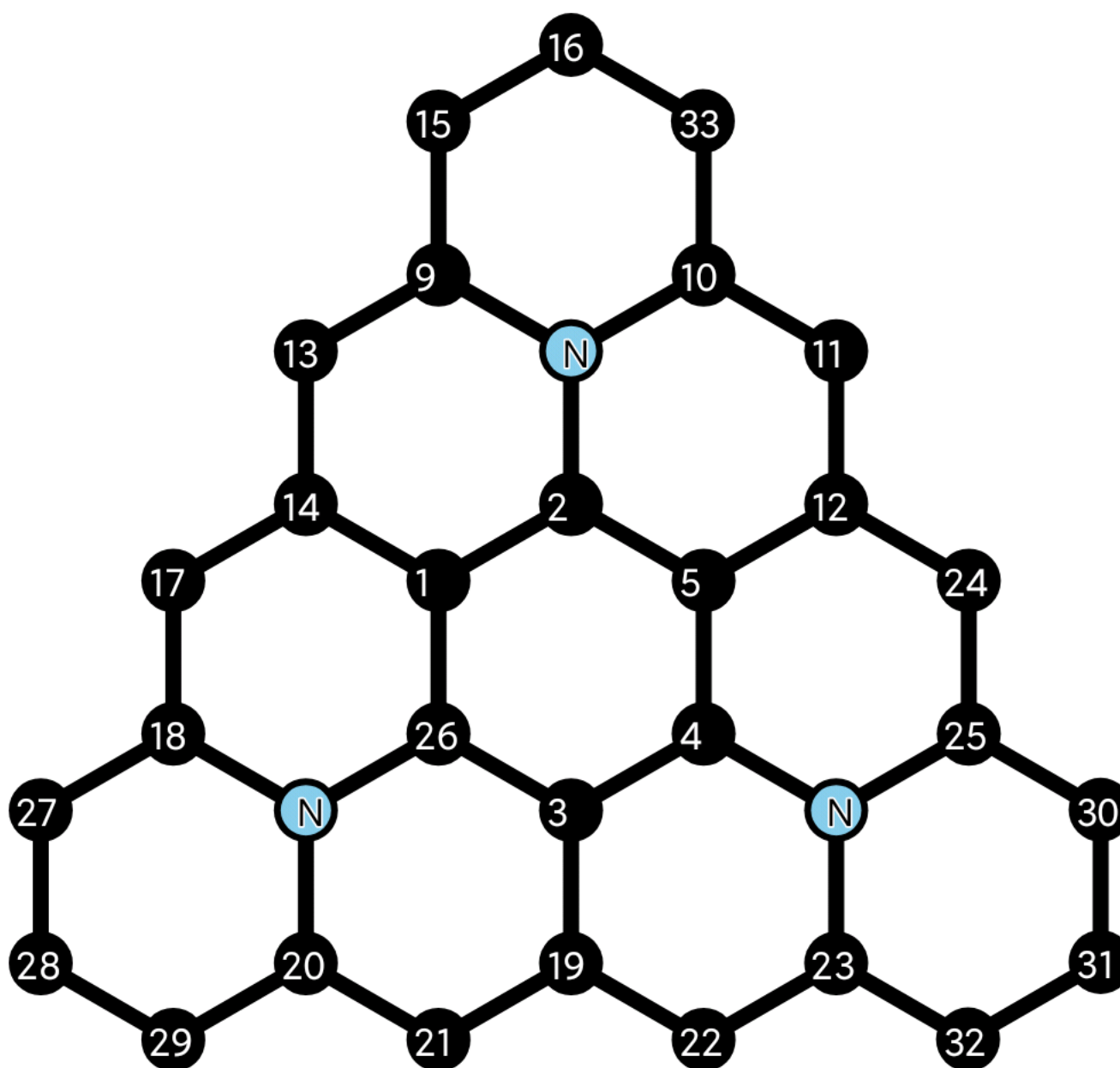


Report generated by:root, 20.01.2020 - 21:27:00

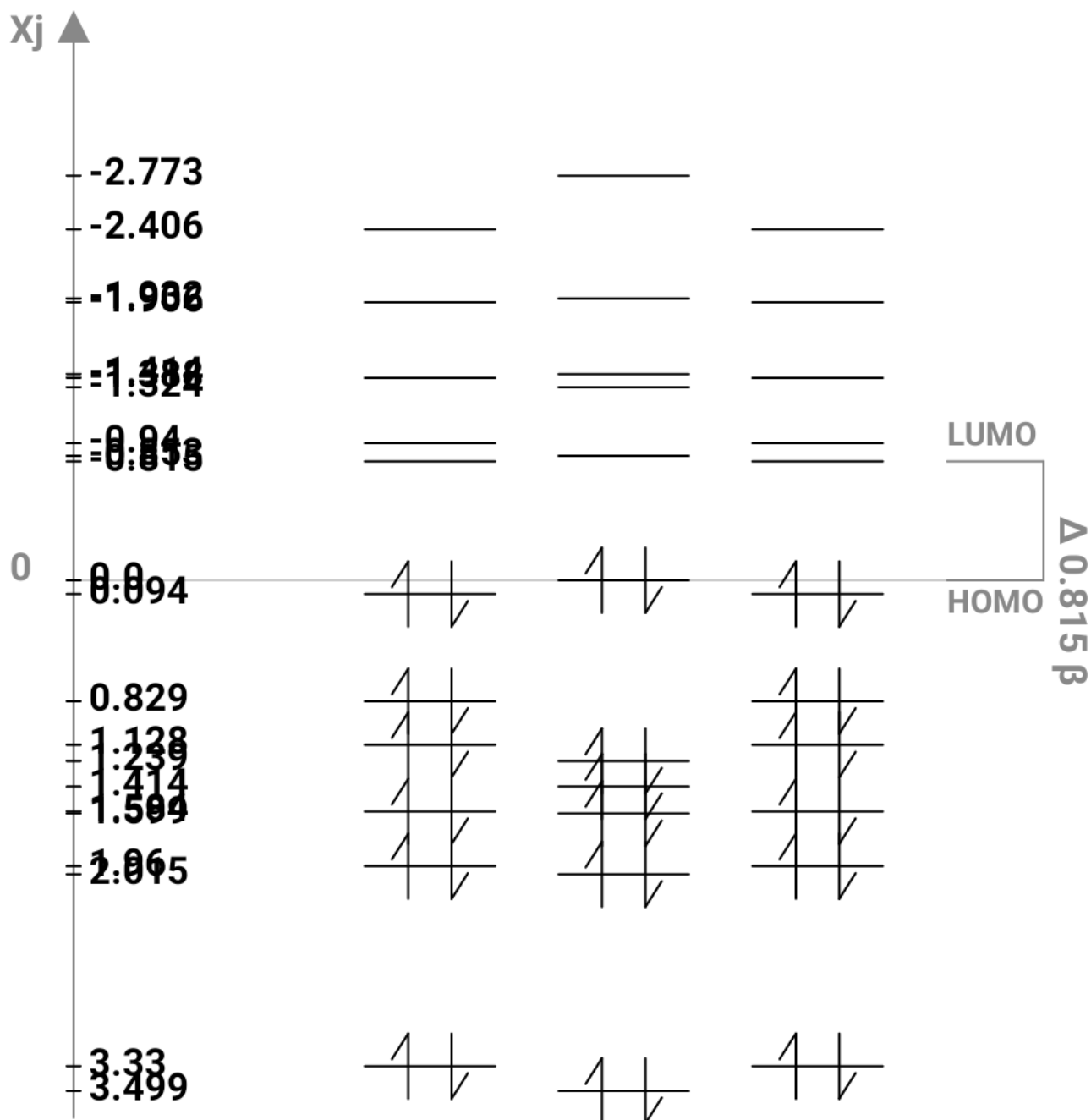
[illegible]

Page 2 of 27



1. Energy-eigenvalues

1.1. Calculated values:



total Power E_π : $33\alpha + 55.232\beta$ -

this corresponds to one π electron: 1.534β

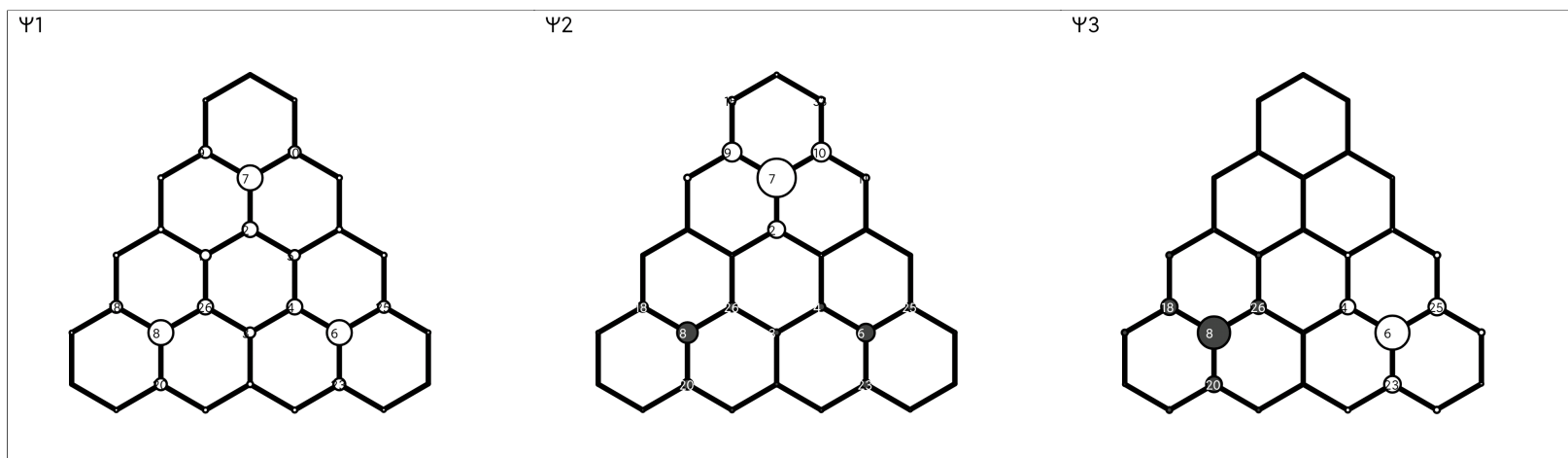
2. Hueckel-coefficient

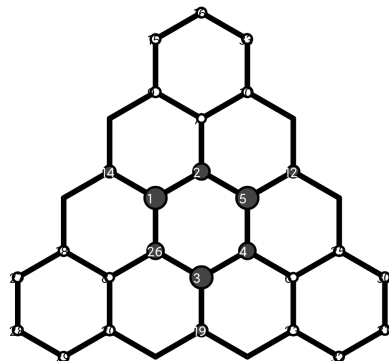
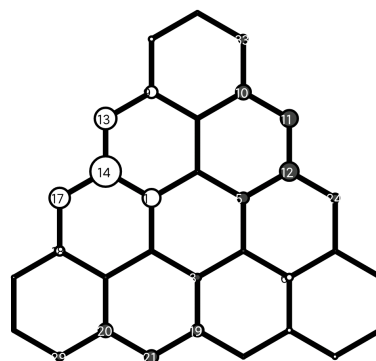
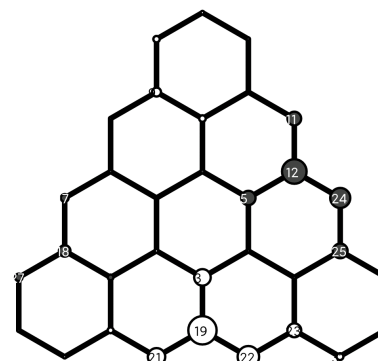
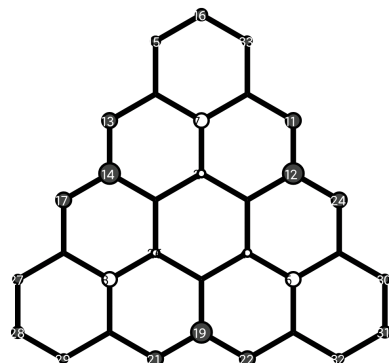
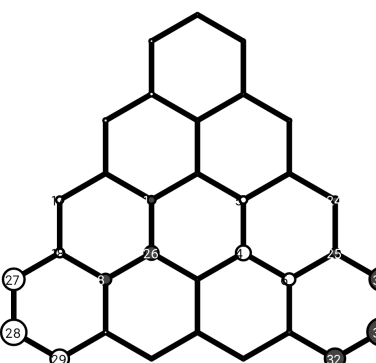
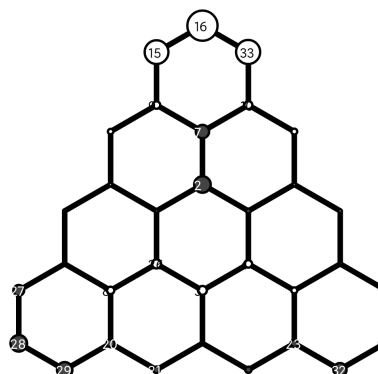
2.1. Calculated values:

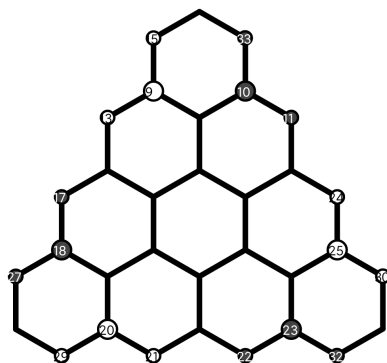
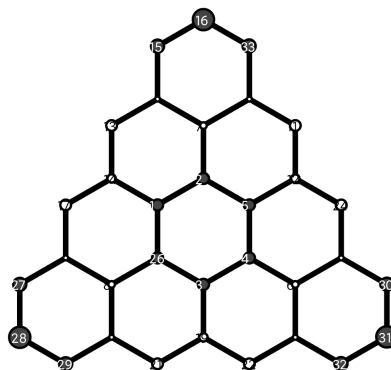
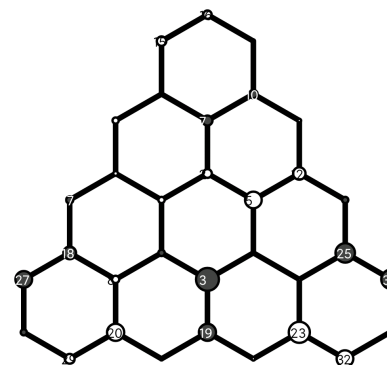
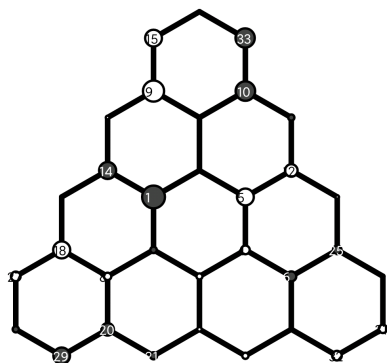
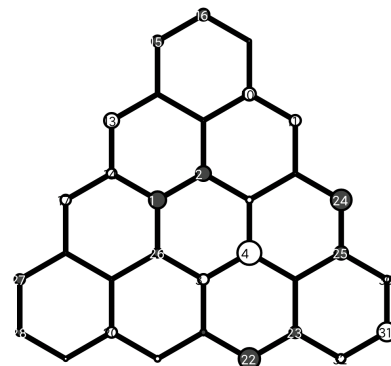
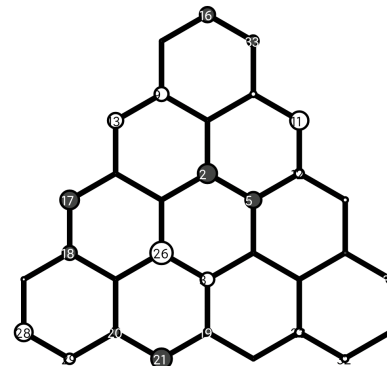
	Psi 1	Psi 2	Psi 3	Psi 4	Psi 5	Psi 6	Psi 7	Psi 8	Psi 9	Psi 10	Psi 11	Psi 12	Psi 13	Psi 14	Psi 15	Psi 16	Psi 17	Psi 18	Psi 19	Psi 20	Psi 21	Psi 22	Psi 23	Psi 24	Psi 25	Psi 26	Psi 27	Psi 28	Psi 29	Psi 30	Psi 31	Psi 32	Psi 33
	x1= 3.499	x2= 3.33	x3= 3.33	x4= 2.015	x5= 1.96	x6= 1.96	x7= 1.599	x8= 1.584	x9= 1.584	x10= 1.414	x11= 1.239	x12= 1.128	x13= 1.128	x14= 0.829	x15= 0.829	x16= 0.094	x17= 0.094	x18= 0.0	x19= 0.815	x20= 0.815	x21= 0.853	x22= -0.94	x23= -0.94	x24= 1.324	x25= 1.388	x26= 1.388	x27= 1.414	x28= 1.906	x29= 1.906	x30= 1.932	x31= 2.406	x32= 2.406	x33= 2.773
1	0.162	0.046	-0.089	-0.334	0.271	-0.033	-0.049	-0.12	-0.06	0.0	-0.17	0.095	-0.347	-0.259	0.035	0.131	-0.232	0.0	-0.15	-0.155	-0.139	0.17	-0.22	-0.089	-0.276	0.027	0.0	-0.106	0.207	-0.246	-0.193	0.056	-0.277
2	0.237	0.264	-0.012	0.247	0.026	-0.062	0.117	-0.015	0.252	0.0	-0.169	0.133	-0.035	0.224	0.289	0.092	-0.001	0.0	0.401	-0.101	-0.048	-0.004	-0.01	0.212	0.213	0.297	0.0	-0.027	-0.042	0.21	0.058	-0.238	0.288
3	0.162	-0.1	0.004	-0.334	-0.107	0.251	-0.049	0.008	0.134	0.0	-0.17	-0.348	0.091	0.16	0.206	-0.266	0.002	0.0	0.209	-0.053	-0.139	0.106	0.258	-0.089	0.162	0.226	0.0	-0.127	-0.195	-0.246	0.048	-0.195	-0.277
4	0.237	-0.122	0.234	-0.247	-0.067	0.008	0.117	0.226	0.113	0.0	-0.169	-0.036	0.133	0.362	-0.05	-0.046	0.08	0.0	-0.288	-0.297	-0.048	-0.006	0.008	0.212	-0.364	0.036	0.0	-0.023	0.044	0.21	-0.235	0.069	0.288
5	0.162	0.054	0.085	-0.334	-0.164	-0.218	-0.049	0.112	-0.074	0.0	-0.17	0.253	0.256	0.099	-0.242	0.135	0.229	0.0	-0.059	0.207	-0.139	0.276	-0.037	0.089	0.114	-0.253	0.0	0.232	-0.012	-0.246	0.145	0.139	-0.277
6	0.39	-0.276	0.531	0.132	0.107	-0.013	0.219	0.182	0.092	0.0	0.1	0.042	-0.152	0.032	-0.004	0.098	-0.172	0.0	0.065	0.067	0.245	0.136	-0.175	-0.078	0.177	-0.017	0.0	-0.048	0.095	0.065	0.287	-0.084	-0.188
7	0.39	0.598	-0.026	0.132	-0.042	0.099	0.219	-0.012	-0.204	0.0	0.1	-0.152	0.04	-0.02	-0.025	-0.198	0.002	0.0	-0.091	0.023	0.245	0.084	0.205	-0.078	-0.103	-0.144	0.0	-0.058	-0.089	0.065	-0.071	0.291	-0.188
8	0.39	-0.322	-0.505	0.132	-0.065	0.086	0.219	-0.171	0.112	0.0	0.1	0.111	0.112	-0.012	0.03	0.101	0.171	0.0	0.026	-0.09	0.245	-0.22	-0.03	-0.078	-0.073	0.162	0.0	0.106	-0.006	0.065	-0.216	0.207	-0.188
9	0.186	0.296	-0.02	0.151	0.181	0.136	-0.047	0.074	0.113	0.289	0.075	0.035	0.321	0.039	0.211	0.058	-0.03	0.0	-0.083	0.18	-0.195	0.119	-0.265	-0.022	-0.18	0.144	0.289	0.264	0.023	-0.191	0.13	-0.301	0.163
10	0.186	0.296	-0.006	0.151	-0.223	-0.036	-0.047	-0.06	0.121	-0.289	0.075	-0.127	-0.297	0.195	0.09	0.059	0.029	0.0	-0.159	-0.119	-0.195	-0.271	-0.105	-0.022	0.194	-0.124	-0.289	-0.087	0.25	-0.191	0.024	-0.327	0.163
11	0.079	0.1	0.016	-0.015	-0.258	0.209	-0.225	-0.059	0.09	-0.204	0.164	0.054	-0.094	0.167	0.276	0.263	-0.313	0.289	0.274	-0.135	-0.022	0.002	0.073	0.247	-0.134	0.077	0.204	0.252	-0.142	0.071	0.061	0.204	-0.128
12	0.091	0.038	0.06	-0.18	-0.281	0.373	0.312	-0.033	0.022	0.0	0.127	0.189	0.191	-0.056	0.138	-0.034	-0.058	0.0	-0.065	0.229	0.214	0.27	0.037	-0.306	-0.008	0.018	0.0	-0.393	0.021	0.054	-0.172	-0.164	0.192
13	0.079	0.099	-0.025	-0.015	0.329	0.04	-0.225	0.069	0.083	0.204	0.164	0.094	0.055	0.226	0.23	0.269	0.309	-0.289	0.306	-0.011	-0.022	0.05	0.053	0.247	0.116	-0.102	-0.204	-0.232	0.172	0.071	-0.149	0.153	-0.128
14	0.091	0.033	-0.063	-0.18	0.464	-0.057	0.312	0.035	0.018	0.0	0.127	0.071	-0.259	0.148	-0.02	-0.033	0.059	0.0	-0.166	-0.171	0.214	-0.166	0.215	-0.306	0.019	-0.002	0.0	0.179	-0.351	0.054	0.228	-0.066	0.192
15	0.063	0.108	-0.007	0.148	0.081	0.097	-0.136	0.063	0.362	0.204	-0.2	0.144	0.255	-0.168	-0.022	-0.006	-0.314	0.289	-0.12	-0.165	-0.131	-0.272	-0.071	-0.116	0.269	0.09	-0.204	-0.195	-0.1	0.213	-0.071	0.194	-0.079
16	0.036	0.065	-0.003	0.146	-0.023	0.054	-0.17	0.027	0.46	0.0	-0.324	0.127	-0.033	-0.178	-0.229	-0.059	0.001	0.0	0.181	-0.046	0.307	0.136	0.332	0.176	-0.193	-0.269	0.0	0.109	0.167	-0.22	0.041	-0.166	0.057
17	0.079	-0.036	-0.095	0.015	0.309	-0.119	0.225	0.107	0.006	-0.204	0.164	-0.109	0.0	0.155	-0.282	-0.403	-0.071	0.289	-0.021	0.305	-0.022	0.064	-0.035	0.247	0.134	0.078	0.204	-0.003	0.289	0.071	-0.208	-0.049	0.128
18	0.186	-0.153	-0.253	0.151	0.143	-0.176	-0.047	0.135	-0.008	-0.289	0.075	-0.193	0.259	-0.019	0.214	-0.004	-0.065	0.0	0.183	-0.078	-0.195	0.227	-0.182	-0.022	-0.205	-0.106	-0.289	-0.173	-0.2	-0.191	0.271	0.184	0.163
19	0.091	-0.071	0.003	-0.18	-0.183	0.43	-0.312	-0.002	-0.039	0.0	0.127	-0.26	0.068	-0.091	0.118	-0.068	-0.001	0.0	0.231	-0.058	0.214	-0.103	0.252	-0.306	-0.011	-0.016	0.0	0.215	0.33	0.054	-0.056	0.231	0.192
20	0.186	-0.165	-0.246	0.151	-0.208	0.089	-0.047	0.061	-0.12	0.289	0.075	0.261	-0.191	0.163	-0.139	-0.055	-0.036	0.0	-0.114	-0.162	-0.195	0.17	0.236	-0.022	0.215	0.084	0.289	-0.152	0.217	-0.191	0.196	0.263	0.163

