

Supporting Information

Fast Screening of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons using Trapped Ion Mobility Spectrometry – Mass Spectrometry

Anthony Castellanos[†], Paolo Benigni[†], Diana Hernandez[†], John Daniel DeBord[†], Mark Ridgeway[‡], Melvin Park[‡], and Francisco Fernandez-Lima[†]

[†]*Department of Chemistry and Biochemistry, Florida International University, Miami, FL 33199, USA.*

[‡]*Bruker Daltonics, Inc., Billerica, Massachusetts 01821, USA*

Table S1. Relative abundance of the analyte in the PAHs in Soil standard as reported by manufacturer. PAHs in Soil. SQC017-40GMfg Lot 014529

Analyte	Concentration In Soil (ppb)	Units
Naphthalene 5005	906 ± 9	µg/Kg
Acenaphthene 5500	533 ± 5	µg/Kg
Acenaphthylene 5505	236 ± 2	µg/Kg
Anthracene 5555	827 ± 8	µg/Kg
Benzo(a)Anthracene 5575	176 ± 2	µg/Kg
Benzo(a)Pyrene 5580	260 ± 3	µg/Kg
Benzo(b)Fluoranthene 5585	151 ± 1	µg/Kg
Benzo(g,h,i)perylene 5590	461 ± 4	µg/Kg
Benzo(k)Fluoranthene 5600	262 ± 3	µg/Kg
Chrysene 5855	383 ± 4	µg/Kg
Dibenzo(a,h)Anthracene 5895	298 ± 3	µg/Kg
Fluoranthene 6265	613 ± 6	µg/Kg
Fluorene 6270	314 ± 3	µg/Kg
Indeno(1,2,3-cd) Pyrene 6315	238 ± 2	µg/Kg
Phenanthrene 6615	845 ± 8	µg/Kg
Pyrene 6665	341 ± 3	µg/Kg

Table S2. Experimental and theoretical ion neutral collision cross section for standard and extract PAHs obtained using TIMS-MS.

	m/z	Formula	Theoretical CCS [\AA^2]				Experimental		
			TM b3lyp/cc- pvtz (He)	TM b3lyp/6- 31+g(d) (N ₂)	TM b3lyp/6- 31++g(d,p) (N ₂)	TM b3lyp/cc- pvdz (N ₂)	TM b3lyp/cc- pvtz (N ₂)	CCS [\AA^2] TIMS	CCS [\AA^2] reported
Naphthalene	128.062	C ₁₀ H ₈	63.83	119.31	119.29	119.35	120.62	114 ±2	(115.8‡)
Acenaphthylene	152.062	C ₁₂ H ₈	68.80	123.67	123.83	123.57	123.83	122 ±2	
Acenaphthene	154.078	C ₁₂ H ₁₀	68.42	125.85	125.67	125.55	125.51	123 ±2	
Fluorene	166.078	C ₁₃ H ₁₀	74.83	132.31	132.27	132.21	132.21	125 ±3	
Anthracene	178.078	C ₁₄ H ₁₀	75.91	134.30	134.15	134.05	134.20	128 ±3	(128†, 129.6‡)
Phenanthrene	178.078	C ₁₄ H ₁₀	77.20	131.82	131.76	131.83	131.81	128 ±3	(129.1‡)
Fluoranthene	202.078	C ₁₆ H ₁₀	80.42	140.17	140.06	139.80	139.75	135 ±3	
Pyrene	202.078	C ₁₆ H ₁₀	81.31	136.68	136.76	136.51	136.70	134 ±6	(135†, 135‡)
1,2 Benzanthracene	228.093	C ₁₈ H ₁₂	89.47	149.15	149.32	149.26	148.98	143 ±9	
2,3 Benzanthracene	228.093	C ₁₈ H ₁₂	92.24	148.28	148.28	148.16	148.16	142 ±6	
Chrysene	228.093	C ₁₈ H ₁₂	88.02	150.61	150.57	150.56	150.68	142 ±8	
Triphenylene	228.093	C ₁₈ H ₁₂	86.69	146.76	146.84	146.38	146.68	141 ±7	(143.3‡)
Benzo(a)pyrene	252.093	C ₂₀ H ₁₂	91.97	151.19	151.21	151.63	151.58	146 ±7	
Benzo(e)pyrene	252.093	C ₂₀ H ₁₂	89.70	148.34	148.41	148.45	148.39	146 ±8	
Benzo(b)fluoranthene	252.093	C ₂₀ H ₁₂	92.86	152.04	152.06	152.09	151.92	152 ±3	
Benzo(k)fluoranthene	252.093	C ₂₀ H ₁₂	97.53	157.81	157.67	157.88	156.78	152 ±3	
Perylene	252.093	C ₂₀ H ₁₂	89.83	152.65	152.68	152.91	152.73	147 ±6	(147†)
Benzo(g,h,i)perylene	276.093	C ₂₂ H ₁₂	97.25	157.47	157.49	157.17	157.45	154 ±3	
Indeno(1,2,3-cd)pyrene	276.093	C ₂₂ H ₁₂	98.43	160.80	161.05	160.69	160.98	154 ±3	
1,2,3,4 Dibenzanthracene	278.109	C ₂₂ H ₁₄	100.71	162.98	162.86	162.67	162.88	158 ±5	
1,2:5,6 Dibenzanthracene	278.109	C ₂₂ H ₁₄	102.50	163.21	162.99	162.84	162.99	160 ±7	
Pentacene	278.109	C ₂₂ H ₁₄	108.27	169.45	169.44	169.50	169.50	158 ±6	(159†)
Rubrene	532.219	C ₄₂ H ₂₈	165.45	240.01	239.94	240.09	239.95	232 ±6	

Footnote: †reference ²¹, ‡ reference ¹⁹

Table S3. PAH geometry and partial charges (use for MOBCAL input files) at different DFT/B3LYP levels of theory.

Naphthalene							
Atom Orientation				Electrostatic Potential Charges			
Coordinates (x,y,z)			mass	b3lyp/6-31+G(d)	b3lyp/6-31++G(d,p)	b3lyp/cc-pvdz	b3lyp/cc-pvtz
0.000000	0.695498	2.450190	12	-0.038951	-0.069869	-0.058944	-0.064265
0.000000	1.400938	1.234971	12	-0.114876	-0.049845	-0.021976	-0.049169
0.000000	0.715353	0.000000	12	0.152010	0.080883	0.042854	0.080191
0.000000	-0.715353	0.000000	12	0.152010	0.080883	0.042854	0.080191
0.000000	-1.400938	1.234971	12	-0.114876	-0.049845	-0.021976	-0.049169
0.000000	-0.695498	2.450190	12	-0.038951	-0.069869	-0.058943	-0.064265
0.000000	2.485531	-1.241694	1	0.170471	0.162491	0.150744	0.160024
0.000000	1.240924	3.385968	1	0.157350	0.170148	0.160388	0.166899
0.000000	2.485531	1.241694	1	0.170471	0.160869	0.150076	0.158070
0.000000	1.400938	-1.234971	12	-0.114876	-0.059397	-0.026816	-0.059076
0.000000	-1.400938	-1.234971	12	-0.114876	-0.059397	-0.026816	-0.059076
0.000000	-2.485531	1.241694	1	0.170471	0.160869	0.150076	0.158070
0.000000	-1.240924	3.385968	1	0.157350	0.170148	0.160388	0.166899
0.000000	-0.695498	-2.450190	12	-0.038951	-0.064252	-0.056377	-0.057774
0.000000	0.695498	-2.450190	12	-0.038951	-0.064252	-0.056376	-0.057774
0.000000	-2.485531	-1.241694	1	0.170471	0.162491	0.150744	0.160024
0.000000	-1.240924	-3.385968	1	0.157350	0.168972	0.160051	0.165099
0.000000	1.240924	-3.385968	1	0.157350	0.168972	0.160051	0.165099

Acenaphthylene							
Atom Orientation				Electrostatic Potential Charges			
Coordinates (x,y,z)			Mass	b3lyp/6-31+G(d)	b3lyp/6-31++G(d,p)	b3lyp/cc-pvdz	b3lyp/cc-pvtz
0.000000	0.715947	-2.301098	12	-0.046704	-0.059014	-0.033746	-0.050406
0.000000	1.328768	-3.192764	1	0.184956	0.184844	0.172211	0.18118
0.000000	-1.328768	-3.192764	1	0.184956	0.184844	0.172211	0.18118
0.000000	-0.715947	-2.301098	12	-0.046704	-0.059014	-0.033746	-0.050406
0.000000	1.179086	-0.958357	12	0.034121	0.034717	0.017241	0.026398
0.000000	0.000000	-0.142030	12	0.215965	0.196254	0.159179	0.189215
0.000000	2.419985	-0.322917	12	-0.147334	-0.116479	-0.080705	-0.109691
0.000000	0.000000	1.253200	12	0.103159	0.089488	0.056932	0.091339
0.000000	-1.179086	-0.958357	12	0.034121	0.034717	0.017241	0.026398
0.000000	2.445342	1.086295	12	-0.071846	-0.08958	-0.093565	-0.081264
0.000000	3.347506	-0.882947	1	0.183477	0.18138	0.168408	0.17717
0.000000	1.284170	1.864151	12	-0.140684	-0.119056	-0.077527	-0.117519
0.000000	-1.284170	1.864151	12	-0.140684	-0.119056	-0.077527	-0.117519
0.000000	-2.419985	-0.322917	12	-0.147334	-0.116479	-0.080705	-0.109691
0.000000	3.404903	1.588594	1	0.165334	0.165423	0.158728	0.161735
0.000000	1.369823	2.945163	1	0.179118	0.174895	0.160898	0.172119
0.000000	-2.445342	1.086295	12	-0.071846	-0.08958	-0.093565	-0.081264
0.000000	-1.369823	2.945163	1	0.179118	0.174895	0.160898	0.172119
0.000000	-3.347506	-0.882947	1	0.183477	0.18138	0.168408	0.17717
0.000000	-3.404903	1.588594	1	0.165334	0.165423	0.158728	0.161735

