Supporting Information
MolBar: A Molecular Identifier for Inorganic and Organic Molecules with Full Support of Stereoisomerism

Nils van Staalduinen, Christoph Bannwarth
Insitute of Physical Chemistry
RWTH Aachen University
Aachen
{van.staalduinen, bannwarth}@pc.rwth-aachen.de

S1 First and Second Order Derivatives of the Structure Unification Force Field

The structure unification workflow uses a force field optimization to determine the ideal geometry of a fragment. The optimizer is based on the *Newton-CG* algorithm [1]. For this, we need the first order and second order derivatives of the potential energy function with respect to the Cartesian coordinates. The energy function is given by

$$\begin{aligned} E_{\text{FF}} =& E_{\text{bond}} + E_{\text{angle}} + E_{\text{dihedral}} + E_{\text{Coulomb}} \\ =& \sum E_{\text{bond},ij} + \sum E_{\text{angle},ijk} + \sum E_{\text{dihedral},ijkl} + \sum E_{\text{Coulomb},ij} \end{aligned} \tag{1}$$

S1.1 Bond Potential

One single bond harmonic potential between two atoms i and j is given by

$$E_{\text{bond},ij} = k_{\text{bond}} \left(r_{ij}^0 - r_{ij}\right)^2 \ , \tag{2}$$

where distance in Cartesian space between two atoms i and j reads

$$r_{ij} = \sqrt{x_{ij}^2 + y_{ij}^2 + z_{ij}^2} \tag{3}$$

with

$$x_{ij} = x_i - x_j \tag{4}$$

and x_i is the x-coordinate of atom i.

S1.1.1 Derivatives of $E_{\text{bond},ij}$

The first and second order derivatives of $E_{\text{bond},ij}$ with respect to the coordinates x, y and z of the participating atoms i and j are:

$$\frac{d}{dx_i} E_{\text{bond},ij} = 2k_{\text{bond}} \left(r_{ij} - r_{ij}^0\right) \frac{d}{dx_i} r_{ij} \tag{5}$$

$$\frac{d}{dy_i} E_{\text{bond},ij} = 2k_{\text{bond}} \left(r_{ij} - r_{ij}^0\right) \frac{d}{dy_i} r_{ij} \tag{6}$$

$$\frac{d}{dz_i} E_{\text{bond},ij} = 2k_{\text{bond}} \left(r_{ij} - r_{ij}^0\right) \frac{d}{dz_i} r_{ij} \tag{7}$$

$$\frac{d}{dx_j} E_{\text{bond},ij} = 2k_{\text{bond}} \left(r_{ij} - r_{ij}^0\right) \frac{d}{dx_j} r_{ij} \tag{8}$$

$$\frac{d}{dy_j} E_{\text{bond},ij} = 2k_{\text{bond}} \left(r_{ij} - r_{ij}^0\right) \frac{d}{dy_j} r_{ij} \tag{9}$$

$$\frac{d}{dz_j} E_{\text{bond},ij} = 2k_{\text{bond}} \left(r_{ij} - r_{ij}^0\right) \frac{d}{dz_j} r_{ij} \tag{10}$$

$$\frac{d^2}{dx_i^2} E_{\text{bond},ij} = 2k_{\text{bond}} \left(r_{ij} - r_{ij}^0\right) \frac{d^2}{dx_i^2} r_{ij} + 2k_{\text{bond}} \left(\frac{d}{dx_i} r_{ij}\right)^2 \tag{11}$$

$$\frac{d^2}{dy_i dx_i} E_{\text{bond},ij} = 2k_{\text{bond}} \left(r_{ij} - r_{ij}^0\right) \frac{d^2}{dy_i dx_i} r_{ij} + 2k_{\text{bond}} \frac{d}{dx_i} r_{ij} \frac{d}{dy_i} r_{ij} \tag{12}$$

$$\frac{d^2}{dz_i dx_i} E_{\text{bond},ij} = 2k_{\text{bond}} \left(r_{ij} - r_{ij}^0\right) \frac{d^2}{dz_i dx_i} r_{ij} + 2k_{\text{bond}} \frac{d}{dx_i} r_{ij} \frac{d}{dz_i} r_{ij} \tag{13}$$

$$\frac{d^2}{dx_j dx_i} E_{\text{bond},ij} = 2k_{\text{bond}} \left(r_{ij} - r_{ij}^0\right) \frac{d^2}{dx_j dx_i} r_{ij} + 2k_{\text{bond}} \frac{d}{dx_i} r_{ij} \frac{d}{dx_j} r_{ij} \tag{14}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dx_i} E_{\text{bond},ij} = 2k_{\text{bond}} \left(r_{ij} - r_{ij}^0\right) \frac{d^2}{dy_j dx_i} r_{ij} + 2k_{\text{bond}} \frac{d}{dx_i} r_{ij} \frac{d}{dy_j} r_{ij} \tag{15}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dx_i} E_{\text{bond},ij} = 2k_{\text{bond}} \left(r_{ij} - r_{ij}^0\right) \frac{d^2}{dz_j dx_i} r_{ij} + 2k_{\text{bond}} \frac{d}{dx_i} r_{ij} \frac{d}{dz_j} r_{ij} \tag{16}$$

$$\frac{d^2}{dy_i^2}E_{\text{bond},ij} = 2k_{\text{bond}}\left(r_{ij} - r_{ij}^0\right)\frac{d^2}{dy_i^2}r_{ij} + 2k_{\text{bond}}\left(\frac{d}{dy_i}r_{ij}\right)^2 \tag{17}$$

$$\frac{d^2}{dz_i dy_i}E_{\text{bond},ij} = 2k_{\text{bond}}\left(r_{ij} - r_{ij}^0\right)\frac{d^2}{dz_i dy_i}r_{ij} + 2k_{\text{bond}}\frac{d}{dy_i}r_{ij}\frac{d}{dz_i}r_{ij} \tag{18}$$

$$\frac{d^2}{dx_j dy_i}E_{\text{bond},ij} = 2k_{\text{bond}}\left(r_{ij} - r_{ij}^0\right)\frac{d^2}{dy_i dx_j}r_{ij} + 2k_{\text{bond}}\frac{d}{dx_j}r_{ij}\frac{d}{dy_i}r_{ij} \tag{19}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dy_i}E_{\text{bond},ij} = 2k_{\text{bond}}\left(r_{ij} - r_{ij}^0\right)\frac{d^2}{dy_j dy_i}r_{ij} + 2k_{\text{bond}}\frac{d}{dy_i}r_{ij}\frac{d}{dy_j}r_{ij} \tag{20}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dy_i}E_{\text{bond},ij} = 2k_{\text{bond}}\left(r_{ij} - r_{ij}^0\right)\frac{d^2}{dz_j dy_i}r_{ij} + 2k_{\text{bond}}\frac{d}{dy_i}r_{ij}\frac{d}{dz_j}r_{ij} \tag{21}$$

$$\frac{d^2}{dz_i^2}E_{\text{bond},ij} = 2k_{\text{bond}}\left(r_{ij} - r_{ij}^0\right)\frac{d^2}{dz_i^2}r_{ij} + 2k_{\text{bond}}\left(\frac{d}{dz_i}r_{ij}\right)^2 \tag{22}$$

$$\frac{d^2}{dx_j dz_i}E_{\text{bond},ij} = 2k_{\text{bond}}\left(r_{ij} - r_{ij}^0\right)\frac{d^2}{dz_i dx_j}r_{ij} + 2k_{\text{bond}}\frac{d}{dx_j}r_{ij}\frac{d}{dz_i}r_{ij} \tag{23}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dz_i}E_{\text{bond},ij} = 2k_{\text{bond}}\left(r_{ij} - r_{ij}^0\right)\frac{d^2}{dz_i dy_j}r_{ij} + 2k_{\text{bond}}\frac{d}{dy_j}r_{ij}\frac{d}{dz_i}r_{ij} \tag{24}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dz_i}E_{\text{bond},ij} = 2k_{\text{bond}}\left(r_{ij} - r_{ij}^0\right)\frac{d^2}{dz_j dz_i}r_{ij} + 2k_{\text{bond}}\frac{d}{dz_i}r_{ij}\frac{d}{dz_j}r_{ij} \tag{25}$$

$$\frac{d^2}{dx_j^2}E_{\text{bond},ij} = 2k_{\text{bond}}\left(r_{ij} - r_{ij}^0\right)\frac{d^2}{dx_j^2}r_{ij} + 2k_{\text{bond}}\left(\frac{d}{dx_j}r_{ij}\right)^2 \tag{26}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dx_j}E_{\text{bond},ij} = 2k_{\text{bond}}\left(r_{ij} - r_{ij}^0\right)\frac{d^2}{dy_j dx_j}r_{ij} + 2k_{\text{bond}}\frac{d}{dx_j}r_{ij}\frac{d}{dy_j}r_{ij} \tag{27}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dx_j}E_{\text{bond},ij} = 2k_{\text{bond}}\left(r_{ij} - r_{ij}^0\right)\frac{d^2}{dz_j dx_j}r_{ij} + 2k_{\text{bond}}\frac{d}{dx_j}r_{ij}\frac{d}{dz_j}r_{ij} \tag{28}$$

$$\frac{d^2}{dy_j^2}E_{\text{bond},ij} = 2k_{\text{bond}}\left(r_{ij} - r_{ij}^0\right)\frac{d^2}{dy_j^2}r_{ij} + 2k_{\text{bond}}\left(\frac{d}{dy_j}r_{ij}\right)^2 \tag{29}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dy_j}E_{\text{bond},ij} = 2k_{\text{bond}}\left(r_{ij} - r_{ij}^0\right)\frac{d^2}{dz_j dy_j}r_{ij} + 2k_{\text{bond}}\frac{d}{dy_j}r_{ij}\frac{d}{dz_j}r_{ij} \tag{30}$$

$$\frac{d^2}{dz_j^2}E_{\text{bond},ij} = 2k_{\text{bond}}\left(r_{ij} - r_{ij}^0\right)\frac{d^2}{dz_j^2}r_{ij} + 2k_{\text{bond}}\left(\frac{d}{dz_j}r_{ij}\right)^2 \tag{31}$$

The derivatives of r_{ij} with respect to the coordinates of the particapating atoms i and j are given in Section S1.1.2.

S1.1.2 Derivatives of r_{ij}

The first and second order derivatives of r_{ij} with respect to the coordinates x, y and z of the participating atoms i and j are:

$$\frac{d}{dx_i}r_{ij} = -\frac{x_{ji}}{r_{ij}} \tag{32}$$

$$\frac{d}{dy_i}r_{ij} = -\frac{y_{ji}}{r_{ij}} \tag{33}$$

$$\frac{d}{dz_i}r_{ij} = -\frac{z_{ji}}{r_{ij}} \tag{34}$$

$$\frac{d}{dx_j}r_{ij} = \frac{x_{ji}}{r_{ij}} \tag{35}$$

$$\frac{d}{dy_j}r_{ij} = \frac{y_{ji}}{r_{ij}} \tag{36}$$

$$\frac{d}{dz_j}r_{ij} = \frac{z_{ji}}{r_{ij}} \tag{37}$$

$$\frac{d^2}{dx_i^2}r_{ij} = \frac{1}{r_{ij}} - \frac{x_{ji}^2}{r_{ij}^3} \tag{38}$$

$$\frac{d^2}{dy_i dx_i}r_{ij} = -\frac{x_{ji}y_{ji}}{r_{ij}^3} \tag{39}$$

$$\frac{d^2}{dz_i dx_i}r_{ij} = -\frac{x_{ji}z_{ji}}{r_{ij}^3} \tag{40}$$

$$\frac{d^2}{dx_j dx_i}r_{ij} = -\frac{1}{r_{ij}} + \frac{x_{ji}^2}{r_{ij}^3} \tag{41}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dx_i}r_{ij} = \frac{x_{ji}y_{ji}}{r_{ij}^3} \tag{42}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dx_i}r_{ij} = \frac{x_{ji}z_{ji}}{r_{ij}^3} \tag{43}$$

$$\frac{d^2}{dy_i^2}r_{ij} = \frac{1}{r_{ij}} - \frac{y_{ji}^2}{r_{ij}^3} \tag{44}$$

$$\frac{d^2}{dz_i dy_i}r_{ij} = -\frac{y_{ji}z_{ji}}{r_{ij}^3} \tag{45}$$

$$\frac{d^2}{dx_j dy_i}r_{ij} = \frac{x_{ji}y_{ji}}{r_{ij}^3} \tag{46}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dy_i}r_{ij} = -\frac{1}{r_{ij}} + \frac{y_{ji}^2}{r_{ij}^3} \tag{47}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dy_i}r_{ij} = \frac{y_{ji}z_{ji}}{r_{ij}^3} \tag{48}$$

$$\frac{d^2}{dz_i^2}r_{ij} = \frac{1}{r_{ij}} - \frac{z_{ji}^2}{r_{ij}^3} \tag{49}$$

$$\frac{d^2}{dx_j dz_i}r_{ij} = \frac{x_{ji}z_{ji}}{r_{ij}^3} \tag{50}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dz_i}r_{ij} = \frac{y_{ji}z_{ji}}{r_{ij}^3} \tag{51}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dz_i}r_{ij} = -\frac{1}{r_{ij}} + \frac{z_{ji}^2}{r_{ij}^3} \tag{52}$$

$$\frac{d^2}{dx_j^2}r_{ij} = \frac{1}{r_{ij}} - \frac{x_{ji}^2}{r_{ij}^3} \tag{53}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dx_j}r_{ij} = -\frac{x_{ji}y_{ji}}{r_{ij}^3} \tag{54}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dx_j}r_{ij} = -\frac{x_{ji}z_{ji}}{r_{ij}^3} \tag{55}$$

$$\frac{d^2}{dy_j^2}r_{ij} = \frac{1}{r_{ij}} - \frac{y_{ji}^2}{r_{ij}^3} \tag{56}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dy_j}r_{ij} = -\frac{y_{ji}z_{ji}}{r_{ij}^3} \tag{57}$$

$$\frac{d^2}{dz_j^2}r_{ij} = \frac{1}{r_{ij}} - \frac{z_{ji}^2}{r_{ij}^3} \tag{58}$$

The first and second order derivatives of r_{ij} are equivalent to the derivatives of e.g. r_{ji} by interchanging atomic indices.

S1.2 Angle Potential

The angle harmonic potential between three atoms i, j and k is given by

$$E_{\text{angle},ijk} = k_{\text{angle}}\big(\alpha^0_{ijk} - \alpha_{ijk}\big)^2 \tag{59}$$

The angle between three atoms i, j and k is given by

$$\alpha_{ijk} = \arccos\Big(\frac{x_{ij}x_{kj} + y_{ij}y_{kj} + z_{ij}z_{kj}}{r_{ij}r_{kj}}\Big) \tag{60}$$

$$= \arccos\Big(\frac{a_{ijk}}{r_{ij}r_{kj}}\Big)\ , \tag{61}$$

where a_{ijk} is the dot product of the vectors $\mathbf{r}_{ij}$ and $\mathbf{r}_{kj}$.

S1.2.1 Derivatives of $E_{\text{angle},ijk}$

The first and second order derivatives of $E_{\text{angle},ijk}$ with respect to the coordinates x, y and z of the participating atoms i, j and k are:

$$\frac{d}{dx_i}E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}}\left(\alpha_{ijk} - \alpha^0_{ijk}\right)\frac{d}{dx_i}\alpha_{ijk} \tag{62}$$

$$\frac{d}{dy_i}E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}}\left(\alpha_{ijk} - \alpha^0_{ijk}\right)\frac{d}{dy_i}\alpha_{ijk} \tag{63}$$

$$\frac{d}{dz_i}E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}}\left(\alpha_{ijk} - \alpha^0_{ijk}\right)\frac{d}{dz_i}\alpha_{ijk} \tag{64}$$

$$\frac{d}{dx_j}E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}}\left(\alpha_{ijk} - \alpha^0_{ijk}\right)\frac{d}{dx_j}\alpha_{ijk} \tag{65}$$

$$\frac{d}{dy_j}E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}}\left(\alpha_{ijk} - \alpha^0_{ijk}\right)\frac{d}{dy_j}\alpha_{ijk} \tag{66}$$

$$\frac{d}{dz_j}E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}}\left(\alpha_{ijk} - \alpha^0_{ijk}\right)\frac{d}{dz_j}\alpha_{ijk} \tag{67}$$

$$\frac{d}{dx_k}E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}}\left(\alpha_{ijk} - \alpha^0_{ijk}\right)\frac{d}{dx_k}\alpha_{ijk} \tag{68}$$

$$\frac{d}{dy_k}E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}}\left(\alpha_{ijk} - \alpha^0_{ijk}\right)\frac{d}{dy_k}\alpha_{ijk} \tag{69}$$

$$\frac{d}{dz_k}E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}}\left(\alpha_{ijk} - \alpha^0_{ijk}\right)\frac{d}{dz_k}\alpha_{ijk} \tag{70}$$

$$\frac{d^2}{dx_i^2}E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}}\left(\alpha_{ijk} - \alpha^0_{ijk}\right)\frac{d^2}{dx_i^2}\alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}}\left(\frac{d}{dx_i}\alpha_{ijk}\right)^2 \tag{71}$$

$$\frac{d^2}{dy_i dx_i} E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}} \left(\alpha_{ijk} - \alpha_{ijk}^0\right) \frac{d^2}{dy_i dx_i} \alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}} \frac{d}{dx_i} \alpha_{ijk} \frac{d}{dy_i} \alpha_{ijk} \tag{72}$$

$$\frac{d^2}{dz_i dx_i} E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}} \left(\alpha_{ijk} - \alpha_{ijk}^0\right) \frac{d^2}{dz_i dx_i} \alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}} \frac{d}{dx_i} \alpha_{ijk} \frac{d}{dz_i} \alpha_{ijk} \tag{73}$$

$$\frac{d^2}{dx_j dx_i} E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}} \left(\alpha_{ijk} - \alpha_{ijk}^0\right) \frac{d^2}{dx_j dx_i} \alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}} \frac{d}{dx_i} \alpha_{ijk} \frac{d}{dx_j} \alpha_{ijk} \tag{74}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dx_i} E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}} \left(\alpha_{ijk} - \alpha_{ijk}^0\right) \frac{d^2}{dy_j dx_i} \alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}} \frac{d}{dx_i} \alpha_{ijk} \frac{d}{dy_j} \alpha_{ijk} \tag{75}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dx_i} E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}} \left(\alpha_{ijk} - \alpha_{ijk}^0\right) \frac{d^2}{dz_j dx_i} \alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}} \frac{d}{dx_i} \alpha_{ijk} \frac{d}{dz_j} \alpha_{ijk} \tag{76}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dx_i} E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}} \left(\alpha_{ijk} - \alpha_{ijk}^0\right) \frac{d^2}{dx_k dx_i} \alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}} \frac{d}{dx_i} \alpha_{ijk} \frac{d}{dx_k} \alpha_{ijk} \tag{77}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dx_i} E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}} \left(\alpha_{ijk} - \alpha_{ijk}^0\right) \frac{d^2}{dy_k dx_i} \alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}} \frac{d}{dx_i} \alpha_{ijk} \frac{d}{dy_k} \alpha_{ijk} \tag{78}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dx_i} E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}} \left(\alpha_{ijk} - \alpha_{ijk}^0\right) \frac{d^2}{dz_k dx_i} \alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}} \frac{d}{dx_i} \alpha_{ijk} \frac{d}{dz_k} \alpha_{ijk} \tag{79}$$

$$\frac{d^2}{dy_i^2} E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}} \left(\alpha_{ijk} - \alpha_{ijk}^0\right) \frac{d^2}{dy_i^2} \alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}} \left(\frac{d}{dy_i} \alpha_{ijk}\right)^2 \tag{80}$$

$$\frac{d^2}{dz_i dy_i} E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}} \left(\alpha_{ijk} - \alpha_{ijk}^0\right) \frac{d^2}{dz_i dy_i} \alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}} \frac{d}{dy_i} \alpha_{ijk} \frac{d}{dz_i} \alpha_{ijk} \tag{81}$$

$$\frac{d^2}{dx_j dy_i} E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}} \left(\alpha_{ijk} - \alpha_{ijk}^0\right) \frac{d^2}{dy_i dx_j} \alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}} \frac{d}{dx_j} \alpha_{ijk} \frac{d}{dy_i} \alpha_{ijk} \tag{82}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dy_i} E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}} \left(\alpha_{ijk} - \alpha_{ijk}^0\right) \frac{d^2}{dy_j dy_i} \alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}} \frac{d}{dy_i} \alpha_{ijk} \frac{d}{dy_j} \alpha_{ijk} \tag{83}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dy_i} E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}} \left(\alpha_{ijk} - \alpha_{ijk}^0\right) \frac{d^2}{dz_j dy_i} \alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}} \frac{d}{dy_i} \alpha_{ijk} \frac{d}{dz_j} \alpha_{ijk} \tag{84}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dy_i} E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}} \left(\alpha_{ijk} - \alpha_{ijk}^0\right) \frac{d^2}{dy_i dx_k} \alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}} \frac{d}{dx_k} \alpha_{ijk} \frac{d}{dy_i} \alpha_{ijk} \tag{85}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dy_i} E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}} \left(\alpha_{ijk} - \alpha_{ijk}^0\right) \frac{d^2}{dy_k dy_i} \alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}} \frac{d}{dy_i} \alpha_{ijk} \frac{d}{dy_k} \alpha_{ijk} \tag{86}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dy_i} E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}} \left(\alpha_{ijk} - \alpha_{ijk}^0\right) \frac{d^2}{dz_k dy_i} \alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}} \frac{d}{dy_i} \alpha_{ijk} \frac{d}{dz_k} \alpha_{ijk} \tag{87}$$

$$\frac{d^2}{dz_i^2}E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}}\left(\alpha_{ijk}-\alpha_{ijk}^0\right)\frac{d^2}{dz_i^2}\alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}}\left(\frac{d}{dz_i}\alpha_{ijk}\right)^2 \tag{88}$$

$$\frac{d^2}{dx_j dz_i}E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}}\left(\alpha_{ijk}-\alpha_{ijk}^0\right)\frac{d^2}{dz_i dx_j}\alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}}\frac{d}{dx_j}\alpha_{ijk}\frac{d}{dz_i}\alpha_{ijk} \tag{89}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dz_i}E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}}\left(\alpha_{ijk}-\alpha_{ijk}^0\right)\frac{d^2}{dz_i dy_j}\alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}}\frac{d}{dy_j}\alpha_{ijk}\frac{d}{dz_i}\alpha_{ijk} \tag{90}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dz_i}E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}}\left(\alpha_{ijk}-\alpha_{ijk}^0\right)\frac{d^2}{dz_j dz_i}\alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}}\frac{d}{dz_i}\alpha_{ijk}\frac{d}{dz_j}\alpha_{ijk} \tag{91}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dz_i}E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}}\left(\alpha_{ijk}-\alpha_{ijk}^0\right)\frac{d^2}{dz_i dx_k}\alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}}\frac{d}{dx_k}\alpha_{ijk}\frac{d}{dz_i}\alpha_{ijk} \tag{92}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dz_i}E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}}\left(\alpha_{ijk}-\alpha_{ijk}^0\right)\frac{d^2}{dz_i dy_k}\alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}}\frac{d}{dy_k}\alpha_{ijk}\frac{d}{dz_i}\alpha_{ijk} \tag{93}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dz_i}E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}}\left(\alpha_{ijk}-\alpha_{ijk}^0\right)\frac{d^2}{dz_k dz_i}\alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}}\frac{d}{dz_i}\alpha_{ijk}\frac{d}{dz_k}\alpha_{ijk} \tag{94}$$

$$\frac{d^2}{dx_j^2}E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}}\left(\alpha_{ijk}-\alpha_{ijk}^0\right)\frac{d^2}{dx_j^2}\alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}}\left(\frac{d}{dx_j}\alpha_{ijk}\right)^2 \tag{95}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dx_j}E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}}\left(\alpha_{ijk}-\alpha_{ijk}^0\right)\frac{d^2}{dy_j dx_j}\alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}}\frac{d}{dx_j}\alpha_{ijk}\frac{d}{dy_j}\alpha_{ijk} \tag{96}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dx_j}E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}}\left(\alpha_{ijk}-\alpha_{ijk}^0\right)\frac{d^2}{dz_j dx_j}\alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}}\frac{d}{dx_j}\alpha_{ijk}\frac{d}{dz_j}\alpha_{ijk} \tag{97}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dx_j}E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}}\left(\alpha_{ijk}-\alpha_{ijk}^0\right)\frac{d^2}{dx_k dx_j}\alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}}\frac{d}{dx_j}\alpha_{ijk}\frac{d}{dx_k}\alpha_{ijk} \tag{98}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dx_j}E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}}\left(\alpha_{ijk}-\alpha_{ijk}^0\right)\frac{d^2}{dy_k dx_j}\alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}}\frac{d}{dx_j}\alpha_{ijk}\frac{d}{dy_k}\alpha_{ijk} \tag{99}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dx_j}E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}}\left(\alpha_{ijk}-\alpha_{ijk}^0\right)\frac{d^2}{dz_k dx_j}\alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}}\frac{d}{dx_j}\alpha_{ijk}\frac{d}{dz_k}\alpha_{ijk} \tag{100}$$

$$\frac{d^2}{dy_j^2}E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}}\left(\alpha_{ijk}-\alpha_{ijk}^0\right)\frac{d^2}{dy_j^2}\alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}}\left(\frac{d}{dy_j}\alpha_{ijk}\right)^2 \tag{101}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dy_j}E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}}\left(\alpha_{ijk}-\alpha_{ijk}^0\right)\frac{d^2}{dz_j dy_j}\alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}}\frac{d}{dy_j}\alpha_{ijk}\frac{d}{dz_j}\alpha_{ijk} \tag{102}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dy_j}E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}}\left(\alpha_{ijk}-\alpha_{ijk}^0\right)\frac{d^2}{dy_j dx_k}\alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}}\frac{d}{dx_k}\alpha_{ijk}\frac{d}{dy_j}\alpha_{ijk} \tag{103}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dy_j} E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}} \left(\alpha_{ijk} - \alpha^0_{ijk}\right) \frac{d^2}{dy_k dy_j} \alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}} \frac{d}{dy_j} \alpha_{ijk} \frac{d}{dy_k} \alpha_{ijk} \tag{104}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dy_j} E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}} \left(\alpha_{ijk} - \alpha^0_{ijk}\right) \frac{d^2}{dz_k dy_j} \alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}} \frac{d}{dy_j} \alpha_{ijk} \frac{d}{dz_k} \alpha_{ijk} \tag{105}$$

$$\frac{d^2}{dz_j^2} E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}} \left(\alpha_{ijk} - \alpha^0_{ijk}\right) \frac{d^2}{dz_j^2} \alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}} \left(\frac{d}{dz_j} \alpha_{ijk}\right)^2 \tag{106}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dz_j} E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}} \left(\alpha_{ijk} - \alpha^0_{ijk}\right) \frac{d^2}{dz_j dx_k} \alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}} \frac{d}{dx_k} \alpha_{ijk} \frac{d}{dz_j} \alpha_{ijk} \tag{107}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dz_j} E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}} \left(\alpha_{ijk} - \alpha^0_{ijk}\right) \frac{d^2}{dz_j dy_k} \alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}} \frac{d}{dy_k} \alpha_{ijk} \frac{d}{dz_j} \alpha_{ijk} \tag{108}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dz_j} E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}} \left(\alpha_{ijk} - \alpha^0_{ijk}\right) \frac{d^2}{dz_k dz_j} \alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}} \frac{d}{dz_j} \alpha_{ijk} \frac{d}{dz_k} \alpha_{ijk} \tag{109}$$

$$\frac{d^2}{dx_k^2} E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}} \left(\alpha_{ijk} - \alpha^0_{ijk}\right) \frac{d^2}{dx_k^2} \alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}} \left(\frac{d}{dx_k} \alpha_{ijk}\right)^2 \tag{110}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dx_k} E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}} \left(\alpha_{ijk} - \alpha^0_{ijk}\right) \frac{d^2}{dy_k dx_k} \alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}} \frac{d}{dx_k} \alpha_{ijk} \frac{d}{dy_k} \alpha_{ijk} \tag{111}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dx_k} E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}} \left(\alpha_{ijk} - \alpha^0_{ijk}\right) \frac{d^2}{dz_k dx_k} \alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}} \frac{d}{dx_k} \alpha_{ijk} \frac{d}{dz_k} \alpha_{ijk} \tag{112}$$

$$\frac{d^2}{dy_k^2} E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}} \left(\alpha_{ijk} - \alpha^0_{ijk}\right) \frac{d^2}{dy_k^2} \alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}} \left(\frac{d}{dy_k} \alpha_{ijk}\right)^2 \tag{113}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dy_k} E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}} \left(\alpha_{ijk} - \alpha^0_{ijk}\right) \frac{d^2}{dz_k dy_k} \alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}} \frac{d}{dy_k} \alpha_{ijk} \frac{d}{dz_k} \alpha_{ijk} \tag{114}$$

$$\frac{d^2}{dz_k^2} E_{\text{angle},ijk} = 2k_{\text{angle}} \left(\alpha_{ijk} - \alpha^0_{ijk}\right) \frac{d^2}{dz_k^2} \alpha_{ijk} + 2k_{\text{angle}} \left(\frac{d}{dz_k} \alpha_{ijk}\right)^2 \tag{115}$$

The derivatives of α_{ijk} with respect to the coordinates x, y and z of the participating atoms i, j and k are defined in Section S1.2.2.

