**Revisiting the Algar-Flynn-Oyamada (AFO) Reaction Mechanism: Computational and other Studies**

Carla S. S. Teixeiraa, Sergio F. Sousaa Anthony J. Burkeb,c,d,e,f\*

aLAQV/REQUIMTE, BioSIM – Department of Biomedicine, Faculty of Medicine, Universidade do Porto, Alameda Prof. Hernâni Monteiro, 4200-319 Porto, Portugal.

bFaculty of Pharmacy, University of Coimbra, Pólo das Ciências da Saúde, Azinhaga de Santa Coimbra, 3000-548 Coimbra, Portugal.

cCoimbra chemistry centre, Institute of Molecular Sciences, Rua Larga, 3004-535 Coimbra, Portugal.

dLAQV-REQUIMTE, Institute for Research and Advanced Studies, Universidade de Évora, Rua Romão Romalho 59, 7000 Évora, Portugal.

eCenter for Neurosciences and Cellular Biology (CNC), Polo I, Universidade de Coimbra Rua Larga Faculdade de Medicina, Polo I, 1ºandar 3004–504, Coimbra Portugal. [ajburke@ff.uc.pt](mailto:ajburke@ff.uc.pt)

fDepartment of Chemistry, University College, Belfield, Dublin 4, Ireland.

# Hypothesis 1; R=H; Step 1

## Reagent

C         3.533750        0.580807        0.480241  
 C         2.341814        0.001130       -0.033618  
 C         2.354813       -1.403483       -0.450650  
 C         3.628879       -2.080712       -0.279747  
 C         4.744365       -1.478149        0.247076  
 C         4.709660       -0.119077        0.642783  
 H         3.482601        1.626437        0.765711  
 H         3.651696       -3.122187       -0.590922  
 H         5.663429       -2.050067        0.361997  
 H         5.587673        0.357786        1.067051  
 C         1.219670        0.930734       -0.175000  
 O         1.448588        2.176311       -0.157234  
 C        -0.208964        0.577663       -0.283234  
 H        -0.813319        1.432343       -0.574262  
 C        -0.808888       -0.572343        0.078737  
 H        -0.187021       -1.418825        0.343932  
 C        -2.254267       -0.805111        0.102140  
 C        -2.721268       -2.085576        0.450907  
 C        -3.205826        0.187864       -0.206542  
 C        -4.084913       -2.371198        0.485375  
 H        -1.999283       -2.859857        0.694577  
 C        -4.566401       -0.097266       -0.172124  
 H        -2.877987        1.187857       -0.469883  
 C        -5.013558       -1.377559        0.172893  
 H        -4.421806       -3.367094        0.756136  
 H        -5.284534        0.680869       -0.412141  
 H        -6.076762       -1.594719        0.199688  
 O         1.377799       -2.036843       -0.949386  
 O        -0.332965        4.105370        0.246106  
 H         0.264159        3.324820        0.050545  
 O        -1.610474        3.640472       -0.276155

 H        -2.065620        3.393816        0.545503

## Transition state

 C         3.498695       -0.197103        0.401707  
 C         2.117901       -0.243188        0.154034  
 C         1.526348       -1.471414       -0.314358  
 C         2.411737       -2.548287       -0.594064  
 C         3.768858       -2.469801       -0.317404  
 C         4.328810       -1.292902        0.202775  
 H         3.906659        0.750939        0.739928  
 H         1.977207       -3.462312       -0.988558  
 H         4.399560       -3.336552       -0.500649  
 H         5.390253       -1.233991        0.422392  
 C         1.351785        1.034523        0.130049  
 O         1.998214        2.126384       -0.029180  
 C        -0.052690        0.936674        0.122925  
 H        -0.635520        1.741021       -0.310317  
 C        -0.645581       -0.286572        0.488868  
 H        -0.257107       -0.784943        1.375152  
 C        -2.081606       -0.545075        0.260055  
 C        -2.787511       -1.387960        1.130954  
 C        -2.760848        0.015093       -0.833636  
 C        -4.143499       -1.645725        0.932641  
 H        -2.265855       -1.837117        1.971484  
 C        -4.114206       -0.243472       -1.036086  
 H        -2.216511        0.645394       -1.528917  
 C        -4.810739       -1.072565       -0.151660  
 H        -4.677813       -2.294115        1.620204  
 H        -4.627057        0.196236       -1.886083  
 H        -5.865483       -1.274458       -0.311137  
 O         0.238354       -1.657056       -0.501388  
 O         0.662058        4.298214        0.433557  
 H         1.142996        3.432825        0.199611  
 O        -0.491431        4.239031       -0.455039  
 H        -1.173599        3.911130        0.152492

## Product

 C         3.536513       -0.126149       -0.062014  
 C         2.140173       -0.177065       -0.013222  
 C         1.517689       -1.440062        0.032659  
 C         2.277960       -2.611893        0.013668  
 C         3.671414       -2.534709       -0.029947  
 C         4.306273       -1.290170       -0.060888  
 H         3.998113        0.854087       -0.117259  
 H         1.766067       -3.568726        0.039250  
 H         4.257767       -3.448942       -0.032165  
 H         5.389965       -1.229800       -0.092835  
 C         1.303798        1.056230       -0.102901  
 O         1.902670        2.161246       -0.438147  
 C        -0.034831        0.879119        0.134751  
 H        -0.726757        1.707427        0.036881  
 C        -0.571631       -0.434769        0.621797  
 H        -0.472172       -0.553878        1.716980  
 C        -2.026468       -0.641849        0.263855  
 C        -2.991435       -0.825734        1.256091  
 C        -2.423961       -0.633558       -1.079116  
 C        -4.337377       -0.992362        0.917834  
 H        -2.687680       -0.836529        2.299588  
 C        -3.762660       -0.810917       -1.421945  
 H        -1.671418       -0.483750       -1.846865  
 C        -4.724837       -0.987730       -0.422146  
 H        -5.078830       -1.129141        1.699304  
 H        -4.059612       -0.807356       -2.466617  
 H        -5.769029       -1.120915       -0.688550  
 O         0.158188       -1.568459        0.049196  
 O         0.756368        4.274762        0.365438  
 H         1.160219        3.397568       -0.011481  
 O        -0.605758        4.230071       -0.155883  
 H        -1.082094        3.868706        0.608081

