

# Supporting Material for Density Functional Study on the Mechanism of Direct N-Acylation Reaction of Lactams with Aldehydes Catalyzed by Shvo's Catalyst

Qian Liu,<sup>a</sup> Xi Lu,<sup>\*b,c</sup> Xiaomin Sun<sup>d</sup> and Xian Zhao<sup>\*a</sup>

<sup>a</sup>State Key Laboratory of Crystal Materials, Shandong University, Jinan 250100, China,

<sup>b</sup>Department of Chemical and Materials Engineering, University of Alberta, Edmonton, AB,

T6G 2V4, Canada, <sup>c</sup>Research Institute of Petroleum Exploration and Development, Sinopec,

Beijing, 100083, People's Republic of China, <sup>d</sup>Environment Research Institute, Shandong

University, Jinan, 250100, People's Republic of China.

E-mail: \*xlu2@ualberta.ca; zhaoxian@sdu.edu.cn

Gaussian 09, Revision B.01,

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

**Table S1 M062X-calculated energies and thermochemistry in gas at 298 K and 1 atm (Hartree)**

<b>Complexes</b>	$E_{\text{SCF}}$	$E_{\text{SCF}} + H_{\text{corr}}$	$E_{\text{SCF}} + G_{\text{corr}}$
<b>1</b>	-286.500808	-286.381722	-286.416817
<b>TS1</b>	-286.414519	-286.301082	-286.335954
<b>2</b>	-286.479568	-286.360834	-286.395856
<b>PhCHO</b>	-345.419894	-345.301361	-345.339075
<b>TS2</b>	-631.903939	-631.666384	-631.718695
<b>3</b>	-631.946999	-631.704934	-631.757016
<b>4</b>	-1512.240490	-1511.788426	-1511.882171
<b>TS3</b>	-2144.185534	-2143.498932	-2143.617638
<b>5</b>	-630.7582126	-630.540792	-630.591243
<b>6</b>	-1513.449380	-1512.976658	-1513.070476
<b>7</b>	-1798.791295	-1798.217900	-1798.323229
<b>TS4</b>	-1798.695688	-1798.127685	-1798.233252
<b>8</b>	-1798.753763	-1798.181019	-1798.287724
<b>TS5</b>	-2144.179274	-2143.487104	-2143.608801
<b>9</b>	-2144.230132	-2143.533682	-2143.654502
<b>TS6</b>	-573.000063	-572.768320	-572.819080
<b>10</b>	-573.012580	-572.772846	-572.825431
<b>10'</b>	-631.9378896	-631.698085	-631.752527
<b>TS7</b>	-918.422247	-918.062672	-918.133533
<b>TS8</b>	-918.429959	-918.069717	-918.139729
<b>TS9</b>	-918.425010	-918.065232	-918.134572
<b>11</b>	-918.476214	-918.112993	-918.184204
<b>H<sub>2</sub></b>	-1.167486	-1.153850	-1.168629

**Table S2 Single-point energies<sup>a</sup> obtained at the M062X/def2-TZVP, 6-31++G\*\* level with SMD solvent model in toluene (Hartree)**

<b>Complexes</b>	$E(\text{sol}) + \Delta G(\text{sol})$
<b>1</b>	-286.531796

<b>TS1</b>	-286.445957
<b>2</b>	-286.510108
<b>PhCHO</b>	-345.449862
<b>TS2</b>	-631.961010
<b>3</b>	-632.003977
<b>4</b>	-1513.389860
<b>TS3</b>	-2145.385972
<b>5</b>	-630.8072323
<b>6</b>	-1514.611378
<b>7</b>	-1799.960515
<b>TS4</b>	-1799.866511
<b>8</b>	-1799.924748
<b>TS5</b>	-2145.375205
<b>9</b>	-2145.426158
<b>TS6</b>	-2145.426158
<b>10</b>	-573.065581
<b>10'</b>	-631.991978
<b>TS7</b>	-918.501868
<b>TS8</b>	-918.506047
<b>TS9</b>	-918.504013
<b>11</b>	-918.556727
<b>H<sub>2</sub></b>	-1.167004

---

a. Single-point calculations were performed based on the gas-optimized structures

---

## Cartesian Coordinates of M062X-Optimized Structures in Gas

### 1

C	-0.00907600	1.21801200	0.15021500
C	-1.40293900	0.69065200	-0.20398100
C	-1.32294100	-0.80913900	0.14159300
H	0.05323500	1.54246000	1.19547000
H	0.33980500	2.04080100	-0.47545000
H	-2.21192900	1.19332100	0.32905900
H	-1.57980400	0.80249700	-1.27756900
H	-1.61445300	-0.99530700	1.18465300
H	-1.95855600	-1.42025200	-0.50477400
C	0.90243400	0.00139600	-0.00778800
O	2.11323400	-0.01185900	-0.04458900
N	0.08273500	-1.09346000	-0.07855500
H	0.48181600	-2.01995100	-0.02502800

### TS1

C	0.19062300	1.26879100	0.12833100
C	1.50830400	0.51482700	-0.17197500
C	1.19114200	-0.98202900	0.11260800
H	-0.01820900	2.09608500	-0.55226600
H	0.14707800	1.65690700	1.15180800
H	1.75634500	0.63272000	-1.23056300
H	2.35507900	0.88113200	0.41255400
H	1.69597000	-1.65110000	-0.58865700
H	1.48255500	-1.27534100	1.12866300
C	-0.79925400	0.14849300	-0.00423400
O	-2.07361300	0.05121900	-0.04512800
N	-0.25776300	-1.03412300	-0.04100700
H	-1.57046100	-1.21178700	-0.06184700

### 2

C	-0.08868900	1.20527300	0.13348300
C	-1.48223600	0.63409700	-0.16718300
C	-1.29810300	-0.88257100	0.09297500

H	0.00443600	1.59452100	1.15424500
H	0.24077700	1.99055400	-0.55104000
H	-2.27468700	1.07877200	0.43830700
H	-1.72995100	0.80119100	-1.21950400
H	-1.62616000	-1.16344800	1.10170800
H	-1.86218400	-1.49999200	-0.61174600
C	0.74191600	-0.04533900	0.00131200
O	2.07727500	0.08291700	-0.04659800
N	0.13617000	-1.15933000	-0.02993000
H	2.43905300	-0.81837600	-0.09320300

### PhCHO

C	-1.98979800	0.47059500	-0.00000400
O	-2.83005100	-0.39748400	-0.00001000
H	-2.27908500	1.54272500	0.00000700
C	-0.52872700	0.21674700	0.00000000
C	-0.05017500	-1.09610300	-0.00000500
C	0.36100200	1.29039100	0.00000700
C	1.31819700	-1.32904300	-0.00000200
H	-0.76854000	-1.91051400	-0.00001100
C	1.73275700	1.05622300	0.00000900
H	-0.02468400	2.30766400	0.00001000
C	2.20813000	-0.25298800	0.00000500
H	1.69776100	-2.34599100	-0.00000500
H	2.42851700	1.88917200	0.00001400
H	3.27812500	-0.43811600	0.00000700

### TS2

C	0.03798900	1.23653200	-0.84654800
O	-0.37497500	2.26887700	-0.24704700
H	-0.12354400	1.13034200	-1.93406300
C	1.29244800	0.55770000	-0.37107000
C	1.77600700	0.84064100	0.90476900
C	1.95815000	-0.35870900	-1.18234100
C	2.91924400	0.20007100	1.37011800
H	1.24366700	1.57347400	1.50350500

