

(Not) an Extra Constitutional Isomer of Benzene

Patrick W. Fowler

University of Sheffield, Department of Chemistry, Sheffield S3 7HF, UK,

P.W.Fowler@sheffield.ac.uk

(Received September 25, 2009)

Abstract

Despite a recent claim that 218 constitutional isomers correspond to the formula C_6H_6 , the number of such isomers remains at 217. A concordance of the four previous tabulations of the isomers is presented, documenting some duplications and omissions.

Isomer enumeration is a topic with a long history of fruitful connection between graph theory and chemistry.^{1,2} A standard example in mathematical organic chemistry is the counting of isomers with the formula C_6H_6 , the constitutional isomers of benzene. Specifically, the question is to determine how many non-isomorphic molecular graphs, with edges weighted to show the locations of single, double and triple bonds, can be drawn for this formula while respecting the valencies of 4 for carbon and 1 for hydrogen. On first encounter, the result is surprisingly large.

The first published constructive enumeration (by hand³) gave 217 constitutional isomers obeying the recipe. The number was confirmed in a computer enumeration that served as the source of an iconic pictorial tabulation appearing in a paper on silicon chemistry.⁴ The original tabulation was used in advertising in chemistry journals.⁵ After publication of the computer enumeration in Ref. 4, a pedagogical review discussed the problem once more and was accompanied by a poster with a distinctively different arrangement of the isomers by cycle count.⁶ The generation of the 217 isomers is a standard test example for the MOLGEN+ program.⁷ The count of 217 is also cited *en passant* in various places in the chemical literature⁸ where questions of isomerism, complexity and

molecular structure are discussed, and the variety of unconventional isomers of benzene has inspired theoretical studies⁹ and experimental syntheses.^{10–12}

Given this history, it was surprising to encounter a recently published claim that the number of constitutional isomers is actually 218, not 217. In the course of their heroic campaign using quantum mechanical methods to identify all local minima on the C_6H_6 potential hypersurface, Dinadayalane *et al.*¹³ state that they found an extra constitutional isomer in the course of preparing candidates for optimisation. The revised total has been quoted as fact in experimental work,¹¹ and the paper itself was cited by the Bayreuth MOLGEN+ group⁷ without comment on the 217/218 discrepancy. The present note resolves the discrepancy, supporting the consensus count of 217.

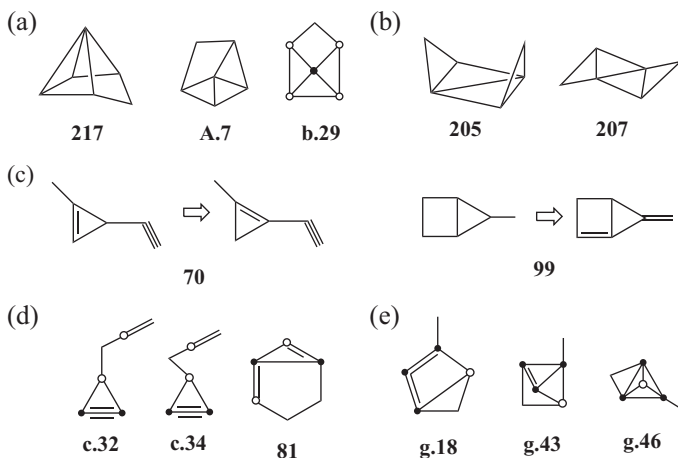


Figure 1: Discrepant isomers in enumerations of constitutional isomers of C_6H_6 . (a) Isomer (**217** was claimed in Ref. 13) as missing from previous evaluations, but in fact is present in two of them.^{3,4} It is, however, missing from the poster associated with Ref. 6. In Ref. 4 it is isomer A.7; in Ref. 3 it is the 29-th isomer of formula type b [$C(CH)_4(CH_2)$], visually encoded here with \bullet for C and \circ for CH. It also appears in the order generated by MOLGEN, at position 28.⁷ (b) The duplicated isomer^{6,13} responsible for the excess of one in the total count in Ref. 13. (c) Typographical corrections to two isomers in Scheme 1 of Ref. 13. (d) Repeated isomers in the earliest tabulation (Figure 4 of Ref. 3), one of which should be replaced as shown, with the bicyclic isomer that appears as **81** in Scheme 1, Ref. 13. (e) Typographical corrections to three isomers in Figure 4 of Ref. 3.

The published lists of isomers are organised on different principles: the list in Ref. 13 is grouped by ring count, following the classification and essentially the sequence of isomers in Ref. 6; in Ref. 3, isomers are grouped by formula $C_a(CH)_b(CH_2)_c(CH_3)_d$; for brevity, in the present work each isomer is given a code $p:q$, where $p = 1, \dots, 7$ correspond to (a, b, c, d) = (0, 6, 0, 0) (1, 4, 1, 0), (2, 2, 2, 0), (3, 0, 3, 0), (4, 0, 0, 2), (2, 3, 0, 1), (3, 1, 1, 1), and the range of q reflects the size of the formula class (6, 32, 76, 16, 7, 34, 46); in Ref. 4, the isomers are arranged in a matrix from which the present letter/number codes are derived. In Ref. 6, the isomers are unnumbered, but here they are labelled simply in appearance order, by line and then column, in one continuous sequence.

The authors of Ref. 13 state that the difference from previous work arose from detection of a extra isomer (**217** in their numbering scheme), one unconsidered in previous work. This is clearly not correct, as this particular $C(CH)_4(CH_2)$ isomer was already present in two previous constructive enumerations^{3,4} (see Figure 1). Closer inspection of the full set of structures in Scheme 1 of Ref. 13 shows that the discrepancy actually arises from inadvertent duplication by these authors of a tetracyclic isomer, which appears as both **205** and **207** in their list (see Figure 1).¹ The same duplication had occurred earlier in the poster associated with Ref. 6, also at positions **205** and **207** in the isomer order. The ‘extra’ isomer **217** is the exactly the one that was missing from the poster.

In summary, cross comparison of all the four available isomer lists^{3,4,6,13} shows the following set of essential discrepancies. Ref. 4 (Scheme 7 in that paper) lists 217 isomers, without duplication. The earlier Ref. 3 (Figure 4 in that paper) lists 217 isomers, of which two (**c.32** and **c.34**) are slightly disguised duplicates, and misses one isomer, probably as a transcription error, since the method used is capable of finding this isomer. Ref. 6 (associated poster) lists 217 isomers, corresponding to a re-ordering and redrawing of the structures in Ref. 4, including a different pair of duplicates (**205** and **207**), and having a different missing isomer. Ref. 13 (Scheme 1 in that paper) lists 218 isomers, taking over the list from Ref. 6, retaining the duplication, but then adding back the isomer that was missing from the poster, to give an incorrectly inflated total. Figure 1 of the present paper shows the various noted duplications, omissions and minor topographical errors.