# Hypothesis 1; R=H; Step 2

## Reagent

 C         3.489111       -0.204431        0.141432  
 C         2.091159       -0.201943        0.126577  
 C         1.418030       -1.419062       -0.097444  
 C         2.134112       -2.605228       -0.279868  
 C         3.529350       -2.581165       -0.266046  
 C         4.213157       -1.378565       -0.063363  
 H         3.987110        0.739498        0.337265  
 H         1.586879       -3.529076       -0.437982  
 H         4.080747       -3.503846       -0.421588  
 H         5.298676       -1.361693       -0.055603  
 C         1.305792        1.023756        0.460457  
 O         1.941928        2.018038        0.991660  
 C        -0.047877        0.944192        0.202533  
 H        -0.726011        1.713946        0.555309  
 C        -0.620784       -0.254069       -0.500675  
 H        -0.488019       -0.203930       -1.595696  
 C        -2.090136       -0.451945       -0.213277  
 C        -3.040316       -0.339668       -1.230292  
 C        -2.517846       -0.726308        1.091855  
 C        -4.401286       -0.492050       -0.951738  
 H        -2.713455       -0.130978       -2.245445  
 C        -3.872834       -0.891166        1.371778  
 H        -1.776892       -0.810380        1.880410  
 C        -4.819706       -0.770693        0.349505  
 H        -5.130675       -0.397985       -1.750620  
 H        -4.193631       -1.109503        2.386092  
 H        -5.876036       -0.894482        0.568148  
 O         0.054813       -1.492639       -0.100032  
 O         0.501372        3.639981       -1.130007  
 H         0.175726        2.715948       -1.054561  
 O         0.505742        4.028979        0.279659

 H         1.125184        3.307672        0.655433

## Transition state

 C         3.576862        0.138187        0.257213  
 C         2.185660       -0.006613        0.306879  
 C         1.614932       -1.207692       -0.163279  
 C         2.426320       -2.238106       -0.647907  
 C         3.808956       -2.065831       -0.691804  
 C         4.390701       -0.872564       -0.247108  
 H         3.995867        1.060901        0.645850  
 H         1.959927       -3.155342       -0.992559  
 H         4.433512       -2.864199       -1.081501  
 H         5.467711       -0.742827       -0.286203  
 C         1.321948        1.005654        0.987579  
 O         1.843656        1.919712        1.689620  
 C        -0.062374        0.836223        0.779744  
 H        -0.767601        1.220439        1.505239  
 C        -0.514365       -0.194054       -0.213888  
 H        -0.334829        0.184256       -1.234298  
 C        -1.978354       -0.539406       -0.086048  
 C        -2.917168        0.492074       -0.233179  
 C        -2.425446       -1.836945        0.173514  
 C        -4.280449        0.226115       -0.120486  
 H        -2.561246        1.499516       -0.427486  
 C        -3.793247       -2.101666        0.286809  
 H        -1.701420       -2.635139        0.286287  
 C        -4.724542       -1.073690        0.140554  
 H        -4.998422        1.032883       -0.236112  
 H        -4.128801       -3.114440        0.490473  
 H        -5.786743       -1.281180        0.228115  
 O         0.267938       -1.422268       -0.128660  
 O        -0.322624        4.205792       -1.199652  
 H         0.115684        3.873692       -1.996385  
 O        -0.262818        2.618367       -0.405348  
 H         0.320543        2.978498        0.279348

## Product

 C         3.635413        0.108491       -0.098063  
 C         2.231953        0.050290       -0.103710  
 C         1.602198       -1.205289       -0.024327  
 C         2.369259       -2.373589        0.083050  
 C         3.756353       -2.287458        0.101305  
 C         4.400327       -1.044378        0.004118  
 H         4.096296        1.088772       -0.161782  
 H         1.859937       -3.329343        0.142728  
 H         4.344004       -3.196698        0.184067  
 H         5.483665       -0.988103        0.015120  
 C         1.419949        1.289597       -0.150719  
 O         1.951930        2.387441       -0.312200  
 C        -0.098687        1.130311        0.084127  
 H        -0.135029        0.943281        1.199474  
 C        -0.525870       -0.238120       -0.538515  
 H        -0.350862       -0.171438       -1.622599  
 C        -1.974492       -0.549899       -0.271937  
 C        -2.965543        0.160825       -0.963284  
 C        -2.360340       -1.497305        0.682008  
 C        -4.314806       -0.076393       -0.706938  
 H        -2.660473        0.912187       -1.680941  
 C        -3.713326       -1.737528        0.935503  
 H        -1.599338       -2.050554        1.219649  
 C        -4.695184       -1.029013        0.242784  
 H        -5.072207        0.481176       -1.250462  
 H        -3.997339       -2.480434        1.675278  
 H        -5.746748       -1.217586        0.437693  
 O         0.256326       -1.352033       -0.037713  
 O        -0.009256        4.127213        1.075105  
 H         0.903731        3.992087        0.785161  
 O        -0.859937        2.139669       -0.364727  
 H        -0.441357        3.395084        0.520474

# Hypothesis 1; R=OCH3; Step 1

## Reagent

C         2.907898       -0.215183        0.466957  
 C         1.832581       -0.250991       -0.455305  
 C         1.669735       -1.373717       -1.372650  
 C         2.620004       -2.450432       -1.202904  
 C         3.635789       -2.385256       -0.276123  
 C         3.806995       -1.274382        0.575720  
 H         2.513499       -3.311344       -1.857805  
 H         4.335842       -3.214257       -0.189529  
 H         4.606685       -1.266504        1.303402  
 C         0.888425        0.871430       -0.541250  
 O         1.270757        2.061528       -0.625194  
 C        -0.565082        0.628263       -0.478829  
 H        -1.177619        1.459297       -0.817905  
 C        -1.113077       -0.463196        0.085954  
 H        -0.440299       -1.245868        0.429442  
 C        -2.538869       -0.718387        0.284337  
 C        -2.938333       -1.963195        0.803395  
 C        -3.537354        0.227645       -0.021718  
 C        -4.285217       -2.261055        1.001084  
 H        -2.178833       -2.700636        1.047327  
 C        -4.881024       -0.069076        0.178084  
 H        -3.258135        1.201133       -0.410843  
 C        -5.262300       -1.314983        0.688212  
 H        -4.571412       -3.229481        1.399422  
 H        -5.636493        0.672768       -0.061752  
 H        -6.312392       -1.542278        0.842506  
 O         0.789871       -1.393888       -2.285554  
 O        -0.349293        4.164912       -0.264649  
 H         0.186728        3.337872       -0.430833  
 O        -1.663606        3.761896       -0.745362  
 H        -2.130698        3.626771        0.095306  
 O         2.965599        0.888577        1.282032  
 C         3.971895        0.926416        2.283148  
 H         4.978076        0.903133        1.847670  
 H         3.833032        1.868663        2.815291  
 H         3.873003        0.093120        2.989436