S1.2.2 Derivatives of α_{ijk}

The first and second order derivatives of α_{ijk} with respect to the coordinates x, y and z of the participating atoms i, j and k are:

$$\frac{d}{dx_i} \alpha_{ijk} = \frac{a_{ijk} \frac{d}{dx_i} r_{ij} - r_{ij} \frac{d}{dx_i} a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj} \sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2} + 1}} \tag{116}$$

$$\frac{d}{dy_i}\alpha_{ijk} = \frac{a_{ijk}\frac{d}{dy_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dy_i}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \tag{117}$$

$$\frac{d}{dz_i}\alpha_{ijk} = \frac{a_{ijk}\frac{d}{dz_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dz_i}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \tag{118}$$

$$\frac{d}{dx_j}\alpha_{ijk} = \frac{a_{ijk}r_{ij}\frac{d}{dx_j}r_{kj} + a_{ijk}r_{kj}\frac{d}{dx_j}r_{ij} - r_{ij}r_{kj}\frac{d}{dx_j}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \tag{119}$$

$$\frac{d}{dy_j}\alpha_{ijk} = \frac{a_{ijk}r_{ij}\frac{d}{dy_j}r_{kj} + a_{ijk}r_{kj}\frac{d}{dy_j}r_{ij} - r_{ij}r_{kj}\frac{d}{dy_j}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \tag{120}$$

$$\frac{d}{dz_j}\alpha_{ijk} = \frac{a_{ijk}r_{ij}\frac{d}{dz_j}r_{kj} + a_{ijk}r_{kj}\frac{d}{dz_j}r_{ij} - r_{ij}r_{kj}\frac{d}{dz_j}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \tag{121}$$

$$\frac{d}{dx_k}\alpha_{ijk} = \frac{a_{ijk}\frac{d}{dx_k}r_{kj} - r_{kj}\frac{d}{dx_k}a_{ijk}}{r_{ij} r_{kj}^2\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \tag{122}$$

$$\frac{d}{dy_k}\alpha_{ijk} = \frac{a_{ijk}\frac{d}{dy_k}r_{kj} - r_{kj}\frac{d}{dy_k}a_{ijk}}{r_{ij} r_{kj}^2\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \tag{123}$$

$$\frac{d}{dz_k}\alpha_{ijk} = \frac{a_{ijk}\frac{d}{dz_k}r_{kj} - r_{kj}\frac{d}{dz_k}a_{ijk}}{r_{ij} r_{kj}^2\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \tag{124}$$

$$\frac{d^2}{dx_i^2}\alpha_{ijk} = \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dx_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dx_i}a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dx_i}r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}^2} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dx_i}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)}{r_{ij}^2 r_{kj}\left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1\right)^{\frac{3}{2}}} + \frac{a_{ijk}\frac{d^2}{dx_i^2}r_{ij} - r_{ij}\frac{d^2}{dx_i^2}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} - \frac{2\left(a_{ijk}\frac{d}{dx_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dx_i}a_{ijk}\right)\frac{d}{dx_i}r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \tag{125}$$

$$\frac{d^2}{dy_i dx_i}\alpha_{ijk} = \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dx_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dx_i}a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dy_i}r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}^2} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dy_i}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)}{r_{ij}^2 r_{kj}\left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1\right)^{\frac{3}{2}}} + \frac{a_{ijk}\frac{d^2}{dy_i dx_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d^2}{dy_i dx_i}a_{ijk} - \frac{d}{dx_i}a_{ijk}\frac{d}{dy_i}r_{ij} + \frac{d}{dy_i}a_{ijk}\frac{d}{dx_i}r_{ij}}{r_{ij}^2 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} - \frac{2\left(a_{ijk}\frac{d}{dx_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dx_i}a_{ijk}\right)\frac{d}{dy_i}r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \tag{126}$$

$$\frac{d^2}{dz_i dx_i}\alpha_{ijk} = \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dx_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dx_i}a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dz_i}r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}^2} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dz_i}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)}{r_{ij}^2 r_{kj}\left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1\right)^{\frac{3}{2}}} + \frac{a_{ijk}\frac{d^2}{dz_i dx_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d^2}{dz_i dx_i}a_{ijk} - \frac{d}{dx_i}a_{ijk}\frac{d}{dz_i}r_{ij} + \frac{d}{dz_i}a_{ijk}\frac{d}{dx_i}r_{ij}}{r_{ij}^2 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} - \frac{2\left(a_{ijk}\frac{d}{dx_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dx_i}a_{ijk}\right)\frac{d}{dz_i}r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \tag{127}$$

$$\frac{d^2}{dx_j dx_i}\alpha_{ijk} = \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dx_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dx_i}a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dx_j}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3} - \frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dx_j}r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}^2} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dx_j}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)}{r_{ij}^2 r_{kj}\left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1\right)^{\frac{3}{2}}} + \frac{a_{ijk}\frac{d^2}{dx_j dx_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d^2}{dx_j dx_i}a_{ijk} - \frac{d}{dx_i}a_{ijk}\frac{d}{dx_j}r_{ij} + \frac{d}{dx_j}a_{ijk}\frac{d}{dx_i}r_{ij}}{r_{ij}^2 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} - \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dx_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dx_i}a_{ijk}\right)\frac{d}{dx_j}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} - \frac{2\left(a_{ijk}\frac{d}{dx_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dx_i}a_{ijk}\right)\frac{d}{dx_j}r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \tag{128}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dx_i}\alpha_{ijk} = \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dx_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dx_i}a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dy_j}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3} - \frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dy_j}r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}^2} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dy_j}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)}{r_{ij}^2 r_{kj}\left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1\right)^{\frac{3}{2}}} + \frac{a_{ijk}\frac{d^2}{dy_j dx_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d^2}{dy_j dx_i}a_{ijk} - \frac{d}{dx_i}a_{ijk}\frac{d}{dy_j}r_{ij} + \frac{d}{dy_j}a_{ijk}\frac{d}{dx_i}r_{ij}}{r_{ij}^2 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} - \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dx_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dx_i}a_{ijk}\right)\frac{d}{dy_j}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} - \frac{2\left(a_{ijk}\frac{d}{dx_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dx_i}a_{ijk}\right)\frac{d}{dy_j}r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \tag{129}$$

$$\frac{d^{2}}{dz_{j}dx_{i}}\alpha_{ijk} = \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dx_{i}}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dx_{i}}a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^{2}\frac{d}{dz_{j}}r_{kj}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{3}} - \frac{a_{ijk}^{2}\frac{d}{dz_{j}}r_{ij}}{r_{ij}^{3}r_{kj}^{2}} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dz_{j}}a_{ijk}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}}\right)}{r_{ij}^{2}r_{kj}\left(-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}} + 1\right)^{\frac{3}{2}}} + \frac{a_{ijk}\frac{d^{2}}{dz_{j}dx_{i}}r_{ij} - r_{ij}\frac{d^{2}}{dz_{j}dx_{i}}a_{ijk} - \frac{d}{dx_{i}}a_{ijk}\frac{d}{dz_{j}}r_{ij} + \frac{d}{dz_{j}}a_{ijk}\frac{d}{dx_{i}}r_{ij}}{r_{ij}^{2}r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}} + 1}} - \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dx_{i}}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dx_{i}}a_{ijk}\right)\frac{d}{dz_{j}}r_{kj}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}} + 1}} - \frac{2\left(a_{ijk}\frac{d}{dx_{i}}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dx_{i}}a_{ijk}\right)\frac{d}{dz_{j}}r_{ij}}{r_{ij}^{3}r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}} + 1}} \tag{130}$$

$$\frac{d^{2}}{dx_{k}dx_{i}}\alpha_{ijk} = \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dx_{i}}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dx_{i}}a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^{2}\frac{d}{dx_{k}}r_{kj}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{3}} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dx_{k}}a_{ijk}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}}\right)}{r_{ij}^{2}r_{kj}\left(-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}} + 1\right)^{\frac{3}{2}}} + \frac{-r_{ij}\frac{d^{2}}{dx_{k}dx_{i}}a_{ijk} + \frac{d}{dx_{k}}a_{ijk}\frac{d}{dx_{i}}r_{ij}}{r_{ij}^{2}r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}} + 1}} - \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dx_{i}}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dx_{i}}a_{ijk}\right)\frac{d}{dx_{k}}r_{kj}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}} + 1}} \tag{131}$$

$$\frac{d^{2}}{dy_{k}dx_{i}}\alpha_{ijk} = \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dx_{i}}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dx_{i}}a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^{2}\frac{d}{dy_{k}}r_{kj}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{3}} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dy_{k}}a_{ijk}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}}\right)}{r_{ij}^{2}r_{kj}\left(-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}} + 1\right)^{\frac{3}{2}}} + \frac{-r_{ij}\frac{d^{2}}{dy_{k}dx_{i}}a_{ijk} + \frac{d}{dy_{k}}a_{ijk}\frac{d}{dx_{i}}r_{ij}}{r_{ij}^{2}r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}} + 1}} - \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dx_{i}}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dx_{i}}a_{ijk}\right)\frac{d}{dy_{k}}r_{kj}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}} + 1}} \tag{132}$$

$$\frac{d^{2}}{dz_{k}dx_{i}}\alpha_{ijk} = \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dx_{i}}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dx_{i}}a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^{2}\frac{d}{dz_{k}}r_{kj}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{3}} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dz_{k}}a_{ijk}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}}\right)}{r_{ij}^{2}r_{kj}\left(-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}} + 1\right)^{\frac{3}{2}}} + \frac{-r_{ij}\frac{d^{2}}{dz_{k}dx_{i}}a_{ijk} + \frac{d}{dz_{k}}a_{ijk}\frac{d}{dx_{i}}r_{ij}}{r_{ij}^{2}r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}} + 1}} - \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dx_{i}}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dx_{i}}a_{ijk}\right)\frac{d}{dz_{k}}r_{kj}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}} + 1}} \tag{133}$$

$$\frac{d^{2}}{dy_{i}^{2}}\alpha_{ijk} = \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dy_{i}}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dy_{i}}a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^{2}\frac{d}{dy_{i}}r_{ij}}{r_{ij}^{3}r_{kj}^{2}} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dy_{i}}a_{ijk}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}}\right)}{r_{ij}^{2}r_{kj}\left(-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}} + 1\right)^{\frac{3}{2}}} + \frac{a_{ijk}\frac{d^{2}}{dy_{i}^{2}}r_{ij} - r_{ij}\frac{d^{2}}{dy_{i}^{2}}a_{ijk}}{r_{ij}^{2}r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}} + 1}} - \frac{2\left(a_{ijk}\frac{d}{dy_{i}}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dy_{i}}a_{ijk}\right)\frac{d}{dy_{i}}r_{ij}}{r_{ij}^{3}r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}} + 1}} \tag{134}$$

$$\frac{d^{2}}{dz_{i}dy_{i}}\alpha_{ijk} = \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dy_{i}}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dy_{i}}a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^{2}\frac{d}{dz_{i}}r_{ij}}{r_{ij}^{3}r_{kj}^{2}} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dz_{i}}a_{ijk}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}}\right)}{r_{ij}^{2}r_{kj}\left(-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}} + 1\right)^{\frac{3}{2}}} + \frac{a_{ijk}\frac{d^{2}}{dz_{i}dy_{i}}r_{ij} - r_{ij}\frac{d^{2}}{dz_{i}dy_{i}}a_{ijk} - \frac{d}{dy_{i}}a_{ijk}\frac{d}{dz_{i}}r_{ij} + \frac{d}{dz_{i}}a_{ijk}\frac{d}{dy_{i}}r_{ij}}{r_{ij}^{2}r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}} + 1}} - \frac{2\left(a_{ijk}\frac{d}{dy_{i}}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dy_{i}}a_{ijk}\right)\frac{d}{dz_{i}}r_{ij}}{r_{ij}^{3}r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}} + 1}} \tag{135}$$

$$\frac{d^2}{dx_j dy_i}\alpha_{ijk} = \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dy_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dy_i}a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dx_j}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3} - \frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dx_j}r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}^2} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dx_j}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)}{r_{ij}^2 r_{kj}\left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1\right)^{\frac{3}{2}}} + \frac{a_{ijk}\frac{d^2}{dy_i dx_j}r_{ij} - r_{ij}\frac{d^2}{dy_i dx_j}a_{ijk} + \frac{d}{dx_j}a_{ijk}\frac{d}{dy_i}r_{ij} - \frac{d}{dy_i}a_{ijk}\frac{d}{dx_j}r_{ij}}{r_{ij}^2 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} - \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dy_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dy_i}a_{ijk}\right)\frac{d}{dx_j}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} - \frac{2\left(a_{ijk}\frac{d}{dy_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dy_i}a_{ijk}\right)\frac{d}{dx_j}r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \tag{136}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dy_i}\alpha_{ijk} = \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dy_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dy_i}a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dy_j}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3} - \frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dy_j}r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}^2} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dy_j}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)}{r_{ij}^2 r_{kj}\left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1\right)^{\frac{3}{2}}} + \frac{a_{ijk}\frac{d^2}{dy_j dy_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d^2}{dy_j dy_i}a_{ijk} - \frac{d}{dy_i}a_{ijk}\frac{d}{dy_j}r_{ij} + \frac{d}{dy_j}a_{ijk}\frac{d}{dy_i}r_{ij}}{r_{ij}^2 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} - \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dy_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dy_i}a_{ijk}\right)\frac{d}{dy_j}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} - \frac{2\left(a_{ijk}\frac{d}{dy_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dy_i}a_{ijk}\right)\frac{d}{dy_j}r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \tag{137}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dy_i}\alpha_{ijk} = \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dy_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dy_i}a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dz_j}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3} - \frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dz_j}r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}^2} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dz_j}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)}{r_{ij}^2 r_{kj}\left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1\right)^{\frac{3}{2}}} + \frac{a_{ijk}\frac{d^2}{dz_j dy_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d^2}{dz_j dy_i}a_{ijk} - \frac{d}{dy_i}a_{ijk}\frac{d}{dz_j}r_{ij} + \frac{d}{dz_j}a_{ijk}\frac{d}{dy_i}r_{ij}}{r_{ij}^2 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} - \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dy_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dy_i}a_{ijk}\right)\frac{d}{dz_j}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} - \frac{2\left(a_{ijk}\frac{d}{dy_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dy_i}a_{ijk}\right)\frac{d}{dz_j}r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \tag{138}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dy_i}\alpha_{ijk} = \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dy_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dy_i}a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dx_k}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dx_k}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)}{r_{ij}^2 r_{kj}\left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1\right)^{\frac{3}{2}}} + \frac{-r_{ij}\frac{d^2}{dy_i dx_k}a_{ijk} + \frac{d}{dx_k}a_{ijk}\frac{d}{dy_i}r_{ij}}{r_{ij}^2 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} - \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dy_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dy_i}a_{ijk}\right)\frac{d}{dx_k}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \tag{139}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dy_i}\alpha_{ijk} = \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dy_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dy_i}a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dy_k}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dy_k}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)}{r_{ij}^2 r_{kj}\left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1\right)^{\frac{3}{2}}} + \frac{-r_{ij}\frac{d^2}{dy_k dy_i}a_{ijk} + \frac{d}{dy_k}a_{ijk}\frac{d}{dy_i}r_{ij}}{r_{ij}^2 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} - \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dy_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dy_i}a_{ijk}\right)\frac{d}{dy_k}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \tag{140}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dy_i}\alpha_{ijk} = \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dy_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dy_i}a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dz_k}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dz_k}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)}{r_{ij}^2 r_{kj}\left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1\right)^{\frac{3}{2}}} + \frac{-r_{ij}\frac{d^2}{dz_k dy_i}a_{ijk} + \frac{d}{dz_k}a_{ijk}\frac{d}{dy_i}r_{ij}}{r_{ij}^2 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} - \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dy_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dy_i}a_{ijk}\right)\frac{d}{dz_k}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \tag{141}$$

$$\frac{d^2}{dz_i^2}\alpha_{ijk} = \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dz_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dz_i}a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dz_i}r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}^2} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dz_i}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)}{r_{ij}^2 r_{kj}\left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1\right)^{\frac{3}{2}}} + \frac{a_{ijk}\frac{d^2}{dz_i^2}r_{ij} - r_{ij}\frac{d^2}{dz_i^2}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} - \frac{2\left(a_{ijk}\frac{d}{dz_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dz_i}a_{ijk}\right)\frac{d}{dz_i}r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \tag{142}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dx_j dz_i}\alpha_{ijk} = {} & \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dz_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dz_i}a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dx_j}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3} - \frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dx_j}r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}^2} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dx_j}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)}{r_{ij}^2 r_{kj}\left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1\right)^{\frac{3}{2}}} + \frac{a_{ijk}\frac{d^2}{dz_i dx_j}r_{ij} - r_{ij}\frac{d^2}{dz_i dx_j}a_{ijk} + \frac{d}{dx_j}a_{ijk}\frac{d}{dz_i}r_{ij} - \frac{d}{dz_i}a_{ijk}\frac{d}{dx_j}r_{ij}}{r_{ij}^2 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \\ & - \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dz_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dz_i}a_{ijk}\right)\frac{d}{dx_j}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} - \frac{2\left(a_{ijk}\frac{d}{dz_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dz_i}a_{ijk}\right)\frac{d}{dx_j}r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}}\end{aligned} \tag{143}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dy_j dz_i}\alpha_{ijk} = {} & \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dz_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dz_i}a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dy_j}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3} - \frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dy_j}r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}^2} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dy_j}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)}{r_{ij}^2 r_{kj}\left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1\right)^{\frac{3}{2}}} + \frac{a_{ijk}\frac{d^2}{dz_i dy_j}r_{ij} - r_{ij}\frac{d^2}{dz_i dy_j}a_{ijk} + \frac{d}{dy_j}a_{ijk}\frac{d}{dz_i}r_{ij} - \frac{d}{dz_i}a_{ijk}\frac{d}{dy_j}r_{ij}}{r_{ij}^2 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \\ & - \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dz_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dz_i}a_{ijk}\right)\frac{d}{dy_j}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} - \frac{2\left(a_{ijk}\frac{d}{dz_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dz_i}a_{ijk}\right)\frac{d}{dy_j}r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}}\end{aligned} \tag{144}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dz_j dz_i}\alpha_{ijk} = {} & \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dz_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dz_i}a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dz_j}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3} - \frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dz_j}r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}^2} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dz_j}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)}{r_{ij}^2 r_{kj}\left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1\right)^{\frac{3}{2}}} + \frac{a_{ijk}\frac{d^2}{dz_j dz_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d^2}{dz_j dz_i}a_{ijk} - \frac{d}{dz_i}a_{ijk}\frac{d}{dz_j}r_{ij} + \frac{d}{dz_j}a_{ijk}\frac{d}{dz_i}r_{ij}}{r_{ij}^2 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \\ & - \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dz_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dz_i}a_{ijk}\right)\frac{d}{dz_j}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} - \frac{2\left(a_{ijk}\frac{d}{dz_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dz_i}a_{ijk}\right)\frac{d}{dz_j}r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}}\end{aligned} \tag{145}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dz_i}\alpha_{ijk} = \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dz_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dz_i}a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dx_k}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dx_k}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)}{r_{ij}^2 r_{kj}\left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1\right)^{\frac{3}{2}}} + \frac{-r_{ij}\frac{d^2}{dz_i dx_k}a_{ijk} + \frac{d}{dx_k}a_{ijk}\frac{d}{dz_i}r_{ij}}{r_{ij}^2 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} - \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dz_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dz_i}a_{ijk}\right)\frac{d}{dx_k}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \tag{146}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dz_i}\alpha_{ijk} = \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dz_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dz_i}a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dy_k}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dy_k}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)}{r_{ij}^2 r_{kj}\left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1\right)^{\frac{3}{2}}} + \frac{-r_{ij}\frac{d^2}{dz_i dy_k}a_{ijk} + \frac{d}{dy_k}a_{ijk}\frac{d}{dz_i}r_{ij}}{r_{ij}^2 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} - \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dz_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dz_i}a_{ijk}\right)\frac{d}{dy_k}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \tag{147}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dz_i}\alpha_{ijk} = \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dz_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dz_i}a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dz_k}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dz_k}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)}{r_{ij}^2 r_{kj}\left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1\right)^{\frac{3}{2}}} + \frac{-r_{ij}\frac{d^2}{dz_k dz_i}a_{ijk} + \frac{d}{dz_k}a_{ijk}\frac{d}{dz_i}r_{ij}}{r_{ij}^2 r_{kj}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} - \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dz_i}r_{ij} - r_{ij}\frac{d}{dz_i}a_{ijk}\right)\frac{d}{dz_k}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \tag{148}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dx_j^2}\alpha_{ijk} = &\frac{a_{ijk}r_{ij}\frac{d^2}{dx_j^2}r_{kj} + a_{ijk}r_{kj}\frac{d^2}{dx_j^2}r_{ij} + 2a_{ijk}\frac{d}{dx_j}r_{ij}\frac{d}{dx_j}r_{kj} - r_{ij}r_{kj}\frac{d^2}{dx_j^2}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \\ &+ \frac{\left(a_{ijk}r_{ij}\frac{d}{dx_j}r_{kj} + a_{ijk}r_{kj}\frac{d}{dx_j}r_{ij} - r_{ij}r_{kj}\frac{d}{dx_j}a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dx_j}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3} - \frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dx_j}r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}^2} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dx_j}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)}{r_{ij}^2 r_{kj}^2\left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1\right)^{\frac{3}{2}}} \\ &- \frac{2\left(a_{ijk}r_{ij}\frac{d}{dx_j}r_{kj} + a_{ijk}r_{kj}\frac{d}{dx_j}r_{ij} - r_{ij}r_{kj}\frac{d}{dx_j}a_{ijk}\right)\frac{d}{dx_j}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} - \frac{2\left(a_{ijk}r_{ij}\frac{d}{dx_j}r_{kj} + a_{ijk}r_{kj}\frac{d}{dx_j}r_{ij} - r_{ij}r_{kj}\frac{d}{dx_j}a_{ijk}\right)\frac{d}{dx_j}r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}^2\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}}\end{aligned} \tag{149}$$

$$
\begin{aligned}
\frac{d^2}{dy_j dx_j}\alpha_{ijk} = {} & \frac{a_{ijk} r_{ij} \frac{d^2}{dy_j dx_j} r_{kj} + a_{ijk} r_{kj} \frac{d^2}{dy_j dx_j} r_{ij} + a_{ijk} \frac{d}{dx_j} r_{ij} \frac{d}{dy_j} r_{kj} + a_{ijk} \frac{d}{dy_j} r_{ij} \frac{d}{dx_j} r_{kj} - r_{ij} r_{kj} \frac{d^2}{dy_j dx_j} a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2 \sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}}} \\
& + \frac{-r_{ij} \frac{d}{dx_j} a_{ijk} \frac{d}{dy_j} r_{kj} + r_{ij} \frac{d}{dy_j} a_{ijk} \frac{d}{dx_j} r_{kj} - r_{kj} \frac{d}{dx_j} a_{ijk} \frac{d}{dy_j} r_{ij} + r_{kj} \frac{d}{dy_j} a_{ijk} \frac{d}{dx_j} r_{ij}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2 \sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2} + 1}} \\
& + \frac{\left(a_{ijk} r_{ij} \frac{d}{dx_j} r_{kj} + a_{ijk} r_{kj} \frac{d}{dx_j} r_{ij} - r_{ij} r_{kj} \frac{d}{dx_j} a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^2 \frac{d}{dy_j} r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3} - \frac{a_{ijk}^2 \frac{d}{dy_j} r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}^2} + \frac{a_{ijk} \frac{d}{dy_j} a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)}{r_{ij}^2 r_{kj}^2 \left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2} + 1\right)^{\frac{3}{2}}} \\
& - \frac{2\left(a_{ijk} r_{ij} \frac{d}{dx_j} r_{kj} + a_{ijk} r_{kj} \frac{d}{dx_j} r_{ij} - r_{ij} r_{kj} \frac{d}{dx_j} a_{ijk}\right) \frac{d}{dy_j} r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3 \sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2} + 1}} \\
& - \frac{2\left(a_{ijk} r_{ij} \frac{d}{dx_j} r_{kj} + a_{ijk} r_{kj} \frac{d}{dx_j} r_{ij} - r_{ij} r_{kj} \frac{d}{dx_j} a_{ijk}\right) \frac{d}{dy_j} r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}^2 \sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2} + 1}}
\end{aligned} \tag{150}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{d^2}{dz_j dx_j}\alpha_{ijk} = {} & \frac{a_{ijk} r_{ij} \frac{d^2}{dz_j dx_j} r_{kj} + a_{ijk} r_{kj} \frac{d^2}{dz_j dx_j} r_{ij} + a_{ijk} \frac{d}{dx_j} r_{ij} \frac{d}{dz_j} r_{kj} + a_{ijk} \frac{d}{dz_j} r_{ij} \frac{d}{dx_j} r_{kj} - r_{ij} r_{kj} \frac{d^2}{dz_j dx_j} a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2 \sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2} + 1}} \\
& + \frac{-r_{ij} \frac{d}{dx_j} a_{ijk} \frac{d}{dz_j} r_{kj} + r_{ij} \frac{d}{dz_j} a_{ijk} \frac{d}{dx_j} r_{kj} - r_{kj} \frac{d}{dx_j} a_{ijk} \frac{d}{dz_j} r_{ij} + r_{kj} \frac{d}{dz_j} a_{ijk} \frac{d}{dx_j} r_{ij}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2 \sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2} + 1}} \\
& + \frac{\left(a_{ijk} r_{ij} \frac{d}{dx_j} r_{kj} + a_{ijk} r_{kj} \frac{d}{dx_j} r_{ij} - r_{ij} r_{kj} \frac{d}{dx_j} a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^2 \frac{d}{dz_j} r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3} - \frac{a_{ijk}^2 \frac{d}{dz_j} r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}^2} + \frac{a_{ijk} \frac{d}{dz_j} a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)}{r_{ij}^2 r_{kj}^2 \left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2} + 1\right)^{\frac{3}{2}}} \\
& - \frac{2\left(a_{ijk} r_{ij} \frac{d}{dx_j} r_{kj} + a_{ijk} r_{kj} \frac{d}{dx_j} r_{ij} - r_{ij} r_{kj} \frac{d}{dx_j} a_{ijk}\right) \frac{d}{dz_j} r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3 \sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2} + 1}} \\
& - \frac{2\left(a_{ijk} r_{ij} \frac{d}{dx_j} r_{kj} + a_{ijk} r_{kj} \frac{d}{dx_j} r_{ij} - r_{ij} r_{kj} \frac{d}{dx_j} a_{ijk}\right) \frac{d}{dz_j} r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}^2 \sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2} + 1}}
\end{aligned}
\tag{151}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{d^2}{dx_k dx_j}\alpha_{ijk} = {} & \frac{a_{ijk} r_{ij} \frac{d^2}{dx_k dx_j} r_{kj} + a_{ijk} \frac{d}{dx_j} r_{ij} \frac{d}{dx_k} r_{kj} - r_{ij} r_{kj} \frac{d^2}{dx_k dx_j} a_{ijk} - r_{ij} \frac{d}{dx_j} a_{ijk} \frac{d}{dx_k} r_{kj} + r_{ij} \frac{d}{dx_k} a_{ijk} \frac{d}{dx_j} r_{kj} + r_{kj} \frac{d}{dx_k} a_{ijk} \frac{d}{dx_j} r_{ij}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2 \sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2} + 1}} \\
& + \frac{\left(-\frac{a_{ijk}^2 \frac{d}{dx_k} r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3} + \frac{a_{ijk} \frac{d}{dx_k} a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)\left(a_{ijk} r_{ij} \frac{d}{dx_j} r_{kj} + a_{ijk} r_{kj} \frac{d}{dx_j} r_{ij} - r_{ij} r_{kj} \frac{d}{dx_j} a_{ijk}\right)}{r_{ij}^2 r_{kj}^2 \left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2} + 1\right)^{\frac{3}{2}}} \\
& - \frac{2\left(a_{ijk} r_{ij} \frac{d}{dx_j} r_{kj} + a_{ijk} r_{kj} \frac{d}{dx_j} r_{ij} - r_{ij} r_{kj} \frac{d}{dx_j} a_{ijk}\right) \frac{d}{dx_k} r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3 \sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2} + 1}}
\end{aligned}
\tag{152}
$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dy_k dx_j}\alpha_{ijk} = & \frac{a_{ijk} r_{ij} \frac{d^2}{dy_k dx_j} r_{kj} + a_{ijk}\frac{d}{dx_j} r_{ij} \frac{d}{dy_k} r_{kj} - r_{ij} r_{kj}\frac{d^2}{dy_k dx_j} a_{ijk} - r_{ij}\frac{d}{dx_j}a_{ijk}\frac{d}{dy_k}r_{kj} + r_{ij}\frac{d}{dy_k}a_{ijk}\frac{d}{dx_j}r_{kj} + r_{kj}\frac{d}{dy_k}a_{ijk}\frac{d}{dx_j}r_{ij}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \\ & + \frac{\left(-\frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dy_k}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dy_k}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)\left(a_{ijk} r_{ij}\frac{d}{dx_j}r_{kj} + a_{ijk} r_{kj}\frac{d}{dx_j} r_{ij} - r_{ij}r_{kj}\frac{d}{dx_j}a_{ijk}\right)}{r_{ij}^2 r_{kj}^2\left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2r_{kj}^2}+1\right)^{\frac{3}{2}}} \\ & - \frac{2\left(a_{ijk} r_{ij}\frac{d}{dx_j}r_{kj} + a_{ijk} r_{kj}\frac{d}{dx_j} r_{ij} - r_{ij}r_{kj}\frac{d}{dx_j}a_{ijk}\right)\frac{d}{dy_k}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}}\end{aligned} \tag{153}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dz_k dx_j}\alpha_{ijk} = & \frac{a_{ijk} r_{ij} \frac{d^2}{dz_k dx_j} r_{kj} + a_{ijk}\frac{d}{dx_j} r_{ij} \frac{d}{dz_k} r_{kj} - r_{ij} r_{kj}\frac{d^2}{dz_k dx_j} a_{ijk} - r_{ij}\frac{d}{dx_j}a_{ijk}\frac{d}{dz_k}r_{kj} + r_{ij}\frac{d}{dz_k}a_{ijk}\frac{d}{dx_j}r_{kj} + r_{kj}\frac{d}{dz_k}a_{ijk}\frac{d}{dx_j}r_{ij}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \\ & + \frac{\left(-\frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dz_k}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dz_k}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)\left(a_{ijk} r_{ij}\frac{d}{dx_j}r_{kj} + a_{ijk} r_{kj}\frac{d}{dx_j} r_{ij} - r_{ij}r_{kj}\frac{d}{dx_j}a_{ijk}\right)}{r_{ij}^2 r_{kj}^2\left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2r_{kj}^2}+1\right)^{\frac{3}{2}}} \\ & - \frac{2\left(a_{ijk} r_{ij}\frac{d}{dx_j}r_{kj} + a_{ijk} r_{kj}\frac{d}{dx_j} r_{ij} - r_{ij}r_{kj}\frac{d}{dx_j}a_{ijk}\right)\frac{d}{dz_k}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}}\end{aligned} \tag{154}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dy_j^2}\alpha_{ijk} = & \frac{a_{ijk} r_{ij} \frac{d^2}{dy_j^2} r_{kj} + a_{ijk} r_{kj}\frac{d^2}{dy_j^2} r_{ij} + 2a_{ijk}\frac{d}{dy_j} r_{ij}\frac{d}{dy_j} r_{kj} - r_{ij} r_{kj}\frac{d^2}{dy_j^2} a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \\ & + \frac{\left(a_{ijk} r_{ij}\frac{d}{dy_j}r_{kj} + a_{ijk} r_{kj}\frac{d}{dy_j} r_{ij} - r_{ij}r_{kj}\frac{d}{dy_j}a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dy_j}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3} - \frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dy_j}r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}^2} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dy_j}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)}{r_{ij}^2 r_{kj}^2\left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2r_{kj}^2}+1\right)^{\frac{3}{2}}} \\ & - \frac{2\left(a_{ijk} r_{ij}\frac{d}{dy_j}r_{kj} + a_{ijk} r_{kj}\frac{d}{dy_j} r_{ij} - r_{ij}r_{kj}\frac{d}{dy_j}a_{ijk}\right)\frac{d}{dy_j}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} - \frac{2\left(a_{ijk} r_{ij}\frac{d}{dy_j}r_{kj} + a_{ijk} r_{kj}\frac{d}{dy_j} r_{ij} - r_{ij}r_{kj}\frac{d}{dy_j}a_{ijk}\right)\frac{d}{dy_j}r_{ij}}{r_{ij}^3 r_{kj}^2\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}}\end{aligned} \tag{155}$$