¹The two topologically equivalent graphs gave optimised molecular structures with different geometries and energies differing by $\sim 1000 \text{ kJ mol}^{-1}$, emphasising the difficulties inherent in potential surface searching, where small differences in starting geometry may lead to qualitatively different outcomes. Nevertheless, **205** and **207** are equivalent as molecular graphs, and hence as constitutional isomers.

Once the various discrepancies are taken into account, the union of all four sources gives 217 distinct constitutional isomers of formula C_6H_6 . However, once a doubt has been planted, it seems advisable to check once more, in the spirit of the thirteenth stroke of the clock,¹⁶ that although the claim of this particular extra isomer might be illusory, the corrected enumeration is complete. When faced with a similar question about the six¹⁵ valence isomers of benzene, Gutman and Potgieter¹⁷ were able to supply a formal mathematical proof of completeness of the isomer set. For the full set of constitutional isomers, the sheer number of cases makes this difficult and suggests the need for a computer-aided approach.

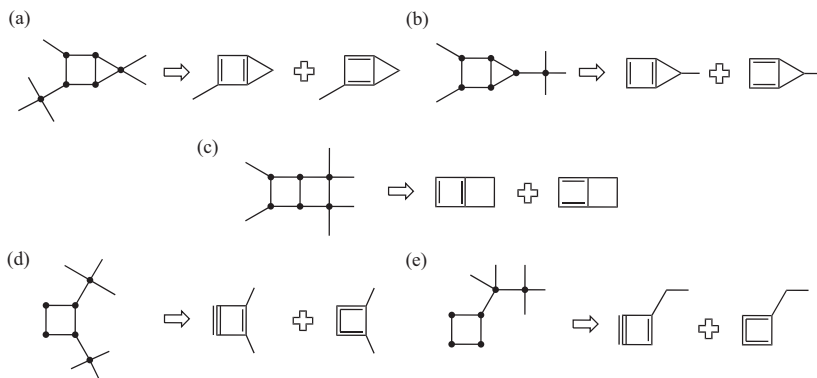


Figure 2: The five cases where a given σ -skeleton graph corresponds to more than one constitutional isomer of C_6H_6 . In the σ -skeleton a black dot denotes a carbon centre and the unmarked vertices are hydrogen centres. In the derived molecular structures, H atoms are suppressed.

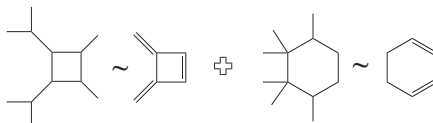


Figure 3: The cospectral pair of σ -skeleton graphs for isomers of C_6H_6 . Both are bipartite, and have identical characteristic polynomials $x^2(x^5 - 2x^4 - 4x^3 + 6x^2 + 3x - 2)(x^5 + 2x^4 - 4x^3 - 6x^2 + 3x + 2)$, with roots $\pm 2.499.., \pm 1.662.., \pm 1.496.., \pm 0.757.., \pm 0.425.., 0, 0$.

Previous schemes have built up the set of isomers by concentrating on the 6-carbon graphs and their possible decorations with multiple edges. A construction that is deliberately designed to be independent, though not necessarily efficient, can be based on the 12-vertex graphs that represent the σ -bond (CC and CH) frameworks of C_6H_6 isomers. McKay's graph enumeration and construction program **geng**¹⁸ gives 6,800,637 connected graphs of order 12 with maximum degree less than or equal to 4. Of these, 1071 have exactly 6 leaves (locating the H atoms, and thus the C, CH, CH_2 and CH_3 carbon centres) and are candidate σ -skeletons of C_6H_6 . Vertices of degree 2 or 3 in the skeleton graph represent carbon atoms, and the 'hunger' of a carbon vertex is the difference of its degree from four. Many candidates cannot be completed by decoration with multiple CC bonds in a way that is consistent with valency and stoichiometry. Elimination of graphs with isolated 'hungry' carbon vertices, and the more general requirement that the hunger of a carbon vertex must not exceed the sum of the hungers of its carbon neighbours, reduce the number of candidates, as do other simple feasibility tests. Finally, a total of 207 skeleton graphs is reached, each of which has at least one completion in which the double and triple bonds (if any) are marked. A small number of the σ -skeletons can be completed in two non-isomorphic ways: all such cases for isomers of C_6H_6 arise from switching of a perfect matching within a 4-cycle; the 10 constitutional isomers produced in this way are illustrated in Figure 2. The total number of constitutional isomers is therefore $207 + 10 = 217$, as expected.

The individual isomers can be reconciled with those in the union of previous tabulated sets. For this purpose, the adjacency spectra of the σ -skeleton graphs turn out to be useful tools for rapidly identifying their equivalents in the various tabulations. The 207 acceptable σ skeletons have 206 distinct spectra. (Figure 3 shows the sole cospectral pair within the set of 208.) Finally, Table 1 (Appendix) details the correspondence between the σ -skeleton graphs and the numbering schemes of Refs. 13, 6, 4, and 3.

Acknowledgement: I would like to thank Prof. A. T. Balaban and Prof. Gopalpur Nagendrappa for detailed and very helpful discussions about their work, and for supplying copies of Refs. 3 and 6, respectively.