## Transition state

 C         2.969243       -0.576192        0.189277  
 C         1.583291       -0.433788       -0.075561  
 C         0.867816       -1.566543       -0.611573  
 C         1.617119       -2.699928       -1.026594  
 C         2.977446       -2.775604       -0.788645  
 C         3.668945       -1.735543       -0.153792  
 H         1.077627       -3.526287       -1.478240  
 H         3.520976       -3.673836       -1.070902  
 H         4.723474       -1.841715        0.060947  
 C         0.913453        0.903280       -0.083161  
 O         1.584589        1.940274       -0.409554  
 C        -0.485552        0.905007        0.075189  
 H        -1.049543        1.742765       -0.318696  
 C        -1.117968       -0.298115        0.437606  
 H        -0.671497       -0.868454        1.251021  
 C        -2.584146       -0.460402        0.348029  
 C        -3.249321       -1.303069        1.250493  
 C        -3.335227        0.191886       -0.642608  
 C        -4.631980       -1.472118        1.184629  
 H        -2.674180       -1.822881        2.011715  
 C        -4.715792        0.021751       -0.713292  
 H        -2.827438        0.823958       -1.363364  
 C        -5.369323       -0.808546        0.202181  
 H        -5.132527       -2.122151        1.895695  
 H        -5.283956        0.531964       -1.485163  
 H        -6.445372       -0.941153        0.145373  
 O        -0.440347       -1.614006       -0.740151  
 O         0.454068        4.208475        0.078971  
 H         0.847460        3.298225       -0.161313  
 O        -0.788887        4.198494       -0.682524  
 H        -1.425715        3.962256        0.010619  
 O         3.566611        0.472239        0.833268  
 C         4.955314        0.383405        1.117717  
 H         5.550750        0.277082        0.203056  
 H         5.220712        1.318806        1.612240  
 H         5.181043       -0.455277        1.787578

## Product

 C         3.033823       -0.502983        0.069961  
 C         1.624394       -0.387323       -0.028706  
 C         0.897675       -1.582344       -0.226335  
 C         1.526470       -2.816730       -0.422556  
 C         2.912473       -2.882350       -0.369100  
 C         3.670273       -1.740043       -0.104546  
 H         0.916162       -3.697330       -0.590368  
 H         3.415430       -3.835061       -0.505345  
 H         4.746373       -1.822451       -0.033166  
 C         0.861337        0.910281       -0.075574  
 O         1.480696        1.992572       -0.434748  
 C        -0.485455        0.801773        0.174996  
 H        -1.139230        1.654273        0.037420  
 C        -1.075470       -0.518794        0.543056  
 H        -0.874030       -0.811159        1.590249  
 C        -2.564682       -0.591233        0.308299  
 C        -3.450938       -0.776275        1.371767  
 C        -3.077301       -0.447265       -0.987185  
 C        -4.830478       -0.808727        1.151027  
 H        -3.058929       -0.893738        2.378518  
 C        -4.451617       -0.491328       -1.213648  
 H        -2.385837       -0.302109       -1.810861  
 C        -5.333343       -0.668696       -0.142720  
 H        -5.508838       -0.948151        1.987439  
 H        -4.837906       -0.384188       -2.223002  
 H        -6.404518       -0.698836       -0.317908  
 O        -0.466558       -1.586737       -0.261690  
 O         0.325648        4.150549        0.196592  
 H         0.740869        3.244747       -0.103942  
 O        -0.947429        4.147311       -0.518370  
 H        -1.553245        3.881556        0.190933  
 O         3.730849        0.633484        0.363423  
 C         5.145019        0.547455        0.472010  
 H         5.605570        0.217933       -0.467057  
 H         5.487774        1.556519        0.704363  
 H         5.451616       -0.131955        1.276586

# Hypothesis 1; R=OCH3; Step 2

## Reagent

 C        -2.964526       -0.528540        0.045312  
 C        -1.563282       -0.400784       -0.118525  
 C        -0.796741       -1.586374       -0.085126  
 C        -1.388983       -2.851776       -0.005103  
 C        -2.770616       -2.940882        0.102553  
 C        -3.562892       -1.791448        0.150208  
 H        -0.755427       -3.731805       -0.003816  
 H        -3.244184       -3.914941        0.180913  
 H        -4.633311       -1.888921        0.271143  
 C        -0.855704        0.874760       -0.484082  
 O        -1.512055        1.810354       -1.079998  
 C         0.505366        0.883744       -0.219999  
 H         1.140157        1.635041       -0.678140  
 C         1.129218       -0.314271        0.419415  
 H         0.907793       -0.387141        1.497794  
 C         2.623023       -0.383788        0.228832  
 C         3.488619       -0.240518        1.315818  
 C         3.161731       -0.563041       -1.051561  
 C         4.873150       -0.267437        1.130855  
 H         3.076229       -0.106518        2.312208  
 C         4.542332       -0.602992       -1.238460  
 H         2.487797       -0.675644       -1.894594  
 C         5.402758       -0.451605       -0.146740  
 H         5.534865       -0.151181        1.983918  
 H         4.949589       -0.749126       -2.234542  
 H         6.478339       -0.479252       -0.292622  
 O         0.565004       -1.550411       -0.150036  
 O        -0.126860        3.553412        0.989586  
 H         0.223110        2.633437        0.921582  
 O        -0.172839        3.915251       -0.427456  
 H        -0.751898        3.153056       -0.781990  
 O        -3.683132        0.627487        0.119367  
 C        -5.090278        0.534319        0.300601  
 H        -5.454471        1.561695        0.335334  
 H        -5.572706        0.008522       -0.531860  
 H        -5.345875        0.027831        1.238983

