

```

!
!=====
!ATOMIZATION ENERGIES AND NON-ZERO DIPOLE MOMENTS FOR THE MOLECULAR TEST SET
!AT LEVELS DFT(BP86), MP2 AND HF USING DEF2- AND DEF-BASIS SETS.
!=====
!
!column "QZVPP": result obtained with def2-QZVPP bases
!other columns: differences to def2-QZVPP
!
!
!
!=====
!   atomization energies per atom /eV: DFT(BP86)
!=====
!
!
!
!compound      QZVPP      def2-      def-
!              QZVPP      TZVPP      TZVPP      SVP      SV(P)  TZVPP      TZVPP      SVP      SV(P)
!              -QZVPP      -QZVPP      -QZVPP      -QZVPP      -QZVPP  -QZVPP      -QZVPP      -QZVPP      -QZVPP
!
BaF            3.09      -0.02      -0.06      -0.06      -0.12      -0.12      -0.18      -0.20      -0.12      -0.12
BaF2           4.09      -0.03      -0.07      -0.07      -0.16      -0.16      -0.20      -0.22      -0.16      -0.16
BaH2           1.61      -0.01      -0.02      -0.04      -0.07      -0.08      -0.06      -0.07      -0.07      -0.08
BaO            2.97      -0.02      -0.09      -0.09      -0.24      -0.24      -0.26      -0.30      -0.24      -0.24
BaS            2.30      -0.01      -0.04      -0.04      -0.07      -0.07      -0.10      -0.11      -0.07      -0.07
Be2F4          4.75      0.00      -0.09      -0.09      -0.02      -0.02      -0.15      -0.21      -0.02      -0.02
Be2H4          2.48      0.00      -0.02      -0.03      -0.03      -0.03      -0.04      -0.06      -0.03      -0.07
Be4            1.22      0.00      -0.03      -0.03      -0.01      -0.01      -0.06      -0.08      -0.01      -0.01
BeC2H6         3.77      0.00      -0.01      -0.02      0.00      -0.05      -0.01      -0.02      0.00      -0.05
BeF2O2H4       3.96      0.00      -0.03      -0.04      -0.02      -0.12      -0.05      -0.09      -0.02      -0.12
BeH2           2.23      0.00      -0.02      -0.03      -0.01      -0.05      -0.02      -0.04      -0.01      -0.05
BeS            1.83      0.00      -0.04      -0.04      -0.03      -0.03      -0.07      -0.11      -0.03      -0.03
CaCl2          3.10      0.00      -0.05      -0.05      -0.01      -0.01      -0.05      -0.08      -0.01      -0.01
CaF2           4.01      0.00      -0.08      -0.08      -0.09      -0.09      -0.08      -0.09      -0.09      -0.09
CaH2           1.57      0.00      -0.02      -0.03      -0.05      -0.06      -0.02      -0.04      -0.05      -0.06
CsF            2.62      -0.02      -0.04      -0.05      -0.21      -0.21      -0.22      -0.43      -0.85      -0.85
CsH            0.95      0.00      -0.01      -0.02      -0.06      -0.06      -0.07      -0.17      -0.19      -0.20
CsO            1.47      -0.01      -0.04      -0.05      -0.17      -0.17      -0.25      -0.38      -0.69      -0.69
K2S            1.61      0.00      -0.03      -0.03      -0.07      -0.07      -0.14      -0.23      -0.27      -0.27
K3P            1.00      0.00      -0.02      -0.02      -0.03      -0.03      -0.09      -0.15      -0.15      -0.15
KBr            1.96      0.00      -0.02      -0.02      -0.09      -0.09      -0.09      -0.15      -0.23      -0.23
KCl            2.14      0.00      -0.04      -0.04      -0.13      -0.13      -0.13      -0.20      -0.34      -0.34
KF             2.58      0.00      -0.06      -0.06      -0.26      -0.26      -0.22      -0.33      -0.67      -0.67
KH             0.96      0.00      -0.02      -0.02      -0.05      -0.05      -0.05      -0.11      -0.12      -0.12
KI             1.70      0.00      -0.02      -0.02      -0.05      -0.05      -0.07      -0.11      -0.13      -0.13
Li2            0.44      0.00      -0.01      -0.01      0.01      0.01      -0.01      -0.01      0.00      0.00
Li2O           2.54      0.00      -0.03      -0.04      0.01      0.01      -0.04      -0.16      -0.13      -0.13
Li4C4H12       3.42      0.00      0.00      -0.01      0.01      -0.03      -0.01      -0.02      0.00      -0.04
Li4Cl4         3.10      0.00      -0.01      -0.02      0.11      0.11      -0.03      -0.06      0.07      0.07
Li4H4          2.02      0.00      -0.01      -0.03      0.01      0.00      -0.02      -0.04      -0.03      -0.04
Li8            0.80      0.00      -0.02      -0.02      0.01      0.01      -0.02      -0.03      -0.02      -0.02
LiBH4          2.98      0.00      -0.01      -0.02      0.00      -0.03      -0.01      -0.03      -0.01      -0.04
LiCl           2.38      0.00      -0.02      -0.04      -0.04      -0.04      -0.04      -0.09      -0.10      -0.10
LiF            2.99      0.00      -0.03      -0.06      -0.09      -0.09      -0.06      -0.15      -0.20      -0.20
LiH            1.26      0.00      -0.01      -0.02      0.00      -0.01      -0.01      -0.03      -0.02      -0.03
LiSLi          2.11      0.00      -0.02      -0.03      -0.03      -0.03      -0.03      -0.10      -0.14      -0.14
Mg4            0.29      0.00      0.00      0.00      0.02      0.02      -0.05      -0.15      -0.15      -0.15
MgCl2          2.65      0.00      -0.01      -0.01      0.02      0.02      -0.12      -0.23      -0.27      -0.27
MgF            2.36      0.00      -0.04      -0.04      0.00      0.00      -0.15      -0.30      -0.46      -0.46
MgF2           3.58      0.00      -0.05      -0.05      0.01      0.01      -0.20      -0.30      -0.45      -0.45
MgH2           1.55      0.00      0.00      -0.01      0.00      -0.02      -0.02      -0.05      -0.05      -0.08
Na2O           1.72      -0.01      -0.01      -0.01      0.02      0.02      -0.07      -0.08      -0.11      -0.11
Na2S           1.59      -0.01      0.00      0.00      0.01      0.01      -0.05      -0.07      -0.05      -0.05
Na3N           1.04      -0.01      0.00      0.00      0.01      0.01      -0.04      -0.06      -0.04      -0.04
Na3P           1.11      0.00      0.01      0.01      0.02      0.02      -0.02      -0.04      -0.01      -0.01
NaCl           2.04      0.00      -0.01      -0.01      -0.03      -0.03      -0.06      -0.08      -0.11      -0.11
NaF            2.47      -0.01      -0.03      -0.03      -0.11      -0.11      -0.11      -0.12      -0.29      -0.29
NaH            1.01      0.00      0.00      -0.01      -0.01      -0.02      -0.01      -0.03      -0.02      -0.03
PLi3           1.55      0.00      -0.02      -0.02      0.00      0.00      -0.03      -0.08      -0.06      -0.06
RbF            2.48      -0.01      -0.04      -0.05      -0.21      -0.21      -0.20      -0.29      -0.65      -0.65
RbH            0.90      0.00      -0.01      -0.01      -0.02      -0.03      -0.04      -0.10      -0.11      -0.11
RbO            1.34      -0.01      -0.03      -0.04      -0.17      -0.17      -0.20      -0.26      -0.53      -0.53
SrF            2.88      -0.02      -0.04      -0.06      -0.03      -0.03      -0.12      -0.13      -0.03      -0.03
SrF2           3.91      -0.03      -0.05      -0.08      -0.05      -0.05      -0.14      -0.14      -0.05      -0.05
SrH2           1.48      0.00      -0.01      -0.02      -0.04      -0.05      -0.03      -0.03      -0.04      -0.05

```

SrO	2.44	-0.01	-0.04	-0.07	-0.10	-0.10	-0.14	-0.16	-0.10	-0.10
SrS	1.90	-0.01	-0.01	-0.02	0.00	0.00	-0.05	-0.05	0.00	0.00
B2H6	3.36	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.04	0.00	-0.01	0.00	-0.04
B3N3H6	4.53	0.00	0.00	-0.01	0.04	-0.01	0.00	-0.03	0.04	-0.01
B4H4	3.80	0.00	0.00	0.00	0.03	0.01	0.00	-0.01	0.03	0.01
BF3	5.15	0.00	0.00	0.00	0.13	0.13	0.00	-0.05	0.13	0.13
BH3	3.10	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.00	-0.01	-0.01	-0.04
BH3CO	4.25	0.00	0.00	0.00	0.03	0.01	0.00	-0.03	0.03	0.01
BH3NH3	3.40	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.07	0.00	-0.02	-0.01	-0.07
C2H2	4.49	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.04	0.00	-0.02	0.00	-0.04
C2H3N	4.03	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.04	0.00	-0.04	0.01	-0.04
C2H4	4.16	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.03	0.00	-0.01	0.01	-0.03
C2H6	3.94	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.04	0.00	-0.01	0.01	-0.04
C4H4	4.45	0.00	0.00	0.00	0.07	0.04	0.00	-0.03	0.07	0.04
C6H6	5.06	0.00	0.00	0.00	0.05	0.02	0.00	-0.02	0.05	0.02
CF4	4.28	0.00	0.01	0.01	0.17	0.17	0.01	-0.07	0.17	0.17
CH2O	4.19	0.00	0.00	-0.01	0.03	0.00	0.00	-0.03	0.03	0.00
CH2O2	3.74	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	-0.05	0.02	0.00
CH3N	3.94	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.05	0.00	-0.03	0.00	-0.05
CH3OH	3.80	0.00	0.00	-0.02	-0.01	-0.08	0.00	-0.03	-0.01	-0.08
CH4	3.72	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.06	0.00	-0.01	-0.01	-0.06
CO	5.73	0.00	0.00	0.00	0.06	0.06	0.00	-0.05	0.06	0.06
CO2	5.90	0.00	0.00	0.00	0.10	0.10	0.00	-0.07	0.10	0.10
F2	1.10	0.00	0.01	0.01	0.06	0.06	0.01	-0.03	0.06	0.06
H2	2.42	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.08	0.00	0.00	-0.05	-0.08
H2CO3	4.64	0.00	0.00	-0.01	0.06	-0.03	0.00	-0.06	0.06	-0.03
H2O	3.44	0.00	-0.01	-0.04	-0.11	-0.28	-0.01	-0.06	-0.11	-0.28
H2O2	3.08	0.00	0.00	-0.03	-0.04	-0.16	0.00	-0.05	-0.04	-0.16
HCN	4.67	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.00	-0.03	0.00	-0.02
HF	3.12	0.00	-0.01	-0.04	-0.13	-0.31	-0.01	-0.05	-0.13	-0.31
HNC	4.46	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.04	0.00	-0.04	0.01	-0.04
HNO	3.19	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.02	0.00	-0.06	0.01	-0.02
HNO2	3.64	0.00	0.00	-0.01	0.04	0.02	0.00	-0.07	0.04	0.02
HNO3	3.72	0.00	0.00	-0.01	0.06	0.01	0.00	-0.09	0.06	0.01
N2	5.15	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.07	-0.01	-0.01
N2H2	3.35	0.00	-0.01	-0.02	-0.03	-0.09	-0.01	-0.07	-0.03	-0.09
N2H4	3.31	0.00	-0.01	-0.02	-0.05	-0.13	-0.01	-0.05	-0.05	-0.13
N4	3.43	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.12	-0.01	-0.01
NF3	2.57	0.00	0.00	0.00	0.05	0.05	0.00	-0.08	0.05	0.05
NH3	3.34	0.00	-0.01	-0.03	-0.07	-0.18	-0.01	-0.04	-0.07	-0.18
NH4F	3.36	0.00	-0.01	-0.03	-0.08	-0.20	-0.01	-0.03	-0.08	-0.20
OF2	1.72	0.00	0.00	0.00	0.04	0.04	0.00	-0.06	0.04	0.04
Al2O3	4.07	0.00	-0.01	-0.01	-0.07	-0.07	-0.06	-0.14	-0.07	-0.07
Al2S3	3.07	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	-0.02	-0.08	0.00	0.00
AlCl3	3.26	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01	-0.03	-0.09	0.01	0.01
AlF3	4.59	0.00	-0.02	-0.02	-0.06	-0.06	-0.07	-0.18	-0.06	-0.06
AlH3	2.31	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.01	-0.02	-0.01	-0.03
AlN	1.51	0.00	-0.01	-0.01	-0.07	-0.07	-0.03	-0.09	-0.07	-0.07
CS2	4.24	0.00	0.01	0.01	0.01	0.01	-0.03	-0.11	0.01	0.01
Cl2	1.36	0.00	0.00	0.00	-0.10	-0.10	-0.03	-0.14	-0.10	-0.10
ClF	1.52	0.00	-0.01	-0.01	-0.09	-0.09	-0.03	-0.13	-0.09	-0.09
ClF3	1.73	0.00	-0.02	-0.02	-0.21	-0.21	-0.07	-0.23	-0.21	-0.21
H2SO4	3.81	0.00	-0.01	-0.02	-0.23	-0.31	-0.10	-0.31	-0.23	-0.31
H3PO4	4.20	0.00	-0.01	-0.02	-0.15	-0.25	-0.06	-0.21	-0.15	-0.25
HCP	3.73	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.04	-0.02	-0.07	-0.02	-0.04
HCl	2.35	0.00	0.00	-0.02	-0.06	-0.17	-0.01	-0.05	-0.06	-0.17
HSH	2.70	0.00	0.00	-0.01	-0.05	-0.14	-0.02	-0.05	-0.05	-0.14
HSSH	2.69	0.00	0.00	-0.01	-0.08	-0.14	-0.03	-0.09	-0.08	-0.14
P2	2.59	0.00	0.00	0.00	-0.07	-0.07	-0.04	-0.12	-0.07	-0.07
PF3	4.02	0.00	-0.01	-0.02	-0.14	-0.14	-0.07	-0.26	-0.14	-0.14
PF5	4.04	0.00	-0.01	-0.01	-0.12	-0.12	-0.08	-0.30	-0.12	-0.12
PH3	2.68	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.09	-0.01	-0.04	-0.03	-0.09
S2	2.43	0.00	0.00	0.00	-0.09	-0.09	-0.05	-0.16	-0.09	-0.09
S5	2.76	0.00	0.00	0.00	-0.15	-0.15	-0.05	-0.22	-0.15	-0.15
SF2	2.72	0.00	-0.02	-0.02	-0.14	-0.14	-0.06	-0.22	-0.14	-0.14
SF4	3.07	0.00	-0.02	-0.02	-0.18	-0.18	-0.09	-0.29	-0.18	-0.18
SF6	3.08	0.00	-0.01	-0.01	-0.14	-0.14	-0.10	-0.35	-0.14	-0.14
SiCl4	3.27	0.00	0.01	0.01	-0.04	-0.04	-0.04	-0.14	-0.04	-0.04
SiF4	4.91	0.00	-0.01	-0.02	-0.11	-0.11	-0.08	-0.27	-0.11	-0.11
SiH4	2.82	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.05	-0.01	-0.03	-0.02	-0.05
SiO2	4.42	0.00	-0.01	-0.01	-0.16	-0.16	-0.07	-0.21	-0.16	-0.16
SiS2	3.32	0.00	0.01	0.01	-0.05	-0.05	-0.04	-0.13	-0.05	-0.05
As4	2.73	0.00	0.01	0.01	-0.03	-0.03	0.01	-0.07	-0.03	-0.03
As4S4	2.71	0.00	0.01	0.01	-0.04	-0.04	-0.01	-0.11	-0.04	-0.04
AsCl3	2.49	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.04	-0.01	-0.10	-0.04	-0.04