References

- [1] D. H. Rouvray, The origins of chemical graph theory, in: D. Bonchev, D. H. Rouvray (Eds.), *Chemical Graph Theory Introduction and Fundamentals*, Abacus Press/Gordon & Breach Science Publishers, New York, 1990.
- [2] I. Gutman, O. E. Polansky, *Mathematical Concepts in Organic Chemistry*, Springer-Verlag, Berlin, 1986.
- [3] A. T. Balaban, Chemical graphs. XVIII. Graphs of degrees four or less, isomers of annulenes and nomenclature of bridged polycyclic structures, *Rev. Roum. Chim.* **18** (1973) 635–653.
- [4] H. Bock, Fundamentals of silicon Chemistry: Molecular states of silicon-containing compounds, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **28** (1989) 1627–1650.
- [5] A. T. Balaban, Applications of graph theory in chemistry, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **25** (1985) 334–343.
As noted in this paper, the isomers were featured in an advertisement for JEOL, on the reverse front cover of issues 15, 16, and 18 of volume 95 of J. Am. Chem. Soc. in 1973.
- [6] G. Nagendrappa, Benzene and its isomers. How many structures can we draw for C₆H₆? *Resonance* **6** (2001) 74–78.
This review appeared in the May issue, and the poster illustrating 217 structures appeared as an insert in the June issue.
- [7] C. Benecke, R. Grund, R. Hohberger, A. Kerber, R. Laue, T. Wieland, MOLGEN+, a generator of connectivity isomers and stereoisomers for molecular structure elucidation, *Anal. Chim. Acta* **314** (1995) 141–147.
An online trial version of the program is available at www.molgen.de
- [8] G. Del Re, Ontological status of molecular structure, *Hyle* **4** (1998) 81–103.
- [9] M. D. Newton, J. M. Schulman, M. M. Manus, Theoretical studies of benzene and its valence isomers, *J. Am. Chem. Soc.* **96** (1974) 17–23.
- [10] A. T. Balaban, M. Banciu, V. Ciorba, *Annulenes, Benzo-, Hetero-, Homo-Derivatives and Their Valence Isomers*, CRC Press, Boca Raton, 1986.
- [11] H. Maurer, H. Hopf, The preparation of the last remaining acyclic isomers of benzene, *Eur. J. Org. Chem.* (2005) 2702–2707.

- [12] A. H. Schmidt, Valenzisomere des Benzols, *Chemie in unserer Zeit* **11** (1977) 118–128.
- [13] T. C. Dinadayalane, U. D. Priyakumar, G. N. Sastry, Exploration of C₆H₆ potential energy surface: A computational effort to unravel the relative stabilities and synthetic feasibility of new benzene isomers, *J. Phys. Chem. A* **108** (2004) 11433–11448.
- [14] A. Kerber, R. Laue, M. Meringer, C. Rücker, Molecules *in silico*: potential *versus* known organic compounds, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **54** (2005) 301–312.
- [15] A. T. Balaban, Valence isomerism of cyclopolyenes, *Rev. Roum. Chim.* **11** (1966) 1097–1116; **12** (1967) 103 (erratum).
- [16] A. P. Herbert, *Uncommon Law*, Methuen, London, 1935.
 ‘It is like the thirteenth stroke of a [...] clock, which not only is itself discredited but casts a shade of doubt over all previous assertions.’
- [17] I. Gutman, J. H. Potgieter, Isomers of benzene, *J. Chem. Edu.* **71** (1994) 222–224.
- [18] B. D. McKay, The *geng* program is part of the gtools utilities associated with the graph isomorphism–automorphism software nauty, the manual for which is available at <http://cs.anu.edu.au/~bdm/nauty>.

APPENDIX

Table 1. A ‘Rosetta Stone’ for benzene isomers, linking the four existing tabulations of constitutional isomers of C₆H₆ to the specifications of the underlying σ -skeleton graph. Column ID1 gives the numbering in Scheme 1 of Ref. 13 (**205** and **207** represent identical isomers). Column ID2 gives the positions in the matrix of Scheme 7 of Ref. 4. Column ID3 gives the positions in Figure 4 of Ref. 3, using the $p:q$ code described above, where p denotes a molecular formula in terms of carbon-vertex degrees, and q is a sequence number. Column ID4 gives the positions on the poster associated with Ref. 6, using sequence numbers assigned as described above. The remaining columns list the edges of the labelled σ -skeleton graph, where vertices 1 to 6 represent carbon centres and vertices 7 to 12 hydrogen, and each edge is a comma-separated pair of vertex labels. Acyclic, unicyclic, ... tetracyclic C₆H₆ graphs have 11, 12, ... 15 edges, respectively. Entries – indicate the missing isomers of tabulations 3 and 6. The table has 218 lines, but only 217 distinct isomers, as **205** and **207** (bold entries) are duplicates.

ID1	ID2	ID3	ID4	Edge list															
1	C.02	b.1	1	1,5	1,6	2,3	2,4	3,6	3,7	4,8	5,9	5,10	6,11	1,12					
2	F.14	c.1	2	1,3	1,5	2,4	2,6	3,6	3,7	4,8	5,9	5,10	6,11	6,12					
3	G.06	c.3	3	1,2	1,5	2,6	3,5	4,6	3,7	3,8	4,9	4,10	5,11	6,12					
4	H.17	f.1	4	1,3	1,5	2,4	2,5	3,6	3,7	4,8	5,9	6,10	6,11	6,12					
5	L.11	g.2	5	1,3	1,5	2,4	2,5	3,6	4,7	4,8	5,9	6,10	6,11	6,12					
6	F.15	c.2	6	1,3	1,5	2,4	2,6	5,6	3,7	4,8	5,9	5,10	6,11	6,12					
7	L.01	g.1	7	1,3	1,5	2,4	2,6	3,6	4,7	5,8	5,9	5,10	6,11	6,12					
8	L.12	g.3	8	1,3	1,4	2,3	2,6	5,6	4,7	5,8	5,9	5,10	6,11	6,12					
9	L.13	e.1	9	1,3	1,4	2,4	2,5	3,6	5,7	5,8	5,9	6,10	6,11	6,12					
10	F.12	c.11	10	1,3	1,5	2,4	2,6	3,6	3,7	4,8	4,9	5,10	5,11	6,12					
11	F.13	c.12	11	1,3	1,6	2,3	2,5	4,6	4,7	4,8	5,9	5,10	6,11	1,12					
12	L.10	g.4	12	1,3	1,4	2,3	2,5	4,6	4,7	5,8	5,9	6,10	6,11	6,12					
13	F.10	c.4	13	1,5	1,6	2,4	2,6	3,6	3,7	3,8	4,9	5,10	5,11	1,12					
14	H.18	f.2	14	1,3	1,6	2,4	2,6	5,6	3,7	4,8	5,9	5,10	5,11	6,12					
15	K.18	g.5	15	1,3	1,4	2,3	2,5	3,6	4,7	5,8	5,9	6,10	6,11	6,12					
16	A.06	a.1	16	1,4	1,5	2,4	2,6	3,5	3,6	4,7	5,8	6,9	1,10	2,11	3,12				
17	B.16	b.13	17	1,5	1,6	2,3	2,4	3,5	4,6	3,7	4,8	5,9	6,10	6,11	1,12				
18	F.11	c.27	18	1,3	1,6	2,3	2,5	4,5	4,6	4,7	4,8	5,9	6,10	6,11	1,12				
19	G.04	c.24	19	1,4	1,5	2,3	2,5	3,6	4,6	4,7	4,8	5,9	6,10	6,11	1,12				
20	G.05	c.25	20	1,4	1,5	2,3	2,5	3,6	4,6	4,7	5,8	5,9	6,10	6,11	1,12				
21	B.12	b.5	21	1,3	1,5	2,5	2,6	3,6	4,6	3,7	4,8	4,9	5,10	1,11	2,12				
22	F.05	c.26	22	1,3	1,5	2,4	2,5	2,6	3,6	3,7	4,8	4,9	5,10	6,11	6,12				
23	H.12	f.15	23	1,3	1,5	1,6	2,4	2,5	3,4	3,7	4,8	5,9	6,10	6,11	6,12				
24	H.13	f.16	24	1,3	1,4	1,6	2,4	2,5	3,5	4,7	5,8	6,9	6,10	6,11	2,12				
25	H.16	f.14	25	1,3	1,6	2,3	2,4	4,6	5,6	4,7	5,8	5,9	5,10	6,11	1,12				
26	I.04	f.13	26	1,3	1,5	2,5	2,6	3,6	4,6	4,7	4,8	4,9	5,10	6,11	2,12				
27	J.01	d.6	27	1,3	1,5	2,4	2,5	2,6	3,6	4,7	4,8	5,9	5,10	6,11	6,12				
28	J.02	d.5	28	1,3	1,4	1,5	2,3	2,6	4,6	4,7	4,8	5,9	5,10	6,11	6,12				
29	K.17	g.12	29	1,3	1,4	2,3	2,5	2,6	4,6	4,7	5,8	5,9	5,10	6,11	6,12				
30	L.09	g.10	30	1,3	1,4	1,5	2,4	2,6	3,6	3,7	5,8	5,9	5,10	6,11	6,12				
31	L.07	g.11	31	1,3	1,4	2,4	2,5	2,6	3,6	4,7	5,8	5,9	5,10	6,11	6,12				

