



## Ein Rettungsanker in der Datenflut

Als neugieriger Flüssigkristall-Forscher finde ich mich häufiger in der Situation wieder, dass ich während einer Reise Daten über einen Flüssigkristall (LC) benötige. Mit Hilfe einer Internet-Verbindung und einem Besuch bei Liqcryst Online lässt sich dieses Problem häufig lösen. Liqcryst ist die WWW-basierte Schnupper-Version der mächtigen (und teuren) Flüssigkristall-Datenbank Liqcryst, zur Zeit in der Version 4.0. Die vollständige Datenbank ist geradezu legendär und enthält Strukturen und Daten von über 80000 thermotropen Flüssigkristallen; rund 50000 davon wurden von Volkmar Vill, dem lebenden Liqcryst, eingegeben; 5000 davon stammen ausschließlich aus Dissertationen. Die Datenbank enthält praktische Mög-

lichkeiten zum Visualisieren und Manipulieren der Daten, sodass man wertvolle Einsichten über Struktur-Eigenschafts-Beziehungen gewinnen kann. Die Vollversion ist klar ein Muss für anspruchsvolle LC-Forscher, aber die freie Version ist trotz der stark eingeschränkten Datenmenge sehr nützlich. Durch die Webseiten sind Suchanfragen über die Registriernummer, Literaturdaten, Zeilennotation, SMILES-Zeichenketten, Abkürzungen und chemische Struktur möglich. Hierzu wird ein Java-Applet gestartet, das zwar noch im Beta-Stadium ist, aber auf meinem Mac einwandfrei läuft. Eine Minute genügt, um Benzoessäure zu zeichnen. Ohne Wasserstoffatome erhält man damit durch eine Substruktur-Suche 27882 Antworten. Die Suchergebnisse kommen praktisch umgehend zurück, da Vill hocheffiziente Speicher- und Suchroutinen entwickelt hat. Die Ergebnisse werden in Listen gesammelt, die sich anzeigen, manipulieren und kombinieren lassen. Die Strukturen aller Verbindungen können angezeigt werden.

Liqcryst Online informiert mich über die interne Registriernummer und die molekulare Masse, dann aber heisst es oft: „No further information. Structure is not in the free set.“ Dennoch ist die Datenbank sehr hilfreich. Alle Suchen werden ungefähr drei Jahre auf dem Server gespeichert und können über die „History“-Funktion wieder aufgerufen werden. Wenn mir danach ist, kann ich zurück in die Liste gehen und mir alle

Einträge ansehen, in denen ich selbst Autor bin. Das kann recht unterhaltsam sein. Sucht man den Autor Goodby, erhält man 1181 Antworten. Jedoch ist nur für den Klassiker *p-n-Octyl-p'-cyanobiphenyl* (8CB) eine große Menge an Informationen frei verfügbar. Diese erhält man leichter, wenn man nach der Abkürzung 8CB sucht. Anstelle des berüchtigten „no further information“ enthält dieser Datensatz über 200 (!) Literaturzitate: Zusätzlich zur CAS Registry Number und dem Datum der Erstveröffentlichung erhält man die freundliche Mitteilung „Even More Data.“ Folgt man diesem Link, findet man die Struktur, die Phasenfolge und -umwandlungstemperaturen, eine offenbar vollständige Liste der Umwandlungstemperaturen aus verschiedenen Quellen (das kann recht lästig sein), die Änderungen der Enthalpie und des Volumens an den Phasenübergängen, Dichten, Brechungsindices, dielektrische Konstanten und Anisotropien, Dipolmomente und vieles mehr aus verschiedenen Quellen. Jede Angabe ist mit einem Zitat belegt und weitere Daten sind über Zitate zu erreichen.

Schlagen Sie eine Web-Site für diese Rubrik vor:  
angewandte@wiley-vch.de

Wenn Sie also das nächste Mal unterwegs oder am heimischen Schreibtisch den starken Wunsch haben, die Phasenumwandlungstemperaturen des bekannten MHPOBC zu erfahren (bis 1997), können Sie die Antwort binnen weniger Sekunden aus Liqcryst Online (Abbildung 1) erhalten.