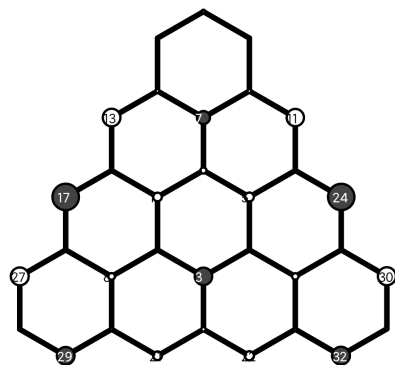
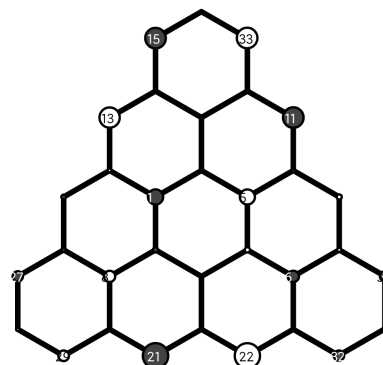
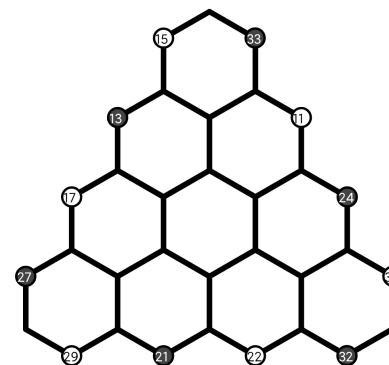
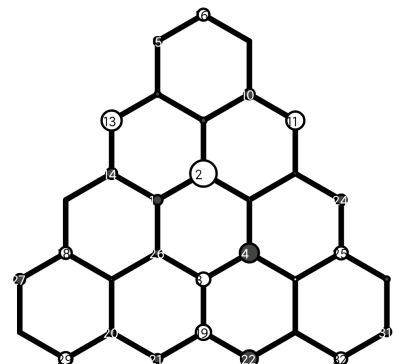
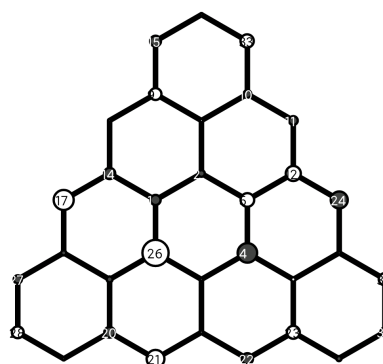
	Psi 1	Psi 2	Psi 3	Psi 4	Psi 5	Psi 6	Psi 7	Psi 8	Psi 9	Psi 10	Psi 11	Psi 12	Psi 13	Psi 14	Psi 15	Psi 16	Psi 17	Psi 18	Psi 19	Psi 20	Psi 21	Psi 22	Psi 23	Psi 24	Psi 25	Psi 26	Psi 27	Psi 28	Psi 29	Psi 30	Psi 31	Psi 32	Psi 33
21	0.079	-0.071	-0.073	-0.015	-0.199	0.265	-0.225	0.037	-0.101	0.204	0.164	0.001	-0.109	0.087	-0.311	0.133	-0.387	-0.289	-0.143	0.27	-0.022	-0.071	0.017	0.247	-0.147	-0.049	-0.204	-0.033	-0.287	0.071	-0.058	-0.205	-0.128
22	0.079	-0.064	0.079	-0.015	-0.052	0.327	-0.225	-0.049	-0.096	-0.204	0.164	0.054	0.094	-0.322	0.007	0.14	0.384	0.289	-0.254	-0.17	-0.022	0.063	-0.038	0.247	0.0	-0.155	0.204	-0.249	-0.147	0.071	0.146	-0.155	-0.128
23	0.186	-0.143	0.26	0.151	0.081	0.211	-0.047	-0.075	-0.113	-0.289	0.075	0.321	0.038	-0.176	0.123	-0.054	0.037	0.0	-0.024	0.197	-0.195	0.044	0.287	-0.022	0.011	0.23	-0.289	0.26	-0.05	-0.191	-0.295	0.143	0.163
24	0.079	-0.028	0.098	-0.015	-0.13	-0.305	-0.225	-0.106	0.018	0.204	0.164	-0.095	0.053	-0.312	0.08	-0.401	0.078	-0.289	-0.163	-0.259	-0.022	0.021	-0.07	0.247	0.031	0.151	-0.204	0.265	0.115	0.071	0.207	0.052	-0.128
25	0.186	-0.131	0.266	0.151	0.027	-0.225	-0.047	-0.135	0.007	0.289	0.075	-0.296	-0.131	-0.202	-0.072	-0.003	0.066	0.0	0.198	-0.018	-0.195	-0.289	0.029	-0.022	-0.035	-0.228	0.289	-0.112	-0.24	-0.191	-0.326	0.038	0.163
26	0.237	-0.142	-0.222	-0.247	0.041	0.054	0.117	-0.211	0.139	0.0	-0.169	-0.097	-0.098	-0.138	0.338	-0.047	-0.08	0.0	-0.113	0.398	-0.048	0.01	0.001	0.212	0.151	-0.333	0.0	0.05	-0.003	0.21	0.177	0.169	0.288
27	0.063	-0.057	-0.093	0.148	0.055	-0.114	-0.136	0.328	-0.165	-0.204	-0.2	-0.254	0.146	-0.155	0.067	0.272	-0.157	-0.289	-0.161	-0.125	-0.131	0.137	0.245	-0.116	0.246	-0.141	0.204	0.195	0.1	0.213	-0.164	-0.126	-0.079
28	0.036	-0.035	-0.055	0.146	-0.035	-0.047	-0.17	0.385	-0.253	0.0	-0.324	-0.093	-0.094	-0.11	0.269	0.03	0.051	0.0	-0.051	0.179	0.307	-0.355	-0.048	0.176	-0.136	0.301	0.0	-0.199	0.01	-0.22	0.123	0.118	0.057
29	0.063	-0.06	-0.09	0.148	-0.124	0.021	-0.136	0.282	-0.236	0.204	-0.2	0.149	-0.252	0.065	0.156	-0.269	0.162	0.289	0.203	-0.021	0.131	0.197	-0.2	-0.116	-0.056	0.277	-0.204	0.184	-0.119	0.213	-0.133	-0.158	0.079
30	0.063	-0.048	0.097	0.148	0.044	-0.118	-0.136	-0.345	-0.126	0.204	-0.2	-0.293	-0.003	0.103	-0.134	0.274	0.152	0.289	-0.083	0.186	-0.131	0.075	0.271	-0.116	-0.212	0.188	-0.204	0.011	0.219	0.213	0.203	-0.036	-0.079
31	0.036	-0.03	0.058	0.146	0.058	-0.007	-0.17	-0.411	-0.207	0.0	-0.324	-0.035	0.127	0.288	-0.039	0.029	-0.051	0.0	-0.13	-0.134	0.307	0.219	-0.284	0.176	0.329	-0.033	0.0	0.091	-0.178	-0.22	-0.164	0.048	0.057
32	0.063	-0.052	0.095	0.148	0.071	0.104	-0.136	-0.307	-0.202	-0.204	-0.2	0.254	0.146	0.135	0.101	-0.272	-0.157	-0.289	0.189	-0.077	-0.131	0.281	-0.004	-0.116	-0.245	-0.142	0.204	-0.184	0.12	0.213	0.191	-0.079	0.079
33	0.063	0.108	-0.003	0.148	-0.126	0.009	-0.136	-0.021	0.367	-0.204	-0.2	0.0	-0.293	0.02	-0.168	0.0	0.314	-0.289	-0.027	0.202	-0.131	0.144	-0.241	-0.116	-0.001	0.283	0.204	-0.012	-0.219	0.213	-0.027	0.205	-0.079

2.2. Molecule orbital presentation:



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.

