

# Synthesis and Biological Evaluation of Octahydro-quinazolinones as Phospholipase A2, and Proteanase Inhibitors: Experimental and Theoretical Exploration

Md Afroz Bakht <sup>1,\*</sup>, Thangaiyan Pooventhiran <sup>2,3</sup>, Renjith Thomas <sup>2</sup>, Mehnaz Kamal <sup>4</sup>, Israf Ud Din <sup>1</sup>, Najeeb-Ur-Rahman <sup>5</sup>, Imtiaz Ali <sup>6</sup>, Noushin Ajmal <sup>7</sup>, and Mohamed Jawed Ahsan <sup>8,\*</sup>

<sup>1</sup> Department of Chemistry, College of Science and Humanity Studies, Prince Sattam Bin Abdulaziz University, P.O. Box- 83, Al-Kharj 11942, Saudi Arabia

<sup>2</sup> Department of Chemistry, St Berchmans College (Autonomous), Mahatma Gandhi University, Changanassery, Kerala, India

<sup>3</sup> Department of Mechanical Engineering, University Centre for Research & Development, Chandigarh University, Gharuan, Mohali, Punjab, India

<sup>4</sup> Department of Pharmaceutical Chemistry, College of Pharmacy, Prince Sattam Bin Abdulaziz University, P.O. Box- 83, Al-Kharj 11942, Saudi Arabia

<sup>5</sup> Department of Pharmacology, College of Pharmacy, Prince Sattam Bin Abdulaziz University, P.O. Box- 83, Al-Kharj 11942, Saudi Arabia

<sup>6</sup> Preparatory College, Prince Sattam Bin Abdulaziz University, P.O. Box- 83, Al-Kharj 11942, Saudi Arabia

<sup>7</sup> Department of Basic Science and Humanities, Pratap University, Jaipur, Rajasthan, India

<sup>8</sup> Department of Pharmaceutical Chemistry, Maharishi Arvind College of Pharmacy, Ambabari Circle, Jaipur, Rajasthan 302 039, India

\* Correspondence: Correspondence: m.bakht@psau.edu.sa (M.A.B.); jawedpharma@gmail.com (M.J.A.)

## SUPPLEMENTAL MATERIALS

### Electronic Supplementary Information of Compounds 4a and 4b

Table S1. Cartesian coordination of molecules 4a and 4b.

Atom.	Atomic number	Coordinates (Angstroms)				Atom	Atomic number	Coordinates (Angstroms)		
		X	Y	Z					X	Y
4a						4b				
1	6	-3.0555	-0.5885	-0.4612		1	6	-3.0017	-0.667	-0.4235
2	6	-1.8406	0.07533	-0.2103		2	6	-1.7851	0.0082	-0.1848
3	6	-1.3372	0.16573	1.08764		3	6	-1.3148	0.18542	1.12115
4	6	-2.0632	-0.436	2.12401		4	6	-2.0741	-0.344	2.17855
5	6	-3.2577	-1.0979	1.87765		5	6	-3.272	-1.013	1.94539
6	6	-3.766	-1.175	0.57756		6	6	-3.7491	-1.1753	0.63637
7	1	-3.802	-1.5606	2.69206		7	1	-3.8466	-1.4175	2.78056
8	1	-4.6994	-1.6891	0.38959		8	1	-4.6886	-1.698	0.4571
9	6	-0.0444	0.91867	1.40655		9	6	-0.0214	0.94982	1.41274
10	6	1.20258	0.29934	0.80897		10	6	1.2216	0.28876	0.8528
11	6	1.85585	0.89979	-0.2194		11	6	1.99599	0.83258	-0.3085
12	6	1.71923	-0.9262	1.40548		12	6	1.68444	-0.9428	1.48595

13	6	0.43947	2.89816	-0.0908	13	6	0.59496	2.70714	-0.1796
14	1	-0.8833	2.87931	1.39462	14	1	-0.8722	2.84	1.33053
15	6	3.07609	0.31575	-0.8801	15	6	3.10791	0.19175	-0.8209
16	6	2.98981	-1.5195	0.80691	16	6	2.93521	-1.5999	0.90736
17	1	1.88229	2.54781	-1.487	17	1	1.99306	2.36419	-1.5241
18	6	3.21193	-1.2102	-0.6867	18	6	3.17331	-1.3354	-0.5941
19	1	3.05568	0.55859	-1.9495	19	1	3.11961	0.41601	-1.9024
20	1	3.82733	-1.1169	1.39273	20	1	3.7938	-1.2094	1.48627
21	8	-3.4211	-0.5807	-1.7867	21	8	-3.3232	-0.7481	-1.7602
22	8	-1.1601	0.63276	-1.2541	22	8	-1.0708	0.48095	-1.2493
23	1	-1.6994	0.51944	-2.0491	23	1	-1.6003	0.2855	-2.0417
24	6	-4.6461	-1.2018	-2.1588	24	6	-4.5386	-1.3866	-2.1208
25	1	-5.4963	-0.7257	-1.66	25	1	-5.4105	-0.8703	-1.6819
26	1	-4.7357	-1.0688	-3.2355	26	1	-4.599	-1.3347	-3.2158
27	1	-4.6324	-2.2707	-1.923	27	1	-4.5471	-2.4446	-1.8044
28	7	1.44085	2.12074	-0.6869	28	7	1.47355	2.06209	-0.7092
29	7	-0.1166	2.33911	1.02003	29	7	-0.0757	2.35235	0.93408
30	8	1.19214	-1.4427	2.38439	30	8	1.12354	-1.4153	2.4716
31	8	0.16182	4.00174	-0.5272	31	1	-1.6961	-0.2353	3.19669
32	1	-1.664	-0.3936	3.13047	32	6	2.10349	-2.044	-1.4493
33	6	2.17492	-1.9558	-1.5503	33	1	2.3193	-1.9155	-2.5234
34	1	2.34397	-1.758	-2.6134	34	1	2.09316	-3.1256	-1.2381
35	1	2.25704	-3.0354	-1.3953	35	1	1.09426	-1.6486	-1.2594
36	1	1.15154	-1.659	-1.3114	36	6	4.56324	-1.8517	-0.9984
37	6	4.6237	-1.6512	-1.1059	37	1	4.63399	-2.9412	-0.8492
38	1	4.74779	-2.7296	-0.9717	38	1	4.7705	-1.6452	-2.0618
39	1	4.8103	-1.4241	-2.1606	39	1	5.35927	-1.3784	-0.4001
40	1	5.39259	-1.149	-0.5109	40	1	2.87697	-2.6774	1.12545
41	1	2.96978	-2.5966	0.99141	41	1	4.01114	0.66987	-0.3974
42	1	3.96065	0.8197	-0.4676	42	1	0.07955	0.96429	2.50945
43	1	0.06434	0.88058	2.4935	43	16	0.33308	4.18437	-1.0001

**Table S2.** Physical parameters of molecules **4a** and **4b**.

Name	Definition	Values (in Å)		Name	Definition	Values (in °)
<b>4a</b>						
R1	R(C1-C2)	1.4117		A1	A(C2-C1-C6)	120.547
R2	R(C1-C6)	1.393		A2	A(C2-C1-O21)	113.17
R3	R(C1-O21)	1.3772		A3	A(C6-C1-O21)	126.283
R4	R(C2-C3)	1.3993		A4	A(C1-C2-C3)	120.534

R5	R(C2-O22)	1.3663	A5	A(C1-C2-O22)	118.963
R6	R(C3-C4)	1.4053	A6	A(C3-C2-O22)	120.503
R7	R(C3-C9)	1.5304	A7	A(C2-C3-C4)	118.222
R8	R(C4-C5)	1.3918	A8	A(C2-C3-C9)	121.677
R9	R(C4-H32)	1.0915	A9	A(C4-C3-C9)	120.095
R10	R(C5-C6)	1.4027	A10	A(C3-C4-C5)	121.34
R11	R(C5-H7)	1.0915	A11	A(C3-C4-H32)	118.506
R12	R(C6-H8)	1.09	A12	A(C5-C4-H32)	120.146
R13	R(C9-C10)	1.5151	A13	A(C4-C5-C6)	120.313
R14	R(C9-N29)	1.472	A14	A(C4-C5-H7)	120.205
R15	R(C9-H43)	1.1014	A15	A(C6-C5-H7)	119.482
R16	R(C10-C11)	1.3629	A16	A(C1-C6-C5)	119.036
R17	R(C10-C12)	1.4601	A17	A(C1-C6-H8)	120.821
R18	R(C11-C15)	1.507	A18	A(C5-C6-H8)	120.142
R19	R(C11-N28)	1.3719	A19	A(C3-C9-C10)	113.891
R20	R(C12-C16)	1.5268	A20	A(C3-C9-N29)	112.216
R21	R(C12-O30)	1.2285	A21	A(C3-C9-H43)	105.887
R22	R(C13-N28)	1.403	A22	A(C10-C9-N29)	109.387
R23	R(C13-N29)	1.3669	A23	A(C10-C9-H43)	107.368
R24	R(C13-O31)	1.2206	A24	A(N29-C9-H43)	107.745
R25	R(H14-N29)	1.0146	A25	A(C9-C10-C11)	121.058
R26	R(C15-C18)	1.5453	A26	A(C9-C10-C12)	117.893
R27	R(C15-H19)	1.1046	A27	A(C11-C10-C12)	121.045
R28	R(C15-H42)	1.1062	A28	A(C10-C11-C15)	123.056
R29	R(C16-C18)	1.543	A29	A(C10-C11-N28)	120.415
R30	R(C16-H20)	1.1067	A30	A(C15-C11-N28)	116.511
R31	R(C16-H41)	1.1008	A31	A(C10-C12-C16)	117.284
R32	R(H17-N28)	1.0126	A32	A(C10-C12-O30)	121.841
R33	R(C18-C33)	1.5421	A33	A(C16-C12-O30)	120.832
R34	R(C18-C37)	1.5369	A34	A(N28-C13-N29)	114.27
R35	R(O21-C24)	1.4195	A35	A(N28-C13-O31)	120.873
R36	R(O22-H23)	0.9728	A36	A(N29-C13-O31)	124.77
R37	R(C24-H25)	1.1043	A37	A(C11-C15-H18)	113.267
R38	R(C24-H26)	1.0978	A38	A(C11-C15-H19)	109.036
R39	R(C24-H27)	1.1043	A39	A(C11-C15-H42)	108.336
R40	R(C33-H34)	1.1031	A40	A(C18-C15-H19)	110.117
R41	R(C33-H35)	1.1021	A41	A(C18-C15-H42)	109.656
R42	R(C33-H36)	1.1004	A42	A(H19-C15-H42)	106.167

R43	R(C37-H38)	1.102	A43	A(C12-C16-C18)	114.92
R44	R(C37-H39)	1.1029	A44	A(C12-C16-H20)	106.584
R45	R(C37-H40)	1.1025	A45	A(C12-C16-H41)	107.629
			A46	A(C18-C16-H20)	109.193
			A47	A(C18-C16-H41)	111.639
			A48	A(H20-C16-H41)	106.43
			A49	A(C15-C18-C16)	107.805
			A50	A(C15-C18-C33)	110.082
			A51	A(C15-C18-C37)	109.369
			A52	A(C16-C18-C33)	110.72
			A53	A(C16-C18-C37)	109.752
			A54	A(C33-C18-C37)	109.093
			A55	A(C1-O21-C24)	118.223
			A56	A(C2-O22-H23)	106.296
			A57	A(O21-C24-H25)	111.394
			A58	A(O21-C24-H26)	106.211
			A59	A(O21-C24-H27)	111.39
			A60	A(H25-C24-H26)	109.327
			A61	A(H25-C24-H27)	109.142
			A62	A(H26-C24-H27)	109.31
			A63	A(C11-N28-C13)	124.353
			A64	A(C11-N28-H17)	121.21
			A65	A(C13-N28-H17)	114.422
			A66	A(C9-N29-C13)	126.16
			A67	A(C9-N29-H14)	116.947
			A68	A(C13-N29-H14)	112.608
			A69	A(C18-C33-H34)	110.533
			A70	A(C18-C33-H35)	110.562
			A71	A(C18-C33-H36)	112.049
			A72	A(H34-C33-H35)	107.626
			A73	A(H34-C33-H36)	107.792
			A74	A(H35-C33-H36)	108.119
			A75	A(C18-C37-H38)	110.769
			A76	A(C18-C37-H39)	111.144
			A77	A(C18-C37-H40)	111.468
			A78	A(H38-C37-H39)	107.673
			A79	A(H38-C37-H40)	107.735
			A80	A(H39-C37-H40)	107.887

