Electronic Supplementary Material (ESI) for Physical Chemistry Chemical Physics

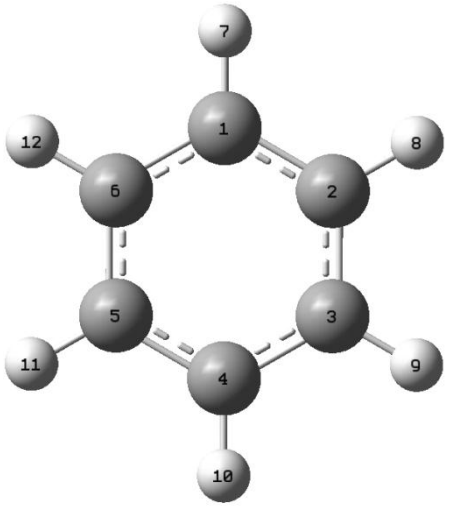
σ, π Aromaticity and Anti-Aromaticity as Retrieved by the Linear Response Kernel

Supplementary Material

Stijn Fias, Paul Geerlings, Paul Ayers, Frank de Proft

On the next pages, the linear response values for the molecules discussed in the paper "σ, π Aromaticity and Anti-Aromaticity as Retrieved by the Linear Response Kernel" by Fias *et al.* are given. The numbering of the atoms is shown in the provided pictures. When molecules are discussed in different ionization states, the numbering of the atoms is the same for all ionization states.

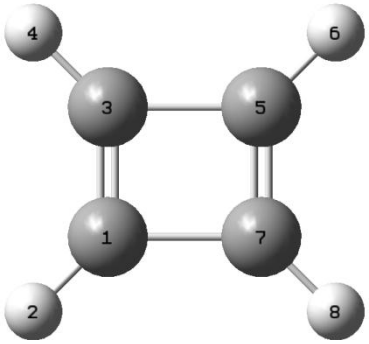
Benzene



AT1	AT2	Total	Sigma	Pi
1	1	-2.66781	-1.12819	-1.53962
1	2	0.53669	0.22595	0.31074
1	3	0.28071	0.07436	0.20635
1	4	0.50298	0.01987	0.48310
1	5	0.28071	0.07436	0.20635
1	6	0.53669	0.22595	0.31074
1	7	0.18685	0.31419	-0.12733
1	8	0.10461	0.06777	0.03685
1	9	0.04133	0.02676	0.01457
1	10	0.05132	0.00447	0.04685
1	11	0.04133	0.02676	0.01457
1	12	0.10461	0.06777	0.03685
2	1	0.53669	0.22595	0.31074
2	2	-2.66780	-1.12820	-1.53960
2	3	0.53666	0.22593	0.31073
2	4	0.28071	0.07436	0.20635
2	5	0.50294	0.01987	0.48307
2	6	0.28070	0.07435	0.20635
2	7	0.10462	0.06777	0.03685
2	8	0.18689	0.31422	-0.12732
2	9	0.10462	0.06777	0.03685
2	10	0.04133	0.02676	0.01457
2	11	0.05132	0.00447	0.04685
2	12	0.04133	0.02676	0.01457
3	1	0.28071	0.07436	0.20635
3	2	0.53666	0.22593	0.31073
3	3	-2.66780	-1.12820	-1.53960
3	4	0.53669	0.22595	0.31074
3	5	0.28070	0.07435	0.20635
3	6	0.50294	0.01987	0.48307
3	7	0.04133	0.02676	0.01457
3	8	0.10462	0.06777	0.03685
3	9	0.18689	0.31422	-0.12732
3	10	0.10462	0.06777	0.03685
3	11	0.04133	0.02676	0.01457
3	12	0.05132	0.00447	0.04685
4	1	0.50298	0.01987	0.48310
4	2	0.28071	0.07436	0.20635
4	3	0.53669	0.22595	0.31074
4	4	-2.66781	-1.12819	-1.53962
4	5	0.53669	0.22595	0.31074
4	6	0.28071	0.07436	0.20635
4	7	0.05132	0.00447	0.04685
4	8	0.04133	0.02676	0.01457
4	9	0.10461	0.06777	0.03685
4	10	0.18685	0.31419	-0.12733
4	11	0.10461	0.06777	0.03685
4	12	0.04133	0.02676	0.01457
5	1	0.28071	0.07436	0.20635
5	2	0.50294	0.01987	0.48307
5	3	0.28070	0.07435	0.20635
5	4	0.53669	0.22595	0.31074
5	5	-2.66780	-1.12820	-1.53960
5	6	0.53666	0.22593	0.31073
5	7	0.04133	0.02676	0.01457
5	8	0.05132	0.00447	0.04685
5	9	0.04133	0.02676	0.01457
5	10	0.10462	0.06777	0.03685
5	11	0.18689	0.31422	-0.12732
5	12	0.10462	0.06777	0.03685
6	1	0.53669	0.22595	0.31074
6	2	0.28070	0.07435	0.20635
6	3	0.50294	0.01987	0.48307
6	4	0.28071	0.07436	0.20635
6	5	0.53666	0.22593	0.31073
6	6	-2.66780	-1.12820	-1.53960
6	7	0.10462	0.06777	0.03685
6	8	0.04133	0.02676	0.01457
6	9	0.05132	0.00447	0.04685
6	10	0.04133	0.02676	0.01457
6	11	0.10462	0.06777	0.03685
6	12	0.18689	0.31422	-0.12732
7	1	0.18685	0.31419	-0.12733
7	2	0.10462	0.06777	0.03685
7	3	0.04133	0.02676	0.01457
7	4	0.05132	0.00447	0.04685
7	5	0.04133	0.02676	0.01457
7	6	0.10462	0.06777	0.03685
7	7	-0.56943	-0.53456	-0.03487
7	8	0.01016	0.00683	0.00333
7	9	0.00735	0.00632	0.00103
7	10	0.00434	0.00055	0.00380
7	11	0.00735	0.00632	0.00103
7	12	0.01016	0.00683	0.00333
8	1	0.10461	0.06777	0.03685
8	2	0.18689	0.31422	-0.12732
8	3	0.10462	0.06777	0.03685
8	4	0.04133	0.02676	0.01457
8	5	0.05132	0.00447	0.04685
8	6	0.04133	0.02676	0.01457
8	7	0.01016	0.00683	0.00333
8	8	-0.56947	-0.53459	-0.03488
8	9	0.01016	0.00684	0.00333
8	10	0.00735	0.00632	0.00103
8	11	0.00434	0.00055	0.00380
8	12	0.00735	0.00632	0.00103
9	1	0.04133	0.02676	0.01457
9	2	0.10462	0.06777	0.03685
9	3	0.18689	0.31422	-0.12732
9	4	0.10461	0.06777	0.03685
9	5	0.04133	0.02676	0.01457
9	6	0.05132	0.00447	0.04685
9	7	0.00735	0.00632	0.00103
9	8	0.01016	0.00684	0.00333

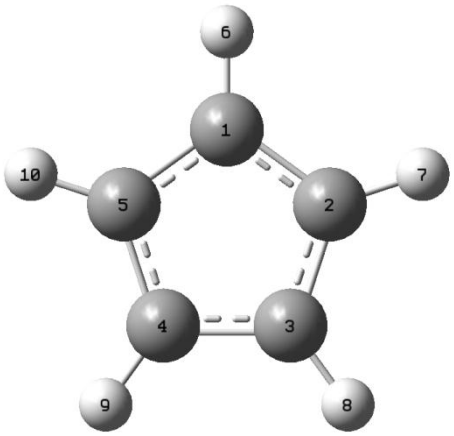
9	9	-0.56947	-0.53459	-0.03488
9	10	0.01016	0.00683	0.00333
9	11	0.00735	0.00632	0.00103
9	12	0.00434	0.00055	0.00380
10	1	0.05132	0.00447	0.04685
10	2	0.04133	0.02676	0.01457
10	3	0.10462	0.06777	0.03685
10	4	0.18685	0.31419	-0.12733
10	5	0.10462	0.06777	0.03685
10	6	0.04133	0.02676	0.01457
10	7	0.00434	0.00055	0.00380
10	8	0.00735	0.00632	0.00103
10	9	0.01016	0.00683	0.00333
10	10	-0.56943	-0.53456	-0.03487
10	11	0.01016	0.00683	0.00333
10	12	0.00735	0.00632	0.00103
11	1	0.04133	0.02676	0.01457
11	2	0.05132	0.00447	0.04685
11	3	0.04133	0.02676	0.01457
11	4	0.10461	0.06777	0.03685
11	5	0.18689	0.31422	-0.12732
11	6	0.10462	0.06777	0.03685
11	7	0.00735	0.00632	0.00103
11	8	0.00434	0.00055	0.00380
11	9	0.00735	0.00632	0.00103
11	10	0.01016	0.00683	0.00333
11	11	-0.56947	-0.53459	-0.03488
11	12	0.01016	0.00684	0.00333
12	1	0.10461	0.06777	0.03685
12	2	0.04133	0.02676	0.01457
12	3	0.05132	0.00447	0.04685
12	4	0.04133	0.02676	0.01457
12	5	0.10462	0.06777	0.03685
12	6	0.18689	0.31422	-0.12732
12	7	0.01016	0.00683	0.00333
12	8	0.00735	0.00632	0.00103
12	9	0.00434	0.00055	0.00380
12	10	0.00735	0.00632	0.00103
12	11	0.01016	0.00684	0.00333
12	12	-0.56947	-0.53459	-0.03488

Cyclobutadiene (D2h)