Acenaphthene							
Atom Orientation			Electrostatic Potential Charges				
Coordinates (x,y,z)			Mass	b3lyp/6-31+G(d)	b3lyp/6-31++G(d,p)	b3lyp/cc-pvdz	b3lyp/cc-pvtz
0.779751	-2.329428	0.000022	12	-0.147553	-0.143591	-0.120477	-0.133656
1.192364	-2.845466	-0.873791	1	0.113737	0.114034	0.104577	0.111216
-1.192308	-2.845408	-0.873898	1	0.104880	0.105605	0.098881	0.104615
-0.779753	-2.329428	-0.000022	12	-0.108423	-0.106340	-0.094121	-0.104156
1.162886	-0.876577	0.000000	12	0.219649	0.205255	0.213194	0.185924
0.000000	-0.090311	0.000000	12	-0.044705	-0.028613	-0.066642	0.001218
2.412113	-0.228187	-0.000009	12	-0.213082	-0.206236	-0.191289	-0.194840
0.000000	1.320505	0.000000	12	0.112323	0.105194	0.076612	0.085017
-1.162886	-0.876577	-0.000001	12	0.209996	0.196560	0.203380	0.179922
2.442165	1.167849	-0.000007	12	-0.033683	-0.034128	-0.025452	-0.029735
3.337654	-0.791538	-0.000010	1	0.185466	0.183958	0.174180	0.179414
1.267047	1.947744	0.000016	12	-0.119090	-0.116026	-0.083148	-0.108621
-1.267046	1.947744	-0.000016	12	-0.121303	-0.117494	-0.086923	-0.109020
-2.412113	-0.228185	0.000009	12	-0.208594	-0.202675	-0.186440	-0.194242
3.400094	1.674138	-0.000015	1	0.166192	0.164764	0.154958	0.160592
1.343234	3.029271	0.000004	1	0.174000	0.173026	0.160239	0.169936
-2.442165	1.167851	0.000007	12	-0.031406	-0.032257	-0.021567	-0.027540
-1.343231	3.029271	-0.000004	1	0.175354	0.174012	0.161496	0.170159
-3.337654	-0.791536	0.000010	1	0.182976	0.181826	0.172021	0.178387
-3.400094	1.674141	0.000015	1	0.164649	0.163487	0.153065	0.159578
-1.192366	-2.845466	0.873791	1	0.104877	0.105603	0.098879	0.104613
1.192306	-2.845409	0.873898	1	0.113739	0.114036	0.104579	0.111218

Fluorene							
Atom Orientation				Electrostatic Potential Charges			
Coordinates (x,y,z)			Mass	b3lyp/6-31+G(d)	b3lyp/6-31++G(d,p)	b3lyp/cc-pvdz	b3lyp/cc-pvtz
0.000000	-1.239142	2.969901	12	-0.145618	-0.142141	-0.139703	-0.134769
-0.000004	-1.523608	1.625460	12	-0.109690	-0.109274	-0.083951	-0.110155
-0.000004	-0.441598	0.710639	12	0.047320	0.047715	0.034609	0.047555
0.000000	0.916078	1.174656	12	0.262693	0.261689	0.235166	0.276992
0.000005	1.183580	2.524295	12	-0.277883	-0.274216	-0.253899	-0.270024
0.000004	0.102601	3.418225	12	0.078687	0.078173	0.086424	0.075449
0.000000	-2.037885	3.697108	1	0.170425	0.168498	0.162526	0.164859
-0.000008	-2.545334	1.274301	1	0.163673	0.162736	0.153146	0.160210
0.000008	2.197171	2.899473	1	0.191266	0.189946	0.180098	0.187079
0.000008	0.297427	4.481970	1	0.141644	0.140468	0.133947	0.138868
0.000000	0.916078	1.174656	12	0.262693	0.261689	0.235166	0.276992
-0.000004	-0.441598	0.710639	12	0.047320	0.047715	0.034609	0.047556
0.000005	1.183580	2.524295	12	-0.277883	-0.274216	-0.253899	-0.270024
-0.000004	-1.523608	1.625460	12	-0.109690	-0.109274	-0.083951	-0.110155
0.000004	0.102601	3.418225	12	0.078687	0.078173	0.086424	0.075448
0.000008	2.197171	2.899473	1	0.191266	0.189946	0.180098	0.187079
0.000000	-1.239142	2.969901	12	-0.145618	-0.142141	-0.139703	-0.134769
-0.000008	-2.545334	1.274301	1	0.163673	0.162736	0.153146	0.160210
0.000008	0.297427	4.481970	1	0.141644	0.140468	0.133947	0.138868
0.000000	-2.037885	3.697108	1	0.170425	0.168498	0.162526	0.164859
-0.000002	1.862271	0.000000	12	-0.396514	-0.404155	-0.343909	-0.441661
-0.876752	2.514333	0.000000	1	0.175739	0.178482	0.163591	0.184766
0.876739	2.514344	0.000000	1	0.175740	0.178483	0.163591	0.184766

Anthracene							
Atom Orientation				Electrostatic Potential Charges			
Coordinates (x,y,z)			Mass	b3lyp/6-31+G(d)	b3lyp/6-31++G(d,p)	b3lyp/cc-pvdz	b3lyp/cc-pvtz
3.66536	0.70233	0.00000	12	-0.06693	-0.065708	-0.055428	-0.059597
2.46685	1.40631	0.00000	12	-0.14632	-0.144944	-0.108469	-0.145534
1.23136	0.71957	0.00000	12	0.12693	0.128618	0.080493	0.133524
1.23136	-0.71957	0.00000	12	0.12693	0.128618	0.080493	0.133524
2.46685	-1.40631	0.00000	12	-0.14632	-0.144944	-0.108469	-0.145533
3.66536	-0.70233	0.00000	12	-0.06693	-0.065708	-0.055428	-0.059597
0.00000	1.40441	0.00000	12	-0.15936	-0.163824	-0.094952	-0.172933
0.00000	-1.40441	0.00000	12	-0.15936	-0.163824	-0.094952	-0.172933
-1.23136	-0.71957	0.00000	12	0.10928	0.112075	0.069045	0.120515
-1.23136	0.71957	0.00000	12	0.10928	0.112075	0.069045	0.120515
-2.46685	1.40631	0.00000	12	-0.12761	-0.126855	-0.096911	-0.129976
-2.47169	2.49046	0.00000	1	0.16602	0.164969	0.151944	0.163235
-3.66536	0.70233	0.00000	12	-0.06959	-0.068821	-0.056655	-0.063554
-3.66536	-0.70233	0.00000	12	-0.06959	-0.068821	-0.056655	-0.063554
-2.46685	-1.40631	0.00000	12	-0.12761	-0.126855	-0.096911	-0.129976
0.00000	2.48991	0.00000	1	0.17012	0.170876	0.152536	0.169642
4.60573	1.24001	0.00000	1	0.16429	0.162764	0.152480	0.158964
2.47169	2.49046	0.00000	1	0.16994	0.168812	0.154317	0.166631
2.47169	-2.49046	0.00000	1	0.16994	0.168812	0.154317	0.166631
4.60573	-1.24001	0.00000	1	0.16429	0.162764	0.152480	0.158964
0.00000	-2.48991	0.00000	1	0.17012	0.170876	0.152536	0.169642
-4.60573	1.24001	0.00000	1	0.16322	0.162037	0.151600	0.159082
-4.60573	-1.24001	0.00000	1	0.16322	0.162037	0.151600	0.159082
-2.47169	-2.49046	0.00000	1	0.16602	0.164969	0.151944	0.163235

Phenanthrene							
Atom Orientation				Electrostatic Potential Charges			
Coordinates (x,y,z)			Mass	b3lyp/6-31+G(d)	b3lyp/6-31++G(d,p)	b3lyp/cc-pvdz	b3lyp/cc-pvtz
0.000000	3.578396	-0.281698	12	-0.081823	-0.079176	-0.085092	-0.080849
0.000000	2.851750	0.887106	12	-0.164108	-0.163036	-0.121101	-0.150307
0.000000	1.426625	0.858513	12	0.199966	0.200075	0.137459	0.178519
0.000000	0.731566	-0.395850	12	0.044502	0.043232	0.041819	0.050320
0.000000	1.498665	-1.558220	12	-0.162340	-0.160126	-0.142742	-0.162360
0.000000	2.896860	-1.504380	12	0.000510	0.001422	0.015277	0.008053
0.000000	0.698749	2.056675	12	-0.137346	-0.136406	-0.091850	-0.122776
0.000000	-0.731566	-0.395850	12	0.044502	0.043232	0.041819	0.050320
0.000000	-1.426625	0.858513	12	0.199966	0.200075	0.137459	0.178519
0.000000	-0.698749	2.056675	12	-0.137346	-0.136406	-0.091850	-0.122776
0.000000	-2.851750	0.887106	12	-0.164108	-0.163036	-0.121101	-0.150307
0.000000	-3.351002	1.846492	1	0.163157	0.161954	0.151928	0.158242
0.000000	-3.578396	-0.281698	12	-0.081823	-0.079176	-0.085092	-0.080849
0.000000	-2.896860	-1.504380	12	0.000510	0.001422	0.015277	0.008053
0.000000	-1.498665	-1.558220	12	-0.162340	-0.160126	-0.142742	-0.162360
0.000000	1.229996	2.999027	1	0.180338	0.179568	0.161651	0.173809
0.000000	4.658048	-0.259685	1	0.154044	0.152067	0.147753	0.150767
0.000000	3.351002	1.846492	1	0.163157	0.161954	0.151928	0.158242
0.000000	1.027502	-2.529139	1	0.160366	0.159145	0.150792	0.157586
0.000000	3.456344	-2.429564	1	0.142734	0.141281	0.134106	0.138996
0.000000	-1.229996	2.999027	1	0.180338	0.179568	0.161651	0.173809
0.000000	-4.658048	-0.259685	1	0.154044	0.152067	0.147753	0.150767
0.000000	-3.456344	-2.429564	1	0.142734	0.141281	0.134106	0.138996
0.000000	-1.027502	-2.529139	1	0.160366	0.159145	0.150792	0.157586

