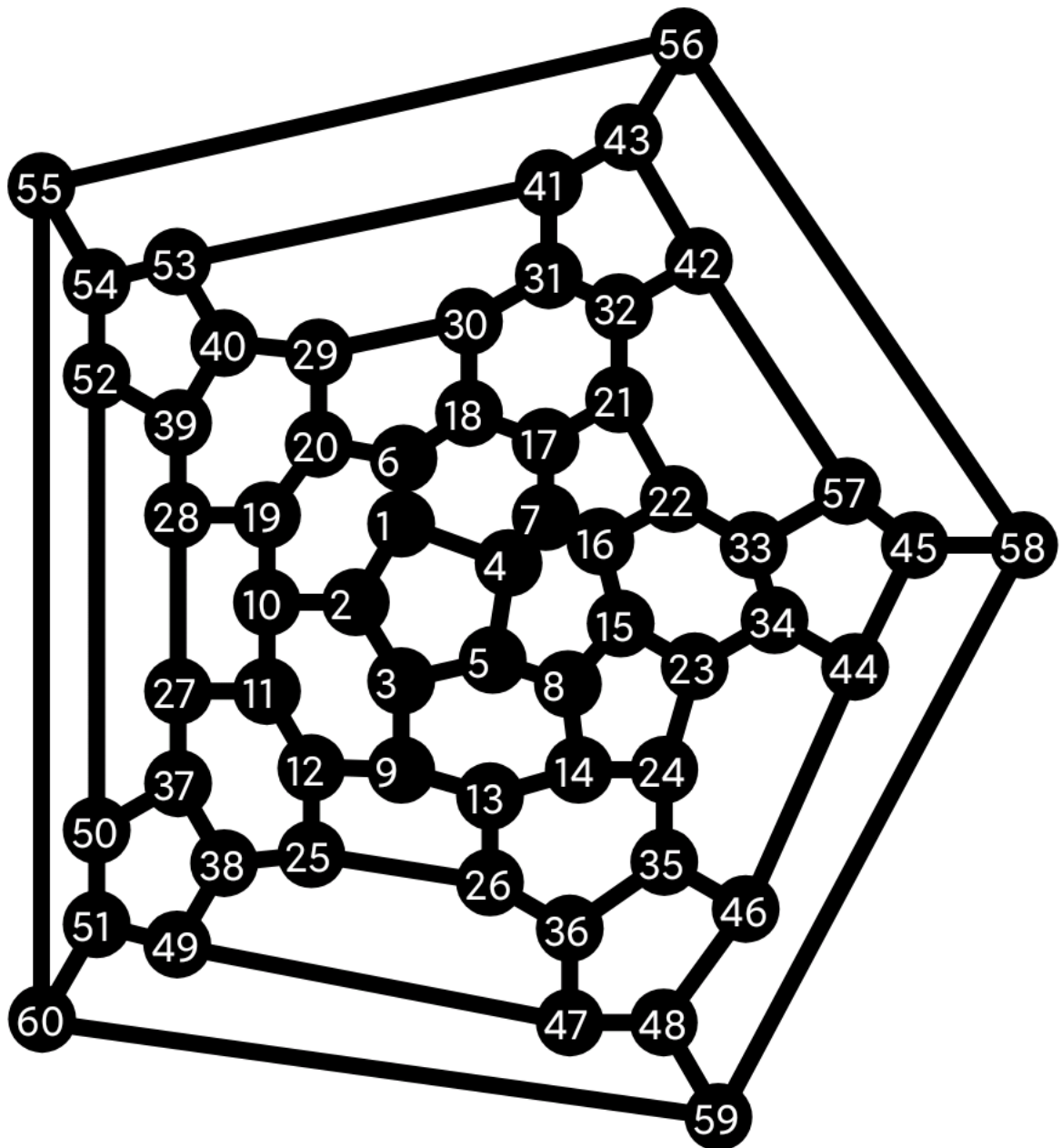


Report generated by:root, 17.02.2020 - 16:20:40

[illegible]

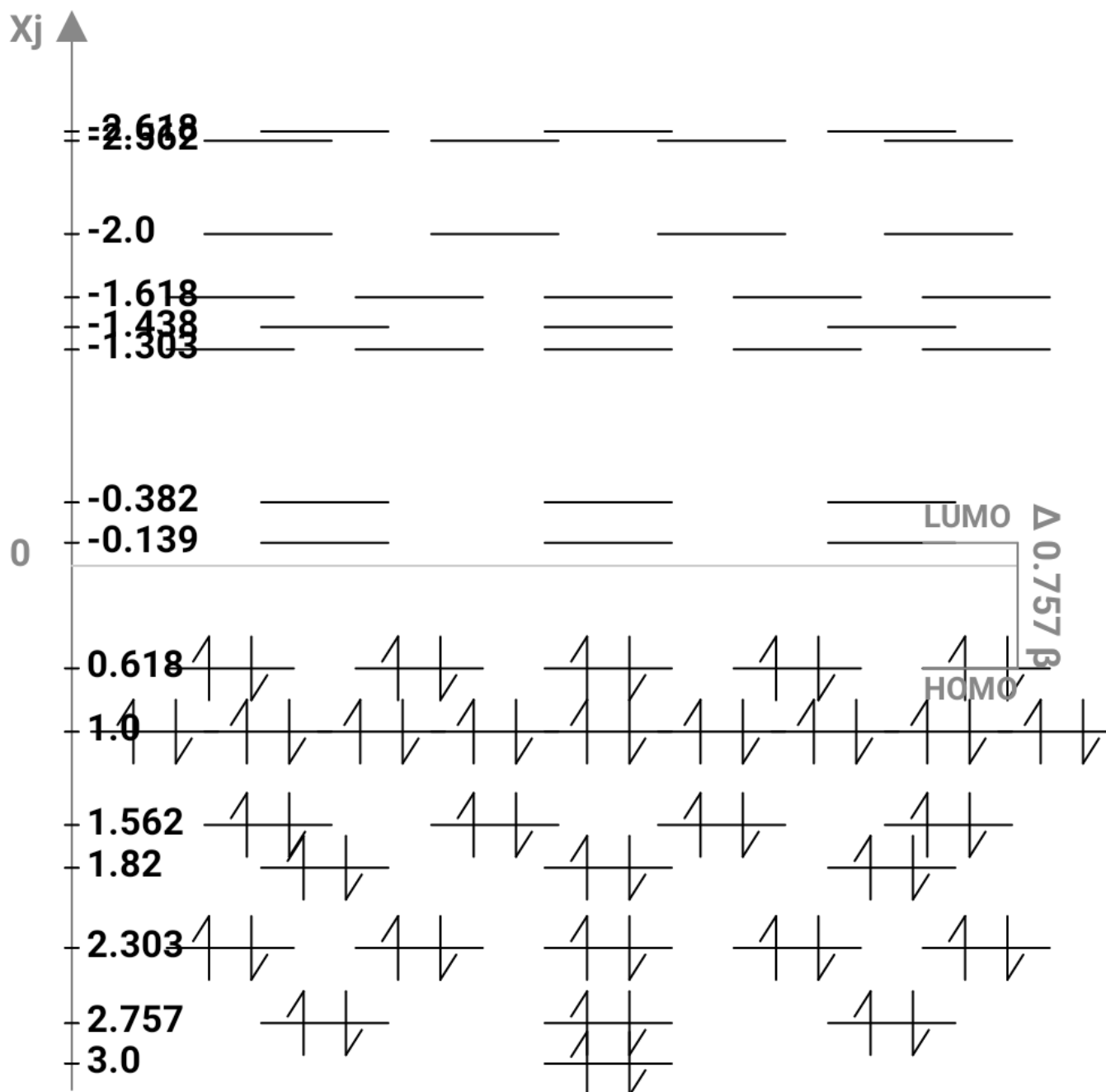
Page 2 of 53

Page 3 of 53



1. Energy-eigenvalues

1.1. Calculated values:



total Power E_π : $60\alpha + 93.168\beta$ -

this corresponds to one π electron: 1.553β

2.1. Calculated values:

[illegible]