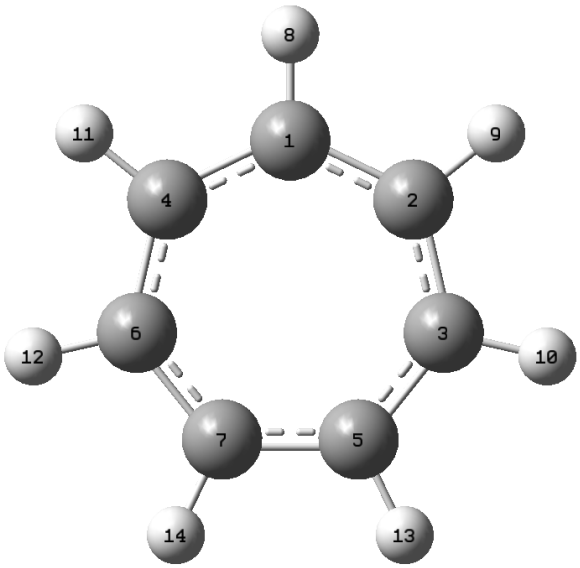
AT1	AT2	Total	Sigma	Pi
1	1	-3.18186	-1.35719	-1.82467
1	2	0.10454	0.28125	-0.17671
1	3	1.94677	0.20058	1.74619
1	4	0.27516	0.07927	0.19588
1	5	0.12382	0.13980	-0.01598
1	6	0.03815	0.04922	-0.01107
1	7	0.58160	0.51208	0.06952
1	8	0.11182	0.09500	0.01682
2	1	0.10454	0.28125	-0.17671
2	2	-0.58517	-0.53884	-0.04633
2	3	0.27516	0.07927	0.19588
2	4	0.03067	0.00828	0.02239
2	5	0.03815	0.04922	-0.01107
2	6	0.01832	0.01995	-0.00162
2	7	0.11182	0.09500	0.01682
2	8	0.00652	0.00587	0.00064
3	1	1.94677	0.20058	1.74619
3	2	0.27516	0.07927	0.19588
3	3	-3.18186	-1.35719	-1.82467
3	4	0.10454	0.28125	-0.17671
3	5	0.58160	0.51208	0.06952
3	6	0.11182	0.09500	0.01682
3	7	0.12382	0.13980	-0.01598
3	8	0.03815	0.04922	-0.01107
4	1	0.27516	0.07927	0.19588
4	2	0.03067	0.00828	0.02239
4	3	0.10454	0.28125	-0.17671
4	4	-0.58517	-0.53884	-0.04633
4	5	0.11182	0.09500	0.01682
4	6	0.00652	0.00587	0.00064
4	7	0.03815	0.04922	-0.01107
4	8	0.01832	0.01995	-0.00162
5	1	0.12382	0.13980	-0.01598
5	2	0.03815	0.04922	-0.01107
5	3	0.58160	0.51208	0.06952
5	4	0.11182	0.09500	0.01682
5	5	-3.18186	-1.35719	-1.82467
5	6	0.10454	0.28125	-0.17671
5	7	1.94677	0.20058	1.74619
5	8	0.27516	0.07927	0.19588
6	1	0.03815	0.04922	-0.01107
6	2	0.01832	0.01995	-0.00162
6	3	0.11182	0.09500	0.01682
6	4	0.00652	0.00587	0.00064
6	5	0.10454	0.28125	-0.17671
6	6	-0.58517	-0.53884	-0.04633
6	7	0.27516	0.07927	0.19588
6	8	0.03067	0.00828	0.02239
7	1	0.58160	0.51208	0.06952
7	2	0.11182	0.09500	0.01682
7	3	0.12382	0.13980	-0.01598
7	4	0.03815	0.04922	-0.01107
7	5	1.94677	0.20058	1.74619
7	6	0.27516	0.07927	0.19588
7	7	-3.18186	-1.35719	-1.82467
7	8	0.10454	0.28125	-0.17671
8	1	0.11182	0.09500	0.01682
8	2	0.00652	0.00587	0.00064
8	3	0.03815	0.04922	-0.01107
8	4	0.01832	0.01995	-0.00162
8	5	0.27516	0.07927	0.19588
8	6	0.03067	0.00828	0.02239
8	7	0.10454	0.28125	-0.17671
8	8	-0.58517	-0.53884	-0.04633

Cyclopentadienyl anion



AT1	AT2	Total	Sigma	Pi
1	1	-2.65716	-1.18079	-1.47637
1	2	0.56411	0.24341	0.32070
1	3	0.48115	0.08341	0.39773
1	4	0.48115	0.08341	0.39773
1	5	0.56411	0.24341	0.32070
1	6	0.16098	0.31080	-0.14982
1	7	0.11599	0.07613	0.03987
1	8	0.08682	0.03203	0.05479
1	9	0.08682	0.03203	0.05479
1	10	0.11599	0.07613	0.03987
2	1	0.56411	0.24341	0.32070
2	2	-2.65714	-1.18085	-1.47628
2	3	0.56408	0.24345	0.32064
2	4	0.48109	0.08341	0.39768
2	5	0.48113	0.08341	0.39773
2	6	0.11603	0.07613	0.03990
2	7	0.16104	0.31084	-0.14980
2	8	0.11600	0.07613	0.03987
2	9	0.08682	0.03204	0.05478
2	10	0.08683	0.03204	0.05480
3	1	0.48115	0.08341	0.39773
3	2	0.56408	0.24345	0.32064
3	3	-2.65704	-1.18079	-1.47625
3	4	0.56402	0.24338	0.32065
3	5	0.48110	0.08341	0.39768
3	6	0.08680	0.03203	0.05477
3	7	0.11605	0.07614	0.03991
3	8	0.16101	0.31082	-0.14981
3	9	0.11603	0.07613	0.03989
3	10	0.08681	0.03204	0.05478
4	1	0.48115	0.08341	0.39773
4	2	0.48109	0.08341	0.39768
4	3	0.56402	0.24338	0.32065
4	4	-2.65704	-1.18079	-1.47625
4	5	0.56408	0.24345	0.32064
4	6	0.08680	0.03203	0.05477
4	7	0.08681	0.03204	0.05478
4	8	0.11603	0.07613	0.03989
4	9	0.16101	0.31082	-0.14981
4	10	0.11605	0.07614	0.03991
5	1	0.56411	0.24341	0.32070
5	2	0.48113	0.08341	0.39773
5	3	0.48110	0.08341	0.39768
5	4	0.56408	0.24345	0.32064
5	5	-2.65714	-1.18085	-1.47628
5	6	0.11603	0.07613	0.03990
5	7	0.08683	0.03204	0.05480
5	8	0.08682	0.03204	0.05478
5	9	0.11600	0.07613	0.03987
5	10	0.16104	0.31084	-0.14980
6	1	0.16098	0.31080	-0.14982
6	2	0.11603	0.07613	0.03990
6	3	0.08680	0.03203	0.05477
6	4	0.08680	0.03203	0.05477
6	5	0.11603	0.07613	0.03990
6	6	-0.61459	-0.55463	-0.05996
6	7	0.00846	0.00487	0.00359
6	8	0.01551	0.00888	0.00663
6	9	0.01551	0.00888	0.00663
6	10	0.00846	0.00487	0.00359
7	1	0.11599	0.07613	0.03987
7	2	0.16104	0.31084	-0.14980
7	3	0.11605	0.07614	0.03991
7	4	0.08681	0.03204	0.05478
7	5	0.08683	0.03204	0.05480
7	6	0.00846	0.00487	0.00359
7	7	-0.61465	-0.55467	-0.05999
7	8	0.00846	0.00487	0.00359
7	9	0.01552	0.00888	0.00664
7	10	0.01552	0.00888	0.00664
8	1	0.08682	0.03203	0.05479
8	2	0.11600	0.07613	0.03987
8	3	0.16101	0.31082	-0.14981
8	4	0.11603	0.07613	0.03989
8	5	0.08682	0.03204	0.05478
8	6	0.01551	0.00888	0.00663
8	7	0.00846	0.00487	0.00359
8	8	-0.61464	-0.55464	-0.05999
8	9	0.00846	0.00487	0.00359
8	10	0.01552	0.00888	0.00664
9	1	0.08682	0.03203	0.05479
9	2	0.08682	0.03204	0.05478
9	3	0.11603	0.07613	0.03989
9	4	0.16101	0.31082	-0.14981
9	5	0.11600	0.07613	0.03987
9	6	0.01551	0.00888	0.00663
9	7	0.01552	0.00888	0.00664
9	8	0.00846	0.00487	0.00359
9	9	-0.61464	-0.55464	-0.05999
9	10	0.00846	0.00487	0.00359
10	1	0.11599	0.07613	0.03987
10	2	0.08683	0.03204	0.05480
10	3	0.08681	0.03204	0.05478
10	4	0.11605	0.07614	0.03991
10	5	0.16104	0.31084	-0.14980
10	6	0.00846	0.00487	0.00359
10	7	0.01552	0.00888	0.00664
10	8	0.01552	0.00888	0.00664
10	9	0.00846	0.00487	0.00359
10	10	-0.61465	-0.55467	-0.05999

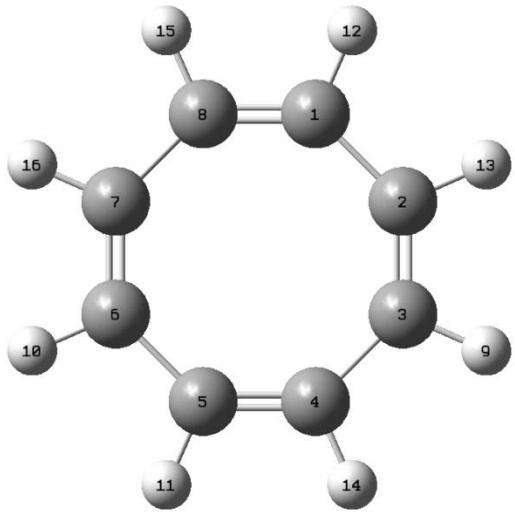
tropylium ion (cycloheptatrienyl cation)



