## SMALL MOLECULES WITHOUT H2O

HET CL A 501 1

HET EDO A 502 4

HET EDO A 503 4

HET EDO A 504 4

HET EDO A 505 4

HET EDO A 506 4

HET EDO A 507 4

HET CL B 501 1

HET EDO B 502 4

HET EDO B 503 4

HET EDO B 504 4

HET EDO B 505 4

HET EDO B 506 4

HET EDO B 507 4

HET EDO B 508 4

HETNAM CL CHLORIDE ION

HETNAM EDO 1,2-ETHANEDIOL

HETSYN EDO ETHYLENE GLYCOL

FORMUL 3 CL 2(CL 1-)

FORMUL 4 EDO 13(C2 H6 O2)

HETATM 6108 CL CL A 501 64.388 16.714 51.655 1.00 18.08 CL

HETATM 6109 C1 EDO A 502 71.593 26.406 41.821 1.00 42.16 C

HETATM 6110 O1 EDO A 502 71.825 27.757 42.234 1.00 50.47 O

HETATM 6111 C2 EDO A 502 71.346 25.518 43.039 1.00 38.32 C

HETATM 6112 O2 EDO A 502 69.951 25.528 43.381 1.00 30.58 O

HETATM 6113 C1 EDO A 503 70.172 19.732 77.879 1.00 33.95 C

HETATM 6114 O1 EDO A 503 69.004 20.451 77.480 1.00 25.03 O

HETATM 6115 C2 EDO A 503 71.393 20.619 77.695 1.00 37.30 C

HETATM 6116 O2 EDO A 503 71.324 21.758 78.561 1.00 34.00 O

HETATM 6117 C1 EDO A 504 31.989 27.170 45.530 1.00 34.42 C

HETATM 6118 O1 EDO A 504 30.986 26.684 46.421 1.00 37.44 O

HETATM 6119 C2 EDO A 504 31.839 28.671 45.331 1.00 37.34 C

HETATM 6120 O2 EDO A 504 33.008 29.156 44.667 1.00 28.48 O

HETATM 6121 C1 EDO A 505 73.357 15.933 45.861 1.00 43.75 C

HETATM 6122 O1 EDO A 505 73.115 16.638 47.084 1.00 49.06 O

HETATM 6123 C2 EDO A 505 74.588 16.515 45.175 1.00 41.79 C

HETATM 6124 O2 EDO A 505 74.399 17.920 44.976 1.00 41.93 O

HETATM 6125 C1 EDO A 506 69.550 22.580 66.391 1.00 27.32 C

HETATM 6126 O1 EDO A 506 70.043 23.732 65.701 1.00 30.45 O

HETATM 6127 C2 EDO A 506 70.686 21.950 67.196 1.00 26.02 C

HETATM 6128 O2 EDO A 506 71.667 21.424 66.293 1.00 27.83 O

HETATM 6129 C1 EDO A 507 19.708 9.646 57.753 1.00 25.79 C

HETATM 6130 O1 EDO A 507 18.674 8.731 58.121 1.00 27.92 O

HETATM 6131 C2 EDO A 507 19.719 9.810 56.242 1.00 28.02 C

HETATM 6132 O2 EDO A 507 18.540 10.521 55.857 1.00 28.69 O

HETATM 6133 CL CL B 501 32.928 19.682 76.227 1.00 18.43 CL

HETATM 6134 C1 EDO B 502 27.799 23.854 50.449 1.00 27.87 C

HETATM 6135 O1 EDO B 502 29.198 24.098 50.270 1.00 23.44 O

HETATM 6136 C2 EDO B 502 26.992 24.610 49.400 1.00 33.95 C

HETATM 6137 O2 EDO B 502 27.338 26.002 49.424 1.00 30.28 O

HETATM 6138 C1 EDO B 503 13.942 18.923 76.468 1.00 44.19 C

HETATM 6139 O1 EDO B 503 15.211 19.551 76.702 1.00 39.98 O

HETATM 6140 C2 EDO B 503 13.326 19.493 75.198 1.00 46.63 C

HETATM 6141 O2 EDO B 503 13.446 20.924 75.219 1.00 49.22 O

HETATM 6142 C1 EDO B 504 75.596 4.509 71.745 1.00 24.89 C

HETATM 6143 O1 EDO B 504 76.942 4.891 72.072 1.00 24.73 O

HETATM 6144 C2 EDO B 504 75.486 4.304 70.238 1.00 26.94 C

HETATM 6145 O2 EDO B 504 76.411 3.281 69.841 1.00 27.31 O

HETATM 6146 C1 EDO B 505 36.452 30.709 80.463 1.00 37.56 C

HETATM 6147 O1 EDO B 505 37.848 30.582 80.792 1.00 28.33 O

HETATM 6148 C2 EDO B 505 36.253 30.953 78.968 1.00 43.28 C

HETATM 6149 O2 EDO B 505 36.757 32.245 78.595 1.00 47.04 O

HETATM 6150 C1 EDO B 506 27.975 11.929 89.769 1.00 46.31 C

HETATM 6151 O1 EDO B 506 28.431 10.710 90.366 1.00 53.56 O

HETATM 6152 C2 EDO B 506 29.129 12.590 89.025 1.00 39.26 C

HETATM 6153 O2 EDO B 506 30.174 12.910 89.952 1.00 41.11 O

HETATM 6154 C1 EDO B 507 62.719 -2.849 44.698 1.00 32.13 C

HETATM 6155 O1 EDO B 507 61.302 -2.753 44.535 1.00 36.57 O

HETATM 6156 C2 EDO B 507 63.224 -1.524 45.235 1.00 33.94 C

HETATM 6157 O2 EDO B 507 62.933 -0.506 44.270 1.00 42.48 O

HETATM 6158 C1 EDO B 508 29.106 26.507 61.380 1.00 25.61 C

HETATM 6159 O1 EDO B 508 28.854 27.709 62.116 1.00 24.03 O

HETATM 6160 C2 EDO B 508 27.892 26.125 60.532 1.00 25.02 C

HETATM 6161 O2 EDO B 508 26.865 25.591 61.375 1.00 24.23 O