## Transition state

 C         3.037154       -0.376252        0.026492  
 C         1.635089       -0.347313        0.239992  
 C         0.904873       -1.506944       -0.107738  
 C         1.531219       -2.674277       -0.556790  
 C         2.910699       -2.677653       -0.713145  
 C         3.667914       -1.534779       -0.444942  
 H         0.924506       -3.541061       -0.793880  
 H         3.410271       -3.571568       -1.074170  
 H         4.737077       -1.556876       -0.606705  
 C         0.904284        0.750960        0.966274  
 O         1.504902        1.566530        1.721437  
 C        -0.491483        0.755947        0.764204  
 H        -1.128668        1.224363        1.504225  
 C        -1.072501       -0.238706       -0.184656  
 H        -0.826128        0.043490       -1.222861  
 C        -2.570486       -0.383407       -0.071029  
 C        -3.363270        0.763043       -0.226215  
 C        -3.188935       -1.611781        0.174116  
 C        -4.751489        0.678195       -0.135602  
 H        -2.875341        1.715429       -0.410764  
 C        -4.581046       -1.694470        0.267375  
 H        -2.577863       -2.498600        0.292836  
 C        -5.366754       -0.552394        0.112766  
 H        -5.355165        1.572918       -0.257391  
 H        -5.049942       -2.654808        0.461617  
 H        -6.448199       -0.618287        0.184610  
 O        -0.454702       -1.549360       -0.000548  
 O        -0.277659        4.141965       -1.218278  
 H         0.151260        3.777259       -2.005915  
 O        -0.443090        2.573804       -0.456687  
 H         0.164768        2.824846        0.254840  
 O         3.721160        0.773663        0.280172  
 C         5.126769        0.784039        0.060916  
 H         5.461042        1.787928        0.324528  
 H         5.640618        0.053286        0.696233  
 H         5.374645        0.583617       -0.988088

## Product

 C         3.111049       -0.392134       -0.062956  
 C         1.701723       -0.233981        0.074804  
 C         0.918631       -1.402860        0.191278  
 C         1.493173       -2.676622        0.232401  
 C         2.871742       -2.791428        0.122887  
 C         3.685395       -1.667102       -0.040195  
 H         0.849946       -3.542735        0.335038  
 H         3.331457       -3.774642        0.146063  
 H         4.753873       -1.795724       -0.144555  
 C         1.019877        1.071886        0.239726  
 O         1.634509        2.099371        0.529262  
 C        -0.522340        1.132040        0.061141  
 H        -0.907910        1.298511        1.100826  
 C        -1.062315       -0.239589       -0.394452  
 H        -0.786913       -0.334860       -1.456126  
 C        -2.557609       -0.411711       -0.226240  
 C        -3.419507        0.678151       -0.418706  
 C        -3.106693       -1.657720        0.104577  
 C        -4.797965        0.522587       -0.273666  
 H        -2.964611        1.630722       -0.674118  
 C        -4.487307       -1.810549        0.245534  
 H        -2.449398       -2.504805        0.260242  
 C        -5.339819       -0.721855        0.056520  
 H        -5.452578        1.377447       -0.419802  
 H        -4.895684       -2.783145        0.505135  
 H        -6.413720       -0.841796        0.165477  
 O        -0.430638       -1.339403        0.312542  
 O        -0.449026        4.171779        0.674294  
 H         0.418455        3.812107        0.913147  
 O        -0.865082        2.096592       -0.840596  
 H        -0.709262        3.442001        0.020956  
 O         3.840150        0.736308       -0.229813  
 C         5.250232        0.614594       -0.405961  
 H         5.620054        1.632274       -0.529400  
 H         5.724754        0.158321        0.469509  
 H         5.492626        0.026909       -1.298055

# Hypothesis 2; R=H; Step 1

## Reagent

 C         3.605961        0.810513        0.192154  
 C         2.469685       -0.040406        0.110826  
 C         2.666792       -1.481173       -0.088592  
 C         4.052828       -1.899426       -0.212494  
 C         5.112592       -1.032414       -0.128333  
 C         4.899378        0.354452        0.079293  
 H         3.409084        1.866743        0.345567  
 H         4.211961       -2.963490       -0.368198  
 H         6.128346       -1.411847       -0.222464  
 H         5.739822        1.038572        0.142264  
 C         1.171647        0.612167        0.234316  
 O         1.101844        1.852253        0.470325  
 C        -0.059122       -0.185209        0.068357  
 H         0.101015       -1.211370       -0.239568  
 C        -1.283793        0.319193        0.320866  
 H        -1.363299        1.350488        0.652746  
 C        -2.555988       -0.387975        0.180581  
 C        -3.751321        0.330809        0.365817  
 C        -2.645321       -1.758578       -0.133805  
 C        -4.992059       -0.289941        0.235545  
 H        -3.696002        1.388425        0.608089  
 C        -3.883657       -2.378495       -0.261205  
 H        -1.738922       -2.339289       -0.269434  
 C        -5.063191       -1.648032       -0.078628  
 H        -5.901751        0.284723        0.380009  
 H        -3.933304       -3.436224       -0.501295  
 H        -6.027537       -2.136275       -0.178513  
 O         1.751115       -2.356740       -0.150060  
 O        -0.829531        3.634445        0.244552  
 H        -0.126863        2.922616        0.291559  
 O        -1.326257        3.439512       -1.110423  
 H        -0.846513        4.138250       -1.584101

## Transition state

 C         3.633752        0.390756       -0.695626  
 C         2.354027       -0.004362       -0.223414  
 C         2.168138       -1.312072        0.398720  
 C         3.377175       -2.101539        0.535569  
 C         4.596944       -1.674384        0.071055  
 C         4.743454       -0.411453       -0.561482  
 H         3.708670        1.367344       -1.164818  
 H         3.268507       -3.072891        1.011103  
 H         5.468841       -2.315013        0.187743  
 H         5.714480       -0.087058       -0.921508  
 C         1.267763        0.929452       -0.382084  
 O         1.360711        2.020480       -0.991709  
 C        -0.084851        0.606266        0.209815  
 H        -0.082875        0.086832        1.156346  
 C        -1.144338        0.418264       -0.685526  
 H        -1.011107        0.813067       -1.689616  
 C        -2.406039       -0.215488       -0.395146  
 C        -3.421834       -0.201006       -1.375594  
 C        -2.665175       -0.872357        0.828161  
 C        -4.650055       -0.809204       -1.141110  
 H        -3.232805        0.296166       -2.322570  
 C        -3.894630       -1.477291        1.058372  
 H        -1.893664       -0.917652        1.588183  
 C        -4.892963       -1.447850        0.078119  
 H        -5.419247       -0.786298       -1.906539  
 H        -4.078038       -1.979458        2.003067  
 H        -5.850937       -1.923308        0.262856  
 O         1.049508       -1.764667        0.787576  
 O        -0.733309        2.205477        0.567522  
 H        -0.171064        2.639356       -0.114313  
 O        -0.477573        3.961441        1.332986  
 H         0.096330        3.590668        2.020096