AT1	AT2	Total	Sigma	Pi
1	1	-2.84767	-1.14259	-1.70508
1	2	0.49680	0.23371	0.26309
1	3	0.32095	0.08062	0.24033
1	4	0.49680	0.23371	0.26309
1	5	0.35225	0.01084	0.34141
1	6	0.32095	0.08062	0.24033
1	7	0.35225	0.01084	0.34141
1	8	0.18776	0.31021	-0.12245
1	9	0.09156	0.06307	0.02848
1	10	0.04087	0.02555	0.01533
1	11	0.09156	0.06307	0.02848
1	12	0.04087	0.02555	0.01533
1	13	0.02753	0.00242	0.02511
1	14	0.02753	0.00242	0.02511
2	1	0.49680	0.23371	0.26309
2	2	-2.84765	-1.14261	-1.70504
2	3	0.49679	0.23370	0.26309
2	4	0.32095	0.08062	0.24032
2	5	0.32095	0.08062	0.24033
2	6	0.35224	0.01084	0.34140
2	7	0.35224	0.01084	0.34141
2	8	0.09155	0.06307	0.02848
2	9	0.18777	0.31022	-0.12245
2	10	0.09156	0.06308	0.02848
2	11	0.04087	0.02555	0.01533
2	12	0.02753	0.00242	0.02511
2	13	0.04087	0.02554	0.01533
2	14	0.02753	0.00242	0.02511
3	1	0.32095	0.08062	0.24033
3	2	0.49679	0.23370	0.26309
3	3	-2.84767	-1.14260	-1.70506
3	4	0.35224	0.01084	0.34140
3	5	0.49681	0.23371	0.26311
3	6	0.35225	0.01083	0.34141
3	7	0.32095	0.08062	0.24033
3	8	0.04087	0.02555	0.01533
3	9	0.09155	0.06307	0.02848
3	10	0.18777	0.31022	-0.12245
3	11	0.02753	0.00242	0.02511
3	12	0.02753	0.00242	0.02511
3	13	0.09155	0.06307	0.02848
3	14	0.04087	0.02555	0.01533
4	1	0.49680	0.23371	0.26309
4	2	0.32095	0.08062	0.24032
4	3	0.35224	0.01084	0.34140
4	4	-2.84765	-1.14261	-1.70504
4	5	0.35224	0.01084	0.34141
4	6	0.49679	0.23370	0.26309
4	7	0.32095	0.08062	0.24033
4	8	0.09155	0.06307	0.02848
4	9	0.04087	0.02555	0.01533
4	10	0.02753	0.00242	0.02511
4	11	0.18777	0.31022	-0.12245
4	12	0.09156	0.06308	0.02848
4	13	0.02753	0.00242	0.02511
4	14	0.04087	0.02554	0.01533
5	1	0.35225	0.01084	0.34141
5	2	0.32095	0.08062	0.24033
5	3	0.49681	0.23371	0.26311
5	4	0.35224	0.01084	0.34141
5	5	-2.84768	-1.14261	-1.70507
5	6	0.32095	0.08062	0.24033
5	7	0.49679	0.23370	0.26310
5	8	0.02753	0.00242	0.02511
5	9	0.04087	0.02555	0.01533
5	10	0.09154	0.06306	0.02848
5	11	0.02753	0.00242	0.02511
5	12	0.04087	0.02554	0.01532
5	13	0.18777	0.31022	-0.12245
5	14	0.09155	0.06307	0.02848
6	1	0.32095	0.08062	0.24033
6	2	0.35224	0.01084	0.34140
6	3	0.35225	0.01083	0.34141
6	4	0.49679	0.23370	0.26309
6	5	0.32095	0.08062	0.24033
6	6	-2.84767	-1.14260	-1.70506
6	7	0.49681	0.23371	0.26311
6	8	0.04087	0.02555	0.01533
6	9	0.02753	0.00242	0.02511
6	10	0.02753	0.00242	0.02511
6	11	0.09155	0.06307	0.02848
6	12	0.18777	0.31022	-0.12245
6	13	0.04087	0.02555	0.01533
6	14	0.09155	0.06307	0.02848
7	1	0.35225	0.01084	0.34141
7	2	0.35224	0.01084	0.34141
7	3	0.32095	0.08062	0.24033
7	4	0.32095	0.08062	0.24033
7	5	0.49679	0.23370	0.26310
7	6	0.49681	0.23371	0.26311
7	7	-2.84768	-1.14261	-1.70507
7	8	0.02753	0.00242	0.02511
7	9	0.02753	0.00242	0.02511
7	10	0.04087	0.02554	0.01532
7	11	0.04087	0.02555	0.01533
7	12	0.09154	0.06306	0.02848
7	13	0.09155	0.06307	0.02848
7	14	0.18777	0.31022	-0.12245
8	1	0.18776	0.31021	-0.12245
8	2	0.09155	0.06307	0.02848
8	3	0.04087	0.02555	0.01533
8	4	0.09155	0.06307	0.02848
8	5	0.02753	0.00242	0.02511
8	6	0.04087	0.02555	0.01533
8	7	0.02753	0.00242	0.02511

8	8	-0.54104	-0.51582	-0.02521
8	9	0.00844	0.00631	0.00214
8	10	0.00617	0.00505	0.00112
8	11	0.00844	0.00631	0.00214
8	12	0.00617	0.00505	0.00112
8	13	0.00207	0.00041	0.00166
8	14	0.00207	0.00041	0.00166
9	1	0.09156	0.06307	0.02848
9	2	0.18777	0.31022	-0.12245
9	3	0.09155	0.06307	0.02848
9	4	0.04087	0.02555	0.01533
9	5	0.04087	0.02555	0.01533
9	6	0.02753	0.00242	0.02511
9	7	0.02753	0.00242	0.02511
9	8	0.00844	0.00631	0.00214
9	9	-0.54107	-0.51585	-0.02522
9	10	0.00844	0.00631	0.00214
9	11	0.00617	0.00505	0.00112
9	12	0.00207	0.00041	0.00166
9	13	0.00617	0.00505	0.00112
9	14	0.00207	0.00041	0.00166
10	1	0.04087	0.02555	0.01533
10	2	0.09156	0.06308	0.02848
10	3	0.18777	0.31022	-0.12245
10	4	0.02753	0.00242	0.02511
10	5	0.09154	0.06306	0.02848
10	6	0.02753	0.00242	0.02511
10	7	0.04087	0.02554	0.01532
10	8	0.00617	0.00505	0.00112
10	9	0.00844	0.00631	0.00214
10	10	-0.54104	-0.51583	-0.02521
10	11	0.00207	0.00041	0.00166
10	12	0.00207	0.00041	0.00166
10	13	0.00845	0.00631	0.00214
10	14	0.00617	0.00505	0.00112
11	1	0.09156	0.06307	0.02848
11	2	0.04087	0.02555	0.01533
11	3	0.02753	0.00242	0.02511
11	4	0.18777	0.31022	-0.12245
11	5	0.02753	0.00242	0.02511
11	6	0.09155	0.06307	0.02848
11	7	0.04087	0.02555	0.01533
11	8	0.00844	0.00631	0.00214
11	9	0.00617	0.00505	0.00112
11	10	0.00207	0.00041	0.00166
11	11	-0.54107	-0.51585	-0.02522
11	12	0.00844	0.00631	0.00214
11	13	0.00207	0.00041	0.00166
11	14	0.00617	0.00505	0.00112
12	1	0.04087	0.02555	0.01533
12	2	0.02753	0.00242	0.02511
12	3	0.02753	0.00242	0.02511
12	4	0.09156	0.06308	0.02848
12	5	0.04087	0.02554	0.01532
12	6	0.18777	0.31022	-0.12245
12	7	0.09154	0.06306	0.02848
12	8	0.00617	0.00505	0.00112
12	9	0.00207	0.00041	0.00166
12	10	0.00207	0.00041	0.00166
12	11	0.00844	0.00631	0.00214
12	12	-0.54104	-0.51583	-0.02521
12	13	0.00617	0.00505	0.00112
12	14	0.00845	0.00631	0.00214
13	1	0.02753	0.00242	0.02511
13	2	0.04087	0.02554	0.01533
13	3	0.09155	0.06307	0.02848
13	4	0.02753	0.00242	0.02511
13	5	0.18777	0.31022	-0.12245
13	6	0.04087	0.02555	0.01533
13	7	0.09155	0.06307	0.02848
13	8	0.00207	0.00041	0.00166
13	9	0.00617	0.00505	0.00112
13	10	0.00845	0.00631	0.00214
13	11	0.00207	0.00041	0.00166
13	12	0.00617	0.00505	0.00112
13	13	-0.54105	-0.51583	-0.02522
13	14	0.00845	0.00631	0.00213
14	1	0.02753	0.00242	0.02511
14	2	0.02753	0.00242	0.02511
14	3	0.04087	0.02555	0.01533
14	4	0.04087	0.02554	0.01533
14	5	0.09155	0.06307	0.02848
14	6	0.09155	0.06307	0.02848
14	7	0.18777	0.31022	-0.12245
14	8	0.00207	0.00041	0.00166
14	9	0.00207	0.00041	0.00166
14	10	0.00617	0.00505	0.00112
14	11	0.00617	0.00505	0.00112
14	12	0.00845	0.00631	0.00214
14	13	0.00845	0.00631	0.00213
14	14	-0.54105	-0.51583	-0.02522

cyclooctatetraene (D4h)



AT1	AT2	Total	Sigma	Pi
1	1	-2.86633	-1.18854	-1.67778
1	2	0.08046	0.29872	-0.21826
1	3	0.13878	0.08553	0.05326
1	4	0.14846	0.01273	0.13573
1	5	0.03759	0.00267	0.03492
1	6	0.48631	0.01001	0.47630
1	7	0.13878	0.08553	0.05326
1	8	1.29090	0.17219	1.11871
1	9	0.03758	0.03304	0.00454
1	10	0.04943	0.00360	0.04582
1	11	0.00144	0.00095	0.00049
1	12	0.18791	0.32166	-0.13375
1	13	0.05076	0.06663	-0.01586
1	14	0.01609	0.00266	0.01343
1	15	0.18198	0.06816	0.11382
1	16	0.01986	0.02447	-0.00461
2	1	0.08046	0.29872	-0.21826
2	2	-2.86633	-1.18854	-1.67778
2	3	1.29090	0.17219	1.11871
2	4	0.13878	0.08553	0.05326
2	5	0.48631	0.01001	0.47630
2	6	0.03759	0.00267	0.03492
2	7	0.14846	0.01273	0.13573
2	8	0.13878	0.08553	0.05326
2	9	0.18198	0.06816	0.11382
2	10	0.00144	0.00095	0.00049
2	11	0.04943	0.00360	0.04582
2	12	0.05076	0.06663	-0.01586
2	13	0.18791	0.32166	-0.13375
2	14	0.01986	0.02447	-0.00461
2	15	0.03758	0.03304	0.00454
2	16	0.01609	0.00266	0.01343
3	1	0.13878	0.08553	0.05326
3	2	1.29090	0.17219	1.11871
3	3	-2.86633	-1.18854	-1.67778
3	4	0.08046	0.29872	-0.21826
3	5	0.13878	0.08553	0.05326
3	6	0.14846	0.01273	0.13573
3	7	0.03759	0.00267	0.03492
3	8	0.48631	0.01001	0.47630
3	9	0.18791	0.32166	-0.13375
3	10	0.01609	0.00266	0.01343
3	11	0.03758	0.03304	0.00454
3	12	0.01986	0.02447	-0.00461
3	13	0.18198	0.06816	0.11382
3	14	0.05076	0.06663	-0.01586
3	15	0.04943	0.00360	0.04582
3	16	0.00144	0.00095	0.00049
4	1	0.14846	0.01273	0.13573
4	2	0.13878	0.08553	0.05326
4	3	0.08046	0.29872	-0.21826
4	4	-2.86633	-1.18854	-1.67778
4	5	1.29090	0.17219	1.11871
4	6	0.13878	0.08553	0.05326
4	7	0.48631	0.01001	0.47630
4	8	0.03759	0.00267	0.03492
4	9	0.05076	0.06663	-0.01586
4	10	0.01986	0.02447	-0.00461
4	11	0.18198	0.06816	0.11382
4	12	0.01609	0.00266	0.01343
4	13	0.03758	0.03304	0.00454
4	14	0.18791	0.32166	-0.13375
4	15	0.00144	0.00095	0.00049
4	16	0.04943	0.00360	0.04582
5	1	0.03759	0.00267	0.03492
5	2	0.48631	0.01001	0.47630
5	3	0.13878	0.08553	0.05326
5	4	1.29090	0.17219	1.11871
5	5	-2.86633	-1.18854	-1.67778
5	6	0.08046	0.29872	-0.21826
5	7	0.13878	0.08553	0.05326
5	8	0.14846	0.01273	0.13573
5	9	0.01986	0.02447	-0.00461
5	10	0.05076	0.06663	-0.01586
5	11	0.18791	0.32166	-0.13375
5	12	0.00144	0.00095	0.00049
5	13	0.04943	0.00360	0.04582
5	14	0.18198	0.06816	0.11382
5	15	0.01609	0.00266	0.01343
5	16	0.03758	0.03304	0.00454
6	1	0.48631	0.01001	0.47630
6	2	0.03759	0.00267	0.03492
6	3	0.14846	0.01273	0.13573
6	4	0.13878	0.08553	0.05326
6	5	0.08046	0.29872	-0.21826
6	6	-2.86633	-1.18854	-1.67778
6	7	1.29090	0.17219	1.11871
6	8	0.13878	0.08553	0.05326
6	9	0.01609	0.00266	0.01343
6	10	0.18791	0.32166	-0.13375
6	11	0.05076	0.06663	-0.01586
6	12	0.04943	0.00360	0.04582
6	13	0.00144	0.00095	0.00049
6	14	0.03758	0.03304	0.00454
6	15	0.01986	0.02447	-0.00461
6	16	0.18198	0.06816	0.11382
7	1	0.13878	0.08553	0.05326
7	2	0.14846	0.01273	0.13573
7	3	0.03759	0.00267	0.03492
7	4	0.48631	0.01001	0.47630
7	5	0.13878	0.08553	0.05326
7	6	1.29090	0.17219	1.11871
7	7	-2.86633	-1.18854	-1.67778
7	8	0.08046	0.29872	-0.21826
7	9	0.00144	0.00095	0.00049