4b					
R1	R(C1-C2)	1.4121	A1	A(C2-C1-C6)	120.509
R2	R(C1-C6)	1.3929	A2	A(C2-C1-O21)	113.149
R3	R(C1-O21)	1.376	A3	A(C6-C1-O21)	126.342
R4	R(C2-C3)	1.3993	A4	A(C1-C2-C3)	120.438
R5	R(C2-O22)	1.3648	A5	A(C1-C2-O22)	119.116
R6	R(C3-C4)	1.4054	A6	A(C3-C2-O22)	120.446
R7	R(C3-C9)	1.528	A7	A(C2-C3-C4)	118.379
R8	R(C4-C5)	1.3914	A8	A(C2-C3-C9)	121.527
R9	R(C4-H31)	1.0915	A9	A(C4-C3-C9)	120.089
R10	R(C5-C6)	1.4029	A10	A(C3-C4-C5)	121.24
R11	R(C5-H7)	1.0914	A11	A(C3-C4-H31)	118.582
R12	R(C6-H8)	1.0899	A12	A(C5-C4-H31)	120.171
R13	R(C9-C10)	1.5136	A13	A(C4-C5-C6)	120.302
R14	R(C9-N29)	1.4762	A14	A(C4-C5-H7)	120.207
R15	R(C9-H42)	1.1013	A15	A(C6-C5-H7)	119.491
R16	R(C10-C11)	1.3612	A16	A(C1-C6-C5)	119.122
R17	R(C10-C12)	1.4615	A17	A(C1-C6-H8)	120.769
R18	R(C11-C15)	1.506	A18	A(C5-C6-H8)	120.108
R19	R(C11-N28)	1.3764	A19	A(C3-C9-C10)	114.334
R20	R(C12-C16)	1.5261	A20	A(C3-C9-N29)	111.608
R21	R(C12-O30)	1.2279	A21	A(C3-C9-H42)	106.122
R22	R(C13-N28)	1.3828	A22	A(C10-C9-N29)	109.156
R23	R(C13-N29)	1.3492	A23	A(C10-C9-H42)	107.745
R24	R(C13-S43)	1.6786	A24	A(N29-C9-H42)	107.552
R25	R(H14-N29)	1.0144	A25	A(C9-C10-C11)	121.022
R26	R(C15-C18)	1.5457	A26	A(C9-C10-C12)	117.921
R27	R(C15-H19)	1.1044	A27	A(C11-C10-C12)	121.05
R28	R(C15-H41)	1.1062	A28	A(C10-C11-C15)	123.224
R29	R(C16-C18)	1.5437	A29	A(C10-C11-N28)	120.283
R30	R(C16-H20)	1.1068	A30	A(C15-C11-N28)	116.466
R31	R(C16-H40)	1.1008	A31	A(C10-C12-C16)	117.201
R32	R(H17-N28)	1.0129	A32	A(C10-1C2-O30)	121.663
R33	R(C18-C32)	1.542	A33	A(C16-C12-O30)	121.091
R34	R(C18-C36)	1.5368	A34	A(N28-C13-N29)	115.152
R35	R(O21-C24)	1.42	A35	A(N28-C13-S43)	120.55
R36	R(O22-H23)	0.9729	A36	A(N29-C13-S43)	124.252
R37	R(C24-H25)	1.1042	A37	A(C11-C15-C18)	113.101
R38	R(C24-H26)	1.0977	A38	A(C11-C15-H19)	109.177

R39	R(C24-H27)	1.1042	A39	A(C11-C15-H41)	108.349
R40	R(C32-H33)	1.103	A40	A(C18-C15-H19)	110.092
R41	R(C32-H34)	1.102	A41	A(C18-C15-H41)	109.663
R42	R(C32-H35)	1.1004	A42	A(H19-C15-H41)	106.213
R43	R(C36-H37)	1.1019	A43	A(C12-C16-C18)	115.017
R44	R(C36-H38)	1.1028	A44	A(C12-C16-H20)	106.497
R45	R(C36-H39)	1.1025	A45	A(C12-C16-H40)	107.65
			A46	A(C18-C16-H20)	109.235
			A47	A(C18-C16-H40)	111.623
			A48	A(H20-C16-H40)	106.354
			A49	A(C15-C18-C16)	107.88
			A50	A(C15-C18-C32)	110.03
			A51	A(C15-C18-C36)	109.351
			A52	A(C16-C18-C32)	110.748
			A53	A(C16-C18-C36)	109.707
			A54	A(C32-C18-C36)	109.104
			A55	A(C1-O21-C24)	118.237
			A56	A(C2-O22-H23)	106.468
			A57	A(O21-C24-H25)	111.376
			A58	A(O21-C24-H26)	106.186
			A59	A(O21-C24-H27)	111.36
			A60	A(H25-C24-H26)	109.341
			A61	A(H25-C24-H27)	109.189
			A62	A(H26-C24-H27)	109.321
			A63	A(C11-N28-C13)	124.224
			A64	A(C11-N28-C17)	120.987
			A65	A(C13-N28-C17)	114.687
			A66	A(C9-N29-C13)	126.834
			A67	A(C9-N29-H14)	117.292
			A68	A(C13-N29-H14)	113.869
			A69	A(C18-C32-H33)	110.488
			A70	A(C18-C32-H34)	110.575
			A71	A(C18-C32-H35)	112.087
			A72	A(H33-C32-H34)	107.63
			A73	A(H33-C32-H35)	107.757
			A74	A(H34-C32-H35)	108.144
			A75	A(C18-C36-H37)	110.718
			A76	A(C18-C36-H38)	111.132
			A77	A(C18-C36-H39)	111.497

				A78	A(H37-C36-H38)	107.689
				A79	A(H37-C36-H39)	107.748
				A80	A(H38-C36-H39)	107.895

**Table S3.** Natural atomic orbital occupancies of molecules **4a** and **4b**.

NAO	Atom	No.	lang	Type (AO)	Occupancy	Energy	NAO	Atom	No.	lang	Type (AO)	Occupancy	Energy
<b>4a</b>													
1	C	1	S	Cor( 1S)	1.99859	-10.119	217	H	19	S	Val( 1S)	0.76015	0.05047
2	C	1	S	Val( 2S)	0.82336	-0.1117	218	H	19	S	Ryd( 2S)	0.00269	0.41442
3	C	1	S	Ryd( 3S)	0.00191	1.03822	219	H	19	px	Ryd( 2p)	0.0002	1.80053
4	C	1	px	Val( 2p)	1.05449	-0.0722	220	H	19	py	Ryd( 2p)	0.00012	1.74527
5	C	1	px	Ryd( 3p)	0.00327	0.79017	221	H	19	pz	Ryd( 2p)	0.00082	2.16275
6	C	1	py	Val( 2p)	1.0551	-0.1039							
7	C	1	py	Ryd( 3p)	0.00172	0.65241	222	H	20	S	Val( 1S)	0.75191	0.06611
8	C	1	pz	Val( 2p)	0.77353	-0.0217	223	H	20	S	Ryd( 2S)	0.00204	0.4173
9	C	1	pz	Ryd( 3p)	0.0093	0.78011	224	H	20	px	Ryd( 2p)	0.00057	2.01463
10	C	1	dxy	Ryd( 3d)	0.00066	1.88443	225	H	20	py	Ryd( 2p)	0.00031	1.84115
11	C	1	dxz	Ryd( 3d)	0.00154	1.91036	226	H	20	pz	Ryd( 2p)	0.00035	1.89954
12	C	1	dyz	Ryd( 3d)	0.00229	1.63171							
13	C	1	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00086	1.62539	227	O	21	S	Cor( 1S)	1.99972	-18.986
14	C	1	dz2	Ryd( 3d)	0.00192	2.05133	228	O	21	S	Val( 2S)	1.59322	-0.8846
							229	O	21	S	Ryd( 3S)	0.00038	2.11105
15	C	2	S	Cor( 1S)	1.9985	-10.114	230	O	21	px	Val( 2p)	1.61702	-0.3317
16	C	2	S	Val( 2S)	0.81251	-0.0963	231	O	21	px	Ryd( 3p)	0.0016	1.3739
17	C	2	S	Ryd( 3S)	0.00183	1.12352	232	O	21	py	Val( 2p)	1.80023	-0.3272
18	C	2	px	Val( 2p)	0.9695	-0.0554	233	O	21	py	Ryd( 3p)	0.00214	1.16324
19	C	2	px	Ryd( 3p)	0.00651	0.81809	234	O	21	pz	Val( 2p)	1.55893	-0.3366
20	C	2	py	Val( 2p)	0.97896	-0.0931	235	O	21	pz	Ryd( 3p)	0.00175	1.19214
21	C	2	py	Ryd( 3p)	0.00298	0.66551	236	O	21	dxy	Ryd( 3d)	0.00065	2.84831
22	C	2	pz	Val( 2p)	0.88862	-0.0341	237	O	21	dxz	Ryd( 3d)	0.00073	2.90696
23	C	2	pz	Ryd( 3p)	0.0065	0.77358	238	O	21	dyz	Ryd( 3d)	0.00068	2.77082



24	C	2	dxy	Ryd( 3d)	0.00097	1.87664	239	O	21	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00057	2.77096
25	C	2	dxz	Ryd( 3d)	0.00189	1.97459	240	O	21	dz2	Ryd( 3d)	0.00125	3.09021
26	C	2	dyz	Ryd( 3d)	0.00218	1.66421							
27	C	2	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00137	1.63536	241	O	22	S	Cor( 1S)	1.99977	-18.969
28	C	2	dz2	Ryd( 3d)	0.00157	2.04515	242	O	22	S	Val( 2S)	1.65853	-0.9018
							243	O	22	S	Ryd( 3S)	0.00015	2.23055
29	C	3	S	Cor( 1S)	1.99882	-10.047	244	O	22	px	Val( 2p)	1.75205	-0.3262
30	C	3	S	Val( 2S)	0.87806	-0.112	245	O	22	px	Ryd( 3p)	0.00139	1.24886
31	C	3	S	Ryd( 3S)	0.00196	1.08551	246	O	22	py	Val( 2p)	1.83307	-0.3171
32	C	3	px	Val( 2p)	1.0594	-0.0583	247	O	22	py	Ryd( 3p)	0.00177	1.11072
33	C	3	px	Ryd( 3p)	0.00666	0.97842	248	O	22	pz	Val( 2p)	1.4462	-0.3031
34	C	3	py	Val( 2p)	1.05795	-0.0821	249	O	22	pz	Ryd( 3p)	0.00229	1.23896
35	C	3	py	Ryd( 3p)	0.0035	0.76841	250	O	22	dxy	Ryd( 3d)	0.0011	2.87453
36	C	3	pz	Val( 2p)	1.08588	-0.0436	251	O	22	dxz	Ryd( 3d)	0.00129	3.22951
37	C	3	pz	Ryd( 3p)	0.00458	0.98411	252	O	22	dyz	Ryd( 3d)	0.00041	2.87488
38	C	3	dxy	Ryd( 3d)	0.0006	1.88066	253	O	22	dx2y2	Ryd( 3d)	0.0012	2.80949
39	C	3	dxz	Ryd( 3d)	0.00073	1.98049	254	O	22	dz2	Ryd( 3d)	0.00042	3.06286
40	C	3	dyz	Ryd( 3d)	0.00072	1.71894							
41	C	3	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00073	1.65864	255	H	23	S	Val( 1S)	0.50237	0.09804
42	C	3	dz2	Ryd( 3d)	0.00062	2.11151	256	H	23	S	Ryd( 2S)	0.00298	0.43606
							257	H	23	px	Ryd( 2p)	0.00154	1.93053
43	C	4	S	Cor( 1S)	1.99891	-10.041	258	H	23	py	Ryd( 2p)	0.00153	1.60089
44	C	4	S	Val( 2S)	0.94635	-0.1283	259	H	23	pz	Ryd( 2p)	0.00203	2.1695
45	C	4	S	Ryd( 3S)	0.00113	1.06522							
46	C	4	px	Val( 2p)	1.06201	-0.0414	260	C	24	S	Cor( 1S)	1.99935	-10.153
47	C	4	px	Ryd( 3p)	0.00339	0.71964	261	C	24	S	Val( 2S)	1.10755	-0.2852
48	C	4	py	Val( 2p)	1.0221	-0.0747	262	C	24	S	Ryd( 3S)	0.00157	1.07388
49	C	4	py	Ryd( 3p)	0.00181	0.61015	263	C	24	px	Val( 2p)	0.84494	-0.0781

50	C	4	pz	Val( 2p)	1.16945	-0.042	264	C	24	px	Ryd( 3p)	0.00248	0.4755
51	C	4	pz	Ryd( 3p)	0.00617	0.95081	265	C	24	py	Val( 2p)	1.10606	-0.095
52	C	4	dxy	Ryd( 3d)	0.00047	1.9024	266	C	24	py	Ryd( 3p)	0.00102	0.50676
53	C	4	dxz	Ryd( 3d)	0.00061	1.97508	267	C	24	pz	Val( 2p)	1.17985	-0.1068
54	C	4	dyz	Ryd( 3d)	0.00054	1.64605	268	C	24	pz	Ryd( 3p)	0.003	0.68883
55	C	4	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00062	1.66916	269	C	24	dxy	Ryd( 3d)	0.00156	1.72068
56	C	4	dz2	Ryd( 3d)	0.00052	2.10824	270	C	24	dxz	Ryd( 3d)	0.00101	1.70258
							271	C	24	dyz	Ryd( 3d)	0.00053	1.65852
57	C	5	S	Cor( 1S)	1.99899	-10.046	272	C	24	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00166	1.75829
58	C	5	S	Val( 2S)	0.95143	-0.1367	273	C	24	dz2	Ryd( 3d)	0.00099	1.90744
59	C	5	S	Ryd( 3S)	0.00096	1.02193							
60	C	5	px	Val( 2p)	1.0894	-0.0464	274	H	25	S	Val( 1S)	0.80514	0.03135
61	C	5	px	Ryd( 3p)	0.004	0.70442	275	H	25	S	Ryd( 2S)	0.00275	0.36379
62	C	5	py	Val( 2p)	1.0547	-0.0794	276	H	25	px	Ryd( 2p)	0.00053	1.95401
63	C	5	py	Ryd( 3p)	0.00225	0.62806	277	H	25	py	Ryd( 2p)	0.00038	1.73045
64	C	5	pz	Val( 2p)	1.1217	-0.0359	278	H	25	pz	Ryd( 2p)	0.00033	1.73216
65	C	5	pz	Ryd( 3p)	0.00515	0.84938							
66	C	5	dxy	Ryd( 3d)	0.00045	1.84951	279	H	26	S	Val( 1S)	0.78549	0.04699
67	C	5	dxz	Ryd( 3d)	0.00062	2.05832	280	H	26	S	Ryd( 2S)	0.00081	0.31147
68	C	5	dyz	Ryd( 3d)	0.00058	1.69314	281	H	26	px	Ryd( 2p)	0.0001	1.58937
69	C	5	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00057	1.62623	282	H	26	py	Ryd( 2p)	0.00021	1.61184
70	C	5	dz2	Ryd( 3d)	0.00053	1.98215	283	H	26	pz	Ryd( 2p)	0.00088	2.16404
71	C	6	S	Cor( 1S)	1.99892	-10.053	284	H	27	S	Val( 1S)	0.80538	0.03125
72	C	6	S	Val( 2S)	0.95672	-0.1475	285	H	27	S	Ryd( 2S)	0.00273	0.36477
73	C	6	S	Ryd( 3S)	0.00104	1.01945	286	H	27	px	Ryd( 2p)	0.00014	1.59655
74	C	6	px	Val( 2p)	1.15958	-0.0707	287	H	27	py	Ryd( 2p)	0.00082	2.12171
75	C	6	px	Ryd( 3p)	0.00417	0.86888	288	H	27	pz	Ryd( 2p)	0.00029	1.69791