C	3. 10386900	-0. 99968700	-0. 71817600
H	1. 57758500	-0. 56557900	-2. 18117500
C	3. 58256200	-0. 72153800	0. 56015500
H	3. 29975500	0. 42026900	2. 36316700
H	3. 62570800	-1. 70979700	-1. 35263300
H	4. 47719600	-1. 21847400	0. 92354600
C	-3. 14319200	-0. 82807700	0. 70969700
C	-2. 43874500	-2. 07484300	0. 15309800
C	-1. 02985600	-1. 55964100	-0. 22111800
H	-3. 06981500	-0. 74603700	1. 80047700
H	-4. 19770500	-0. 73890200	0. 44031800
H	-2. 40505400	-2. 90388200	0. 86176700
H	-2. 95401900	-2. 41892700	-0. 74777400
H	-0. 29836900	-1. 71397300	0. 58184900
H	-0. 63110400	-2. 02995700	-1. 12421800
C	-2. 31965500	0. 27602800	0. 09862100
O	-2. 70208200	1. 52018500	0. 15217300
N	-1. 21401700	-0. 12593700	-0. 43330600
H	-1. 86264100	2. 07963500	-0. 08586800

### 3

C	0. 16995500	0. 98363200	0. 39612700
O	0. 37603900	2. 03862400	-0. 50375600
H	0. 32181500	1. 33423900	1. 42499400
C	-1. 22943900	0. 43759400	0. 24053500
C	-2. 04441900	0. 84467400	-0. 81171200
C	-1. 69939100	-0. 50724300	1. 15512800
C	-3. 32317300	0. 30657700	-0. 94905500
H	-1. 67203100	1. 58613700	-1. 50971100
C	-2. 97387800	-1. 04465600	1. 01569000
H	-1. 05744200	-0. 82196100	1. 97537900
C	-3. 78907200	-0. 63778900	-0. 04003300
H	-3. 95628400	0. 62795300	-1. 77056900
H	-3. 33448700	-1. 77701600	1. 73156700
H	-4. 78515400	-1. 05563800	-0. 14956700
C	3. 33818200	-0. 81351800	-0. 25348400

C	2. 34053800	-1. 93274200	-0. 57017600
C	1. 00289200	-1. 19150700	-0. 73144900
H	3. 79737200	-0. 40132100	-1. 15949700
H	4. 14428800	-1. 09197500	0. 42780800
H	2. 60155700	-2. 51011500	-1. 45867800
H	2. 26977300	-2. 62157300	0. 27643600
H	0. 85826600	-0. 82176800	-1. 75619200
H	0. 14001300	-1. 80400200	-0. 46286200
C	2. 47202700	0. 28409800	0. 34499800
O	2. 84224300	1. 34676500	0. 81755500
N	1. 15874600	-0. 07551000	0. 19836000
H	1. 22950800	2. 42778200	-0. 24742500

#### 4

C	-1. 19985800	-0. 90442200	-0. 61359700
C	-0. 72851400	0. 42343400	-0. 49228600
C	0. 73977100	0. 39941600	-0. 50628600
C	1. 17676600	-0. 93669500	-0. 65057300
C	-0. 02947000	-1. 79862300	-0. 85581300
C	1. 40130600	-0. 20980800	2. 51737600
O	2. 25209900	0. 17789800	3. 17592400
O	-0. 05908500	-3. 01461900	-0. 97554700
C	-1. 35925800	-0. 31749600	2. 58077800
O	-2. 19976100	-0. 03438900	3. 30335000
Ru	0. 00604700	-0. 69073100	1. 28620700
C	2. 55959800	-1. 45367700	-0. 70508800
C	3. 60418500	-0. 84683000	0. 00870600
C	2. 84564000	-2. 57970700	-1. 48855700
C	4. 89772800	-1. 34672400	-0. 06586800
H	3. 40315400	0. 02376400	0. 62556900
C	4. 14365600	-3. 07781600	-1. 55792200
H	2. 04340400	-3. 07043100	-2. 02636800
C	5. 17327700	-2. 46542600	-0. 85048900
H	5. 69161300	-0. 86363800	0. 49518400
H	4. 34822500	-3. 95246000	-2. 16764400
H	6. 18369300	-2. 85857200	-0. 90513200

C	1. 58861500	1. 61453600	-0. 48688100
C	2. 53780500	1. 79940900	-1. 49734800
C	1. 43227000	2. 59683700	0. 49568400
C	3. 32015800	2. 94996000	-1. 52169400
H	2. 66586900	1. 03154700	-2. 25516600
C	2. 21788500	3. 74405800	0. 47038600
H	0. 68952200	2. 45364800	1. 27616200
C	3. 16340600	3. 92292300	-0. 53721500
H	4. 05681300	3. 08278800	-2. 30753800
H	2. 09171300	4. 49877800	1. 23991700
H	3. 77808800	4. 81734800	-0. 55357900
C	-1. 55087100	1. 65765600	-0. 50022000
C	-1. 23354100	2. 69968100	-1. 37813000
C	-2. 68709000	1. 77444500	0. 30787100
C	-2. 03169600	3. 83924400	-1. 43684900
H	-0. 35908800	2. 61822700	-2. 01670300
C	-3. 47874400	2. 91484600	0. 25214300
H	-2. 96128600	0. 96002500	0. 97012200
C	-3. 15161500	3. 95237000	-0. 61890300
H	-1. 77315100	4. 63971300	-2. 12271500
H	-4. 35407100	2. 99052600	0. 88923400
H	-3. 76957800	4. 84379400	-0. 66036800
C	-2. 58892800	-1. 38739000	-0. 74448600
C	-2. 97538100	-2. 56460500	-0. 09363600
C	-3. 52044200	-0. 71804200	-1. 54628300
C	-4. 27438800	-3. 04543100	-0. 21872500
H	-2. 24565600	-3. 10424300	0. 50253700
C	-4. 81896900	-1. 20136800	-1. 66961700
H	-3. 22446000	0. 18362500	-2. 07434500
C	-5. 20129600	-2. 36270300	-1. 00255400
H	-4. 56160300	-3. 95691100	0. 29616900
H	-5. 53211600	-0. 67053000	-2. 29271100
H	-6. 21524600	-2. 73826300	-1. 09908800