David M. Walba  
University of Colorado at Boulder  
(USA)

The screenshot shows the LIQCRYST - ONLINE web interface. At the top, it says "LIQCRYST - ONLINE" and "user mmueller logged in". Below this is a chemical structure of MHPOBC. To the left is a "Menu" with options like "Search By", "Registry Number", "Literature", "Line Notation", "Drawing", "SMILES - String", "Abbreviation", "Display Lists", "Combine Lists", "History", "Change Password", and "Help". Below the structure is a table with the following data:

Abbreviation	MHPOBC
Line Notation	<chem>*c1ccc(cc1)-c2ccc(cc2)-c3ccc(cc3)-c4ccc(cc4)-c5ccc(cc5)-c6ccc(cc6)-c7ccc(cc7)-c8ccc(cc8)-c9ccc(cc9)-c10ccc(cc10)-c11ccc(cc11)-c12ccc(cc12)-c13ccc(cc13)-c14ccc(cc14)-c15ccc(cc15)-c16ccc(cc16)-c17ccc(cc17)-c18ccc(cc18)-c19ccc(cc19)-c20ccc(cc20)-c21ccc(cc21)-c22ccc(cc22)-c23ccc(cc23)-c24ccc(cc24)-c25ccc(cc25)-c26ccc(cc26)-c27ccc(cc27)-c28ccc(cc28)-c29ccc(cc29)-c30ccc(cc30)-c31ccc(cc31)-c32ccc(cc32)-c33ccc(cc33)-c34ccc(cc34)-c35ccc(cc35)-c36ccc(cc36)-c37ccc(cc37)-c38ccc(cc38)-c39ccc(cc39)-c40ccc(cc40)-c41ccc(cc41)-c42ccc(cc42)-c43ccc(cc43)-c44ccc(cc44)-c45ccc(cc45)-c46ccc(cc46)-c47ccc(cc47)-c48ccc(cc48)-c49ccc(cc49)-c50ccc(cc50)-c51ccc(cc51)-c52ccc(cc52)-c53ccc(cc53)-c54ccc(cc54)-c55ccc(cc55)-c56ccc(cc56)-c57ccc(cc57)-c58ccc(cc58)-c59ccc(cc59)-c60ccc(cc60)-c61ccc(cc61)-c62ccc(cc62)-c63ccc(cc63)-c64ccc(cc64)-c65ccc(cc65)-c66ccc(cc66)-c67ccc(cc67)-c68ccc(cc68)-c69ccc(cc69)-c70ccc(cc70)-c71ccc(cc71)-c72ccc(cc72)-c73ccc(cc73)-c74ccc(cc74)-c75ccc(cc75)-c76ccc(cc76)-c77ccc(cc77)-c78ccc(cc78)-c79ccc(cc79)-c80ccc(cc80)-c81ccc(cc81)-c82ccc(cc82)-c83ccc(cc83)-c84ccc(cc84)-c85ccc(cc85)-c86ccc(cc86)-c87ccc(cc87)-c88ccc(cc88)-c89ccc(cc89)-c90ccc(cc90)-c91ccc(cc91)-c92ccc(cc92)-c93ccc(cc93)-c94ccc(cc94)-c95ccc(cc95)-c96ccc(cc96)-c97ccc(cc97)-c98ccc(cc98)-c99ccc(cc99)-c100ccc(cc100)-c101ccc(cc101)-c102ccc(cc102)-c103ccc(cc103)-c104ccc(cc104)-c105ccc(cc105)-c106ccc(cc106)-c107ccc(cc107)-c108ccc(cc108)-c109ccc(cc109)-c110ccc(cc110)-c111ccc(cc111)-c112ccc(cc112)-c113ccc(cc113)-c114ccc(cc114)-c115ccc(cc115)-c116ccc(cc116)-c117ccc(cc117)-c118ccc(cc118)-c119ccc(cc119)-c120ccc(cc120)-c121ccc(cc121)-c122ccc(cc122)-c123ccc(cc123)-c124ccc(cc124)-c125ccc(cc125)-c126ccc(cc126)-c127ccc(cc127)-c128ccc(cc128)-c129ccc(cc129)-c130ccc(cc130)-c131ccc(cc131)-c132ccc(cc132)-c133ccc(cc133)-c134ccc(cc134)-c135ccc(cc135)-c136ccc(cc136)-c137ccc(cc137)-c138ccc(cc138)-c139ccc(