

```
1
2 T_calc =
3
4     -1.0000    -0.0000    -0.0000     1.2500
5      0.0000    -1.0000     0.0000    -0.0000
6     -0.0000     0.0000     1.0000     0.0000
7           0           0           0     1.0000
8
9
10 xyz =
11
12     1.2500     0.0000    -0.0000
13
14
15 fval =
16
17     5.8128e-05
18
19
20 T_calc =
21
22     -1.0000    -0.0000    -0.0000     1.2500
23      0.0000    -1.0000     0.0000    -0.0000
24     -0.0000     0.0000     1.0000     0.0000
25           0           0           0     1.0000
26
27
28 xyz =
29
30     1.2500     0.0000    -0.0000
31
32
33 fval =
34
35     5.8128e-05
36
37
38 T_calc =
```

April 9, 2017

6:35:17 PM

```
39
40     -1.0000    -0.0000     0.0000     1.2500
41      0.0000    -1.0000     0.0000    -0.0000
42      0.0000     0.0000     1.0000    -0.0000
43          0          0          0     1.0000
44
45
46 xyz =
47
48     1.2500     0.0000    -0.0000
49
50
51 fval =
52
53     5.8128e-05
54
55
56 T_calc =
57
58     -1.0000     0.0000     0.0000     1.2500
59     -0.0000    -1.0000    -0.0000     0.0000
60      0.0000    -0.0000     1.0000    -0.0000
61          0          0          0     1.0000
62
63
64 xyz =
65
66     1.2500     0.0000    -0.0000
67
68
69 fval =
70
71     5.8128e-05
72
73
74 T_calc =
75
76     -1.0000    -0.0000    -0.0000     1.2500
```

April 9, 2017

6:35:17 PM

```
77      0.0000    -1.0000    -0.0000    -0.0000
78     -0.0000    -0.0000     1.0000    -0.0000
79         0         0         0         1.0000
80
81
82 xyz =
83
84      1.2500     0.0000    -0.0000
85
86
87 fval =
88
89      5.8128e-05
90
91
92 T_calc =
93
94     -1.0000     0.0000     0.0000     1.2500
95     -0.0000    -1.0000     0.0000     0.0000
96     0.0000     0.0000     1.0000    -0.0000
97         0         0         0         1.0000
98
99
100 xyz =
101
102      1.2500     0.0000    -0.0000
103
104
105 fval =
106
107      5.8128e-05
108
109
110 T_calc =
111
112     -1.0000     0.0000     0.0000     1.2500
113     -0.0000    -1.0000    -0.0000     0.0000
114     0.0000    -0.0000     1.0000     0.0000
```

April 9, 2017

6:35:17 PM

```
115         0         0         0         1.0000
116
117
118 xyz =
119
120     1.2500     0.0000    -0.0000
121
122
123 fval =
124
125     5.8128e-05
126
127
128 T_calc =
129
130     -1.0000     0.0000    -0.0000     1.2500
131     -0.0000    -1.0000    -0.0000     0.0000
132     -0.0000    -0.0000     1.0000     0.0000
133         0         0         0         1.0000
134
135
136 xyz =
137
138     1.2500     0.0000    -0.0000
139
140
141 fval =
142
143     5.8128e-05
144
145
146 T_calc =
147
148     -1.0000     0.0000     0.0000     1.2500
149     -0.0000    -1.0000    -0.0000    -0.0000
150     0.0000    -0.0000     1.0000    -0.0000
151         0         0         0         1.0000
152
```

April 9, 2017

6:35:17 PM

```
153
154 xyz =
155
156     1.2500     0.0000    -0.0000
157
158
159 fval =
160
161     5.8128e-05
162
163 >>
```