76	C	6	py	Val( 2p)	1.09287	-0.0953
77	C	6	py	Ryd( 3p)	0.00223	0.65911
78	C	6	pz	Val( 2p)	1.08071	-0.0443
79	C	6	pz	Ryd( 3p)	0.00315	0.69787
80	C	6	dxy	Ryd( 3d)	0.00038	1.8815
81	C	6	dxz	Ryd( 3d)	0.00067	1.91745
82	C	6	dyz	Ryd( 3d)	0.00073	1.65491
83	C	6	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00052	1.62434
84	C	6	dz2	Ryd( 3d)	0.00041	2.15611
85	H	7	S	Val( 1S)	0.76747	0.08321
86	H	7	S	Ryd( 2S)	0.00172	0.32591
87	H	7	px	Ryd( 2p)	0.00034	1.93598
88	H	7	py	Ryd( 2p)	0.00032	1.7071
89	H	7	pz	Ryd( 2p)	0.00057	2.11209
90	H	8	S	Val( 1S)	0.76551	0.06814
91	H	8	S	Ryd( 2S)	0.00156	0.34978
92	H	8	px	Ryd( 2p)	0.00072	2.06335
93	H	8	py	Ryd( 2p)	0.0004	1.72437
94	H	8	pz	Ryd( 2p)	0.0001	1.97006
95	C	9	S	Cor( 1S)	1.99901	-10.103
96	C	9	S	Val( 2S)	0.92516	-0.1802
97	C	9	S	Ryd( 3S)	0.0014	1.51636
98	C	9	px	Val( 2p)	1.04706	-0.0754
99	C	9	px	Ryd( 3p)	0.00259	0.61256
100	C	9	py	Val( 2p)	0.84601	-0.0562
289	N	28	S	Cor( 1S)	1.99914	-14.206
290	N	28	S	Val( 2S)	1.25807	-0.5369
291	N	28	S	Ryd( 3S)	0.00114	1.74609
292	N	28	px	Val( 2p)	1.49551	-0.2603
293	N	28	px	Ryd( 3p)	0.00268	1.13186
294	N	28	py	Val( 2p)	1.40506	-0.2578
295	N	28	py	Ryd( 3p)	0.00212	1.13886
296	N	28	pz	Val( 2p)	1.49293	-0.2572
297	N	28	pz	Ryd( 3p)	0.00317	1.17796
298	N	28	dxy	Ryd( 3d)	0.00056	2.38362
299	N	28	dxz	Ryd( 3d)	0.00047	2.36145
300	N	28	dyz	Ryd( 3d)	0.00055	2.42182
301	N	28	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00046	2.23195
302	N	28	dz2	Ryd( 3d)	0.00036	2.21801
303	N	29	S	Cor( 1S)	1.99929	-14.189
304	N	29	S	Val( 2S)	1.28007	-0.5314
305	N	29	S	Ryd( 3S)	0.0014	1.67056
306	N	29	px	Val( 2p)	1.54452	-0.2333
307	N	29	px	Ryd( 3p)	0.00363	1.14966
308	N	29	py	Val( 2p)	1.36784	-0.2253
309	N	29	py	Ryd( 3p)	0.00226	1.15948
310	N	29	pz	Val( 2p)	1.48965	-0.2425
311	N	29	pz	Ryd( 3p)	0.00188	1.05461
312	N	29	dxy	Ryd( 3d)	0.00053	2.38361
313	N	29	dxz	Ryd( 3d)	0.00052	2.32997
314	N	29	dyz	Ryd( 3d)	0.00044	2.3491

101	C	9	py	Ryd( 3p)	0.00637	0.65642	315	N	29	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00041	2.3334
102	C	9	pz	Val( 2p)	1.19258	-0.095	316	N	29	dz2	Ryd( 3d)	0.00086	2.2921
103	C	9	pz	Ryd( 3p)	0.01156	0.9675							
104	C	9	dxy	Ryd( 3d)	0.00111	1.91198	317	O	30	S	Cor( 1S)	1.9998	-18.846
105	C	9	dxz	Ryd( 3d)	0.00056	1.89614	318	O	30	S	Val( 2S)	1.69244	-0.8618
106	C	9	dyz	Ryd( 3d)	0.00097	1.77473	319	O	30	S	Ryd( 3S)	0.00045	2.1155
107	C	9	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00176	1.87709	320	O	30	px	Val( 2p)	1.65299	-0.2391
108	C	9	dz2	Ryd( 3d)	0.00118	2.13667	321	O	30	px	Ryd( 3p)	0.00169	1.18759
							322	O	30	py	Val( 2p)	1.70538	-0.2381
109	C	10	S	Cor( 1S)	1.99868	-10.037	323	O	30	py	Ryd( 3p)	0.0019	1.18927
110	C	10	S	Val( 2S)	0.87691	-0.1086	324	O	30	pz	Val( 2p)	1.53272	-0.2646
111	C	10	S	Ryd( 3S)	0.00243	1.19142	325	O	30	pz	Ryd( 3p)	0.00059	1.06853
112	C	10	px	Val( 2p)	1.08759	-0.0686	326	O	30	dxy	Ryd( 3d)	0.00059	2.81898
113	C	10	px	Ryd( 3p)	0.00574	0.9277	327	O	30	dxz	Ryd( 3d)	0.00098	3.07582
114	C	10	py	Val( 2p)	1.11947	-0.0742	328	O	30	dyz	Ryd( 3d)	0.00099	3.02434
115	C	10	py	Ryd( 3p)	0.00467	0.95161	329	O	30	dx2y2	Ryd( 3d)	0.0005	2.80708
116	C	10	pz	Val( 2p)	1.11298	-0.0725	330	O	30	dz2	Ryd( 3d)	0.00157	2.98672
117	C	10	pz	Ryd( 3p)	0.00387	0.8705							
118	C	10	dxy	Ryd( 3d)	0.00122	1.60926	331	O	31	S	Cor( 1S)	1.9998	-18.845
119	C	10	dxz	Ryd( 3d)	0.00093	1.69192	332	O	31	S	Val( 2S)	1.70036	-0.8586
120	C	10	dyz	Ryd( 3d)	0.00094	1.69027	333	O	31	S	Ryd( 3S)	0.00076	2.09403
121	C	10	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00055	1.49286	334	O	31	px	Val( 2p)	1.68446	-0.228
122	C	10	dz2	Ryd( 3d)	0.00112	1.44982	335	O	31	px	Ryd( 3p)	0.00123	1.14859
							336	O	31	py	Val( 2p)	1.57803	-0.2713
123	C	11	S	Cor( 1S)	1.9988	-10.109	337	O	31	py	Ryd( 3p)	0.0007	1.06204
124	C	11	S	Val( 2S)	0.81821	-0.1083	338	O	31	pz	Val( 2p)	1.68007	-0.2356
125	C	11	S	Ryd( 3S)	0.00157	0.98885	339	O	31	pz	Ryd( 3p)	0.00093	1.14365
126	C	11	px	Val( 2p)	0.995	-0.0759	340	O	31	dxy	Ryd( 3d)	0.00133	2.9699

127	C	11	px	Ryd( 3p)	0.00455	0.88745	341	O	31	dxz	Ryd( 3d)	0.00042	2.74939
128	C	11	py	Val( 2p)	0.88246	-0.0452	342	O	31	dyz	Ryd( 3d)	0.00129	3.08724
129	C	11	py	Ryd( 3p)	0.00581	0.76111	343	O	31	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00122	3.02091
130	C	11	pz	Val( 2p)	0.98807	-0.0751	344	O	31	dz2	Ryd( 3d)	0.00083	2.84261
131	C	11	pz	Ryd( 3p)	0.00378	0.73304							
132	C	11	dxy	Ryd( 3d)	0.00107	1.90179	345	H	32	S	Val( 1S)	0.76183	0.08911
133	C	11	dxz	Ryd( 3d)	0.00083	2.05067	346	H	32	S	Ryd( 2S)	0.00225	0.35609
134	C	11	dyz	Ryd( 3d)	0.00086	2.00288	347	H	32	px	Ryd( 2p)	0.00024	1.92784
135	C	11	dx2y2	Ryd( 3d)	0.0014	1.86977	348	H	32	py	Ryd( 2p)	0.00019	1.68567
136	C	11	dz2	Ryd( 3d)	0.0013	1.8084	349	H	32	pz	Ryd( 2p)	0.00078	2.2039
137	C	12	S	Cor( 1S)	1.99905	-10.127	350	C	33	S	Cor( 1S)	1.99927	-10.052
138	C	12	S	Val( 2S)	0.80859	-0.107	351	C	33	S	Val( 2S)	1.09594	-0.2458
139	C	12	S	Ryd( 3S)	0.00536	1.00793	352	C	33	S	Ryd( 3S)	0.00111	1.23157
140	C	12	px	Val( 2p)	0.88247	-0.0386	353	C	33	px	Val( 2p)	1.16596	-0.0704
141	C	12	px	Ryd( 3p)	0.00747	0.78174	354	C	33	px	Ryd( 3p)	0.00287	0.6071
142	C	12	py	Val( 2p)	0.90805	-0.0312	355	C	33	py	Val( 2p)	1.197	-0.0761
143	C	12	py	Ryd( 3p)	0.0068	0.69832	356	C	33	py	Ryd( 3p)	0.00325	0.6284
144	C	12	pz	Val( 2p)	0.78882	-0.0217	357	C	33	pz	Val( 2p)	1.17504	-0.075
145	C	12	pz	Ryd( 3p)	0.01551	0.6737	358	C	33	pz	Ryd( 3p)	0.00298	0.61349
146	C	12	dxy	Ryd( 3d)	0.00165	1.98706	359	C	33	dxy	Ryd( 3d)	0.00034	1.77222
147	C	12	dxz	Ryd( 3d)	0.00206	1.91452	360	C	33	dxz	Ryd( 3d)	0.00033	1.74977
148	C	12	dyz	Ryd( 3d)	0.00176	1.97354	361	C	33	dyz	Ryd( 3d)	0.00019	1.71682
149	C	12	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00184	1.8067	362	C	33	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00061	1.96778
150	C	12	dz2	Ryd( 3d)	0.00318	1.79372	363	C	33	dz2	Ryd( 3d)	0.00067	1.98149
151	C	13	S	Cor( 1S)	1.9993	-10.191	364	H	34	S	Val( 1S)	0.78002	0.0648
152	C	13	S	Val( 2S)	0.68872	-0.0718	365	H	34	S	Ryd( 2S)	0.00153	0.4009

153	C	13	S	Ryd( 3S)	0.00514	0.67377	366	H	34	px	Ryd( 2p)	0.00018	1.71901
154	C	13	px	Val( 2p)	0.8029	-0.0463	367	H	34	py	Ryd( 2p)	0.00021	1.71498
155	C	13	px	Ryd( 3p)	0.00579	0.54941	368	H	34	pz	Ryd( 2p)	0.00077	2.17172
156	C	13	py	Val( 2p)	0.75832	0.0036							
157	C	13	py	Ryd( 3p)	0.01656	0.59942	369	H	35	S	Val( 1S)	0.77274	0.07132
158	C	13	pz	Val( 2p)	0.79981	-0.0214	370	H	35	S	Ryd( 2S)	0.00142	0.40027
159	C	13	pz	Ryd( 3p)	0.0097	0.54288	371	H	35	px	Ryd( 2p)	0.00017	1.72079
160	C	13	dxy	Ryd( 3d)	0.00423	1.80426	372	H	35	py	Ryd( 2p)	0.00078	2.18228
161	C	13	dxz	Ryd( 3d)	0.00201	1.85235	373	H	35	pz	Ryd( 2p)	0.0002	1.7137
162	C	13	dyz	Ryd( 3d)	0.00331	1.89795							
163	C	13	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00287	1.72381	374	H	36	S	Val( 1S)	0.76289	0.08759
164	C	13	dz2	Ryd( 3d)	0.00382	1.68693	375	H	36	S	Ryd( 2S)	0.00271	0.52011
							376	H	36	px	Ryd( 2p)	0.0007	2.16992
165	H	14	S	Val( 1S)	0.57998	0.10051	377	H	36	py	Ryd( 2p)	0.00026	1.78057
166	H	14	S	Ryd( 2S)	0.00333	0.44529	378	H	36	pz	Ryd( 2p)	0.0002	1.72964
167	H	14	px	Ryd( 2p)	0.00121	2.00432							
168	H	14	py	Ryd( 2p)	0.00069	1.96042	379	C	37	S	Cor( 1S)	1.99927	-10.057
169	H	14	pz	Ryd( 2p)	0.00057	1.79695	380	C	37	S	Val( 2S)	1.09424	-0.2501
							381	C	37	S	Ryd( 3S)	0.00079	1.24614
170	C	15	S	Cor( 1S)	1.99907	-10.071	382	C	37	px	Val( 2p)	1.10004	-0.0738
171	C	15	S	Val( 2S)	1.01849	-0.2342	383	C	37	px	Ryd( 3p)	0.00251	0.52892
172	C	15	S	Ryd( 3S)	0.00165	1.46438	384	C	37	py	Val( 2p)	1.21475	-0.0827
173	C	15	px	Val( 2p)	1.13357	-0.0956	385	C	37	py	Ryd( 3p)	0.00351	0.64033
174	C	15	px	Ryd( 3p)	0.00426	0.69168	386	C	37	pz	Val( 2p)	1.21551	-0.082
175	C	15	py	Val( 2p)	1.09162	-0.0953	387	C	37	pz	Ryd( 3p)	0.00359	0.64909
176	C	15	py	Ryd( 3p)	0.00392	0.59038	388	C	37	dxy	Ryd( 3d)	0.00041	1.77471
177	C	15	pz	Val( 2p)	1.20628	-0.1011	389	C	37	dxz	Ryd( 3d)	0.00048	1.82819
178	C	15	pz	Ryd( 3p)	0.00521	0.77501	390	C	37	dyz	Ryd( 3d)	0.00012	1.73777