7	10	0.18198	0.06816	0.11382
7	11	0.01986	0.02447	-0.00461
7	12	0.03758	0.03304	0.00454
7	13	0.01609	0.00266	0.01343
7	14	0.04943	0.00360	0.04582
7	15	0.05076	0.06663	-0.01586
7	16	0.18791	0.32166	-0.13375
8	1	1.29090	0.17219	1.11871
8	2	0.13878	0.08553	0.05326
8	3	0.48631	0.01001	0.47630
8	4	0.03759	0.00267	0.03492
8	5	0.14846	0.01273	0.13573
8	6	0.13878	0.08553	0.05326
8	7	0.08046	0.29872	-0.21826
8	8	-2.86633	-1.18854	-1.67778
8	9	0.04943	0.00360	0.04582
8	10	0.03758	0.03304	0.00454
8	11	0.01609	0.00266	0.01343
8	12	0.18198	0.06816	0.11382
8	13	0.01986	0.02447	-0.00461
8	14	0.00144	0.00095	0.00049
8	15	0.18791	0.32166	-0.13375
8	16	0.05076	0.06663	-0.01586
9	1	0.03758	0.03304	0.00454
9	2	0.18198	0.06816	0.11382
9	3	0.18791	0.32166	-0.13375
9	4	0.05076	0.06663	-0.01586
9	5	0.01986	0.02447	-0.00461
9	6	0.01609	0.00266	0.01343
9	7	0.00144	0.00095	0.00049
9	8	0.04943	0.00360	0.04582
9	9	-0.58014	-0.54469	-0.03546
9	10	0.00210	0.00044	0.00166
9	11	0.00487	0.00530	-0.00043
9	12	0.00487	0.00530	-0.00043
9	13	0.01910	0.00957	0.00953
9	14	-0.00082	0.00177	-0.00259
9	15	0.00502	0.00103	0.00400
9	16	-0.00006	0.00012	-0.00018
10	1	0.04943	0.00360	0.04582
10	2	0.00144	0.00095	0.00049
10	3	0.01609	0.00266	0.01343
10	4	0.01986	0.02447	-0.00461
10	5	0.05076	0.06663	-0.01586
10	6	0.18791	0.32166	-0.13375
10	7	0.18198	0.06816	0.11382
10	8	0.03758	0.03304	0.00454
10	9	0.00210	0.00044	0.00166
10	10	-0.58014	-0.54469	-0.03546
10	11	-0.00082	0.00177	-0.00259
10	12	0.00502	0.00103	0.00400
10	13	-0.00006	0.00012	-0.00018
10	14	0.00487	0.00530	-0.00043
10	15	0.00487	0.00530	-0.00043
10	16	0.01910	0.00957	0.00953
11	1	0.00144	0.00095	0.00049
11	2	0.04943	0.00360	0.04582
11	3	0.03758	0.03304	0.00454
11	4	0.18198	0.06816	0.11382
11	5	0.18791	0.32166	-0.13375
11	6	0.05076	0.06663	-0.01586
11	7	0.01986	0.02447	-0.00461
11	8	0.01609	0.00266	0.01343
11	9	0.00487	0.00530	-0.00043
11	10	-0.00082	0.00177	-0.00259
11	11	-0.58014	-0.54469	-0.03546
11	12	-0.00006	0.00012	-0.00018
11	13	0.00502	0.00103	0.00400
11	14	0.01910	0.00957	0.00953
11	15	0.00210	0.00044	0.00166
11	16	0.00487	0.00530	-0.00043
12	1	0.18791	0.32166	-0.13375
12	2	0.05076	0.06663	-0.01586
12	3	0.01986	0.02447	-0.00461
12	4	0.01609	0.00266	0.01343
12	5	0.00144	0.00095	0.00049
12	6	0.04943	0.00360	0.04582
12	7	0.03758	0.03304	0.00454
12	8	0.18198	0.06816	0.11382
12	9	0.00487	0.00530	-0.00043
12	10	0.00502	0.00103	0.00400
12	11	-0.00006	0.00012	-0.00018
12	12	-0.58014	-0.54469	-0.03546
12	13	-0.00082	0.00177	-0.00259
12	14	0.00210	0.00044	0.00166
12	15	0.01910	0.00957	0.00953
12	16	0.00487	0.00530	-0.00043
13	1	0.05076	0.06663	-0.01586
13	2	0.18791	0.32166	-0.13375
13	3	0.18198	0.06816	0.11382
13	4	0.03758	0.03304	0.00454
13	5	0.04943	0.00360	0.04582
13	6	0.00144	0.00095	0.00049
13	7	0.01609	0.00266	0.01343
13	8	0.01986	0.02447	-0.00461
13	9	0.01910	0.00957	0.00953
13	10	-0.00006	0.00012	-0.00018
13	11	0.00502	0.00103	0.00400
13	12	-0.00082	0.00177	-0.00259
13	13	-0.58014	-0.54469	-0.03546
13	14	0.00487	0.00530	-0.00043
13	15	0.00487	0.00530	-0.00043
13	16	0.00210	0.00044	0.00166
14	1	0.01609	0.00266	0.01343
14	2	0.01986	0.02447	-0.00461
14	3	0.05076	0.06663	-0.01586
14	4	0.18791	0.32166	-0.13375
14	5	0.18198	0.06816	0.11382
14	6	0.03758	0.03304	0.00454
14	7	0.04943	0.00360	0.04582
14	8	0.00144	0.00095	0.00049
14	9	-0.00082	0.00177	-0.00259
14	10	0.00487	0.00530	-0.00043
14	11	0.01910	0.00957	0.00953
14	12	0.00210	0.00044	0.00166
14	13	0.00487	0.00530	-0.00043
14	14	-0.58014	-0.54469	-0.03546
14	15	-0.00006	0.00012	-0.00018
14	16	0.00502	0.00103	0.00400
15	1	0.18198	0.06816	0.11382
15	2	0.03758	0.03304	0.00454
15	3	0.04943	0.00360	0.04582
15	4	0.00144	0.00095	0.00049
15	5	0.01609	0.00266	0.01343
15	6	0.01986	0.02447	-0.00461
15	7	0.05076	0.06663	-0.01586
15	8	0.18791	0.32166	-0.13375
15	9	0.00502	0.00103	0.00400
15	10	0.00487	0.00530	-0.00043
15	11	0.00210	0.00044	0.00166
15	12	0.01910	0.00957	0.00953
15	13	0.00487	0.00530	-0.00043
15	14	-0.00006	0.00012	-0.00018
15	15	-0.58014	-0.54469	-0.03546

15	16	-0.00082	0.00177	-0.00259
16	1	0.01986	0.02447	-0.00461
16	2	0.01609	0.00266	0.01343
16	3	0.00144	0.00095	0.00049
16	4	0.04943	0.00360	0.04582
16	5	0.03758	0.03304	0.00454
16	6	0.18198	0.06816	0.11382
16	7	0.18791	0.32166	-0.13375
16	8	0.05076	0.06663	-0.01586
16	9	-0.00006	0.00012	-0.00018
16	10	0.01910	0.00957	0.00953
16	11	0.00487	0.00530	-0.00043
16	12	0.00487	0.00530	-0.00043
16	13	0.00210	0.00044	0.00166
16	14	0.00502	0.00103	0.00400
16	15	-0.00082	0.00177	-0.00259
16	16	-0.58014	-0.54469	-0.03546

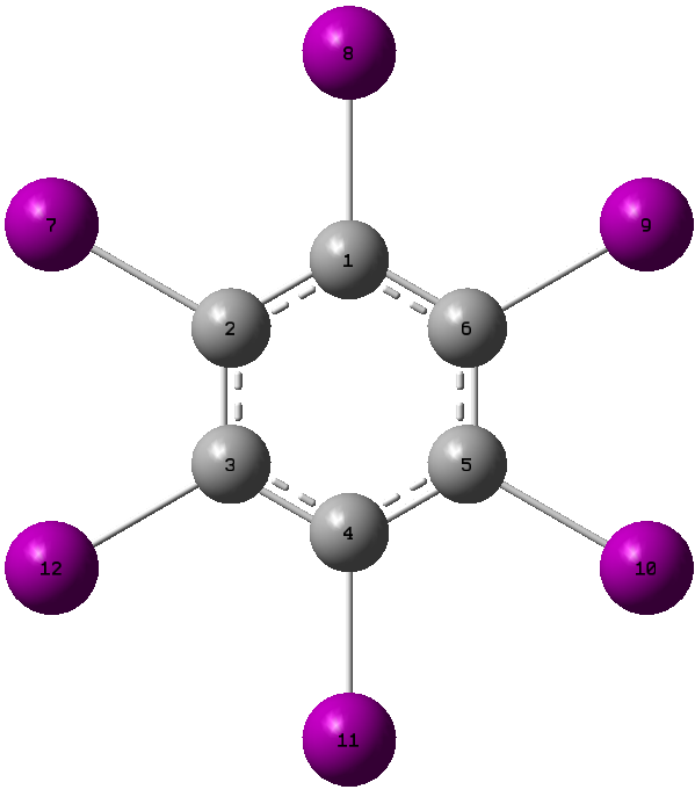
Cyclooctatetraenyl dication (D8h)