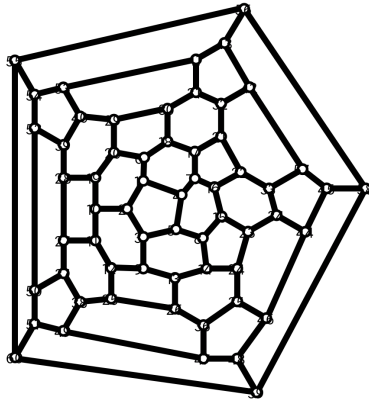
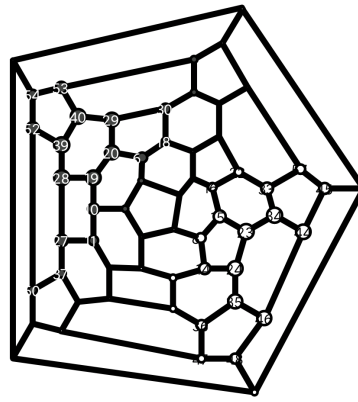
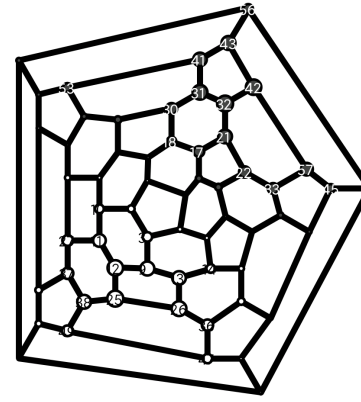
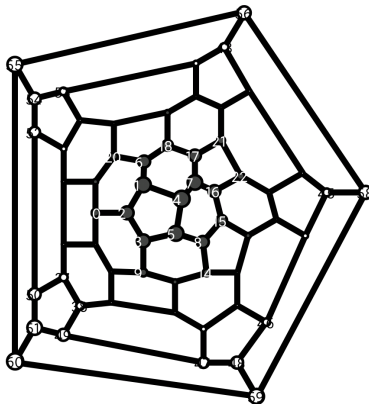
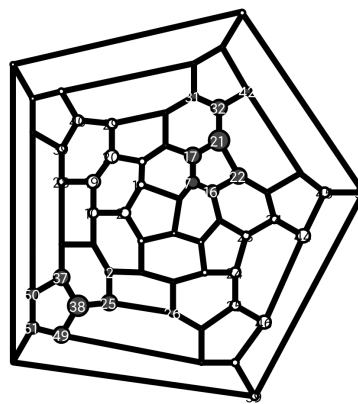
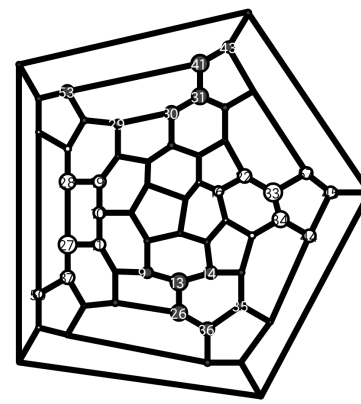
	Ps i 1	Ps i 2	Ps i 3	Ps i 4	Ps i 5	Ps i 6	Ps i 7	Ps i 8	Ps i 9	Ps i 10	Ps i 11	Ps i 12	Ps i 13	Ps i 14	Ps i 15	Ps i 16	Ps i 17	Ps i 18	Ps i 19	Ps i 20	Ps i 21	Ps i 22	Ps i 23	Ps i 24	Ps i 25	Ps i 26	Ps i 27	Ps i 28	Ps i 29	Ps i 30	Ps i 31	Ps i 32	Ps i 33	Ps i 34	Ps i 35	Ps i 36	Ps i 37	Ps i 38	Ps i 39	Ps i 40	Ps i 41	Ps i 42	Ps i 43	Ps i 44	Ps i 45	Ps i 46	Ps i 47	Ps i 48	Ps i 49	Ps i 50	Ps i 51	Ps i 52	Ps i 53	Ps i 54	Ps i 55	Ps i 56	Ps i 57	Ps i 58	Ps i 59	Ps i 60
11	0.12 9	-0.12 9	0.17 6	-0.04 8	-0.00 6	0.16 3	0.19 8	-0.08 7	0.1 2	0.11 2	0.19 2	-0.02 7	0.03 3	-0.02 5	-0.12 1	-0.22 4	-0.17 8	0.00 3	-0.08 1	0.03 4	-0.13 3	-0.04 1	-0.19 4	-0.20 7	0.10 3	0.05 3	0.12 2	0.04 7	0.02 9	0.03 8	0.04 8	0.13 2	0.0 0	-0.04 7	0.04 6	0.24 6	0.07 4	-0.11 4	-0.19 2	0.02 3	-0.11 2	-0.19 1	0.16 1	-0.08 2	-0.00 7	0.11 9	0.14 9	-0.03 4	0.08 9	-0.18 8	-0.15 1	0.13 3	0.15 7	-0.03 7	0.09 1	-0.05 5	0.19 7			
12	0.12 9	-0.21 5	0.04 8	-0.00 3	-0.10 3	0.21 5	-0.12 6	0.09 8	0.11 9	-0.06 4	-0.08 8	0.02 9	-0.09 6	-0.02 2	-0.22 3	0.05 6	-0.18 1	-0.02 2	-0.05 1	-0.05 1	-0.17 7	-0.23 9	0.06 1	0.12 6	0.09 6	0.03 3	0.12 8	0.02 12	-0.19 7	0.09 4	0.04 7	0.18 18	-0.13 2	0.0 0	-0.09 3	-0.26 7	0.00 2	0.05 7	0.07 1	-0.18 3	-0.10 7	0.06 8	-0.17 2	-0.08 2	0.12 4	-0.16 3	0.18 3	0.02 6	0.08 5	-0.13 7	-0.16 2	-0.02 6	0.09 1	-0.05 5	0.19 7					
13	0.12 9	0.09 4	0.18 9	-0.07 4	-0.01 9	0.23 4	0.03 9	-0.13 2	0.09 7	0.13 8	-0.11 9	-0.13 1	-0.05 1	-0.06 1	-0.04 2	0.24 2	-0.13 3	-0.13 3	-0.05 9	0.08 1	0.15 7	0.11 1	-0.00 8	-0.19 5	0.00 6	0.19 5	-0.06 8	-0.06 7	0.19 2	-0.05 9	-0.12 5	0.17 5	0.16 3	-0.11 2	0.0 0	-0.14 2	0.07 2	-0.00 6	0.23 6	-0.03 3	-0.18 4	0.12 3	-0.16 6	0.03 9	0.15 9	0.16 4	-0.06 4	0.14 4	-0.16 2	0.20 9	-0.12 3	-0.06 7	0.13 7	-0.07 3	0.16 1					
14	0.12 9	0.15 7	0.12 5	-0.10 5	0.08 1	-0.17 7	-0.14 2	0.07 6	0.17 3	0.00 3	0.13 8	-0.04 6	0.01 3	-0.08 3	0.24 3	-0.16 3	0.06 4	-0.14 1	0.02 8	0.00 7	-0.10 3	-0.07 4	-0.28 4	0.22 3	0.10 3	0.10 2	-0.11 03	0.11 2	0.00 2	0.05 6	0.21 5	0.10 5	-0.16 3	0.11 2	-0.12 2	0.03 2	0.16 2	0.15 2	-0.13 4	-0.21 1	0.02 3	-0.07 5	0.19 5	-0.02 8	0.12 9	-0.10 1	-0.13 3	0.15 2	0.01 7	0.14 2	-0.20 2	0.01 8	-0.10 9	0.11 6	-0.13 7	0.07 3	0.16 1			
15	0.12 9	0.16 7	-0.01 2	-0.14 8	0.00 7	0.06 4	-0.25 2	-0.12 5	0.16 3	0.07 7	0.13 2	0.15 1	0.03 8	0.15 4	0.13 7	-0.17 9	-0.04 9	-0.15 9	-0.10 2	0.17 1	-0.03 9	-0.01 3	-0.14 1	0.17 7	-0.07 1	-0.02 8	-0.27 7	0.00 8	-0.00 5	0.17 1	0.00 3	-0.14 5	0.01 2	0.15 9	0.05 9	0.10 7	-0.20 4	0.04 6	-0.02 5	-0.07 3	-0.21 5	0.02 3	0.24 3	0.08 6	0.11 6	-0.06 3	0.18 3	0.02 6	0.08 3	-0.10 5	0.17 8	0.11 4	0.15 9							
16	0.12 9	0.11 6	-0.09 3	-0.16 7	-0.16 5	0.13 3	-0.18 8	-0.03 9	0.09 5	0.13 1	-0.11 3	0.05 7	0.19 4	-0.11 4	-0.09 7	-0.15 8	-0.11 8	-0.23 8	-0.06 4	0.15 1	-0.11 3	0.05 6	0.12 8	0.10 7	0.06 6	-0.17 6	-0.18 3	-0.08 9	-0.09 8	-0.01 7	-0.06 2	0.03 1	0.19 7	0.14 1	0.15 1	0.0 0	-0.09 8	0.02 2	0.09 9	-0.12 6	-0.05 2	0.18 3	-0.01 8	0.11 7	-0.09 5	-0.11 3	-0.19 6	-0.11 4	-0.15 9	-0.11 9										
17	0.12 9	-0.01 2	-0.14 8	-0.16 7	-0.21 8	0.00 8	-0.04 8	0.16 5	-0.08 6	0.09 9	0.07 9	-0.18 9	0.07 8	-0.22 7	0.02 8	-0.04 2	0.06 4	0.27 2	0.07 3	-0.11 2	0.04 6	-0.18 5	0.10 5	-0.16 6	-0.19 5	-0.02 3	0.03 3	0.12 7	0.17 4	0.10 7	0.09 7	0.01 2	0.21 9	0.06 5	-0.15 3	0.05 6	0.12 8	-0.19 8	0.04 6	0.09 4	0.04 3	0.06 9	-0.12 2	0.24 2	0.06 2	-0.15 2	0.01 7	-0.03 3	-0.17 6	0.10 5	-0.19 4	0.02 4								
18	0.12 9	-0.10 6	-0.13 8	-0.14 9	-0.05 8	0.08 7	0.26 6	-0.03 3	0.16 9	-0.14 6	0.00 1	-0.10 7	0.05 7	-0.22 6	-0.02 8	0.06 8	0.15 3	-0.12 8	0.14 2	-0.08 2	0.26 1	0.08 2	-0.26 2	0.07 4	-0.26 7	-0.08 3	-0.00 5	-0.09 7	-0.14 1	-0.14 4	0.01 2	0.21 9	0.02 3	-0.05 9	-0.00 4	-0.18 7	-0.06 5	-0.21 1	-0.00 8	-0.23 3	-0.08 3	-0.09 1	0.14 9	-0.03 4	0.08 9	-0.07 7	0.17 6	-0.16 8	0.10 5	-0.19 4	0.02 4									
19	0.12 9	-0.20 2	0.06 4	-0.07 3	0.18 2	0.17 5	0.07 7	0.09 4	0.12 7	0.17 4	0.04 9	-0.04 9	-0.07 4	0.20 7	0.12 6	0.03 3	0.05 3	-0.02 1	0.03 7	-0.16 6	0.18 1	0.02 2	-0.20 3	-0.11 1	0.18 5	-0.14 4	-0.08 7	-0.13 5	-0.10 7	0.16 3	-0.11 2	0.23 8	-0.06 4	-0.12 4	0.0 0	-0.19 1	0.04 9	-0.00 4	-0.17 4	0.12 4	-0.01 9	-0.02 6	-0.00 9	0.04 3	-0.28 3	0.01 4	0.14 4	-0.14 2	0.07 5	-0.23 8	-0.01 8	-0.13 3	0.10 2							
20	0.12 9	-0.19 5	-0.03 2	-0.10 5	0.17 8	0.01 5	0.21 8	0.05 8	0.17 9	-0.11 5	0.06 9	-0.04 4	-0.03 6	0.23 6	0.09 8	-0.02 7	-0.02 7	-0.06 1	-0.18 2	0.10 1	-0.19 1	0.22 8	-0.07 2	-0.21 8	0.07 3	0.12 3	0.04 7	-0.11 7	-0.04 7	0.21 5	-0.10 5	0.16 3	0.11 2	-0.10 4	-0.19 1	-0.00 1	-0.16 4	-0.07 7	-0.20 4	0.0 0	-0.16 5	-0.04 2	0.12 5	-0.15 3	0.18 3	-0.01 8	0.11 7	-0.09 8	0.00 1	0.11 2	0.13 8	0.14 3	-0.10 2							
21	0.12 9	0.03 6	-0.19 1	-0.11 8	-0.27 8	0.04 4	0.01 2	0.05 3	0.02 4	0.16 1	-0.15 3	-0.08 8	-0.18 6	-0.11 6	0.12 8	0.14 5	0.19 4	0.09 4	0.16 3	-0.10 2	0.14 6	-0.02 5	0.13 2	-0.05 5	0.05 9	-0.26 7	0.03 8	0.21 2	-0.02 8	0.01 1	0.13 1	-0.18 1	-0.12 9	0.20 1	0.12 7	0.02 9	-0.20 8	0.07 5	-0.20 6	0.05 3	0.12 4	0.11 7	-0.16 9	0.16 9	0.18 4	0.03 6	0.05 6	-0.01 3	0.24 8	0.05 8	-0.17 5	0.1 1	-0.09 7							
22	0.12 9	0.11 5	-0.15 7	-0.11 2	-0.21 2	0.18 5	-0.05 4	0.03 6	0.02 7	0.05 7	-0.21 5	-0.01 1	-0.16 2	-0.12 2	0.01 3	-0.10 2	-0.11 3	-0.10 6	0.07 9	0.11 5	-0.15 1	0.26 9	0.03 1	0.26 6	0.00 1	0.23 1	-0.05 2	0.09 1	-0.13 8	-0.09 2	-0.01 2	-0.13 1	-0.18 1	-0.02 3	-0.21 6	-0.00 6	-0.16 8	-0.08 9	-0.11 3	0.18 7	0.04 7	-0.21 1	-0.09 3	-0.12 2	-0.18 3	0.08 2	-0.15 8	0.12 1	0.03 7	-0.07 4	0.17 6	0.03 4	0.13 4							
23	0.12 9	0.21 1	-0.00 5	-0.07 4	0.11 7	0.08 7	-0.20 7	-0.07 7	0.12 4	0.12 6	-0.18 2	-0.08 4	-0.06 4	-0.01 7	-0.23 5	-0.26 1	-0.15 8	-0.16 4	0.09 5	-0.05 9	0.04 6	-0.09 2	-0.08 3	0.09 8	-0.05 7	0.04 4	-0.02 7	0.01 7	-0.13 2	-0.17 6	-0.18 7	-0.05 2	-0.11 9	-0.12 9	-0.09 6	-0.01 5	-0.13 6	0.15 9	0.11 5	-0.07 1	-0.22 9	0.15 3	-0.04 8	-0.18 3	-0.15 2	-0.18 3	0.05 8	-0.06 5	-0.19 4	-0.10 9	-0.01 9	0.1 1								