cc139)-c140ccc(cc140)-c141ccc(cc141)-c142ccc(cc142)-c143ccc(cc143)-c144ccc(cc144)-c145ccc(cc145)-c146ccc(cc146)-c147ccc(cc147)-c148ccc(cc148)-c149ccc(cc149)-c150ccc(cc150)-c151ccc(cc151)-c152ccc(cc152)-c153ccc(cc153)-c154ccc(cc154)-c155ccc(cc155)-c156ccc(cc156)-c157ccc(cc157)-c158ccc(cc158)-c159ccc(cc159)-c160ccc(cc160)-c161ccc(cc161)-c162ccc(cc162)-c163ccc(cc163)-c164ccc(cc164)-c165ccc(cc165)-c166ccc(cc166)-c167ccc(cc167)-c168ccc(cc168)-c169ccc(cc169)-c170ccc(cc170)-c171ccc(cc171)-c172ccc(cc172)-c173ccc(cc173)-c174ccc(cc174)-c175ccc(cc175)-c176ccc(cc176)-c177ccc(cc177)-c178ccc(cc178)-c179ccc(cc179)-c180ccc(cc180)-c181ccc(cc181)-c182ccc(cc182)-c183ccc(cc183)-c184ccc(cc184)-c185ccc(cc185)-c186ccc(cc186)-c187ccc(cc187)-c188ccc(cc188)-c189ccc(cc189)-c190ccc(cc190)-c191ccc(cc191)-c192ccc(cc192)-c193ccc(cc193)-c194ccc(cc194)-c195ccc(cc195)-c196ccc(cc196)-c197ccc(cc197)-c198ccc(cc198)-c199ccc(cc199)-c200ccc(cc200)-c201ccc(cc201)-c202ccc(cc202)-c203ccc(cc203)-c204ccc(cc204)-c205ccc(cc205)-c206ccc(cc206)-c207ccc(cc207)-c208ccc(cc208)-c209ccc(cc209)-c210ccc(cc210)-c211ccc(cc211)-c212ccc(cc212)-c213ccc(cc213)-c214ccc(cc214)-c215ccc(cc215)-c216ccc(cc216)-c217ccc(cc217)-c218ccc(cc218)-c219ccc(cc219)-c220ccc(cc220)-c221ccc(cc221)-c222ccc(cc222)-c223ccc(cc223)-c224ccc(cc224)-c225ccc(cc225)-c226ccc(cc226)-c227ccc(cc227)-c228ccc(cc228)-c229ccc(cc229)-c230ccc(cc230)-c231ccc(cc231)-c232ccc(cc232)-c233ccc(cc233)-c234ccc(cc234)-c235ccc(cc235)-c236ccc(cc236)-c237ccc(cc237)-c238ccc(cc238)-c239ccc(cc239)-c240ccc(cc240)-c241ccc(cc241)-c242ccc(cc242)-c243ccc(cc243)-c244ccc(cc244)-c245ccc(cc245)-c246ccc(cc246)-c247ccc(cc247)-c248ccc(cc248)-c249ccc(cc249)-c250ccc(cc250)-c251ccc(cc251)-c252ccc(cc252)-c253ccc(cc253)-c254ccc(cc254)-c255ccc(cc255)-c256ccc(cc256)-c257ccc(cc257)-c258ccc(cc258)-c259ccc(cc259)-c260ccc(cc260)-c261ccc(cc261)-c262ccc(cc262)-c263ccc(cc263)-c264ccc(cc264)-c265ccc(cc265)-c266ccc(cc266)-c267ccc(cc267)-c268ccc(cc268)-c269ccc(cc269)-c270ccc(cc270)-c271ccc(cc271)-c272ccc(cc272)-c273ccc(cc273)-c274ccc(cc274)-c275ccc(cc275)-c276ccc(cc276)-c277ccc(cc277)-c278ccc(cc278)-c279ccc(cc279)-c280ccc(cc280)-c281ccc(cc281)-c282ccc(cc282)-c283ccc(cc283)-c284ccc(cc284)-c285ccc(cc285)-c286ccc(cc286)-c287ccc(cc287)-c288ccc(cc288)-c289ccc(cc289)-c290ccc(cc290)-c291ccc(cc291)-c292ccc(cc292)-c293ccc(cc293)-c294ccc(cc294)-c295ccc(cc295)-c296ccc(cc296)-c297ccc(cc297)-c298ccc(cc298)-c299ccc(cc299)-c300ccc(cc300)-c