AT1	AT2	Total	Sigma	Pi
1	1	-3.08995	-1.18359	-1.90636
1	2	0.43240	0.25400	0.17840
1	3	0.45782	0.08806	0.36976
1	4	0.19089	0.01084	0.18004
1	5	0.44276	0.00267	0.44009
1	6	0.19036	0.01084	0.17953
1	7	0.45782	0.08806	0.36976
1	8	0.43136	0.25367	0.17768
1	9	0.04780	0.02470	0.02310
1	10	0.01254	0.00246	0.01007
1	11	0.02977	0.00076	0.02901
1	12	0.17862	0.30136	-0.12274
1	13	0.07876	0.05951	0.01925
1	14	0.01257	0.00246	0.01011
1	15	0.07871	0.05951	0.01920
1	16	0.04777	0.02467	0.02310
2	1	0.43240	0.25400	0.17840
2	2	-3.08995	-1.18359	-1.90636
2	3	0.43136	0.25367	0.17768
2	4	0.45782	0.08806	0.36976
2	5	0.19036	0.01084	0.17953
2	6	0.44276	0.00267	0.44009
2	7	0.19089	0.01084	0.18004
2	8	0.45782	0.08806	0.36976
2	9	0.07871	0.05951	0.01920
2	10	0.02977	0.00076	0.02901
2	11	0.01254	0.00246	0.01007
2	12	0.07876	0.05951	0.01925
2	13	0.17862	0.30136	-0.12274
2	14	0.04777	0.02467	0.02310
2	15	0.04780	0.02470	0.02310
2	16	0.01257	0.00246	0.01011
3	1	0.45782	0.08806	0.36976
3	2	0.43136	0.25367	0.17768
3	3	-3.08995	-1.18359	-1.90636
3	4	0.43240	0.25400	0.17840
3	5	0.45782	0.08806	0.36976
3	6	0.19089	0.01084	0.18004
3	7	0.44276	0.00267	0.44009
3	8	0.19036	0.01084	0.17953
3	9	0.17862	0.30136	-0.12274
3	10	0.01257	0.00246	0.01011
3	11	0.04780	0.02470	0.02310
3	12	0.04777	0.02467	0.02310
3	13	0.07871	0.05951	0.01920
3	14	0.07876	0.05951	0.01925
3	15	0.01254	0.00246	0.01007
3	16	0.02977	0.00076	0.02901
4	1	0.19089	0.01084	0.18004
4	2	0.45782	0.08806	0.36976
4	3	0.43240	0.25400	0.17840
4	4	-3.08995	-1.18359	-1.90636
4	5	0.43136	0.25367	0.17768
4	6	0.45782	0.08806	0.36976
4	7	0.19036	0.01084	0.17953
4	8	0.44276	0.00267	0.44009
4	9	0.07876	0.05951	0.01925
4	10	0.04777	0.02467	0.02310
4	11	0.07871	0.05951	0.01920
4	12	0.01257	0.00246	0.01011
4	13	0.04780	0.02470	0.02310
4	14	0.17862	0.30136	-0.12274
4	15	0.02977	0.00076	0.02901
4	16	0.01254	0.00246	0.01007
5	1	0.44276	0.00267	0.44009
5	2	0.19036	0.01084	0.17953
5	3	0.45782	0.08806	0.36976
5	4	0.43136	0.25367	0.17768
5	5	-3.08995	-1.18359	-1.90636
5	6	0.43240	0.25400	0.17840
5	7	0.45782	0.08806	0.36976
5	8	0.19089	0.01084	0.18004
5	9	0.04777	0.02467	0.02310
5	10	0.07876	0.05951	0.01925
5	11	0.17862	0.30136	-0.12274
5	12	0.02977	0.00076	0.02901
5	13	0.01254	0.00246	0.01007
5	14	0.07871	0.05951	0.01920
5	15	0.01257	0.00246	0.01011
5	16	0.04780	0.02470	0.02310
6	1	0.19036	0.01084	0.17953
6	2	0.44276	0.00267	0.44009
6	3	0.19089	0.01084	0.18004
6	4	0.45782	0.08806	0.36976
6	5	0.43240	0.25400	0.17840
6	6	-3.08995	-1.18359	-1.90636
6	7	0.43136	0.25367	0.17768
6	8	0.45782	0.08806	0.36976
6	9	0.01257	0.00246	0.01011
6	10	0.17862	0.30136	-0.12274
6	11	0.07876	0.05951	0.01925
6	12	0.01254	0.00246	0.01007
6	13	0.02977	0.00076	0.02901
6	14	0.04780	0.02470	0.02310
6	15	0.04777	0.02467	0.02310
6	16	0.07871	0.05951	0.01920
7	1	0.45782	0.08806	0.36976
7	2	0.19089	0.01084	0.18004
7	3	0.44276	0.00267	0.44009
7	4	0.19036	0.01084	0.17953
7	5	0.45782	0.08806	0.36976
7	6	0.43136	0.25367	0.17768
7	7	-3.08995	-1.18359	-1.90636
7	8	0.43240	0.25400	0.17840
7	9	0.02977	0.00076	0.02901

7	10	0.07871	0.05951	0.01920
7	11	0.04777	0.02467	0.02310
7	12	0.04780	0.02470	0.02310
7	13	0.01257	0.00246	0.01011
7	14	0.01254	0.00246	0.01007
7	15	0.07876	0.05951	0.01925
7	16	0.17862	0.30136	-0.12274
8	1	0.43136	0.25367	0.17768
8	2	0.45782	0.08806	0.36976
8	3	0.19036	0.01084	0.17953
8	4	0.44276	0.00267	0.44009
8	5	0.19089	0.01084	0.18004
8	6	0.45782	0.08806	0.36976
8	7	0.43240	0.25400	0.17840
8	8	-3.08995	-1.18359	-1.90636
8	9	0.01254	0.00246	0.01007
8	10	0.04780	0.02470	0.02310
8	11	0.01257	0.00246	0.01011
8	12	0.07871	0.05951	0.01920
8	13	0.04777	0.02467	0.02310
8	14	0.02977	0.00076	0.02901
8	15	0.17862	0.30136	-0.12274
8	16	0.07876	0.05951	0.01925
9	1	0.04780	0.02470	0.02310
9	2	0.07871	0.05951	0.01920
9	3	0.17862	0.30136	-0.12274
9	4	0.07876	0.05951	0.01925
9	5	0.04777	0.02467	0.02310
9	6	0.01257	0.00246	0.01011
9	7	0.02977	0.00076	0.02901
9	8	0.01254	0.00246	0.01007
9	9	-0.51498	-0.49515	-0.01983
9	10	0.00097	0.00047	0.00050
9	11	0.00514	0.00356	0.00157
9	12	0.00514	0.00356	0.00157
9	13	0.00711	0.00577	0.00134
9	14	0.00713	0.00579	0.00134
9	15	0.00097	0.00047	0.00050
9	16	0.00201	0.00010	0.00190
10	1	0.01254	0.00246	0.01007
10	2	0.02977	0.00076	0.02901
10	3	0.01257	0.00246	0.01011
10	4	0.04777	0.02467	0.02310
10	5	0.07876	0.05951	0.01925
10	6	0.17862	0.30136	-0.12274
10	7	0.07871	0.05951	0.01920
10	8	0.04780	0.02470	0.02310
10	9	0.00097	0.00047	0.00050
10	10	-0.51498	-0.49515	-0.01983
10	11	0.00713	0.00579	0.00134
10	12	0.00097	0.00047	0.00050
10	13	0.00201	0.00010	0.00190
10	14	0.00514	0.00356	0.00157
10	15	0.00514	0.00356	0.00157
10	16	0.00711	0.00577	0.00134
11	1	0.02977	0.00076	0.02901
11	2	0.01254	0.00246	0.01007
11	3	0.04780	0.02470	0.02310
11	4	0.07871	0.05951	0.01920
11	5	0.17862	0.30136	-0.12274
11	6	0.07876	0.05951	0.01925
11	7	0.04777	0.02467	0.02310
11	8	0.01257	0.00246	0.01011
11	9	0.00514	0.00356	0.00157
11	10	0.00713	0.00579	0.00134
11	11	-0.51498	-0.49515	-0.01983
11	12	0.00201	0.00010	0.00190
11	13	0.00097	0.00047	0.00050
11	14	0.00711	0.00577	0.00134
11	15	0.00097	0.00047	0.00050
11	16	0.00514	0.00356	0.00157
12	1	0.17862	0.30136	-0.12274
12	2	0.07876	0.05951	0.01925
12	3	0.04777	0.02467	0.02310
12	4	0.01257	0.00246	0.01011
12	5	0.02977	0.00076	0.02901
12	6	0.01254	0.00246	0.01007
12	7	0.04780	0.02470	0.02310
12	8	0.07871	0.05951	0.01920
12	9	0.00514	0.00356	0.00157
12	10	0.00097	0.00047	0.00050
12	11	0.00201	0.00010	0.00190
12	12	-0.51498	-0.49515	-0.01983
12	13	0.00713	0.00579	0.00134
12	14	0.00097	0.00047	0.00050
12	15	0.00711	0.00577	0.00134
12	16	0.00514	0.00356	0.00157
13	1	0.07876	0.05951	0.01925
13	2	0.17862	0.30136	-0.12274
13	3	0.07871	0.05951	0.01920
13	4	0.04780	0.02470	0.02310
13	5	0.01254	0.00246	0.01007
13	6	0.02977	0.00076	0.02901
13	7	0.01257	0.00246	0.01011
13	8	0.04777	0.02467	0.02310
13	9	0.00711	0.00577	0.00134
13	10	0.00201	0.00010	0.00190
13	11	0.00097	0.00047	0.00050
13	12	0.00713	0.00579	0.00134
13	13	-0.51498	-0.49515	-0.01983
13	14	0.00514	0.00356	0.00157
13	15	0.00514	0.00356	0.00157
13	16	0.00097	0.00047	0.00050
14	1	0.01257	0.00246	0.01011
14	2	0.04777	0.02467	0.02310
14	3	0.07876	0.05951	0.01925
14	4	0.17862	0.30136	-0.12274
14	5	0.07871	0.05951	0.01920
14	6	0.04780	0.02470	0.02310
14	7	0.01254	0.00246	0.01007
14	8	0.02977	0.00076	0.02901
14	9	0.00713	0.00579	0.00134
14	10	0.00514	0.00356	0.00157
14	11	0.00711	0.00577	0.00134
14	12	0.00097	0.00047	0.00050
14	13	0.00514	0.00356	0.00157
14	14	-0.51498	-0.49515	-0.01983
14	15	0.00201	0.00010	0.00190
14	16	0.00097	0.00047	0.00050
15	1	0.07871	0.05951	0.01920
15	2	0.04780	0.02470	0.02310
15	3	0.01254	0.00246	0.01007
15	4	0.02977	0.00076	0.02901
15	5	0.01257	0.00246	0.01011
15	6	0.04777	0.02467	0.02310
15	7	0.07876	0.05951	0.01925
15	8	0.17862	0.30136	-0.12274
15	9	0.00097	0.00047	0.00050
15	10	0.00514	0.00356	0.00157
15	11	0.00097	0.00047	0.00050
15	12	0.00711	0.00577	0.00134
15	13	0.00514	0.00356	0.00157
15	14	0.00201	0.00010	0.00190
15	15	-0.51498	-0.49515	-0.01983