179	C	15	dxy	Ryd( 3d)	0.00079	1.91264	391	C	37	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00064	1.89143
180	C	15	dxz	Ryd( 3d)	0.00043	1.76677	392	C	37	dz2	Ryd( 3d)	0.00056	1.91633
181	C	15	dyz	Ryd( 3d)	0.00063	1.73818							
182	C	15	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00062	1.80905	393	H	38	S	Val( 1S)	0.77004	0.06778
183	C	15	dz2	Ryd( 3d)	0.00062	1.95025	394	H	38	S	Ryd( 2S)	0.0015	0.39353
							395	H	38	px	Ryd( 2p)	0.00014	1.69314
184	C	16	S	Cor( 1S)	1.99909	-10.05	396	H	38	py	Ryd( 2p)	0.00081	2.18226
185	C	16	S	Val( 2S)	1.04388	-0.226	397	H	38	pz	Ryd( 2p)	0.00024	1.72627
186	C	16	S	Ryd( 3S)	0.00169	1.4219							
187	C	16	px	Val( 2p)	1.15399	-0.0832	398	H	39	S	Val( 1S)	0.77639	0.06277
188	C	16	px	Ryd( 3p)	0.00447	0.7179	399	H	39	S	Ryd( 2S)	0.00165	0.39365
189	C	16	py	Val( 2p)	1.22419	-0.0839	400	H	39	px	Ryd( 2p)	0.00016	1.70962
190	C	16	py	Ryd( 3p)	0.0061	0.79605	401	H	39	py	Ryd( 2p)	0.00024	1.72588
191	C	16	pz	Val( 2p)	1.07545	-0.0717	402	H	39	pz	Ryd( 2p)	0.00078	2.15447
192	C	16	pz	Ryd( 3p)	0.0045	0.61412							
193	C	16	dxy	Ryd( 3d)	0.0005	1.76117	403	H	40	S	Val( 1S)	0.77734	0.0635
194	C	16	dxz	Ryd( 3d)	0.00065	1.94599	404	H	40	S	Ryd( 2S)	0.00154	0.39932
195	C	16	dyz	Ryd( 3d)	0.00057	1.75518	405	H	40	px	Ryd( 2p)	0.00049	1.9544
196	C	16	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00049	1.91253	406	H	40	py	Ryd( 2p)	0.00031	1.79542
197	C	16	dz2	Ryd( 3d)	0.00061	1.82812	407	H	40	pz	Ryd( 2p)	0.00038	1.84789
198	H	17	S	Val( 1S)	0.57354	0.08451	408	H	41	S	Val( 1S)	0.74611	0.08521
199	H	17	S	Ryd( 2S)	0.00371	0.42858	409	H	41	S	Ryd( 2S)	0.00339	0.41097
200	H	17	px	Ryd( 2p)	0.00064	1.80212	410	H	41	px	Ryd( 2p)	0.00019	1.80396
201	H	17	py	Ryd( 2p)	0.00056	1.86423	411	H	41	py	Ryd( 2p)	0.00078	2.19074
202	H	17	pz	Ryd( 2p)	0.00125	2.01146	412	H	41	pz	Ryd( 2p)	0.00015	1.77135
203	C	18	S	Cor( 1S)	1.99903	-10.073	413	H	42	S	Val( 1S)	0.74756	0.05674

204	C	18	S	Val( 2S)	0.90364	-0.2034		414	H	42	S	Ryd( 2S)	0.00246	0.40233
205	C	18	S	Ryd( 3S)	0.00032	1.54628		415	H	42	px	Ryd( 2p)	0.00062	2.03079
206	C	18	px	Val( 2p)	1.06045	-0.0956		416	H	42	py	Ryd( 2p)	0.00025	1.84512
207	C	18	px	Ryd( 3p)	0.00462	0.89495		417	H	42	pz	Ryd( 2p)	0.00031	1.84162
208	C	18	py	Val( 2p)	1.02318	-0.0887								
209	C	18	py	Ryd( 3p)	0.00254	0.74748		418	H	43	S	Val( 1S)	0.743	0.08863
210	C	18	pz	Val( 2p)	1.04834	-0.0909		419	H	43	S	Ryd( 2S)	0.00413	0.41635
211	C	18	pz	Ryd( 3p)	0.00243	0.74599		420	H	43	px	Ryd( 2p)	0.00019	1.8431
212	C	18	dxy	Ryd( 3d)	0.00088	1.78777		421	H	43	py	Ryd( 2p)	0.00012	1.85868
213	C	18	dxz	Ryd( 3d)	0.00098	1.7998		422	H	43	pz	Ryd( 2p)	0.00085	2.23222
214	C	18	dyz	Ryd( 3d)	0.0008	1.73237								
215	C	18	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00125	1.89883								
216	C	18	dz2	Ryd( 3d)	0.00128	1.91178								
4b														
1	C	1	S	Cor( 1S)	1.99859	-10.123		217	H	19	S	Val( 1S)	0.75786	0.04795
2	C	1	S	Val( 2S)	0.82303	-0.115		218	H	19	S	Ryd( 2S)	0.00258	0.41152
3	C	1	S	Ryd( 3S)	0.00192	1.034		219	H	19	px	Ryd( 2p)	0.0002	1.79765
4	C	1	px	Val( 2p)	1.05657	-0.0744		220	H	19	py	Ryd( 2p)	0.00015	1.77123
5	C	1	px	Ryd( 3p)	0.00334	0.79287		221	H	19	pz	Ryd( 2p)	0.0008	2.12992
6	C	1	py	Val( 2p)	1.05628	-0.1071								
7	C	1	py	Ryd( 3p)	0.00182	0.64654		222	H	20	S	Val( 1S)	0.75043	0.06231
8	C	1	pz	Val( 2p)	0.76881	-0.026		223	H	20	S	Ryd( 2S)	0.00203	0.41336
9	C	1	pz	Ryd( 3p)	0.00917	0.77386		224	H	20	px	Ryd( 2p)	0.00058	2.01071
10	C	1	dxy	Ryd( 3d)	0.00071	1.86579		225	H	20	py	Ryd( 2p)	0.00028	1.81984
11	C	1	dxz	Ryd( 3d)	0.00148	1.91078		226	H	20	pz	Ryd( 2p)	0.00038	1.91171
12	C	1	dyz	Ryd( 3d)	0.00231	1.63902								
13	C	1	dx2y2	Ryd( 3d)	0.0008	1.64699		227	O	21	S	Cor( 1S)	1.99972	-18.988
14	C	1	dz2	Ryd( 3d)	0.002	2.02422		228	O	21	S	Val( 2S)	1.59314	-0.887



							229	O	21	S	Ryd( 3S)	0.00038	2.10909
15	C	2	S	Cor( 1S)	1.9985	-10.118	230	O	21	px	Val( 2p)	1.61277	-0.3346
16	C	2	S	Val( 2S)	0.812	-0.1	231	O	21	px	Ryd( 3p)	0.00161	1.37724
17	C	2	S	Ryd( 3S)	0.00182	1.12004	232	O	21	py	Val( 2p)	1.81701	-0.3305
18	C	2	px	Val( 2p)	0.96442	-0.0578	233	O	21	py	Ryd( 3p)	0.00224	1.14439
19	C	2	px	Ryd( 3p)	0.00675	0.81767	234	O	21	pz	Val( 2p)	1.54518	-0.3378
20	C	2	py	Val( 2p)	0.96208	-0.0968	235	O	21	pz	Ryd( 3p)	0.00166	1.19948
21	C	2	py	Ryd( 3p)	0.00314	0.65452	236	O	21	dxy	Ryd( 3d)	0.00064	2.82525
22	C	2	pz	Val( 2p)	0.90808	-0.0396	237	O	21	dxz	Ryd( 3d)	0.00073	2.91638
23	C	2	pz	Ryd( 3p)	0.00618	0.77204	238	O	21	dyz	Ryd( 3d)	0.00068	2.77271
24	C	2	dxy	Ryd( 3d)	0.00104	1.84426	239	O	21	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00062	2.77858
25	C	2	dxz	Ryd( 3d)	0.00186	1.99113	240	O	21	dz2	Ryd( 3d)	0.00122	3.08349
26	C	2	dyz	Ryd( 3d)	0.00203	1.67599							
27	C	2	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00151	1.65403	241	O	22	S	Cor( 1S)	1.99977	-18.972
28	C	2	dz2	Ryd( 3d)	0.00158	2.01073	242	O	22	S	Val( 2S)	1.658	-0.9048
							243	O	22	S	Ryd( 3S)	0.00015	2.22339
29	C	3	S	Cor( 1S)	1.99882	-10.053	244	O	22	px	Val( 2p)	1.74649	-0.3302
30	C	3	S	Val( 2S)	0.87639	-0.1167	245	O	22	px	Ryd( 3p)	0.00142	1.24909
31	C	3	S	Ryd( 3S)	0.00191	1.07881	246	O	22	py	Val( 2p)	1.82253	-0.3198
32	C	3	px	Val( 2p)	1.05916	-0.0629	247	O	22	py	Ryd( 3p)	0.00184	1.08543
33	C	3	px	Ryd( 3p)	0.00667	0.97912	248	O	22	pz	Val( 2p)	1.46103	-0.3061
34	C	3	py	Val( 2p)	1.06355	-0.0876	249	O	22	pz	Ryd( 3p)	0.00227	1.25187
35	C	3	py	Ryd( 3p)	0.00353	0.76345	250	O	22	dxy	Ryd( 3d)	0.00111	2.85341
36	C	3	pz	Val( 2p)	1.08567	-0.0503	251	O	22	dxz	Ryd( 3d)	0.00134	3.24365
37	C	3	pz	Ryd( 3p)	0.00449	0.97815	252	O	22	dyz	Ryd( 3d)	0.00036	2.86231
38	C	3	dxy	Ryd( 3d)	0.0006	1.86526	253	O	22	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00121	2.82367
39	C	3	dxz	Ryd( 3d)	0.00072	1.98183	254	O	22	dz2	Ryd( 3d)	0.00042	3.05468
40	C	3	dyz	Ryd( 3d)	0.00068	1.73409							

41	C	3	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00071	1.66616	255	H	23	S	Val( 1S)	0.50103	0.09594
42	C	3	dz2	Ryd( 3d)	0.00065	2.0778	256	H	23	S	Ryd( 2S)	0.00294	0.4354
							257	H	23	px	Ryd( 2p)	0.00152	1.93448
43	C	4	S	Cor( 1S)	1.99891	-10.045	258	H	23	py	Ryd( 2p)	0.00147	1.57704
44	C	4	S	Val( 2S)	0.94618	-0.1326	259	H	23	pz	Ryd( 2p)	0.00212	2.17463
45	C	4	S	Ryd( 3S)	0.00113	1.06144							
46	C	4	px	Val( 2p)	1.06253	-0.0444	260	C	24	S	Cor( 1S)	1.99935	-10.155
47	C	4	px	Ryd( 3p)	0.00343	0.71293	261	C	24	S	Val( 2S)	1.10803	-0.2873
48	C	4	py	Val( 2p)	1.01973	-0.0783	262	C	24	S	Ryd( 3S)	0.00156	1.07215
49	C	4	py	Ryd( 3p)	0.00178	0.59955	263	C	24	px	Val( 2p)	0.8347	-0.0794
50	C	4	pz	Val( 2p)	1.17115	-0.0486	264	C	24	px	Ryd( 3p)	0.00256	0.47189
51	C	4	pz	Ryd( 3p)	0.00617	0.95402	265	C	24	py	Val( 2p)	1.13013	-0.0985
52	C	4	dxy	Ryd( 3d)	0.00049	1.88803	266	C	24	py	Ryd( 3p)	0.001	0.5098
53	C	4	dxz	Ryd( 3d)	0.00061	1.96833	267	C	24	pz	Val( 2p)	1.16588	-0.1079
54	C	4	dyz	Ryd( 3d)	0.00051	1.64354	268	C	24	pz	Ryd( 3p)	0.00294	0.6839
55	C	4	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00063	1.68706	269	C	24	dxy	Ryd( 3d)	0.00148	1.70277
56	C	4	dz2	Ryd( 3d)	0.00052	2.09238	270	C	24	dxz	Ryd( 3d)	0.00111	1.71599
							271	C	24	dyz	Ryd( 3d)	0.00053	1.64519
57	C	5	S	Cor( 1S)	1.99899	-10.05	272	C	24	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00162	1.78056
58	C	5	S	Val( 2S)	0.95158	-0.1404	273	C	24	dz2	Ryd( 3d)	0.001	1.89294
59	C	5	S	Ryd( 3S)	0.00096	1.0184							
60	C	5	px	Val( 2p)	1.09192	-0.049	274	H	25	S	Val( 1S)	0.80452	0.02987
61	C	5	px	Ryd( 3p)	0.00409	0.70923	275	H	25	S	Ryd( 2S)	0.00272	0.36229
62	C	5	py	Val( 2p)	1.05962	-0.0841	276	H	25	px	Ryd( 2p)	0.00052	1.94119
63	C	5	py	Ryd( 3p)	0.00233	0.64247	277	H	25	py	Ryd( 2p)	0.00038	1.72877
64	C	5	pz	Val( 2p)	1.11327	-0.0394	278	H	25	pz	Ryd( 2p)	0.00035	1.74099
65	C	5	pz	Ryd( 3p)	0.00497	0.82003							
66	C	5	dxy	Ryd( 3d)	0.00047	1.83118	279	H	26	S	Val( 1S)	0.7847	0.04584