### TS3

H	1. 67177900	-0. 07933000	-0. 51229100
---	-------------	--------------	--------------

C	-1.02869500	1.20015100	1.00280700
C	-2.05512700	0.45396800	0.30263000
C	-1.77975200	-0.94926900	0.47928500
C	-0.58434600	-1.08647500	1.25786800
C	-0.15984500	0.25439500	1.62713600
C	0.00858800	-1.32528800	-2.07822100
O	-0.05756900	-2.11030800	-2.90238600
O	0.89416000	0.56681400	2.34470100
H	1.74163600	0.00835400	2.00972400
C	0.08593300	1.42026800	-1.93993900
O	0.14791400	2.31998200	-2.64458400
Ru	-0.06905100	0.00074700	-0.69011500
C	0.05723100	-2.32311000	1.75132200
C	0.21772800	-3.44743700	0.93494100
C	0.48854100	-2.38009200	3.08191200
C	0.78859600	-4.60736100	1.44264400
H	-0.08802100	-3.40725600	-0.10541900
C	1.06241000	-3.54273100	3.58620000
H	0.37695300	-1.50658000	3.71682300
C	1.21189500	-4.65949700	2.76904600
H	0.91448700	-5.46804500	0.79341600
H	1.39357100	-3.57338500	4.61962900
H	1.66138400	-5.56635400	3.16225700
C	-2.63810100	-2.05847500	-0.00316300
C	-3.01350500	-3.07065600	0.88588800
C	-3.12787000	-2.08609400	-1.31312600
C	-3.85766300	-4.09537700	0.46831800
H	-2.63795000	-3.05284800	1.90466700
C	-3.97054400	-3.11062900	-1.72790600
H	-2.84860300	-1.29333300	-2.00258900
C	-4.33623600	-4.11938600	-0.83877400
H	-4.13949700	-4.87670600	1.16715100
H	-4.33961400	-3.12218000	-2.74850500
H	-4.99087300	-4.92161700	-1.16466100
C	-3.28239000	1.03857900	-0.28902300
C	-4.53477100	0.51256900	0.04755400

C	-3. 22326700	2. 15650900	-1. 12912700
C	-5. 69957800	1. 08029400	-0. 46039800
H	-4. 59338300	-0. 34654600	0. 70924300
C	-4. 38768800	2. 72344700	-1. 63411800
H	-2. 25878200	2. 58814200	-1. 38048200
C	-5. 62957000	2. 18435800	-1. 30498000
H	-6. 66289500	0. 65776900	-0. 19222000
H	-4. 32405100	3. 58845300	-2. 28669000
H	-6. 53834400	2. 62506400	-1. 70285500
C	-0. 98106900	2. 66704900	1. 20449400
C	0. 15388900	3. 41013600	0. 86996800
C	-2. 08596700	3. 32158900	1. 75918200
C	0. 18474600	4. 78353400	1. 09116900
H	1. 01088600	2. 90924300	0. 42815500
C	-2. 05599200	4. 69571300	1. 97279800
H	-2. 97189300	2. 74752000	2. 01647600
C	-0. 91968500	5. 42989200	1. 64042900
H	1. 07593700	5. 34410600	0. 82583500
H	-2. 92107600	5. 19239300	2. 40111400
H	-0. 89711100	6. 50251500	1. 80712100
C	2. 87962200	-0. 05464200	0. 11801600
O	2. 79415100	-0. 57538000	1. 28190400
C	3. 17383300	1. 43261700	0. 01418300
C	3. 45379300	2. 14760200	1. 17476700
C	3. 15667700	2. 08579300	-1. 22037600
C	3. 70128300	3. 51883600	1. 10224100
H	3. 46426800	1. 62427600	2. 12469800
C	3. 39724800	3. 45160900	-1. 29228900
H	2. 93881100	1. 51221900	-2. 11945800
C	3. 67011500	4. 17137700	-0. 12603300
H	3. 91054800	4. 07639100	2. 00988200
H	3. 36892600	3. 95779400	-2. 25228100
H	3. 85755500	5. 23973300	-0. 18020600
C	4. 53119900	-2. 81016800	-1. 71933800
C	5. 53969600	-1. 67946800	-1. 92155100
C	5. 09147200	-0. 62704800	-0. 90023500

H	4. 85131100	-3. 50257200	-0. 93143200
H	4. 30302800	-3. 39703700	-2. 61035500
H	6. 57681600	-1. 98325900	-1. 76826200
H	5. 44643500	-1. 26793200	-2. 93092500
H	5. 51807800	-0. 81392600	0. 09487700
H	5. 34255100	0. 39279500	-1. 19939400
C	3. 28423300	-2. 10579400	-1. 20233500
O	2. 17718800	-2. 59191600	-1. 10533000
N	3. 63660800	-0. 81456800	-0. 86223600

## 5

C	-0. 14309800	1. 07726100	0. 04041200
O	-0. 23247500	2. 28861700	0. 01766500
C	1. 17948600	0. 38960000	0. 05378000
C	1. 40226300	-0. 81402000	0. 72399000
C	2. 24717500	1. 06534200	-0. 54092100
C	2. 68534800	-1. 34482800	0. 78222900
H	0. 57774000	-1. 33013900	1. 20264600
C	3. 52507100	0. 52196200	-0. 49933200
H	2. 05674300	2. 01630800	-1. 02774800
C	3. 74441800	-0. 68368400	0. 16359500
H	2. 85900500	-2. 27826900	1. 30785300
H	4. 35043800	1. 04061900	-0. 97659400
H	4. 74368100	-1. 10689400	0. 20376800
C	-3. 08610900	-1. 13876900	-0. 43500800
C	-3. 60077200	-0. 07282300	0. 53065200
C	-2. 57135500	1. 05039400	0. 37963100
H	-3. 44409800	-0. 96617100	-1. 45721300
H	-3. 32523700	-2. 16953600	-0. 16893800
H	-4. 61404600	0. 26542800	0. 30761600
H	-3. 58434300	-0. 45371600	1. 55610900
H	-2. 79848200	1. 71008200	-0. 46559600
H	-2. 45726500	1. 67270600	1. 26849900
C	-1. 57615100	-0. 93958000	-0. 45167900
O	-0. 75904700	-1. 70155900	-0. 90332000
N	-1. 32423200	0. 31971200	0. 12153400

## 6

H	0. 16662600	-2. 07845000	2. 06568500
C	-1. 16305800	-0. 86442500	-0. 62179300

C	-0.68502900	0.50847900	-0.53930000
C	0.73440300	0.47927700	-0.50884700
C	1.16495000	-0.90538700	-0.59187100
C	-0.01563500	-1.69297400	-0.73032600
C	1.23433200	-0.08496300	2.67659700
O	2.02175000	0.26195800	3.43295100
O	-0.08337700	-3.02565100	-0.93511200
H	0.79187200	-3.40630700	-0.75307600
C	-1.43817500	-0.48401800	2.60733600
O	-2.33103800	-0.40889400	3.32073700
Ru	-0.01456100	-0.65123900	1.39010000
C	2.53644800	-1.44238600	-0.73754500
C	3.57429700	-1.09514000	0.13609700
C	2.81267500	-2.31979300	-1.79486600
C	4.85012400	-1.61517000	-0.04207200
H	3.37363200	-0.41563500	0.95963400
C	4.08968400	-2.85245000	-1.96269800
H	2.02401300	-2.56758600	-2.50161300
C	5.11113600	-2.50156200	-1.08717800
H	5.64307100	-1.33587200	0.64459900
H	4.28412400	-3.53425500	-2.78481500
H	6.10655900	-2.91440900	-1.21601000
C	1.64300600	1.64943800	-0.45447400
C	2.69381100	1.75563300	-1.37153800
C	1.45640700	2.67133300	0.48396200
C	3.54376100	2.85842800	-1.34673700
H	2.84310000	0.96864300	-2.10541700
C	2.30285100	3.77337700	0.50445300
H	0.63920200	2.59225100	1.19681400
C	3.35120500	3.86904100	-0.40927700
H	4.35671800	2.92626500	-2.06293400
H	2.14779600	4.55607700	1.24025700
H	4.01502300	4.72760800	-0.38876300
C	-1.54023600	1.71818100	-0.57540300
C	-1.22909300	2.76796200	-1.44689300
C	-2.69331900	1.81724200	0.21229100