AsCl6-	2.64	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.06	-0.01	-0.08	-0.06	-0.06
AsH3	2.46	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.05	0.00	-0.01	-0.01	-0.05
Br2	1.21	0.00	-0.01	-0.01	-0.04	-0.04	-0.01	-0.07	-0.04	-0.04
BrCl	1.29	0.00	-0.01	-0.01	-0.07	-0.07	-0.02	-0.10	-0.07	-0.07
BrO4-	3.01	0.00	-0.03	-0.03	-0.29	-0.29	-0.03	-0.24	-0.29	-0.29
GaCl	2.43	0.00	0.01	0.01	0.02	0.02	0.01	-0.02	0.02	0.02
GaCl3	2.76	0.00	0.01	0.01	0.03	0.03	0.00	-0.05	0.03	0.03
GaF	3.12	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.05	0.00	0.00
GaF2	3.16	0.00	-0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.08	0.01	0.01
GaH3	2.15	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.04	0.00	-0.01	-0.02	-0.04
GaO	2.36	0.00	-0.01	-0.01	-0.03	-0.03	-0.01	-0.07	-0.03	-0.03
GeCl4	2.83	0.00	0.02	0.02	0.01	0.01	0.00	-0.07	0.01	0.01
GeF3	3.67	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.12	-0.01	-0.01
GeF4	4.01	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.14	0.00	0.00
GeH4	2.59	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.04	0.00	-0.01	-0.01	-0.04
GeO	3.62	0.00	-0.01	-0.01	-0.03	-0.03	-0.01	-0.08	-0.03	-0.03
GeO2	3.59	0.00	-0.01	-0.01	-0.07	-0.07	-0.01	-0.12	-0.07	-0.07
HBr	2.07	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.10	0.00	-0.02	-0.02	-0.10
HCBBr3	2.74	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.04	0.01	0.00
Se8	2.52	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.01	-0.07	-0.02	-0.02
SeH2	2.43	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.08	0.00	-0.02	-0.01	-0.08
SeO	2.59	0.00	-0.01	-0.01	-0.07	-0.07	-0.01	-0.11	-0.07	-0.07
SeO2	3.29	0.00	-0.02	-0.02	-0.11	-0.11	-0.02	-0.16	-0.11	-0.11
I2	1.06	0.00	-0.01	-0.01	-0.07	-0.07	-0.05	-0.11	-0.11	-0.11
ICl	1.26	0.00	-0.01	-0.01	-0.09	-0.09	-0.06	-0.14	-0.13	-0.13
IH	1.77	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.08	-0.01	-0.02	-0.04	-0.10
IO4-	3.24	0.00	-0.06	-0.06	-0.47	-0.47	-0.22	-0.52	-0.59	-0.59
InCl	2.30	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.08	0.03	0.04	0.04
InCl3	2.49	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.27	0.16	0.19	0.19
InH	1.39	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.03	0.03	0.02	0.00	-0.01
InH3	1.90	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.05	0.10	0.07	0.06	0.04
InO	1.98	0.00	-0.02	-0.02	-0.13	-0.13	0.24	0.13	0.10	0.10
SbCl6-	2.81	0.00	-0.01	-0.01	-0.07	-0.07	0.01	-0.08	-0.05	-0.05
SbF	2.25	0.00	-0.03	-0.03	-0.15	-0.15	-0.02	-0.13	-0.14	-0.14
SbF3	3.62	0.00	-0.04	-0.04	-0.17	-0.17	-0.02	-0.22	-0.18	-0.18
SbH3	2.20	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.06	0.04	0.03	-0.01	-0.04
SbO2	2.88	0.00	-0.03	-0.03	-0.21	-0.21	-0.02	-0.19	-0.23	-0.23
SnF3	3.41	0.00	-0.02	-0.02	-0.11	-0.11	0.00	-0.16	-0.12	-0.12
SnH4	2.28	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.05	0.03	0.02	-0.03	-0.06
SnO	3.04	0.00	-0.02	-0.02	-0.13	-0.13	-0.06	-0.16	-0.22	-0.22
SnO2	3.00	0.00	-0.02	-0.02	-0.19	-0.19	-0.06	-0.21	-0.30	-0.30
TeF3	2.90	0.00	-0.04	-0.04	-0.18	-0.18	-0.07	-0.25	-0.23	-0.23
TeH2	2.13	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.07	0.05	0.03	0.00	-0.05
TeO	2.36	0.00	-0.03	-0.03	-0.18	-0.18	-0.02	-0.16	-0.22	-0.22
TeO2	3.03	0.00	-0.04	-0.04	-0.28	-0.28	-0.05	-0.28	-0.33	-0.33
XeF2	1.21	0.00	-0.05	-0.05	-0.04	-0.04	-0.11	-0.21	-0.22	-0.22
XeF4	1.45	0.00	-0.07	-0.07	0.01	0.01	-0.14	-0.30	-0.22	-0.22
XeOF4	1.51	0.00	-0.07	-0.07	0.02	0.02	-0.17	-0.43	-0.32	-0.32
BiCl6-	2.64	0.00	-0.01	0.00	-0.07	-0.07	0.05	-0.06	-0.06	-0.06
BiF	2.15	0.00	-0.03	-0.03	-0.16	-0.16	0.03	-0.08	-0.13	-0.13
BiF3	3.45	0.00	-0.04	-0.04	-0.19	-0.19	0.04	-0.12	-0.11	-0.11
BiH3	2.05	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.06	0.04	0.02	0.03	-0.01
BiO2	2.56	0.00	-0.03	-0.03	-0.21	-0.21	0.02	-0.13	-0.17	-0.17
PbF3	3.04	0.00	-0.02	-0.02	-0.10	-0.10	-0.05	-0.17	-0.11	-0.11
PbH4	2.02	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.06	0.10	0.08	0.08	0.05
PbO	2.75	0.00	-0.03	-0.03	-0.16	-0.16	0.00	-0.10	-0.14	-0.14
PbO2	2.61	0.00	-0.02	-0.02	-0.21	-0.21	-0.09	-0.26	-0.27	-0.27
TlCl	2.23	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.03	-0.01	-0.04	-0.04	-0.04
TlCl3	2.08	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.11	0.03	0.09	0.09
TlH	1.34	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.03	0.00	-0.01	-0.02	-0.02
TlH3	1.69	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.07	0.09	0.08	0.06	0.03
TlO	1.73	0.00	-0.02	-0.02	-0.14	-0.14	0.09	0.00	-0.01	-0.01
CoCl3	2.65	0.00	0.00	-0.03	0.13	0.13	0.06	0.03	0.13	0.13
CoF2	3.38	0.00	-0.03	-0.06	0.10	0.09	0.05	0.01	0.09	0.09
CoF3	3.46	0.00	-0.03	-0.07	0.12	0.11	0.03	-0.01	0.11	0.11
CrCO6	6.00	0.00	0.01	0.01	0.12	0.11	0.01	-0.04	0.11	0.11
CrCl3	2.79	0.00	0.00	-0.02	-0.02	-0.03	-0.01	-0.07	-0.03	-0.03
CrF3	3.90	0.00	-0.01	-0.05	0.01	-0.03	-0.05	-0.11	-0.03	-0.03
CrO3	4.16	0.00	0.01	-0.02	0.05	-0.02	-0.02	-0.12	-0.02	-0.02
Cu2	1.02	0.00	-0.01	-0.02	0.24	0.23	0.06	0.06	0.23	0.23
Cu2O	2.09	0.00	-0.03	-0.08	0.21	0.20	0.03	0.01	0.20	0.20
Cu2S	2.01	0.00	-0.02	-0.05	0.20	0.19	0.05	0.02	0.19	0.19
CuCN	4.17	0.00	-0.01	-0.01	0.14	0.14	0.05	0.01	0.14	0.14
CuCl	1.85	0.00	-0.03	-0.05	0.10	0.10	0.02	0.00	0.10	0.10
CuF	2.16	0.00	-0.04	-0.08	0.07	0.06	-0.01	-0.02	0.06	0.06

CuH	1.46	0.00	-0.01	-0.03	0.08	0.04	0.03	0.02	0.07	0.04
FeCO5	6.02	0.00	0.01	0.01	0.14	0.14	0.03	-0.03	0.14	0.14
FeF2	3.67	0.00	-0.07	-0.05	0.00	-0.01	0.00	-0.04	-0.01	-0.01
FeF3	3.71	0.00	-0.03	-0.07	0.05	0.04	-0.01	-0.05	0.04	0.04
FeO	2.71	0.00	-0.02	-0.06	-0.04	-0.07	-0.02	-0.07	-0.07	-0.07
Ferrocen	5.00	0.00	0.00	-0.01	0.08	0.05	0.01	-0.01	0.08	0.05
MnF2	3.70	0.00	-0.02	-0.05	-0.11	-0.12	-0.07	-0.10	-0.12	-0.12
MnO	2.70	0.00	-0.02	-0.07	-0.14	-0.17	-0.10	-0.14	-0.17	-0.17
MnO2	3.57	0.00	-0.01	-0.04	-0.02	-0.07	-0.04	-0.11	-0.07	-0.07
MnO3F	4.03	0.00	-0.01	-0.03	0.04	-0.02	-0.04	-0.12	-0.02	-0.02
MnO4-	4.83	0.00	-0.01	-0.04	-0.03	-0.09	-0.05	-0.12	-0.09	-0.09
MnS	2.05	0.00	-0.01	-0.04	-0.18	-0.19	-0.09	-0.12	-0.19	-0.19
NiCO4	5.91	0.00	0.00	0.01	0.19	0.19	0.06	0.00	0.19	0.19
NiCl2	2.58	0.00	0.00	-0.02	0.15	0.14	0.09	0.05	0.14	0.14
NiF2	3.24	0.00	-0.02	-0.05	0.15	0.14	0.07	0.04	0.14	0.14
NiF3	3.03	0.00	-0.03	-0.07	0.18	0.17	0.05	0.02	0.17	0.17
NiO	2.37	-0.01	-0.02	-0.04	0.10	0.08	0.07	0.04	0.08	0.08
NiS	2.07	0.00	-0.01	-0.02	0.01	0.01	0.05	0.00	0.01	0.01
ScCl3	3.77	0.00	0.01	0.00	0.05	0.00	-0.02	-0.06	0.00	0.00
ScF3	5.06	0.00	0.00	-0.02	0.07	0.01	-0.06	-0.10	0.01	0.01
ScH3	2.20	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.05	0.00	-0.01	-0.02	-0.05
ScO	3.88	0.00	0.00	-0.02	0.05	0.00	-0.02	-0.08	0.00	0.00
TiCO4	5.72	0.00	0.00	0.00	0.10	0.09	0.01	-0.04	0.09	0.09
TiCl4	3.78	0.00	0.01	0.00	0.05	0.01	-0.01	-0.06	0.01	0.01
TiF3	4.96	0.00	0.00	-0.01	0.07	0.00	-0.05	-0.10	0.00	0.00
TiF4	5.21	0.00	0.00	-0.01	0.10	0.02	-0.05	-0.12	0.02	0.02
TiH4	2.30	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.05	0.01	0.00	0.00	-0.05
TiO	3.99	0.00	0.01	-0.02	0.05	-0.01	-0.02	-0.08	-0.01	-0.01
TiO2	4.92	0.00	0.01	-0.01	0.07	0.00	-0.03	-0.09	0.00	0.00
TiS2	3.49	0.00	0.01	0.00	0.03	0.00	0.00	-0.04	0.00	0.00
VH5	2.08	0.00	0.00	-0.01	0.10	0.04	0.06	0.05	0.10	0.04
VO	3.60	0.00	0.01	-0.02	0.29	0.23	0.10	0.04	0.23	0.23
VOF3	4.92	0.00	0.00	-0.02	0.21	0.13	0.01	-0.06	0.13	0.13
ZnCl2	2.18	0.00	-0.03	-0.03	0.01	0.01	-0.01	-0.04	0.01	0.01
ZnF2	2.82	-0.01	-0.06	-0.07	-0.04	-0.05	-0.05	-0.08	-0.05	-0.05
ZnH2	1.55	0.00	-0.01	-0.02	0.01	-0.04	0.02	0.00	0.01	-0.04
ZnMe2	3.48	0.00	0.00	-0.01	0.03	-0.02	0.01	0.00	0.03	-0.02
Ag2	0.87	0.00	-0.01	-0.02	-0.03	-0.04	-0.03	-0.03	-0.04	-0.04
AgCl	1.55	0.00	-0.01	-0.03	-0.01	-0.03	-0.03	-0.06	-0.03	-0.03
CdF2	2.39	-0.01	-0.05	-0.08	-0.06	-0.08	-0.08	-0.11	-0.08	-0.08
CdMe2	3.39	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.05	-0.01	-0.02	-0.01	-0.05
MoCO6	6.17	0.00	0.00	0.00	0.10	0.08	0.00	-0.07	0.08	0.08
MoF3	4.13	0.00	-0.01	-0.05	0.06	-0.05	-0.10	-0.23	-0.05	-0.05
MoH	1.35	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.04	-0.01	-0.02	-0.02	-0.04
MoO2	4.41	0.00	0.00	-0.04	0.03	-0.14	-0.07	-0.25	-0.14	-0.14
MoO3	4.95	0.00	0.00	-0.04	0.04	-0.16	-0.08	-0.28	-0.16	-0.16
NbF3	4.70	0.00	0.00	-0.04	0.11	-0.03	-0.10	-0.24	-0.03	-0.03
NbO	4.11	0.00	0.01	-0.02	0.05	-0.08	-0.03	-0.16	-0.08	-0.08
NbO2	5.13	0.00	0.00	-0.03	0.06	-0.11	-0.05	-0.22	-0.11	-0.11
NbO2F	5.39	0.00	0.00	-0.04	0.07	-0.10	-0.08	-0.24	-0.10	-0.10
PdCO4	5.72	0.00	0.00	0.00	0.08	0.07	0.00	-0.07	0.07	0.07
PdF	1.85	-0.01	0.00	-0.03	-0.03	-0.06	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06
PdO2	2.14	0.00	-0.01	-0.05	-0.03	-0.08	-0.07	-0.14	-0.08	-0.08
RhF	2.03	-0.01	-0.03	-0.07	0.05	-0.06	-0.08	-0.13	-0.06	-0.06
RhF4	2.93	0.00	-0.04	-0.08	0.03	0.00	-0.11	-0.16	0.00	0.00
RhF6	3.01	0.00	-0.03	-0.09	0.05	-0.02	-0.14	-0.24	-0.02	-0.02
RhO	2.54	0.00	-0.01	-0.06	-0.03	-0.10	-0.07	-0.16	-0.10	-0.10
RuCO5	6.15	0.00	0.00	0.00	0.09	0.08	0.00	-0.07	0.08	0.08
RuF	2.18	0.00	0.00	-0.04	0.03	-0.01	-0.03	-0.07	-0.01	-0.01
RuO	2.84	0.00	0.01	-0.02	0.00	-0.08	-0.04	-0.13	-0.08	-0.08
RuO2	3.89	0.00	0.00	-0.05	0.00	-0.17	-0.08	-0.27	-0.17	-0.17
RuO4	4.47	0.00	-0.01	-0.06	-0.01	-0.19	-0.09	-0.31	-0.19	-0.19
Tc2O7	5.23	0.00	0.01	-0.04	0.03	-0.18	-0.10	-0.32	-0.18	-0.18
TcO	3.08	0.00	0.05	0.02	0.00	-0.09	-0.05	-0.15	-0.09	-0.09
TcO3F	4.96	0.00	0.01	-0.04	0.02	-0.17	-0.10	-0.31	-0.17	-0.17
YF	3.53	0.00	-0.01	-0.03	0.06	-0.02	-0.06	-0.13	-0.02	-0.02
YF3	5.09	-0.01	-0.03	-0.05	0.09	-0.03	-0.08	-0.16	-0.03	-0.03
YO	3.86	0.00	-0.02	-0.04	0.00	-0.09	-0.04	-0.14	-0.09	-0.09
ZrF	3.41	0.00	-0.01	-0.03	0.06	-0.02	-0.06	-0.14	-0.02	-0.02
ZrF3	5.24	0.00	-0.01	-0.04	0.11	-0.02	-0.09	-0.20	-0.02	-0.02
ZrO	4.27	0.00	-0.01	-0.03	0.03	-0.09	-0.04	-0.15	-0.09	-0.09
ZrO2	5.16	0.00	-0.01	-0.04	0.04	-0.11	-0.05	-0.19	-0.11	-0.11
Au2	1.13	-0.01	-0.02	-0.04	-0.05	-0.09	-0.06	-0.08	-0.09	-0.09
Au3-	2.39	-0.01	-0.03	-0.04	-0.08	-0.11	-0.09	-0.11	-0.11	-0.11
AuCl	1.47	0.00	-0.02	-0.03	-0.05	-0.08	-0.06	-0.12	-0.08	-0.08

AuCl3	1.68	0.00	-0.01	-0.03	-0.05	-0.09	-0.09	-0.17	-0.09	-0.09
HfF	3.52	0.00	0.00	-0.02	0.02	-0.06	-0.09	-0.17	-0.06	-0.06
HfF3	5.24	0.00	0.00	-0.03	0.06	-0.06	-0.12	-0.22	-0.06	-0.06
HfO	4.41	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.13	-0.07	-0.16	-0.13	-0.13
HfO2	4.90	0.00	-0.01	-0.03	-0.01	-0.14	-0.08	-0.20	-0.14	-0.14
Hg2Cl2	1.18	0.00	-0.01	-0.02	-0.11	-0.14	-0.13	-0.18	-0.14	-0.14
HgF2	1.94	0.00	-0.02	-0.04	-0.09	-0.15	-0.12	-0.19	-0.15	-0.15
HgMe2	3.36	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.07	-0.02	-0.04	-0.03	-0.07
IrF6	3.42	0.00	-0.01	-0.05	0.02	-0.14	-0.17	-0.34	-0.14	-0.14
OsCO5	6.25	0.00	0.00	0.00	0.05	0.03	-0.04	-0.12	0.03	0.03
OsO2	4.29	0.00	-0.01	-0.06	-0.09	-0.29	-0.14	-0.36	-0.29	-0.29
OsO3	4.91	0.00	-0.01	-0.05	-0.08	-0.31	-0.15	-0.41	-0.31	-0.31
OsO4	5.00	0.00	0.00	-0.04	-0.08	-0.36	-0.17	-0.46	-0.36	-0.36
OsOF5	3.97	0.00	0.00	-0.04	0.02	-0.19	-0.18	-0.39	-0.19	-0.19
PtCO4	5.90	0.00	0.00	0.00	0.04	0.02	-0.05	-0.12	0.02	0.02
PtO	2.46	0.00	-0.02	-0.06	-0.06	-0.17	-0.10	-0.22	-0.17	-0.17
PtO2	3.43	0.00	-0.01	-0.05	-0.10	-0.32	-0.16	-0.40	-0.32	-0.32
ReH	1.26	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.08	-0.03	-0.04	-0.04	-0.08
ReO	2.85	0.00	-0.01	-0.04	-0.13	-0.25	-0.16	-0.29	-0.25	-0.25
ReO2	4.17	0.00	-0.01	-0.03	-0.13	-0.32	-0.18	-0.40	-0.32	-0.32
ReO3	5.04	0.00	0.00	-0.04	-0.09	-0.32	-0.16	-0.41	-0.32	-0.32
ReO3F	5.22	0.00	0.00	-0.04	-0.05	-0.30	-0.16	-0.42	-0.30	-0.30
TaF	3.18	0.00	0.00	-0.04	0.00	-0.10	-0.09	-0.21	-0.10	-0.10
TaF3	5.00	0.00	0.00	-0.04	0.05	-0.09	-0.13	-0.28	-0.09	-0.09
TaO2F	5.40	0.00	0.00	-0.04	-0.02	-0.19	-0.13	-0.30	-0.19	-0.19
WCO6	6.31	0.00	0.00	0.00	0.07	0.06	-0.02	-0.09	0.06	0.06
WF3	4.49	0.00	0.00	-0.04	0.02	-0.11	-0.13	-0.27	-0.11	-0.11
WH	1.76	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.06	-0.02	-0.03	-0.03	-0.06
WO	3.45	0.00	0.00	-0.03	-0.02	-0.15	-0.06	-0.20	-0.15	-0.15
WO2	5.00	0.00	0.00	-0.03	-0.03	-0.21	-0.10	-0.28	-0.21	-0.21
WO3	5.22	0.00	0.00	-0.04	-0.09	-0.31	-0.16	-0.39	-0.31	-0.31

!  
!  
!