67	C	5	dxz	Ryd( 3d)	0.00061	2.06817
68	C	5	dyz	Ryd( 3d)	0.00059	1.70444
69	C	5	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00054	1.63868
70	C	5	dz2	Ryd( 3d)	0.00054	1.94865
71	C	6	S	Cor( 1S)	1.99892	-10.057
72	C	6	S	Val( 2S)	0.95712	-0.1511
73	C	6	S	Ryd( 3S)	0.00104	1.01646
74	C	6	px	Val( 2p)	1.16139	-0.073
75	C	6	px	Ryd( 3p)	0.00426	0.87267
76	C	6	py	Val( 2p)	1.08585	-0.0982
77	C	6	py	Ryd( 3p)	0.00216	0.64322
78	C	6	pz	Val( 2p)	1.08339	-0.049
79	C	6	pz	Ryd( 3p)	0.00312	0.70123
80	C	6	dxy	Ryd( 3d)	0.00039	1.85081
81	C	6	dxz	Ryd( 3d)	0.00068	1.92817
82	C	6	dyz	Ryd( 3d)	0.0007	1.67099
83	C	6	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00054	1.65141
84	C	6	dz2	Ryd( 3d)	0.00041	2.11559
85	H	7	S	Val( 1S)	0.76651	0.08042
86	H	7	S	Ryd( 2S)	0.0017	0.32301
87	H	7	px	Ryd( 2p)	0.00035	1.94567
88	H	7	py	Ryd( 2p)	0.00035	1.71645
89	H	7	pz	Ryd( 2p)	0.00052	2.08355
90	H	8	S	Val( 1S)	0.76464	0.06564
91	H	8	S	Ryd( 2S)	0.00155	0.34741

280	H	26	S	Ryd( 2S)	0.0008	0.31004
281	H	26	px	Ryd( 2p)	0.0001	1.58596
282	H	26	py	Ryd( 2p)	0.00023	1.62243
283	H	26	pz	Ryd( 2p)	0.00087	2.15256
284	H	27	S	Val( 1S)	0.80528	0.0294
285	H	27	S	Ryd( 2S)	0.0027	0.36275
286	H	27	px	Ryd( 2p)	0.00014	1.59583
287	H	27	py	Ryd( 2p)	0.00085	2.14139
288	H	27	pz	Ryd( 2p)	0.00025	1.67347
289	N	28	S	Cor( 1S)	1.99907	-14.212
290	N	28	S	Val( 2S)	1.23964	-0.5421
291	N	28	S	Ryd( 3S)	0.00146	1.71813
292	N	28	px	Val( 2p)	1.48457	-0.2725
293	N	28	px	Ryd( 3p)	0.00289	1.11141
294	N	28	py	Val( 2p)	1.38	-0.2686
295	N	28	py	Ryd( 3p)	0.00247	1.1895
296	N	28	pz	Val( 2p)	1.50458	-0.2716
297	N	28	pz	Ryd( 3p)	0.00311	1.1344
298	N	28	dxy	Ryd( 3d)	0.0006	2.38881
299	N	28	dxz	Ryd( 3d)	0.0005	2.36202
300	N	28	dyz	Ryd( 3d)	0.0006	2.41125
301	N	28	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00052	2.27001
302	N	28	dz2	Ryd( 3d)	0.00036	2.145
303	N	29	S	Cor( 1S)	1.99918	-14.201
304	N	29	S	Val( 2S)	1.25725	-0.5401

92	H	8	px	Ryd( 2p)	0.00073	2.07265	305	N	29	S	Ryd( 3S)	0.00199	1.63674
93	H	8	py	Ryd( 2p)	0.00037	1.70892	306	N	29	px	Val( 2p)	1.52413	-0.2514
94	H	8	pz	Ryd( 2p)	0.00012	1.96773	307	N	29	px	Ryd( 3p)	0.00417	1.12761
							308	N	29	py	Val( 2p)	1.34121	-0.2422
95	C	9	S	Cor( 1S)	1.999	-10.112	309	N	29	py	Ryd( 3p)	0.00245	1.2194
96	C	9	S	Val( 2S)	0.92703	-0.1895	310	N	29	pz	Val( 2p)	1.49273	-0.2606
97	C	9	S	Ryd( 3S)	0.00138	1.51295	311	N	29	pz	Ryd( 3p)	0.00232	1.01521
98	C	9	px	Val( 2p)	1.05126	-0.0849	312	N	29	dxy	Ryd( 3d)	0.0006	2.36773
99	C	9	px	Ryd( 3p)	0.00284	0.60679	313	N	29	dxz	Ryd( 3d)	0.00048	2.36367
100	C	9	py	Val( 2p)	0.82715	-0.0628	314	N	29	dyz	Ryd( 3d)	0.00052	2.34956
101	C	9	py	Ryd( 3p)	0.00662	0.66632	315	N	29	dx2y2	Ryd( 3d)	0.0004	2.33122
102	C	9	pz	Val( 2p)	1.20534	-0.1051	316	N	29	dz2	Ryd( 3d)	0.00072	2.19963
103	C	9	pz	Ryd( 3p)	0.01129	0.9467							
104	C	9	dxy	Ryd( 3d)	0.00108	1.89492	317	O	30	S	Cor( 1S)	1.9998	-18.852
105	C	9	dxz	Ryd( 3d)	0.00056	1.89554	318	O	30	S	Val( 2S)	1.69253	-0.8685
106	C	9	dyz	Ryd( 3d)	0.0009	1.74443	319	O	30	S	Ryd( 3S)	0.00045	2.10863
107	C	9	dx2y2	Ryd( 3d)	0.0018	1.88757	320	O	30	px	Val( 2p)	1.64559	-0.246
108	C	9	dz2	Ryd( 3d)	0.00119	2.13535	321	O	30	px	Ryd( 3p)	0.00165	1.17735
							322	O	30	py	Val( 2p)	1.7238	-0.2495
109	C	10	S	Cor( 1S)	1.99869	-10.046	323	O	30	py	Ryd( 3p)	0.00188	1.17926
110	C	10	S	Val( 2S)	0.87791	-0.1166	324	O	30	pz	Val( 2p)	1.51609	-0.2655
111	C	10	S	Ryd( 3S)	0.00242	1.18498	325	O	30	pz	Ryd( 3p)	0.00063	1.06921
112	C	10	px	Val( 2p)	1.08442	-0.0762	326	O	30	dxy	Ryd( 3d)	0.0007	2.84381
113	C	10	px	Ryd( 3p)	0.00571	0.91928	327	O	30	dxz	Ryd( 3d)	0.00089	3.04624
114	C	10	py	Val( 2p)	1.11711	-0.0787	328	O	30	dyz	Ryd( 3d)	0.00094	3.0312
115	C	10	py	Ryd( 3p)	0.00461	0.96371	329	O	30	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00061	2.83003
116	C	10	pz	Val( 2p)	1.10918	-0.0833	330	O	30	dz2	Ryd( 3d)	0.00152	2.93035
117	C	10	pz	Ryd( 3p)	0.00396	0.84746							

118	C	10	dxy	Ryd( 3d)	0.00118	1.60508	331	H	31	S	Val( 1S)	0.76204	0.08425
119	C	10	dxz	Ryd( 3d)	0.00097	1.68512	332	H	31	S	Ryd( 2S)	0.00221	0.35079
120	C	10	dyz	Ryd( 3d)	0.00079	1.6636	333	H	31	px	Ryd( 2p)	0.00023	1.92716
121	C	10	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00057	1.52531	334	H	31	py	Ryd( 2p)	0.0002	1.6774
122	C	10	dz2	Ryd( 3d)	0.00123	1.4181	335	H	31	pz	Ryd( 2p)	0.00079	2.19739
123	C	11	S	Cor( 1S)	1.99879	-10.115	336	C	32	S	Cor( 1S)	1.99927	-10.055
124	C	11	S	Val( 2S)	0.81829	-0.115	337	C	32	S	Val( 2S)	1.09597	-0.2491
125	C	11	S	Ryd( 3S)	0.00159	0.98739	338	C	32	S	Ryd( 3S)	0.00111	1.22889
126	C	11	px	Val( 2p)	1.00085	-0.0831	339	C	32	px	Val( 2p)	1.1655	-0.0736
127	C	11	px	Ryd( 3p)	0.00479	0.88882	340	C	32	px	Ryd( 3p)	0.00288	0.6046
128	C	11	py	Val( 2p)	0.87711	-0.0417	341	C	32	py	Val( 2p)	1.20766	-0.08
129	C	11	py	Ryd( 3p)	0.00594	0.76977	342	C	32	py	Ryd( 3p)	0.00332	0.63661
130	C	11	pz	Val( 2p)	0.99178	-0.0898	343	C	32	pz	Val( 2p)	1.16518	-0.0778
131	C	11	pz	Ryd( 3p)	0.004	0.73213	344	C	32	pz	Ryd( 3p)	0.00294	0.59906
132	C	11	dxy	Ryd( 3d)	0.00112	1.89004	345	C	32	dxy	Ryd( 3d)	0.00029	1.75624
133	C	11	dxz	Ryd( 3d)	0.00074	2.05112	346	C	32	dxz	Ryd( 3d)	0.00039	1.76338
134	C	11	dyz	Ryd( 3d)	0.00088	1.95108	347	C	32	dyz	Ryd( 3d)	0.00021	1.71528
135	C	11	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00141	1.93035	348	C	32	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00062	1.97787
136	C	11	dz2	Ryd( 3d)	0.00125	1.77891	349	C	32	dz2	Ryd( 3d)	0.00064	1.95957
137	C	12	S	Cor( 1S)	1.99906	-10.133	350	H	33	S	Val( 1S)	0.77896	0.06236
138	C	12	S	Val( 2S)	0.80889	-0.1137	351	H	33	S	Ryd( 2S)	0.00151	0.39857
139	C	12	S	Ryd( 3S)	0.0054	1.00135	352	H	33	px	Ryd( 2p)	0.00018	1.71839
140	C	12	px	Val( 2p)	0.87939	-0.0449	353	H	33	py	Ryd( 2p)	0.00023	1.73273
141	C	12	px	Ryd( 3p)	0.00761	0.77327	354	H	33	pz	Ryd( 2p)	0.00074	2.14716
142	C	12	py	Val( 2p)	0.91004	-0.0282							
143	C	12	py	Ryd( 3p)	0.00822	0.69258	355	H	34	S	Val( 1S)	0.77229	0.06845

144	C	12	pz	Val( 2p)	0.78855	-0.0372	356	H	34	S	Ryd( 2S)	0.00141	0.3973
145	C	12	pz	Ryd( 3p)	0.01389	0.66884	357	H	34	px	Ryd( 2p)	0.00017	1.71813
146	C	12	dxy	Ryd( 3d)	0.00175	1.98516	358	H	34	py	Ryd( 2p)	0.0008	2.19398
147	C	12	dxz	Ryd( 3d)	0.00196	1.90781	359	H	34	pz	Ryd( 2p)	0.00018	1.69536
148	C	12	dyz	Ryd( 3d)	0.00168	1.9657							
149	C	12	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00203	1.84397	360	H	35	S	Val( 1S)	0.76309	0.08431
150	C	12	dz2	Ryd( 3d)	0.0031	1.73911	361	H	35	S	Ryd( 2S)	0.00278	0.51886
							362	H	35	px	Ryd( 2p)	0.0007	2.16583
151	C	13	S	Cor( 1S)	1.99921	-10.183	363	H	35	py	Ryd( 2p)	0.00027	1.77845
152	C	13	S	Val( 2S)	0.87192	-0.2103	364	H	35	pz	Ryd( 2p)	0.0002	1.72733
153	C	13	S	Ryd( 3S)	0.00207	0.73691							
154	C	13	px	Val( 2p)	0.86702	-0.0932	365	C	36	S	Cor( 1S)	1.99927	-10.06
155	C	13	px	Ryd( 3p)	0.00899	0.5612	366	C	36	S	Val( 2S)	1.09427	-0.2532
156	C	13	py	Val( 2p)	1.02641	-0.1501	367	C	36	S	Ryd( 3S)	0.00078	1.24372
157	C	13	py	Ryd( 3p)	0.00867	0.80314	368	C	36	px	Val( 2p)	1.09973	-0.0767
158	C	13	pz	Val( 2p)	0.87435	-0.0883	369	C	36	px	Ryd( 3p)	0.00252	0.52694
159	C	13	pz	Ryd( 3p)	0.01093	0.55928	370	C	36	py	Val( 2p)	1.21705	-0.086
160	C	13	dxy	Ryd( 3d)	0.00314	1.63564	371	C	36	py	Ryd( 3p)	0.00352	0.64012
161	C	13	dxz	Ryd( 3d)	0.00126	1.83548	372	C	36	pz	Val( 2p)	1.21367	-0.0848
162	C	13	dyz	Ryd( 3d)	0.00285	1.69375	373	C	36	pz	Ryd( 3p)	0.00358	0.6432
163	C	13	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00231	1.6855	374	C	36	dxy	Ryd( 3d)	0.00035	1.74711
164	C	13	dz2	Ryd( 3d)	0.00268	1.58792	375	C	36	dxz	Ryd( 3d)	0.00054	1.85159
							376	C	36	dyz	Ryd( 3d)	0.00015	1.74505
165	H	14	S	Val( 1S)	0.56854	0.09597	377	C	36	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00066	1.90188
166	H	14	S	Ryd( 2S)	0.00391	0.42783	378	C	36	dz2	Ryd( 3d)	0.0005	1.8877
167	H	14	px	Ryd( 2p)	0.00112	1.96158							
168	H	14	py	Ryd( 2p)	0.0007	1.98502	379	H	37	S	Val( 1S)	0.76953	0.06518
169	H	14	pz	Ryd( 2p)	0.00064	1.80198	380	H	37	S	Ryd( 2S)	0.00149	0.39108