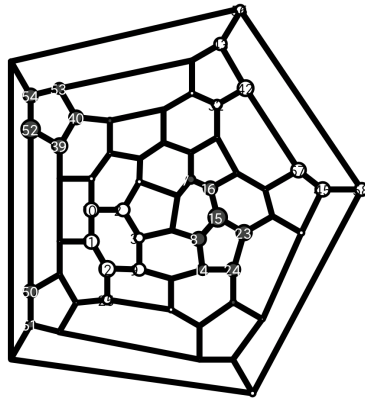
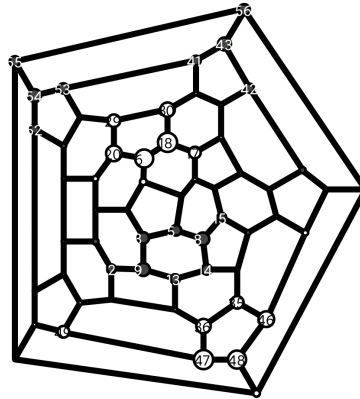
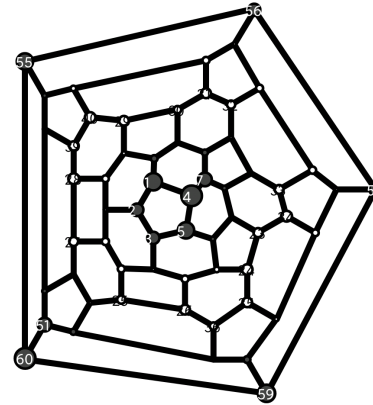
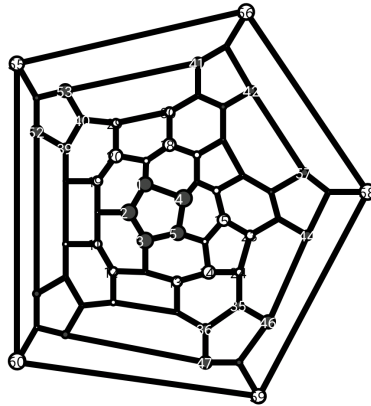
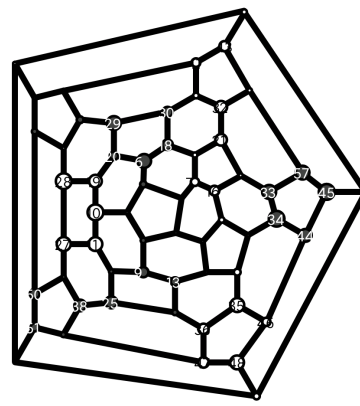
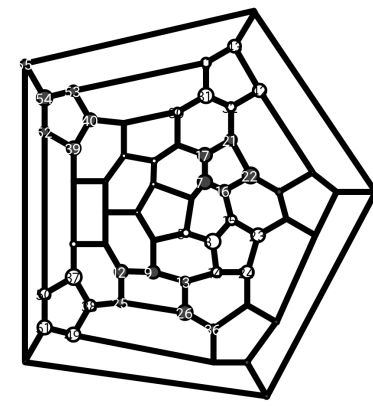
	Ps i 1	Ps i 2	Ps i 3	Ps i 4	Ps i 5	Ps i 6	Ps i 7	Ps i 8	Ps i 9	Ps i 10	Ps i 11	Ps i 12	Ps i 13	Ps i 14	Ps i 15	Ps i 16	Ps i 17	Ps i 18	Ps i 19	Ps i 20	Ps i 21	Ps i 22	Ps i 23	Ps i 24	Ps i 25	Ps i 26	Ps i 27	Ps i 28	Ps i 29	Ps i 30	Ps i 31	Ps i 32	Ps i 33	Ps i 34	Ps i 35	Ps i 36	Ps i 37	Ps i 38	Ps i 39	Ps i 40	Ps i 41	Ps i 42	Ps i 43	Ps i 44	Ps i 45	Ps i 46	Ps i 47	Ps i 48	Ps i 49	Ps i 50	Ps i 51	Ps i 52	Ps i 53	Ps i 54	Ps i 55	Ps i 56	Ps i 57	Ps i 58	Ps i 59	Ps i 60
24	0.12 9	0.20 4	0.07 7	0.04 8	0.14 08 3	-0.18 7	-0.01 6	0.14 7	0.10 3	0.09 4	0.17 5	-0.22 9	0.02 6	-0.11 7	0.00 4	-0.04 8	-0.07 8	0.09 9	0.33 1	0.09 2	-0.08 8	0.05 2	0.01 5	0.01 5	0.00 9	0.01 1	0.17 1	-0.16 4	-0.16 5	-0.14 4	0.16 4	0.04 7	-0.13 2	-0.18 0	0.27 7	-0.00 7	-0.04 2	0.06 8	0.01 2	0.19 4	0.00 4	-0.11 1	0.05 5	0.08 6	-0.20 3	0.10 8	0.14 4	0.16 9	0.18 4	0.03 6	0.05 6	0.22 2	0.11 4	0.05 8	-0.03 4	0.20 4	0.02 2	-0.08 8		
25	0.12 9	0.00 4	0.22 2	0.02 6	-0.21 2	-0.09 9	-0.02 3	0.11 4	0.08 7	-0.16 6	0.12 5	0.00 5	0.16 8	0.11 6	0.15 8	0.32 2	0.05 0	-0.07 2	0.01 4	-0.10 8	-0.14 1	0.04 1	0.06 2	-0.03 3	0.11 7	-0.24 6	0.08 4	-0.00 2	-0.00 8	-0.01 3	0.22 3	0.01 6	-0.01 1	0.13 1	0.18 1	0.03 6	0.14 8	-0.05 3	-0.17 1	0.16 8	-0.01 3	0.04 8	0.21 8	0.03 9	0.15 5	0.05 5	0.08 0	-0.21 8	-0.00 3	-0.18 3	-0.15 2	-0.01 1	0.06 8	0.24 5	0.03 6	0.17 5	-0.01 1	0.09 7		
26	0.12 9	0.08 7	0.20 6	0.00 9	-0.10 7	-0.21 9	0.07 1	0.02 7	0.13 5	0.05 8	-0.07 4	0.20 14 5	0.10 3	0.15 6	0.10 4	0.12 2	0.03 8	-0.18 8	-0.09 6	-0.13 7	0.22 4	-0.02 2	-0.13 7	0.02 8	0.10 8	0.12 7	-0.09 1	0.12 1	0.18 0	-0.16 7	0.08 5	-0.12 2	0.18 7	0.05 1	0.11 5	0.17 6	-0.12 6	-0.06 7	0.13 1	-0.12 1	0.15 5	0.04 9	-0.15 3	0.01 2	0.02 7	-0.13 4	-0.21 7	0.13 2	0.0 0	0.00 2	0.25 1	0.05 9	-0.13 4	-0.02 5	-0.21 9	-0.01 3	0.19 7	0.10 4		
27	0.12 9	-0.16 5	0.14 9	0.02 6	-0.04 9	0.24 6	0.04 7	0.12 4	0.06 9	0.19 4	0.08 7	0.04 9	0.18 4	-0.17 5	0.00 7	-0.16 1	0.06 6	0.03 7	-0.02 1	-0.11 5	0.29 3	-0.11 8	0.06 7	0.01 6	-0.13 5	0.22 3	0.03 1	-0.00 8	-0.17 9	0.13 4	0.01 6	0.01 1	0.13 1	0.18 1	0.18 7	0.04 5	-0.10 5	-0.17 7	0.06 3	0.04 5	0.00 3	0.21 9	0.01 2	-0.13 5	-0.04 9	-0.04 9	0.01 5	0.03 7	-0.21 1	0.14 1	0.17 8	0.02 4	-0.18 2	0.05 2	-0.17 6	-0.03 4	-0.13 4			
28	0.12 9	-0.07 9	0.00 9	0.10 6	0.21 9	-0.03 7	-0.02	0.15	0.04 1	0.21 8	-0.02 9	0.05 3	0.11 1	0.01	0.22 7	0.13	-0.04	0.22 4	-0.13 3	-0.09 8	0.18 3	0.10 7	0.00 5	-0.10 4	0.05 4	-0.13 3	-0.13 9	0.02 1	0.18 6	-0.12 2	0.18 7	-0.11 2	0.11 4	-0.17 4	0.11 8	0.05 1	0.15 1	0.12 1	0.01 4	0.15 9	-0.15 6	-0.03 9	0.13 2	0.19 8	0.15 5	0.0 0	0.00 2	0.25 1	0.05 9	-0.16 7	-0.16 8	0.10 2	-0.02 1	0.19 4	0.10 9	0.01 9				
29	0.12 9	-0.19 6	-0.09 6	-0.08	0.13 2	-0.10 8	-0.07 7	0.17 4	0.13 1	0.11 4	-0.00 5	0.22 7	-0.03 7	0.11 7	0.01 1	-0.14 6	0.01 5	-0.01 9	0.09 5	-0.10 1	-0.15 2	0.00 5	0.20 8	0.20 7	-0.06 1	0.15 4	0.04 5	0.22 9	-0.05 8	0.10 5	0.04 1	0.13 2	0.18	0.0 0	-0.10 3	0.01 3	-0.07 5	0.25 5	-0.18 7	0.11 6	0.20 5	-0.11 7	-0.04 6	0.06 1	0.14 7	-0.18 3	-0.03 8	0.08 2	-0.15 8	0.18 5	0.14 7	0.09 7	-0.03 5	-0.20 4	-0.02 8	0.08				
30	0.12 9	-0.14 1	-0.15 7	-0.07 4	-0.18 5	-0.00 6	0.2	0.10 3	0.12 7	-0.11 4	0.17 5	-0.05 3	-0.17 8	-0.07	0.12	-0.05 7	-0.05 5	-0.10 9	0.12 5	0.05 8	0.14 8	0.07 6	0.26 1	0.19 7	0.02 2	0.07 4	-0.18 7	0.08 9	0.10 5	-0.08 1	0.17 6	-0.12 5	0.18 1	0.05 1	-0.11 2	0.06 2	0.05 9	-0.00 1	0.17 7	-0.06 5	0.12 4	-0.23 3	-0.00 3	-0.11 1	0.05 9	0.01 7	0.03 5	-0.21 1	0.14 5	-0.15 2	-0.19 2	0.05 6	0.19 3	-0.10 7	-0.04					
31	0.12 9	-0.08 7	-0.20 6	-0.00 9	-0.10 7	-0.21 9	0.07 1	0.02 7	0.13 7	0.07 8	0.20 4	0.14 5	-0.10 3	-0.15 6	-0.10 4	0.12 2	0.03 8	-0.18 8	0.09 6	0.13 7	0.22 4	0.02 2	0.10 8	0.12 7	0.09 1	-0.12 1	0.16 7	-0.18 5	0.12 2	-0.18 7	0.05 1	0.11 1	0.17 5	-0.12 6	-0.13 6	0.07 7	-0.12 1	0.15 9	0.04 3	0.15 2	-0.01 7	0.13 4	0.21 7	-0.13 2	0.0 0	0.00 2	0.25 1	0.05 9	0.13 4	0.02 5	0.21 9	0.01 3	-0.19 7	0.10 4						
32	0.12 9	-0.00 4	-0.22 2	-0.02 6	-0.21 2	-0.09 9	0.12 9	0.11 4	0.16 7	0.12 5	0.00 6	-0.16 8	-0.11 6	0.15 8	0.32 2	0.05	-0.07 2	0.01 4	-0.10 8	-0.14 1	0.04 1	0.06 2	0.03 3	0.11 7	0.24 6	-0.08 4	0.04 2	-0.00 8	0.01 3	-0.22 3	-0.01 6	0.13 1	0.18 6	0.03 8	0.14 3	-0.05 3	-0.17 1	0.16 8	0.01 3	-0.04 8	-0.21 8	-0.15 9	-0.05 5	-0.08 8	0.21 3	-0.00 3	-0.18 3	-0.15 2	0.02 1	-0.06 8	-0.24 5	0.03 6	0.17 5	-0.01 7	0.09					
33	0.12 9	0.16 5	-0.14 9	-0.02 6	-0.04 9	0.24 6	0.04 7	0.12 4	-0.06 9	-0.19 4	0.08 7	0.04 9	-0.18 4	0.17 5	0.00 7	-0.16 1	0.06 6	0.03 7	-0.02 1	-0.11 5	0.29 3	-0.11 8	0.06 7	0.01 6	0.12 5	-0.22 3	-0.03 1	0.00 8	0.17 9	-0.13 4	-0.01 6	0.13 1	0.18 1	0.18 7	0.04 5	-0.10 5	-0.17 7	0.06 3	-0.04 5	-0.21 9	0.13 5	0.04 9	-0.04 9	0.24 5	0.01 7	0.03 5	-0.21 1	0.14 4	-0.17 1	-0.02 8	0.18 4	-0.05 2	-0.17 6	-0.03 4	-0.13 4					
34	0.12 9	0.20 9	-0.07 8	-0.00 9	0.10 6	0.21 9	-0.03 7	0.15	-0.04 1	-0.21 8	0.02 9	-0.05 3	-0.11 1	-0.01	-0.22 7	0.13	-0.04	0.22 4	-0.13 3	0.09 8	0.18 3	0.10 7	0.00 5	-0.09 4	0.05 4	0.13 3	0.13 9	0.18	-0.02 1	-0.18 6	0.12 2	0.18 7	-0.05 1	0.11 2	-0.17 4	0.11 8	0.05 1	0.15 1	0.12 1	-0.15 9	0.15 6	0.03 9	-0.13	-0.19 8	-0.15 5	0.0 0	0.00 2	0.25 1	0.05 9	0.16 7	0.16 8	-0.10 2	0.02 1	0.19 4	0.10 9	0.01				
35	0.12 9	0.19 6	0.09 6	0.04 8	0.13 2	-0.10 8	-0.07 7	0.17 5	0.13 4	-0.11 1	0.19 4	0.00 5	-0.02 7	0.03 7	-0.11 7	-0.01 1	-0.14 6	0.01 5	-0.09 5	-0.10 1	0.15 2	0.00 8	0.20 7	0.20 1	0.06 1	-0.15 4	-0.04 5	-0.22 9	0.05 8	-0.03 9	0.10 2	-0.03 9	0.0 0	-0.10 4	-0.01 3	0.07 5	0.25 5	0.04	-0.18 7	0.11 6	-0.20 5	0.11 7	0.04 6	-0.14 3	-0.18 8	0.08 2	-0.15 5	-0.18 5	-0.14 7	-0.09 7	0.03 5	-0.20 2	-0.02 8	0.08						
36	0.12 9	0.14 1	0.15 7	0.07 4	-0.01 5	-0.18	-0.00 6	0.2	0.10 3	-0.12 7	0.14 4	-0.11 5	0.05 3	0.17	0.07 8	-0.07	0.12	-0.05 7	-0.05 5	-0.10 9	0.12 8	0.14 8	-0.07 6	0.26 1	-0.19 7	-0.02 7	-0.18 4	-0.08 7	-0.10 5	0.17 6	0.18 7	-0.05 1	-0.11 1	-0.12 2	0.06 9	0.05 1	-0.24 7	-0.17 7	-0.06 5	-0.12 4	0.11 3	0.00 3	-0.11 9	0.01 7	0.03 5	-0.21 1	0.14 4	0.15 5	0.05 2	0.19 2	0.05 6	0.19 3	-0.10 7	-0.04						