C	-2.04410900	3.89467400	-1.51753100
H	-0.34095800	2.69858300	-2.06851700
C	-3.50992300	2.93921900	0.13596400
H	-2.95369700	1.00415400	0.88412300
C	-3.18614500	3.98426800	-0.72712200
H	-1.78535200	4.70186300	-2.19580200
H	-4.39918600	2.99738700	0.75568800
H	-3.82130900	4.86282700	-0.78228100
C	-2.55614000	-1.33652400	-0.79502100
C	-3.02465400	-2.43906800	-0.07228700
C	-3.41137300	-0.70943100	-1.70678700
C	-4.32396200	-2.90007200	-0.25212100
H	-2.35886100	-2.92765100	0.63427100
C	-4.71411700	-1.16770200	-1.87931300
H	-3.05397900	0.14268500	-2.27760800
C	-5.17437700	-2.26242800	-1.15264700
H	-4.67434200	-3.75490200	0.31805900
H	-5.36935100	-0.66823900	-2.58630100
H	-6.19113600	-2.61819600	-1.28730400

## 7

C	-1.16776500	-0.94896800	-0.82988200
C	-1.41784800	0.41638400	-0.45464900
C	-0.15746600	1.13108900	-0.50234300
C	0.86490800	0.21415500	-0.91974900
C	0.21046000	-1.04690000	-1.34753500
C	0.90519100	0.67131600	2.31167400
O	1.44641900	1.40393800	3.00806100
O	0.74692800	-2.03457000	-1.86041200
C	-1.31603800	-0.94140700	2.39219400
O	-2.10178400	-1.25047600	3.16121800
Ru	-0.03849500	-0.41058100	1.04910800
C	2.28033500	0.51860300	-1.21780200
C	3.09374100	1.25011000	-0.34193700
C	2.82757000	0.08309200	-2.43313900
C	4.41043100	1.55210800	-0.67731700

H	2. 68480900	1. 60230700	0. 60135400
C	4. 14464500	0. 38969200	-2. 76829500
H	2. 21118500	-0. 50157200	-3. 10752800
C	4. 94116700	1. 12577000	-1. 89409000
H	5. 02083400	2. 12757700	0. 01216600
H	4. 54802900	0. 04923600	-3. 71726900
H	5. 96728800	1. 36456300	-2. 15605800
C	0. 01601900	2. 59001700	-0. 29067600
C	0. 69606300	3. 34326700	-1. 25279900
C	-0. 52515500	3. 23945500	0. 82391100
C	0. 83504100	4. 72012700	-1. 10027700
H	1. 11901700	2. 84441600	-2. 12019500
C	-0. 38574100	4. 61404200	0. 97386300
H	-1. 05973400	2. 65648200	1. 56954200
C	0. 29656400	5. 35845000	0. 01318100
H	1. 36745100	5. 29193300	-1. 85383600
H	-0. 80899000	5. 10423200	1. 84490600
H	0. 40885800	6. 43144000	0. 13416500
C	-2. 74650000	1. 04807000	-0. 25248600
C	-3. 05983300	2. 22053500	-0. 94905700
C	-3. 72439100	0. 46494300	0. 56027800
C	-4. 31568900	2. 80698000	-0. 81933000
H	-2. 31454300	2. 67406900	-1. 59557000
C	-4. 97773500	1. 05191900	0. 69009900
H	-3. 50850000	-0. 46261600	1. 07975900
C	-5. 27601600	2. 22786700	0. 00452400
H	-4. 54124400	3. 71769200	-1. 36510300
H	-5. 72298300	0. 58791800	1. 32841400
H	-6. 25421800	2. 68666500	0. 10969400
C	-2. 13784100	-2. 04951300	-1. 00990400
C	-1. 79468500	-3. 33262100	-0. 56723300
C	-3. 36025000	-1. 85815700	-1. 66183100
C	-2. 66836700	-4. 39767600	-0. 75564900
H	-0. 83530500	-3. 47637600	-0. 07614600
C	-4. 23474000	-2. 92569700	-1. 84398200
H	-3. 62563200	-0. 87009800	-2. 02693000

C	-3. 89297800	-4. 19672100	-1. 39004800
H	-2. 39283500	-5. 38776100	-0. 40533000
H	-5. 18354400	-2. 76328400	-2. 34634100
H	-4. 57660000	-5. 02792600	-1. 53379900
C	3. 47275400	-1. 76648600	1. 98768700
C	4. 75486700	-2. 19650700	1. 26671100
C	4. 33492700	-2. 24030900	-0. 21419500
H	3. 39250200	-0. 67271900	2. 04570300
H	3. 34471600	-2. 17162100	2. 99280700
H	5. 59222000	-1. 51675300	1. 43225500
H	5. 05146300	-3. 19567800	1. 59838800
H	4. 49865600	-1. 27772800	-0. 70993500
H	4. 85275700	-3. 01960500	-0. 77819100
C	2. 37197700	-2. 24388700	1. 05704500
O	1. 16275800	-2. 34214500	1. 34277100
N	2. 90766200	-2. 52876400	-0. 12996600
H	2. 28418600	-2. 60072300	-0. 94280200

#### TS4

C	-0. 69449400	-1. 10051800	-0. 72973900
C	-1. 33934600	0. 15301100	-0. 46697200
C	-0. 32960100	1. 19100600	-0. 46386600
C	0. 94181200	0. 58789000	-0. 75666300
C	0. 71542300	-0. 83238800	-1. 11615900
C	0. 70185300	1. 19367100	2. 40002900
O	1. 02775100	2. 07505700	3. 05180700
O	1. 55471200	-1. 65815900	-1. 48051200
C	-1. 18046800	-0. 79225200	2. 51678100
O	-1. 95705700	-1. 14044200	3. 27938800
Ru	0. 07744800	-0. 16668200	1. 19623100
C	2. 22377100	1. 28669700	-0. 98669800
C	2. 64207800	2. 35982000	-0. 18692400
C	3. 05828300	0. 86758300	-2. 03279000
C	3. 85840800	2. 99041900	-0. 42088900
H	2. 00847000	2. 70342800	0. 62529600
C	4. 27979800	1. 49761800	-2. 25975000

H	2. 74871600	0. 03216200	-2. 65076600
C	4. 68632600	2. 55861800	-1. 45587200
H	4. 16220300	3. 81898600	0. 21141600
H	4. 91437900	1. 15641600	-3. 07228600
H	5. 63982400	3. 04644500	-1. 63269400
C	-0. 60192700	2. 64770100	-0. 37022800
C	-0. 14874700	3. 48594000	-1. 39436700
C	-1. 34277900	3. 19637400	0. 68057500
C	-0. 43091200	4. 84839800	-1. 36593900
H	0. 42956400	3. 06328000	-2. 21126800
C	-1. 62529300	4. 55782700	0. 70633800
H	-1. 70173100	2. 54446900	1. 47297200
C	-1. 16914300	5. 38760400	-0. 31581700
H	-0. 07161900	5. 48845200	-2. 16563400
H	-2. 20093100	4. 97170200	1. 52834000
H	-1. 38705500	6. 45076800	-0. 29241100
C	-2. 80282500	0. 39519700	-0. 37472900
C	-3. 38099300	1. 41400100	-1. 13976800
C	-3. 63595900	-0. 42094900	0. 39892300
C	-4. 75704900	1. 62480600	-1. 11407100
H	-2. 74981500	2. 04414100	-1. 75871400
C	-5. 00897300	-0. 20869800	0. 42564200
H	-3. 20787400	-1. 24252000	0. 96392400
C	-5. 57416300	0. 81869100	-0. 32763400
H	-5. 18827500	2. 42128100	-1. 71238200
H	-5. 63829200	-0. 84965700	1. 03480700
H	-6. 64656100	0. 98544700	-0. 30482100
C	-1. 32474400	-2. 41102100	-0. 99752800
C	-0. 67223400	-3. 58537300	-0. 60536300
C	-2. 52482300	-2. 51810000	-1. 71123500
C	-1. 22408800	-4. 83148700	-0. 88127500
H	0. 28510400	-3. 50884900	-0. 10081700
C	-3. 07739200	-3. 76550000	-1. 98453600
H	-3. 02561800	-1. 62052700	-2. 05996100
C	-2. 43436200	-4. 92657200	-1. 56413300
H	-0. 70447200	-5. 73096400	-0. 56471300