							381	H	37	px	Ryd( 2p)	0.00014	1.68981
170	C	15	S	Cor( 1S)	1.99908	-10.076	382	H	37	py	Ryd( 2p)	0.00082	2.18873
171	C	15	S	Val( 2S)	1.01857	-0.2387	383	H	37	pz	Ryd( 2p)	0.00023	1.71527
172	C	15	S	Ryd( 3S)	0.00165	1.46218							
173	C	15	px	Val( 2p)	1.13234	-0.0999	384	H	38	S	Val( 1S)	0.77543	0.06062
174	C	15	px	Ryd( 3p)	0.00424	0.6838	385	H	38	S	Ryd( 2S)	0.00162	0.39121
175	C	15	py	Val( 2p)	1.09538	-0.1004	386	H	38	px	Ryd( 2p)	0.00017	1.70971
176	C	15	py	Ryd( 3p)	0.0042	0.5837	387	H	38	py	Ryd( 2p)	0.00026	1.74616
177	C	15	pz	Val( 2p)	1.20387	-0.1051	388	H	38	pz	Ryd( 2p)	0.00075	2.12664
178	C	15	pz	Ryd( 3p)	0.00499	0.77707							
179	C	15	dxy	Ryd( 3d)	0.0007	1.87788	389	H	39	S	Val( 1S)	0.77686	0.06094
180	C	15	dxz	Ryd( 3d)	0.00051	1.79216	390	H	39	S	Ryd( 2S)	0.00152	0.39679
181	C	15	dyz	Ryd( 3d)	0.00071	1.76966	391	H	39	px	Ryd( 2p)	0.00049	1.95214
182	C	15	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00064	1.8249	392	H	39	py	Ryd( 2p)	0.00028	1.76833
183	C	15	dz2	Ryd( 3d)	0.00052	1.88913	393	H	39	pz	Ryd( 2p)	0.00041	1.86899
184	C	16	S	Cor( 1S)	1.99909	-10.055	394	H	40	S	Val( 1S)	0.74485	0.08132
185	C	16	S	Val( 2S)	1.04408	-0.2309	395	H	40	S	Ryd( 2S)	0.0033	0.40695
186	C	16	S	Ryd( 3S)	0.00169	1.41763	396	H	40	px	Ryd( 2p)	0.00019	1.80006
187	C	16	px	Val( 2p)	1.15354	-0.0879	397	H	40	py	Ryd( 2p)	0.00081	2.20258
188	C	16	px	Ryd( 3p)	0.00448	0.71702	398	H	40	pz	Ryd( 2p)	0.00012	1.75101
189	C	16	py	Val( 2p)	1.22142	-0.0879							
190	C	16	py	Ryd( 3p)	0.00638	0.77857	399	H	41	S	Val( 1S)	0.74616	0.05358
191	C	16	pz	Val( 2p)	1.07951	-0.0773	400	H	41	S	Ryd( 2S)	0.00242	0.39925
192	C	16	pz	Ryd( 3p)	0.00417	0.61931	401	H	41	px	Ryd( 2p)	0.00062	2.02758
193	C	16	dxy	Ryd( 3d)	0.00044	1.73423	402	H	41	py	Ryd( 2p)	0.00022	1.82454
194	C	16	dxz	Ryd( 3d)	0.00072	1.96643	403	H	41	pz	Ryd( 2p)	0.00034	1.85336
195	C	16	dyz	Ryd( 3d)	0.00054	1.72676							

196	C	16	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00055	1.93655	404	H	42	S	Val( 1S)	0.74018	0.08065
197	C	16	dz2	Ryd( 3d)	0.00058	1.81577	405	H	42	S	Ryd( 2S)	0.00407	0.40759
							406	H	42	px	Ryd( 2p)	0.00018	1.83624
198	H	17	S	Val( 1S)	0.56281	0.08295	407	H	42	py	Ryd( 2p)	0.00012	1.85846
199	H	17	S	Ryd( 2S)	0.00444	0.42389	408	H	42	pz	Ryd( 2p)	0.00085	2.21386
200	H	17	px	Ryd( 2p)	0.00066	1.81072							
201	H	17	py	Ryd( 2p)	0.00067	1.9201	409	S	43	S	Cor( 1S)	2	-87.596
202	H	17	pz	Ryd( 2p)	0.00113	1.94328	410	S	43	S	Cor( 2S)	1.99944	-8.8124
							411	S	43	S	Val( 3S)	1.76575	-0.7171
203	C	18	S	Cor( 1S)	1.99903	-10.077	412	S	43	S	Ryd( 4S)	0.00815	0.76895
204	C	18	S	Val( 2S)	0.90394	-0.2076	413	S	43	px	Cor( 2p)	1.99995	-5.8305
205	C	18	S	Ryd( 3S)	0.00032	1.54309	414	S	43	px	Val( 3p)	1.70129	-0.1794
206	C	18	px	Val( 2p)	1.06161	-0.0997	415	S	43	px	Ryd( 4p)	0.00189	0.56415
207	C	18	px	Ryd( 3p)	0.00462	0.89097	416	S	43	py	Cor( 2p)	1.99983	-5.835
208	C	18	py	Val( 2p)	1.02073	-0.0921	417	S	43	py	Val( 3p)	1.08545	-0.1288
209	C	18	py	Ryd( 3p)	0.00251	0.73652	418	S	43	py	Ryd( 4p)	0.00528	0.51018
210	C	18	pz	Val( 2p)	1.04918	-0.0954	419	S	43	pz	Cor( 2p)	1.99994	-5.831
211	C	18	pz	Ryd( 3p)	0.00247	0.75087	420	S	43	pz	Val( 3p)	1.65285	-0.1763
212	C	18	dxy	Ryd( 3d)	0.00082	1.75866	421	S	43	pz	Ryd( 4p)	0.00189	0.55959
213	C	18	dxz	Ryd( 3d)	0.00104	1.82403	422	S	43	dxy	Ryd( 3d)	0.00249	0.96106
214	C	18	dyz	Ryd( 3d)	0.00082	1.73521	423	S	43	dxz	Ryd( 3d)	0.00052	0.73183
215	C	18	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00127	1.91121	424	S	43	dyz	Ryd( 3d)	0.00292	0.99554
216	C	18	dz2	Ryd( 3d)	0.00124	1.88137	425	S	43	dx2y2	Ryd( 3d)	0.00389	0.97677
							426	S	43	dz2	Ryd( 3d)	0.00143	0.81077



**Table S4.** Non-bond interactions of molecules (4a and 4b) with proteins (PDB IDs: 1DB4 and 2PWB).

Distance (Å)	Category	Type	From	From Chemistry	To	To Chemistry
<b>Favourable Non-bond</b>						
<b>1DB4 vs 4a</b>						
2.27	Hydrogen Bond	Conventional Hydrogen Bond	A:SER113:HG	H-Donor	:UNK0:O	H-Acceptor
2.63	Hydrogen Bond	Conventional Hydrogen Bond	A:ASN114:HD22	H-Donor	:UNK0:O	H-Acceptor
2.34	Hydrogen Bond	Conventional Hydrogen Bond	A:LYS115:HN	H-Donor	:UNK0:O	H-Acceptor
2.99	Hydrogen Bond	Conventional Hydrogen Bond	:UNK0:H	H-Donor	A:CYS28:O	H-Acceptor
3.52	Hydrophobic	Pi-Sigma	A:ASN114:CB	C-H	:UNK0	Pi-Orbitals
4.33	Hydrophobic	Alkyl	:UNK0:C	Alkyl	A:VAL30	Alkyl
3.90	Hydrophobic	Alkyl	:UNK0:C	Alkyl	A:VAL30	Alkyl
<b>1DB4 vs 4b</b>						
2.47	Hydrogen Bond	Conventional Hydrogen Bond	A:GLY29:HN	H-Donor	:UNK0:O	H-Acceptor
2.55	Hydrogen Bond	Conventional Hydrogen Bond	A:VAL30:HN	H-Donor	:UNK0:O	H-Acceptor
2.28	Hydrogen Bond	Conventional Hydrogen Bond	A:HIS47:HD1	H-Donor	:UNK0:O	H-Acceptor
3.70	Hydrogen Bond	Carbon Hydrogen Bond	:UNK0:C	H-Donor	A:HIS27:O	H-Acceptor
3.33	Hydrogen Bond	Carbon Hydrogen Bond	:UNK0:C	H-Donor	A:ASP48:OD2	H-Acceptor
5.09	Other	Pi-Sulfur	:UNK0:S	Sulfur	A:HIS6	Pi-Orbitals
5.23	Hydrophobic	Pi-Pi T-shaped	A:PHE5	Pi-Orbitals	:UNK0	Pi-Orbitals
4.92	Hydrophobic	Alkyl	:UNK0:C	Alkyl	A:LEU2	Alkyl
<b>2PWB vs 4a</b>						
2.07	Hydrogen Bond	Conventional Hydrogen Bond	A:TRP8:HN	H-Donor	:UNK0:O	H-Acceptor
2.41	Hydrogen Bond	Conventional Hydrogen Bond	A:ARG185:HH22	H-Donor	:UNK0:O	H-Acceptor
2.96	Hydrogen Bond	Conventional Hydrogen Bond	:UNK0:H	H-Donor	A:ASN5:O	H-Acceptor
2.61	Hydrogen Bond	Conventional Hydrogen Bond	:UNK0:H	H-Donor	A:ALA6:O	H-Acceptor

1.86	Hydrogen Bond	Conventional Hydrogen Bond	:UNK0:H	H-Donor	A:ALA6:O	H-Acceptor
3.18	Hydrogen Bond	Carbon Hydrogen Bond	A:TRP8:CD1	H-Donor	:UNK0:O	H-Acceptor
3.92	Hydrogen Bond;Electrostatic	Pi-Cation;Pi-Donor Hydrogen Bond	A:ARG185:N H1	Positive;H-Donor	:UNK0	Pi-Orbitals;Pi-Orbitals
4.69	Hydrophobic	Alkyl	:UNK0:C	Alkyl	A:LEU209	Alkyl
2PWB vs 4b						
2.23	Hydrogen Bond	Conventional Hydrogen Bond	A:VAL127:HN	H-Donor	:UNK0:O	H-Acceptor
2.05	Hydrogen Bond	Conventional Hydrogen Bond	A:ALA245:HN	H-Donor	:UNK0:O	H-Acceptor
2.95	Hydrogen Bond	Conventional Hydrogen Bond	:UNK0:H	H-Donor	A:GLY152:O	H-Acceptor
2.52	Hydrogen Bond	Conventional Hydrogen Bond	:UNK0:H	H-Donor	A:GLY152:O	H-Acceptor
2.73	Hydrogen Bond	Conventional Hydrogen Bond	:UNK0:H	H-Donor	:UNK0:O	H-Acceptor
3.41	Hydrogen Bond	Carbon Hydrogen Bond	A:GLY126:CA	H-Donor	:UNK0:O	H-Acceptor
3.41	Hydrogen Bond	Carbon Hydrogen Bond	A:GLY126:CA	H-Donor	:UNK0:O	H-Acceptor
3.26	Hydrogen Bond	Carbon Hydrogen Bond	:UNK0:C	H-Donor	A:LYS125:O	H-Acceptor
4.63	Hydrophobic	Pi-Alkyl	:UNK0	Pi-Orbitals	A:ALA245	Alkyl
Unsatisfied Bond (within compounds 4a and4b)						
Name	Atom	Unsatisfied type		Name	Atom	Unsatisfied type
1DB4 vs 4a						
:UNK0:H	H	Donor		:UNK0:H	H	Donor
:UNK0:O	O	Acceptor				
1DB4 vs 4b						
:UNK0:H	H	Donor		:UNK0:H	H	Donor
:UNK0:H	H	Donor				
2PWB vs 4a						
:UNK0:H	H	Donor		:UNK0:O	O	Acceptor
:UNK0:O	O	Acceptor				
2PWB vs 4b						

:UNK0:H	H	Donor		:UNK0:S	S	Donor
---------	---	-------	--	---------	---	-------

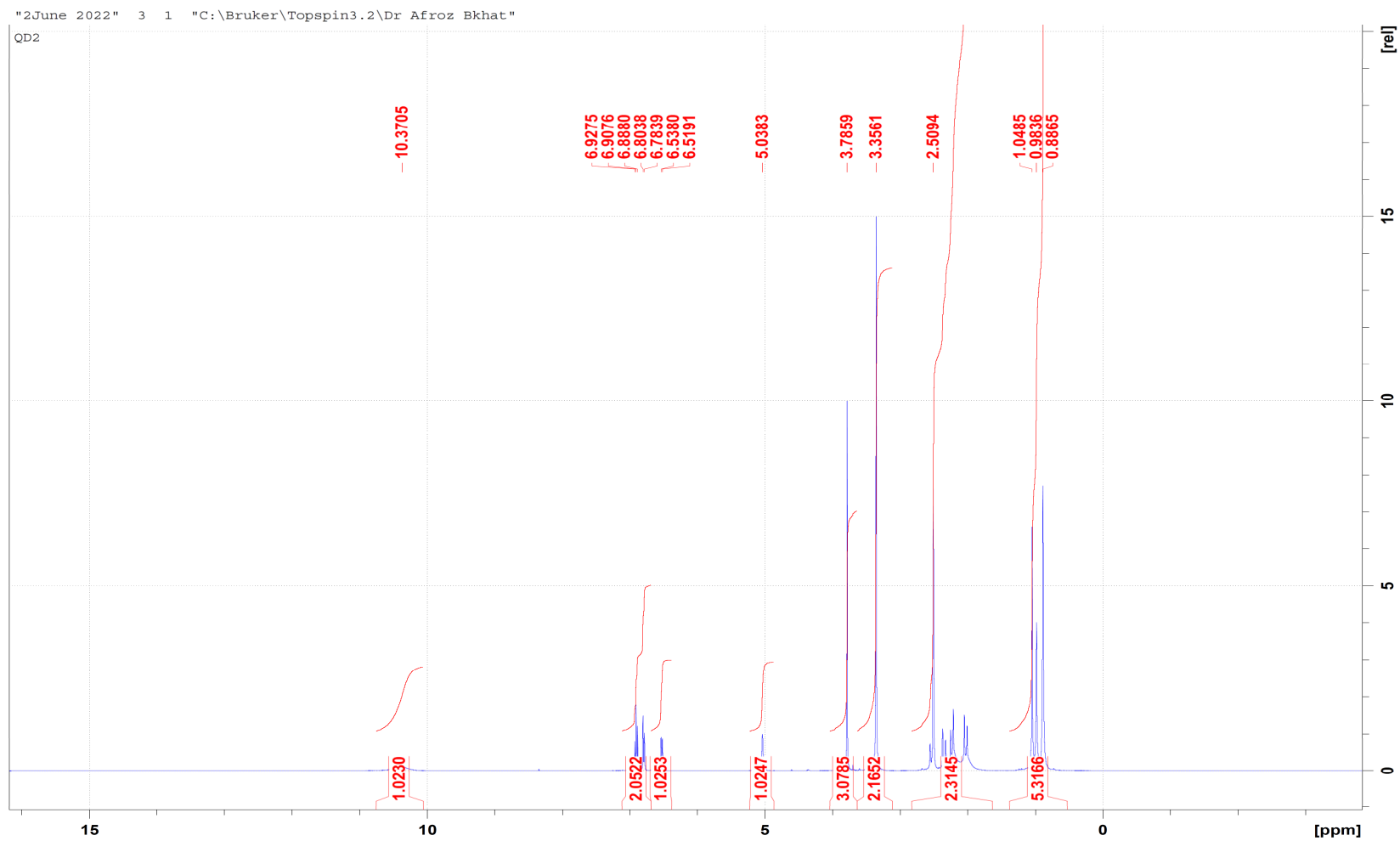


Figure S1. <sup>1</sup>H NMR of compound 4a.