$$
\begin{aligned}
\frac{d^{2}}{dz_{j}dy_{j}}\alpha_{ijk} = {} & \frac{a_{ijk} r_{ij} \frac{d^{2}}{dz_{j}dy_{j}} r_{kj} + a_{ijk} r_{kj} \frac{d^{2}}{dz_{j}dy_{j}} r_{ij} + a_{ijk} \frac{d}{dy_{j}} r_{ij} \frac{d}{dz_{j}} r_{kj} + a_{ijk} \frac{d}{dz_{j}} r_{ij} \frac{d}{dy_{j}} r_{kj}}{r_{ij}^{2} r_{kj}^{2} \sqrt{- \frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2} r_{kj}^{2}} + 1}} \\
& \frac{- r_{ij} r_{kj} \frac{d^{2}}{dz_{j}dy_{j}} a_{ijk} - r_{ij} \frac{d}{dy_{j}} a_{ijk} \frac{d}{dz_{j}} r_{kj} + r_{ij} \frac{d}{dz_{j}} a_{ijk} \frac{d}{dy_{j}} r_{kj} - r_{kj} \frac{d}{dy_{j}} a_{ijk} \frac{d}{dz_{j}} r_{ij} + r_{kj} \frac{d}{dz_{j}} a_{ijk} \frac{d}{dy_{j}} r_{ij}}{r_{ij}^{2} r_{kj}^{2} \sqrt{- \frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2} r_{kj}^{2}} + 1}} \\
& + \frac{\left(a_{ijk} r_{ij} \frac{d}{dy_{j}} r_{kj} + a_{ijk} r_{kj} \frac{d}{dy_{j}} r_{ij} - r_{ij} r_{kj} \frac{d}{dy_{j}} a_{ijk}\right) \left(- \frac{a_{ijk}^{2} \frac{d}{dz_{j}} r_{kj}}{r_{ij}^{2} r_{kj}^{3}} - \frac{a_{ijk}^{2} \frac{d}{dz_{j}} r_{ij}}{r_{ij}^{3} r_{kj}^{2}} + \frac{a_{ijk} \frac{d}{dz_{j}} a_{ijk}}{r_{ij}^{2} r_{kj}^{2}}\right)}{r_{ij}^{2} r_{kj}^{2} \left(- \frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2} r_{kj}^{2}} + 1\right)^{\frac{3}{2}}} \\
& - \frac{2 \left(a_{ijk} r_{ij} \frac{d}{dy_{j}} r_{kj} + a_{ijk} r_{kj} \frac{d}{dy_{j}} r_{ij} - r_{ij} r_{kj} \frac{d}{dy_{j}} a_{ijk}\right) \frac{d}{dz_{j}} r_{kj}}{r_{ij}^{2} r_{kj}^{3} \sqrt{- \frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2} r_{kj}^{2}} + 1}} \\
& - \frac{2 \left(a_{ijk} r_{ij} \frac{d}{dy_{j}} r_{kj} + a_{ijk} r_{kj} \frac{d}{dy_{j}} r_{ij} - r_{ij} r_{kj} \frac{d}{dy_{j}} a_{ijk}\right) \frac{d}{dz_{j}} r_{ij}}{r_{ij}^{3} r_{kj}^{2} \sqrt{- \frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2} r_{kj}^{2}} + 1}}
\end{aligned}
\tag{156}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{d^{2}}{dx_{k}dy_{j}}\alpha_{ijk} = {} & \frac{a_{ijk} r_{ij} \frac{d^{2}}{dy_{j}dx_{k}} r_{kj} + a_{ijk} \frac{d}{dy_{j}} r_{ij} \frac{d}{dx_{k}} r_{kj} - r_{ij} r_{kj} \frac{d^{2}}{dy_{j}dx_{k}} a_{ijk} + r_{ij} \frac{d}{dx_{k}} a_{ijk} \frac{d}{dy_{j}} r_{kj} - r_{ij} \frac{d}{dy_{j}} a_{ijk} \frac{d}{dx_{k}} r_{kj} + r_{kj} \frac{d}{dx_{k}} a_{ijk} \frac{d}{dy_{j}} r_{ij}}{r_{ij}^{2} r_{kj}^{2} \sqrt{- \frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2} r_{kj}^{2}} + 1}} \\
& + \frac{\left(- \frac{a_{ijk}^{2} \frac{d}{dx_{k}} r_{kj}}{r_{ij}^{2} r_{kj}^{3}} + \frac{a_{ijk} \frac{d}{dx_{k}} a_{ijk}}{r_{ij}^{2} r_{kj}^{2}}\right) \left(a_{ijk} r_{ij} \frac{d}{dy_{j}} r_{kj} + a_{ijk} r_{kj} \frac{d}{dy_{j}} r_{ij} - r_{ij} r_{kj} \frac{d}{dy_{j}} a_{ijk}\right)}{r_{ij}^{2} r_{kj}^{2} \left(- \frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2} r_{kj}^{2}} + 1\right)^{\frac{3}{2}}} - \frac{2 \left(a_{ijk} r_{ij} \frac{d}{dy_{j}} r_{kj} + a_{ijk} r_{kj} \frac{d}{dy_{j}} r_{ij} - r_{ij} r_{kj} \frac{d}{dy_{j}} a_{ijk}\right) \frac{d}{dx_{k}} r_{kj}}{r_{ij}^{2} r_{kj}^{3} \sqrt{- \frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2} r_{kj}^{2}} + 1}}
\end{aligned}
\tag{157}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{d^{2}}{dy_{k}dy_{j}}\alpha_{ijk} = {} & \frac{a_{ijk} r_{ij} \frac{d^{2}}{dy_{k}dy_{j}} r_{kj} + a_{ijk} \frac{d}{dy_{j}} r_{ij} \frac{d}{dy_{k}} r_{kj} - r_{ij} r_{kj} \frac{d^{2}}{dy_{k}dy_{j}} a_{ijk} - r_{ij} \frac{d}{dy_{j}} a_{ijk} \frac{d}{dy_{k}} r_{kj} + r_{ij} \frac{d}{dy_{k}} a_{ijk} \frac{d}{dy_{j}} r_{kj} + r_{kj} \frac{d}{dy_{k}} a_{ijk} \frac{d}{dy_{j}} r_{ij}}{r_{ij}^{2} r_{kj}^{2} \sqrt{- \frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2} r_{kj}^{2}} + 1}} \\
& + \frac{\left(- \frac{a_{ijk}^{2} \frac{d}{dy_{k}} r_{kj}}{r_{ij}^{2} r_{kj}^{3}} + \frac{a_{ijk} \frac{d}{dy_{k}} a_{ijk}}{r_{ij}^{2} r_{kj}^{2}}\right) \left(a_{ijk} r_{ij} \frac{d}{dy_{j}} r_{kj} + a_{ijk} r_{kj} \frac{d}{dy_{j}} r_{ij} - r_{ij} r_{kj} \frac{d}{dy_{j}} a_{ijk}\right)}{r_{ij}^{2} r_{kj}^{2} \left(- \frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2} r_{kj}^{2}} + 1\right)^{\frac{3}{2}}} - \frac{2 \left(a_{ijk} r_{ij} \frac{d}{dy_{j}} r_{kj} + a_{ijk} r_{kj} \frac{d}{dy_{j}} r_{ij} - r_{ij} r_{kj} \frac{d}{dy_{j}} a_{ijk}\right) \frac{d}{dy_{k}} r_{kj}}{r_{ij}^{2} r_{kj}^{3} \sqrt{- \frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2} r_{kj}^{2}} + 1}}
\end{aligned}
\tag{158}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{d^{2}}{dz_{k}dy_{j}}\alpha_{ijk} ={}& \frac{a_{ijk}r_{ij}\frac{d^{2}}{dz_{k}dy_{j}}r_{kj} + a_{ijk}\frac{d}{dy_{j}}r_{ij}\frac{d}{dz_{k}}r_{kj} - r_{ij}r_{kj}\frac{d^{2}}{dz_{k}dy_{j}}a_{ijk} - r_{ij}\frac{d}{dy_{j}}a_{ijk}\frac{d}{dz_{k}}r_{kj} + r_{ij}\frac{d}{dz_{k}}a_{ijk}\frac{d}{dy_{j}}r_{kj} + r_{kj}\frac{d}{dz_{k}}a_{ijk}\frac{d}{dy_{j}}r_{ij}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}}+1}} \\
&+ \frac{\left(-\frac{a_{ijk}^{2}\frac{d}{dz_{k}}r_{kj}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{3}} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dz_{k}}a_{ijk}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}}\right)\left(a_{ijk}r_{ij}\frac{d}{dy_{j}}r_{kj} + a_{ijk}r_{kj}\frac{d}{dy_{j}}r_{ij} - r_{ij}r_{kj}\frac{d}{dy_{j}}a_{ijk}\right)}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}\left(-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}}+1\right)^{\frac{3}{2}}} - \frac{2\left(a_{ijk}r_{ij}\frac{d}{dy_{j}}r_{kj} + a_{ijk}r_{kj}\frac{d}{dy_{j}}r_{ij} - r_{ij}r_{kj}\frac{d}{dy_{j}}a_{ijk}\right)\frac{d}{dz_{k}}r_{kj}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{3}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}}+1}}
\end{aligned} \tag{159}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{d^{2}}{dz_{j}^{2}}\alpha_{ijk} ={}& \frac{a_{ijk}r_{ij}\frac{d^{2}}{dz_{j}^{2}}r_{kj} + a_{ijk}r_{kj}\frac{d^{2}}{dz_{j}^{2}}r_{ij} + 2a_{ijk}\frac{d}{dz_{j}}r_{ij}\frac{d}{dz_{j}}r_{kj} - r_{ij}r_{kj}\frac{d^{2}}{dz_{j}^{2}}a_{ijk}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}}+1}} \\
&+ \frac{\left(a_{ijk}r_{ij}\frac{d}{dz_{j}}r_{kj} + a_{ijk}r_{kj}\frac{d}{dz_{j}}r_{ij} - r_{ij}r_{kj}\frac{d}{dz_{j}}a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^{2}\frac{d}{dz_{j}}r_{kj}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{3}} - \frac{a_{ijk}^{2}\frac{d}{dz_{j}}r_{ij}}{r_{ij}^{3}r_{kj}^{2}} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dz_{j}}a_{ijk}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}}\right)}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}\left(-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}}+1\right)^{\frac{3}{2}}} \\
&- \frac{2\left(a_{ijk}r_{ij}\frac{d}{dz_{j}}r_{kj} + a_{ijk}r_{kj}\frac{d}{dz_{j}}r_{ij} - r_{ij}r_{kj}\frac{d}{dz_{j}}a_{ijk}\right)\frac{d}{dz_{j}}r_{kj}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{3}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}}+1}} - \frac{2\left(a_{ijk}r_{ij}\frac{d}{dz_{j}}r_{kj} + a_{ijk}r_{kj}\frac{d}{dz_{j}}r_{ij} - r_{ij}r_{kj}\frac{d}{dz_{j}}a_{ijk}\right)\frac{d}{dz_{j}}r_{ij}}{r_{ij}^{3}r_{kj}^{2}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}}+1}}
\end{aligned} \tag{160}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{d^{2}}{dx_{k}dz_{j}}\alpha_{ijk} ={}& \frac{a_{ijk}r_{ij}\frac{d^{2}}{dz_{j}dx_{k}}r_{kj} + a_{ijk}\frac{d}{dz_{j}}r_{ij}\frac{d}{dx_{k}}r_{kj} - r_{ij}r_{kj}\frac{d^{2}}{dz_{j}dx_{k}}a_{ijk} + r_{ij}\frac{d}{dx_{k}}a_{ijk}\frac{d}{dz_{j}}r_{kj} - r_{ij}\frac{d}{dz_{j}}a_{ijk}\frac{d}{dx_{k}}r_{kj} + r_{kj}\frac{d}{dx_{k}}a_{ijk}\frac{d}{dz_{j}}r_{ij}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}}+1}} \\
&+ \frac{\left(-\frac{a_{ijk}^{2}\frac{d}{dx_{k}}r_{kj}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{3}} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dx_{k}}a_{ijk}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}}\right)\left(a_{ijk}r_{ij}\frac{d}{dz_{j}}r_{kj} + a_{ijk}r_{kj}\frac{d}{dz_{j}}r_{ij} - r_{ij}r_{kj}\frac{d}{dz_{j}}a_{ijk}\right)}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}\left(-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}}+1\right)^{\frac{3}{2}}} - \frac{2\left(a_{ijk}r_{ij}\frac{d}{dz_{j}}r_{kj} + a_{ijk}r_{kj}\frac{d}{dz_{j}}r_{ij} - r_{ij}r_{kj}\frac{d}{dz_{j}}a_{ijk}\right)\frac{d}{dx_{k}}r_{kj}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{3}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}}+1}}
\end{aligned} \tag{161}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{d^{2}}{dy_{k}dz_{j}}\alpha_{ijk} ={}& \frac{a_{ijk}r_{ij}\frac{d^{2}}{dz_{j}dy_{k}}r_{kj} + a_{ijk}\frac{d}{dz_{j}}r_{ij}\frac{d}{dy_{k}}r_{kj} - r_{ij}r_{kj}\frac{d^{2}}{dz_{j}dy_{k}}a_{ijk} + r_{ij}\frac{d}{dy_{k}}a_{ijk}\frac{d}{dz_{j}}r_{kj} - r_{ij}\frac{d}{dz_{j}}a_{ijk}\frac{d}{dy_{k}}r_{kj} + r_{kj}\frac{d}{dy_{k}}a_{ijk}\frac{d}{dz_{j}}r_{ij}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}}+1}} \\
&+ \frac{\left(-\frac{a_{ijk}^{2}\frac{d}{dy_{k}}r_{kj}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{3}} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dy_{k}}a_{ijk}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}}\right)\left(a_{ijk}r_{ij}\frac{d}{dz_{j}}r_{kj} + a_{ijk}r_{kj}\frac{d}{dz_{j}}r_{ij} - r_{ij}r_{kj}\frac{d}{dz_{j}}a_{ijk}\right)}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}\left(-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}}+1\right)^{\frac{3}{2}}} - \frac{2\left(a_{ijk}r_{ij}\frac{d}{dz_{j}}r_{kj} + a_{ijk}r_{kj}\frac{d}{dz_{j}}r_{ij} - r_{ij}r_{kj}\frac{d}{dz_{j}}a_{ijk}\right)\frac{d}{dy_{k}}r_{kj}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{3}\sqrt{-\frac{a_{ijk}^{2}}{r_{ij}^{2}r_{kj}^{2}}+1}}
\end{aligned} \tag{162}
$$

$$\frac{d^2}{dz_k dz_j}\alpha_{ijk} = \frac{a_{ijk} r_{ij} \frac{d^2}{dz_k dz_j} r_{kj} + a_{ijk} \frac{d}{dz_j} r_{ij} \frac{d}{dz_k} r_{kj} - r_{ij} r_{kj} \frac{d^2}{dz_k dz_j} a_{ijk} - r_{ij} \frac{d}{dz_j} a_{ijk} \frac{d}{dz_k} r_{kj} + r_{ij} \frac{d}{dz_k} a_{ijk} \frac{d}{dz_j} r_{kj} + r_{kj} \frac{d}{dz_k} a_{ijk} \frac{d}{dz_j} r_{ij}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2 \sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2} + 1}}$$
$$+ \frac{\left(-\frac{a_{ijk}^2 \frac{d}{dz_k} r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3} + \frac{a_{ijk} \frac{d}{dz_k} a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)\left(a_{ijk} r_{ij} \frac{d}{dz_j} r_{kj} + a_{ijk} r_{kj} \frac{d}{dz_j} r_{ij} - r_{ij} r_{kj} \frac{d}{dz_j} a_{ijk}\right)}{r_{ij}^2 r_{kj}^2 \left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2} + 1\right)^{\frac{3}{2}}} - \frac{2\left(a_{ijk} r_{ij} \frac{d}{dz_j} r_{kj} + a_{ijk} r_{kj} \frac{d}{dz_j} r_{ij} - r_{ij} r_{kj} \frac{d}{dz_j} a_{ijk}\right) \frac{d}{dz_k} r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3 \sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2} + 1}} \tag{163}$$

$$\frac{d^2}{dx_k^2}\alpha_{ijk} = \frac{\left(a_{ijk} \frac{d}{dx_k} r_{kj} - r_{kj} \frac{d}{dx_k} a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^2 \frac{d}{dx_k} r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3} + \frac{a_{ijk} \frac{d}{dx_k} a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)}{r_{ij} r_{kj}^2 \left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2} + 1\right)^{\frac{3}{2}}} + \frac{a_{ijk} \frac{d^2}{dx_k^2} r_{kj} - r_{kj} \frac{d^2}{dx_k^2} a_{ijk}}{r_{ij} r_{kj}^2 \sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2} + 1}} - \frac{2\left(a_{ijk} \frac{d}{dx_k} r_{kj} - r_{kj} \frac{d}{dx_k} a_{ijk}\right) \frac{d}{dx_k} r_{kj}}{r_{ij} r_{kj}^3 \sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2} + 1}} \tag{164}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dx_k}\alpha_{ijk} = \frac{\left(a_{ijk} \frac{d}{dx_k} r_{kj} - r_{kj} \frac{d}{dx_k} a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^2 \frac{d}{dy_k} r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3} + \frac{a_{ijk} \frac{d}{dy_k} a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)}{r_{ij} r_{kj}^2 \left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2} + 1\right)^{\frac{3}{2}}}$$
$$+ \frac{a_{ijk} \frac{d^2}{dy_k dx_k} r_{kj} - r_{kj} \frac{d^2}{dy_k dx_k} a_{ijk} - \frac{d}{dx_k} a_{ijk} \frac{d}{dy_k} r_{kj} + \frac{d}{dy_k} a_{ijk} \frac{d}{dx_k} r_{kj}}{r_{ij} r_{kj}^2 \sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2} + 1}} - \frac{2\left(a_{ijk} \frac{d}{dx_k} r_{kj} - r_{kj} \frac{d}{dx_k} a_{ijk}\right) \frac{d}{dy_k} r_{kj}}{r_{ij} r_{kj}^3 \sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2} + 1}} \tag{165}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dx_k}\alpha_{ijk} = \frac{\left(a_{ijk} \frac{d}{dx_k} r_{kj} - r_{kj} \frac{d}{dx_k} a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^2 \frac{d}{dz_k} r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3} + \frac{a_{ijk} \frac{d}{dz_k} a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)}{r_{ij} r_{kj}^2 \left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2} + 1\right)^{\frac{3}{2}}}$$
$$+ \frac{a_{ijk} \frac{d^2}{dz_k dx_k} r_{kj} - r_{kj} \frac{d^2}{dz_k dx_k} a_{ijk} - \frac{d}{dx_k} a_{ijk} \frac{d}{dz_k} r_{kj} + \frac{d}{dz_k} a_{ijk} \frac{d}{dx_k} r_{kj}}{r_{ij} r_{kj}^2 \sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2} + 1}} - \frac{2\left(a_{ijk} \frac{d}{dx_k} r_{kj} - r_{kj} \frac{d}{dx_k} a_{ijk}\right) \frac{d}{dz_k} r_{kj}}{r_{ij} r_{kj}^3 \sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2} + 1}} \tag{166}$$

$$\frac{d^2}{dy_k^2}\alpha_{ijk} = \frac{\left(a_{ijk} \frac{d}{dy_k} r_{kj} - r_{kj} \frac{d}{dy_k} a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^2 \frac{d}{dy_k} r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3} + \frac{a_{ijk} \frac{d}{dy_k} a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)}{r_{ij} r_{kj}^2 \left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2} + 1\right)^{\frac{3}{2}}} + \frac{a_{ijk} \frac{d^2}{dy_k^2} r_{kj} - r_{kj} \frac{d^2}{dy_k^2} a_{ijk}}{r_{ij} r_{kj}^2 \sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2} + 1}} - \frac{2\left(a_{ijk} \frac{d}{dy_k} r_{kj} - r_{kj} \frac{d}{dy_k} a_{ijk}\right) \frac{d}{dy_k} r_{kj}}{r_{ij} r_{kj}^3 \sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2} + 1}} \tag{167}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dy_k}\alpha_{ijk} = \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dy_k}r_{kj} - r_{kj}\frac{d}{dy_k}a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dz_k}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dz_k}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)}{r_{ij}r_{kj}^2\left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1\right)^{\frac{3}{2}}} + \frac{a_{ijk}\frac{d^2}{dz_k dy_k}r_{kj} - r_{kj}\frac{d^2}{dz_k dy_k}a_{ijk} - \frac{d}{dy_k}a_{ijk}\frac{d}{dz_k}r_{kj} + \frac{d}{dz_k}a_{ijk}\frac{d}{dy_k}r_{kj}}{r_{ij}r_{kj}^2\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} - \frac{2\left(a_{ijk}\frac{d}{dy_k}r_{kj} - r_{kj}\frac{d}{dy_k}a_{ijk}\right)\frac{d}{dz_k}r_{kj}}{r_{ij}r_{kj}^3\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \tag{168}$$

$$\frac{d^2}{dz_k^2}\alpha_{ijk} = \frac{\left(a_{ijk}\frac{d}{dz_k}r_{kj} - r_{kj}\frac{d}{dz_k}a_{ijk}\right)\left(-\frac{a_{ijk}^2\frac{d}{dz_k}r_{kj}}{r_{ij}^2 r_{kj}^3} + \frac{a_{ijk}\frac{d}{dz_k}a_{ijk}}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}\right)}{r_{ij}r_{kj}^2\left(-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1\right)^{\frac{3}{2}}} + \frac{a_{ijk}\frac{d^2}{dz_k^2}r_{kj} - r_{kj}\frac{d^2}{dz_k^2}a_{ijk}}{r_{ij}r_{kj}^2\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} - \frac{2\left(a_{ijk}\frac{d}{dz_k}r_{kj} - r_{kj}\frac{d}{dz_k}a_{ijk}\right)\frac{d}{dz_k}r_{kj}}{r_{ij}r_{kj}^3\sqrt{-\frac{a_{ijk}^2}{r_{ij}^2 r_{kj}^2}+1}} \tag{169}$$

The derivatives of a_{ijk} with respect to the coordinates x, y and z of the participating atoms i, j and k are defined in Section S1.2.3. The derivatives of r_{ij} and r_{kj} with respect to the coordinates x, y and z of the participating atoms i, j and k are defined in Section S1.1.2. The derivatives of r_{ij} and r_{kj} are identical, only differing the atomic indices i and k.