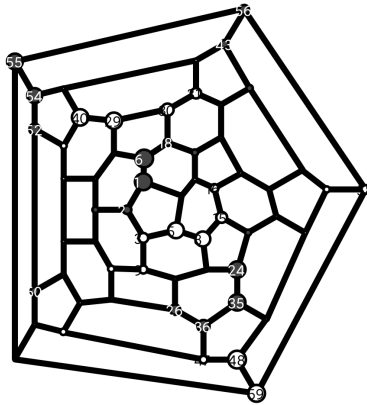
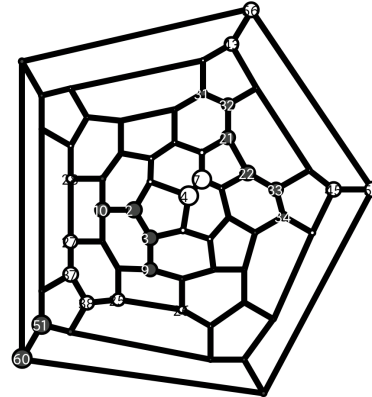
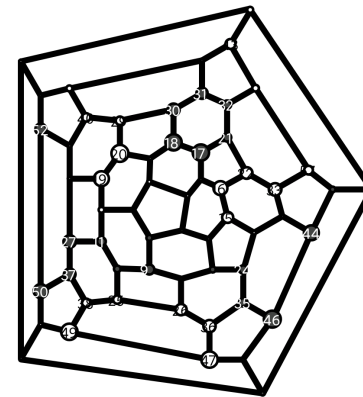
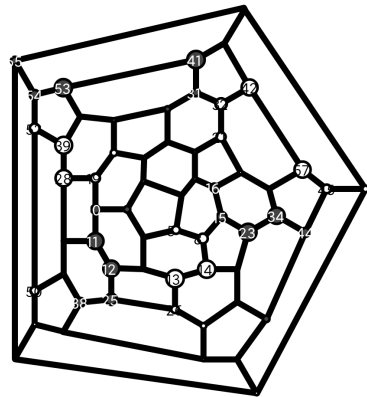
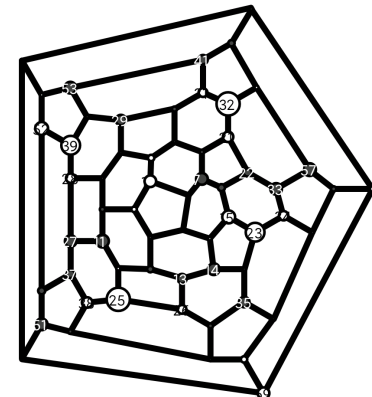
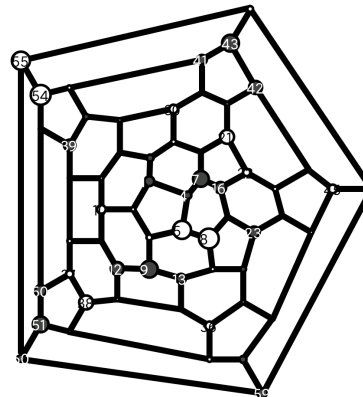
	Ps i 1	Ps i 2	Ps i 3	Ps i 4	Ps i 5	Ps i 6	Ps i 7	Ps i 8	Ps i 9	Ps i 10	Ps i 11	Ps i 12	Ps i 13	Ps i 14	Ps i 15	Ps i 16	Ps i 17	Ps i 18	Ps i 19	Ps i 20	Ps i 21	Ps i 22	Ps i 23	Ps i 24	Ps i 25	Ps i 26	Ps i 27	Ps i 28	Ps i 29	Ps i 30	Ps i 31	Ps i 32	Ps i 33	Ps i 34	Ps i 35	Ps i 36	Ps i 37	Ps i 38	Ps i 39	Ps i 40	Ps i 41	Ps i 42	Ps i 43	Ps i 44	Ps i 45	Ps i 46	Ps i 47	Ps i 48	Ps i 49	Ps i 50	Ps i 51	Ps i 52	Ps i 53	Ps i 54	Ps i 55	Ps i 56	Ps i 57	Ps i 58	Ps i 59	Ps i 60
37	0.12 9	-0.11 5	0.15 7	0.11 2	-0.18 5	-0.05 4	-0.01 7	0.03 6	-0.02 7	-0.05 5	0.21 1	-0.01 1	0.2 2	-0.16 2	-0.01 3	-0.11 3	0.10 2	-0.10 6	0.07 9	0.11 5	0.15 1	-0.03 1	0.26 9	0.00 6	-0.01 5	0.05 2	-0.01 5	-0.09 1	0.13 8	0.19 1	-0.09 2	0.07 2	-0.01 1	-0.13 1	0.18 1	-0.02 3	-0.21 6	0.16 8	0.00 6	-0.08 9	0.11 3	-0.18 7	0.21 1	0.09 9	0.03 1	-0.11 2	0.12 4	-0.18 3	-0.03 8	0.08 2	-0.15 8	-0.12 1	-0.03 7	0.21 3	-0.07 4	0.17 6	0.03 4	0.13 4		
38	0.12 9	-0.03 6	0.19 1	0.11 2	-0.04 4	0.01 2	0.05 3	0.02 8	-0.02 4	-0.16 1	0.15 3	0.04 8	0.18 6	0.11 6	-0.12 8	0.14 5	0.19 4	0.09 4	0.16 3	0.08 8	-0.10 2	-0.02 6	0.14 5	-0.13 2	0.08 5	-0.05 9	0.01 5	-0.26 7	0.03 8	-0.02 8	0.01 1	-0.13 1	0.18 1	-0.12 9	0.20 1	0.12 7	0.02 9	-0.09 8	-0.20 7	0.06 5	-0.05 3	-0.12 4	-0.11 7	-0.12 7	0.16 9	0.09 7	0.16 9	0.18 4	0.03 6	0.05 6	0.04 2	-0.01 3	-0.24 8	-0.05 8	-0.17 5	0.1 5	-0.09 7			
39	0.12 9	-0.21 1	0.00 5	0.07 4	0.11 2	0.08 7	-0.20 7	-0.07 7	0.12 4	-0.02 6	-0.18 5	0.08 4	0.06 4	-0.01 7	0.23 5	0.26 1	-0.15 8	0.16 4	0.09 5	-0.01 9	0.05 6	0.04 5	-0.09 2	0.01 8	0.27 8	-0.05 7	-0.04 4	0.02 7	-0.01 7	0.04 2	-0.13 2	0.17 6	0.18 7	0.05 1	-0.11 2	-0.19 9	-0.12 6	-0.09 5	-0.01 1	0.10 8	-0.15 9	-0.11 5	0.07 1	0.22 9	-0.15 3	0.01 2	-0.04 8	0.00 3	-0.18 3	-0.15 2	0.18 3	-0.05 8	0.06 5	-0.19 4	-0.10 9	-0.01 9				
40	0.12 9	-0.20 4	-0.07 7	0.04 8	0.14 3	-0.08 3	-0.18 7	-0.01 6	0.14 7	-0.10 3	0.09 4	-0.17 5	0.00 9	0.04 8	-0.07 8	0.09 1	0.33 1	-0.09 2	0.09 8	-0.03 2	-0.08 8	0.05 2	0.01 9	-0.00 9	-0.01 1	0.16 4	0.16 5	0.14 4	-0.16 4	-0.13 2	0.0 0	0.27 7	-0.00 7	-0.04 2	0.06 8	0.01 2	-0.19 4	0.00 4	0.11 1	-0.05 5	-0.20 6	0.08 3	-0.10 8	0.16 9	0.18 4	0.03 6	0.05 6	-0.22 2	-0.11 4	0.05 4	0.20 2	0.02 8	-0.08 8							
41	0.12 9	-0.09 4	-0.18 9	0.07 4	-0.01 9	0.23 4	-0.03 2	0.09 7	-0.13 8	0.11 9	0.13 1	0.05 1	0.06 1	0.04 2	-0.24 2	-0.13 3	-0.13 3	0.05 9	0.08 1	0.15 1	0.11 7	0.0 0	-0.00 8	-0.25 6	-0.00 6	-0.19 5	0.06 8	0.06 7	-0.19 2	0.05 2	0.12 9	-0.17 5	0.10 3	-0.16 1	-0.11 2	-0.14 2	0.07 6	-0.00 6	0.23 6	0.03 3	0.18 4	-0.12 3	0.16 6	-0.03 9	-0.16 4	-0.06 4	0.14 4	-0.01 4	0.14 2	-0.16 2	0.05 5	-0.12 3	0.06 7	0.13 7	-0.07 3	-0.16 1				
42	0.12 9	0.04 5	-0.04 8	0.04 3	-0.10 3	0.21 5	-0.12 6	0.09 9	-0.11 4	0.06 8	0.17 8	-0.08 9	0.02 6	0.09 2	0.22 3	0.05 6	-0.18 1	0.02 2	-0.05 2	-0.05 1	-0.17 7	-0.23 9	0.06 1	-0.12 6	-0.09 6	-0.03 3	-0.12 8	-0.03 8	-0.12 6	0.20 6	-0.19 7	-0.09 4	0.18 2	0.13 2	0.0 0	-0.09 3	0.00 2	0.05 7	0.0 0	-0.07 1	0.18 3	0.10 7	0.16 8	-0.17 2	0.08 2	-0.12 4	0.16 3	0.18 3	0.02 3	0.08 6	0.13 5	0.16 2	0.02 6	0.13 7	0.02 1	0.05 5	0.19 7			
43	0.12 9	-0.01 6	-0.19 4	0.11 8	-0.01 9	0.16 7	-0.18 1	0.01 1	0.14 2	0.17 1	-0.11 5	0.18 4	0.13 8	-0.03 5	0.08 9	0.12 5	0.11 9	-0.07 2	0.17 5	0.19 1	0.00 6	-0.08 4	0.05 6	0.11 1	-0.05 2	0.13 3	0.17 3	-0.17 3	0.12 3	0.07 1	0.12 2	0.04 9	-0.18 1	0.13 2	0.15 5	-0.19 6	0.02 3	-0.05 4	-0.10 4	0.19 2	-0.04 7	0.06 2	0.04 9	0.25 2	-0.05 9	0.10 1	0.18 3	-0.01 8	0.11 7	0.02 9	-0.14 9	0.01 2	-0.06 6	0.02 8	0.01 2	0.22 2				
44	0.12 9	0.20 2	-0.06 4	0.07 3	0.18 2	0.17 5	0.07 7	0.09 4	-0.12 9	0.04 9	-0.07 4	0.0 0	-0.20 7	0.12 6	0.03 3	0.05 3	0.02 3	-0.03 8	0.03 7	-0.16 6	0.18 1	0.02 1	-0.20 2	0.09 3	0.11 1	-0.18 5	0.14 4	0.08 7	-0.13 6	0.02 7	0.17 5	0.10 3	-0.16 2	0.23 8	-0.06 4	-0.12 9	-0.00 9	-0.08 4	0.17 4	0.07 4	-0.12 9	0.01 6	0.02 9	0.00 3	-0.28 3	-0.04 3	0.01 4	-0.14 2	-0.07 5	0.01 8	0.06 2	-0.13 8	-0.14 3	0.10 2						
45	0.12 9	0.15 3	-0.12 1	0.11 7	0.13 2	0.16 5	-0.19 2	0.00 8	-0.01 5	-0.21 9	0.08 6	-0.19 8	0.12 1	-0.07 2	0.11 9	-0.14 1	0.10 7	0.03 3	-0.15 8	0.16 3	-0.21 3	-0.03 9	0.09 6	-0.12 4	-0.09 3	-0.12 3	-0.00 7	-0.23 7	-0.00 7	0.21 2	0.07 2	-0.12 2	-0.04 9	-0.18 1	0.03 3	-0.16 3	-0.21 9	0.02 4	0.08 5	-0.16 1	0.14 7	-0.04 8	-0.23 8	-0.01 2	-0.14 1	-0.07 2	-0.15 4	0.01 7	0.14 7	0.02 1	0.05 2	-0.06 9	0.03 2	0.12 2	-0.18 5					
46	0.12 9	0.19 5	0.03 2	0.10 5	0.17 8	0.01 5	0.01 8	-0.21 8	0.05 8	-0.11 5	-0.06 9	0.04 4	0.03 6	-0.23 6	-0.09 8	-0.02 8	-0.02 7	-0.06 1	-0.18 2	0.10 1	-0.19 1	-0.09 8	0.22 0	0.21 8	-0.12 3	-0.04 7	0.11 7	0.04 7	-0.03 7	-0.21 5	0.16 3	0.11 2	-0.10 4	-0.19 1	-0.00 4	-0.16 4	-0.09 7	-0.20 1	0.06 5	0.16 8	-0.12 5	0.12 3	0.15 3	0.18 3	-0.14 3	0.01 8	0.11 7	0.09 8	0.21 1	-0.11 2	0.13 8	0.14 3	-0.10 2							
47	0.12 9	0.10 6	0.13 8	0.14 8	-0.05 9	-0.08 8	-0.00 7	0.26 6	-0.03 3	-0.16 6	0.14 0	-0.10 7	0.22 6	0.02 8	-0.06 8	0.15 4	-0.05 3	0.12 8	0.14 2	0.08 2	-0.26 1	0.08 2	-0.02 2	0.26 2	0.08 7	-0.26 4	0.08 7	0.26 7	0.03 7	-0.00 5	0.09 7	0.14 1	0.14 4	-0.21 2	-0.02 3	-0.05 9	-0.21 4	0.18 7	0.06 5	-0.21 7	0.06 5	0.21 1	0.00 8	0.23 3	0.08 3	0.09 8	0.11 1	0.14 9	-0.03 4	0.08 9	-0.18 8	0.03 9	-0.17 6	-0.10 7	0.19 5	-0.02 4				
48	0.12 9	0.13 9	0.05 3	0.16 7	0.09 6	-0.03 7	0.25 1	-0.09 4	-0.08 5	-0.19 2	0.07 6	-0.24 6	-0.06 4	-0.04 5	0.08 5	-0.06 4	-0.08 8	-0.09 5	-0.06 8	0.16 5	0.12 6	-0.27 5	0.0 0	-0.07 9	-0.01 5	-0.01 9	0.14 9	-0.12 8	0.21 8	0.07 1	0.18 8	-0.09 7	-0.19 9	0.06 9	-0.20 8	-0.11 8	0.14 8	-0.04 5	-0.10 7	-0.17 5	-0.08 5	-0.07 5	-0.25 8	-0.02 8	-0.05 3	0.18 3	0.02 6	0.08 6	0.01 3	-0.15 5	0.08 2	0.18 9	-0.01 9	-0.20 8	0.07 8					
49	0.12 9	0.01 2	0.14 8	0.16 7	-0.00 8	0.16 8	-0.16 2	-0.09 5	-0.09 6	-0.18 9	0.09 7	-0.22 7	-0.02 8	-0.06 4	0.04 2	0.27 2	0.07 3	-0.11 2	0.04 6	-0.18 5	-0.10 5	0.16 6	0.19 5	-0.02 3	-0.03 3	-0.12 7	-0.17 4	-0.10 2	-0.09 7	0.01 2	0.21 9	0.06 5	-0.15 3	0.05 6	0.12 8	0.04 8	0.19 8	-0.04 3	-0.06 9	0.12 9	-0.24 2	-0.06 2	-0.15 2	-0.14 7	0.01 1	0.14 3	0.03 2	0.17 6	0.18 5	0.10 7	-0.19 5	0.02 4								