!=====  
! atomization energies per atom /eV: MP2  
!=====

!compound	def2-						def-			
	QZVPP	QZVP	TZVPP	TZVP	SVP	SV(P)	TZVPP	TZVP	SVP	SV(P)
!		-QZVPP	-QZVPP	-QZVPP	-QZVPP	-QZVPP	-QZVPP	-QZVPP	-QZVPP	-QZVPP
!										
BaF	3.07	-0.02	-0.09	-0.09	-0.36	-0.36	-0.21	-0.36	-0.36	-0.36
BaF2	4.12	-0.03	-0.15	-0.15	-0.48	-0.48	-0.26	-0.44	-0.48	-0.48
BaH2	1.38	-0.01	-0.03	-0.20	-0.25	-0.44	-0.07	-0.24	-0.25	-0.44
BaO	3.02	-0.06	-0.20	-0.20	-0.70	-0.70	-0.38	-0.67	-0.70	-0.70
BaS	2.20	-0.04	-0.15	-0.15	-0.57	-0.57	-0.24	-0.59	-0.57	-0.57
Be2F4	4.93	0.00	-0.19	-0.19	-0.33	-0.33	-0.27	-0.47	-0.33	-0.33
Be2H4	2.38	0.00	-0.07	-0.14	-0.17	-0.40	-0.09	-0.20	-0.17	-0.40
Be4	1.13	0.00	-0.16	-0.16	-0.31	-0.31	-0.40	-0.40	-0.31	-0.31
BeC2H6	3.67	0.00	-0.06	-0.12	-0.16	-0.35	-0.06	-0.18	-0.16	-0.35
BeF2O2H4	4.00	0.00	-0.10	-0.16	-0.26	-0.46	-0.13	-0.30	-0.26	-0.46
BeH2	2.14	0.00	-0.06	-0.12	-0.12	-0.34	-0.05	-0.15	-0.12	-0.34
BeS	1.82	0.00	-0.16	-0.16	-0.36	-0.36	-0.22	-0.42	-0.36	-0.36
CaCl2	3.14	0.01	-0.15	-0.16	-0.32	-0.32	-0.16	-0.40	-0.32	-0.32
CaF2	4.02	0.01	-0.19	-0.19	-0.35	-0.35	-0.19	-0.34	-0.35	-0.35
CaH2	1.37	0.01	-0.06	-0.17	-0.18	-0.35	-0.06	-0.19	-0.18	-0.35
CsF	2.72	-0.04	-0.21	-0.24	-0.52	-0.52	-0.35	-0.54	-1.05	-1.05
CsH	0.80	-0.03	-0.11	-0.22	-0.23	-0.33	-0.17	-0.32	-0.35	-0.45
CsO	1.41	-0.03	-0.20	-0.21	-0.47	-0.47	-0.34	-0.49	-0.92	-0.92
K2S	1.63	0.01	-0.14	-0.14	-0.36	-0.36	-0.27	-0.55	-0.61	-0.61
K3P	0.99	0.00	-0.12	-0.13	-0.27	-0.27	-0.24	-0.50	-0.51	-0.51
KBr	2.06	0.00	-0.09	-0.09	-0.23	-0.23	-0.14	-0.29	-0.35	-0.35
KCl	2.23	0.01	-0.11	-0.11	-0.36	-0.36	-0.19	-0.39	-0.56	-0.56
KF	2.63	0.00	-0.15	-0.15	-0.44	-0.44	-0.27	-0.43	-0.83	-0.83
KH	0.78	0.00	-0.06	-0.13	-0.15	-0.26	-0.10	-0.22	-0.23	-0.33
KI	1.83	0.01	-0.09	-0.09	-0.21	-0.21	-0.23	-0.31	-0.30	-0.30
Li2	0.38	0.00	-0.04	-0.10	-0.09	-0.09	-0.10	-0.12	-0.13	-0.13
Li2O	2.61	0.00	-0.13	-0.17	-0.28	-0.28	-0.17	-0.44	-0.47	-0.47
Li4C4H12	3.35	0.00	-0.05	-0.12	-0.15	-0.32	-0.06	-0.18	-0.17	-0.35
Li4Cl4	3.27	0.00	-0.10	-0.15	-0.14	-0.14	-0.15	-0.31	-0.20	-0.20
Li4H4	1.94	0.00	-0.06	-0.18	-0.14	-0.29	-0.08	-0.18	-0.18	-0.32
Li8	0.78	0.00	-0.07	-0.17	-0.14	-0.14	-0.17	-0.21	-0.22	-0.22
LiBH4	2.88	0.00	-0.04	-0.10	-0.11	-0.29	-0.04	-0.14	-0.12	-0.30
LiCl	2.47	0.00	-0.09	-0.13	-0.29	-0.29	-0.13	-0.33	-0.36	-0.36

LiF	3.09	0.00	-0.11	-0.15	-0.32	-0.32	-0.15	-0.34	-0.42	-0.42
LiH	1.13	0.00	-0.05	-0.14	-0.13	-0.25	-0.06	-0.15	-0.15	-0.27
LiSLi	2.15	0.00	-0.12	-0.16	-0.36	-0.36	-0.16	-0.40	-0.49	-0.49
Mg4	0.33	0.00	-0.08	-0.08	-0.04	-0.04	-0.28	-0.40	-0.42	-0.42
MgCl2	2.85	0.00	-0.10	-0.10	-0.19	-0.19	-0.22	-0.48	-0.52	-0.52
MgF	2.51	0.00	-0.09	-0.09	-0.14	-0.14	-0.18	-0.41	-0.55	-0.55
MgF2	3.80	0.00	-0.13	-0.13	-0.21	-0.21	-0.29	-0.47	-0.60	-0.60
MgH2	1.46	0.00	-0.04	-0.12	-0.09	-0.26	-0.05	-0.15	-0.14	-0.32
Na2O	1.85	-0.01	-0.13	-0.13	-0.26	-0.26	-0.24	-0.40	-0.42	-0.42
Na2S	1.69	0.00	-0.12	-0.12	-0.30	-0.30	-0.19	-0.43	-0.43	-0.43
Na3N	0.77	-0.01	-0.10	-0.10	-0.29	-0.29	-0.25	-0.44	-0.48	-0.48
Na3P	1.14	0.00	-0.10	-0.11	-0.25	-0.25	-0.18	-0.39	-0.38	-0.38
NaCl	2.16	0.00	-0.10	-0.10	-0.27	-0.27	-0.15	-0.34	-0.39	-0.39
NaF	2.59	0.00	-0.12	-0.12	-0.32	-0.32	-0.20	-0.32	-0.54	-0.54
NaH	0.86	0.00	-0.04	-0.10	-0.13	-0.24	-0.07	-0.17	-0.17	-0.27
PLi3	1.52	0.00	-0.11	-0.17	-0.31	-0.31	-0.16	-0.36	-0.38	-0.38
RbF	2.56	-0.02	-0.13	-0.14	-0.47	-0.47	-0.26	-0.40	-0.85	-0.85
RbH	0.72	-0.01	-0.04	-0.14	-0.15	-0.26	-0.09	-0.20	-0.23	-0.33
RbO	1.27	-0.02	-0.11	-0.12	-0.43	-0.43	-0.25	-0.38	-0.75	-0.75
SrF	2.87	-0.03	-0.14	-0.20	-0.26	-0.26	-0.13	-0.27	-0.26	-0.26
SrF2	3.96	-0.04	-0.19	-0.25	-0.36	-0.36	-0.16	-0.33	-0.36	-0.36
SrH2	1.27	-0.01	-0.06	-0.22	-0.18	-0.36	-0.01	-0.17	-0.18	-0.36
SrO	2.34	-0.05	-0.21	-0.35	-0.53	-0.53	-0.22	-0.49	-0.53	-0.53
SrS	1.74	-0.03	-0.18	-0.25	-0.42	-0.42	-0.13	-0.44	-0.42	-0.42
B2H6	3.25	0.00	-0.03	-0.08	-0.10	-0.29	-0.03	-0.12	-0.10	-0.29
B3N3H6	4.46	0.00	-0.07	-0.11	-0.16	-0.31	-0.07	-0.23	-0.16	-0.31
B4H4	3.74	0.00	-0.04	-0.07	-0.08	-0.20	-0.04	-0.14	-0.08	-0.20
BF3	5.32	0.00	-0.07	-0.07	-0.14	-0.14	-0.07	-0.25	-0.14	-0.14
BH3	3.00	0.00	-0.03	-0.08	-0.09	-0.27	-0.03	-0.10	-0.09	-0.27
BH3CO	4.15	0.00	-0.05	-0.09	-0.13	-0.25	-0.05	-0.18	-0.13	-0.25
BH3NH3	3.27	0.00	-0.04	-0.11	-0.14	-0.36	-0.04	-0.15	-0.14	-0.36
C2H2	4.44	0.00	-0.06	-0.10	-0.15	-0.28	-0.06	-0.19	-0.15	-0.28
C2H3N	3.89	0.00	-0.08	-0.12	-0.21	-0.36	-0.08	-0.25	-0.21	-0.36
C2H4	4.05	0.00	-0.05	-0.10	-0.13	-0.31	-0.05	-0.16	-0.13	-0.31
C2H6	3.83	0.00	-0.04	-0.10	-0.12	-0.32	-0.04	-0.14	-0.12	-0.32
C4H4	4.37	0.00	-0.07	-0.11	-0.14	-0.27	-0.07	-0.24	-0.14	-0.27
C6H6	5.01	0.00	-0.06	-0.10	-0.14	-0.27	-0.06	-0.21	-0.14	-0.27
CF4	4.34	0.00	-0.07	-0.07	-0.16	-0.16	-0.07	-0.29	-0.16	-0.16
CH2O	4.11	0.00	-0.06	-0.10	-0.17	-0.30	-0.06	-0.20	-0.17	-0.30
CH2O2	3.63	0.00	-0.07	-0.11	-0.25	-0.35	-0.07	-0.27	-0.25	-0.35
CH3N	3.79	0.00	-0.06	-0.12	-0.19	-0.37	-0.06	-0.21	-0.19	-0.37
CH3OH	3.71	0.00	-0.05	-0.12	-0.18	-0.40	-0.05	-0.19	-0.18	-0.40
CH4	3.59	0.00	-0.04	-0.10	-0.12	-0.34	-0.04	-0.13	-0.12	-0.34
CO	5.84	0.00	-0.09	-0.09	-0.17	-0.17	-0.09	-0.26	-0.17	-0.17
CO2	5.92	0.00	-0.10	-0.10	-0.21	-0.21	-0.10	-0.35	-0.21	-0.21
F2	0.91	0.00	-0.05	-0.05	-0.20	-0.20	-0.05	-0.17	-0.20	-0.20
H2	2.26	0.00	-0.02	-0.08	-0.13	-0.33	-0.02	-0.08	-0.13	-0.33
H2CO3	4.61	0.00	-0.08	-0.12	-0.23	-0.39	-0.08	-0.31	-0.23	-0.39
H2O	3.39	0.00	-0.07	-0.16	-0.29	-0.61	-0.07	-0.23	-0.29	-0.61
H2O2	2.96	0.00	-0.07	-0.14	-0.29	-0.52	-0.07	-0.26	-0.29	-0.52
HCN	4.61	0.00	-0.08	-0.11	-0.21	-0.29	-0.08	-0.24	-0.21	-0.29
HF	3.14	0.00	-0.06	-0.13	-0.28	-0.57	-0.06	-0.19	-0.28	-0.57
HNC	4.36	0.00	-0.09	-0.12	-0.21	-0.32	-0.09	-0.26	-0.21	-0.32
HNO	3.01	0.00	-0.09	-0.12	-0.27	-0.38	-0.09	-0.30	-0.27	-0.38
HNO2	3.45	0.00	-0.10	-0.13	-0.30	-0.37	-0.10	-0.35	-0.30	-0.37
HNO3	3.53	0.00	-0.10	-0.13	-0.31	-0.40	-0.10	-0.38	-0.31	-0.40
N2	5.10	0.00	-0.13	-0.13	-0.33	-0.33	-0.13	-0.35	-0.33	-0.33
N2H2	3.12	0.00	-0.09	-0.14	-0.28	-0.46	-0.09	-0.29	-0.28	-0.46
N2H4	3.13	0.00	-0.07	-0.15	-0.26	-0.49	-0.07	-0.24	-0.26	-0.49
N4	3.20	0.00	-0.14	-0.14	-0.56	-0.56	-0.14	-0.54	-0.56	-0.56
NF3	2.33	0.00	-0.09	-0.09	-0.32	-0.32	-0.09	-0.32	-0.32	-0.32
NH3	3.18	0.00	-0.06	-0.14	-0.24	-0.52	-0.06	-0.21	-0.24	-0.52
NH4F	3.26	0.00	-0.06	-0.14	-0.24	-0.51	-0.06	-0.20	-0.24	-0.51
OF2	1.44	0.00	-0.07	-0.07	-0.29	-0.29	-0.07	-0.26	-0.29	-0.29
Al2O3	4.34	0.00	-0.11	-0.12	-0.43	-0.43	-0.16	-0.44	-0.43	-0.43
Al2S3	3.22	0.00	-0.09	-0.10	-0.33	-0.33	-0.12	-0.39	-0.33	-0.33
AlCl3	3.51	0.00	-0.08	-0.08	-0.26	-0.26	-0.10	-0.32	-0.26	-0.26
AlF3	4.88	0.00	-0.10	-0.10	-0.32	-0.32	-0.14	-0.39	-0.32	-0.32
AlH3	2.25	0.00	-0.03	-0.09	-0.10	-0.29	-0.04	-0.12	-0.10	-0.29
AlN	1.10	0.00	-0.07	-0.07	-0.27	-0.27	-0.09	-0.25	-0.27	-0.27
CS2	4.23	0.00	-0.08	-0.09	-0.30	-0.30	-0.12	-0.41	-0.30	-0.30
Cl2	1.31	0.00	-0.08	-0.08	-0.36	-0.36	-0.10	-0.34	-0.36	-0.36
ClF	1.42	0.00	-0.08	-0.08	-0.32	-0.32	-0.10	-0.29	-0.32	-0.32
ClF3	1.49	0.00	-0.11	-0.11	-0.55	-0.55	-0.15	-0.45	-0.55	-0.55
H2SO4	3.82	0.00	-0.11	-0.15	-0.62	-0.75	-0.20	-0.61	-0.62	-0.75

H3PO4	4.24	0.00	-0.10	-0.16	-0.49	-0.67	-0.15	-0.49	-0.49	-0.67
HCP	3.68	0.00	-0.08	-0.12	-0.24	-0.32	-0.10	-0.29	-0.24	-0.32
HCl	2.31	0.00	-0.04	-0.11	-0.20	-0.45	-0.05	-0.18	-0.20	-0.45
HSH	2.58	0.00	-0.05	-0.12	-0.21	-0.47	-0.06	-0.20	-0.21	-0.47
HSSH	2.58	0.00	-0.07	-0.13	-0.32	-0.51	-0.09	-0.30	-0.32	-0.51
P2	2.48	0.00	-0.13	-0.18	-0.41	-0.41	-0.16	-0.44	-0.41	-0.41
PF3	4.06	0.00	-0.11	-0.13	-0.50	-0.50	-0.16	-0.52	-0.50	-0.50
PF5	4.19	0.00	-0.11	-0.12	-0.51	-0.51	-0.17	-0.58	-0.51	-0.51
PH3	2.50	0.00	-0.04	-0.12	-0.19	-0.43	-0.06	-0.19	-0.19	-0.43
S2	2.27	0.00	-0.09	-0.10	-0.38	-0.38	-0.13	-0.40	-0.38	-0.38
S5	2.66	0.00	-0.14	-0.15	-0.65	-0.65	-0.19	-0.63	-0.65	-0.65
SF2	2.65	0.00	-0.11	-0.11	-0.46	-0.46	-0.15	-0.44	-0.46	-0.46
SF4	3.02	0.00	-0.12	-0.12	-0.56	-0.56	-0.18	-0.56	-0.56	-0.56
SF6	3.16	0.00	-0.10	-0.11	-0.53	-0.53	-0.18	-0.62	-0.53	-0.53
SiCl4	3.49	0.00	-0.09	-0.10	-0.37	-0.37	-0.13	-0.41	-0.37	-0.37
SiF4	5.18	0.00	-0.10	-0.11	-0.44	-0.44	-0.15	-0.52	-0.44	-0.44
SiH4	2.73	0.00	-0.03	-0.10	-0.14	-0.36	-0.05	-0.15	-0.14	-0.36
SiO2	4.59	0.00	-0.13	-0.13	-0.55	-0.55	-0.18	-0.53	-0.55	-0.55
SiS2	3.40	0.00	-0.10	-0.11	-0.43	-0.43	-0.15	-0.47	-0.43	-0.43
As4	2.70	0.02	-0.12	-0.12	-0.57	-0.57	-0.12	-0.53	-0.57	-0.57
As4S4	2.66	0.01	-0.13	-0.13	-0.61	-0.61	-0.15	-0.60	-0.61	-0.61
AsCl3	2.45	0.01	-0.09	-0.09	-0.42	-0.42	-0.10	-0.41	-0.42	-0.42
AsCl6-	2.71	0.02	-0.09	-0.10	-0.47	-0.47	-0.10	-0.42	-0.47	-0.47
AsH3	2.26	0.02	-0.03	-0.11	-0.17	-0.39	-0.03	-0.16	-0.17	-0.39
Br2	1.18	0.00	-0.08	-0.08	-0.27	-0.27	-0.08	-0.24	-0.27	-0.27
BrCl	1.25	0.00	-0.08	-0.08	-0.32	-0.32	-0.09	-0.29	-0.32	-0.32
BrO4-	2.89	0.02	-0.13	-0.13	-0.88	-0.88	-0.13	-0.69	-0.88	-0.88
GaCl	2.53	0.00	-0.06	-0.06	-0.23	-0.23	-0.06	-0.22	-0.23	-0.23
GaCl3	2.99	0.03	-0.03	-0.04	-0.19	-0.19	-0.04	-0.24	-0.19	-0.19
GaF	3.23	0.00	-0.07	-0.07	-0.23	-0.23	-0.07	-0.22	-0.23	-0.23
GaF2	3.30	0.04	-0.03	-0.03	-0.18	-0.18	-0.03	-0.22	-0.18	-0.18
GaH3	2.09	0.03	-0.01	-0.08	-0.09	-0.29	-0.01	-0.09	-0.09	-0.29
GaO	2.07	0.00	-0.09	-0.09	-0.31	-0.31	-0.09	-0.28	-0.31	-0.31
GeCl4	3.02	0.02	-0.05	-0.05	-0.29	-0.29	-0.06	-0.33	-0.29	-0.29
GeF3	3.78	0.03	-0.05	-0.05	-0.28	-0.28	-0.05	-0.32	-0.28	-0.28
GeF4	4.22	0.03	-0.06	-0.06	-0.28	-0.28	-0.06	-0.36	-0.28	-0.28
GeH4	2.49	0.03	-0.02	-0.09	-0.12	-0.34	-0.02	-0.12	-0.12	-0.34
GeO	3.77	0.01	-0.11	-0.11	-0.35	-0.35	-0.11	-0.33	-0.35	-0.35
GeO2	3.73	0.03	-0.10	-0.10	-0.45	-0.45	-0.10	-0.42	-0.45	-0.45
HBr	2.03	0.00	-0.04	-0.10	-0.16	-0.36	-0.04	-0.15	-0.16	-0.36
HCBBr3	2.79	0.00	-0.07	-0.09	-0.26	-0.31	-0.07	-0.26	-0.26	-0.31
Se8	2.45	0.00	-0.12	-0.12	-0.47	-0.47	-0.12	-0.43	-0.47	-0.47
SeH2	2.31	0.01	-0.04	-0.12	-0.17	-0.41	-0.04	-0.17	-0.17	-0.41
SeO	2.44	0.01	-0.08	-0.08	-0.37	-0.37	-0.08	-0.33	-0.37	-0.37
SeO2	3.30	0.01	-0.11	-0.11	-0.55	-0.55	-0.11	-0.48	-0.55	-0.55
I2	1.10	0.00	-0.12	-0.12	-0.33	-0.33	-0.21	-0.38	-0.39	-0.39
ICl	1.24	0.00	-0.10	-0.10	-0.35	-0.35	-0.13	-0.37	-0.39	-0.39
IH	1.72	0.00	-0.04	-0.10	-0.18	-0.35	-0.07	-0.19	-0.21	-0.38
IO4-	3.11	0.00	-0.21	-0.21	-1.02	-1.02	-0.28	-0.95	-1.15	-1.15
InCl	2.41	0.00	-0.07	-0.08	-0.28	-0.28	-0.01	-0.19	-0.23	-0.23
InCl3	2.67	0.00	-0.07	-0.07	-0.20	-0.20	0.19	-0.09	-0.11	-0.11
InH	1.29	0.00	-0.02	-0.08	-0.10	-0.22	0.00	-0.08	-0.10	-0.22
InH3	1.77	0.00	-0.01	-0.09	-0.06	-0.25	0.07	-0.04	-0.06	-0.24
InO	1.71	0.00	-0.11	-0.11	-0.41	-0.41	0.11	-0.14	-0.24	-0.24
SbCl6-	2.88	0.00	-0.14	-0.14	-0.43	-0.43	-0.08	-0.45	-0.47	-0.47
SbF	2.11	0.00	-0.11	-0.11	-0.35	-0.35	-0.05	-0.29	-0.37	-0.37
SbF3	3.60	0.00	-0.15	-0.15	-0.47	-0.47	-0.08	-0.46	-0.50	-0.50
SbH3	1.97	0.00	-0.04	-0.12	-0.17	-0.38	-0.02	-0.15	-0.20	-0.40
SbO2	2.47	0.00	-0.15	-0.15	-0.59	-0.59	-0.12	-0.52	-0.65	-0.65
SnF3	3.42	0.00	-0.11	-0.11	-0.29	-0.29	0.00	-0.32	-0.36	-0.36
SnH4	2.14	0.00	-0.02	-0.11	-0.11	-0.32	0.01	-0.11	-0.17	-0.37
SnO	3.17	0.00	-0.13	-0.13	-0.45	-0.45	-0.17	-0.44	-0.58	-0.58
SnO2	3.05	0.00	-0.14	-0.14	-0.57	-0.57	-0.14	-0.52	-0.73	-0.73
TeF3	2.75	0.00	-0.17	-0.17	-0.53	-0.53	-0.10	-0.44	-0.53	-0.53
TeH2	1.99	0.00	-0.05	-0.13	-0.20	-0.40	-0.03	-0.17	-0.21	-0.42
TeO	2.20	0.00	-0.11	-0.11	-0.47	-0.47	-0.09	-0.41	-0.53	-0.53
TeO2	3.06	0.00	-0.17	-0.17	-0.71	-0.71	-0.10	-0.56	-0.77	-0.77
XeF2	0.97	0.00	-0.15	-0.15	-0.35	-0.35	-0.14	-0.37	-0.45	-0.45
XeF4	1.18	0.00	-0.18	-0.18	-0.36	-0.36	-0.19	-0.50	-0.52	-0.52
XeOF4	1.20	0.00	-0.20	-0.20	-0.39	-0.39	-0.22	-0.68	-0.68	-0.68
BiCl6-	2.63	0.00	-0.12	-0.13	-0.43	-0.43	-0.01	-0.40	-0.44	-0.44
BiF	2.01	0.00	-0.12	-0.12	-0.39	-0.39	0.02	-0.22	-0.32	-0.32
BiF3	3.41	0.00	-0.15	-0.15	-0.51	-0.51	0.01	-0.33	-0.39	-0.39
BiH3	1.79	0.00	-0.04	-0.13	-0.18	-0.38	-0.02	-0.16	-0.17	-0.38
BiO2	1.98	0.00	-0.14	-0.14	-0.61	-0.61	-0.05	-0.43	-0.58	-0.58