301ccc(cc301)-c302ccc(cc302)-c303ccc(cc303)-c304ccc(cc304)-c305ccc(cc305)-c306ccc(cc306)-c307ccc(cc307)-c308ccc(cc308)-c309ccc(cc309)-c310ccc(cc310)-c311ccc(cc311)-c312ccc(cc312)-c313ccc(cc313)-c314ccc(cc314)-c315ccc(cc315)-c316ccc(cc316)-c317ccc(cc317)-c318ccc(cc318)-c319ccc(cc319)-c320ccc(cc320)-c321ccc(cc321)-c322ccc(cc322)-c323ccc(cc323)-c324ccc(cc324)-c325ccc(cc325)-c326ccc(cc326)-c327ccc(cc327)-c328ccc(cc328)-c329ccc(cc329)-c330ccc(cc330)-c331ccc(cc331)-c332ccc(cc332)-c333ccc(cc333)-c334ccc(cc334)-c335ccc(cc335)-c336ccc(cc336)-c337ccc(cc337)-c338ccc(cc338)-c339ccc(cc339)-c340ccc(cc340)-c341ccc(cc341)-c342ccc(cc342)-c343ccc(cc343)-c344ccc(cc344)-c345ccc(cc345)-c346ccc(cc346)-c347ccc(cc347)-c348ccc(cc348)-c349ccc(cc349)-c350ccc(cc350)-c351ccc(cc351)-c352ccc(cc352)-c353ccc(cc353)-c354ccc(cc354)-c355ccc(cc355)-c356ccc(cc356)-c357ccc(cc357)-c358ccc(cc358)-c359ccc(cc359)-c360ccc(cc360)-c361ccc(cc361)-c362ccc(cc362)-c363ccc(cc363)-c364ccc(cc364)-c365ccc(cc365)-c366ccc(cc366)-c367ccc(cc367)-c368ccc(cc368)-c369ccc(cc369)-c370ccc(cc370)-c371ccc(cc371)-c372ccc(cc372)-c373ccc(cc373)-c374ccc(cc374)-c375ccc(cc375)-c376ccc(cc376)-c377ccc(cc377)-c378ccc(cc378)-c379ccc(cc379)-c380ccc(cc380)-c381ccc(cc381)-c382ccc(cc382)-c383ccc(cc383)-c384ccc(cc384)-c385ccc(cc385)-c386ccc(cc386)-c387ccc(cc387)-c388ccc(cc388)-c389ccc(cc389)-c390ccc(cc390)-c391ccc(cc391)-c392ccc(cc392)-c393ccc(cc393)-c394ccc(cc394)-c395ccc(cc395)-c396ccc(cc396)-c397ccc(cc397)-c398ccc(cc398)-c399ccc(cc399)-c400ccc(cc400)-c401ccc(cc401)-c402ccc(cc402)-c403ccc(cc403)-c404ccc(cc404)-c405ccc(cc405)-c406ccc(cc406)-c407ccc(cc407)-c408ccc(cc408)-c409ccc(cc409)-c410ccc(cc410)-c411ccc(cc411)-c412ccc(cc412)-c413ccc(cc413)-c414ccc(cc414)-c415ccc(cc415)-c416ccc(cc416)-c417ccc(cc417)-c418ccc(cc418)-c419ccc(cc419)-c420ccc(cc420)-c421ccc(cc421)-c422ccc(cc422)-c423ccc(cc423)-c424ccc(cc424)-c425ccc(cc425)-c426ccc(cc426)-c427ccc(cc427)-c428ccc(cc428)-c429ccc(cc429)-c430ccc(cc430)-c431ccc(cc431)-c432ccc(cc432)-c433ccc(cc433)-c434ccc(cc434)-c435ccc(cc435)-c436ccc(cc436)-c437ccc(cc437)-c438ccc(cc438)-c439ccc(cc439)-c440ccc(cc440)-c441ccc(cc441)-c442ccc(cc442)-c443ccc(cc443)-c444ccc(cc444)-c445ccc(cc445)-c446ccc(cc446)-c447ccc(cc447)-c448ccc(cc448)-c449ccc(cc449)-c450ccc(cc450)-c451ccc(cc451)-c452ccc(cc452)-c453ccc(cc453)-c454ccc(cc454)-c455ccc(cc455)-c456ccc(cc456)-c457ccc(cc457)-c458ccc(cc458)-c459ccc(cc459)-c460ccc(cc460)-c461ccc(cc461)-c462ccc(cc462)-c463ccc(cc463)-c464ccc(cc464)-c465ccc(cc465)-c466ccc(cc466)-c467ccc(cc467)-c468ccc(cc468)-c469ccc(cc469)-c470ccc(cc470)-c471ccc(cc471)-c472ccc(cc472)-c473ccc(cc473)-c474ccc(cc474)-c475ccc(cc475)-c476ccc(cc476)-c477ccc(cc477)-c478ccc(cc478)-c479ccc(cc479)-c480ccc(cc480)-c481ccc(cc481)-c482ccc(cc482)-c483ccc(cc483)-c484ccc(cc484)-c485ccc(cc485)-c486ccc(cc486)-c487ccc(cc487)-c488ccc(cc488)-c489ccc(cc489)-c490ccc(cc490)-c491ccc(cc491)-c492ccc(cc492)-c493ccc(cc493)-c494ccc(cc494)-c495ccc(cc495)-c496ccc(cc496)-c497ccc(cc497)-c498ccc(cc498)-c499ccc(cc499)-c500ccc(cc500)-c501ccc(cc501)-c502ccc(cc502)-c503ccc(cc503)-c504ccc(cc504)-c505ccc(cc505)-c506ccc(cc506)-c507ccc(cc507)-c508ccc(cc508)-c509ccc(cc509)-c510ccc(cc510)-c511ccc(cc511)-c512ccc(cc512)-c513ccc(cc513)-c514ccc(cc514)-c515ccc(cc515)-c516ccc(cc516)-c517ccc(cc517)-c518ccc(cc518)-c519ccc(cc519)-c520ccc(cc520)-c521ccc(cc521)-c522ccc(cc522)-c523ccc(cc523)-c524ccc(cc524)-c525ccc(cc525)-c526ccc(cc526)-c527ccc(cc527)-c528ccc(cc528)-c529ccc(cc529)-c530ccc(cc530)-c531ccc(cc531)-c532ccc(cc532)-c533ccc(cc533)-c534ccc(cc534)-c535ccc(cc535)-c536ccc(cc536)-c537ccc(cc537)-c538ccc(cc538)-c539ccc(cc539)-c540ccc(cc540)-c541ccc(cc541)-c542ccc(cc542)-c543ccc(cc543)-c544ccc(cc544)-c545ccc(cc545)-c546ccc(cc546)-c547ccc(cc547)-c548ccc(cc548)-c549ccc(cc549)-c550ccc(cc550)-c551ccc(cc551)-c552ccc(cc552)-c553ccc(cc553)-c554ccc(cc554)-c555ccc(cc555)-c556ccc(cc556)-c557ccc(cc557)-c558ccc(cc558)-c559ccc(cc559)-c560ccc(cc560)-c561ccc(cc561)-c562ccc(cc562)-c563ccc(cc563)-c564ccc(cc564)-c565ccc(cc565)-c566ccc(cc566)-c567ccc(cc567)-c568ccc(cc568)-c569ccc(cc569)-c570ccc(cc570)-c571ccc(cc571)-c572ccc(cc572)-c573ccc(cc573)-c574ccc(cc574)-c575ccc(cc575)-c576ccc(cc576)-c577ccc(cc577)-c578ccc(cc578)-c579ccc(cc579)-c580ccc(cc580)-c581ccc(cc581)-c582ccc(cc582)-c583ccc(cc583)-c584ccc(cc584)-c585ccc(cc585)-c586ccc(cc586)-c587ccc(cc587)-c588ccc(cc588)-c589ccc(cc589)-c590ccc(cc590)-c591ccc(cc591)-c592ccc(cc592)-c593ccc(cc593)-c594ccc(cc594)-c595ccc(cc595)-c596ccc(cc596)-c597ccc(cc597)-c598ccc(cc598)-c599ccc(cc599)-c600ccc(cc600)-c601ccc(cc601)-c602ccc(cc602)-c603ccc(cc603)-c604ccc(cc604)-c605ccc(cc605)-c606ccc(cc606)-c607ccc(cc607)-c608ccc(cc608)-c609ccc(cc609)-c610ccc(cc610)-c611ccc(cc611)-c612ccc(cc612)-c613ccc(cc613)-c614ccc(cc614)-c615ccc(cc615)-c616ccc(cc616)-c617ccc(cc617)-c618ccc(cc618)-c619ccc(cc619)-c620ccc(cc620)-c621ccc(cc621)-c622ccc(cc622)-c623ccc(cc623)-c