ID1	ID2	ID3	ID4	Edge list															
32	B.11	b.20	32	1,4	1,6	2,5	2,6	3,5	3,6	4,7	4,8	5,9	1,10	2,11	3,12				
33	C.01	b.3	33	1,5	1,6	2,4	2,6	3,5	3,6	3,7	3,8	4,9	5,10	6,11	1,12				
34	F.02	c.14	34	1,3	1,4	2,5	2,6	3,5	3,6	4,7	4,8	5,9	6,10	6,11	2,12				
35	F.04	c.36	35	1,3	1,6	2,3	2,5	2,6	4,5	4,7	4,8	5,9	6,10	6,11	1,12				
36	F.09	c.8	36	1,3	2,3	2,5	2,6	4,5	4,6	4,7	4,8	5,9	6,10	6,11	1,12				
37	G.02	c.33	37	1,4	1,5	2,3	2,5	3,6	5,6	4,7	4,8	5,9	6,10	6,11	1,12				
38	H.09	f.11	38	1,3	1,4	1,5	2,4	2,5	3,6	3,7	4,8	5,9	6,10	6,11	6,12				
39	L.05	b.21	39	1,5	1,6	2,3	2,4	3,6	4,6	3,7	4,8	5,9	5,10	6,11	1,12				
40	B.05	g.29	40	1,3	1,4	1,6	2,4	2,6	3,5	3,7	4,8	5,9	5,10	6,11	6,12				
41	L.06	g.31	41	1,3	1,5	1,6	2,3	2,5	4,6	4,7	4,8	4,9	5,10	6,11	6,12				
42	E.13	c.13	42	1,5	1,6	2,4	2,5	2,6	3,6	3,7	3,8	4,9	4,10	5,11	1,12				
43	K.14	g.35	43	1,3	1,4	1,5	2,3	2,5	3,6	4,7	4,8	5,9	6,10	6,11	6,12				
44	L.03	g.30	44	1,3	1,5	1,6	2,3	2,6	4,6	4,7	4,8	4,9	5,10	5,11	6,12				
45	L.19	e.3	45	1,3	1,4	1,5	2,3	2,4	3,6	5,7	5,8	5,9	6,10	6,11	6,12				
46	K.16	e.4	46	1,3	1,4	1,5	2,3	2,4	3,6	5,7	5,8	5,9	6,10	6,11	6,12				
47	L.17	g.32	47	1,3	1,5	1,6	2,3	2,5	4,6	4,7	4,8	4,9	5,10	6,11	6,12				
48	B.10	b.7	48	1,3	1,6	2,5	2,6	3,6	4,5	3,7	4,8	4,9	5,10	1,11	2,12				
49	B.14	b.6	49	1,3	1,6	2,4	2,5	3,6	4,6	3,7	4,8	5,9	5,10	6,11	1,12				
50	B.18	b.4	50	1,3	1,5	1,6	2,4	2,6	3,5	3,7	4,8	5,9	6,10	6,11	1,12				
51	F.01	c.10	51	1,3	1,5	1,6	2,4	2,5	3,6	3,7	4,8	4,9	5,10	6,11	6,12				
52	F.03	c.35	52	1,4	1,6	2,3	2,5	2,6	3,5	4,7	4,8	5,9	6,10	6,11	1,12				
53	F.07	c.5	53	1,3	1,5	2,4	2,5	2,6	4,6	3,7	4,8	4,9	5,10	6,11	6,12				
54	F.08	c.7	54	1,3	1,5	1,6	2,4	2,6	3,5	3,7	4,8	5,9	5,10	6,11	6,12				
55	G.03	c.32	55	1,4	1,5	2,3	2,6	3,6	4,6	4,7	4,8	5,9	5,10	6,11	1,12				
56	H.10	f.7	56	1,3	1,5	2,4	2,5	3,5	4,6	3,7	4,8	6,9	6,10	6,11	1,12				
57	L.08	g.26	57	1,4	1,5	2,3	2,5	3,5	4,6	4,7	4,8	6,9	6,10	6,11	1,12				
58	H.11	f.10	58	1,3	1,4	1,5	2,5	2,6	3,4	4,7	5,8	6,9	6,10	6,11	2,12				
59	I.02	f.6	59	1,4	1,6	2,3	2,5	3,6	4,6	4,7	5,8	5,9	5,10	6,11	1,12				
60	L.04	g.6	60	1,3	1,4	1,5	2,4	2,6	3,5	3,7	5,8	5,9	6,10	6,11	6,12				
61	I.03	f.9	61	1,4	1,5	2,3	2,6	3,6	4,6	4,7	5,8	5,9	5,10	6,11	1,12				
62	I.18	d.1	62	1,3	1,4	1,6	2,3	2,5	4,6	4,7	4,8	5,9	5,10	6,11	6,12				