S1.2.3 Derivatives of a_{ijk}

The first and second order derivatives of a_{ijk} with respect to the coordinates x, y and z of the participating atoms i, j and k are:

$$\frac{d}{dx_i}a_{ijk} = x_{kj} \tag{170}$$

$$\frac{d}{dy_i}a_{ijk} = y_{kj} \tag{171}$$

$$\frac{d}{dz_i}a_{ijk} = z_{kj} \tag{172}$$

$$\frac{d}{dx_j}a_{ijk} = -x_i + 2x_j - x_k \tag{173}$$

$$\frac{d}{dy_j}a_{ijk} = -y_i + 2y_j - y_k \tag{174}$$

$$\frac{d}{dz_j}a_{ijk} = -z_i + 2z_j - z_k \tag{175}$$

$$\frac{d}{dx_k}a_{ijk} = -x_{ji} \tag{176}$$

$$\frac{d}{dy_k}a_{ijk} = -y_{ji} \tag{177}$$

$$\frac{d}{dz_k}a_{ijk} = -z_{ji} \tag{178}$$

$$\frac{d^2}{dx_i^2}a_{ijk} = 0 \tag{179}$$

$$\frac{d^2}{dy_i dx_i}a_{ijk} = 0 \tag{180}$$

$$\frac{d^2}{dz_i dx_i}a_{ijk} = 0 \tag{181}$$

$$\frac{d^2}{dx_j dx_i}a_{ijk} = -1 \tag{182}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dx_i}a_{ijk} = 0 \tag{183}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dx_i}a_{ijk} = 0 \tag{184}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dx_i}a_{ijk} = 1 \tag{185}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dx_i}a_{ijk} = 0 \tag{186}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dx_i}a_{ijk} = 0 \tag{187}$$

$$\frac{d^2}{dy_i^2}a_{ijk} = 0 \tag{188}$$

$$\frac{d^2}{dz_i dy_i}a_{ijk} = 0 \tag{189}$$

$$\frac{d^2}{dx_j dy_i}a_{ijk} = 0 \tag{190}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dy_i}a_{ijk} = -1 \tag{191}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dy_i}a_{ijk} = 0 \tag{192}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dy_i}a_{ijk} = 0 \tag{193}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dy_i} a_{ijk} = 1 \tag{194}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dy_i} a_{ijk} = 0 \tag{195}$$

$$\frac{d^2}{dz_i^2} a_{ijk} = 0 \tag{196}$$

$$\frac{d^2}{dx_j dz_i} a_{ijk} = 0 \tag{197}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dz_i} a_{ijk} = 0 \tag{198}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dz_i} a_{ijk} = -1 \tag{199}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dz_i} a_{ijk} = 0 \tag{200}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dz_i} a_{ijk} = 0 \tag{201}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dz_i} a_{ijk} = 1 \tag{202}$$

$$\frac{d^2}{dx_j^2} a_{ijk} = 2 \tag{203}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dx_j} a_{ijk} = 0 \tag{204}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dx_j} a_{ijk} = 0 \tag{205}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dx_j} a_{ijk} = -1 \tag{206}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dx_j} a_{ijk} = 0 \tag{207}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dx_j} a_{ijk} = 0 \tag{208}$$

$$\frac{d^2}{dy_j^2} a_{ijk} = 2 \tag{209}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dy_j} a_{ijk} = 0 \tag{210}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dy_j} a_{ijk} = 0 \tag{211}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dy_j} a_{ijk} = -1 \tag{212}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dy_j} a_{ijk} = 0 \tag{213}$$

$$\frac{d^2}{dz_j^2} a_{ijk} = 2 \tag{214}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dz_j} a_{ijk} = 0 \tag{215}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dz_j} a_{ijk} = 0 \tag{216}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dz_j} a_{ijk} = -1 \tag{217}$$

$$\frac{d^2}{dx_k^2} a_{ijk} = 0 \tag{218}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dx_k} a_{ijk} = 0 \tag{219}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dx_k} a_{ijk} = 0 \tag{220}$$

$$\frac{d^2}{dy_k^2} a_{ijk} = 0 \tag{221}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dy_k} a_{ijk} = 0 \tag{222}$$

$$\frac{d^2}{dz_k^2} a_{ijk} = 0 \tag{223}$$

S1.3 Dihedral Potential

The dihedral harmonic potential between three atoms i, j, k and l is given by

$$E_{\text{dihedral},ijkl} = \sum k_{\text{dihedral}} \left(\left(\sin\theta^0_{ijkl} - \sin\theta_{ijkl}\right)^2 + \left(\cos\theta^0_{ijkl} - \cos\theta_{ijkl}\right)^2 \right) + \sum \frac{Q}{r_{ij}}$$

The cosine of the dihedral angle between four atoms i, j, k and l is given by

$$\cos\theta_{ijkl} = \frac{\left(x_{ji}y_{kj} - x_{kj}y_{ji}\right)\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right) + \left(x_{ji}z_{kj} - x_{kj}z_{ji}\right)\left(x_{kj}z_{lk} - x_{lk}z_{kj}\right) + \left(y_{ji}z_{kj} - y_{kj}z_{ji}\right)\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right)}{\sqrt{\left(x_{ji}y_{kj} - x_{kj}y_{ji}\right)^2 + \left(x_{ji}z_{kj} - x_{kj}z_{ji}\right)^2 + \left(y_{ji}z_{kj} - y_{kj}z_{ji}\right)^2}\sqrt{\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right)^2 + \left(x_{kj}z_{lk} - x_{lk}z_{kj}\right)^2 + \left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right)^2}} \tag{224}$$

$$= \frac{a_{ijkl}}{b_{ijk}b_{jkl}}\,, \tag{225}$$

where a_{ijkl} is the dot product of the cross product of $\mathbf{r}_{ji}$ and $\mathbf{r}_{kj}$ and the cross product of $\mathbf{r}_{kj}$ and $\mathbf{r}_{lk}$. b_{ijk} is the norm of the first cross product and b_{jkl} is the norm of the second cross product. The sine of the dihedral angle between four atoms i, j, k and l is given by

$$\sin\theta_{ijkl} = \frac{\sqrt{x_{kj}^2 + y_{kj}^2 + z_{kj}^2}\left(x_{ji}\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right) - y_{ji}\left(x_{kj}z_{lk} - x_{lk}z_{kj}\right) + z_{ji}\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right)\right)}{\sqrt{\left(x_{ji}y_{kj} - x_{kj}y_{ji}\right)^2 + \left(x_{ji}z_{kj} - x_{kj}z_{ji}\right)^2 + \left(y_{ji}z_{kj} - y_{kj}z_{ji}\right)^2}\sqrt{\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right)^2 + \left(x_{kj}z_{lk} - x_{lk}z_{kj}\right)^2 + \left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right)^2}} \tag{226}$$

$$= \frac{d_{ijkl}}{b_{ijk}b_{jkl}}\,, \tag{227}$$

where d_{ijkl} is the dot product of $\mathbf{r}_{ji}$ and the cross product of $\mathbf{r}_{kj}$ and $\mathbf{r}_{lk}$ multiplied by the norm of $\mathbf{r}_{kj}$.

S1.3.1 Derivatives of $E_{\textbf{dihedral},ijkl}$

The first and second order derivatives of $E_{\text{angle},ijk}$ with respect to the coordinates x, y and z of the participating atoms i, j and k are:

$$\frac{d}{dx_i}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\left(-\left(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk}\right)\frac{d}{dx_i}\cos\theta_{ijkl} - \left(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk}\right)\frac{d}{dx_i}\sin\theta_{ijkl}\right) \tag{228}$$

$$\frac{d}{dy_i}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\left(-\left(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk}\right)\frac{d}{dy_i}\cos\theta_{ijkl} - \left(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk}\right)\frac{d}{dy_i}\sin\theta_{ijkl}\right) \tag{229}$$

$$\frac{d}{dz_i}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\left(-\left(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk}\right)\frac{d}{dz_i}\cos\theta_{ijkl} - \left(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk}\right)\frac{d}{dz_i}\sin\theta_{ijkl}\right) \tag{230}$$

$$\frac{d}{dx_j}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\left(-\left(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk}\right)\frac{d}{dx_j}\cos\theta_{ijkl} - \left(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk}\right)\frac{d}{dx_j}\sin\theta_{ijkl}\right) \tag{231}$$

$$\frac{d}{dy_j}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\left(-\left(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk}\right)\frac{d}{dy_j}\cos\theta_{ijkl} - \left(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk}\right)\frac{d}{dy_j}\sin\theta_{ijkl}\right) \tag{232}$$

$$\frac{d}{dz_j}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d}{dz_j}\cos\theta_{ijkl}-\big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d}{dz_j}\sin\theta_{ijkl}\big) \tag{233}$$

$$\frac{d}{dx_k}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d}{dx_k}\cos\theta_{ijkl}-\big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d}{dx_k}\sin\theta_{ijkl}\big) \tag{234}$$

$$\frac{d}{dy_k}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d}{dy_k}\cos\theta_{ijkl}-\big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d}{dy_k}\sin\theta_{ijkl}\big) \tag{235}$$

$$\frac{d}{dz_k}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d}{dz_k}\cos\theta_{ijkl}-\big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d}{dz_k}\sin\theta_{ijkl}\big) \tag{236}$$

$$\frac{d}{dx_l}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d}{dx_l}\cos\theta_{ijkl}-\big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d}{dx_l}\sin\theta_{ijkl}\big) \tag{237}$$

$$\frac{d}{dy_l}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d}{dy_l}\cos\theta_{ijkl}-\big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d}{dy_l}\sin\theta_{ijkl}\big) \tag{238}$$

$$\frac{d}{dz_l}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d}{dz_l}\cos\theta_{ijkl}-\big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d}{dz_l}\sin\theta_{ijkl}\big) \tag{239}$$

$$\frac{d^2}{dx_i^2}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dx_i^2}\cos\theta_{ijkl}-\big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dx_i^2}\sin\theta_{ijkl}+\big(\frac{d}{dx_i}\cos\theta_{ijkl}\big)^2+\big(\frac{d}{dx_i}\sin\theta_{ijkl}\big)^2\big) \tag{240}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dy_idx_i}E_{\text{dihedral},ijkl} &= 2k_{\text{dihedral}}\big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dy_idx_i}\cos\theta_{ijkl}-\big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dy_idx_i}\sin\theta_{ijkl}\\ &\quad+\frac{d}{dx_i}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dy_i}\cos\theta_{ijkl}+\frac{d}{dx_i}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dy_i}\sin\theta_{ijkl}\big)\end{aligned} \tag{241}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dz_idx_i}E_{\text{dihedral},ijkl} &= 2k_{\text{dihedral}}\big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_idx_i}\cos\theta_{ijkl}-\big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_idx_i}\sin\theta_{ijkl}\\ &\quad+\frac{d}{dx_i}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_i}\cos\theta_{ijkl}+\frac{d}{dx_i}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_i}\sin\theta_{ijkl}\big)\end{aligned} \tag{242}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dx_jdx_i}E_{\text{dihedral},ijkl} &= 2k_{\text{dihedral}}\big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dx_jdx_i}\cos\theta_{ijkl}-\big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dx_jdx_i}\sin\theta_{ijkl}\\ &\quad+\frac{d}{dx_i}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dx_j}\cos\theta_{ijkl}+\frac{d}{dx_i}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dx_j}\sin\theta_{ijkl}\big)\end{aligned} \tag{243}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dx_i} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk} \big) \frac{d^2}{dy_j dx_i} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk} \big) \frac{d^2}{dy_j dx_i} \sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_i} \cos\theta_{ijkl} \frac{d}{dy_j} \cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_i} \sin\theta_{ijkl} \frac{d}{dy_j} \sin\theta_{ijkl} \big) \tag{244}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dx_i} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk} \big) \frac{d^2}{dz_j dx_i} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk} \big) \frac{d^2}{dz_j dx_i} \sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_i} \cos\theta_{ijkl} \frac{d}{dz_j} \cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_i} \sin\theta_{ijkl} \frac{d}{dz_j} \sin\theta_{ijkl} \big) \tag{245}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dx_i} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk} \big) \frac{d^2}{dx_k dx_i} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk} \big) \frac{d^2}{dx_k dx_i} \sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_i} \cos\theta_{ijkl} \frac{d}{dx_k} \cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_i} \sin\theta_{ijkl} \frac{d}{dx_k} \sin\theta_{ijkl} \big) \tag{246}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dx_i} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk} \big) \frac{d^2}{dy_k dx_i} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk} \big) \frac{d^2}{dy_k dx_i} \sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_i} \cos\theta_{ijkl} \frac{d}{dy_k} \cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_i} \sin\theta_{ijkl} \frac{d}{dy_k} \sin\theta_{ijkl} \big) \tag{247}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dx_i} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk} \big) \frac{d^2}{dz_k dx_i} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk} \big) \frac{d^2}{dz_k dx_i} \sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_i} \cos\theta_{ijkl} \frac{d}{dz_k} \cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_i} \sin\theta_{ijkl} \frac{d}{dz_k} \sin\theta_{ijkl} \big) \tag{248}$$

$$\frac{d^2}{dx_l dx_i} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk} \big) \frac{d^2}{dx_l dx_i} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk} \big) \frac{d^2}{dx_l dx_i} \sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_i} \cos\theta_{ijkl} \frac{d}{dx_l} \cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_i} \sin\theta_{ijkl} \frac{d}{dx_l} \sin\theta_{ijkl} \big) \tag{249}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dx_i} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk} \big) \frac{d^2}{dy_l dx_i} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk} \big) \frac{d^2}{dy_l dx_i} \sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_i} \cos\theta_{ijkl} \frac{d}{dy_l} \cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_i} \sin\theta_{ijkl} \frac{d}{dy_l} \sin\theta_{ijkl} \big) \tag{250}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dx_i} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk} \big) \frac{d^2}{dz_l dx_i} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk} \big) \frac{d^2}{dz_l dx_i} \sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_i} \cos\theta_{ijkl} \frac{d}{dz_l} \cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_i} \sin\theta_{ijkl} \frac{d}{dz_l} \sin\theta_{ijkl} \big) \tag{251}$$

$$\frac{d^2}{dy_i^2}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dy_i^2}\cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dy_i^2}\sin\theta_{ijkl} + \big(\frac{d}{dy_i}\cos\theta_{ijkl}\big)^2 + \big(\frac{d}{dy_i}\sin\theta_{ijkl}\big)^2\big) \tag{252}$$

$$\frac{d^2}{dz_i dy_i}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_i dy_i}\cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_i dy_i}\sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_i}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_i}\cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_i}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_i}\sin\theta_{ijkl}\big) \tag{253}$$

$$\frac{d^2}{dx_j dy_i}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dy_i dx_j}\cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dy_i dx_j}\sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_j}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dy_i}\cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_j}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dy_i}\sin\theta_{ijkl}\big) \tag{254}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dy_i}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dy_j dy_i}\cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dy_j dy_i}\sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_i}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dy_j}\cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_i}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dy_j}\sin\theta_{ijkl}\big) \tag{255}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dy_i}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_j dy_i}\cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_j dy_i}\sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_i}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_j}\cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_i}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_j}\sin\theta_{ijkl}\big) \tag{256}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dy_i}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dy_i dx_k}\cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dy_i dx_k}\sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_k}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dy_i}\cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_k}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dy_i}\sin\theta_{ijkl}\big) \tag{257}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dy_i}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dy_k dy_i}\cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dy_k dy_i}\sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_i}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dy_k}\cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_i}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dy_k}\sin\theta_{ijkl}\big) \tag{258}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dy_i}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_k dy_i}\cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_k dy_i}\sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_i}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_k}\cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_i}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_k}\sin\theta_{ijkl}\big) \tag{259}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dx_l dy_i}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\Big(&-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dy_i dx_l}\cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dy_i dx_l}\sin\theta_{ijkl}\\ &+\frac{d}{dx_l}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dy_i}\cos\theta_{ijkl}+\frac{d}{dx_l}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dy_i}\sin\theta_{ijkl}\Big)\end{aligned} \tag{260}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dy_l dy_i}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\Big(&-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dy_l dy_i}\cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dy_l dy_i}\sin\theta_{ijkl}\\ &+\frac{d}{dy_i}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dy_l}\cos\theta_{ijkl}+\frac{d}{dy_i}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dy_l}\sin\theta_{ijkl}\Big)\end{aligned} \tag{261}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dz_l dy_i}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\Big(&-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_l dy_i}\cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_l dy_i}\sin\theta_{ijkl}\\ &+\frac{d}{dy_i}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_l}\cos\theta_{ijkl}+\frac{d}{dy_i}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_l}\sin\theta_{ijkl}\Big)\end{aligned} \tag{262}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dz_i^2}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\Big(&-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_i^2}\cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_i^2}\sin\theta_{ijkl}\\ &+\big(\frac{d}{dz_i}\cos\theta_{ijkl}\big)^2+\big(\frac{d}{dz_i}\sin\theta_{ijkl}\big)^2\Big)\end{aligned} \tag{263}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dx_j dz_i}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\Big(&-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_i dx_j}\cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_i dx_j}\sin\theta_{ijkl}\\ &+\frac{d}{dx_j}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_i}\cos\theta_{ijkl}+\frac{d}{dx_j}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_i}\sin\theta_{ijkl}\Big)\end{aligned} \tag{264}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dy_j dz_i}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\Big(&-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_i dy_j}\cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_i dy_j}\sin\theta_{ijkl}\\ &+\frac{d}{dy_j}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_i}\cos\theta_{ijkl}+\frac{d}{dy_j}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_i}\sin\theta_{ijkl}\Big)\end{aligned} \tag{265}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dz_j dz_i}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\Big(&-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_j dz_i}\cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_j dz_i}\sin\theta_{ijkl}\\ &+\frac{d}{dz_i}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_j}\cos\theta_{ijkl}+\frac{d}{dz_i}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_j}\sin\theta_{ijkl}\Big)\end{aligned} \tag{266}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dx_k dz_i}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\Big(&-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_i dx_k}\cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_i dx_k}\sin\theta_{ijkl}\\ &+\frac{d}{dx_k}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_i}\cos\theta_{ijkl}+\frac{d}{dx_k}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_i}\sin\theta_{ijkl}\Big)\end{aligned} \tag{267}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dy_k dz_i}E_{\text{dihedral},ijkl} &= 2k_{\text{dihedral}}\big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_i dy_k}\cos\theta_{ijkl}-\big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_i dy_k}\sin\theta_{ijkl}\\ &+\frac{d}{dy_k}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_i}\cos\theta_{ijkl}+\frac{d}{dy_k}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_i}\sin\theta_{ijkl}\big)\end{aligned} \tag{268}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dz_k dz_i}E_{\text{dihedral},ijkl} &= 2k_{\text{dihedral}}\big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_k dz_i}\cos\theta_{ijkl}-\big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_k dz_i}\sin\theta_{ijkl}\\ &+\frac{d}{dz_i}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_k}\cos\theta_{ijkl}+\frac{d}{dz_i}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_k}\sin\theta_{ijkl}\big)\end{aligned} \tag{269}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dx_l dz_i}E_{\text{dihedral},ijkl} &= 2k_{\text{dihedral}}\big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_i dx_l}\cos\theta_{ijkl}-\big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_i dx_l}\sin\theta_{ijkl}\\ &+\frac{d}{dx_l}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_i}\cos\theta_{ijkl}+\frac{d}{dx_l}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_i}\sin\theta_{ijkl}\big)\end{aligned} \tag{270}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dy_l dz_i}E_{\text{dihedral},ijkl} &= 2k_{\text{dihedral}}\big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_i dy_l}\cos\theta_{ijkl}-\big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_i dy_l}\sin\theta_{ijkl}\\ &+\frac{d}{dy_l}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_i}\cos\theta_{ijkl}+\frac{d}{dy_l}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_i}\sin\theta_{ijkl}\big)\end{aligned} \tag{271}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dz_l dz_i}E_{\text{dihedral},ijkl} &= 2k_{\text{dihedral}}\big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_l dz_i}\cos\theta_{ijkl}-\big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_l dz_i}\sin\theta_{ijkl}\\ &+\frac{d}{dz_i}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_l}\cos\theta_{ijkl}+\frac{d}{dz_i}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_l}\sin\theta_{ijkl}\big)\end{aligned} \tag{272}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dx_j^2}E_{\text{dihedral},ijkl} &= 2k_{\text{dihedral}}\big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dx_j^2}\cos\theta_{ijkl}-\big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dx_j^2}\sin\theta_{ijkl}\\ &+\big(\frac{d}{dx_j}\cos\theta_{ijkl}\big)^2+\big(\frac{d}{dx_j}\sin\theta_{ijkl}\big)^2\big)\end{aligned} \tag{273}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dy_j dx_j}E_{\text{dihedral},ijkl} &= 2k_{\text{dihedral}}\big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dy_j dx_j}\cos\theta_{ijkl}-\big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dy_j dx_j}\sin\theta_{ijkl}\\ &+\frac{d}{dx_j}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dy_j}\cos\theta_{ijkl}+\frac{d}{dx_j}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dy_j}\sin\theta_{ijkl}\big)\end{aligned} \tag{274}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dz_j dx_j}E_{\text{dihedral},ijkl} &= 2k_{\text{dihedral}}\big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_j dx_j}\cos\theta_{ijkl}-\big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_j dx_j}\sin\theta_{ijkl}\\ &+\frac{d}{dx_j}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_j}\cos\theta_{ijkl}+\frac{d}{dx_j}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_j}\sin\theta_{ijkl}\big)\end{aligned} \tag{275}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dx_j} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk} \big) \frac{d^2}{dx_k dx_j} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk} \big) \frac{d^2}{dx_k dx_j} \sin\theta_{ijkl} \\ + \frac{d}{dx_j} \cos\theta_{ijkl} \frac{d}{dx_k} \cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_j} \sin\theta_{ijkl} \frac{d}{dx_k} \sin\theta_{ijkl} \big) \tag{276}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dx_j} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk} \big) \frac{d^2}{dy_k dx_j} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk} \big) \frac{d^2}{dy_k dx_j} \sin\theta_{ijkl} \\ + \frac{d}{dx_j} \cos\theta_{ijkl} \frac{d}{dy_k} \cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_j} \sin\theta_{ijkl} \frac{d}{dy_k} \sin\theta_{ijkl} \big) \tag{277}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dx_j} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk} \big) \frac{d^2}{dz_k dx_j} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk} \big) \frac{d^2}{dz_k dx_j} \sin\theta_{ijkl} \\ + \frac{d}{dx_j} \cos\theta_{ijkl} \frac{d}{dz_k} \cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_j} \sin\theta_{ijkl} \frac{d}{dz_k} \sin\theta_{ijkl} \big) \tag{278}$$

$$\frac{d^2}{dx_l dx_j} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk} \big) \frac{d^2}{dx_l dx_j} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk} \big) \frac{d^2}{dx_l dx_j} \sin\theta_{ijkl} \\ + \frac{d}{dx_j} \cos\theta_{ijkl} \frac{d}{dx_l} \cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_j} \sin\theta_{ijkl} \frac{d}{dx_l} \sin\theta_{ijkl} \big) \tag{279}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dx_j} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk} \big) \frac{d^2}{dy_l dx_j} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk} \big) \frac{d^2}{dy_l dx_j} \sin\theta_{ijkl} \\ + \frac{d}{dx_j} \cos\theta_{ijkl} \frac{d}{dy_l} \cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_j} \sin\theta_{ijkl} \frac{d}{dy_l} \sin\theta_{ijkl} \big) \tag{280}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dx_j} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk} \big) \frac{d^2}{dz_l dx_j} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk} \big) \frac{d^2}{dz_l dx_j} \sin\theta_{ijkl} \\ + \frac{d}{dx_j} \cos\theta_{ijkl} \frac{d}{dz_l} \cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_j} \sin\theta_{ijkl} \frac{d}{dz_l} \sin\theta_{ijkl} \big) \tag{281}$$

$$\frac{d^2}{dy_j^2} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk} \big) \frac{d^2}{dy_j^2} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk} \big) \frac{d^2}{dy_j^2} \sin\theta_{ijkl} \\ + \big(\frac{d}{dy_j} \cos\theta_{ijkl} \big)^2 + \big(\frac{d}{dy_j} \sin\theta_{ijkl} \big)^2 \big) \tag{282}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dy_j} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dz_j dy_j} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dz_j dy_j} \sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_j} \cos\theta_{ijkl} \frac{d}{dz_j} \cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_j} \sin\theta_{ijkl} \frac{d}{dz_j} \sin\theta_{ijkl}\big) \tag{283}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dy_j} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dy_j dx_k} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dy_j dx_k} \sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_k} \cos\theta_{ijkl} \frac{d}{dy_j} \cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_k} \sin\theta_{ijkl} \frac{d}{dy_j} \sin\theta_{ijkl}\big) \tag{284}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dy_j} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dy_k dy_j} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dy_k dy_j} \sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_j} \cos\theta_{ijkl} \frac{d}{dy_k} \cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_j} \sin\theta_{ijkl} \frac{d}{dy_k} \sin\theta_{ijkl}\big) \tag{285}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dy_j} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dz_k dy_j} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dz_k dy_j} \sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_j} \cos\theta_{ijkl} \frac{d}{dz_k} \cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_j} \sin\theta_{ijkl} \frac{d}{dz_k} \sin\theta_{ijkl}\big) \tag{286}$$

$$\frac{d^2}{dx_l dy_j} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dy_j dx_l} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dy_j dx_l} \sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_l} \cos\theta_{ijkl} \frac{d}{dy_j} \cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_l} \sin\theta_{ijkl} \frac{d}{dy_j} \sin\theta_{ijkl}\big) \tag{287}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dy_j} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dy_l dy_j} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dy_l dy_j} \sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_j} \cos\theta_{ijkl} \frac{d}{dy_l} \cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_j} \sin\theta_{ijkl} \frac{d}{dy_l} \sin\theta_{ijkl}\big) \tag{288}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dy_j} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dz_l dy_j} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dz_l dy_j} \sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_j} \cos\theta_{ijkl} \frac{d}{dz_l} \cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_j} \sin\theta_{ijkl} \frac{d}{dz_l} \sin\theta_{ijkl}\big) \tag{289}$$

$$\frac{d^2}{dz_j^2}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\Big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_j^2}\cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_j^2}\sin\theta_{ijkl} + \big(\frac{d}{dz_j}\cos\theta_{ijkl}\big)^2 + \big(\frac{d}{dz_j}\sin\theta_{ijkl}\big)^2\Big) \tag{290}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dz_j}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\Big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_j dx_k}\cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_j dx_k}\sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_k}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_j}\cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_k}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_j}\sin\theta_{ijkl}\Big) \tag{291}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dz_j}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\Big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_j dy_k}\cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_j dy_k}\sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_k}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_j}\cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_k}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_j}\sin\theta_{ijkl}\Big) \tag{292}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dz_j}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\Big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_k dz_j}\cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_k dz_j}\sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dz_j}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_k}\cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dz_j}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_k}\sin\theta_{ijkl}\Big) \tag{293}$$

$$\frac{d^2}{dx_l dz_j}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\Big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_j dx_l}\cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_j dx_l}\sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_l}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_j}\cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_l}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_j}\sin\theta_{ijkl}\Big) \tag{294}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dz_j}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\Big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_j dy_l}\cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_j dy_l}\sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_l}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_j}\cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_l}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_j}\sin\theta_{ijkl}\Big) \tag{295}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dz_j}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\Big(-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_l dz_j}\cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_l dz_j}\sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dz_j}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_l}\cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dz_j}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_l}\sin\theta_{ijkl}\Big) \tag{296}$$

$$
\begin{aligned}
\frac{d^2}{dx_k^2}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\Big(&-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dx_k^2}\cos\theta_{ijkl}-\big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dx_k^2}\sin\theta_{ijkl}+\big(\frac{d}{dx_k}\cos\theta_{ijkl}\big)^2\\
&+\big(\frac{d}{dx_k}\sin\theta_{ijkl}\big)^2\Big)
\end{aligned} \tag{297}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{d^2}{dy_k dx_k}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\Big(&-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dy_k dx_k}\cos\theta_{ijkl}-\big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dy_k dx_k}\sin\theta_{ijkl}\\
&+\frac{d}{dx_k}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dy_k}\cos\theta_{ijkl}+\frac{d}{dx_k}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dy_k}\sin\theta_{ijkl}\Big)
\end{aligned} \tag{298}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{d^2}{dz_k dx_k}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\Big(&-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_k dx_k}\cos\theta_{ijkl}-\big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_k dx_k}\sin\theta_{ijkl}\\
&+\frac{d}{dx_k}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_k}\cos\theta_{ijkl}+\frac{d}{dx_k}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_k}\sin\theta_{ijkl}\Big)
\end{aligned} \tag{299}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{d^2}{dx_l dx_k}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\Big(&-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dx_l dx_k}\cos\theta_{ijkl}-\big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dx_l dx_k}\sin\theta_{ijkl}\\
&+\frac{d}{dx_k}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dx_l}\cos\theta_{ijkl}+\frac{d}{dx_k}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dx_l}\sin\theta_{ijkl}\Big)
\end{aligned} \tag{300}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{d^2}{dy_l dx_k}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\Big(&-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dy_l dx_k}\cos\theta_{ijkl}-\big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dy_l dx_k}\sin\theta_{ijkl}\\
&+\frac{d}{dx_k}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dy_l}\cos\theta_{ijkl}+\frac{d}{dx_k}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dy_l}\sin\theta_{ijkl}\Big)
\end{aligned} \tag{301}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{d^2}{dz_l dx_k}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\Big(&-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_l dx_k}\cos\theta_{ijkl}-\big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_l dx_k}\sin\theta_{ijkl}\\
&+\frac{d}{dx_k}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_l}\cos\theta_{ijkl}+\frac{d}{dx_k}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_l}\sin\theta_{ijkl}\Big)
\end{aligned} \tag{302}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{d^2}{dy_k^2}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\Big(&-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dy_k^2}\cos\theta_{ijkl}-\big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dy_k^2}\sin\theta_{ijkl}+\big(\frac{d}{dy_k}\cos\theta_{ijkl}\big)^2\\
&+\big(\frac{d}{dy_k}\sin\theta_{ijkl}\big)^2\Big)
\end{aligned} \tag{303}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{d^2}{dz_k dy_k}E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}}\Big(&-\big(-\cos\theta_{ijkl}+\cos\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_k dy_k}\cos\theta_{ijkl}-\big(-\sin\theta_{ijkl}+\sin\theta^0_{ijk}\big)\frac{d^2}{dz_k dy_k}\sin\theta_{ijkl}\\
&+\frac{d}{dy_k}\cos\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_k}\cos\theta_{ijkl}+\frac{d}{dy_k}\sin\theta_{ijkl}\frac{d}{dz_k}\sin\theta_{ijkl}\Big)
\end{aligned} \tag{304}
$$

$$\frac{d^2}{dx_l dy_k} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dy_k dx_l} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dy_k dx_l} \sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_l}\cos\theta_{ijkl} \frac{d}{dy_k}\cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_l}\sin\theta_{ijkl} \frac{d}{dy_k}\sin\theta_{ijkl}\big) \tag{305}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dy_k} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dy_l dy_k} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dy_l dy_k} \sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_k}\cos\theta_{ijkl} \frac{d}{dy_l}\cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_k}\sin\theta_{ijkl} \frac{d}{dy_l}\sin\theta_{ijkl}\big) \tag{306}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dy_k} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dz_l dy_k} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dz_l dy_k} \sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_k}\cos\theta_{ijkl} \frac{d}{dz_l}\cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_k}\sin\theta_{ijkl} \frac{d}{dz_l}\sin\theta_{ijkl}\big) \tag{307}$$

$$\frac{d^2}{dz_k^2} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dz_k^2} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dz_k^2} \sin\theta_{ijkl} + \big(\frac{d}{dz_k}\cos\theta_{ijkl}\big)^2 + \big(\frac{d}{dz_k}\sin\theta_{ijkl}\big)^2\big) \tag{308}$$

$$\frac{d^2}{dx_l dz_k} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dz_k dx_l} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dz_k dx_l} \sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_l}\cos\theta_{ijkl} \frac{d}{dz_k}\cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_l}\sin\theta_{ijkl} \frac{d}{dz_k}\sin\theta_{ijkl}\big) \tag{309}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dz_k} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dz_k dy_l} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dz_k dy_l} \sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_l}\cos\theta_{ijkl} \frac{d}{dz_k}\cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_l}\sin\theta_{ijkl} \frac{d}{dz_k}\sin\theta_{ijkl}\big) \tag{310}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dz_k} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dz_l dz_k} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dz_l dz_k} \sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dz_k}\cos\theta_{ijkl} \frac{d}{dz_l}\cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dz_k}\sin\theta_{ijkl} \frac{d}{dz_l}\sin\theta_{ijkl}\big) \tag{311}$$

$$\frac{d^2}{dx_l^2} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dx_l^2} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dx_l^2} \sin\theta_{ijkl} + \big(\frac{d}{dx_l}\cos\theta_{ijkl}\big)^2 + \big(\frac{d}{dx_l}\sin\theta_{ijkl}\big)^2\big) \tag{312}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dx_l} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dy_l dx_l} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dy_l dx_l} \sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_l} \cos\theta_{ijkl} \frac{d}{dy_l} \cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_l} \sin\theta_{ijkl} \frac{d}{dy_l} \sin\theta_{ijkl}\big) \tag{313}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dx_l} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dz_l dx_l} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dz_l dx_l} \sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_l} \cos\theta_{ijkl} \frac{d}{dz_l} \cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dx_l} \sin\theta_{ijkl} \frac{d}{dz_l} \sin\theta_{ijkl}\big) \tag{314}$$

$$\frac{d^2}{dy_l^2} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dy_l^2} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dy_l^2} \sin\theta_{ijkl} + \big(\frac{d}{dy_l} \cos\theta_{ijkl}\big)^2 + \big(\frac{d}{dy_l} \sin\theta_{ijkl}\big)^2\big) \tag{315}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dy_l} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dz_l dy_l} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dz_l dy_l} \sin\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_l} \cos\theta_{ijkl} \frac{d}{dz_l} \cos\theta_{ijkl} + \frac{d}{dy_l} \sin\theta_{ijkl} \frac{d}{dz_l} \sin\theta_{ijkl}\big) \tag{316}$$

$$\frac{d^2}{dz_l^2} E_{\text{dihedral},ijkl} = 2k_{\text{dihedral}} \big(-\big(-\cos\theta_{ijkl} + \cos\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dz_l^2} \cos\theta_{ijkl} - \big(-\sin\theta_{ijkl} + \sin\theta^0_{ijk}\big) \frac{d^2}{dz_l^2} \sin\theta_{ijkl} + \big(\frac{d}{dz_l} \cos\theta_{ijkl}\big)^2 + \big(\frac{d}{dz_l} \sin\theta_{ijkl}\big)^2\big) \tag{317}$$

The derivatives of $\cos\theta_{ijkl}$ and $\sin\theta_{ijkl}$ with respect to the coordinates x, y and z of the participating atoms i, j, k and l are defined in Section S1.3.2. The derivatives of $\cos\theta_{ijkl}$ and $\sin\theta_{ijkl}$ are identical, except for interchanging a_ijkl and d_ijkl.