15	16	0.00713	0.00579	0.00134
16	1	0.04777	0.02467	0.02310
16	2	0.01257	0.00246	0.01011
16	3	0.02977	0.00076	0.02901
16	4	0.01254	0.00246	0.01007
16	5	0.04780	0.02470	0.02310
16	6	0.07871	0.05951	0.01920
16	7	0.17862	0.30136	-0.12274
16	8	0.07876	0.05951	0.01925
16	9	0.00201	0.00010	0.00190
16	10	0.00711	0.00577	0.00134
16	11	0.00514	0.00356	0.00157
16	12	0.00514	0.00356	0.00157
16	13	0.00097	0.00047	0.00050
16	14	0.00097	0.00047	0.00050
16	15	0.00713	0.00579	0.00134
16	16	-0.51498	-0.49515	-0.01983

Hexaiodobenzene



AT1	AT2	Total	Sigma	Pi
1	1	-3.51342	-1.87656	-1.63687
1	2	0.34858	0.09665	0.25193
1	3	0.18918	0.03819	0.15099
1	4	0.39446	0.00275	0.39171
1	5	0.18918	0.03819	0.15099
1	6	0.34858	0.09665	0.25193
1	7	0.31609	0.17844	0.13764
1	8	1.06113	1.11573	-0.05461
1	9	0.31609	0.17844	0.13764
1	10	0.09868	0.06218	0.03650
1	11	0.15281	0.00713	0.14568
1	12	0.09868	0.06218	0.03650
2	1	0.34858	0.09665	0.25193
2	2	-3.51585	-1.87809	-1.63775
2	3	0.34903	0.09679	0.25224
2	4	0.18918	0.03819	0.15099
2	5	0.39485	0.00273	0.39211
2	6	0.18901	0.03812	0.15089
2	7	1.06275	1.11737	-0.05462
2	8	0.31611	0.17823	0.13787
2	9	0.09865	0.06219	0.03646
2	10	0.15275	0.00715	0.14560
2	11	0.09863	0.06212	0.03651
2	12	0.31625	0.17851	0.13773
3	1	0.18918	0.03819	0.15099
3	2	0.34903	0.09679	0.25224
3	3	-3.51585	-1.87809	-1.63775
3	4	0.34858	0.09665	0.25193
3	5	0.18901	0.03812	0.15089
3	6	0.39485	0.00273	0.39211
3	7	0.31625	0.17851	0.13773
3	8	0.09863	0.06212	0.03651
3	9	0.15275	0.00715	0.14560
3	10	0.09865	0.06219	0.03646
3	11	0.31611	0.17823	0.13787
3	12	1.06275	1.11737	-0.05462
4	1	0.39446	0.00275	0.39171
4	2	0.18918	0.03819	0.15099
4	3	0.34858	0.09665	0.25193
4	4	-3.51342	-1.87656	-1.63687
4	5	0.34858	0.09665	0.25193
4	6	0.18918	0.03819	0.15099
4	7	0.09868	0.06218	0.03650
4	8	0.15281	0.00713	0.14568
4	9	0.09868	0.06218	0.03650
4	10	0.31609	0.17844	0.13764
4	11	1.06113	1.11573	-0.05461
4	12	0.31609	0.17844	0.13764
5	1	0.18918	0.03819	0.15099

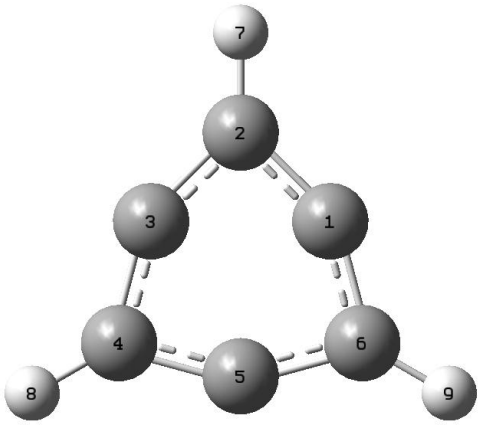
5	2	0.39485	0.00273	0.39211
5	3	0.18901	0.03812	0.15089
5	4	0.34858	0.09665	0.25193
5	5	-3.51585	-1.87809	-1.63775
5	6	0.34903	0.09679	0.25224
5	7	0.15275	0.00715	0.14560
5	8	0.09863	0.06212	0.03651
5	9	0.31625	0.17851	0.13773
5	10	1.06275	1.11737	-0.05462
5	11	0.31611	0.17823	0.13787
5	12	0.09865	0.06219	0.03646
6	1	0.34858	0.09665	0.25193
6	2	0.18901	0.03812	0.15089
6	3	0.39485	0.00273	0.39211
6	4	0.18918	0.03819	0.15099
6	5	0.34903	0.09679	0.25224
6	6	-3.51585	-1.87809	-1.63775
6	7	0.09865	0.06219	0.03646
6	8	0.31611	0.17823	0.13787
6	9	1.06275	1.11737	-0.05462
6	10	0.31625	0.17851	0.13773
6	11	0.09863	0.06212	0.03651
6	12	0.15275	0.00715	0.14560
7	1	0.31609	0.17844	0.13764
7	2	1.06275	1.11737	-0.05462
7	3	0.31625	0.17851	0.13773
7	4	0.09868	0.06218	0.03650
7	5	0.15275	0.00715	0.14560
7	6	0.09865	0.06219	0.03646
7	7	-2.83058	-2.23071	-0.59986
7	8	0.28713	0.23909	0.04804
7	9	0.07815	0.07250	0.00565
7	10	0.05432	0.00116	0.05316
7	11	0.07807	0.07240	0.00567
7	12	0.28782	0.23978	0.04804
8	1	1.06113	1.11573	-0.05461
8	2	0.31611	0.17823	0.13787
8	3	0.09863	0.06212	0.03651
8	4	0.15281	0.00713	0.14568
8	5	0.09863	0.06212	0.03651
8	6	0.31611	0.17823	0.13787
8	7	0.28713	0.23909	0.04804
8	8	-2.82833	-2.22778	-0.60055
8	9	0.28713	0.23909	0.04804
8	10	0.07807	0.07240	0.00567
8	11	0.05447	0.00119	0.05328
8	12	0.07807	0.07240	0.00567
9	1	0.31609	0.17844	0.13764
9	2	0.09865	0.06219	0.03646
9	3	0.15275	0.00715	0.14560
9	4	0.09868	0.06218	0.03650
9	5	0.31625	0.17851	0.13773
9	6	1.06275	1.11737	-0.05462
9	7	0.07815	0.07250	0.00565
9	8	0.28713	0.23909	0.04804
9	9	-2.83058	-2.23071	-0.59986
9	10	0.28782	0.23978	0.04804
9	11	0.07807	0.07240	0.00567
9	12	0.05432	0.00116	0.05316
10	1	0.09868	0.06218	0.03650
10	2	0.15275	0.00715	0.14560
10	3	0.09865	0.06219	0.03646
10	4	0.31609	0.17844	0.13764
10	5	1.06275	1.11737	-0.05462
10	6	0.31625	0.17851	0.13773
10	7	0.05432	0.00116	0.05316
10	8	0.07807	0.07240	0.00567
10	9	0.28782	0.23978	0.04804
10	10	-2.83058	-2.23071	-0.59986
10	11	0.28713	0.23909	0.04804
10	12	0.07815	0.07250	0.00565
11	1	0.15281	0.00713	0.14568
11	2	0.09863	0.06212	0.03651
11	3	0.31611	0.17823	0.13787
11	4	1.06113	1.11573	-0.05461
11	5	0.31611	0.17823	0.13787
11	6	0.09863	0.06212	0.03651
11	7	0.07807	0.07240	0.00567
11	8	0.05447	0.00119	0.05328
11	9	0.07807	0.07240	0.00567
11	10	0.28713	0.23909	0.04804
11	11	-2.82833	-2.22778	-0.60055
11	12	0.28713	0.23909	0.04804
12	1	0.09868	0.06218	0.03650
12	2	0.31625	0.17851	0.13773
12	3	1.06275	1.11737	-0.05462
12	4	0.31609	0.17844	0.13764
12	5	0.09865	0.06219	0.03646
12	6	0.15275	0.00715	0.14560
12	7	0.28782	0.23978	0.04804
12	8	0.07807	0.07240	0.00567
12	9	0.05432	0.00116	0.05316
12	10	0.07815	0.07250	0.00565
12	11	0.28713	0.23909	0.04804
12	12	-2.83058	-2.23071	-0.59986

Hexaiodobenzene dication

AT1	AT2	Total	Sigma	Pi
1	1	-3.38685	-1.79020	-1.59665
1	2	0.32186	0.09075	0.23111
1	3	0.18940	0.03911	0.15029
1	4	0.38507	0.00462	0.38045
1	5	0.18940	0.03911	0.15029
1	6	0.32186	0.09075	0.23111
1	7	0.29634	0.15771	0.13863
1	8	0.90182	0.94368	-0.04186
1	9	0.29634	0.15771	0.13863
1	10	0.14079	0.10417	0.03662
1	11	0.20324	0.05842	0.14482
1	12	0.14079	0.10417	0.03662
2	1	0.32186	0.09075	0.23111
2	2	-3.38929	-1.79167	-1.59762
2	3	0.32249	0.09093	0.23156
2	4	0.18940	0.03911	0.15029
2	5	0.38550	0.00461	0.38089
2	6	0.18921	0.03905	0.15016
2	7	0.90270	0.94471	-0.04201
2	8	0.29653	0.15758	0.13895
2	9	0.14138	0.10479	0.03658
2	10	0.20356	0.05893	0.14463
2	11	0.14074	0.10407	0.03667
2	12	0.29588	0.15710	0.13878
3	1	0.18940	0.03911	0.15029
3	2	0.32249	0.09093	0.23156
3	3	-3.38929	-1.79167	-1.59762