Fluoranthene							
Atom Orientation				Electrostatic Potential Charges			
Coordinates (x,y,z)			Mass	b3lyp/6-31+G(d)	b3lyp/6-31++G(d,p)	b3lyp/cc-pvdz	b3lyp/cc-pvtz
2.151554	2.441100	0.000000	12	-0.053618	-0.048559	-0.058826	-0.040184
2.930532	1.270900	0.000000	12	-0.123892	-0.126538	-0.078928	-0.127589
0.749564	2.410945	0.000000	12	-0.138793	-0.138916	-0.108978	-0.137394
2.302167	0.000028	0.000000	12	0.089722	0.094048	0.052384	0.104895
0.901285	-0.000030	0.000000	12	0.099129	0.096918	0.057401	0.072481
0.104057	1.165478	0.000000	12	0.097320	0.097282	0.098202	0.098124
0.104173	-1.165551	0.000000	12	0.097131	0.097091	0.098002	0.097937
0.749767	-2.410931	0.000000	12	-0.138721	-0.138842	-0.108900	-0.137319
2.151800	-2.440997	0.000000	12	-0.053631	-0.048572	-0.058839	-0.040201
2.930676	-1.270786	0.000000	12	-0.124098	-0.126743	-0.079129	-0.127798
0.193206	3.340723	0.000000	1	0.170142	0.169250	0.158421	0.166594
0.193496	-3.340762	0.000000	1	0.170124	0.169231	0.158401	0.166575
2.654578	-3.400617	0.000000	1	0.153137	0.150853	0.146586	0.147975
4.012190	-1.347048	0.000000	1	0.170467	0.170207	0.155544	0.167723
-1.292868	-0.712990	0.000000	12	-0.038357	-0.038433	-0.044003	-0.028482
-1.292888	0.712884	0.000000	12	-0.038439	-0.038519	-0.044103	-0.028553
-2.488679	-1.414641	0.000000	12	-0.043353	-0.042552	-0.024609	-0.047620
-2.488750	1.414561	0.000000	12	-0.043206	-0.042405	-0.024459	-0.047480
-3.708996	-0.691341	0.000000	12	-0.103428	-0.101265	-0.090799	-0.095029
-2.505270	-2.498357	0.000000	1	0.154058	0.153207	0.141789	0.150978
-3.709028	0.691284	0.000000	12	-0.103741	-0.101577	-0.091105	-0.095337
-2.505319	2.498277	0.000000	1	0.154043	0.153192	0.141773	0.150964
-4.646475	-1.233372	0.000000	1	0.162188	0.160278	0.151011	0.156510
-4.646523	1.233284	0.000000	1	0.162226	0.160316	0.151047	0.156546
4.012039	1.347275	0.000000	1	0.170448	0.170189	0.155527	0.167705
2.654292	3.400741	0.000000	1	0.153141	0.150857	0.146592	0.147979

Pyrene							
Atom Orientation				Electrostatic Potential Charges			
Coordinates (x,y,z)			Mass	b3lyp/6-31+G(d)	b3lyp/6-31++G(d,p)	b3lyp/cc-pvdz	b3lyp/cc-pvtz
0.000000	-1.205595	2.841608	12	-0.121582	-0.156997	-0.102269	-0.150356
0.000000	1.232551	1.419803	12	0.148992	0.191130	0.135590	0.182494
0.000000	1.205595	2.841608	12	-0.121582	-0.156997	-0.102269	-0.150356
0.000000	0.000000	3.537325	12	-0.082477	-0.041125	-0.065894	-0.038941
0.000000	-2.144686	3.384033	1	0.163161	0.165857	0.152058	0.162770
0.000000	2.144686	3.384033	1	0.163161	0.165857	0.152058	0.162770
0.000000	0.000000	4.620015	1	0.158388	0.148408	0.146149	0.146600
0.000000	0.000000	0.707815	12	0.001517	-0.023463	-0.012305	-0.023569
0.000000	0.000000	-0.707815	12	0.001517	-0.023463	-0.012305	-0.023569
0.000000	-1.232551	1.419803	12	0.148992	0.191130	0.135590	0.182494
0.000000	-1.232551	-1.419803	12	0.148992	0.191130	0.135590	0.182494
0.000000	-2.448634	0.692064	12	-0.153958	-0.171310	-0.132948	-0.161210
0.000000	-2.448634	-0.692064	12	-0.153958	-0.171310	-0.132948	-0.161210
0.000000	-3.388518	1.232375	1	0.174674	0.179410	0.163595	0.174258
0.000000	-3.388518	-1.232375	1	0.174674	0.179410	0.163595	0.174258
0.000000	2.448634	0.692064	12	-0.153958	-0.171310	-0.132948	-0.161210
0.000000	2.448634	-0.692064	12	-0.153958	-0.171310	-0.132948	-0.161210
0.000000	3.388518	1.232375	1	0.174674	0.179410	0.163595	0.174258
0.000000	3.388518	-1.232375	1	0.174674	0.179410	0.163595	0.174258
0.000000	1.232551	-1.419803	12	0.148992	0.191130	0.135590	0.182494
0.000000	1.205595	-2.841608	12	-0.121582	-0.156997	-0.102269	-0.150356
0.000000	0.000000	-3.537325	12	-0.082477	-0.041125	-0.065894	-0.038941
0.000000	2.144686	-3.384033	1	0.163161	0.165857	0.152058	0.162770
0.000000	-1.205595	-2.841608	12	-0.121582	-0.156997	-0.102269	-0.150356
0.000000	0.000000	-4.620015	1	0.158388	0.148408	0.146149	0.146600
0.000000	-2.144686	-3.384033	1	0.163161	0.165857	0.152058	0.162770

1,2-Benzanthracene							
Atom Orientation				Electrostatic Potential Charges			
Coordinates (x,y,z)			Mass	b3lyp/6-31+G(d)	b3lyp/6-31++G(d,p)	b3lyp/cc-pvdz	b3lyp/cc-pvtz
4.765370	-0.015140	0.000000	12	-0.094566	-0.092515	-0.080066	-0.084206
3.805658	0.988527	0.000000	12	-0.148681	-0.147278	-0.108969	-0.147528
2.428530	0.662611	0.000000	12	0.137456	0.139372	0.085272	0.143313
2.031904	-0.714595	0.000000	12	0.095030	0.096516	0.058303	0.106571
3.027834	-1.711451	0.000000	12	-0.153390	-0.151525	-0.116402	-0.152477
4.376277	-1.363814	0.000000	12	-0.049549	-0.050190	-0.041939	-0.049741
1.422666	1.645534	0.000000	12	-0.160015	-0.164950	-0.099602	-0.175807
0.651224	-1.037368	0.000000	12	-0.117113	-0.118337	-0.069931	-0.128848
-0.351511	-0.065447	0.000000	12	-0.016911	-0.019222	-0.024024	-0.020308
0.052493	1.314450	0.000000	12	0.127263	0.132380	0.090553	0.145033
-0.927144	2.339731	0.000000	12	-0.160342	-0.160261	-0.130942	-0.163687
-0.607283	3.375382	0.000000	1	0.173022	0.172135	0.156871	0.170177
-2.270385	2.029601	0.000000	12	-0.122644	-0.122160	-0.084451	-0.113737
-2.722935	0.686609	0.000000	12	0.135530	0.134775	0.098367	0.125312
-1.768228	-0.390487	0.000000	12	0.142297	0.142674	0.114235	0.151720
1.705780	2.693355	0.000000	1	0.161491	0.162214	0.145741	0.161395
5.817378	0.242471	0.000000	1	0.164625	0.162995	0.151836	0.158900
4.104224	2.030852	0.000000	1	0.168719	0.167455	0.152150	0.164874
2.737249	-2.756024	0.000000	1	0.164564	0.163365	0.148700	0.161608
5.130906	-2.141089	0.000000	1	0.156080	0.155106	0.145357	0.153093
0.389134	-2.088096	0.000000	1	0.150384	0.150368	0.137807	0.149603
-3.006626	2.825741	0.000000	1	0.168667	0.167945	0.151936	0.164153
-4.113174	0.400170	0.000000	12	-0.195237	-0.193043	-0.158887	-0.187650
-4.559348	-0.900204	0.000000	12	-0.094786	-0.092302	-0.083122	-0.083420
-4.815340	1.225847	0.000000	1	0.167716	0.166101	0.153010	0.162002
-2.263910	-1.709583	0.000000	12	-0.249212	-0.245737	-0.211804	-0.247268
-3.624358	-1.959153	0.000000	12	-0.028747	-0.029669	-0.018987	-0.028428
-5.620318	-1.117516	0.000000	1	0.160736	0.158894	0.148595	0.154365
-1.585533	-2.551951	0.000000	1	0.169449	0.167646	0.153626	0.166093
-3.978097	-2.983414	0.000000	1	0.148165	0.147247	0.136766	0.144889

2,3-Benzanthracene							
Atom Orientation				Electrostatic Potential Charges			
Coordinates (x,y,z)			Mass	b3lyp/6-31+G(d)	b3lyp/6-31++G(d,p)	b3lyp/cc-pvdz	b3lyp/cc-pvtz
0.000000	4.889490	0.707115	12	-0.068502	-0.067013	-0.056210	-0.061539
0.000000	3.699122	1.409913	12	-0.175644	-0.174559	-0.146619	-0.175427
0.000000	2.458000	0.722471	12	0.174601	0.175036	0.127140	0.174325
0.000000	2.458000	-0.722471	12	0.174601	0.175036	0.127140	0.174325
0.000000	3.699122	-1.409913	12	-0.175644	-0.174559	-0.146619	-0.175427
0.000000	4.889490	-0.707115	12	-0.068502	-0.067013	-0.056210	-0.061539
0.000000	1.229196	1.408423	12	-0.261375	-0.263720	-0.182204	-0.259679
0.000000	1.229196	-1.408423	12	-0.261375	-0.263720	-0.182204	-0.259679
0.000000	0.000000	-0.725437	12	0.161539	0.164021	0.104041	0.163783
0.000000	0.000000	0.725437	12	0.161539	0.164021	0.104041	0.163783
0.000000	-1.229196	1.408423	12	-0.261375	-0.263720	-0.182204	-0.259679
0.000000	-1.230955	2.495714	1	0.187552	0.188073	0.164515	0.184032
0.000000	-2.458000	0.722471	12	0.174601	0.175036	0.127140	0.174325
0.000000	-2.458000	-0.722471	12	0.174601	0.175036	0.127140	0.174325
0.000000	-1.229196	-1.408423	12	-0.261375	-0.263720	-0.182204	-0.259679
0.000000	1.230955	2.495714	1	0.187552	0.188073	0.164515	0.184032
0.000000	5.834163	1.241768	1	0.152811	0.151384	0.142774	0.148783
0.000000	3.701751	2.496164	1	0.159788	0.158788	0.148583	0.157613
0.000000	3.701751	-2.496164	1	0.159788	0.158788	0.148583	0.157613
0.000000	5.834163	-1.241768	1	0.152811	0.151384	0.142774	0.148783
0.000000	1.230955	-2.495714	1	0.187552	0.188073	0.164515	0.184032
0.000000	-1.230955	-2.495714	1	0.187552	0.188073	0.164515	0.184032
0.000000	-3.699122	1.409913	12	-0.175644	-0.174559	-0.146619	-0.175427
0.000000	-4.889490	0.707115	12	-0.068502	-0.067013	-0.056210	-0.061539
0.000000	-3.701751	2.496164	1	0.159788	0.158788	0.148583	0.157613
0.000000	-3.699122	-1.409913	12	-0.175644	-0.174559	-0.146619	-0.175427
0.000000	-4.889490	-0.707115	12	-0.068502	-0.067013	-0.056210	-0.061539
0.000000	-5.834163	1.241768	1	0.152811	0.151384	0.142774	0.148783
0.000000	-3.701751	-2.496164	1	0.159788	0.158788	0.148583	0.157613
0.000000	-5.834163	-1.241768	1	0.152811	0.151384	0.142774	0.148783