ID1	ID2	ID3	ID4	Edge list											
63	I.17	d.2	63	1,3	1,4	1,6	2,3	2,5	3,6	4,7	4,8	5,9	5,10	6,11	6,12
64	F.06	c.6	64	1,3	1,6	2,4	2,5	2,6	4,6	3,7	4,8	4,9	5,10	5,11	6,12
65	H.14	f.4	65	1,3	1,5	1,6	2,4	2,6	3,6	3,7	4,8	5,9	5,10	5,11	6,12
66	H.15	f.5	66	1,3	1,6	2,3	2,4	3,6	5,6	4,7	5,8	5,9	5,10	6,11	1,12
67	E.12	c.15	67	1,5	1,6	2,3	2,4	2,6	3,6	3,7	4,8	4,9	5,10	5,11	1,12
68	K.11	g.8	68	1,3	1,4	1,6	2,3	2,5	3,4	4,7	5,8	5,9	6,10	6,11	6,12
69	K.12	g.27	69	1,4	1,5	2,3	2,5	2,6	3,5	4,7	4,8	6,9	6,10	6,11	1,12
70	K.15	g.7	70	1,3	1,4	2,3	2,5	2,6	3,6	4,7	5,8	5,9	5,10	6,11	6,12
71	G.14	f.3	71	1,3	1,6	2,4	2,6	3,6	5,6	3,7	4,8	5,9	5,10	5,11	1,12
72	J.15	g.25	72	1,5	1,6	2,3	2,6	3,6	4,6	4,7	4,8	4,9	5,10	5,11	1,12
73	L.18	e.2	73	1,3	1,4	2,4	2,5	2,6	3,4	5,7	5,8	5,9	6,10	6,11	6,12
74	L.02	g.24	74	1,3	1,6	2,4	2,5	2,6	3,6	4,7	4,8	5,9	5,10	5,11	6,12
75	K.13	g.28	75	1,3	1,4	2,3	2,5	2,6	3,4	4,7	5,8	5,9	6,10	6,11	6,12
76	I.14	d.3	76	1,2	1,4	1,6	2,5	2,6	3,6	3,7	3,8	4,9	4,10	5,11	5,12
77	B.04	b.14	77	1,4	1,5	2,3	2,5	2,6	3,4	3,6	3,7	4,8	5,9	6,10	6,11
78	B.05	b.17	78	1,5	1,6	2,3	2,4	2,5	3,4	3,6	3,7	4,8	5,9	6,10	6,11
79	B.07	b.16	79	1,3	1,5	2,4	2,5	2,6	3,6	4,5	3,7	4,8	5,9	6,10	6,11
80	E.01	c.43	80	1,3	1,5	2,3	2,4	2,6	3,6	4,5	4,7	5,8	5,9	6,10	6,11
81	E.05	—	81	1,4	1,6	2,3	2,4	2,5	3,4	5,6	3,7	5,8	5,9	6,10	6,11
82	E.07	c.42	82	1,3	1,4	1,6	2,4	2,5	3,5	3,6	4,7	5,8	5,9	6,10	6,11
83	B.13	b.15	83	1,4	1,5	1,6	2,3	2,5	3,6	4,6	3,7	4,8	4,9	5,10	6,11
84	E.15	c.68	84	1,2	1,4	2,5	2,6	3,4	3,6	5,6	3,7	3,8	4,9	5,10	5,11
85	F.16	c.22	85	1,2	1,4	2,5	3,4	3,6	4,6	5,6	3,7	3,8	4,9	5,10	6,12
86	I.15	d.14	86	1,2	1,4	1,5	2,4	3,4	3,6	5,6	3,7	3,8	5,9	5,10	6,12
87	A.05	a.2	87	1,4	1,5	1,6	2,4	2,6	3,5	3,6	4,7	5,8	6,9	1,10	2,11
88	B.06	b.18	88	1,4	1,5	1,6	2,4	2,5	3,5	3,6	4,7	6,8	6,9	1,10	2,11
89	E.02	c.45	89	1,4	1,5	2,4	2,5	2,6	3,4	3,6	3,7	3,8	5,9	6,10	6,11
90	E.04	c.47	90	1,3	1,5	2,3	2,4	2,5	3,6	4,6	4,7	5,8	5,9	6,10	6,11
91	E.10	c.44	91	1,4	1,5	2,4	2,5	2,6	3,4	3,6	3,7	3,8	5,9	6,10	6,11
92	E.17	c.46	92	1,4	1,5	1,6	2,4	2,5	3,4	3,6	3,7	3,8	5,9	6,10	6,11
93	F.18	c.21	93	1,3	1,5	1,6	2,3	2,6	4,5	4,6	4,7	4,8	5,9	5,10	6,11