PbF3	2.92	0.00	-0.12	-0.12	-0.31	-0.31	-0.02	-0.30	-0.32	-0.32
PbH4	1.82	0.00	-0.03	-0.12	-0.10	-0.32	0.06	-0.06	-0.08	-0.28
PbO	2.88	0.00	-0.14	-0.14	-0.49	-0.49	-0.05	-0.33	-0.49	-0.49
PbO2	2.58	0.00	-0.16	-0.16	-0.61	-0.61	-0.13	-0.55	-0.69	-0.69
TlCl	2.32	0.00	-0.08	-0.08	-0.31	-0.31	-0.10	-0.27	-0.31	-0.31
TlCl3	2.13	0.00	-0.09	-0.09	-0.16	-0.16	0.12	-0.12	-0.10	-0.10
TlH	1.21	0.00	-0.03	-0.09	-0.11	-0.23	-0.03	-0.10	-0.12	-0.23
TlH3	1.52	0.00	-0.04	-0.12	-0.05	-0.25	0.09	-0.01	-0.03	-0.21
TlO	1.51	0.00	-0.11	-0.11	-0.43	-0.43	-0.02	-0.24	-0.31	-0.31
CoCl3	2.31	0.00	-0.13	-0.12	-0.27	-0.25	-0.10	-0.30	-0.25	-0.25
CoF2	3.48	0.00	-0.18	-0.22	-0.51	-0.38	-0.14	-0.31	-0.38	-0.38
CoF3	3.23	-0.01	-0.18	-0.16	-0.31	-0.28	-0.13	-0.33	-0.28	-0.28
CrCO6	6.30	0.00	-0.12	-0.13	-0.29	-0.32	-0.15	-0.41	-0.32	-0.32
CrCl3	2.61	-0.02	-0.13	-0.13	-0.35	-0.31	-0.12	-0.28	-0.31	-0.31
CrF3	3.71	-0.03	-0.16	-0.16	-0.33	-0.29	-0.15	-0.32	-0.29	-0.29
CrO3	4.95	-0.04	-0.14	-0.12	-0.59	-0.67	-0.16	-0.44	-0.67	-0.67
Cu2	1.03	-0.06	-0.12	-0.19	-0.12	-0.19	-0.23	-0.28	-0.19	-0.19
Cu2O	2.34	-0.03	-0.18	-0.24	-0.37	-0.42	-0.24	-0.44	-0.42	-0.42
Cu2S	2.18	-0.04	-0.17	-0.22	-0.30	-0.36	-0.23	-0.41	-0.36	-0.36
CuCN	4.28	0.00	-0.11	-0.10	-0.22	-0.23	-0.07	-0.31	-0.23	-0.23
CuCl	2.03	0.00	-0.11	-0.12	-0.22	-0.23	-0.09	-0.23	-0.23	-0.23
CuF	2.32	-0.01	-0.13	-0.14	-0.27	-0.28	-0.11	-0.24	-0.28	-0.28
CuH	1.40	0.00	-0.07	-0.16	-0.19	-0.37	-0.07	-0.20	-0.22	-0.37
FeCO5	6.50	-0.01	-0.14	-0.15	-0.42	-0.47	-0.17	-0.47	-0.47	-0.47
FeF2	3.74	-0.01	-0.15	-0.17	-0.43	-0.42	-0.17	-0.33	-0.42	-0.42
FeF3	3.66	-0.01	-0.18	-0.16	-0.33	-0.28	-0.13	-0.32	-0.28	-0.28
FeO	1.40	-0.02	-0.13	-0.15	-0.45	-0.49	-0.15	-0.37	-0.49	-0.49
Ferrocen	5.00	-0.01	-0.09	-0.14	-0.20	-0.34	-0.10	-0.28	-0.22	-0.34
MnF2	3.64	-0.01	-0.15	-0.17	-0.44	-0.44	-0.18	-0.34	-0.44	-0.44
MnO	1.40	-0.02	-0.12	-0.14	-0.44	-0.48	-0.14	-0.37	-0.48	-0.48
MnO2	2.31	-0.03	-0.16	-0.13	-0.59	-0.69	-0.15	-0.46	-0.69	-0.69
MnO3F	0.95	-0.03	-0.18	-0.21	-0.54	-0.64	-0.23	-0.55	-0.64	-0.64
MnO4-	5.51	-0.04	-0.21	-0.23	-1.04	-1.13	-0.31	-0.61	-1.13	-1.13
MnS	1.27	-0.01	-0.13	-0.17	-0.54	-0.55	-0.18	-0.39	-0.55	-0.55
NiCO4	6.72	-0.02	-0.14	-0.16	-0.46	-0.50	-0.19	-0.47	-0.50	-0.50
NiCl2	2.66	-0.03	-0.13	-0.14	-0.37	-0.35	-0.14	-0.32	-0.35	-0.35
NiF2	3.40	0.00	-0.15	-0.16	-0.39	-0.36	-0.14	-0.30	-0.36	-0.36
NiF3	2.77	0.00	-0.17	-0.15	-0.24	-0.20	-0.11	-0.29	-0.20	-0.20
NiO	0.89	-0.01	-0.14	-0.15	-0.48	-0.48	-0.15	-0.33	-0.48	-0.48
NiS	1.23	-0.01	-0.18	-0.24	-0.72	-0.72	-0.29	-0.47	-0.72	-0.72
ScCl3	3.89	-0.01	-0.04	-0.08	-0.25	-0.39	-0.19	-0.36	-0.39	-0.39
ScF3	5.16	-0.01	-0.05	-0.09	-0.22	-0.32	-0.21	-0.36	-0.32	-0.32
ScH3	2.01	0.00	0.00	-0.10	-0.15	-0.41	-0.03	-0.11	-0.16	-0.41
ScO	3.85	-0.01	-0.05	-0.09	-0.27	-0.39	-0.14	-0.35	-0.39	-0.39
TiCO4	5.69	0.00	-0.11	-0.11	-0.31	-0.39	-0.14	-0.39	-0.39	-0.39
TiCl4	3.82	0.01	-0.09	-0.09	-0.34	-0.45	-0.19	-0.35	-0.45	-0.45
TiF3	4.91	-0.01	-0.11	-0.10	-0.30	-0.38	-0.20	-0.37	-0.38	-0.38
TiF4	5.17	0.00	-0.09	-0.08	-0.26	-0.36	-0.21	-0.36	-0.36	-0.36
TiH4	2.00	0.00	-0.05	-0.11	-0.21	-0.50	-0.03	-0.11	-0.21	-0.50
TiO	3.78	-0.01	-0.07	-0.08	-0.35	-0.49	-0.15	-0.37	-0.49	-0.49
TiO2	5.03	-0.01	-0.11	-0.11	-0.40	-0.56	-0.21	-0.46	-0.56	-0.56
TiS2	3.57	0.00	-0.12	-0.12	-0.52	-0.65	-0.23	-0.43	-0.65	-0.65
VH5	1.93	-0.01	-0.08	-0.17	-0.30	-0.61	-0.06	-0.18	-0.31	-0.61
VO	2.92	-0.01	-0.07	-0.05	-0.44	-0.57	-0.12	-0.33	-0.57	-0.57
VOF3	5.20	-0.02	-0.13	-0.12	-0.34	-0.41	-0.20	-0.37	-0.41	-0.41
ZnCl2	2.43	-0.04	-0.14	-0.11	-0.25	-0.23	-0.09	-0.26	-0.23	-0.23
ZnF2	3.03	-0.02	-0.14	-0.11	-0.26	-0.24	-0.08	-0.22	-0.24	-0.24
ZnH2	1.52	-0.01	-0.05	-0.13	-0.10	-0.31	0.00	-0.12	-0.10	-0.31
ZnMe2	3.44	-0.01	-0.06	-0.12	-0.13	-0.32	-0.04	-0.17	-0.13	-0.32
Ag2	0.91	-0.03	-0.07	-0.13	-0.09	-0.23	-0.14	-0.25	-0.23	-0.23
AgCl	1.65	0.00	-0.07	-0.02	-0.18	-0.16	0.01	-0.13	-0.16	-0.16
CdF2	2.44	0.00	-0.11	-0.03	-0.21	-0.10	0.04	-0.03	-0.10	-0.10
CdMe2	3.31	0.00	-0.04	-0.08	-0.12	-0.30	0.00	-0.13	-0.11	-0.30
MoCO6	6.32	0.00	-0.10	-0.11	-0.25	-0.32	-0.10	-0.41	-0.32	-0.32
MoF3	4.03	0.00	-0.10	-0.11	-0.29	-0.27	-0.13	-0.33	-0.27	-0.27
MoH	1.11	0.00	-0.02	-0.09	-0.11	-0.28	0.03	-0.08	-0.10	-0.28
MoO2	4.36	0.01	-0.11	-0.14	-0.47	-1.09	-0.20	-1.06	-1.09	-1.09
MoO3	5.20	0.01	-0.11	-0.09	-0.40	-0.47	-0.07	-0.41	-0.47	-0.47
NbF3	4.74	0.01	-0.08	-0.10	-0.24	-0.26	-0.16	-0.34	-0.26	-0.26
NbO	4.18	0.00	-0.07	-0.06	-0.23	-0.30	-0.02	-0.28	-0.30	-0.30
NbO2	5.20	0.00	-0.12	-0.19	-0.46	-0.92	-0.34	-0.96	-0.92	-0.92
NbO2F	5.62	0.01	-0.10	-0.09	-0.30	-0.36	-0.08	-0.36	-0.36	-0.36
PdCO4	5.86	0.00	-0.07	-0.02	-0.19	-0.28	0.00	-0.36	-0.28	-0.28
PdF	1.54	0.01	-0.02	0.12	-0.05	-0.06	0.18	0.00	-0.06	-0.06
PdO2	0.69	0.02	-0.04	0.10	-0.25	-0.09	0.19	-0.11	-0.09	-0.09



RhF	1.99	-0.01	-0.10	-0.11	-0.19	-0.27	-0.08	-0.22	-0.27	-0.27
RhF4	2.58	0.00	-0.13	-0.06	-0.24	-0.20	-0.01	-0.21	-0.20	-0.20
RhF6	2.62	0.00	-0.11	-0.09	-0.25	-0.27	-0.10	-0.36	-0.27	-0.27
RhO	2.34	-0.01	-0.10	-0.19	-0.54	-0.70	-0.21	-0.59	-0.70	-0.70
RuCO5	6.37	0.00	-0.10	-0.08	-0.25	-0.33	-0.06	-0.42	-0.33	-0.33
RuF	2.03	-0.02	-0.12	-0.20	-0.39	-0.41	-0.18	-0.36	-0.41	-0.41
RuO	1.85	0.01	-0.05	0.03	-0.24	-0.32	0.08	-0.26	-0.32	-0.32
RuO2	4.16	0.00	-0.11	-0.11	-0.46	-0.54	-0.10	-0.48	-0.54	-0.54
RuO4	5.18	0.01	-0.10	-0.03	-0.40	-0.49	0.00	-0.40	-0.49	-0.49
Tc2O7	5.56	0.01	-0.11	-0.11	-0.45	-0.54	-0.09	-0.46	-0.54	-0.54
TcO	2.19	0.01	-0.09	-0.12	-0.40	-0.51	-0.10	-0.44	-0.51	-0.51
TcO3F	5.22	0.01	-0.11	-0.11	-0.43	-0.52	-0.11	-0.46	-0.52	-0.52
YF	3.73	0.00	-0.05	-0.03	-0.11	-0.11	-0.09	-0.15	-0.11	-0.11
YF3	5.28	-0.02	-0.12	-0.14	-0.17	-0.31	-0.18	-0.39	-0.31	-0.31
YO	4.00	0.00	-0.10	-0.13	-0.23	-0.36	-0.06	-0.38	-0.36	-0.36
ZrF	3.29	-0.01	-0.07	-0.12	-0.18	-0.32	-0.14	-0.39	-0.32	-0.32
ZrF3	5.30	0.00	-0.09	-0.12	-0.19	-0.29	-0.17	-0.38	-0.29	-0.29
ZrO	4.26	-0.01	-0.09	-0.11	-0.24	-0.40	-0.06	-0.39	-0.40	-0.40
ZrO2	5.33	-0.01	-0.12	-0.15	-0.35	-0.53	-0.12	-0.51	-0.53	-0.53
Au2	1.26	-0.05	-0.10	-0.17	-0.20	-0.41	-0.26	-0.43	-0.41	-0.41
Au3-	2.61	-0.08	-0.17	-0.30	-0.33	-0.77	-0.49	-0.80	-0.77	-0.77
AuCl	1.49	-0.01	-0.08	-0.09	-0.30	-0.24	-0.07	-0.23	-0.24	-0.24
AuCl3	2.85	0.00	-0.03	0.01	-0.15	-0.14	-0.04	-0.15	-0.14	-0.14
HfF	3.54	0.00	-0.05	-0.03	-0.13	-0.15	-0.08	-0.18	-0.15	-0.15
HfF3	5.37	0.00	-0.07	-0.09	-0.18	-0.28	-0.16	-0.37	-0.28	-0.28
HfO	4.68	0.01	-0.07	-0.03	-0.24	-0.27	-0.03	-0.19	-0.27	-0.27
HfO2	5.09	-0.01	-0.11	-0.13	-0.32	-0.48	-0.11	-0.47	-0.48	-0.48
Hg2Cl2	1.23	-0.04	-0.11	-0.11	-0.34	-0.15	-0.13	-0.18	-0.15	-0.15
HgF2	1.86	-0.01	-0.12	-0.10	-0.37	-0.12	-0.05	-0.07	-0.12	-0.12
HgMe2	3.27	0.00	-0.05	-0.10	-0.17	-0.33	-0.03	-0.15	-0.14	-0.33
IrF6	3.19	0.00	-0.08	-0.09	-0.34	-0.38	-0.20	-0.45	-0.38	-0.38
OsCO5	6.44	0.00	-0.08	-0.09	-0.30	-0.41	-0.14	-0.50	-0.41	-0.41
OsO2	4.28	0.00	-0.09	-0.09	-0.48	-0.64	-0.15	-0.57	-0.64	-0.64
OsO3	5.18	0.01	-0.11	-0.08	-0.49	-0.63	-0.16	-0.54	-0.63	-0.63
OsO4	5.43	0.01	-0.10	-0.07	-0.50	-0.65	-0.17	-0.56	-0.65	-0.65
OsOF5	3.39	0.01	-0.08	-0.09	-0.38	-0.54	-0.25	-0.58	-0.54	-0.54
PtCO4	6.14	0.00	-0.10	-0.09	-0.30	-0.38	-0.11	-0.46	-0.38	-0.38
PtO	2.14	-0.01	-0.10	-0.16	-0.41	-0.67	-0.20	-0.62	-0.67	-0.67
PtO2	3.91	0.01	-0.11	-0.03	-0.40	-0.51	-0.07	-0.41	-0.51	-0.51
ReH	0.78	0.00	-0.01	-0.08	-0.10	-0.31	0.02	-0.08	-0.09	-0.31
ReO	2.55	0.01	-0.10	-0.12	-0.55	-0.74	-0.31	-0.69	-0.74	-0.74
ReO2	3.85	0.02	-0.09	-0.06	-0.40	-0.57	-0.14	-0.55	-0.57	-0.57
ReO3	4.57	0.01	-0.10	-0.11	-0.43	-0.72	-0.18	-0.67	-0.72	-0.72
ReO3F	5.42	0.01	-0.10	-0.09	-0.45	-0.60	-0.19	-0.55	-0.60	-0.60
TaF	2.64	0.01	-0.02	0.03	-0.06	0.01	0.05	-0.03	0.01	0.01
TaF3	5.08	0.01	-0.08	-0.10	-0.25	-0.37	-0.21	-0.44	-0.37	-0.37
TaO2F	5.63	0.01	-0.09	-0.10	-0.34	-0.48	-0.16	-0.47	-0.48	-0.48
WCO6	6.45	0.00	-0.09	-0.10	-0.27	-0.38	-0.14	-0.46	-0.38	-0.38
WF3	4.38	0.01	-0.09	-0.12	-0.32	-0.34	-0.19	-0.39	-0.34	-0.34
WH	1.33	0.01	-0.03	-0.09	-0.14	-0.32	-0.02	-0.11	-0.13	-0.32
WO	1.90	-0.03	-0.14	-0.36	-0.41	-0.86	-0.44	-0.81	-0.86	-0.86
WO2	5.10	0.01	-0.12	-0.10	-0.45	-0.57	-0.20	-0.46	-0.57	-0.57
WO3	5.36	0.01	-0.12	-0.10	-0.50	-0.63	-0.22	-0.55	-0.63	-0.63

!

!

!

=====

! atomization energies per atom /eV: HF

=====

!

!

! compound QZVPP

!

