

SI

Reliability of computing van der Waals bond lengths of some rare gas diatomics

Yi-Liang Zhang* and Bin Li

(College of Chemistry, Jilin University, Qianjin Street 2699, Changchun 130012, China)

(Corresponding author: yiliang@jlu.edu.cn)*

Contents

Table S1. The numbers of 80 different basis sets.....	S2
Table S2. MADs (Å) of 11-RG-Mols calculated by 572 methods and 20 basis sets.....	S3
Table S3. MDs (Å) of 11-RG-Mols calculated by 572 methods and 20 basis sets.....	S15
Table S4. Imaginary frequencies (cm ⁻¹) of 36 methods and 20 basis sets.....	S26
Table S5. MADs (Å) of 11-RG-Mols calculated by 54 methods and 60 basis sets.....	S31
Table S6. MDs (Å) of 11-RG-Mols calculated by 54 methods and 60 basis sets.....	S35
Reference.....	S38

Table S1. The numbers of 80 different basis sets.

BS01	BS02	BS03	BS04	BS05
Def2TZVP	Def2TZVPP	Def2QZVP	Def2QZVPP	6-311G**
BS06	BS07	BS08	BS09	BS10
6-311++G(d,p)	6-311++G(2d,2p)	6-311++G(3d,3p)	6-311++G(df,pd)	6-311++G(2df,2pd)
BS11	BS12	BS13	BS14	BS15
6-311++G(3df,3pd)	6-311++G(3d2f,3p2d)	cc-pVDZ	aug-cc-pVDZ	cc-pVTZ
BS16	BS17	BS18	BS19	BS20
aug-cc-pVTZ	cc-pVQZ	aug-cc-pVQZ	cc-pV5Z	aug-cc-pV5Z
BS21	BS22	BS23	BS24	BS25
SV	SVP	TZV	TZVP	Def2SV
BS26	BS27	BS28	BS29	BS30
Def2SVP	Def2SVPP	Def2TZV	Def2QZV	DGDZVP
BS31	BS32	BS33	BS34	BS35
CEP-31G	CEP-31++G	CEP-121G	CEP-121++G	SDD
BS36	BS37	BS38	BS39	BS40
SDDAll	LanL2DZ	LanL2MB	STO-3G	STO-6G
BS41	BS42	BS43	BS44	BS45
CBSB7	CBSB7++	3-21G*	6-31G	6-311G
BS46	BS47	BS48	BS49	BS50
6-31+G	6-311+G	6-31++G	6-311++G	6-31G(d)
BS51	BS52	BS53	BS54	BS55
6-31G(d,p)	6-31+G(d)	6-31++G(d)	6-31+G(d,p)	6-31++G(d,p)
BS56	BS57	BS58	BS59	BS60
6-311+G(d)	6-311++G(d)	6-311+G(d,p)	6-31G(df)	6-31+G(df)
BS61	BS62	BS63	BS64	BS65
6-31++G(df)	6-31+G(df,pd)	6-311+G(df,pd)	6-311++G(df)	6-31++G(2d,2p)
BS66	BS67	BS68	BS69	BS70
6-31++G(3d,3p)	6-31++G(df,pd)	6-31++G(2df,2pd)	6-31++G(3df,3pd)	6-31++G(3d2f,3p2d)
BS71	BS72	BS73	BS74	BS75
6-31G(d',p')	6-31++G(d',p')	6-31++G(2d',2p')	6-31++G(3d',3p')	6-31++G(d'f,p'd)
BS76	BS77	BS78	BS79	BS80
6-31++G(2d'f,2p'd)	6-31++G(3d'f,3p'd)	6-31++G(3d'2f,3p'2d)	UGBS	UGBS1V++

Table S2. MADs (Å) of 11-RG-Mols calculated by 572 methods and 20 basis sets.^{a,b,c,d,e,f}

	BS01	BS02	BS03	BS04	BS05	BS06	BS07	BS08	BS09	BS10	BS11	BS12	BS13	BS14	BS15	BS16	BS17	BS18	BS19	BS20	Ave
HF	0.791	0.758	1.309	1.309	0.626	0.914	0.804	0.726	0.913	0.804	0.726	0.855	0.396	0.918	0.665	1.105	1.013	1.259	1.308	1.308	0.925
APFD	0.094	0.100	0.012	0.012	0.178	0.005	0.045	0.054	0.006	0.047	0.056	0.012	0.271	0.025	0.127	0.023	0.053	0.012	0.012	0.013	0.058
wB97	0.155	0.162	0.432	0.434	0.224	0.240	0.185	0.178	0.240	0.218	0.206	0.254	0.372	0.311	0.232	0.254	0.312	0.458	0.392	0.474	0.287
wB97X	0.102	0.109	0.065	0.065	0.182	0.082	0.087	0.076	0.083	0.088	0.077	0.079	0.286	0.143	0.145	0.070	0.050	0.051	0.067	0.078	0.099
wB97XD	0.294	0.292	0.381	0.381	0.210	0.355	0.335	0.319	0.355	0.334	0.319	0.357	0.143	0.343	0.251	0.370	0.333	0.393	0.378	0.393	0.327
B98	0.139	0.144	0.145	0.145	0.227	0.136	0.127	0.119	0.135	0.127	0.120	0.138	0.262	0.135	0.176	0.141	0.136	0.147	0.144	0.143	0.149
B971	0.159	0.161	0.121	0.121	0.245	0.126	0.137	0.148	0.127	0.137	0.149	0.133	0.283	0.112	0.199	0.120	0.152	0.124	0.123	0.122	0.150
B972	0.367	0.359	0.495	0.495	0.308	0.471	0.431	0.397	0.471	0.429	0.396	0.484	0.235	0.456	0.310	0.507	0.401	0.514	0.494	0.506	0.426
BHandH	0.527	0.528	0.519	0.519	0.555	0.521	0.534	0.532	0.523	0.536	0.534	0.507	0.610	0.540	0.534	0.525	0.523	0.522	0.521	0.522	0.532
BHandHLYP	0.205	0.205	0.605	0.604	0.364	0.662	0.279	0.259	0.584	0.266	0.259	0.450	0.344	0.278	0.452	0.604	0.590	0.665	0.651	0.654	0.449
HFS	0.359	0.362	0.311	0.311	0.401	0.295	0.324	0.326	0.297	0.327	0.329	0.274	0.498	0.322	0.379	0.320	0.334	0.313	0.316	0.309	0.335
HFB	1.977	1.983	2.233	2.234	1.485	2.159	2.160	2.112	2.231	2.185	2.109	2.163	1.504	2.282	1.831	2.262	2.061	2.374	2.287	2.521	2.108
XAlpha	0.412	0.414	0.378	0.378	0.446	0.363	0.390	0.391	0.366	0.393	0.394	0.340	0.533	0.391	0.427	0.387	0.393	0.380	0.381	0.378	0.397
LSDA	0.504	0.506	0.488	0.488	0.526	0.473	0.497	0.497	0.477	0.500	0.501	0.449	0.595	0.502	0.514	0.496	0.496	0.491	0.491	0.491	0.499
LC-LSDA	0.166	0.174	0.396	0.396	0.259	0.354	0.294	0.266	0.355	0.294	0.265	0.355	0.274	0.355	0.237	0.325	0.267	0.408	0.394	0.419	0.312
HCTH	0.210	0.211	0.186	0.186	0.271	0.184	0.187	0.190	0.184	0.187	0.190	0.186	0.310	0.192	0.238	0.180	0.204	0.183	0.187	0.186	0.203
HCTH93	0.853	0.850	1.098	1.099	0.612	1.097	1.080	1.022	1.093	1.083	1.024	1.065	0.490	0.951	0.735	1.179	0.882	1.195	1.184	1.256	0.992
HCTH147	0.189	0.193	0.214	0.214	0.234	0.206	0.199	0.185	0.205	0.198	0.185	0.212	0.263	0.223	0.172	0.229	0.181	0.221	0.215	0.214	0.208
tHCTH	0.189	0.191	0.202	0.202	0.222	0.180	0.174	0.160	0.179	0.174	0.159	0.183	0.265	0.183	0.174	0.208	0.180	0.213	0.199	0.198	0.192
tHCTHhyb	0.212	0.213	0.307	0.307	0.225	0.284	0.253	0.239	0.283	0.251	0.238	0.300	0.223	0.291	0.183	0.315	0.228	0.309	0.296	0.300	0.263
VSXC	0.198	0.198	0.160	0.160	0.265	0.163	0.199	0.200	0.163	0.200	0.200	0.161	0.333	0.209	0.228	0.185	0.159	0.179	0.162	0.185	0.195
BMK	1.669	1.667	1.810	1.881	1.411	1.494	1.497	1.419	1.515	1.458	1.447	1.536	1.097	1.682	1.676	1.605	1.746	1.719	1.866	1.969	1.608
TPSSh	0.232	0.233	0.280	0.280	0.277	0.264	0.248	0.235	0.262	0.247	0.235	0.271	0.267	0.274	0.233	0.299	0.248	0.312	0.277	0.277	0.263
APF	0.507	0.470	0.835	0.835	0.481	0.797	0.699	0.606	0.799	0.725	0.602	0.800	0.389	0.738	0.442	0.907	0.702	0.908	0.846	0.898	0.699
OAPF	0.169	0.175	0.243	0.245	0.277	0.236	0.201	0.185	0.235	0.199	0.183	0.247	0.283	0.242	0.213	0.254	0.205	0.247	0.241	0.244	0.226
GVB(0)	0.768	0.768	1.287	1.287	0.632	0.923	0.792	0.718	0.923	0.792	0.717	0.865	0.386	0.897	0.664	1.090	1.016	1.247	1.285	1.276	0.917
B97D	0.064	0.066	0.147	0.147	0.139	0.163	0.139	0.132	0.162	0.138	0.131	0.173	0.168	0.158	0.088	0.174	0.078	0.159	0.142	0.137	0.135
B97D3	0.114	0.116	0.199	0.200	0.121	0.209	0.172	0.162	0.208	0.172	0.161	0.226	0.148	0.210	0.082	0.224	0.138	0.213	0.196	0.198	0.173
B3LYP	0.982	1.057	1.864	1.910	1.099	1.416	1.190	1.069	1.380	1.195	1.074	1.349	0.636	1.142	1.099	1.772	1.174	1.910	1.828	1.990	1.357
B3P86	1.725	1.698	2.019	2.020	1.307	1.734	1.661	1.580	1.697	1.656	1.581	1.737	1.363	1.767	1.721	1.861	1.807	2.106	2.034	2.151	1.761
B3PW91	1.676	1.654	2.031	2.010	1.227	1.650	1.611	1.530	1.627	1.611	1.536	1.651	1.359	1.588	1.587	1.826	1.749	2.059	1.966	2.077	1.701
X3LYP	0.203	0.207	0.218	0.218	0.338	0.224	0.203	0.215	0.231	0.202	0.215	0.257	0.349	0.209	0.279	0.225	0.217	0.213	0.219	0.219	0.233
O3LYP	0.290	0.290	0.400	0.400	0.332	0.385	0.369	0.352	0.385	0.371	0.351	0.387	0.315	0.350	0.289	0.455	0.332	0.421	0.409	0.411	0.365
B1LYP	1.149	1.000	1.803	1.828	1.087	1.444	1.186	1.145	1.472	1.211	1.159	1.439	0.779	1.255	1.170	1.724	1.287	2.103	1.741	2.047	1.402
B1B95	0.212	0.212	0.278	0.278	0.213	0.410	0.367	0.302	0.410	0.367	0.302	0.431	0.184	0.230	0.180	0.444	0.252	0.280	0.245	0.315	0.296
OmPW1LYP	0.258	0.259	0.235	0.235	0.341	0.248	0.251	0.252	0.248	0.252	0.253	0.253	0.377	0.246	0.298	0.235	0.257	0.234	0.237	0.234	0.260
LG1LYP	0.321	0.322	0.293	0.293	0.370	0.293	0.303	0.304	0.294	0.305	0.306	0.292	0.444	0.296	0.340	0.293	0.306	0.297	0.295	0.295	0.313
mPW1LYP	0.253	0.254	0.227	0.226	0.339	0.242	0.245	0.246	0.242	0.245	0.247	0.247	0.374	0.237	0.294	0.228	0.250	0.226	0.229	0.226	0.254
mPW1PW91	0.376	0.369	0.511	0.511	0.341	0.505	0.461	0.405	0.504	0.459	0.404	0.501	0.282	0.440	0.324	0.540	0.420	0.532	0.512	0.523	0.446
mPW1PBE	0.385	0.377	0.519	0.519	0.342	0.512	0.468	0.425	0.509	0.467	0.427	0.511	0.283	0.450	0.329	0.550	0.431	0.542	0.517	0.533	0.455
mPW3PBE	0.310	0.310	0.461	0.461	0.325	0.439	0.391	0.363	0.439	0.390	0.362	0.444	0.270	0.398	0.286	0.475	0.353	0.486	0.458	0.477	0.395
PBE1PBE	0.148	0.152	0.155	0.155	0.236	0.148	0.130	0.122	0.142	0.129	0.121	0.160	0.271	0.145	0.178	0.147	0.144	0.154	0.153	0.153	0.157
PBEh1PBE	0.146	0.151	0.151	0.151	0.236	0.140	0.129	0.123	0.139	0.128	0.121	0.149	0.272	0.146	0.184	0.146	0.142	0.152	0.150	0.150	0.155
HSEh1PBE	0.145	0.147	0.144	0.144	0.237	0.136	0.128	0.123	0.136	0.128	0.123	0.146	0.273	0.137	0.185	0.141	0.139	0.145	0.141	0.143	0.152
OHSE1PBE	0.144	0.148	0.142	0.142	0.237	0.136	0.128	0.122	0.136	0.128	0.122	0.144	0.273	0.138	0.185	0.141	0.139	0.145	0.138	0.141	0.151
OHSE2PBE	0.139	0.142	0.139	0.139	0.238	0.135	0.131	0.128	0.134	0.130	0.128	0.144	0.278	0.126	0.187	0.135	0.137	0.140	0.139	0.139	0.150
HISSbPBE	0.124	0.126	0.138	0.138	0.213	0.128	0.123	0.107	0.128	0.121	0.106	0.136	0.255	0.121	0.161	0.125	0.123	0.135	0.137	0.135	0.139
M06	0.065	0.065	0.141	0.141	0.064	0.072	0.072	0.070	0.072	0.072	0.070	0.074	0.074	0.054	0.051	0.068	0.165	0.170	0.140	0.152	0.093
M06L	0.121	0.120	0.140	0.140	0.145	0.127	0.100	0.074	0.127	0.099	0.073	0.127	0.113	0.082	0.111	0.066	0.134	0.099	0.110	0.076	0.109
M06HF	0.137	0.138	0.142	0.142	0.167	0.144	0.144	0.147	0.144	0.144	0.147	0.144	0.055	0.112	0.146	0.143	0.143	0.145	0.141	0.112	0.137
M062X	0.127	0.128	0.146	0.146	0.245	0.144	0.134	0.139	0.144	0.134	0.139	0.146	0.256	0.042	0.170	0.126	0.155	0.145	0.145	0.171	0.149
M05	0.220	0.222	0.197	0.197	0.307	0.224	0.224	0.222	0.225	0.224	0.223	0.224	0.387	0.247	0.257	0.195	0.208	0.193	0.197	0.190	0.229
M0																					

PW6B95	0.108	0.108	0.106	0.106	0.195	0.100	0.099	0.086	0.100	0.099	0.086	0.120	0.177	0.112	0.108	0.101	0.093	0.106	0.107	0.107	0.111
PW6B95D3	0.081	0.081	0.089	0.089	0.180	0.082	0.082	0.069	0.082	0.082	0.069	0.081	0.182	0.097	0.092	0.084	0.075	0.088	0.089	0.090	0.093
M08HX	0.116	0.136	0.129	0.129	0.229	0.144	0.150	0.150	0.145	0.151	0.151	0.137	0.332	0.224	0.172	0.152	0.092	0.122	0.133	0.164	0.158
M11	0.116	0.115	0.159	0.159	0.210	0.135	0.132	0.127	0.134	0.131	0.127	0.136	0.238	0.098	0.149	0.102	0.147	0.151	0.158	0.163	0.144
M11L	0.766	0.798	1.000	1.000	0.661	0.837	0.820	0.636	0.836	0.821	0.636	0.836	0.511	0.685	0.650	0.866	0.902	1.053	0.984	1.082	0.819
SOGGA11	0.385	0.385	0.341	0.341	0.376	0.335	0.338	0.343	0.336	0.339	0.343	0.333	0.733	0.339	0.357	0.343	0.356	0.374	0.328	0.348	0.369
SOGGA11X	0.879	0.868	1.053	1.052	0.738	0.938	0.911	0.909	0.929	0.911	0.909	0.953	0.357	0.763	0.786	1.024	0.927	1.018	1.029	1.051	0.900
N12	0.945	0.910	1.556	1.563	0.793	1.297	1.285	1.233	1.344	1.320	1.206	1.357	0.632	1.288	0.811	1.474	1.072	1.596	1.487	1.614	1.239
N12SX	0.629	0.632	1.548	1.563	0.932	1.282	0.962	0.949	1.287	0.971	0.994	1.288	0.350	0.829	0.817	1.230	0.998	1.621	1.574	1.733	1.109
MN12SX	0.288	0.288	0.798	0.798	0.278	0.456	0.420	0.374	0.457	0.419	0.354	0.460	0.159	0.367	0.218	0.337	0.617	0.915	0.764	0.893	0.483
MN12L	0.792	0.731	1.051	1.051	0.617	0.844	0.815	0.769	0.845	0.815	0.769	0.813	0.156	0.501	0.609	0.816	0.874	1.157	0.955	1.259	0.812
MN15	0.094	0.093	0.081	0.081	0.130	0.075	0.078	0.066	0.075	0.078	0.066	0.080	0.197	0.097	0.129	0.066	0.080	0.072	0.082	0.088	0.090
MN15L	0.072	0.063	0.086	0.086	0.111	0.076	0.076	0.070	0.076	0.076	0.062	0.087	0.122	0.107	0.110	0.061	0.079	0.081	0.086	0.089	0.084
LC-HFS	0.468	0.457	1.062	1.062	0.453	1.002	0.941	0.861	1.001	0.940	0.852	1.008	0.285	0.910	0.454	1.058	0.722	1.184	1.080	1.200	0.850
LC-HFB	0.470	0.458	1.073	1.073	0.453	1.017	0.946	0.850	1.016	0.940	0.860	0.987	0.286	0.952	0.456	1.125	0.725	1.161	1.070	1.281	0.860
LC-XAlpha	0.472	0.460	1.047	1.047	0.442	0.981	0.923	0.814	1.004	0.929	0.813	0.945	0.284	0.916	0.457	1.094	0.714	1.093	1.048	1.200	0.834
LC-M06L	0.722	0.723	0.712	0.712	0.734	0.712	0.722	0.723	0.713	0.723	0.724	0.703	0.688	0.712	0.721	0.718	0.718	0.719	0.716	0.718	0.717
LC-M11L	0.766	0.798	1.000	1.001	0.661	0.837	0.820	0.636	0.836	0.821	0.636	0.836	0.511	0.685	0.650	0.866	0.902	1.053	0.984	1.084	0.819
LC-N12	1.735	1.735	2.143	2.145	1.811	1.828	1.812	1.787	1.829	1.806	1.785	1.829	1.343	1.779	1.827	1.792	2.001	2.170	2.071	2.139	1.868
LC-B97D	0.658	0.658	0.651	0.651	0.672	0.648	0.652	0.651	0.648	0.653	0.652	0.641	0.705	0.648	0.659	0.651	0.653	0.651	0.651	0.651	0.655
LC-B97D3	0.705	0.706	0.698	0.698	0.717	0.693	0.698	0.698	0.694	0.699	0.699	0.685	0.750	0.695	0.705	0.698	0.700	0.699	0.699	0.698	0.702
LC-wPBE	0.248	0.244	0.631	0.629	0.309	0.581	0.524	0.510	0.581	0.519	0.510	0.572	0.215	0.531	0.266	0.537	0.406	0.679	0.639	0.723	0.493
LC-wHPBE	0.244	0.243	0.671	0.669	0.309	0.576	0.521	0.461	0.576	0.521	0.463	0.553	0.216	0.559	0.263	0.555	0.405	0.675	0.631	0.718	0.492
CAM-B3LYP	0.214	0.216	0.170	0.170	0.316	0.201	0.192	0.196	0.201	0.192	0.196	0.205	0.363	0.169	0.264	0.170	0.209	0.171	0.178	0.170	0.208
LC-HCTH	0.558	0.558	0.541	0.541	0.579	0.538	0.541	0.540	0.538	0.542	0.541	0.532	0.623	0.534	0.559	0.537	0.546	0.540	0.540	0.539	0.548
LC-tHCTH	0.736	0.737	0.730	0.730	0.745	0.723	0.728	0.728	0.724	0.729	0.729	0.716	0.777	0.726	0.735	0.729	0.731	0.730	0.730	0.729	0.732
LC-XaVP86	0.180	0.182	0.478	0.479	0.244	0.207	0.164	0.213	0.206	0.165	0.218	0.199	0.372	0.328	0.303	0.220	0.387	0.398	0.476	0.530	0.297
LC-XaVWN	0.163	0.173	0.380	0.381	0.256	0.338	0.278	0.251	0.337	0.277	0.251	0.340	0.274	0.346	0.234	0.311	0.262	0.389	0.380	0.404	0.301
LC-XaVWN5	0.206	0.208	0.496	0.496	0.290	0.468	0.384	0.340	0.466	0.384	0.336	0.467	0.272	0.447	0.265	0.443	0.334	0.519	0.501	0.536	0.393
BB95	0.551	0.724	0.636	0.636	0.499	0.693	1.040	0.634	0.705	0.598	0.650	0.593	0.335	0.464	0.658	1.383	0.839	0.874	0.657	0.646	0.691
BBRC	1.819	1.815	2.206	2.206	1.368	1.949	1.951	1.964	1.950	1.952	1.954	1.976	1.460	2.034	1.833	2.234	1.885	2.232	2.216	2.336	1.967
BRKCIS	1.829	1.827	2.208	2.208	1.399	1.905	1.903	1.897	1.908	1.901	1.896	1.944	1.397	1.964	1.814	2.204	1.917	2.232	2.205	2.288	1.942
BLYP	1.667	1.673	2.216	2.221	1.231	1.885	1.859	1.779	1.835	1.863	1.816	1.895	1.120	1.701	1.136	2.140	1.380	2.222	2.216	2.320	1.809
BP86	1.891	1.891	2.219	2.219	1.692	1.977	2.007	2.001	1.999	2.007	2.005	1.978	1.425	2.099	1.891	2.164	1.936	2.248	2.227	2.390	2.013
BPBE	1.801	1.822	2.169	2.164	1.398	1.906	1.873	1.822	1.875	1.872	1.867	1.938	1.519	1.962	1.845	2.143	1.869	2.232	2.165	2.341	1.929
BPKZB	1.810	1.809	2.136	2.135	1.408	1.929	1.794	1.784	1.916	1.867	1.750	1.916	1.463	1.979	1.798	2.111	1.877	2.230	2.123	2.333	1.908
BPL	1.818	1.811	2.125	2.121	1.365	1.902	1.896	1.826	1.905	1.860	1.786	1.934	1.423	1.802	1.757	2.105	1.866	2.227	2.114	2.205	1.892
BPW91	1.822	1.821	2.149	2.139	1.467	1.946	1.867	1.774	1.943	1.871	1.759	1.946	1.461	1.985	1.794	2.112	1.920	2.223	2.109	2.301	1.921
BRxRevTPSS	1.815	1.794	2.190	2.201	1.442	1.918	1.883	1.801	1.924	1.915	1.768	1.918	1.490	2.002	1.770	2.133	1.888	2.239	2.238	2.256	1.929
BTPSS	1.814	1.831	2.170	2.166	1.455	1.915	1.942	1.754	1.916	1.914	1.863	1.915	1.428	1.937	1.803	2.165	1.875	2.224	2.141	2.333	1.928
BVP86	1.882	1.883	2.217	2.220	1.684	1.997	2.007	1.995	1.975	2.011	1.971	1.997	1.431	2.110	1.910	2.165	1.982	2.287	2.222	2.389	2.017
BVWN	1.856	1.859	2.106	2.117	1.269	1.758	1.710	1.658	1.757	1.710	1.663	1.765	1.481	1.704	1.764	1.971	1.831	2.179	1.986	2.304	1.822
BVWN5	1.814	1.813	2.116	2.115	1.362	1.896	1.861	1.814	1.937	1.897	1.786	1.939	1.468	1.794	1.770	2.112	1.867	2.221	2.111	2.211	1.895
BRxB95	0.146	0.146	0.174	0.174	0.120	0.203	0.146	0.144	0.203	0.146	0.144	0.205	0.110	0.176	0.143	0.178	0.146	0.150	0.174	0.150	0.159
BRxBRC	1.242	1.172	1.721	1.717	0.939	1.376	1.370	1.319	1.373	1.364	1.291	1.415	0.873	1.305	1.034	1.691	1.194	1.737	1.661	1.890	1.384
BRxKCIS	1.233	1.231	1.603	1.603	0.939	1.382	1.346	1.204	1.383	1.328	1.192	1.386	0.850	1.245	0.984	1.664	1.194	1.745	1.588	1.745	1.342
BRxLYP	0.223	0.228	0.170	0.170	0.325	0.190	0.153	0.162	0.182	0.153	0.162	0.220	0.359	0.228	0.268	0.176	0.214	0.173	0.175	0.167	0.205
BRxP86	1.473	1.439	2.093	2.097	1.138	1.630	1.437	1.366	1.631	1.437	1.393	1.704	1.034	1.587	0.998	1.770	1.684	2.079	2.045	2.133	1.608
BRxPBE	1.531	1.522	1.753	1.754	0.946	1.484	1.403	1.387	1.435	1.372	1.436	1.443	0.931	1.416	1.125	1.796	1.433	1.891	1.822	1.964	1.492
BRxPKZB	1.392	1.445	1.792	1.792	0.990	1.466	1.365	1.380	1.438	1.454	1.406	1.487	0.888	1.419	1.152	1.698	1.476	1.930	1.849	1.935	1.488
BRxPL	1.287	1.248	1.615	1.615	0.922	1.353	1.360	1.241	1.352	1.362	1.246	1.372	0.832	1.213	1.121	1.612	1.260	1.707	1.607	1.733	1.353
BRxPW91	1.476	1.442	1.820	1.820	0.987	1.513	1.414	1.364	1.479	1.402	1.374	1.529	0.883	1.443	1.246	1.652	1.412	1.799	1.786	1.988	1.492
BRxRevTPSS	1.386	1.371	1.935	1.899	0.993	1.480	1.476	1.395	1.447	1.496	1.392	1.485	0.866	1.377	1.160	1.658	1.335	1.882	1.741	1.920	1.485
BRxTPSS	1.446	1.445	1.830	1.829	1.035	1.472	1.454	1.409	1.469	1.408	1.409	1.468	0.883	1.406	1.165	1.734	1.468	1.886	1.823	1.940	1.499
BRxVP86	1.470	1.470	2.048	2.095	1.246	1.625	1.414	1.398	1.656	1.450	1.379	1.656	0.997	1.619	0.973	1.737	1.692	2.048	2.100	2.134	1.610
BRxVWN	1.198	1.186	1.549																		

G96B95	2.807	2.845	3.724	3.666	2.943	3.587	3.567	3.850	3.514	3.279	3.543	3.589	2.391	4.074	2.856	3.707	3.135	3.783	3.731	3.889	3.424
G96BRC	2.822	2.825	3.376	3.383	2.587	3.230	3.340	3.334	3.332	3.334	3.329	3.282	2.176	3.658	2.687	3.416	3.035	3.635	3.267	3.588	3.182
G96KCIS	2.831	2.838	3.369	3.369	2.797	3.349	3.244	3.241	3.349	3.244	3.240	3.341	2.165	3.684	2.802	3.382	3.022	3.511	3.353	3.509	3.182
G96LYP	2.812	2.812	3.437	3.443	2.660	3.376	3.376	3.319	3.376	3.369	3.318	3.369	2.158	3.988	2.702	3.428	3.040	3.527	3.426	3.487	3.221
G96P86	2.764	2.766	3.348	3.357	2.681	3.046	3.048	3.045	3.060	3.054	3.022	3.053	2.176	3.606	2.639	3.215	3.017	3.394	3.251	3.397	3.047
G96PBE	2.766	2.769	3.369	3.362	2.579	3.117	3.115	3.118	3.116	3.119	3.120	3.114	2.148	3.456	2.688	3.372	3.020	3.394	3.249	3.450	3.072
G96PKZB	2.770	2.770	3.367	3.363	2.575	3.110	3.112	3.119	3.118	3.112	3.116	3.112	2.147	3.517	2.684	3.372	3.026	3.390	3.289	3.388	3.073
G96PL	2.766	2.765	3.362	3.359	2.628	3.111	3.101	3.083	3.112	3.102	3.086	3.108	2.147	3.568	2.689	3.381	2.998	3.421	3.257	3.386	3.071
G96PW91	2.768	2.766	3.364	3.366	2.537	3.115	3.115	3.112	3.114	3.110	3.113	3.109	2.151	3.464	2.682	3.369	3.045	3.385	3.247	3.401	3.067
G96RevTPSS	2.771	2.770	3.372	3.364	2.624	3.118	3.107	3.123	3.118	3.111	3.123	3.118	2.149	3.529	2.687	3.388	3.019	3.382	3.246	3.401	3.076
G96TPSS	2.767	2.770	3.371	3.368	2.580	3.105	3.113	3.120	3.115	3.111	3.120	3.113	2.151	3.473	2.685	3.369	3.022	3.389	3.249	3.390	3.069
G96VP86	2.777	2.778	3.353	3.355	2.690	3.064	3.056	3.039	3.059	3.052	3.045	3.053	2.178	3.552	2.636	3.218	3.019	3.383	3.243	3.450	3.050
G96VWN	2.794	2.791	3.255	3.259	2.597	3.069	3.077	3.076	3.070	3.072	3.091	3.071	2.149	3.405	2.679	3.222	2.981	3.308	3.248	3.384	3.030
G96VWN5	2.765	2.764	3.360	3.352	2.624	3.113	3.092	3.082	3.083	3.092	3.084	3.111	2.144	3.549	2.689	3.379	2.992	3.409	3.260	3.388	3.067
LGB95	0.107	0.101	0.093	0.093	0.187	0.081	0.065	0.067	0.081	0.065	0.067	0.080	0.266	0.098	0.150	0.055	0.100	0.091	0.093	0.095	0.102
LGBRC	0.146	0.154	0.135	0.134	0.274	0.157	0.145	0.125	0.155	0.133	0.116	0.171	0.305	0.136	0.201	0.137	0.148	0.140	0.133	0.142	0.159
LGKCIS	0.135	0.142	0.070	0.071	0.242	0.088	0.082	0.074	0.088	0.080	0.073	0.105	0.295	0.075	0.180	0.078	0.116	0.072	0.076	0.070	0.111
LGLYP	0.326	0.328	0.293	0.293	0.378	0.284	0.295	0.298	0.285	0.296	0.299	0.284	0.459	0.289	0.348	0.289	0.309	0.295	0.294	0.294	0.312
LGP86	0.220	0.225	0.130	0.130	0.277	0.094	0.171	0.187	0.111	0.174	0.189	0.090	0.330	0.101	0.250	0.160	0.172	0.152	0.144	0.141	0.172
LGPBE	0.090	0.109	0.181	0.181	0.240	0.209	0.140	0.132	0.207	0.138	0.133	0.227	0.253	0.227	0.174	0.172	0.131	0.177	0.176	0.177	0.174
LGPKZB	0.090	0.111	0.189	0.189	0.243	0.217	0.148	0.140	0.216	0.147	0.142	0.234	0.251	0.233	0.180	0.187	0.138	0.200	0.179	0.187	0.181
LGPL	0.166	0.173	0.232	0.232	0.252	0.256	0.218	0.185	0.255	0.217	0.185	0.264	0.278	0.268	0.202	0.266	0.192	0.246	0.228	0.229	0.227
LGPW91	0.098	0.110	0.146	0.146	0.233	0.169	0.128	0.100	0.168	0.127	0.101	0.192	0.259	0.180	0.161	0.134	0.124	0.146	0.139	0.140	0.150
LGRRevTPSS	0.105	0.116	0.120	0.120	0.231	0.145	0.098	0.068	0.141	0.092	0.067	0.161	0.267	0.150	0.165	0.093	0.114	0.114	0.115	0.118	0.130
LGTPSS	0.091	0.111	0.187	0.187	0.241	0.219	0.146	0.138	0.214	0.146	0.143	0.236	0.255	0.232	0.178	0.185	0.136	0.187	0.175	0.184	0.179
LGVP86	0.217	0.223	0.129	0.128	0.276	0.100	0.161	0.176	0.109	0.169	0.186	0.096	0.329	0.099	0.238	0.157	0.170	0.145	0.137	0.138	0.169
LGWVN	0.156	0.169	0.189	0.189	0.259	0.204	0.187	0.160	0.203	0.182	0.164	0.212	0.280	0.218	0.194	0.189	0.158	0.194	0.183	0.184	0.194
LGWVN5	0.167	0.173	0.234	0.234	0.254	0.257	0.218	0.188	0.256	0.218	0.186	0.267	0.284	0.271	0.204	0.263	0.194	0.247	0.247	0.232	0.230
mPWB95	0.128	0.127	0.166	0.166	0.174	0.152	0.151	0.150	0.152	0.150	0.150	0.153	0.172	0.168	0.137	0.160	0.162	0.167	0.166	0.168	0.156
mPWBRC	0.285	0.287	0.458	0.458	0.336	0.452	0.414	0.397	0.451	0.413	0.396	0.452	0.281	0.416	0.269	0.485	0.341	0.498	0.457	0.495	0.402
mPWKCIS	0.258	0.262	0.410	0.410	0.308	0.398	0.370	0.350	0.397	0.370	0.347	0.402	0.270	0.383	0.238	0.436	0.300	0.438	0.404	0.433	0.359
mPWLYP	0.248	0.251	0.208	0.209	0.352	0.219	0.225	0.227	0.219	0.225	0.227	0.225	0.380	0.213	0.297	0.208	0.245	0.205	0.213	0.208	0.240
mPWP86	0.178	0.184	0.424	0.424	0.276	0.392	0.300	0.272	0.392	0.298	0.271	0.421	0.232	0.365	0.224	0.397	0.269	0.441	0.410	0.440	0.331
mPWPBE	0.360	0.354	0.517	0.517	0.353	0.538	0.495	0.470	0.537	0.495	0.467	0.538	0.291	0.476	0.321	0.570	0.401	0.551	0.516	0.540	0.465
mPWPKZB	0.363	0.359	0.520	0.520	0.354	0.537	0.498	0.470	0.536	0.501	0.471	0.537	0.292	0.479	0.324	0.569	0.406	0.554	0.521	0.543	0.468
mPWPL	0.362	0.357	0.484	0.484	0.342	0.502	0.464	0.437	0.502	0.462	0.434	0.504	0.275	0.443	0.319	0.543	0.380	0.518	0.486	0.508	0.440
mPWPW91	0.351	0.349	0.511	0.511	0.352	0.521	0.485	0.455	0.523	0.483	0.454	0.527	0.291	0.470	0.315	0.557	0.392	0.545	0.509	0.532	0.457
mPWRRevTPSS	0.328	0.323	0.491	0.491	0.345	0.497	0.452	0.420	0.496	0.451	0.420	0.501	0.280	0.452	0.299	0.519	0.375	0.519	0.489	0.510	0.433
mPWTTPSS	0.362	0.357	0.522	0.522	0.354	0.539	0.500	0.473	0.538	0.500	0.473	0.540	0.291	0.481	0.323	0.574	0.406	0.554	0.520	0.543	0.469
mPWVP86	0.180	0.185	0.427	0.427	0.277	0.398	0.303	0.275	0.393	0.301	0.274	0.426	0.230	0.369	0.229	0.399	0.272	0.449	0.415	0.448	0.334
mPWVWN	0.335	0.332	0.440	0.440	0.332	0.431	0.406	0.392	0.428	0.407	0.391	0.432	0.264	0.409	0.305	0.476	0.355	0.474	0.439	0.454	0.397
mPWVWN5	0.363	0.358	0.486	0.486	0.342	0.503	0.465	0.439	0.502	0.463	0.437	0.504	0.274	0.444	0.320	0.545	0.381	0.520	0.489	0.509	0.442
OB95	0.310	0.310	0.407	0.407	0.266	0.415	0.415	0.370	0.415	0.415	0.370	0.452	0.225	0.379	0.303	0.432	0.368	0.400	0.394	0.339	0.370
OBRC	0.478	0.474	0.711	0.711	0.389	0.709	0.695	0.672	0.708	0.695	0.673	0.709	0.294	0.633	0.407	0.765	0.566	0.781	0.706	0.752	0.626
OKCIS	0.471	0.466	0.686	0.686	0.378	0.688	0.667	0.647	0.687	0.666	0.647	0.692	0.285	0.609	0.408	0.725	0.547	0.717	0.682	0.724	0.604
OLYP	0.308	0.310	0.456	0.456	0.343	0.445	0.431	0.415	0.445	0.430	0.415	0.446	0.321	0.387	0.305	0.509	0.366	0.492	0.465	0.472	0.411
OP86	0.559	0.553	0.877	0.875	0.444	0.775	0.768	0.713	0.775	0.768	0.712	0.803	0.337	0.760	0.529	0.942	0.650	0.943	0.803	0.904	0.725
OPBE	0.535	0.531	0.761	0.761	0.420	0.729	0.707	0.684	0.728	0.706	0.684	0.727	0.326	0.668	0.481	0.833	0.599	0.822	0.725	0.822	0.662
OPKZB	0.538	0.534	0.764	0.764	0.422	0.730	0.709	0.687	0.730	0.709	0.687	0.732	0.326	0.672	0.484	0.833	0.603	0.820	0.728	0.831	0.665
OPL	0.523	0.515	0.708	0.708	0.410	0.713	0.692	0.672	0.712	0.692	0.672	0.714	0.312	0.635	0.468	0.755	0.584	0.771	0.705	0.731	0.635
OPW91	0.533	0.529	0.725	0.725	0.419	0.726	0.702	0.682	0.726	0.702	0.681	0.726	0.323	0.661	0.479	0.829	0.599	0.820	0.721	0.806	0.656
ORRevTPSS	0.527	0.522	0.718	0.718	0.411	0.720	0.696	0.675	0.719	0.696	0.675	0.718	0.313	0.654	0.471	0.815	0.591	0.804	0.713	0.798	0.648
OTPSS	0.538	0.534	0.765	0.765	0.421	0.732	0.710	0.688	0.732	0.710	0.688	0.734	0.326	0.673	0.483	0.835	0.603	0.825	0.731	0.826	0.666
OVP86	0.560	0.554	0.878	0.877	0.462	0.776	0.768	0.713	0.776	0.768	0.713	0.804	0.337	0.760	0.530	0.926	0.649	0.944	0.804	0.921	0.726
OVVN	0.499	0.493	0.667	0.667	0.397	0.661	0.644	0.622	0.661	0.641	0.622	0.661	0.310	0.599	0.429	0.707	0.556	0.702	0.666	0.693	0.595
OVVN5	0.524	0.516	0.708	0.708	0.410	0															