H	-4. 01138000	-3. 82795600	-2. 53476700
H	-2. 86813300	-5. 89912100	-1. 77582400
C	3. 82665500	-1. 27285300	0. 72183100
C	4. 33310800	-2. 27093100	-0. 35077300
C	3. 61465000	-3. 62495600	-0. 05265500
H	3. 56641900	-0. 29379100	0. 31578300
H	4. 53216600	-1. 12438000	1. 54723200
H	4. 01647200	-1. 91144200	-1. 33054700
H	5. 41990700	-2. 37416700	-0. 34120300
H	3. 16843100	-4. 05220400	-0. 95318600
H	4. 27711700	-4. 36884900	0. 40149800
C	2. 64193400	-2. 01651900	1. 23334000
O	1. 61589400	-1. 74357800	2. 01192200
N	2. 56149200	-3. 24892500	0. 88797400
H	1. 50169700	-3. 01762000	1. 66737400

## 8

C	1. 24666200	-0. 97891100	0. 83840700
C	1. 50871500	0. 36423900	0. 39743700
C	0. 29260700	1. 14197000	0. 57552600
C	-0. 72668100	0. 28621300	1. 07823400
C	-0. 10111500	-1. 02691000	1. 42139000
C	-0. 91209900	0. 66286200	-2. 21074300
O	-1. 37501900	1. 42956400	-2. 92393800
O	-0. 67787900	-2. 03041800	1. 86686700
C	1. 05209200	-1. 26865700	-2. 29829400
O	1. 75917300	-1. 74058700	-3. 06211000
Ru	-0. 03495300	-0. 46808700	-0. 93339100
C	-2. 14764800	0. 60294100	1. 33843500
C	-2. 85380000	1. 52334400	0. 54761600
C	-2. 82219000	-0. 04000000	2. 38451400
C	-4. 18848100	1. 80871100	0. 80952800
H	-2. 35160100	2. 02582600	-0. 27492000
C	-4. 15982800	0. 24903200	2. 64271500
H	-2. 29954700	-0. 78232200	2. 97542800
C	-4. 84620000	1. 17623700	1. 86455000

H	-4. 71497300	2. 52759100	0. 18906700
H	-4. 66639000	-0. 26046100	3. 45646100
H	-5. 88850100	1. 40023400	2. 07107800
C	0. 19175300	2. 60405500	0. 34771500
C	-0. 36003900	3. 40808600	1. 35009000
C	0. 68776900	3. 20383000	-0. 81402000
C	-0. 41856300	4. 78919500	1. 18978400
H	-0. 74818400	2. 94413400	2. 25254000
C	0. 62538100	4. 58362600	-0. 97282000
H	1. 12798500	2. 58127900	-1. 58881900
C	0. 07162000	5. 37966300	0. 02785600
H	-0. 85024400	5. 40314000	1. 97391500
H	1. 01011900	5. 03667100	-1. 88091400
H	0. 02166200	6. 45657900	-0. 09880000
C	2. 84239700	0. 93915500	0. 09079700
C	3. 27879400	2. 06045300	0. 80519400
C	3. 70969400	0. 34486800	-0. 83077300
C	4. 55097100	2. 58304200	0. 59303300
H	2. 61620700	2. 52364600	1. 53055600
C	4. 98027100	0. 86886400	-1. 04297900
H	3. 39468400	-0. 54036800	-1. 37360300
C	5. 40384800	1. 99089700	-0. 33377000
H	4. 87293200	3. 45420800	1. 15476000
H	5. 64116600	0. 39717300	-1. 76326800
H	6. 39531800	2. 39990200	-0. 50121900
C	2. 20791600	-2. 09519600	0. 97006400
C	1. 83982900	-3. 38440100	0. 56987100
C	3. 47110500	-1. 89873200	1. 53881100
C	2. 71957600	-4. 45043400	0. 71974600
H	0. 85583500	-3. 54530000	0. 13802200
C	4. 35279900	-2. 96555900	1. 68319900
H	3. 76142600	-0. 90554400	1. 86865300
C	3. 98132100	-4. 24309200	1. 27279800
H	2. 41930700	-5. 44418800	0. 40250900
H	5. 33124700	-2. 79767000	2. 12267400
H	4. 67076400	-5. 07391300	1. 38641100

C	-3.54925400	-1.26179100	-1.88340100
C	-5.03406000	-1.61374200	-1.71349200
C	-5.11552100	-2.00551000	-0.21880800
H	-3.36784800	-0.19080300	-1.72800800
H	-3.11149000	-1.54918700	-2.84359900
H	-5.70467500	-0.79423000	-1.97957200
H	-5.28449300	-2.47677800	-2.33760100
H	-5.39152800	-1.15016400	0.40968500
H	-5.83647800	-2.80495600	-0.02865300
C	-2.97329000	-2.02670600	-0.71960000
O	-1.62781200	-2.22517400	-0.63958800
N	-3.76980600	-2.43765600	0.17103400
H	-1.44192000	-2.51200100	0.29770400

**TS5**

C	0.67536700	1.30043600	-0.70807000
C	2.01481600	0.85659700	-0.47781400
C	2.02994700	-0.59049700	-0.55625000
C	0.70437000	-1.04409200	-0.88334400
C	-0.11620300	0.15310900	-1.22328400
C	1.25960100	-1.48287900	2.25423600
O	1.62791600	-2.38683400	2.85097200
O	-1.25896400	0.19286800	-1.66953000
C	1.18617200	1.26653900	2.50577500
O	1.49701300	2.03619600	3.29115300
Ru	0.76320500	-0.00831400	1.12131700
C	0.25925400	-2.43883700	-1.09131800
C	0.87307000	-3.52005600	-0.43500200
C	-0.83293700	-2.70792100	-1.92956100
C	0.41163100	-4.81935200	-0.61071700
H	1.70983400	-3.34395500	0.23370000
C	-1.29167700	-4.01281100	-2.10096600
H	-1.32413000	-1.88303200	-2.43130100
C	-0.67626400	-5.07471300	-1.44483600
H	0.90303100	-5.63467100	-0.08861900
H	-2.13781200	-4.19701600	-2.75756600