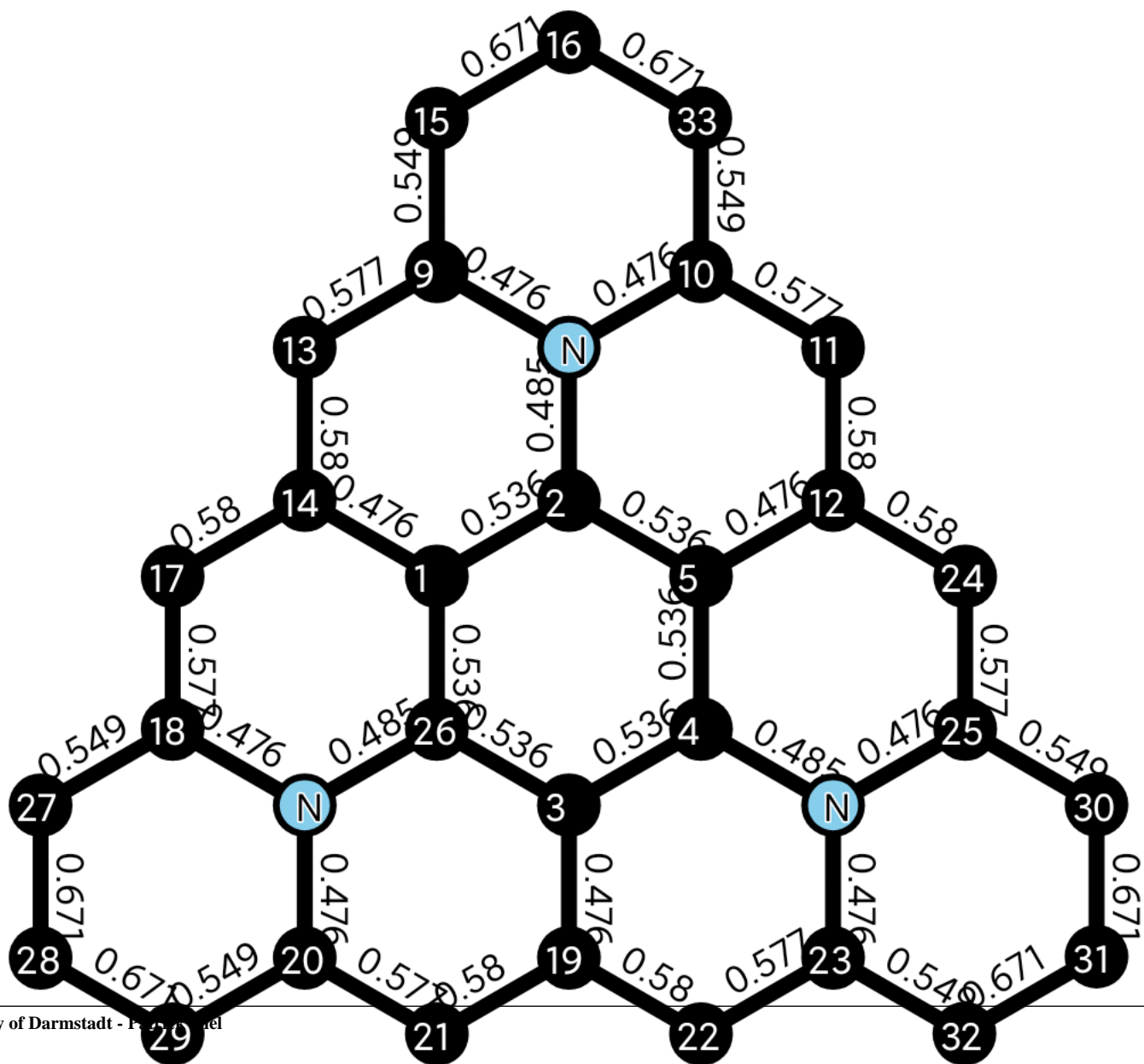
3. Bond Order

3.1. 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
1	1.081																																
2	0.536	0.916																															
3	-0.033	-0.21	1.081																														
4	-0.21	0.019	0.536	0.916																													
5	-0.033	0.536	-0.033	0.536	1.081																												
6	0.068	-0.037	-0.061	0.485	-0.061	1.408																											
7	-0.061	0.485	0.068	-0.037	-0.061	-0.022	1.408																										
8	-0.061	0.037	-0.061	0.037	0.068	-0.022	-0.022	1.408																									
9	-0.166	-0.075	0.043	0.013	-0.062	0.005	0.476	0.055	0.921																								
10	-0.062	-0.075	0.043	-0.006	-0.166	0.055	0.476	0.005	-0.074	0.921																							
11	0.109	-0.206	-0.074	-0.064	-0.029	0.1	-0.094	-0.03	-0.004	0.577	1.247																						
12	-0.031	0.033	-0.031	0.033	0.476	-0.138	-0.138	0.012	0.034	0.046	0.58	0.957																					
13	-0.029	-0.206	-0.074	0.081	0.109	-0.03	-0.094	0.1	0.577	-0.004	-0.093	0.03	1.247																				
14	0.476	0.033	-0.031	0.016	0.031	0.012	-0.138	0.138	0.046	0.034	0.03	-0.015	0.58	0.957																			
15	0.072	-0.034	-0.004	-0.047	-0.058	0.056	-0.033	-0.058	0.549	-0.242	0.175	0.095	-0.158	-0.116	1.17																		
16	0.076	0.046	-0.032	-0.001	0.076	-0.024	-0.17	-0.024	0.048	0.048	-0.143	-0.031	-0.143	-0.031	0.671	0.963																	
17	-0.029	-0.064	0.109	0.081	-0.074	-0.03	0.1	-0.094	-0.125	0.013	0.003	-0.006	-0.216	0.58	0.101	0.046	1.247																
18	-0.166	-0.006	-0.062	0.013	0.043	0.005	0.055	0.476	-0.031	-0.015	-0.023	0.005	-0.125	0.046	0.037	0.019	0.577	0.921															
19	-0.031	-0.016	0.476	0.033	-0.031	-0.138	0.012	-0.138	0.005	0.005	-0.006	-0.015	-0.006	-0.015	-0.002	-0.005	0.03	0.034	0.957														
20	-0.062	0.013	-0.166	0.006	0.043	0.055	0.005	0.476	-0.015	-0.004	-0.012	0.005	0.013	0.034	-0.007	0.008	-0.004	-0.074	0.046	0.921													
21	0.109	0.081	-0.029	-0.064	-0.074	0.1	-0.03	-0.094	-0.023	-0.012	0.061	-0.006	0.003	0.03	0.026	0.014	-0.093	-0.004	0.58	0.577	1.247												
22	-0.074	0.081	-0.029	-0.206	0.109	-0.094	-0.03	0.1	-0.012	-0.023	0.003	0.03	0.061	-0.006	-0.022	0.014	0.003	0.013	0.58	-0.125	-0.216	1.247											
23	0.043	0.013	-0.166	-0.075	-0.062	0.476	0.005	0.055	-0.004	-0.015	0.013	0.034	-0.012	0.005	0.004	0.008	-0.023	-0.015	0.046	-0.031	-0.125	0.577	0.921										

	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
24	-0.074	0.064	0.109	-0.206	-0.029	-0.094	0.1	-0.03	0.013	-0.125	0.216	0.58	0.003	-0.006	0.113	0.046	0.061	-0.012	0.03	-0.023	0.003	-0.093	-0.004	1.247									
25	0.043	-0.006	-0.062	-0.075	-0.166	0.476	0.055	0.005	-0.015	-0.031	-0.125	0.046	-0.023	0.005	-0.036	0.019	-0.012	-0.004	0.034	-0.015	0.013	-0.004	-0.074	0.577	0.921								
26	0.536	0.019	0.536	0.019	-0.21	-0.037	-0.037	0.485	-0.006	0.013	0.081	-0.016	-0.064	0.033	0.06	-0.001	-0.206	-0.075	0.033	-0.075	-0.206	-0.064	-0.006	0.081	0.013	0.916							
27	0.072	0.06	-0.058	0.047	0.004	0.056	-0.058	0.033	0.037	-0.007	0.026	-0.002	0.101	-0.116	0.037	-0.014	-0.158	0.549	0.095	-0.242	0.175	-0.113	-0.036	0.022	0.004	-0.034	1.17						
28	0.076	-0.001	0.076	-0.001	-0.032	-0.024	-0.024	-0.17	0.019	0.008	0.014	-0.005	0.046	-0.031	0.014	-0.012	-0.143	0.048	-0.031	0.048	-0.143	0.046	0.019	0.014	0.008	0.046	0.671	0.963					
29	-0.058	-0.047	0.072	0.06	-0.004	-0.058	0.056	-0.033	-0.036	0.004	-0.022	-0.002	-0.113	0.095	0.044	0.015	0.175	-0.242	-0.116	0.549	-0.158	0.101	0.037	0.026	-0.007	-0.034	-0.159	0.671	1.17				
30	-0.004	0.06	-0.058	0.034	0.072	-0.033	0.058	0.056	-0.007	0.037	0.101	-0.116	0.026	-0.002	0.044	-0.014	0.022	0.004	0.095	-0.036	-0.113	0.175	-0.242	-0.158	0.549	-0.047	-0.048	0.015	0.044	1.17			
31	-0.032	-0.001	0.076	0.046	0.076	-0.17	-0.024	-0.024	0.008	0.019	0.046	-0.031	0.014	-0.005	0.015	-0.012	0.014	0.008	-0.031	0.019	0.046	-0.143	0.048	-0.143	0.048	-0.001	0.015	-0.012	-0.014	0.671	0.963		
32	-0.004	-0.047	0.072	-0.034	-0.058	0.033	0.056	-0.058	0.004	-0.036	-0.113	0.095	-0.022	-0.002	0.048	0.015	0.026	-0.007	-0.116	0.037	0.101	-0.158	0.549	0.175	-0.242	0.06	0.044	-0.014	-0.037	-0.159	0.671	1.17	
33	-0.058	-0.034	-0.004	0.06	0.072	-0.058	-0.033	0.056	-0.242	0.549	-0.158	-0.116	0.175	0.095	-0.159	0.671	-0.113	-0.036	-0.002	0.004	-0.022	0.026	-0.007	0.101	0.037	-0.047	0.044	0.015	-0.048	-0.037	-0.014	0.044	1.17

3.2. Presentation of bond order:



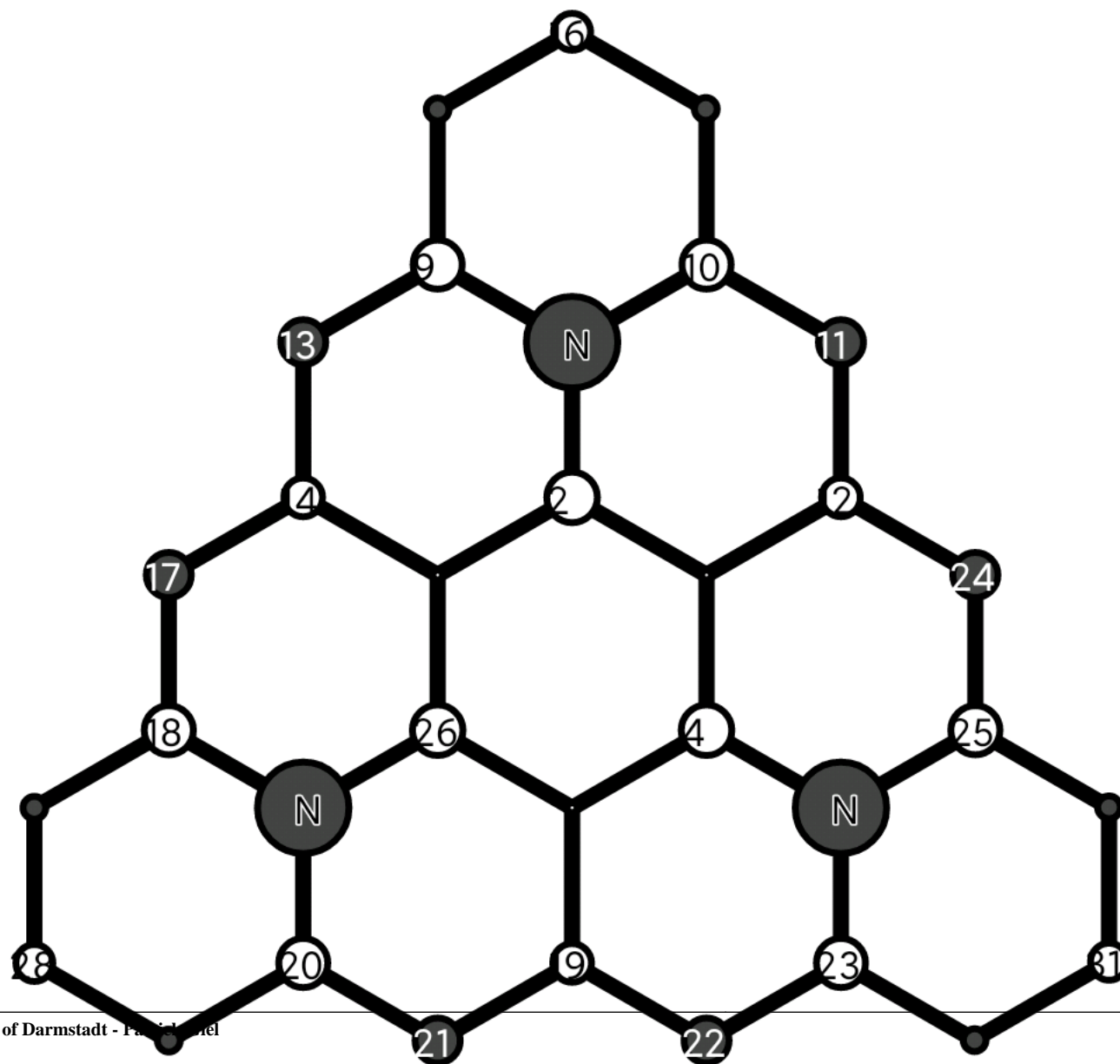
4. Net Charge

4.1. 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	
1	0.01																																	
2		0.175																																
3			0.01																															
4				0.175																														
5					0.01																													
6						-0.317																												
7							-0.317																											
8								-0.317																										
9									0.17																									
10										0.17																								
11											-0.156																							
12												0.134																						
13													-0.156																					
14														0.134																				
15															-0.079																			
16																0.128																		
17																	-0.156																	
18																		0.17																
19																			0.134															
20																				0.17														
21																					-0.156													
22																						-0.156												
23																							0.17											
24																								-0.156										
25																									0.17									
26																										0.175								
27																											-0.079							
28																												0.128						

	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
29																													- 0.079				
30																													- 0.079				
31																														0.128			
32																															- 0.079		
33																																- 0.079	

