

Electronic Supplementary Information: Sub 20 cm⁻¹ computational prediction of the CH bond energy – a case of systematic error in computational thermochemistry

James H. Thorpe,^a David Feller,^b David H. Bross,^c Branko Ruscic,^{*c} and John F. Stanton^{*a}

^aThe Quantum Theory Project, Department of Chemistry, University of Florida, Gainesville, Florida, 32611, USA; E-mail: johnstanton@chem.ufl.edu

^bWashington State University, Pullman, Washington 99164-4630, USA and University of Alabama, Tuscaloosa, Alabama 35487-0336, USA

^cChemical Sciences and Engineering Division, Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois 60439, USA; E-mail: ruscic@anl.gov

Basis Sets

Hydrogen aug-pV9Z

H: aug-cc-pV9Z

CFOUR GENBAS entry

9

0	1	2	3	4	5	6	7	8
10	9	8	7	6	5	4	3	2
18	9	8	7	6	5	4	3	2

284997.23	13941.053	3471.4437	1903.1627	623.29320
290.36042	126.58232	44.692572	16.002336	6.081038
2.476265	1.076662	0.488407	0.229309	0.111481
0.055012	0.019986	0.006610		

0.00000013	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.00000289	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.00000572	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.00001753	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.00007214	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.00012056	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.00052484	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.00201573	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.00686535	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

0.02097115	1.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.05604920	0.0000000	1.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.13047152	0.0000000	0.0000000	1.0000000	0.0000000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.25361887	0.0000000	0.0000000	0.0000000	1.0000000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.34909591	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.26027369	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0
0.06419063	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0
0.00070951	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0

21.701825	10.296109	4.8848364	2.3175382	1.0995216
0.5216517	0.2474899	0.1174179	0.04174	

1.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0	0.0	0.0
0.0000000	1.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0	0.0	0.0
0.0000000	0.0000000	1.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0	0.0	0.0
0.0000000	0.0000000	0.0000000	1.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0	0.0	0.0
0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	1.0000000	0.0000000	0.0	0.0	0.0
0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	1.0000000	0.0	0.0	0.0
0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	1.0	0.0	0.0
0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0	1.0	0.0
0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0	0.0	1.0

18.015632	9.1122145	4.6089116	2.3311639	1.1790908
0.5963781	0.3016450	0.10386		

1.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0	0.0
0.0000000	1.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0	0.0
0.0000000	0.0000000	1.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0	0.0
0.0000000	0.0000000	0.0000000	1.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0	0.0
0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	1.0000000	0.0000000	0.0	0.0
0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	1.0000000	0.0	0.0
0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	1.0	0.0
0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0	1.0

15.107851 7.8761055 4.1060133 2.1405688 1.1159327
0.5817640 0.19957

1.0000000 0.0000000 0.0000000 0.0000000 0.0000000 0.0 0.0
0.0000000 1.0000000 0.0000000 0.0000000 0.0000000 0.0 0.0
0.0000000 0.0000000 1.0000000 0.0000000 0.0000000 0.0 0.0
0.0000000 0.0000000 0.0000000 1.0000000 0.0000000 0.0 0.0
0.0000000 0.0000000 0.0000000 0.0000000 1.0000000 0.0 0.0
0.0000000 0.0000000 0.0000000 0.0000000 0.0000000 1.0 0.0
0.0000000 0.0000000 0.0000000 0.0000000 0.0000000 0.0 1.0

8.3774603 4.6929685 2.6289535 1.4727131 0.8249990
0.28657

1.0000000 0.0000000 0.0000000 0.0000000 0.0 0.0
0.0000000 1.0000000 0.0000000 0.0000000 0.0 0.0
0.0000000 0.0000000 1.0000000 0.0000000 0.0 0.0
0.0000000 0.0000000 0.0000000 1.0000000 0.0 0.0
0.0000000 0.0000000 0.0000000 0.0000000 1.0 0.0
0.0000000 0.0000000 0.0000000 0.0000000 0.0 1.0

7.1115284 4.0718537 2.3314247 1.3349058 0.45046

1.0000000 0.0000000 0.0000000 0.0 0.0
0.0000000 1.0000000 0.0000000 0.0 0.0
0.0000000 0.0000000 1.0000000 0.0 0.0
0.0000000 0.0000000 0.0000000 1.0 0.0
0.0000000 0.0000000 0.0000000 0.0 1.0

6.0325318 3.0007400 1.4926470 0.56826

1.0000000 0.0000000 0.0 0.0
0.0000000 1.0000000 0.0 0.0

0.0000000 0.0000000 1.0 0.0
0.0000000 0.0000000 0.0 1.0

5.87400 2.94400 0.87987

1.0000000 0.0 0.0
0.0000000 1.0 0.0
0.0000000 0.0 1.0

3.593434 1.10825

1.0000000 0.0
0.0000000 1.0

Carbon aug-cc-pCV9Z

C:aug-cc-pCV9Z

CFOUR GENBAS entry

10

0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
19	18	16	14	12	10	8	6	4	2
23	25	16	14	12	10	8	6	4	2

8446504.1 1250293.5 281186.21 76849.358 24060.211 8442.7783 3250.9923
1339.5446 577.58611 254.84875 115.36232 53.751502 25.647907 12.549058
6.2703580 3.1941910 1.6309190 0.8030740 0.3971520 0.1986730 0.1016200
0.051768 0.023089

0.00000009 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.00000073 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.00000395 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.00001773 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.00006817 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0

0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0

5999.9031	3242.6451	723.89126	183.71640	59.399339	22.319230	9.3047030
4.1562730	1.9771390	0.9948880	0.5206980	0.2804700	0.1548220	0.0864380
0.0472720	0.0210060	0.0070160	460.902	261.507	148.375	84.185
47.765	27.101	15.377	8.724			

0.00000040	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.00000145	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.00002641	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.00023206	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.00135143	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.00573219	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.01857812	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.04987885	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.11069681	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.19157433	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

0.25745348 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.27047287 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.21062761 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.10476686 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.02198629 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.00039853 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0

10.111987 5.3534834 2.8342387 1.5005014 0.7943947 0.4205681 0.2226570
0.1178790 0.0510280 424.560 253.711 151.614 90.602 54.143
32.355 19.335

1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0

0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0

5.2477955 3.0530678 1.7762169 1.0333692 0.6011946 0.3497636 0.2034858
0.088373 282.765 152.085 81.798 43.995 23.663 12.727

1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0

5.9651818 3.4034629 1.9418619 1.1079386 0.6321396 0.3606703 0.162547
219.966 113.768 58.841 30.433 15.740

1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0

0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0

3.8661049 2.3249083 1.3980993 0.8407565 0.5055946 0.304043 163.672
79.150 38.276 18.510

1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0

3.9592251 2.2689852 1.3003287 0.7452030 0.359658 112.696 47.250
19.811

1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0

3.873875 1.844702 0.878430 0.423930 87.2302 34.0610

1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0
0.0 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0

0.0 0.0 0.0 1.0 0.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 1.0 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 1.0

3.459997 1.632668 0.787926 60.333

1.0 0.0 0.0 0.0
0.0 1.0 0.0 0.0
0.0 0.0 1.0 0.0
0.0 0.0 0.0 1.0

2.375420 1.146377

1.0 0.0
0.0 1.0