S1.3.2 Derivatives of $\cos\theta_{ijkl}$

The first and second order derivatives of $\cos\theta_{ijkl}$ with respect to the coordinates x, y and z of the participating atoms i, j, k and l are:

$$\frac{d}{dx_i} \cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl} \frac{d}{dx_i} b_{ijk} + b_{ijk} \frac{d}{dx_i} a_{ijkl}}{b^2_{ijk} c_{jkl}} \tag{318}$$

$$\frac{d}{dy_i} \cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl} \frac{d}{dy_i} b_{ijk} + b_{ijk} \frac{d}{dy_i} a_{ijkl}}{b^2_{ijk} c_{jkl}} \tag{319}$$

$$\frac{d}{dz_i}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}\frac{d}{dz_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dz_i}a_{ijkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}} \tag{320}$$

$$\frac{d}{dx_j}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dx_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}a_{ijkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \tag{321}$$

$$\frac{d}{dy_j}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dy_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dy_j}a_{ijkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \tag{322}$$

$$\frac{d}{dz_j}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dz_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dz_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dz_j}a_{ijkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \tag{323}$$

$$\frac{d}{dx_k}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dx_k}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dx_k}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dx_k}a_{ijkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \tag{324}$$

$$\frac{d}{dy_k}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dy_k}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dy_k}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dy_k}a_{ijkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \tag{325}$$

$$\frac{d}{dz_k}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dz_k}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dz_k}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dz_k}a_{ijkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \tag{326}$$

$$\frac{d}{dx_l}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}\frac{d}{dx_l}c_{jkl} + c_{jkl}\frac{d}{dx_l}a_{ijkl}}{b_{ijk}c_{jkl}^2} \tag{327}$$

$$\frac{d}{dy_l}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}\frac{d}{dy_l}c_{jkl} + c_{jkl}\frac{d}{dy_l}a_{ijkl}}{b_{ijk}c_{jkl}^2} \tag{328}$$

$$\frac{d}{dz_l}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}\frac{d}{dz_l}c_{jkl} + c_{jkl}\frac{d}{dz_l}a_{ijkl}}{b_{ijk}c_{jkl}^2} \tag{329}$$

$$\frac{d^2}{dx_i^2}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}\frac{d^2}{dx_i^2}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d^2}{dx_i^2}a_{ijkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}} - \frac{2\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dx_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dx_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_i}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}} \tag{330}$$

$$\frac{d^2}{dy_i dx_i}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}\frac{d^2}{dy_i dx_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d^2}{dy_i dx_i}a_{ijkl} + \frac{d}{dx_i}a_{ijkl}\frac{d}{dy_i}b_{ijk} - \frac{d}{dy_i}a_{ijkl}\frac{d}{dx_i}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}} - \frac{2\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dx_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dx_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_i}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}} \tag{331}$$

$$\frac{d^2}{dz_i dx_i}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}\frac{d^2}{dz_i dx_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d^2}{dz_i dx_i}a_{ijkl} + \frac{d}{dx_i}a_{ijkl}\frac{d}{dz_i}b_{ijk} - \frac{d}{dz_i}a_{ijkl}\frac{d}{dx_i}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}} - \frac{2\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dx_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dx_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_i}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}} \tag{332}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dx_j dx_i}\cos\theta_{ijkl} = &\frac{-a_{ijkl}\frac{d^2}{dx_j dx_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d^2}{dx_j dx_i}a_{ijkl} + \frac{d}{dx_i}a_{ijkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk} - \frac{d}{dx_j}a_{ijkl}\frac{d}{dx_i}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}} \\ &- \frac{\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dx_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dx_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_j}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \\ &- \frac{2\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dx_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dx_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}}\end{aligned} \tag{333}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dy_j dx_i}\cos\theta_{ijkl} = &\frac{-a_{ijkl}\frac{d^2}{dy_j dx_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d^2}{dy_j dx_i}a_{ijkl} + \frac{d}{dx_i}a_{ijkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk} - \frac{d}{dy_j}a_{ijkl}\frac{d}{dx_i}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}} \\ &- \frac{\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dx_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dx_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_j}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \\ &- \frac{2\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dx_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dx_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}}\end{aligned} \tag{334}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dz_j dx_i}\cos\theta_{ijkl} = &\frac{-a_{ijkl}\frac{d^2}{dz_j dx_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d^2}{dz_j dx_i}a_{ijkl} + \frac{d}{dx_i}a_{ijkl}\frac{d}{dz_j}b_{ijk} - \frac{d}{dz_j}a_{ijkl}\frac{d}{dx_i}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}} \\ &- \frac{\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dx_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dx_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_j}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \\ &- \frac{2\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dx_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dx_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}}\end{aligned} \tag{335}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dx_i}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}\frac{d^2}{dx_k dx_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d^2}{dx_k dx_i}a_{ijkl} + \frac{d}{dx_i}a_{ijkl}\frac{d}{dx_k}b_{ijk} - \frac{d}{dx_k}a_{ijkl}\frac{d}{dx_i}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}} - \frac{\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dx_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dx_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_k}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} - \frac{2\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dx_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dx_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}} \tag{336}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dx_i}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}\frac{d^2}{dy_k dx_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d^2}{dy_k dx_i}a_{ijkl} + \frac{d}{dx_i}a_{ijkl}\frac{d}{dy_k}b_{ijk} - \frac{d}{dy_k}a_{ijkl}\frac{d}{dx_i}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}} - \frac{\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dx_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dx_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_k}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} - \frac{2\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dx_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dx_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}} \tag{337}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dx_i}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}\frac{d^2}{dz_k dx_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d^2}{dz_k dx_i}a_{ijkl} + \frac{d}{dx_i}a_{ijkl}\frac{d}{dz_k}b_{ijk} - \frac{d}{dz_k}a_{ijkl}\frac{d}{dx_i}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}} - \frac{\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dx_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dx_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_k}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} - \frac{2\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dx_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dx_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}} \tag{338}$$

$$\frac{d^2}{dx_l dx_i}\cos\theta_{ijkl} = \frac{b_{ijk}\frac{d^2}{dx_l dx_i}a_{ijkl} - \frac{d}{dx_l}a_{ijkl}\frac{d}{dx_i}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}} - \frac{\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dx_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dx_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_l}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \tag{339}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dx_i}\cos\theta_{ijkl} = \frac{b_{ijk}\frac{d^2}{dy_l dx_i}a_{ijkl} - \frac{d}{dy_l}a_{ijkl}\frac{d}{dx_i}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}} - \frac{\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dx_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dx_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_l}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \tag{340}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dx_i}\cos\theta_{ijkl} = \frac{b_{ijk}\frac{d^2}{dz_l dx_i}a_{ijkl} - \frac{d}{dz_l}a_{ijkl}\frac{d}{dx_i}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}} - \frac{\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dx_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dx_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_l}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \tag{341}$$

$$\frac{d^2}{dy_i^2}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}\frac{d^2}{dy_i^2}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d^2}{dy_i^2}a_{ijkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}} - \frac{2\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dy_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dy_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_i}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}} \tag{342}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dz_i dy_i}\cos\theta_{ijkl} = &\frac{-a_{ijkl}\frac{d^2}{dz_i dy_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d^2}{dz_i dy_i}a_{ijkl} + \frac{d}{dy_i}a_{ijkl}\frac{d}{dz_i}b_{ijk} - \frac{d}{dz_i}a_{ijkl}\frac{d}{dy_i}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}}\\ &- \frac{2\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dy_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dy_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_i}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}}\end{aligned} \tag{343}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dx_j dy_i}\cos\theta_{ijkl} = &\frac{-a_{ijkl}\frac{d^2}{dy_i dx_j}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d^2}{dy_i dx_j}a_{ijkl} - \frac{d}{dx_j}a_{ijkl}\frac{d}{dy_i}b_{ijk} + \frac{d}{dy_i}a_{ijkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}}\\ &- \frac{\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dy_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dy_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_j}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2}\\ &- \frac{2\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dy_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dy_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}}\end{aligned} \tag{344}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dy_j dy_i}\cos\theta_{ijkl} = &\frac{-a_{ijkl}\frac{d^2}{dy_j dy_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d^2}{dy_j dy_i}a_{ijkl} + \frac{d}{dy_i}a_{ijkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk} - \frac{d}{dy_j}a_{ijkl}\frac{d}{dy_i}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}}\\ &- \frac{\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dy_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dy_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_j}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2}\\ &- \frac{2\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dy_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dy_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}}\end{aligned} \tag{345}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dz_j dy_i}\cos\theta_{ijkl} = &\frac{-a_{ijkl}\frac{d^2}{dz_j dy_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d^2}{dz_j dy_i}a_{ijkl} + \frac{d}{dy_i}a_{ijkl}\frac{d}{dz_j}b_{ijk} - \frac{d}{dz_j}a_{ijkl}\frac{d}{dy_i}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}}\\ &- \frac{\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dy_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dy_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_j}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2}\\ &- \frac{2\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dy_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dy_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}}\end{aligned} \tag{346}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dx_k dy_i}\cos\theta_{ijkl} = {} & \frac{-a_{ijkl}\frac{d^2}{dy_i dx_k}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d^2}{dy_i dx_k}a_{ijkl} - \frac{d}{dx_k}a_{ijkl}\frac{d}{dy_i}b_{ijk} + \frac{d}{dy_i}a_{ijkl}\frac{d}{dx_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}} \\ & - \frac{\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dy_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dy_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_k}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \\ & - \frac{2\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dy_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dy_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}}\end{aligned} \tag{347}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dy_k dy_i}\cos\theta_{ijkl} = {} & \frac{-a_{ijkl}\frac{d^2}{dy_k dy_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d^2}{dy_k dy_i}a_{ijkl} + \frac{d}{dy_i}a_{ijkl}\frac{d}{dy_k}b_{ijk} - \frac{d}{dy_k}a_{ijkl}\frac{d}{dy_i}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}} \\ & - \frac{\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dy_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dy_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_k}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \\ & - \frac{2\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dy_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dy_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}}\end{aligned} \tag{348}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dz_k dy_i}\cos\theta_{ijkl} = {} & \frac{-a_{ijkl}\frac{d^2}{dz_k dy_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d^2}{dz_k dy_i}a_{ijkl} + \frac{d}{dy_i}a_{ijkl}\frac{d}{dz_k}b_{ijk} - \frac{d}{dz_k}a_{ijkl}\frac{d}{dy_i}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}} \\ & - \frac{\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dy_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dy_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_k}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \\ & - \frac{2\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dy_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dy_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}}\end{aligned} \tag{349}$$

$$\frac{d^2}{dx_l dy_i}\cos\theta_{ijkl} = \frac{b_{ijk}\frac{d^2}{dy_i dx_l}a_{ijkl} - \frac{d}{dx_l}a_{ijkl}\frac{d}{dy_i}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}} - \frac{\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dy_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dy_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_l}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \tag{350}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dy_i}\cos\theta_{ijkl} = \frac{b_{ijk}\frac{d^2}{dy_l dy_i}a_{ijkl} - \frac{d}{dy_l}a_{ijkl}\frac{d}{dy_i}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}} - \frac{\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dy_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dy_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_l}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \tag{351}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dy_i}\cos\theta_{ijkl} = \frac{b_{ijk}\frac{d^2}{dz_l dy_i}a_{ijkl} - \frac{d}{dz_l}a_{ijkl}\frac{d}{dy_i}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}} - \frac{\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dy_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dy_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_l}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \tag{352}$$

$$\frac{d^2}{dz_i^2}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}\frac{d^2}{dz_i^2}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d^2}{dz_i^2}a_{ijkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}} - \frac{2\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dz_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dz_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_i}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}} \tag{353}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dx_j dz_i}\cos\theta_{ijkl} = &\frac{-a_{ijkl}\frac{d^2}{dz_i dx_j}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d^2}{dz_i dx_j}a_{ijkl} - \frac{d}{dx_j}a_{ijkl}\frac{d}{dz_i}b_{ijk} + \frac{d}{dz_i}a_{ijkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}} \\ &- \frac{\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dz_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dz_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_j}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \\ &- \frac{2\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dz_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dz_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}}\end{aligned} \tag{354}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dy_j dz_i}\cos\theta_{ijkl} = &\frac{-a_{ijkl}\frac{d^2}{dz_i dy_j}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d^2}{dz_i dy_j}a_{ijkl} - \frac{d}{dy_j}a_{ijkl}\frac{d}{dz_i}b_{ijk} + \frac{d}{dz_i}a_{ijkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}} \\ &- \frac{\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dz_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dz_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_j}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \\ &- \frac{2\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dz_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dz_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}}\end{aligned} \tag{355}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dz_j dz_i}\cos\theta_{ijkl} = &\frac{-a_{ijkl}\frac{d^2}{dz_j dz_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d^2}{dz_j dz_i}a_{ijkl} + \frac{d}{dz_i}a_{ijkl}\frac{d}{dz_j}b_{ijk} - \frac{d}{dz_j}a_{ijkl}\frac{d}{dz_i}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}} \\ &- \frac{\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dz_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dz_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_j}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \\ &- \frac{2\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dz_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dz_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}}\end{aligned} \tag{356}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dx_k dz_i}\cos\theta_{ijkl} =& \frac{-a_{ijkl}\frac{d^2}{dz_i dx_k}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d^2}{dz_i dx_k}a_{ijkl} - \frac{d}{dx_k}a_{ijkl}\frac{d}{dz_i}b_{ijk} + \frac{d}{dz_i}a_{ijkl}\frac{d}{dx_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}} \\ &- \frac{\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dz_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dz_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_k}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \\ &- \frac{2\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dz_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dz_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}}\end{aligned} \tag{357}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dy_k dz_i}\cos\theta_{ijkl} =& \frac{-a_{ijkl}\frac{d^2}{dz_i dy_k}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d^2}{dz_i dy_k}a_{ijkl} - \frac{d}{dy_k}a_{ijkl}\frac{d}{dz_i}b_{ijk} + \frac{d}{dz_i}a_{ijkl}\frac{d}{dy_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}} \\ &- \frac{\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dz_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dz_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_k}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \\ &- \frac{2\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dz_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dz_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}}\end{aligned} \tag{358}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dz_k dz_i}\cos\theta_{ijkl} =& \frac{-a_{ijkl}\frac{d^2}{dz_k dz_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d^2}{dz_k dz_i}a_{ijkl} + \frac{d}{dz_i}a_{ijkl}\frac{d}{dz_k}b_{ijk} - \frac{d}{dz_k}a_{ijkl}\frac{d}{dz_i}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}} \\ &- \frac{\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dz_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dz_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_k}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \\ &- \frac{2\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dz_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dz_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}}\end{aligned} \tag{359}$$

$$\frac{d^2}{dx_l dz_i}\cos\theta_{ijkl} = \frac{b_{ijk}\frac{d^2}{dz_i dx_l}a_{ijkl} - \frac{d}{dx_l}a_{ijkl}\frac{d}{dz_i}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}} - \frac{\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dz_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dz_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_l}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \tag{360}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dz_i}\cos\theta_{ijkl} = \frac{b_{ijk}\frac{d^2}{dz_i dy_l}a_{ijkl} - \frac{d}{dy_l}a_{ijkl}\frac{d}{dz_i}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}} - \frac{\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dz_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dz_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_l}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \tag{361}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dz_i}\cos\theta_{ijkl} = \frac{b_{ijk}\frac{d^2}{dz_l dz_i}a_{ijkl} - \frac{d}{dz_l}a_{ijkl}\frac{d}{dz_i}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}} - \frac{\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dz_i}b_{ijk} + b_{ijk}\frac{d}{dz_i}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_l}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \tag{362}$$

$$\frac{d^2}{dx_j^2}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dx_j^2}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d^2}{dx_j^2}b_{ijk} - 2a_{ijkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk}\frac{d}{dx_j}c_{jkl} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dx_j^2}a_{ijkl}}{b_{ijk}^2c_{jkl}^2} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dx_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_j}c_{jkl}}{b_{ijk}^2c_{jkl}^3} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dx_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^3c_{jkl}^2} \tag{363}$$

$$\frac{d^2}{dy_jdx_j}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dy_jdx_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d^2}{dy_jdx_j}b_{ijk} - a_{ijkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk}\frac{d}{dy_j}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk}\frac{d}{dx_j}c_{jkl} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dy_jdx_j}a_{ijkl}}{b_{ijk}^2c_{jkl}^2} + \frac{b_{ijk}\frac{d}{dx_j}a_{ijkl}\frac{d}{dy_j}c_{jkl} - b_{ijk}\frac{d}{dy_j}a_{ijkl}\frac{d}{dx_j}c_{jkl} + c_{jkl}\frac{d}{dx_j}a_{ijkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk} - c_{jkl}\frac{d}{dy_j}a_{ijkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^2c_{jkl}^2} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dx_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_j}c_{jkl}}{b_{ijk}^2c_{jkl}^3} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dx_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^3c_{jkl}^2} \tag{364}$$

$$\frac{d^2}{dz_jdx_j}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dz_jdx_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d^2}{dz_jdx_j}b_{ijk} - a_{ijkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk}\frac{d}{dz_j}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dz_j}b_{ijk}\frac{d}{dx_j}c_{jkl} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dz_jdx_j}a_{ijkl}}{b_{ijk}^2c_{jkl}^2} + \frac{b_{ijk}\frac{d}{dx_j}a_{ijkl}\frac{d}{dz_j}c_{jkl} - b_{ijk}\frac{d}{dz_j}a_{ijkl}\frac{d}{dx_j}c_{jkl} + c_{jkl}\frac{d}{dx_j}a_{ijkl}\frac{d}{dz_j}b_{ijk} - c_{jkl}\frac{d}{dz_j}a_{ijkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^2c_{jkl}^2} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dx_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_j}c_{jkl}}{b_{ijk}^2c_{jkl}^3} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dx_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^3c_{jkl}^2} \tag{365}$$

$$\frac{d^2}{dx_kdx_j}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dx_kdx_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d^2}{dx_kdx_j}b_{ijk} - a_{ijkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk}\frac{d}{dx_k}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dx_k}b_{ijk}\frac{d}{dx_j}c_{jkl} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dx_kdx_j}a_{ijkl}}{b_{ijk}^2c_{jkl}^2} + \frac{b_{ijk}\frac{d}{dx_j}a_{ijkl}\frac{d}{dx_k}c_{jkl} - b_{ijk}\frac{d}{dx_k}a_{ijkl}\frac{d}{dx_j}c_{jkl} + c_{jkl}\frac{d}{dx_j}a_{ijkl}\frac{d}{dx_k}b_{ijk} - c_{jkl}\frac{d}{dx_k}a_{ijkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^2c_{jkl}^2} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dx_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_k}c_{jkl}}{b_{ijk}^2c_{jkl}^3} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dx_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^3c_{jkl}^2} \tag{366}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dy_k dx_j}\cos\theta_{ijkl} = {} & \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dy_k dx_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d^2}{dy_k dx_j}b_{ijk} - a_{ijkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk}\frac{d}{dy_k}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dy_k}b_{ijk}\frac{d}{dx_j}c_{jkl} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dy_k dx_j}a_{ijkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \\ & + \frac{b_{ijk}\frac{d}{dx_j}a_{ijkl}\frac{d}{dy_k}c_{jkl} - b_{ijk}\frac{d}{dy_k}a_{ijkl}\frac{d}{dx_j}c_{jkl} + c_{jkl}\frac{d}{dx_j}a_{ijkl}\frac{d}{dy_k}b_{ijk} - c_{jkl}\frac{d}{dy_k}a_{ijkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \\ & - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dx_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_k}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^3} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dx_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}^2}\end{aligned} \tag{367}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dz_k dx_j}\cos\theta_{ijkl} = {} & \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dz_k dx_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d^2}{dz_k dx_j}b_{ijk} - a_{ijkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk}\frac{d}{dz_k}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dz_k}b_{ijk}\frac{d}{dx_j}c_{jkl} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dz_k dx_j}a_{ijkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \\ & + \frac{b_{ijk}\frac{d}{dx_j}a_{ijkl}\frac{d}{dz_k}c_{jkl} - b_{ijk}\frac{d}{dz_k}a_{ijkl}\frac{d}{dx_j}c_{jkl} + c_{jkl}\frac{d}{dx_j}a_{ijkl}\frac{d}{dz_k}b_{ijk} - c_{jkl}\frac{d}{dz_k}a_{ijkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \\ & - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dx_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_k}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^3} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dx_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}^2}\end{aligned} \tag{368}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dx_l dx_j}\cos\theta_{ijkl} = {} & \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dx_l dx_j}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk}\frac{d}{dx_l}c_{jkl} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dx_l dx_j}a_{ijkl} + b_{ijk}\frac{d}{dx_j}a_{ijkl}\frac{d}{dx_l}c_{jkl} - b_{ijk}\frac{d}{dx_l}a_{ijkl}\frac{d}{dx_j}c_{jkl} - c_{jkl}\frac{d}{dx_l}a_{ijkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \\ & - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dx_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_l}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^3}\end{aligned} \tag{369}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dy_l dx_j}\cos\theta_{ijkl} = {} & \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dy_l dx_j}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk}\frac{d}{dy_l}c_{jkl} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dy_l dx_j}a_{ijkl} + b_{ijk}\frac{d}{dx_j}a_{ijkl}\frac{d}{dy_l}c_{jkl} - b_{ijk}\frac{d}{dy_l}a_{ijkl}\frac{d}{dx_j}c_{jkl} - c_{jkl}\frac{d}{dy_l}a_{ijkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \\ & - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dx_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_l}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^3}\end{aligned} \tag{370}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dz_l dx_j}\cos\theta_{ijkl} = {} & \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dz_l dx_j}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk}\frac{d}{dz_l}c_{jkl} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dz_l dx_j}a_{ijkl} + b_{ijk}\frac{d}{dx_j}a_{ijkl}\frac{d}{dz_l}c_{jkl} - b_{ijk}\frac{d}{dz_l}a_{ijkl}\frac{d}{dx_j}c_{jkl} - c_{jkl}\frac{d}{dz_l}a_{ijkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} \\ & - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dx_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dx_j}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_l}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^3}\end{aligned} \tag{371}$$

$$
\begin{aligned}
\frac{d^2}{dy_j^2}\cos\theta_{ijkl} = {} & \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dy_j^2}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d^2}{dy_j^2}b_{ijk} - 2a_{ijkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk}\frac{d}{dy_j}c_{jkl} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dy_j^2}a_{ijkl}}{b_{ijk}^2c_{jkl}^2} \\
& - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dy_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dy_j}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_j}c_{jkl}}{b_{ijk}^2c_{jkl}^3} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dy_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dy_j}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^3c_{jkl}^2}
\end{aligned} \tag{372}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{d^2}{dz_jdy_j}\cos\theta_{ijkl} = {} & \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dz_jdy_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d^2}{dz_jdy_j}b_{ijk} - a_{ijkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk}\frac{d}{dz_j}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dz_j}b_{ijk}\frac{d}{dy_j}c_{jkl}}{b_{ijk}^2c_{jkl}^2} \\
& + \frac{b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dz_jdy_j}a_{ijkl} + b_{ijk}\frac{d}{dy_j}a_{ijkl}\frac{d}{dz_j}c_{jkl} - b_{ijk}\frac{d}{dz_j}a_{ijkl}\frac{d}{dy_j}c_{jkl} + c_{jkl}\frac{d}{dy_j}a_{ijkl}\frac{d}{dz_j}b_{ijk} - c_{jkl}\frac{d}{dz_j}a_{ijkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^2c_{jkl}^2} \\
& - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dy_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dy_j}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_j}c_{jkl}}{b_{ijk}^2c_{jkl}^3} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dy_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dy_j}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^3c_{jkl}^2}
\end{aligned} \tag{373}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{d^2}{dx_kdy_j}\cos\theta_{ijkl} = {} & \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dy_jdx_k}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d^2}{dy_jdx_k}b_{ijk} - a_{ijkl}\frac{d}{dx_k}b_{ijk}\frac{d}{dy_j}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk}\frac{d}{dx_k}c_{jkl}}{b_{ijk}^2c_{jkl}^2} \\
& + \frac{b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dy_jdx_k}a_{ijkl} - b_{ijk}\frac{d}{dx_k}a_{ijkl}\frac{d}{dy_j}c_{jkl} + b_{ijk}\frac{d}{dy_j}a_{ijkl}\frac{d}{dx_k}c_{jkl} - c_{jkl}\frac{d}{dx_k}a_{ijkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk} + c_{jkl}\frac{d}{dy_j}a_{ijkl}\frac{d}{dx_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^2c_{jkl}^2} \\
& - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dy_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dy_j}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_k}c_{jkl}}{b_{ijk}^2c_{jkl}^3} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dy_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dy_j}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^3c_{jkl}^2}
\end{aligned} \tag{374}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{d^2}{dy_kdy_j}\cos\theta_{ijkl} = {} & \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dy_kdy_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d^2}{dy_kdy_j}b_{ijk} - a_{ijkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk}\frac{d}{dy_k}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dy_k}b_{ijk}\frac{d}{dy_j}c_{jkl}}{b_{ijk}^2c_{jkl}^2} \\
& + \frac{b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dy_kdy_j}a_{ijkl} + b_{ijk}\frac{d}{dy_j}a_{ijkl}\frac{d}{dy_k}c_{jkl} - b_{ijk}\frac{d}{dy_k}a_{ijkl}\frac{d}{dy_j}c_{jkl} + c_{jkl}\frac{d}{dy_j}a_{ijkl}\frac{d}{dy_k}b_{ijk} - c_{jkl}\frac{d}{dy_k}a_{ijkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^2c_{jkl}^2} \\
& - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dy_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dy_j}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_k}c_{jkl}}{b_{ijk}^2c_{jkl}^3} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dy_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dy_j}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^3c_{jkl}^2}
\end{aligned} \tag{375}
$$