!

BaF 2.21 -0.03 -0.07 -0.07 -0.18 -0.18 -0.22 -0.24 -0.18 -0.18

BaF2 2.82 -0.03 -0.08 -0.08 -0.19 -0.19 -0.22 -0.25 -0.19 -0.19

BaH2 1.09 -0.01 -0.04 -0.07 -0.13 -0.15 -0.09 -0.12 -0.13 -0.15

BaO 0.93 -0.04 -0.13 -0.13 -0.44 -0.44 -0.39 -0.47 -0.44 -0.44

BaS 1.17 -0.02 -0.07 -0.07 -0.18 -0.18 -0.17 -0.21 -0.18 -0.18

Be2F4 3.70 0.00 -0.11 -0.11 -0.09 -0.09 -0.17 -0.25 -0.09 -0.09

Be2H4 1.99 0.00 -0.03 -0.03 -0.02 -0.09 -0.04 -0.07 -0.02 -0.09

Be4 0.45 0.00 -0.03 -0.03 0.01 0.01 -0.09 -0.09 0.01 0.01

BeC2H6 2.87 0.00 -0.01 -0.02 0.02 0.02 -0.03 -0.01 -0.02 -0.03

BeF2O2H4 2.80 0.00 -0.03 -0.05 -0.02 -0.15 -0.06 -0.10 -0.02 -0.15

BeH2 1.81 0.00 -0.02 -0.02 0.01 -0.05 -0.02 -0.03 0.01 -0.05

BeS	0.81	0.00	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.08	-0.13	-0.04	-0.04
CaCl2	2.53	0.00	-0.05	-0.05	0.00	0.00	-0.05	-0.08	0.00	0.00
CaF2	2.76	0.00	-0.07	-0.07	-0.06	-0.06	-0.07	-0.09	-0.06	-0.06
CaH2	1.12	0.00	-0.02	-0.03	-0.04	-0.06	-0.02	-0.04	-0.04	-0.06
CsF	1.56	-0.02	-0.04	-0.06	-0.18	-0.18	-0.13	-0.28	-0.63	-0.63
CsH	0.44	-0.01	-0.02	-0.04	-0.08	-0.08	-0.09	-0.21	-0.24	-0.25
CsO	0.47	-0.02	-0.05	-0.06	-0.18	-0.18	-0.16	-0.25	-0.56	-0.56
K2S	0.81	0.00	-0.03	-0.03	-0.06	-0.06	-0.14	-0.23	-0.31	-0.31
K3P	0.07	0.00	-0.02	-0.03	-0.04	-0.04	-0.09	-0.18	-0.19	-0.19
KBr	1.51	0.00	-0.01	-0.01	-0.04	-0.04	-0.06	-0.11	-0.16	-0.16
KCl	1.62	0.00	-0.03	-0.03	-0.08	-0.08	-0.10	-0.15	-0.28	-0.28
KF	1.52	0.00	-0.05	-0.05	-0.15	-0.15	-0.14	-0.22	-0.48	-0.48
KH	0.43	0.00	-0.02	-0.02	-0.04	-0.05	-0.06	-0.13	-0.13	-0.14
KI	1.32	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.08	-0.10	-0.10	-0.10
Li2	0.09	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01
Li2O	1.19	0.00	-0.03	-0.04	0.01	0.01	-0.04	-0.13	-0.11	-0.11
Li4C4H12	2.51	0.00	-0.01	-0.02	0.03	-0.01	-0.01	-0.02	0.02	-0.02
Li4Cl4	2.54	0.00	-0.02	-0.03	0.13	0.13	-0.03	-0.05	0.10	0.10
Li4H4	1.48	0.00	-0.02	-0.04	0.00	-0.02	-0.02	-0.05	-0.02	-0.04
Li8	0.24	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.02	-0.03	-0.03	-0.03
LiBH4	2.29	0.00	-0.01	-0.02	0.02	-0.01	-0.01	-0.02	0.01	-0.02
LiCl	1.81	0.00	-0.02	-0.03	-0.02	-0.02	-0.03	-0.08	-0.07	-0.07
LiF	1.95	0.00	-0.03	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.13	-0.12	-0.12
LiH	0.74	0.00	-0.01	-0.02	0.00	-0.02	-0.01	-0.03	-0.02	-0.03
LiSLi	1.34	0.00	-0.02	-0.03	-0.02	-0.02	-0.03	-0.08	-0.13	-0.13
Mg4	-0.07	0.00	-0.01	-0.01	0.00	0.00	-0.06	-0.14	-0.16	-0.16
MgCl2	2.19	0.00	-0.02	-0.02	0.02	0.02	-0.13	-0.23	-0.25	-0.25
MgF	1.73	0.00	-0.05	-0.05	-0.02	-0.02	-0.15	-0.32	-0.40	-0.40
MgF2	2.55	0.00	-0.05	-0.05	0.00	0.00	-0.19	-0.27	-0.30	-0.30
MgH2	1.14	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.04	-0.02	-0.07	-0.06	-0.11
Na2O	0.28	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.10	-0.11	-0.16	-0.16
Na2S	0.85	-0.01	0.00	0.00	0.01	0.01	-0.05	-0.06	-0.06	-0.06
Na3N	-0.45	-0.01	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.04	-0.07	-0.06	-0.06
Na3P	0.22	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.07	-0.04	-0.04
NaCl	1.52	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.05	-0.07	-0.10	-0.10
NaF	1.45	-0.01	-0.01	-0.01	-0.06	-0.06	-0.08	-0.09	-0.22	-0.22
NaH	0.46	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.03	-0.01	-0.04	-0.03	-0.05
PLi3	0.66	0.00	-0.02	-0.03	-0.02	-0.02	-0.03	-0.09	-0.08	-0.08
RbF	1.47	-0.01	-0.04	-0.04	-0.16	-0.16	-0.13	-0.20	-0.50	-0.50
RbH	0.39	0.00	-0.01	-0.02	-0.04	-0.04	-0.06	-0.13	-0.15	-0.16
RbO	0.39	-0.01	-0.04	-0.04	-0.17	-0.17	-0.14	-0.20	-0.47	-0.47
SrF	2.07	-0.03	-0.06	-0.09	-0.09	-0.09	-0.15	-0.17	-0.09	-0.09
SrF2	2.70	-0.03	-0.07	-0.10	-0.09	-0.09	-0.15	-0.17	-0.09	-0.09
SrH2	1.01	-0.01	-0.02	-0.05	-0.06	-0.08	-0.04	-0.05	-0.06	-0.08
SrO	0.31	-0.03	-0.08	-0.13	-0.24	-0.24	-0.23	-0.27	-0.24	-0.24
SrS	0.76	-0.01	-0.03	-0.05	-0.05	-0.05	-0.09	-0.10	-0.05	-0.05
B2H6	2.63	0.00	0.00	-0.01	0.03	-0.01	0.00	-0.01	0.03	-0.01
B3N3H6	3.28	0.00	-0.01	-0.01	0.06	0.00	-0.01	-0.04	0.06	0.00
B4H4	2.83	0.00	0.00	0.00	0.07	0.04	0.00	-0.01	0.07	0.04
BF3	3.92	0.00	-0.01	-0.01	0.04	0.04	-0.01	-0.07	0.04	0.04
BH3	2.51	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.02	0.00	0.00	0.02	-0.02
BH3CO	2.96	0.00	0.00	-0.01	0.03	0.01	0.00	-0.04	0.03	0.01
BH3NH3	2.45	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.06	0.00	-0.02	0.02	-0.06
C2H2	3.16	0.00	0.00	-0.01	0.04	0.00	0.00	-0.02	0.04	0.00
C2H3N	2.46	0.00	-0.01	-0.01	0.03	-0.03	-0.01	-0.05	0.03	-0.03
C2H4	3.09	0.00	0.00	-0.01	0.04	-0.02	0.00	-0.01	0.04	-0.02
C2H6	2.98	0.00	0.00	-0.01	0.04	-0.02	0.00	-0.01	0.04	-0.02
C4H4	3.01	0.00	0.00	-0.01	0.09	0.05	0.00	-0.03	0.09	0.05
C6H6	3.69	0.00	0.00	-0.01	0.08	0.04	0.00	-0.02	0.08	0.04
CF4	2.70	0.00	-0.01	-0.01	0.06	0.06	-0.01	-0.10	0.06	0.06
CH2O	2.77	0.00	-0.01	-0.01	0.03	-0.01	-0.01	-0.04	0.03	-0.01
CH2O2	1.97	0.00	0.00	-0.01	0.01	-0.03	0.00	-0.06	0.01	-0.03
CH3N	2.59	0.00	-0.01	-0.01	0.01	-0.05	-0.01	-0.04	0.01	-0.05
CH3OH	2.66	0.00	0.00	-0.02	0.02	-0.07	0.00	-0.03	0.02	-0.07
CH4	2.84	0.00	0.00	-0.01	0.02	-0.04	0.00	-0.01	0.02	-0.04
CO	3.75	0.00	-0.01	-0.01	0.04	0.04	-0.01	-0.08	0.04	0.04
CO2	3.53	0.00	-0.01	-0.01	0.05	0.05	-0.01	-0.12	0.05	0.05
F2	-0.81	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	0.00	-0.02	-0.02	-0.02
H2	1.81	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.10	0.00	-0.01	-0.04	-0.10
H2CO3	2.86	0.00	-0.01	-0.02	0.05	-0.06	-0.01	-0.08	0.05	-0.06
H2O	2.23	0.00	-0.01	-0.04	-0.05	-0.25	-0.01	-0.05	-0.05	-0.25
H2O2	1.44	0.00	0.00	-0.02	-0.02	-0.16	0.00	-0.04	-0.02	-0.16
HCN	2.85	0.00	-0.01	-0.01	0.02	-0.01	-0.01	-0.05	0.02	-0.01
HF	2.09	0.00	-0.01	-0.03	-0.07	-0.28	-0.01	-0.04	-0.07	-0.28
HNC	2.71	0.00	-0.01	-0.01	0.03	-0.04	-0.01	-0.05	0.03	-0.04

HNO	1.12	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	-0.06	-0.01	-0.09	-0.01	-0.06
HNO2	1.19	0.00	-0.01	-0.02	-0.02	-0.06	-0.01	-0.12	-0.02	-0.06
HNO3	1.18	0.00	-0.01	-0.02	-0.02	-0.08	-0.01	-0.13	-0.02	-0.08
N2	2.45	0.00	-0.01	-0.01	-0.05	-0.05	-0.01	-0.13	-0.05	-0.05
N2H2	1.55	0.00	-0.01	-0.02	-0.03	-0.11	-0.01	-0.09	-0.03	-0.11
N2H4	1.92	0.00	-0.01	-0.02	-0.02	-0.12	-0.01	-0.05	-0.02	-0.12
N4	-0.02	0.00	-0.02	-0.02	-0.15	-0.15	-0.02	-0.17	-0.15	-0.15
NF3	0.36	0.00	-0.01	-0.01	-0.06	-0.06	-0.01	-0.10	-0.06	-0.06
NH3	2.16	0.00	-0.01	-0.03	-0.03	-0.16	-0.01	-0.04	-0.03	-0.16
NH4F	2.21	0.00	-0.01	-0.02	-0.03	-0.17	-0.01	-0.03	-0.03	-0.17
OF2	-0.63	0.00	0.00	0.00	-0.06	-0.06	0.00	-0.05	-0.06	-0.06
Al2O3	2.19	0.00	-0.02	-0.02	-0.10	-0.10	-0.07	-0.17	-0.10	-0.10
Al2S3	1.97	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.02	-0.03	-0.09	-0.02	-0.02
AlCl3	2.64	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.03	-0.09	-0.01	-0.01
AlF3	3.47	0.00	-0.03	-0.03	-0.09	-0.09	-0.07	-0.20	-0.09	-0.09
AlH3	1.83	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.03	-0.02	-0.02	0.00	-0.03
AlN	0.30	0.00	-0.02	-0.02	-0.10	-0.10	-0.03	-0.11	-0.10	-0.10
CS2	2.36	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.03	-0.04	-0.15	-0.03	-0.03
Cl2	0.38	0.00	-0.01	-0.01	-0.11	-0.11	-0.04	-0.12	-0.11	-0.11
ClF	0.13	0.00	-0.02	-0.02	-0.11	-0.11	-0.04	-0.12	-0.11	-0.11
ClF3	-0.36	0.00	-0.03	-0.03	-0.27	-0.27	-0.07	-0.25	-0.27	-0.27
H2SO4	1.90	0.00	-0.02	-0.03	-0.30	-0.38	-0.09	-0.35	-0.30	-0.38
H3PO4	2.58	0.00	-0.01	-0.03	-0.18	-0.30	-0.06	-0.24	-0.18	-0.30
HCP	2.22	0.00	-0.01	-0.01	-0.03	-0.06	-0.03	-0.10	-0.03	-0.06
HCl	1.66	0.00	0.00	-0.02	-0.04	-0.17	-0.02	-0.04	-0.04	-0.17
HSH	1.86	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.15	-0.02	-0.05	-0.04	-0.15
HSSH	1.67	0.00	0.00	-0.01	-0.08	-0.16	-0.03	-0.09	-0.08	-0.16
P2	0.81	0.00	-0.01	-0.01	-0.14	-0.14	-0.05	-0.20	-0.14	-0.14
PF3	2.49	0.00	-0.03	-0.03	-0.25	-0.25	-0.07	-0.31	-0.25	-0.25
PF5	2.56	0.00	-0.02	-0.03	-0.25	-0.25	-0.08	-0.35	-0.25	-0.25
PH3	1.86	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.11	-0.02	-0.06	-0.04	-0.11
S2	1.08	0.00	-0.02	-0.02	-0.18	-0.18	-0.06	-0.22	-0.18	-0.18
S5	0.92	0.00	-0.01	-0.01	-0.20	-0.20	-0.06	-0.21	-0.20	-0.20
SF2	1.09	0.00	-0.03	-0.03	-0.21	-0.21	-0.06	-0.23	-0.21	-0.21
SF4	1.24	0.00	-0.03	-0.03	-0.29	-0.29	-0.08	-0.33	-0.29	-0.29
SF6	1.38	0.00	-0.02	-0.02	-0.27	-0.27	-0.09	-0.38	-0.27	-0.27
SiCl4	2.46	0.00	-0.01	-0.01	-0.08	-0.08	-0.04	-0.15	-0.08	-0.08
SiF4	3.68	0.00	-0.03	-0.03	-0.22	-0.22	-0.08	-0.31	-0.22	-0.22
SiH4	2.22	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.07	-0.02	-0.05	-0.03	-0.07
SiO2	2.19	0.00	-0.02	-0.02	-0.23	-0.23	-0.08	-0.27	-0.23	-0.23
SiS2	1.96	0.00	0.00	0.00	-0.11	-0.11	-0.04	-0.17	-0.11	-0.11
As4	0.74	0.00	0.01	0.01	-0.08	-0.08	0.01	-0.09	-0.08	-0.08
As4S4	0.70	0.00	0.00	0.00	-0.08	-0.08	-0.01	-0.13	-0.08	-0.08
AsCl3	1.34	0.00	-0.01	-0.01	-0.11	-0.11	-0.02	-0.13	-0.11	-0.11
AsCl6-	1.41	0.00	-0.01	-0.01	-0.08	-0.08	-0.02	-0.09	-0.08	-0.08
AsH3	1.61	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.07	0.00	-0.02	-0.01	-0.07
Br2	0.33	0.00	-0.01	-0.01	-0.06	-0.06	-0.01	-0.05	-0.06	-0.06
BrCl	0.36	0.00	-0.02	-0.02	-0.08	-0.08	-0.02	-0.08	-0.08	-0.08
BrO4-	0.23	0.00	-0.04	-0.04	-0.40	-0.40	-0.04	-0.34	-0.40	-0.40
GaCl	1.81	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.02	-0.01	-0.01
GaCl3	2.15	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.05	0.01	0.01
GaF	2.12	0.00	-0.01	-0.01	-0.03	-0.03	-0.01	-0.07	-0.03	-0.03
GaF2	2.13	0.00	-0.02	-0.02	-0.04	-0.04	-0.02	-0.11	-0.04	-0.04
GaH3	1.64	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.03	0.00	-0.01	0.00	-0.03
GaO	0.84	0.00	-0.01	-0.01	-0.07	-0.07	-0.01	-0.09	-0.07	-0.07
GeCl4	2.03	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.04	-0.01	-0.10	-0.04	-0.04
GeF3	2.38	0.00	-0.02	-0.02	-0.11	-0.11	-0.02	-0.17	-0.11	-0.11
GeF4	2.72	0.00	-0.02	-0.02	-0.12	-0.12	-0.02	-0.20	-0.12	-0.12
GeH4	1.95	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.05	0.00	-0.01	0.00	-0.05
GeO	1.56	0.00	-0.02	-0.02	-0.11	-0.11	-0.02	-0.12	-0.11	-0.11
GeO2	1.19	0.00	-0.01	-0.01	-0.16	-0.16	-0.01	-0.18	-0.16	-0.16
HBr	1.41	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.11	0.00	-0.01	0.00	-0.11
HBr3	1.62	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.02	0.00	-0.03	-0.01	-0.02
Se8	0.86	0.00	-0.01	-0.01	-0.08	-0.08	-0.01	-0.07	-0.08	-0.08
SeH2	1.60	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.09	0.00	-0.01	0.00	-0.09
SeO	0.62	0.00	-0.02	-0.02	-0.18	-0.18	-0.02	-0.16	-0.18	-0.18
SeO2	0.59	0.00	-0.03	-0.03	-0.26	-0.26	-0.03	-0.26	-0.26	-0.26
I2	0.30	0.00	-0.02	-0.02	-0.08	-0.08	-0.04	-0.08	-0.08	-0.08
ICl	0.39	0.00	-0.02	-0.02	-0.09	-0.09	-0.05	-0.12	-0.11	-0.11
IH	1.14	0.00	0.00	-0.01	-0.02	-0.09	-0.01	-0.02	-0.03	-0.11
IO4-	0.33	0.00	-0.08	-0.08	-0.52	-0.52	-0.18	-0.56	-0.62	-0.62
InCl	1.71	0.00	-0.01	-0.01	-0.04	-0.04	0.08	0.04	0.02	0.02
InCl3	1.90	0.00	-0.01	-0.01	-0.04	-0.04	0.18	0.07	0.08	0.08
InH	0.92	0.00	0.00	0.00	-0.02	-0.03	0.02	0.01	-0.01	-0.03
InH3	1.39	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.06	0.05	0.02	0.00	-0.03