PBEBRC	0.181	0.185	0.158	0.159	0.288	0.160	0.153	0.159	0.159	0.153	0.159	0.167	0.325	0.147	0.233	0.162	0.177	0.161	0.160	0.160	0.180
PBEKCIS	0.180	0.183	0.128	0.128	0.273	0.129	0.129	0.137	0.127	0.129	0.137	0.138	0.321	0.116	0.224	0.125	0.167	0.127	0.130	0.127	0.158
PBELYP	0.319	0.320	0.287	0.287	0.371	0.281	0.288	0.290	0.282	0.289	0.291	0.282	0.448	0.286	0.339	0.280	0.305	0.288	0.287	0.286	0.305
PBEP86	0.222	0.225	0.174	0.174	0.279	0.166	0.183	0.191	0.167	0.184	0.192	0.170	0.366	0.166	0.250	0.178	0.200	0.180	0.178	0.176	0.201
PBEPBE	0.157	0.161	0.140	0.139	0.262	0.137	0.132	0.124	0.136	0.131	0.124	0.147	0.305	0.126	0.208	0.140	0.153	0.145	0.141	0.141	0.158
PBEPKZB	0.156	0.161	0.144	0.144	0.261	0.140	0.134	0.126	0.140	0.134	0.126	0.148	0.304	0.132	0.208	0.146	0.153	0.149	0.145	0.145	0.160
PBEPL	0.183	0.187	0.190	0.190	0.274	0.182	0.174	0.168	0.181	0.174	0.167	0.189	0.311	0.185	0.220	0.201	0.179	0.199	0.191	0.191	0.197
PBEPW91	0.161	0.166	0.136	0.136	0.263	0.136	0.130	0.131	0.135	0.130	0.131	0.146	0.307	0.125	0.210	0.134	0.157	0.139	0.139	0.137	0.157
PBERevTPSS	0.163	0.167	0.135	0.135	0.261	0.132	0.129	0.132	0.132	0.129	0.132	0.143	0.307	0.122	0.209	0.130	0.158	0.134	0.136	0.135	0.156
PBETPSS	0.156	0.161	0.143	0.143	0.261	0.139	0.133	0.125	0.138	0.134	0.125	0.147	0.305	0.131	0.208	0.145	0.153	0.148	0.144	0.144	0.159
PBEVP86	0.221	0.224	0.172	0.172	0.278	0.165	0.181	0.190	0.166	0.182	0.191	0.169	0.365	0.165	0.249	0.177	0.199	0.178	0.177	0.175	0.200
PBEVWN	0.174	0.178	0.180	0.180	0.275	0.176	0.167	0.160	0.176	0.166	0.160	0.183	0.313	0.174	0.223	0.188	0.172	0.184	0.182	0.181	0.189
PBEVWN5	0.183	0.187	0.190	0.190	0.274	0.182	0.175	0.168	0.182	0.174	0.168	0.189	0.311	0.186	0.220	0.201	0.179	0.200	0.191	0.191	0.197
PBEhB95	0.119	0.120	0.108	0.108	0.213	0.049	0.099	0.082	0.049	0.100	0.082	0.066	0.316	0.037	0.188	0.084	0.114	0.105	0.097	0.110	0.112
PBEhBRC	0.184	0.187	0.159	0.159	0.288	0.162	0.157	0.163	0.161	0.157	0.163	0.170	0.325	0.153	0.235	0.164	0.180	0.162	0.161	0.161	0.183
PBEhKCIS	0.178	0.183	0.131	0.131	0.272	0.131	0.133	0.140	0.130	0.133	0.142	0.140	0.321	0.123	0.224	0.127	0.171	0.129	0.133	0.130	0.160
PBEhLYP	0.314	0.315	0.283	0.284	0.369	0.277	0.284	0.285	0.278	0.285	0.286	0.279	0.444	0.283	0.336	0.274	0.302	0.285	0.284	0.283	0.301
PBEhP86	0.221	0.224	0.174	0.174	0.278	0.167	0.182	0.189	0.168	0.183	0.191	0.172	0.363	0.164	0.247	0.176	0.202	0.181	0.179	0.179	0.201
PBEhPBE	0.159	0.163	0.141	0.141	0.262	0.141	0.132	0.129	0.140	0.132	0.128	0.150	0.305	0.133	0.211	0.142	0.158	0.144	0.142	0.142	0.160
PBEhPKZB	0.159	0.163	0.145	0.145	0.263	0.144	0.134	0.130	0.144	0.135	0.130	0.155	0.304	0.138	0.211	0.148	0.158	0.149	0.147	0.147	0.162
PBEhPL	0.184	0.188	0.190	0.190	0.277	0.186	0.177	0.171	0.185	0.178	0.171	0.192	0.312	0.184	0.222	0.203	0.181	0.198	0.190	0.190	0.198
PBEhPW91	0.163	0.167	0.140	0.140	0.263	0.136	0.133	0.133	0.135	0.134	0.134	0.147	0.307	0.130	0.212	0.136	0.160	0.140	0.141	0.140	0.160
PBEhRevTPSS	0.165	0.169	0.135	0.135	0.261	0.136	0.132	0.135	0.135	0.131	0.135	0.147	0.307	0.127	0.212	0.135	0.161	0.138	0.138	0.138	0.159
PBEhTPSS	0.159	0.163	0.144	0.144	0.262	0.142	0.134	0.129	0.142	0.133	0.129	0.153	0.305	0.136	0.211	0.147	0.158	0.148	0.145	0.145	0.161
PBEhVP86	0.220	0.223	0.174	0.174	0.278	0.167	0.181	0.188	0.167	0.182	0.189	0.171	0.361	0.163	0.245	0.175	0.201	0.180	0.179	0.177	0.200
PBEhVWN	0.177	0.180	0.182	0.182	0.277	0.181	0.169	0.165	0.181	0.169	0.164	0.186	0.314	0.178	0.225	0.190	0.174	0.185	0.183	0.182	0.192
PBEhVWN5	0.184	0.188	0.190	0.190	0.276	0.186	0.178	0.171	0.186	0.178	0.172	0.192	0.312	0.185	0.222	0.203	0.182	0.199	0.190	0.191	0.199
PKZBB95	0.166	0.166	0.196	0.196	0.227	0.164	0.163	0.162	0.164	0.163	0.162	0.134	0.234	0.150	0.190	0.185	0.193	0.195	0.195	0.197	0.180
PKZBBRC	0.206	0.207	0.250	0.250	0.271	0.239	0.232	0.226	0.238	0.231	0.226	0.243	0.306	0.223	0.210	0.255	0.218	0.256	0.254	0.257	0.240
PKZBKIS	0.195	0.198	0.218	0.218	0.262	0.207	0.203	0.194	0.207	0.202	0.195	0.214	0.299	0.200	0.203	0.225	0.197	0.223	0.221	0.222	0.215
PKZBLYP	0.244	0.244	0.212	0.212	0.339	0.229	0.232	0.232	0.229	0.232	0.233	0.230	0.369	0.230	0.288	0.212	0.240	0.210	0.214	0.212	0.242
PKZBP86	0.176	0.178	0.178	0.179	0.267	0.176	0.171	0.164	0.176	0.171	0.164	0.180	0.296	0.169	0.213	0.179	0.167	0.180	0.179	0.183	0.187
PKZBPBE	0.205	0.207	0.255	0.255	0.260	0.241	0.232	0.220	0.240	0.232	0.220	0.246	0.286	0.237	0.202	0.266	0.217	0.261	0.258	0.261	0.240
PKZBPKZB	0.205	0.208	0.260	0.260	0.260	0.244	0.236	0.224	0.244	0.235	0.224	0.249	0.285	0.241	0.202	0.270	0.220	0.265	0.262	0.265	0.243
PKZBPL	0.224	0.226	0.280	0.280	0.263	0.266	0.260	0.250	0.266	0.260	0.249	0.270	0.288	0.269	0.206	0.293	0.244	0.284	0.283	0.283	0.262
PKZBPW91	0.204	0.206	0.248	0.248	0.261	0.235	0.228	0.215	0.235	0.227	0.214	0.240	0.288	0.231	0.201	0.259	0.212	0.254	0.251	0.254	0.236
PKZBRevTPSS	0.200	0.203	0.238	0.239	0.259	0.227	0.219	0.205	0.227	0.218	0.205	0.233	0.288	0.223	0.199	0.247	0.204	0.243	0.241	0.243	0.228
PKZBTPSS	0.205	0.207	0.260	0.260	0.259	0.244	0.235	0.223	0.243	0.235	0.223	0.249	0.285	0.241	0.202	0.270	0.220	0.265	0.262	0.265	0.243
PKZBVP86	0.176	0.178	0.178	0.178	0.267	0.176	0.171	0.164	0.176	0.171	0.164	0.180	0.296	0.169	0.213	0.179	0.168	0.181	0.179	0.183	0.187
PKZBVWN	0.217	0.219	0.252	0.252	0.261	0.242	0.237	0.225	0.241	0.236	0.224	0.246	0.291	0.244	0.203	0.265	0.223	0.255	0.256	0.255	0.242
PKZBVWN5	0.224	0.226	0.281	0.281	0.263	0.266	0.261	0.250	0.266	0.260	0.250	0.271	0.288	0.270	0.206	0.293	0.244	0.284	0.284	0.284	0.263
PW91B95	0.165	0.166	0.117	0.117	0.241	0.120	0.126	0.121	0.120	0.126	0.122	0.120	0.374	0.123	0.195	0.107	0.158	0.109	0.117	0.089	0.147
PW91BRC	0.203	0.205	0.168	0.168	0.306	0.181	0.186	0.191	0.181	0.187	0.192	0.185	0.341	0.173	0.254	0.171	0.202	0.172	0.169	0.167	0.200
PW91KCIS	0.204	0.206	0.159	0.159	0.295	0.164	0.170	0.175	0.164	0.171	0.176	0.169	0.336	0.161	0.247	0.153	0.197	0.154	0.162	0.154	0.189
PW91LYP	0.325	0.325	0.290	0.290	0.379	0.289	0.295	0.297	0.290	0.296	0.298	0.291	0.463	0.292	0.345	0.285	0.309	0.290	0.291	0.288	0.312
PW91P86	0.238	0.240	0.196	0.196	0.299	0.196	0.206	0.211	0.197	0.207	0.212	0.201	0.391	0.199	0.268	0.197	0.219	0.195	0.198	0.194	0.223
PW91PBE	0.189	0.191	0.156	0.156	0.286	0.157	0.163	0.169	0.156	0.163	0.169	0.162	0.327	0.152	0.236	0.154	0.186	0.161	0.157	0.158	0.182
PW91PKZB	0.187	0.190	0.161	0.160	0.286	0.157	0.163	0.168	0.157	0.163	0.169	0.164	0.326	0.153	0.236	0.158	0.186	0.164	0.161	0.162	0.184
PW91PL	0.192	0.194	0.193	0.193	0.295	0.185	0.180	0.177	0.185	0.180	0.177	0.191	0.330	0.183	0.243	0.200	0.192	0.199	0.194	0.194	0.204
PW91PW91	0.191	0.193	0.153	0.153	0.287	0.160	0.167	0.173	0.161	0.167	0.173	0.164	0.328	0.155	0.237	0.150	0.189	0.159	0.155	0.153	0.183
PW91RevTPSS	0.191	0.193	0.154	0.154	0.285	0.160	0.167	0.173	0.161	0.167	0.173	0.166	0.326	0.155	0.236	0.149	0.188	0.152	0.155	0.152	0.183
PW91TPSS	0.187	0.189	0.159	0.159	0.285	0.156	0.161	0.168	0.156	0.162	0.168	0.163	0.327	0.151	0.235	0.157	0.185	0.163	0.160	0.161	0.183
PW91VP86	0.237	0.239	0.195	0.195	0.298	0.196	0.205	0.211	0.197	0.206	0.212	0.201	0.390	0.199	0.268	0.196	0.218	0.194	0.197	0.193	0.222
PW91VWN	0.196	0.198	0.185	0.185	0.293	0.180	0.178	0.184	0.180	0.179	0.184	0.184	0.330	0.177	0.245	0.192	0.196	0.190	0.186	0.185	0.201
PW91VWN5																					

RevTPSSKCIS	0.195	0.196	0.258	0.258	0.277	0.243	0.223	0.206	0.241	0.223	0.205	0.251	0.251	0.245	0.207	0.276	0.217	0.266	0.256	0.257	0.238
RevTPSSLYP	0.275	0.276	0.249	0.249	0.355	0.253	0.258	0.261	0.254	0.259	0.262	0.257	0.392	0.256	0.314	0.246	0.272	0.249	0.252	0.249	0.272
RevTPSSP86	0.108	0.113	0.145	0.144	0.215	0.135	0.119	0.099	0.136	0.118	0.098	0.149	0.242	0.140	0.151	0.126	0.115	0.141	0.138	0.143	0.139
RevTPSSPBE	0.251	0.261	0.364	0.364	0.304	0.332	0.294	0.282	0.330	0.293	0.282	0.353	0.281	0.350	0.244	0.379	0.269	0.398	0.352	0.364	0.317
RevTPSSPKZB	0.254	0.265	0.365	0.365	0.304	0.338	0.295	0.285	0.337	0.296	0.285	0.373	0.285	0.354	0.246	0.399	0.271	0.401	0.354	0.369	0.322
RevTPSSPL	0.292	0.293	0.375	0.375	0.308	0.362	0.330	0.315	0.361	0.329	0.313	0.366	0.264	0.351	0.273	0.412	0.304	0.397	0.368	0.375	0.338
RevTPSSPW91	0.245	0.255	0.350	0.350	0.303	0.322	0.287	0.276	0.321	0.287	0.276	0.326	0.273	0.345	0.239	0.366	0.263	0.384	0.346	0.349	0.308
RevTPSSRevTPS	0.239	0.241	0.337	0.337	0.293	0.305	0.277	0.265	0.306	0.276	0.264	0.311	0.265	0.330	0.223	0.348	0.251	0.369	0.331	0.340	0.295
RevTPSSTPSS	0.252	0.263	0.366	0.366	0.303	0.339	0.296	0.285	0.338	0.297	0.285	0.374	0.282	0.354	0.245	0.400	0.271	0.401	0.354	0.369	0.322
RevTPSSVP86	0.109	0.114	0.147	0.148	0.214	0.138	0.121	0.101	0.137	0.119	0.100	0.152	0.241	0.144	0.151	0.128	0.116	0.144	0.142	0.145	0.141
RevTPSSVWN	0.263	0.264	0.317	0.317	0.293	0.315	0.284	0.275	0.313	0.282	0.275	0.319	0.268	0.313	0.253	0.370	0.274	0.349	0.315	0.315	0.299
RevTPSSVWN5	0.294	0.295	0.377	0.377	0.308	0.363	0.332	0.316	0.362	0.331	0.315	0.367	0.264	0.353	0.274	0.414	0.306	0.403	0.370	0.380	0.340
SB95	0.642	0.643	0.637	0.637	0.632	0.597	0.615	0.629	0.600	0.619	0.633	0.583	0.707	0.632	0.639	0.645	0.647	0.647	0.643	0.645	0.634
SBRC	0.564	0.565	0.554	0.554	0.595	0.543	0.567	0.570	0.546	0.571	0.573	0.517	0.656	0.575	0.576	0.560	0.562	0.557	0.559	0.560	0.566
SKCIS	0.601	0.604	0.594	0.594	0.621	0.577	0.601	0.605	0.580	0.605	0.608	0.551	0.681	0.610	0.611	0.601	0.601	0.597	0.598	0.598	0.602
SLYP	0.699	0.701	0.695	0.695	0.714	0.677	0.695	0.697	0.679	0.698	0.700	0.654	0.757	0.694	0.704	0.696	0.699	0.695	0.696	0.696	0.697
SP86	0.696	0.699	0.700	0.700	0.709	0.681	0.704	0.707	0.684	0.708	0.710	0.653	0.752	0.708	0.702	0.705	0.702	0.702	0.703	0.704	0.701
SPBE	0.605	0.608	0.602	0.602	0.627	0.586	0.613	0.616	0.589	0.617	0.621	0.556	0.687	0.625	0.617	0.611	0.608	0.605	0.607	0.607	0.610
SPKZB	0.591	0.594	0.586	0.586	0.613	0.572	0.598	0.601	0.576	0.602	0.605	0.543	0.675	0.610	0.603	0.596	0.592	0.589	0.591	0.591	0.596
SPL	0.485	0.487	0.465	0.465	0.509	0.450	0.474	0.475	0.454	0.478	0.478	0.427	0.582	0.479	0.495	0.474	0.474	0.468	0.468	0.468	0.478
SPW91	0.613	0.615	0.610	0.610	0.633	0.594	0.620	0.624	0.598	0.624	0.628	0.565	0.692	0.631	0.623	0.619	0.616	0.613	0.615	0.615	0.618
SRevTPSS	0.604	0.606	0.599	0.599	0.625	0.585	0.610	0.613	0.588	0.614	0.617	0.556	0.683	0.620	0.614	0.608	0.605	0.602	0.603	0.604	0.608
STPSS	0.594	0.596	0.589	0.589	0.616	0.575	0.600	0.604	0.578	0.604	0.608	0.545	0.677	0.612	0.605	0.598	0.595	0.592	0.593	0.594	0.598
SVP86	0.696	0.699	0.700	0.700	0.709	0.681	0.704	0.707	0.684	0.708	0.711	0.653	0.752	0.708	0.702	0.705	0.702	0.702	0.703	0.704	0.701
SVWN5	0.484	0.486	0.464	0.464	0.508	0.450	0.474	0.475	0.453	0.477	0.478	0.426	0.581	0.479	0.495	0.473	0.474	0.468	0.467	0.467	0.477
TPSSB95	0.117	0.105	0.131	0.131	0.168	0.118	0.118	0.116	0.118	0.118	0.116	0.118	0.173	0.132	0.129	0.121	0.110	0.131	0.131	0.132	0.127
TPSSBRC	0.206	0.210	0.253	0.254	0.279	0.247	0.239	0.222	0.247	0.239	0.221	0.253	0.286	0.242	0.214	0.275	0.221	0.267	0.251	0.259	0.244
TPSSKCIS	0.176	0.181	0.207	0.207	0.262	0.213	0.211	0.185	0.211	0.210	0.183	0.218	0.279	0.214	0.194	0.235	0.191	0.220	0.207	0.205	0.210
TPSSLYP	0.280	0.281	0.252	0.252	0.355	0.254	0.259	0.262	0.255	0.259	0.262	0.258	0.392	0.261	0.315	0.247	0.274	0.249	0.254	0.251	0.273
TPSSP86	0.137	0.141	0.133	0.133	0.238	0.127	0.137	0.124	0.126	0.136	0.123	0.136	0.278	0.134	0.188	0.137	0.132	0.140	0.134	0.148	0.149
TPSSPBE	0.223	0.224	0.280	0.280	0.281	0.256	0.242	0.232	0.255	0.241	0.232	0.262	0.271	0.270	0.225	0.308	0.237	0.301	0.279	0.278	0.259
TPSSPKZB	0.230	0.240	0.283	0.283	0.281	0.259	0.245	0.235	0.258	0.244	0.234	0.267	0.272	0.272	0.227	0.311	0.242	0.309	0.281	0.282	0.263
TPSSPL	0.245	0.245	0.293	0.293	0.281	0.293	0.277	0.262	0.293	0.277	0.262	0.298	0.273	0.300	0.243	0.331	0.257	0.306	0.293	0.290	0.281
TPSSPW91	0.216	0.219	0.273	0.273	0.281	0.247	0.236	0.221	0.245	0.237	0.220	0.253	0.270	0.263	0.216	0.301	0.231	0.282	0.271	0.271	0.251
TPSSRevTPSS	0.206	0.209	0.260	0.260	0.274	0.237	0.234	0.209	0.235	0.234	0.208	0.241	0.266	0.243	0.209	0.278	0.219	0.270	0.247	0.260	0.240
TPSSTPSS	0.230	0.239	0.283	0.283	0.280	0.260	0.244	0.234	0.259	0.244	0.234	0.267	0.272	0.273	0.227	0.308	0.241	0.308	0.281	0.281	0.262
TPSSVP86	0.137	0.142	0.133	0.133	0.237	0.127	0.138	0.123	0.127	0.137	0.124	0.137	0.278	0.135	0.188	0.138	0.132	0.141	0.134	0.149	0.150
TPSSVWN	0.230	0.233	0.259	0.260	0.267	0.260	0.251	0.234	0.260	0.249	0.233	0.266	0.276	0.269	0.221	0.296	0.232	0.271	0.260	0.257	0.254
TPSSVWN5	0.246	0.248	0.294	0.294	0.281	0.294	0.278	0.263	0.294	0.277	0.263	0.298	0.273	0.301	0.244	0.333	0.258	0.308	0.294	0.292	0.282
wPBEhB95	0.119	0.120	0.108	0.108	0.213	0.049	0.099	0.082	0.049	0.100	0.082	0.066	0.316	0.037	0.188	0.084	0.114	0.105	0.097	0.110	0.112
wPBEhBRC	0.184	0.187	0.159	0.159	0.288	0.162	0.157	0.163	0.161	0.157	0.163	0.170	0.325	0.153	0.235	0.164	0.180	0.162	0.160	0.161	0.183
wPBEhKCIS	0.178	0.183	0.131	0.131	0.272	0.131	0.133	0.140	0.130	0.133	0.142	0.140	0.321	0.123	0.224	0.127	0.171	0.129	0.133	0.130	0.160
wPBEhLYP	0.314	0.315	0.283	0.283	0.369	0.277	0.284	0.285	0.278	0.285	0.286	0.279	0.444	0.283	0.336	0.274	0.302	0.285	0.284	0.283	0.301
wPBEhP86	0.221	0.224	0.174	0.174	0.278	0.167	0.182	0.189	0.168	0.184	0.191	0.172	0.363	0.164	0.247	0.176	0.202	0.181	0.180	0.178	0.201
wPBEhPBE	0.159	0.164	0.141	0.141	0.262	0.141	0.132	0.128	0.139	0.132	0.128	0.151	0.305	0.133	0.211	0.142	0.158	0.144	0.142	0.143	0.160
wPBEhPKZB	0.159	0.163	0.145	0.145	0.262	0.144	0.134	0.130	0.143	0.135	0.130	0.155	0.304	0.138	0.211	0.148	0.158	0.149	0.147	0.147	0.162
wPBEhPL	0.184	0.187	0.190	0.189	0.277	0.186	0.178	0.171	0.186	0.178	0.171	0.192	0.312	0.185	0.222	0.203	0.181	0.198	0.190	0.189	0.198
wPBEhPW91	0.163	0.167	0.140	0.140	0.263	0.136	0.134	0.134	0.135	0.134	0.134	0.147	0.307	0.131	0.212	0.136	0.160	0.139	0.141	0.141	0.160
wPBEhRevTPSS	0.165	0.169	0.135	0.135	0.261	0.136	0.131	0.135	0.136	0.131	0.135	0.147	0.307	0.127	0.212	0.135	0.161	0.137	0.137	0.138	0.158
wPBEhTPSS	0.159	0.163	0.144	0.144	0.262	0.143	0.134	0.129	0.142	0.134	0.129	0.153	0.305	0.136	0.211	0.147	0.158	0.148	0.146	0.146	0.162
wPBEhVP86	0.220	0.223	0.174	0.174	0.278	0.167	0.181	0.188	0.167	0.182	0.189	0.171	0.361	0.163	0.245	0.175	0.201	0.180	0.179	0.177	0.200
wPBEhVWN	0.177	0.180	0.182	0.182	0.277	0.181	0.170	0.165	0.181	0.169	0.164	0.186	0.314	0.178	0.225	0.190	0.174	0.185	0.183	0.182	0.192
wPBEhVWN5	0.184	0.187	0.190	0.190	0.276	0.186	0.178	0.171	0.186	0.178	0.171	0.192	0.312	0.185	0.222	0.203	0.182	0.199	0.190	0.191	0.199
XaB95	0.679	0.680	0.679	0.679	0.692	0.646	0.683	0.688	0.650	0.686	0.691	0.610	0.755	0.675	0.683	0.684	0.682	0.683	0.682	0.684	0.680
XaKCIS	0.																				

XaP86	0.735	0.738	0.744	0.744	0.746	0.724	0.747	0.750	0.728	0.751	0.754	0.695	0.781	0.749	0.740	0.748	0.745	0.746	0.747	0.748	0.743
XaPBE	0.649	0.651	0.654	0.654	0.666	0.635	0.662	0.666	0.640	0.666	0.670	0.604	0.719	0.672	0.658	0.661	0.657	0.656	0.658	0.659	0.658
XaPKZB	0.635	0.638	0.638	0.638	0.653	0.622	0.647	0.651	0.626	0.651	0.655	0.592	0.706	0.657	0.644	0.646	0.641	0.640	0.642	0.643	0.643
XaPL	0.533	0.534	0.521	0.521	0.552	0.507	0.530	0.530	0.511	0.534	0.534	0.482	0.615	0.536	0.541	0.529	0.528	0.525	0.524	0.524	0.531
XaPW91	0.656	0.659	0.662	0.662	0.672	0.643	0.669	0.672	0.647	0.673	0.676	0.612	0.723	0.678	0.665	0.668	0.664	0.664	0.665	0.666	0.665
XaRevTPSS	0.647	0.649	0.650	0.650	0.663	0.634	0.658	0.661	0.637	0.662	0.665	0.604	0.714	0.666	0.655	0.657	0.653	0.653	0.653	0.654	0.654
XaTPSS	0.638	0.640	0.641	0.641	0.655	0.624	0.649	0.653	0.628	0.654	0.657	0.594	0.708	0.659	0.647	0.648	0.644	0.643	0.645	0.645	0.646
XaVP86	0.685	0.688	0.689	0.689	0.746	0.671	0.696	0.698	0.728	0.699	0.700	0.695	0.741	0.704	0.689	0.696	0.692	0.693	0.694	0.695	0.699
XaVWN	0.551	0.552	0.542	0.542	0.568	0.489	0.508	0.551	0.492	0.512	0.555	0.464	0.628	0.538	0.558	0.550	0.548	0.545	0.544	0.545	0.539
XaVWN5	0.532	0.534	0.495	0.495	0.551	0.471	0.491	0.530	0.474	0.495	0.534	0.446	0.615	0.521	0.540	0.529	0.499	0.524	0.523	0.523	0.516
LC-BB95	0.070	0.060	0.099	0.099	0.158	0.086	0.086	0.084	0.086	0.086	0.085	0.085	0.229	0.107	0.111	0.086	0.096	0.097	0.099	0.101	0.100
LC-BBRC	0.120	0.124	0.361	0.361	0.265	0.324	0.251	0.223	0.329	0.249	0.222	0.348	0.304	0.316	0.233	0.268	0.242	0.378	0.360	0.437	0.286
LC-BKCIS	0.074	0.081	0.184	0.184	0.224	0.199	0.135	0.114	0.198	0.133	0.113	0.189	0.280	0.169	0.177	0.139	0.139	0.183	0.181	0.206	0.165
LC-BLYP	0.347	0.348	0.302	0.301	0.405	0.309	0.320	0.318	0.310	0.322	0.320	0.303	0.499	0.319	0.361	0.306	0.317	0.300	0.303	0.301	0.331
LC-BP86	0.173	0.174	0.463	0.459	0.238	0.205	0.160	0.167	0.204	0.162	0.176	0.199	0.364	0.326	0.289	0.207	0.388	0.419	0.467	0.493	0.287
LC-BPBE	0.146	0.142	0.571	0.570	0.285	0.488	0.458	0.378	0.484	0.458	0.379	0.485	0.237	0.435	0.265	0.456	0.345	0.543	0.572	0.588	0.414
LC-BPKZB	0.154	0.150	0.568	0.571	0.293	0.486	0.460	0.381	0.482	0.458	0.382	0.497	0.226	0.445	0.289	0.487	0.346	0.542	0.573	0.590	0.419
LC-BPL	0.209	0.211	0.494	0.494	0.295	0.457	0.397	0.354	0.457	0.389	0.353	0.456	0.272	0.458	0.269	0.480	0.329	0.514	0.522	0.558	0.398
LC-BPW91	0.129	0.124	0.563	0.563	0.258	0.476	0.409	0.328	0.470	0.392	0.314	0.472	0.237	0.418	0.248	0.410	0.332	0.539	0.591	0.581	0.393
LC-BRevTPSS	0.103	0.100	0.517	0.519	0.230	0.444	0.304	0.250	0.437	0.308	0.243	0.437	0.236	0.390	0.226	0.392	0.310	0.463	0.509	0.543	0.348
LC-BTPSS	0.151	0.146	0.571	0.570	0.299	0.486	0.458	0.383	0.482	0.458	0.382	0.490	0.240	0.440	0.278	0.484	0.346	0.544	0.573	0.601	0.419
LC-BVP86	0.170	0.171	0.474	0.470	0.234	0.206	0.157	0.168	0.201	0.163	0.170	0.212	0.363	0.326	0.294	0.205	0.385	0.402	0.467	0.484	0.286
LC-BVWN	0.170	0.178	0.381	0.381	0.263	0.354	0.294	0.268	0.353	0.293	0.268	0.355	0.275	0.358	0.238	0.341	0.268	0.402	0.385	0.413	0.312
LC-BVWN5	0.211	0.213	0.509	0.509	0.297	0.471	0.403	0.364	0.470	0.402	0.364	0.466	0.273	0.461	0.270	0.504	0.343	0.551	0.526	0.604	0.410
LC-BRxB95	0.061	0.061	0.101	0.101	0.158	0.088	0.088	0.086	0.088	0.088	0.086	0.087	0.228	0.107	0.112	0.088	0.098	0.098	0.101	0.102	0.101
LC-BRxBRC	0.115	0.119	0.367	0.367	0.265	0.295	0.227	0.218	0.299	0.227	0.217	0.302	0.302	0.273	0.228	0.240	0.245	0.368	0.361	0.433	0.273
LC-BRxKCIS	0.073	0.079	0.181	0.181	0.221	0.144	0.119	0.096	0.143	0.119	0.095	0.148	0.280	0.139	0.170	0.105	0.128	0.175	0.176	0.186	0.148
LC-BRxLYP	0.360	0.360	0.319	0.319	0.414	0.327	0.342	0.339	0.329	0.343	0.341	0.322	0.504	0.340	0.373	0.329	0.333	0.320	0.321	0.320	0.348
LC-BRxP86	0.187	0.189	0.475	0.475	0.252	0.210	0.236	0.235	0.211	0.223	0.237	0.201	0.371	0.339	0.316	0.227	0.406	0.402	0.483	0.520	0.310
LC-BRxPBE	0.143	0.139	0.579	0.578	0.284	0.487	0.364	0.326	0.475	0.358	0.307	0.478	0.228	0.430	0.250	0.409	0.347	0.523	0.574	0.605	0.394
LC-BRxPKZB	0.160	0.146	0.563	0.562	0.285	0.489	0.392	0.325	0.477	0.390	0.323	0.491	0.218	0.440	0.263	0.478	0.350	0.525	0.577	0.592	0.402
LC-BRxPL	0.211	0.212	0.502	0.502	0.283	0.448	0.366	0.324	0.448	0.367	0.323	0.445	0.270	0.479	0.268	0.441	0.355	0.521	0.544	0.540	0.392
LC-BRxPW91	0.127	0.120	0.540	0.540	0.261	0.447	0.328	0.245	0.443	0.323	0.244	0.461	0.227	0.403	0.231	0.377	0.338	0.513	0.559	0.562	0.364
LC-BRxRevTPSS	0.098	0.095	0.489	0.490	0.228	0.370	0.269	0.217	0.368	0.264	0.216	0.388	0.228	0.353	0.219	0.302	0.309	0.459	0.500	0.545	0.320
LC-BRxTPSS	0.148	0.143	0.577	0.579	0.286	0.489	0.392	0.329	0.478	0.388	0.308	0.493	0.218	0.440	0.251	0.451	0.348	0.539	0.580	0.591	0.401
LC-BRxVP86	0.185	0.186	0.469	0.464	0.248	0.211	0.208	0.223	0.210	0.218	0.229	0.197	0.363	0.343	0.313	0.223	0.396	0.433	0.479	0.509	0.305
LC-BRxVWN	0.169	0.179	0.377	0.377	0.262	0.335	0.268	0.247	0.334	0.267	0.247	0.338	0.271	0.343	0.223	0.314	0.269	0.373	0.374	0.418	0.299
LC-BRxVWN5	0.214	0.216	0.504	0.504	0.286	0.450	0.370	0.328	0.450	0.369	0.329	0.448	0.269	0.481	0.268	0.446	0.335	0.528	0.529	0.560	0.394
LC-G96B95	0.070	0.070	0.099	0.099	0.158	0.086	0.086	0.085	0.086	0.086	0.085	0.085	0.229	0.107	0.111	0.086	0.096	0.097	0.100	0.101	0.101
LC-G96BRC	0.120	0.124	0.366	0.366	0.264	0.336	0.251	0.229	0.334	0.250	0.226	0.338	0.303	0.320	0.232	0.272	0.243	0.384	0.375	0.439	0.289
LC-G96KCIS	0.076	0.083	0.190	0.190	0.222	0.200	0.135	0.114	0.199	0.133	0.113	0.191	0.279	0.171	0.176	0.140	0.147	0.184	0.187	0.221	0.168
LC-G96LYP	0.347	0.347	0.301	0.301	0.405	0.309	0.320	0.318	0.310	0.322	0.319	0.303	0.498	0.319	0.361	0.307	0.317	0.301	0.302	0.300	0.330
LC-G96P86	0.170	0.172	0.463	0.462	0.233	0.206	0.161	0.168	0.205	0.163	0.174	0.214	0.363	0.327	0.293	0.205	0.385	0.365	0.463	0.486	0.284
LC-G96PBE	0.154	0.141	0.571	0.571	0.284	0.485	0.458	0.379	0.499	0.457	0.374	0.482	0.237	0.438	0.272	0.469	0.346	0.543	0.572	0.580	0.416
LC-G96PKZB	0.157	0.149	0.571	0.571	0.304	0.497	0.459	0.381	0.487	0.460	0.381	0.486	0.224	0.448	0.289	0.475	0.349	0.544	0.573	0.598	0.420
LC-G96PL	0.210	0.211	0.495	0.495	0.293	0.457	0.395	0.353	0.456	0.393	0.352	0.460	0.273	0.459	0.267	0.480	0.330	0.514	0.507	0.526	0.396
LC-G96PW91	0.131	0.124	0.565	0.564	0.274	0.474	0.419	0.328	0.471	0.416	0.336	0.471	0.235	0.421	0.240	0.444	0.336	0.536	0.575	0.586	0.397
LC-G96RevTPSS	0.105	0.101	0.521	0.523	0.244	0.441	0.322	0.263	0.439	0.304	0.261	0.418	0.234	0.394	0.227	0.389	0.312	0.465	0.512	0.546	0.351
LC-G96TPSS	0.160	0.149	0.572	0.571	0.292	0.487	0.475	0.381	0.482	0.459	0.383	0.487	0.238	0.441	0.286	0.476	0.356	0.544	0.574	0.616	0.421
LC-G96VP86	0.166	0.168	0.474	0.474	0.232	0.207	0.155	0.175	0.202	0.156	0.168	0.211	0.362	0.329	0.291	0.203	0.381	0.399	0.464	0.486	0.285
LC-G96VWN	0.171	0.178	0.384	0.384	0.262	0.355	0.294	0.268	0.353	0.293	0.268	0.354	0.274	0.358	0.237	0.342	0.268	0.406	0.386	0.416	0.312
LC-G96VWN5	0.212	0.214	0.509	0.509	0.299	0.468	0.405	0.360	0.469	0.402	0.359	0.466	0.271	0.461	0.269	0.503	0.344	0.550	0.527	0.574	0.409
LC-LGB95	0.060	0.060	0.099	0.099	0.159	0.086	0.086	0.084	0.086	0.086	0.084	0.085	0.230	0.107	0.111	0.085	0.095	0			