Chrysene							
Atom Orientation				Electrostatic Potential Charges			
Coordinates (x,y,z)			Mass	b3lyp/6-31+G(d)	b3lyp/6-31++G(d,p)	b3lyp/cc-pvdz	b3lyp/cc-pvtz
-0.661378	3.923861	0.000000	12	-0.120373	-0.120777	-0.091304	-0.122678
1.794618	2.594647	0.000000	12	-0.145431	-0.144431	-0.114793	-0.151844
1.741054	3.989607	0.000000	12	-0.068822	-0.066515	-0.055860	-0.057257
0.513905	4.660058	0.000000	12	-0.108115	-0.105680	-0.093536	-0.097901
-1.622945	4.424745	0.000000	1	0.156495	0.155677	0.143754	0.153597
2.768476	2.124518	0.000000	1	0.153339	0.152088	0.141042	0.151148
2.665594	4.554457	0.000000	1	0.158817	0.156957	0.146164	0.152373
0.482340	5.742433	0.000000	1	0.165296	0.163418	0.152503	0.158873
-0.626314	2.510150	0.000000	12	0.081244	0.083190	0.046787	0.083509
-1.826515	1.758410	0.000000	12	-0.062349	-0.062811	-0.029900	-0.061200
0.622297	1.821058	0.000000	12	0.061559	0.060614	0.036381	0.067759
-1.823185	0.372771	0.000000	12	-0.191163	-0.189649	-0.164731	-0.187374
-2.773942	2.286613	0.000000	1	0.157533	0.157058	0.143048	0.154416
0.626314	0.361792	0.000000	12	0.077103	0.076888	0.071920	0.075171
-0.626314	-0.361792	0.000000	12	0.103725	0.103262	0.092495	0.099992
-2.775492	-0.138249	0.000000	1	0.169963	0.169103	0.156640	0.167067
-0.622297	-1.821058	0.000000	12	0.063512	0.062595	0.039062	0.070434
0.626314	-2.510150	0.000000	12	0.085380	0.086046	0.048417	0.081470
1.823185	-0.372771	0.000000	12	-0.175730	-0.173497	-0.151454	-0.170566
1.826515	-1.758410	0.000000	12	-0.071368	-0.071609	-0.036868	-0.067648
2.775492	0.138249	0.000000	1	0.167638	0.166251	0.154351	0.163229
2.773942	-2.286613	0.000000	1	0.159934	0.159475	0.144827	0.156379
-1.794618	-2.594647	0.000000	12	-0.167742	-0.165352	-0.132664	-0.167919
-1.741054	-3.989607	0.000000	12	-0.046507	-0.046271	-0.039479	-0.044288
-2.768476	-2.124518	0.000000	1	0.158213	0.156789	0.145261	0.155016
0.661378	-3.923861	0.000000	12	-0.129534	-0.127974	-0.097242	-0.124215
-0.513905	-4.660058	0.000000	12	-0.108498	-0.106462	-0.093478	-0.098960
-2.665594	-4.554457	0.000000	1	0.152478	0.151251	0.141543	0.148945
1.622945	-4.424745	0.000000	1	0.159094	0.157709	0.145490	0.153885
-0.482340	-5.742433	0.000000	1	0.164310	0.162657	0.151623	0.158589

Triphenylene							
Atom Orientation				Electrostatic Potential Charges			
Coordinates (x,y,z)			Mass	b3lyp/6-31+G(d)	b3lyp/6-31++G(d,p)	b3lyp/cc-pvdz	b3lyp/cc-pvtz
-1.273092	-0.670520	0.000014	12	0.068220	0.069755	0.057524	0.076491
-0.048365	-1.439474	0.000032	12	0.142054	0.135152	0.120133	0.133372
1.241470	-0.753819	0.000004	12	-0.000679	0.004151	-0.009315	0.006606
1.291718	0.663677	-0.000019	12	0.009009	0.008377	-0.007169	0.008974
0.056572	1.438144	-0.000020	12	0.141833	0.135586	0.121611	0.134414
-1.222589	0.757302	-0.000015	12	0.097113	0.100632	0.084549	0.100070
-2.417524	1.545790	-0.000032	12	-0.177275	-0.177139	-0.151064	-0.175202
-2.372677	2.914077	-0.000046	12	-0.099379	-0.098798	-0.089283	-0.098597
-3.382223	1.062257	-0.000035	1	0.165651	0.165031	0.154553	0.162435
0.058152	2.842559	-0.000029	12	-0.237513	-0.230327	-0.204344	-0.229952
-1.120120	3.570264	-0.000041	12	0.013298	0.013739	0.021669	0.022774
-3.288067	3.492314	-0.000059	1	0.161581	0.160558	0.150710	0.158457
0.990557	3.387234	-0.000025	1	0.171311	0.167835	0.157530	0.165267
-1.079591	4.653185	-0.000048	1	0.149084	0.147798	0.138263	0.143576
2.552439	1.294007	-0.000045	12	-0.101222	-0.100288	-0.074466	-0.101807
2.452387	-1.470312	-0.000005	12	-0.105540	-0.107554	-0.081311	-0.107986
3.740175	0.563577	-0.000050	12	-0.098629	-0.096662	-0.085805	-0.089398
2.622907	2.372191	-0.000065	1	0.149635	0.149556	0.138645	0.147651
3.690073	-0.824944	-0.000031	12	-0.082485	-0.080101	-0.071402	-0.074884
2.446986	-2.550812	0.000005	1	0.150487	0.151188	0.139794	0.148282
4.690690	1.082393	-0.000071	1	0.161264	0.159367	0.148999	0.155056
4.600948	-1.410714	-0.000037	1	0.158644	0.156841	0.147073	0.153067
-2.522054	-1.370968	0.000033	12	-0.149444	-0.148925	-0.125835	-0.156175
-0.146657	-2.838394	0.000078	12	-0.225817	-0.219317	-0.194326	-0.222144
-2.576697	-2.739865	0.000073	12	-0.120578	-0.118745	-0.107216	-0.111851
-3.449012	-0.818631	0.000018	1	0.161986	0.160539	0.150597	0.160191
-1.375733	-3.482011	0.000097	12	0.015315	0.016033	0.023272	0.024590
0.744457	-3.448454	0.000101	1	0.167545	0.164006	0.154446	0.163176
-3.531447	-3.250377	0.000087	1	0.164754	0.163381	0.153263	0.159853
-1.411070	-4.565130	0.000132	1	0.149776	0.148331	0.138905	0.143695

Benzo(a)pyrene							
Atom Orientation				Electrostatic Potential Charges			
Coordinates (x,y,z)			Mass	b3lyp/6-31+G(d)	b3lyp/6-31++G(d,p)	b3lyp/cc-pvdz	b3lyp/cc-pvtz
4.796228	0.159178	0.000000	12	-0.124474	-0.115664	-0.105783	-0.110029
3.845803	1.152244	-0.000001	12	-0.146557	-0.153634	-0.103013	-0.145555
2.457279	0.842092	-0.000001	12	0.235519	0.191258	0.061822	0.137478
2.042089	-0.531413	0.000000	12	-0.019517	-0.008961	0.052175	0.057250
3.054702	-1.527802	0.000003	12	-0.173819	-0.171379	-0.143668	-0.170686
4.392496	-1.196161	0.000003	12	-0.031961	-0.031443	-0.032807	-0.037905
1.486002	1.870081	-0.000002	12	-0.314309	-0.254521	-0.106370	-0.192645
0.631761	-0.835902	-0.000001	12	0.151634	0.153083	0.077919	0.090158
-0.313418	0.223213	0.000000	12	-0.107962	-0.088734	-0.050787	-0.071998
0.129930	1.595607	-0.000001	12	0.249729	0.225905	0.123312	0.185778
-0.858126	2.646164	0.000000	12	-0.161176	-0.166286	-0.150314	-0.181156
-0.507538	3.675483	0.000000	1	0.167909	0.171534	0.159049	0.171391
-2.186442	2.370175	0.000000	12	-0.178704	-0.195879	-0.086075	-0.114602
-2.668383	1.011161	0.000000	12	0.144324	0.187016	0.054615	0.086813
-1.716004	-0.056261	0.000000	12	0.078681	0.036392	0.075574	0.088852
1.821662	2.905141	-0.000002	1	0.192514	0.174953	0.145515	0.162460
5.853349	0.410309	0.000000	1	0.162298	0.160397	0.152057	0.159237
4.140936	2.198944	-0.000002	1	0.153017	0.162252	0.146182	0.159444
2.780428	-2.576971	0.000005	1	0.155963	0.155197	0.143102	0.151837
5.142528	-1.982390	0.000005	1	0.148769	0.146749	0.141064	0.147854
-2.917696	3.174940	0.000000	1	0.178316	0.181767	0.149844	0.161643
0.133166	-2.178530	-0.000002	12	-0.148402	-0.166400	-0.139450	-0.161902
-2.177727	-1.405779	-0.000001	12	0.123826	0.161644	0.022356	0.062525
-1.204925	-2.451790	-0.000002	12	-0.190002	-0.179001	-0.085041	-0.111723
0.831731	-3.007579	-0.000004	1	0.162113	0.166422	0.150863	0.161236
-1.550244	-3.482930	-0.000004	1	0.181592	0.175453	0.148163	0.158462
-3.563988	-1.662845	0.000000	12	-0.123536	-0.163397	-0.045502	-0.092865
-4.477369	-0.618056	0.000000	12	-0.081955	-0.053199	-0.123917	-0.107087
-3.909184	-2.693882	0.000000	1	0.155264	0.162590	0.141003	0.153730
-4.034264	0.708972	0.000002	12	-0.155862	-0.176692	-0.075488	-0.116505
-5.543184	-0.829734	0.000002	1	0.153152	0.148992	0.156662	0.160453
-4.755645	1.522578	0.000002	1	0.163615	0.163589	0.146936	0.158057