ID1	ID2	ID3	ID4	Edge list															
94	A.13	b.8	94	1,3	1,6	2,5	2,6	3,6	4,5	4,6	3,7	4,8	4,9	5,10	1,11	2,12			
95	D.01	c.56	95	1,2	1,3	2,6	3,6	4,5	4,6	5,6	2,7	3,8	4,9	4,10	5,11	5,12			
96	I.10	d.9	96	1,2	1,5	2,6	3,4	3,6	4,6	5,6	3,7	3,8	4,9	4,10	5,11	5,12			
97	I.11	d.10	97	1,2	1,6	2,6	3,5	3,6	4,5	4,6	3,7	3,8	4,9	4,10	5,11	5,12			
98	B.03	b.11	98	1,4	1,6	2,3	2,5	2,6	3,4	3,6	3,7	4,8	5,9	5,10	6,11	1,12			
99	D.12	c.30	99	1,2	1,4	1,6	2,5	2,6	3,4	3,6	3,7	3,8	4,9	5,10	5,11	6,12			
100	D.14	c.28	100	1,3	1,4	1,5	2,3	2,4	2,6	3,6	3,7	4,8	5,9	5,10	6,11	6,12			
101	D.16	c.41	101	1,3	1,5	1,6	2,4	2,5	2,6	3,5	3,7	4,8	4,9	5,10	6,11	6,12			
102	D.17	c.29	102	1,3	1,4	1,6	2,3	2,5	2,6	3,4	4,7	5,8	5,9	6,10	6,11	1,12			
104	H.01	f.23	103	1,3	1,4	2,3	2,4	2,6	3,6	5,6	4,7	5,8	5,9	5,10	6,11	1,12			
105	H.02	f.20	104	1,3	1,4	1,6	2,4	2,6	3,5	3,6	4,7	5,8	5,9	5,10	6,11	2,12			
106	H.03	f.18	105	1,3	1,4	1,5	2,4	2,5	2,6	3,5	3,7	4,8	5,9	6,10	6,11	6,12			
106	H.04	f.21	106	1,3	1,4	2,3	2,4	2,6	3,6	5,6	4,7	5,8	5,9	5,10	6,11	1,12			
107	H.06	f.17	107	1,3	1,6	2,3	2,4	2,5	3,6	4,6	4,7	5,8	5,9	5,10	6,11	1,12			
108	H.07	f.22	108	1,3	1,4	1,6	2,3	2,4	2,5	3,5	4,7	5,8	6,9	6,10	6,11	1,12			
109	H.08	f.24	109	1,3	1,4	1,6	2,3	2,4	3,6	5,6	4,7	5,8	5,9	5,10	6,11	1,12			
110	I.01	f.12	110	1,3	1,4	1,6	2,3	2,4	4,6	5,6	4,7	5,8	5,9	5,10	6,11	1,12			
111	I.12	d.7	111	1,2	1,4	1,5	2,4	2,6	3,4	3,6	3,7	3,8	5,9	5,10	6,11	6,12			
112	I.13	d.8	112	1,3	1,4	1,5	2,3	2,5	2,6	3,6	4,7	4,8	5,9	5,10	6,11	6,12			
113	J.12	g.17	113	1,3	1,6	2,3	2,5	2,6	4,6	5,6	4,7	4,8	4,9	5,10	5,11	1,12			
114	J.14	g.9	114	1,2	1,4	2,6	3,4	3,6	4,6	5,6	3,7	3,8	4,9	5,10	5,11	5,12			
115	K.02	g.15	115	1,3	1,4	1,5	2,4	2,5	3,4	3,6	5,7	5,8	6,9	6,10	6,11	2,12			
116	K.03	g.16	116	1,3	1,4	1,5	2,3	2,4	2,6	3,6	4,7	5,8	5,9	5,10	6,11	6,12			
117	K.04	g.14	117	1,3	1,4	1,5	2,3	2,5	2,6	3,4	4,7	5,8	5,9	6,10	6,11	6,12			
118	K.05	g.13	118	1,3	1,4	1,5	2,3	2,4	2,6	3,6	4,7	5,8	5,9	5,10	6,11	6,12			
119	K.10	g.22	119	1,2	1,4	1,6	2,4	3,4	3,6	5,6	3,7	3,8	5,9	5,10	5,11	6,12			
120	K.08	g.18	120	1,3	1,4	1,6	2,3	2,5	2,6	4,6	4,7	4,8	5,9	5,10	5,11	6,12			
121	G.13	f.19	121	1,3	1,4	2,3	2,4	2,5	2,6	3,5	4,7	5,8	6,9	6,10	6,11	1,12			
122	A.04	a.3	122	1,3	1,5	1,6	2,4	2,6	3,5	4,6	3,7	4,8	5,9	6,10	1,11	2,12			
123	B.08	b.9	123	1,3	1,6	2,4	2,5	2,6	3,6	4,5	3,7	4,8	5,9	5,10	6,11	1,12			
124	E.03	c.19	124	1,3	1,5	2,3	2,4	2,6	3,5	4,6	4,7	5,8	5,9	6,10	6,11	1,12			

ID1	ID2	ID3	ID4	Edge list												
125	E.09	c.18	125	1,3	1,4	2,3	2,5	2,6	3,4	5,6	4,7	5,8	5,9	6,10	6,11	1,12
126	E.16	c.55	126	1,2	1,5	1,6	2,5	3,4	3,6	4,6	3,7	3,8	4,9	4,10	5,11	6,12
127	F.17	c.31	127	1,2	1,5	2,5	3,4	3,6	4,6	5,6	3,7	3,8	4,9	4,10	5,11	6,12
128	C.18	c.16	128	1,3	1,6	2,4	2,5	2,6	3,6	4,6	3,7	4,8	4,9	5,10	5,11	1,12
129	J.13	g.23	129	1,2	1,4	2,4	3,4	3,6	4,6	5,6	3,7	3,8	5,9	5,10	5,11	6,12
130	G.12	f.8	130	1,3	1,6	2,4	2,5	2,6	3,6	4,6	3,7	4,8	5,9	5,10	5,11	1,12
131	B.02	b.22	131	1,4	1,5	2,3	2,5	2,6	3,6	5,6	3,7	4,8	4,9	5,10	6,11	1,12
132	B.17	b.2	132	1,4	1,5	1,6	2,3	2,5	4,6	5,6	3,7	4,8	4,9	5,10	6,11	1,12
133	K.07	f.34	133	1,3	1,4	1,6	2,3	2,4	3,4	5,6	5,7	5,8	5,9	6,10	6,11	1,12
134	D.13	c.40	134	1,2	1,4	1,5	2,5	2,6	3,4	5,6	3,7	3,8	4,9	5,10	6,11	6,12
135	D.15	c.37	135	1,4	1,5	2,3	2,5	2,6	3,5	3,6	4,7	4,8	5,9	6,10	6,11	1,12
136	E.14	c.17	136	1,2	1,4	1,6	2,5	3,4	3,6	4,6	3,7	3,8	4,9	5,10	5,11	6,12
137	G.18	f.26	137	1,3	1,5	2,3	2,4	2,6	3,6	4,6	4,7	5,8	5,9	5,10	6,11	1,12
138	J.18	g.37	138	1,3	1,4	1,6	2,4	2,5	3,4	3,6	5,7	5,8	5,9	6,10	6,11	2,12
139	K.01	g.33	139	1,3	1,4	2,3	2,4	2,5	3,4	5,6	5,7	5,8	6,9	6,10	6,11	1,12
140	C.17	c.39	140	1,2	1,4	1,5	1,6	2,5	2,6	3,4	3,7	3,8	4,9	5,10	6,11	6,12
141	D.02	c.9	141	1,4	1,5	1,6	2,3	2,6	4,6	5,6	3,7	4,8	4,9	5,10	5,11	1,12
142	D.11	c.20	142	1,3	1,4	1,6	2,3	2,5	2,6	3,6	3,7	4,8	4,9	5,10	5,11	6,12
143	J.16	g.39	143	1,3	1,4	1,5	2,3	2,5	2,6	3,5	4,7	4,8	5,9	6,10	6,11	6,12
144	J.17	g.38	144	1,2	1,4	1,6	2,4	2,6	3,4	5,6	3,7	3,8	5,9	5,10	5,11	6,12
145	L.16	e.5	145	1,3	1,4	1,5	2,3	2,4	2,6	3,4	5,7	5,8	5,9	6,10	6,11	6,12
146	J.11	g.36	146	1,3	1,6	2,3	2,5	2,6	3,6	4,6	4,7	4,8	4,9	5,10	5,11	1,12
147	L.15	e.6	147	1,2	1,3	1,6	2,3	2,6	4,6	5,6	4,7	4,8	4,9	5,10	5,11	5,12
148	B.09	b.19	148	1,5	1,6	2,3	2,4	2,5	3,6	4,6	3,7	4,8	4,9	5,10	6,11	1,12
149	E.11	c.66	151	1,3	1,4	1,5	2,3	2,4	2,6	5,6	3,7	4,8	5,9	5,10	6,11	6,12
150	E.18	c.54	152	1,3	1,6	2,3	2,4	2,5	4,6	5,6	4,7	4,8	5,9	5,10	6,11	1,12
151	G.01	c.23	153	1,2	1,5	2,6	3,5	3,6	4,5	4,6	3,7	3,8	4,9	4,10	5,11	6,12
152	I.16	d.12	154	1,3	1,4	1,5	2,3	2,5	2,6	4,6	4,7	4,8	5,9	5,10	6,11	6,12
153	K.09	g.40	158	1,3	1,5	1,6	2,3	2,5	2,6	4,6	4,7	4,8	4,9	5,10	5,11	6,12
154	E.06	c.53	149	1,3	1,5	1,6	2,4	2,5	2,6	3,4	3,7	4,8	5,9	5,10	6,11	6,12
155	E.08	c.67	150	1,3	1,4	1,5	2,4	2,5	2,6	3,6	3,7	4,8	5,9	5,10	6,11	6,12
156	H.05	f.27	155	1,3	1,4	1,6	2,3	2,4	2,6	5,6	3,7	4,8	5,9	5,10	5,11	6,12