4.2. Presentation of molecule:

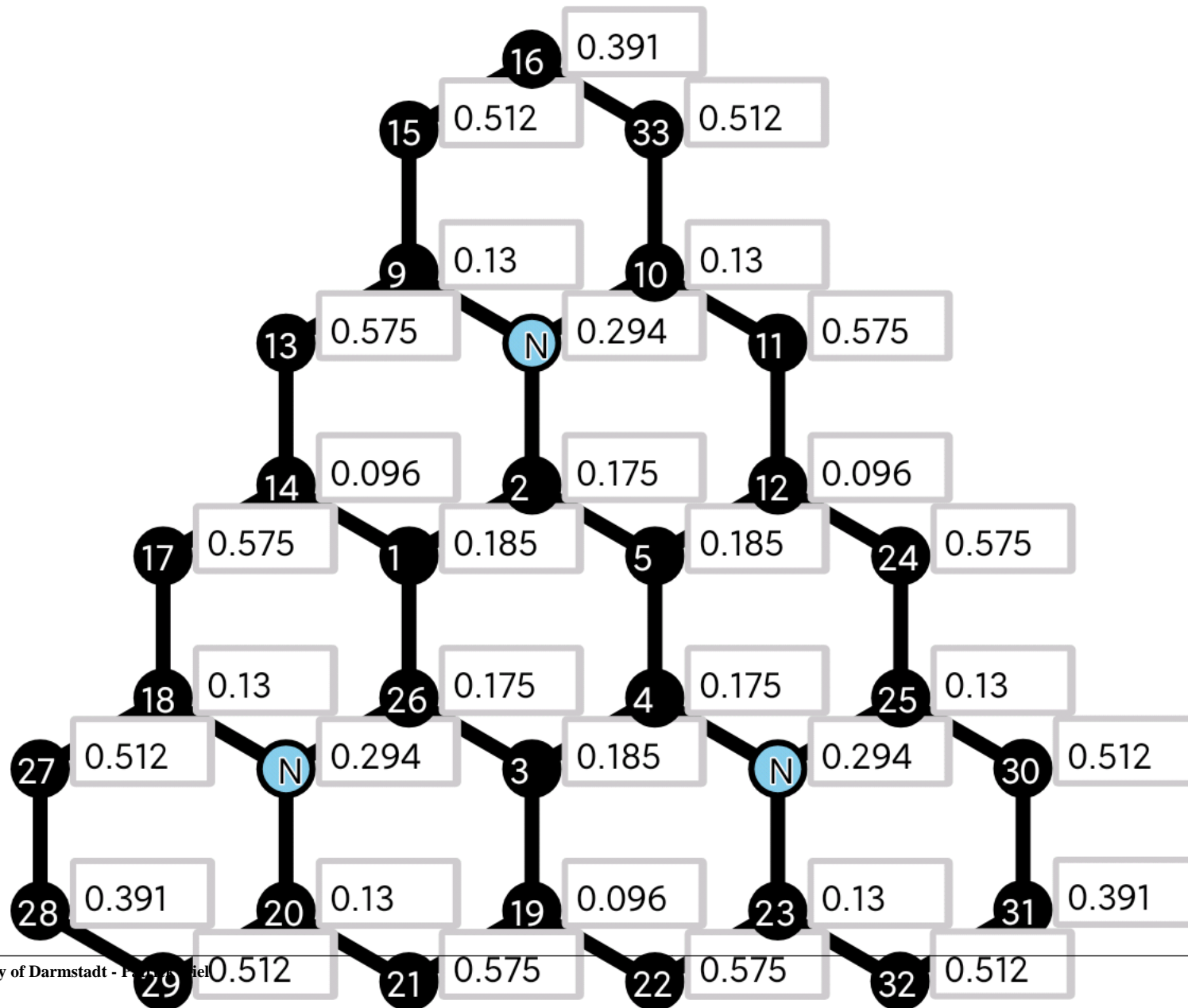


5. Free valences

5.1. 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
0.185	0.175	0.185	0.175	0.185	0.294	0.294	0.294	0.13	0.13	0.575	0.096	0.575	0.096	0.512	0.391	0.575	0.13	0.096	0.13	0.575	0.575	0.13	0.575	0.13	0.175	0.512	0.391	0.512	0.512	0.391	0.512	0.512

5.2. Presentation of molecule:



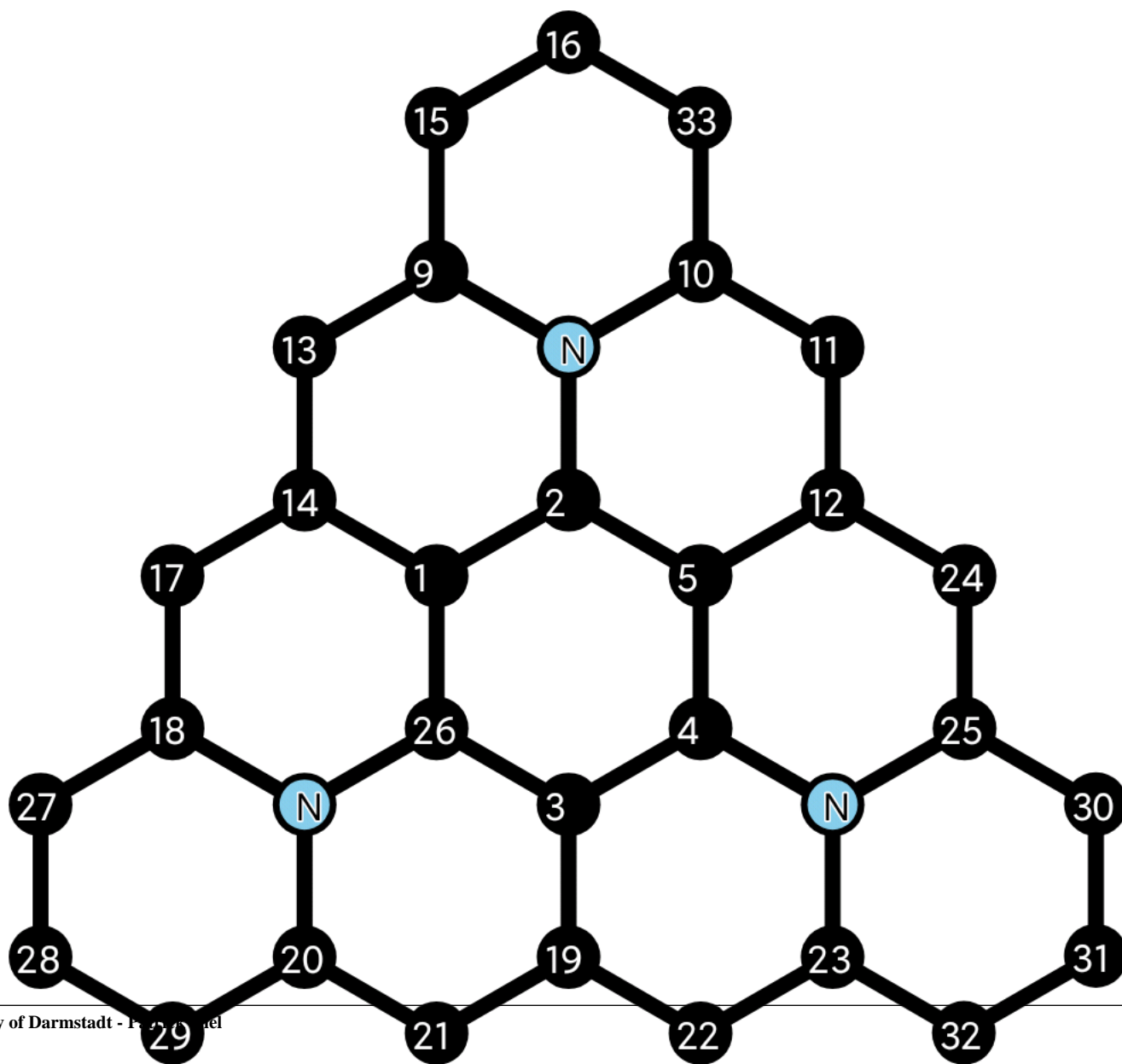
6. Atom-Atom-Polarizability

6.1. 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
1	0.371																																
2	-0.087	0.337																															
3	0.006	-0.042	0.371																														
4	-0.042	0.005	-0.087	0.337																													
5	0.006	-0.087	0.006	-0.087	0.371																												
6	-0.005	0.0	0.003	-0.04	0.003	0.214																											
7	0.003	-0.04	-0.005	0.0	0.003	-0.001	0.214																										
8	0.003	0.0	0.003	0.0	-0.005	-0.001	-0.001	0.214																									
9	-0.018	0.002	-0.001	0.0	-0.002	0.0	-0.039	-0.003	0.316																								
10	-0.002	0.002	-0.001	0.001	-0.018	-0.003	-0.039	0.0	0.0	0.316																							
11	-0.015	-0.029	-0.012	-0.002	0.008	-0.011	0.0	-0.001	-0.001	-0.105	0.47																						
12	-0.001	0.003	-0.001	0.003	-0.053	-0.011	0.011	0.0	0.0	0.003	-0.105	0.325																					
13	0.008	-0.029	-0.012	-0.009	-0.015	-0.001	0.0	-0.011	-0.105	-0.001	-0.023	0.0	0.47																				
14	-0.053	0.003	-0.001	0.001	-0.001	0.0	-0.011	-0.011	0.003	0.0	0.0	0.0	-0.105	0.325																			
15	-0.002	0.0	0.0	-0.005	-0.008	0.007	0.003	-0.006	-0.088	-0.049	-0.04	-0.012	-0.001	-0.013	0.463																		
16	-0.006	0.0	-0.001	0.0	-0.006	-0.001	-0.018	-0.001	0.006	0.006	-0.021	-0.001	-0.021	-0.001	-0.159	0.392																	
17	0.008	-0.002	-0.015	-0.009	-0.012	-0.001	-0.011	0.0	-0.016	0.001	-0.001	0.0	-0.032	-0.105	-0.017	-0.003	0.47																
18	-0.018	0.001	-0.002	0.0	-0.001	0.0	-0.003	-0.039	-0.001	0.0	0.0	0.0	-0.016	0.003	-0.002	-0.001	-0.105	0.316															
19	-0.001	0.001	-0.053	0.003	-0.001	-0.011	0.0	-0.011	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.325														
20	-0.002	0.0	-0.018	0.001	-0.001	-0.003	0.0	-0.039	0.0	0.0	0.0	0.0	0.001	0.0	0.0	0.0	-0.001	0.0	0.003	0.316													
21	-0.015	-0.009	0.008	-0.002	-0.012	-0.011	-0.001	0.0	0.0	0.0	-0.007	0.0	-0.001	0.0	-0.001	0.0	-0.023	-0.001	-0.105	-0.105	0.47												
22	-0.012	-0.009	0.008	-0.029	-0.015	0.0	-0.001	-0.011	0.0	0.0	-0.001	0.0	-0.007	0.0	-0.001	0.0	-0.001	0.001	-0.105	-0.016	-0.032	0.47											

	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
23	-0.001	0.0	-0.018	0.002	-0.002	-0.039	0.0	-0.003	0.0	0.0	0.001	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.003	-0.001	-0.016	-0.105	0.316										
24	-0.012	-0.002	-0.015	-0.029	0.008	0.0	-0.011	-0.001	0.001	-0.016	-0.032	-0.105	-0.001	0.0	-0.025	-0.003	-0.007	0.0	0.0	0.0	-0.001	-0.023	-0.001	0.47									
25	-0.001	0.001	-0.002	0.002	-0.018	-0.039	-0.003	0.0	0.0	-0.001	-0.016	0.003	0.0	0.0	-0.002	-0.001	0.0	0.0	0.0	0.0	0.001	-0.001	0.0	-0.105	0.316								
26	-0.087	0.005	-0.087	0.005	-0.042	0.0	0.0	-0.04	0.001	0.0	-0.009	0.001	-0.002	0.003	-0.005	0.0	-0.029	0.002	0.003	0.002	-0.029	-0.002	0.001	-0.009	0.0	0.337							
27	-0.002	-0.005	-0.008	-0.005	0.0	-0.007	-0.006	0.003	-0.002	0.0	-0.001	0.0	-0.017	-0.013	-0.003	0.0	-0.001	-0.088	-0.012	-0.049	-0.04	-0.025	-0.002	-0.001	0.0	0.0	0.463						
28	-0.006	0.0	-0.006	0.0	-0.001	-0.001	-0.001	-0.018	-0.001	0.0	0.0	0.0	-0.003	-0.001	0.0	0.0	-0.021	0.006	-0.001	0.006	-0.021	-0.003	-0.001	0.0	0.0	0.0	-0.159	0.392					
29	-0.008	-0.005	-0.002	-0.005	0.0	-0.006	-0.007	0.003	-0.002	0.0	-0.001	0.0	-0.025	-0.012	-0.004	0.0	-0.04	-0.049	-0.013	-0.088	-0.001	-0.017	-0.002	-0.001	0.0	0.0	-0.005	-0.159	0.463				
30	0.0	-0.005	-0.008	0.0	-0.002	0.003	-0.006	-0.007	0.0	-0.002	-0.017	-0.013	-0.001	0.0	-0.004	0.0	-0.001	0.0	-0.012	-0.002	-0.025	-0.04	-0.049	-0.001	-0.088	-0.005	-0.005	0.0	-0.004	0.463			
31	-0.001	0.0	-0.006	0.0	-0.006	-0.018	-0.001	-0.001	0.0	-0.001	-0.003	-0.001	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.001	-0.001	-0.003	-0.021	0.006	-0.021	0.006	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.159	0.392			
32	0.0	-0.005	-0.002	0.0	-0.008	0.003	-0.007	-0.006	0.0	-0.002	-0.025	-0.012	-0.001	0.0	-0.005	0.0	-0.001	0.0	-0.013	-0.002	-0.017	-0.001	-0.088	-0.04	-0.049	-0.005	-0.004	0.0	-0.003	-0.005	-0.159	0.463	
33	-0.008	0.0	0.0	-0.005	-0.002	-0.006	0.003	-0.007	-0.049	-0.088	-0.001	-0.013	-0.04	-0.012	-0.005	-0.159	-0.025	-0.002	0.0	0.0	-0.001	-0.001	0.0	-0.017	-0.002	-0.005	-0.004	0.0	-0.005	-0.003	0.0	-0.004	0.463