Benzo(e)pyrene							
Atom Orientation				Electrostatic Potential Charges			
Coordinates (x,y,z)			Mass	b3lyp/6-31+G(d)	b3lyp/6-31++G(d,p)	b3lyp/cc-pvdz	b3lyp/cc-pvtz
0.918616	3.541029	0.000000	12	-0.154646	-0.149487	-0.143835	-0.134139
2.110852	2.836303	0.000000	12	-0.089873	-0.091825	-0.057209	-0.093323
2.105896	1.415616	0.000000	12	0.100795	0.104958	0.071258	0.107947
0.863876	0.713162	0.000000	12	0.027303	0.024055	0.016884	0.017701
-0.357442	1.435676	0.000000	12	-0.007390	-0.003971	-0.002173	0.006681
-0.293555	2.853643	0.000000	12	-0.031797	-0.034744	-0.015549	-0.048091
3.320897	0.690883	0.000000	12	-0.129702	-0.130033	-0.099693	-0.126368
0.863876	-0.713162	0.000000	12	0.027302	0.024055	0.016884	0.017701
2.105896	-1.415616	0.000000	12	0.100795	0.104958	0.071258	0.107947
3.320897	-0.690883	0.000000	12	-0.129702	-0.130033	-0.099693	-0.126368
2.110852	-2.836303	0.000000	12	-0.089873	-0.091826	-0.057209	-0.093323
3.060287	-3.359621	0.000000	1	0.159779	0.159054	0.146078	0.155828
0.918616	-3.541029	0.000000	12	-0.154646	-0.149487	-0.143835	-0.134139
-0.293555	-2.853643	0.000000	12	-0.031797	-0.034744	-0.015549	-0.048091
-0.357442	-1.435676	0.000000	12	-0.007390	-0.003971	-0.002172	0.006681
4.259086	1.233935	0.000000	1	0.166986	0.166368	0.151994	0.162772
0.922347	4.623677	0.000000	1	0.171347	0.169326	0.159399	0.164444
3.060287	3.359621	0.000000	1	0.159779	0.159054	0.146078	0.155828
-1.205294	3.433856	0.000000	1	0.140781	0.140459	0.132193	0.141437
4.259086	-1.233935	0.000000	1	0.166986	0.166368	0.151994	0.162772
0.922347	-4.623677	0.000000	1	0.171347	0.169326	0.159399	0.164444
-1.205294	-3.433856	0.000000	1	0.140781	0.140459	0.132193	0.141437
-1.616263	-0.720153	0.000000	12	0.105849	0.104168	0.083335	0.104144
-1.616263	0.720153	0.000000	12	0.105849	0.104168	0.083336	0.104144
-2.860371	1.395653	0.000000	12	-0.211586	-0.207700	-0.181450	-0.206729
-4.051445	0.704932	0.000000	12	-0.064806	-0.064380	-0.053187	-0.060168
-2.892828	2.475424	0.000000	1	0.163785	0.161773	0.150439	0.158647
-2.860371	-1.395653	0.000000	12	-0.211586	-0.207699	-0.181450	-0.206729
-4.051445	-0.704933	0.000000	12	-0.064806	-0.064381	-0.053187	-0.060168
-4.989961	1.245777	0.000000	1	0.153175	0.151979	0.141515	0.149216
-2.892828	-2.475424	0.000000	1	0.163786	0.161774	0.150439	0.158647
-4.989961	-1.245779	0.000000	1	0.153175	0.151979	0.141515	0.149216

Benzo(b)fluoranthene							
Atom Orientation				Electrostatic Potential Charges			
Coordinates (x,y,z)			Mass	b3lyp/6-31+G(d)	b3lyp/6-31++G(d,p)	b3lyp/cc-pvdz	b3lyp/cc-pvtz
-4.360667	-1.644471	0.000000	12	-0.147232	-0.145233	-0.134480	-0.136029
-3.058663	-2.091313	0.000000	12	-0.076495	-0.077721	-0.052668	-0.093147
-1.963847	-1.174449	0.000000	12	-0.020687	-0.013328	-0.028023	0.028588
-2.231907	0.248739	0.000000	12	0.227948	0.221301	0.176102	0.183903
-3.561786	0.662107	0.000000	12	-0.216305	-0.212000	-0.175736	-0.198066
-4.610443	-0.263513	0.000000	12	0.005736	0.006467	0.014705	0.008459
-0.647054	-1.677001	0.000000	12	-0.017066	-0.021499	-0.018421	-0.057361
-1.105231	1.179013	0.000000	12	-0.121898	-0.118130	-0.081995	-0.077430
0.169825	0.613264	0.000000	12	0.258466	0.257755	0.155499	0.211899
0.435083	-0.785803	0.000000	12	-0.125218	-0.124318	-0.033018	-0.077615
1.376956	1.345556	0.000000	12	-0.181971	-0.182486	-0.110995	-0.146356
1.310157	2.724113	0.000000	12	-0.060628	-0.060613	-0.065762	-0.076826
0.031042	3.325435	0.000001	12	-0.105114	-0.100439	-0.082076	-0.078075
-1.151943	2.587217	0.000000	12	-0.113773	-0.116052	-0.101885	-0.138236
-0.491854	-2.750462	0.000000	1	0.146420	0.147102	0.139035	0.149476
-5.184298	-2.346861	0.000000	1	0.166736	0.165186	0.155450	0.161743
-2.841822	-3.153570	0.000000	1	0.150919	0.150144	0.138900	0.151029
-3.799909	1.718033	0.000000	1	0.169156	0.167369	0.153830	0.162024
-5.632474	0.097110	0.000000	1	0.151879	0.150453	0.140356	0.146904
2.196816	3.346395	0.000000	1	0.155152	0.154285	0.145847	0.153309
-0.033371	4.407233	0.000001	1	0.158634	0.156403	0.145771	0.150498
-2.095971	3.116898	0.000001	1	0.153464	0.153112	0.142410	0.154792
2.468575	0.342819	0.000000	12	0.136418	0.136417	0.101052	0.123046
1.871985	-0.957288	0.000000	12	0.141806	0.141715	0.066083	0.118964
3.839693	0.468098	0.000000	12	-0.162188	-0.161175	-0.133101	-0.153358
2.661942	-2.110215	0.000001	12	-0.123341	-0.122792	-0.081765	-0.116154
4.631565	-0.706252	0.000000	12	-0.023241	-0.021492	-0.013815	-0.020232
4.319691	1.439484	0.000000	1	0.165396	0.164332	0.152127	0.160003
4.054249	-1.971805	0.000000	12	-0.154846	-0.151545	-0.140720	-0.143908
2.211419	-3.096062	0.000001	1	0.159054	0.158053	0.143712	0.154797
5.710959	-0.611093	0.000000	1	0.142267	0.140451	0.133714	0.138615
4.683632	-2.852613	0.000000	1	0.160551	0.158278	0.149867	0.154744

Benzo(k)fluoranthene							
Atom Orientation				Electrostatic Potential Charges			
Coordinates (x,y,z)			Mass	b3lyp/6-31+G(d)	b3lyp/6-31++G(d,p)	b3lyp/cc-pvdz	b3lyp/cc-pvtz
0.000000	2.435910	3.273551	12	-0.110455	-0.085483	-0.094517	-0.072489
0.000000	1.272549	4.045102	12	-0.126911	-0.144054	-0.096401	-0.150578
0.000000	2.407246	1.867231	12	-0.097480	-0.129897	-0.091865	-0.130109
0.000000	0.000000	3.419236	12	0.100168	0.091488	0.048101	0.110847
0.000000	0.000000	2.017545	12	0.115130	0.142156	0.116489	0.112406
0.000000	1.169349	1.224059	12	-0.013349	0.043746	0.024220	0.043871
0.000000	-1.169349	1.224059	12	-0.013349	0.043745	0.024219	0.043871
0.000000	-2.407246	1.867231	12	-0.097480	-0.129897	-0.091864	-0.130109
0.000000	-2.435910	3.273551	12	-0.110455	-0.085484	-0.094518	-0.072489
0.000000	-1.272549	4.045102	12	-0.126911	-0.144054	-0.096401	-0.150579
0.000000	3.338434	1.312810	1	0.157264	0.160641	0.147509	0.158576
0.000000	-3.338434	1.312810	1	0.157264	0.160641	0.147509	0.158576
0.000000	-3.396006	3.775253	1	0.156618	0.149800	0.144697	0.145902
0.000000	-1.345981	5.126815	1	0.162377	0.166080	0.151199	0.164379
0.000000	-0.721617	-0.163977	12	0.069314	-0.023375	-0.016261	-0.004954
0.000000	0.721617	-0.163977	12	0.069314	-0.023375	-0.016261	-0.004953
0.000000	-1.419888	-1.354378	12	-0.221112	-0.102795	-0.067710	-0.122662
0.000000	1.419888	-1.354378	12	-0.221112	-0.102795	-0.067711	-0.122662
0.000000	-0.716225	-2.595672	12	0.156412	0.088022	0.049623	0.098719
0.000000	-2.504711	-1.366889	1	0.181288	0.157888	0.144870	0.158209
0.000000	0.716225	-2.595672	12	0.156412	0.088021	0.049623	0.098719
0.000000	2.504711	-1.366889	1	0.181288	0.157888	0.144870	0.158209
0.000000	-1.398524	-3.825520	12	-0.147554	-0.121179	-0.089094	-0.124563
0.000000	1.398524	-3.825520	12	-0.147554	-0.121179	-0.089094	-0.124563
0.000000	-0.698041	-5.030544	12	-0.081824	-0.087772	-0.076277	-0.083144
0.000000	-2.482836	-3.829265	1	0.153711	0.152869	0.139913	0.151620
0.000000	0.698041	-5.030544	12	-0.081824	-0.087773	-0.076278	-0.083144
0.000000	2.482836	-3.829265	1	0.153711	0.152869	0.139913	0.151620
0.000000	-1.240139	-5.968174	1	0.154052	0.158690	0.147801	0.155595
0.000000	1.240139	-5.968174	1	0.154052	0.158690	0.147801	0.155595
0.000000	1.345981	5.126815	1	0.162377	0.166080	0.151199	0.164379
0.000000	3.396006	3.775253	1	0.156618	0.149800	0.144697	0.145902