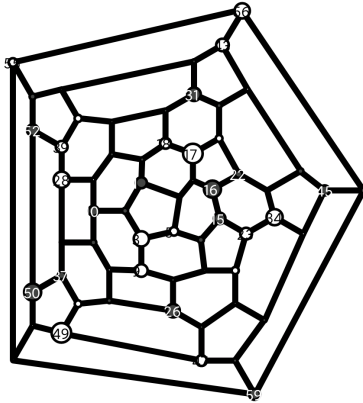
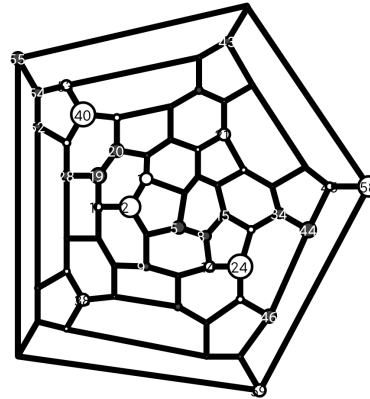
	Ps i 1	Ps i 2	Ps i 3	Ps i 4	Ps i 5	Ps i 6	Ps i 7	Ps i 8	Ps i 9	Ps i 10	Ps i 11	Ps i 12	Ps i 13	Ps i 14	Ps i 15	Ps i 16	Ps i 17	Ps i 18	Ps i 19	Ps i 20	Ps i 21	Ps i 22	Ps i 23	Ps i 24	Ps i 25	Ps i 26	Ps i 27	Ps i 28	Ps i 29	Ps i 30	Ps i 31	Ps i 32	Ps i 33	Ps i 34	Ps i 35	Ps i 36	Ps i 37	Ps i 38	Ps i 39	Ps i 40	Ps i 41	Ps i 42	Ps i 43	Ps i 44	Ps i 45	Ps i 46	Ps i 47	Ps i 48	Ps i 49	Ps i 50	Ps i 51	Ps i 52	Ps i 53	Ps i 54	Ps i 55	Ps i 56	Ps i 57	Ps i 58	Ps i 59	Ps i 60
50	0.12 9	-0.11 6	0.09 3	0.16 7	-0.16 5	0.13 3	-0.18 8	-0.03 9	-0.06 4	-0.09 5	0.15 1	-0.11 3	-0.05 7	-0.19 4	0.11 4	-0.09 7	-0.15 8	-0.23 8	-0.06 4	0.15 1	-0.04 3	0.11 3	0.05 6	0.12 2	-0.10 8	-0.06 7	0.17 6	0.18 3	0.06 3	0.18 9	0.08 9	-0.09 8	-0.01 7	0.21 2	0.06 9	-0.02 8	0.03 6	0.19 7	0.14 1	0.15 1	0.00 1	0.20 1	-0.09 8	0.12 6	0.06 1	-0.05 2	0.18 3	-0.01 8	0.11 7	0.09 5	0.08 3	-0.11 3	0.19 6	-0.11 4	-0.15 4	-0.11 9				
51	0.12 9	-0.03 8	0.08 8	0.20 2	-0.16 4	0.06 2	-0.11 5	-0.05 4	-0.19 1	0.01 8	-0.11 3	0.19 2	-0.01 4	0.01 2	0.05 3	0.05 5	-0.16 3	-0.22 8	0.02 8	-0.04 5	-0.13 5	0.15 2	0.15 3	-0.07 5	0.08 5	-0.08 4	-0.11 6	0.21 4	-0.10 4	-0.04 5	0.08 3	-0.20 3	0.00 0	0.22 4	-0.09 7	0.11 6	-0.19 5	0.01 5	-0.15 3	-0.13 7	-0.17 5	-0.02 2	0.18 5	-0.00 4	-0.15 4	0.12 4	-0.10 6	-0.01 4	0.14 4	-0.16 2	-0.05 2	-0.03 2	-0.02 8	-0.25 2	0.00 6	0.21 6	0.05 9			
52	0.12 9	-0.16 7	0.01 2	0.14 8	0.00 7	0.06 4	-0.25 2	-0.12 5	-0.00 4	-0.16 3	-0.07 7	-0.13 2	0.05 1	-0.03 8	-0.15 4	0.13 7	0.17 9	-0.04 0	-0.15 9	-0.10 2	0.17 1	-0.03 9	-0.01 3	0.17 7	0.07 8	0.02 7	0.27 7	-0.00 8	0.00 5	-0.17 1	0.14 5	0.01 7	-0.21 2	0.15 6	0.05 9	0.10 7	-0.20 4	0.04 6	0.02 5	0.07 3	0.21 5	-0.02 5	-0.24 3	-0.08 6	-0.11 1	0.06 6	-0.16 3	0.18 3	0.02 6	-0.08 3	0.10 5	-0.17 8	0.11 4	0.15 4	0.11 9					
53	0.12 9	-0.15 7	-0.12 5	0.10 1	0.08 1	-0.17 7	-0.14 2	0.14 7	-0.07 6	-0.17 3	-0.00 8	0.04 6	0.01 3	0.08 3	-0.24 3	-0.16 3	-0.06 4	0.14 1	0.02 8	0.00 7	-0.10 3	-0.07 4	-0.28 4	0.02 3	-0.10 3	-0.10 2	0.03 2	-0.11 2	-0.00 2	-0.10 5	0.21 6	-0.10 3	0.16 2	-0.12 2	0.03 2	0.16 2	0.02 3	0.01 3	-0.15 2	-0.13 4	0.21 1	-0.02 3	0.07 5	-0.19 8	0.02 9	-0.12 9	0.10 1	0.13 3	-0.15 2	0.01 7	0.14 2	0.20 8	-0.10 9	-0.11 6	-0.13 7	0.07 3	0.16 1			
54	0.12 9	-0.13 4	-0.06 5	0.16 7	0.06 5	-0.07 5	-0.19 1	-0.18 7	-0.06 9	-0.07 1	-0.03 7	0.00 7	-0.20 7	-0.06 6	-0.02 9	-0.13 6	0.01 5	0.27 6	-0.08 6	-0.13 4	-0.03 9	-0.05 5	-0.16 8	-0.11 7	-0.04 4	0.12 2	0.14 1	0.04 2	-0.21 2	-0.19 3	0.04 6	0.19 7	0.08 9	0.06 4	0.02 3	0.01 3	-0.13 7	0.07 4	-0.13 4	-0.07 4	-0.14 3	-0.14 7	0.08 9	-0.18 8	0.10 5	-0.00 8	0.14 9	-0.03 4	0.08 8	-0.18 8	0.10 5	-0.09 9	0.19 5	0.01 7	-0.14 3	0.17 3				
55	0.12 9	-0.04 5	-0.07 1	0.20 7	0.06 4	0.06 6	-0.04 1	-0.14 7	-0.22 8	-0.19 5	0.02 5	-0.10 6	0.21 9	-0.07 9	-0.02 6	-0.11 1	-0.25 1	0.11 9	-0.17 2	-0.15 9	-0.02 4	0.09 5	0.07 6	0.16 2	-0.15 1	-0.15 3	0.07 9	-0.15 3	0.02 9	0.16 9	-0.05 4	-0.08 7	-0.06 5	-0.06 7	-0.04 5	0.04 8	0.17 8	0.18 4	-0.03 1	0.16 2	-0.02 2	-0.15 2	0.09 8	-0.05 2	-0.16 6	0.01 7	0.03 5	-0.14 4	0.09 5	-0.11 5	0.03 8	-0.20 7	-0.01 7	0.14 3	0.17 3					
56	0.12 9	0.01 2	-0.13 2	0.18 8	0.08 7	0.13 1	-0.15 8	-0.17 1	0.21 5	-0.07 4	0.00 5	-0.20 1	0.08 3	-0.03 5	-0.01 4	-0.07 9	0.21 2	0.00 8	-0.16 2	0.03 4	0.11 8	0.15 4	0.18 6	0.17 9	0.13 2	0.09 5	0.13 1	0.09 1	0.16 9	-0.05 2	-0.13 7	-0.12 2	0.04 9	0.18 2	0.06 2	0.11 2	0.18 1	0.08 1	-0.16 6	0.18 6	-0.09 4	0.08 4	-0.00 6	-0.21 6	-0.07 7	0.17 3	-0.02 3	-0.18 3	0.08 2	-0.15 8	0.19 8	-0.07 7	0.02 8	-0.01 1	-0.22 2					
57	0.12 9	0.12 9	-0.04 6	0.16 3	0.19 8	0.16 3	-0.08 7	0.11 2	-0.11 2	-0.02 2	0.02 7	-0.03 3	0.02 5	-0.12 1	0.22 4	-0.17 8	0.00 3	-0.03 1	0.03 4	-0.13 3	0.04 1	-0.19 4	0.20 7	0.10 3	-0.05 3	-0.12 2	-0.04 7	-0.24 9	-0.03 8	0.18 7	0.11 3	-0.08 2	0.13 0	-0.04 6	0.04 6	0.24 6	0.07 4	-0.11 4	0.19 2	-0.02 3	0.11 2	0.19 1	-0.16 1	0.08 2	0.00 7	-0.11 9	0.14 9	-0.03 4	0.08 9	-0.15 1	-0.13 3	0.03 7	0.09 1	-0.05 5	0.19 7					
58	0.12 9	0.08 9	-0.09 8	0.18 9	0.13 9	0.03 5	0.17 7	-0.03 5	0.21 4	-0.03 8	0.11 9	-0.20 8	-0.05 8	-0.08 5	0.09 5	0.07 5	0.06 3	-0.28 1	0.12 9	0.04 9	0.17 7	-0.02 6	0.06 6	-0.06 9	0.15 5	0.10 3	-0.19 5	-0.05 5	-0.17 7	-0.13 2	0.12 9	0.04 1	-0.18 8	-0.00 4	-0.14 4	-0.08 5	0.08 6	-0.13 4	0.16 1	0.07 8	0.17 5	0.20 3	-0.07 5	-0.06 2	0.04 7	0.16 9	0.18 4	0.03 6	0.05 7	0.10 2	-0.07 6	-0.03 4	0.07 7	-0.02 2	0.14 7	0.20 6	0.03 3	0.01 4	0.18 2	0.05 9
59	0.12 9	0.08 3	-0.01 6	0.20 7	0.10 4	0.00 7	0.07 3	-0.09 1	0.19 3	-0.08 9	-0.23 4	0.06 8	-0.05 2	-0.05 9	0.16 2	-0.13 6	-0.15 4	0.16 6	-0.06 4	0.17 6	-0.10 3	0.03 7	-0.16 9	0.12 8	-0.06 9	-0.02 5	-0.15 4	-0.13 7	0.08 6	0.19 7	0.08 9	-0.06 4	0.16 2	-0.14 2	0.18 2	0.02 2	0.14 8	0.18 2	-0.03 1	0.16 8	0.00 6	-0.14 8	-0.03 9	0.20 8	0.07 7	-0.17 3	-0.00 3	-0.18 3	-0.15 2	-0.04 6	0.14 7	-0.03 3	0.20 4	0.01 9	0.20 9	-0.07 8				
60	0.12 9	0.00 4	0.22 1	0.00 1	0.00 0	-0.03 4	0.00 7	-0.28 7	0.22 3	0.00 1	0.00 1	-0.25 8	-0.01 4	0.00 2	-0.10 4	-0.00 7	-0.35 8	0.00 2	-0.10 4	-0.04 6	0.00 5	-0.05 9	-0.18 4	-0.22 5	-0.00 7	-0.18 5	-0.02 1	0.00 0	0.00 1	0.22 4	0.00 0	-0.22 4	-0.00 1	0.01 4	0.00 2	-0.01 2	0.00 8	0.00 0	0.22 4	-0.02 7	-0.01 5	-0.00 4	-0.28 9	0.00 6	0.00 2	0.25 1	0.05 9	0.00 0	0.25 8	-0.00 2	-0.21 6	0.05 9								

2.2. Molecule orbital presentation:

Ψ_1  Ψ_2  Ψ_3  Ψ_4  Ψ_5  Ψ_6 

Ψ_7  Ψ_8  Ψ_9  Ψ_{10}  Ψ_{11}  Ψ_{12} 

Ψ_{13}  Ψ_{14}  Ψ_{15}  Ψ_{16}  Ψ_{17}  Ψ_{18} 

Ψ_{19}  Ψ_{20} 

The picture export was cancelled, more than 20 pictures are not possible.

3.1. Calculated values:

[illegible]

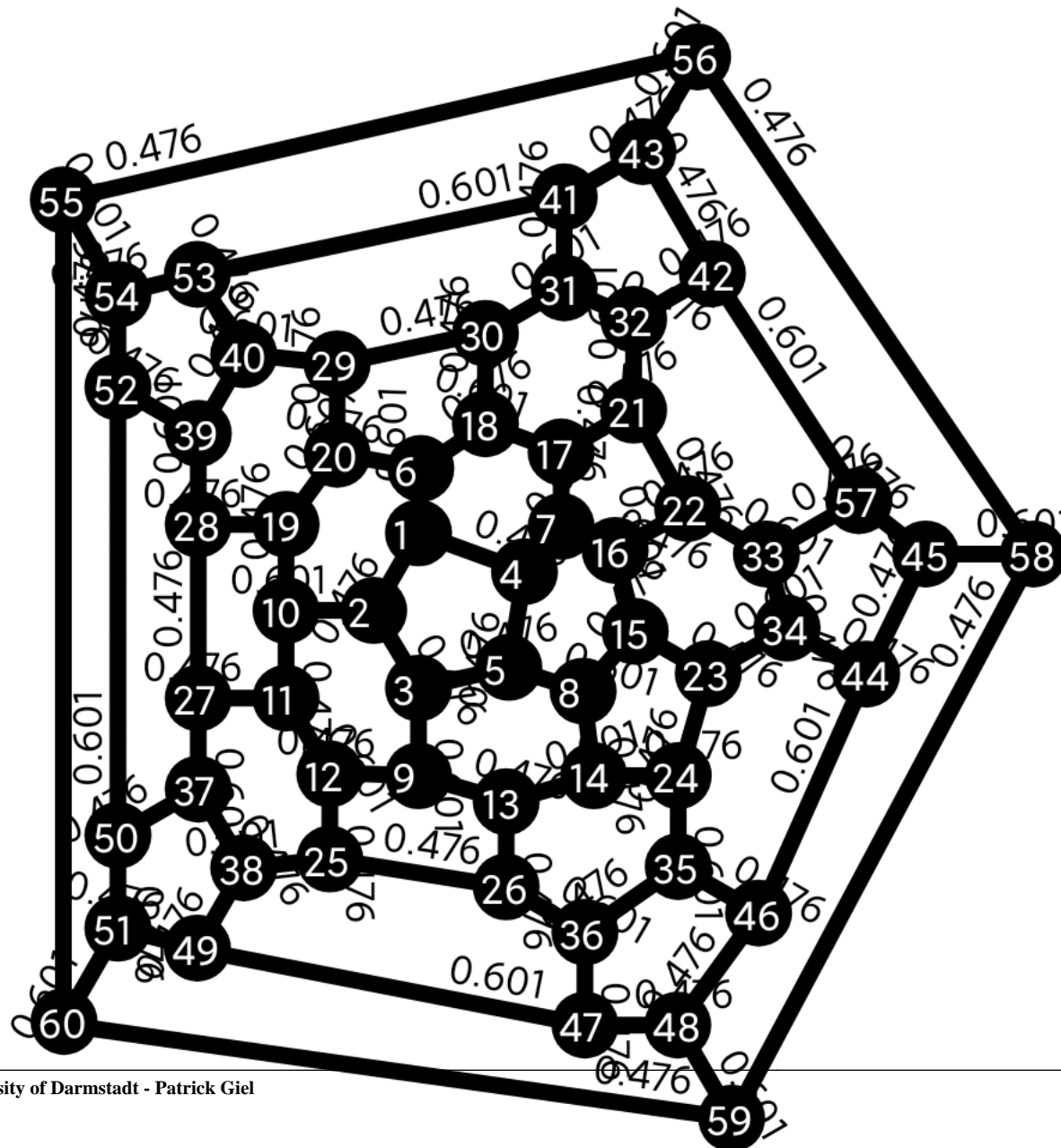
[illegible]