$$\frac{d^2}{dz_k dy_j}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dz_k dy_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d^2}{dz_k dy_j}b_{ijk} - a_{ijkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk}\frac{d}{dz_k}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dz_k}b_{ijk}\frac{d}{dy_j}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2}$$
$$+ \frac{b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dz_k dy_j}a_{ijkl} + b_{ijk}\frac{d}{dy_j}a_{ijkl}\frac{d}{dz_k}c_{jkl} - b_{ijk}\frac{d}{dz_k}a_{ijkl}\frac{d}{dy_j}c_{jkl} + c_{jkl}\frac{d}{dy_j}a_{ijkl}\frac{d}{dz_k}b_{ijk} - c_{jkl}\frac{d}{dz_k}a_{ijkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2}$$
$$- \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dy_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dy_j}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_k}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^3} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dy_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dy_j}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}^2} \tag{376}$$

$$\frac{d^2}{dx_l dy_j}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dy_j dx_l}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk}\frac{d}{dx_l}c_{jkl} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dy_j dx_l}a_{ijkl} - b_{ijk}\frac{d}{dx_l}a_{ijkl}\frac{d}{dy_j}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2}$$
$$+ \frac{b_{ijk}\frac{d}{dy_j}a_{ijkl}\frac{d}{dx_l}c_{jkl} - c_{jkl}\frac{d}{dx_l}a_{ijkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dy_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dy_j}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_l}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^3} \tag{377}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dy_j}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dy_l dy_j}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk}\frac{d}{dy_l}c_{jkl} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dy_l dy_j}a_{ijkl} + b_{ijk}\frac{d}{dy_j}a_{ijkl}\frac{d}{dy_l}c_{jkl} - b_{ijk}\frac{d}{dy_l}a_{ijkl}\frac{d}{dy_j}c_{jkl} - c_{jkl}\frac{d}{dy_l}a_{ijkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2}$$
$$- \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dy_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dy_j}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_l}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^3} \tag{378}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dy_j}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dz_l dy_j}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk}\frac{d}{dz_l}c_{jkl} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dz_l dy_j}a_{ijkl} + b_{ijk}\frac{d}{dy_j}a_{ijkl}\frac{d}{dz_l}c_{jkl} - b_{ijk}\frac{d}{dz_l}a_{ijkl}\frac{d}{dy_j}c_{jkl} - c_{jkl}\frac{d}{dz_l}a_{ijkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2}$$
$$- \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dy_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dy_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dy_j}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_l}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^3} \tag{379}$$

$$\frac{d^2}{dz_j^2}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dz_j^2}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d^2}{dz_j^2}b_{ijk} - 2a_{ijkl}\frac{d}{dz_j}b_{ijk}\frac{d}{dz_j}c_{jkl} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dz_j^2}a_{ijkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2}$$
$$- \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dz_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dz_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dz_j}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_j}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^3}$$
$$- \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dz_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dz_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dz_j}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}^2} \tag{380}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^{2}}{dx_{k}dz_{j}}\cos\theta_{ijkl} &= \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^{2}}{dz_{j}dx_{k}}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d^{2}}{dz_{j}dx_{k}}b_{ijk} - a_{ijkl}\frac{d}{dx_{k}}b_{ijk}\frac{d}{dz_{j}}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dz_{j}}b_{ijk}\frac{d}{dx_{k}}c_{jkl}}{b_{ijk}^{2}c_{jkl}^{2}} \\ &+ \frac{b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^{2}}{dz_{j}dx_{k}}a_{ijkl} - b_{ijk}\frac{d}{dx_{k}}a_{ijkl}\frac{d}{dz_{j}}c_{jkl} + b_{ijk}\frac{d}{dz_{j}}a_{ijkl}\frac{d}{dx_{k}}c_{jkl} - c_{jkl}\frac{d}{dx_{k}}a_{ijkl}\frac{d}{dz_{j}}b_{ijk} + c_{jkl}\frac{d}{dz_{j}}a_{ijkl}\frac{d}{dx_{k}}b_{ijk}}{b_{ijk}^{2}c_{jkl}^{2}} \\ &- \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dz_{j}}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dz_{j}}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dz_{j}}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_{k}}c_{jkl}}{b_{ijk}^{2}c_{jkl}^{3}} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dz_{j}}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dz_{j}}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dz_{j}}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_{k}}b_{ijk}}{b_{ijk}^{3}c_{jkl}^{2}}\end{aligned} \tag{381}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^{2}}{dy_{k}dz_{j}}\cos\theta_{ijkl} &= \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^{2}}{dz_{j}dy_{k}}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d^{2}}{dz_{j}dy_{k}}b_{ijk} - a_{ijkl}\frac{d}{dy_{k}}b_{ijk}\frac{d}{dz_{j}}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dz_{j}}b_{ijk}\frac{d}{dy_{k}}c_{jkl}}{b_{ijk}^{2}c_{jkl}^{2}} \\ &+ \frac{b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^{2}}{dz_{j}dy_{k}}a_{ijkl} - b_{ijk}\frac{d}{dy_{k}}a_{ijkl}\frac{d}{dz_{j}}c_{jkl} + b_{ijk}\frac{d}{dz_{j}}a_{ijkl}\frac{d}{dy_{k}}c_{jkl} - c_{jkl}\frac{d}{dy_{k}}a_{ijkl}\frac{d}{dz_{j}}b_{ijk} + c_{jkl}\frac{d}{dz_{j}}a_{ijkl}\frac{d}{dy_{k}}b_{ijk}}{b_{ijk}^{2}c_{jkl}^{2}} \\ &- \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dz_{j}}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dz_{j}}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dz_{j}}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_{k}}c_{jkl}}{b_{ijk}^{2}c_{jkl}^{3}} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dz_{j}}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dz_{j}}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dz_{j}}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_{k}}b_{ijk}}{b_{ijk}^{3}c_{jkl}^{2}}\end{aligned} \tag{382}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^{2}}{dz_{k}dz_{j}}\cos\theta_{ijkl} &= \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^{2}}{dz_{k}dz_{j}}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d^{2}}{dz_{k}dz_{j}}b_{ijk} - a_{ijkl}\frac{d}{dz_{j}}b_{ijk}\frac{d}{dz_{k}}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dz_{k}}b_{ijk}\frac{d}{dz_{j}}c_{jkl}}{b_{ijk}^{2}c_{jkl}^{2}} \\ &+ \frac{b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^{2}}{dz_{k}dz_{j}}a_{ijkl} + b_{ijk}\frac{d}{dz_{j}}a_{ijkl}\frac{d}{dz_{k}}c_{jkl} - b_{ijk}\frac{d}{dz_{k}}a_{ijkl}\frac{d}{dz_{j}}c_{jkl} + c_{jkl}\frac{d}{dz_{j}}a_{ijkl}\frac{d}{dz_{k}}b_{ijk} - c_{jkl}\frac{d}{dz_{k}}a_{ijkl}\frac{d}{dz_{j}}b_{ijk}}{b_{ijk}^{2}c_{jkl}^{2}} \\ &- \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dz_{j}}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dz_{j}}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dz_{j}}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_{k}}c_{jkl}}{b_{ijk}^{2}c_{jkl}^{3}} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dz_{j}}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dz_{j}}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dz_{j}}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_{k}}b_{ijk}}{b_{ijk}^{3}c_{jkl}^{2}}\end{aligned} \tag{383}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^{2}}{dx_{l}dz_{j}}\cos\theta_{ijkl} &= \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^{2}}{dz_{j}dx_{l}}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dz_{j}}b_{ijk}\frac{d}{dx_{l}}c_{jkl} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^{2}}{dz_{j}dx_{l}}a_{ijkl} - b_{ijk}\frac{d}{dx_{l}}a_{ijkl}\frac{d}{dz_{j}}c_{jkl}}{b_{ijk}^{2}c_{jkl}^{2}} \\ &+ \frac{b_{ijk}\frac{d}{dz_{j}}a_{ijkl}\frac{d}{dx_{l}}c_{jkl} - c_{jkl}\frac{d}{dx_{l}}a_{ijkl}\frac{d}{dz_{j}}b_{ijk}}{b_{ijk}^{2}c_{jkl}^{2}} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dz_{j}}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dz_{j}}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dz_{j}}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_{l}}c_{jkl}}{b_{ijk}^{2}c_{jkl}^{3}}\end{aligned} \tag{384}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^{2}}{dy_{l}dz_{j}}\cos\theta_{ijkl} &= \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^{2}}{dz_{j}dy_{l}}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dz_{j}}b_{ijk}\frac{d}{dy_{l}}c_{jkl} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^{2}}{dz_{j}dy_{l}}a_{ijkl} - b_{ijk}\frac{d}{dy_{l}}a_{ijkl}\frac{d}{dz_{j}}c_{jkl}}{b_{ijk}^{2}c_{jkl}^{2}} \\ &+ \frac{b_{ijk}\frac{d}{dz_{j}}a_{ijkl}\frac{d}{dy_{l}}c_{jkl} - c_{jkl}\frac{d}{dy_{l}}a_{ijkl}\frac{d}{dz_{j}}b_{ijk}}{b_{ijk}^{2}c_{jkl}^{2}} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dz_{j}}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dz_{j}}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dz_{j}}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_{l}}c_{jkl}}{b_{ijk}^{2}c_{jkl}^{3}}\end{aligned} \tag{385}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dz_j}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dz_l dz_j}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dz_j}b_{ijk}\frac{d}{dz_l}c_{jkl} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dz_l dz_j}a_{ijkl} + b_{ijk}\frac{d}{dz_j}a_{ijkl}\frac{d}{dz_l}c_{jkl} - b_{ijk}\frac{d}{dz_l}a_{ijkl}\frac{d}{dz_j}c_{jkl} - c_{jkl}\frac{d}{dz_l}a_{ijkl}\frac{d}{dz_j}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dz_j}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dz_j}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dz_j}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_l}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^3} \tag{386}$$

$$\frac{d^2}{dx_k^2}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dx_k^2}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d^2}{dx_k^2}b_{ijk} - 2a_{ijkl}\frac{d}{dx_k}b_{ijk}\frac{d}{dx_k}c_{jkl} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dx_k^2}a_{ijkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dx_k}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dx_k}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dx_k}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_k}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^3} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dx_k}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dx_k}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dx_k}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}^2} \tag{387}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dx_k}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dy_k dx_k}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d^2}{dy_k dx_k}b_{ijk} - a_{ijkl}\frac{d}{dx_k}b_{ijk}\frac{d}{dy_k}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dy_k}b_{ijk}\frac{d}{dx_k}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} + \frac{b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dy_k dx_k}a_{ijkl} + b_{ijk}\frac{d}{dx_k}a_{ijkl}\frac{d}{dy_k}c_{jkl} - b_{ijk}\frac{d}{dy_k}a_{ijkl}\frac{d}{dx_k}c_{jkl} + c_{jkl}\frac{d}{dx_k}a_{ijkl}\frac{d}{dy_k}b_{ijk} - c_{jkl}\frac{d}{dy_k}a_{ijkl}\frac{d}{dx_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dx_k}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dx_k}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dx_k}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_k}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^3} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dx_k}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dx_k}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dx_k}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}^2} \tag{388}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dx_k}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dz_k dx_k}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d^2}{dz_k dx_k}b_{ijk} - a_{ijkl}\frac{d}{dx_k}b_{ijk}\frac{d}{dz_k}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dz_k}b_{ijk}\frac{d}{dx_k}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} + \frac{b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dz_k dx_k}a_{ijkl} + b_{ijk}\frac{d}{dx_k}a_{ijkl}\frac{d}{dz_k}c_{jkl} - b_{ijk}\frac{d}{dz_k}a_{ijkl}\frac{d}{dx_k}c_{jkl} + c_{jkl}\frac{d}{dx_k}a_{ijkl}\frac{d}{dz_k}b_{ijk} - c_{jkl}\frac{d}{dz_k}a_{ijkl}\frac{d}{dx_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dx_k}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dx_k}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dx_k}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_k}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^3} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dx_k}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dx_k}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dx_k}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}^2} \tag{389}$$

$$\frac{d^2}{dx_l dx_k}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dx_l dx_k}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dx_k}b_{ijk}\frac{d}{dx_l}c_{jkl} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dx_l dx_k}a_{ijkl} + b_{ijk}\frac{d}{dx_k}a_{ijkl}\frac{d}{dx_l}c_{jkl} - b_{ijk}\frac{d}{dx_l}a_{ijkl}\frac{d}{dx_k}c_{jkl} - c_{jkl}\frac{d}{dx_l}a_{ijkl}\frac{d}{dx_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dx_k}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dx_k}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dx_k}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_l}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^3} \tag{390}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dx_k}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dy_l dx_k}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dx_k}b_{ijk}\frac{d}{dy_l}c_{jkl} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dy_l dx_k}a_{ijkl} + b_{ijk}\frac{d}{dx_k}a_{ijkl}\frac{d}{dy_l}c_{jkl} - b_{ijk}\frac{d}{dy_l}a_{ijkl}\frac{d}{dx_k}c_{jkl} - c_{jkl}\frac{d}{dy_l}a_{ijkl}\frac{d}{dx_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dx_k}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dx_k}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dx_k}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_l}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^3} \tag{391}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dx_k}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dz_l dx_k}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dx_k}b_{ijk}\frac{d}{dz_l}c_{jkl} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dz_l dx_k}a_{ijkl} + b_{ijk}\frac{d}{dx_k}a_{ijkl}\frac{d}{dz_l}c_{jkl} - b_{ijk}\frac{d}{dz_l}a_{ijkl}\frac{d}{dx_k}c_{jkl} - c_{jkl}\frac{d}{dz_l}a_{ijkl}\frac{d}{dx_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dx_k}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dx_k}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dx_k}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_l}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^3} \tag{392}$$

$$\frac{d^2}{dy_k^2}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dy_k^2}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d^2}{dy_k^2}b_{ijk} - 2a_{ijkl}\frac{d}{dy_k}b_{ijk}\frac{d}{dy_k}c_{jkl} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dy_k^2}a_{ijkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dy_k}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dy_k}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dy_k}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_k}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^3} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dy_k}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dy_k}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dy_k}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}^2} \tag{393}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dy_k}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dz_k dy_k}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d^2}{dz_k dy_k}b_{ijk} - a_{ijkl}\frac{d}{dy_k}b_{ijk}\frac{d}{dz_k}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dz_k}b_{ijk}\frac{d}{dy_k}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} + \frac{b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dz_k dy_k}a_{ijkl} + b_{ijk}\frac{d}{dy_k}a_{ijkl}\frac{d}{dz_k}c_{jkl} - b_{ijk}\frac{d}{dz_k}a_{ijkl}\frac{d}{dy_k}c_{jkl} + c_{jkl}\frac{d}{dy_k}a_{ijkl}\frac{d}{dz_k}b_{ijk} - c_{jkl}\frac{d}{dz_k}a_{ijkl}\frac{d}{dy_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dy_k}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dy_k}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dy_k}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_k}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^3} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dy_k}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dy_k}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dy_k}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}^2} \tag{394}$$

$$\frac{d^2}{dx_l dy_k}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dy_k dx_l}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dy_k}b_{ijk}\frac{d}{dx_l}c_{jkl} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dy_k dx_l}a_{ijkl} - b_{ijk}\frac{d}{dx_l}a_{ijkl}\frac{d}{dy_k}c_{jkl} + b_{ijk}\frac{d}{dy_k}a_{ijkl}\frac{d}{dx_l}c_{jkl} - c_{jkl}\frac{d}{dx_l}a_{ijkl}\frac{d}{dy_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dy_k}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dy_k}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dy_k}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_l}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^3} \tag{395}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dy_k}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dy_l dy_k}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dy_k}b_{ijk}\frac{d}{dy_l}c_{jkl} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dy_l dy_k}a_{ijkl} + b_{ijk}\frac{d}{dy_k}a_{ijkl}\frac{d}{dy_l}c_{jkl} - b_{ijk}\frac{d}{dy_l}a_{ijkl}\frac{d}{dy_k}c_{jkl} - c_{jkl}\frac{d}{dy_l}a_{ijkl}\frac{d}{dy_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dy_k}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dy_k}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dy_k}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_l}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^3} \tag{396}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dy_k}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dz_l dy_k}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dy_k}b_{ijk}\frac{d}{dz_l}c_{jkl} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dz_l dy_k}a_{ijkl} + b_{ijk}\frac{d}{dy_k}a_{ijkl}\frac{d}{dz_l}c_{jkl} - b_{ijk}\frac{d}{dz_l}a_{ijkl}\frac{d}{dy_k}c_{jkl} - c_{jkl}\frac{d}{dz_l}a_{ijkl}\frac{d}{dy_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dy_k}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dy_k}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dy_k}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_l}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^3} \tag{397}$$

$$\frac{d^2}{dz_k^2}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dz_k^2}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d^2}{dz_k^2}b_{ijk} - 2a_{ijkl}\frac{d}{dz_k}b_{ijk}\frac{d}{dz_k}c_{jkl} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dz_k^2}a_{ijkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dz_k}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dz_k}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dz_k}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_k}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^3} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dz_k}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dz_k}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dz_k}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^3 c_{jkl}^2} \tag{398}$$

$$\frac{d^2}{dx_l dz_k}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dz_k dx_l}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dz_k}b_{ijk}\frac{d}{dx_l}c_{jkl} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dz_k dx_l}a_{ijkl} - b_{ijk}\frac{d}{dx_l}a_{ijkl}\frac{d}{dz_k}c_{jkl} + b_{ijk}\frac{d}{dz_k}a_{ijkl}\frac{d}{dx_l}c_{jkl} - c_{jkl}\frac{d}{dx_l}a_{ijkl}\frac{d}{dz_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dz_k}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dz_k}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dz_k}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_l}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^3} \tag{399}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dz_k}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dz_k dy_l}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dz_k}b_{ijk}\frac{d}{dy_l}c_{jkl} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dz_k dy_l}a_{ijkl} - b_{ijk}\frac{d}{dy_l}a_{ijkl}\frac{d}{dz_k}c_{jkl} + b_{ijk}\frac{d}{dz_k}a_{ijkl}\frac{d}{dy_l}c_{jkl} - c_{jkl}\frac{d}{dy_l}a_{ijkl}\frac{d}{dz_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dz_k}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dz_k}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dz_k}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_l}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^3} \tag{400}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dz_k}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d^2}{dz_l dz_k}c_{jkl} - a_{ijkl}\frac{d}{dz_k}b_{ijk}\frac{d}{dz_l}c_{jkl} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d^2}{dz_l dz_k}a_{ijkl} + b_{ijk}\frac{d}{dz_k}a_{ijkl}\frac{d}{dz_l}c_{jkl} - b_{ijk}\frac{d}{dz_l}a_{ijkl}\frac{d}{dz_k}c_{jkl} - c_{jkl}\frac{d}{dz_l}a_{ijkl}\frac{d}{dz_k}b_{ijk}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^2} - \frac{2\left(-a_{ijkl}b_{ijk}\frac{d}{dz_k}c_{jkl} - a_{ijkl}c_{jkl}\frac{d}{dz_k}b_{ijk} + b_{ijk}c_{jkl}\frac{d}{dz_k}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_l}c_{jkl}}{b_{ijk}^2 c_{jkl}^3} \tag{401}$$

$$\frac{d^2}{dx_l^2}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}\frac{d^2}{dx_l^2}c_{jkl} + c_{jkl}\frac{d^2}{dx_l^2}a_{ijkl}}{b_{ijk}c_{jkl}^2} - \frac{2\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dx_l}c_{jkl} + c_{jkl}\frac{d}{dx_l}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dx_l}c_{jkl}}{b_{ijk}c_{jkl}^3} \tag{402}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dx_l}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}\frac{d^2}{dy_l dx_l}c_{jkl} + c_{jkl}\frac{d^2}{dy_l dx_l}a_{ijkl} + \frac{d}{dx_l}a_{ijkl}\frac{d}{dy_l}c_{jkl} - \frac{d}{dy_l}a_{ijkl}\frac{d}{dx_l}c_{jkl}}{b_{ijk}c_{jkl}^2} - \frac{2\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dx_l}c_{jkl} + c_{jkl}\frac{d}{dx_l}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_l}c_{jkl}}{b_{ijk}c_{jkl}^3} \tag{403}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dx_l}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}\frac{d^2}{dz_l dx_l}c_{jkl} + c_{jkl}\frac{d^2}{dz_l dx_l}a_{ijkl} + \frac{d}{dx_l}a_{ijkl}\frac{d}{dz_l}c_{jkl} - \frac{d}{dz_l}a_{ijkl}\frac{d}{dx_l}c_{jkl}}{b_{ijk}c_{jkl}^2} - \frac{2\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dx_l}c_{jkl} + c_{jkl}\frac{d}{dx_l}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_l}c_{jkl}}{b_{ijk}c_{jkl}^3} \tag{404}$$

$$\frac{d^2}{dy_l^2}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}\frac{d^2}{dy_l^2}c_{jkl} + c_{jkl}\frac{d^2}{dy_l^2}a_{ijkl}}{b_{ijk}c_{jkl}^2} - \frac{2\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dy_l}c_{jkl} + c_{jkl}\frac{d}{dy_l}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dy_l}c_{jkl}}{b_{ijk}c_{jkl}^3} \tag{405}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dy_l}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}\frac{d^2}{dz_l dy_l}c_{jkl} + c_{jkl}\frac{d^2}{dz_l dy_l}a_{ijkl} + \frac{d}{dy_l}a_{ijkl}\frac{d}{dz_l}c_{jkl} - \frac{d}{dz_l}a_{ijkl}\frac{d}{dy_l}c_{jkl}}{b_{ijk}c_{jkl}^2} - \frac{2\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dy_l}c_{jkl} + c_{jkl}\frac{d}{dy_l}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_l}c_{jkl}}{b_{ijk}c_{jkl}^3} \tag{406}$$

$$\frac{d^2}{dz_l^2}\cos\theta_{ijkl} = \frac{-a_{ijkl}\frac{d^2}{dz_l^2}c_{jkl} + c_{jkl}\frac{d^2}{dz_l^2}a_{ijkl}}{b_{ijk}c_{jkl}^2} - \frac{2\left(-a_{ijkl}\frac{d}{dz_l}c_{jkl} + c_{jkl}\frac{d}{dz_l}a_{ijkl}\right)\frac{d}{dz_l}c_{jkl}}{b_{ijk}c_{jkl}^3} \tag{407}$$

The derivatives of a_{ijkl} with respect to the coordinates x, y and z of the participating atoms i, j and k are defined in Section S1.3.3. The derivatives of $\cos\theta_{ijkl}$ are equivalent by replacing a_{ijkl} with d_{ijkl} (see Section S1.3.4).

S1.3.3 Derivatives of a_{ijkl}

The first and second order derivatives of a_{ijkl} with respect to the coordinates x, y and z of the participating atoms i,j,k and l are:

$$\frac{d}{dx_i}a_{ijkl} = -y_{kj}\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right) - z_{kj}\left(x_{kj}z_{lk} - x_{lk}z_{kj}\right) \tag{408}$$

$$\frac{d}{dy_i}a_{ijkl} = x_{kj}\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right) - z_{kj}\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right) \tag{409}$$

$$\frac{d}{dz_i}a_{ijkl} = x_{kj}\left(x_{kj}z_{lk} - x_{lk}z_{kj}\right) + y_{kj}\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right) \tag{410}$$

$$\frac{d}{dx_j}a_{ijkl} = -y_{lk}\left(x_{ji}y_{kj} - x_{kj}y_{ji}\right) - z_{lk}\left(x_{ji}z_{kj} - x_{kj}z_{ji}\right) - \left(y_i - y_k\right)\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right) - \left(z_i - z_k\right)\left(x_{kj}z_{lk} - x_{lk}z_{kj}\right) \tag{411}$$

$$\frac{d}{dy_j}a_{ijkl} = x_{lk}\left(x_{ji}y_{kj} - x_{kj}y_{ji}\right) - z_{lk}\left(y_{ji}z_{kj} - y_{kj}z_{ji}\right) + \left(x_i - x_k\right)\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right) - \left(z_i - z_k\right)\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right) \tag{412}$$

$$\frac{d}{dz_j}a_{ijkl} = x_{lk}\left(x_{ji}z_{kj} - x_{kj}z_{ji}\right) + y_{lk}\left(y_{ji}z_{kj} - y_{kj}z_{ji}\right) + \left(x_i - x_k\right)\left(x_{kj}z_{lk} - x_{lk}z_{kj}\right) + \left(y_i - y_k\right)\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right) \tag{413}$$

$$\frac{d}{dx_k}a_{ijkl} = -y_{ji}\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right) - z_{ji}\left(x_{kj}z_{lk} - x_{lk}z_{kj}\right) - \left(y_j - y_l\right)\left(x_{ji}y_{kj} - x_{kj}y_{ji}\right) - \left(z_j - z_l\right)\left(x_{ji}z_{kj} - x_{kj}z_{ji}\right) \tag{414}$$

$$\frac{d}{dy_k}a_{ijkl} = x_{ji}\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right) - z_{ji}\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right) + \left(x_j - x_l\right)\left(x_{ji}y_{kj} - x_{kj}y_{ji}\right) - \left(z_j - z_l\right)\left(y_{ji}z_{kj} - y_{kj}z_{ji}\right) \tag{415}$$

$$\frac{d}{dz_k}a_{ijkl} = x_{ji}\left(x_{kj}z_{lk} - x_{lk}z_{kj}\right) + y_{ji}\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right) + \left(x_j - x_l\right)\left(x_{ji}z_{kj} - x_{kj}z_{ji}\right) + \left(y_j - y_l\right)\left(y_{ji}z_{kj} - y_{kj}z_{ji}\right) \tag{416}$$

$$\frac{d}{dx_l}a_{ijkl} = -y_{kj}\left(x_{ji}y_{kj} - x_{kj}y_{ji}\right) - z_{kj}\left(x_{ji}z_{kj} - x_{kj}z_{ji}\right) \tag{417}$$

$$\frac{d}{dy_l}a_{ijkl} = x_{kj}\left(x_{ji}y_{kj} - x_{kj}y_{ji}\right) - z_{kj}\left(y_{ji}z_{kj} - y_{kj}z_{ji}\right) \tag{418}$$

$$\frac{d}{dz_l}a_{ijkl} = x_{kj}\left(x_{ji}z_{kj} - x_{kj}z_{ji}\right) + y_{kj}\left(y_{ji}z_{kj} - y_{kj}z_{ji}\right) \tag{419}$$

$$\frac{d^2}{dx_i^2}a_{ijkl} = 0 \tag{420}$$

$$\frac{d^2}{dy_i dx_i}a_{ijkl} = 0 \tag{421}$$

$$\frac{d^2}{dz_i dx_i}a_{ijkl} = 0 \tag{422}$$

$$\frac{d^2}{dx_j dx_i}a_{ijkl} = y_{kj}y_{lk} + z_{kj}z_{lk} \tag{423}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dx_i}a_{ijkl} = x_{kj}y_{lk} - 2x_{lk}y_{kj} \tag{424}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dx_i}a_{ijkl} = x_{kj}z_{lk} - 2x_{lk}z_{kj} \tag{425}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dx_i}a_{ijkl} = -y_{kj}\left(-y_j + y_l\right) - z_{kj}\left(-z_j + z_l\right) \tag{426}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dx_i}a_{ijkl} = -x_{kj}y_{lk} + x_{lk}y_{kj} - y_{kj}\left(x_j - x_l\right) \tag{427}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dx_i}a_{ijkl} = -x_{kj}z_{lk} + x_{lk}z_{kj} - z_{kj}\left(x_j - x_l\right) \tag{428}$$

$$\frac{d^2}{dx_l dx_i} a_{ijkl} = y_{kj}^2 + z_{kj}^2 \tag{429}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dx_i} a_{ijkl} = -x_{kj} y_{kj} \tag{430}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dx_i} a_{ijkl} = -x_{kj} z_{kj} \tag{431}$$