H	-1. 03735400	-6. 08950700	-1. 58064800
C	3. 26349300	-1. 41503800	-0. 50693700
C	3. 56985800	-2. 23422800	-1. 59880600
C	4. 15507400	-1. 34810000	0. 56695900
C	4. 74766400	-2. 97494500	-1. 61377300
H	2. 87552300	-2. 28963600	-2. 43273400
C	5. 33248700	-2. 08880100	0. 54966100
H	3. 92084600	-0. 70542300	1. 41173700
C	5. 63118200	-2. 90471800	-0. 53927900
H	4. 97408700	-3. 60849600	-2. 46559400
H	6. 01662300	-2. 02940500	1. 39020100
H	6. 54801500	-3. 48560400	-0. 54924300
C	3. 20768400	1. 73202700	-0. 35709000
C	4. 34849400	1. 45657700	-1. 11964900
C	3. 18635900	2. 88886600	0. 43123400
C	5. 45057700	2. 30530400	-1. 07585400
H	4. 37207500	0. 57587600	-1. 75351200
C	4. 28928100	3. 73340700	0. 47628900
H	2. 29461300	3. 13719600	0. 99780300
C	5. 42715800	3. 44217300	-0. 27372700
H	6. 32755900	2. 07458000	-1. 67234800
H	4. 25735900	4. 62352400	1. 09638500
H	6. 28825300	4. 10215200	-0. 23738900
C	0. 21130400	2. 69776800	-0. 85869800
C	-0. 89756900	3. 15290600	-0. 14176900
C	0. 84133100	3. 56862000	-1. 75444900
C	-1. 37072400	4. 45036600	-0. 31359500
H	-1. 39348000	2. 49132400	0. 56248300
C	0. 37463800	4. 86895100	-1. 91949000
H	1. 70372300	3. 22349400	-2. 31851200
C	-0. 73357100	5. 31326700	-1. 20103800
H	-2. 23645500	4. 78053600	0. 25246400
H	0. 87603200	5. 53572800	-2. 61449100
H	-1. 09812300	6. 32732800	-1. 33349100
C	-1. 97182500	-2. 57566600	1. 57395300
C	-3. 20320700	-3. 24499600	0. 92983600

C	-3. 78765100	-2. 15772000	-0. 01027600
H	-1. 03187000	-2. 91597500	1. 12753600
H	-1. 90071500	-2. 71287300	2. 65685300
H	-2. 93850500	-4. 15323000	0. 38619400
H	-3. 93594900	-3. 50583000	1. 69790900
H	-3. 53367500	-2. 33625600	-1. 06070300
H	-4. 87558500	-2. 06536300	0. 06375700
C	-2. 21533700	-1. 12957200	1. 23872300
O	-1. 51300500	-0. 14012600	1. 79388400
N	-3. 16321900	-0. 90918700	0. 41125400
H	-2. 12958000	0. 73363700	1. 68209900
C	-3. 62588600	1. 02188000	0. 25342300
O	-3. 29221400	1. 47407400	1. 38955900
H	-2. 93280600	1. 10718100	-0. 59298400
C	-5. 06486000	0. 90071200	-0. 11091400
C	-6. 05210100	1. 09021300	0. 85433400
C	-5. 41321000	0. 57009700	-1. 42067800
C	-7. 39158200	0. 95067700	0. 50606300
H	-5. 74785000	1. 35059900	1. 86324000
C	-6. 75298600	0. 42769900	-1. 76706000
H	-4. 62601800	0. 42097000	-2. 15719900
C	-7. 74169700	0. 61836300	-0. 80231300
H	-8. 16531700	1. 10075700	1. 25264200
H	-7. 02785900	0. 17252100	-2. 78574700
H	-8. 78808000	0. 50989400	-1. 07150500

**9**

C	-0. 16452400	-1. 03520600	-0. 61884300
C	-1. 58126600	-1. 16289900	-0. 54723000
C	-2. 14749400	0. 17507700	-0. 54884500
C	-1. 07344400	1. 12591800	-0. 74178400
C	0. 16601100	0. 37272400	-0. 98994300
C	-1. 84828900	1. 26171000	2. 33523100
O	-2. 45439400	2. 03217400	2. 92469000
O	1. 29148900	0. 80721500	-1. 25852900
C	-1. 22380400	-1. 38664100	2. 52169000

O	-1.45675200	-2.23436500	3.25482000
Ru	-0.92105200	-0.00186900	1.23153800
C	-1.20308400	2.58725000	-0.93012000
C	-2.19047500	3.33596600	-0.27101100
C	-0.31088100	3.26312300	-1.77628400
C	-2.28297300	4.71050700	-0.45139500
H	-2.89532200	2.83807300	0.38758800
C	-0.40436800	4.64229000	-1.94905100
H	0.46583600	2.69983900	-2.28004200
C	-1.38783900	5.37291900	-1.28953800
H	-3.05621000	5.26590400	0.07050900
H	0.29710100	5.14526300	-2.60835600
H	-1.45796900	6.44769700	-1.42551900
C	-3.60186200	0.46339200	-0.62489500
C	-4.10233000	1.18041800	-1.71662600
C	-4.49209300	-0.01821900	0.33901000
C	-5.46936500	1.41001000	-1.84046800
H	-3.41219400	1.56064000	-2.46470100
C	-5.85846100	0.20862900	0.21171600
H	-4.10185100	-0.57792000	1.18529700
C	-6.35065300	0.92419500	-0.87738200
H	-5.84494700	1.97055700	-2.69092700
H	-6.53952900	-0.17260000	0.96602000
H	-7.41666700	1.10486100	-0.97405800
C	-2.35691200	-2.42581500	-0.61173600
C	-3.40881200	-2.52989000	-1.53048100
C	-2.02359700	-3.54510800	0.15786300
C	-4.11646400	-3.71962000	-1.66427100
H	-3.67158600	-1.67403300	-2.14415300
C	-2.73414400	-4.73307200	0.02514600
H	-1.20647600	-3.48865900	0.86722000
C	-3.78474100	-4.82376800	-0.88374800
H	-4.92905700	-3.78210000	-2.38116800
H	-2.46428700	-5.58892300	0.63557300
H	-4.33977600	-5.75124100	-0.98458300
C	0.89532300	-2.06541600	-0.67933000

C	1. 32950800	-2. 77132500	0. 44786300
C	1. 60172900	-2. 21886200	-1. 87825600
C	2. 43334400	-3. 61590200	0. 37919800
H	0. 83142700	-2. 61191600	1. 40061000
C	2. 70854800	-3. 05879000	-1. 94730500
H	1. 29405600	-1. 64624200	-2. 74802100
C	3. 12970300	-3. 75682800	-0. 81780500
H	2. 76782600	-4. 13843300	1. 26981100
H	3. 25554600	-3. 15265000	-2. 88039800
H	4. 00616000	-4. 39493100	-0. 86564200
C	1. 45286400	2. 72736700	1. 46275900
C	2. 75230100	3. 46887400	1. 12736900
C	3. 58622400	2. 40859700	0. 39181200
H	0. 72628600	2. 81379800	0. 64670000
H	0. 96718900	3. 03663500	2. 39160100
H	2. 58554500	4. 35582600	0. 51379500
H	3. 26502500	3. 77115800	2. 04508700
H	3. 36661400	2. 39412900	-0. 68204400
H	4. 66258800	2. 52025600	0. 53595600
C	1. 89366400	1. 28547500	1. 52298900
O	1. 24070900	0. 31285000	1. 96700200
N	3. 11055700	1. 16082200	0. 99330200
H	2. 93504000	-1. 02717300	2. 25861800
C	3. 59663800	-0. 20354200	0. 68075700
O	3. 81652100	-0. 90681900	1. 86591200
H	2. 80053400	-0. 66683800	0. 08884600
C	4. 85229100	-0. 14625400	-0. 14710000
C	6. 11018000	-0. 25729700	0. 44063200
C	4. 73548300	0. 04329500	-1. 52493700
C	7. 25275200	-0. 17493300	-0. 35188700
H	6. 18051700	-0. 42218100	1. 51090800
C	5. 87945400	0. 13061900	-2. 31273200
H	3. 74148900	0. 12275600	-1. 96212900
C	7. 13921400	0. 02177400	-1. 72637800
H	8. 23393400	-0. 26791800	0. 10383000
H	5. 78871800	0. 27674500	-3. 38484200