ID1	ID2	ID3	ID4	Edge list												
157	D.18	c.38	156	1,4	1,5	1,6	2,4	2,5	2,6	3,4	3,7	3,8	5,9	6,10	6,11	1,12
158	K.06	g.41	157	1,3	1,4	1,6	2,3	2,4	2,6	3,5	4,7	5,8	5,9	5,10	6,11	6,12
159	A.03	a.4	171	1,3	1,4	1,6	2,4	2,5	2,6	3,5	4,6	3,7	4,8	5,9	6,10	1,11
160	A.15	b.26	172	1,3	1,4	1,6	2,4	2,5	3,4	3,6	5,6	3,7	5,8	5,9	6,10	1,11
161	D.03	c.64	173	1,2	1,4	1,5	2,4	2,6	3,5	3,6	4,6	3,7	3,8	4,9	5,10	5,11
162	D.09	c.69	174	1,2	1,4	1,5	2,4	2,5	3,5	3,6	4,6	3,7	3,8	4,9	5,10	6,11
163	B.01	b.27	197	1,4	1,5	1,6	2,4	2,5	2,6	3,5	3,6	3,7	3,8	4,9	5,10	6,11
164	D.08	c.71	198	1,4	1,5	1,6	2,4	2,5	2,6	3,4	3,6	3,7	3,8	5,9	5,10	6,11
165	A.16	b.25	175	1,3	1,4	1,6	2,3	2,4	2,5	3,6	5,6	3,7	4,8	5,9	5,10	6,11
166	A.17	b.28	176	1,2	1,3	1,6	2,5	2,6	3,5	4,5	4,6	2,7	3,8	4,9	4,10	5,11
167	D.04	c.72	177	1,3	1,5	1,6	2,3	2,4	2,5	3,6	4,6	4,7	4,8	5,9	5,10	6,11
168	D.05	c.65	178	1,2	1,3	1,4	2,3	2,5	3,6	4,6	5,6	3,7	4,8	4,9	5,10	5,11
169	D.10	c.70	179	1,2	1,4	1,5	2,5	2,6	3,5	3,6	4,6	3,7	3,8	4,9	4,10	5,11
170	C.15	c.61	195	1,3	1,4	1,5	2,4	2,6	3,6	4,6	5,6	2,7	2,8	3,9	4,10	5,11
171	C.16	c.62	196	1,2	1,5	1,6	2,5	3,5	3,6	4,5	4,6	2,7	3,8	3,9	4,10	4,11
172	I.09	d.13	199	1,2	1,3	1,4	2,5	2,6	3,6	4,6	5,6	3,7	3,8	4,9	4,10	5,11
173	A.11	b.24	159	1,4	1,5	1,6	2,5	2,6	3,4	3,6	4,6	3,7	3,8	4,9	5,10	1,11
174	I.07	d.15	160	1,2	1,4	1,6	2,5	2,6	3,5	3,6	4,6	3,7	3,8	4,9	4,10	5,11
175	C.10	c.48	161	1,2	1,4	1,5	1,6	2,4	2,6	3,5	3,6	3,7	3,8	4,9	5,10	5,11
176	C.12	c.49	162	1,3	1,4	1,6	2,4	2,6	3,5	3,6	5,6	2,7	2,8	3,9	4,10	5,11
177	A.18	b.23	163	1,3	1,4	1,6	2,4	2,5	2,6	3,4	5,6	3,7	5,8	5,9	6,10	1,11
178	D.06	c.50	164	1,2	1,4	1,5	2,5	2,6	3,4	3,6	4,6	3,7	3,8	4,9	5,10	5,11
179	D.07	c.51	165	1,3	1,5	1,6	2,3	2,4	2,6	3,5	4,6	4,7	4,8	5,9	5,10	6,11
180	C.13	c.60	166	1,3	1,4	1,6	2,3	2,5	2,6	4,6	5,6	3,7	4,8	4,9	5,10	5,11
181	C.14	c.59	167	1,2	1,3	1,4	1,6	2,3	2,5	4,6	5,6	3,7	4,8	4,9	5,10	5,11
182	A.14	b.12	185	1,3	1,4	1,6	2,3	2,4	2,5	3,6	4,6	3,7	4,8	5,9	5,10	6,11
183	G.16	f.32	186	1,4	1,5	1,6	2,3	2,4	2,6	3,4	3,6	3,7	5,8	5,9	5,10	6,11
184	G.15	f.28	187	1,3	1,4	1,6	2,3	2,5	2,6	3,4	4,6	4,7	5,8	5,9	5,10	6,11
185	G.17	f.33	188	1,2	1,3	1,4	2,3	2,4	3,6	4,6	5,6	3,7	4,8	5,9	5,10	5,11
186	G.11	f.29	189	1,3	1,4	1,6	2,4	2,6	3,4	3,6	5,6	3,7	5,8	5,9	5,10	1,11
187	J.10	g.44	190	1,2	1,5	1,6	2,5	2,6	3,5	3,6	4,6	3,7	3,8	4,9	4,10	4,11