Perylene							
Atom Orientation				Electrostatic Potential Charges			
Coordinates (x,y,z)			Mass	b3lyp/6-31+G(d)	b3lyp/6-31++G(d,p)	b3lyp/cc-pvdz	b3lyp/cc-pvtz
0.738169	1.249810	0.000000	12	-0.002022	-0.009478	0.009164	0.020930
-0.738171	1.249819	0.000000	12	-0.006527	0.007243	-0.004032	0.009207
-1.439330	-0.000011	0.000000	12	0.121748	0.104796	0.089078	0.075822
-0.738179	-1.249821	0.000000	12	-0.002518	0.007244	-0.004031	0.009207
0.738171	-1.249820	0.000000	12	-0.006005	-0.009478	0.009164	0.020930
1.439330	0.000001	0.000000	12	0.104725	0.105815	0.087772	0.075328
1.479612	-2.427539	0.000010	12	-0.085789	-0.087539	-0.082497	-0.109376
2.874760	0.000002	0.000000	12	0.155117	0.160962	0.075307	0.151190
2.885922	-2.422668	0.000020	12	-0.086937	-0.082204	-0.080234	-0.062071
0.977182	-3.388099	0.000020	1	0.143136	0.143025	0.135978	0.142455
3.575551	-1.232477	0.000010	12	-0.164057	-0.167639	-0.102746	-0.159390
3.421382	-3.368167	0.000020	1	0.151485	0.150379	0.142282	0.144180
4.662511	-1.217906	0.000010	1	0.167628	0.167359	0.148646	0.162032
3.575539	1.232483	-0.000010	12	-0.165293	-0.167639	-0.102746	-0.159391
2.885898	2.422682	-0.000020	12	-0.085473	-0.082204	-0.080234	-0.062071
4.662499	1.217924	-0.000010	1	0.167874	0.167359	0.148646	0.162032
1.479598	2.427541	-0.000020	12	-0.088706	-0.087538	-0.082497	-0.109377
3.421357	3.368183	-0.000030	1	0.151350	0.150379	0.142282	0.144180
0.977147	3.388091	-0.000020	1	0.143750	0.143025	0.135978	0.142455
-1.479608	-2.427551	-0.000010	12	-0.090333	-0.098499	-0.073815	-0.102438
-2.874760	-0.000003	0.000000	12	0.120602	0.137207	0.092228	0.170323
-2.885908	-2.422673	-0.000020	12	-0.085085	-0.075959	-0.085339	-0.064828
-0.977168	-3.388091	-0.000020	1	0.140372	0.141684	0.136987	0.143241
-3.575539	-1.232473	-0.000010	12	-0.146402	-0.154655	-0.111666	-0.171048
-3.421378	-3.368173	-0.000020	1	0.149853	0.147907	0.144090	0.145796
-4.662509	-1.217924	-0.000010	1	0.163560	0.163985	0.150991	0.164980
-3.575541	1.232487	0.000010	12	-0.145177	-0.154655	-0.111666	-0.171048
-2.885912	2.422667	0.000020	12	-0.086549	-0.075959	-0.085339	-0.064828
-4.662511	1.217916	0.000010	1	0.163318	0.163985	0.150991	0.164980
-1.479592	2.427539	0.000020	12	-0.087379	-0.098498	-0.073816	-0.102438
-3.421363	3.368177	0.000030	1	0.149983	0.147907	0.144090	0.145796
-0.977163	3.388089	0.000020	1	0.139752	0.141684	0.136987	0.143241

Benzo(g,h,i)perylene							
Atom Orientation				Electrostatic Potential Charges			
Coordinates (x,y,z)			Mass	b3lyp/6-31+G(d)	b3lyp/6-31++G(d,p)	b3lyp/cc-pvdz	b3lyp/cc-pvtz
0.000000	0.707729	0.893208	12	-0.076290	-0.075752	-0.056792	-0.064862
0.000000	-0.707729	0.893208	12	-0.076290	-0.075752	-0.056792	-0.064862
0.000000	-1.420312	-0.340910	12	0.108300	0.104311	0.090456	0.082882
0.000000	-0.723561	-1.583487	12	0.027888	0.030194	0.022031	0.043165
0.000000	0.723561	-1.583487	12	0.027888	0.030194	0.022031	0.043165
0.000000	1.420312	-0.340910	12	0.108300	0.104312	0.090456	0.082882
0.000000	1.487431	-2.779333	12	-0.125773	-0.128562	-0.100418	-0.139982
0.000000	2.845812	-0.322244	12	0.087508	0.092459	0.046940	0.101287
0.000000	2.874927	-2.756873	12	-0.099598	-0.092311	-0.097855	-0.077093
0.000000	0.990392	-3.739395	1	0.154875	0.154497	0.144998	0.154808
0.000000	3.555441	-1.540762	12	-0.100637	-0.104623	-0.064334	-0.110846
0.000000	3.428039	-3.687810	1	0.152579	0.149782	0.144468	0.145851
0.000000	4.639556	-1.522321	1	0.149494	0.149168	0.138011	0.148201
0.000000	3.525205	0.927493	12	-0.123807	-0.124533	-0.090384	-0.125467
0.000000	2.830493	2.118770	12	-0.224875	-0.222582	-0.183349	-0.206223
0.000000	4.609441	0.932124	1	0.166384	0.165799	0.151285	0.163196
0.000000	1.417412	2.133874	12	0.265710	0.264672	0.209862	0.247119
0.000000	3.367860	3.060169	1	0.175601	0.174280	0.159945	0.168948
0.000000	-1.487431	-2.779333	12	-0.125773	-0.128562	-0.100418	-0.139982
0.000000	-2.845812	-0.322244	12	0.087508	0.092459	0.046940	0.101287
0.000000	-2.874927	-2.756873	12	-0.099598	-0.092311	-0.097854	-0.077093
0.000000	-0.990392	-3.739395	1	0.154875	0.154497	0.144998	0.154808
0.000000	-3.555441	-1.540762	12	-0.100637	-0.104623	-0.064334	-0.110846
0.000000	-3.428039	-3.687810	1	0.152579	0.149782	0.144468	0.145851
0.000000	-4.639556	-1.522321	1	0.149494	0.149168	0.138011	0.148201
0.000000	-3.525205	0.927493	12	-0.123807	-0.124533	-0.090384	-0.125467
0.000000	-2.830493	2.118770	12	-0.224875	-0.222582	-0.183349	-0.206223
0.000000	-4.609441	0.932124	1	0.166384	0.165799	0.151285	0.163196
0.000000	-1.417412	2.133874	12	0.265710	0.264672	0.209862	0.247119
0.000000	-3.367860	3.060169	1	0.175601	0.174280	0.159945	0.168948
0.000000	-0.682634	3.360630	12	-0.211540	-0.209662	-0.174971	-0.199723
0.000000	0.682634	3.360630	12	-0.211540	-0.209662	-0.174971	-0.199723
0.000000	-1.231869	4.295037	1	0.174180	0.172863	0.160107	0.168739
0.000000	1.231869	4.295037	1	0.174180	0.172863	0.160107	0.168739

Indeno(1,2,3-cd)pyrene							
Atom Orientation				Electrostatic Potential Charges			
Coordinates (x,y,z)			Mass	b3lyp/6-31+G(d)	b3lyp/6-31++G(d,p)	b3lyp/cc-pvdz	b3lyp/cc-pvtz
-2.400937	1.870922	0.000000	12	-0.173392	-0.172915	-0.124664	-0.101851
0.000000	0.524190	0.000000	12	0.322586	0.324939	0.228237	0.058845
0.010670	1.950039	0.000000	12	-0.145856	-0.148120	-0.053361	0.128940
-1.226943	2.617629	0.000000	12	-0.078982	-0.076414	-0.100134	-0.195521
-3.353775	2.389093	0.000000	1	0.168587	0.167527	0.153949	0.159536
-1.283196	3.699254	0.000000	1	0.163190	0.162130	0.156018	0.175679
-1.158148	-0.233379	0.000000	12	-0.192421	-0.192292	-0.150492	-0.036385
-1.032069	-1.636910	0.000000	12	0.175678	0.168638	0.134772	0.040625
-2.410218	0.435275	0.000000	12	0.229806	0.230053	0.177893	0.125856
-2.212352	-2.425971	0.000000	12	-0.024105	-0.014969	-0.023762	0.082946
-3.571090	-0.370244	0.000000	12	-0.206489	-0.204221	-0.165676	-0.146168
-3.468261	-1.756535	0.000000	12	-0.047229	-0.050274	-0.034491	-0.104539
-4.550948	0.093580	0.000000	1	0.173706	0.172619	0.157793	0.161063
-4.373873	-2.353228	0.000000	1	0.153383	0.153288	0.141627	0.158012
1.304766	-0.020311	0.000000	12	-0.229733	-0.229351	-0.143021	0.063871
1.440296	-1.392533	0.000000	12	-0.077424	-0.079905	-0.072052	-0.224556
2.413646	-1.871174	0.000000	1	0.159562	0.159889	0.149612	0.174870
0.266936	-2.223292	0.000000	12	0.013354	0.018787	-0.003047	0.107445
0.338849	-3.634946	0.000000	12	-0.083621	-0.085817	-0.046042	-0.094789
-0.815862	-4.419101	0.000000	12	-0.150743	-0.144311	-0.142569	-0.127454
1.311250	-4.115291	0.000000	1	0.156960	0.156102	0.141208	0.153805
-2.078174	-3.833922	0.000000	12	-0.051465	-0.057819	-0.031439	-0.102658
-0.725968	-5.498239	0.000000	1	0.168221	0.165941	0.156690	0.162791
-2.966034	-4.456252	0.000000	1	0.150645	0.150873	0.139174	0.156130
1.409120	2.339274	0.000000	12	0.117349	0.116635	0.059138	-0.036052
2.009064	3.600640	0.000000	12	-0.134468	-0.132439	-0.094996	-0.077511
2.214081	1.150939	0.000000	12	0.218237	0.216598	0.144650	0.073361
3.403131	3.683400	0.000000	12	-0.154147	-0.150980	-0.138151	-0.131385
1.407732	4.502183	0.000000	1	0.162251	0.160826	0.146685	0.147972
3.589649	1.246447	0.000000	12	-0.247831	-0.244026	-0.191881	-0.164329
4.180715	2.525954	0.000000	12	-0.008582	-0.008292	-0.007212	-0.050365
3.884135	4.653532	0.000000	1	0.158145	0.155844	0.147540	0.154127
4.216645	0.362676	0.000000	1	0.176967	0.175228	0.158147	0.159339
5.261052	2.608476	0.000000	1	0.137861	0.136227	0.129859	0.148350