624ccc(cc624)-c625ccc(cc625)-c626ccc(cc626)-c627ccc(cc627)-c628ccc(cc628)-c629ccc(cc629)-c630ccc(cc630)-c631ccc(cc631)-c632ccc(cc632)-c633ccc(cc633)-c634ccc(cc634)-c635ccc(cc635)-c636ccc(cc636)-c637ccc(cc637)-c638ccc(cc638)-c639ccc(cc639)-c640ccc(cc640)-c641ccc(cc641)-c642ccc(cc642)-c643ccc(cc643)-c644ccc(cc644)-c645ccc(cc645)-c646ccc(cc646)-c647ccc(cc647)-c648ccc(cc648)-c649ccc(cc649)-c650ccc(cc650)-c651ccc(cc651)-c652ccc(cc652)-c653ccc(cc653)-c654ccc(cc654)-c655ccc(cc655)-c656ccc(cc656)-c657ccc(cc657)-c658ccc(cc658)-c659ccc(cc659)-c660ccc(cc660)-c661ccc(cc661)-c662ccc(cc662)-c663ccc(cc663)-c664ccc(cc664)-c665ccc(cc665)-c666ccc(cc666)-c667ccc(cc667)-c668ccc(cc668)-c669ccc(cc669)-c670ccc(cc670)-c671ccc(cc671)-c672ccc(cc672)-c673ccc(cc673)-c674ccc(cc674)-c675ccc(cc675)-c676ccc(cc676)-c677ccc(cc677)-c678ccc(cc678)-c679ccc(cc679)-c680ccc(cc680)-c681ccc(cc681)-c682ccc(cc682)-c683ccc(cc683)-c684ccc(cc684)-c685ccc(cc685)-c686ccc(cc686)-c687ccc(cc687)-c688ccc(cc688)-c689ccc(cc689)-c690ccc(cc690)-c691ccc(cc691)-c692ccc(cc692)-c693ccc(cc693)-c694ccc(cc694)-c695ccc(cc695)-c696ccc(cc696)-c697ccc(cc697)-c698ccc(cc698)-c699ccc(cc699)-c700ccc(cc700)-c701ccc(cc701)-c702ccc(cc702)-c703ccc(cc703)-c704ccc(cc704)-c705ccc(cc705)-c706ccc(cc706)-c707ccc(cc707)-c708ccc(cc708)-c709ccc(cc709)-c710ccc(cc710)-c711ccc(cc711)-c712ccc(cc712)-c713ccc(cc713)-c714ccc(cc714)-c715ccc(cc715)-c716ccc(cc716)-c717ccc(cc717)-c718ccc(cc718)-c719ccc(cc719)-c720ccc(cc720)-c721ccc(cc721)-c722ccc(cc722)-c723ccc(cc723)-c724ccc(cc724)-c725ccc(cc725)-c726ccc(cc726)-c727ccc(cc727)-c728ccc(cc728)-c729ccc(cc729)-c730ccc(cc730)-c731ccc(cc731)-c732ccc(cc732)-c733ccc(cc733)-c734ccc(cc734)-c735ccc(cc735)-c736ccc(cc736)-c737ccc(cc737)-c738ccc(cc738)-c739ccc(cc739)-c740ccc(cc740)-c741ccc(cc741)-c742ccc(cc742)-c743ccc(cc743)-c744ccc(cc744)-c745ccc(cc745)-c746ccc(cc746)-c747ccc(cc747)-c748ccc(cc748)-c749ccc(cc749)-c750ccc(cc750)-c751ccc(cc751)-c752ccc(cc752)-c753ccc(cc753)-c754ccc(cc754)-c755ccc(cc755)-c756ccc(cc756)-c757ccc(cc757)-c758ccc(cc758)-c759ccc(cc759)-c760ccc(cc760)-c761ccc(cc761)-c762ccc(cc762)-c763ccc(cc763)-c764ccc(cc764)-c765ccc(cc765)-c766ccc(cc766)-c767ccc(cc767)-c768ccc(cc768)-c769ccc(cc769)-c770ccc(cc770)-c771ccc(cc771)-c772ccc(cc772)-c773ccc(cc773)-c774ccc(cc774)-c775ccc(cc775)-c776ccc(cc776)-c777ccc(cc777)-c778ccc(cc778)-c779ccc(cc779)-c780ccc(cc780)-c781ccc(cc781)-c782ccc(cc782)-c783ccc(cc783)-c784ccc(cc784)-c785ccc(cc785)-c786ccc(cc786)-c787ccc(cc787)-c788ccc(cc788)-c789ccc(cc789)-c790ccc(cc790)-c791ccc(cc791)-c792ccc(cc792)-c793ccc(cc793)-c794ccc(cc794)-c795ccc(cc795)-c796ccc(cc796)-c797ccc(cc797)-c798ccc(cc798)-c799ccc(cc799)-c800ccc(cc800)-c801ccc(cc801)-c802ccc(cc802)-c803ccc(cc803)-c804ccc(cc804)-c805ccc(cc805)-c806ccc(cc806)-c807ccc(cc807)-c808ccc(cc808)-c809ccc(cc809)-c810ccc(cc810)-c811ccc(cc811)-c812ccc(cc812)-c813ccc(cc813)-c814ccc(cc814)-c815ccc(cc815)-c816ccc(cc816)-c817ccc(cc817)-c818ccc(cc818)-c819ccc(cc819)-c820ccc(cc820)-c821ccc(cc821)-c822ccc(cc822)-c823ccc(cc823)-c824ccc(cc824)-c825ccc(cc825)-c826ccc(cc826)-c827ccc(cc827)-c828ccc(cc828)-c829ccc(cc829)-c830ccc(cc830)-c831ccc(cc831)-c832ccc(cc832)-c833ccc(cc833)-c834ccc(cc834)-c835ccc(cc835)-c836ccc(cc836)-c837ccc(cc837)-c838ccc(cc838)-c839ccc(cc839)-c840ccc(cc840)-c841ccc(cc841)-c842ccc(cc842)-c843ccc(cc843)-c844ccc(cc844)-c845ccc(cc845)-c846ccc(cc846)-c847ccc(cc847)-c848ccc(cc848)-c849ccc(cc849)-c850ccc(cc850)-c851ccc(cc851)-c852ccc(cc852)-c853ccc(cc853)-c854ccc(cc854)-c855ccc(cc855)-c856ccc(cc856)-c857ccc(cc857)-c858ccc(cc858)-c859ccc(cc859)-c860ccc(cc860)-c861ccc(cc861)-c862ccc(cc862)-c863ccc(cc863)-c864ccc(cc864)-c865ccc(cc865)-c866ccc(cc866)-c867ccc(cc867)-c868ccc(cc868)-c869ccc(cc869)-c870ccc(cc870)-c871ccc(cc871)-c872ccc(cc872)-c873ccc(cc873)-c874ccc(cc874)-c875ccc(cc875)-c876ccc(cc876)-c877ccc(cc877)-c878ccc(cc878)-c879ccc(cc879)-c880ccc(cc880)-c881ccc(cc881)-c882ccc(cc882)-c883ccc(cc883)-c884ccc(cc884)-c885ccc(cc885)-c886ccc(cc886)-c887ccc(cc887)-c888ccc(cc888)-c889ccc(cc889)-c890ccc(cc890)-c891ccc(cc891)-c892ccc(cc892)-c893ccc(cc893)-c894ccc(cc894)-c895ccc(cc895)-c896ccc(cc896)-c897ccc(cc897)-c898ccc(cc898)-c899ccc(cc899)-c900ccc(cc900)-c901ccc(cc901)-c902ccc(cc902)-c903ccc(cc903)-c904ccc(cc904)-c905ccc(cc905)-c906ccc(cc906)-c907ccc(cc907)-c908ccc(cc908)-c909ccc(cc909)-c910ccc(cc910)-c911ccc(cc911)-c912ccc(cc912)-c913ccc(cc913)-c914ccc(cc914)-c915ccc(cc915)-c916ccc(cc916)-c917ccc(cc917)-c918ccc(cc918)-c919ccc(cc919)-c920ccc(cc920)-c921ccc(cc921)-c922ccc(cc922)-c923ccc(cc923)-c924ccc(cc924)-c925ccc(cc925)-c926ccc(cc926)-c927ccc(cc927)-c928ccc(cc928)-c929ccc(cc929)-c930ccc(cc930)-c931ccc(cc931)-c932ccc(cc932)-c933ccc(cc933)-c934ccc(cc934)-c935ccc(cc935)-c936ccc(cc936)-c937ccc(cc937)-c938ccc(cc938)-c939ccc(cc939)-c940ccc(cc940)-c941ccc(cc941)-c942ccc(cc942)-c943ccc(cc943)-c944ccc(cc944)-c945ccc(cc945)-c946ccc(cc946)-c947