H	8.03209000	0.08321400	-2.34125800
---	------------	------------	-------------

**TS6**

C	-3.16695200	-1.05473700	-0.09394300
C	-3.82768800	0.27796900	0.27270900
C	-2.74502000	1.31286900	-0.09951100
H	-3.39932700	-1.37486400	-1.11669600
H	-3.40034700	-1.88566700	0.57465500
H	-4.77495900	0.45433600	-0.24058300
H	-4.01418000	0.31403700	1.35009700
H	-2.88846600	1.69868900	-1.11730800
H	-2.73166700	2.17147100	0.57755900
C	-1.69683900	-0.69972500	-0.03149700
O	-0.79953700	-1.61892900	-0.01723600
N	-1.48068100	0.58319500	-0.02228600
H	-0.24582700	1.16493900	-0.02045300
C	3.16695200	1.05473700	-0.09393700
C	3.82768700	-0.27797000	0.27271300
C	2.74502100	-1.31286900	-0.09951000
H	3.39932900	1.37486600	-1.11668800
H	3.40034600	1.88566500	0.57466300
H	4.77496000	-0.45433500	-0.24057800
H	4.01417800	-0.31404000	1.35010200
H	2.88846700	-1.69868600	-1.11730900
H	2.73166700	-2.17147300	0.57755700
C	1.69683900	0.69972500	-0.03149300
O	0.79953800	1.61892900	-0.01723100
N	1.48068100	-0.58319500	-0.02228600
H	0.24582700	-1.16493900	-0.02045600

**10**

C	3.49940800	0.59239600	-0.13757400
C	3.78659800	-0.86613800	0.23378300
C	2.44137800	-1.56396800	-0.07245400
H	3.79467600	0.83724900	-1.16482200
H	3.95422500	1.33375100	0.52310400

H	4. 62621700	-1. 30154400	-0. 31200300
H	4. 00504200	-0. 94001300	1. 30333000
H	2. 43838500	-2. 00772700	-1. 07708100
H	2. 21693000	-2. 36734200	0. 63576500
C	1. 99126900	0. 61971600	-0. 04734800
O	1. 39679800	1. 79405300	-0. 04867900
N	1. 41237200	-0. 52287500	-0. 00282600
C	-3. 46517800	0. 65758200	0. 18029200
C	-3. 81163300	-0. 77706200	-0. 23268400
C	-2. 52465600	-1. 56489800	0. 08341100
H	-3. 70995200	0. 85771100	1. 22991500
H	-3. 93309400	1. 43515900	-0. 42537000
H	-4. 68330400	-1. 18375200	0. 28315200
H	-4. 00397300	-0. 81577400	-1. 30876200
H	-2. 54518400	-1. 97993300	1. 09988800
H	-2. 35502400	-2. 38768200	-0. 61601400
C	-1. 94974200	0. 70784600	0. 04317300
O	-1. 26887700	1. 73443900	0. 03662900
N	-1. 49228100	-0. 55136500	-0. 04342300
H	0. 39980400	1. 70269800	-0. 02231900
H	-0. 47341600	-0. 72389800	-0. 03223500

## 10'

C	0. 79669500	2. 17469300	-0. 05532300
O	0. 15004500	2. 66320800	-0. 95689800
H	1. 01130800	2. 74256200	0. 86807300
C	1. 35275800	0. 79730500	-0. 10589300
C	1. 22202700	0. 04043200	-1. 27128200
C	1. 95315900	0. 24800700	1. 02606300
C	1. 69618500	-1. 26584000	-1. 30491200
H	0. 74555600	0. 49659200	-2. 13481600
C	2. 43071900	-1. 05892100	0. 99257900
H	2. 01603100	0. 83970000	1. 93586600
C	2. 30210000	-1. 81361500	-0. 17265500
H	1. 60188900	-1. 85768400	-2. 21054700
H	2. 89526600	-1. 49170600	1. 87293000
H	2. 67450700	-2. 83340100	-0. 19944000
C	-1. 53892600	-1. 21665100	1. 05287800

C	-2.43512700	-1.69787800	-0.09092300
C	-2.23552800	-0.62282000	-1.17581000
H	-0.50747300	-1.57834700	0.94236300
H	-1.88518900	-1.47884300	2.05370300
H	-2.18519200	-2.69671600	-0.45353900
H	-3.48113800	-1.70117600	0.22946400
H	-1.38872400	-0.87625300	-1.82860300
H	-3.12359500	-0.48323700	-1.79796200
C	-1.48684100	0.29503200	0.86828000
O	-1.05941300	1.11552300	1.66151700
N	-1.95387100	0.56285300	-0.38518800
H	-1.76451300	1.47022100	-0.79615000

### TS7

C	1.39884500	-1.24723000	0.15212800
O	1.09205600	-1.98780300	-0.81695100
H	0.82365300	-1.29875900	1.09311400
C	2.82253200	-0.81586600	0.34543800
C	3.73738000	-0.99805900	-0.68950600
C	3.22814300	-0.22661000	1.54133500
C	5.05564800	-0.58544400	-0.52836200
H	3.39106900	-1.47172100	-1.60303700
C	4.54692800	0.18819700	1.70309700
H	2.50558400	-0.09465800	2.34463900
C	5.46042600	0.00959000	0.66627500
H	5.77242600	-0.72826100	-1.33151400
H	4.86413400	0.64510900	2.63568200
H	6.49038200	0.33052600	0.79092500
C	-0.75674700	1.84296100	-1.60740000
C	-0.11451800	2.73566500	-0.53392700
C	1.00886700	1.85296100	0.06182800
H	-0.36413600	2.02068200	-2.61584800
H	-1.84585800	1.90683600	-1.63600800
H	0.26566700	3.67920900	-0.92962700
H	-0.85814200	2.94374800	0.23699000
H	1.99404000	2.05692200	-0.37602300
H	1.09970900	1.96435600	1.14605600
C	-0.30965100	0.48251800	-1.15300100

O	-0.82067600	-0.61846600	-1.67422400
N	0.61701500	0.48488600	-0.26673300
H	-0.20055100	-1.38434200	-1.37888500
C	-4.58090800	0.12996300	1.55124100
C	-5.54258300	-0.76191400	0.76024600
C	-4.61075300	-1.55190700	-0.17788200
H	-4.21242100	-0.36519400	2.45745100
H	-4.98925800	1.09859400	1.84363400
H	-6.15087500	-1.41694900	1.38638600
H	-6.21505900	-0.14146000	0.16070200
H	-4.26861300	-2.48562000	0.28882400
H	-5.08861200	-1.80129100	-1.12890800
C	-3.39140800	0.30833800	0.61110700
O	-2.49016300	1.12276700	0.72384900
N	-3.50949600	-0.62467600	-0.37058100
H	-2.72873100	-0.79016800	-1.00043800