## Product

 C        -3.660398        0.487972        0.257338  
 C        -2.353654        0.011387       -0.029948  
 C        -2.110231       -1.424241       -0.148581  
 C        -3.291358       -2.258443       -0.029691  
 C        -4.538862       -1.749043        0.234811  
 C        -4.741873       -0.353161        0.389366  
 H        -3.781009        1.562329        0.358806  
 H        -3.135478       -3.328897       -0.137505  
 H        -5.386056       -2.425517        0.330011  
 H        -5.732027        0.039005        0.598660  
 C        -1.314197        1.008413       -0.193326  
 O        -1.507000        2.223640        0.032791  
 C         0.045260        0.567522       -0.672892  
 H         0.081463       -0.357033       -1.237101  
 C         1.257627        0.922727        0.107057  
 H         1.107208        1.546602        0.987255  
 C         2.453242        0.040695        0.131328  
 C         3.025150       -0.311472        1.359101  
 C         3.005717       -0.463374       -1.052765  
 C         4.124157       -1.169820        1.405285  
 H         2.605976        0.086534        2.279109  
 C         4.106502       -1.316607       -1.006485  
 H         2.572579       -0.170232       -2.003446  
 C         4.667069       -1.675304        0.222589  
 H         4.558642       -1.438839        2.363133  
 H         4.530341       -1.700423       -1.929501  
 H         5.524487       -2.340185        0.257128  
 O        -0.968487       -1.949752       -0.319617  
 O         0.945897        1.604116       -1.117683  
 H         1.147177        3.733327       -0.244244  
 O         0.539765        4.052091        0.436399  
 H        -0.219607        3.449062        0.283458

# Hypothesis 2; R=H; Step 2 (Cα)

## Reagent

C        -3.639524        0.675978        0.339185  
 C        -2.322309        0.271109        0.011475  
 C        -2.035632       -1.131215       -0.268146  
 C        -3.190672       -2.007582       -0.242433  
 C        -4.455513       -1.566712        0.069071  
 C        -4.700571       -0.204439        0.371691  
 H        -3.788075        1.729689        0.557931  
 H        -3.004330       -3.055372       -0.465168  
 H        -5.281827       -2.275166        0.085455  
 H        -5.702214        0.135322        0.615933  
 C        -1.304416        1.314935       -0.022430  
 O        -1.509058        2.481659        0.352175  
 C         0.070354        0.971186       -0.545918  
 H         0.144715        0.152597       -1.252492  
 C         1.251042        1.222945        0.317261  
 H         1.048704        1.662182        1.294954  
 C         2.475001        0.383270        0.229946  
 C         3.011215       -0.184448        1.391524  
 C         3.088536        0.128858       -1.003079  
 C         4.135135       -1.008236        1.320955  
 H         2.544722        0.018303        2.351756  
 C         4.214079       -0.689977       -1.072678  
 H         2.680820        0.588546       -1.897365  
 C         4.739219       -1.263936        0.088501  
 H         4.541162       -1.445479        2.228009  
 H         4.684747       -0.879283       -2.032739  
 H         5.615920       -1.901755        0.033052  
 O        -0.876661       -1.597034       -0.500650

 O         0.948217        2.090373       -0.780134

## Transition state

C        -3.771050        0.514063        0.181908  
 C        -2.398330        0.366590       -0.068652  
 C        -1.814365       -0.905193       -0.320611  
 C        -2.674230       -2.040730       -0.313790  
 C        -4.027737       -1.872583       -0.070144  
 C        -4.593232       -0.601352        0.179199  
 H        -4.163419        1.509136        0.372767  
 H        -2.253587       -3.023863       -0.501982  
 H        -4.675505       -2.745917       -0.070283  
 H        -5.657995       -0.507967        0.365740  
 C        -1.432083        1.453786       -0.063056  
 O        -1.705845        2.624950        0.204389  
 C        -0.028450        0.969812       -0.410669  
 H         0.274448        0.927921       -1.447913  
 C         1.083575        1.133802        0.551059  
 H         0.748255        1.021121        1.602760  
 C         2.298669        0.251659        0.328560  
 C         2.380132       -1.029613        0.885911  
 C         3.354699        0.721951       -0.454245  
 C         3.498012       -1.830716        0.656157  
 H         1.555642       -1.400678        1.488341  
 C         4.478882       -0.074952       -0.683021  
 H         3.269000        1.721463       -0.867854  
 C         4.552997       -1.354569       -0.129607  
 H         3.550839       -2.825353        1.090097  
 H         5.297069        0.301698       -1.290881  
 H         5.425500       -1.977014       -0.305425  
 O        -0.536484       -0.949515       -0.539135  
 O         1.140432        2.423031        0.078577

## Product

 C        -3.734632        0.377350        0.289875  
 C        -2.394381        0.421980       -0.104613  
 C        -1.697663       -0.756470       -0.398835  
 C        -2.300262       -2.011184       -0.297288  
 C        -3.636937       -2.040904        0.100415  
 C        -4.354023       -0.864617        0.393461  
 H        -4.267745        1.297341        0.509878  
 H        -1.750149       -2.917628       -0.524150  
 H        -4.138477       -3.000280        0.184749  
 H        -5.391972       -0.934257        0.701463  
 C        -1.465119        1.536147       -0.328488  
 O        -1.704275        2.740295       -0.260447  
 C        -0.131489        0.882273       -0.609165  
 H         0.367857        1.245440       -1.507986  
 C         0.904154        1.133754        0.632525  
 H         0.355826        0.651772        1.495124  
 C         2.112493        0.209542        0.355941  
 C         2.118396       -1.154426        0.669821  
 C         3.260548        0.769763       -0.210708  
 C         3.240678       -1.943522        0.409446  
 H         1.236172       -1.598499        1.123187  
 C         4.384261       -0.012453       -0.480927  
 H         3.239893        1.836777       -0.409393  
 C         4.378063       -1.375603       -0.171992  
 H         3.231551       -3.000442        0.663229  
 H         5.268799        0.438611       -0.923864  
 H         5.253022       -1.987461       -0.372754  
 O        -0.419660       -0.536743       -0.788024  
 O         1.185273        2.413803        0.743936