InO	0.57	0.00	-0.02	-0.02	-0.15	-0.15	0.26	0.14	0.07	0.07
SbCl6-	1.69	0.00	-0.03	-0.03	-0.08	-0.08	-0.01	-0.12	-0.07	-0.07
SbF	1.10	0.00	-0.04	-0.04	-0.19	-0.19	-0.02	-0.16	-0.19	-0.19
SbF3	2.01	0.00	-0.06	-0.06	-0.24	-0.24	-0.04	-0.28	-0.25	-0.25
SbH3	1.38	0.00	-0.01	-0.01	-0.04	-0.09	0.02	0.00	-0.03	-0.08
SbO2	0.24	0.00	-0.04	-0.04	-0.34	-0.34	-0.03	-0.27	-0.36	-0.36
SnF3	2.03	0.00	-0.04	-0.04	-0.16	-0.16	-0.05	-0.25	-0.22	-0.22
SnH4	1.66	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.07	0.02	0.00	-0.06	-0.10
SnO	0.83	0.00	-0.03	-0.03	-0.23	-0.23	-0.08	-0.22	-0.33	-0.33
SnO2	0.42	0.00	-0.03	-0.03	-0.29	-0.29	-0.11	-0.32	-0.43	-0.43
TeF3	1.05	0.00	-0.07	-0.07	-0.25	-0.25	-0.06	-0.28	-0.27	-0.27
TeH2	1.34	0.00	0.00	-0.01	-0.03	-0.10	0.03	0.01	-0.01	-0.09
TeO	0.29	0.00	-0.04	-0.04	-0.29	-0.29	0.00	-0.19	-0.31	-0.31
TeO2	0.21	0.00	-0.05	-0.05	-0.42	-0.42	-0.06	-0.37	-0.47	-0.47
XeF2	-0.49	0.00	-0.07	-0.07	-0.07	-0.07	-0.11	-0.24	-0.21	-0.21
XeF4	-0.71	0.00	-0.10	-0.10	-0.07	-0.07	-0.15	-0.35	-0.27	-0.27
XeOF4	-0.94	0.00	-0.11	-0.11	-0.10	-0.10	-0.16	-0.48	-0.40	-0.40
BiCl6-	1.38	0.00	-0.02	-0.02	-0.07	-0.07	0.05	-0.08	-0.04	-0.04
BiF	0.93	0.00	-0.04	-0.04	-0.19	-0.19	0.04	-0.08	-0.10	-0.10
BiF3	1.74	0.00	-0.05	-0.05	-0.24	-0.24	0.05	-0.12	-0.09	-0.09
BiH3	1.16	0.00	0.00	-0.01	-0.05	-0.09	0.02	-0.01	0.00	-0.06
BiO2	-0.14	0.00	-0.04	-0.04	-0.32	-0.32	0.02	-0.18	-0.25	-0.25
PbF3	1.43	0.00	-0.04	-0.04	-0.15	-0.15	-0.08	-0.21	-0.14	-0.14
PbH4	1.32	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.09	0.06	0.04	0.04	0.00
PbO	0.45	0.00	-0.04	-0.04	-0.26	-0.26	-0.05	-0.18	-0.26	-0.26
PbO2	-0.04	0.00	-0.03	-0.03	-0.31	-0.31	-0.18	-0.39	-0.42	-0.42
TlCl	1.59	0.00	-0.01	-0.01	-0.05	-0.05	0.00	-0.02	-0.04	-0.04
TlCl3	1.34	0.00	-0.01	-0.01	-0.04	-0.04	0.08	0.01	0.06	0.06
TlH	0.82	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.04	0.00	-0.01	-0.02	-0.03
TlH3	1.12	0.00	0.00	-0.01	-0.04	-0.08	0.06	0.05	0.03	0.00
TlO	0.33	0.00	-0.02	-0.02	-0.16	-0.16	0.15	0.06	0.03	0.03
CoCl3	1.49	0.00	-0.03	-0.08	-0.20	-0.19	-0.09	-0.13	-0.19	-0.19
CoF2	2.11	-0.01	-0.17	-0.21	-0.31	-0.14	-0.08	-0.12	-0.14	-0.14
CoF3	2.01	-0.01	-0.07	-0.13	-0.26	-0.25	-0.14	-0.20	-0.25	-0.25
CrCO6	3.16	0.00	0.00	0.00	0.06	0.05	0.00	-0.08	0.05	0.05
CrCl3	1.49	0.00	-0.02	-0.06	-0.23	-0.26	-0.08	-0.16	-0.26	-0.26
CrF3	2.15	0.00	-0.04	-0.09	-0.26	-0.33	-0.12	-0.23	-0.33	-0.33
CrO3	-0.80	0.00	-0.01	-0.05	-0.32	-0.48	-0.09	-0.28	-0.48	-0.48
Cu2	0.16	0.00	0.00	-0.01	0.07	0.06	0.00	0.00	0.06	0.06
Cu2O	0.26	-0.01	-0.03	-0.08	-0.06	-0.08	-0.09	-0.12	-0.08	-0.08
Cu2S	0.79	0.00	-0.02	-0.05	-0.01	-0.02	-0.04	-0.06	-0.02	-0.02
CuCN	2.30	0.00	-0.01	-0.01	0.04	0.03	-0.01	-0.06	0.03	0.03
CuCl	1.29	0.00	-0.02	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04
CuF	1.15	-0.01	-0.04	-0.07	-0.09	-0.10	-0.07	-0.09	-0.10	-0.10
CuH	0.68	0.00	-0.01	-0.03	-0.02	-0.05	-0.02	-0.03	-0.03	-0.05
FeCO5	2.87	0.00	0.00	0.00	0.05	0.05	0.00	-0.08	0.05	0.05
FeF2	2.43	0.00	-0.04	-0.07	-0.15	-0.16	-0.08	-0.13	-0.16	-0.16
FeF3	2.48	-0.01	-0.06	-0.12	-0.24	-0.24	-0.13	-0.19	-0.24	-0.24
FeO	0.27	0.00	-0.02	-0.09	-0.17	-0.20	-0.10	-0.18	-0.20	-0.20
Ferrocen	3.29	0.00	0.00	-0.01	0.08	0.04	-0.01	-0.03	0.08	0.04
MnF2	2.32	0.00	-0.03	-0.07	-0.14	-0.16	-0.09	-0.13	-0.16	-0.16
MnO	0.25	0.00	-0.02	-0.08	-0.15	-0.19	-0.10	-0.17	-0.19	-0.19
MnO2	-0.42	0.00	-0.02	-0.07	-0.20	-0.27	-0.10	-0.20	-0.27	-0.27
MnO3F	-1.41	0.00	-0.02	-0.06	-0.17	-0.26	-0.09	-0.24	-0.26	-0.26
MnO4-	-1.12	0.00	-0.02	-0.06	-0.30	-0.41	-0.10	-0.27	-0.41	-0.41
MnS	0.40	0.00	-0.02	-0.07	-0.17	-0.19	-0.08	-0.13	-0.19	-0.19
NiCO4	2.94	0.00	0.00	0.00	0.05	0.07	0.00	-0.06	0.07	0.07
NiCl2	1.84	0.00	-0.02	-0.05	-0.12	-0.11	-0.06	-0.09	-0.11	-0.11
NiF2	2.04	-0.01	-0.04	-0.08	-0.15	-0.15	-0.09	-0.13	-0.15	-0.15
NiF3	1.62	-0.01	-0.07	-0.15	-0.25	-0.25	-0.15	-0.22	-0.25	-0.25
NiO	-0.29	0.00	-0.04	-0.10	-0.22	-0.22	-0.11	-0.16	-0.22	-0.22
NiS	-0.10	-0.01	-0.03	-0.08	-0.21	-0.20	-0.09	-0.14	-0.20	-0.20
ScCl3	2.89	0.00	0.01	-0.01	-0.04	-0.12	-0.07	-0.12	-0.12	-0.12
ScF3	3.58	0.00	0.00	-0.03	-0.03	-0.12	-0.10	-0.17	-0.12	-0.12
ScH3	1.53	0.00	0.01	-0.01	-0.07	-0.14	-0.01	-0.03	-0.08	-0.14
ScO	1.56	0.00	0.00	-0.04	-0.08	-0.19	-0.09	-0.18	-0.19	-0.19
TiCO4	3.03	0.00	0.00	0.00	0.04	0.04	0.00	-0.06	0.04	0.04
TiCl4	2.23	0.00	0.00	-0.02	-0.14	-0.21	-0.07	-0.14	-0.21	-0.21
TiF3	3.22	0.00	-0.01	-0.03	-0.08	-0.18	-0.11	-0.18	-0.18	-0.18
TiF4	3.16	0.00	-0.01	-0.03	-0.14	-0.27	-0.12	-0.23	-0.27	-0.27
TiH4	1.14	0.00	0.00	-0.01	-0.11	-0.20	0.00	-0.02	-0.11	-0.20
TiO	1.27	0.00	0.01	-0.03	-0.09	-0.21	-0.08	-0.17	-0.21	-0.21
TiO2	1.26	0.00	0.01	-0.01	-0.10	-0.24	-0.08	-0.19	-0.24	-0.24
TiS2	0.76	0.00	0.01	0.01	-0.11	-0.16	-0.05	-0.07	-0.16	-0.16
VH5	0.61	0.00	0.00	-0.01	-0.08	-0.17	0.00	-0.02	-0.08	-0.17

VO	0.89	0.00	0.00	-0.05	-0.12	-0.20	-0.08	-0.16	-0.20	-0.20
VOF3	1.95	0.00	-0.01	-0.05	-0.22	-0.36	-0.12	-0.25	-0.36	-0.36
ZnCl2	1.78	0.00	-0.03	-0.04	-0.07	-0.07	-0.05	-0.07	-0.07	-0.07
ZnF2	1.87	-0.01	-0.06	-0.07	-0.11	-0.12	-0.08	-0.12	-0.12	-0.12
ZnH2	1.13	0.00	-0.01	-0.02	-0.02	-0.06	-0.01	-0.03	-0.02	-0.06
ZnMe2	2.57	0.00	-0.01	-0.01	0.03	-0.02	0.00	-0.01	0.03	-0.02
Ag2	0.20	0.00	-0.01	-0.02	-0.02	-0.04	-0.02	-0.03	-0.04	-0.04
AgCl	1.10	0.00	-0.02	-0.04	-0.05	-0.07	-0.04	-0.06	-0.07	-0.07
CdF2	1.42	-0.01	-0.06	-0.09	-0.10	-0.11	-0.09	-0.12	-0.11	-0.11
CdMe2	2.49	0.00	-0.01	-0.02	0.02	-0.04	-0.01	-0.02	0.02	-0.04
MoCO6	3.58	0.00	-0.01	-0.01	0.06	0.04	-0.01	-0.10	0.04	0.04
MoF3	2.36	0.00	-0.03	-0.09	-0.06	-0.21	-0.16	-0.35	-0.21	-0.21
MoH	0.62	0.00	-0.01	-0.02	-0.02	-0.08	-0.02	-0.05	-0.05	-0.08
MoO2	0.91	0.00	-0.03	-0.10	-0.12	-0.42	-0.14	-0.45	-0.42	-0.42
MoO3	1.04	0.00	-0.03	-0.10	-0.15	-0.52	-0.17	-0.57	-0.52	-0.52
NbF3	2.92	0.00	-0.02	-0.08	-0.04	-0.22	-0.16	-0.36	-0.22	-0.22
NbO	1.71	0.00	-0.01	-0.06	-0.05	-0.27	-0.08	-0.29	-0.27	-0.27
NbO2	1.90	0.00	-0.02	-0.07	-0.07	-0.34	-0.11	-0.37	-0.34	-0.34
NbO2F	2.52	0.00	-0.03	-0.09	-0.07	-0.38	-0.15	-0.46	-0.38	-0.38
PdCO4	3.37	0.00	-0.01	-0.01	0.04	0.04	-0.01	-0.09	0.04	0.04
PdF	1.21	-0.01	-0.03	-0.08	-0.11	-0.18	-0.10	-0.17	-0.18	-0.18
PdO2	-0.96	-0.01	-0.04	-0.11	-0.23	-0.34	-0.16	-0.30	-0.34	-0.34
RhF	0.84	-0.01	-0.04	-0.09	0.08	-0.12	-0.11	-0.14	-0.12	-0.12
RhF4	0.94	-0.01	-0.08	-0.14	-0.20	-0.22	-0.19	-0.27	-0.22	-0.22
RhF6	0.19	-0.01	-0.09	-0.17	-0.27	-0.37	-0.26	-0.44	-0.37	-0.37
RhO	-0.30	-0.01	-0.04	-0.08	-0.12	-0.14	-0.10	-0.13	-0.14	-0.14
RuCO5	3.50	0.00	-0.01	-0.01	0.05	0.04	-0.01	-0.09	0.04	0.04
RuF	0.71	-0.01	-0.04	-0.09	-0.10	-0.02	-0.11	-0.12	-0.11	-0.11
RuO	0.39	0.00	-0.01	-0.04	-0.11	-0.20	-0.07	-0.20	-0.20	-0.20
RuO2	0.11	0.00	-0.03	-0.11	-0.21	-0.45	-0.15	-0.46	-0.45	-0.45
RuO4	-0.28	-0.01	-0.04	-0.12	-0.27	-0.56	-0.18	-0.56	-0.56	-0.56
Tc2O7	0.90	-0.01	-0.04	-0.13	-0.22	-0.60	-0.21	-0.62	-0.60	-0.60
TcO	0.70	0.00	-0.03	-0.07	-0.12	-0.27	-0.10	-0.27	-0.27	-0.27
TcO3F	1.00	-0.01	-0.05	-0.13	-0.22	-0.57	-0.20	-0.60	-0.57	-0.57
YF	2.59	-0.01	-0.03	-0.05	-0.03	-0.11	-0.11	-0.19	-0.11	-0.11
YF3	3.81	-0.01	-0.05	-0.07	0.01	-0.12	-0.13	-0.23	-0.12	-0.12
YO	2.00	0.00	-0.04	-0.07	-0.11	-0.29	-0.11	-0.29	-0.29	-0.29
ZrF	2.31	0.00	-0.01	-0.03	-0.02	-0.08	-0.09	-0.15	-0.08	-0.08
ZrF3	3.76	0.00	-0.03	-0.07	0.00	-0.15	-0.14	-0.28	-0.15	-0.15
ZrO	2.14	0.00	-0.02	-0.05	-0.08	-0.28	-0.10	-0.29	-0.28	-0.28
ZrO2	2.31	0.00	-0.03	-0.07	-0.06	-0.32	-0.11	-0.35	-0.32	-0.32
Au2	0.40	-0.01	-0.03	-0.04	-0.06	-0.10	-0.07	-0.10	-0.10	-0.10
Au3-	0.98	-0.01	-0.02	-0.03	-0.08	-0.10	-0.08	-0.10	-0.10	-0.10
AuCl	0.85	0.00	-0.02	-0.03	-0.08	-0.12	-0.07	-0.12	-0.12	-0.12
AuCl3	0.48	0.00	-0.02	-0.04	-0.10	-0.14	-0.10	-0.19	-0.14	-0.14
HfF	2.52	0.00	-0.01	-0.04	-0.12	-0.21	-0.15	-0.25	-0.21	-0.21
HfF3	3.89	0.00	-0.01	-0.05	-0.06	-0.20	-0.16	-0.31	-0.20	-0.20
HfO	2.28	0.00	-0.01	-0.03	-0.17	-0.36	-0.14	-0.31	-0.36	-0.36
HfO2	2.27	0.00	-0.01	-0.04	-0.14	-0.37	-0.15	-0.37	-0.37	-0.37
Hg2Cl2	0.81	0.00	-0.01	-0.02	-0.15	-0.17	-0.14	-0.19	-0.17	-0.17
HgF2	0.85	-0.01	-0.03	-0.05	-0.12	-0.17	-0.12	-0.20	-0.17	-0.17
HgMe2	2.45	0.00	0.00	-0.01	0.00	-0.06	-0.03	-0.05	-0.01	-0.06
IrF6	1.06	-0.01	-0.03	-0.09	-0.21	-0.44	-0.28	-0.57	-0.44	-0.44
OsCO5	3.66	0.00	-0.01	-0.01	0.01	-0.02	-0.05	-0.15	-0.02	-0.02
OsO2	0.94	0.00	-0.04	-0.10	-0.29	-0.63	-0.25	-0.62	-0.63	-0.63
OsO3	1.11	0.00	-0.02	-0.09	-0.30	-0.71	-0.26	-0.71	-0.71	-0.71
OsO4	0.86	0.00	-0.02	-0.09	-0.31	-0.81	-0.28	-0.81	-0.81	-0.81
OsOF5	1.46	0.00	-0.02	-0.08	-0.19	-0.48	-0.25	-0.55	-0.48	-0.48
PtCO4	3.49	0.00	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.05	-0.14	0.00	0.00
PtO	0.06	-0.01	-0.06	-0.08	-0.12	-0.22	-0.11	-0.21	-0.22	-0.22
PtO2	-0.29	0.00	-0.03	-0.08	-0.31	-0.64	-0.25	-0.62	-0.64	-0.64
ReH	0.45	0.00	-0.01	-0.02	-0.08	-0.16	-0.06	-0.10	-0.10	-0.16
ReO	0.71	0.00	-0.03	-0.07	-0.27	-0.48	-0.25	-0.46	-0.48	-0.48
ReO2	1.27	0.00	-0.02	-0.06	-0.33	-0.65	-0.30	-0.66	-0.65	-0.65
ReO3	1.61	0.00	-0.02	-0.08	-0.31	-0.70	-0.27	-0.69	-0.70	-0.70
ReO3F	1.78	0.00	-0.01	-0.09	-0.27	-0.72	-0.27	-0.75	-0.72	-0.72
TaF	2.12	0.00	-0.01	-0.04	-0.14	-0.24	-0.15	-0.27	-0.24	-0.24
TaF3	3.39	0.00	-0.01	-0.06	-0.10	-0.27	-0.18	-0.38	-0.27	-0.27
TaO2F	2.96	0.00	-0.01	-0.06	-0.17	-0.47	-0.21	-0.51	-0.47	-0.47
WCO6	3.72	0.00	-0.01	-0.01	0.02	0.01	-0.03	-0.12	0.01	0.01
WF3	2.75	0.00	-0.02	-0.07	-0.09	-0.27	-0.18	-0.39	-0.27	-0.27
WH	0.87	0.00	-0.01	-0.03	-0.09	-0.16	-0.08	-0.12	-0.12	-0.16
WO	-1.27	-0.01	-0.02	-0.12	-0.18	-0.43	-0.16	-0.43	-0.43	-0.43
WO2	1.34	0.00	-0.01	-0.08	-0.22	-0.58	-0.20	-0.57	-0.58	-0.58
WO3	1.82	0.00	-0.02	-0.08	-0.28	-0.72	-0.27	-0.72	-0.72	-0.72

```

!
!
!
!=====
!   non-zero dipole moments / Debye: DFT(BP86)
!=====
!
!
!
!compound  QZVPP      def2-      def-
!           QZVP    TZVPP    TZVP   SVP   SV(P) | TZVPP    def-
!           -QZVPP -QZVPP -QZVPP -QZVPP -QZVPP | -QZVPP -QZVPP -QZVPP -QZVPP
!
BaF        3.27    0.07    0.11    0.11   -0.20  -0.20    0.19    0.29   -0.20  -0.20
BaF2       7.22    0.08    0.11    0.11   -0.53  -0.53    0.02    0.10   -0.53  -0.53
BaH2       7.03    0.06    0.12    0.10   -0.18  -0.17   -0.11   -0.12   -0.18  -0.17
BaO        7.87   -0.04   -0.10   -0.10   -0.73  -0.73   -0.43   -0.39   -0.73  -0.73
BaS       10.01   -0.01   -0.12   -0.12   -0.89  -0.89   -0.41   -0.30   -0.89  -0.89
BeF2O2H4   3.00    0.00    0.00   -0.07    0.02   -0.14    0.05   -0.06    0.02   -0.14
BeS        5.09    0.00   -0.15   -0.15   -0.44  -0.44   -0.18   -0.17   -0.44  -0.44
CsF        8.84   -0.04   -0.10   -0.11   -0.71  -0.71    0.64    1.45   -0.41  -0.41
CsH        7.98   -0.04   -0.01   -0.02   -0.21  -0.20    0.49    0.70    0.39    0.42
CsO        9.98   -0.06   -0.17   -0.18   -0.90  -0.90    0.73    1.37   -0.76  -0.76
K2S        7.25    0.01   -0.18   -0.18   -1.17  -1.17   -0.38   -0.33   -1.67  -1.67
K3P        4.83    0.00    0.01    0.02   -0.74  -0.74   -0.49   -0.46   -1.23  -1.23
KBr       10.67    0.03    0.06    0.06   -0.36  -0.36    0.57    1.08    0.17    0.17
KCl       10.25    0.02   -0.01    0.00   -0.67  -0.67    0.58    1.05   -0.25  -0.25
KF         8.64   -0.01   -0.01   -0.01   -0.85  -0.85    0.42    0.73   -0.92  -0.92
KH         7.65    0.00   -0.12   -0.09   -0.10  -0.07    0.20    0.19    0.11    0.14
KI        11.24    0.01    0.13    0.13    0.00    0.00    0.80    1.23    1.23    1.23
LiBH4     6.08    0.00    0.05    0.12    0.02    0.09    0.08    0.03   -0.01    0.06
LiCl      6.98    0.00   -0.01    0.08   -0.46  -0.46    0.09    0.19   -0.22  -0.22
LiF       6.09    0.00    0.00    0.01   -0.70  -0.70    0.01    0.10   -0.53  -0.53
LiH       5.78    0.00    0.00    0.00   -0.22  -0.19    0.00   -0.22   -0.30  -0.27
MgF       3.22    0.00    0.00    0.00   -0.21  -0.21    0.08    1.37    0.86    0.86
Na3N      1.49   -0.01   -0.08   -0.08   -0.21  -0.21   -0.29   -0.28   -0.73  -0.73
Na3P      5.10   -0.01   -0.07   -0.07   -0.38  -0.38   -0.13   -0.01   -0.55  -0.55
NaCl      8.62    0.02   -0.07   -0.07   -0.67  -0.67    0.10    0.41   -0.64  -0.64
NaF       7.76    0.02   -0.08   -0.08   -0.79  -0.79   -0.01    0.11   -1.09  -1.09
NaH       5.98    0.00   -0.01   -0.01   0.00    0.03    0.04    0.07    0.03    0.07
PLi3     6.34    0.00   -0.04   -0.05   -0.30  -0.30   -0.05    0.50    0.08    0.08
RbF       9.21   -0.01   -0.05   -0.05   -0.56  -0.56    0.31    0.67   -1.04  -1.04
RbH       7.73   -0.01   0.10    0.13    0.04    0.06    0.29    0.42    0.20    0.22
RbO      10.17   -0.01   -0.08   -0.08   -0.46  -0.46    0.18    0.49   -1.47  -1.47
SrF       3.33    0.05    0.08    0.11   -0.18  -0.18    0.12    0.21   -0.18  -0.18
SrF2     6.25    0.07    0.07    0.07   -0.26  -0.26    0.07    0.13   -0.26  -0.26
SrH2     6.20    0.04    0.05    0.04   -0.08  -0.06   -0.05   -0.04   -0.08  -0.06
SrO       7.90    0.01   -0.07   -0.09   -0.49  -0.49   -0.28   -0.19   -0.49  -0.49
SrS       9.81    0.00   -0.11   -0.11   -0.67  -0.67   -0.36   -0.23   -0.67  -0.67
BH3CO    1.11    0.00    0.03    0.04    0.16    0.20    0.03    0.03    0.16    0.20
BH3NH3   5.37    0.00    0.06    0.12    0.34    0.43    0.06    0.21    0.34    0.43
C2H3N    1.89    0.00    0.00    0.02    0.06    0.11    0.00    0.15    0.06    0.11
CH2O     2.21   -0.01   -0.04   -0.03   -0.21  -0.21   -0.04    0.01   -0.21  -0.21
CH2O2    2.38    0.00   -0.01    0.00    0.03    0.03   -0.01    0.14    0.03    0.03
CH3N     1.95    0.00   -0.01    0.02   -0.12  -0.06   -0.01    0.08   -0.12  -0.06
CH3OH    1.57    0.00   -0.01    0.04    0.00    0.09   -0.01    0.17    0.00    0.09
CO        0.16    0.00    0.01    0.01    0.14    0.14    0.01   -0.01    0.14    0.14
H2CO3    0.29    0.00   -0.02   -0.06   -0.16  -0.27   -0.02   -0.19   -0.16  -0.27
H2O      1.90    0.00    0.03    0.18    0.08    0.26    0.03    0.25    0.08    0.26
H2O2     1.64    0.00    0.03    0.10    0.11    0.19    0.03    0.18    0.11    0.19
HCN      2.97   -0.01   -0.02   -0.01   -0.19  -0.18   -0.02   -0.02   -0.19  -0.18
HF        1.81    0.00    0.01    0.10    0.01    0.12    0.01    0.13    0.01    0.12
HNC       3.06    0.00    0.03    0.05    0.09    0.10    0.03    0.04    0.09    0.10
HNO      1.53    0.00   -0.01    0.00    0.00    0.01   -0.01    0.07    0.00    0.01
HNO2     2.47    0.00    0.01    0.02   -0.01  -0.03    0.01    0.08   -0.01  -0.03
HNO3     2.14    0.00    0.02    0.05    0.04    0.05    0.02    0.10    0.04    0.05
N2H2     2.74    0.00    0.03    0.10    0.12    0.20    0.03    0.27    0.12    0.20
N2H4     1.92    0.00    0.04    0.13    0.13    0.26    0.04    0.24    0.13    0.26
NF3       0.17    0.00   -0.03   -0.03   -0.10  -0.10   -0.03    0.02   -0.10  -0.10
NH3       1.63    0.00    0.07    0.18    0.16    0.34    0.07    0.29    0.16    0.34
NH4F     4.77    0.00    0.05    0.15    0.16    0.38    0.05    0.24    0.16    0.38
OF2       0.29    0.00   -0.01   -0.01   -0.07  -0.07   -0.01    0.00   -0.07  -0.07
Al2S3    4.00    0.01   -0.04   -0.03   -0.55  -0.55   -0.03   -0.21   -0.55  -0.55
AlN       2.90    0.03   -0.08   -0.10   -0.62  -0.62   -0.09   -0.06   -0.62  -0.62
ClF       0.88    0.01    0.09    0.09    0.22    0.22    0.09    0.26    0.22    0.22
ClF3      0.73    0.00    0.06    0.05    0.20    0.20    0.06    0.22    0.20    0.20
H2SO4    0.83    0.00   -0.02   -0.09   -0.25  -0.40   -0.02   -0.26   -0.25  -0.40