### TS8

C	-0.80269100	-0.78269900	0.05495300
O	-0.24259500	-1.29185600	1.05197700
H	-0.23458700	-0.66212100	-0.88494600
C	-2.28570700	-0.84097600	-0.10986700
C	-3.08455700	-1.26619400	0.94958900
C	-2.86721800	-0.49415300	-1.32825200
C	-4.46463300	-1.32988400	0.79398100
H	-2.60352700	-1.54687300	1.88147100
C	-4.24832200	-0.55806000	-1.48501200
H	-2.23243100	-0.17582900	-2.15318500
C	-5.04725000	-0.97424600	-0.42191600
H	-5.08932400	-1.65938200	1.61873300
H	-4.70170200	-0.28910200	-2.43424700
H	-6.12514300	-1.02675200	-0.54298700
C	0.94660500	2.94779200	0.75212700
C	0.02641800	3.45575200	-0.36810000
C	-0.67537600	2.16887400	-0.86049600
H	1.01988900	3.60614700	1.62092000

H	1. 95508000	2. 71968000	0. 39251300
H	-0. 71466600	4. 14908500	0. 03990200
H	0. 56736600	3. 96501100	-1. 16721000
H	-1. 71419000	2. 33477900	-1. 16103800
H	-0. 13094200	1. 71579200	-1. 69866600
C	0. 28888200	1. 63932300	1. 08717700
O	0. 68280900	0. 95506400	2. 14619000
N	-0. 61718500	1. 24664800	0. 27066000
H	0. 29610500	0. 04912600	2. 07115900
C	4. 22138800	-0. 51433200	-1. 16899300
C	4. 77539100	-1. 55790900	-0. 19447700
C	3. 51715000	-2. 31011600	0. 28075900
H	4. 16478900	-0. 89704500	-2. 19486200
H	4. 77359100	0. 42640900	-1. 19433800
H	5. 51418700	-2. 22724600	-0. 63924200
H	5. 24048000	-1. 05667300	0. 65938300
H	3. 30893000	-3. 18480700	-0. 35028400
H	3. 59979000	-2. 65279600	1. 31556200
C	2. 79201300	-0. 28499900	-0. 68063800
O	2. 06077200	0. 64342900	-1. 00232500
N	2. 47579800	-1. 30806800	0. 14422000
H	1. 53556200	-1. 39959200	0. 54545700

## TS9

C	-0. 59253300	-0. 74058500	0. 40549800
O	-0. 52534600	-1. 69885900	-0. 41333000
H	-0. 66350900	-0. 93728200	1. 48416700
C	0. 06439300	0. 56699500	0. 07190200
C	0. 37062500	0. 86105200	-1. 25548000
C	0. 37929700	1. 47678000	1. 07947100
C	0. 98821900	2. 06636000	-1. 57661800
H	0. 12606000	0. 12454500	-2. 01623600
C	0. 99263600	2. 68562500	0. 75898800
H	0. 17047700	1. 21842200	2. 11476000
C	1. 29727200	2. 98059500	-0. 56925500
H	1. 22893900	2. 29594400	-2. 61067400

H	1. 24379300	3. 39172400	1. 54484500
H	1. 77999800	3. 92094100	-0. 81862800
C	-4. 71927700	-0. 50657000	-0. 21915800
C	-4. 50462400	1. 00675900	-0. 05014100
C	-3. 11396500	1. 10750300	0. 62366400
H	-5. 19602400	-0. 79853500	-1. 15724800
H	-5. 29559600	-0. 95091300	0. 60052500
H	-4. 47107700	1. 48687500	-1. 03186300
H	-5. 28884900	1. 48994900	0. 53489900
H	-2. 51293900	1. 93967000	0. 24525800
H	-3. 18954500	1. 21987000	1. 71227900
C	-3. 30252600	-1. 01329800	-0. 14040500
O	-3. 01166300	-2. 24281500	-0. 48702900
N	-2. 45716300	-0. 15848000	0. 31423100
H	-2. 00175400	-2. 32416600	-0. 44852400
C	3. 78154400	-0. 07191600	0. 77209800
C	4. 44899700	-0. 56742900	-0. 51224400
C	3. 27672900	-1. 18389000	-1. 29549600
H	3. 36196800	0. 93550200	0. 64617600
H	4. 41876800	-0. 06828400	1. 65774400
H	4. 95493800	0. 21813000	-1. 07696200
H	5. 17965600	-1. 34757400	-0. 27790700
H	2. 76584800	-0. 42110100	-1. 90052400
H	3. 59127600	-1. 99762800	-1. 95461100
C	2. 59115200	-1. 00914100	0. 94960200
O	1. 89167500	-1. 11694900	1. 94185100
N	2. 41558200	-1. 66964600	-0. 23138300
H	1. 50367500	-2. 08326600	-0. 41390400

## 11

C	-4. 50570400	-1. 31728500	-0. 69863200
C	-4. 91759900	-1. 43328500	0. 77222200
C	-4. 16440800	-0. 27179700	1. 44810400
H	-5. 17791700	-0. 66385100	-1. 26704000
H	-4. 43464700	-2. 26670700	-1. 23154500
H	-5. 99572700	-1. 37570300	0. 93212600

H	-4.56205100	-2.38285400	1.18246400
H	-4.76532500	0.64690900	1.45882000
H	-3.87343500	-0.49974000	2.47640000
C	-3.14409400	-0.63529300	-0.63731300
O	-2.34401100	-0.56268600	-1.56453700
N	-2.99552900	-0.11647400	0.59799000
H	-2.22194000	0.51760700	0.81605400
C	0.53039900	3.53452800	0.18556300
C	1.94343700	3.37868800	-0.38555500
C	1.92243400	1.97668700	-1.01337600
H	-0.16452500	3.96212000	-0.54682800
H	0.46326600	4.13158100	1.09656000
H	2.20824900	4.15223300	-1.10855000
H	2.67752900	3.40400000	0.42542500
H	1.59472000	1.98701400	-2.05934000
H	2.88807900	1.46612900	-0.96031600
C	0.08147800	2.10362100	0.44647400
O	-0.89282800	1.76950000	1.11164300
N	0.93993900	1.27410500	-0.19578900
H	-0.60832200	-0.37855600	-1.76329200
C	0.71098200	-0.15559900	-0.37910500
O	0.36899500	-0.43399600	-1.69697500
H	-0.10734000	-0.40580100	0.31030100
C	1.95884200	-0.93402800	0.00670800
C	2.39954600	-1.99063900	-0.78627000
C	2.65525600	-0.61442500	1.17437100
C	3.52678200	-2.72108100	-0.41530900
H	1.85296800	-2.22589500	-1.69208500
C	3.77922700	-1.34542800	1.54506200
H	2.31353000	0.21437400	1.79026400
C	4.21824000	-2.40210500	0.74920700
H	3.86509500	-3.54204600	-1.04056100
H	4.31437000	-1.08985900	2.45479300
H	5.09639500	-2.97227600	1.03697400

**H2**

H	0.00000000	0.00000000	0.36827100
H	0.00000000	0.00000000	-0.36827100