6.2. Presentation of molecule:



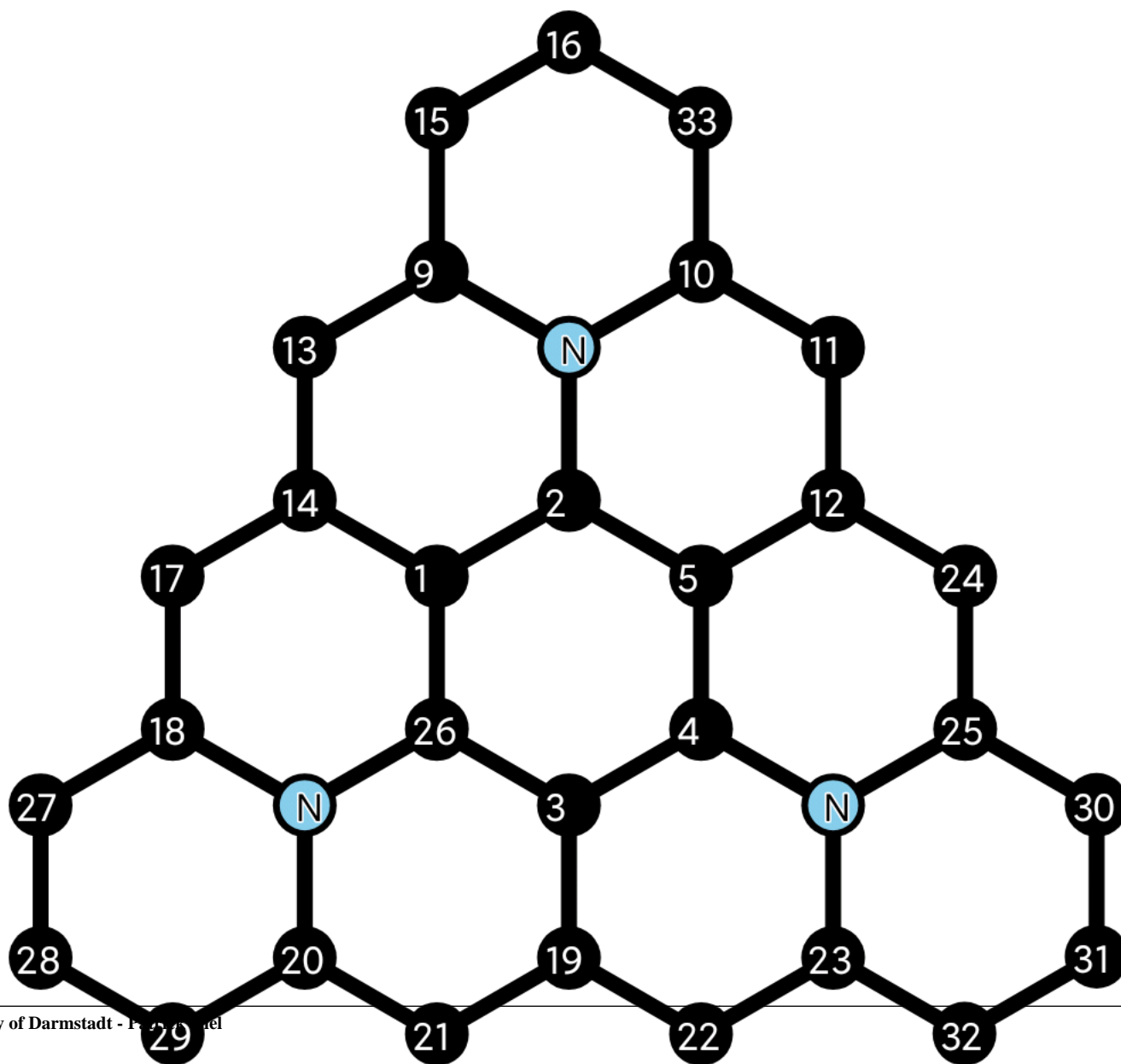
7. Bond-Atom-Polarizability

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
1 2	-0.018	0.026	-0.008	0.005	0.01	0.002	0.015	-0.002	-0.009	-0.004	0.03	0.0	-0.012	-0.005	0.001	-0.004	0.001	0.0	0.0	0.001	-0.015	0.011	0.0	-0.005	0.0	-0.006	-0.007	0.0	-0.007	0.0	0.0	0.0	-0.001
1 14	-0.026	-0.01	0.0	-0.004	0.0	-0.001	-0.008	-0.008	0.004	0.002	-0.005	0.0	0.012	0.001	0.01	0.002	0.012	0.004	0.0	0.002	-0.005	-0.001	0.0	-0.001	0.0	-0.01	0.01	0.002	0.011	0.0	0.0	0.0	0.011
1 26	-0.018	-0.006	0.01	0.005	-0.008	0.002	-0.002	0.015	0.0	0.001	-0.015	0.0	0.001	-0.005	0.007	0.0	-0.012	-0.009	0.0	-0.004	0.03	-0.005	0.0	0.011	0.0	0.026	0.001	-0.004	-0.001	0.0	0.0	0.0	-0.007
2 5	0.01	0.026	-0.008	-0.006	-0.018	-0.002	0.015	0.002	-0.004	-0.009	-0.012	-0.005	0.03	0.0	-0.001	-0.004	-0.005	0.0	0.0	0.0	0.011	-0.015	0.001	0.001	0.0	0.005	0.0	0.0	0.0	-0.007	0.0	-0.007	0.001
2 7	0.013	-0.023	0.017	-0.001	0.013	-0.001	-0.059	-0.001	0.016	0.016	-0.021	0.001	-0.021	0.001	-0.001	0.008	0.005	0.0	0.0	0.0	0.004	0.004	0.0	0.005	0.0	-0.001	0.006	0.0	0.006	0.006	0.0	0.006	-0.001
3 4	-0.008	0.005	-0.018	0.026	0.01	0.015	0.002	-0.002	0.0	0.0	-0.005	0.0	0.011	0.0	0.0	0.0	-0.015	0.001	-0.005	0.0	0.001	-0.012	-0.009	0.03	-0.004	-0.006	-0.007	0.0	-0.007	-0.001	-0.004	0.001	0.0
3 19	0.0	-0.004	-0.026	-0.01	0.0	-0.008	-0.001	-0.008	0.0	0.0	-0.001	0.0	-0.001	0.0	0.0	0.0	-0.005	0.002	0.001	0.004	0.012	0.012	0.004	-0.005	0.002	-0.01	0.011	0.002	0.01	0.011	0.002	0.01	0.0
3 26	0.01	0.005	-0.018	-0.006	-0.008	0.002	0.002	0.015	0.0	0.0	0.011	0.0	-0.005	0.0	0.0	0.0	0.03	-0.004	-0.005	-0.009	-0.012	0.001	0.0	-0.015	0.001	0.026	-0.001	-0.004	0.001	-0.007	0.0	-0.007	0.0
4 5	-0.008	-0.006	0.01	0.026	-0.018	0.015	-0.002	0.002	0.001	0.0	0.001	-0.005	-0.015	0.0	-0.007	0.0	0.011	0.0	0.0	0.0	-0.005	0.03	-0.004	-0.012	-0.009	0.005	0.0	0.0	0.0	0.001	-0.004	-0.001	-0.007
4 6	0.017	-0.001	0.013	-0.023	0.013	-0.059	-0.001	-0.001	0.0	0.0	0.005	0.001	0.004	0.0	0.006	0.0	0.004	0.0	0.001	0.0	0.005	-0.021	0.016	-0.021	0.016	-0.001	0.006	0.0	0.006	-0.001	0.008	-0.001	0.006
5 12	0.0	-0.01	0.0	-0.01	-0.026	0.008	-0.008	-0.001	0.002	0.004	0.012	0.001	-0.005	0.0	0.011	0.002	-0.001	0.0	0.0	0.0	-0.001	-0.005	0.002	0.012	0.004	-0.004	0.0	0.0	0.0	0.01	0.002	0.011	0.01
6 23	-0.004	0.0	-0.009	0.017	-0.004	-0.057	0.0	0.002	0.0	0.001	-0.002	0.005	-0.001	0.0	-0.001	0.0	-0.001	0.0	0.003	0.002	0.016	0.026	-0.02	0.001	0.015	0.0	0.004	0.001	0.003	-0.004	0.003	0.004	-0.001
6 25	-0.004	0.0	-0.004	0.017	-0.009	-0.057	0.002	0.0	0.0	0.002	0.016	0.003	-0.001	0.0	0.004	0.001	-0.001	0.0	0.005	0.001	-0.002	0.001	0.015	0.026	-0.02	0.0	-0.001	0.0	-0.001	0.004	0.003	-0.004	0.003
7 9	-0.009	0.017	-0.004	0.0	-0.004	0.0	-0.057	0.002	-0.02	0.015	0.001	0.005	0.026	0.003	0.004	0.003	0.016	0.002	0.0	0.0	-0.001	-0.001	0.0	-0.002	0.001	0.0	0.003	0.001	0.004	-0.001	0.0	-0.001	0.004
7 10	-0.004	0.017	-0.004	0.0	-0.009	0.002	-0.057	0.0	0.015	-0.02	0.026	0.003	0.001	0.005	-0.004	0.003	-0.002	0.001	0.0	0.0	-0.001	-0.001	0.0	0.016	0.002	0.0	-0.001	0.0	-0.001	0.003	0.001	0.004	0.004
8 18	-0.009	0.0	-0.004	0.0	-0.004	0.0	0.002	-0.057	0.002	0.0	-0.001	0.0	0.016	0.003	0.003	0.001	0.026	-0.02	0.005	0.015	0.001	-0.002	0.001	-0.001	0.0	0.017	0.004	0.003	-0.004	-0.001	0.0	-0.001	0.004
8 20	-0.004	0.0	-0.009	0.0	-0.004	0.002	0.0	-0.057	0.001	0.0	-0.001	0.0	-0.002	0.005	-0.001	0.0	0.001	0.015	0.003	-0.02	0.026	0.016	0.002	-0.001	0.0	0.017	-0.004	0.003	0.004	0.004	0.001	0.003	-0.001
8 26	0.013	-0.001	0.013	-0.001	0.017	-0.001	-0.001	-0.059	0.0	0.0	0.004	0.0	0.005	0.001	0.006	0.0	-0.021	0.016	0.001	0.016	-0.021	0.005	0.0	0.004	0.0	-0.023	-0.001	0.008	-0.001	0.006	0.0	0.006	0.006
9 13	-0.008	-0.012	0.004	-0.001	0.009	0.0	0.023	-0.009	0.026	0.0	0.006	-0.002	0.081	-0.014	0.05	0.009	-0.037	-0.005	0.0	0.0	0.0	0.001	0.0	0.0	-0.001	-0.002	-0.006	-0.001	-0.008	0.0	0.0	0.0	0.059
9 15	0.015	-0.002	0.0	0.001	-0.005	-0.001	0.008	0.006	0.024	-0.012	0.007	-0.003	0.058	0.007	-0.046	0.017	0.019	0.002	0.0	0.0	0.001	0.0	0.0	0.002	-0.001	0.002	0.003	0.001	0.004	0.001	0.0	0.001	-0.057
10 11	0.009	-0.012	0.004	-0.002	-0.008	-0.009	0.023	0.0	0.0	0.026	-0.081	-0.014	0.006	-0.002	0.059	0.009	0.0	-0.001	0.0	0.0	0.001	0.0	0.0	-0.037	-0.005	-0.001	0.0	0.0	0.0	-0.006	-0.001	-0.008	0.05
10 33	-0.005	-0.002	0.0	0.002	0.015	0.006	0.008	-0.001	-0.012	0.024	0.058	0.007	-0.007	-0.003	-0.057	-0.017	0.002	-0.001	0.0	0.0	0.0	0.001	0.0	0.019	0.002	0.001	0.001	0.0	0.001	0.003	0.001	0.004	-0.046