# Hypothesis 2; R=H; Step 2 (Cβ)

## Reagent

C        -3.639654        0.676111        0.338792  
 C        -2.322370        0.271097        0.011555  
 C        -2.035657       -1.131301       -0.267649  
 C        -3.190730       -2.007622       -0.242037  
 C        -4.455645       -1.566613        0.068977  
 C        -4.700748       -0.204257        0.371176  
 H        -3.788234        1.729881        0.557233  
 H        -3.004370       -3.055479       -0.464443  
 H        -5.281994       -2.275030        0.085284  
 H        -5.702462        0.135602        0.614990  
 C        -1.304406        1.314843       -0.022318  
 O        -1.508934        2.481570        0.352339  
 C         0.070303        0.970992       -0.545902  
 H         0.144624        0.152319       -1.252369  
 C         1.251075        1.222955        0.317095  
 H         1.048818        1.662338        1.294743  
 C         2.475058        0.383303        0.229810  
 C         3.011602       -0.183959        1.391453  
 C         3.088290        0.128473       -1.003283  
 C         4.135556       -1.007701        1.320898  
 H         2.545353        0.019132        2.351735  
 C         4.213861       -0.690324       -1.072873  
 H         2.680323        0.587812       -1.897632  
 C         4.739332       -1.263827        0.088382  
 H         4.541843       -1.444587        2.228007  
 H         4.684291       -0.879958       -2.032987  
 H         5.616053       -1.901619        0.032947  
 O        -0.876616       -1.597186       -0.499675  
 O         0.948118        2.090187       -0.780408

## Transition state

 C        -3.627199        0.353563       -0.085026  
 C        -2.215270        0.298162       -0.075303  
 C        -1.550862       -0.982135       -0.117499  
 C        -2.401247       -2.136367       -0.167910  
 C        -3.777257       -2.038130       -0.192087  
 C        -4.414245       -0.779821       -0.148435  
 H        -4.076315        1.341614       -0.046449  
 H        -1.910149       -3.104975       -0.194486  
 H        -4.376628       -2.944427       -0.241511  
 H        -5.497067       -0.707759       -0.164304  
 C        -1.493824        1.578937       -0.001977  
 O        -2.069707        2.661761        0.155237  
 C         0.024991        1.559376       -0.163446  
 H         0.231034        1.546696       -1.255435  
 C         0.716705        0.514263        0.570136  
 H         0.349236        0.324249        1.570729  
 C         2.080413        0.066093        0.255322  
 C         2.635627       -0.990067        0.992183  
 C         2.830654        0.632354       -0.786524  
 C         3.904472       -1.480834        0.688344  
 H         2.057274       -1.434495        1.796530  
 C         4.100340        0.145513       -1.087048  
 H         2.427371        1.476445       -1.333744  
 C         4.641040       -0.915312       -0.354390  
 H         4.318683       -2.301686        1.265825  
 H         4.672982        0.597060       -1.891536  
 H         5.631088       -1.292787       -0.590928  
 O        -0.266930       -1.158114       -0.111715  
 O         0.767445        2.439665        0.597387

## Product

 C         3.646892        0.327827        0.036981  
 C         2.243007        0.340739        0.031489  
 C         1.551531       -0.883016        0.059638  
 C         2.259753       -2.092515        0.112678  
 C         3.649813       -2.077632        0.133485  
 C         4.354554       -0.865210        0.089546  
 H         4.155321        1.286270        0.011311  
 H         1.703291       -3.023572        0.132328  
 H         4.191261       -3.018027        0.175358  
 H         5.439568       -0.863148        0.101072  
 C         1.491933        1.623355        0.021125  
 O         2.084911        2.694405       -0.088128  
 C        -0.046091        1.556772        0.194483  
 H        -0.123599        1.353313        1.316746  
 C        -0.531434        0.212960       -0.438322  
 H        -0.331885        0.275557       -1.520496  
 C        -1.992972       -0.122716       -0.206532  
 C        -2.436324       -1.441626       -0.389533  
 C        -2.919945        0.851090        0.188575  
 C        -3.771645       -1.782172       -0.174206  
 H        -1.726714       -2.205397       -0.688251  
 C        -4.254961        0.506133        0.409117  
 H        -2.545066        1.867049        0.287005  
 C        -4.688568       -0.808497        0.228373  
 H        -4.095584       -2.809000       -0.318995  
 H        -4.961627        1.270527        0.721434  
 H        -5.728708       -1.072647        0.396336  
 O         0.201418       -0.954810        0.059401  
 O        -0.700019        2.618671       -0.270677

# Hypothesis 2; R=OCH3; Step 1

## Reagent

C         3.219698       -0.076905        0.178787  
 C         1.937614       -0.598617       -0.194190  
 C         1.809398       -2.024013       -0.512836  
 C         2.993807       -2.833084       -0.345116  
 C         4.192750       -2.282751        0.030790  
 C         4.330904       -0.902954        0.297033  
 H         2.898874       -3.893774       -0.559493  
 H         5.071025       -2.917618        0.128441  
 H         5.291557       -0.512819        0.602366  
 C         0.755861        0.249867       -0.249662  
 O         0.816121        1.489361       -0.456192  
 C        -0.562888       -0.381730        0.005921  
 H        -0.549823       -1.381249        0.417052  
 C        -1.721081        0.250712       -0.264158  
 H        -1.673704        1.242964       -0.704630  
 C        -3.069042       -0.255950       -0.006992  
 C        -4.162430        0.615859       -0.163947  
 C        -3.329124       -1.581825        0.391922  
 C        -5.465683        0.188107        0.081306  
 H        -3.976428        1.640729       -0.473192  
 C        -4.630767       -2.009588        0.633529  
 H        -2.507398       -2.282433        0.497948  
 C        -5.705805       -1.127337        0.482472  
 H        -6.293264        0.880054       -0.042022  
 H        -4.811107       -3.036580        0.936636  
 H        -6.719907       -1.465427        0.671218  
 O         0.734736       -2.540781       -0.946328  
 O        -0.904363        3.401643        0.146384  
 H        -0.282962        2.643213       -0.057707  
 O        -0.391562        4.420942       -0.757856  
 H         0.155278        4.946368       -0.151691  
 O         3.283571        1.257906        0.465054  
 C         4.511006        1.783922        0.950544  
 H         5.315120        1.685219        0.211651  
 H         4.327426        2.842167        1.141456  
 H         4.821982        1.294340        1.881061