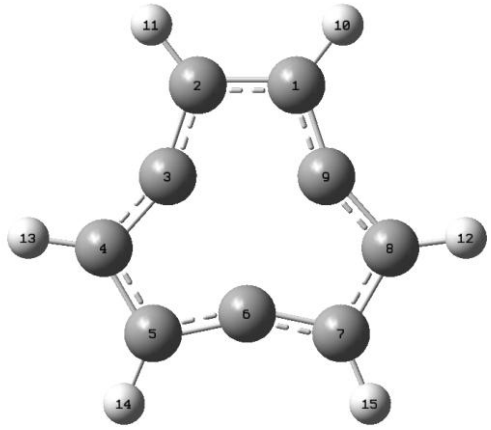
3	4	0.32186	0.09075	0.23111
3	5	0.18921	0.03905	0.15016
3	6	0.38550	0.00461	0.38089
3	7	0.29588	0.15710	0.13878
3	8	0.14074	0.10407	0.03667
3	9	0.20356	0.05893	0.14463
3	10	0.14138	0.10479	0.03658
3	11	0.29653	0.15758	0.13895
3	12	0.90270	0.94471	-0.04201
4	1	0.38507	0.00462	0.38045
4	2	0.18940	0.03911	0.15029
4	3	0.32186	0.09075	0.23111
4	4	-3.38685	-1.79020	-1.59665
4	5	0.32186	0.09075	0.23111
4	6	0.18940	0.03911	0.15029
4	7	0.14079	0.10417	0.03662
4	8	0.20324	0.05842	0.14482
4	9	0.14079	0.10417	0.03662
4	10	0.29634	0.15771	0.13863
4	11	0.90182	0.94368	-0.04186
4	12	0.29634	0.15771	0.13863
5	1	0.18940	0.03911	0.15029
5	2	0.38550	0.00461	0.38089
5	3	0.18921	0.03905	0.15016
5	4	0.32186	0.09075	0.23111
5	5	-3.38929	-1.79167	-1.59762
5	6	0.32249	0.09093	0.23156
5	7	0.20356	0.05893	0.14463
5	8	0.14074	0.10407	0.03667
5	9	0.29588	0.15710	0.13878
5	10	0.90270	0.94471	-0.04201
5	11	0.29653	0.15758	0.13895
5	12	0.14138	0.10479	0.03658
6	1	0.32186	0.09075	0.23111
6	2	0.18921	0.03905	0.15016
6	3	0.38550	0.00461	0.38089
6	4	0.18940	0.03911	0.15029
6	5	0.32249	0.09093	0.23156
6	6	-3.38929	-1.79167	-1.59762
6	7	0.14138	0.10479	0.03658
6	8	0.29653	0.15758	0.13895
6	9	0.90270	0.94471	-0.04201
6	10	0.29588	0.15710	0.13878
6	11	0.14074	0.10407	0.03667
6	12	0.20356	0.05893	0.14463
7	1	0.29634	0.15771	0.13863
7	2	0.90270	0.94471	-0.04201
7	3	0.29588	0.15710	0.13878
7	4	0.14079	0.10417	0.03662
7	5	0.20356	0.05893	0.14463
7	6	0.14138	0.10479	0.03658
7	7	-8.05593	-7.44274	-0.61319
7	8	-0.08160	-0.12920	0.04760
7	9	1.83349	1.82826	0.00523
7	10	2.62308	2.56882	0.05426
7	11	1.80892	1.80366	0.00526
7	12	-0.10853	-0.15616	0.04763
8	1	0.90182	0.94368	-0.04186
8	2	0.29653	0.15758	0.13895
8	3	0.14074	0.10407	0.03667
8	4	0.20324	0.05842	0.14482
8	5	0.14074	0.10407	0.03667
8	6	0.29653	0.15758	0.13895
8	7	-0.08160	-0.12920	0.04760
8	8	-8.03397	-7.41959	-0.61438
8	9	-0.08160	-0.12920	0.04760
8	10	1.80892	1.80366	0.00526
8	11	2.59966	2.54520	0.05446
8	12	1.80892	1.80366	0.00526
9	1	0.29634	0.15771	0.13863
9	2	0.14138	0.10479	0.03658
9	3	0.20356	0.05893	0.14463
9	4	0.14079	0.10417	0.03662
9	5	0.29588	0.15710	0.13878
9	6	0.90270	0.94471	-0.04201
9	7	1.83349	1.82826	0.00523
9	8	-0.08160	-0.12920	0.04760
9	9	-8.05593	-7.44274	-0.61319
9	10	-0.10853	-0.15616	0.04763
9	11	1.80892	1.80366	0.00526
9	12	2.62308	2.56882	0.05426
10	1	0.14079	0.10417	0.03662
10	2	0.20356	0.05893	0.14463
10	3	0.14138	0.10479	0.03658
10	4	0.29634	0.15771	0.13863
10	5	0.90270	0.94471	-0.04201
10	6	0.29588	0.15710	0.13878
10	7	2.62308	2.56882	0.05426
10	8	1.80892	1.80366	0.00526
10	9	-0.10853	-0.15616	0.04763
10	10	-8.05593	-7.44274	-0.61319
10	11	-0.08160	-0.12920	0.04760
10	12	1.83349	1.82826	0.00523
11	1	0.20324	0.05842	0.14482
11	2	0.14074	0.10407	0.03667
11	3	0.29653	0.15758	0.13895
11	4	0.90182	0.94368	-0.04186
11	5	0.29653	0.15758	0.13895
11	6	0.14074	0.10407	0.03667
11	7	1.80892	1.80366	0.00526
11	8	2.59966	2.54520	0.05446
11	9	1.80892	1.80366	0.00526
11	10	-0.08160	-0.12920	0.04760
11	11	-8.03397	-7.41959	-0.61438
11	12	-0.08160	-0.12920	0.04760
12	1	0.14079	0.10417	0.03662
12	2	0.29588	0.15710	0.13878
12	3	0.90270	0.94471	-0.04201
12	4	0.29634	0.15771	0.13863
12	5	0.14138	0.10479	0.03658
12	6	0.20356	0.05893	0.14463
12	7	-0.10853	-0.15616	0.04763
12	8	1.80892	1.80366	0.00526
12	9	2.62308	2.56882	0.05426
12	10	1.83349	1.82826	0.00523
12	11	-0.08160	-0.12920	0.04760
12	12	-8.05593	-7.44274	-0.61319

3,5-dehydrophenyl cation, ($C_6H_3^+$)



AT1	AT2	Total	Sigma	Pi
1	1	-3.75678	-2.30075	-1.45603
1	2	0.47613	0.16904	0.30709
1	3	0.88868	0.74318	0.14549
1	4	0.75448	0.29574	0.45874
1	5	0.88862	0.74312	0.14550
1	6	0.47616	0.16905	0.30711
1	7	0.07029	0.04046	0.02984
1	8	0.13213	0.09970	0.03243
1	9	0.07030	0.04046	0.02984
2	1	0.47613	0.16904	0.30709
2	2	-2.64870	-1.17460	-1.47410
2	3	0.47613	0.16904	0.30709
2	4	0.37791	0.14029	0.23762
2	5	0.75443	0.29574	0.45868
2	6	0.37791	0.14029	0.23762
2	7	0.11922	0.21835	-0.09913
2	8	0.03349	0.02092	0.01257
2	9	0.03349	0.02092	0.01257
3	1	0.88868	0.74318	0.14549
3	2	0.47613	0.16904	0.30709
3	3	-3.75678	-2.30075	-1.45603
3	4	0.47616	0.16905	0.30711
3	5	0.88862	0.74312	0.14550
3	6	0.75448	0.29574	0.45874
3	7	0.07029	0.04046	0.02984
3	8	0.07030	0.04046	0.02984
3	9	0.13213	0.09970	0.03243
4	1	0.75448	0.29574	0.45874
4	2	0.37791	0.14029	0.23762
4	3	0.47616	0.16905	0.30711
4	4	-2.64873	-1.17459	-1.47414
4	5	0.47609	0.16902	0.30707
4	6	0.37788	0.14028	0.23761
4	7	0.03349	0.02092	0.01257
4	8	0.11922	0.21836	-0.09913
4	9	0.03349	0.02092	0.01257
5	1	0.88862	0.74312	0.14550
5	2	0.75443	0.29574	0.45868
5	3	0.88862	0.74312	0.14550
5	4	0.47609	0.16902	0.30707
5	5	-3.75655	-2.30063	-1.45592
5	6	0.47609	0.16902	0.30707
5	7	0.13213	0.09970	0.03243
5	8	0.07029	0.04046	0.02983
5	9	0.07029	0.04046	0.02983
6	1	0.47616	0.16905	0.30711
6	2	0.37791	0.14029	0.23762
6	3	0.75448	0.29574	0.45874
6	4	0.37788	0.14028	0.23761
6	5	0.47609	0.16902	0.30707
6	6	-2.64873	-1.17459	-1.47414
6	7	0.03349	0.02092	0.01257
6	8	0.03349	0.02092	0.01257
6	9	0.11922	0.21836	-0.09913
7	1	0.07029	0.04046	0.02984
7	2	0.11922	0.21835	-0.09913
7	3	0.07029	0.04046	0.02984
7	4	0.03349	0.02092	0.01257
7	5	0.13213	0.09970	0.03243
7	6	0.03349	0.02092	0.01257
7	7	-0.46486	-0.44516	-0.01971
7	8	0.00297	0.00217	0.00080
7	9	0.00297	0.00217	0.00080
8	1	0.13213	0.09970	0.03243
8	2	0.03349	0.02092	0.01257
8	3	0.07030	0.04046	0.02984
8	4	0.11922	0.21836	-0.09913
8	5	0.07029	0.04046	0.02983
8	6	0.03349	0.02092	0.01257
8	7	0.00297	0.00217	0.00080
8	8	-0.46486	-0.44515	-0.01971
8	9	0.00297	0.00217	0.00080
9	1	0.07030	0.04046	0.02984
9	2	0.03349	0.02092	0.01257
9	3	0.13213	0.09970	0.03243
9	4	0.03349	0.02092	0.01257
9	5	0.07029	0.04046	0.02983
9	6	0.11922	0.21836	-0.09913
9	7	0.00297	0.00217	0.00080
9	8	0.00297	0.00217	0.00080
9	9	-0.46486	-0.44515	-0.01971

[5.5.5]trefoilene, (C_9H_6)