1,2,3,4- Dibenanthracene							
Atom Orientation				Electrostatic Potential Charges			
Coordinates (x,y,z)			Mass	b3lyp/6-31+G(d)	b3lyp/6-31++G(d,p)	b3lyp/cc-pvdz	b3lyp/cc-pvtz
-5.142409	0.701237	0.000000	12	-0.078458	-0.077352	-0.066506	-0.072391
-3.941110	1.404273	0.000002	12	-0.136913	-0.136538	-0.102632	-0.140504
-2.710671	0.713356	0.000000	12	0.094295	0.096662	0.054814	0.106240
-2.710671	-0.713356	-0.000002	12	0.094297	0.096662	0.054814	0.106240
-3.941110	-1.404273	-0.000003	12	-0.136914	-0.136538	-0.102632	-0.140504
-5.142409	-0.701237	-0.000002	12	-0.078458	-0.077352	-0.066506	-0.072391
-1.468173	1.384434	0.000002	12	-0.106663	-0.108497	-0.063464	-0.119125
-1.468173	-1.384434	-0.000002	12	-0.106665	-0.108497	-0.063464	-0.119125
-0.234339	-0.716536	-0.000001	12	0.017220	0.016714	0.008532	0.017910
-0.234339	0.716536	0.000000	12	0.017215	0.016714	0.008532	0.017910
1.021795	1.448674	0.000000	12	0.083519	0.086040	0.062314	0.097728
2.260942	0.725421	0.000000	12	0.078326	0.075283	0.067409	0.071192
2.260942	-0.725421	0.000000	12	0.078331	0.075283	0.067409	0.071192
1.021795	-1.448674	-0.000001	12	0.083514	0.086040	0.062314	0.097728
-1.495939	2.465492	0.000004	1	0.139386	0.139365	0.129415	0.139097
-6.082096	1.240041	0.000000	1	0.158696	0.157295	0.146772	0.154198
-3.944516	2.488597	0.000004	1	0.162603	0.161677	0.146873	0.160330
-3.944516	-2.488597	-0.000005	1	0.162603	0.161677	0.146873	0.160330
-6.082096	-1.240041	-0.000004	1	0.158696	0.157295	0.146772	0.154198
-1.495939	-2.465492	-0.000004	1	0.139387	0.139365	0.129415	0.139097
3.469609	-1.464648	0.000000	12	-0.178279	-0.173928	-0.154639	-0.173280
3.473855	-2.841630	0.000000	12	-0.087314	-0.085986	-0.073370	-0.076903
4.418799	-0.950548	0.000002	1	0.155879	0.153565	0.144576	0.150593
1.061888	-2.862534	-0.000001	12	-0.195425	-0.194163	-0.169910	-0.202387
2.256275	-3.549620	-0.000001	12	-0.077364	-0.075726	-0.060544	-0.069135
4.413969	-3.379788	0.000000	1	0.158035	0.156353	0.144944	0.151562
0.146247	-3.435788	-0.000001	1	0.159099	0.157460	0.145193	0.156748
2.257562	-4.632857	-0.000001	1	0.153358	0.151775	0.140220	0.148127
4.418799	0.950548	-0.000002	1	0.155878	0.153565	0.144576	0.150593
3.469609	1.464648	0.000000	12	-0.178276	-0.173928	-0.154639	-0.173280
3.473855	2.841630	0.000000	12	-0.087315	-0.085986	-0.073370	-0.076903
2.256275	3.549620	0.000002	12	-0.077362	-0.075726	-0.060544	-0.069135
4.413969	3.379788	0.000000	1	0.158035	0.156353	0.144944	0.151562
1.061888	2.862534	0.000002	12	-0.195427	-0.194163	-0.169910	-0.202387
2.257562	4.632857	0.000003	1	0.153358	0.151775	0.140220	0.148127
0.146247	3.435788	0.000003	1	0.159100	0.157460	0.145193	0.156748

1,2:5,6- Dibenzanthracene							
Atom Orientation				Electrostatic Potential Charges			
Coordinates (x,y,z)			Mass	b3lyp/6-31+G(d)	b3lyp/6-31++G(d,p)	b3lyp/cc-pvdz	b3lyp/cc-pvtz
-0.759840	3.707453	0.000000	12	0.050393	0.206579	0.144635	0.185842
0.406771	2.874334	0.000000	12	0.164992	0.128817	0.105220	0.130065
0.229444	1.427645	0.000000	12	-0.019951	-0.035900	-0.028757	-0.031572
-1.095624	0.879662	0.000000	12	0.142587	0.225169	0.170544	0.211522
-2.212376	1.743383	0.000000	12	-0.188439	-0.189842	-0.158049	-0.183369
-2.045408	3.113555	0.000000	12	-0.068487	-0.179471	-0.122219	-0.163195
1.285877	0.525804	0.000000	12	-0.123963	-0.197724	-0.152038	-0.186939
-1.285877	-0.525805	0.000000	12	-0.156218	-0.207448	-0.163404	-0.195850
-0.229443	-1.427645	0.000000	12	0.025486	-0.008075	-0.004137	-0.010657
1.095625	-0.879662	0.000000	12	0.101141	0.217726	0.159842	0.205574
2.212376	-1.743384	0.000000	12	-0.158888	-0.182291	-0.149953	-0.178774
3.209791	-1.319057	0.000000	1	0.167097	0.172506	0.155748	0.169411
2.045408	-3.113555	0.000000	12	-0.110261	-0.201445	-0.139358	-0.178094
0.759840	-3.707453	0.000000	12	0.118366	0.238544	0.168305	0.209230
-0.406770	-2.874334	0.000000	12	0.105887	0.088286	0.075198	0.100356
2.308548	0.881641	0.000000	1	0.138379	0.150333	0.142683	0.145227
-3.209791	1.319057	0.000000	1	0.168906	0.174399	0.157503	0.170518
-2.915892	3.760378	0.000000	1	0.154368	0.180261	0.159617	0.174020
-2.308547	-0.881642	0.000000	1	0.150655	0.148255	0.141854	0.144789
2.915892	-3.760379	0.000000	1	0.162637	0.183304	0.161910	0.175967
-1.662427	-3.502682	0.000000	12	-0.213595	-0.199272	-0.181180	-0.204836
0.622927	-5.118954	0.000000	12	-0.174249	-0.235770	-0.189571	-0.218527
-1.769122	-4.884368	0.000000	12	-0.050518	-0.055399	-0.038004	-0.046936
-2.570990	-2.915347	0.000000	1	0.160566	0.157240	0.146825	0.155747
-0.622928	-5.701225	0.000000	12	-0.110386	-0.051681	-0.058994	-0.055963
1.518934	-5.728997	0.000000	1	0.160761	0.160775	0.149657	0.156165
-2.751671	-5.341348	0.000000	1	0.150032	0.134914	0.128002	0.133126
-0.726462	-6.779109	0.000000	1	0.161236	0.137601	0.133752	0.137149
1.662427	3.502683	0.000000	12	-0.246896	-0.216659	-0.192254	-0.218575
1.769121	4.884368	0.000000	12	-0.048784	-0.055108	-0.039622	-0.045025
2.570990	2.915348	0.000000	1	0.172960	0.156765	0.146069	0.156036
-0.622928	5.118955	0.000000	12	-0.139039	-0.229424	-0.185089	-0.212202
0.622927	5.701225	0.000000	12	-0.109786	-0.046423	-0.054367	-0.054431
2.751670	5.341350	0.000000	1	0.151719	0.137893	0.130528	0.135036
-1.518935	5.728996	0.000000	1	0.154575	0.157115	0.146967	0.153208
0.726461	6.779110	0.000000	1	0.156716	0.135447	0.132135	0.135957