## Transition state

 C         3.269473       -0.154791       -0.243632  
 C         1.863738       -0.394687       -0.063029  
 C         1.405288       -1.741368        0.291221  
 C         2.427181       -2.736311        0.511995  
 C         3.756581       -2.446314        0.343279  
 C         4.202690       -1.160673       -0.038691  
 H         2.093403       -3.730460        0.793827  
 H         4.501439       -3.223179        0.502019  
 H         5.261311       -0.977581       -0.156809  
 C         0.886958        0.654743       -0.211346  
 O         1.075828        1.779190       -0.726090  
 C        -0.520109        0.409330        0.307753  
 H        -0.626290       -0.155701        1.220097  
 C        -1.569685        0.456496       -0.614981  
 H        -1.353192        0.918965       -1.574442  
 C        -2.910472       -0.035793       -0.413441  
 C        -3.890601        0.222185       -1.395755  
 C        -3.282667       -0.787829        0.722003  
 C        -5.193124       -0.241104       -1.245276  
 H        -3.615123        0.794307       -2.277025  
 C        -4.586017       -1.247502        0.868959  
 H        -2.541835       -1.023737        1.477184  
 C        -5.547720       -0.975700       -0.110323  
 H        -5.933307       -0.030416       -2.010748  
 H        -4.855865       -1.825929        1.747042  
 H        -6.563604       -1.338643        0.008835  
 O         0.177675       -2.045783        0.384378  
 O        -1.028803        2.055673        0.772901  
 H        -0.388729        2.470949        0.149310  
 O        -0.609886        3.731226        1.673512  
 H        -0.097743        3.249166        2.339769  
 O         3.634567        1.111016       -0.592969  
 C         5.021387        1.401291       -0.717012  
 H         5.489698        0.802047       -1.506458  
 H         5.081921        2.457540       -0.981700  
 H         5.555449        1.230266        0.224897

## Product

 C         3.277042       -0.199623       -0.028876  
 C         1.856627       -0.401701       -0.024462  
 C         1.325077       -1.764178       -0.109093  
 C         2.292572       -2.836130       -0.111801  
 C         3.641173       -2.585882       -0.094203  
 C         4.158828       -1.272249       -0.055226  
 H         1.903820       -3.849576       -0.153780  
 H         4.343931       -3.416344       -0.113153  
 H         5.228807       -1.120686       -0.035067  
 C         0.930934        0.712384        0.056673  
 O         1.207175        1.889667       -0.245691  
 C        -0.462151        0.430501        0.586525  
 H        -0.594155       -0.457929        1.191076  
 C        -1.654105        0.921295       -0.138585  
 H        -1.471622        1.501973       -1.042165  
 C        -2.952788        0.201686       -0.080432  
 C        -3.618534       -0.120026       -1.268660  
 C        -3.513826       -0.180455        1.144412  
 C        -4.821276       -0.826592       -1.235246  
 H        -3.191482        0.183201       -2.220668  
 C        -4.717860       -0.881610        1.177944  
 H        -3.004605        0.090249        2.063517  
 C        -5.373945       -1.209702       -0.011719  
 H        -5.328170       -1.072937       -2.163214  
 H        -5.147370       -1.170420        2.132495  
 H        -6.311692       -1.755931        0.015725  
 O         0.084694       -2.011874       -0.206969  
 O        -1.199970        1.586157        1.051844  
 H        -1.238794        3.717195        0.135691  
 O        -0.624842        3.945512       -0.574603  
 H         0.053866        3.247802       -0.444318  
 O         3.714163        1.091729        0.042270  
 C         5.113513        1.324695        0.131650  
 H         5.641780        0.957868       -0.756221  
 H         5.231968        2.406920        0.199222  
 H         5.546261        0.854606        1.022625

# Hypothesis 2; R=OCH3; Step 2 (Cα)

## Reagent

C         3.241323       -0.030813        0.059614  
 C         1.827724        0.187832        0.054995  
 C         1.310915        1.554787        0.016367  
 C         2.290341        2.610677       -0.085734  
 C         3.637550        2.344686       -0.095651  
 C         4.139654        1.028044       -0.022885  
 H         1.913825        3.628874       -0.131280  
 H         4.348795        3.165916       -0.159027  
 H         5.207370        0.860481       -0.041460  
 C         0.886992       -0.927822        0.093124  
 O         1.128286       -2.059699        0.533304  
 C        -0.499515       -0.699622       -0.487243  
 H        -0.646348        0.144793       -1.149070  
 C        -1.681409       -1.183303        0.261084  
 H        -1.474788       -1.672425        1.213991  
 C        -3.006518       -0.517873        0.152689  
 C        -3.689690       -0.141323        1.314930  
 C        -3.575189       -0.236628       -1.096077  
 C        -4.915621        0.519856        1.232014  
 H        -3.257478       -0.366198        2.286263  
 C        -4.801763        0.419986       -1.178949  
 H        -3.051978       -0.549002       -1.993843  
 C        -5.474895        0.803136       -0.015500  
 H        -5.435285        0.808784        2.140494  
 H        -5.235724        0.631124       -2.151734  
 H        -6.430379        1.314239       -0.081486  
 O         0.071727        1.824745        0.096831  
 O        -1.195587       -1.907523       -0.874387  
 O         3.662607       -1.331389        0.101553  
 C         5.056430       -1.588934        0.006829  
 H         5.607476       -1.153561        0.849006  
 H         5.162478       -2.674458        0.031583  
 H         5.477785       -1.203754       -0.929473

## Transition state

 C         3.215570        0.095438        0.035886  
 C         1.817807        0.032453       -0.212859  
 C         1.068568        1.231559       -0.425317  
 C         1.742391        2.483936       -0.371503  
 C         3.101803        2.505845       -0.127224  
 C         3.855869        1.333392        0.077389  
 H         1.175664        3.395757       -0.528423  
 H         3.619765        3.461092       -0.089896  
 H         4.918130        1.409909        0.263761  
 C         0.997065       -1.167406       -0.257399  
 O         1.391197       -2.323131       -0.098448  
 C        -0.478315       -0.850280       -0.523236  
 H        -0.845961       -0.841141       -1.539729  
 C        -1.499293       -1.096525        0.510300  
 H        -1.115910       -0.934367        1.537798  
 C        -2.822087       -0.372353        0.356836  
 C        -3.036497        0.880919        0.942055  
 C        -3.846833       -0.959246       -0.388487  
 C        -4.253813        1.540299        0.775493  
 H        -2.239906        1.342174        1.519361  
 C        -5.069568       -0.304802       -0.554009  
 H        -3.659162       -1.935542       -0.823288  
 C        -5.276003        0.948228        0.026314  
 H        -4.409805        2.514046        1.231450  
 H        -5.861534       -0.772025       -1.133018  
 H        -6.225710        1.459871       -0.099697  
 O        -0.198048        1.117645       -0.661040  
 O        -1.422013       -2.390863        0.040571  
 O         3.863221       -1.085456        0.222913  
 C         5.265121       -1.046818        0.472001  
 H         5.494125       -0.491690        1.388648  
 H         5.575852       -2.085232        0.589580  
 H         5.808891       -0.596243       -0.365964