```

H3PO4	0.39	0.00	0.04	0.15	0.39	0.62	0.03	0.43	0.39	0.62
HCP	0.38	0.00	-0.01	0.03	0.15	0.16	0.07	0.05	0.15	0.16
HCl	1.14	0.00	0.05	0.11	0.20	0.25	0.07	0.27	0.20	0.25
HSH	1.02	0.00	0.06	0.11	0.28	0.33	0.09	0.35	0.28	0.33
HSSH	1.12	0.00	0.06	0.10	0.29	0.32	0.08	0.34	0.29	0.32
PF3	1.18	0.00	0.01	0.01	0.03	0.03	0.04	0.23	0.03	0.03
PH3	0.56	0.00	0.04	0.06	0.28	0.32	0.06	0.28	0.28	0.32
S5	0.26	0.01	-0.04	0.02	0.07	0.07	0.05	0.13	0.07	0.07
SF2	1.07	0.00	0.08	0.08	0.23	0.23	0.09	0.33	0.23	0.23
SF4	0.80	0.00	0.01	0.01	0.15	0.15	0.04	0.22	0.15	0.15
AsCl3	1.54	0.00	0.02	0.03	0.06	0.06	0.04	0.24	0.06	0.06
AsH3	0.24	0.00	0.00	0.00	0.17	0.17	0.00	0.13	0.17	0.17
BrCl	0.50	0.00	-0.02	-0.02	0.01	0.01	-0.02	0.06	0.01	0.01
GaCl	2.42	0.00	-0.04	-0.04	-0.48	-0.48	-0.03	0.10	-0.48	-0.48
GaF	2.22	0.00	-0.06	-0.06	-0.46	-0.46	-0.06	0.03	-0.46	-0.46
GaF2	2.31	-0.02	-0.05	-0.05	-0.30	-0.30	-0.05	0.08	-0.30	-0.30
GaO	3.64	0.03	-0.07	-0.07	-0.49	-0.49	-0.07	0.00	-0.49	-0.49
GeF3	2.03	-0.02	-0.04	-0.04	-0.15	-0.15	-0.04	0.11	-0.15	-0.15
GeO	3.18	0.00	-0.03	-0.03	-0.45	-0.45	-0.03	0.01	-0.45	-0.45
HBr	0.89	0.00	0.01	0.03	0.15	0.15	0.01	0.18	0.15	0.15
HCCl3	0.87	0.00	0.01	0.02	0.03	0.03	0.01	0.07	0.03	0.03
SeH2	0.71	0.00	0.00	0.01	0.17	0.18	0.00	0.19	0.17	0.18
SeO	2.04	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.04	0.00	0.15	-0.04	-0.04
SeO2	2.61	0.00	-0.03	-0.03	-0.10	-0.10	-0.03	0.09	-0.10	-0.10
ICl	1.23	-0.01	0.02	0.02	0.10	0.10	-0.08	0.12	-0.04	-0.04
IH	0.44	-0.01	0.02	0.03	0.18	0.18	0.10	0.22	0.30	0.29
InCl	3.41	0.00	-0.06	-0.06	-0.58	-0.58	-0.33	-0.13	-0.67	-0.67
InH	1.05	-0.01	-0.03	-0.03	-0.28	-0.28	-0.37	-0.37	-0.66	-0.65
InO	4.00	0.02	-0.09	-0.09	-0.56	-0.56	0.10	0.19	-0.47	-0.47
SbF	2.40	-0.01	0.06	0.06	-0.05	-0.05	-0.01	0.32	-0.05	-0.05
SbF3	3.80	0.00	0.04	0.04	-0.18	-0.18	-0.09	0.25	-0.15	-0.15
SbH3	0.47	0.00	0.01	0.01	-0.18	-0.16	-0.14	-0.20	-0.42	-0.45
SbO2	2.96	0.02	0.01	0.01	-0.25	-0.25	-0.04	0.10	-0.21	-0.21
SnF3	3.02	-0.01	-0.01	-0.01	-0.25	-0.25	0.01	0.21	-0.22	-0.22
SnO	4.10	0.00	-0.07	-0.07	-0.59	-0.59	0.04	0.20	-0.38	-0.38
TeF3	0.96	0.00	0.02	0.02	-0.07	-0.07	-0.03	0.08	-0.03	-0.03
TeH2	0.11	0.00	0.02	0.03	0.18	0.17	0.15	0.31	0.44	0.42
TeO	2.84	0.01	0.04	0.04	-0.14	-0.14	-0.05	0.15	-0.17	-0.17
TeO2	3.78	0.00	0.00	0.00	-0.20	-0.20	-0.07	0.16	-0.06	-0.06
XeOF4	1.41	0.00	-0.02	-0.02	0.15	0.15	-0.04	-0.01	0.21	0.21
BiF	2.96	-0.01	0.05	0.05	-0.11	-0.11	-0.03	0.41	-0.08	-0.08
BiF3	4.82	0.00	0.03	0.03	-0.23	-0.23	0.13	0.47	-0.07	-0.07
BiH3	1.18	0.00	0.01	0.01	-0.14	-0.12	-0.10	-0.19	-0.21	-0.20
BiO2	3.83	0.02	0.02	0.02	-0.30	-0.30	-0.05	0.09	-0.23	-0.23
PbF3	3.32	0.00	-0.01	-0.01	-0.29	-0.29	0.12	0.28	-0.24	-0.24
PbO	4.28	0.00	-0.08	-0.08	-0.56	-0.56	0.01	0.12	-0.33	-0.33
TlCl	4.43	0.00	-0.07	-0.07	-0.67	-0.67	-0.17	0.04	-0.75	-0.75
TlCl3	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.01
TlH	1.52	0.00	-0.04	-0.04	-0.29	-0.28	-0.24	-0.28	-0.54	-0.52
TlO	3.86	0.02	-0.09	-0.09	-0.50	-0.50	0.21	0.30	-0.39	-0.39
CoF2	0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.02	0.01	0.01
Cu2O	3.43	0.04	0.08	0.27	0.20	0.20	0.32	0.36	0.20	0.20
Cu2S	3.97	0.02	-0.05	0.08	0.28	0.28	0.31	0.33	0.28	0.28
CuCN	6.50	0.02	-0.03	-0.04	0.02	0.03	0.15	0.15	0.03	0.03
CuCl	4.42	0.02	-0.05	0.05	0.15	0.16	0.20	0.25	0.16	0.16
CuF	4.43	0.05	0.08	0.18	-0.02	-0.01	0.23	0.28	-0.01	-0.01
CuH	2.25	0.02	-0.06	-0.09	-0.03	-0.02	-0.06	-0.08	-0.03	-0.01
FeO	4.11	0.05	0.00	0.10	-0.06	-0.06	0.23	0.29	-0.05	-0.05
MnO	4.12	0.03	-0.01	0.11	-0.18	-0.17	0.21	0.27	-0.17	-0.17
MnO2	2.37	0.02	0.02	0.11	0.11	0.12	0.20	0.23	0.12	0.12
MnO3F	0.09	0.01	0.01	0.04	-0.04	-0.02	0.05	0.08	-0.03	-0.03
MnS	4.97	0.02	-0.08	0.11	0.32	0.31	0.41	0.49	0.32	0.32
NiO	3.77	0.06	0.00	0.07	0.09	0.08	0.23	0.27	0.09	0.09
NiS	3.35	0.02	-0.03	0.01	0.61	0.60	0.49	0.54	0.60	0.61
ScO	3.56	0.02	0.05	0.35	-0.17	-0.11	0.24	0.30	-0.11	-0.11
TiO	3.34	-0.02	-0.02	0.25	-0.22	-0.17	0.15	0.20	-0.17	-0.17
TiO2	6.51	0.00	-0.03	0.05	-0.18	-0.19	0.07	0.08	-0.19	-0.19
TiS2	5.47	0.00	-0.01	0.07	0.24	0.21	0.24	0.30	0.21	0.21
VH5	1.19	0.00	0.01	0.01	0.03	0.02	0.03	0.02	0.03	0.02
VO	3.24	0.00	0.01	0.22	-0.20	-0.16	0.14	0.19	-0.16	-0.16
VOF3	0.48	0.00	-0.01	-0.04	0.03	0.00	-0.06	-0.10	0.00	0.00
AgCl	4.90	0.04	-0.01	0.04	-0.40	-0.36	0.11	0.21	-0.36	-0.36
CdMe2	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
MoH	2.20	-0.01	0.03	0.06	0.03	0.04	0.08	0.07	0.04	0.04
MoO2	4.03	-0.01	0.03	0.09	-0.01	0.02	0.15	0.21	0.02	0.02

MoO3	5.03	0.00	0.04	0.11	0.08	0.07	0.14	0.17	0.07	0.07
NbO	3.49	0.00	-0.01	0.03	-0.06	-0.01	0.09	0.12	-0.02	-0.02
NbO2	4.90	-0.01	-0.01	0.04	-0.04	0.05	0.15	0.24	0.05	0.05
NbO2F	5.20	0.00	0.01	0.08	0.01	0.01	0.13	0.14	0.01	0.01
PdF	4.07	0.06	0.09	0.15	-0.21	-0.18	0.23	0.29	-0.17	-0.17
RhF	4.00	0.06	0.09	0.18	-0.33	-0.10	0.22	0.29	-0.10	-0.10
RhO	3.26	0.05	0.05	0.08	-0.07	-0.06	0.11	0.14	-0.06	-0.06
RuF	3.83	0.06	0.08	0.17	-0.45	-0.42	-0.01	0.06	-0.42	-0.42
RuO	3.29	0.03	0.06	0.10	-0.11	-0.09	0.14	0.18	-0.10	-0.10
RuO4	0.03	-0.02	-0.03	-0.03	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02
TcO	3.43	0.02	0.05	0.09	-0.14	-0.11	0.16	0.21	-0.11	-0.11
TcO3F	0.62	0.01	-0.02	-0.05	0.06	0.01	-0.09	-0.16	0.01	0.01
YF	1.89	0.04	0.11	0.10	0.00	0.10	0.30	0.41	0.10	0.10
YF3	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
YO	4.71	-0.01	-0.03	-0.04	-0.17	-0.12	0.07	0.12	-0.13	-0.13
ZrF	2.84	0.00	0.04	0.15	0.06	0.13	0.32	0.39	0.12	0.12
ZrO	4.03	-0.01	-0.01	0.04	-0.06	-0.01	0.13	0.17	-0.01	-0.01
ZrO2	7.53	0.00	-0.05	0.04	-0.18	-0.17	0.13	0.13	-0.17	-0.17
AuCl	3.20	0.03	0.08	0.12	-0.31	-0.26	0.14	0.22	-0.26	-0.26
HfF	1.62	0.04	0.05	0.08	0.18	0.26	0.36	0.46	0.27	0.27
HfO	3.37	0.04	0.02	0.01	-0.01	0.06	0.14	0.20	0.06	0.06
HfO2	7.52	0.00	-0.05	0.01	-0.24	-0.14	0.14	0.16	-0.14	-0.14
OsO2	1.73	0.01	0.06	0.11	0.05	0.11	0.19	0.22	0.11	0.11
OsOF5	1.48	0.00	0.01	0.06	-0.16	-0.09	0.14	0.28	-0.08	-0.08
PtO	2.38	0.03	0.05	0.09	0.00	0.05	0.12	0.16	0.05	0.05
ReH	1.11	0.04	0.04	0.03	0.05	0.06	0.09	0.07	0.05	0.06
ReO	3.27	0.03	0.01	0.06	0.02	0.11	0.35	0.40	0.10	0.10
ReO3F	1.15	-0.01	-0.01	-0.03	0.02	-0.05	-0.09	-0.19	-0.04	-0.04
TaF	0.88	0.07	0.06	0.08	0.14	0.23	0.29	0.37	0.24	0.24
TaO2F	2.05	0.01	0.00	-0.03	-0.11	-0.21	-0.14	-0.28	-0.21	-0.21
WH	1.77	-0.01	0.03	0.05	0.14	0.17	0.20	0.19	0.17	0.16
WO	2.17	0.00	0.00	0.00	0.03	0.13	0.07	0.14	0.13	0.13
WO2	3.07	0.03	0.01	0.01	0.09	0.21	0.19	0.26	0.20	0.20

!  
!  
!