AT1	AT2	Total	Sigma	Pi
1	1	-2.91671	-1.16511	-1.75160
1	2	0.24085	0.23316	0.00769
1	3	0.18981	0.10749	0.08232
1	4	0.42377	0.04580	0.37797
1	5	0.30565	0.04682	0.25883
1	6	0.38635	0.19244	0.19391
1	7	0.42364	0.04582	0.37782
1	8	0.28342	0.07078	0.21264
1	9	0.34781	0.07001	0.27780
1	10	0.09982	0.24680	-0.14698
1	11	0.06009	0.05679	0.00331
1	12	0.01935	0.00174	0.01761
1	13	0.04560	0.01172	0.03388
1	14	0.03862	0.01711	0.02151
1	15	0.05192	0.01863	0.03330
2	1	0.24085	0.23316	0.00769
2	2	-2.91671	-1.16511	-1.75160
2	3	0.34781	0.07001	0.27780
2	4	0.28342	0.07078	0.21264
2	5	0.42364	0.04582	0.37782
2	6	0.38635	0.19244	0.19391
2	7	0.30565	0.04682	0.25883
2	8	0.42377	0.04580	0.37797
2	9	0.18981	0.10749	0.08232
2	10	0.06009	0.05679	0.00331
2	11	0.09982	0.24680	-0.14698
2	12	0.04560	0.01172	0.03388
2	13	0.01935	0.00174	0.01761
2	14	0.05192	0.01863	0.03330
2	15	0.03862	0.01711	0.02151
3	1	0.18981	0.10749	0.08232
3	2	0.34781	0.07001	0.27780
3	3	-3.74154	-2.22279	-1.51875
3	4	0.34907	0.07008	0.27899
3	5	0.19029	0.10765	0.08264
3	6	0.72711	0.58830	0.13881
3	7	0.38675	0.19246	0.19429
3	8	0.38652	0.19245	0.19408
3	9	0.72700	0.58811	0.13888
3	10	0.05030	0.04335	0.00694
3	11	0.07466	0.03256	0.04210
3	12	0.09355	0.07720	0.01635
3	13	0.07478	0.03258	0.04220
3	14	0.05034	0.04336	0.00698
3	15	0.09355	0.07719	0.01637
4	1	0.42377	0.04580	0.37797
4	2	0.28342	0.07078	0.21264
4	3	0.34907	0.07008	0.27899
4	4	-2.91890	-1.16604	-1.75285
4	5	0.24152	0.23394	0.00757
4	6	0.18999	0.10755	0.08244
4	7	0.42383	0.04580	0.37803
4	8	0.30549	0.04682	0.25867
4	9	0.38652	0.19245	0.19408
4	10	0.05194	0.01863	0.03331
4	11	0.01934	0.00174	0.01759
4	12	0.03860	0.01711	0.02149
4	13	0.09975	0.24683	-0.14708
4	14	0.06009	0.05680	0.00329
4	15	0.04560	0.01171	0.03389
5	1	0.30565	0.04682	0.25883
5	2	0.42364	0.04582	0.37782
5	3	0.19029	0.10765	0.08264
5	4	0.24152	0.23394	0.00757
5	5	-2.91901	-1.16595	-1.75306
5	6	0.34852	0.06998	0.27854
5	7	0.28363	0.07076	0.21287
5	8	0.42383	0.04580	0.37803
5	9	0.38675	0.19246	0.19429
5	10	0.03861	0.01711	0.02150
5	11	0.04558	0.01172	0.03386
5	12	0.05193	0.01862	0.03331
5	13	0.06008	0.05680	0.00328
5	14	0.09962	0.24674	-0.14712
5	15	0.01936	0.00173	0.01763
6	1	0.38635	0.19244	0.19391
6	2	0.38635	0.19244	0.19391
6	3	0.72711	0.58830	0.13881
6	4	0.18999	0.10755	0.08244
6	5	0.34852	0.06998	0.27854
6	6	-3.74101	-2.22270	-1.51831
6	7	0.34852	0.06998	0.27854
6	8	0.18999	0.10755	0.08244
6	9	0.72711	0.58830	0.13881
6	10	0.09352	0.07719	0.01633
6	11	0.09352	0.07719	0.01633
6	12	0.05027	0.04332	0.00695
6	13	0.05027	0.04332	0.00695
6	14	0.07473	0.03257	0.04216
6	15	0.07473	0.03257	0.04216
7	1	0.42364	0.04582	0.37782
7	2	0.30565	0.04682	0.25883
7	3	0.38675	0.19246	0.19429
7	4	0.42383	0.04580	0.37803
7	5	0.28363	0.07076	0.21287
7	6	0.34852	0.06998	0.27854
7	7	-2.91901	-1.16595	-1.75306
7	8	0.24152	0.23394	0.00757
7	9	0.19029	0.10765	0.08264
7	10	0.04558	0.01172	0.03386
7	11	0.03861	0.01711	0.02150
7	12	0.06008	0.05680	0.00328
7	13	0.05193	0.01862	0.03331
7	14	0.01936	0.00173	0.01763
7	15	0.09962	0.24674	-0.14712
8	1	0.28342	0.07078	0.21264
8	2	0.42377	0.04580	0.37797
8	3	0.38652	0.19245	0.19408
8	4	0.30549	0.04682	0.25867

8	5	0.42383	0.04580	0.37803
8	6	0.18999	0.10755	0.08244
8	7	0.24152	0.23394	0.00757
8	8	-2.91890	-1.16604	-1.75285
8	9	0.34907	0.07008	0.27899
8	10	0.01934	0.00174	0.01759
8	11	0.05194	0.01863	0.03331
8	12	0.09975	0.24683	-0.14708
8	13	0.03860	0.01711	0.02149
8	14	0.04560	0.01171	0.03389
8	15	0.06009	0.05680	0.00329
9	1	0.34781	0.07001	0.27780
9	2	0.18981	0.10749	0.08232
9	3	0.72700	0.58811	0.13888
9	4	0.38652	0.19245	0.19408
9	5	0.38675	0.19246	0.19429
9	6	0.72711	0.58830	0.13881
9	7	0.19029	0.10765	0.08264
9	8	0.34907	0.07008	0.27899
9	9	-3.74154	-2.22279	-1.51875
9	10	0.07466	0.03256	0.04210
9	11	0.05030	0.04335	0.00694
9	12	0.07478	0.03258	0.04220
9	13	0.09355	0.07720	0.01635
9	14	0.09355	0.07719	0.01637
9	15	0.05034	0.04336	0.00698
10	1	0.09982	0.24680	-0.14698
10	2	0.06009	0.05679	0.00331
10	3	0.05030	0.04335	0.00694
10	4	0.05194	0.01863	0.03331
10	5	0.03861	0.01711	0.02150
10	6	0.09352	0.07719	0.01633
10	7	0.04558	0.01172	0.03386
10	8	0.01934	0.00174	0.01759
10	9	0.07466	0.03256	0.04210
10	10	-0.56129	-0.52339	-0.03791
10	11	0.00283	0.00294	-0.00011
10	12	0.00111	-0.00106	0.00218
10	13	0.00782	0.00489	0.00293
10	14	0.00786	0.00584	0.00201
10	15	0.00782	0.00489	0.00293
11	1	0.06009	0.05679	0.00331
11	2	0.09982	0.24680	-0.14698
11	3	0.07466	0.03256	0.04210
11	4	0.01934	0.00174	0.01759
11	5	0.04558	0.01172	0.03386
11	6	0.09352	0.07719	0.01633
11	7	0.03861	0.01711	0.02150
11	8	0.05194	0.01863	0.03331
11	9	0.05030	0.04335	0.00694
11	10	0.00283	0.00294	-0.00011
11	11	-0.56129	-0.52339	-0.03791
11	12	0.00782	0.00489	0.00293
11	13	0.00111	-0.00106	0.00218
11	14	0.00782	0.00489	0.00293
11	15	0.00786	0.00584	0.00201
12	1	0.01935	0.00174	0.01761
12	2	0.04560	0.01172	0.03388
12	3	0.09355	0.07720	0.01635
12	4	0.03860	0.01711	0.02149
12	5	0.05193	0.01862	0.03331
12	6	0.05027	0.04332	0.00695
12	7	0.06008	0.05680	0.00328
12	8	0.09975	0.24683	-0.14708
12	9	0.07478	0.03258	0.04220
12	10	0.00111	-0.00106	0.00218
12	11	0.00782	0.00489	0.00293
12	12	-0.56132	-0.52339	-0.03793
12	13	0.00786	0.00585	0.00201
12	14	0.00781	0.00488	0.00293
12	15	0.00282	0.00292	-0.00011
13	1	0.04560	0.01172	0.03388
13	2	0.01935	0.00174	0.01761
13	3	0.07478	0.03258	0.04220
13	4	0.09975	0.24683	-0.14708
13	5	0.06008	0.05680	0.00328
13	6	0.05027	0.04332	0.00695
13	7	0.05193	0.01862	0.03331
13	8	0.03860	0.01711	0.02149
13	9	0.09355	0.07720	0.01635
13	10	0.00782	0.00489	0.00293
13	11	0.00111	-0.00106	0.00218
13	12	0.00786	0.00585	0.00201
13	13	-0.56132	-0.52339	-0.03793
13	14	0.00282	0.00292	-0.00011
13	15	0.00781	0.00488	0.00293
14	1	0.03862	0.01711	0.02151
14	2	0.05192	0.01863	0.03330
14	3	0.05034	0.04336	0.00698
14	4	0.06009	0.05680	0.00329
14	5	0.09962	0.24674	-0.14712
14	6	0.07473	0.03257	0.04216
14	7	0.01936	0.00173	0.01763
14	8	0.04560	0.01171	0.03389
14	9	0.09355	0.07719	0.01637
14	10	0.00786	0.00584	0.00201
14	11	0.00782	0.00489	0.00293
14	12	0.00781	0.00488	0.00293
14	13	0.00282	0.00292	-0.00011
14	14	-0.56127	-0.52333	-0.03794
14	15	0.00111	-0.00107	0.00218
15	1	0.05192	0.01863	0.03330
15	2	0.03862	0.01711	0.02151
15	3	0.09355	0.07719	0.01637
15	4	0.04560	0.01171	0.03389
15	5	0.01936	0.00173	0.01763
15	6	0.07473	0.03257	0.04216
15	7	0.09962	0.24674	-0.14712
15	8	0.06009	0.05680	0.00329
15	9	0.05034	0.04336	0.00698
15	10	0.00782	0.00489	0.00293
15	11	0.00786	0.00584	0.00201
15	12	0.00282	0.00292	-0.00011
15	13	0.00781	0.00488	0.00293
15	14	0.00111	-0.00107	0.00218
15	15	-0.56127	-0.52333	-0.03794