$$\frac{d^2}{dy_i^2} a_{ijkl} = 0 \tag{432}$$

$$\frac{d^2}{dz_i dy_i} a_{ijkl} = 0 \tag{433}$$

$$\frac{d^2}{dx_j dy_i} a_{ijkl} = -2x_{kj} y_{lk} + x_{lk} y_{kj} \tag{434}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dy_i} a_{ijkl} = x_{kj} x_{lk} + z_{kj} z_{lk} \tag{435}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dy_i} a_{ijkl} = y_{kj} z_{lk} - 2y_{lk} z_{kj} \tag{436}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dy_i} a_{ijkl} = x_{kj} y_{lk} + x_{kj} \left(-y_j + y_l\right) - x_{lk} y_{kj} \tag{437}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dy_i} a_{ijkl} = x_{kj} \left(x_j - x_l\right) - z_{kj} \left(-z_j + z_l\right) \tag{438}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dy_i} a_{ijkl} = -y_{kj} z_{lk} + y_{lk} z_{kj} - z_{kj} \left(y_j - y_l\right) \tag{439}$$

$$\frac{d^2}{dx_l dy_i} a_{ijkl} = -x_{kj} y_{kj} \tag{440}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dy_i} a_{ijkl} = x_{kj}^2 + z_{kj}^2 \tag{441}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dy_i} a_{ijkl} = -y_{kj} z_{kj} \tag{442}$$

$$\frac{d^2}{dz_i^2} a_{ijkl} = 0 \tag{443}$$

$$\frac{d^2}{dx_j dz_i} a_{ijkl} = -2x_{kj} z_{lk} + x_{lk} z_{kj} \tag{444}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dz_i} a_{ijkl} = -2y_{kj}z_{lk} + y_{lk}z_{kj} \tag{445}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dz_i} a_{ijkl} = x_{kj}x_{lk} + y_{kj}y_{lk} \tag{446}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dz_i} a_{ijkl} = x_{kj}z_{lk} + x_{kj}\left(-z_j + z_l\right) - x_{lk}z_{kj} \tag{447}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dz_i} a_{ijkl} = y_{kj}z_{lk} + y_{kj}\left(-z_j + z_l\right) - y_{lk}z_{kj} \tag{448}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dz_i} a_{ijkl} = x_{kj}\left(x_j - x_l\right) + y_{kj}\left(y_j - y_l\right) \tag{449}$$

$$\frac{d^2}{dx_l dz_i} a_{ijkl} = -x_{kj}z_{kj} \tag{450}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dz_i} a_{ijkl} = -y_{kj}z_{kj} \tag{451}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dz_i} a_{ijkl} = x_{kj}^2 + y_{kj}^2 \tag{452}$$

$$\frac{d^2}{dx_j^2} a_{ijkl} = -y_{lk}\left(-y_i + y_k\right) + y_{lk}\left(y_i - y_k\right) - z_{lk}\left(-z_i + z_k\right) + z_{lk}\left(z_i - z_k\right) \tag{453}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dx_j} a_{ijkl} = -x_{lk}\left(y_i - y_k\right) - y_{lk}\left(x_i - x_k\right) \tag{454}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dx_j} a_{ijkl} = -x_{lk}\left(z_i - z_k\right) - z_{lk}\left(x_i - x_k\right) \tag{455}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dx_j} a_{ijkl} = y_{ji}y_{lk} + z_{ji}z_{lk} - \left(y_i - y_k\right)\left(-y_j + y_l\right) - \left(z_i - z_k\right)\left(-z_j + z_l\right) \tag{456}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dx_j} a_{ijkl} = x_{ji}y_{kj} - x_{ji}y_{lk} - x_{kj}y_{ji} + x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj} - \left(x_j - x_l\right)\left(y_i - y_k\right) \tag{457}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dx_j} a_{ijkl} = x_{ji}z_{kj} - x_{ji}z_{lk} - x_{kj}z_{ji} + x_{kj}z_{lk} - x_{lk}z_{kj} - \left(x_j - x_l\right)\left(z_i - z_k\right) \tag{458}$$

$$\frac{d^2}{dx_l dx_j} a_{ijkl} = y_{kj}\left(y_i - y_k\right) + z_{kj}\left(z_i - z_k\right) \tag{459}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dx_j} a_{ijkl} = -x_{ji}y_{kj} + x_{kj}y_{ji} - x_{kj}\left(y_i - y_k\right) \tag{460}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dx_j} a_{ijkl} = -x_{ji}z_{kj} + x_{kj}z_{ji} - x_{kj}\left(z_i - z_k\right) \tag{461}$$

$$\frac{d^2}{dy_j^2} a_{ijkl} = 2x_{lk}\left(x_i - x_k\right) - z_{lk}\left(-z_i + z_k\right) + z_{lk}\left(z_i - z_k\right) \tag{462}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dy_j} a_{ijkl} = -y_{lk}\left(z_i - z_k\right) - z_{lk}\left(y_i - y_k\right) \tag{463}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dy_j} a_{ijkl} = -x_{ji}y_{kj} + x_{kj}y_{ji} - x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{ji} + x_{lk}y_{kj} + \left(x_i - x_k\right)\left(-y_j + y_l\right) \tag{464}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dy_j} a_{ijkl} = x_{ji}x_{lk} + z_{ji}z_{lk} + \left(x_i - x_k\right)\left(x_j - x_l\right) - \left(z_i - z_k\right)\left(-z_j + z_l\right) \tag{465}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dy_j} a_{ijkl} = y_{ji}z_{kj} - y_{ji}z_{lk} - y_{kj}z_{ji} + y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj} - \left(y_j - y_l\right)\left(z_i - z_k\right) \tag{466}$$

$$\frac{d^2}{dx_l dy_j} a_{ijkl} = x_{ji}y_{kj} - x_{kj}y_{ji} - y_{kj}\left(x_i - x_k\right) \tag{467}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dy_j} a_{ijkl} = x_{kj}\left(x_i - x_k\right) + z_{kj}\left(z_i - z_k\right) \tag{468}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dy_j} a_{ijkl} = -y_{ji}z_{kj} + y_{kj}z_{ji} - y_{kj}\left(z_i - z_k\right) \tag{469}$$

$$\frac{d^2}{dz_j^2} a_{ijkl} = 2x_{lk}\left(x_i - x_k\right) + 2y_{lk}\left(y_i - y_k\right) \tag{470}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dz_j} a_{ijkl} = -x_{ji}z_{kj} + x_{kj}z_{ji} - x_{kj}z_{lk} - x_{lk}z_{ji} + x_{lk}z_{kj} + \left(x_i - x_k\right)\left(-z_j + z_l\right) \tag{471}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dz_j} a_{ijkl} = -y_{ji}z_{kj} + y_{kj}z_{ji} - y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{ji} + y_{lk}z_{kj} + \left(y_i - y_k\right)\left(-z_j + z_l\right) \tag{472}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dz_j} a_{ijkl} = x_{ji}x_{lk} + y_{ji}y_{lk} + \left(x_i - x_k\right)\left(x_j - x_l\right) + \left(y_i - y_k\right)\left(y_j - y_l\right) \tag{473}$$

$$\frac{d^2}{dx_l dz_j} a_{ijkl} = x_{ji}z_{kj} - x_{kj}z_{ji} - z_{kj}\left(x_i - x_k\right) \tag{474}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dz_j} a_{ijkl} = y_{ji}z_{kj} - y_{kj}z_{ji} - z_{kj}\left(y_i - y_k\right) \tag{475}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dz_j} a_{ijkl} = x_{kj}\left(x_i - x_k\right) + y_{kj}\left(y_i - y_k\right) \tag{476}$$

$$\frac{d^2}{dx_k^2}a_{ijkl} = -y_{ji}\left(-y_j + y_l\right) + y_{ji}\left(y_j - y_l\right) - z_{ji}\left(-z_j + z_l\right) + z_{ji}\left(z_j - z_l\right) \tag{477}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dx_k}a_{ijkl} = -x_{ji}\left(y_j - y_l\right) - y_{ji}\left(x_j - x_l\right) \tag{478}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dx_k}a_{ijkl} = -x_{ji}\left(z_j - z_l\right) - z_{ji}\left(x_j - x_l\right) \tag{479}$$

$$\frac{d^2}{dx_l dx_k}a_{ijkl} = y_{ji}y_{kj} + z_{ji}z_{kj} \tag{480}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dx_k}a_{ijkl} = x_{ji}y_{kj} - 2x_{kj}y_{ji} \tag{481}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dx_k}a_{ijkl} = x_{ji}z_{kj} - 2x_{kj}z_{ji} \tag{482}$$

$$\frac{d^2}{dy_k^2}a_{ijkl} = 2x_{ji}\left(x_j - x_l\right) - z_{ji}\left(-z_j + z_l\right) + z_{ji}\left(z_j - z_l\right) \tag{483}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dy_k}a_{ijkl} = -y_{ji}\left(z_j - z_l\right) - z_{ji}\left(y_j - y_l\right) \tag{484}$$

$$\frac{d^2}{dx_l dy_k}a_{ijkl} = -2x_{ji}y_{kj} + x_{kj}y_{ji} \tag{485}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dy_k}a_{ijkl} = x_{ji}x_{kj} + z_{ji}z_{kj} \tag{486}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dy_k}a_{ijkl} = y_{ji}z_{kj} - 2y_{kj}z_{ji} \tag{487}$$

$$\frac{d^2}{dz_k^2}a_{ijkl} = 2x_{ji}\left(x_j - x_l\right) + 2y_{ji}\left(y_j - y_l\right) \tag{488}$$

$$\frac{d^2}{dx_l dz_k}a_{ijkl} = -2x_{ji}z_{kj} + x_{kj}z_{ji} \tag{489}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dz_k}a_{ijkl} = -2y_{ji}z_{kj} + y_{kj}z_{ji} \tag{490}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dz_k}a_{ijkl} = x_{ji}x_{kj} + y_{ji}y_{kj} \tag{491}$$

$$\frac{d^2}{dx_l^2}a_{ijkl} = 0 \tag{492}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dx_l}a_{ijkl} = 0 \tag{493}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dx_l} a_{ijkl} = 0 \tag{494}$$

$$\frac{d^2}{dy_l^2} a_{ijkl} = 0 \tag{495}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dy_l} a_{ijkl} = 0 \tag{496}$$

$$\frac{d^2}{dz_l^2} a_{ijkl} = 0 \tag{497}$$

S1.3.4 Derivatives of d_{ijkl}

The first and second order derivatives of d_{ijkl} with respect to the coordinates x, y and z of the participating atoms i,j,k and l are:

$$\frac{d}{dx_i} d_{ijkl} = r_{kj} \left(-y_{kj} z_{lk} + y_{lk} z_{kj}\right) \tag{498}$$

$$\frac{d}{dy_i} d_{ijkl} = r_{kj} \left(x_{kj} z_{lk} - x_{lk} z_{kj}\right) \tag{499}$$

$$\frac{d}{dz_i} d_{ijkl} = r_{kj} \left(-x_{kj} y_{lk} + x_{lk} y_{kj}\right) \tag{500}$$

$$\frac{d}{dx_j} d_{ijkl} = r_{kj} \left(y_{ji} z_{lk} + y_{kj} z_{lk} - y_{lk} z_{ji} - y_{lk} z_{kj}\right) - \frac{x_{kj} \left(x_{ji} \left(y_{kj} z_{lk} - y_{lk} z_{kj}\right) + y_{ji} \left(-x_{kj} z_{lk} + x_{lk} z_{kj}\right) + z_{ji} \left(x_{kj} y_{lk} - x_{lk} y_{kj}\right)\right)}{r_{kj}} \tag{501}$$

$$\frac{d}{dy_j} d_{ijkl} = r_{kj} \left(-x_{ji} z_{lk} - x_{kj} z_{lk} + x_{lk} z_{ji} + x_{lk} z_{kj}\right) - \frac{y_{kj} \left(x_{ji} \left(y_{kj} z_{lk} - y_{lk} z_{kj}\right) + y_{ji} \left(-x_{kj} z_{lk} + x_{lk} z_{kj}\right) + z_{ji} \left(x_{kj} y_{lk} - x_{lk} y_{kj}\right)\right)}{r_{kj}} \tag{502}$$

$$\frac{d}{dz_j} d_{ijkl} = r_{kj} \left(x_{ji} y_{lk} + x_{kj} y_{lk} - x_{lk} y_{ji} - x_{lk} y_{kj}\right) - \frac{z_{kj} \left(x_{ji} \left(y_{kj} z_{lk} - y_{lk} z_{kj}\right) + y_{ji} \left(-x_{kj} z_{lk} + x_{lk} z_{kj}\right) + z_{ji} \left(x_{kj} y_{lk} - x_{lk} y_{kj}\right)\right)}{r_{kj}} \tag{503}$$

$$\frac{d}{dx_k} d_{ijkl} = r_{kj} \left(y_{ji} \left(z_j - z_l\right) + z_{ji} \left(-y_j + y_l\right)\right) + \frac{x_{kj} \left(x_{ji} \left(y_{kj} z_{lk} - y_{lk} z_{kj}\right) + y_{ji} \left(-x_{kj} z_{lk} + x_{lk} z_{kj}\right) + z_{ji} \left(x_{kj} y_{lk} - x_{lk} y_{kj}\right)\right)}{r_{kj}} \tag{504}$$

$$\frac{d}{dy_k} d_{ijkl} = r_{kj} \left(x_{ji} \left(-z_j + z_l\right) + z_{ji} \left(x_j - x_l\right)\right) + \frac{y_{kj} \left(x_{ji} \left(y_{kj} z_{lk} - y_{lk} z_{kj}\right) + y_{ji} \left(-x_{kj} z_{lk} + x_{lk} z_{kj}\right) + z_{ji} \left(x_{kj} y_{lk} - x_{lk} y_{kj}\right)\right)}{r_{kj}} \tag{505}$$

$$\frac{d}{dz_k}d_{ijkl} = r_{kj}\left(x_{ji}\left(y_j - y_l\right) + y_{ji}\left(-x_j + x_l\right)\right) + \frac{z_{kj}\left(x_{ji}\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right) + y_{ji}\left(-x_{kj}z_{lk} + x_{lk}z_{kj}\right) + z_{ji}\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right)\right)}{r_{kj}} \tag{506}$$

$$\frac{d}{dx_l}d_{ijkl} = r_{kj}\left(y_{ji}z_{kj} - y_{kj}z_{ji}\right) \tag{507}$$

$$\frac{d}{dy_l}d_{ijkl} = r_{kj}\left(-x_{ji}z_{kj} + x_{kj}z_{ji}\right) \tag{508}$$

$$\frac{d}{dz_l}d_{ijkl} = r_{kj}\left(x_{ji}y_{kj} - x_{kj}y_{ji}\right) \tag{509}$$

$$\frac{d^2}{dx_i^2}d_{ijkl} = 0 \tag{510}$$

$$\frac{d^2}{dy_i dx_i}d_{ijkl} = 0 \tag{511}$$

$$\frac{d^2}{dz_i dx_i}d_{ijkl} = 0 \tag{512}$$

$$\frac{d^2}{dx_j dx_i}d_{ijkl} = -\frac{x_{kj}\left(-y_{kj}z_{lk} + y_{lk}z_{kj}\right)}{r_{kj}} \tag{513}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dx_i}d_{ijkl} = r_{kj}z_{lk} - \frac{y_{kj}\left(-y_{kj}z_{lk} + y_{lk}z_{kj}\right)}{r_{kj}} \tag{514}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dx_i}d_{ijkl} = -r_{kj}y_{lk} - \frac{z_{kj}\left(-y_{kj}z_{lk} + y_{lk}z_{kj}\right)}{r_{kj}} \tag{515}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dx_i}d_{ijkl} = \frac{x_{kj}\left(-y_{kj}z_{lk} + y_{lk}z_{kj}\right)}{r_{kj}} \tag{516}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dx_i}d_{ijkl} = r_{kj}\left(z_j - z_l\right) + \frac{y_{kj}\left(-y_{kj}z_{lk} + y_{lk}z_{kj}\right)}{r_{kj}} \tag{517}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dx_i}d_{ijkl} = r_{kj}\left(-y_j + y_l\right) + \frac{z_{kj}\left(-y_{kj}z_{lk} + y_{lk}z_{kj}\right)}{r_{kj}} \tag{518}$$

$$\frac{d^2}{dx_l dx_i} d_{ijkl} = 0 \tag{519}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dx_i} d_{ijkl} = r_{kj} z_{kj} \tag{520}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dx_i} d_{ijkl} = -r_{kj} y_{kj} \tag{521}$$

$$\frac{d^2}{dy_i^2} d_{ijkl} = 0 \tag{522}$$

$$\frac{d^2}{dz_i dy_i} d_{ijkl} = 0 \tag{523}$$

$$\frac{d^2}{dx_j dy_i} d_{ijkl} = -r_{kj} z_{lk} - \frac{x_{kj} \left(x_{kj} z_{lk} - x_{lk} z_{kj}\right)}{r_{kj}} \tag{524}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dy_i} d_{ijkl} = -\frac{y_{kj} \left(x_{kj} z_{lk} - x_{lk} z_{kj}\right)}{r_{kj}} \tag{525}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dy_i} d_{ijkl} = r_{kj} x_{lk} - \frac{z_{kj} \left(x_{kj} z_{lk} - x_{lk} z_{kj}\right)}{r_{kj}} \tag{526}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dy_i} d_{ijkl} = r_{kj} \left(-z_j + z_l\right) + \frac{x_{kj} \left(x_{kj} z_{lk} - x_{lk} z_{kj}\right)}{r_{kj}} \tag{527}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dy_i} d_{ijkl} = \frac{y_{kj} \left(x_{kj} z_{lk} - x_{lk} z_{kj}\right)}{r_{kj}} \tag{528}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dy_i} d_{ijkl} = r_{kj} \left(x_j - x_l\right) + \frac{z_{kj} \left(x_{kj} z_{lk} - x_{lk} z_{kj}\right)}{r_{kj}} \tag{529}$$

$$\frac{d^2}{dx_l dy_i} d_{ijkl} = -r_{kj} z_{kj} \tag{530}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dy_i} d_{ijkl} = 0 \tag{531}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dy_i} d_{ijkl} = r_{kj} x_{kj} \tag{532}$$

$$\frac{d^2}{dz_i^2} d_{ijkl} = 0 \tag{533}$$

$$\frac{d^2}{dx_j dz_i} d_{ijkl} = r_{kj} y_{lk} - \frac{x_{kj} \left(-x_{kj} y_{lk} + x_{lk} y_{kj}\right)}{r_{kj}} \tag{534}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dz_i} d_{ijkl} = -r_{kj} x_{lk} - \frac{y_{kj} \left(-x_{kj} y_{lk} + x_{lk} y_{kj}\right)}{r_{kj}} \tag{535}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dz_i} d_{ijkl} = -\frac{z_{kj} \left(-x_{kj} y_{lk} + x_{lk} y_{kj}\right)}{r_{kj}} \tag{536}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dz_i} d_{ijkl} = r_{kj} \left(y_j - y_l\right) + \frac{x_{kj} \left(-x_{kj} y_{lk} + x_{lk} y_{kj}\right)}{r_{kj}} \tag{537}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dz_i} d_{ijkl} = r_{kj} \left(-x_j + x_l\right) + \frac{y_{kj} \left(-x_{kj} y_{lk} + x_{lk} y_{kj}\right)}{r_{kj}} \tag{538}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dz_i} d_{ijkl} = \frac{z_{kj} \left(-x_{kj} y_{lk} + x_{lk} y_{kj}\right)}{r_{kj}} \tag{539}$$

$$\frac{d^2}{dx_l dz_i} d_{ijkl} = r_{kj} y_{kj} \tag{540}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dz_i} d_{ijkl} = -r_{kj} x_{kj} \tag{541}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dz_i} d_{ijkl} = 0 \tag{542}$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx_j^2} d_{ijkl} = &- \frac{2 x_{kj} \left(y_{ji} z_{lk} + y_{kj} z_{lk} - y_{lk} z_{ji} - y_{lk} z_{kj}\right)}{r_{kj}} \\ &+ \frac{x_{ji} \left(y_{kj} z_{lk} - y_{lk} z_{kj}\right) + y_{ji} \left(-x_{kj} z_{lk} + x_{lk} z_{kj}\right) + z_{ji} \left(x_{kj} y_{lk} - x_{lk} y_{kj}\right)}{r_{kj}} \\ &- \frac{x_{kj}^2 \left(x_{ji} \left(y_{kj} z_{lk} - y_{lk} z_{kj}\right) + y_{ji} \left(-x_{kj} z_{lk} + x_{lk} z_{kj}\right) + z_{ji} \left(x_{kj} y_{lk} - x_{lk} y_{kj}\right)\right)}{r_{kj}^3} \end{aligned} \tag{543}$$

$$
\begin{aligned}
\frac{d^2}{dy_j dx_j} d_{ijkl} = &-\frac{x_{kj}\left(-x_{ji}z_{lk} - x_{kj}z_{lk} + x_{lk}z_{ji} + x_{lk}z_{kj}\right)}{r_{kj}} \\
&- \frac{y_{kj}\left(y_{ji}z_{lk} + y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{ji} - y_{lk}z_{kj}\right)}{r_{kj}} \\
&- \frac{x_{kj}y_{kj}\left(x_{ji}\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right) + y_{ji}\left(-x_{kj}z_{lk} + x_{lk}z_{kj}\right) + z_{ji}\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right)\right)}{r_{kj}^3}
\end{aligned} \tag{544}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{d^2}{dz_j dx_j} d_{ijkl} = &-\frac{x_{kj}\left(x_{ji}y_{lk} + x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{ji} - x_{lk}y_{kj}\right)}{r_{kj}} \\
&- \frac{z_{kj}\left(y_{ji}z_{lk} + y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{ji} - y_{lk}z_{kj}\right)}{r_{kj}} \\
&- \frac{x_{kj}z_{kj}\left(x_{ji}\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right) + y_{ji}\left(-x_{kj}z_{lk} + x_{lk}z_{kj}\right) + z_{ji}\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right)\right)}{r_{kj}^3}
\end{aligned} \tag{545}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{d^2}{dx_k dx_j} d_{ijkl} = &-\frac{x_{kj}\left(y_{ji}\left(z_j - z_l\right) + z_{ji}\left(-y_j + y_l\right)\right)}{r_{kj}} \\
&+ \frac{x_{kj}\left(y_{ji}z_{lk} + y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{ji} - y_{lk}z_{kj}\right)}{r_{kj}} \\
&- \frac{x_{ji}\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right) + y_{ji}\left(-x_{kj}z_{lk} + x_{lk}z_{kj}\right) + z_{ji}\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right)}{r_{kj}} \\
&+ \frac{x_{kj}^2\left(x_{ji}\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right) + y_{ji}\left(-x_{kj}z_{lk} + x_{lk}z_{kj}\right) + z_{ji}\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right)\right)}{r_{kj}^3}
\end{aligned} \tag{546}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{d^2}{dy_k dx_j} d_{ijkl} = &\, r_{kj}\left(-z_i + z_l\right) - \frac{x_{kj}\left(x_{ji}\left(-z_j + z_l\right) + z_{ji}\left(x_j - x_l\right)\right)}{r_{kj}} \\
&+ \frac{y_{kj}\left(y_{ji}z_{lk} + y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{ji} - y_{lk}z_{kj}\right)}{r_{kj}} \\
&+ \frac{x_{kj}y_{kj}\left(x_{ji}\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right) + y_{ji}\left(-x_{kj}z_{lk} + x_{lk}z_{kj}\right) + z_{ji}\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right)\right)}{r_{kj}^3}
\end{aligned} \tag{547}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{d^2}{dz_k dx_j} d_{ijkl} = &\, r_{kj}\left(y_i - y_l\right) - \frac{x_{kj}\left(x_{ji}\left(y_j - y_l\right) + y_{ji}\left(-x_j + x_l\right)\right)}{r_{kj}} \\
&+ \frac{z_{kj}\left(y_{ji}z_{lk} + y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{ji} - y_{lk}z_{kj}\right)}{r_{kj}} \\
&+ \frac{x_{kj}z_{kj}\left(x_{ji}\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right) + y_{ji}\left(-x_{kj}z_{lk} + x_{lk}z_{kj}\right) + z_{ji}\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right)\right)}{r_{kj}^3}
\end{aligned} \tag{548}
$$

$$\frac{d^2}{dx_l dx_j} d_{ijkl} = -\frac{x_{kj}\left(y_{ji}z_{kj} - y_{kj}z_{ji}\right)}{r_{kj}} \tag{549}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dx_j} d_{ijkl} = r_{kj}\left(z_i - z_k\right) - \frac{x_{kj}\left(-x_{ji}z_{kj} + x_{kj}z_{ji}\right)}{r_{kj}} \tag{550}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dx_j} d_{ijkl} = r_{kj}\left(-y_i + y_k\right) - \frac{x_{kj}\left(x_{ji}y_{kj} - x_{kj}y_{ji}\right)}{r_{kj}} \tag{551}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dy_j^2} d_{ijkl} = &-\frac{2y_{kj}\left(-x_{ji}z_{lk} - x_{kj}z_{lk} + x_{lk}z_{ji} + x_{lk}z_{kj}\right)}{r_{kj}} \\ &+ \frac{x_{ji}\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right) + y_{ji}\left(-x_{kj}z_{lk} + x_{lk}z_{kj}\right) + z_{ji}\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right)}{r_{kj}} \\ &- \frac{y_{kj}^2\left(x_{ji}\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right) + y_{ji}\left(-x_{kj}z_{lk} + x_{lk}z_{kj}\right) + z_{ji}\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right)\right)}{r_{kj}^3}\end{aligned} \tag{552}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dz_j dy_j} d_{ijkl} = &-\frac{y_{kj}\left(x_{ji}y_{lk} + x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{ji} - x_{lk}y_{kj}\right)}{r_{kj}} - \frac{z_{kj}\left(-x_{ji}z_{lk} - x_{kj}z_{lk} + x_{lk}z_{ji} + x_{lk}z_{kj}\right)}{r_{kj}} \\ &- \frac{y_{kj}z_{kj}\left(x_{ji}\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right) + y_{ji}\left(-x_{kj}z_{lk} + x_{lk}z_{kj}\right) + z_{ji}\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right)\right)}{r_{kj}^3}\end{aligned} \tag{553}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dx_k dy_j} d_{ijkl} = &\, r_{kj}\left(z_i - z_l\right) + \frac{x_{kj}\left(-x_{ji}z_{lk} - x_{kj}z_{lk} + x_{lk}z_{ji} + x_{lk}z_{kj}\right)}{r_{kj}} \\ &- \frac{y_{kj}\left(y_{ji}\left(z_j - z_l\right) + z_{ji}\left(-y_j + y_l\right)\right)}{r_{kj}} \\ &+ \frac{x_{kj}y_{kj}\left(x_{ji}\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right) + y_{ji}\left(-x_{kj}z_{lk} + x_{lk}z_{kj}\right) + z_{ji}\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right)\right)}{r_{kj}^3}\end{aligned} \tag{554}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dy_k dy_j} d_{ijkl} = &-\frac{y_{kj}\left(x_{ji}\left(-z_j + z_l\right) + z_{ji}\left(x_j - x_l\right)\right)}{r_{kj}} \\ &+ \frac{y_{kj}\left(-x_{ji}z_{lk} - x_{kj}z_{lk} + x_{lk}z_{ji} + x_{lk}z_{kj}\right)}{r_{kj}} \\ &- \frac{x_{ji}\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right) + y_{ji}\left(-x_{kj}z_{lk} + x_{lk}z_{kj}\right) + z_{ji}\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right)}{r_{kj}} \\ &+ \frac{y_{kj}^2\left(x_{ji}\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right) + y_{ji}\left(-x_{kj}z_{lk} + x_{lk}z_{kj}\right) + z_{ji}\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right)\right)}{r_{kj}^3}\end{aligned} \tag{555}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dy_j} d_{ijkl} = r_{kj}\left(-x_i + x_l\right) - \frac{y_{kj}\left(x_{ji}\left(y_j - y_l\right) + y_{ji}\left(-x_j + x_l\right)\right)}{r_{kj}} + \frac{z_{kj}\left(-x_{ji}z_{lk} - x_{kj}z_{lk} + x_{lk}z_{ji} + x_{lk}z_{kj}\right)}{r_{kj}} + \frac{y_{kj}z_{kj}\left(x_{ji}\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right) + y_{ji}\left(-x_{kj}z_{lk} + x_{lk}z_{kj}\right) + z_{ji}\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right)\right)}{r_{kj}^3} \tag{556}$$