ccc(cc947)-c948ccc(cc948)-c949ccc(cc949)-c950ccc(cc950)-c951ccc(cc951)-c952ccc(cc952)-c953ccc(cc953)-c954ccc(cc954)-c955ccc(cc955)-c956ccc(cc956)-c957ccc(cc957)-c958ccc(cc958)-c959ccc(cc959)-c960ccc(cc960)-c961ccc(cc961)-c962ccc(cc962)-c963ccc(cc963)-c964ccc(cc964)-c965ccc(cc965)-c966ccc(cc966)-c967ccc(cc967)-c968ccc(cc968)-c969ccc(cc969)-c970ccc(cc970)-c971ccc(cc971)-c972ccc(cc972)-c973ccc(cc973)-c974ccc(cc974)-c975ccc(cc975)-c976ccc(cc976)-c977ccc(cc977)-c978ccc(cc978)-c979ccc(cc979)-c980ccc(cc980)-c981ccc(cc981)-c982ccc(cc982)-c983ccc(cc983)-c984ccc(cc984)-c985ccc(cc985)-c986ccc(cc986)-c987ccc(cc987)-c988ccc(cc988)-c989ccc(cc989)-c990ccc(cc990)-c991ccc(cc991)-c992ccc(cc992)-c993ccc(cc993)-c994ccc(cc994)-c995ccc(cc995)-c996ccc(cc996)-c997ccc(cc997)-c998ccc(cc998)-c999ccc(cc999)-c1000ccc(cc1000)-c1001ccc(cc1001)-c1002ccc(cc1002)-c1003ccc(cc1003)-c1004ccc(cc1004)-c1005ccc(cc1005)-c1006ccc(cc1006)-c1007ccc(cc1007)-c1008ccc(cc1008)-c1009ccc(cc1009)-c1010ccc(cc1010)-c1011ccc(cc1011)-c1012ccc(cc1012)-c1013ccc(cc1013)-c1014ccc(cc1014)-c1015ccc(cc1015)-c1016ccc(cc1016)-c1017ccc(cc1017)-c1018ccc(cc1018)-c1019ccc(cc1019)-c1020ccc(cc1020)-c1021ccc(cc1021)-c1022ccc(cc1022)-c1023ccc(cc1023)-c1024ccc(cc1024)-c1025ccc(cc1025)-c1026ccc(cc1026)-c1027ccc(cc1027)-c1028ccc(cc1028)-c1029ccc(cc1029)-c1030ccc(cc1030)-c1031ccc(cc1031)-c1032ccc(cc1032)-c1033ccc(cc1033)-c1034ccc(cc1034)-c1035ccc(cc1035)-c1036ccc(cc1036)-c1037ccc(cc1037)-c1038ccc(cc1038)-c1039ccc(cc1039)-c1040ccc(cc1040)-c1041ccc(cc1041)-c1042ccc(cc1042)-c1043ccc(cc1043)-c1044ccc(cc1044)-c1045ccc(cc1045)-c1046ccc(cc1046)-c1047ccc(cc1047)-c1048ccc(cc1048)-c1049ccc(cc1049)-c1050ccc(cc1050)-c1051ccc(cc1051)-c1052ccc(cc1052)-c1053ccc(cc1053)-c1054ccc(cc1054)-c1055ccc(cc1055)-c1056ccc(cc1056)-c1057ccc(cc1057)-c1058ccc(cc1058)-c1059ccc(cc1059)-c1060ccc(cc1060)-c1061ccc(cc1061)-c1062ccc(cc1062)-c1063ccc(cc1063)-c1064ccc(cc1064)-c1065ccc(cc1065)-c1066ccc(cc1066)-c1067ccc(cc1067)-c1068ccc(cc1068)-c1069ccc(cc1069)-c1070ccc(cc1070)-c1071ccc(cc1071)-c1072ccc(cc1072)-c1073ccc(cc1073)-c1074ccc(cc1074)-c1075ccc(cc1075)-c1076ccc(cc1076)-c1077ccc(cc1077)-c1078ccc(cc1078)-c1079ccc(cc1079)-c1080ccc(cc1080)-c1081ccc(cc1081)-c1082ccc(cc1082)-c1083ccc(cc1083)-c1084ccc(cc1084)-c1085ccc(cc1085)-c1086ccc(cc1086)-c1087ccc(cc1087)-c1088ccc(cc1088)-c1089ccc(cc1089)-c1090ccc(cc1090)-c1091ccc(cc1091)-c1092ccc(cc1092)-c1093ccc(cc1093)-c1094ccc(cc1094)-c1095ccc</chem>