	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
11 12	0.001	0.003	-0.001	0.004	0.009	0.017	-0.014	0.0	0.0	-0.015	-0.094	0.014	0.004	0.0	-0.031	-0.005	0.0	0.0	0.0	0.0	0.001	0.0	-0.001	0.082	0.007	0.002	0.0	0.0	0.0	0.017	0.003	0.02	-0.024
12 24	-0.001	0.004	0.001	0.003	0.009	-0.014	0.017	0.0	-0.001	0.007	0.082	0.014	0.0	0.0	0.02	0.003	0.001	0.0	0.0	0.0	0.0	0.004	0.0	-0.094	-0.015	0.002	0.0	0.0	0.0	-0.024	-0.005	-0.031	0.017
13 14	0.009	0.003	-0.001	0.002	0.001	0.0	-0.014	0.017	-0.015	0.0	0.004	0.0	-0.094	0.014	-0.024	-0.005	0.082	0.007	0.0	-0.001	0.0	0.001	0.0	0.0	0.0	0.004	0.017	0.003	0.02	0.0	0.0	0.0	-0.031
14 17	0.009	0.004	0.001	0.002	-0.001	0.0	0.017	-0.014	0.007	-0.001	0.0	0.0	0.082	0.014	0.017	0.003	-0.094	-0.015	0.0	0.0	0.004	0.0	0.0	0.001	0.0	0.003	-0.024	-0.005	-0.031	0.0	0.0	0.0	0.02
15 16	-0.01	0.001	0.0	0.0	0.009	0.003	-0.004	-0.003	-0.015	0.01	0.035	0.004	-0.032	-0.004	-0.088	0.011	-0.009	-0.001	0.0	0.0	-0.001	0.0	0.0	0.01	0.001	0.0	-0.001	0.0	-0.002	0.001	0.0	0.002	0.083
16 33	0.009	0.001	0.0	0.0	-0.01	-0.003	-0.004	0.003	0.01	-0.015	-0.032	-0.004	0.035	0.004	0.083	0.011	0.01	0.001	0.0	0.0	0.0	-0.001	0.0	-0.009	-0.001	0.0	0.001	0.0	0.002	-0.001	0.0	-0.002	-0.088
17 18	-0.008	-0.002	0.009	-0.001	0.004	0.0	-0.009	0.023	-0.005	0.0	0.0	0.0	-0.037	-0.014	-0.006	-0.001	-0.081	0.026	-0.002	0.0	0.006	0.0	-0.001	0.001	0.0	-0.012	0.05	0.009	0.059	0.0	0.0	0.0	-0.008
18 27	0.015	0.002	-0.005	0.001	0.0	-0.001	0.006	0.008	0.002	0.0	0.001	0.0	0.019	0.007	0.003	0.001	0.058	0.024	-0.003	-0.012	-0.007	0.002	-0.001	0.0	0.0	-0.002	-0.046	-0.017	-0.057	0.001	0.0	0.001	0.004
19 21	0.001	0.002	0.009	0.004	-0.001	0.017	0.0	-0.014	0.0	0.0	0.001	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.004	0.0	0.014	-0.015	-0.094	0.082	0.007	0.0	-0.001	0.003	-0.031	-0.005	-0.024	0.02	0.003	0.017	0.0
19 22	-0.001	0.002	0.009	0.003	0.001	-0.014	0.0	0.017	0.0	0.0	0.0	0.0	0.001	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.001	0.014	0.007	0.082	-0.094	-0.015	0.004	0.0	0.004	0.02	0.003	0.017	-0.031	-0.005	-0.024	0.0
20 21	0.009	-0.001	-0.008	-0.002	0.004	-0.009	0.0	0.023	-0.001	0.0	0.001	0.0	0.0	-0.002	0.0	0.0	0.006	0.0	-0.014	0.026	-0.081	-0.037	-0.005	0.0	0.0	-0.012	0.059	0.009	0.05	-0.008	-0.001	-0.006	0.0
20 29	-0.005	0.001	0.015	0.002	0.0	0.006	-0.001	0.008	-0.001	0.0	0.0	0.0	0.002	-0.003	0.001	0.0	-0.007	-0.012	0.007	0.024	0.058	0.019	0.002	0.001	0.0	-0.002	-0.057	-0.017	-0.046	0.004	0.001	0.003	0.001
22 23	0.004	-0.001	-0.008	-0.012	0.009	0.023	0.0	-0.009	0.0	-0.001	0.0	-0.002	0.001	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-0.014	-0.005	-0.037	-0.081	0.026	0.006	0.0	-0.002	-0.008	-0.001	-0.006	0.059	0.009	0.05	0.0
23 32	0.0	0.001	0.015	-0.002	-0.005	0.008	-0.001	0.006	0.0	-0.001	0.002	-0.003	0.0	0.0	0.001	0.0	0.001	0.0	0.007	0.002	0.019	0.058	0.024	-0.007	-0.012	0.002	0.004	0.001	0.003	-0.057	-0.017	-0.046	0.001
24 25	0.004	-0.002	0.009	-0.012	-0.008	0.023	-0.009	0.0	0.0	-0.005	-0.037	-0.014	0.0	0.0	-0.008	-0.001	0.001	0.0	-0.002	-0.001	0.0	0.006	0.0	-0.081	0.026	-0.001	0.0	0.0	0.0	0.05	0.009	0.059	-0.006
25 30	0.0	0.002	-0.005	-0.002	0.015	0.008	0.006	-0.001	0.0	0.002	0.019	0.007	0.001	0.0	0.004	0.001	0.0	0.0	-0.003	-0.001	0.002	-0.007	-0.012	0.058	0.024	0.001	0.001	0.0	0.001	-0.046	-0.017	-0.057	0.003
27 28	-0.01	0.0	0.009	0.0	0.0	0.003	-0.003	-0.004	-0.001	0.0	-0.001	0.0	-0.009	-0.004	-0.001	0.0	-0.032	-0.015	0.004	0.01	0.035	0.01	0.001	0.0	0.0	0.001	-0.088	0.011	0.083	0.002	0.0	0.001	-0.002
28 29	0.009	0.0	-0.01	0.0	0.0	-0.003	-0.004	0.001	0.0	0.0	0.0	0.01	0.004	0.001	0.0	0.035	0.01	-0.004	-0.015	-0.032	-0.009	-0.001	-0.001	0.0	0.001	0.083	0.011	-0.088	-0.002	0.0	-0.001	0.002	
30 31	0.0	0.0	0.009	0.001	-0.01	-0.004	-0.003	0.003	0.0	-0.001	-0.009	-0.004	-0.001	0.0	-0.002	0.0	0.0	0.0	0.004	0.001	0.01	0.035	0.01	-0.032	-0.015	0.0	0.002	0.0	0.001	-0.088	0.011	0.083	-0.001
31 32	0.0	0.0	-0.01	0.001	0.009	-0.004	0.003	-0.003	0.0	0.001	0.01	0.004	0.0	0.0	0.002	0.0	-0.001	0.0	-0.004	-0.001	-0.009	-0.032	-0.015	0.035	0.01	0.0	-0.002	0.0	-0.001	0.083	0.011	-0.088	0.001

7.2. Presentation of molecule:



8. Bond-Bond-Polarizability

8.1. Calculated values:

	1 2	1 14	1 26	2 5	2 7	3 4	3 19	3 26	4 5	4 6	5 12	6 23	6 25	7 9	7 10	8 18	8 20	8 26	9 13	9 15	10 11	10 33	11 12	12 24	13 14	14 17	15 16	16 33	17 18	18 27	19 21	19 22	20 21	20 29	22 23	23 32	24 25	25 30	27 28	28 29	30 31	31 32					
1 2	0.2 8																																														
1 14	- 0.1 02	0.3 04																																													
1 26	- 0.1 24	- 0.1 02	0.2 8																																												
2 5	- 0.1 28	0.0 13	0.0 64	0.2 8																																											
2 7	- 0.0 98	0.0 39	0.0 14	- 0.0 98	0.2 5																																										
3 4	- 0.0 34	- 0.0 07	0.0 64	0.0 64	- 0.0 1	0.2 8																																									
3 19	- 0.0 07	- 0.0 01	0.0 13	- 0.0 07	0.0 06	- 0.1 02	0.3 04																																								
3 26	0.0 64	0.0 13	- 0.1 28	- 0.0 34	- 0.0 1	- 0.1 24	- 0.1 02	0.2 8																																							
4 5	0.0 64	- 0.0 07	- 0.0 34	- 0.1 24	0.0 14	- 0.1 28	0.0 13	0.0 64	0.2 8																																						
4 6	- 0.0 1	0.0 06	- 0.0 1	0.0 14	0.0 01	- 0.0 98	0.0 39	0.0 14	- 0.0 98	0.2 5																																					
5 12	0.0 13	- 0.0 01	- 0.0 07	- 0.1 02	0.0 39	0.0 13	- 0.0 01	- 0.0 07	- 0.1 02	0.0 39	0.3 04																																				
6 23	0.0	- 0.0 01	0.0 04	0.0	0.0 01	0.0 27	- 0.0 06	- 0.0 06	0.0 11	- 0.0 58	- 0.0 06	0.2 43																																			
6 25	0.0 04	- 0.0 01	0.0	- 0.0 06	0.0	0.0 11	- 0.0 06	0.0	0.0 27	- 0.0 58	- 0.0 06	- 0.0 53	0.2 43																																		
7 9	0.0 27	- 0.0 06	- 0.0 06	0.0 11	- 0.0 58	0.0	- 0.0 01	0.0 04	0.0	0.0 01	- 0.0 06	0.0	- 0.0 01	0.2 43																																	
7 10	0.0 11	- 0.0 06	0.0	0.0 27	- 0.0 58	0.0 04	- 0.0 01	0.0	- 0.0 06	0.0	- 0.0 06	- 0.0 01	- 0.0 05	- 0.0 53	0.2 43																																