$$\frac{d^2}{dx_l dy_j} d_{ijkl} = r_{kj}\left(-z_i + z_k\right) - \frac{y_{kj}\left(y_{ji}z_{kj} - y_{kj}z_{ji}\right)}{r_{kj}} \tag{557}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dy_j} d_{ijkl} = -\frac{y_{kj}\left(-x_{ji}z_{kj} + x_{kj}z_{ji}\right)}{r_{kj}} \tag{558}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dy_j} d_{ijkl} = r_{kj}\left(x_i - x_k\right) - \frac{y_{kj}\left(x_{ji}y_{kj} - x_{kj}y_{ji}\right)}{r_{kj}} \tag{559}$$

$$\frac{d^2}{dz_j^2} d_{ijkl} = -\frac{2z_{kj}\left(x_{ji}y_{lk} + x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{ji} - x_{lk}y_{kj}\right)}{r_{kj}} + \frac{x_{ji}\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right) + y_{ji}\left(-x_{kj}z_{lk} + x_{lk}z_{kj}\right) + z_{ji}\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right)}{r_{kj}} - \frac{z_{kj}^2\left(x_{ji}\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right) + y_{ji}\left(-x_{kj}z_{lk} + x_{lk}z_{kj}\right) + z_{ji}\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right)\right)}{r_{kj}^3} \tag{560}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dz_j} d_{ijkl} = r_{kj}\left(-y_i + y_l\right) + \frac{x_{kj}\left(x_{ji}y_{lk} + x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{ji} - x_{lk}y_{kj}\right)}{r_{kj}} - \frac{z_{kj}\left(y_{ji}\left(z_j - z_l\right) + z_{ji}\left(-y_j + y_l\right)\right)}{r_{kj}} + \frac{x_{kj}z_{kj}\left(x_{ji}\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right) + y_{ji}\left(-x_{kj}z_{lk} + x_{lk}z_{kj}\right) + z_{ji}\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right)\right)}{r_{kj}^3} \tag{561}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dz_j} d_{ijkl} = r_{kj}\left(x_i - x_l\right) + \frac{y_{kj}\left(x_{ji}y_{lk} + x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{ji} - x_{lk}y_{kj}\right)}{r_{kj}} - \frac{z_{kj}\left(x_{ji}\left(-z_j + z_l\right) + z_{ji}\left(x_j - x_l\right)\right)}{r_{kj}} + \frac{y_{kj}z_{kj}\left(x_{ji}\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right) + y_{ji}\left(-x_{kj}z_{lk} + x_{lk}z_{kj}\right) + z_{ji}\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right)\right)}{r_{kj}^3} \tag{562}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dz_k dz_j}d_{ijkl} = &-\frac{z_{kj}\left(x_{ji}\left(y_j - y_l\right) + y_{ji}\left(-x_j + x_l\right)\right)}{r_{kj}} + \frac{z_{kj}\left(x_{ji}y_{lk} + x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{ji} - x_{lk}y_{kj}\right)}{r_{kj}} \\ &- \frac{x_{ji}\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right) + y_{ji}\left(-x_{kj}z_{lk} + x_{lk}z_{kj}\right) + z_{ji}\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right)}{r_{kj}} \\ &+ \frac{z_{kj}^2\left(x_{ji}\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right) + y_{ji}\left(-x_{kj}z_{lk} + x_{lk}z_{kj}\right) + z_{ji}\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right)\right)}{r_{kj}^3}\end{aligned} \tag{563}$$

$$\frac{d^2}{dx_l dz_j}d_{ijkl} = r_{kj}\left(y_i - y_k\right) - \frac{z_{kj}\left(y_{ji}z_{kj} - y_{kj}z_{ji}\right)}{r_{kj}} \tag{564}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dz_j}d_{ijkl} = r_{kj}\left(-x_i + x_k\right) - \frac{z_{kj}\left(-x_{ji}z_{kj} + x_{kj}z_{ji}\right)}{r_{kj}} \tag{565}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dz_j}d_{ijkl} = -\frac{z_{kj}\left(x_{ji}y_{kj} - x_{kj}y_{ji}\right)}{r_{kj}} \tag{566}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dx_k^2}d_{ijkl} = &\frac{2x_{kj}\left(y_{ji}\left(z_j - z_l\right) + z_{ji}\left(-y_j + y_l\right)\right)}{r_{kj}} \\ &+ \frac{x_{ji}\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right) + y_{ji}\left(-x_{kj}z_{lk} + x_{lk}z_{kj}\right) + z_{ji}\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right)}{r_{kj}} \\ &- \frac{x_{kj}^2\left(x_{ji}\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right) + y_{ji}\left(-x_{kj}z_{lk} + x_{lk}z_{kj}\right) + z_{ji}\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right)\right)}{r_{kj}^3}\end{aligned} \tag{567}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dy_k dx_k}d_{ijkl} = &\frac{x_{kj}\left(x_{ji}\left(-z_j + z_l\right) + z_{ji}\left(x_j - x_l\right)\right)}{r_{kj}} \\ &+ \frac{y_{kj}\left(y_{ji}\left(z_j - z_l\right) + z_{ji}\left(-y_j + y_l\right)\right)}{r_{kj}} \\ &- \frac{x_{kj}y_{kj}\left(x_{ji}\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right) + y_{ji}\left(-x_{kj}z_{lk} + x_{lk}z_{kj}\right) + z_{ji}\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right)\right)}{r_{kj}^3}\end{aligned} \tag{568}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dz_k dx_k}d_{ijkl} = &\frac{x_{kj}\left(x_{ji}\left(y_j - y_l\right) + y_{ji}\left(-x_j + x_l\right)\right)}{r_{kj}} \\ &+ \frac{z_{kj}\left(y_{ji}\left(z_j - z_l\right) + z_{ji}\left(-y_j + y_l\right)\right)}{r_{kj}} \\ &- \frac{x_{kj}z_{kj}\left(x_{ji}\left(y_{kj}z_{lk} - y_{lk}z_{kj}\right) + y_{ji}\left(-x_{kj}z_{lk} + x_{lk}z_{kj}\right) + z_{ji}\left(x_{kj}y_{lk} - x_{lk}y_{kj}\right)\right)}{r_{kj}^3}\end{aligned} \tag{569}$$

$$\frac{d^2}{dx_l dx_k} d_{ijkl} = \frac{x_{kj}\left(y_{ji} z_{kj} - y_{kj} z_{ji}\right)}{r_{kj}} \tag{570}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dx_k} d_{ijkl} = r_{kj} z_{ji} + \frac{x_{kj}\left(-x_{ji} z_{kj} + x_{kj} z_{ji}\right)}{r_{kj}} \tag{571}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dx_k} d_{ijkl} = -r_{kj} y_{ji} + \frac{x_{kj}\left(x_{ji} y_{kj} - x_{kj} y_{ji}\right)}{r_{kj}} \tag{572}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dy_k^2} d_{ijkl} = & \frac{2 y_{kj}\left(x_{ji}\left(-z_j + z_l\right) + z_{ji}\left(x_j - x_l\right)\right)}{r_{kj}} \\ & + \frac{x_{ji}\left(y_{kj} z_{lk} - y_{lk} z_{kj}\right) + y_{ji}\left(-x_{kj} z_{lk} + x_{lk} z_{kj}\right) + z_{ji}\left(x_{kj} y_{lk} - x_{lk} y_{kj}\right)}{r_{kj}} \\ & - \frac{y_{kj}^2\left(x_{ji}\left(y_{kj} z_{lk} - y_{lk} z_{kj}\right) + y_{ji}\left(-x_{kj} z_{lk} + x_{lk} z_{kj}\right) + z_{ji}\left(x_{kj} y_{lk} - x_{lk} y_{kj}\right)\right)}{r_{kj}^3}\end{aligned} \tag{573}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dz_k dy_k} d_{ijkl} = & \frac{y_{kj}\left(x_{ji}\left(y_j - y_l\right) + y_{ji}\left(-x_j + x_l\right)\right)}{r_{kj}} \\ & + \frac{z_{kj}\left(x_{ji}\left(-z_j + z_l\right) + z_{ji}\left(x_j - x_l\right)\right)}{r_{kj}} \\ & - \frac{y_{kj} z_{kj}\left(x_{ji}\left(y_{kj} z_{lk} - y_{lk} z_{kj}\right) + y_{ji}\left(-x_{kj} z_{lk} + x_{lk} z_{kj}\right) + z_{ji}\left(x_{kj} y_{lk} - x_{lk} y_{kj}\right)\right)}{r_{kj}^3}\end{aligned} \tag{574}$$

$$\frac{d^2}{dx_l dy_k} d_{ijkl} = -r_{kj} z_{ji} + \frac{y_{kj}\left(y_{ji} z_{kj} - y_{kj} z_{ji}\right)}{r_{kj}} \tag{575}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dy_k} d_{ijkl} = \frac{y_{kj}\left(-x_{ji} z_{kj} + x_{kj} z_{ji}\right)}{r_{kj}} \tag{576}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dy_k} d_{ijkl} = r_{kj} x_{ji} + \frac{y_{kj}\left(x_{ji} y_{kj} - x_{kj} y_{ji}\right)}{r_{kj}} \tag{577}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dz_k^2} d_{ijkl} = & \frac{2 z_{kj}\left(x_{ji}\left(y_j - y_l\right) + y_{ji}\left(-x_j + x_l\right)\right)}{r_{kj}} \\ & + \frac{x_{ji}\left(y_{kj} z_{lk} - y_{lk} z_{kj}\right) + y_{ji}\left(-x_{kj} z_{lk} + x_{lk} z_{kj}\right) + z_{ji}\left(x_{kj} y_{lk} - x_{lk} y_{kj}\right)}{r_{kj}} \\ & - \frac{z_{kj}^2\left(x_{ji}\left(y_{kj} z_{lk} - y_{lk} z_{kj}\right) + y_{ji}\left(-x_{kj} z_{lk} + x_{lk} z_{kj}\right) + z_{ji}\left(x_{kj} y_{lk} - x_{lk} y_{kj}\right)\right)}{r_{kj}^3}\end{aligned} \tag{578}$$

$$\frac{d^2}{dx_l dz_k} d_{ijkl} = r_{kj} y_{ji} + \frac{z_{kj} \left(y_{ji} z_{kj} - y_{kj} z_{ji} \right)}{r_{kj}} \tag{579}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dz_k} d_{ijkl} = -r_{kj} x_{ji} + \frac{z_{kj} \left(-x_{ji} z_{kj} + x_{kj} z_{ji} \right)}{r_{kj}} \tag{580}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dz_k} d_{ijkl} = \frac{z_{kj} \left(x_{ji} y_{kj} - x_{kj} y_{ji} \right)}{r_{kj}} \tag{581}$$

$$\frac{d^2}{dx_l^2} d_{ijkl} = 0 \tag{582}$$

$$\frac{d^2}{dy_l dx_l} d_{ijkl} = 0 \tag{583}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dx_l} d_{ijkl} = 0 \tag{584}$$

$$\frac{d^2}{dy_l^2} d_{ijkl} = 0 \tag{585}$$

$$\frac{d^2}{dz_l dy_l} d_{ijkl} = 0 \tag{586}$$

$$\frac{d^2}{dz_l^2} d_{ijkl} = 0 \tag{587}$$

S1.3.5 Derivatives of b_{ijk}

The first and second order derivatives of b_{ijk} with respect to the coordinates x, y and z of the participating atoms i, j and k are:

$$\frac{d}{dx_i} b_{ijk} = \frac{d}{dx_i} b_{ijk} \tag{588}$$

$$\frac{d}{dy_i} b_{ijk} = \frac{d}{dy_i} b_{ijk} \tag{589}$$

$$\frac{d}{dz_i} b_{ijk} = \frac{d}{dz_i} b_{ijk} \tag{590}$$

$$\frac{d}{dx_j} b_{ijk} = \frac{d}{dx_j} b_{ijk} \tag{591}$$

$$\frac{d}{dy_j} b_{ijk} = \frac{d}{dy_j} b_{ijk} \tag{592}$$

$$\frac{d}{dz_j} b_{ijk} = \frac{d}{dz_j} b_{ijk} \tag{593}$$

$$\frac{d}{dx_k} b_{ijk} = \frac{d}{dx_k} b_{ijk} \tag{594}$$

$$\frac{d}{dy_k} b_{ijk} = \frac{d}{dy_k} b_{ijk} \tag{595}$$

$$\frac{d}{dz_k} b_{ijk} = \frac{d}{dz_k} b_{ijk} \tag{596}$$

$$\frac{d^2}{dx_i^2} b_{ijk} = \frac{d^2}{dx_i^2} b_{ijk} \tag{597}$$

$$\frac{d^2}{dy_i dx_i} b_{ijk} = \frac{d^2}{dy_i dx_i} b_{ijk} \tag{598}$$

$$\frac{d^2}{dz_i dx_i} b_{ijk} = \frac{d^2}{dz_i dx_i} b_{ijk} \tag{599}$$

$$\frac{d^2}{dx_j dx_i} b_{ijk} = \frac{d^2}{dx_j dx_i} b_{ijk} \tag{600}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dx_i} b_{ijk} = \frac{d^2}{dy_j dx_i} b_{ijk} \tag{601}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dx_i} b_{ijk} = \frac{d^2}{dz_j dx_i} b_{ijk} \tag{602}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dx_i} b_{ijk} = \frac{d^2}{dx_k dx_i} b_{ijk} \tag{603}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dx_i} b_{ijk} = \frac{d^2}{dy_k dx_i} b_{ijk} \tag{604}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dx_i} b_{ijk} = \frac{d^2}{dz_k dx_i} b_{ijk} \tag{605}$$

$$\frac{d^2}{dy_i^2} b_{ijk} = \frac{d^2}{dy_i^2} b_{ijk} \tag{606}$$

$$\frac{d^2}{dz_i dy_i} b_{ijk} = \frac{d^2}{dz_i dy_i} b_{ijk} \tag{607}$$

$$\frac{d^2}{dx_j dy_i} b_{ijk} = \frac{d^2}{dy_i dx_j} b_{ijk} \tag{608}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dy_i} b_{ijk} = \frac{d^2}{dy_j dy_i} b_{ijk} \tag{609}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dy_i} b_{ijk} = \frac{d^2}{dz_j dy_i} b_{ijk} \tag{610}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dy_i} b_{ijk} = \frac{d^2}{dy_i dx_k} b_{ijk} \tag{611}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dy_i} b_{ijk} = \frac{d^2}{dy_k dy_i} b_{ijk} \tag{612}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dy_i} b_{ijk} = \frac{d^2}{dz_k dy_i} b_{ijk} \tag{613}$$

$$\frac{d^2}{dz_i^2} b_{ijk} = \frac{d^2}{dz_i^2} b_{ijk} \tag{614}$$

$$\frac{d^2}{dx_j dz_i} b_{ijk} = \frac{d^2}{dz_i dx_j} b_{ijk} \tag{615}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dz_i} b_{ijk} = \frac{d^2}{dz_i dy_j} b_{ijk} \tag{616}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dz_i} b_{ijk} = \frac{d^2}{dz_j dz_i} b_{ijk} \tag{617}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dz_i} b_{ijk} = \frac{d^2}{dz_i dx_k} b_{ijk} \tag{618}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dz_i} b_{ijk} = \frac{d^2}{dz_i dy_k} b_{ijk} \tag{619}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dz_i} b_{ijk} = \frac{d^2}{dz_k dz_i} b_{ijk} \tag{620}$$

$$\frac{d^2}{dx_j^2} b_{ijk} = \frac{d^2}{dx_j^2} b_{ijk} \tag{621}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dx_j} b_{ijk} = \frac{d^2}{dy_j dx_j} b_{ijk} \tag{622}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dx_j} b_{ijk} = \frac{d^2}{dz_j dx_j} b_{ijk} \tag{623}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dx_j} b_{ijk} = \frac{d^2}{dx_k dx_j} b_{ijk} \tag{624}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dx_j} b_{ijk} = \frac{d^2}{dy_k dx_j} b_{ijk} \tag{625}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dx_j} b_{ijk} = \frac{d^2}{dz_k dx_j} b_{ijk} \tag{626}$$

$$\frac{d^2}{dy_j^2} b_{ijk} = \frac{d^2}{dy_j^2} b_{ijk} \tag{627}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dy_j} b_{ijk} = \frac{d^2}{dz_j dy_j} b_{ijk} \tag{628}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dy_j} b_{ijk} = \frac{d^2}{dy_j dx_k} b_{ijk} \tag{629}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dy_j} b_{ijk} = \frac{d^2}{dy_k dy_j} b_{ijk} \tag{630}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dy_j} b_{ijk} = \frac{d^2}{dz_k dy_j} b_{ijk} \tag{631}$$

$$\frac{d^2}{dz_j^2} b_{ijk} = \frac{d^2}{dz_j^2} b_{ijk} \tag{632}$$

$$\frac{d^2}{dx_k dz_j} b_{ijk} = \frac{d^2}{dz_j dx_k} b_{ijk} \tag{633}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dz_j} b_{ijk} = \frac{d^2}{dz_j dy_k} b_{ijk} \tag{634}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dz_j} b_{ijk} = \frac{d^2}{dz_k dz_j} b_{ijk} \tag{635}$$

$$\frac{d^2}{dx_k^2} b_{ijk} = \frac{d^2}{dx_k^2} b_{ijk} \tag{636}$$

$$\frac{d^2}{dy_k dx_k} b_{ijk} = \frac{d^2}{dy_k dx_k} b_{ijk} \tag{637}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dx_k} b_{ijk} = \frac{d^2}{dz_k dx_k} b_{ijk} \tag{638}$$

$$\frac{d^2}{dy_k^2} b_{ijk} = \frac{d^2}{dy_k^2} b_{ijk} \tag{639}$$

$$\frac{d^2}{dz_k dy_k} b_{ijk} = \frac{d^2}{dz_k dy_k} b_{ijk} \tag{640}$$

$$\frac{d^2}{dz_k^2} b_{ijk} = \frac{d^2}{dz_k^2} b_{ijk} \tag{641}$$

The first and second order derivatives of b_{ijk} are equivalent to the derivatives of b_{jkl} by interchanging atomic indices.

S1.4 Coulomb Repulsion

A single Coulomb repulsion between two atoms i and j is given by

$$E_{\text{Coulomb},ij} = \frac{Q}{r_{ij}} \tag{642}$$

S1.4.1 Derivatives of $E_{\text{Coulomb},ij}$

The first and second order derivatives of $E_{\text{Coulomb},ij}$ with respect to the coordinates of the particapating atoms are:

$$\frac{d}{dx_i} E_{\text{Coulomb},ij} = -\frac{Q \frac{d}{dx_i} r_{ij}}{r_{ij}^2} \tag{643}$$

$$\frac{d}{dy_i} E_{\text{Coulomb},ij} = -\frac{Q \frac{d}{dy_i} r_{ij}}{r_{ij}^2} \tag{644}$$

$$\frac{d}{dz_i} E_{\text{Coulomb},ij} = -\frac{Q \frac{d}{dz_i} r_{ij}}{r_{ij}^2} \tag{645}$$

$$\frac{d}{dx_j} E_{\text{Coulomb},ij} = -\frac{Q \frac{d}{dx_j} r_{ij}}{r_{ij}^2} \tag{646}$$

$$\frac{d}{dy_j} E_{\text{Coulomb},ij} = -\frac{Q \frac{d}{dy_j} r_{ij}}{r_{ij}^2} \tag{647}$$

$$\frac{d}{dz_j} E_{\text{Coulomb},ij} = -\frac{Q \frac{d}{dz_j} r_{ij}}{r_{ij}^2} \tag{648}$$

$$\frac{d^2}{dx_i^2} E_{\text{Coulomb},ij} = -\frac{Q \frac{d^2}{dx_i^2} r_{ij}}{r_{ij}^2} + \frac{2Q \left(\frac{d}{dx_i} r_{ij}\right)^2}{r_{ij}^3} \tag{649}$$

$$\frac{d^2}{dy_i dx_i} E_{\text{Coulomb},ij} = -\frac{Q \frac{d^2}{dy_i dx_i} r_{ij}}{r_{ij}^2} + \frac{2Q \frac{d}{dx_i} r_{ij} \frac{d}{dy_i} r_{ij}}{r_{ij}^3} \tag{650}$$

$$\frac{d^2}{dz_i dx_i} E_{\text{Coulomb},ij} = -\frac{Q \frac{d^2}{dz_i dx_i} r_{ij}}{r_{ij}^2} + \frac{2Q \frac{d}{dx_i} r_{ij} \frac{d}{dz_i} r_{ij}}{r_{ij}^3} \tag{651}$$

$$\frac{d^2}{dx_j dx_i} E_{\text{Coulomb},ij} = -\frac{Q \frac{d^2}{dx_j dx_i} r_{ij}}{r_{ij}^2} + \frac{2Q \frac{d}{dx_i} r_{ij} \frac{d}{dx_j} r_{ij}}{r_{ij}^3} \tag{652}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dx_i} E_{\text{Coulomb},ij} = -\frac{Q \frac{d^2}{dy_j dx_i} r_{ij}}{r_{ij}^2} + \frac{2Q \frac{d}{dx_i} r_{ij} \frac{d}{dy_j} r_{ij}}{r_{ij}^3} \tag{653}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dx_i} E_{\text{Coulomb},ij} = -\frac{Q \frac{d^2}{dz_j dx_i} r_{ij}}{r_{ij}^2} + \frac{2Q \frac{d}{dx_i} r_{ij} \frac{d}{dz_j} r_{ij}}{r_{ij}^3} \tag{654}$$

$$\frac{d^2}{dy_i^2} E_{\text{Coulomb},ij} = -\frac{Q \frac{d^2}{dy_i^2} r_{ij}}{r_{ij}^2} + \frac{2Q \left(\frac{d}{dy_i} r_{ij}\right)^2}{r_{ij}^3} \tag{655}$$

$$\frac{d^2}{dz_i dy_i} E_{\text{Coulomb},ij} = -\frac{Q \frac{d^2}{dz_i dy_i} r_{ij}}{r_{ij}^2} + \frac{2Q \frac{d}{dy_i} r_{ij} \frac{d}{dz_i} r_{ij}}{r_{ij}^3} \tag{656}$$

$$\frac{d^2}{dx_j dy_i} E_{\text{Coulomb},ij} = -\frac{Q \frac{d^2}{dy_i dx_j} r_{ij}}{r_{ij}^2} + \frac{2Q \frac{d}{dx_j} r_{ij} \frac{d}{dy_i} r_{ij}}{r_{ij}^3} \tag{657}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dy_i} E_{\text{Coulomb},ij} = -\frac{Q \frac{d^2}{dy_j dy_i} r_{ij}}{r_{ij}^2} + \frac{2Q \frac{d}{dy_i} r_{ij} \frac{d}{dy_j} r_{ij}}{r_{ij}^3} \tag{658}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dy_i} E_{\text{Coulomb},ij} = -\frac{Q \frac{d^2}{dz_j dy_i} r_{ij}}{r_{ij}^2} + \frac{2Q \frac{d}{dy_i} r_{ij} \frac{d}{dz_j} r_{ij}}{r_{ij}^3} \tag{659}$$

$$\frac{d^2}{dz_i^2} E_{\text{Coulomb},ij} = -\frac{Q \frac{d^2}{dz_i^2} r_{ij}}{r_{ij}^2} + \frac{2Q \left(\frac{d}{dz_i} r_{ij}\right)^2}{r_{ij}^3} \tag{660}$$

$$\frac{d^2}{dx_j dz_i} E_{\text{Coulomb},ij} = -\frac{Q \frac{d^2}{dz_i dx_j} r_{ij}}{r_{ij}^2} + \frac{2Q \frac{d}{dx_j} r_{ij} \frac{d}{dz_i} r_{ij}}{r_{ij}^3} \tag{661}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dz_i} E_{\text{Coulomb},ij} = -\frac{Q \frac{d^2}{dz_i dy_j} r_{ij}}{r_{ij}^2} + \frac{2Q \frac{d}{dy_j} r_{ij} \frac{d}{dz_i} r_{ij}}{r_{ij}^3} \tag{662}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dz_i} E_{\text{Coulomb},ij} = -\frac{Q \frac{d^2}{dz_j dz_i} r_{ij}}{r_{ij}^2} + \frac{2Q \frac{d}{dz_i} r_{ij} \frac{d}{dz_j} r_{ij}}{r_{ij}^3} \tag{663}$$

$$\frac{d^2}{dx_j^2}E_{\text{Coulomb},ij} = -\frac{Q\frac{d^2}{dx_j^2}r_{ij}}{r_{ij}^2} + \frac{2Q\left(\frac{d}{dx_j}r_{ij}\right)^2}{r_{ij}^3} \tag{664}$$

$$\frac{d^2}{dy_j dx_j}E_{\text{Coulomb},ij} = -\frac{Q\frac{d^2}{dy_j dx_j}r_{ij}}{r_{ij}^2} + \frac{2Q\frac{d}{dx_j}r_{ij}\frac{d}{dy_j}r_{ij}}{r_{ij}^3} \tag{665}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dx_j}E_{\text{Coulomb},ij} = -\frac{Q\frac{d^2}{dz_j dx_j}r_{ij}}{r_{ij}^2} + \frac{2Q\frac{d}{dx_j}r_{ij}\frac{d}{dz_j}r_{ij}}{r_{ij}^3} \tag{666}$$

$$\frac{d^2}{dy_j^2}E_{\text{Coulomb},ij} = -\frac{Q\frac{d^2}{dy_j^2}r_{ij}}{r_{ij}^2} + \frac{2Q\left(\frac{d}{dy_j}r_{ij}\right)^2}{r_{ij}^3} \tag{667}$$

$$\frac{d^2}{dz_j dy_j}E_{\text{Coulomb},ij} = -\frac{Q\frac{d^2}{dz_j dy_j}r_{ij}}{r_{ij}^2} + \frac{2Q\frac{d}{dy_j}r_{ij}\frac{d}{dz_j}r_{ij}}{r_{ij}^3} \tag{668}$$

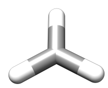
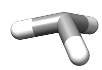
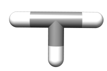
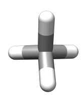
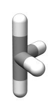
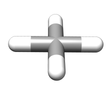
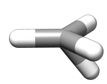
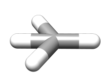
$$\frac{d^2}{dz_j^2}E_{\text{Coulomb},ij} = -\frac{Q\frac{d^2}{dz_j^2}r_{ij}}{r_{ij}^2} + \frac{2Q\left(\frac{d}{dz_j}r_{ij}\right)^2}{r_{ij}^3} \tag{669}$$

The first and second order derivatives of r_{ij} can be found in the section S1.1.2.

S2 Reference Geometries

In the Tables S2 and S2 , we enumerate the reference geometries, most of them from VSEPR theory [2], employed in the structural unification workflow for extracting angle constraints. Our future intention is to broaden this listing by incorporating additional reference geometries that exhibit greater deviations from the ideal geometry and are more general. The symbol n_{adj} denotes the count of adjacent atoms surrounding the central atom. The central atom is represented by the grey dummy atom, serving as a placeholder. The adjacent dummy atoms are depicted as white atoms. All bond lengths are standardized to 1.0 Å.

Table S1: Reference geometries used for extracting angle constraints with $n_{\text{adj}} \leq 4$.

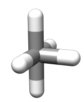
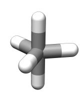
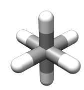
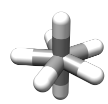
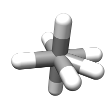
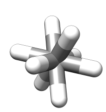
n_{adj}	class	reference geometry	angles	comment
1	linear CN=1		-	
2	linear CN=2		π	
	bent		$\frac{2}{3}\pi$	
2	trigonal planar		$\frac{2}{3}\pi$	
	trigonal pyramidal		0.606π	
	t-shaped		$\frac{1}{2}\pi$, π	
4	tetrahedral		0.606π	
	seesaw		$\pi, \frac{2}{3}\pi$, $\frac{1}{2}\pi$	
	square planar		$\frac{1}{2}\pi$, π	
	ferrocene		0.6π, 0.394π, 0.7π	used for carbon atom in ferrocene for example
	formate		$\frac{1}{3}\pi$, $\frac{2}{3}\pi$, π	used for the central coordinating atom in a formate ligand

References

[1] Jorge Nocedal and Stephen J Wright. Conjugate gradient methods. *Numerical Optimization*, pages 101–134, 2006.

[2] Ronald J Gillespie. The VSEPR model revisited. *Chemical Society Reviews*, 21(1):59–69, 1992.

Table S2: Reference geometries used for extracting angle constraints with $n_{\text{adj}} > 4$.

n_{adj}	class	reference geometry	angles	comment
5	square pyramidal		$\frac{1}{2}\pi$, π	
	trigonal bipyramidal		$\frac{1}{2}\pi$, $\frac{2}{3}\pi$, π	
6	octahedral		$\frac{1}{2}\pi$, π	
7	pentagonal bipyramidal		0.4π, 0.8π, π	
	pentagonal bipyramidal formate		$\frac{1}{4}\pi$,$\frac{1}{2}\pi$, $\frac{3}{4}\pi$,π	used for the metal center with a formate ligand
8	square antiprismatic		0.394π, 0.605π, π	
>8	unkown			geometry is constrained by Coulomb repulsion only.