LC-LGPBE	0.143	0.140	0.561	0.561	0.288	0.491	0.457	0.378	0.488	0.458	0.378	0.490	0.240	0.462	0.269	0.486	0.342	0.563	0.571	0.590	0.418
LC-LGPKZB	0.149	0.145	0.562	0.563	0.281	0.484	0.459	0.387	0.491	0.460	0.386	0.487	0.229	0.492	0.291	0.490	0.345	0.563	0.574	0.594	0.421
LC-LGPL	0.208	0.209	0.509	0.509	0.289	0.470	0.398	0.360	0.470	0.398	0.382	0.462	0.275	0.485	0.272	0.484	0.330	0.532	0.527	0.548	0.406
LC-LGPW91	0.127	0.120	0.558	0.555	0.260	0.476	0.414	0.324	0.474	0.414	0.326	0.479	0.238	0.448	0.252	0.423	0.330	0.534	0.547	0.582	0.394
LC-LGRevTPSS	0.100	0.097	0.510	0.508	0.234	0.441	0.333	0.248	0.415	0.334	0.251	0.441	0.238	0.409	0.230	0.380	0.307	0.465	0.509	0.551	0.350
LC-LGTPSS	0.145	0.145	0.563	0.563	0.286	0.486	0.459	0.385	0.482	0.459	0.386	0.483	0.243	0.469	0.281	0.491	0.343	0.564	0.568	0.592	0.420
LC-LGVP86	0.175	0.175	0.477	0.474	0.241	0.214	0.158	0.168	0.216	0.158	0.171	0.209	0.367	0.301	0.298	0.207	0.397	0.423	0.473	0.495	0.290
LC-LGVWN	0.169	0.179	0.391	0.391	0.266	0.356	0.298	0.272	0.354	0.298	0.272	0.363	0.277	0.356	0.234	0.341	0.268	0.401	0.388	0.417	0.315
LC-LGVWN5	0.211	0.212	0.524	0.524	0.295	0.479	0.408	0.370	0.478	0.409	0.366	0.471	0.275	0.490	0.274	0.512	0.337	0.552	0.532	0.567	0.414
LC-mPWB95	0.060	0.060	0.099	0.099	0.158	0.086	0.086	0.085	0.086	0.086	0.085	0.085	0.229	0.107	0.111	0.086	0.096	0.097	0.099	0.101	0.100
LC-mPWBRC	0.119	0.123	0.360	0.360	0.266	0.329	0.249	0.222	0.317	0.249	0.221	0.332	0.304	0.303	0.232	0.268	0.241	0.377	0.360	0.435	0.283
LC-mPWKCIS	0.074	0.081	0.184	0.184	0.224	0.198	0.132	0.112	0.196	0.132	0.111	0.188	0.281	0.155	0.177	0.137	0.139	0.182	0.180	0.204	0.164
LC-mPWLYP	0.348	0.349	0.303	0.303	0.406	0.310	0.321	0.319	0.311	0.323	0.321	0.304	0.499	0.320	0.362	0.308	0.318	0.301	0.304	0.302	0.332
LC-mPWP86	0.174	0.175	0.463	0.459	0.240	0.204	0.162	0.171	0.210	0.162	0.177	0.199	0.365	0.329	0.290	0.209	0.389	0.419	0.467	0.493	0.288
LC-mPWPBE	0.148	0.141	0.573	0.574	0.284	0.490	0.458	0.377	0.480	0.458	0.372	0.483	0.237	0.437	0.273	0.456	0.343	0.564	0.571	0.588	0.415
LC-mPWPKZB	0.153	0.148	0.588	0.571	0.292	0.496	0.475	0.382	0.485	0.455	0.382	0.489	0.226	0.447	0.279	0.474	0.347	0.566	0.571	0.590	0.421
LC-mPWPL	0.208	0.211	0.495	0.495	0.294	0.456	0.388	0.353	0.456	0.388	0.352	0.454	0.274	0.457	0.269	0.479	0.329	0.514	0.506	0.557	0.397
LC-mPWPW91	0.128	0.122	0.563	0.563	0.260	0.471	0.399	0.326	0.470	0.391	0.341	0.485	0.237	0.419	0.254	0.401	0.332	0.537	0.553	0.580	0.392
LC-mPWRevTPS	0.103	0.099	0.518	0.518	0.231	0.438	0.302	0.242	0.433	0.320	0.249	0.416	0.236	0.412	0.226	0.389	0.309	0.466	0.510	0.549	0.348
LC-mPWTPSS	0.147	0.146	0.588	0.589	0.302	0.490	0.458	0.382	0.483	0.473	0.381	0.490	0.239	0.443	0.273	0.475	0.345	0.563	0.590	0.591	0.422
LC-mPWVP86	0.171	0.172	0.470	0.474	0.235	0.201	0.163	0.171	0.201	0.163	0.167	0.203	0.364	0.325	0.295	0.206	0.385	0.402	0.466	0.490	0.286
LC-mPWVWN	0.171	0.177	0.380	0.381	0.263	0.353	0.293	0.267	0.352	0.293	0.267	0.354	0.275	0.356	0.238	0.340	0.267	0.396	0.384	0.412	0.311
LC-mPWVWN5	0.211	0.212	0.508	0.508	0.297	0.470	0.402	0.361	0.469	0.401	0.359	0.465	0.273	0.460	0.270	0.504	0.338	0.550	0.527	0.579	0.408
LC-OB95	0.082	0.082	0.099	0.099	0.172	0.086	0.086	0.084	0.086	0.086	0.084	0.085	0.229	0.106	0.110	0.086	0.097	0.097	0.099	0.100	0.103
LC-OBRC	0.124	0.129	0.357	0.357	0.267	0.352	0.254	0.230	0.350	0.253	0.229	0.353	0.302	0.321	0.235	0.281	0.239	0.380	0.358	0.434	0.290
LC-OKCIS	0.082	0.088	0.185	0.185	0.223	0.201	0.136	0.116	0.200	0.135	0.115	0.193	0.278	0.178	0.178	0.147	0.137	0.182	0.186	0.202	0.167
LC-OLYP	0.345	0.346	0.300	0.301	0.404	0.307	0.318	0.317	0.309	0.321	0.318	0.302	0.495	0.322	0.359	0.303	0.317	0.300	0.301	0.300	0.329
LC-OP86	0.163	0.165	0.461	0.457	0.229	0.206	0.159	0.179	0.202	0.165	0.166	0.214	0.360	0.330	0.287	0.198	0.303	0.399	0.468	0.486	0.280
LC-OPBE	0.161	0.148	0.570	0.570	0.304	0.519	0.460	0.378	0.501	0.461	0.377	0.499	0.235	0.472	0.268	0.487	0.345	0.560	0.573	0.589	0.424
LC-OPKZB	0.171	0.168	0.571	0.571	0.305	0.504	0.463	0.383	0.500	0.462	0.385	0.503	0.223	0.480	0.290	0.488	0.345	0.541	0.574	0.592	0.426
LC-OPL	0.209	0.210	0.491	0.491	0.293	0.464	0.400	0.356	0.464	0.399	0.354	0.460	0.272	0.463	0.269	0.487	0.326	0.509	0.503	0.522	0.397
LC-OPW91	0.134	0.130	0.545	0.560	0.259	0.489	0.437	0.346	0.488	0.424	0.326	0.491	0.234	0.427	0.257	0.443	0.332	0.536	0.577	0.571	0.400
LC-ORevTPSS	0.107	0.104	0.481	0.481	0.233	0.479	0.337	0.307	0.480	0.336	0.286	0.481	0.232	0.389	0.225	0.388	0.308	0.464	0.486	0.550	0.358
LC-OTPSS	0.158	0.150	0.572	0.572	0.299	0.501	0.463	0.387	0.503	0.461	0.385	0.503	0.237	0.480	0.290	0.491	0.352	0.542	0.578	0.591	0.426
LC-OVP86	0.161	0.162	0.464	0.460	0.227	0.220	0.151	0.161	0.210	0.162	0.162	0.210	0.359	0.342	0.285	0.196	0.379	0.396	0.486	0.518	0.286
LC-OVWN	0.170	0.178	0.377	0.377	0.262	0.353	0.294	0.267	0.352	0.293	0.266	0.355	0.273	0.362	0.239	0.349	0.265	0.391	0.408	0.410	0.312
LC-OVWN5	0.211	0.212	0.497	0.497	0.298	0.463	0.412	0.362	0.463	0.407	0.359	0.465	0.270	0.465	0.270	0.510	0.329	0.545	0.508	0.541	0.404
LC-PBEB95	0.060	0.060	0.099	0.099	0.159	0.086	0.086	0.084	0.086	0.086	0.084	0.085	0.230	0.107	0.111	0.086	0.096	0.096	0.099	0.100	0.100
LC-PBEBRC	0.119	0.124	0.360	0.360	0.265	0.319	0.251	0.223	0.328	0.248	0.221	0.332	0.305	0.312	0.234	0.269	0.240	0.375	0.357	0.434	0.284
LC-PBEKCIS	0.075	0.082	0.183	0.183	0.224	0.197	0.134	0.113	0.195	0.133	0.112	0.188	0.282	0.154	0.178	0.127	0.137	0.181	0.180	0.205	0.163
LC-PBELYP	0.348	0.348	0.302	0.302	0.406	0.309	0.321	0.318	0.311	0.322	0.320	0.304	0.499	0.320	0.362	0.307	0.318	0.301	0.303	0.301	0.331
LC-PBEP86	0.175	0.176	0.461	0.461	0.241	0.222	0.160	0.172	0.214	0.161	0.174	0.215	0.366	0.325	0.297	0.213	0.393	0.421	0.468	0.495	0.290
LC-PBEPBE	0.150	0.140	0.572	0.569	0.285	0.484	0.459	0.378	0.498	0.457	0.377	0.495	0.238	0.436	0.265	0.457	0.342	0.562	0.570	0.589	0.416
LC-PBEPKZB	0.159	0.148	0.570	0.568	0.292	0.487	0.457	0.382	0.483	0.456	0.382	0.486	0.241	0.439	0.289	0.476	0.344	0.566	0.572	0.590	0.419
LC-PBEPL	0.207	0.209	0.494	0.494	0.289	0.463	0.389	0.354	0.457	0.389	0.353	0.455	0.274	0.457	0.269	0.480	0.328	0.529	0.523	0.558	0.399
LC-PBEPW91	0.127	0.119	0.545	0.544	0.258	0.472	0.393	0.311	0.471	0.392	0.319	0.485	0.237	0.420	0.253	0.402	0.330	0.535	0.554	0.580	0.387
LC-PBERevTPSS	0.102	0.098	0.498	0.494	0.232	0.434	0.321	0.251	0.434	0.301	0.237	0.435	0.237	0.392	0.227	0.389	0.307	0.463	0.506	0.546	0.345
LC-PBETPSS	0.149	0.145	0.570	0.571	0.286	0.485	0.457	0.383	0.483	0.458	0.382	0.487	0.241	0.440	0.288	0.485	0.344	0.565	0.572	0.595	0.419
LC-PBEVP86	0.172	0.174	0.474	0.474	0.238	0.200	0.160	0.167	0.203	0.161	0.169	0.199	0.332	0.326	0.296	0.207	0.389	0.420	0.465	0.493	0.286
LC-PBEVWN	0.169	0.176	0.383	0.383	0.263	0.353	0.294	0.268	0.353	0.293	0.268	0.355	0.276	0.356	0.239	0.337	0.267	0.395	0.383	0.413	0.311
LC-PBEVWN5	0.209	0.211	0.508	0.508	0.298	0.471	0.408	0.364	0.470	0.407	0.363	0.466	0.274	0.460	0.271	0.504	0.331	0.550	0.529	0.598	0.410
LC-PBEhB95	0.060	0.060	0.099	0.099	0.159	0.086	0.086	0.085	0.086	0.086	0.085	0.085	0.230	0.107	0.111	0.086	0.096	0.096	0.099	0.101	0.100
LC-PBEhBRC	0.119	0.124	0.360	0.360	0.266	0.324	0.250	0.226	0.318	0.247	0.221	0.327	0.305	0.312	0						

LC-PBEhPKZB	0.157	0.147	0.565	0.563	0.290	0.489	0.459	0.382	0.490	0.457	0.379	0.490	0.228	0.469	0.279	0.476	0.347	0.565	0.572	0.594	0.420
LC-PBEhPL	0.207	0.208	0.505	0.505	0.294	0.478	0.397	0.360	0.478	0.393	0.357	0.456	0.274	0.458	0.269	0.477	0.328	0.532	0.523	0.547	0.402
LC-PBEhPW91	0.127	0.120	0.535	0.536	0.258	0.476	0.415	0.325	0.479	0.385	0.334	0.478	0.237	0.420	0.249	0.402	0.330	0.534	0.548	0.582	0.389
LC-PBEhRevTPS	0.101	0.098	0.518	0.519	0.232	0.438	0.301	0.238	0.436	0.305	0.248	0.438	0.237	0.373	0.228	0.380	0.303	0.466	0.509	0.552	0.346
LC-PBEhTPSS	0.156	0.144	0.571	0.573	0.285	0.491	0.459	0.382	0.489	0.458	0.383	0.484	0.242	0.440	0.271	0.474	0.346	0.565	0.568	0.611	0.420
LC-PBEhVP86	0.173	0.175	0.473	0.471	0.239	0.200	0.160	0.168	0.204	0.162	0.172	0.198	0.365	0.343	0.295	0.207	0.388	0.385	0.427	0.494	0.285
LC-PBEhVWN	0.169	0.176	0.387	0.387	0.264	0.353	0.293	0.268	0.352	0.293	0.268	0.354	0.276	0.356	0.239	0.338	0.267	0.401	0.383	0.417	0.312
LC-PBEhVWN5	0.210	0.211	0.510	0.510	0.298	0.489	0.413	0.368	0.488	0.405	0.365	0.467	0.274	0.460	0.271	0.502	0.332	0.551	0.530	0.563	0.411
LC-PKZBB95	0.080	0.081	0.098	0.098	0.157	0.085	0.085	0.084	0.085	0.085	0.084	0.085	0.227	0.105	0.110	0.085	0.095	0.096	0.099	0.100	0.101
LC-PKZBBRC	0.125	0.129	0.371	0.371	0.268	0.355	0.288	0.239	0.354	0.276	0.238	0.356	0.300	0.331	0.237	0.288	0.246	0.387	0.372	0.443	0.299
LC-PKZBKIS	0.081	0.088	0.194	0.194	0.224	0.211	0.146	0.128	0.210	0.145	0.127	0.215	0.276	0.203	0.181	0.157	0.150	0.196	0.193	0.234	0.178
LC-PKZBLYP	0.334	0.334	0.289	0.289	0.395	0.297	0.305	0.306	0.298	0.307	0.308	0.292	0.489	0.308	0.352	0.293	0.307	0.289	0.290	0.288	0.318
LC-PKZBP86	0.157	0.159	0.457	0.455	0.226	0.221	0.150	0.157	0.220	0.151	0.159	0.235	0.355	0.337	0.276	0.191	0.377	0.394	0.447	0.482	0.280
LC-PKZBPBE	0.159	0.151	0.561	0.562	0.305	0.492	0.464	0.388	0.488	0.464	0.389	0.498	0.234	0.452	0.272	0.491	0.348	0.566	0.580	0.601	0.423
LC-PKZBPKZB	0.170	0.166	0.562	0.564	0.304	0.496	0.465	0.395	0.492	0.464	0.395	0.498	0.222	0.481	0.294	0.494	0.352	0.568	0.582	0.599	0.428
LC-PKZBPL	0.214	0.215	0.510	0.510	0.301	0.475	0.422	0.377	0.474	0.426	0.377	0.471	0.270	0.469	0.270	0.497	0.339	0.538	0.529	0.567	0.413
LC-PKZBPW91	0.138	0.131	0.556	0.557	0.278	0.492	0.451	0.371	0.478	0.443	0.368	0.490	0.233	0.425	0.252	0.479	0.336	0.561	0.569	0.592	0.410
LC-PKZBRevTPS	0.110	0.107	0.519	0.518	0.233	0.452	0.388	0.281	0.450	0.359	0.277	0.449	0.231	0.413	0.229	0.390	0.312	0.495	0.531	0.549	0.365
LC-PKZBTPSS	0.173	0.170	0.580	0.566	0.303	0.501	0.466	0.394	0.498	0.465	0.394	0.532	0.222	0.483	0.290	0.494	0.350	0.566	0.574	0.630	0.433
LC-PKZBVP86	0.155	0.156	0.465	0.464	0.222	0.215	0.159	0.150	0.218	0.159	0.177	0.215	0.354	0.361	0.281	0.189	0.373	0.390	0.455	0.484	0.282
LC-PKZBVWN	0.176	0.184	0.421	0.421	0.265	0.376	0.311	0.278	0.374	0.309	0.278	0.374	0.272	0.371	0.243	0.361	0.270	0.408	0.409	0.421	0.326
LC-PKZBVWN5	0.218	0.218	0.529	0.530	0.302	0.484	0.430	0.379	0.478	0.430	0.379	0.482	0.270	0.474	0.272	0.504	0.346	0.556	0.534	0.566	0.419
LC-PW91B95	0.060	0.060	0.099	0.099	0.158	0.086	0.086	0.085	0.086	0.086	0.085	0.085	0.230	0.107	0.111	0.086	0.096	0.097	0.099	0.101	0.100
LC-PW91BRC	0.119	0.123	0.359	0.359	0.265	0.317	0.246	0.221	0.316	0.247	0.219	0.319	0.305	0.308	0.233	0.269	0.240	0.375	0.357	0.434	0.282
LC-PW91KCIS	0.077	0.083	0.183	0.183	0.224	0.195	0.131	0.112	0.194	0.131	0.110	0.187	0.282	0.154	0.177	0.124	0.136	0.181	0.179	0.202	0.162
LC-PW91LYP	0.349	0.349	0.304	0.304	0.407	0.311	0.322	0.320	0.312	0.324	0.322	0.305	0.500	0.321	0.363	0.309	0.319	0.302	0.304	0.303	0.333
LC-PW91P86	0.174	0.177	0.463	0.464	0.239	0.214	0.160	0.176	0.208	0.162	0.176	0.206	0.366	0.328	0.298	0.213	0.392	0.421	0.467	0.492	0.290
LC-PW91PBE	0.154	0.141	0.569	0.569	0.284	0.494	0.456	0.374	0.482	0.456	0.372	0.496	0.238	0.459	0.250	0.451	0.344	0.563	0.570	0.588	0.416
LC-PW91PKZB	0.151	0.146	0.570	0.570	0.290	0.488	0.457	0.379	0.481	0.457	0.375	0.483	0.241	0.445	0.272	0.474	0.347	0.565	0.571	0.607	0.419
LC-PW91PL	0.207	0.208	0.494	0.494	0.292	0.455	0.387	0.352	0.455	0.387	0.349	0.454	0.274	0.456	0.268	0.478	0.328	0.513	0.505	0.556	0.396
LC-PW91PW91	0.126	0.121	0.544	0.543	0.257	0.483	0.390	0.338	0.469	0.359	0.311	0.485	0.238	0.419	0.256	0.400	0.330	0.536	0.557	0.580	0.387
LC-PW91RevTPS	0.101	0.098	0.517	0.510	0.230	0.434	0.302	0.239	0.466	0.307	0.237	0.434	0.237	0.394	0.225	0.349	0.307	0.464	0.511	0.542	0.345
LC-PW91TPSS	0.146	0.145	0.570	0.571	0.284	0.490	0.459	0.379	0.479	0.457	0.379	0.489	0.241	0.440	0.262	0.489	0.344	0.563	0.572	0.606	0.418
LC-PW91VP86	0.173	0.174	0.467	0.467	0.237	0.200	0.161	0.170	0.203	0.163	0.173	0.200	0.365	0.334	0.295	0.207	0.388	0.419	0.466	0.491	0.288
LC-PW91VWN	0.168	0.176	0.382	0.382	0.262	0.352	0.293	0.266	0.351	0.292	0.266	0.353	0.276	0.355	0.237	0.334	0.267	0.393	0.380	0.411	0.310
LC-PW91VWN5	0.210	0.210	0.507	0.507	0.296	0.469	0.400	0.358	0.467	0.399	0.358	0.463	0.274	0.459	0.270	0.496	0.330	0.549	0.525	0.576	0.406
LC-RevTPSSB95	0.081	0.081	0.099	0.099	0.156	0.086	0.086	0.085	0.086	0.086	0.085	0.085	0.225	0.107	0.110	0.086	0.082	0.097	0.100	0.101	0.101
LC-RevTPSSBRC	0.124	0.129	0.390	0.390	0.269	0.343	0.252	0.226	0.342	0.251	0.225	0.344	0.299	0.306	0.237	0.282	0.249	0.384	0.387	0.434	0.293
LC-RevTPSSKCI	0.080	0.087	0.193	0.193	0.222	0.204	0.140	0.120	0.202	0.139	0.119	0.192	0.273	0.198	0.179	0.152	0.152	0.193	0.191	0.232	0.173
LC-RevTPSSLYP	0.341	0.342	0.300	0.300	0.401	0.308	0.318	0.317	0.310	0.320	0.318	0.303	0.492	0.320	0.358	0.304	0.314	0.298	0.300	0.298	0.328
LC-RevTPSSP86	0.159	0.157	0.463	0.461	0.222	0.204	0.151	0.158	0.206	0.158	0.160	0.212	0.355	0.342	0.282	0.225	0.374	0.358	0.463	0.496	0.280
LC-RevTPSSPBE	0.169	0.159	0.544	0.544	0.305	0.531	0.459	0.380	0.512	0.457	0.374	0.514	0.219	0.427	0.273	0.480	0.377	0.566	0.576	0.572	0.422
LC-RevTPSSPKZ	0.188	0.185	0.547	0.546	0.304	0.518	0.462	0.384	0.517	0.461	0.380	0.540	0.220	0.439	0.276	0.498	0.378	0.565	0.578	0.573	0.428
LC-RevTPSSPL	0.218	0.219	0.499	0.499	0.303	0.459	0.397	0.358	0.458	0.394	0.358	0.461	0.265	0.465	0.267	0.490	0.345	0.510	0.520	0.546	0.402
LC-RevTPSSPW9	0.147	0.147	0.564	0.563	0.284	0.476	0.393	0.342	0.476	0.385	0.320	0.476	0.230	0.425	0.255	0.430	0.342	0.542	0.570	0.587	0.398
LC-RevTPSSRev	0.115	0.112	0.492	0.493	0.248	0.444	0.317	0.255	0.417	0.317	0.254	0.446	0.229	0.391	0.231	0.391	0.315	0.494	0.521	0.549	0.352
LC-RevTPSSSTPS	0.176	0.178	0.545	0.544	0.304	0.515	0.460	0.383	0.515	0.460	0.382	0.544	0.220	0.441	0.272	0.481	0.376	0.568	0.579	0.570	0.426
LC-RevTPSSVP8	0.155	0.154	0.415	0.456	0.220	0.230	0.145	0.157	0.225	0.147	0.158	0.219	0.354	0.421	0.281	0.222	0.372	0.357	0.460	0.492	0.282
LC-RevTPSSVW	0.179	0.187	0.394	0.394	0.266	0.363	0.295	0.268	0.362	0.294	0.267	0.365	0.269	0.375	0.239	0.356	0.270	0.410	0.396	0.420	0.318
LC-RevTPSSVW	0.221	0.222	0.503	0.503	0.304	0.463	0.408	0.368	0.462	0.408	0.368	0.464	0.263	0.473	0.270	0.495	0.349	0.526	0.525	0.538	0.407
LC-SB95	0.070	0.060	0.099	0.099	0.182	0.085	0.085	0.084	0.085	0.085	0.084	0.085	0.233	0.107	0.111	0.085	0.096	0.096	0.099	0.100	0.101
LC-SBRC	0.117	0.121	0.379	0.379	0.262	0.343	0.252	0.227	0.338	0.248	0.226	0.363	0.304	0.314	0.232	0.261	0.241	0.381	0.372	0.439	0.290
LC-SKCIS	0.073	0.083	0.189	0.189	0.222	0.200															

LC-SPL	0.206	0.208	0.507	0.507	0.292	0.482	0.406	0.354	0.477	0.404	0.350	0.488	0.273	0.452	0.264	0.446	0.331	0.526	0.522	0.543	0.402
LC-SPW91	0.123	0.117	0.571	0.571	0.244	0.475	0.408	0.311	0.472	0.389	0.310	0.474	0.234	0.415	0.227	0.412	0.331	0.571	0.550	0.580	0.389
LC-SRevTPSS	0.095	0.092	0.483	0.483	0.226	0.474	0.307	0.236	0.471	0.300	0.278	0.456	0.234	0.359	0.216	0.313	0.305	0.467	0.475	0.552	0.341
LC-STPSS	0.144	0.140	0.581	0.581	0.283	0.480	0.458	0.374	0.479	0.459	0.371	0.487	0.240	0.421	0.268	0.463	0.344	0.556	0.562	0.582	0.414
LC-SVP86	0.176	0.177	0.475	0.475	0.240	0.205	0.163	0.205	0.210	0.164	0.213	0.206	0.332	0.328	0.307	0.218	0.270	0.397	0.467	0.512	0.287
LC-SVWN5	0.208	0.210	0.524	0.524	0.295	0.484	0.412	0.357	0.482	0.409	0.356	0.491	0.272	0.455	0.265	0.451	0.345	0.546	0.526	0.586	0.410
LC-TPSSB95	0.081	0.081	0.099	0.099	0.157	0.086	0.086	0.085	0.086	0.086	0.085	0.086	0.209	0.107	0.111	0.086	0.097	0.097	0.100	0.101	0.101
LC-TPSSBRC	0.123	0.128	0.390	0.390	0.267	0.318	0.246	0.222	0.327	0.245	0.221	0.329	0.301	0.305	0.236	0.275	0.246	0.383	0.372	0.433	0.288
LC-TPSSKCIS	0.080	0.086	0.190	0.190	0.222	0.198	0.135	0.114	0.196	0.134	0.113	0.187	0.275	0.195	0.178	0.146	0.150	0.186	0.187	0.213	0.169
LC-TPSSLYP	0.346	0.346	0.304	0.304	0.405	0.312	0.323	0.320	0.313	0.324	0.322	0.307	0.496	0.323	0.361	0.308	0.318	0.302	0.305	0.303	0.332
LC-TPSSP86	0.164	0.163	0.466	0.463	0.227	0.202	0.158	0.165	0.201	0.174	0.167	0.192	0.358	0.334	0.286	0.207	0.378	0.399	0.469	0.492	0.283
LC-TPSSPBE	0.165	0.158	0.542	0.541	0.291	0.484	0.454	0.373	0.484	0.452	0.370	0.510	0.233	0.421	0.268	0.480	0.352	0.532	0.575	0.597	0.414
LC-TPSSPKZB	0.170	0.167	0.544	0.544	0.303	0.486	0.458	0.378	0.508	0.457	0.375	0.481	0.222	0.427	0.272	0.485	0.376	0.532	0.577	0.595	0.418
LC-TPSSPL	0.215	0.217	0.496	0.496	0.301	0.457	0.392	0.353	0.457	0.389	0.350	0.459	0.269	0.464	0.267	0.485	0.331	0.507	0.498	0.532	0.397
LC-TPSSPW91	0.148	0.131	0.564	0.563	0.281	0.474	0.374	0.329	0.481	0.379	0.327	0.475	0.232	0.404	0.255	0.421	0.339	0.523	0.568	0.585	0.393
LC-TPSSRevTPS	0.112	0.109	0.488	0.486	0.235	0.448	0.304	0.242	0.474	0.304	0.218	0.444	0.231	0.382	0.229	0.391	0.312	0.498	0.516	0.549	0.349
LC-TPSSTPSS	0.163	0.159	0.542	0.542	0.292	0.487	0.459	0.378	0.505	0.458	0.375	0.506	0.221	0.429	0.272	0.475	0.376	0.531	0.576	0.570	0.416
LC-TPSSVP86	0.163	0.161	0.457	0.457	0.225	0.207	0.149	0.160	0.206	0.150	0.163	0.211	0.357	0.335	0.286	0.205	0.376	0.397	0.462	0.498	0.281
LC-TPSSVWN	0.176	0.185	0.385	0.385	0.264	0.351	0.292	0.263	0.350	0.291	0.262	0.357	0.271	0.369	0.236	0.344	0.268	0.399	0.386	0.415	0.312
LC-TPSSVWN5	0.218	0.220	0.499	0.499	0.301	0.460	0.401	0.356	0.458	0.400	0.356	0.463	0.265	0.469	0.269	0.489	0.342	0.523	0.503	0.575	0.403
LC-XaB95	0.071	0.071	0.100	0.100	0.174	0.086	0.086	0.104	0.086	0.086	0.085	0.086	0.234	0.108	0.111	0.086	0.098	0.098	0.101	0.102	0.104
LC-XaBRC	0.116	0.120	0.368	0.368	0.260	0.310	0.235	0.216	0.307	0.233	0.215	0.313	0.305	0.294	0.229	0.256	0.238	0.382	0.368	0.432	0.278
LC-XaKCIS	0.075	0.083	0.181	0.181	0.220	0.171	0.125	0.104	0.170	0.125	0.103	0.177	0.282	0.143	0.173	0.114	0.130	0.175	0.177	0.199	0.155
LC-XaLYP	0.361	0.361	0.318	0.318	0.417	0.322	0.337	0.335	0.324	0.339	0.337	0.316	0.508	0.336	0.374	0.324	0.333	0.318	0.319	0.319	0.346
LC-XaP86	0.182	0.184	0.479	0.479	0.248	0.208	0.167	0.214	0.208	0.186	0.223	0.199	0.373	0.358	0.304	0.225	0.390	0.410	0.450	0.494	0.299
LC-XaPBE	0.141	0.137	0.567	0.568	0.281	0.480	0.404	0.339	0.500	0.401	0.340	0.478	0.237	0.415	0.248	0.455	0.344	0.560	0.553	0.585	0.402
LC-XaPKZB	0.146	0.142	0.569	0.569	0.282	0.478	0.455	0.345	0.478	0.440	0.345	0.478	0.240	0.422	0.267	0.460	0.346	0.563	0.554	0.587	0.408
LC-XaPL	0.204	0.206	0.489	0.489	0.281	0.464	0.381	0.335	0.463	0.380	0.334	0.461	0.273	0.445	0.264	0.439	0.328	0.501	0.497	0.518	0.387
LC-XaPW91	0.124	0.120	0.546	0.543	0.241	0.471	0.342	0.319	0.471	0.354	0.289	0.471	0.236	0.430	0.221	0.371	0.336	0.533	0.526	0.579	0.376
LC-XaRevTPSS	0.097	0.094	0.473	0.472	0.225	0.439	0.349	0.285	0.459	0.314	0.229	0.445	0.234	0.393	0.215	0.309	0.308	0.470	0.467	0.549	0.341
LC-XaTPSS	0.145	0.141	0.571	0.571	0.283	0.481	0.455	0.353	0.479	0.456	0.354	0.481	0.241	0.426	0.274	0.460	0.345	0.562	0.549	0.587	0.411
BB1K	0.176	0.176	0.179	0.179	0.149	0.237	0.235	0.234	0.317	0.235	0.234	0.237	0.149	0.436	0.175	0.239	0.179	0.180	0.180	0.180	0.215
mPW1K	0.388	0.379	0.521	0.521	0.339	0.494	0.441	0.386	0.493	0.440	0.385	0.490	0.274	0.418	0.332	0.533	0.450	0.549	0.532	0.540	0.445
mPW1B95	0.108	0.108	0.128	0.128	0.163	0.131	0.115	0.114	0.131	0.115	0.114	0.131	0.149	0.136	0.129	0.118	0.126	0.145	0.128	0.129	0.127
mPWB1K	0.113	0.113	0.108	0.108	0.143	0.094	0.097	0.095	0.094	0.097	0.095	0.118	0.133	0.094	0.110	0.105	0.106	0.108	0.108	0.109	0.107
mPW1KCIS	0.257	0.260	0.401	0.401	0.293	0.373	0.347	0.326	0.373	0.346	0.326	0.377	0.257	0.360	0.235	0.412	0.301	0.424	0.398	0.419	0.344
mPWKCIS1K	0.244	0.246	0.367	0.367	0.262	0.320	0.282	0.261	0.318	0.281	0.260	0.324	0.232	0.313	0.226	0.357	0.293	0.386	0.367	0.374	0.304
TPSS1KCIS	0.177	0.180	0.211	0.211	0.253	0.207	0.193	0.178	0.207	0.193	0.177	0.213	0.267	0.209	0.187	0.230	0.193	0.226	0.211	0.210	0.207
PBE1KCIS	0.151	0.154	0.117	0.117	0.250	0.119	0.116	0.122	0.118	0.116	0.122	0.127	0.296	0.108	0.199	0.116	0.133	0.117	0.119	0.117	0.142
mPWLYP1M	0.249	0.251	0.212	0.212	0.349	0.225	0.228	0.230	0.226	0.228	0.230	0.230	0.379	0.218	0.297	0.214	0.246	0.207	0.215	0.210	0.243
PBE1W	0.156	0.160	0.156	0.155	0.266	0.153	0.142	0.135	0.152	0.141	0.133	0.162	0.306	0.148	0.212	0.161	0.156	0.161	0.155	0.155	0.168
mPWLYP1W	0.230	0.232	0.201	0.201	0.346	0.197	0.203	0.210	0.197	0.204	0.210	0.213	0.370	0.188	0.284	0.210	0.230	0.209	0.203	0.204	0.227
PBELYP1W	0.247	0.249	0.217	0.217	0.325	0.217	0.221	0.224	0.217	0.221	0.224	0.222	0.368	0.222	0.284	0.212	0.243	0.216	0.220	0.218	0.239
TPSSLYP1W	0.240	0.241	0.210	0.210	0.330	0.219	0.223	0.225	0.219	0.222	0.225	0.225	0.371	0.220	0.289	0.211	0.239	0.206	0.215	0.211	0.238
mPW3LYP	0.235	0.236	0.205	0.205	0.326	0.220	0.223	0.226	0.220	0.224	0.226	0.224	0.363	0.213	0.279	0.206	0.232	0.204	0.208	0.204	0.234
PBEPBE-D2	0.208	0.211	0.158	0.158	0.261	0.147	0.167	0.169	0.148	0.169	0.171	0.147	0.342	0.150	0.229	0.157	0.182	0.161	0.160	0.158	0.183
BLYP-D2	0.211	0.102	0.317	0.317	0.186	0.405	0.392	0.396	0.406	0.429	0.396	0.413	0.268	0.321	0.297	0.405	0.299	0.402	0.319	0.402	0.334
B3LYP-D2	0.170	0.175	0.097	0.097	0.226	0.093	0.112	0.110	0.094	0.114	0.111	0.097	0.323	0.097	0.171	0.091	0.117	0.100	0.100	0.097	0.130
BP86-D2	0.988	0.990	1.385	1.414	0.646	1.149	1.105	1.033	1.145	1.096	1.026	1.283	0.482	1.201	0.691	1.295	1.036	1.316	1.288	1.403	1.099
TPSSTPSS-D2	0.142	0.144	0.101	0.102	0.216	0.111	0.118	0.122	0.111	0.118	0.122	0.118	0.259	0.105	0.173	0.092	0.144	0.098	0.117	0.104	0.131
PBEPBE-D3	0.166	0.169	0.123	0.123	0.254	0.124	0.132	0.140	0.124	0.132	0.140	0.130	0.297	0.113	0.207	0.118	0.160	0.122	0.126	0.123	0.151
BLYP-D3	0.102	0.125	0.193	0.191	0.214	0.383	0.228	0.260	0.383	0.297	0.268	0.392	0.294	0.221	0.143	0.260	0.114	0.211	0.197	0.220	0.235
B3LYP-D3	0.106	0.111	0.066	0.064	0.209	0.068	0.080	0.087	0.069	0.080	0.087	0.076	0.300	0.068	0.154	0.043	0.107	0.06			

B3PW91-D3	0.480	0.479	0.688	0.662	0.319	0.615	0.535	0.478	0.613	0.535	0.477	0.592	0.246	0.562	0.383	0.731	0.514	0.718	0.653	0.759	0.552
BMK-D3	0.873	0.854	1.063	1.063	0.604	0.975	0.857	0.849	0.832	0.855	0.869	0.832	0.450	0.958	0.740	0.966	0.921	0.988	1.019	1.045	0.881
CAM-B3LYP-D3	0.259	0.260	0.193	0.193	0.320	0.203	0.222	0.220	0.205	0.224	0.222	0.191	0.418	0.210	0.275	0.200	0.219	0.196	0.196	0.193	0.231
LC-wPBE-D3	0.049	0.052	0.157	0.157	0.178	0.162	0.129	0.115	0.161	0.128	0.112	0.167	0.242	0.134	0.132	0.140	0.093	0.173	0.155	0.166	0.140
M05-D3	0.235	0.235	0.216	0.216	0.318	0.233	0.235	0.231	0.234	0.237	0.232	0.231	0.404	0.280	0.273	0.207	0.221	0.195	0.205	0.199	0.242
M052X-D3	0.155	0.155	0.148	0.148	0.245	0.172	0.177	0.178	0.172	0.177	0.178	0.167	0.284	0.140	0.202	0.152	0.149	0.145	0.147	0.144	0.172
M06-D3	0.068	0.067	0.172	0.172	0.069	0.136	0.076	0.073	0.136	0.076	0.073	0.137	0.077	0.057	0.053	0.123	0.167	0.172	0.171	0.118	0.110
M06L-D3	0.122	0.122	0.141	0.141	0.145	0.128	0.101	0.098	0.128	0.101	0.074	0.128	0.113	0.083	0.112	0.067	0.136	0.101	0.111	0.128	0.114
M06HF-D3	0.140	0.140	0.146	0.146	0.168	0.148	0.148	0.151	0.148	0.148	0.151	0.148	0.056	0.116	0.148	0.147	0.146	0.211	0.145	0.139	0.145
M062X-D3	0.126	0.127	0.149	0.149	0.238	0.145	0.135	0.149	0.144	0.144	0.149	0.147	0.254	0.041	0.168	0.119	0.155	0.157	0.148	0.155	0.150
PBEPBE-D3BJ	0.150	0.153	0.097	0.097	0.237	0.098	0.110	0.118	0.098	0.111	0.119	0.104	0.292	0.091	0.188	0.090	0.140	0.095	0.104	0.097	0.129
BLYP-D3BJ	0.141	0.115	0.403	0.404	0.284	0.430	0.336	0.313	0.464	0.338	0.312	0.478	0.288	0.358	0.292	0.528	0.219	0.561	0.393	0.540	0.360
B3LYP-D3BJ	0.052	0.062	0.082	0.083	0.170	0.165	0.151	0.150	0.165	0.166	0.154	0.172	0.256	0.131	0.110	0.151	0.079	0.077	0.073	0.164	0.131
BP86-D3BJ	0.893	0.893	1.153	1.152	0.588	0.982	0.944	0.902	0.958	0.936	0.898	1.002	0.536	1.003	0.788	1.103	0.933	1.130	1.163	1.207	0.958
TPSSTPSS-D3BJ	0.121	0.124	0.132	0.132	0.200	0.113	0.108	0.095	0.112	0.108	0.099	0.118	0.230	0.119	0.148	0.135	0.115	0.137	0.130	0.131	0.130
PBE1PBE-D3BJ	0.112	0.115	0.087	0.087	0.206	0.084	0.088	0.102	0.084	0.088	0.102	0.091	0.246	0.074	0.158	0.082	0.104	0.090	0.086	0.087	0.108
BPBE-D3BJ	0.762	0.762	0.987	0.987	0.502	0.880	0.859	0.799	0.880	0.860	0.797	0.888	0.435	0.877	0.654	1.036	0.875	1.120	0.978	1.110	0.852
B3PW91-D3BJ	0.543	0.541	0.788	0.788	0.345	0.610	0.609	0.564	0.639	0.609	0.563	0.646	0.297	0.666	0.452	0.799	0.568	0.828	0.815	0.868	0.627
BMK-D3BJ	0.904	0.905	1.207	1.215	0.848	0.904	0.918	0.887	0.905	0.914	0.887	1.048	0.528	0.851	0.827	1.036	1.125	1.062	1.067	1.147	0.959
CAM-B3LYP-D3B	0.186	0.188	0.132	0.132	0.275	0.148	0.159	0.162	0.148	0.160	0.163	0.150	0.367	0.143	0.226	0.136	0.165	0.133	0.135	0.130	0.172
LC-wPBE-D3BJ	0.079	0.078	0.220	0.220	0.162	0.230	0.181	0.172	0.230	0.190	0.177	0.225	0.206	0.227	0.127	0.212	0.131	0.234	0.218	0.262	0.189
B2PLYP	0.218	0.218	0.472	0.471	0.641	0.599	0.432	0.316	0.628	0.486	0.311	1.082	0.287	0.256	0.314	0.280	0.312	0.214	0.338	0.199	0.404
B2PLYP(Full)	0.199	0.202	0.449	0.449	0.633	0.752	0.419	0.269	0.731	0.383	0.264	0.998	0.286	0.241	0.304	0.141	0.302	0.175	0.283	0.122	0.380
B2PLYPD	0.108	0.118	0.065	0.065	0.200	0.115	0.097	0.103	0.101	0.095	0.103	0.174	0.271	0.086	0.139	0.089	0.083	0.099	0.069	0.095	0.114
B2PLYPD(Full)	0.109	0.118	0.065	0.065	0.200	0.115	0.096	0.108	0.098	0.096	0.107	0.174	0.270	0.085	0.138	0.112	0.084	0.105	0.074	0.116	0.117
B2PLYP-D3	0.062	0.071	0.041	0.041	0.208	0.117	0.101	0.101	0.114	0.098	0.099	0.186	0.257	0.077	0.145	0.049	0.083	0.048	0.055	0.045	0.100
B2PLYP-D3(Full)	0.061	0.071	0.037	0.032	0.207	0.120	0.102	0.082	0.117	0.101	0.085	0.185	0.255	0.076	0.131	0.074	0.079	0.055	0.042	0.068	0.099
B2PLYPD3	0.038	0.046	0.053	0.053	0.187	0.183	0.089	0.099	0.155	0.083	0.095	0.267	0.242	0.053	0.127	0.014	0.062	0.008	0.024	0.008	0.094
B2PLYPD3(Full)	0.037	0.045	0.040	0.038	0.186	0.179	0.086	0.085	0.154	0.080	0.083	0.265	0.241	0.051	0.113	0.020	0.046	0.007	0.012	0.010	0.089
mPW2PLYP	0.188	0.191	0.167	0.166	0.291	0.200	0.200	0.203	0.199	0.199	0.203	0.214	0.334	0.191	0.235	0.177	0.184	0.177	0.169	0.175	0.203
mPW2PLYP(Full)	0.187	0.190	0.167	0.166	0.289	0.200	0.199	0.202	0.199	0.198	0.202	0.214	0.333	0.191	0.232	0.178	0.183	0.177	0.168	0.173	0.202
mPW2PLYPD	0.221	0.224	0.202	0.202	0.278	0.210	0.215	0.225	0.210	0.224	0.230	0.214	0.345	0.214	0.246	0.227	0.219	0.233	0.218	0.232	0.230
mPW2PLYPD(Full)	0.226	0.229	0.204	0.206	0.278	0.210	0.220	0.227	0.211	0.229	0.236	0.214	0.347	0.218	0.251	0.241	0.222	0.239	0.223	0.242	0.234
PBE0DH	0.122	0.127	0.161	0.161	0.213	0.149	0.128	0.112	0.145	0.126	0.106	0.208	0.232	0.137	0.138	0.118	0.129	0.134	0.146	0.131	0.146
PBE0DH(Full)	0.117	0.123	0.156	0.155	0.211	0.148	0.124	0.104	0.142	0.121	0.100	0.207	0.231	0.134	0.134	0.100	0.127	0.127	0.139	0.117	0.141
DSDPBEP86	0.018	0.029	0.037	0.035	0.139	0.052	0.036	0.058	0.048	0.038	0.060	0.179	0.182	0.041	0.083	0.028	0.016	0.026	0.013	0.029	0.057
DSDPBEP86(Full)	0.018	0.027	0.029	0.025	0.137	0.050	0.040	0.061	0.040	0.045	0.066	0.163	0.180	0.036	0.078	0.072	0.018	0.041	0.014	0.056	0.060
revDSDPBEP86	0.032	0.039	0.075	0.078	0.150	0.067	0.049	0.055	0.058	0.043	0.055	0.193	0.183	0.056	0.092	0.015	0.025	0.010	0.034	0.017	0.066
revDSDPBEP86(F	0.023	0.035	0.061	0.059	0.144	0.064	0.046	0.060	0.054	0.036	0.060	0.179	0.182	0.047	0.082	0.049	0.018	0.019	0.022	0.033	0.064
PBEQIDH	0.130	0.128	0.175	0.172	0.212	0.184	0.135	0.107	0.173	0.122	0.095	0.329	0.190	0.127	0.128	0.084	0.138	0.103	0.141	0.098	0.149
PBEQIDH(Full)	0.117	0.115	0.160	0.158	0.209	0.177	0.128	0.091	0.164	0.110	0.081	0.316	0.192	0.121	0.118	0.058	0.131	0.088	0.123	0.058	0.136
MP2	0.219	0.188	0.203	0.198	0.283	0.273	0.150	0.091	0.241	0.120	0.076	0.636	0.207	0.138	0.178	0.057	0.144	0.061	0.153	0.063	0.184
MP2(Full)	0.182	0.149	0.165	0.158	0.271	0.253	0.130	0.067	0.224	0.106	0.055	0.599	0.201	0.117	0.133	0.079	0.123	0.064	0.130	0.096	0.165
MP3	0.274	0.243	0.249	0.250	0.319	0.277	0.182	0.117	0.244	0.153	0.098	0.601	0.208	0.161	0.229	0.049	0.192	0.034	0.164	0.030	0.204
MP3(Full)	0.240	0.206	0.207	0.206	0.309	0.261	0.164	0.093	0.230	0.139	0.079	0.571	0.204	0.137	0.180	0.043	0.165	0.022	0.121	0.046	0.181
CISD	0.325	0.295	0.347	0.356	0.336	0.328	0.221	0.153	0.312	0.202	0.137	0.594	0.222	0.193	0.276	0.098	0.268	0.104	0.260	0.101	0.256
CISD(Full)	0.289	0.261	0.312	0.317	0.338	0.334	0.217	0.131	0.317	0.195	0.119	0.574	0.209	0.174	0.226	0.042	0.241	0.076	0.224	0.047	0.232
CCSD	0.282	0.253	0.272	0.270	0.317	0.292	0.188	0.121	0.271	0.162	0.102	0.599	0.220	0.163	0.242	0.061	0.209	0.052	0.190	0.044	0.216
CCSD(Full)	0.245	0.214	0.228	0.225	0.309	0.274	0.169	0.092	0.254	0.145	0.078	0.558	0.213	0.139	0.187	0.038	0.178	0.025	0.142	0.033	0.187
QCISD	0.280	0.251	0.272	0.270	0.316	0.293	0.189	0.120	0.266	0.162	0.101	0.601	0.219	0.160	0.241	0.060	0.206	0.050	0.189	0.043 </	

QCISD(T)	0.249	0.215	0.198	0.172	0.298	0.260	0.154	0.098	0.226	0.125	0.072	0.565	0.214	0.115	0.205	0.030	0.133	0.023	0.105	0.028	0.174
QCISD(T)(Full)	0.199	0.166	0.163	0.168	0.278	0.235	0.110	0.077	0.194	0.078	0.050	0.530	0.210	0.098	0.141	0.061	0.115	0.026	0.084	0.053	0.152
BD(T)	0.207	0.186	0.187	0.150	0.251	0.224	0.121	0.048	0.187	0.067	0.038	0.508	0.100	0.063	0.157	0.008	0.077	0.013	0.098	0.016	0.135
BD(T)(Full)	0.180	0.111	0.182	0.178	0.310	0.235	0.129	0.066	0.271	0.104	0.043	0.556	0.085	0.041	0.091	0.038	0.091	0.012	0.074	0.027	0.141
MP5	0.257	0.224	0.192	0.199	0.299	0.257	0.154	0.099	0.225	0.127	0.076	0.569	0.213	0.120	0.209	0.032	0.141	0.027			0.190
MP5(Full)	0.213	0.177	0.180	0.176	0.276	0.231	0.441	0.063	0.201	0.078	0.049	0.498	0.208	0.101	0.150	0.058	0.138	0.030			0.182
Ave	0.378	0.377	0.538	0.538	0.419	0.486	0.454	0.428	0.484	0.451	0.427	0.502	0.408	0.480	0.405	0.495	0.443	0.538	0.532	0.558	0.467
PM7	0.528																				
PM6	0.567																				
Dreiding	0.000																				
UFF	0.094																				

^a A blank means that this method/basis set has not been used to calculate these 11-RG-Mols, so cc-pV5Z and aug-cc-pV5Z have not been calculated for MP5 and MP5(Full). For instance, the consumed memories of even MP5(Full)/aug-cc-pVTZ calculating ⁸⁴Kr₂, MP5(Full)/6-311++G(3df,3pd) calculating ⁸⁴Kr₂, MP5(Full)/cc-pVQZ calculating ⁸⁴Kr₂, MP5(Full)/Def2QZVP calculating ⁴⁰Ar⁸⁴Kr, MP5(Full)/aug-cc-pVQZ calculating ²⁰Ne⁸⁴Kr, MP5(Full)/aug-cc-pVQZ calculating ⁴⁰Ar⁸⁴Kr, MP3/UGBS1V++ calculating ²⁰Ne⁸⁴Kr, and MP3/UGBS1V++ calculating ⁸⁴Kr₂ are respectively as large as ~730 GB, ~1.1 TB, ~1.4 TB, ~920 GB, ~1.2 TB, ~1.9 TB, ~1.2 TB, and ~3.1 TB (the latter two are used in Table S5), so some calculations are now impossible.

^b The definition of 14 special methods are as follows: (1) BB1K/6-311++G**: BB95/6-311++G** lop(3/76=0580004200); (2) mPW1K/6-311++G**: mPWPW91/6-311++G** lop(3/76=0572004280); (3) mPW1B95/6-311++G**: mPWB95/6-311++G** lop(3/76=0690003100); (4) mPWB1K/6-311++G**: mPWB95/6-311++G** lop(3/76=0560004400); (5) mPW1KCIS/6-311++G**: mPWKCIS/6-311++G** lop(3/76=0850001500); (6) mPWKCIS1K/6-311++G**: mPWKCIS/6-311++G** lop(3/76=0590004100); (7) TPSS1KCIS/6-311++G**: TPSSKCIS/6-311++G** lop(3/76=0870001300); (8) PBE1KCIS/6-311++G**: PBEKCIS/6-311++G** lop(3/76=0780002200); (9) mPWLYP1M/6-311++G**: mPWLYP/6-311++G** lop(3/76=0950000500); (10) PBE1W/6-311++G**: PBE1W/6-311++G** lop(3/78=0740010000); (11) mPWLYP1W/6-311++G**: mPWLYP/6-311++G** lop(3/78=0880010000); (12) PBE1W/6-311++G**: PBE1W/6-311++G** lop(3/78=0740010000); (13) TPSSLYP1W/6-311++G**: TPSSLYP1W/6-311++G** lop(3/78=0740010000); (14) mPW3LYP/6-311++G**: mPWLYP/6-311++G** lop(3/76=1000002000) lop(3/77=0720008000) lop(3/78=0810010000).

^c B2PLYP-D3 is different from B2PLYPD3 in this work, i.e., B2PLYPD3 is D3BJ dispersion corrected by definition (or by adding keyword "EmpiricalDispersion=GD3BJ" or "EM=GD3BJ" to B2PLYP), while B2PLYP-D3 is defined by adding keyword "EM=GD3" to B2PLYP or is D3 dispersion corrected.

^d The definition of e.g. revDSDPBEP86/6-311++G** is: DSDPBEP86/6-311++G** EM=GD3BJ lop(3/125=0079905785, 3/78=0429604296, 3/76=0310006900, 3/74=1004, 3/174=0437700, 3/175=-1, 3/176=0, 3/177=-1, 3/178=5500000).

^e A green or blue value means, respectively, that this MAD is smaller than 0.020 Å (with the one less than 0.010 Å slightly different) or is between 0.020~0.100 Å, while a black one means that this value is larger than 0.100 Å in which the largest one is shown with red.

^f For some molecules optimized by post-MP3 methods, Gaussian 09 [S1] have to be used, especially for BD(T) and BD(T)(Full), because their successful optimization by Gaussian 16 cannot be attained even after 30 times. Moreover, for some molecules, both Gaussian 16 and Gaussian 09 cannot optimize them. For example, for the several method/basis sets listed in the text, i.e., BD(T)/aug-cc-pVTZ, BD(T)/aug-cc-pVQZ, BD(T)/aug-cc-pV5Z, BD(T)(Full)/aug-cc-pVQZ, MP4/aug-cc-pVQZ, and CCSD(T)/aug-cc-pVQZ, their numbers of the 11-RG-Mols successfully optimized only by Gaussian 09 are respectively 6 (i.e., ⁸⁴Kr₂, HeAr, HeKr, ²⁰Ne⁴⁰Ar, ²²Ne³⁶Ar, and ²⁰Ne⁸⁴Kr), 5 (i.e., Ne₂, ⁸⁴Kr₂, ²⁰Ne⁴⁰Ar, ²²Ne³⁶Ar, and ²⁰Ne⁸⁴Kr), 5 (i.e., ⁸⁴Kr₂, HeNe, ²⁰Ne⁴⁰Ar, ²²Ne³⁶Ar, and ²⁰Ne⁸⁴Kr), 3 (i.e., ⁴Kr₂, HeNe, and ²⁰Ne⁸⁴Kr), 0, and 0, in which HeKr cannot be successfully optimized by MP4/aug-cc-pVQZ. Not only HeKr and ²⁰Ne⁸⁴Kr are successfully optimized by CCSD(T)/aug-cc-pV5Z only using Gaussian 09, but also ⁸⁴Kr₂ cannot be successfully optimized by CCSD(T)/aug-cc-pV5 and CCSD(T)(Full)/aug-cc-pV5. Only three molecules

(i.e., He₂, HeNe, and Ne₂) can be calculated by Dreiding, and 4 molecules containing He cannot be optimized by UFF. For the other methods and basis sets, all the 11 molecules are successfully optimized by Gaussian 16 except LC-N12 which has optimized 6 molecules (i.e., the 6 molecules that do not contain Ne).

Table S3. MDs (Å) of 11-RG-Mols calculated by 572 methods and 20 basis sets.

	BS01	BS02	BS03	BS04	BS05	BS06	BS07	BS08	BS09	BS10	BS11	BS12	BS13	BS14	BS15	BS16	BS17	BS18	BS19	BS20	Ave
HF	0.791	0.758	1.309	1.309	0.567	0.914	0.804	0.726	0.913	0.804	0.726	0.855	0.345	0.918	0.665	1.105	1.013	1.259	1.308	1.308	0.920
APFD	-0.094	-0.100	-0.005	-0.005	-0.178	-0.005	-0.045	-0.054	-0.006	-0.047	-0.056	0.006	-0.271	-0.005	-0.127	-0.016	-0.053	-0.003	-0.012	-0.007	-0.054
wB97	-0.147	-0.159	0.337	0.338	-0.220	0.149	0.051	-0.011	0.148	0.081	0.015	0.170	-0.355	0.050	-0.152	0.040	0.131	0.282	0.283	0.350	0.069
wB97X	-0.102	-0.109	0.001	0.001	-0.182	-0.008	-0.041	-0.065	-0.009	-0.043	-0.066	-0.003	-0.286	-0.034	-0.145	-0.066	-0.050	-0.024	-0.007	0.002	-0.062
wB97XD	0.294	0.292	0.381	0.381	0.192	0.355	0.335	0.319	0.355	0.334	0.319	0.357	0.109	0.343	0.251	0.370	0.333	0.393	0.378	0.393	0.324
B98	0.014	0.010	0.087	0.087	-0.079	0.077	0.044	0.036	0.076	0.043	0.035	0.089	-0.177	0.088	-0.033	0.076	0.041	0.085	0.085	0.085	0.039
B971	-0.089	-0.091	-0.028	-0.028	-0.161	-0.031	-0.058	-0.067	-0.033	-0.059	-0.069	-0.021	-0.254	-0.029	-0.120	-0.034	-0.061	-0.034	-0.031	-0.031	-0.066
B972	0.367	0.359	0.495	0.495	0.228	0.471	0.431	0.397	0.471	0.429	0.396	0.484	0.099	0.456	0.299	0.507	0.401	0.514	0.494	0.506	0.415
BHandH	-0.527	-0.528	-0.519	-0.519	-0.555	-0.521	-0.534	-0.532	-0.523	-0.536	-0.534	-0.507	-0.610	-0.540	-0.534	-0.525	-0.523	-0.522	-0.521	-0.522	-0.532
BHandHLYP	0.023	0.022	0.485	0.484	-0.020	0.527	0.111	0.079	0.448	0.096	0.076	0.316	-0.243	0.144	0.178	0.483	0.450	0.539	0.530	0.532	0.263
HFS	-0.359	-0.362	-0.311	-0.311	-0.401	-0.295	-0.324	-0.326	-0.297	-0.327	-0.329	-0.274	-0.498	-0.322	-0.379	-0.320	-0.334	-0.313	-0.316	-0.309	-0.335
HFB	1.977	1.983	2.233	2.234	1.485	2.159	2.160	2.112	2.231	2.185	2.109	2.163	1.504	2.282	1.831	2.262	2.061	2.374	2.287	2.521	2.108
XAlpha	-0.412	-0.414	-0.378	-0.378	-0.446	-0.363	-0.390	-0.391	-0.366	-0.393	-0.394	-0.340	-0.533	-0.391	-0.427	-0.387	-0.393	-0.380	-0.381	-0.378	-0.397
LSDA	-0.504	-0.506	-0.488	-0.488	-0.526	-0.473	-0.497	-0.497	-0.477	-0.500	-0.501	-0.449	-0.595	-0.502	-0.514	-0.496	-0.496	-0.491	-0.491	-0.491	-0.499
LC-LSDA	0.159	0.148	0.396	0.396	0.019	0.354	0.294	0.266	0.355	0.294	0.265	0.355	-0.138	0.355	0.121	0.325	0.267	0.408	0.394	0.419	0.272
HCTH	-0.119	-0.120	-0.078	-0.078	-0.182	-0.083	-0.092	-0.094	-0.084	-0.093	-0.095	-0.077	-0.240	-0.057	-0.141	-0.071	-0.100	-0.080	-0.077	-0.080	-0.102
HCTH93	0.853	0.850	1.098	1.099	0.612	1.097	1.080	1.022	1.093	1.083	1.024	1.065	0.479	0.951	0.735	1.179	0.882	1.195	1.184	1.256	0.992
HCTH147	0.114	0.110	0.192	0.192	0.009	0.187	0.163	0.155	0.186	0.162	0.154	0.194	-0.071	0.204	0.070	0.205	0.135	0.198	0.189	0.190	0.147
tHCTH	0.092	0.090	0.135	0.135	-0.004	0.126	0.109	0.102	0.126	0.108	0.102	0.132	-0.089	0.136	0.049	0.150	0.092	0.142	0.130	0.126	0.099
tHCTHhyb	0.205	0.198	0.307	0.307	0.079	0.284	0.253	0.239	0.283	0.251	0.238	0.300	-0.014	0.291	0.143	0.315	0.228	0.309	0.296	0.300	0.241
VSXC	-0.176	-0.176	-0.132	-0.132	-0.147	-0.139	-0.177	-0.178	-0.140	-0.178	-0.179	-0.137	-0.049	-0.174	-0.202	-0.165	-0.138	-0.159	-0.134	-0.159	-0.153
BMK	1.669	1.667	1.810	1.881	1.411	1.494	1.497	1.419	1.515	1.458	1.447	1.536	1.097	1.682	1.676	1.605	1.746	1.719	1.866	1.969	1.608
TPSSh	0.189	0.187	0.271	0.270	0.067	0.261	0.236	0.225	0.259	0.235	0.225	0.269	-0.047	0.269	0.137	0.299	0.211	0.304	0.267	0.270	0.220
APF	0.507	0.470	0.835	0.835	0.360	0.797	0.699	0.606	0.799	0.725	0.602	0.800	0.190	0.738	0.417	0.907	0.702	0.908	0.846	0.898	0.682
OAPF	0.103	0.097	0.243	0.245	-0.002	0.236	0.170	0.154	0.235	0.168	0.151	0.247	-0.146	0.242	0.061	0.254	0.173	0.247	0.241	0.244	0.168
GVb(0)	0.768	0.768	1.287	1.287	0.574	0.923	0.792	0.718	0.923	0.792	0.717	0.865	0.335	0.897	0.664	1.090	1.016	1.247	1.285	1.276	0.911
B97D	0.059	0.055	0.147	0.147	-0.041	0.163	0.139	0.132	0.162	0.138	0.131	0.173	-0.119	0.158	0.015	0.174	0.078	0.159	0.142	0.137	0.108
B97D3	0.114	0.109	0.199	0.200	0.000	0.209	0.172	0.162	0.208	0.172	0.161	0.226	-0.078	0.210	0.061	0.224	0.138	0.213	0.196	0.198	0.155
B3LYP	0.982	1.057	1.864	1.910	0.853	1.416	1.190	1.069	1.380	1.195	1.074	1.349	0.282	1.142	0.981	1.772	1.174	1.910	1.828	1.990	1.321
B3P86	1.725	1.698	2.019	2.020	1.307	1.734	1.661	1.580	1.697	1.656	1.581	1.737	1.363	1.767	1.721	1.861	1.807	2.106	2.034	2.151	1.761
B3PW91	1.676	1.654	2.031	2.010	1.227	1.650	1.611	1.530	1.627	1.611	1.536	1.651	1.359	1.588	1.587	1.826	1.749	2.059	1.966	2.077	1.701
X3LYP	-0.005	-0.010	0.107	0.107	-0.075	0.104	0.067	0.052	0.111	0.066	0.050	0.138	-0.252	0.101	-0.025	0.121	0.054	0.097	0.105	0.108	0.051
O3LYP	0.236	0.231	0.381	0.381	0.107	0.380	0.355	0.340	0.380	0.357	0.340	0.382	-0.039	0.332	0.185	0.432	0.292	0.399	0.391	0.392	0.313
B1LYP	1.142	0.975	1.803	1.828	0.823	1.444	1.186	1.132	1.472	1.211	1.146	1.439	0.407	1.255	1.030	1.724	1.274	2.103	1.741	2.047	1.359
B1B95	0.207	0.207	0.273	0.273	0.204	0.406	0.362	0.297	0.406	0.362	0.297	0.427	0.184	0.230	0.174	0.444	0.246	0.276	0.241	0.311	0.291
OmPW1LYP	-0.175	-0.176	-0.117	-0.117	-0.244	-0.126	-0.145	-0.146	-0.127	-0.146	-0.147	-0.114	-0.355	-0.125	-0.199	-0.117	-0.141	-0.115	-0.117	-0.115	-0.153
LG1LYP	-0.316	-0.316	-0.283	-0.283	-0.363	-0.282	-0.298	-0.297	-0.283	-0.300	-0.299	-0.270	-0.444	-0.284	-0.331	-0.284	-0.295	-0.286	-0.284	-0.284	-0.304
mPW1LYP	-0.151	-0.152	-0.087	-0.087	-0.225	-0.098	-0.119	-0.121	-0.099	-0.121	-0.122	-0.086	-0.341	-0.095	-0.178	-0.088	-0.114	-0.085	-0.087	-0.084	-0.127
mPW1PW91	0.376	0.369	0.511	0.511	0.223	0.505	0.461	0.405	0.504	0.459	0.404	0.501	0.056	0.440	0.295	0.540	0.420	0.532	0.512	0.523	0.427
mPW1PBE	0.385	0.377	0.519	0.519	0.232	0.512	0.468	0.425	0.509	0.467	0.427	0.511	0.066	0.450	0.303	0.550	0.431	0.542	0.517	0.533	0.437
mPW3PBE	0.310	0.301	0.461	0.461	0.168	0.439	0.391	0.363	0.439	0.390	0.362	0.444	0.011	0.398	0.245	0.475	0.353	0.486	0.458	0.477	0.372
PBE1PBE	0.026	0.021	0.114	0.114	-0.074	0.106	0.062	0.050	0.099	0.060	0.048	0.117	-0.176	0.108	-0.021	0.100	0.063	0.112	0.109	0.112	0.057
PBEh1PBE	0.018	0.013	0.104	0.104	-0.079	0.086	0.053	0.041	0.085	0.052	0.038	0.099	-0.181	0.104	-0.027	0.092	0.054	0.098	0.101	0.102	0.048
HSEh1PBE	0.003	0.000	0.086	0.086	-0.088	0.072	0.037	0.024	0.071	0.036	0.022	0.083	-0.188	0.083	-0.038	0.071	0.040	0.083	0.079	0.083	0.032
OHSE1PBE	0.004	0.000	0.090	0.090	-0.088	0.073	0.038	0.024	0.071	0.036	0.023	0.083	-0.189	0.083	-0.037	0.071	0.042	0.083	0.083	0.086	0.033
OHSE2PBE	-0.018	-0.021	0.054	0.054	-0.104	0.041	0.006	-0.001	0.040	0.005	-0.003	0.053	-0.198	0.056	-0.056	0.045	0.009	0.048	0.051	0.050	0.006
HISSbPBE	0.021	0.017	0.095	0.095	-0.081	0.081	0.046	0.034	0.080	0.045	0.033	0.090	-0.183	0.080	-0.031	0.073	0.054	0.088	0.091	0.090	0.041
M06	0.051	0.051	0.138	0.138	0.009	0.059	0.056	0.056	0.059	0.056	0.055	0.060	-0.030	0.040	0.036	0.058	0.160	0.166	0.137	0.150	0.075
M06L	0.104	0.104	0.131	0.131	0.049	0.103	0.076	0.049	0.103	0.076	0.049	0.105	-0.053	0.067	0.088	0.048	0.129	0.087	0.102	0.064	0.081
M06HF	0.111	0.111	0.123	0.123	0.072	0.122	0.118	0.115	0.122	0.118	0.115	0.123	-0.028	0.090	0.103	0.120	0.120	0.125	0.120	0.090	0.106
M062X	0.055	0.054	0.126	0.126	-0.040	0.088	0.070	0.065	0.088	0.069	0.065	0.091	-0.256	-0.029	0.011	0.084	0.100	0.127	0.126	0.151	0.058
M05	-0.193	-0.196	-0.162	-0.162	-0.276	-0.181	-0.191	-0.188	-0.183	-0.192	-0.189	-0.172	-0.387	-0.247	-0.220	-0.150	-0.173	-0.154	-0.158	-0.152	-0.196
M052X	-0.123	-0.123	-0.092	-0.092	-0.203	-0.122	-0.133	-0.133	-0.123	-0.134	-0.134	-0.116	-0.285	-0.116	-0.164	-0.118	-0.096	-0.090	-0.093	-0.094	-0.129

PW6B95	0.026	0.026	0.063	0.063	-0.128	0.057	0.055	0.042	0.057	0.055	0.042	0.085	-0.177	0.071	-0.026	0.060	0.048	0.062	0.063	0.064	0.030
PW6B95D3	-0.017	-0.017	0.031	0.031	-0.160	0.024	0.022	0.010	0.024	0.022	0.010	0.026	-0.182	0.039	-0.059	0.027	0.016	0.031	0.031	0.032	-0.003
M08HX	-0.106	-0.127	0.033	0.033	-0.208	-0.058	-0.067	-0.068	-0.059	-0.068	-0.069	-0.051	-0.332	-0.204	-0.140	-0.099	-0.039	0.038	0.038	0.101	-0.073
M11	0.087	0.087	0.153	0.153	-0.058	0.126	0.122	0.118	0.126	0.122	0.118	0.128	-0.229	0.064	0.001	0.095	0.138	0.144	0.153	0.159	0.090
M11L	0.699	0.731	0.970	0.970	0.623	0.801	0.773	0.589	0.799	0.773	0.589	0.804	0.402	0.583	0.587	0.799	0.870	1.025	0.949	1.049	0.769
SOGGA11	-0.377	-0.377	-0.310	-0.310	-0.171	-0.333	-0.337	-0.343	-0.333	-0.337	-0.343	-0.329	0.458	-0.277	-0.349	-0.343	-0.336	-0.351	-0.315	-0.335	-0.287
SOGGA11X	0.879	0.868	1.053	1.052	0.726	0.938	0.911	0.909	0.929	0.911	0.909	0.953	0.316	0.756	0.786	1.024	0.927	1.018	1.029	1.051	0.897
N12	0.945	0.910	1.556	1.563	0.548	1.297	1.285	1.233	1.344	1.320	1.206	1.357	0.251	1.288	0.717	1.474	1.072	1.596	1.487	1.614	1.203
N12SX	0.599	0.602	1.548	1.563	0.627	1.282	0.962	0.875	1.287	0.971	0.914	1.288	0.012	0.829	0.574	1.230	0.968	1.621	1.574	1.733	1.053
MN12SX	0.285	0.285	0.798	0.798	0.191	0.445	0.404	0.360	0.446	0.403	0.340	0.449	-0.153	0.280	0.122	0.320	0.617	0.915	0.764	0.893	0.448
MN12L	0.792	0.731	1.051	1.051	0.611	0.844	0.815	0.769	0.845	0.815	0.769	0.813	0.040	0.452	0.609	0.816	0.874	1.157	0.955	1.259	0.803
MN15	-0.079	-0.083	-0.016	-0.016	-0.130	-0.016	-0.031	-0.041	-0.017	-0.032	-0.041	-0.001	-0.186	-0.014	-0.124	-0.044	-0.073	-0.031	-0.022	-0.028	-0.051
MN15L	-0.005	-0.015	0.018	0.018	-0.077	0.008	0.002	-0.001	0.008	0.001	-0.010	0.030	-0.101	-0.012	-0.077	-0.008	0.008	0.011	0.018	0.015	-0.008
LC-HFS	0.468	0.457	1.062	1.062	0.307	1.002	0.941	0.861	1.001	0.940	0.852	1.008	0.036	0.910	0.417	1.058	0.722	1.184	1.080	1.200	0.828
LC-HFB	0.470	0.458	1.073	1.073	0.305	1.017	0.946	0.850	1.016	0.940	0.860	0.987	0.036	0.952	0.417	1.125	0.725	1.161	1.070	1.281	0.838
LC-XAlpha	0.472	0.460	1.047	1.047	0.299	0.981	0.923	0.814	1.004	0.929	0.813	0.945	0.034	0.916	0.421	1.094	0.714	1.093	1.048	1.200	0.813
LC-M06L	-0.722	-0.723	-0.712	-0.712	-0.734	-0.712	-0.722	-0.723	-0.713	-0.723	-0.724	-0.703	-0.673	-0.712	-0.721	-0.718	-0.718	-0.719	-0.716	-0.718	-0.716
LC-M11L	0.699	0.731	0.971	0.971	0.623	0.801	0.773	0.589	0.799	0.773	0.589	0.804	0.402	0.583	0.587	0.799	0.870	1.025	0.948	1.051	0.769
LC-N12	1.735	1.735	2.143	2.145	1.811	1.828	1.812	1.787	1.829	1.806	1.785	1.829	1.343	1.779	1.827	1.792	2.001	2.170	2.071	2.139	1.868
LC-B97D	-0.658	-0.658	-0.651	-0.651	-0.672	-0.648	-0.652	-0.651	-0.648	-0.653	-0.652	-0.641	-0.705	-0.648	-0.659	-0.651	-0.653	-0.651	-0.651	-0.651	-0.655
LC-B97D3	-0.705	-0.706	-0.698	-0.698	-0.717	-0.693	-0.698	-0.698	-0.694	-0.699	-0.699	-0.685	-0.750	-0.695	-0.705	-0.698	-0.700	-0.699	-0.699	-0.698	-0.702
LC-wPBE	0.248	0.240	0.631	0.629	0.117	0.581	0.524	0.510	0.581	0.519	0.510	0.572	-0.073	0.531	0.210	0.537	0.406	0.679	0.639	0.723	0.466
LC-wHPBE	0.244	0.238	0.671	0.669	0.117	0.576	0.521	0.461	0.576	0.521	0.463	0.553	-0.073	0.559	0.208	0.555	0.405	0.675	0.631	0.718	0.464
CAM-B3LYP	-0.096	-0.098	0.033	0.033	-0.174	0.024	-0.024	-0.029	0.020	-0.027	-0.031	0.036	-0.327	-0.007	-0.114	0.015	-0.017	0.033	0.027	0.035	-0.034
LC-HCTH	-0.558	-0.558	-0.541	-0.541	-0.579	-0.538	-0.541	-0.540	-0.538	-0.542	-0.541	-0.532	-0.623	-0.534	-0.559	-0.537	-0.546	-0.540	-0.540	-0.539	-0.548
LC-tHCTH	-0.736	-0.737	-0.730	-0.730	-0.745	-0.723	-0.728	-0.728	-0.724	-0.729	-0.729	-0.716	-0.777	-0.726	-0.735	-0.729	-0.731	-0.730	-0.730	-0.729	-0.732
LC-XaVP86	-0.180	-0.182	0.441	0.442	-0.244	0.174	0.073	-0.002	0.171	0.072	-0.002	0.188	-0.280	0.163	-0.093	0.005	0.184	0.276	0.419	0.479	0.105
LC-XaVWN	0.156	0.147	0.380	0.381	0.016	0.338	0.278	0.251	0.337	0.277	0.251	0.340	-0.142	0.346	0.119	0.311	0.262	0.389	0.380	0.404	0.261
LC-XaVWN5	0.206	0.202	0.496	0.496	0.081	0.468	0.384	0.340	0.466	0.384	0.336	0.467	-0.111	0.447	0.175	0.443	0.334	0.519	0.501	0.536	0.359
BB95	0.549	0.721	0.636	0.636	0.499	0.693	1.040	0.634	0.705	0.598	0.650	0.593	0.335	0.464	0.654	1.383	0.836	0.874	0.657	0.646	0.690
BBRC	1.819	1.815	2.206	2.206	1.368	1.949	1.951	1.964	1.950	1.952	1.954	1.976	1.460	2.034	1.833	2.234	1.885	2.232	2.216	2.336	1.967
BKCIS	1.829	1.827	2.208	2.208	1.399	1.905	1.903	1.897	1.908	1.901	1.896	1.944	1.397	1.964	1.814	2.204	1.917	2.232	2.205	2.288	1.942
BLYP	1.667	1.673	2.216	2.221	1.005	1.885	1.859	1.779	1.835	1.863	1.816	1.895	0.778	1.701	1.065	2.140	1.380	2.222	2.216	2.320	1.777
BP86	1.891	1.891	2.219	2.219	1.692	1.977	2.007	2.001	1.999	2.007	2.005	1.978	1.425	2.099	1.891	2.164	1.936	2.248	2.227	2.390	2.013
BPBE	1.801	1.822	2.169	2.164	1.398	1.906	1.873	1.822	1.875	1.872	1.867	1.938	1.519	1.962	1.845	2.143	1.869	2.232	2.165	2.341	1.929
BPKZB	1.810	1.809	2.136	2.135	1.408	1.929	1.794	1.784	1.916	1.867	1.750	1.916	1.463	1.979	1.798	2.111	1.877	2.230	2.123	2.333	1.908
BPL	1.818	1.811	2.125	2.121	1.365	1.902	1.896	1.826	1.905	1.860	1.786	1.934	1.423	1.802	1.757	2.105	1.866	2.227	2.114	2.205	1.892
BPW91	1.822	1.821	2.149	2.139	1.467	1.946	1.867	1.774	1.943	1.871	1.759	1.946	1.461	1.985	1.794	2.112	1.920	2.223	2.109	2.301	1.921
BRvTPSS	1.815	1.794	2.190	2.201	1.442	1.918	1.883	1.801	1.924	1.915	1.768	1.918	1.490	2.002	1.770	2.133	1.888	2.239	2.238	2.256	1.929
BTPSS	1.814	1.831	2.170	2.166	1.455	1.915	1.942	1.754	1.916	1.914	1.863	1.915	1.428	1.937	1.803	2.165	1.875	2.224	2.141	2.333	1.928
BVP86	1.882	1.883	2.217	2.220	1.684	1.997	2.007	1.995	1.975	2.011	1.971	1.997	1.431	2.110	1.910	2.165	1.982	2.287	2.222	2.389	2.017
BVWN	1.856	1.859	2.106	2.117	1.269	1.758	1.710	1.658	1.757	1.710	1.663	1.765	1.481	1.704	1.764	1.971	1.831	2.179	1.986	2.304	1.822
BVWN5	1.814	1.813	2.116	2.115	1.362	1.896	1.861	1.814	1.937	1.897	1.786	1.939	1.468	1.794	1.770	2.112	1.867	2.221	2.111	2.211	1.895
BRxB95	0.136	0.136	0.168	0.168	0.078	0.199	0.141	0.139	0.198	0.141	0.139	0.200	0.045	0.170	0.135	0.176	0.140	0.144	0.168	0.143	0.148
BRxBRC	1.242	1.172	1.721	1.717	0.844	1.376	1.370	1.319	1.373	1.364	1.291	1.415	0.788	1.305	1.034	1.691	1.194	1.737	1.661	1.890	1.375
BRxKCIS	1.233	1.231	1.603	1.603	0.882	1.382	1.346	1.204	1.383	1.328	1.192	1.386	0.778	1.245	0.984	1.664	1.194	1.745	1.588	1.745	1.336
BRxLYP	-0.073	-0.078	0.045	0.045	-0.141	0.085	0.020	0.009	0.081	0.018	0.006	0.116	-0.285	0.153	-0.098	0.076	-0.011	0.033	0.041	0.038	0.004
BRxP86	1.473	1.439	2.093	2.097	1.104	1.630	1.437	1.366	1.631	1.437	1.393	1.704	0.962	1.587	0.998	1.770	1.684	2.079	2.045	2.133	1.603
BRxPBE	1.531	1.522	1.753	1.754	0.946	1.484	1.403	1.387	1.435	1.372	1.436	1.443	0.931	1.416	1.125	1.796	1.433	1.891	1.822	1.964	1.492
BRxPKZB	1.392	1.445	1.792	1.792	0.990	1.466	1.365	1.380	1.438	1.454	1.406	1.487	0.888	1.419	1.152	1.698	1.476	1.930	1.849	1.935	1.488
BRxPL	1.287	1.248	1.615	1.615	0.888	1.353	1.360	1.241	1.352	1.362	1.246	1.372	0.832	1.213	1.121	1.612	1.260	1.707	1.607	1.733	1.351
BRxPW91	1.476	1.442	1.820	1.820	0.987	1.513	1.414	1.364	1.479	1.402	1.374	1.529	0.883	1.443	1.246	1.652	1.412	1.799	1.786	1.988	1.492
BRxRevTPSS	1.386	1.371	1.935	1.899	0.993	1.480	1.476	1.395	1.447	1.496	1.392	1.485	0.829	1.377	1.160	1.658	1.335	1.882	1.741	1.920	1.483
BRxTPSS	1.446	1.445	1.830	1.829	1.035	1.472	1.454	1.409	1.469	1.408	1.409	1.468	0.883	1.406	1.165	1.734	1.468	1.886	1.823	1.940	1.499
BRxVP86	1.470	1.470	2.048	2.095																	

G96B95	2.807	2.845	3.724	3.666	2.943	3.587	3.567	3.850	3.514	3.279	3.543	3.589	2.391	4.074	2.856	3.707	3.135	3.783	3.731	3.889	3.424
G96BRC	2.822	2.825	3.376	3.383	2.587	3.230	3.340	3.334	3.332	3.334	3.329	3.282	2.176	3.658	2.687	3.416	3.035	3.635	3.267	3.588	3.182
G96KCIS	2.831	2.838	3.369	3.369	2.797	3.349	3.244	3.241	3.349	3.244	3.240	3.341	2.165	3.684	2.802	3.382	3.022	3.511	3.353	3.509	3.182
G96LYP	2.812	2.812	3.437	3.443	2.660	3.376	3.376	3.319	3.376	3.369	3.318	3.369	2.158	3.988	2.702	3.428	3.040	3.527	3.426	3.487	3.221
G96P86	2.764	2.766	3.348	3.357	2.681	3.046	3.048	3.045	3.060	3.054	3.022	3.053	2.176	3.606	2.639	3.215	3.017	3.394	3.251	3.397	3.047
G96PBE	2.766	2.769	3.369	3.362	2.579	3.117	3.115	3.118	3.116	3.119	3.120	3.114	2.148	3.456	2.688	3.372	3.020	3.394	3.249	3.450	3.072
G96PKZB	2.770	2.770	3.367	3.363	2.575	3.110	3.112	3.119	3.118	3.112	3.116	3.112	2.147	3.517	2.684	3.372	3.026	3.390	3.289	3.388	3.073
G96PL	2.766	2.765	3.362	3.359	2.628	3.111	3.101	3.083	3.112	3.102	3.086	3.108	2.147	3.568	2.689	3.381	2.998	3.421	3.257	3.386	3.071
G96PW91	2.768	2.766	3.364	3.366	2.537	3.115	3.115	3.112	3.114	3.110	3.113	3.109	2.151	3.464	2.682	3.369	3.045	3.385	3.247	3.401	3.067
G96RevTPSS	2.771	2.770	3.372	3.364	2.624	3.118	3.107	3.123	3.118	3.111	3.123	3.118	2.149	3.529	2.687	3.388	3.019	3.382	3.246	3.401	3.076
G96TPSS	2.767	2.770	3.371	3.368	2.580	3.105	3.113	3.120	3.115	3.111	3.120	3.113	2.151	3.473	2.685	3.369	3.022	3.389	3.249	3.390	3.069
G96VP86	2.777	2.778	3.353	3.355	2.690	3.064	3.056	3.039	3.059	3.052	3.045	3.053	2.178	3.552	2.636	3.218	3.019	3.383	3.243	3.450	3.050
G96VWN	2.794	2.791	3.255	3.259	2.597	3.069	3.077	3.076	3.070	3.072	3.091	3.071	2.149	3.405	2.679	3.222	2.981	3.308	3.248	3.384	3.030
G96VWN5	2.765	2.764	3.360	3.352	2.624	3.113	3.092	3.082	3.083	3.092	3.084	3.111	2.144	3.549	2.689	3.379	2.992	3.409	3.260	3.388	3.067
LGB95	-0.082	-0.090	0.031	0.031	-0.166	0.019	0.000	-0.026	0.019	-0.001	-0.026	0.022	-0.266	0.037	-0.113	-0.009	-0.051	0.028	0.030	0.033	-0.029
LGBRC	-0.007	-0.015	0.118	0.118	-0.098	0.142	0.096	0.073	0.140	0.083	0.064	0.156	-0.253	0.122	-0.050	0.108	0.047	0.123	0.115	0.125	0.060
LGKCIS	-0.053	-0.060	0.049	0.050	-0.132	0.071	0.028	0.024	0.071	0.025	0.023	0.088	-0.260	0.066	-0.087	0.052	-0.003	0.050	0.043	0.049	0.005
LGLYP	-0.320	-0.322	-0.282	-0.282	-0.371	-0.273	-0.289	-0.290	-0.274	-0.291	-0.292	-0.258	-0.459	-0.271	-0.339	-0.279	-0.298	-0.284	-0.283	-0.283	-0.302
LGP86	-0.220	-0.225	-0.130	-0.130	-0.277	-0.094	-0.171	-0.187	-0.111	-0.174	-0.189	-0.077	-0.330	-0.088	-0.250	-0.160	-0.172	-0.152	-0.144	-0.141	-0.171
LGPBE	0.035	0.016	0.181	0.181	-0.067	0.209	0.140	0.132	0.207	0.138	0.133	0.227	-0.191	0.227	-0.016	0.172	0.085	0.177	0.176	0.177	0.117
LGPKZB	0.045	0.024	0.189	0.189	-0.056	0.217	0.148	0.140	0.216	0.147	0.142	0.234	-0.180	0.233	-0.004	0.187	0.098	0.200	0.179	0.187	0.127
LGPL	0.115	0.107	0.219	0.219	-0.008	0.256	0.209	0.185	0.255	0.208	0.185	0.264	-0.100	0.268	0.050	0.254	0.141	0.231	0.214	0.216	0.174
LGPW91	0.009	-0.003	0.146	0.146	-0.084	0.169	0.108	0.095	0.168	0.107	0.095	0.192	-0.207	0.180	-0.040	0.134	0.065	0.146	0.139	0.140	0.085
LGRRevTPSS	-0.012	-0.024	0.120	0.120	-0.104	0.145	0.072	0.056	0.141	0.075	0.054	0.161	-0.220	0.150	-0.059	0.093	0.040	0.114	0.115	0.118	0.058
LGTPSS	0.042	0.022	0.187	0.187	-0.063	0.219	0.146	0.138	0.214	0.146	0.143	0.236	-0.186	0.232	-0.007	0.185	0.096	0.187	0.175	0.184	0.124
LGV86	-0.217	-0.223	-0.129	-0.128	-0.276	-0.100	-0.161	-0.176	-0.109	-0.169	-0.186	-0.082	-0.329	-0.084	-0.238	-0.157	-0.170	-0.145	-0.137	-0.138	-0.168
LGVWN	0.082	0.068	0.171	0.171	-0.036	0.190	0.144	0.128	0.189	0.140	0.131	0.198	-0.135	0.208	0.023	0.172	0.094	0.174	0.164	0.165	0.122
LGVWN5	0.117	0.109	0.221	0.221	-0.004	0.257	0.210	0.188	0.256	0.210	0.186	0.267	-0.095	0.271	0.053	0.259	0.143	0.233	0.232	0.218	0.178
mPWB95	0.098	0.098	0.159	0.159	-0.041	0.145	0.143	0.143	0.145	0.143	0.143	0.146	-0.125	0.160	0.083	0.155	0.153	0.160	0.158	0.160	0.119
mPWBRC	0.272	0.266	0.458	0.458	0.138	0.452	0.414	0.397	0.451	0.413	0.396	0.452	-0.047	0.416	0.209	0.485	0.341	0.498	0.457	0.495	0.371
mPWKCIS	0.247	0.239	0.410	0.410	0.109	0.398	0.370	0.350	0.397	0.370	0.347	0.402	-0.034	0.383	0.181	0.436	0.300	0.438	0.404	0.433	0.329
mPWLYP	-0.106	-0.108	-0.012	-0.012	-0.189	-0.009	-0.035	-0.039	-0.010	-0.037	-0.041	0.005	-0.329	0.000	-0.139	0.003	-0.060	-0.008	-0.013	-0.007	-0.057
mPWP86	0.178	0.166	0.424	0.424	0.044	0.392	0.300	0.272	0.392	0.298	0.271	0.421	-0.110	0.365	0.111	0.397	0.269	0.441	0.410	0.440	0.295
mPWPBE	0.360	0.354	0.517	0.517	0.212	0.538	0.495	0.470	0.537	0.495	0.467	0.538	0.043	0.476	0.289	0.570	0.401	0.551	0.516	0.540	0.444
mPWPKZB	0.363	0.359	0.520	0.520	0.216	0.537	0.498	0.470	0.536	0.501	0.471	0.537	0.046	0.479	0.292	0.569	0.406	0.554	0.521	0.543	0.447
mPWPL	0.354	0.344	0.484	0.484	0.202	0.502	0.464	0.437	0.502	0.462	0.434	0.504	0.049	0.443	0.287	0.543	0.380	0.518	0.486	0.508	0.419
mPWPW91	0.351	0.343	0.511	0.511	0.205	0.521	0.485	0.455	0.523	0.483	0.454	0.527	0.035	0.470	0.280	0.557	0.392	0.545	0.509	0.532	0.434
mPWRRevTPSS	0.328	0.315	0.491	0.491	0.187	0.497	0.452	0.420	0.496	0.451	0.420	0.501	0.021	0.452	0.261	0.519	0.375	0.519	0.489	0.510	0.410
mPWTPSS	0.362	0.357	0.522	0.522	0.215	0.539	0.500	0.473	0.538	0.500	0.473	0.540	0.045	0.481	0.292	0.574	0.406	0.554	0.520	0.543	0.448
mPWVP86	0.180	0.169	0.427	0.427	0.047	0.398	0.303	0.275	0.393	0.301	0.274	0.426	-0.104	0.369	0.117	0.399	0.272	0.449	0.415	0.448	0.299
mPWVWN	0.323	0.316	0.440	0.440	0.181	0.431	0.406	0.392	0.428	0.407	0.391	0.432	0.027	0.409	0.262	0.476	0.355	0.474	0.439	0.454	0.374
mPWVWN5	0.356	0.345	0.486	0.486	0.203	0.503	0.465	0.439	0.502	0.463	0.437	0.504	0.050	0.444	0.288	0.545	0.381	0.520	0.489	0.509	0.421
OB95	0.304	0.304	0.402	0.402	0.228	0.411	0.410	0.367	0.411	0.410	0.367	0.448	0.102	0.373	0.295	0.432	0.362	0.396	0.390	0.334	0.357
OBRC	0.478	0.474	0.711	0.711	0.329	0.709	0.695	0.672	0.708	0.695	0.673	0.709	0.205	0.633	0.407	0.763	0.566	0.781	0.706	0.752	0.619
OKCIS	0.471	0.466	0.686	0.686	0.321	0.688	0.667	0.647	0.687	0.666	0.647	0.692	0.208	0.609	0.408	0.725	0.547	0.717	0.682	0.724	0.597
OLYP	0.257	0.253	0.444	0.444	0.122	0.445	0.424	0.409	0.445	0.423	0.409	0.446	-0.027	0.383	0.207	0.494	0.333	0.475	0.454	0.460	0.365
OP86	0.559	0.553	0.877	0.875	0.400	0.775	0.768	0.713	0.775	0.768	0.712	0.803	0.295	0.760	0.529	0.942	0.650	0.943	0.803	0.904	0.720
OPBE	0.535	0.531	0.761	0.761	0.379	0.729	0.707	0.684	0.728	0.706	0.684	0.727	0.275	0.668	0.481	0.833	0.599	0.822	0.725	0.822	0.658
OPKZB	0.538	0.534	0.764	0.764	0.382	0.730	0.709	0.687	0.730	0.709	0.687	0.732	0.276	0.672	0.484	0.833	0.603	0.820	0.728	0.831	0.661
OPL	0.523	0.515	0.708	0.708	0.361	0.713	0.692	0.672	0.712	0.692	0.672	0.714	0.246	0.635	0.468	0.755	0.584	0.771	0.705	0.731	0.629
OPW91	0.533	0.529	0.725	0.725	0.377	0.726	0.702	0.682	0.726	0.702	0.681	0.726	0.272	0.661	0.479	0.829	0.599	0.820	0.721	0.806	0.651
ORRevTPSS	0.527	0.522	0.718	0.718	0.368	0.720	0.696	0.675	0.719	0.696	0.675	0.718	0.260	0.654	0.471	0.815	0.591	0.804	0.713	0.798	0.643
OTPSS	0.538	0.534	0.765	0.765	0.382	0.732	0.710	0.688	0.732	0.710	0.688	0.734	0.275	0.673	0.483	0.835	0.603	0.825	0.731	0.826	0.661
OVP86	0.560	0.554	0.878	0.877	0.418	0.776	0.768	0.713	0.776	0.768	0.713	0.804	0.297	0.760	0.530	0.926	0.649	0.944	0.804	0.921	0.722
OVWN	0.499	0.493	0.667	0.667	0.346	0.661	0														

PBEBRC	-0.048	-0.052	0.036	0.036	-0.135	0.041	0.016	0.008	0.039	0.014	0.007	0.051	-0.266	0.031	-0.087	0.042	-0.010	0.044	0.035	0.040	-0.008
PBECICIS	-0.087	-0.090	-0.005	-0.005	-0.164	0.000	-0.017	-0.026	0.000	-0.017	-0.028	0.011	-0.274	0.014	-0.121	-0.002	-0.048	-0.004	-0.006	-0.004	-0.044
PBELYP	-0.307	-0.308	-0.265	-0.265	-0.359	-0.259	-0.274	-0.275	-0.260	-0.276	-0.276	-0.246	-0.448	-0.252	-0.325	-0.260	-0.284	-0.266	-0.265	-0.264	-0.287
PBEP86	-0.220	-0.222	-0.167	-0.167	-0.274	-0.153	-0.182	-0.187	-0.155	-0.184	-0.189	-0.137	-0.366	-0.161	-0.246	-0.174	-0.194	-0.174	-0.172	-0.170	-0.195
PBEPBE	-0.034	-0.039	0.054	0.054	-0.122	0.055	0.024	0.012	0.055	0.023	0.011	0.069	-0.229	0.064	-0.076	0.053	-0.005	0.057	0.050	0.052	0.006
PBEPKZB	-0.026	-0.031	0.060	0.060	-0.115	0.062	0.031	0.017	0.060	0.030	0.016	0.079	-0.222	0.072	-0.069	0.062	0.003	0.063	0.056	0.059	0.013
PBEPL	0.035	0.031	0.106	0.106	-0.062	0.110	0.087	0.078	0.109	0.087	0.078	0.117	-0.171	0.125	-0.009	0.122	0.057	0.114	0.105	0.105	0.067
PBEPW91	-0.049	-0.054	0.039	0.039	-0.133	0.039	0.011	-0.004	0.038	0.010	-0.006	0.052	-0.241	0.045	-0.088	0.038	-0.019	0.038	0.031	0.038	-0.009
PBERevTPSS	-0.060	-0.065	0.021	0.021	-0.141	0.027	-0.003	-0.014	0.026	-0.004	-0.016	0.041	-0.248	0.031	-0.097	0.025	-0.030	0.023	0.016	0.020	-0.021
PBETPSS	-0.027	-0.033	0.059	0.059	-0.117	0.062	0.031	0.018	0.060	0.030	0.016	0.079	-0.224	0.071	-0.070	0.062	0.002	0.062	0.056	0.058	0.013
PBEVP86	-0.218	-0.221	-0.165	-0.165	-0.273	-0.152	-0.179	-0.186	-0.153	-0.182	-0.187	-0.135	-0.365	-0.159	-0.244	-0.173	-0.193	-0.172	-0.170	-0.169	-0.193
PBEVWN	0.005	0.002	0.069	0.069	-0.083	0.072	0.052	0.043	0.071	0.050	0.042	0.080	-0.188	0.088	-0.034	0.084	0.027	0.073	0.067	0.066	0.033
PBEVWN5	0.036	0.032	0.107	0.107	-0.060	0.111	0.088	0.080	0.110	0.088	0.079	0.118	-0.169	0.127	-0.008	0.124	0.059	0.115	0.107	0.106	0.068
PBEhB95	-0.110	-0.111	-0.051	-0.050	-0.213	-0.041	-0.093	-0.075	-0.041	-0.093	-0.076	-0.013	-0.316	-0.021	-0.188	-0.076	-0.105	-0.053	-0.062	-0.048	-0.092
PBEhBRC	-0.049	-0.052	0.029	0.029	-0.136	0.034	0.012	0.005	0.032	0.011	0.004	0.044	-0.264	0.028	-0.088	0.041	-0.013	0.036	0.028	0.033	-0.012
PBEhKCIS	-0.084	-0.089	-0.008	-0.008	-0.164	-0.004	-0.022	-0.030	-0.005	-0.023	-0.032	0.007	-0.271	0.013	-0.120	-0.003	-0.051	-0.007	-0.009	-0.006	-0.046
PBEhLYP	-0.302	-0.303	-0.261	-0.261	-0.355	-0.253	-0.268	-0.268	-0.255	-0.269	-0.270	-0.240	-0.444	-0.246	-0.319	-0.253	-0.279	-0.262	-0.260	-0.260	-0.281
PBEhP86	-0.218	-0.221	-0.165	-0.165	-0.272	-0.154	-0.180	-0.184	-0.155	-0.182	-0.187	-0.138	-0.363	-0.159	-0.242	-0.172	-0.193	-0.173	-0.171	-0.170	-0.193
PBEhPBE	-0.039	-0.044	0.045	0.045	-0.125	0.045	0.016	0.007	0.043	0.014	0.006	0.059	-0.231	0.062	-0.079	0.046	-0.009	0.043	0.043	0.045	0.000
PBEhPKZB	-0.031	-0.036	0.052	0.052	-0.119	0.051	0.024	0.013	0.050	0.022	0.012	0.065	-0.224	0.069	-0.071	0.054	-0.002	0.051	0.049	0.051	0.007
PBEhPL	0.032	0.028	0.097	0.097	-0.061	0.100	0.082	0.073	0.100	0.082	0.072	0.109	-0.175	0.118	-0.009	0.117	0.054	0.103	0.096	0.096	0.061
PBEhPW91	-0.053	-0.058	0.026	0.026	-0.136	0.030	-0.001	-0.009	0.028	-0.003	-0.011	0.045	-0.242	0.043	-0.091	0.031	-0.023	0.026	0.022	0.025	-0.016
PBEhRevTPSS	-0.063	-0.067	0.012	0.012	-0.144	0.016	-0.011	-0.019	0.015	-0.015	-0.021	0.030	-0.247	0.031	-0.099	0.017	-0.033	0.012	0.008	0.011	-0.028
PBEhTPSS	-0.032	-0.037	0.051	0.052	-0.120	0.052	0.023	0.013	0.050	0.021	0.012	0.066	-0.226	0.069	-0.072	0.054	-0.003	0.050	0.049	0.051	0.006
PBEhVP86	-0.216	-0.219	-0.164	-0.164	-0.270	-0.152	-0.178	-0.183	-0.154	-0.180	-0.185	-0.136	-0.361	-0.158	-0.239	-0.170	-0.192	-0.171	-0.169	-0.168	-0.192
PBEhVWN	0.002	-0.001	0.063	0.063	-0.085	0.068	0.045	0.039	0.067	0.044	0.038	0.075	-0.190	0.083	-0.035	0.082	0.024	0.065	0.061	0.060	0.028
PBEhVWN5	0.033	0.030	0.099	0.099	-0.060	0.102	0.083	0.074	0.101	0.083	0.073	0.109	-0.173	0.120	-0.008	0.117	0.055	0.105	0.098	0.097	0.062
PKZBB95	0.040	0.039	0.132	0.132	-0.078	0.136	0.134	0.134	0.136	0.134	0.134	0.106	-0.141	0.122	0.049	0.122	0.101	0.132	0.132	0.133	0.091
PKZBBRC	0.093	0.091	0.215	0.215	-0.012	0.201	0.186	0.181	0.200	0.185	0.180	0.205	-0.136	0.182	0.049	0.222	0.153	0.224	0.219	0.224	0.154
PKZBKICIS	0.079	0.076	0.182	0.182	-0.021	0.169	0.153	0.149	0.168	0.152	0.149	0.176	-0.136	0.164	0.039	0.190	0.126	0.188	0.184	0.187	0.128
PKZBLYP	-0.086	-0.087	-0.012	-0.012	-0.174	-0.025	-0.033	-0.034	-0.026	-0.034	-0.035	-0.018	-0.295	-0.029	-0.118	-0.003	-0.044	-0.009	-0.010	-0.011	-0.055
PKZBP86	0.023	0.020	0.106	0.106	-0.069	0.100	0.083	0.076	0.100	0.082	0.075	0.106	-0.189	0.097	-0.016	0.111	0.059	0.112	0.107	0.113	0.060
PKZBPBE	0.116	0.114	0.225	0.225	0.010	0.210	0.196	0.187	0.210	0.196	0.186	0.215	-0.096	0.208	0.074	0.238	0.165	0.232	0.227	0.232	0.168
PKZBPKZB	0.121	0.118	0.229	0.229	0.014	0.214	0.200	0.191	0.213	0.199	0.190	0.219	-0.094	0.212	0.078	0.242	0.170	0.235	0.231	0.235	0.172
PKZBPL	0.142	0.140	0.249	0.249	0.033	0.235	0.221	0.214	0.234	0.220	0.213	0.239	-0.079	0.239	0.098	0.263	0.191	0.254	0.252	0.252	0.193
PKZBPW91	0.110	0.107	0.215	0.215	0.004	0.202	0.188	0.178	0.202	0.187	0.177	0.208	-0.103	0.200	0.065	0.229	0.158	0.222	0.217	0.222	0.160
PKZBRevTPSS	0.102	0.100	0.204	0.205	-0.003	0.193	0.178	0.169	0.192	0.177	0.168	0.199	-0.108	0.190	0.059	0.216	0.147	0.211	0.207	0.210	0.151
PKZBTPSS	0.120	0.118	0.230	0.230	0.014	0.215	0.201	0.193	0.215	0.200	0.192	0.221	-0.094	0.213	0.078	0.242	0.170	0.237	0.232	0.236	0.173
PKZBVP86	0.023	0.021	0.107	0.107	-0.069	0.101	0.084	0.077	0.100	0.083	0.076	0.108	-0.188	0.098	-0.016	0.112	0.059	0.113	0.108	0.114	0.061
PKZBVWN	0.119	0.117	0.213	0.213	0.012	0.201	0.187	0.180	0.200	0.186	0.179	0.205	-0.089	0.202	0.078	0.227	0.161	0.217	0.216	0.215	0.162
PKZBVWN5	0.143	0.140	0.250	0.250	0.033	0.235	0.221	0.214	0.234	0.221	0.213	0.239	-0.078	0.240	0.098	0.263	0.191	0.255	0.253	0.253	0.193
PW91B95	-0.159	-0.160	-0.104	-0.104	-0.241	-0.114	-0.124	-0.119	-0.115	-0.124	-0.119	-0.070	-0.374	-0.110	-0.195	-0.101	-0.153	-0.097	-0.105	-0.077	-0.138
PW91BRC	-0.083	-0.085	-0.013	-0.013	-0.172	-0.012	-0.029	-0.035	-0.013	-0.031	-0.036	-0.002	-0.296	-0.026	-0.123	-0.004	-0.051	-0.004	-0.011	-0.009	-0.052
PW91KCIS	-0.120	-0.122	-0.045	-0.045	-0.197	-0.043	-0.062	-0.067	-0.044	-0.063	-0.068	-0.032	-0.306	-0.045	-0.153	-0.037	-0.087	-0.039	-0.046	-0.038	-0.083
PW91LYP	-0.313	-0.314	-0.269	-0.269	-0.368	-0.265	-0.279	-0.279	-0.266	-0.281	-0.281	-0.252	-0.463	-0.264	-0.332	-0.264	-0.289	-0.268	-0.269	-0.267	-0.292
PW91P86	-0.236	-0.237	-0.189	-0.189	-0.293	-0.181	-0.202	-0.205	-0.183	-0.204	-0.207	-0.166	-0.391	-0.199	-0.264	-0.192	-0.213	-0.189	-0.191	-0.187	-0.216
PW91PBE	-0.081	-0.083	-0.014	-0.014	-0.164	-0.014	-0.034	-0.040	-0.015	-0.036	-0.042	-0.004	-0.273	-0.022	-0.119	-0.006	-0.054	-0.007	-0.015	-0.011	-0.052
PW91PKZB	-0.073	-0.076	-0.008	-0.007	-0.159	-0.010	-0.028	-0.034	-0.011	-0.029	-0.035	0.001	-0.266	-0.014	-0.112	0.001	-0.048	-0.001	-0.008	-0.004	-0.046
PW91PL	-0.016	-0.018	0.043	0.043	-0.107	0.042	0.028	0.025	0.041	0.027	0.024	0.050	-0.216	0.051	-0.054	0.061	0.008	0.051	0.044	0.044	0.009
PW91PW91	-0.092	-0.095	-0.027	-0.027	-0.174	-0.027	-0.047	-0.053	-0.028	-0.048	-0.054	-0.014	-0.283	-0.035	-0.129	-0.023	-0.066	-0.021	-0.027	-0.026	-0.065
PW91RevTPSS	-0.099	-0.102	-0.035	-0.035	-0.179	-0.035	-0.055	-0.060	-0.035	-0.056	-0.061	-0.023	-0.286	-0.042	-0.135	-0.030	-0.072	-0.032	-0.035	-0.032	-0.072
PW91TPSS	-0.074	-0.077	-0.007	-0.007	-0.159	-0.009	-0.028	-0.034	-0.010	-0.029	-0.035	0.002	-0.267	-0.014	-0.112	0.001	-0.048	-0.001	-0.008	-0.004	-0.046
PW91VP86	-0.234	-0.236	-0.188	-0.188	-0.292	-0.180	-0.201	-0.204	-0.181	-0.203	-0.206	-0.165	-0.390	-0.197	-0.262	-0.190	-0.212	-0.188	-0.190	-0.186	-0.215
PW91VWN	-0.040	-0.042	0.012	0.012	-0.129	0.013	-0.001	-0.007	0.012	-0.003	-0.008	0.021	-0.231	0.024	-0.077	0.030	-0.020	0.017	0.012	0.011	-0.020
PW91VWN5																					

RevTPSSKCIS	0.149	0.143	0.243	0.243	0.028	0.243	0.213	0.198	0.241	0.212	0.198	0.251	-0.087	0.245	0.092	0.265	0.181	0.251	0.240	0.246	0.190
RevTPSSLYP	-0.200	-0.201	-0.147	-0.147	-0.267	-0.148	-0.167	-0.169	-0.150	-0.169	-0.171	-0.135	-0.371	-0.143	-0.229	-0.144	-0.173	-0.147	-0.149	-0.146	-0.179
RevTPSSP86	0.039	0.033	0.145	0.144	-0.081	0.135	0.102	0.088	0.136	0.100	0.087	0.149	-0.175	0.140	-0.029	0.126	0.084	0.141	0.138	0.143	0.082
RevTPSSPBE	0.243	0.224	0.364	0.364	0.099	0.332	0.289	0.278	0.330	0.288	0.278	0.353	-0.003	0.350	0.191	0.379	0.262	0.398	0.352	0.364	0.287
RevTPSSPKZB	0.248	0.229	0.365	0.365	0.103	0.338	0.290	0.281	0.337	0.291	0.281	0.373	0.005	0.354	0.194	0.399	0.265	0.401	0.354	0.369	0.292
RevTPSSPL	0.262	0.257	0.360	0.360	0.125	0.362	0.325	0.312	0.361	0.324	0.310	0.366	0.005	0.351	0.193	0.406	0.277	0.379	0.353	0.360	0.302
RevTPSSPW91	0.231	0.216	0.350	0.350	0.090	0.322	0.281	0.272	0.321	0.281	0.271	0.326	-0.019	0.345	0.182	0.366	0.255	0.384	0.346	0.349	0.276
RevTPSSRevTPSS	0.205	0.201	0.337	0.337	0.077	0.305	0.269	0.260	0.306	0.269	0.258	0.311	-0.033	0.330	0.160	0.348	0.242	0.369	0.331	0.340	0.261
RevTPSSTPSS	0.247	0.227	0.366	0.366	0.101	0.339	0.291	0.282	0.338	0.292	0.281	0.374	0.000	0.354	0.194	0.400	0.264	0.401	0.354	0.369	0.292
RevTPSSVP86	0.041	0.035	0.147	0.148	-0.079	0.138	0.104	0.091	0.137	0.102	0.089	0.152	-0.173	0.144	-0.027	0.128	0.086	0.144	0.142	0.145	0.085
RevTPSSVWN	0.226	0.221	0.295	0.295	0.096	0.312	0.271	0.269	0.310	0.269	0.268	0.317	-0.014	0.305	0.163	0.346	0.237	0.324	0.293	0.293	0.255
RevTPSSVWN5	0.263	0.259	0.362	0.362	0.127	0.363	0.327	0.313	0.362	0.326	0.312	0.367	0.006	0.353	0.194	0.408	0.279	0.387	0.355	0.365	0.305
SB95	-0.642	-0.643	-0.637	-0.637	-0.632	-0.597	-0.615	-0.629	-0.600	-0.619	-0.633	-0.583	-0.707	-0.632	-0.639	-0.645	-0.647	-0.647	-0.643	-0.645	-0.634
SBRC	-0.564	-0.565	-0.554	-0.554	-0.595	-0.543	-0.567	-0.570	-0.546	-0.571	-0.573	-0.517	-0.656	-0.575	-0.576	-0.560	-0.562	-0.557	-0.559	-0.560	-0.566
SKCIS	-0.601	-0.604	-0.594	-0.594	-0.621	-0.577	-0.601	-0.605	-0.580	-0.605	-0.608	-0.551	-0.681	-0.610	-0.611	-0.601	-0.601	-0.597	-0.598	-0.598	-0.602
SLYP	-0.699	-0.701	-0.695	-0.695	-0.714	-0.677	-0.695	-0.697	-0.679	-0.698	-0.700	-0.654	-0.757	-0.694	-0.704	-0.696	-0.699	-0.695	-0.696	-0.696	-0.697
SP86	-0.696	-0.699	-0.700	-0.700	-0.709	-0.681	-0.704	-0.707	-0.684	-0.708	-0.710	-0.653	-0.752	-0.708	-0.702	-0.705	-0.702	-0.702	-0.703	-0.704	-0.701
SPBE	-0.605	-0.608	-0.602	-0.602	-0.627	-0.586	-0.613	-0.616	-0.589	-0.617	-0.621	-0.556	-0.687	-0.625	-0.617	-0.611	-0.608	-0.605	-0.607	-0.607	-0.610
SPKZB	-0.591	-0.594	-0.586	-0.586	-0.613	-0.572	-0.598	-0.601	-0.576	-0.602	-0.605	-0.543	-0.675	-0.610	-0.603	-0.596	-0.592	-0.589	-0.591	-0.591	-0.596
SPL	-0.485	-0.487	-0.465	-0.465	-0.509	-0.450	-0.474	-0.475	-0.454	-0.478	-0.478	-0.427	-0.582	-0.479	-0.495	-0.474	-0.474	-0.468	-0.468	-0.468	-0.478
SPW91	-0.613	-0.615	-0.610	-0.610	-0.633	-0.594	-0.620	-0.624	-0.598	-0.624	-0.628	-0.565	-0.692	-0.631	-0.623	-0.619	-0.616	-0.613	-0.615	-0.615	-0.618
SRevTPSS	-0.604	-0.606	-0.599	-0.599	-0.625	-0.585	-0.610	-0.613	-0.588	-0.614	-0.617	-0.556	-0.683	-0.620	-0.614	-0.608	-0.605	-0.602	-0.603	-0.604	-0.608
STPSS	-0.594	-0.596	-0.589	-0.589	-0.616	-0.575	-0.600	-0.604	-0.578	-0.604	-0.608	-0.545	-0.677	-0.612	-0.605	-0.598	-0.595	-0.592	-0.593	-0.594	-0.598
SVP86	-0.696	-0.699	-0.700	-0.700	-0.709	-0.681	-0.704	-0.707	-0.684	-0.708	-0.711	-0.653	-0.752	-0.708	-0.702	-0.705	-0.702	-0.702	-0.703	-0.704	-0.701
SVWN5	-0.484	-0.486	-0.464	-0.464	-0.508	-0.450	-0.474	-0.475	-0.453	-0.477	-0.478	-0.426	-0.581	-0.479	-0.495	-0.473	-0.474	-0.468	-0.467	-0.467	-0.477
TPSSB95	0.039	0.026	0.098	0.098	-0.096	0.085	0.083	0.082	0.085	0.083	0.081	0.087	-0.173	0.102	0.003	0.088	0.075	0.097	0.098	0.099	0.057
TPSSBRC	0.124	0.119	0.217	0.218	0.011	0.214	0.188	0.179	0.213	0.187	0.179	0.220	-0.118	0.210	0.067	0.236	0.161	0.231	0.213	0.222	0.164
TPSSKCIS	0.109	0.103	0.175	0.175	-0.003	0.183	0.155	0.138	0.181	0.153	0.136	0.188	-0.119	0.191	0.052	0.202	0.124	0.187	0.174	0.174	0.134
TPSSLYP	-0.190	-0.191	-0.141	-0.141	-0.257	-0.140	-0.155	-0.157	-0.141	-0.157	-0.159	-0.128	-0.354	-0.124	-0.216	-0.130	-0.166	-0.140	-0.141	-0.141	-0.168
TPSSP86	-0.013	-0.017	0.078	0.078	-0.106	0.073	0.050	0.027	0.072	0.049	0.027	0.083	-0.191	0.088	-0.063	0.061	0.007	0.067	0.068	0.091	0.026
TPSSPBE	0.172	0.166	0.249	0.249	0.054	0.253	0.229	0.222	0.252	0.228	0.222	0.258	-0.057	0.264	0.121	0.279	0.194	0.275	0.246	0.246	0.206
TPSSPKZB	0.181	0.184	0.252	0.252	0.058	0.256	0.233	0.225	0.255	0.231	0.224	0.264	-0.053	0.267	0.125	0.283	0.199	0.281	0.249	0.250	0.211
TPSSPL	0.197	0.188	0.260	0.260	0.075	0.266	0.238	0.229	0.266	0.238	0.228	0.271	-0.036	0.280	0.142	0.298	0.211	0.275	0.259	0.257	0.220
TPSSPW91	0.162	0.158	0.240	0.240	0.048	0.243	0.221	0.210	0.241	0.222	0.209	0.249	-0.067	0.257	0.110	0.268	0.187	0.249	0.237	0.237	0.196
TPSSRevTPSS	0.149	0.145	0.225	0.226	0.035	0.229	0.196	0.197	0.227	0.195	0.196	0.233	-0.079	0.233	0.096	0.244	0.173	0.235	0.211	0.225	0.180
TPSSTPSS	0.180	0.183	0.252	0.252	0.057	0.257	0.232	0.225	0.256	0.232	0.225	0.264	-0.054	0.268	0.124	0.285	0.199	0.280	0.249	0.250	0.211
TPSSVP86	-0.012	-0.016	0.080	0.080	-0.105	0.075	0.051	0.029	0.073	0.050	0.028	0.085	-0.190	0.090	-0.061	0.063	0.009	0.069	0.070	0.093	0.028
TPSSVWN	0.165	0.160	0.220	0.220	0.045	0.224	0.199	0.189	0.223	0.197	0.189	0.230	-0.052	0.239	0.110	0.255	0.179	0.230	0.219	0.217	0.183
TPSSVWN5	0.198	0.192	0.262	0.262	0.076	0.268	0.239	0.230	0.267	0.239	0.229	0.272	-0.035	0.280	0.143	0.302	0.212	0.278	0.261	0.259	0.222
wPBEhB95	-0.110	-0.111	-0.050	-0.050	-0.213	-0.041	-0.093	-0.075	-0.041	-0.093	-0.076	-0.013	-0.316	-0.021	-0.188	-0.076	-0.105	-0.053	-0.062	-0.048	-0.092
wPBEhBRC	-0.049	-0.052	0.029	0.029	-0.136	0.034	0.012	0.005	0.032	0.011	0.004	0.044	-0.264	0.028	-0.088	0.040	-0.013	0.036	0.028	0.033	-0.012
wPBEhKCIS	-0.084	-0.089	-0.008	-0.008	-0.164	-0.004	-0.022	-0.030	-0.005	-0.023	-0.032	0.007	-0.271	0.013	-0.120	-0.003	-0.051	-0.007	-0.009	-0.006	-0.046
wPBEhLYP	-0.302	-0.303	-0.261	-0.261	-0.355	-0.253	-0.268	-0.268	-0.255	-0.269	-0.270	-0.240	-0.444	-0.246	-0.319	-0.253	-0.279	-0.262	-0.260	-0.259	-0.281
wPBEhP86	-0.218	-0.221	-0.165	-0.165	-0.272	-0.154	-0.180	-0.184	-0.155	-0.182	-0.187	-0.137	-0.363	-0.159	-0.242	-0.172	-0.193	-0.173	-0.171	-0.170	-0.193
wPBEhPBE	-0.039	-0.044	0.045	0.045	-0.125	0.045	0.016	0.007	0.044	0.014	0.006	0.058	-0.231	0.062	-0.079	0.046	-0.009	0.043	0.043	0.044	0.000
wPBEhPKZB	-0.031	-0.036	0.052	0.052	-0.119	0.052	0.023	0.013	0.050	0.022	0.012	0.065	-0.224	0.069	-0.071	0.054	-0.002	0.051	0.049	0.051	0.007
wPBEhPL	0.032	0.028	0.097	0.098	-0.061	0.100	0.082	0.073	0.100	0.081	0.072	0.108	-0.175	0.118	-0.009	0.116	0.054	0.103	0.096	0.097	0.061
wPBEhPW91	-0.054	-0.058	0.026	0.027	-0.136	0.030	-0.001	-0.010	0.029	-0.003	-0.011	0.044	-0.241	0.043	-0.091	0.030	-0.023	0.027	0.022	0.025	-0.016
wPBEhRevTPSS	-0.063	-0.067	0.012	0.012	-0.144	0.016	-0.012	-0.019	0.015	-0.014	-0.021	0.030	-0.247	0.030	-0.099	0.016	-0.033	0.012	0.008	0.011	-0.028
wPBEhTPSS	-0.032	-0.037	0.051	0.051	-0.120	0.052	0.023	0.013	0.051	0.021	0.012	0.065	-0.226	0.069	-0.072	0.053	-0.002	0.049	0.049	0.051	0.006
wPBEhVP86	-0.216	-0.219	-0.164	-0.164	-0.270	-0.152	-0.178	-0.183	-0.154	-0.180	-0.185	-0.136	-0.361	-0.158	-0.239	-0.170	-0.192	-0.171	-0.169	-0.168	-0.192
wPBEhVWN	0.002	-0.001	0.063	0.063	-0.085	0.068	0.045	0.039	0.067	0.044	0.038	0.075	-0.190	0.083	-0.035	0.082	0.024	0.065	0.061	0.060	0.029
wPBEhVWN5	0.033	0.029	0.099	0.099	-0.060	0.102	0.083	0.074	0.101	0.083	0.073	0.110	-0.173	0.119	-0.008	0.117	0.055	0.104	0.098	0.097	0.062
XaB95	-0.679	-0.680	-0.679	-0.679	-0.692	-0.646	-0.683	-0.688	-0.650	-0.686	-0.691	-0.610	-0.755	-0.675	-0.683	-0.684	-0.682	-0.683	-0.682	-0.684	-0.680
XaKCIS	-0																				

XaP86	-0.735	-0.738	-0.744	-0.744	-0.746	-0.724	-0.747	-0.750	-0.728	-0.751	-0.754	-0.695	-0.781	-0.749	-0.740	-0.748	-0.745	-0.746	-0.747	-0.748	-0.743
XaPBE	-0.649	-0.651	-0.654	-0.654	-0.666	-0.635	-0.662	-0.666	-0.640	-0.666	-0.670	-0.604	-0.719	-0.672	-0.658	-0.661	-0.657	-0.656	-0.658	-0.659	-0.658
XaPKZB	-0.635	-0.638	-0.638	-0.638	-0.653	-0.622	-0.647	-0.651	-0.626	-0.651	-0.655	-0.592	-0.706	-0.657	-0.644	-0.646	-0.641	-0.640	-0.642	-0.643	-0.643
XaPL	-0.533	-0.534	-0.521	-0.521	-0.552	-0.507	-0.530	-0.530	-0.511	-0.534	-0.534	-0.482	-0.615	-0.536	-0.541	-0.529	-0.528	-0.525	-0.524	-0.524	-0.531
XaPW91	-0.656	-0.659	-0.662	-0.662	-0.672	-0.643	-0.669	-0.672	-0.647	-0.673	-0.676	-0.612	-0.723	-0.678	-0.665	-0.668	-0.664	-0.664	-0.665	-0.666	-0.665
XaRevTPSS	-0.647	-0.649	-0.650	-0.650	-0.663	-0.634	-0.658	-0.661	-0.637	-0.662	-0.665	-0.604	-0.714	-0.666	-0.655	-0.657	-0.653	-0.653	-0.653	-0.654	-0.654
XaTPSS	-0.638	-0.640	-0.641	-0.641	-0.655	-0.624	-0.649	-0.653	-0.628	-0.654	-0.657	-0.594	-0.708	-0.659	-0.647	-0.648	-0.644	-0.643	-0.645	-0.645	-0.646
XaVP86	-0.685	-0.688	-0.689	-0.689	-0.746	-0.671	-0.696	-0.698	-0.728	-0.699	-0.700	-0.695	-0.741	-0.704	-0.689	-0.696	-0.692	-0.693	-0.694	-0.695	-0.699
XaVWN	-0.551	-0.552	-0.542	-0.542	-0.568	-0.466	-0.486	-0.551	-0.469	-0.490	-0.555	-0.441	-0.628	-0.471	-0.558	-0.550	-0.548	-0.545	-0.544	-0.545	-0.530
XaVWN5	-0.532	-0.534	-0.433	-0.433	-0.551	-0.443	-0.465	-0.530	-0.447	-0.468	-0.534	-0.418	-0.615	-0.449	-0.540	-0.529	-0.440	-0.524	-0.523	-0.523	-0.497
LC-BB95	-0.004	-0.015	0.031	0.031	-0.126	0.018	0.017	0.016	0.018	0.016	0.016	0.019	-0.213	0.005	-0.067	0.019	-0.001	0.029	0.031	0.033	-0.006
LC-BBRC	0.062	0.058	0.361	0.361	-0.057	0.324	0.251	0.223	0.329	0.249	0.222	0.348	-0.263	0.316	0.029	0.268	0.215	0.378	0.360	0.437	0.224
LC-BKCIS	0.021	0.014	0.184	0.184	-0.104	0.199	0.132	0.112	0.198	0.130	0.111	0.189	-0.278	0.169	-0.033	0.139	0.105	0.183	0.181	0.206	0.102
LC-BLYP	-0.347	-0.348	-0.302	-0.301	-0.405	-0.305	-0.320	-0.318	-0.307	-0.322	-0.320	-0.296	-0.499	-0.319	-0.361	-0.306	-0.317	-0.300	-0.303	-0.301	-0.330
LC-BP86	-0.173	-0.174	0.435	0.431	-0.238	0.179	0.082	0.037	0.177	0.080	0.041	0.193	-0.273	0.178	-0.093	0.014	0.186	0.279	0.415	0.440	0.111
LC-BPBE	0.141	0.134	0.571	0.570	0.028	0.488	0.458	0.378	0.484	0.458	0.379	0.485	-0.181	0.435	0.120	0.456	0.345	0.543	0.572	0.588	0.373
LC-BPKZB	0.149	0.142	0.568	0.571	0.041	0.486	0.460	0.381	0.482	0.458	0.382	0.497	-0.155	0.445	0.151	0.487	0.346	0.542	0.573	0.590	0.380
LC-BPL	0.209	0.205	0.494	0.494	0.081	0.457	0.397	0.354	0.457	0.389	0.353	0.456	-0.109	0.458	0.173	0.480	0.329	0.514	0.522	0.558	0.364
LC-BPW91	0.123	0.114	0.563	0.563	-0.009	0.476	0.409	0.328	0.470	0.392	0.314	0.472	-0.204	0.418	0.075	0.410	0.332	0.539	0.591	0.581	0.348
LC-BRevTPSS	0.094	0.088	0.517	0.519	-0.041	0.444	0.304	0.250	0.437	0.308	0.243	0.437	-0.211	0.390	0.044	0.392	0.305	0.463	0.509	0.543	0.302
LC-BTPSS	0.145	0.139	0.571	0.570	0.047	0.486	0.458	0.383	0.482	0.458	0.382	0.490	-0.172	0.440	0.139	0.484	0.346	0.544	0.573	0.601	0.378
LC-BVP86	-0.170	-0.171	0.447	0.443	-0.234	0.189	0.080	0.042	0.184	0.084	0.040	0.210	-0.272	0.183	-0.086	0.016	0.189	0.295	0.420	0.443	0.117
LC-BVWN	0.163	0.150	0.381	0.381	0.019	0.354	0.294	0.268	0.353	0.293	0.268	0.355	-0.139	0.358	0.121	0.341	0.263	0.402	0.385	0.413	0.271
LC-BVWN5	0.211	0.207	0.509	0.509	0.084	0.471	0.403	0.364	0.470	0.402	0.364	0.466	-0.107	0.461	0.177	0.504	0.343	0.551	0.526	0.604	0.376
LC-BRxB95	-0.014	-0.015	0.032	0.032	-0.126	0.019	0.017	0.016	0.019	0.017	0.016	0.020	-0.212	0.031	-0.066	0.019	0.001	0.030	0.033	0.034	-0.005
LC-BRxBRC	0.055	0.051	0.367	0.367	-0.058	0.295	0.227	0.188	0.299	0.227	0.187	0.302	-0.266	0.273	0.025	0.240	0.217	0.368	0.361	0.433	0.208
LC-BRxCIS	0.014	0.008	0.181	0.181	-0.107	0.144	0.112	0.091	0.143	0.111	0.090	0.148	-0.280	0.139	-0.040	0.105	0.094	0.175	0.176	0.186	0.084
LC-BRxDLYP	-0.360	-0.360	-0.319	-0.319	-0.414	-0.327	-0.342	-0.339	-0.329	-0.343	-0.341	-0.317	-0.504	-0.340	-0.373	-0.329	-0.333	-0.320	-0.321	-0.320	-0.347
LC-BRxDP86	-0.187	-0.189	0.435	0.435	-0.252	0.164	0.031	-0.036	0.163	0.011	-0.038	0.173	-0.280	0.168	-0.108	-0.015	0.180	0.230	0.413	0.429	0.086
LC-BRxDPBE	0.138	0.131	0.579	0.578	0.029	0.487	0.364	0.326	0.475	0.358	0.307	0.478	-0.188	0.430	0.109	0.409	0.347	0.523	0.574	0.605	0.353
LC-BRxDPKZB	0.155	0.139	0.563	0.562	0.035	0.489	0.392	0.325	0.477	0.390	0.323	0.491	-0.159	0.440	0.129	0.478	0.350	0.525	0.577	0.592	0.364
LC-BRxDPL	0.211	0.207	0.502	0.502	0.073	0.448	0.366	0.324	0.448	0.367	0.323	0.445	-0.105	0.479	0.178	0.441	0.355	0.521	0.544	0.540	0.358
LC-BRxDPW91	0.121	0.111	0.540	0.540	-0.005	0.447	0.328	0.245	0.443	0.323	0.244	0.461	-0.212	0.403	0.058	0.377	0.338	0.513	0.559	0.562	0.320
LC-BRxDRevTPSS	0.089	0.084	0.489	0.490	-0.042	0.370	0.269	0.217	0.368	0.264	0.216	0.388	-0.217	0.353	0.037	0.302	0.304	0.459	0.500	0.545	0.274
LC-BRxDTPSS	0.142	0.136	0.577	0.579	0.035	0.489	0.392	0.329	0.478	0.388	0.308	0.493	-0.162	0.440	0.116	0.451	0.348	0.539	0.580	0.591	0.363
LC-BRxDVP86	-0.185	-0.186	0.431	0.426	-0.248	0.167	0.015	-0.035	0.167	0.017	-0.035	0.181	-0.286	0.170	-0.105	-0.011	0.181	0.265	0.410	0.441	0.089
LC-BRxDVWN	0.162	0.152	0.377	0.377	0.022	0.335	0.268	0.247	0.334	0.267	0.247	0.338	-0.135	0.343	0.110	0.314	0.265	0.373	0.374	0.418	0.259
LC-BRxDVWN5	0.214	0.212	0.504	0.504	0.078	0.450	0.370	0.328	0.450	0.369	0.329	0.448	-0.102	0.481	0.181	0.446	0.335	0.528	0.529	0.560	0.361
LC-G96B95	-0.004	-0.004	0.031	0.031	-0.126	0.018	0.017	0.016	0.018	0.016	0.016	0.019	-0.213	0.005	-0.067	0.019	0.000	0.029	0.031	0.033	-0.006
LC-G96BRC	0.064	0.060	0.366	0.366	-0.054	0.336	0.251	0.229	0.334	0.250	0.226	0.338	-0.260	0.320	0.032	0.272	0.217	0.384	0.375	0.439	0.227
LC-G96KCIS	0.020	0.013	0.190	0.190	-0.102	0.200	0.133	0.112	0.199	0.131	0.111	0.191	-0.277	0.171	-0.032	0.140	0.114	0.184	0.187	0.221	0.105
LC-G96LYP	-0.347	-0.347	-0.301	-0.301	-0.405	-0.305	-0.320	-0.318	-0.307	-0.322	-0.319	-0.296	-0.498	-0.319	-0.361	-0.307	-0.317	-0.301	-0.302	-0.300	-0.330
LC-G96P86	-0.170	-0.172	0.435	0.434	-0.233	0.188	0.083	0.041	0.179	0.082	0.043	0.209	-0.272	0.182	-0.084	0.016	0.190	0.256	0.414	0.445	0.113
LC-G96PBE	0.149	0.134	0.571	0.571	0.031	0.485	0.458	0.379	0.499	0.457	0.374	0.482	-0.179	0.438	0.132	0.469	0.346	0.543	0.572	0.590	0.375
LC-G96PKZB	0.152	0.142	0.571	0.571	0.055	0.497	0.459	0.381	0.487	0.460	0.381	0.486	-0.152	0.448	0.155	0.475	0.349	0.544	0.573	0.588	0.381
LC-G96PL	0.210	0.205	0.495	0.495	0.082	0.457	0.395	0.353	0.456	0.393	0.352	0.460	-0.107	0.459	0.175	0.480	0.330	0.514	0.507	0.526	0.362
LC-G96PW91	0.124	0.115	0.565	0.564	0.010	0.474	0.419	0.328	0.471	0.416	0.336	0.471	-0.198	0.421	0.078	0.444	0.336	0.536	0.575	0.586	0.354
LC-G96RevTPSS	0.096	0.090	0.521	0.523	-0.024	0.441	0.322	0.263	0.439	0.304	0.261	0.418	-0.208	0.394	0.048	0.389	0.307	0.465	0.512	0.546	0.305
LC-G96TPSS	0.155	0.141	0.572	0.571	0.042	0.487	0.475	0.381	0.482	0.459	0.383	0.487	-0.168	0.441	0.150	0.476	0.356	0.544	0.574	0.616	0.381
LC-G96VP86	-0.166	-0.168	0.448	0.448	-0.232	0.194	0.080	0.054	0.186	0.080	0.041	0.211	-0.271	0.188	-0.083	0.018	0.192	0.295	0.419	0.447	0.119
LC-G96VWN	0.164	0.152	0.384	0.384	0.021	0.355	0.294	0.268	0.353	0.293	0.268	0.354	-0.137	0.358	0.123	0.342	0.264	0.406	0.386	0.416	0.272
LC-G96VWN5	0.212	0.209	0.509	0.509	0.088	0.468	0.405	0.360	0.469	0.402	0.359	0.466	-0.105	0.461	0.178	0.503	0.344	0.550	0.527	0.574	0.374
LC-LGB95	-0.015	-0.015	0.031	0.031	-0.127	0.018	0.016	0.016	0.018	0.016	0.016	0.019	-0.213	0.005	-0.068	0.018	-0.001	0.029	0.031	0.033	-0.00

LC-LGPBE	0.138	0.131	0.561	0.561	0.023	0.491	0.457	0.378	0.488	0.458	0.378	0.490	-0.188	0.462	0.114	0.486	0.342	0.563	0.571	0.590	0.375
LC-LGPKZB	0.144	0.137	0.562	0.563	0.022	0.484	0.459	0.387	0.491	0.460	0.386	0.487	-0.162	0.492	0.143	0.490	0.345	0.563	0.574	0.594	0.381
LC-LGPL	0.208	0.203	0.509	0.509	0.069	0.470	0.398	0.360	0.470	0.398	0.382	0.462	-0.113	0.485	0.171	0.484	0.330	0.532	0.527	0.548	0.370
LC-LGPW91	0.120	0.110	0.558	0.555	-0.015	0.476	0.414	0.324	0.474	0.414	0.326	0.479	-0.212	0.448	0.069	0.423	0.330	0.534	0.547	0.582	0.348
LC-LGRRevTPSS	0.091	0.085	0.510	0.508	-0.044	0.441	0.333	0.248	0.415	0.334	0.251	0.441	-0.218	0.409	0.040	0.380	0.302	0.465	0.509	0.551	0.302
LC-LGTPSS	0.139	0.137	0.563	0.563	0.027	0.486	0.459	0.385	0.482	0.459	0.386	0.483	-0.178	0.469	0.132	0.491	0.343	0.564	0.568	0.592	0.377
LC-LGVP86	-0.175	-0.175	0.442	0.438	-0.241	0.194	0.076	0.036	0.195	0.074	0.033	0.202	-0.276	0.153	-0.089	0.012	0.179	0.275	0.419	0.438	0.111
LC-LGVWN	0.162	0.151	0.391	0.391	0.016	0.356	0.298	0.272	0.354	0.298	0.272	0.363	-0.143	0.356	0.112	0.341	0.263	0.401	0.388	0.417	0.273
LC-LGVWN5	0.211	0.207	0.524	0.524	0.076	0.479	0.408	0.370	0.478	0.409	0.366	0.471	-0.111	0.490	0.174	0.512	0.337	0.552	0.532	0.567	0.379
LC-mPWB95	-0.015	-0.015	0.031	0.031	-0.127	0.018	0.016	0.016	0.018	0.016	0.016	0.019	-0.213	0.005	-0.067	0.019	-0.001	0.029	0.031	0.033	-0.007
LC-mPWBRC	0.062	0.057	0.360	0.360	-0.057	0.329	0.249	0.222	0.317	0.249	0.221	0.332	-0.263	0.303	0.028	0.268	0.214	0.377	0.360	0.435	0.221
LC-mPWKCIS	0.020	0.013	0.184	0.184	-0.104	0.198	0.130	0.110	0.196	0.129	0.109	0.188	-0.280	0.155	-0.034	0.137	0.104	0.182	0.180	0.204	0.100
LC-mPWLYP	-0.348	-0.349	-0.303	-0.303	-0.406	-0.306	-0.321	-0.319	-0.308	-0.323	-0.321	-0.297	-0.499	-0.320	-0.362	-0.308	-0.318	-0.301	-0.304	-0.302	-0.331
LC-mPWP86	-0.174	-0.175	0.434	0.430	-0.240	0.177	0.080	0.039	0.182	0.078	0.040	0.191	-0.274	0.179	-0.095	0.012	0.184	0.277	0.415	0.439	0.110
LC-mPWPBE	0.142	0.133	0.573	0.574	0.027	0.490	0.458	0.377	0.480	0.458	0.372	0.483	-0.182	0.437	0.127	0.456	0.343	0.564	0.571	0.588	0.374
LC-mPWPKZB	0.148	0.140	0.588	0.571	0.039	0.496	0.475	0.382	0.485	0.455	0.382	0.489	-0.156	0.447	0.140	0.474	0.347	0.566	0.571	0.590	0.382
LC-mPWPL	0.208	0.205	0.495	0.495	0.079	0.456	0.388	0.353	0.456	0.388	0.352	0.454	-0.110	0.457	0.172	0.479	0.329	0.514	0.506	0.557	0.362
LC-mPWPW91	0.121	0.112	0.563	0.563	-0.008	0.471	0.399	0.326	0.470	0.391	0.341	0.485	-0.204	0.419	0.080	0.401	0.332	0.537	0.553	0.580	0.347
LC-mPWRRevTPSS	0.094	0.087	0.518	0.518	-0.040	0.438	0.302	0.242	0.433	0.320	0.249	0.416	-0.213	0.412	0.043	0.389	0.304	0.466	0.510	0.549	0.302
LC-mPWTPSS	0.141	0.138	0.588	0.589	0.049	0.490	0.458	0.382	0.483	0.473	0.381	0.490	-0.172	0.443	0.133	0.475	0.345	0.563	0.590	0.591	0.382
LC-mPWVP86	-0.171	-0.172	0.442	0.446	-0.235	0.183	0.085	0.044	0.182	0.083	0.037	0.197	-0.273	0.180	-0.086	0.015	0.187	0.294	0.417	0.440	0.115
LC-mPWVWN	0.163	0.149	0.380	0.381	0.019	0.353	0.293	0.267	0.352	0.293	0.267	0.354	-0.139	0.356	0.120	0.340	0.263	0.396	0.384	0.412	0.270
LC-mPWVWN5	0.211	0.207	0.508	0.508	0.083	0.470	0.402	0.361	0.469	0.401	0.359	0.465	-0.108	0.460	0.176	0.504	0.338	0.550	0.527	0.579	0.373
LC-OB95	0.007	0.007	0.030	0.030	-0.141	0.017	0.016	0.015	0.017	0.016	0.015	0.018	-0.212	0.030	-0.067	0.019	-0.001	0.029	0.030	0.033	-0.005
LC-OBRC	0.066	0.062	0.357	0.357	-0.052	0.352	0.254	0.230	0.350	0.253	0.229	0.353	-0.257	0.321	0.035	0.281	0.213	0.380	0.358	0.434	0.229
LC-OKCIS	0.023	0.016	0.185	0.185	-0.101	0.201	0.134	0.114	0.200	0.132	0.113	0.193	-0.274	0.178	-0.030	0.147	0.104	0.182	0.186	0.202	0.105
LC-OLYP	-0.345	-0.346	-0.300	-0.301	-0.404	-0.304	-0.318	-0.317	-0.305	-0.321	-0.318	-0.294	-0.495	-0.322	-0.359	-0.303	-0.317	-0.300	-0.301	-0.300	-0.329
LC-OP86	-0.163	-0.165	0.436	0.432	-0.229	0.195	0.090	0.061	0.190	0.092	0.044	0.214	-0.268	0.182	-0.080	0.024	0.111	0.297	0.425	0.448	0.117
LC-OPBE	0.156	0.140	0.570	0.570	0.052	0.519	0.460	0.378	0.501	0.461	0.377	0.499	-0.172	0.472	0.128	0.487	0.345	0.560	0.573	0.589	0.383
LC-OPKZB	0.166	0.160	0.571	0.571	0.056	0.504	0.463	0.383	0.500	0.462	0.385	0.503	-0.147	0.480	0.156	0.488	0.345	0.541	0.574	0.592	0.388
LC-OPL	0.209	0.204	0.491	0.491	0.079	0.464	0.400	0.356	0.464	0.399	0.354	0.460	-0.105	0.463	0.173	0.487	0.326	0.509	0.503	0.522	0.362
LC-OPW91	0.128	0.120	0.545	0.560	-0.004	0.489	0.437	0.346	0.488	0.424	0.326	0.491	-0.194	0.427	0.094	0.443	0.332	0.536	0.577	0.571	0.357
LC-ORRevTPSS	0.098	0.093	0.481	0.481	-0.035	0.479	0.337	0.307	0.480	0.336	0.286	0.481	-0.203	0.389	0.047	0.388	0.303	0.464	0.486	0.550	0.312
LC-OTPSS	0.152	0.142	0.572	0.572	0.050	0.501	0.463	0.387	0.503	0.461	0.385	0.503	-0.163	0.480	0.154	0.491	0.352	0.542	0.578	0.591	0.386
LC-OVP86	-0.161	-0.162	0.441	0.437	-0.227	0.210	0.091	0.047	0.200	0.092	0.045	0.210	-0.267	0.200	-0.077	0.026	0.194	0.299	0.447	0.482	0.126
LC-OVWN	0.162	0.149	0.377	0.377	0.018	0.353	0.294	0.267	0.352	0.293	0.266	0.355	-0.134	0.362	0.121	0.349	0.261	0.391	0.408	0.410	0.272
LC-OVWN5	0.211	0.207	0.497	0.497	0.086	0.463	0.412	0.362	0.463	0.407	0.359	0.465	-0.103	0.465	0.176	0.510	0.329	0.545	0.508	0.541	0.370
LC-PBEB95	-0.015	-0.015	0.031	0.031	-0.127	0.018	0.016	0.016	0.018	0.016	0.016	0.019	-0.213	0.005	-0.068	0.019	-0.001	0.029	0.031	0.033	-0.007
LC-PBEBRC	0.060	0.055	0.360	0.360	-0.060	0.319	0.251	0.223	0.328	0.248	0.221	0.332	-0.265	0.312	0.028	0.269	0.212	0.375	0.357	0.434	0.221
LC-PBEKCIS	0.019	0.012	0.183	0.183	-0.105	0.197	0.132	0.111	0.195	0.131	0.111	0.188	-0.281	0.154	-0.035	0.127	0.102	0.181	0.180	0.205	0.099
LC-PBELYP	-0.348	-0.348	-0.302	-0.302	-0.406	-0.305	-0.321	-0.318	-0.307	-0.322	-0.320	-0.296	-0.499	-0.320	-0.362	-0.307	-0.318	-0.301	-0.303	-0.301	-0.330
LC-PBEP86	-0.175	-0.176	0.431	0.432	-0.241	0.195	0.078	0.038	0.187	0.077	0.036	0.207	-0.275	0.173	-0.089	0.009	0.180	0.276	0.414	0.439	0.111
LC-PBEPBE	0.144	0.132	0.572	0.569	0.026	0.484	0.459	0.378	0.498	0.457	0.377	0.495	-0.184	0.436	0.117	0.457	0.342	0.562	0.570	0.589	0.374
LC-PBEPKZB	0.154	0.140	0.570	0.568	0.038	0.487	0.457	0.382	0.483	0.456	0.382	0.486	-0.172	0.439	0.147	0.476	0.344	0.566	0.572	0.590	0.378
LC-PBEPL	0.207	0.203	0.494	0.494	0.073	0.463	0.389	0.354	0.457	0.389	0.353	0.455	-0.111	0.457	0.171	0.480	0.328	0.529	0.523	0.558	0.363
LC-PBEPW91	0.120	0.110	0.545	0.544	-0.012	0.472	0.393	0.311	0.471	0.392	0.319	0.485	-0.207	0.420	0.075	0.402	0.330	0.535	0.554	0.580	0.342
LC-PBERRevTPSS	0.092	0.086	0.498	0.494	-0.042	0.434	0.321	0.251	0.434	0.301	0.237	0.435	-0.214	0.392	0.041	0.389	0.302	0.463	0.506	0.546	0.298
LC-PBETPSS	0.143	0.137	0.570	0.571	0.030	0.485	0.457	0.383	0.483	0.458	0.382	0.487	-0.175	0.440	0.145	0.485	0.344	0.565	0.572	0.595	0.378
LC-PBEVP86	-0.172	-0.174	0.446	0.446	-0.238	0.182	0.081	0.038	0.179	0.080	0.035	0.193	-0.191	0.180	-0.087	0.015	0.185	0.279	0.413	0.441	0.117
LC-PBEVWN	0.162	0.149	0.383	0.383	0.016	0.353	0.294	0.268	0.353	0.293	0.268	0.355	-0.140	0.356	0.119	0.337	0.262	0.395	0.383	0.413	0.270
LC-PBEVWN5	0.209	0.206	0.508	0.508	0.082	0.471	0.408	0.364	0.470	0.407	0.363	0.466	-0.109	0.460	0.174	0.504	0.331	0.550	0.529	0.598	0.375
LC-PBEhB95	-0.015	-0.015	0.031	0.031	-0.127	0.018	0.016	0.016	0.018	0.016	0.016	0.019	-0.213	0.005	-0.068	0.019	-0.001	0.029	0.031	0.033	-0.007
LC-PBEhBRC	0.060	0.055	0.360	0.360	-0.059	0.324	0.250	0.226	0.318	0.247	0.221	0.327	-0.265	0.312	0.027	0.267	0.213	0.364	0.358	0.434	0.220
LC-PBEhKCIS	0.019	0.012	0.183	0.183	-0.106	0.197	0.133	0.112	0.196	0.130	0.111	0.188	-0.280	0.155	-0.036	0.126	0.100	0.176	0.177</		

LC-PBEhPKZB	0.152	0.140	0.565	0.563	0.035	0.489	0.459	0.382	0.490	0.457	0.379	0.490	-0.158	0.469	0.136	0.476	0.347	0.565	0.572	0.594	0.380
LC-PBEhPL	0.207	0.203	0.505	0.505	0.077	0.478	0.397	0.360	0.478	0.393	0.357	0.456	-0.113	0.458	0.172	0.477	0.328	0.532	0.523	0.547	0.367
LC-PBEhPW91	0.120	0.111	0.535	0.536	-0.012	0.476	0.415	0.325	0.479	0.385	0.334	0.478	-0.208	0.420	0.071	0.402	0.330	0.534	0.548	0.582	0.343
LC-PBEhRevTPSS	0.091	0.086	0.518	0.519	-0.042	0.438	0.301	0.238	0.436	0.305	0.248	0.438	-0.215	0.373	0.042	0.380	0.297	0.466	0.509	0.552	0.299
LC-PBEhTPSS	0.151	0.136	0.571	0.573	0.029	0.491	0.459	0.382	0.489	0.458	0.383	0.484	-0.175	0.440	0.127	0.474	0.346	0.565	0.568	0.611	0.378
LC-PBEhVP86	-0.173	-0.175	0.446	0.443	-0.239	0.181	0.081	0.038	0.177	0.079	0.038	0.192	-0.274	0.202	-0.087	0.014	0.186	0.242	0.375	0.443	0.109
LC-PBEhVWN	0.161	0.149	0.387	0.387	0.017	0.353	0.293	0.268	0.352	0.293	0.268	0.354	-0.141	0.356	0.119	0.338	0.262	0.401	0.383	0.417	0.271
LC-PBEhVWN5	0.210	0.206	0.510	0.510	0.082	0.489	0.413	0.368	0.488	0.405	0.365	0.467	-0.109	0.460	0.175	0.502	0.332	0.551	0.530	0.563	0.376
LC-PKZBB95	0.007	0.007	0.031	0.031	-0.125	0.019	0.017	0.016	0.019	0.017	0.016	0.020	-0.210	0.032	-0.067	0.019	-0.001	0.030	0.032	0.034	-0.003
LC-PKZBBRC	0.071	0.066	0.371	0.371	-0.049	0.355	0.288	0.239	0.354	0.276	0.238	0.356	-0.253	0.331	0.039	0.288	0.221	0.387	0.372	0.443	0.238
LC-PKZBKClS	0.027	0.019	0.194	0.194	-0.098	0.211	0.146	0.128	0.210	0.145	0.127	0.215	-0.268	0.203	-0.024	0.157	0.117	0.196	0.193	0.234	0.116
LC-PKZBLYP	-0.334	-0.334	-0.286	-0.285	-0.395	-0.291	-0.305	-0.304	-0.292	-0.307	-0.305	-0.282	-0.489	-0.308	-0.350	-0.291	-0.304	-0.286	-0.287	-0.286	-0.316
LC-PKZBP86	-0.157	-0.159	0.440	0.438	-0.226	0.213	0.089	0.053	0.211	0.087	0.052	0.235	-0.264	0.203	-0.081	0.031	0.198	0.304	0.415	0.451	0.127
LC-PKZBPBE	0.153	0.143	0.561	0.562	0.053	0.492	0.464	0.388	0.488	0.464	0.389	0.498	-0.170	0.452	0.132	0.491	0.348	0.566	0.580	0.601	0.383
LC-PKZBPKZB	0.165	0.159	0.562	0.564	0.056	0.496	0.465	0.395	0.492	0.464	0.395	0.498	-0.144	0.481	0.160	0.494	0.352	0.568	0.582	0.599	0.390
LC-PKZBPL	0.214	0.210	0.510	0.510	0.089	0.475	0.422	0.377	0.474	0.426	0.377	0.471	-0.101	0.469	0.177	0.497	0.339	0.538	0.529	0.567	0.379
LC-PKZBPW91	0.132	0.122	0.556	0.557	0.015	0.492	0.451	0.371	0.478	0.443	0.368	0.490	-0.190	0.425	0.087	0.479	0.336	0.561	0.569	0.592	0.367
LC-PKZBRevTPSS	0.101	0.096	0.519	0.518	-0.033	0.452	0.388	0.281	0.450	0.359	0.277	0.449	-0.199	0.413	0.053	0.390	0.308	0.495	0.531	0.549	0.320
LC-PKZBTPSS	0.168	0.162	0.580	0.566	0.054	0.501	0.466	0.394	0.498	0.465	0.394	0.532	-0.147	0.483	0.155	0.494	0.350	0.566	0.574	0.630	0.394
LC-PKZBV86	-0.155	-0.156	0.450	0.449	-0.222	0.210	0.106	0.057	0.211	0.105	0.075	0.215	-0.263	0.265	-0.072	0.033	0.203	0.306	0.426	0.454	0.135
LC-PKZBVWN	0.169	0.158	0.421	0.421	0.024	0.376	0.311	0.278	0.374	0.309	0.278	0.374	-0.130	0.371	0.127	0.361	0.266	0.408	0.409	0.421	0.286
LC-PKZBVWN5	0.218	0.213	0.529	0.530	0.091	0.484	0.430	0.379	0.478	0.430	0.379	0.482	-0.098	0.474	0.180	0.504	0.346	0.556	0.534	0.566	0.385
LC-PW91B95	-0.015	-0.015	0.031	0.031	-0.127	0.018	0.016	0.016	0.018	0.016	0.016	0.019	-0.213	0.005	-0.067	0.019	-0.001	0.029	0.031	0.033	-0.007
LC-PW91BRC	0.060	0.055	0.359	0.359	-0.059	0.317	0.246	0.221	0.316	0.247	0.219	0.319	-0.265	0.308	0.028	0.269	0.212	0.375	0.357	0.434	0.219
LC-PW91KCIS	0.017	0.010	0.183	0.183	-0.105	0.195	0.128	0.109	0.194	0.128	0.108	0.187	-0.281	0.154	-0.035	0.124	0.101	0.181	0.179	0.202	0.098
LC-PW91LYP	-0.349	-0.349	-0.304	-0.304	-0.407	-0.307	-0.322	-0.320	-0.309	-0.324	-0.322	-0.298	-0.500	-0.321	-0.363	-0.309	-0.319	-0.302	-0.304	-0.303	-0.332
LC-PW91P86	-0.174	-0.177	0.433	0.434	-0.239	0.187	0.078	0.041	0.178	0.075	0.037	0.197	-0.275	0.177	-0.090	0.008	0.180	0.275	0.413	0.439	0.110
LC-PW91PBE	0.148	0.133	0.569	0.569	0.027	0.494	0.456	0.374	0.482	0.456	0.372	0.496	-0.184	0.459	0.103	0.451	0.344	0.563	0.570	0.588	0.374
LC-PW91PKZB	0.146	0.138	0.570	0.570	0.036	0.488	0.457	0.379	0.481	0.457	0.375	0.483	-0.171	0.445	0.132	0.474	0.347	0.565	0.571	0.607	0.378
LC-PW91PL	0.207	0.203	0.494	0.494	0.076	0.455	0.387	0.352	0.455	0.387	0.349	0.454	-0.111	0.456	0.172	0.478	0.328	0.513	0.505	0.556	0.360
LC-PW91PW91	0.119	0.112	0.544	0.543	-0.012	0.483	0.390	0.338	0.469	0.359	0.311	0.485	-0.206	0.419	0.080	0.400	0.330	0.536	0.557	0.580	0.342
LC-PW91RevTPSS	0.092	0.086	0.517	0.510	-0.043	0.434	0.302	0.239	0.466	0.307	0.237	0.434	-0.214	0.394	0.040	0.349	0.302	0.464	0.511	0.542	0.298
LC-PW91TPSS	0.140	0.137	0.570	0.571	0.030	0.490	0.459	0.379	0.479	0.457	0.379	0.489	-0.174	0.440	0.120	0.489	0.344	0.563	0.572	0.606	0.377
LC-PW91VP86	-0.173	-0.174	0.439	0.438	-0.237	0.181	0.082	0.039	0.176	0.081	0.038	0.194	-0.274	0.188	-0.088	0.014	0.187	0.278	0.414	0.439	0.112
LC-PW91VWN	0.161	0.148	0.382	0.382	0.016	0.352	0.293	0.266	0.351	0.292	0.266	0.353	-0.141	0.355	0.117	0.334	0.262	0.393	0.380	0.411	0.269
LC-PW91VWN5	0.210	0.205	0.507	0.507	0.082	0.469	0.400	0.358	0.467	0.399	0.358	0.463	-0.109	0.459	0.175	0.496	0.330	0.549	0.525	0.576	0.371
LC-RevTPSSB95	0.010	0.010	0.033	0.033	-0.122	0.021	0.019	0.019	0.021	0.019	0.019	0.022	-0.209	0.007	-0.064	0.022	0.016	0.032	0.034	0.036	-0.001
LC-RevTPSSBRC	0.074	0.070	0.390	0.390	-0.046	0.343	0.252	0.226	0.342	0.251	0.225	0.344	-0.251	0.306	0.041	0.282	0.225	0.384	0.387	0.434	0.233
LC-RevTPSSKClS	0.029	0.020	0.193	0.193	-0.098	0.204	0.137	0.118	0.202	0.137	0.117	0.192	-0.265	0.198	-0.023	0.152	0.121	0.193	0.191	0.232	0.112
LC-RevTPSSLYP	-0.341	-0.342	-0.298	-0.297	-0.401	-0.303	-0.318	-0.317	-0.305	-0.320	-0.318	-0.294	-0.492	-0.320	-0.358	-0.304	-0.313	-0.298	-0.299	-0.298	-0.327
LC-RevTPSSP86	-0.151	-0.157	0.444	0.441	-0.222	0.193	0.090	0.051	0.194	0.093	0.048	0.212	-0.264	0.234	-0.074	0.053	0.199	0.262	0.436	0.462	0.127
LC-RevTPSSPBE	0.163	0.153	0.544	0.544	0.055	0.531	0.459	0.380	0.512	0.457	0.374	0.514	-0.153	0.427	0.138	0.480	0.377	0.566	0.576	0.572	0.383
LC-RevTPSSPKZB	0.184	0.178	0.547	0.546	0.058	0.518	0.462	0.384	0.517	0.461	0.380	0.540	-0.141	0.439	0.147	0.498	0.378	0.565	0.578	0.573	0.391
LC-RevTPSSPL	0.218	0.214	0.499	0.499	0.093	0.459	0.397	0.358	0.458	0.394	0.358	0.461	-0.093	0.465	0.178	0.490	0.345	0.510	0.520	0.546	0.369
LC-RevTPSSPW91	0.142	0.139	0.564	0.563	0.023	0.476	0.393	0.342	0.476	0.385	0.320	0.476	-0.187	0.425	0.092	0.430	0.342	0.542	0.570	0.587	0.355
LC-RevTPSSRevTPSS	0.107	0.102	0.492	0.493	-0.017	0.444	0.317	0.255	0.417	0.317	0.254	0.446	-0.196	0.391	0.058	0.391	0.310	0.494	0.521	0.549	0.307
LC-RevTPSSTPSS	0.171	0.172	0.545	0.544	0.058	0.515	0.460	0.383	0.515	0.460	0.382	0.544	-0.143	0.441	0.143	0.481	0.376	0.568	0.579	0.570	0.388
LC-RevTPSSVP86	-0.146	-0.154	0.397	0.439	-0.220	0.220	0.087	0.053	0.214	0.086	0.051	0.219	-0.262	0.318	-0.071	0.054	0.202	0.265	0.435	0.460	0.132
LC-RevTPSSVWN	0.172	0.161	0.394	0.394	0.026	0.363	0.295	0.268	0.362	0.294	0.267	0.365	-0.126	0.375	0.128	0.356	0.265	0.410	0.396	0.420	0.279
LC-RevTPSSVWN5	0.221	0.218	0.503	0.503	0.095	0.463	0.408	0.368	0.462	0.408	0.368	0.464	-0.090	0.473	0.183	0.495	0.349	0.526	0.525	0.538	0.374
LC-SB95	-0.007	-0.018	0.028	0.028	-0.152	0.015	0.014	0.013	0.015	0.014	0.013	0.016	-0.217	0.002	-0.070	0.016	-0.003	0.027	0.029	0.031	-0.010
LC-SBRC	0.061	0.056	0.379	0.379	-0.058	0.343	0.252	0.227	0.338	0.248	0.226	0.363	-0.264	0.314	0.027	0.261	0.215	0.381	0.372	0.439	0.228
LC-SKClS	0.020	0.010	0.189	0.189	-0.103	0.200	0.132	0.112	0.199	0.131	0.110	0.191	-0.280	0.156	-0.037	0.134	0.103	0.187	0.184	0.224	0.102
LC-SLYP	-0.346	-0.346	-0.297	-0.297	-0.404	-0.302	-0.317	-0.315	-0.304	-0.319											

LC-SPL	0.206	0.202	0.507	0.507	0.081	0.482	0.406	0.354	0.477	0.404	0.350	0.488	-0.109	0.452	0.171	0.446	0.331	0.526	0.522	0.543	0.367
LC-SPW91	0.116	0.108	0.571	0.571	-0.020	0.475	0.408	0.311	0.472	0.389	0.310	0.474	-0.206	0.415	0.063	0.412	0.331	0.571	0.550	0.580	0.345
LC-SRevTPSS	0.086	0.080	0.483	0.483	-0.042	0.474	0.307	0.236	0.471	0.300	0.278	0.456	-0.214	0.359	0.034	0.313	0.305	0.467	0.475	0.552	0.295
LC-STPSS	0.138	0.132	0.581	0.581	0.033	0.480	0.458	0.374	0.479	0.459	0.371	0.487	-0.175	0.421	0.127	0.463	0.344	0.556	0.562	0.582	0.373
LC-SVP86	-0.176	-0.177	0.447	0.447	-0.240	0.178	0.082	0.007	0.183	0.079	0.011	0.199	-0.313	0.175	-0.099	0.011	0.071	0.289	0.417	0.468	0.103
LC-SVWN5	0.208	0.205	0.524	0.524	0.085	0.484	0.412	0.357	0.482	0.409	0.356	0.491	-0.106	0.455	0.174	0.451	0.345	0.546	0.526	0.586	0.376
LC-TPSSB95	0.009	0.009	0.033	0.033	-0.123	0.021	0.019	0.018	0.021	0.019	0.018	0.021	-0.193	0.007	-0.064	0.021	0.002	0.031	0.033	0.035	-0.001
LC-TPSSBRC	0.069	0.065	0.390	0.390	-0.050	0.318	0.246	0.222	0.327	0.245	0.221	0.329	-0.256	0.305	0.037	0.275	0.221	0.383	0.372	0.433	0.227
LC-TPSSKCIS	0.024	0.017	0.190	0.190	-0.100	0.198	0.131	0.112	0.196	0.131	0.111	0.187	-0.270	0.195	-0.027	0.146	0.117	0.186	0.187	0.213	0.107
LC-TPSSLYP	-0.346	-0.346	-0.303	-0.303	-0.405	-0.308	-0.323	-0.320	-0.309	-0.324	-0.322	-0.299	-0.496	-0.323	-0.361	-0.308	-0.318	-0.302	-0.305	-0.303	-0.331
LC-TPSSP86	-0.158	-0.163	0.442	0.439	-0.227	0.188	0.083	0.043	0.184	0.097	0.040	0.192	-0.267	0.188	-0.079	0.024	0.194	0.294	0.428	0.455	0.120
LC-TPSSPBE	0.159	0.151	0.542	0.541	0.040	0.484	0.454	0.373	0.484	0.452	0.370	0.510	-0.171	0.421	0.131	0.480	0.352	0.532	0.575	0.597	0.374
LC-TPSSPKZB	0.165	0.160	0.544	0.544	0.056	0.486	0.458	0.378	0.508	0.457	0.375	0.481	-0.146	0.427	0.142	0.485	0.376	0.532	0.577	0.595	0.380
LC-TPSSPL	0.215	0.211	0.496	0.496	0.090	0.457	0.392	0.353	0.457	0.389	0.350	0.459	-0.101	0.464	0.177	0.485	0.331	0.507	0.498	0.532	0.363
LC-TPSSPW91	0.141	0.122	0.564	0.563	0.018	0.474	0.374	0.329	0.481	0.379	0.327	0.475	-0.192	0.404	0.089	0.421	0.339	0.523	0.568	0.585	0.349
LC-TPSSRevTPSS	0.103	0.098	0.488	0.486	-0.031	0.448	0.304	0.242	0.474	0.304	0.218	0.444	-0.201	0.382	0.052	0.391	0.307	0.498	0.516	0.549	0.304
LC-TPSSTPSS	0.158	0.152	0.542	0.542	0.044	0.487	0.459	0.378	0.505	0.458	0.375	0.506	-0.148	0.429	0.140	0.475	0.376	0.531	0.576	0.570	0.378
LC-TPSSVP86	-0.156	-0.161	0.435	0.435	-0.225	0.195	0.083	0.049	0.193	0.082	0.047	0.211	-0.266	0.194	-0.075	0.026	0.197	0.296	0.432	0.462	0.123
LC-TPSSVWN	0.168	0.157	0.385	0.385	0.024	0.351	0.292	0.263	0.350	0.291	0.262	0.357	-0.131	0.369	0.124	0.344	0.263	0.399	0.386	0.415	0.273
LC-TPSSSVWN5	0.218	0.215	0.499	0.499	0.092	0.460	0.401	0.356	0.458	0.400	0.356	0.463	-0.095	0.469	0.181	0.489	0.342	0.523	0.503	0.575	0.370
LC-XaB95	-0.007	-0.007	0.029	0.029	-0.145	0.015	0.014	-0.006	0.015	0.014	0.013	0.016	-0.218	0.026	-0.069	0.017	-0.003	0.027	0.029	0.030	-0.009
LC-XaBRC	0.059	0.053	0.368	0.368	-0.061	0.310	0.235	0.216	0.307	0.233	0.215	0.313	-0.267	0.294	0.024	0.256	0.212	0.382	0.368	0.432	0.216
LC-XaKCIS	0.015	0.007	0.181	0.181	-0.106	0.171	0.120	0.100	0.170	0.119	0.099	0.177	-0.282	0.143	-0.039	0.114	0.097	0.175	0.177	0.199	0.091
LC-XaLYP	-0.361	-0.361	-0.318	-0.318	-0.417	-0.322	-0.337	-0.335	-0.324	-0.339	-0.337	-0.312	-0.508	-0.336	-0.374	-0.324	-0.333	-0.318	-0.319	-0.319	-0.346
LC-XaP86	-0.182	-0.184	0.440	0.440	-0.248	0.171	0.074	-0.007	0.170	0.052	-0.001	0.179	-0.281	0.188	-0.095	0.000	0.181	0.284	0.387	0.442	0.101
LC-XaPBE	0.135	0.129	0.567	0.568	0.029	0.480	0.404	0.339	0.500	0.401	0.340	0.478	-0.184	0.415	0.106	0.455	0.344	0.560	0.553	0.585	0.360
LC-XaPKZB	0.141	0.135	0.569	0.569	0.035	0.478	0.455	0.345	0.478	0.440	0.345	0.478	-0.171	0.422	0.132	0.460	0.346	0.563	0.554	0.587	0.368
LC-XaPL	0.204	0.200	0.489	0.489	0.070	0.464	0.381	0.335	0.463	0.380	0.334	0.461	-0.113	0.445	0.172	0.439	0.328	0.501	0.497	0.518	0.353
LC-XaPW91	0.118	0.111	0.546	0.543	-0.022	0.471	0.342	0.319	0.471	0.354	0.289	0.471	-0.206	0.430	0.063	0.371	0.336	0.533	0.526	0.579	0.332
LC-XaRevTPSS	0.088	0.082	0.473	0.472	-0.042	0.439	0.349	0.285	0.459	0.314	0.229	0.445	-0.216	0.393	0.036	0.309	0.308	0.470	0.467	0.549	0.295
LC-XaTPSS	0.139	0.133	0.571	0.571	0.035	0.481	0.455	0.353	0.479	0.456	0.354	0.481	-0.174	0.426	0.138	0.460	0.345	0.562	0.549	0.587	0.370
BB1K	0.170	0.170	0.174	0.174	0.140	0.231	0.229	0.229	0.312	0.229	0.229	0.232	0.145	0.436	0.169	0.237	0.173	0.174	0.174	0.174	0.210
mPW1K	0.388	0.379	0.521	0.521	0.241	0.494	0.441	0.386	0.493	0.440	0.385	0.490	0.067	0.418	0.307	0.533	0.450	0.549	0.532	0.540	0.429
mPW1B95	0.075	0.074	0.114	0.114	-0.012	0.118	0.102	0.101	0.118	0.102	0.101	0.119	-0.120	0.105	0.069	0.107	0.111	0.131	0.114	0.115	0.088
mPWB1K	0.071	0.071	0.086	0.086	-0.040	0.080	0.075	0.074	0.080	0.074	0.073	0.104	-0.104	0.054	0.043	0.074	0.083	0.085	0.086	0.086	0.062
mPW1KCIS	0.249	0.243	0.401	0.401	0.113	0.373	0.347	0.326	0.373	0.346	0.326	0.377	-0.026	0.360	0.183	0.412	0.301	0.424	0.398	0.419	0.317
mPWKCIS1K	0.241	0.236	0.367	0.367	0.112	0.320	0.281	0.261	0.318	0.280	0.260	0.324	-0.026	0.313	0.182	0.357	0.293	0.386	0.367	0.374	0.281
TPSS1KCIS	0.107	0.104	0.174	0.174	-0.001	0.172	0.143	0.133	0.172	0.142	0.132	0.178	-0.111	0.180	0.058	0.192	0.135	0.190	0.173	0.174	0.131
PBE1KCIS	-0.044	-0.047	0.036	0.036	-0.129	0.029	0.008	0.001	0.027	0.006	0.000	0.038	-0.238	0.029	-0.082	0.030	0.000	0.035	0.031	0.034	-0.010
mPWLYP1M	-0.114	-0.116	-0.028	-0.028	-0.195	-0.027	-0.053	-0.056	-0.029	-0.054	-0.058	-0.012	-0.330	-0.018	-0.146	-0.016	-0.070	-0.023	-0.029	-0.024	-0.071
PBE1W	-0.012	-0.016	0.070	0.071	-0.104	0.073	0.044	0.030	0.071	0.043	0.027	0.085	-0.211	0.084	-0.055	0.077	0.017	0.074	0.068	0.069	0.025
mPWLYP1W	-0.053	-0.056	0.048	0.048	-0.140	0.049	0.027	0.018	0.048	0.025	0.017	0.070	-0.292	0.055	-0.089	0.068	-0.002	0.055	0.047	0.054	0.000
PBELYP1W	-0.169	-0.171	-0.114	-0.114	-0.238	-0.111	-0.129	-0.131	-0.112	-0.130	-0.133	-0.098	-0.336	-0.094	-0.196	-0.106	-0.142	-0.114	-0.114	-0.114	-0.143
TPSSLYP1W	-0.094	-0.095	-0.040	-0.041	-0.177	-0.043	-0.063	-0.065	-0.045	-0.065	-0.067	-0.030	-0.279	-0.018	-0.129	-0.023	-0.071	-0.035	-0.040	-0.042	-0.073
mPW3LYP	-0.131	-0.132	-0.062	-0.061	-0.207	-0.072	-0.096	-0.098	-0.073	-0.098	-0.100	-0.059	-0.326	-0.067	-0.160	-0.064	-0.092	-0.061	-0.063	-0.060	-0.104
PBEPBE-D2	-0.208	-0.211	-0.158	-0.158	-0.261	-0.147	-0.167	-0.169	-0.148	-0.169	-0.171	-0.132	-0.342	-0.150	-0.229	-0.157	-0.182	-0.161	-0.160	-0.158	-0.182
BLYP-D2	0.041	-0.078	0.248	0.248	-0.147	0.351	0.266	0.261	0.349	0.302	0.260	0.364	-0.268	0.248	0.037	0.359	0.132	0.339	0.246	0.333	0.194
B3LYP-D2	-0.170	-0.175	-0.089	-0.090	-0.224	-0.085	-0.109	-0.108	-0.086	-0.112	-0.109	-0.075	-0.323	-0.087	-0.171	-0.088	-0.113	-0.095	-0.092	-0.093	-0.125
BP86-D2	0.988	0.990	1.385	1.414	0.570	1.149	1.105	1.033	1.145	1.096	1.026	1.283	0.367	1.201	0.682	1.295	1.036	1.316	1.288	1.403	1.089
TPSSTPSS-D2	-0.109	-0.112	-0.044	-0.045	-0.171	-0.054	-0.077	-0.077	-0.056	-0.079	-0.079	-0.040	-0.255	-0.052	-0.132	-0.039	-0.090	-0.043	-0.061	-0.050	-0.083
PBEPBE-D3	-0.115	-0.118	-0.050	-0.050	-0.188	-0.046	-0.068	-0.076	-0.047	-0.070	-0.077	-0.035	-0.284	-0.043	-0.148	-0.050	-0.090	-0.050	-0.053	-0.051	-0.086
BLYP-D3	-0.067	-0.090	0.176	0.174	-0.169	0.368	0.148	0.163	0.367	0.215	0.170	0.379	-0.285	0.203	-0.100	0.256	-0.017	0.211	0.176	0.203	0.124
B3LYP-D3	-0.099	-0.104	-0.011	-0.012	-0.193	-0.003	-0.036	-0.041	-0.004	-0.037	-0.042	0.007	-0.300	0.009	-0.138	-0.022	-0.052	-0.009	-0.012	-0.013	-0.056
BP86-D3	0.841	0.840	1.182	1.182	0.461	0.964	0.943	0.872	0.968	0.943	0.872	0.979	0.302	1.134	0.586	1.094	0.838	1.193	1.126	1	

B3PW91-D3	0.480	0.479	0.688	0.662	0.253	0.615	0.535	0.478	0.613	0.535	0.477	0.592	0.133	0.562	0.383	0.731	0.514	0.718	0.653	0.759	0.543
BMK-D3	0.770	0.750	1.011	1.011	0.553	0.926	0.775	0.769	0.769	0.772	0.788	0.788	0.329	0.848	0.641	0.858	0.867	0.924	0.962	0.969	0.804
CAM-B3LYP-D3	-0.259	-0.260	-0.193	-0.193	-0.320	-0.203	-0.222	-0.220	-0.205	-0.224	-0.222	-0.190	-0.418	-0.210	-0.275	-0.200	-0.219	-0.196	-0.196	-0.193	-0.231
LC-wPBE-D3	0.006	0.003	0.157	0.157	-0.113	0.162	0.125	0.112	0.161	0.124	0.108	0.167	-0.242	0.131	-0.039	0.140	0.084	0.173	0.155	0.166	0.087
M05-D3	-0.235	-0.235	-0.216	-0.216	-0.318	-0.226	-0.235	-0.231	-0.227	-0.237	-0.232	-0.219	-0.404	-0.280	-0.273	-0.200	-0.221	-0.195	-0.205	-0.199	-0.240
M052X-D3	-0.112	-0.113	-0.079	-0.079	-0.194	-0.110	-0.123	-0.122	-0.112	-0.124	-0.123	-0.096	-0.277	-0.105	-0.152	-0.103	-0.080	-0.078	-0.080	-0.080	-0.117
M06-D3	0.054	0.054	0.171	0.171	0.015	0.125	0.062	0.060	0.125	0.061	0.060	0.126	-0.030	0.043	0.040	0.116	0.162	0.168	0.170	0.117	0.093
M06L-D3	0.107	0.107	0.133	0.133	0.050	0.105	0.078	0.075	0.105	0.078	0.051	0.107	-0.052	0.069	0.090	0.050	0.132	0.090	0.104	0.116	0.086
M06HF-D3	0.115	0.115	0.128	0.128	0.076	0.128	0.124	0.121	0.128	0.124	0.121	0.128	-0.024	0.095	0.108	0.126	0.125	0.193	0.126	0.120	0.115
M062X-D3	0.059	0.058	0.132	0.132	-0.043	0.093	0.074	0.080	0.092	0.083	0.079	0.096	-0.254	-0.025	0.015	0.098	0.105	0.142	0.132	0.139	0.064
PBEPBE-D3BJ	-0.120	-0.124	-0.047	-0.047	-0.194	-0.044	-0.070	-0.077	-0.045	-0.072	-0.079	-0.033	-0.292	-0.045	-0.152	-0.045	-0.094	-0.048	-0.055	-0.049	-0.087
BLYP-D3BJ	0.141	0.115	0.403	0.404	0.004	0.430	0.336	0.313	0.464	0.338	0.312	0.478	-0.127	0.358	0.122	0.528	0.208	0.561	0.393	0.540	0.316
B3LYP-D3BJ	-0.033	-0.043	0.082	0.083	-0.143	0.165	0.106	0.085	0.163	0.121	0.089	0.172	-0.256	0.131	-0.084	0.151	0.012	0.077	0.073	0.164	0.056
BP86-D3BJ	0.893	0.893	1.153	1.152	0.588	0.982	0.944	0.902	0.958	0.936	0.898	1.002	0.536	1.003	0.788	1.103	0.933	1.130	1.163	1.207	0.958
TPSSTPSS-D3BJ	0.029	0.026	0.069	0.069	-0.089	0.072	0.055	0.045	0.071	0.054	0.040	0.077	-0.147	0.093	-0.038	0.071	0.036	0.071	0.067	0.067	0.037
PBE1PBE-D3BJ	-0.067	-0.071	0.002	0.002	-0.150	-0.006	-0.036	-0.048	-0.008	-0.037	-0.049	0.002	-0.244	-0.006	-0.107	-0.008	-0.042	0.001	-0.001	0.000	-0.044
BPBE-D3BJ	0.762	0.762	0.987	0.987	0.502	0.880	0.859	0.799	0.880	0.860	0.797	0.888	0.435	0.877	0.654	1.036	0.875	1.120	0.978	1.110	0.852
B3PW91-D3BJ	0.543	0.541	0.788	0.788	0.345	0.610	0.609	0.564	0.639	0.609	0.563	0.646	0.297	0.666	0.452	0.799	0.568	0.828	0.815	0.868	0.627
BMK-D3BJ	0.867	0.868	1.186	1.193	0.827	0.883	0.880	0.850	0.885	0.876	0.849	1.029	0.482	0.804	0.791	0.995	1.103	1.023	1.045	1.107	0.927
CAM-B3LYP-D3BJ	-0.173	-0.174	-0.096	-0.096	-0.253	-0.108	-0.130	-0.131	-0.109	-0.132	-0.133	-0.098	-0.367	-0.113	-0.201	-0.104	-0.130	-0.096	-0.098	-0.094	-0.142
LC-wPBE-D3BJ	0.070	0.064	0.220	0.220	-0.054	0.230	0.181	0.172	0.230	0.190	0.177	0.225	-0.180	0.227	0.022	0.212	0.128	0.234	0.218	0.262	0.152
B2PLYP	0.209	0.190	0.472	0.471	0.401	0.599	0.387	0.264	0.623	0.441	0.258	1.082	-0.092	0.256	0.175	0.280	0.287	0.214	0.338	0.199	0.353
B2PLYP(Full)	0.190	0.173	0.449	0.449	0.392	0.747	0.373	0.216	0.725	0.337	0.208	0.998	-0.094	0.241	0.159	0.141	0.275	0.175	0.283	0.122	0.328
B2PLYPD	-0.089	-0.099	-0.044	-0.045	-0.145	-0.019	-0.068	-0.081	-0.040	-0.076	-0.089	0.096	-0.253	-0.056	-0.110	-0.089	-0.067	-0.099	-0.063	-0.095	-0.077
B2PLYPD(Full)	-0.096	-0.107	-0.048	-0.049	-0.146	-0.022	-0.073	-0.093	-0.045	-0.081	-0.104	0.093	-0.255	-0.060	-0.120	-0.112	-0.075	-0.105	-0.072	-0.116	-0.084
B2PLYP-D3	-0.055	-0.065	0.026	0.026	-0.122	0.056	-0.029	-0.051	0.048	-0.039	-0.060	0.172	-0.251	-0.011	-0.079	-0.049	-0.027	-0.048	-0.012	-0.045	-0.031
B2PLYP-D3(Full)	-0.061	-0.071	0.019	0.013	-0.124	0.055	-0.034	-0.075	0.047	-0.046	-0.085	0.170	-0.254	-0.018	-0.097	-0.074	-0.042	-0.055	-0.039	-0.068	-0.042
B2PLYPD3	0.002	-0.007	0.053	0.053	-0.084	0.173	0.025	0.002	0.146	0.015	-0.007	0.267	-0.204	0.038	-0.047	0.005	0.012	0.008	0.024	0.006	0.024
B2PLYPD3(Full)	-0.004	-0.013	0.040	0.038	-0.086	0.169	0.018	-0.017	0.143	0.009	-0.026	0.265	-0.207	0.030	-0.066	-0.016	-0.006	0.001	0.012	-0.010	0.014
mPW2PLYP	-0.126	-0.130	-0.097	-0.097	-0.183	-0.086	-0.124	-0.134	-0.095	-0.133	-0.143	-0.013	-0.291	-0.118	-0.159	-0.134	-0.122	-0.136	-0.117	-0.136	-0.129
mPW2PLYP(Full)	-0.134	-0.138	-0.102	-0.103	-0.186	-0.089	-0.129	-0.143	-0.099	-0.139	-0.152	-0.016	-0.292	-0.122	-0.170	-0.154	-0.127	-0.143	-0.124	-0.153	-0.136
mPW2PLYPD	-0.221	-0.224	-0.202	-0.202	-0.264	-0.191	-0.215	-0.222	-0.198	-0.224	-0.230	-0.140	-0.345	-0.214	-0.244	-0.227	-0.219	-0.233	-0.218	-0.232	-0.223
mPW2PLYPD(Full)	-0.226	-0.229	-0.204	-0.206	-0.265	-0.193	-0.220	-0.227	-0.201	-0.229	-0.236	-0.142	-0.347	-0.218	-0.251	-0.241	-0.222	-0.239	-0.223	-0.242	-0.228
PBE0DH	0.080	0.073	0.161	0.161	-0.014	0.149	0.101	0.075	0.145	0.097	0.068	0.208	-0.120	0.129	0.039	0.112	0.116	0.133	0.146	0.130	0.099
PBE0DH(Full)	0.075	0.069	0.156	0.155	-0.016	0.148	0.096	0.066	0.142	0.092	0.062	0.207	-0.121	0.125	0.031	0.093	0.113	0.126	0.139	0.115	0.094
DSDPBEP86	0.004	-0.007	0.037	0.035	-0.067	0.052	-0.005	-0.037	0.041	-0.020	-0.049	0.179	-0.152	0.025	-0.051	-0.028	-0.004	-0.026	0.008	-0.029	-0.005
DSDPBEP86(Full)	-0.008	-0.018	0.029	0.025	-0.070	0.050	-0.019	-0.053	0.030	-0.031	-0.065	0.163	-0.155	0.017	-0.064	-0.072	-0.012	-0.041	-0.007	-0.056	-0.018
revDSDPBEP86	0.026	0.017	0.075	0.078	-0.049	0.067	0.012	-0.019	0.058	0.002	-0.029	0.193	-0.142	0.048	-0.033	-0.013	0.019	-0.006	0.034	-0.004	0.017
revDSDPBEP86(Full)	0.016	0.003	0.061	0.059	-0.057	0.064	0.004	-0.035	0.054	-0.010	-0.047	0.179	-0.145	0.037	-0.051	-0.049	0.008	-0.019	0.019	-0.033	0.003
PBEQIDH	0.130	0.121	0.175	0.172	0.057	0.184	0.117	0.074	0.173	0.102	0.061	0.329	-0.061	0.127	0.071	0.084	0.131	0.103	0.141	0.098	0.120
PBEQIDH(Full)	0.117	0.108	0.160	0.158	0.051	0.177	0.108	0.057	0.164	0.089	0.045	0.316	-0.066	0.121	0.057	0.046	0.123	0.088	0.123	0.058	0.105
MP2	0.219	0.188	0.203	0.198	0.190	0.273	0.150	0.072	0.241	0.120	0.046	0.636	0.089	0.138	0.147	0.024	0.143	0.012	0.138	0.003	0.161
MP2(Full)	0.182	0.149	0.165	0.158	0.177	0.253	0.120	0.033	0.224	0.086	0.002	0.599	0.080	0.117	0.099	-0.054	0.114	-0.022	0.094	-0.061	0.126
MP3	0.274	0.243	0.249	0.250	0.233	0.277	0.171	0.089	0.244	0.140	0.058	0.601	0.106	0.161	0.205	0.034	0.192	0.025	0.164	0.016	0.187
MP3(Full)	0.240	0.206	0.207	0.206	0.222	0.261	0.150	0.054	0.230	0.116	0.023	0.571	0.101	0.137	0.153	-0.043	0.165	0.000	0.121	-0.046	0.154
CISD	0.325	0.295	0.347	0.356	0.250	0.328	0.211	0.127	0.312	0.190	0.109	0.594	0.122	0.193	0.252	0.093	0.268	0.104	0.260	0.101	0.242
CISD(Full)	0.289	0.261	0.312	0.317	0.251	0.334	0.203	0.101	0.317	0.179	0.086	0.574	0.116	0.174	0.201	0.012	0.241	0.076	0.224	0.030	0.215
CCSD	0.282	0.253	0.272	0.270	0.229	0.292	0.179	0.096	0.271	0.151	0.073	0.599	0.116	0.163	0.216	0.049	0.209	0.047	0.190	0.033	0.200
CCSD(Full)	0.245	0.214	0.228	0.225	0.221	0.274	0.156	0.062	0.254	0.126	0.031	0.558	0.107	0.139	0.159	-0.033	0.178	0.011	0.142	-0.033	0.163
QCISD	0.280	0.251	0.272	0.270	0.228	0.293	0.180	0.096	0.266	0.151	0.074	0.601	0.114	0.160	0.214	0.047	0.206	0.045	0.189	0.032	0.198
QCISD(Full)	0.243	0.212	0.228	0.228	0.220	0.275	0.155	0.062	0.249	0.126	0.033	0.570	0.107	0.136	0.157	-0.034	0.176	0.009	0.140	-0.033	0.163
BD	0.249	0.209	0.207	0.215	0.215	0.280	0.159	0.060	0.241	0.127	0.037	0.585	0.109	0.129	0.165	-0.029	0.160	0.009	0.097	-0.022	0.160
BD(Full)	0.249	0.209	0.207	0.212	0.215	0.280	0.159	0.059	0.241	0.127	0.037	0.585	0.109	0.129	0.165	-0.029	0.160	0.009	0.097	-0.022	0.160
MP																					

QCISD(T)	0.249	0.215	0.198	0.172	0.207	0.260	0.143	0.069	0.224	0.110	0.036	0.565	0.103	0.115	0.174	0.004	0.133	-0.002	0.105	-0.013	0.153
QCISD(T)(Full)	0.199	0.166	0.163	0.168	0.186	0.235	0.090	0.037	0.189	0.051	-0.021	0.530	0.097	0.098	0.107	-0.053	0.115	-0.023	0.084	-0.049	0.118
BD(T)	0.207	0.186	0.187	0.150	0.160	0.224	0.114	0.033	0.187	0.058	0.021	0.508	0.100	0.063	0.127	0.007	0.077	-0.006	0.098	-0.013	0.124
BD(T)(Full)	0.180	0.111	0.182	0.178	0.209	0.235	0.119	0.046	0.271	0.090	0.003	0.556	0.085	0.041	0.057	-0.029	0.091	-0.009	0.074	-0.024	0.123
MP5	0.257	0.224	0.192	0.199	0.210	0.257	0.142	0.069	0.222	0.111	0.033	0.569	0.105	0.120	0.180	0.007	0.141	0.015			0.170
MP5(Full)	0.213	0.177	0.180	0.176	0.177	0.231	-0.241	0.023	0.193	0.052	-0.021	0.498	0.098	0.101	0.118	-0.050	0.138	-0.025			0.113
Ave	0.192	0.185	0.401	0.401	0.078	0.351	0.302	0.271	0.347	0.299	0.268	0.373	-0.056	0.333	0.149	0.343	0.277	0.392	0.391	0.415	0.286
PM7	0.228																				
PM6	0.270																				
Dreiding	0.000																				
UFF	0.094																				

Table S4. Imaginary frequencies (cm⁻¹) of 36 methods and 20 basis sets.

Molecules	Method/basis set and imaginary frequency
⁴ He ₂ (62) ^a	B3LYP/6-311++G(2d,2p) (4.23 <i>i</i> , SGG); B3LYP/6-311++G(2df,2pd) (7.30 <i>i</i> , SGG); B3LYP/6-311++G(3d2f,3p2d) (2.32 <i>i</i> , SGG); B3LYP/6-311++G(df,pd) (6.80 <i>i</i> , SGG); B3LYP/6-311++G** (2.32 <i>i</i> , SGG); B3LYP/aug-cc-pVDZ (8.80 <i>i</i> , SGG); B3LYP/cc-pVDZ (28.21 <i>i</i> , SGG); B3LYP/cc-pVTZ (11.45 <i>i</i> , SGG); B3LYP-D2/6-311++G(2d,2p) (4.78 <i>i</i> , SGG); B3LYP-D2/6-311++G(2df,2pd) (5.53 <i>i</i> , SGG); B3LYP-D2/6-311++G(3d2f,3p2d) (16.90 <i>i</i> , SGG); B3LYP-D2/6-311++G(3d,3p) (13.10 <i>i</i> , SGG); B3LYP-D2/6-311++G(3df,3pd) (13.40 <i>i</i> , SGG); B3LYP-D2/6-311++G(df,pd) (17.12 <i>i</i> , SGG); B3LYP-D2/6-311++G** (16.90 <i>i</i> , SGG); B3LYP-D2/aug-cc-pV5Z (14.93 <i>i</i> , SGG); B3LYP-D2/aug-cc-pVDZ (1.93 <i>i</i> , SGG); B3LYP-D2/aug-cc-pVQZ (17.73 <i>i</i> , SGG); B3LYP-D2/aug-cc-pVTZ (17.07 <i>i</i> , SGG); B3LYP-D2/cc-pV5Z (14.90 <i>i</i> , SGG); B3LYP-D2/cc-pVQZ (17.97 <i>i</i> , SGG); B3LYP-D2/Def2QZVP (14.64 <i>i</i> , SGG); B3LYP-D2/Def2QZVPP (14.64 <i>i</i> , SGG); B3LYP-D3/6-311++G(3d,3p) (15.58 <i>i</i> , SGG); B3LYP-D3/6-311++G(3df,3pd) (15.83 <i>i</i> , SGG); B3LYP-D3/aug-cc-pVDZ (8.65 <i>i</i> , SGG); B3LYP-D3BJ/6-311++G(2d,2p) (16.85 <i>i</i> , SGG); B3LYP-D3BJ/6-311++G(3df,3pd) (11.09 <i>i</i> , SGG); B3LYP-D3BJ/aug-cc-pVQZ (15.71 <i>i</i> , SGG); B3LYP-D3BJ/cc-pV5Z (19.68 <i>i</i> , SGG); B3LYP-D3BJ/Def2QZVP (20.73 <i>i</i> , SGG); B3LYP-D3BJ/Def2QZVPP (20.73 <i>i</i> , SGG); BD(T)/6-311++G(3d2f,3p2d) (20.25 <i>i</i> , SGG); BD(T)/6-311++G(3d,3p) (40.83 <i>i</i> , SGG); BD(T)/6-311++G(3df,3pd) (27.07 <i>i</i> , SGG); BD(T)/6-311++G** (20.25 <i>i</i> , SGG); BD(T)/aug-cc-pVDZ (23.51 <i>i</i> , SGG); BD(T)/Def2TZVP (23.72 <i>i</i> , SGG);

	BD(T)(Full)/6-311++G(3d2f,3p2d) (20.25 <i>i</i> , SGG); BD(T)(Full)/6-311++G(3d,3p) (40.83 <i>i</i> , SGG); BD(T)(Full)/6-311++G(3df,3pd) (27.07 <i>i</i> , SGG); BD(T)(Full)/6-311++G** (20.25 <i>i</i> , SGG); BD(T)(Full)/aug-cc-pVDZ (23.51 <i>i</i> , SGG); BD(T)(Full)/Def2TZVP (23.73 <i>i</i> , SGG); HF/aug-cc-pVDZ (1.27 <i>i</i> , SGG); HF/Def2TZVP (1.10 <i>i</i> , SGG); M06-D3/cc-pVDZ (91.51 <i>i</i> , SGG); PBEB95/6-311++G(2d,2p) (112.50 <i>i</i> , SGG); PBEB95/6-311++G(2df,2pd) (112.54 <i>i</i> , SGG); PBEB95/6-311++G(3d2f,3p2d) (115.49 <i>i</i> , SGG); PBEB95/6-311++G(3d,3p) (112.85 <i>i</i> , SGG); PBEB95/6-311++G(3df,3pd) (112.89 <i>i</i> , SGG); PBEB95/6-311++G(df,pd) (115.53 <i>i</i> , SGG); PBEB95/6-311++G** (115.49 <i>i</i> , SGG); PBEB95/aug-cc-pVDZ (116.96 <i>i</i> , SGG); PW6B95D3/aug-cc-pV5Z (104.00 <i>i</i> , SGG); PW6B95D3/aug-cc-pVQZ (104.42 <i>i</i> , SGG); PW6B95D3/cc-pV5Z (103.49 <i>i</i> , SGG); PW6B95D3/cc-pVQZ (103.49 <i>i</i> , SGG); PW6B95D3/cc-pVTZ (104.37 <i>i</i> , SGG); PW6B95D3/Def2QZVP (103.58 <i>i</i> , SGG); PW6B95D3/Def2QZVPP (103.58 <i>i</i> , SGG)
Ne ₂ (27)	B3LYP/aug-cc-pV5Z (8.21 <i>i</i> , SGG); B3LYP/Def2QZVPP (1.05 <i>i</i> , SGG); BD(T)/aug-cc-pVQZ (7.62 <i>i</i> , SGG); BD(T)/cc-pV5Z (14.71 <i>i</i> , SGG); BD(T)/cc-pVDZ (14.57 <i>i</i> , SGG); BD(T)/Def2QZVP (16.30 <i>i</i> , SGG); BD(T)/Def2QZVPP (16.30 <i>i</i> , SGG); BD(T)(Full)/cc-pV5Z (13.70 <i>i</i> , SGG); BD(T)(Full)/Def2QZVP (14.58 <i>i</i> , SGG); BD(T)(Full)/Def2QZVPP (14.58 <i>i</i> , SGG); LC-PBEB95/Def2TZVP (58.41 <i>i</i> , SGG); LC-PBEB95/Def2TZVPP (58.41 <i>i</i> , SGG); M06/6-311G** (65.44 <i>i</i> , SGG); MN15/cc-pVQZ (40.52 <i>i</i> , SGG); PBEB95/6-311++G(3d2f,3p2d) (39.52 <i>i</i> , SGG); PBEB95/aug-cc-pV5Z (49.62 <i>i</i> , SGG); PBEB95/aug-cc-pVDZ (29.33 <i>i</i> , SGG);

	PBEB95/aug-cc-pVQZ (61.42 <i>i</i> , SGG); PBEB95/cc-pVTZ (59.38 <i>i</i> , SGG); PW6B95D3/6-311++G(3d,3p) (31.77 <i>i</i> , SGG); PW6B95D3/6-311++G(3df,3pd) (31.79 <i>i</i> , SGG); PW6B95D3/cc-pVQZ (47.10 <i>i</i> , SGG); PW6B95D3/Def2TZVP (48.57 <i>i</i> , SGG); PW6B95D3/Def2TZVPP (48.57 <i>i</i> , SGG); wB97X/6-311G** (15.09 <i>i</i> , SGG); wB97X/Def2QZVP (51.78 <i>i</i> , SGG); wB97X/Def2QZVPP (51.78 <i>i</i> , SGG)
⁴⁰ Ar ₂ (7)	B3LYP/6-311++G(2d,2p) (4.95 <i>i</i> , SGG); B3LYP/6-311++G(2df,2pd) (5.37 <i>i</i> , SGG); B3LYP/cc-pVDZ (5.85 <i>i</i> , SGG); BD(T)/6-311++G(3d2f,3p2d) (3.77 <i>i</i> , SGG); BD(T)/6-311G** (4.65 <i>i</i> , SGG); BD(T)/aug-cc-pVTZ (70.07 <i>i</i> , SGG); BD(T)(Full)/6-311++G(3d2f,3p2d) (11.44 <i>i</i> , SGG)
⁸⁴ Kr ₂ (2)	B3LYP/6-311G** (3.06 <i>i</i> , SGG); B3LYP/cc-pVTZ (3.66 <i>i</i> , SGG)
HeNe (19)	B3LYP/cc-pV5Z (11.86 <i>i</i> , SG); BD(T)/aug-cc-pV5Z (19.09 <i>i</i> , SG); BD(T)/aug-cc-pVQZ (15.45 <i>i</i> , SG); BD(T)/cc-pV5Z (25.41 <i>i</i> , SG); BD(T)/Def2QZVP (28.70 <i>i</i> , SG); BD(T)/Def2QZVPP (28.70 <i>i</i> , SG); BD(T)(Full)/aug-cc-pV5Z (11.09 <i>i</i> , SG); BD(T)(Full)/aug-cc-pVQZ (12.91 <i>i</i> , SG); BD(T)(Full)/cc-pV5Z (24.56 <i>i</i> , SG); BD(T)(Full)/Def2QZVP (27.44 <i>i</i> , SG); BD(T)(Full)/Def2QZVPP (27.44 <i>i</i> , SG); HF/aug-cc-pVTZ (1.77 <i>i</i> , SG); LC-PBEB95/cc-pVDZ (69.86 <i>i</i> , SG); LC-wPBE-D3/aug-cc-pVDZ (1.93 <i>i</i> , SG); M06-D3/aug-cc-pV5Z (21.82 <i>i</i> , SG); wB97X/6-311++G(2d,2p) (49.31 <i>i</i> , SG); wB97X/6-311++G(2df,2pd) (57.38 <i>i</i> , SG); wB97X/cc-pVDZ (43.15 <i>i</i> , SG); wB97X/cc-pVQZ (47.94 <i>i</i> , SG)
HeAr (10)	B3LYP/6-311G** (12.66 <i>i</i> , SG); B3LYP/Def2TZVP (21.29 <i>i</i> , SG); BD(T)/6-311++G(3df,3pd) (41.91 <i>i</i> , SG);

	BD(T)/aug-cc-pVTZ (41.41 <i>i</i> , SG); BD(T)(Full)/6-311++G(2d,2p) (4.99 <i>i</i> , SG); BD(T)(Full)/6-311++G(2df,2pd) (37.65 <i>i</i> , SG); BD(T)(Full)/6-311++G(3d2f,3p2d) (36.94 <i>i</i> , SG); BD(T)(Full)/6-311++G(3d,3p) (48.84 <i>i</i> , SG); M06/aug-cc-pVQZ (21.96 <i>i</i> , SG); M06-D3/aug-cc-pVQZ (5.61 <i>i</i> , SG)
HeKr (14)	B3LYP-D2/6-311++G(df,pd) (6.97 <i>i</i> , SG); B3LYP-D2/6-311++G** (6.23 <i>i</i> , SG); BD(T)/6-311++G(2df,2pd) (35.13 <i>i</i> , SG); BD(T)(Full)/6-311G** (19.67 <i>i</i> , SG); BD(T)(Full)/aug-cc-pV5Z (8.45 <i>i</i> , SG); MN15L/6-311++G(3df,3pd) (89.83 <i>i</i> , SG); MN15L/Def2TZVPP (106.44 <i>i</i> , SG); PBEB95/6-311++G(2d,2p) (72.67 <i>i</i> , SG); PBEB95/6-311++G(2df,2pd) (72.75 <i>i</i> , SG); PBEB95/6-311++G(3d,3p) (72.89 <i>i</i> , SG); PBEB95/6-311++G(3df,3pd) (72.96 <i>i</i> , SG); PBEB95/aug-cc-pVDZ (78.07 <i>i</i> , SG); PW6B95D3/Def2TZVP (66.25 <i>i</i> , SG); PW6B95D3/Def2TZVPP (66.18 <i>i</i> , SG)
²⁰ Ne ⁴⁰ Ar (10)	LC-PBEB95/Def2TZVP (61.94 <i>i</i> , SG); LC-PBEB95/Def2TZVPP (61.93 <i>i</i> , SG); MN15L/aug-cc-pVTZ (25.88 <i>i</i> , SG); MN15L/Def2TZVP (59.52 <i>i</i> , SG); MN15L/Def2TZVPP (59.51 <i>i</i> , SG); PBEB95/6-311++G(3d2f,3p2d) (68.56 <i>i</i> , SG); PBEB95/6-311++G(df,pd) (68.93 <i>i</i> , SG); PBEB95/6-311++G** (68.86 <i>i</i> , SG); PBEB95/aug-cc-pVDZ (61.14 <i>i</i> , SG); PBEB95/aug-cc-pVTZ (59.09 <i>i</i> , SG)
²² Ne ³⁶ Ar (10)	B3LYP/aug-cc-pV5Z (6.73 <i>i</i> , SG); LC-PBEB95/Def2TZVP (60.30 <i>i</i> , SG); LC-PBEB95/Def2TZVPP (60.29 <i>i</i> , SG); LC-wPBE-D3/aug-cc-pVQZ (6.61 <i>i</i> , SG); MN15L/aug-cc-pVTZ (23.67 <i>i</i> , SG); PBEB95/6-311++G(3d2f,3p2d) (67.46 <i>i</i> , SG); PBEB95/6-311++G(df,pd) (67.83 <i>i</i> , SG); PBEB95/6-311++G** (67.76 <i>i</i> , SG); PBEB95/aug-cc-pVDZ (58.92 <i>i</i> , SG); PBEB95/aug-cc-pVTZ (58.33 <i>i</i> , SG)

²⁰ Ne ⁸⁴ Kr (1)	B3LYP/cc-pV5Z (3.68 <i>i</i> , SG)
⁴⁰ Ar ⁸⁴ Kr (4)	B3LYP/Def2TZVP (1.52 <i>i</i> , SG); B3LYP/Def2TZVPP (1.42 <i>i</i> , SG); BD(T)/6-311++G(df,pd) (7.57 <i>i</i> , SG); BD(T)(Full)/6-311++G(3d2f,3p2d) (4.86 <i>i</i> , SG)

^a The number in the bracket is the total number of method/basis sets with imaginary frequencies when calculating this molecule.

Table S5. MADs (Å) of 11-RG-Mols calculated by 54 methods and 60 basis sets.^{a,b,c,d}

	BS21	BS22	BS23	BS24	BS25	BS26	BS27	BS28	BS29	BS30	BS31	BS32	BS33	BS34	BS35	BS36	BS37	BS38	BS39	BS40	
	BS41	BS42	BS43	BS44	BS45	BS46	BS47	BS48	BS49	BS50	BS51	BS52	BS53	BS54	BS55	BS56	BS57	BS58	BS59	BS60	
	BS61	BS62	BS63	BS64	BS65	BS66	BS67	BS68	BS69	BS70	BS71	BS72	BS73	BS74	BS75	BS76	BS77	BS78	BS79	BS80	Ave
MP2	0.178	0.153	0.715	0.366	0.153	0.153	0.153	0.715	1.064	0.469	1.192	0.971	0.675	0.641	0.310	0.134	0.981				
	0.200	0.259	0.226	0.270	0.585	0.381	0.623	0.501	0.718	0.258	0.242	0.170	0.295	0.130	0.237	0.334	0.379	0.253	0.269	0.162	
	0.285	0.124	0.224	0.349	0.153	0.140	0.219	0.147	0.140	0.468	0.251	0.294	0.174	0.071	0.283	0.154	0.073	0.099	0.893	0.096	0.354
MP2(Full)	0.175	0.153	0.636	0.319	0.153	0.153	0.153	0.647	0.831	0.430	1.192	0.971	0.675	0.641	0.307	0.134	0.981				
	0.188	0.230	0.228	0.267	0.565	0.369	0.599	0.490	0.692	0.266	0.247	0.161	0.279	0.122	0.226	0.320	0.364	0.237	0.275	0.159	
	0.274	0.122	0.207	0.339	0.149	0.159	0.211	0.138	0.207	0.159	0.254	0.285	0.150	0.074	0.221	0.133	0.088	0.147	0.892	0.092	0.336
DSDPBEP86	0.207	0.295	0.150	0.054	0.295	0.295	0.295	0.149	0.269	0.043	0.760	0.669	0.135	0.198	0.232	0.040	0.753				
	0.140	0.045	0.420	0.215	0.180	0.177	0.152	0.254	0.231	0.267	0.298	0.081	0.177	0.099	0.129	0.054	0.121	0.038	0.273	0.083	
	0.173	0.100	0.037	0.118	0.053	0.114	0.124	0.047	0.162	0.222	0.337	0.122	0.082	0.063	0.121	0.089	0.075	0.101	0.271	0.001	0.187
DSDPBEP86(Full)	0.208	0.299	0.135	0.044	0.299	0.299	0.299	0.139	0.256	0.035	0.760	0.669	0.135	0.198	0.233	0.040	0.754				
	0.137	0.037	0.423	0.217	0.179	0.175	0.146	0.253	0.226	0.270	0.301	0.085	0.172	0.103	0.132	0.050	0.118	0.035	0.276	0.092	
	0.179	0.110	0.032	0.111	0.052	0.151	0.130	0.066	0.190	0.217	0.339	0.121	0.079	0.075	0.121	0.087	0.090	0.134	0.272	0.001	0.189
revDSDPBEP86	0.205	0.287	0.161	0.072	0.287	0.287	0.287	0.161	0.285	0.050	0.769	0.678	0.142	0.210	0.232	0.058	0.757				
	0.144	0.060	0.415	0.212	0.186	0.183	0.159	0.262	0.242	0.264	0.293	0.084	0.183	0.100	0.136	0.064	0.132	0.046	0.270	0.084	
	0.179	0.101	0.041	0.126	0.059	0.121	0.128	0.053	0.132	0.231	0.332	0.134	0.076	0.061	0.128	0.087	0.067	0.084	0.271	0.014	0.191
revDSDPBEP86(Full)	0.205	0.290	0.146	0.054	0.290	0.290	0.290	0.150	0.271	0.045	0.769	0.678	0.142	0.209	0.233	0.058	0.757				
	0.142	0.056	0.418	0.214	0.184	0.181	0.156	0.259	0.236	0.267	0.296	0.086	0.180	0.102	0.135	0.061	0.129	0.043	0.273	0.088	
	0.178	0.105	0.037	0.122	0.062	0.137	0.130	0.058	0.175	0.227	0.334	0.132	0.071	0.066	0.128	0.084	0.076	0.105	0.271	0.014	0.191
B2PLYPD	0.307	0.373	0.127	0.103	0.373	0.373	0.373	0.126	0.147	0.108	0.754	0.647	0.164	0.285	0.317	0.147	0.790				
	0.210	0.096	0.524	0.311	0.229	0.178	0.127	0.220	0.289	0.343	0.365	0.192	0.279	0.206	0.191	0.092	0.259	0.128	0.347	0.193	
	0.277	0.197	0.128	0.264	0.138	0.161	0.192	0.139	0.177	0.162	0.390	0.164	0.105	0.119	0.161	0.134	0.133	0.155	0.352	0.134	0.245
B2PLYPD(Full)	0.307	0.376	0.118	0.103	0.376	0.376	0.376	0.120	0.143	0.101	0.754	0.647	0.164	0.285	0.317	0.147	0.790				
	0.209	0.094	0.525	0.312	0.228	0.178	0.127	0.221	0.296	0.344	0.366	0.194	0.277	0.207	0.193	0.093	0.262	0.129	0.348	0.195	
	0.277	0.200	0.129	0.256	0.142	0.169	0.203	0.140	0.196	0.166	0.391	0.163	0.112	0.130	0.161	0.143	0.143	0.170	0.353	0.132	0.247
B2PLYPD-D3	0.301	0.378	0.155	0.080	0.378	0.378	0.378	0.153	0.216	0.138	0.732	0.665	0.168	0.332	0.299	0.110	0.774				
	0.189	0.094	0.534	0.300	0.247	0.202	0.147	0.287	0.347	0.335	0.363	0.161	0.262	0.176	0.237	0.089	0.242	0.083	0.340	0.163	
	0.262	0.167	0.083	0.230	0.154	0.180	0.188	0.155	0.175	0.233	0.391	0.170	0.136	0.083	0.155	0.118	0.095	0.132	0.059	0.035	0.239
B2PLYPD-D3(Full)	0.302	0.380	0.142	0.081	0.380	0.379	0.380	0.145	0.209	0.138	0.732	0.665	0.168	0.332	0.300	0.110	0.774				
	0.187	0.096	0.535	0.301	0.251	0.201	0.145	0.257	0.305	0.337	0.364	0.163	0.263	0.179	0.228	0.092	0.234	0.084	0.342	0.166	
	0.264	0.170	0.083	0.236	0.157	0.180	0.188	0.163	0.197	0.196	0.392	0.169	0.148	0.091	0.155	0.126	0.118	0.152	0.060	0.036	0.239
B2PLYPD3	0.271	0.345	0.169	0.086	0.345	0.345	0.345	0.168	0.339	0.126	0.761	0.696	0.153	0.368	0.276	0.083	0.769				
	0.177	0.176	0.518	0.271	0.242	0.194	0.139	0.270	0.335	0.313	0.342	0.134	0.253	0.152	0.222	0.064	0.226	0.061	0.318	0.135	
	0.250	0.144	0.056	0.258	0.147	0.162	0.226	0.092	0.154	0.261	0.374	0.195	0.092	0.054	0.191	0.063	0.054	0.092	0.397	0.000	0.236
B2PLYPD3(Full)	0.271	0.347	0.160	0.077	0.347	0.347	0.347	0.161	0.332	0.118	0.761	0.696	0.153	0.368	0.277	0.083	0.769				
	0.175	0.151	0.519	0.272	0.242	0.193	0.136	0.266	0.331	0.314	0.344	0.136	0.256	0.155	0.225	0.062	0.224	0.058	0.320	0.139	
	0.244	0.148	0.056	0.223	0.157	0.158	0.228	0.105	0.164	0.259	0.375	0.195	0.103	0.061	0.191	0.073	0.063	0.107	0.396	0.000	0.236
MP3	0.174	0.143	0.728	0.409	0.143	0.143	0.143	0.729	1.049	0.487	1.196	0.954	0.687	0.627	0.325	0.167	0.985				
	0.223	0.284	0.219	0.258	0.588	0.368	0.597	0.492	0.699	0.249	0.233	0.159	0.288	0.122	0.224	0.337	0.379	0.257	0.257	0.150	
	0.277	0.116	0.226	0.353	0.174	0.164	0.205	0.157	0.156	0.451	0.239	0.283	0.180	0.077	0.269	0.161	0.065	0.065	0.916	0.792	0.365
MP3(Full)	0.172	0.143	0.655	0.360	0.143	0.143	0.143	0.667	0.837	0.463	1.196	0.954	0.687	0.627	0.323	0.167	0.985				
	0.211	0.259	0.220	0.254	0.572	0.358	0.575	0.482	0.676	0.253	0.235	0.151	0.272	0.115	0.211	0.324	0.366	0.242	0.262	0.158	
	0.277	0.124	0.211	0.344	0.162	0.187	0.208	0.148	0.183	0.438	0.242	0.274	0.159	0.071	0.201	0.143	0.063	0.095	0.902	0.087	0.340
CCSD	0.166	0.142	0.710	0.409	0.142	0.142	0.142	0.710	1.030	0.476	1.184	0.947	0.667	0.622	0.313	0.163	0.984				
	0.230	0.292	0.220	0.252	0.581	0.354	0.594	0.492	0.699	0.244	0.236	0.155	0.298	0.130	0.237	0.342	0.400	0.269	0.251	0.141	
	0.282	0.118	0.243	0.380	0.180	0.166	0.209	0.168	0.163	0.453	0.240	0.288	0.191	0.083	0.281	0.178	0.069	0.073	0.901	0.107	0.353
CCSD(Full)	0.163	0.142	0.641	0.358	0.142	0.142	0.142	0.652	0.837	0.451	1.184	0.947	0.667	0.622	0.314	0.163	0.984				
	0.219	0.264	0.221	0.248	0.558	0.349	0.568	0.484	0.674	0.244	0.236	0.136	0.277	0.117	0.218	0.329	0.384	0.254	0.257	0.141	
	0.277	0.121	0.227	0.365	0.170	0.188	0.207	0.163	0.189	0.442	0.244	0.279	0.168	0.075	0.219	0.159	0.076	0.092	0.900	0.103	0.340
QCISD	0.172	0.142	0.707	0.406	0.142	0.142	0.142	0.707	1.030	0.472	1.182	0.950	0.665	0.627	0.319	0.164	0.983				
	0.232	0.293	0.220	0.256	0.579	0.360	0.596	0.494	0.701	0.246	0.237	0.159	0.299	0.130	0.237	0.343	0.401	0.270	0.253	0.141	
	0.283	0.118	0.244	0.381	0.179	0.166	0.210	0.166	0.163	0.455	0.241	0.288	0.190	0.082	0.282	0.172	0.068	0.072	0.887	0.104	0.353

[illegible]

PBEB95	0.339	0.381	0.113	0.118	0.381	0.381	0.381	0.114	0.077	0.138	0.708	0.578	0.138	0.082	0.310	0.181	0.763	0.076	0.054	0.046	
	0.247	0.071	0.497	0.358	0.193	0.204	0.090	0.114	0.066	0.389	0.395	0.184	0.095	0.165	0.095	0.088	0.063	0.089	0.391	0.185	
	0.096	0.184	0.089	0.063	0.060	0.145	0.097	0.061	0.166	0.105	0.449	0.076	0.056	0.063	0.071	0.076	0.065	0.073	0.019	0.086	0.191
LGB95	0.283	0.318	0.083	0.100	0.318	0.318	0.318	0.097	0.092	0.106	0.684	0.554	0.096	0.072	0.294	0.112	0.753	0.116	0.122	0.070	
	0.230	0.065	0.373	0.300	0.153	0.142	0.081	0.116	0.080	0.334	0.359	0.119	0.093	0.120	0.093	0.073	0.081	0.066	0.336	0.119	
	0.094	0.119	0.066	0.081	0.096	0.157	0.095	0.098	0.160	0.116	0.411	0.102	0.100	0.098	0.104	0.102	0.099	0.088	0.085	0.085	0.177
LGKCIS	0.317	0.387	0.115	0.124	0.387	0.387	0.387	0.115	0.092	0.118	0.757	0.644	0.163	0.116	0.361	0.177	0.799	0.437	0.167	0.198	
	0.258	0.065	0.468	0.339	0.219	0.205	0.132	0.099	0.100	0.368	0.385	0.195	0.114	0.207	0.112	0.118	0.081	0.144	0.371	0.196	
	0.114	0.185	0.144	0.080	0.069	0.136	0.112	0.068	0.138	0.095	0.421	0.104	0.056	0.041	0.105	0.061	0.041	0.045	0.001	0.031	0.208
LC-PBEB95	0.227	0.275	0.081	0.081	0.275	0.275	0.275	0.081	0.098	0.106	0.689	0.577	0.072	0.083	0.355	0.140	0.761	0.210	0.066	0.069	
	0.197	0.086	0.410	0.324	0.156	0.141	0.086	0.095	0.085	0.353	0.368	0.144	0.099	0.137	0.099	0.087	0.086	0.087	0.354	0.146	
	0.100	0.138	0.087	0.086	0.097	0.140	0.099	0.095	0.140	0.095	0.426	0.121	0.100	0.107	0.120	0.099	0.096	0.110	0.088	0.087	0.179
LC-PKZBB95	0.224	0.272	0.081	0.081	0.272	0.272	0.272	0.081	0.097	0.106	0.688	0.576	0.071	0.083	0.350	0.139	0.760	0.192	0.066	0.068	
	0.176	0.085	0.387	0.320	0.155	0.140	0.086	0.096	0.084	0.349	0.363	0.143	0.100	0.136	0.101	0.086	0.085	0.101	0.351	0.144	
	0.101	0.137	0.086	0.085	0.098	0.148	0.099	0.095	0.139	0.104	0.403	0.130	0.109	0.107	0.120	0.098	0.096	0.109	0.088	0.087	0.178
LC-LGB95	0.249	0.253	0.080	0.081	0.253	0.253	0.253	0.080	0.098	0.107	0.689	0.577	0.072	0.083	0.354	0.140	0.761	0.190	0.068	0.105	
	0.198	0.086	0.392	0.324	0.156	0.140	0.086	0.096	0.085	0.361	0.369	0.144	0.100	0.136	0.109	0.087	0.086	0.087	0.363	0.145	
	0.102	0.137	0.087	0.086	0.106	0.125	0.099	0.095	0.115	0.105	0.426	0.123	0.110	0.108	0.120	0.099	0.098	0.110	0.087	0.087	0.179
LC-LGKCIS	0.344	0.417	0.091	0.085	0.417	0.417	0.417	0.091	0.215	0.134	0.770	0.703	0.153	0.218	0.406	0.223	0.772	0.173	0.080	0.204	
	0.240	0.159	0.513	0.368	0.204	0.251	0.143	0.195	0.211	0.378	0.400	0.225	0.205	0.238	0.187	0.152	0.219	0.168	0.381	0.227	
	0.207	0.221	0.167	0.218	0.137	0.130	0.180	0.132	0.127	0.188	0.432	0.193	0.184	0.146	0.193	0.180	0.102	0.126	0.146	0.101	0.248
B3LYP-D2	0.361	0.412	0.122	0.152	0.412	0.412	0.412	0.122	0.087	0.119	0.721	0.593	0.147	0.220	0.378	0.199	0.776	0.199	0.379	0.351	
	0.253	0.105	0.552	0.363	0.186	0.224	0.122	0.242	0.207	0.380	0.398	0.227	0.278	0.243	0.278	0.124	0.202	0.159	0.383	0.229	
	0.276	0.231	0.160	0.204	0.224	0.250	0.244	0.145	0.181	0.213	0.422	0.232	0.124	0.169	0.233	0.140	0.167	0.242	0.151	0.163	0.265
M06-D3	0.126	0.155	0.069	0.067	0.155	0.155	0.155	0.070	0.173	0.071	0.681	0.637	0.065	0.126	0.147	0.146	0.697	0.166	0.128	0.107	
	0.070	0.077	0.309	0.087	0.068	0.060	0.137	0.062	0.137	0.143	0.151	0.057	0.060	0.066	0.060	0.136	0.136	0.136	0.143	0.057	
	0.059	0.067	0.136	0.136	0.061	0.058	0.059	0.061	0.058	0.062	0.156	0.059	0.060	0.061	0.059	0.060	0.061	0.061	0.074	0.075	0.129
M062X-D3	0.329	0.371	0.137	0.129	0.371	0.371	0.371	0.136	0.153	0.143	0.777	0.722	0.166	0.186	0.359	0.208	0.722	0.186	0.134	0.099	
	0.247	0.133	0.539	0.342	0.225	0.154	0.148	0.098	0.145	0.345	0.355	0.152	0.102	0.155	0.101	0.147	0.143	0.150	0.347	0.155	
	0.105	0.151	0.150	0.143	0.079	0.138	0.103	0.082	0.150	0.098	0.376	0.123	0.088	0.086	0.122	0.094	0.090	0.101	0.040	0.036	0.210
B3LYP-D3	0.346	0.406	0.083	0.098	0.406	0.406	0.406	0.084	0.077	0.095	0.700	0.581	0.122	0.071	0.348	0.141	0.769	0.248	0.412	0.369	
	0.225	0.074	0.559	0.350	0.186	0.173	0.077	0.138	0.068	0.372	0.391	0.172	0.172	0.183	0.154	0.074	0.061	0.090	0.375	0.173	
	0.173	0.170	0.091	0.060	0.109	0.140	0.125	0.114	0.161	0.118	0.418	0.119	0.106	0.072	0.119	0.113	0.073	0.087	0.066	0.128	0.213
PBE1PBE-D3	0.314	0.372	0.108	0.115	0.372	0.372	0.372	0.108	0.097	0.114	0.696	0.586	0.143	0.101	0.342	0.136	0.755	0.189	0.348	0.295	
	0.226	0.092	0.524	0.337	0.200	0.161	0.113	0.094	0.093	0.352	0.367	0.166	0.106	0.175	0.110	0.106	0.084	0.117	0.355	0.168	
	0.108	0.169	0.118	0.085	0.105	0.145	0.111	0.107	0.158	0.100	0.393	0.125	0.116	0.099	0.124	0.121	0.102	0.113	0.119	0.134	0.209
LC-wPBE-D3	0.293	0.344	0.076	0.070	0.344	0.344	0.344	0.076	0.170	0.086	0.703	0.669	0.092	0.204	0.329	0.159	0.734	0.121	0.315	0.204	
	0.180	0.147	0.512	0.303	0.168	0.211	0.109	0.187	0.171	0.324	0.340	0.175	0.171	0.181	0.169	0.105	0.167	0.117	0.327	0.176	
	0.172	0.165	0.116	0.166	0.156	0.143	0.167	0.153	0.127	0.184	0.369	0.162	0.167	0.172	0.162	0.175	0.169	0.193	0.153	0.144	0.222
PBEPBE-D3BJ	0.331	0.390	0.134	0.144	0.390	0.390	0.390	0.134	0.095	0.136	0.713	0.578	0.169	0.095	0.370	0.168	0.769	0.164	0.294	0.287	
	0.251	0.103	0.550	0.352	0.219	0.166	0.120	0.086	0.091	0.372	0.388	0.187	0.100	0.199	0.106	0.115	0.085	0.128	0.375	0.188	
	0.101	0.189	0.129	0.085	0.111	0.157	0.112	0.114	0.162	0.093	0.415	0.117	0.106	0.107	0.121	0.110	0.109	0.123	0.108	0.154	0.217
TPSSTPSS-D3BJ	0.237	0.264	0.131	0.129	0.264	0.264	0.264	0.130	0.127	0.109	0.725	0.658	0.129	0.124	0.257	0.148	0.758	0.159	0.265	0.275	
	0.214	0.103	0.466	0.256	0.187	0.149	0.138	0.093	0.100	0.293	0.308	0.149	0.108	0.155	0.105	0.134	0.096	0.140	0.296	0.150	
	0.109	0.153	0.140	0.095	0.100	0.111	0.105	0.098	0.113	0.094	0.340	0.100	0.098	0.089	0.100	0.100	0.089	0.101	0.095	0.104	0.190
B3LYP-D3BJ	0.303	0.373	0.030	0.042	0.373	0.373	0.373	0.030	0.168	0.174	0.684	0.605	0.079	0.259	0.311	0.090	0.752	0.181	0.343	0.284	
	0.187	0.157	0.551	0.315	0.151	0.120	0.042	0.173	0.191	0.334	0.365	0.128	0.209	0.150	0.206	0.036	0.158	0.054	0.337	0.129	
	0.210	0.139	0.056	0.159	0.162	0.218	0.204	0.158	0.197	0.166	0.398	0.206	0.190	0.146	0.206	0.111	0.092	0.127	0.406	0.358	0.229
PBE1PBE-D3BJ	0.288	0.350	0.101	0.103	0.350	0.350	0.350	0.101	0.095	0.100	0.689	0.596	0.131	0.098	0.333	0.127	0.751	0.116	0.239	0.228	
	0.219	0.078	0.517	0.318	0.																

^a The three rows after a method correspond to the results of this method calculated with the first 20 basis sets (ie. BS21 to BS40), the second 20 ones (i.e. BS41 to BS60), and the third 20 ones (i.e. BS61 to BS80) and Ave.

^b Likewise, a blank means that this method/basis set does not calculate these 11-RG-Mols, so LanL2MB (or BS38), STO-3G (or BS39), and STO-6G (or BS40) cannot calculate these 11-RG-Mols when using *ab initio* and double-hybrid methods.

^c For basis sets UGBS (or BS79) and UGBS1V++ (BS80), these DFT methods can calculate only three molecules (i.e., He₂, HeNe, and Ne₂), just as Dreiding in Table S2.

^d As in Table S2, a green or blue value means, respectively, that this MAD is smaller than 0.020 Å or is between 0.020~0.100 Å, while a black one means that this value is larger than 0.100 Å in which the largest one is shown with red.

Table S6. MDs (Å) of 11-RG-Mols calculated by 54 methods and 60 basis sets.

	BS21	BS22	BS23	BS24	BS25	BS26	BS27	BS28	BS29	BS30	BS31	BS32	BS33	BS34	BS35	BS36	BS37	BS38	BS39	BS40	
	BS41	BS42	BS43	BS44	BS45	BS46	BS47	BS48	BS49	BS50	BS51	BS52	BS53	BS54	BS55	BS56	BS57	BS58	BS59	BS60	
	BS61	BS62	BS63	BS64	BS65	BS66	BS67	BS68	BS69	BS70	BS71	BS72	BS73	BS74	BS75	BS76	BS77	BS78	BS79	BS80	Ave
MP2	0.051	-0.140	0.715	0.366	-0.140	-0.140	-0.140	0.715	1.064	0.469	-0.050	-0.060	0.675	0.641	0.091	0.134	-0.343				
	0.067	0.259	-0.192	0.149	0.523	0.381	0.623	0.501	0.718	-0.070	-0.132	0.147	0.272	0.107	0.215	0.334	0.379	0.253	-0.081	0.114	
	0.237	0.076	0.224	0.349	0.114	-0.015	0.171	0.090	-0.042	0.468	-0.154	0.267	0.125	0.057	0.240	0.085	0.012	-0.044	0.893	0.093	0.206
MP2(Full)	0.046	-0.147	0.636	0.319	-0.147	-0.147	-0.147	0.647	0.831	0.430	-0.050	-0.060	0.675	0.641	0.086	0.134	-0.343				
	0.050	0.230	-0.198	0.144	0.503	0.369	0.599	0.490	0.692	-0.080	-0.145	0.116	0.233	0.077	0.180	0.320	0.364	0.237	-0.095	0.087	
	0.202	0.050	0.207	0.339	0.065	-0.088	0.140	0.034	-0.161	0.087	-0.165	0.254	0.078	0.008	0.174	0.043	-0.037	-0.099	0.892	0.089	0.170
DSDPBEP86	-0.194	-0.295	0.150	0.054	-0.295	-0.295	-0.295	0.149	0.269	0.017	-0.498	-0.368	0.106	0.198	-0.226	-0.024	-0.615				
	-0.111	0.039	-0.420	-0.183	0.027	0.116	0.152	0.254	0.231	-0.252	-0.282	-0.041	0.099	-0.059	0.052	0.054	0.121	0.034	-0.260	-0.054	
	0.083	-0.072	0.024	0.110	-0.023	-0.104	0.034	-0.038	-0.152	0.222	-0.321	0.050	-0.023	-0.048	0.038	-0.040	-0.062	-0.089	0.271	0.001	-0.049
DSDPBEP86(Full)	-0.197	-0.299	0.135	0.044	-0.299	-0.299	-0.299	0.139	0.256	0.007	-0.498	-0.368	0.106	0.198	-0.227	-0.024	-0.615				
	-0.116	0.027	-0.423	-0.186	0.025	0.114	0.146	0.253	0.226	-0.257	-0.288	-0.049	0.084	-0.066	0.044	0.050	0.118	0.031	-0.265	-0.067	
	0.068	-0.085	0.018	0.101	-0.041	-0.144	0.019	-0.059	-0.183	0.217	-0.326	0.043	-0.039	-0.064	0.032	-0.058	-0.079	-0.125	0.272	0.001	-0.057
revDSDPBEP86	-0.189	-0.287	0.161	0.072	-0.287	-0.287	-0.287	0.161	0.285	0.031	-0.489	-0.359	0.114	0.210	-0.220	-0.006	-0.607				
	-0.100	0.057	-0.415	-0.178	0.037	0.122	0.159	0.262	0.242	-0.246	-0.274	-0.032	0.112	-0.048	0.064	0.064	0.132	0.044	-0.253	-0.044	
	0.097	-0.061	0.037	0.126	-0.001	-0.070	0.046	-0.017	-0.116	0.231	-0.314	0.069	-0.002	-0.025	0.051	-0.024	-0.043	-0.071	0.271	0.014	-0.036
revDSDPBEP86(Full)	-0.192	-0.290	0.146	0.054	-0.290	-0.290	-0.290	0.150	0.271	0.022	-0.489	-0.359	0.114	0.209	-0.221	-0.006	-0.608				
	-0.105	0.048	-0.418	-0.181	0.033	0.120	0.156	0.259	0.236	-0.251	-0.280	-0.038	0.101	-0.054	0.056	0.061	0.129	0.041	-0.259	-0.051	
	0.086	-0.069	0.034	0.122	-0.022	-0.123	0.038	-0.036	-0.165	0.227	-0.318	0.063	-0.019	-0.049	0.046	-0.042	-0.064	-0.096	0.271	0.014	-0.045
B2PLYPD	-0.302	-0.373	0.063	-0.051	-0.373	-0.373	-0.373	0.062	0.129	-0.039	-0.558	-0.415	0.035	0.258	-0.312	-0.129	-0.683				
	-0.187	-0.038	-0.524	-0.287	-0.035	-0.045	0.054	0.161	0.227	-0.332	-0.354	-0.146	0.076	-0.160	-0.023	-0.036	0.141	-0.072	-0.337	-0.157	
	0.062	-0.161	-0.080	0.140	-0.070	-0.117	-0.034	-0.080	-0.158	0.090	-0.379	-0.037	-0.090	-0.111	-0.052	-0.122	-0.128	-0.155	0.286	-0.134	-0.120
B2PLYPD(Full)	-0.304	-0.376	0.053	-0.057	-0.376	-0.376	-0.376	0.055	0.124	-0.049	-0.558	-0.415	0.035	0.258	-0.313	-0.129	-0.683				
	-0.191	-0.044	-0.525	-0.288	-0.036	-0.048	0.051	0.158	0.231	-0.334	-0.356	-0.151	0.065	-0.164	-0.028	-0.039	0.140	-0.075	-0.340	-0.161	
	0.055	-0.166	-0.083	0.129	-0.080	-0.150	-0.030	-0.093	-0.181	0.085	-0.381	-0.042	-0.098	-0.124	-0.056	-0.131	-0.141	-0.170	0.286	-0.132	-0.125
B2PLYPD-D3	-0.299	-0.378	0.128	0.010	-0.378	-0.378	-0.378	0.126	0.216	0.032	-0.552	-0.376	0.077	0.332	-0.297	-0.104	-0.685				
	-0.178	0.036	-0.534	-0.279	-0.011	0.038	0.117	0.268	0.333	-0.328	-0.356	-0.128	0.103	-0.144	0.079	0.013	0.181	-0.041	-0.334	-0.139	
	0.093	-0.143	-0.048	0.164	-0.022	-0.100	0.019	-0.035	-0.146	0.215	-0.384	0.029	-0.002	-0.070	0.002	-0.056	-0.095	-0.132	0.059	-0.035	-0.086
B2PLYPD-D3(Full)	-0.301	-0.380	0.114	-0.001	-0.380	-0.379	-0.380	0.118	0.209	0.029	-0.552	-0.376	0.077	0.332	-0.298	-0.104	-0.685				
	-0.180	0.031	-0.535	-0.282	-0.008	0.036	0.113	0.238	0.290	-0.331	-0.359	-0.133	0.097	-0.148	0.063	0.010	0.169	-0.044	-0.338	-0.144	
	0.087	-0.148	-0.051	0.166	-0.036	-0.135	0.011	-0.048	-0.167	0.177	-0.387	0.024	-0.019	-0.081	-0.001	-0.066	-0.118	-0.152	0.060	-0.036	-0.093
B2PLYPD3	-0.260	-0.345	0.169	0.060	-0.345	-0.345	-0.345	0.168	0.339	0.077	-0.510	-0.344	0.100	0.368	-0.264	-0.044	-0.644				
	-0.134	0.158	-0.518	-0.242	0.023	0.071	0.139	0.264	0.335	-0.296	-0.325	-0.070	0.152	-0.088	0.121	0.054	0.217	0.020	-0.302	-0.081	
	0.137	-0.090	0.013	0.248	0.070	-0.049	0.112	-0.003	-0.076	0.255	-0.357	0.111	0.022	-0.004	0.097	-0.015	-0.036	-0.059	0.397	0.000	-0.033
B2PLYPD3(Full)	-0.262	-0.347	0.160	0.050	-0.347	-0.347	-0.347	0.161	0.332	0.067	-0.510	-0.344	0.100	0.368	-0.264	-0.044	-0.644				
	-0.137	0.130	-0.519	-0.243	0.022	0.070	0.136	0.259	0.331	-0.299	-0.329	-0.076	0.146	-0.094	0.115	0.052	0.214	0.016	-0.306	-0.088	
	0.121	-0.097	0.011	0.213	0.054	-0.083	0.105	-0.021	-0.129	0.253	-0.359	0.107	0.001	-0.017	0.094	-0.042	-0.047	-0.077	0.396	0.000	-0.041
MP3	0.058	-0.117	0.728	0.409	-0.117	-0.117	-0.117	0.729	1.049	0.487	-0.046	-0.077	0.687	0.627	0.111	0.167	-0.336				
	0.119	0.284	-0.180	0.163	0.534	0.368	0.597	0.492	0.699	-0.053	-0.114	0.149	0.278	0.112	0.214	0.337	0.379	0.257	-0.064	0.118	
	0.244	0.083	0.226	0.353	0.136	-0.004	0.172	0.105	-0.028	0.451	-0.136	0.273	0.147	0.077	0.242	0.108	0.036	-0.016	0.916	-0.646	0.203
MP3(Full)	0.055	-0.123	0.655	0.360	-0.123	-0.123	-0.123	0.667	0.837	0.463	-0.046	-0.077	0.687	0.627	0.107	0.167	-0.336				
	0.103	0.259	-0.185	0.157	0.517	0.358	0.575	0.482	0.676	-0.063	-0.126	0.123	0.244	0.087	0.184	0.324	0.366	0.242	-0.078	0.092	
	0.212	0.059	0.211	0.344	0.087	-0.053	0.142	0.054	-0.082	0.438	-0.146	0.260	0.104	0.040	0.170	0.070	-0.011	-0.069	0.902	0.087	0.190
CCSD	0.047	-0.115	0.710	0.409	-0.115	-0.115	-0.115	0.710	1.030	0.476	-0.057	-0.084	0.667	0.622	0.093	0.163	-0.339				
	0.119	0.292	-0.179	0.152	0.524	0.354	0.594	0.492	0.699	-0.062	-0.115	0.145	0.288	0.119	0.226	0.342	0.400	0.269	-0.073	0.109	
	0.251	0.086	0.243	0.380	0.145	0.001	0.178	0.122	-0.014	0.453	-0.136	0.278	0.160	0.083	0.255	0.128	0.058	0.002	0.901	0.107	0.217
CCSD(Full)	0.043	-0.122	0.641	0.358	-0.122	-0.122	-0.122	0.652	0.837	0.451	-0.057	-0.084	0.667	0.622	0.092	0.163	-0.339				
	0.101	0.264	-0.184	0.146	0.501	0.349	0.568	0.484	0.674	-0.076	-0.129	0.106	0.247	0.087	0.188	0.329	0.384	0.254	-0.087	0.086	
	0.222	0.066	0.227	0.365	0.097	-0.050	0.152	0.073	-0.070	0.442	-0.147	0.265	0.114	0.048	0.189	0.087	0.007	-0.065	0.900	0.103	0.191
QCISD	0.052	-0.116	0.707	0.406	-0.116	-0.116	-0.116	0.707	1.030	0.472	-0.060	-0.081	0.665	0.627	0.096	0.164	-0.340				
	0.116	0.293	-0.179	0.154	0.522	0.360	0.596	0.494	0.701	-0.064	-0.116	0.148	0.288	0.119	0.226	0.343	0.401	0.270	-0.075	0.109	
	0.250	0.086	0.244	0.381	0.144	0.001	0.177	0.120	-0.015	0.455	-0.137	0.278	0.159	0.082	0.255	0.121	0.056	0.001	0.887	0.104	0.216

S36

PBEB95	-0.339	-0.381	-0.101	-0.107	-0.381	-0.381	-0.381	-0.102	-0.017	-0.134	-0.646	-0.483	-0.082	0.031	-0.310	-0.169	-0.763	-0.052	-0.027	-0.032
	-0.247	-0.049	-0.497	-0.358	-0.193	-0.095	-0.037	0.027	0.016	-0.389	-0.395	-0.184	-0.061	-0.165	-0.062	-0.080	-0.026	-0.081	-0.391	-0.185
	-0.062	-0.184	-0.081	-0.026	-0.041	-0.128	-0.064	-0.043	-0.150	0.017	-0.449	-0.031	-0.023	-0.053	-0.040	-0.043	-0.055	-0.063	-0.019	-0.086
LGB95	-0.283	-0.318	-0.033	-0.052	-0.318	-0.318	-0.318	-0.047	0.034	-0.059	-0.670	-0.509	-0.051	0.022	-0.294	-0.099	-0.735	0.066	0.095	0.045
	-0.230	0.000	-0.373	-0.300	-0.116	-0.006	0.020	0.058	0.022	-0.334	-0.359	-0.048	0.016	-0.049	0.015	0.007	0.020	0.000	-0.336	-0.049
	0.015	-0.049	0.000	0.020	0.022	-0.123	0.012	0.019	-0.127	0.057	-0.411	0.021	0.021	0.020	0.018	0.018	0.017	0.005	0.052	0.050
LGKCIS	-0.311	-0.387	0.024	-0.017	-0.387	-0.387	-0.387	0.024	0.085	-0.004	-0.556	-0.402	-0.013	0.116	-0.320	-0.072	-0.661	0.437	0.167	0.198
	-0.179	0.047	-0.468	-0.326	-0.080	-0.015	0.060	0.099	0.100	-0.360	-0.377	-0.082	0.051	-0.093	0.048	0.042	0.080	0.015	-0.363	-0.086
	0.047	-0.075	0.015	0.080	0.033	-0.031	0.045	0.025	-0.037	0.095	-0.413	0.063	0.011	0.019	0.060	0.004	0.013	0.001	-0.001	-0.031
LC-PBEB95	-0.210	-0.275	0.010	0.008	-0.275	-0.275	-0.275	0.009	0.032	-0.063	-0.619	-0.499	-0.024	0.020	-0.338	-0.030	-0.742	0.148	0.023	0.043
	-0.166	0.017	-0.410	-0.307	-0.123	-0.027	0.017	0.037	0.019	-0.336	-0.368	-0.035	0.028	-0.044	0.028	0.016	0.018	0.015	-0.338	-0.037
	0.027	-0.045	0.015	0.018	0.031	-0.033	0.028	0.032	-0.033	0.036	-0.426	0.008	0.004	0.020	0.008	0.005	0.031	0.018	0.055	0.055
LC-PKZBB95	-0.208	-0.272	0.011	0.009	-0.272	-0.272	-0.272	0.011	0.032	-0.063	-0.618	-0.498	-0.023	0.021	-0.333	-0.028	-0.741	0.131	0.024	0.042
	-0.145	0.017	-0.387	-0.304	-0.122	-0.025	0.017	0.037	0.020	-0.333	-0.363	-0.033	0.029	-0.042	0.027	0.016	0.019	0.001	-0.335	-0.035
	0.028	-0.043	0.016	0.019	0.031	-0.041	0.029	0.032	-0.032	0.028	-0.403	0.000	0.021	0.022	0.009	0.031	0.031	0.020	0.055	0.055
LC-LGB95	-0.232	-0.253	0.010	0.008	-0.253	-0.253	-0.253	0.009	0.032	-0.063	-0.619	-0.499	-0.025	0.020	-0.338	-0.030	-0.743	0.128	0.025	0.079
	-0.167	0.017	-0.392	-0.307	-0.123	-0.026	0.017	0.036	0.019	-0.344	-0.369	-0.035	0.027	-0.044	0.018	0.016	0.018	0.015	-0.346	-0.036
	0.026	-0.045	0.015	0.018	0.022	-0.068	0.027	0.031	-0.059	0.027	-0.426	0.007	-0.005	-0.005	0.008	0.004	0.005	0.018	0.055	0.055
LC-LGKCIS	-0.344	-0.417	0.065	0.031	-0.417	-0.417	-0.417	0.066	0.215	0.044	-0.513	-0.340	0.088	0.218	-0.354	0.004	-0.710	0.173	0.080	0.204
	-0.145	0.159	-0.513	-0.352	-0.060	0.023	0.139	0.179	0.211	-0.366	-0.388	-0.060	0.125	-0.074	0.106	0.148	0.219	0.131	-0.369	-0.064
	0.121	-0.058	0.131	0.218	0.098	0.023	0.095	0.091	0.015	0.171	-0.419	0.141	0.154	0.129	0.137	0.147	0.084	0.096	0.146	0.101
B3LYP-D2	-0.361	-0.412	-0.104	-0.152	-0.412	-0.412	-0.412	-0.105	-0.063	-0.117	-0.685	-0.557	-0.121	0.081	-0.378	-0.192	-0.762	-0.170	-0.379	-0.351
	-0.253	-0.102	-0.552	-0.363	-0.170	-0.182	-0.100	0.036	0.049	-0.380	-0.398	-0.216	0.028	-0.233	0.026	-0.116	0.039	-0.151	-0.383	-0.219
	0.022	-0.221	-0.153	0.038	-0.014	-0.071	-0.014	-0.096	-0.161	-0.001	-0.422	-0.011	-0.119	-0.110	-0.014	-0.136	-0.126	-0.076	-0.151	-0.163
M06-D3	-0.069	-0.102	0.057	0.054	-0.102	-0.102	-0.102	0.058	0.173	0.060	-0.567	-0.408	0.051	0.116	-0.102	0.129	-0.625	-0.084	-0.105	-0.107
	0.012	0.062	-0.276	-0.052	0.018	0.037	0.125	0.046	0.126	-0.109	-0.118	0.031	0.040	0.023	0.040	0.124	0.125	0.124	-0.110	0.031
	0.039	0.024	0.123	0.125	0.041	0.031	0.038	0.040	0.031	0.045	-0.125	0.041	0.040	0.042	0.040	0.038	0.041	0.046	0.074	0.075
M062X-D3	-0.329	-0.371	0.082	0.064	-0.371	-0.371	-0.371	0.081	0.137	0.041	-0.501	-0.320	0.076	0.172	-0.278	0.060	-0.722	-0.186	-0.117	-0.071
	-0.068	0.075	-0.539	-0.300	-0.020	-0.036	0.089	0.023	0.098	-0.320	-0.330	-0.092	-0.030	-0.096	-0.032	0.086	0.095	0.083	-0.323	-0.096
	-0.033	-0.091	0.082	0.095	-0.010	-0.083	-0.037	-0.015	-0.094	0.020	-0.351	0.005	-0.017	-0.013	0.001	-0.022	-0.018	-0.031	-0.004	-0.013
B3LYP-D3	-0.346	-0.406	-0.046	-0.081	-0.406	-0.406	-0.406	-0.047	0.029	-0.076	-0.639	-0.465	-0.077	0.071	-0.346	-0.119	-0.736	-0.160	-0.412	-0.369
	-0.221	-0.028	-0.559	-0.350	-0.151	-0.109	-0.034	0.051	0.024	-0.372	-0.391	-0.153	0.019	-0.164	-0.002	-0.047	0.013	-0.063	-0.375	-0.155
	0.017	-0.151	-0.065	0.013	-0.035	-0.098	-0.035	-0.047	-0.120	0.023	-0.418	-0.026	-0.033	-0.051	-0.032	-0.044	-0.055	-0.067	-0.066	-0.128
PBE1PBE-D3	-0.314	-0.372	-0.046	-0.076	-0.372	-0.372	-0.372	-0.046	0.005	-0.079	-0.603	-0.457	-0.066	0.011	-0.332	-0.090	-0.707	-0.112	-0.348	-0.295
	-0.202	-0.056	-0.524	-0.331	-0.138	-0.083	-0.032	-0.017	-0.013	-0.352	-0.367	-0.145	-0.069	-0.153	-0.073	-0.044	-0.023	-0.054	-0.355	-0.147
	-0.070	-0.148	-0.057	-0.025	-0.083	-0.128	-0.078	-0.088	-0.138	-0.023	-0.393	-0.062	-0.084	-0.082	-0.066	-0.090	-0.086	-0.097	-0.119	-0.134
LC-wPBE-D3	-0.293	-0.344	0.057	0.031	-0.344	-0.344	-0.344	0.057	0.170	0.041	-0.572	-0.375	0.033	0.204	-0.318	0.000	-0.727	-0.069	-0.315	-0.204
	-0.147	0.147	-0.512	-0.294	-0.077	0.021	0.094	0.161	0.171	-0.319	-0.335	-0.063	0.092	-0.069	0.090	0.090	0.167	0.077	-0.322	-0.065
	0.091	-0.054	0.077	0.166	0.101	0.036	0.086	0.096	0.009	0.158	-0.363	0.115	0.115	0.143	0.112	0.111	0.138	0.151	0.153	0.144
PBEPBE-D3BJ	-0.331	-0.390	-0.070	-0.101	-0.390	-0.390	-0.390	-0.071	-0.019	-0.091	-0.622	-0.467	-0.096	0.000	-0.354	-0.123	-0.708	-0.070	-0.294	-0.287
	-0.224	-0.063	-0.550	-0.350	-0.155	-0.106	-0.048	-0.026	-0.019	-0.372	-0.388	-0.157	-0.070	-0.169	-0.076	-0.061	-0.031	-0.074	-0.375	-0.160
	-0.074	-0.161	-0.075	-0.031	-0.085	-0.117	-0.084	-0.090	-0.123	-0.033	-0.415	-0.070	-0.091	-0.091	-0.075	-0.097	-0.096	-0.111	-0.108	-0.154
TPSSTPSS-D3BJ	-0.214	-0.264	0.057	0.041	-0.264	-0.264	-0.264	0.056	0.089	0.043	-0.540	-0.385	0.020	0.124	-0.219	0.033	-0.624	-0.011	-0.265	-0.275
	-0.110	0.061	-0.466	-0.227	-0.065	0.025	0.058	0.088	0.095	-0.267	-0.281	-0.016	0.055	-0.022	0.052	0.051	0.088	0.044	-0.270	-0.019
	0.052	-0.022	0.043	0.088	0.058	0.015	0.048	0.055	0.014	0.084	-0.313	0.060	0.040	0.062	0.057	0.036	0.059	0.039	-0.021	-0.033
B3LYP-D3BJ	-0.303	-0.373	0.017	-0.014	-0.373	-0.373	-0.373	0.016	0.168	0.104	-0.617	-0.441	-0.024	0.259	-0.302	-0.059	-0.709	-0.027	-0.294	-0.233
	-0.171	0.144	-0.551	-0.313	-0.106	-0.049	0.026	0.151	0.191	-0.334	-0.365	-0.104	0.113	-0.126	0.111	0.015	0.158	-0.005	-0.337	-0.107
	0.111	-0.117	-0.007	0.156	0.095	0.051	0.105	0.089	0.013	0.144	-0.398	0.115	0.125	0.101	0.112	0.044	0.044	0.061	0.406	0.358
PBE1PBE-D3BJ	-0.288	-0.350	-0.026	-0.049	-0.350	-0.350	-0.350	-0.027	0.024	-0.050	-0.590	-0.448	-0.047	0.031	-0.313	-0.067	-0.688	-0.031	-0.239	-0.228
	-0.177	-0.026	-0.517	-0.310	-0.118	-0.063	-0.010	0.016	0.011	-0.332	-0.350	-0.118	-0.028	-0.129	-0.034	-0.020	0.004	-0.032		

Reference

[S1] Frisch, M.J.; Trucks, G.W.; Schlegel, H.B.; Scuseria, G.E.; Robb, M.A.; Cheeseman, J.R.; Scalmani, G.; Barone, V.; Mennucci, B.; Petersson, G.A.; Nakatsuji, H.; Caricato, M.; Li, X.; Hratchian, H.P.; Izmaylov, A.F.; Bloino, J.; Zheng, G.; Sonnenberg, J.L.; Hada, M.; Ehara, M.; Toyota, K.; Fukuda, R.; Hasegawa, J.; Ishida, M.; Nakajima, T.; Honda, Y.; Kitao, O.; Nakai, H.; Vreven, T.; Montgomery, J.A., Jr.; Peralta, J.E.; Ogliaro, F.; Bearpark, M.; Heyd, J.J.; Brothers, E.; Kudin, K.N.; Staroverov, V.N.; Kobayashi, R.; Normand, J.; Raghavachari, K.; Rendell, A.; Burant, J.C.; Iyengar, S.S.; Tomasi, J.; Cossi, M.; Rega, N.; Millam, J.M.; Klene, M.; Knox, J.E.; Cross, J.B.; Bakken, V.; Adamo, C.; Jaramillo, J.; Gomperts, R.; Stratmann, R.E.; Yazyev, O.; Austin, A.J.; Cammi, R.; Pomelli, C.; Ochterski, J.W.; Martin, R.L.; Morokuma, K.; Zakrzewski, V.G.; Voth, G.A.; Salvador, P.; Dannenberg, J.J.; Dapprich, S.; Daniels, A.D.; Farkas, O.; Foresman, J.B.; Ortiz, J.V.; Cioslowski, J.; Fox, D.J. *Gaussian 09*, Revision A.01; Gaussian, Inc.: Wallingford CT, USA, 2009.