ID1	ID2	ID3	ID4	Edge list															
188	J.09	g.42	191	1,2	1,3	1,4	2,3	2,6	3,6	4,6	5,6	3,7	4,8	4,9	5,10	5,11	5,12		
189	G.10	f.30	192	1,3	1,4	1,6	2,3	2,4	2,6	3,6	5,6	3,7	4,8	5,9	5,10	5,11	1,12		
190	J.08	g.43	193	1,3	1,5	1,6	2,3	2,5	2,6	3,6	4,6	4,7	4,8	4,9	5,10	5,11	1,12		
191	C.08	c.58	194	1,5	1,6	2,3	2,4	2,5	2,6	3,6	4,6	3,7	3,8	4,9	4,10	5,11	1,12		
192	A.12	b.10	168	1,3	1,4	2,4	2,5	2,6	3,4	4,6	5,6	3,7	5,8	5,9	6,10	1,11	2,12		
193	C.11	c.63	169	1,2	1,4	1,6	2,4	2,6	3,5	3,6	5,6	2,7	3,8	3,9	4,10	5,11	5,12		
194	I.08	d.11	170	1,2	1,5	1,6	2,5	2,6	3,4	3,6	4,6	3,7	3,8	4,9	4,10	5,11	5,12		
195	G.09	f.25	180	1,2	1,3	1,4	1,6	2,3	2,4	3,6	5,6	3,7	4,8	5,9	5,10	5,11	6,12		
196	J.06	g.20	181	1,2	1,4	1,6	2,5	2,6	3,4	3,6	4,6	3,7	3,8	4,9	5,10	5,11	5,12		
197	J.07	g.21	182	1,3	1,5	1,6	2,3	2,4	2,6	3,6	4,6	4,7	4,8	5,9	5,10	5,11	1,12		
198	J.04	g.19	183	1,2	1,3	1,4	1,6	2,3	2,6	4,6	5,6	3,7	4,8	4,9	5,10	5,11	5,12		
199	C.09	c.57	184	1,3	1,4	1,6	2,3	2,5	2,6	3,6	4,6	3,7	4,8	4,9	5,10	5,11	1,12		
200	I.06	d.16	200	1,2	1,3	1,4	1,6	2,5	2,6	3,6	4,6	3,7	3,8	4,9	4,10	5,11	5,12		
201	J.05	g.45	201	1,2	1,4	1,6	2,4	2,6	3,5	3,6	4,6	3,7	3,8	4,9	5,10	5,11	5,12		
202	L.14	e.7	202	1,2	1,3	1,5	1,6	2,3	2,6	3,6	4,6	4,7	4,8	4,9	5,10	5,11	5,12		
203	A.10	b.32	203	1,3	1,4	1,6	2,4	2,5	3,4	3,6	4,6	3,7	5,8	5,9	6,10	1,11	2,12		
204	A.01	a.5	204	1,3	1,4	1,5	2,4	2,5	2,6	3,5	3,6	4,6	3,7	4,8	5,9	6,10	1,11	2,12	
205	C.05	c.52	205	1,3	1,4	1,5	1,6	2,4	2,6	3,5	3,6	4,6	2,7	2,8	3,9	4,10	5,11	5,12	
206	A.09	b.30	206	1,3	1,5	1,6	2,4	2,5	2,6	3,5	3,6	4,6	3,7	4,8	4,9	5,10	1,11	2,12	
207	C.05	c.52	207	1,3	1,4	1,5	1,6	2,4	2,6	3,5	3,6	4,6	2,7	2,8	3,9	4,10	5,11	5,12	
208	I.05	d.4	208	1,2	1,3	1,5	1,6	2,4	2,5	2,6	3,6	4,6	3,7	3,8	4,9	4,10	5,11	5,12	
209	A.08	b.31	209	1,4	1,5	1,6	2,4	2,5	2,6	3,5	3,6	4,6	3,7	3,8	4,9	5,10	1,11	2,12	
210	C.07	c.73	210	1,2	1,5	1,6	2,5	2,6	3,5	3,6	4,5	4,6	2,7	3,8	3,9	4,10	4,11	1,12	
211	C.06	c.74	211	1,4	1,5	1,6	2,3	2,4	2,5	2,6	3,6	4,6	3,7	3,8	4,9	5,10	5,11	1,12	
212	C.04	c.75	212	1,4	1,5	1,6	2,4	2,5	2,6	3,4	3,6	4,6	3,7	3,8	5,9	5,10	1,11	2,12	
213	G.07	g.34	213	1,3	1,4	1,6	2,4	2,5	2,6	3,4	3,6	4,6	3,7	5,8	5,9	5,10	1,11	2,12	
214	C.03	c.76	214	1,2	1,4	1,5	1,6	2,4	2,6	3,5	3,6	4,6	2,7	3,8	3,9	4,10	5,11	5,12	
215	J.03	g.46	215	1,2	1,4	1,5	1,6	2,4	2,5	2,6	3,6	4,6	3,7	3,8	3,9	4,10	5,11	5,12	
216	G.08	f.31	216	1,3	1,4	1,6	2,3	2,4	2,5	2,6	3,6	4,6	3,7	4,8	5,9	5,10	5,11	1,12	
217	A.07	b.29	—	1,3	1,4	1,6	2,4	2,5	2,6	3,5	3,6	4,6	3,7	4,8	5,9	5,10	1,11	2,12	
218	A.02	a.6	217	1,4	1,5	1,6	2,4	2,5	2,6	3,4	3,5	3,6	4,7	5,8	6,9	1,10	2,11	3,12	