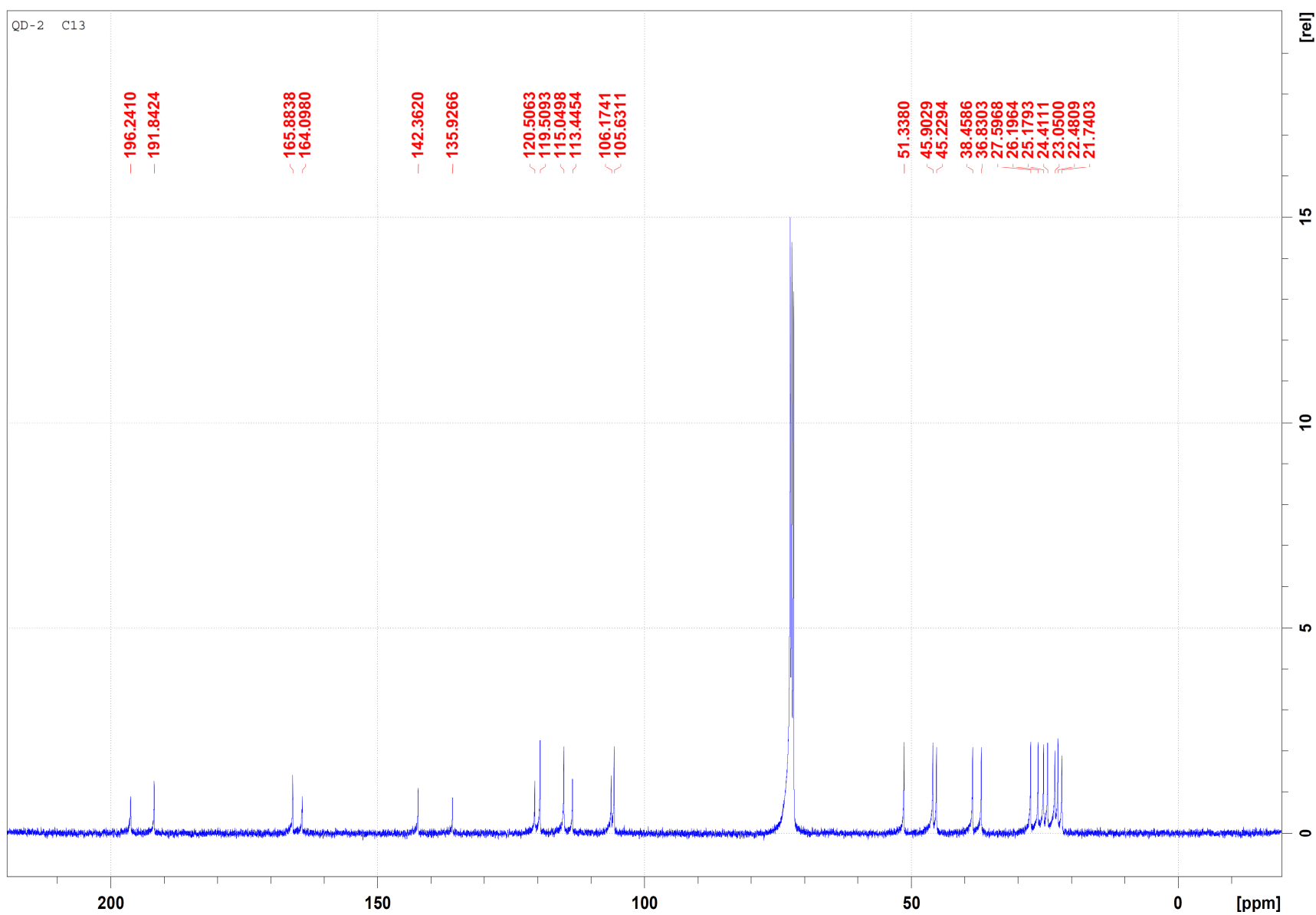


Figure S2.  $^{13}\text{C}$  NMR of compound 4a.

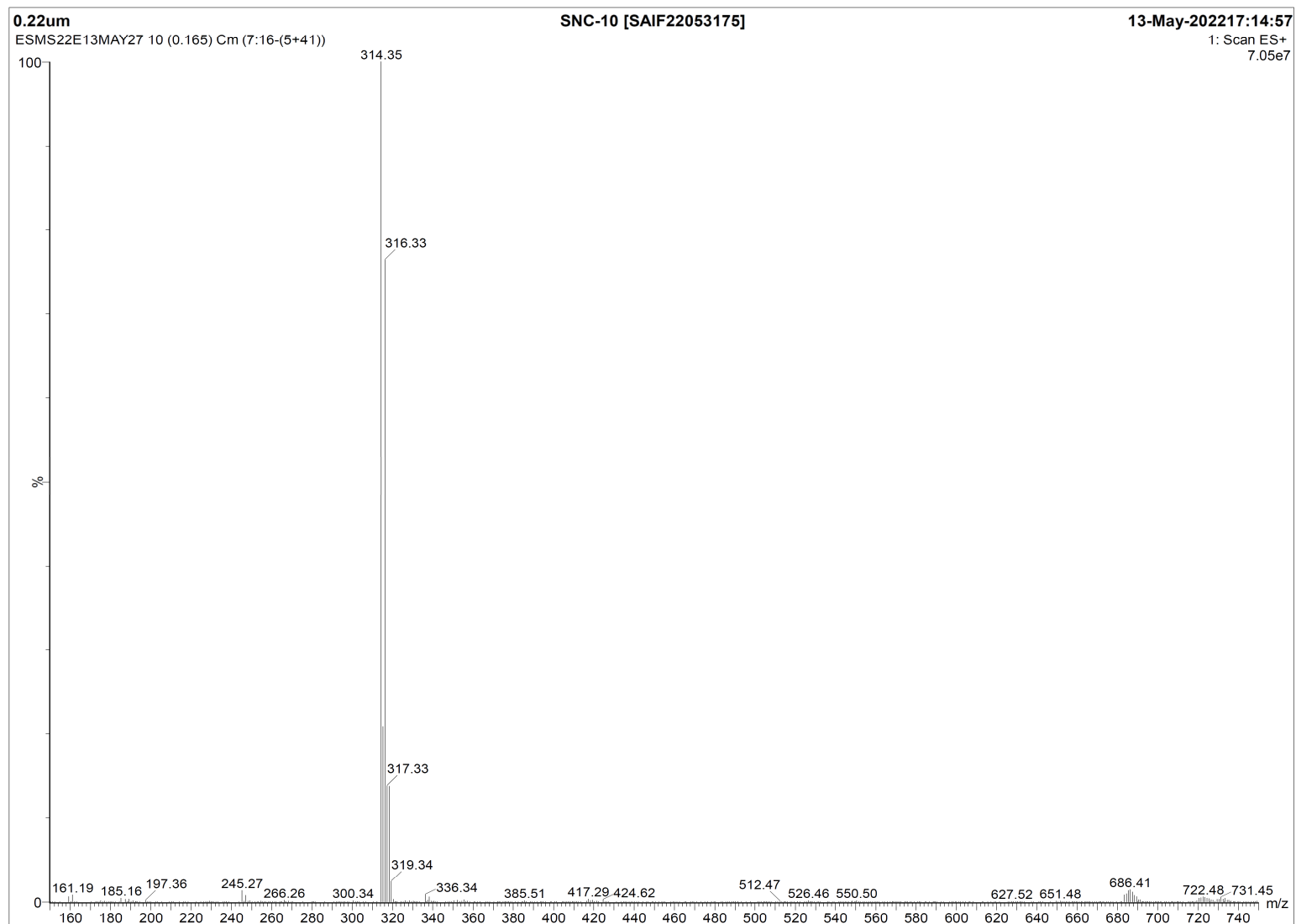


Figure S3. Mass spectra of compound 4a.

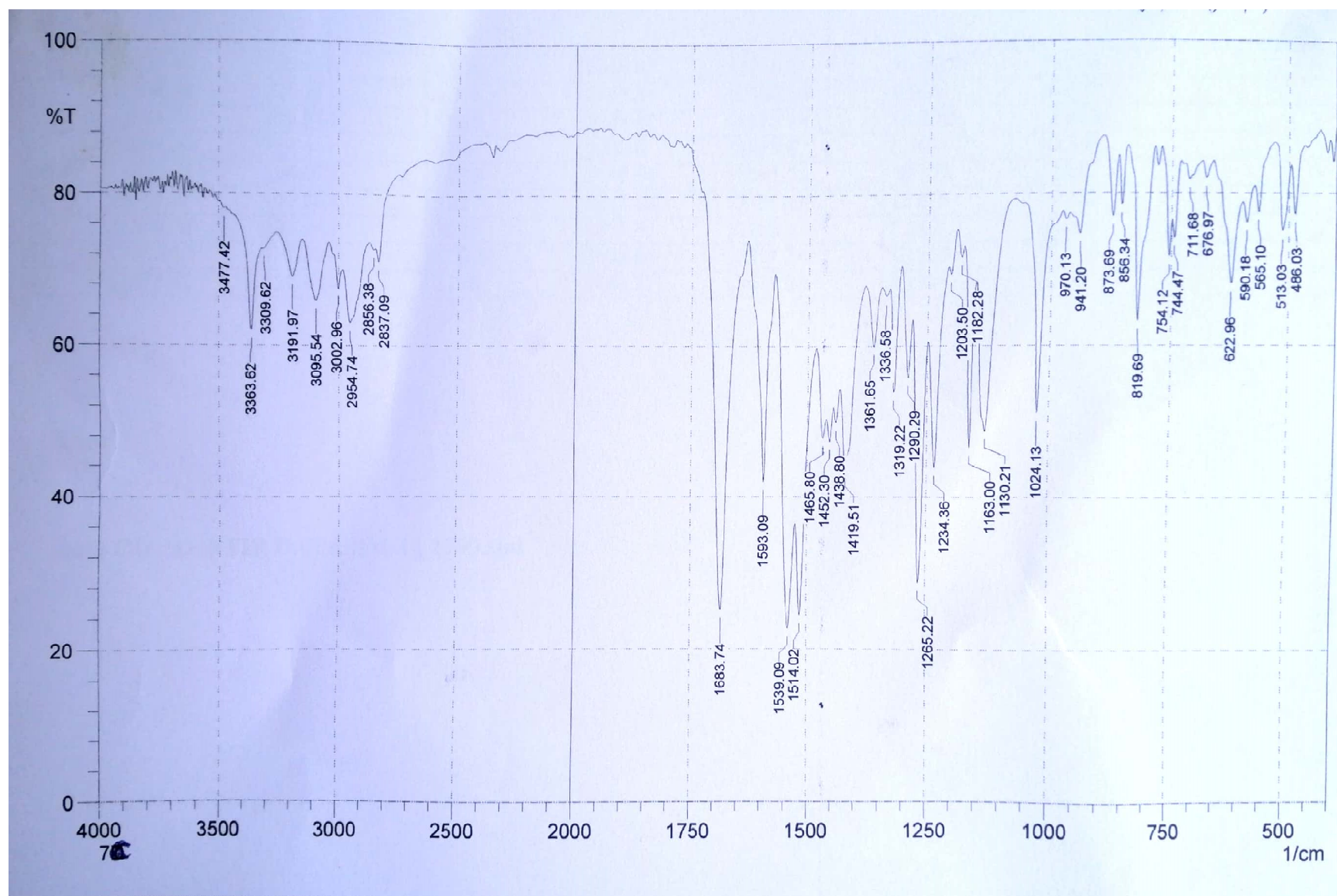


Figure S4. IR spectra of compound 4a.