[illegible]

[illegible]

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60									
52	0.006	-0.012	-0.052	0.029	-0.002	0.002	-0.003	0.013	0.006	0.048	-0.035	0.098	-0.028	0.006	0.0	-0.011	-0.028	0.03	0.028	-0.035	0.02	-0.002	0.013	0.006	0.043	-0.028	0.016	0.097	-0.048	0.048	0.048	0.039	0.029	-0.022	0.012	0.016	0.016	0.047	-0.051	-0.097	0.002	-0.035	-0.052	-0.012	0.006	0.043	0.098	-0.097	0.061	0.016	1.0																		
53	-0.012	0.006	0.029	-0.052	-0.002	0.048	0.006	0.013	-0.002	0.03	-0.028	-0.011	0.0	0.006	-0.028	0.098	-0.035	-0.035	-0.028	0.043	-0.012	0.006	0.013	-0.028	0.006	0.043	-0.028	0.016	-0.097	-0.021	0.016	-0.097	-0.021	0.006	0.029	0.048	-0.051	0.047	0.061	-0.097	-0.012	0.006	-0.052	0.006	-0.012	0.002	-0.097	-0.035	-0.051	1.0																			
54	-0.028	-0.028	-0.002	-0.002	-0.011	0.039	0.0	0.029	0.03	0.006	-0.002	-0.003	0.013	0.013	-0.002	-0.006	0.002	-0.002	0.048	0.048	-0.012	-0.052	0.006	0.006	-0.012	-0.052	-0.035	-0.097	-0.097	-0.035	0.028	0.048	0.006	-0.028	0.006	0.028	0.048	-0.051	-0.051	0.016	-0.035	-0.012	0.043	-0.012	0.098	0.043	-0.035	0.016	-0.021	0.047	0.047	1.0																	
55	0.006	0.006	0.013	0.013	0.0	-0.028	-0.002	-0.012	-0.002	0.028	-0.052	0.098	-0.002	-0.002	-0.028	-0.002	-0.052	0.006	-0.012	-0.012	-0.012	0.006	-0.028	-0.002	-0.002	-0.028	-0.002	0.043	0.043	-0.035	0.048	0.002	0.03	0.03	0.002	-0.035	0.048	-0.097	-0.097	-0.021	0.028	0.016	0.048	-0.097	-0.097	0.028	-0.021	0.016	0.016	0.061	1.0																		
56	0.006	0.013	0.0	0.006	0.013	-0.028	-0.028	-0.002	-0.012	0.028	-0.002	-0.002	0.028	-0.052	-0.006	-0.012	-0.012	-0.052	-0.006	-0.012	-0.052	0.043	0.098	-0.012	0.006	-0.028	-0.028	0.006	-0.012	0.098	0.043	-0.097	-0.097	0.035	0.002	0.03	0.002	0.048	-0.035	0.016	0.016	0.061	0.028	-0.035	0.048	-0.097	0.048	-0.035	0.028	-0.097	0.021	0.061	1.0																
57	-0.052	-0.002	0.029	-0.012	0.006	0.006	0.048	0.002	0.002	0.0	-0.012	-0.028	0.035	-0.035	-0.028	-0.035	-0.035	0.098	0.006	-0.021	0.016	0.0	-0.098	0.043	0.006	-0.028	0.016	-0.002	-0.012	0.043	-0.097	0.016	0.476	-0.051	0.048	-0.002	-0.028	-0.012	-0.028	0.061	0.016	-0.051	0.476	-0.097	0.006	-0.035	0.006	-0.052	0.043	0.098	-0.035	0.021	1.0																
58	0.013	0.0	0.013	0.006	0.006	-0.002	-0.028	-0.028	-0.002	-0.012	-0.002	0.028	-0.052	0.006	-0.012	-0.012	-0.006	-0.006	-0.052	0.006	0.029	0.043	0.043	0.098	0.006	-0.012	-0.028	-0.002	-0.012	-0.048	-0.035	-0.097	0.006	0.03	0.002	0.048	-0.035	0.002	0.002	-0.028	0.028	0.016	0.016	0.061	-0.021	0.03	0.028	-0.035	0.048	-0.097	0.048	-0.035	0.028	-0.097	0.021	0.061	1.0												
59	0.0	0.013	0.006	0.013	0.006	-0.011	-0.002	-0.028	-0.028	-0.002	-0.052	0.006	-0.012	-0.012	0.006	-0.052	0.029	-0.002	0.029	-0.002	0.006	-0.012	0.098	0.043	0.098	0.043	-0.012	0.006	-0.028	-0.028	0.03	0.002	0.048	-0.035	-0.097	0.048	-0.035	0.002	0.003	0.048	-0.035	0.016	0.016	0.061	-0.021	0.03	0.028	-0.035	0.048	-0.097	0.061	0.016	0.016	0.061	1.0														
60	0.013	0.006	0.006	0.0	0.013	-0.002	-0.002	-0.002	-0.002	-0.012	-0.012	0.006	-0.052	0.029	-0.002	-0.002	-0.002	0.029	0.006	-0.052	0.029	0.006	0.006	-0.012	0.043	0.098	0.043	0.098	-0.012	-0.028	0.006	0.002	0.048	-0.035	-0.097	0.048	-0.035	0.002	0.003	0.048	-0.035	0.016	0.016	0.061	-0.021	0.03	0.028	-0.035	0.048	-0.097	0.061	0.016	0.016	0.061	1.0														

3.2. Presentation of bond order:



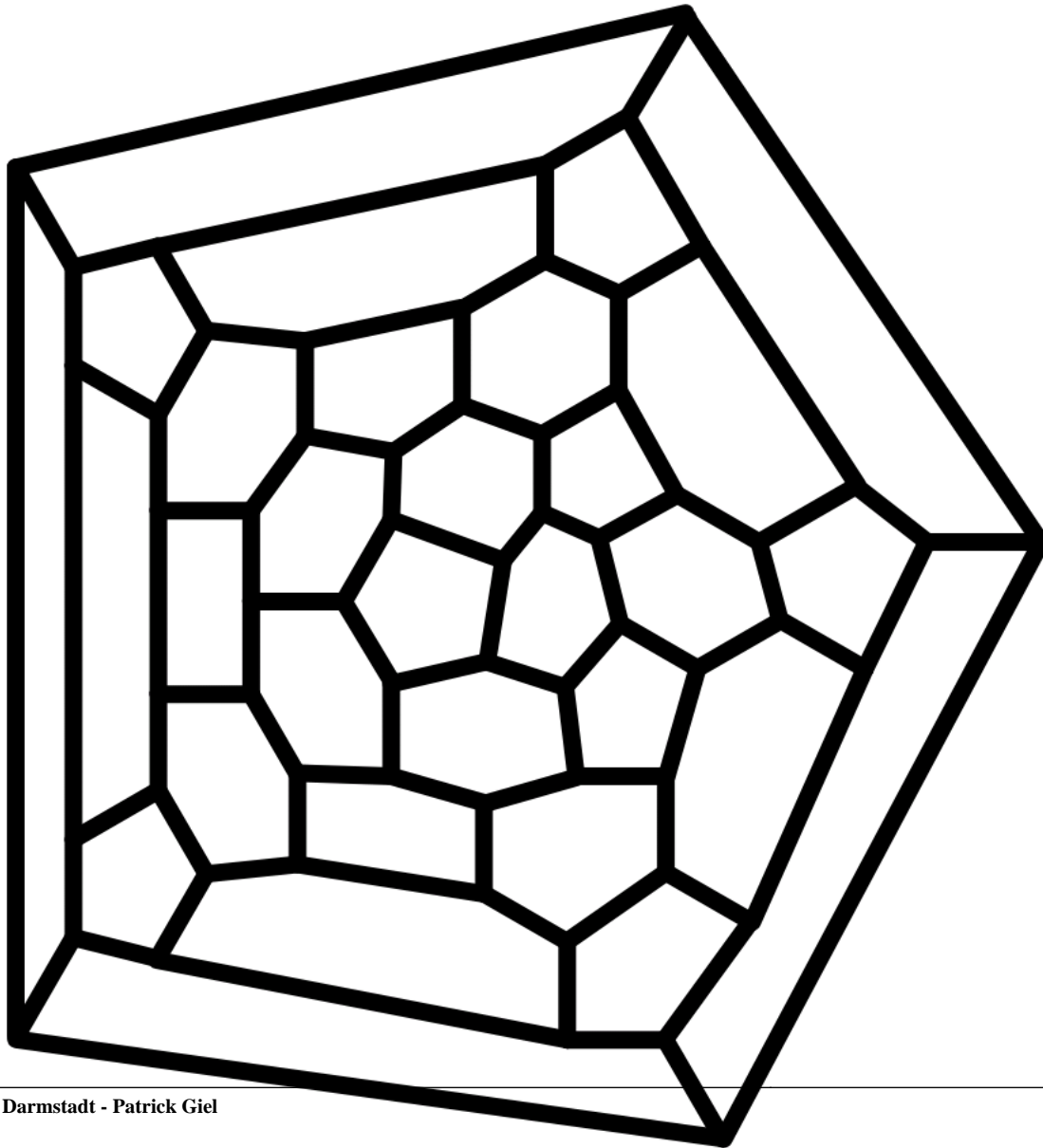
4.1. Calculated values:

Page 21 of 53

[illegible]

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60																																
48																																												0. 0																																																
49																																												0. 0																																																
50																																												0. 0																																																
51																																														0. 0																																														
52																																															0. 0																																													
53																																																0. 0																																												
54																																																	0. 0																																											
55																																																				0. 0																																								
56																																																						0. 0																																						
57																																																								0. 0																																				
58																																																									0. 0																																			
59																																																																			0. 0																									
60																																																																																												0. 0

4.2. Presentation of molecule:

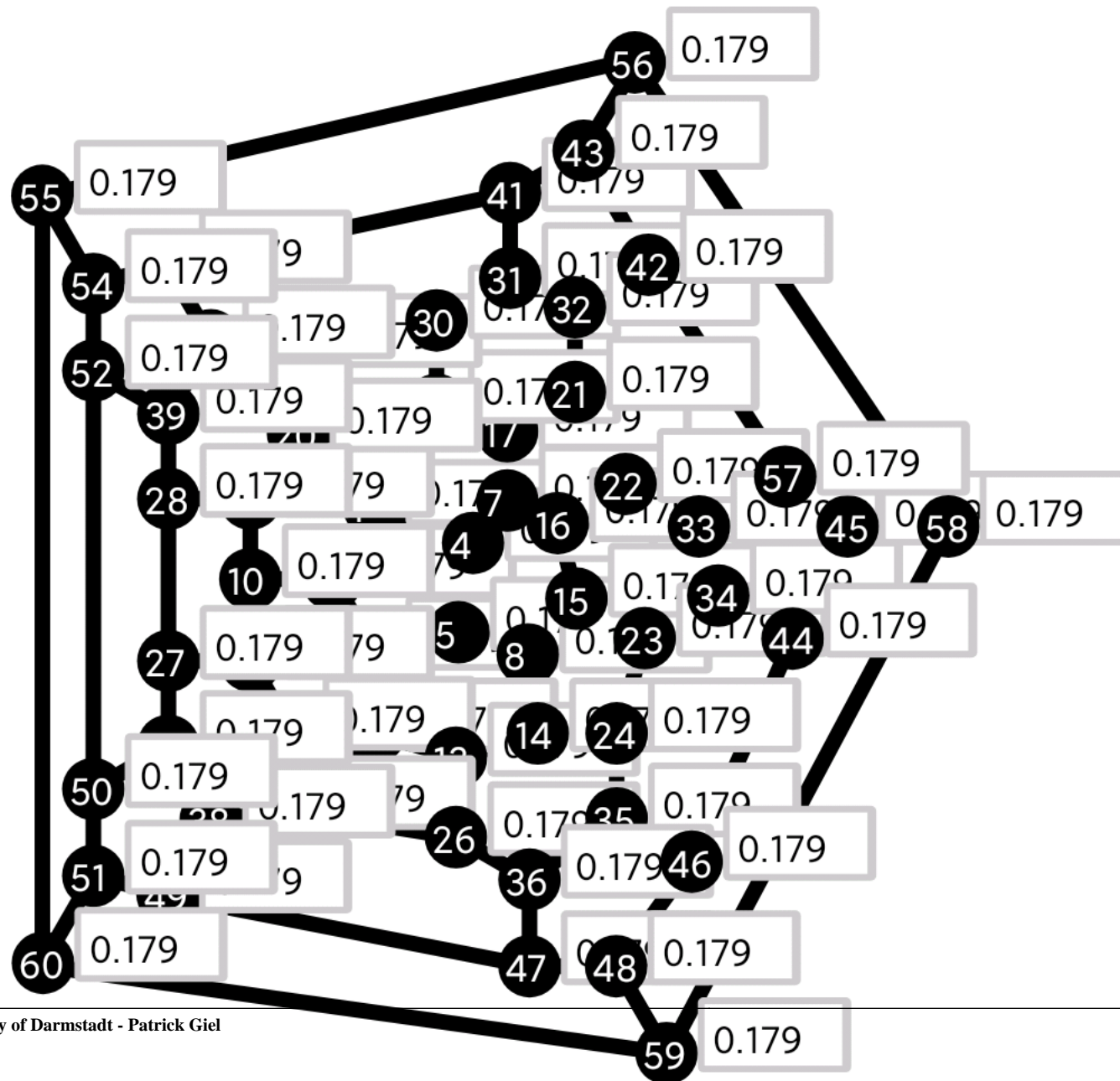


5. Free valences

5.1. Calculated values:

[illegible]