Pentacene							
Atom Orientation				Electrostatic Potential Charges			
Coordinates (x,y,z)			Mass	b3lyp/6-31+G(d)	b3lyp/6-31++G(d,p)	b3lyp/cc-pvdz	b3lyp/cc-pvtz
0.000000	0.709480	6.109310	12	-0.066658	-0.064654	-0.056704	-0.060549
0.000000	1.409867	4.925092	12	-0.227195	-0.225448	-0.190588	-0.222687
0.000000	0.723161	3.679870	12	0.229511	0.229130	0.173839	0.220979
0.000000	-0.723161	3.679870	12	0.229511	0.229130	0.173839	0.220979
0.000000	-1.409867	4.925092	12	-0.227195	-0.225448	-0.190588	-0.222687
0.000000	-0.709480	6.109310	12	-0.066658	-0.064654	-0.056704	-0.060549
0.000000	1.408514	2.456111	12	-0.329353	-0.328892	-0.252344	-0.316940
0.000000	-1.408514	2.456111	12	-0.329353	-0.328892	-0.252344	-0.316940
0.000000	-0.726869	1.228184	12	0.174435	0.174454	0.130317	0.169070
0.000000	0.726869	1.228184	12	0.174435	0.174454	0.130317	0.169070
0.000000	1.409939	0.000000	12	-0.244217	-0.243447	-0.190919	-0.236839
0.000000	2.495251	0.000000	1	0.181000	0.180472	0.163090	0.176533
0.000000	0.726869	-1.228184	12	0.174435	0.174454	0.130317	0.169070
0.000000	-0.726869	-1.228184	12	0.174435	0.174454	0.130317	0.169070
0.000000	-1.409939	0.000000	12	-0.244217	-0.243447	-0.190919	-0.236839
0.000000	2.493716	2.458263	1	0.188604	0.188103	0.168659	0.184248
0.000000	1.241430	7.053126	1	0.147476	0.145505	0.138422	0.143992
0.000000	2.493948	4.927061	1	0.164789	0.163290	0.152314	0.162040
0.000000	-2.493948	4.927061	1	0.164789	0.163290	0.152314	0.162040
0.000000	-1.241430	7.053126	1	0.147476	0.145505	0.138422	0.143992
0.000000	-2.493716	2.458263	1	0.188604	0.188103	0.168659	0.184248
0.000000	-2.495251	0.000000	1	0.181000	0.180472	0.163090	0.176533
0.000000	-1.408514	-2.456111	12	-0.329353	-0.328892	-0.252344	-0.316940
0.000000	1.408514	-2.456111	12	-0.329353	-0.328892	-0.252344	-0.316940
0.000000	-0.723161	-3.679870	12	0.229511	0.229130	0.173839	0.220979
0.000000	-2.493716	-2.458263	1	0.188604	0.188103	0.168659	0.184248
0.000000	0.723161	-3.679870	12	0.229511	0.229130	0.173839	0.220979
0.000000	2.493716	-2.458263	1	0.188604	0.188103	0.168659	0.184248
0.000000	-1.409867	-4.925092	12	-0.227195	-0.225448	-0.190588	-0.222687
0.000000	1.409867	-4.925092	12	-0.227195	-0.225448	-0.190588	-0.222687
0.000000	-0.709480	-6.109310	12	-0.066658	-0.064654	-0.056704	-0.060548
0.000000	-2.493948	-4.927061	1	0.164789	0.163290	0.152314	0.162040
0.000000	0.709480	-6.109310	12	-0.066658	-0.064654	-0.056704	-0.060548
0.000000	2.493948	-4.927061	1	0.164789	0.163290	0.152314	0.162040
0.000000	-1.241430	-7.053126	1	0.147476	0.145505	0.138422	0.143992
0.000000	1.241430	-7.053126	1	0.147476	0.145505	0.138422	0.143992

Rubrene							
Atom Orientation				Electrostatic Potential Charges			
Coordinates (x,y,z)			Mass	b3lyp/6-31+G(d)	b3lyp/6-31++G(d,p)	b3lyp/cc-pvdz	b3lyp/cc-pvtz
0.647301	4.886807	0.278278	12	-0.067863	-0.066729	-0.062109	-0.067214
1.299312	3.695465	0.517364	12	-0.220926	-0.220438	-0.174591	-0.211830
0.686648	2.448096	0.218284	12	0.232195	0.234998	0.160740	0.224204
-0.686928	2.448149	-0.217942	12	0.153070	0.157454	0.094708	0.157122
-1.299502	3.695567	-0.516996	12	-0.153797	-0.155065	-0.124202	-0.157753
-0.647427	4.886859	-0.277844	12	-0.106405	-0.104082	-0.089665	-0.097204
1.405904	1.220471	0.286378	12	-0.362743	-0.374965	-0.213112	-0.358810
-1.406252	1.220572	-0.286268	12	-0.297967	-0.312125	-0.165308	-0.306579
-0.729336	0.000005	0.000017	12	0.191790	0.201148	0.106027	0.190387
0.728903	-0.000005	0.000018	12	0.242394	0.250561	0.149624	0.238935
1.405887	-1.220489	-0.286351	12	-0.362738	-0.374959	-0.213113	-0.358806
0.686611	-2.448104	-0.218279	12	0.232196	0.234999	0.160739	0.224207
-0.686966	-2.448141	0.217943	12	0.153073	0.157457	0.094709	0.157122
-1.406270	-1.220554	0.286288	12	-0.297979	-0.312137	-0.165307	-0.306588
1.139649	5.825094	0.504312	1	0.146823	0.145392	0.135627	0.143358
2.299937	3.708473	0.923853	1	0.140596	0.139362	0.132777	0.137096
-2.300112	3.708648	-0.923523	1	0.123011	0.122286	0.119944	0.122467
-1.139712	5.825185	-0.503853	1	0.150419	0.148889	0.138152	0.146133
1.299254	-3.695479	-0.517378	12	-0.220918	-0.220429	-0.174596	-0.211826
0.647223	-4.886813	-0.278314	12	-0.067873	-0.066738	-0.062104	-0.067219
2.299880	-3.708497	-0.923866	1	0.140595	0.139361	0.132779	0.137096
-1.299562	-3.695554	0.516975	12	-0.153809	-0.155077	-0.124196	-0.157760
-0.647506	-4.886853	0.277805	12	-0.106395	-0.104072	-0.089671	-0.097198
1.139556	-5.825105	-0.504363	1	0.146824	0.145394	0.135627	0.143358
-2.300173	-3.708625	0.923500	1	0.123012	0.122288	0.119942	0.122468
-1.139807	-5.825175	0.503797	1	0.150418	0.148888	0.138153	0.146133
-2.798954	1.228850	-0.813147	12	0.279529	0.295478	0.175736	0.313838
-3.042855	0.629923	-2.059282	12	-0.214176	-0.220623	-0.155433	-0.230805
-3.850976	1.891814	-0.164330	12	-0.067880	-0.072904	-0.086026	-0.092316
-4.305683	0.699034	-2.644391	12	-0.150968	-0.145732	-0.133186	-0.135391
-2.234496	0.130226	-2.581071	1	0.143091	0.142830	0.122061	0.142293
-5.117813	1.939958	-0.740340	12	-0.153852	-0.150247	-0.127263	-0.138543
-3.682663	2.349347	0.803377	1	0.100325	0.099797	0.103555	0.101343
-5.347833	1.349884	-1.984820	12	-0.114177	-0.113298	-0.098290	-0.116045
-4.472637	0.247168	-3.615252	1	0.153966	0.151601	0.138435	0.148071
-5.924827	2.440397	-0.218099	1	0.138284	0.136201	0.129159	0.133646

-6.331464	1.399716	-2.436741	1	0.147393	0.145246	0.134165	0.143295
-2.798977	-1.228820	0.813153	12	0.279572	0.295520	0.175722	0.313873
-3.851009	-1.891728	0.164295	12	-0.067898	-0.072923	-0.086016	-0.092328
-3.042875	-0.629949	2.059316	12	-0.214190	-0.220638	-0.155429	-0.230819
-5.117853	-1.939868	0.740292	12	-0.153842	-0.150235	-0.127269	-0.138534
-3.682699	-2.349218	-0.803433	1	0.100327	0.099799	0.103554	0.101343
-4.305709	-0.699058	2.644411	12	-0.150968	-0.145732	-0.133185	-0.135391
-2.234507	-0.130299	2.581137	1	0.143092	0.142831	0.122062	0.142294
-5.347870	-1.349849	1.984798	12	-0.114187	-0.113309	-0.098284	-0.116055
-5.924875	-2.440261	0.218019	1	0.138281	0.136198	0.129161	0.133643
-4.472659	-0.247237	3.615294	1	0.153968	0.151603	0.138434	0.148073
-6.331505	-1.399679	2.436708	1	0.147395	0.145248	0.134164	0.143298
2.798839	1.228505	0.812638	12	0.342739	0.354761	0.207807	0.353242
3.850665	1.891382	0.163412	12	-0.095155	-0.097141	-0.095374	-0.108749
3.043288	0.629150	2.058460	12	-0.247630	-0.250896	-0.173162	-0.248633
5.117816	1.939119	0.738764	12	-0.163751	-0.160373	-0.137160	-0.148370
3.681944	2.349154	-0.804112	1	0.108787	0.107380	0.107357	0.107244
4.306443	0.697843	2.642912	12	-0.144653	-0.140419	-0.133437	-0.132734
2.235115	0.129433	2.580519	1	0.149350	0.148286	0.126039	0.145139
5.348373	1.348669	1.982967	12	-0.103810	-0.103773	-0.087619	-0.107652
5.924662	2.439508	0.216216	1	0.141887	0.139739	0.131584	0.136961
4.473828	0.245657	3.613550	1	0.152903	0.150683	0.138767	0.147254
6.332256	1.398169	2.434373	1	0.144295	0.142574	0.131499	0.141261
3.681911	-2.349255	0.804091	1	0.108785	0.107379	0.107358	0.107245
3.850636	-1.891453	-0.163417	12	-0.095140	-0.097127	-0.095381	-0.108739
5.117784	-1.939193	-0.738776	12	-0.163758	-0.160380	-0.137156	-0.148375
2.798820	-1.228535	-0.812618	12	0.342707	0.354728	0.207816	0.353215
5.348348	-1.348704	-1.982959	12	-0.103805	-0.103767	-0.087622	-0.107647
5.924623	-2.439616	-0.216248	1	0.141889	0.139741	0.131583	0.136962
3.043276	-0.629139	-2.058418	12	-0.247619	-0.250884	-0.173166	-0.248623
4.306428	-0.697834	-2.642877	12	-0.144650	-0.140417	-0.133438	-0.132731
6.332229	-1.398206	-2.434371	1	0.144293	0.142572	0.131500	0.141260
2.235111	-0.129387	-2.580457	1	0.149348	0.148284	0.126039	0.145137
4.473818	-0.245616	-3.613499	1	0.152901	0.150680	0.138768	0.147251