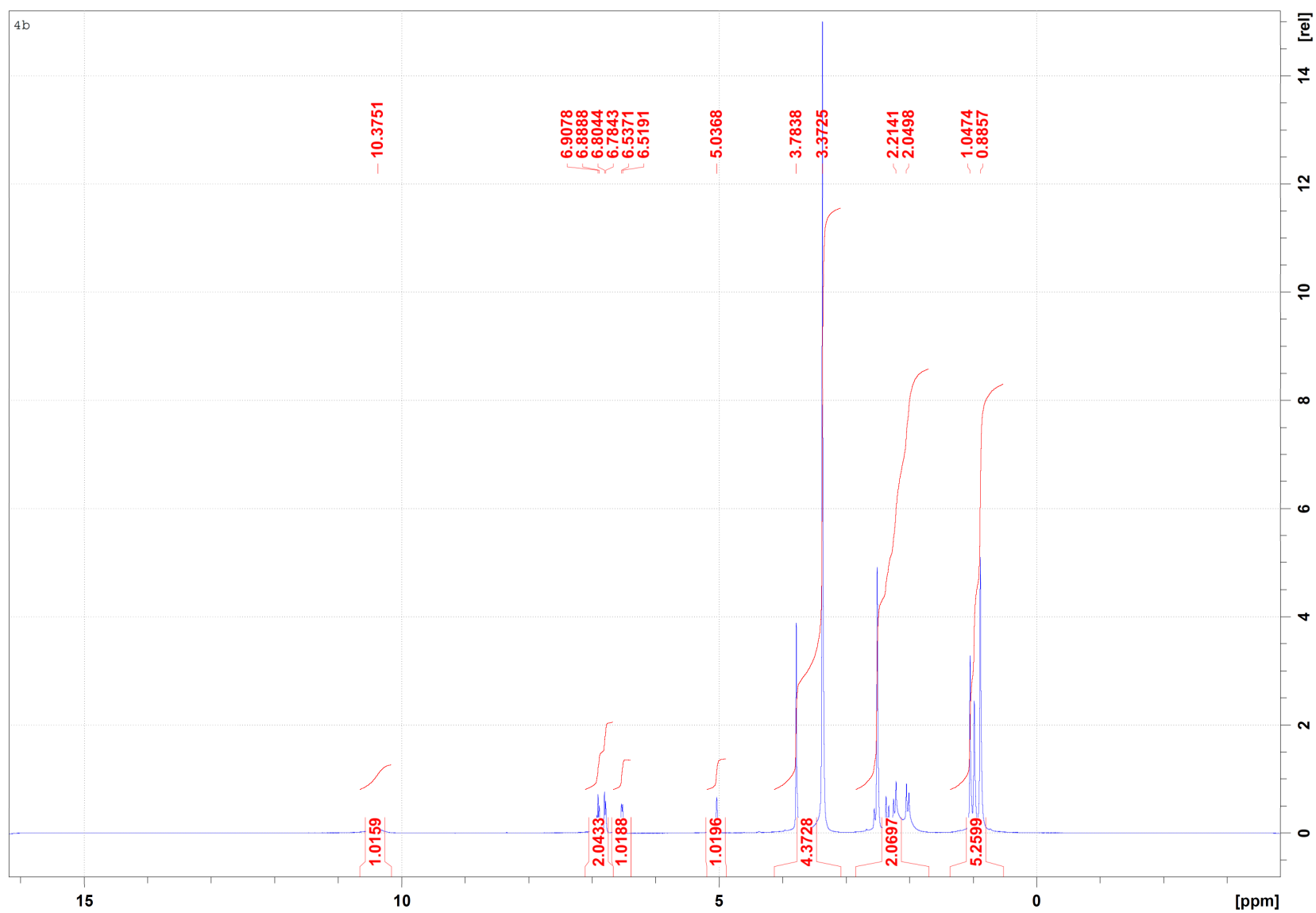


Figure S5.  $^1\text{H}$  NMR spectra of compound 4b.

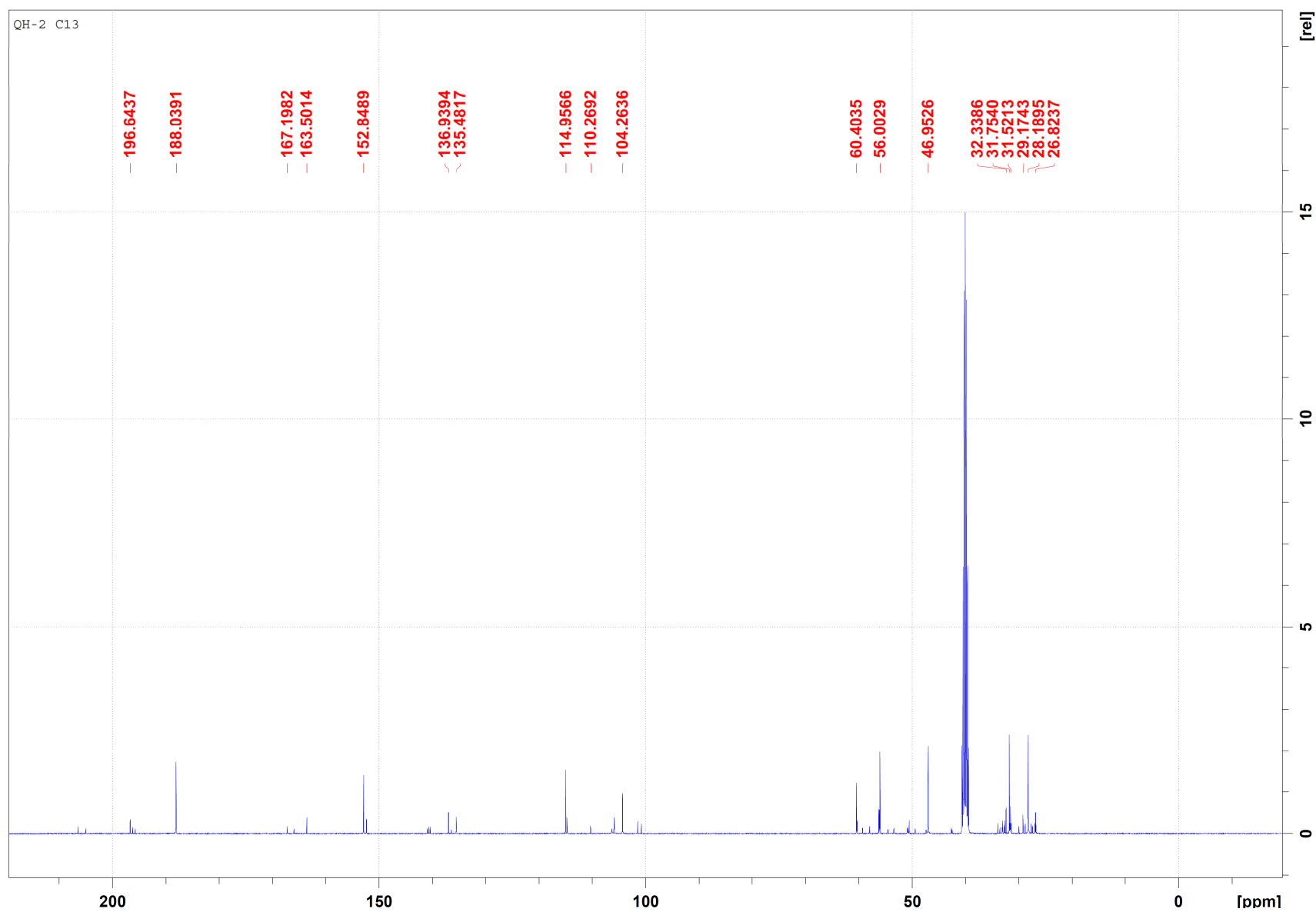


Figure S6.  $^{13}\text{C}$  NMR spectra of compound **4b**.



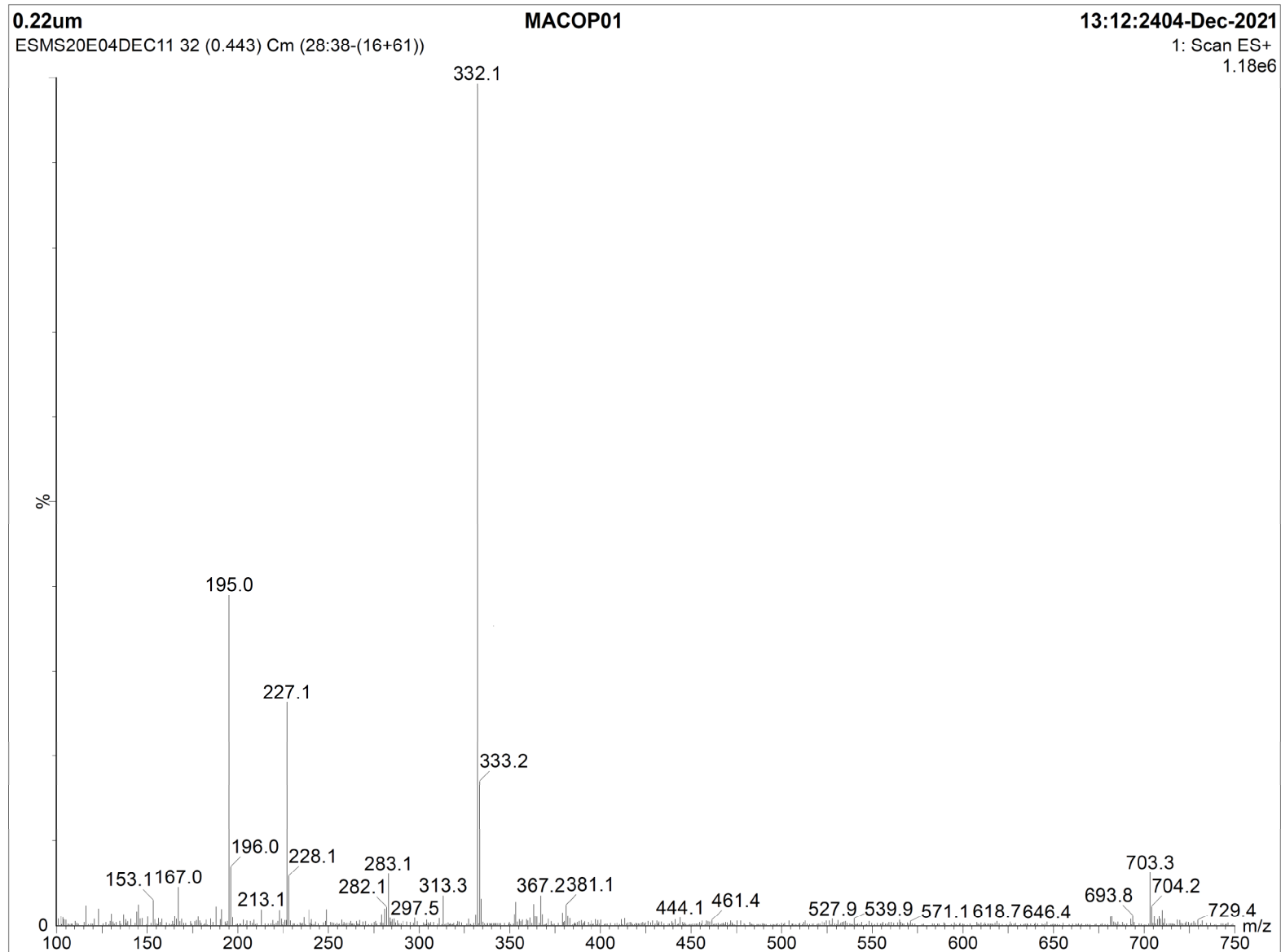


Figure S7. Mass spectra of compound 4b.

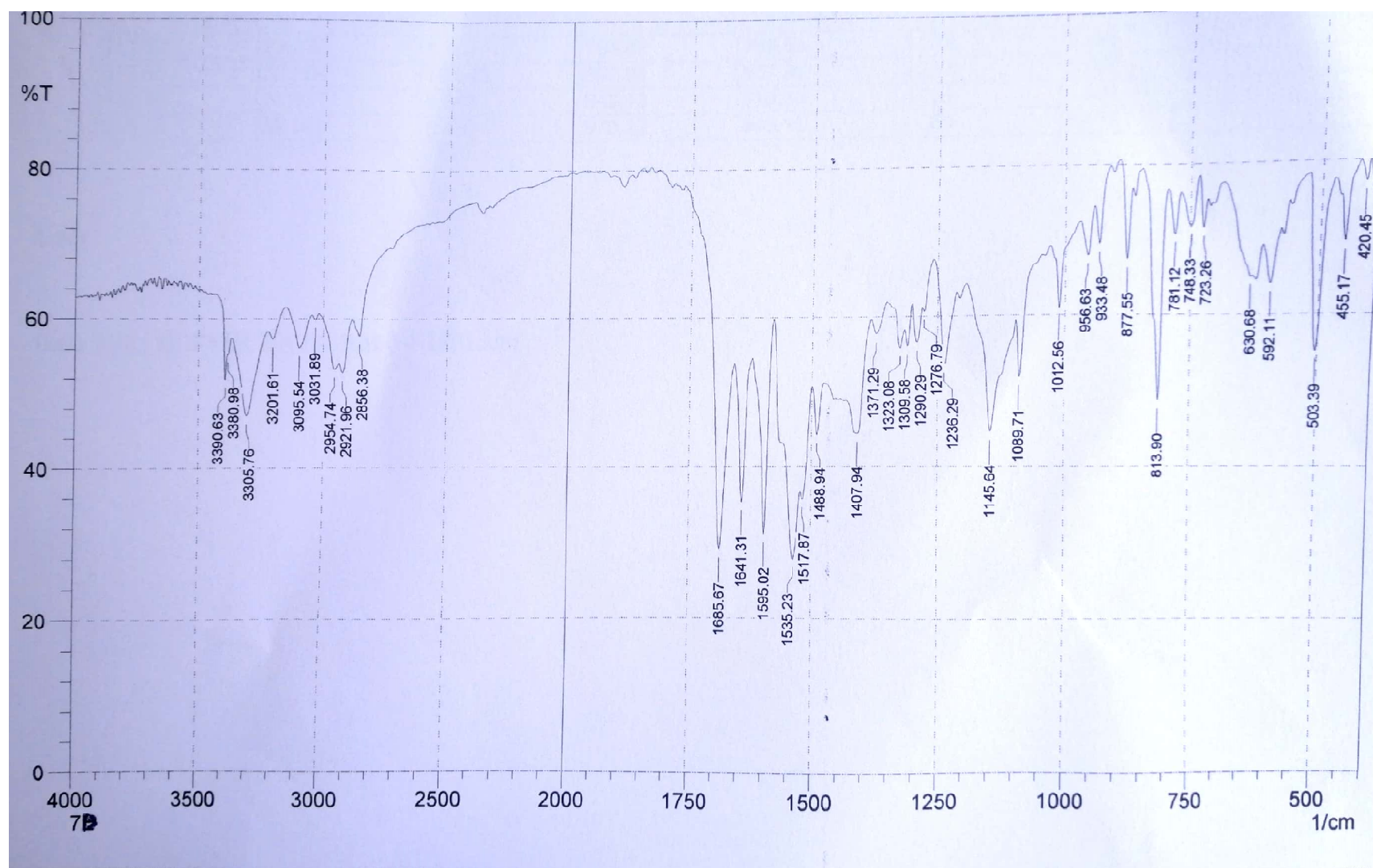


Figure S8. IR spectra of compound 4b.