## Product

 C         3.173586        0.124693        0.051750  
 C         1.815354       -0.043504       -0.286367  
 C         1.000080        1.081966       -0.470728  
 C         1.470045        2.387043       -0.321596  
 C         2.814157        2.525482        0.016008  
 C         3.667610        1.425246        0.204577  
 H         0.819311        3.241020       -0.467046  
 H         3.226530        3.522318        0.139778  
 H         4.701652        1.600132        0.470143  
 C         0.982982       -1.223371       -0.544121  
 O         1.307112       -2.407945       -0.589265  
 C        -0.418513       -0.678337       -0.703127  
 H        -0.936620       -1.040758       -1.592067  
 C        -1.337482       -1.078533        0.587714  
 H        -0.808838       -0.528718        1.422366  
 C        -2.671730       -0.322735        0.387110  
 C        -2.841500        1.028220        0.710674  
 C        -3.762767       -1.029325       -0.126802  
 C        -4.069263        1.662905        0.509918  
 H        -2.003517        1.584444        1.122198  
 C        -4.991047       -0.401448       -0.337941  
 H        -3.610878       -2.084562       -0.333179  
 C        -5.148731        0.950865       -0.020859  
 H        -4.187023        2.711707        0.770300  
 H        -5.829125       -0.964366       -0.741539  
 H        -6.104894        1.442704       -0.176174  
 O        -0.270021        0.764968       -0.813558  
 O        -1.441726       -2.384756        0.705522  
 O         3.907943       -1.002621        0.210016  
 C         5.283674       -0.860414        0.563942  
 H         5.394459       -0.351278        1.527317  
 H         5.677634       -1.873535        0.639527  
 H         5.836103       -0.308808       -0.204255

# Hypothesis 2; R=OCH3; Step 2 (Cβ)

## Reagent

C        -3.241306       -0.030692       -0.059441  
 C        -1.827724        0.187800       -0.055220  
 C        -1.310677        1.554688       -0.017035  
 C        -2.289886        2.610693        0.085510  
 C        -3.637148        2.344852        0.095886  
 C        -4.139492        1.028309        0.023285  
 H        -1.913347        3.628886        0.130857  
 H        -4.348250        3.166194        0.159493  
 H        -5.207225        0.860951        0.042342  
 C        -0.887055       -0.927934       -0.093365  
 O        -1.128346       -2.059765       -0.533632  
 C         0.499355       -0.699675        0.487184  
 H         0.646047        0.144765        1.148998  
 C         1.681298       -1.183391       -0.260979  
 H         1.474865       -1.672633       -1.213862  
 C         3.006409       -0.517911       -0.152514  
 C         3.689928       -0.141909       -1.314719  
 C         3.574736       -0.236112        1.096287  
 C         4.915832        0.519316       -1.231757  
 H         3.257994       -0.367228       -2.286073  
 C         4.801288        0.420537        1.179217  
 H         3.051306       -0.548117        1.994055  
 C         5.474747        0.803170        0.015786  
 H         5.435753        0.807835       -2.140220  
 H         5.234975        0.632113        2.152028  
 H         6.430211        1.314306        0.081810  
 O        -0.071461        1.824346       -0.098227  
 O         1.195419       -1.907575        0.874522  
 O        -3.662697       -1.331252       -0.101149  
 C        -5.056562       -1.588735       -0.006613  
 H        -5.607504       -1.153011       -0.848667  
 H        -5.162672       -2.674243       -0.031755  
 H        -5.477944       -1.203884        0.929812

## Transition state

 C        -3.082127        0.187336        0.101975  
 C        -1.667873        0.038241       -0.063734  
 C        -0.847283        1.233277       -0.100729  
 C        -1.511137        2.498162       -0.002420  
 C        -2.874218        2.586259        0.161903  
 C        -3.681559        1.438298        0.222942  
 H        -0.887360        3.385257       -0.047182  
 H        -3.344322        3.562959        0.249461  
 H        -4.748428        1.539283        0.363730  
 C        -1.062609       -1.298608       -0.229429  
 O        -1.666268       -2.305564       -0.605153  
 C         0.423834       -1.426711        0.115688  
 H         0.520086       -1.312614        1.215502  
 C         1.297525       -0.555617       -0.644453  
 H         1.051724       -0.441970       -1.692359  
 C         2.664003       -0.203622       -0.228632  
 C         3.393826        0.716069       -0.994960  
 C         3.247465       -0.729450        0.933749  
 C         4.671000        1.115050       -0.603265  
 H         2.945405        1.129439       -1.893329  
 C         4.525167       -0.334869        1.322810  
 H         2.708226       -1.473814        1.508025  
 C         5.240858        0.591962        0.559051  
 H         5.221475        1.831392       -1.205578  
 H         4.967334       -0.754584        2.221405  
 H         6.236735        0.897770        0.864628  
 O         0.442575        1.253395       -0.229831  
 O         1.142140       -2.450197       -0.468518  
 O        -3.811702       -0.963922        0.178410  
 C        -5.205899       -0.864278        0.435033  
 H        -5.728946       -0.329861       -0.366809  
 H        -5.573746       -1.890103        0.481659  
 H        -5.407990       -0.361854        1.388407

## Product

 C        -3.103064        0.118230        0.007096  
 C        -1.686472       -0.034156       -0.034017  
 C        -0.912535        1.140365       -0.160305  
 C        -1.501096        2.409986       -0.231717  
 C        -2.881454        2.518157       -0.174914  
 C        -3.691178        1.385883       -0.058581  
 H        -0.860180        3.277760       -0.336917  
 H        -3.346600        3.497700       -0.229982  
 H        -4.765300        1.502341       -0.019109  
 C        -0.985424       -1.347149        0.080116  
 O        -1.565780       -2.423024       -0.025165  
 C         0.540469       -1.300262        0.392037  
 H         0.534970       -0.847307        1.441791  
 C         1.114556       -0.119385       -0.476347  
 H         0.945299       -0.378586       -1.532994  
 C         2.580791        0.100210       -0.233716  
 C         3.062261        1.215559        0.460879  
 C         3.493230       -0.872702       -0.669357  
 C         4.429927        1.362556        0.707873  
 H         2.363535        1.970189        0.802204  
 C         4.856413       -0.727956       -0.416979  
 H         3.105616       -1.749246       -1.172232  
 C         5.332398        0.392530        0.270585  
 H         4.787991        2.237573        1.243075  
 H         5.551221       -1.490329       -0.758440  
 H         6.395545        0.507866        0.460537  
 O         0.439313        1.133567       -0.218259  
 O         1.188396       -2.439256        0.234950  
 O        -3.838982       -1.014710        0.137392  
 C        -5.254544       -0.895106        0.245174  
 H        -5.690436       -0.447866       -0.655169  
 H        -5.628273       -1.912741        0.359593  
 H        -5.542638       -0.300538        1.119343