5.2. Presentation of molecule:



6.1. Calculated values:

[illegible]

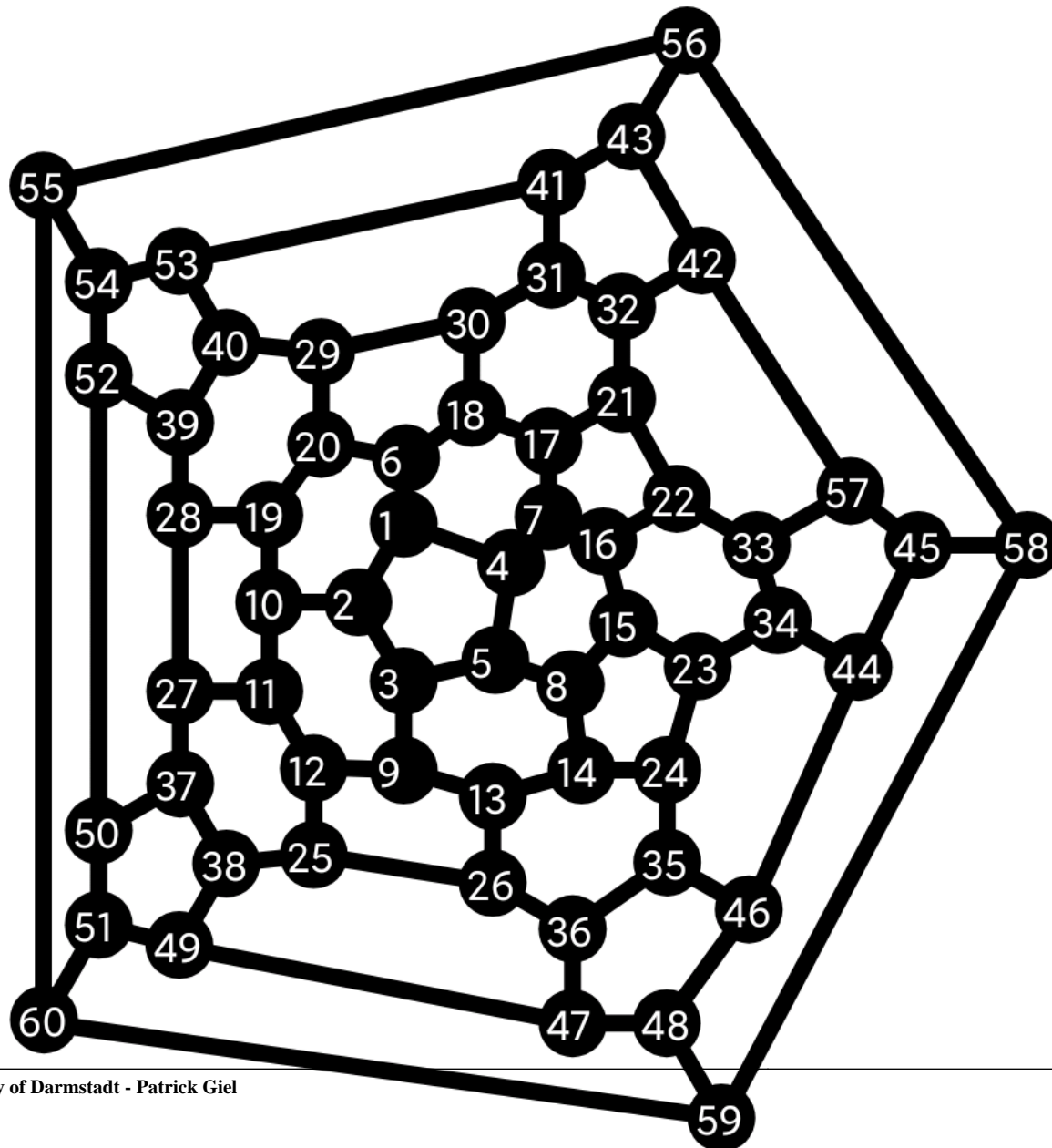
[illegible]

Technical University of Darmstadt - Patrick Giel
Page 29 of 53

Page 30 of 53

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60								
52	0.001	-0.006	-0.003	-0.003	0.001	-0.001	0.000	0.001	0.003	-0.001	-0.001	-0.005	-0.001	0.001	0.002	-0.001	-0.001	0.000	-0.006	0.001	-0.001	0.000	0.000	0.001	-0.003	-0.001	-0.005	0.007	-0.008	-0.003	0.003	-0.003	0.000	-0.001	-0.001	0.007	-0.008	0.005	0.004	-0.008	-0.001	-0.006	0.001	-0.003	0.001	-0.005	-0.008	0.005	0.007	0.003																		
53	-0.001	0.003	-0.006	-0.003	0.000	-0.003	0.001	0.000	-0.001	0.000	-0.001	0.001	0.001	0.002	0.001	-0.001	-0.005	0.001	0.006	0.003	-0.001	0.001	0.000	0.001	-0.006	0.003	-0.008	0.007	-0.004	0.007	-0.008	0.001	-0.001	0.003	0.000	-0.004	0.005	-0.003	0.005	-0.008	0.001	-0.005	0.006	-0.001	0.001	-0.001	0.001	0.008	0.001	0.004	0.003																	
54	-0.001	0.001	0.000	0.000	0.001	0.003	-0.002	0.003	0.001	-0.001	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.001	-0.003	0.003	0.001	0.006	0.001	0.001	0.000	0.001	-0.006	0.001	-0.008	0.008	-0.001	0.001	-0.006	0.003	-0.001	0.001	-0.006	0.003	0.008	-0.003	0.008	0.005	-0.006	0.007	-0.003	0.008	0.003	-0.001	0.001	0.003	0.005	0.007	0.004	0.005	0.003															
55	0.001	0.001	0.000	0.000	0.002	0.001	-0.001	0.001	-0.001	0.001	-0.001	0.006	0.003	0.000	0.003	-0.006	-0.001	-0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	-0.001	0.005	-0.003	-0.003	0.005	-0.001	0.003	-0.001	0.001	-0.001	0.003	0.008	-0.003	0.008	0.005	-0.006	0.007	-0.003	0.008	0.003	-0.001	0.008	0.006	-0.005	0.004	0.007	0.007	0.007	0.005	0.003															
56	0.001	0.002	0.001	0.001	0.000	-0.001	-0.001	0.001	-0.001	0.003	-0.003	0.006	-0.003	-0.006	0.001	-0.001	-0.001	0.006	0.003	0.005	-0.001	0.001	0.001	0.001	-0.001	0.001	-0.001	0.005	-0.003	-0.008	0.008	-0.003	0.001	-0.003	0.001	-0.001	0.003	0.000	-0.003	0.001	-0.005	0.006	0.003	-0.001	0.003	-0.008	0.003	-0.001	0.008	0.003	-0.001	0.001	0.006	0.005	0.003													
57	-0.006	0.003	-0.001	-0.001	0.001	0.003	-0.001	-0.001	0.000	0.002	-0.001	0.001	0.001	0.000	0.001	-0.006	0.001	-0.005	0.001	0.004	0.007	0.008	-0.003	0.001	0.000	0.001	0.000	0.001	-0.003	-0.008	0.007	-0.005	0.003	-0.001	0.000	0.004	0.003	-0.001	0.001	-0.005	0.008	0.001	-0.003	0.001	-0.001	0.001	0.006	-0.001	0.001	0.001	0.006	0.001	0.001	0.003	0.005	0.004	0.003											
58	0.002	0.000	0.001	0.001	0.001	-0.001	-0.001	0.001	-0.001	0.003	-0.006	0.001	-0.001	0.001	-0.001	-0.001	0.006	-0.001	0.003	0.005	-0.003	-0.003	-0.005	0.001	-0.001	-0.001	-0.001	0.001	-0.001	-0.001	0.003	-0.001	0.008	-0.008	0.003	-0.001	0.001	0.000	-0.001	0.004	0.007	0.007	0.005	-0.005	0.006	-0.007	0.007	0.005	-0.005	0.003	-0.001	0.003	0.008	0.005	0.003													
59	0.002	0.000	0.001	0.000	0.001	-0.001	-0.001	-0.001	0.000	-0.006	0.001	-0.001	-0.001	0.001	-0.006	-0.003	0.000	-0.003	0.001	0.005	-0.001	-0.005	-0.003	-0.001	-0.001	-0.001	0.001	-0.001	-0.001	0.001	-0.001	0.003	-0.001	0.008	-0.008	0.003	-0.001	0.001	0.000	-0.001	0.007	0.007	0.005	-0.007	0.007	0.005	-0.005	0.006	-0.007	0.007	0.005	-0.005	0.003	0.008	0.005	0.003												
60	0.001	0.001	0.002	0.000	0.000	-0.001	-0.001	-0.001	-0.001	0.006	-0.001	-0.006	-0.003	0.000	0.000	0.000	0.003	-0.003	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	-0.001	-0.003	-0.005	-0.003	-0.005	-0.001	-0.001	0.001	-0.001	0.000	-0.001	0.003	-0.001	0.008	-0.008	0.003	-0.001	0.001	0.000	-0.001	0.004	0.006	-0.005	0.007	0.007	0.005	-0.005	0.003	0.008	0.005	0.003	0.005	0.003	0.005	0.003	0.003									

6.2. Presentation of molecule:



7.1. Calculated values:

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																										
1 2	0.014	0.014	0.004	0.004	0.014	-0.004	-0.008	-0.001	-0.004	0.002	-0.011	-0.005	0.004	0.004	0.005	-0.001	0.004	0.002	0.004	0.004	-0.001	0.003	0.001	-0.003	0.003	0.006	-0.003	-0.003	0.006	0.001	-0.002	-0.001	0.001	-0.001	0.002	-0.007	-0.007	-0.002	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	-0.002	0.000	0.001	-0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																									
1 4	0.014	0.004	0.014	0.014	0.004	-0.004	-0.004	-0.001	-0.008	-0.001	-0.005	0.004	0.004	-0.005	0.001	0.002	0.004	0.004	-0.001	0.002	-0.003	-0.006	-0.003	0.000	0.000	0.001	-0.003	0.001	-0.006	0.003	-0.007	-0.007	-0.001	0.001	-0.002	0.001	0.001	0.001	-0.001	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	-0.002	0.000	0.001	-0.002	0.000	0.001	-0.002	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
1 6	-0.012	-0.006	-0.007	-0.006	-0.007	-0.012	-0.004	0.005	0.005	0.004	0.002	0.006	0.001	0.001	0.006	0.002	0.004	-0.006	0.004	-0.006	0.002	-0.003	0.000	0.001	0.000	-0.003	0.002	-0.007	-0.007	-0.005	0.006	-0.001	0.001	0.006	0.005	0.001	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.001	0.001	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																						
2 3	0.004	0.014	0.014	0.014	0.004	-0.001	-0.008	-0.001	-0.004	-0.004	0.004	0.004	0.002	-0.011	-0.005	0.004	0.004	-0.005	0.002	-0.011	0.000	0.003	-0.003	-0.003	0.006	-0.003	0.006	-0.003	-0.003	0.003	-0.001	0.001	0.001	-0.002	0.001	-0.002	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.001	-0.001	0.002	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

[illegible]

Technical University of Darmstadt - Patrick Giel Page 35 of 53

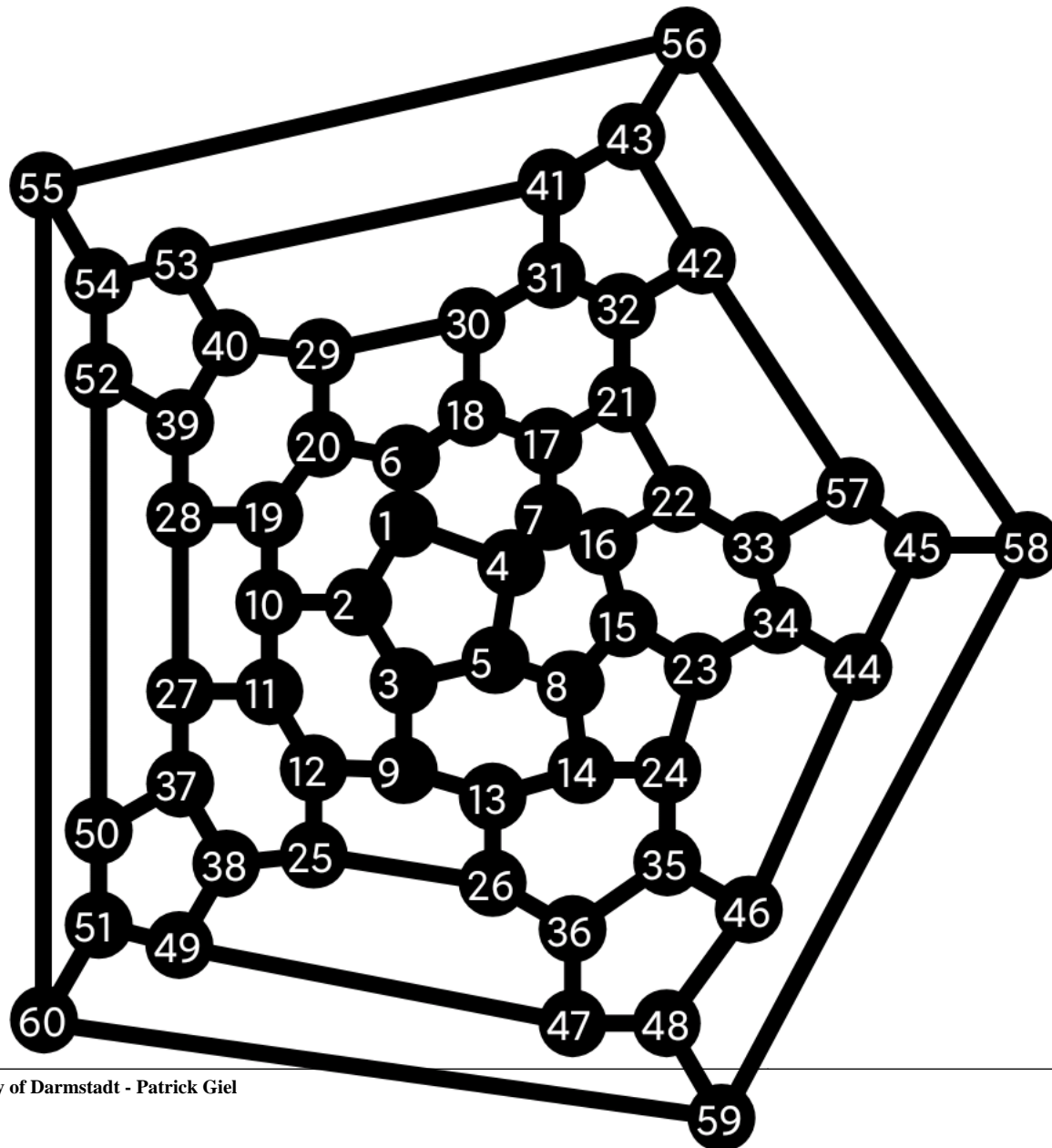
Technical University of Darmstadt - Patrick Giel Page 36 of 53

