- 0.75

- 0.50

- 0.25

- 0.00

- **-**0.25

- -0.50

- -0.75

_														
НОМО	1	0.84	-0.059	0.21	-0.36	0.5	-0.32	-0.16	0.025	-0.46	-0.37	-0.31	-0.42	-0.39
LUMO +	0.84	1	0.41	0.46	0.016	0.59	-0.53	-0.26	-0.008	-0.35	-0.27	-0.18	-0.25	-0.35
E_S1	-0.059	0.41	1	0.51	0.8	0.19	-0.55	0.01	-0.29	0.15	0.058	0.2	0.24	-0.11
f_S1	0.21	0.46	0.51	1	0.15	0.53	-0.35	-0.069	-0.016	0.065	-0.12	-0.27	0.22	-0.14
E_T1	-0.36	0.016	0.8	0.15	1	-0.44	-0.15	0.17	-0.28	0.28	0.13	0.34	0.23	-0.065
dEST	0.5	0.59	0.19	0.53	-0.44	1	-0.59	-0.26	0.034	-0.24	-0.13	-0.26	-0.0084	-0.053
RDKit_7 RDKit_6 RDKit_5 RDKit_4 RDKit_3 RDKit_2 RDKit_1 RDKit_0	-0.32	-0.53	-0.55	-0.35	-0.15	-0.59	1	-1.1e-14	5.7e-15	-1.5e-16	1.9e-17	2.3e-16	-3.7e-17	-2.7e-16
	-0.16	-0.26	0.01	-0.069	0.17	-0.26	-1.1e-14	1	4.9e-16	-6e-16	-2.3e-16	-1.2e-16	5.6e-16	-3.4e-16
	0.025	-0.008	-0.29	-0.016	-0.28	0.034	5.7e-15	4.9e-16	1	-8.7e-17	-3.4e-16	-8.9e-17	1.7e-16	-1.1e-17
	-0.46	-0.35	0.15	0.065	0.28	-0.24	-1.5e-16	-6e-16	-8.7e-17	1	5.3e-16	3.2e-17	-8.7e-16	8.3e-16
	-0.37	-0.27	0.058	-0.12	0.13	-0.13	1.9e-17	-2.3e-16	-3.4e-16	5.3e-16	1	3.9e-16	2.1e-18	2.6e-16
	-0.31	-0.18	0.2	-0.27	0.34	-0.26	2.3e-16	-1.2e-16	-8.9e-17	3.2e-17	3.9e-16	1	-4.1e-16	5.5e-16
	-0.42	-0.25	0.24	0.22	0.23	-0.0084	-3.7e-17	5.6e-16	1.7e-16	-8.7e-16	2.1e-18	-4.1e-16	1	1.1e-16
	-0.39	-0.35	-0.11	-0.14	-0.065	-0.053	-2.7e-16	-3.4e-16	-1.1e-17	8.3e-16	2.6e-16	5.5e-16	1.1e-16	1
B.	НОМО	LUMO	E_S1	f_S1	E_T1	dEST	RDKit_0	RDKit_1	RDKit_2	RDKit_3	RDKit_4	RDKit_5	RDKit_6	RDKit_7