=====

! non-zero dipole moments / Debye: HF

=====

!compound	def2-						def-			
	QZVPP	QZVP	TZVPP	TZVP	SVP	SV(P)	TZVPP	TZVP	SVP	SV(P)
!		-QZVPP	-QZVPP	-QZVPP	-QZVPP	-QZVPP	-QZVPP	-QZVPP	-QZVPP	-QZVPP
!										
BaF	2.61	0.14	0.24	0.29	0.39	0.38	0.53	0.69	0.40	0.40
BaF2	8.22	0.10	0.21	0.21	0.09	0.09	0.31	0.47	0.09	0.09
BaH2	8.54	0.08	0.19	0.25	0.17	0.23	0.14	0.20	0.17	0.23
BaO	10.45	-0.02	-0.03	-0.03	-0.55	-0.55	-0.33	-0.23	-0.55	-0.55
BaS	13.49	0.00	-0.07	-0.07	-0.80	-0.80	-0.31	-0.16	-0.80	-0.80
BeF2O2H4	3.07	0.00	0.01	-0.05	0.00	-0.13	0.06	-0.03	0.00	-0.13
BeS	6.55	0.00	-0.14	-0.14	-0.36	-0.36	-0.16	-0.09	-0.36	-0.36
CsF	9.78	0.04	0.04	0.06	-0.19	-0.19	0.55	1.67	1.55	1.55
CsH	9.84	-0.02	0.08	0.14	0.06	0.08	0.54	1.40	1.09	1.13
CsO	10.94	0.05	0.03	0.04	-0.33	-0.33	0.65	1.50	1.19	1.19
K2S	9.14	0.02	-0.12	-0.12	-0.80	-0.80	0.20	0.57	-0.66	-0.66
K3P	5.41	0.00	0.35	0.35	-0.53	-0.53	-1.53	-1.37	-2.54	-2.54
KBr	11.43	0.03	0.03	0.03	-0.13	-0.13	0.48	1.13	0.65	0.65
KCl	10.94	0.02	0.04	0.05	-0.31	-0.31	0.59	1.19	0.54	0.54
KF	9.33	-0.01	0.07	0.07	-0.20	-0.20	0.50	0.99	0.70	0.70
KH	9.05	0.00	-0.05	-0.01	-0.06	-0.01	0.27	0.49	0.36	0.42
KI	12.11	0.01	0.08	0.08	0.14	0.14	0.70	1.24	1.29	1.29
LiBH4	6.30	0.00	0.06	0.14	0.15	0.24	0.08	0.07	0.08	0.17
LiCl	7.39	0.00	0.03	0.12	-0.16	-0.16	0.13	0.28	0.01	0.01
LiF	6.47	0.00	0.06	0.11	-0.18	-0.18	0.11	0.24	-0.08	-0.08
LiH	6.09	0.00	0.03	0.04	-0.08	-0.04	0.02	-0.13	-0.12	-0.08
MgF	3.25	0.00	0.05	0.05	0.06	0.06	0.35	1.87	1.71	1.71
Na3N	3.34	0.06	0.17	0.17	0.28	0.28	0.82	0.10	1.31	1.31
Na3P	6.39	-0.01	-0.14	-0.15	-0.44	-0.44	-0.22	0.02	-0.60	-0.60
NaCl	9.22	0.02	-0.01	-0.01	-0.29	-0.29	0.22	0.59	-0.08	-0.08
NaF	8.32	0.02	0.01	0.01	-0.14	-0.14	0.21	0.37	-0.04	-0.04
NaH	7.01	0.01	-0.01	-0.01	0.12	0.16	0.06	0.13	0.14	0.20
PLi3	7.52	0.00	-0.10	-0.08	-0.22	-0.22	-0.05	0.57	0.22	0.22
RbF	9.94	0.03	0.03	0.03	-0.20	-0.20	0.47	1.07	0.80	0.80
RbH	9.56	0.00	0.05	0.11	0.11	0.15	0.29	0.72	0.49	0.52
RbO	10.79	0.04	0.03	0.03	-0.15	-0.15	0.52	0.99	0.56	0.56



SrF	2.81	0.12	0.22	0.25	0.16	0.15	0.30	0.44	0.17	0.17
SrF2	6.98	0.08	0.15	0.17	0.10	0.10	0.23	0.34	0.10	0.10
SrH2	7.30	0.05	0.07	0.09	0.07	0.11	0.06	0.09	0.07	0.11
SrO	11.38	0.00	-0.07	-0.09	-0.41	-0.41	-0.26	-0.14	-0.41	-0.41
SrS	13.59	0.00	-0.12	-0.14	-0.61	-0.61	-0.28	-0.11	-0.61	-0.61
BH3CO	1.53	0.00	0.02	0.04	0.14	0.20	0.02	0.06	0.14	0.20
BH3NH3	5.49	0.00	0.06	0.10	0.33	0.41	0.06	0.19	0.33	0.41
C2H3N	2.10	0.00	0.01	0.02	0.17	0.21	0.01	0.14	0.17	0.21
CH2O	2.84	0.00	-0.02	-0.02	-0.06	-0.07	-0.02	0.04	-0.06	-0.07
CH2O2	2.95	0.00	0.00	0.00	0.25	0.23	0.00	0.17	0.25	0.23
CH3N	2.26	0.00	-0.01	0.01	-0.02	0.02	-0.01	0.10	-0.02	0.02
CH3OH	1.78	0.00	0.00	0.04	0.10	0.17	0.00	0.17	0.10	0.17
CO	0.34	0.00	-0.01	-0.01	-0.04	-0.04	-0.01	0.05	-0.04	-0.04
H2CO3	0.31	0.00	-0.02	-0.06	-0.20	-0.30	-0.02	-0.19	-0.20	-0.30
H2O	2.07	0.00	0.03	0.14	0.12	0.26	0.03	0.22	0.12	0.26
H2O2	1.80	0.00	0.02	0.08	0.14	0.19	0.02	0.16	0.14	0.19
HCN	3.33	0.00	-0.01	0.00	-0.09	-0.10	-0.01	-0.01	-0.09	-0.10
HF	1.97	0.00	0.01	0.08	0.05	0.13	0.01	0.11	0.05	0.13
HNC	2.84	0.00	0.02	0.04	0.08	0.08	0.02	0.01	0.08	0.08
HNO	1.97	0.00	0.01	0.01	0.11	0.08	0.01	0.09	0.11	0.08
HNO2	3.06	0.00	0.04	0.04	0.15	0.10	0.04	0.15	0.15	0.10
HNO3	2.57	0.00	0.02	0.04	0.07	0.04	0.02	0.11	0.07	0.04
N2H2	3.02	0.00	0.04	0.08	0.22	0.24	0.04	0.26	0.22	0.24
N2H4	2.06	0.00	0.03	0.09	0.14	0.24	0.03	0.19	0.14	0.24
NF3	0.43	0.00	-0.01	-0.01	0.03	0.03	-0.01	0.06	0.03	0.03
NH3	1.76	0.00	0.05	0.13	0.16	0.30	0.05	0.23	0.16	0.30
NH4F	4.90	0.00	0.04	0.11	0.18	0.34	0.04	0.20	0.18	0.34
OF2	0.44	0.00	0.00	0.00	-0.04	-0.04	0.00	0.01	-0.04	-0.04
Al2S3	5.38	0.00	-0.07	-0.06	-0.63	-0.63	-0.05	-0.24	-0.63	-0.63
AlN	1.53	0.00	-0.07	-0.06	-0.42	-0.42	-0.06	0.01	-0.42	-0.42
ClF	1.30	0.00	0.08	0.08	0.32	0.32	0.08	0.24	0.32	0.32
ClF3	0.70	0.00	0.04	0.04	0.19	0.19	0.04	0.12	0.19	0.19
H2SO4	1.03	0.00	-0.02	-0.08	-0.27	-0.42	-0.01	-0.21	-0.27	-0.42
H3PO4	0.44	0.00	0.04	0.14	0.46	0.68	0.03	0.42	0.46	0.68
HCP	0.37	0.00	0.02	0.02	0.13	0.11	0.05	0.07	0.13	0.11
HCl	1.24	0.00	0.04	0.08	0.20	0.23	0.06	0.23	0.20	0.23
HSH	1.10	0.00	0.04	0.07	0.23	0.26	0.05	0.25	0.23	0.26
HSSH	1.26	0.00	0.04	0.06	0.26	0.26	0.05	0.25	0.26	0.26
PF3	1.60	0.00	0.05	0.04	0.33	0.33	0.07	0.32	0.33	0.33
PH3	0.59	0.00	-0.01	0.00	0.13	0.12	0.01	0.09	0.13	0.12
S5	0.34	0.00	0.00	0.00	0.03	0.03	0.00	0.09	0.03	0.03
SF2	1.60	0.00	0.09	0.10	0.44	0.44	0.11	0.38	0.44	0.44
SF4	1.10	0.00	0.04	0.03	0.32	0.32	0.05	0.24	0.32	0.32
AsCl3	1.75	-0.01	0.06	0.06	0.27	0.27	0.08	0.37	0.27	0.27
AsH3	0.26	0.01	-0.01	-0.01	0.09	0.06	-0.01	0.02	0.09	0.06
BrCl	0.60	0.00	0.00	0.00	0.06	0.06	0.01	0.11	0.06	0.06
GaCl	2.57	-0.01	0.00	0.00	-0.26	-0.26	0.02	0.22	-0.26	-0.26
GaF	2.39	0.00	-0.02	-0.02	-0.16	-0.16	-0.02	0.13	-0.16	-0.16
GaF2	2.89	0.01	-0.01	-0.01	0.06	0.06	-0.01	0.22	0.06	0.06
GaO	2.84	0.00	-0.06	-0.06	-0.25	-0.25	-0.06	0.08	-0.25	-0.25
GeF3	2.72	0.00	0.01	0.01	0.20	0.20	0.01	0.24	0.20	0.20
GeO	4.34	0.00	-0.02	-0.02	-0.30	-0.30	-0.02	0.05	-0.30	-0.30
HBr	1.00	0.00	0.01	0.03	0.14	0.13	0.01	0.14	0.14	0.13
HCBBr3	1.04	0.00	0.01	0.02	0.03	0.00	0.01	0.08	0.03	0.00
SeH2	0.80	0.00	0.00	0.00	0.14	0.12	0.00	0.12	0.14	0.12
SeO	2.63	0.00	-0.03	-0.03	-0.04	-0.04	-0.03	0.05	-0.04	-0.04
SeO2	3.40	-0.01	0.00	0.00	0.12	0.12	0.00	0.17	0.12	0.12
ICl	1.56	0.00	0.05	0.05	0.21	0.21	-0.02	0.21	0.09	0.09
IH	0.54	0.00	0.01	0.01	0.12	0.10	0.04	0.11	0.17	0.14
InCl	3.55	0.00	0.00	0.00	-0.27	-0.27	-0.04	0.25	-0.14	-0.14
InH	0.70	0.00	0.00	0.00	-0.21	-0.19	-0.06	-0.06	-0.30	-0.28
InO	3.18	0.00	-0.04	-0.04	-0.23	-0.23	-0.04	0.14	-0.25	-0.25
SbF	3.02	0.00	0.10	0.10	0.30	0.30	0.10	0.51	0.33	0.33
SbF3	4.38	0.00	0.10	0.10	0.27	0.27	0.06	0.50	0.34	0.34
SbH3	0.46	0.00	0.04	0.04	-0.02	0.02	0.05	0.07	-0.18	-0.14
SbO2	3.19	0.01	0.01	0.01	0.05	0.05	0.00	0.19	0.13	0.13
SnF3	3.87	0.00	0.06	0.06	0.21	0.21	-0.02	0.29	0.12	0.12
SnO	5.61	0.00	-0.05	-0.05	-0.40	-0.40	0.20	0.38	-0.12	-0.12
TeF3	1.05	0.00	0.03	0.03	-0.05	-0.05	0.03	0.08	-0.01	-0.01
TeH2	0.19	0.00	0.00	0.00	0.08	0.05	0.00	0.06	0.19	0.15
TeO	3.66	0.02	-0.04	-0.04	-0.31	-0.31	-0.22	-0.20	-0.40	-0.40
TeO2	4.92	0.00	0.03	0.03	0.07	0.07	0.02	0.32	0.24	0.24
XeOF4	1.42	0.00	-0.02	-0.02	0.17	0.17	-0.05	-0.05	0.14	0.14
BiF	3.79	0.00	0.11	0.11	0.26	0.26	0.13	0.68	0.39	0.39
BiF3	5.72	0.00	0.10	0.10	0.25	0.25	0.52	0.94	0.55	0.55

BiH3	1.30	0.00	0.04	0.04	-0.02	0.02	0.23	0.26	0.23	0.26
BiO2	4.16	0.01	0.03	0.03	0.03	0.03	0.15	0.42	0.19	0.19
PbF3	4.32	0.00	0.04	0.04	0.08	0.08	0.18	0.43	0.14	0.14
PbO	5.93	0.00	-0.06	-0.06	-0.35	-0.35	0.39	0.49	0.07	0.07
TlCl	4.96	0.00	-0.01	0.00	-0.34	-0.34	-0.02	0.26	-0.32	-0.32
TlH	1.38	0.00	-0.02	-0.02	-0.22	-0.19	0.01	-0.08	-0.25	-0.23
TlO	3.78	0.00	-0.04	-0.04	-0.18	-0.18	0.06	0.24	-0.17	-0.17
Cu2O	6.09	0.06	0.05	0.22	0.10	0.11	0.24	0.31	0.11	0.11
Cu2S	7.17	0.04	-0.02	0.19	0.06	0.08	0.30	0.38	0.08	0.08
CuCN	8.26	0.02	0.00	0.03	0.03	0.08	0.13	0.18	0.08	0.08
CuCl	6.39	0.03	0.01	0.13	0.14	0.19	0.23	0.34	0.19	0.19
CuF	6.17	0.07	0.11	0.21	0.19	0.25	0.29	0.39	0.25	0.25
CuH	4.05	0.03	-0.04	-0.05	-0.08	-0.05	-0.02	-0.02	-0.05	-0.05
FeO	2.15	0.02	0.11	0.50	0.40	0.40	0.56	0.64	0.40	0.40
MnO	2.40	0.02	0.08	0.49	0.27	0.28	0.50	0.59	0.28	0.28
MnO2	3.95	0.02	0.03	0.11	0.13	0.14	0.14	0.19	0.14	0.14
MnO3F	2.33	0.03	0.07	0.08	0.11	0.11	0.11	0.15	0.11	0.11
MnS	5.14	-0.03	-0.10	0.23	0.04	0.04	0.29	0.59	0.04	0.04
NiO	2.40	0.01	0.18	0.56	0.53	0.52	0.67	0.75	0.52	0.52
NiS	6.59	0.02	-0.15	-0.31	-0.74	-0.84	-0.32	0.23	-0.84	-0.84
ScO	4.42	0.01	0.05	0.60	0.38	0.54	0.63	0.75	0.54	0.54
TiO	4.07	0.00	0.01	0.57	0.28	0.41	0.54	0.66	0.41	0.41
TiO2	8.28	0.00	0.00	0.10	-0.02	-0.01	0.11	0.16	-0.01	-0.01
TiS2	6.59	0.00	0.00	0.10	0.28	0.22	0.27	0.37	0.22	0.22
VH5	0.74	0.00	0.00	0.00	-0.16	-0.22	0.00	-0.05	-0.18	-0.22
VO	2.37	0.00	0.07	0.69	0.41	0.47	0.65	0.79	0.47	0.47
VOF3	0.37	-0.01	-0.03	-0.07	-0.26	-0.32	-0.12	-0.21	-0.32	-0.32
AgCl	7.01	0.05	0.06	0.17	-0.19	-0.07	0.24	0.47	-0.07	-0.07
MoH	3.24	0.00	0.04	0.11	0.08	0.20	0.12	0.16	0.15	0.20
MoO2	5.99	0.00	0.03	-0.04	-0.01	-1.42	-0.14	-1.44	-1.41	-1.41
MoO3	6.19	0.00	0.07	0.16	0.28	0.22	0.18	0.19	0.22	0.22
NbO	4.49	0.01	-0.02	0.03	0.08	0.27	0.11	0.27	0.27	0.27
NbO2	7.01	0.04	0.01	-0.09	0.04	-0.41	-0.23	-0.56	-0.41	-0.41
NbO2F	6.51	0.00	0.03	0.12	0.22	0.21	0.17	0.20	0.21	0.21
PdF	6.17	0.08	0.18	0.33	0.15	0.26	0.39	0.55	0.26	0.26
RhF	6.10	0.08	0.19	0.35	-0.10	0.34	0.41	0.59	0.34	0.34
RhO	5.49	0.03	-0.02	-0.12	-0.33	-0.41	-0.17	-0.32	-0.41	-0.41
RuF	5.75	0.09	0.22	0.41	0.27	0.27	0.48	0.66	0.42	0.42
RuO	2.59	0.01	0.01	0.05	0.02	0.00	0.07	0.17	0.00	0.00
TcO	3.07	-0.03	-0.06	-0.02	-0.08	-0.10	0.03	0.11	-0.10	-0.10
TcO3F	0.58	0.00	-0.05	-0.11	-0.09	-0.23	-0.19	-0.40	-0.23	-0.23
YF	1.78	0.01	0.11	0.11	0.21	0.50	0.40	0.66	0.51	0.51
YO	5.45	0.00	0.02	0.00	-0.06	0.23	0.14	0.35	0.23	0.23
ZrF	3.10	0.01	0.07	0.19	0.36	0.58	0.50	0.72	0.58	0.58
ZrO	4.91	-0.01	-0.02	0.04	0.12	0.36	0.20	0.39	0.36	0.36
ZrO2	9.81	0.00	-0.04	0.07	0.06	0.10	0.18	0.22	0.10	0.10
AuCl	5.49	0.04	0.14	0.20	-0.11	0.05	0.28	0.54	0.05	0.05
HfF	1.30	0.00	0.16	0.22	0.50	0.74	0.51	0.73	0.74	0.74
HfO	4.34	0.00	0.04	0.05	0.18	0.51	0.26	0.48	0.51	0.51
HfO2	10.21	0.00	-0.03	0.04	-0.06	0.07	0.17	0.21	0.07	0.07
OsO2	2.98	0.02	0.16	0.22	0.42	0.54	0.42	0.51	0.54	0.54
OsOF5	5.72	0.01	0.22	0.21	0.27	0.61	0.50	0.89	0.61	0.61
PtO	3.22	0.06	-0.05	-0.08	-0.13	-0.22	-0.13	-0.28	-0.22	-0.22
ReO	4.62	-0.01	-0.01	-0.03	-0.01	-0.08	0.04	-0.02	-0.09	-0.09
ReO3F	1.37	0.00	0.00	-0.05	-0.05	-0.19	-0.14	-0.34	-0.19	-0.19
TaF	0.40	0.01	0.14	0.20	0.15	0.35	0.19	0.38	0.35	0.35
TaO2F	2.87	0.00	-0.03	-0.06	-0.19	-0.35	-0.20	-0.41	-0.35	-0.35
WH	2.35	0.01	0.07	0.14	0.56	0.72	0.62	0.69	0.68	0.72
WO	6.72	0.00	0.08	0.28	0.28	0.45	0.44	0.47	0.45	0.45
WO2	5.32	0.00	0.03	0.02	0.61	0.95	0.49	0.76	0.95	0.95