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																
31 41	0.001	-0.002	0.0	-0.002	-0.001	0.006	-0.001	0.0	0.0	0.001	-0.001	0.001	0.0	0.0	-0.001	-0.003	-0.001	0.002	-0.007	-0.003	-0.001	-0.005	0.001	0.0	0.0	0.0	0.001	-0.007	0.004	-0.004	0.004	0.004	0.0	0.0	0.0	-0.002	0.0	0.0	-0.003	0.004	0.014	0.014	0.004	0.004	0.001	0.0	-0.001	-0.001	0.001	-0.002	0.006	-0.004	0.002	-0.001	-0.001	0.001	-0.005	-0.003	-0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																	
32 42	-0.002	-0.001	0.0	0.001	-0.002	-0.001	0.006	0.001	0.0	0.0	0.0	0.0	0.001	-0.001	-0.007	-0.003	0.002	-0.001	-0.001	-0.003	-0.004	-0.007	0.001	0.0	0.0	0.0	0.001	-0.005	-0.001	0.004	0.014	0.004	0.004	-0.003	-0.002	0.0	0.0	0.0	0.0	0.004	0.014	0.014	0.004	0.006	0.002	0.001	-0.001	-0.002	0.0	0.001	-0.001	0.0	-0.008	0.004	-0.005	-0.001	-0.004	-0.001	-0.003																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																	
33 34	0.001	-0.001	0.001	-0.007	-0.002	-0.003	0.003	-0.002	0.001	0.0	0.0	0.001	0.006	0.004	0.004	0.006	0.001	0.0	0.0	0.002	-0.004	-0.004	0.002	-0.002	-0.001	-0.002	0.0	-0.001	-0.002	-0.001	-0.014	0.014	0.014	-0.011	-0.001	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.003	-0.001	-0.005	0.004	0.014	-0.001	-0.003	-0.005	0.0	0.001	0.0	-0.001	0.001	0.0	-0.001	0.004	0.004	-0.008	0.004	-0.004	0.0																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																
33 57	-0.002	0.0	-0.001	0.001	-0.002	0.001	0.006	-0.001	0.0	0.0	0.0	-0.001	-0.003	-0.001	0.002	0.003	-0.007	-0.001	0.001	-0.001	-0.004	-0.001	-0.005	0.0	0.001	0.0	0.0	0.001	-0.007	-0.003	0.004	0.014	0.004	0.004	0.004	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.002	0.006	-0.004	0.002	0.014	0.008	0.0	0.001	-0.001	0.001	-0.001	-0.002	0.001	-0.001	0.014	-0.001	-0.005	-0.003																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																			
34 44	-0.001	0.0	-0.002	-0.002	0.001	0.0	-0.006	0.001	0.0	0.001	-0.001	-0.007	-0.003	-0.002	0.001	-0.003	-0.001	0.0	0.0	-0.005	-0.001	-0.004	-0.004	0.001	-0.007	0.0	0.0	0.0	0.001	0.0	0.004	0.004	0.014	0.004	-0.003	0.0	-0.002	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.008	0.004	0.014	0.004	-0.004	0.006	0.002	0.001	-0.001	0.0	0.001	-0.001	-0.005	0.014	-0.001	-0.001	-0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																		
35 36	-0.001	0.001	-0.007	0.001	-0.007	0.001	-0.003	-0.002	-0.003	0.001	0.006	0.004	0.004	0.006	0.001	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.001	-0.002	0.004	-0.002	0.002	-0.004	-0.002	-0.001	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.001	-0.014	0.014	0.014	0.004	-0.001	-0.001	-0.001	0.0	0.0	0.0	-0.001	0.001	-0.001	0.004	0.004	0.014	-0.003	-0.005	0.001	0.0	0.001	0.0	-0.001	0.004	-0.008	0.004																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																		
35 46	0.0	-0.001	-0.002	-0.002	0.001	0.001	-0.006	-0.001	0.0	-0.001	-0.003	-0.001	0.002	-0.003	-0.007	-0.001	0.001	0.0	0.0	0.001	-0.007	-0.004	-0.005	-0.001	-0.001	-0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																		
36 47	0.0	-0.002	-0.001	-0.001	-0.002	0.0	-0.006	0.001	0.001	-0.007	-0.003	0.002	-0.001	-0.003	-0.001	0.0	0.0	-0.001	0.001	0.0	0.001	-0.005	-0.001	-0.004	-0.004	-0.001	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.004	0.004	0.014	-0.003	0.004	-0.004	-0.002	0.0	0.0	0.001	-0.001	-0.002	0.004	0.014	0.004	-0.004	0.006	0.002	0.001	-0.001	-0.001	0.004	-0.004	-0.005	-0.001	-0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																			
37 38	0.001	-0.007	-0.007	-0.001	-0.001	0.002	-0.002	-0.003	-0.003	0.004	0.004	0.006	0.001	0.0	0.0	0.0	0.0	0.006	0.001	0.0	0.0	-0.001	-0.002	-0.004	-0.002	-0.002	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.001	-0.014	0.014	-0.011	0.014	-0.011	-0.001	0.001	-0.001	0.001	0.001	-0.003	-0.001	0.004	0.004	-0.005	0.004	0.004	0.004	-0.004	0.004	-0.008																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																						
37 50	-0.002	0.001	-0.002	0.0	-0.001	0.001	0.0	0.0	-0.001	0.006	0.002	-0.011	-0.003	-0.001	0.0	0.0	0.001	-0.001	-0.003	0.0	0.0	0.0	0.001	-0.001	-0.005	-0.004	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.004	0.014	0.004	0.004	0.004	-0.003	0.004	0.004	0.004	0.004	-0.001	0.001	-0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																			
38 49	-0.001	-0.002	0.001	0.0	-0.002	0.0	0.001	0.006	-0.001	-0.011	-0.002	-0.003	-0.007	-0.001	0.001	0.0	0.0	0.0	-0.003	-0.001	0.0	0.0	0.001	-0.007	-0.004	-0.001	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.002	-0.003	0.004	0.004	0.014	0.004	0.004	0.004	0.0	0.001	0.0	-0.001	0.001	-0.002	0.006	-0.004	0.002	0.014	0.014	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60
4053	0.001	-0.002	-0.001	-0.002	0.000	0.006	0.001	0.000	0.000	-0.001	-0.003	-0.001	0.000	0.000	0.001	-0.001	-0.007	-0.003	-0.001	0.002	-0.007	0.001	0.000	0.000	0.001	0.000	-0.005	-0.001	-0.004	0.004	0.004	-0.003	-0.002	0.000	0.004	0.000	0.004	-0.004	0.006	0.002	-0.001	-0.002	0.000	0.000	-0.008	0.004	0.004	0.004	-0.001	-0.001	0.000	0.004	0.004	0.003	-0.005					
4143	-0.001	0.000	0.000	0.001	0.000	-0.003	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.004	-0.005	-0.002	-0.001	-0.008	0.004	-0.001	0.000	0.001	0.000	-0.002	-0.001	-0.001	-0.004	0.004	-0.005	-0.003	0.000	0.001	-0.001	0.006	0.002	0.004	0.004	0.004	0.001	-0.001	0.004	0.001	-0.001	0.007	-0.007	-0.003	-0.004	0.004	0.004	-0.004	0.001	-0.002	0.006	0.003	-0.003		
4153	-0.001	0.001	0.000	0.001	0.000	-0.003	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.006	0.002	0.006	0.002	0.005	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.005	0.004	0.004	-0.006	-0.007	0.001	0.001	0.000	0.001	0.001	-0.007	0.006	0.001	0.001	-0.002	0.007	-0.006	0.006	0.001	0.001	-0.001	0.005	0.006	-0.007	-0.001	0.002	0.004	0.005	0.002	-0.003	0.002			
4243	0.001	0.000	0.000	-0.001	0.000	0.003	-0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.002	-0.001	-0.005	0.004	0.001	0.000	-0.001	0.001	-0.002	0.000	0.001	0.000	0.001	-0.001	0.004	-0.004	0.002	0.004	0.006	0.001	-0.001	0.000	-0.003	-0.005	0.004	0.004	0.001	-0.004	0.003	-0.007	-0.002	-0.002	0.001	-0.007	0.002	-0.001	0.004	-0.004	0.004	0.004	-0.003	0.006				
4257	0.001	0.000	0.000	-0.001	0.001	0.003	-0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.006	0.002	0.002	0.006	0.000	0.001	0.004	0.001	0.004	0.005	0.001	0.000	0.000	0.001	0.005	0.007	-0.006	-0.006	-0.007	0.001	0.001	0.001	0.001	-0.007	0.001	-0.002	0.006	0.007	-0.006	0.005	0.006	0.001	-0.001	0.005	0.006	0.002	0.004	-0.002	0.004	0.002	-0.003						
4356	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.001	0.001	0.001	0.000	0.005	0.006	-0.001	0.001	0.000	0.000	0.001	0.001	-0.001	0.006	0.005	-0.007	-0.002	0.000	0.001	0.001	-0.003	0.002	-0.006	0.006	0.001	0.005	0.001	0.006	0.005	0.002	0.004	0.004	-0.006	-0.002	0.004	-0.006	-0.007	-0.007							
4445	0.000	0.000	0.000	0.001	-0.001	0.000	0.000	-0.003	0.001	0.000	0.000	0.000	-0.002	-0.001	-0.005	0.004	0.000	0.001	0.000	0.000	0.004	-0.001	-0.001	-0.002	0.001	0.001	0.000	0.001	-0.001	0.003	0.005	0.004	0.002	0.006	0.001	-0.001	0.001	0.000	-0.001	0.001	0.001	-0.001	0.001	0.001	-0.001	0.001	-0.002	0.002	0.002	0.001	-0.002	0.004	-0.003							
4446	0.000	0.000	0.001	0.001	-0.001	0.000	0.000	-0.003	0.000	0.000	0.000	0.006	0.002	0.002	0.006	0.001	0.000	0.000	0.000	0.001	0.005	0.004	0.004	0.001	0.005	0.000	0.000	0.001	0.001	0.001	-0.007	-0.006	-0.007	0.001	0.001	0.000	0.005	0.006	-0.002	-0.006	0.001	0.006	0.001	-0.001	0.001	-0.001	0.003	0.002	0.001	-0.004	0.004	0.002								
4557	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.001	-0.003	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.004	-0.005	-0.001	-0.002	0.000	0.000	-0.001	0.001	-0.008	-0.005	0.004	0.001	-0.001	0.002	0.001	-0.006	0.002	0.004	-0.005	-0.003	0.000	-0.001	-0.001	0.001	-0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.001	-0.001	-0.002	0.001	-0.001	0.002	0.006	0.001	-0.004	0.002	0.006							
4558	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.001	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.006	0.005	0.005	0.006	0.001	-0.001	0.000	0.001	-0.001	0.003	0.007	-0.007	-0.002	-0.001	0.000	0.001	0.000	0.002	-0.004	0.004	0.004	-0.006	-0.002	0.004	0.006	0.001	0.005	0.001	0.006	0.005	-0.007	-0.006	-0.002	-0.001	0.006	0.007					
4648	0.000	0.000	0.001	0.000	-0.001	0.000	-0.003	0.000	0.000	0.001	0.000	0.004	-0.005	-0.001	-0.002	0.000	0.000	0.000	0.000	0.002	0.001	-0.001	-0.001	0.004	-0.008	-0.001	0.000	0.001	0.001	0.001	-0.001	0.006	0.004	-0.003	-0.005	-0.001	0.001	0.000	0.001	0.000	-0.007	-0.004	0.004	0.004	0.001	-0.001	-0.001	0.001	-0.002	0.001	-0.004	0.002								
4748	0.000	0.000	-0.001	0.001	0.001	0.000	0.000	-0.003	-0.001	-0.002	-0.001	-0.005	0.004	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.004	-0.008	-0.001	-0.001	0.001	-0.001	0.002	0.001	0.000	0.003	0.005	0.004	0.006	0.002	0.001	-0.001	0.001	-0.002	0.001	-0.002	0.001	0.004	0.004	-0.004	-0.004	0.004	-0.004	0.004	0.004	-0.004	0.004	0.004							
4749	0.000	0.001	-0.001	0.001	0.001	0.000	0.000	-0.003	0.000	0.006	0.002	0.002	0.006	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000	0.001	0.005	0.004	0.004	0.005	0.000	0.001	0.000	0.000	0.001	0.001	0.001	-0.007	-0.006	-0.007	-0.001	0.001	0.001	0.001	-0.005	0.006	-0.007	0.002	0.006	-0.007	0.005	0.006	0.002	-0.003	0.000	0.006	0.002	-0.000	0.004	0.004					

[illegible]

7.2. Presentation of molecule:



8.1. Calculated values:

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

8.2. Presentation of molecule:

