

## Inhaltsverzeichnis

<b>Geometrien</b>	<b>3</b>
Zu Tabelle 1 . . . . .	3
Zu Tabelle 2 . . . . .	3
Zu Tabelle 3 . . . . .	5
Zu Tabelle 4 . . . . .	6
Zu Tabelle 5 . . . . .	7
Zu Tabelle 6 . . . . .	8
Zu Tabelle 7 . . . . .	8
Zu Tabelle 8 . . . . .	9
Zu Tabelle 9 . . . . .	9



## Geometrien

### Zu Tabelle 1

Geometrien der aus der Geometrieoptimierung mit analytischem Gradienten erhaltenen Strukturen

#### I<sub>2</sub>: 2c-ZORA(MP)-HF

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
I	0,000000	0,000000	-1,338606
I	0,000000	0,000000	1,338606

#### I<sub>2</sub>: 2c-ZORA(MP)-BP86

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
I	0,000000	0,000000	-1,359538
I	0,000000	0,000000	1,359538

#### I<sub>2</sub>: 2c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
I	0,000000	0,000000	-1,360732
I	0,000000	0,000000	1,360732

#### TIH: 2c-ZORA(MP)-HF

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Tl	0,000000	0,000000	-0,009177
H	0,000000	0,000000	1,860825

#### TIH: 2c-ZORA(MP)-BP86

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Tl	0,000000	0,000000	-0,009323
H	0,000000	0,000000	1,890267

#### TIH: 2c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Tl	0,000000	0,000000	-0,009282
H	0,000000	0,000000	1,882074

#### PbH: 2c-ZORA(MP)-HF

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Pb	0,000000	0,000000	-0,008884
H	0,000000	0,000000	1,826146

#### PbH: 2c-ZORA(MP)-BP86

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Pb	0,000000	0,000000	-0,009040
H	0,000000	0,000000	1,858311

#### PbH: 2c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Pb	0,000000	0,000000	-0,008994
H	0,000000	0,000000	1,848852

#### PbO: 2c-ZORA(MP)-HF

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Pb	0,000000	0,000000	-0,134173
O	0,000000	0,000000	1,737608

#### PbO: 2c-ZORA(MP)-BP86

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Pb	0,000000	0,000000	-0,138816
O	0,000000	0,000000	1,797737

#### PbO: 2c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Pb	0,000000	0,000000	-0,137727
O	0,000000	0,000000	1,783635

#### PbS: 2c-ZORA(MP)-HF

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Pb	0,000000	0,000000	-0,303721
S	0,000000	0,000000	1,962665

#### PbS: 2c-ZORA(MP)-BP86

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Pb	0,000000	0,000000	-0,310391
S	0,000000	0,000000	2,005773

#### PbS: 2c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Pb	0,000000	0,000000	-0,309275
S	0,000000	0,000000	1,998557

#### Pb<sub>2</sub>: 2c-ZORA(MP)-HF

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Pb	0,000000	0,000000	-1,582295
Pb	0,000000	0,000000	1,582295

#### Pb<sub>2</sub>: 2c-ZORA(MP)-BP86

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Pb	0,000000	0,000000	-1,486712
Pb	0,000000	0,000000	1,486712

#### Pb<sub>2</sub>: 2c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Pb	0,000000	0,000000	-1,501041
Pb	0,000000	0,000000	1,501041

### Zu Tabelle 2

#### TIH: 2c-ZORA(MP)-HF

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Tl	0,000000	0,000000	-0,009167
H	0,000000	0,000000	1,858719

#### TIH: 2c-ZORA(MP)-BP86

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Tl	0,000000	0,000000	-0,009322
H	0,000000	0,000000	1,890265

#### TIH: 2c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Tl	0,000000	0,000000	-0,009283
H	0,000000	0,000000	1,882332

**TIH:** 1c-ZORA(MP)-HF

Atom	$x$	$y$	$z$
Tl	0,000000	0,000000	-0,009336
H	0,000000	0,000000	1,892972

**TIH:** 1c-ZORA(MP)-BP86

Atom	$x$	$y$	$z$
Tl	0,000000	0,000000	-0,009471
H	0,000000	0,000000	1,920464

**TIH:** 1c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	$x$	$y$	$z$
Tl	0,000000	0,000000	-0,009440
H	0,000000	0,000000	1,914047

**PbH:** 2c-ZORA(MP)-HF

Atom	$x$	$y$	$z$
Pb	0,000000	0,000000	-0,008878
H	0,000000	0,000000	1,824915

**PbH:** 2c-ZORA(MP)-BP86

Atom	$x$	$y$	$z$
Pb	0,000000	0,000000	-0,009041
H	0,000000	0,000000	1,858554

**PbH:** 2c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	$x$	$y$	$z$
Pb	0,000000	0,000000	-0,008994
H	0,000000	0,000000	1,848802

**PbH:** 1c-ZORA(MP)-HF

Atom	$x$	$y$	$z$
Pb	0,000000	0,000000	-0,008908
H	0,000000	0,000000	1,831084

**PbH:** 1c-ZORA(MP)-BP86

Atom	$x$	$y$	$z$
Pb	0,000000	0,000000	-0,009048
H	0,000000	0,000000	1,859906

**PbH:** 1c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	$x$	$y$	$z$
Pb	0,000000	0,000000	-0,009009
H	0,000000	0,000000	1,851851

**BiH:** 2c-ZORA(MP)-HF

Atom	$x$	$y$	$z$
Bi	0,000000	0,000000	-0,008639
H	0,000000	0,000000	1,791185

**BiH:** 2c-ZORA(MP)-BP86

Atom	$x$	$y$	$z$
Bi	0,000000	0,000000	-0,008821
H	0,000000	0,000000	1,828758

**BiH:** 2c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	$x$	$y$	$z$
Bi	0,000000	0,000000	-0,008776
H	0,000000	0,000000	1,819572

**BiH:** 1c-ZORA(MP)-HF

Atom	$x$	$y$	$z$
Bi	0,000000	0,000000	-0,008573
H	0,000000	0,000000	1,777479

**BiH:** 1c-ZORA(MP)-BP86

Atom	$x$	$y$	$z$
Bi	0,000000	0,000000	-0,008713
H	0,000000	0,000000	1,806506

**BiH:** 1c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	$x$	$y$	$z$
Bi	0,000000	0,000000	-0,008669
H	0,000000	0,000000	1,797382

**PoH:** 2c-ZORA(MP)-HF

Atom	$x$	$y$	$z$
Po	0,000000	0,000000	-0,008417
H	0,000000	0,000000	1,745073

**PoH:** 2c-ZORA(MP)-BP86

Atom	$x$	$y$	$z$
Po	0,000000	0,000000	-0,008605
H	0,000000	0,000000	1,784085

**PoH:** 2c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	$x$	$y$	$z$
Po	0,000000	0,000000	-0,008521
H	0,000000	0,000000	1,766594

**PoH:** 1c-ZORA(MP)-HF

Atom	$x$	$y$	$z$
Po	0,000000	0,000000	-0,008312
H	0,000000	0,000000	1,723404

**PoH:** 1c-ZORA(MP)-BP86

Atom	$x$	$y$	$z$
Po	0,000000	0,000000	-0,008463
H	0,000000	0,000000	1,754530

**PoH:** 1c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	$x$	$y$	$z$
Po	0,000000	0,000000	-0,008420
H	0,000000	0,000000	1,745755

**AtH:** 2c-ZORA(MP)-HF

Atom	$x$	$y$	$z$
At	0,000000	0,000000	-0,008172
H	0,000000	0,000000	1,702475

**AtH:** 2c-ZORA(MP)-BP86

Atom	$x$	$y$	$z$
At	0,000000	0,000000	-0,008364
H	0,000000	0,000000	1,742514

**AtH:** 2c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	$x$	$y$	$z$
At	0,000000	0,000000	-0,008321
H	0,000000	0,000000	1,733457

**AtH:** 1c-ZORA(MP)-HF

Atom	$x$	$y$	$z$
At	0,000000	0,000000	-0,008058
H	0,000000	0,000000	1,678811

**AtH:** 1c-ZORA(MP)-BP86

Atom	$x$	$y$	$z$
At	0,000000	0,000000	-0,008209
H	0,000000	0,000000	1,710125

**AtH:** 1c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	$x$	$y$	$z$
At	0,000000	0,000000	-0,008169
H	0,000000	0,000000	1,701804

## Zu Tabelle 3

**(113)H:** 2c-ZORA(MP)-HF

Atom	$x$	$y$	$z$
(113)	0,000000	0,000000	-0,006022
H	0,000000	0,000000	1,696692

**(113)H:** 2c-ZORA(MP)-BP86

Atom	$x$	$y$	$z$
(113)	0,000000	0,000000	-0,006391
H	0,000000	0,000000	1,800747

**(113)H:** 2c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	$x$	$y$	$z$
(113)	0,000000	0,000000	-0,006313
H	0,000000	0,000000	1,778736

**(113)H:** 1c-ZORA(MP)-HF

Atom	$x$	$y$	$z$
(113)	0,000000	0,000000	-0,007265
H	0,000000	0,000000	2,047043

**(113)H:** 1c-ZORA(MP)-BP86

Atom	$x$	$y$	$z$
(113)	0,000000	0,000000	-0,007252
H	0,000000	0,000000	2,043405

**(113)H:** 1c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	$x$	$y$	$z$
(113)	0,000000	0,000000	-0,007249
H	0,000000	0,000000	2,042364

**(114)H:** 2c-ZORA(MP)-BP86

Atom	$x$	$y$	$z$
(114)	0,000000	0,000000	-0,007207
H	0,000000	0,000000	2,066333

**(114)H:** 2c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	$x$	$y$	$z$
(114)	0,000000	0,000000	-0,007031
H	0,000000	0,000000	2,015779

**(114)H:** 1c-ZORA(MP)-BP86

Atom	$x$	$y$	$z$
(114)	0,000000	0,000000	-0,006905
H	0,000000	0,000000	1,979687

**(114)H:** 1c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	$x$	$y$	$z$
(114)	0,000000	0,000000	-0,006902
H	0,000000	0,000000	1,979043

**(115)H:** 2c-ZORA(MP)-HF

Atom	$x$	$y$	$z$
(115)	0,000000	0,000000	-0,007332
H	0,000000	0,000000	2,102147

**(115)H:** 2c-ZORA(MP)-BP86

Atom	$x$	$y$	$z$
(115)	0,000000	0,000000	-0,007268
H	0,000000	0,000000	2,083964

**(115)H:** 2c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	$x$	$y$	$z$
(115)	0,000000	0,000000	-0,007266
H	0,000000	0,000000	2,083263

**(115)H:** 1c-ZORA(MP)-HF

Atom	$x$	$y$	$z$
(115)	0,000000	0,000000	-0,006713
H	0,000000	0,000000	1,924741

**(115)H:** 1c-ZORA(MP)-BP86

Atom	$x$	$y$	$z$
(115)	0,000000	0,000000	-0,006731
H	0,000000	0,000000	1,929837

**(115)H:** 1c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	$x$	$y$	$z$
(115)	0,000000	0,000000	-0,006710
H	0,000000	0,000000	1,923757

**(116)H:** 2c-ZORA(MP)-HF

Atom	$x$	$y$	$z$
(116)	0,000000	0,000000	-0,007084
H	0,000000	0,000000	2,031204

**(116)H:** 2c-ZORA(MP)-BP86

Atom	$x$	$y$	$z$
(116)	0,000000	0,000000	-0,007077
H	0,000000	0,000000	2,028959

**(116)H:** 2c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	$x$	$y$	$z$
(116)	0,000000	0,000000	-0,007029
H	0,000000	0,000000	2,015297

**(116)H:** 1c-ZORA(MP)-HF

Atom	$x$	$y$	$z$
(116)	0,000000	0,000000	-0,006485
H	0,000000	0,000000	1,859275

**(116)H: 1c-ZORA(MP)-BP86**

Atom	$x$	$y$	$z$
(116)	0,000000	0,000000	-0,006551
H	0,000000	0,000000	1,878227

**(116)H: 1c-ZORA(MP)-B3LYP**

Atom	$x$	$y$	$z$
(116)	0,000000	0,000000	-0,006528
H	0,000000	0,000000	1,871797

**(117)H: 2c-ZORA(MP)-HF**

Atom	$x$	$y$	$z$
(117)	0,000000	0,000000	-0,006856
H	0,000000	0,000000	1,965602

**(117)H: 2c-ZORA(MP)-BP86**

Atom	$x$	$y$	$z$
(117)	0,000000	0,000000	-0,006901
H	0,000000	0,000000	1,978533

**(117)H: 2c-ZORA(MP)-B3LYP**

Atom	$x$	$y$	$z$
(117)	0,000000	0,000000	-0,006889
H	0,000000	0,000000	1,975112

**(117)H: 1c-ZORA(MP)-HF**

Atom	$x$	$y$	$z$
(117)	0,000000	0,000000	-0,006309
H	0,000000	0,000000	1,808996

**(117)H: 1c-ZORA(MP)-BP86**

Atom	$x$	$y$	$z$
(117)	0,000000	0,000000	-0,006399
H	0,000000	0,000000	1,834646

**(117)H: 1c-ZORA(MP)-B3LYP**

Atom	$x$	$y$	$z$
(117)	0,000000	0,000000	-0,006376
H	0,000000	0,000000	1,827984

## Zu Tabelle 4

**TII: 2c-ZORA(MP)-HF**

Atom	$x$	$y$	$z$
Tl	0,000000	0,000000	-1,105356
I	0,000000	0,000000	1,780186

**TII: 2c-ZORA(MP)-BP86**

Atom	$x$	$y$	$z$
Tl	0,000000	0,000000	-1,094598
I	0,000000	0,000000	1,762859

**TII: 2c-ZORA(MP)-B3LYP**

Atom	$x$	$y$	$z$
Tl	0,000000	0,000000	-1,099618
I	0,000000	0,000000	1,770944

**TII: 1c-ZORA(MP)-HF**

Atom	$x$	$y$	$z$
Tl	0,000000	0,000000	-1,115316
I	0,000000	0,000000	1,796225

**TII: 1c-ZORA(MP)-BP86**

Atom	$x$	$y$	$z$
Tl	0,000000	0,000000	-1,099743
I	0,000000	0,000000	1,771146

**TII: 1c-ZORA(MP)-B3LYP**

Atom	$x$	$y$	$z$
Tl	0,000000	0,000000	-1,105888
I	0,000000	0,000000	1,781043

**TIAt: 2c-ZORA(MP)-HF**

Atom	$x$	$y$	$z$
Tl	0,000000	0,000000	-1,500656
At	0,000000	0,000000	1,460565

**TIAt: 2c-ZORA(MP)-BP86**

Atom	$x$	$y$	$z$
Tl	0,000000	0,000000	-1,492149
At	0,000000	0,000000	1,452286

**TIAt: 2c-ZORA(MP)-B3LYP**

Atom	$x$	$y$	$z$
Tl	0,000000	0,000000	-1,498878
At	0,000000	0,000000	1,458835

**TIAt: 1c-ZORA(MP)-HF**

Atom	$x$	$y$	$z$
Tl	0,000000	0,000000	-1,514863
At	0,000000	0,000000	1,474393

**TIAt: 1c-ZORA(MP)-BP86**

Atom	$x$	$y$	$z$
Tl	0,000000	0,000000	-1,492204
At	0,000000	0,000000	1,452339

**TIAt: 1c-ZORA(MP)-B3LYP**

Atom	$x$	$y$	$z$
Tl	0,000000	0,000000	-1,500184
At	0,000000	0,000000	1,460105

**(113)(117): 2c-ZORA(MP)-HF**

Atom	$x$	$y$	$z$
(113)	0,000000	0,000000	-1,526289
(117)	0,000000	0,000000	1,499883

**(113)(117): 2c-ZORA(MP)-BP86**

Atom	$x$	$y$	$z$
(113)	0,000000	0,000000	-1,549515
(117)	0,000000	0,000000	1,522706

**(113)(117): 2c-ZORA(MP)-B3LYP**

Atom	$x$	$y$	$z$
(113)	0,000000	0,000000	-1,563595
(117)	0,000000	0,000000	1,536543

**(113)(117): 1c-ZORA(MP)-HF**

Atom	$x$	$y$	$z$
(113)	0,000000	0,000000	-1,631375
(117)	0,000000	0,000000	1,603151

**(113)(117): 1c-ZORA(MP)-BP86**

Atom	$x$	$y$	$z$
(113)	0,000000	0,000000	-1,591871
(117)	0,000000	0,000000	1,564330

**(113)(117): 1c-ZORA(MP)-B3LYP**

Atom	$x$	$y$	$z$
(113)	0,000000	0,000000	-1,598309
(117)	0,000000	0,000000	1,570656

**PbO: 2c-ZORA(MP)-HF**

Atom	$x$	$y$	$z$
Pb	0,000000	0,000000	-0,134365
O	0,000000	0,000000	1,740095

**PbO: 2c-ZORA(MP)-BP86**

Atom	$x$	$y$	$z$
Pb	0,000000	0,000000	-0,138977
O	0,000000	0,000000	1,799822

**PbO: 2c-ZORA(MP)-B3LYP**

Atom	$x$	$y$	$z$
Pb	0,000000	0,000000	-0,137906
O	0,000000	0,000000	1,785948

**PbO: 1c-ZORA(MP)-HF**

Atom	$x$	$y$	$z$
Pb	0,000000	0,000000	-0,133857
O	0,000000	0,000000	1,733513

**PbO: 1c-ZORA(MP)-BP86**

Atom	$x$	$y$	$z$
Pb	0,000000	0,000000	-0,139099
O	0,000000	0,000000	1,801399

**PbO: 1c-ZORA(MP)-B3LYP**

Atom	$x$	$y$	$z$
Pb	0,000000	0,000000	-0,137883
O	0,000000	0,000000	1,785658

**PbS: 2c-ZORA(MP)-HF**

Atom	$x$	$y$	$z$
Pb	0,000000	0,000000	-0,303929
S	0,000000	0,000000	1,964011

**PbS: 2c-ZORA(MP)-BP86**

Atom	$x$	$y$	$z$
Pb	0,000000	0,000000	-0,310728
S	0,000000	0,000000	2,007946

**PbS: 2c-ZORA(MP)-B3LYP**

Atom	$x$	$y$	$z$
Pb	0,000000	0,000000	-0,309623
S	0,000000	0,000000	2,000810

**PbS: 1c-ZORA(MP)-HF**

Atom	$x$	$y$	$z$
Pb	0,000000	0,000000	-0,303692
S	0,000000	0,000000	1,962482

**PbS: 1c-ZORA(MP)-BP86**

Atom	$x$	$y$	$z$
Pb	0,000000	0,000000	-0,311004
S	0,000000	0,000000	2,009734

**PbS: 1c-ZORA(MP)-B3LYP**

Atom	$x$	$y$	$z$
Pb	0,000000	0,000000	-0,309670
S	0,000000	0,000000	2,001113

## Zu Tabelle 5

**TlC<sub>5</sub>H<sub>5</sub>: 2c-ZORA(MP)-HF**

Atom	$x$	$y$	$z$
C	-0,863053	-0,829879	-1,881688
C	0,522155	-1,077280	-1,881948
C	1,185746	0,163770	-1,881901
C	0,210726	1,178862	-1,881620
C	-1,055921	0,564764	-1,881359
H	-1,635139	-1,571748	-1,926790
H	0,989331	-2,040735	-1,926868
H	2,246430	0,310135	-1,927227
H	0,399424	2,232843	-1,926520
H	-2,000177	1,069606	-1,926269
Tl	0,000021	-0,000014	0,600438

**TlC<sub>5</sub>H<sub>5</sub>: 2c-ZORA(MP)-BP86**

Atom	$x$	$y$	$z$
C	1,188106	-0,235965	-1,861121
C	0,591521	1,057114	-1,861060
C	-0,822617	0,889277	-1,860896
C	-1,099969	-0,507522	-1,860821
C	0,142724	-1,202940	-1,860980
H	2,254385	-0,447596	-1,897951
H	1,122417	2,005736	-1,897865
H	-1,560800	1,687301	-1,897431
H	-2,087095	-0,962886	-1,897288
H	0,270839	-2,282444	-1,897728
Tl	0,000015	0,000002	0,593630

**TlC<sub>5</sub>H<sub>5</sub>: 2c-ZORA(MP)-B3LYP**

Atom	$x$	$y$	$z$
C	-0,889079	-0,813519	-1,879191
C	0,498680	-1,097125	-1,879262
C	1,197342	0,135271	-1,878918
C	0,241494	1,181009	-1,878956
C	-1,048372	0,594609	-1,878938
H	-1,685464	-1,541294	-1,919552
H	0,945123	-2,079253	-1,919437
H	2,269374	0,256340	-1,918938
H	0,457872	2,237930	-1,918821
H	-1,986832	1,126756	-1,919198
Tl	-0,000004	-0,000017	0,599473

**TiC<sub>5</sub>H<sub>5</sub>: 1c-ZORA(MP)-HF**

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
C	-0,705140	-0,967519	-1,892014
C	0,701831	-0,969758	-1,892591
C	1,138883	0,368044	-1,892366
C	0,002038	1,197344	-1,892244
C	-1,138022	0,371948	-1,891901
H	-1,336267	-1,832556	-1,938259
H	1,329755	-1,837134	-1,938606
H	2,157826	0,697219	-1,938938
H	0,004063	2,268145	-1,938421
H	-2,155874	0,704529	-1,938066
Tl	0,000027	-0,000004	0,603818

**TiC<sub>5</sub>H<sub>5</sub>: 1c-ZORA(MP)-BP86**

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
C	0,944603	-0,758392	-1,866282
C	1,013334	0,663383	-1,866619
C	-0,317944	1,168371	-1,866768
C	-1,210088	0,058843	-1,866460
C	-0,429822	-1,132611	-1,866271
H	1,791988	-1,439391	-1,904602
H	1,922733	1,259057	-1,904814
H	-0,603303	2,217344	-1,905797
H	-2,295911	0,111640	-1,905290
H	-0,815606	-2,148970	-1,904599
Tl	-0,000004	0,000025	0,595430

**TiC<sub>5</sub>H<sub>5</sub>: 1c-ZORA(MP)-B3LYP**

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
C	0,818818	-0,884138	-1,885953
C	1,093979	0,505320	-1,886045
C	-0,142641	1,196471	-1,885808
C	-1,182284	0,234136	-1,885861
C	-0,588119	-1,051859	-1,885755
H	1,551837	-1,675751	-1,927932
H	2,073335	0,957792	-1,929056
H	-0,270242	2,267782	-1,927701
H	-2,240597	0,443820	-1,927539
H	-1,114546	-1,993596	-1,927516
Tl	0,000016	0,000004	0,601697

## Zu Tabelle 6

**PbH<sub>4</sub>: 2c-ZORA(MP)-HF**

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Pb	0,000000	0,000000	0,000000
H	0,084908	0,000000	1,738617
H	1,610881	0,000000	-0,659592
H	-0,847895	-1,421267	-0,539513
H	-0,847895	1,421267	-0,539513

**PbH<sub>4</sub>: 2c-ZORA(MP)-BP86**

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Pb	-0,000001	0,000000	0,000001
H	0,336419	0,000000	1,729511
H	1,518426	0,000000	-0,893734
H	-0,927323	-1,438659	-0,417993
H	-0,927323	1,438659	-0,417993

**PbH<sub>4</sub>: 2c-ZORA(MP)-B3LYP**

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Pb	-0,000001	0,000000	0,000001
H	0,335075	0,000000	1,722557
H	1,512320	0,000000	-0,890147
H	-0,923603	-1,432873	-0,416304
H	-0,923603	1,432873	-0,416304

**PbH<sub>4</sub>: 1c-ZORA(MP)-HF**

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Pb	0,000000	0,000000	0,000000
H	0,335890	0,000000	1,715422
H	1,505350	0,000000	-0,888492
H	-0,920613	-1,427238	-0,413473
H	-0,920613	1,427238	-0,413473

**PbH<sub>4</sub>: 1c-ZORA(MP)-BP86**

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Pb	-0,000001	0,000000	0,000001
H	0,337862	0,000000	1,736496
H	1,524543	0,000000	-0,897404
H	-0,931139	-1,444464	-0,419613
H	-0,931139	1,444464	-0,419613

**PbH<sub>4</sub>: 1c-ZORA(MP)-B3LYP**

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Pb	0,000001	0,000000	-0,000001
H	0,335875	0,000000	1,729569
H	1,518712	0,000000	-0,893162
H	-0,927346	-1,438542	-0,418149
H	-0,927346	1,438542	-0,418149

## Zu Tabelle 7

**BiHFI: 2c-ZORA(MP)-HF**

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Bi	-0,009222	-0,974725	0,183179
H	1,752259	-1,086760	0,280237
F	0,004131	-1,390430	-1,767661
I	0,000649	1,821924	-0,039247

**BiHFI: 2c-ZORA(MP)-BP86**

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Bi	-0,009633	0,978326	-0,191733
H	1,801425	1,082367	-0,324289
F	0,005807	1,489860	1,800417
I	0,000685	-1,842704	0,048779

**BiHFI: 2c-ZORA(MP)-B3LYP**

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Bi	-0,009506	0,980511	-0,189838
H	1,787943	1,090151	-0,308914
F	0,005143	1,464745	1,796996
I	0,000684	-1,842604	0,046049

**BiHFI (*C<sub>s</sub>*): 2c-ZORA(MP)-HF**

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Bi	-0,055370	0,000000	-0,952715
H	1,685620	0,000000	-0,819805
I	0,031216	0,000000	2,022242
F	0,311117	0,000000	-2,984771



**BiHFI** ( $C_s$ ): 2c-ZORA(MP)–BP86

Atom	$x$	$y$	$z$
Bi	-0,042126	0,000000	-0,950607
H	1,756120	0,000000	-0,814405
I	0,022587	0,000000	2,029783
F	0,219336	0,000000	-3,058614

**BiHFI** ( $C_s$ ): 2c-ZORA(MP)–B3LYP

Atom	$x$	$y$	$z$
Bi	-0,043587	0,000000	-0,953012
H	1,740608	0,000000	-0,825952
I	0,023534	0,000000	2,031810
F	0,229894	0,000000	-3,045095

## Zu Tabelle 8

**BiHFI**: 1c-ZORA(MP)–HF

Atom	$x$	$y$	$z$
Bi	-0,009317	-0,974885	0,182943
H	1,763456	-1,081395	0,289892
F	0,004655	-1,396909	-1,762481
I	0,000638	1,823114	-0,039710

**BiHFI**: 1c-ZORA(MP)–BP86

Atom	$x$	$y$	$z$
Bi	-0,009708	0,975218	-0,190886
H	1,807601	1,074015	-0,333771
F	0,006363	1,485944	1,792505
I	0,000677	-1,836933	0,048643

**BiHFI**: 1c-ZORA(MP)–B3LYP

Atom	$x$	$y$	$z$
Bi	-0,009606	0,977979	-0,189114
H	1,795028	1,082343	-0,322437
F	0,005879	1,464866	1,788738
I	0,000680	-1,838391	0,046199

**BiHFI** ( $C_s$ ): 1c-ZORA(MP)–HF

Atom	$x$	$y$	$z$
Bi	-0,050871	0,000000	-0,953453
H	1,705721	0,000000	-0,829061
I	0,028131	0,000000	2,023240
F	0,281173	0,000000	-2,982823

**BiHFI** ( $C_s$ ): 1c-ZORA(MP)–BP86

Atom	$x$	$y$	$z$
Bi	-0,034291	0,000000	-0,943492
H	1,775726	0,000000	-0,841803
I	0,017331	0,000000	2,017061
F	0,167215	0,000000	-3,050450

**BiHFI** ( $C_s$ ): 1c-ZORA(MP)–B3LYP

Atom	$x$	$y$	$z$
Bi	-0,037262	0,000000	-0,946348
H	1,760160	0,000000	-0,847426
I	0,019313	0,000000	2,019730
F	0,187485	0,000000	-3,036559

## Zu Tabelle 9

**(116)H<sub>2</sub>**: 2c-ZORA(MP)–HF

Atom	$x$	$y$	$z$
(116)	0,000000	0,000000	-0,009432
H	1,536008	0,000000	1,352206
H	-1,536008	0,000000	1,352206

**(116)H<sub>2</sub>**: 2c-ZORA(MP)–BP86

Atom	$x$	$y$	$z$
(116)	0,000000	0,000000	-0,009766
H	1,485606	0,000000	1,399964
H	-1,485606	0,000000	1,399964

**(116)H<sub>2</sub>**: 2c-ZORA(MP)–B3LYP

Atom	$x$	$y$	$z$
(116)	0,000000	0,000000	-0,009676
H	1,497434	0,000000	1,387127
H	-1,497434	0,000000	1,387127

**(116)H<sub>2</sub>**: 1c-ZORA(MP)–HF

Atom	$x$	$y$	$z$
(116)	0,000000	0,000000	-0,009058
H	1,325235	0,000000	1,298525
H	-1,325235	0,000000	1,298525

**(116)H<sub>2</sub>**: 1c-ZORA(MP)–BP86

Atom	$x$	$y$	$z$
(116)	0,000000	0,000000	-0,009247
H	1,331805	0,000000	1,325585
H	-1,331805	0,000000	1,325585

**(116)H<sub>2</sub>**: 1c-ZORA(MP)–B3LYP

Atom	$x$	$y$	$z$
(116)	0,000000	0,000000	-0,009195
H	1,333654	0,000000	1,318131
H	-1,333654	0,000000	1,318131

**(116)F<sub>2</sub>**: 2c-ZORA(MP)–HF

Atom	$x$	$y$	$z$
(116)	0,000000	0,000000	0,000028
F	0,000000	-2,275802	-0,000217
F	0,000000	2,275802	-0,000217

**(116)F<sub>2</sub>**: 2c-ZORA(MP)–BP86

Atom	$x$	$y$	$z$
(116)	0,000000	0,000000	0,076858
F	0,000000	-2,190041	-0,584571
F	0,000000	2,190041	-0,584571

**(116)F<sub>2</sub>**: 2c-ZORA(MP)–B3LYP

Atom	$x$	$y$	$z$
(116)	0,000000	0,000000	0,045663
F	0,000000	-2,251063	-0,347311
F	0,000000	2,251063	-0,347311

**(116)F<sub>2</sub>**: 1c-ZORA(MP)–HF

Atom	$x$	$y$	$z$
(116)	0,000000	0,000000	-0,156170
F	1,614740	0,000000	1,187811
F	-1,614740	0,000000	1,187811

**(116)F<sub>2</sub>**: 1c-ZORA(MP)-BP86

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	-0,000712
F	0,000000	-2,222471	0,005418
F	0,000000	2,222471	0,005418

**(116)F<sub>2</sub>**: 1c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	-0,158366
F	1,641080	0,000000	1,204517
F	-1,641080	0,000000	1,204517

**(116)Cl<sub>2</sub>**: 2c-ZORA(MP)-HF

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	0,003946
Cl	0,000000	-2,745143	-0,016084
Cl	0,000000	2,745143	-0,016084

**(116)Cl<sub>2</sub>**: 2c-ZORA(MP)-BP86

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	0,164290
Cl	0,000000	-2,597779	-0,669618
Cl	0,000000	2,597779	-0,669618

**(116)Cl<sub>2</sub>**: 2c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	0,090116
Cl	0,000000	-2,697386	-0,367298
Cl	0,000000	2,697386	-0,367298

**(116)Cl<sub>2</sub>**: 1c-ZORA(MP)-HF

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	-0,314851
Cl	1,986712	0,000000	1,283274
Cl	-1,986712	0,000000	1,283274

**(116)Cl<sub>2</sub>**: 1c-ZORA(MP)-BP86

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	-0,312882
Cl	2,017830	0,000000	1,275250
Cl	-2,017830	0,000000	1,275250

**(116)Cl<sub>2</sub>**: 1c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	-0,314050
Cl	2,013625	0,000000	1,280013
Cl	-2,013625	0,000000	1,280013

**(116)Br<sub>2</sub>**: 2c-ZORA(MP)-HF

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	0,010082
Br	0,000000	-2,894656	-0,018232
Br	0,000000	2,894656	-0,018232

**(116)Br<sub>2</sub>**: 2c-ZORA(MP)-BP86

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	0,091680
Br	0,000000	-2,866531	-0,165785
Br	0,000000	2,866531	-0,165785

**(116)Br<sub>2</sub>**: 2c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	0,077617
Br	0,000000	-2,875367	-0,140355
Br	0,000000	2,875367	-0,140355

**(116)Br<sub>2</sub>**: 1c-ZORA(MP)-HF

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	-0,596688
Br	2,112518	0,000000	1,078995
Br	-2,112518	0,000000	1,078995

**(116)Br<sub>2</sub>**: 1c-ZORA(MP)-BP86

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	0,036360
Br	0,000000	-2,797437	-0,065751
Br	0,000000	2,797437	-0,065751

**(116)Br<sub>2</sub>**: 1c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	-0,590574
Br	2,149894	0,000000	1,067940
Br	-2,149894	0,000000	1,067940

**(116)I<sub>2</sub>**: 2c-ZORA(MP)-HF

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	-0,011919
I	0,000000	-3,111480	0,013572
I	0,000000	3,111480	0,013572

**(116)I<sub>2</sub>**: 2c-ZORA(MP)-BP86

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	-0,097371
I	0,000000	-3,083978	0,110872
I	0,000000	3,083978	0,110872

**(116)I<sub>2</sub>**: 2c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	-0,083521
I	0,000000	-3,092998	0,095102
I	0,000000	3,092998	0,095102

**(116)I<sub>2</sub>**: 1c-ZORA(MP)-HF

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	-0,842991
I	2,276318	0,000000	0,959877
I	-2,276318	0,000000	0,959877

**(116)I<sub>2</sub>**: 1c-ZORA(MP)-BP86

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	0,083535
I	0,000000	-2,999010	-0,095117
I	0,000000	2,999010	-0,095117

**(116)I<sub>2</sub>**: 1c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	-0,825424
I	2,323222	0,000000	0,939874
I	-2,323222	0,000000	0,939874

**(116)At<sub>2</sub>**: 2c-ZORA(MP)-HF

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	-0,005032
At	0,000000	-3,201824	0,003463
At	0,000000	3,201824	0,003463

**(116)At<sub>2</sub>**: 2c-ZORA(MP)-BP86

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	-0,027993
At	0,000000	-3,209901	0,019263
At	0,000000	3,209901	0,019263

**(116)At<sub>2</sub>**: 2c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	-0,006257
At	0,000000	-3,213429	0,004305
At	0,000000	3,213429	0,004305

**(116)At<sub>2</sub>**: 1c-ZORA(MP)-HF

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	-1,103680
At	2,337608	0,000000	0,759473
At	-2,337608	0,000000	0,759473

**(116)At<sub>2</sub>**: 1c-ZORA(MP)-BP86

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	-1,070068
At	2,397792	0,000000	0,736344
At	-2,397792	0,000000	0,736344

**(116)At<sub>2</sub>**: 1c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	-1,081848
At	2,389477	0,000000	0,744450
At	-2,389477	0,000000	0,744450

**(116)(117)<sub>2</sub>**: 2c-ZORA(MP)-HF

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	-0,095658
(117)	0,000000	-3,418140	0,047829
(117)	0,000000	3,418140	0,047829

**(116)(117)<sub>2</sub>**: 2c-ZORA(MP)-BP86

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	-0,019105
(117)	0,000000	-3,484865	0,009553
(117)	0,000000	3,484865	0,009553

**(116)(117)<sub>2</sub>**: 2c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	0,022314
(117)	0,000000	-3,416154	-0,011157
(117)	0,000000	3,416154	-0,011157

**(116)(117)<sub>2</sub>**: 1c-ZORA(MP)-HF

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	-1,314341
(117)	2,402621	0,000000	0,657170
(117)	-2,402621	0,000000	0,657170

**(116)(117)<sub>2</sub>**: 1c-ZORA(MP)-BP86

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	-1,236130
(117)	2,501602	0,000000	0,618065
(117)	-2,501602	0,000000	0,618065

**(116)(117)<sub>2</sub>**: 1c-ZORA(MP)-B3LYP

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
(116)	0,000000	0,000000	-1,284986
(117)	0,000000	-2,460175	0,642493
(117)	0,000000	2,460175	0,642493