	1 2	1 14	1 26	2 5	2 7	3 4	3 19	3 26	4 5	4 6	5 12	6 23	6 25	7 9	7 10	8 18	8 20	8 26	9 13	9 15	10 11	10 33	11 12	12 24	13 14	14 17	15 16	16 33	17 18	18 27	19 21	19 22	20 21	20 29	22 23	23 32	24 25	25 30	27 28	28 29	30 31	31 32				
8 18	- 0.0 06	- 0.0 06	0.0 27	0.0 04	0.0	0.0	- 0.0 06	0.0 11	0.0	0.0 01	- 0.0 01	- 0.0 01	0.0	- 0.0 05	- 0.0 01	0.2 43																														
8 20	0.0	- 0.0 06	0.0 11	0.0	0.0 01	- 0.0 06	- 0.0 06	0.0 27	0.0 04	0.0	- 0.0 01	- 0.0 05	- 0.0 01	- 0.0 01	0.0	- 0.0 53	0.2 43																													
8 26	0.0 14	0.0 39	- 0.0 98	- 0.0 1	0.0 01	0.0 14	0.0 39	- 0.0 98	- 0.0 1	0.0 01	0.0 06	0.0	0.0 01	0.0 01	0.0	- 0.0 58	- 0.0 58	0.2 5																												
9 13	- 0.0 18	0.0 53	- 0.0 14	- 0.0 08	0.0 32	- 0.0 02	0.0 01	0.0	0.0 03	0.0	- 0.0 01	0.0	0.0	- 0.1 1	- 0.0 04	0.0 14	0.0 02	0.0 1	0.3 34																											
9 15	- 0.0 03	- 0.0 27	0.0 15	- 0.0 02	0.0 06	0.0 03	0.0	- 0.0 03	- 0.0 02	0.0	0.0 06	0.0 01	0.0 01	- 0.0 89	0.0 41	- 0.0 07	- 0.0 01	- 0.0 08	- 0.1 9	0.3 24																										
10 11	- 0.0 08	- 0.0 01	0.0 03	- 0.0 18	0.0 32	0.0	0.0 01	- 0.0 02	- 0.0 14	0.0 1	0.0 53	0.0 02	0.0 14	- 0.0 04	- 0.1 1	0.0	0.0	0.0	- 0.0 05	0.0 11	0.3 34																									
10 33	- 0.0 02	0.0 06	- 0.0 02	- 0.0 03	0.0 06	- 0.0 03	0.0	0.0 03	0.0 15	- 0.0 08	- 0.0 27	- 0.0 01	- 0.0 07	0.0 41	- 0.0 89	0.0 01	0.0 01	0.0	0.0 11	- 0.0 49	- 0.1 9	0.3 24																								
11 12	- 0.0 14	0.0 03	0.0 08	0.0 43	- 0.0 09	0.0 05	- 0.0 02	- 0.0 03	0.0 21	- 0.0 18	- 0.1 14	- 0.0 02	- 0.0 27	0.0 04	0.0 49	0.0	0.0 01	- 0.0 02	0.0 01	- 0.0 06	- 0.1 77	0.0 66	0.3 37																							
12 24	0.0 05	- 0.0 02	- 0.0 03	0.0 21	- 0.0 18	- 0.0 14	0.0 03	0.0 08	0.0 43	- 0.0 09	- 0.1 14	0.0 04	0.0 49	- 0.0 02	- 0.0 27	0.0 01	0.0	- 0.0 02	0.0	0.0 02	0.0 74	- 0.0 31	- 0.2 09	0.3 37																						
13 14	0.0 43	- 0.1 14	0.0 21	- 0.0 14	- 0.0 09	- 0.0 03	- 0.0 02	0.0 05	0.0 08	- 0.0 02	0.0 03	0.0 01	0.0	0.0 49	0.0 04	- 0.0 27	- 0.0 02	- 0.0 18	- 0.1 77	0.0 66	0.0 01	- 0.0 06	- 0.0 02	0.0	0.3 37																					
14 17	0.0 21	- 0.1 14	0.0 43	0.0 05	- 0.0 18	0.0 08	0.0 03	- 0.0 14	- 0.0 03	- 0.0 02	0.0 02	0.0	0.0 01	- 0.0 27	- 0.0 02	0.0 49	0.0 04	- 0.0 09	0.0 74	- 0.0 31	0.0	0.0 02	0.0	0.0 02	- 0.2 09	0.3 37																				
15 16	0.0 01	0.0 15	- 0.0 08	0.0 02	- 0.0 03	- 0.0 02	0.0	0.0 03	0.0 07	- 0.0 13	- 0.0 01	- 0.0 04	0.0	0.0 47	- 0.0 25	0.0 04	0.0 01	0.0 03	0.0 74	- 0.1 88	- 0.0 62	0.1 2	0.0 29	- 0.0 15	- 0.0 31	0.0 15	0.3 04																			
16 33	0.0 02	- 0.0 13	0.0 07	0.0 01	- 0.0 03	0.0	0.0	- 0.0 02	- 0.0 08	0.0 03	0.0 15	0.0 01	0.0 04	- 0.0 25	0.0 47	- 0.0 04	- 0.0 01	- 0.0 03	- 0.0 62	0.1 2	0.0 74	- 0.1 88	- 0.0 31	0.0 15	0.0 29	- 0.0 15	- 0.2 69	0.3 04																		
17 18	- 0.0 14	0.0 53	- 0.0 18	0.0 1	0.0 03	0.0	- 0.0 01	- 0.0 08	- 0.0 02	0.0	0.0 01	0.0	0.0	0.0 14	0.0 02	- 0.1 1	- 0.0 04	0.0 32	- 0.0 32	0.0 13	0.0	- 0.0 02	0.0	- 0.0 01	0.0 74	- 0.1 77	- 0.0 07	0.0 08	0.3 34																	
18 27	0.0 15	- 0.0 27	- 0.0 03	- 0.0 03	- 0.0 08	- 0.0 02	0.0 06	- 0.0 02	0.0 03	0.0	0.0 01	0.0 01	0.0 01	- 0.0 07	- 0.0 01	- 0.0 89	0.0 41	0.0 06	0.0 13	- 0.0 05	0.0 01	0.0	0.0	0.0	- 0.0 31	0.0 66	0.0 03	- 0.0 03	- 0.1 9	0.3 24																
19 21	0.0 08	0.0 03	- 0.0 14	- 0.0 03	- 0.0 02	0.0 21	- 0.1 14	0.0 43	0.0 05	- 0.0 18	- 0.0 02	- 0.0 27	0.0	0.0 01	0.0 01	0.0 04	0.0 49	- 0.0 09	0.0	0.0	- 0.0 01	0.0	0.0 02	0.0	0.0	- 0.0 02	0.0	0.0 01	- 0.0 06	0.3 37																
19 22	- 0.0 03	- 0.0 02	0.0 05	0.0 08	- 0.0 02	0.0 43	- 0.1 14	0.0 21	- 0.0 14	- 0.0 09	0.0 03	0.0 49	0.0 04	0.0 01	0.0	- 0.0 02	- 0.0 27	- 0.0 18	- 0.0 01	0.0	0.0	0.0	0.0	- 0.0 02	0.0 02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0 02	- 0.2 09	0.3 37														

	1 2	1 14	1 26	2 5	2 7	3 4	3 19	3 26	4 5	4 6	5 12	6 23	6 25	7 9	7 10	8 18	8 20	8 26	9 13	9 15	10 11	10 33	11 12	12 24	13 14	14 17	15 16	16 33	17 18	18 27	19 21	19 22	20 21	20 29	22 23	23 32	24 25	25 30	27 28	28 29	30 31	31 32					
20 21	0.0 03	- 0.0 01	- 0.0 08	- 0.0 02	0.0	- 0.0 14	0.0 53	- 0.0 18	0.0 1	0.0 01	0.0 01	0.0 14	0.0 02	0.0	0.0	- 0.0 04	- 0.1 1	0.0 32	0.0	0.0 01	0.0 01	0.0	- 0.0 01	0.0	0.0	0.0 01	0.0	0.0	- 0.0 05	0.0 11	- 0.1 77	0.0 74	0.3 34														
20 29	- 0.0 02	0.0 06	- 0.0 02	0.0 03	0.0	0.0 15	- 0.0 27	- 0.0 03	- 0.0 03	- 0.0 08	0.0	- 0.0 07	- 0.0 01	0.0 01	0.0 01	0.0 41	- 0.0 89	0.0 06	- 0.0 02	0.0	0.0	- 0.0 01	0.0	0.0	0.0 02	- 0.0 06	- 0.0 01	0.0 01	0.0 11	- 0.0 49	0.0 66	- 0.0 31	- 0.1 9	0.3 24													
22 23	- 0.0 02	0.0 01	0.0	0.0 03	0.0	- 0.0 18	0.0 53	- 0.0 14	- 0.0 08	0.0 32	- 0.0 01	- 0.1 1	- 0.0 04	0.0	0.0	0.0 02	0.0 14	0.0 1	0.0 01	0.0	0.0	0.0 01	0.0	0.0 01	- 0.0 01	0.0	0.0	0.0	0.0	- 0.0 02	0.0 74	- 0.1 77	- 0.0 32	0.0 13	0.3 34												
23 32	0.0 03	0.0	- 0.0 03	- 0.0 02	0.0	- 0.0 03	- 0.0 27	0.0 15	- 0.0 02	0.0 06	0.0 06	- 0.0 89	0.0 41	0.0 01	0.0 01	- 0.0 01	- 0.0 07	- 0.0 08	0.0	- 0.0 01	- 0.0 02	0.0	0.0 02	- 0.0 06	0.0	0.0	0.0 01	- 0.0 01	0.0 01	0.0	- 0.0 31	0.0 66	0.0 13	- 0.0 05	- 0.1 9	0.3 24											
24 25	0.0	0.0 01	- 0.0 02	- 0.0 14	0.0 1	- 0.0 08	- 0.0 01	0.0 03	- 0.0 18	0.0 32	0.0 53	- 0.0 04	- 0.1 1	0.0 02	0.0 14	0.0	0.0	0.0	0.0	- 0.0 02	- 0.0 32	0.0 13	0.0 74	- 0.1 77	0.0	- 0.0 01	0.0 08	- 0.0 07	0.0 01	0.0	0.0	0.0 01	0.0	0.0 01	- 0.0 05	0.0 11	0.3 34										
25 30	- 0.0 03	0.0	0.0 03	0.0 15	- 0.0 08	- 0.0 02	0.0 06	- 0.0 02	- 0.0 03	0.0 06	- 0.0 27	0.0 41	- 0.0 89	- 0.0 01	- 0.0 07	0.0 01	0.0 01	0.0	0.0 01	0.0	0.0 13	- 0.0 05	- 0.0 31	0.0 66	0.0	0.0	- 0.0 03	0.0 03	0.0	- 0.0 01	0.0 02	- 0.0 06	- 0.0 02	0.0	0.0 11	- 0.0 49	- 0.1 9	0.3 24									
27 28	- 0.0 08	0.0 15	0.0 01	0.0 03	0.0 03	0.0 07	- 0.0 13	0.0 02	- 0.0 02	- 0.0 03	0.0	- 0.0 04	- 0.0 01	0.0 04	0.0 01	0.0 47	- 0.0 25	- 0.0 03	- 0.0 07	0.0 03	0.0	- 0.0 01	0.0	0.0	0.0 15	- 0.0 31	- 0.0 02	0.0 02	0.0 74	- 0.1 88	0.0 29	- 0.0 15	- 0.0 62	0.1 2	0.0 08	- 0.0 03	0.0	0.0 01	0.3 04								
28 29	0.0 07	- 0.0 13	0.0 02	- 0.0 02	- 0.0 03	- 0.0 08	0.0 15	0.0 01	0.0 03	0.0 03	0.0	0.0 04	0.0 01	- 0.0 04	- 0.0 01	- 0.0 25	0.0 47	- 0.0 03	0.0 08	- 0.0 03	0.0	0.0 01	0.0	0.0	- 0.0 15	0.0 29	0.0 02	- 0.0 02	- 0.0 62	0.1 2	- 0.0 31	0.0 15	0.0 74	- 0.1 88	- 0.0 07	0.0 03	0.0	- 0.0 01	- 0.2 69	0.3 04							
30 31	0.0 03	0.0	- 0.0 02	- 0.0 08	0.0 03	0.0 02	- 0.0 13	0.0 07	0.0 01	- 0.0 03	0.0 15	- 0.0 25	0.0 47	0.0 01	0.0 04	- 0.0 01	- 0.0 04	- 0.0 03	0.0	- 0.0 01	- 0.0 07	0.0 03	0.0 15	- 0.0 31	0.0	0.0	0.0 02	- 0.0 02	0.0	0.0 01	- 0.0 15	0.0 29	0.0 08	- 0.0 03	- 0.0 62	0.1 2	0.0 74	- 0.1 88	- 0.0 02	0.0 02	0.3 04						
31 32	- 0.0 02	0.0	0.0 03	0.0 07	- 0.0 03	0.0 01	0.0 15	- 0.0 08	0.0 02	- 0.0 03	- 0.0 13	0.0 47	- 0.0 25	- 0.0 01	- 0.0 04	0.0 01	0.0 04	0.0 03	0.0	0.0 01	0.0 08	- 0.0 03	- 0.0 15	0.0 29	0.0	0.0	- 0.0 02	0.0 02	0.0	- 0.0 01	0.0 15	- 0.0 31	- 0.0 07	0.0 03	0.0 74	- 0.1 88	- 0.0 62	0.1 2	0.0 02	- 0.0 02	- 0.2 69	0.3 04					

8.2. Presentation of molecule:

