

Supporting Information

Theoretical Investigation on the Mechanism of Glucose-to-Fructose

Isomerization Synergetically Catalyzed by MnCl₂ and

[C₄SO₃HMIM][CH₃SO₃] in [BMIM]Cl

Yaru Jing,^a Zhe Han,^b Chengbu Liu,^a and Dongju Zhang^{*a}

^aKey Lab of Colloid and Interface Chemistry, Ministry of Education, Institute of Theoretical Chemistry, Shandong University, Jinan, 250100, P. R. China

^bQilu University of Technology (Shandong Academy of Sciences), Advanced Materials Institute, Shandong Engineering Research Centre for Municipal Sludge Disposal, Jinan, 250014, P.R. China

Corresponding author:

Dr & Professor Dongju Zhang

E-mail: zhangdj@sdu.edu.cn

Tel: +86-531-88365833

Fax: +86-531-88564464

IM1

C	-1.082544	5.517113	1.653080
C	0.275342	5.499988	1.759443
C	-0.317262	3.935319	0.309873
N	-1.430405	4.537343	0.739574
H	-1.822941	6.134327	2.136845
H	0.947466	6.099890	2.352484
H	-0.253035	3.102830	-0.385557
N	0.735541	4.513104	0.905898
C	-2.792848	4.142693	0.368263
H	-3.273899	3.677791	1.231412
H	-3.347314	5.029837	0.052269
H	-2.742517	3.413397	-0.444646
C	2.132532	4.071058	0.726494
H	2.264613	3.827021	-0.332102
H	2.770877	4.926685	0.964024
C	2.444991	2.852130	1.609288
H	1.582198	2.178650	1.600740
H	2.612104	3.157069	2.648706
C	3.664006	2.100940	1.062606
H	3.488599	1.789138	0.029279
H	4.589367	2.683020	1.099988
S	3.973362	0.610660	2.053721
O	4.832781	-0.307513	1.041193
O	4.811703	0.955081	3.191950
O	2.678618	-0.061771	2.275126
C	0.918723	-3.304918	-1.416193
C	1.470886	-1.986097	-1.956741
C	2.160944	-1.257943	-0.797734
C	2.802356	-3.389319	0.241941
C	2.078461	-4.143743	-0.879974
H	2.677858	-0.356319	-1.139953
H	2.200572	-2.180795	-2.750892
H	0.236818	-3.089294	-0.589290
H	2.123458	-3.279705	1.095251
H	2.796426	-4.346234	-1.689776
O	3.195614	-2.063436	-0.227095
O	1.140932	-0.954614	0.122977
O	0.421130	-1.165850	-2.473404
H	0.861471	-0.466783	-3.025905
O	0.234189	-4.067498	-2.397182
H	-0.672778	-3.708490	-2.409524
O	1.592596	-5.356424	-0.329510
H	0.906728	-5.651055	-0.955107

C	4.092348	-4.066788	0.693086
H	4.516730	-3.505072	1.540971
H	3.848484	-5.074764	1.037730
O	5.034972	-4.208677	-0.356670
H	5.197513	-3.319654	-0.710807
H	4.239057	-1.020100	0.655271
H	1.507075	-0.497184	0.911852
S	1.454397	2.053192	-2.648129
C	0.345111	3.043433	-3.662851
H	0.102229	3.961697	-3.123652
H	0.864377	3.279564	-4.593757
H	-0.565189	2.469381	-3.845382
O	1.821139	0.867437	-3.479634
O	0.644506	1.638279	-1.427863
O	2.591322	2.921659	-2.258450
Mn	-0.842389	-0.054863	-0.920247
C	-6.468918	-1.686647	-0.089894
C	-6.106232	-1.697976	1.222061
C	-4.635208	-0.471400	0.120483
N	-5.543357	-0.906846	-0.760401
H	-7.293607	-2.157066	-0.601589
H	-6.555287	-2.178954	2.076339
H	-3.784512	0.148482	-0.125270
N	-4.963192	-0.924538	1.335802
C	-5.451468	-0.730868	-2.213283
H	-5.101380	-1.663987	-2.660686
H	-6.435689	-0.460895	-2.603336
H	-4.722493	0.054584	-2.422382
C	-4.140645	-0.763560	2.551871
H	-3.431030	0.042165	2.347101
H	-4.811227	-0.452573	3.360728
C	-3.383206	-2.048365	2.901436
H	-4.097514	-2.855402	3.120613
H	-2.805288	-2.354352	2.021610
C	-2.447151	-1.835199	4.098618
H	-1.735015	-1.039101	3.848494
H	-3.025927	-1.482950	4.965725
C	-1.684913	-3.109411	4.475771
H	-1.073814	-3.462624	3.637424
H	-1.016489	-2.932086	5.325406
H	-2.371355	-3.919450	4.752863
C1	-2.551751	1.400398	-2.085660
C1	-2.231158	-2.131856	-0.866571
C1	-1.218155	0.972623	1.331626

TS₁₋₂

C	0.133111	5.535480	-2.336722
C	-1.214836	5.338577	-2.386156
C	-0.387319	4.015953	-0.817427
N	0.628953	4.703820	-1.348394
H	0.774452	6.189013	-2.906613
H	-1.973964	5.788771	-3.006169
H	-0.313744	3.264019	-0.032954
N	-1.521170	4.392937	-1.425223
C	2.042105	4.531742	-0.987448
H	2.531759	3.917848	-1.745764
H	2.508718	5.517351	-0.923305
H	2.114609	4.016467	-0.026844
C	-2.847102	3.807452	-1.130034
H	-2.887453	3.664075	-0.046321
H	-3.594954	4.554752	-1.408990
C	-3.041985	2.473444	-1.869740
H	-2.087365	1.939339	-1.883515
H	-3.330203	2.639092	-2.913696
C	-4.072936	1.588758	-1.161622
H	-3.818241	1.480940	-0.102849
H	-5.094574	1.974092	-1.231496
S	-4.115849	-0.088905	-1.883107
O	-4.627299	-0.980980	-0.793001
O	-4.894566	-0.035908	-3.119135
O	-2.633690	-0.401681	-2.154923
C	-0.376421	-2.955257	1.549313
C	-1.098750	-1.689508	2.027971
C	-1.912037	-1.114691	0.881813
C	-2.426416	-3.762862	0.213627
C	-1.357692	-4.101985	1.257938
H	-2.745810	-0.448698	1.115851
H	-1.755028	-1.918961	2.873106
H	0.164489	-2.715741	0.627186
H	-1.948011	-3.507106	-0.739483
H	-1.868389	-4.372544	2.194558
O	-3.138702	-2.599203	0.725516
O	-1.311371	-1.017574	-0.235934
O	-0.153707	-0.692599	2.432586
H	-0.662468	-0.028573	2.975253
O	0.522572	-3.452096	2.521985
H	1.335337	-2.909529	2.438114
O	-0.625335	-5.209246	0.755332
H	0.152705	-5.265692	1.339919

C	-3.441693	-4.885914	0.000054
H	-4.137292	-4.589253	-0.802273
H	-2.905530	-5.780844	-0.325261
O	-4.133348	-5.227778	1.187412
H	-4.559291	-4.416492	1.508892
H	-3.739779	-2.191498	0.032768
H	-1.939107	-0.645880	-1.127684
S	-1.378030	2.387298	2.539665
C	-0.447647	3.577104	3.516353
H	-0.283981	4.471554	2.912180
H	-1.037509	3.819277	4.402551
H	0.512617	3.132990	3.785152
O	-1.656360	1.231350	3.446161
O	-0.446803	1.966358	1.407827
O	-2.575073	3.076984	2.010216
Mn	1.280140	0.574221	1.163420
C	6.483499	-1.230398	-0.739594
C	5.812343	-1.838864	-1.756128
C	4.510291	-0.258147	-0.929913
N	5.655236	-0.239783	-0.240148
H	7.464197	-1.412648	-0.329349
H	6.096646	-2.653423	-2.403031
H	3.651640	0.382971	-0.777260
N	4.583619	-1.210325	-1.865968
C	5.912109	0.589934	0.941693
H	6.066778	-0.063116	1.803037
H	6.796752	1.208295	0.768868
H	5.038220	1.215705	1.139015
C	3.462249	-1.615063	-2.739470
H	2.726775	-0.808079	-2.688288
H	3.848054	-1.674010	-3.763070
C	2.836694	-2.940538	-2.290866
H	3.579464	-3.747502	-2.369536
H	2.565621	-2.852173	-1.232450
C	1.599633	-3.289162	-3.129542
H	0.853096	-2.493206	-3.010319
H	1.868866	-3.304967	-4.196019
C	0.984158	-4.638079	-2.739913
H	0.659994	-4.652251	-1.692712
H	0.109628	-4.860417	-3.361573
H	1.702974	-5.455953	-2.876572
C1	2.784344	2.296215	1.994074
C1	2.733750	-1.426467	1.315833
C1	1.335594	1.062417	-1.259484

IM2

C	2. 552673	4. 808761	-2. 416828
C	1. 235276	5. 151844	-2. 469802
C	1. 505743	3. 731403	-0. 794074
N	2. 700168	3. 925185	-1. 361774
H	3. 388825	5. 114750	-3. 025491
H	0. 701938	5. 814816	-3. 132703
H	1. 282375	3. 070084	0. 040422
N	0. 599930	4. 476380	-1. 443144
C	3. 936800	3. 236868	-0. 974663
H	4. 193558	2. 508282	-1. 746519
H	4. 734441	3. 975425	-0. 864233
H	3. 776726	2. 707864	-0. 031536
C	-0. 845492	4. 468038	-1. 141467
H	-0. 945333	4. 377074	-0. 055317
H	-1. 242286	5. 441579	-1. 443292
C	-1. 551958	3. 306519	-1. 859086
H	-0. 919875	2. 416757	-1. 785296
H	-1. 686789	3. 528071	-2. 923532
C	-2. 900417	3. 015014	-1. 195534
H	-2. 762348	2. 718741	-0. 152852
H	-3. 584152	3. 869959	-1. 223425
S	-3. 816029	1. 676090	-2. 024716
O	-4. 674688	1. 039201	-1. 009037
O	-4. 398316	2. 183014	-3. 258962
O	-2. 654981	0. 649458	-2. 447104
C	-1. 618899	-2. 438469	1. 565845
C	-1. 752657	-1. 005017	2. 098367
C	-2. 214256	-0. 048509	1. 009229
C	-3. 855937	-2. 494918	0. 247523
C	-2. 957952	-3. 152491	1. 299570
H	-2. 885073	0. 774884	1. 293541
H	-2. 430620	-0. 971581	2. 956413
H	-1. 053781	-2. 403062	0. 626268
H	-3. 287623	-2. 360935	-0. 683272
H	-3. 520900	-3. 204722	2. 244176
O	-4. 244793	-1. 214205	0. 787196
O	-1. 700791	-0. 103427	-0. 106332
O	-0. 454339	-0. 530407	2. 515906
H	-0. 622653	0. 283217	3. 063433
O	-0. 947904	-3. 263584	2. 504320
H	0. 009422	-3. 075839	2. 403572
O	-2. 655768	-4. 461002	0. 832864
H	-1. 930578	-4. 754462	1. 415833

C	-5.125961	-3.303274	-0.034980
H	-5.658468	-2.835179	-0.881496
H	-4.860151	-4.324349	-0.317656
O	-5.954394	-3.382468	1.111324
H	-6.014223	-2.473317	1.451597
H	-4.543715	-0.626940	0.061750
H	-2.222252	0.314572	-1.602822
S	-0.295938	2.805688	2.568760
C	1.046808	3.547566	3.508177
H	1.545193	4.286326	2.877363
H	0.617362	4.028430	4.389231
H	1.752500	2.762762	3.786790
O	-0.994393	1.873251	3.503128
O	0.379066	2.032977	1.439612
O	-1.129120	3.903918	2.029945
Mn	1.333782	0.042824	1.189334
C	5.412724	-3.709584	-0.734433
C	4.535545	-4.016880	-1.729338
C	3.973023	-2.044396	-0.910751
N	5.048446	-2.468825	-0.239325
H	6.252422	-4.256950	-0.336242
H	4.463745	-4.884767	-2.365276
H	3.438198	-1.116655	-0.756159
N	3.648541	-2.958548	-1.831116
C	5.639735	-1.792285	0.919676
H	5.558375	-2.447438	1.789504
H	6.688797	-1.563812	0.713900
H	5.079937	-0.876661	1.125827
C	2.439242	-2.903120	-2.679318
H	2.075093	-1.873663	-2.626931
H	2.750764	-3.113786	-3.708297
C	1.361087	-3.882024	-2.201428
H	1.745573	-4.910892	-2.253417
H	1.146025	-3.670065	-1.147795
C	0.081456	-3.765854	-3.040735
H	-0.303786	-2.740372	-2.964829
H	0.320438	-3.928780	-4.102154
C	-1.002038	-4.757648	-2.601866
H	-1.311223	-4.591869	-1.563366
H	-1.893236	-4.663949	-3.232544
H	-0.646879	-5.792728	-2.684006
C1	3.443705	1.003660	1.966044
C1	1.880547	-2.361644	1.324747
C1	1.578551	0.437263	-1.252387

IM3

C	-4. 932567	2. 821662	0. 424543
C	-5. 811947	1. 858185	0. 040058
C	-4. 408754	0. 960007	1. 489608
N	-4. 072200	2. 242974	1. 336648
H	-4. 818898	3. 843733	0. 104004
H	-6. 628798	1. 886520	-0. 663086
H	-3. 845551	0. 253045	2. 088594
N	-5. 474864	0. 701364	0. 720992
C	-2. 909988	2. 892524	1. 958419
H	-2. 228440	3. 207720	1. 168201
H	-2. 394768	2. 167131	2. 588077
H	-3. 248359	3. 744880	2. 552574
C	-6. 110848	-0. 613112	0. 521303
H	-7. 110160	-0. 402486	0. 132424
H	-6. 235666	-1. 076290	1. 505130
C	-5. 350086	-1. 536287	-0. 446264
H	-6. 065670	-2. 264117	-0. 843359
H	-4. 963285	-0. 949240	-1. 283782
C	-4. 205219	-2. 290490	0. 230979
H	-4. 562469	-2. 912472	1. 059761
H	-3. 412455	-1. 639179	0. 612556
S	-3. 393521	-3. 467739	-0. 881911
O	-2. 641559	-2. 503891	-1. 944607
O	-4. 403506	-4. 190718	-1. 644575
O	-2. 390754	-4. 191175	-0. 092055
C	2. 392983	-3. 467460	0. 921757
C	0. 166556	-2. 729524	-0. 099188
C	1. 004398	-2. 815294	1. 151023
C	4. 496002	-3. 616240	-0. 546477
C	3. 341312	-2. 722026	-0. 050366
H	2. 227573	-4. 482203	0. 549767
H	5. 247947	-2. 925001	-0. 954091
H	2. 789043	-2. 369110	-0. 931511
O	5. 092916	-4. 404068	0. 488415
O	1. 132325	-1. 550415	1. 786509
O	-0. 385816	-1. 698308	-0. 466088
H	-1. 875124	-2. 057400	-1. 499435
O	3. 047731	-3. 574536	2. 182838
H	3. 349120	-2. 658241	2. 356262
O	3. 896962	-1. 603501	0. 641912
H	3. 365630	-0. 822670	0. 372389
C	4. 092324	-4. 608044	-1. 651299
H	5. 009258	-4. 974980	-2. 138606

H	3.477330	-4.123723	-2.417644
O	3.341367	-5.692979	-1.123881
H	3.868475	-5.975936	-0.353057
H	4.643890	-4.186008	1.328570
H	0.432025	-1.482704	2.472603
S	-2.028472	1.621018	-1.528090
C	-1.165892	1.122532	-3.030646
H	-0.643770	0.183573	-2.840545
H	-0.441589	1.894779	-3.294670
H	-1.907294	1.003460	-3.823260
O	-2.591823	2.973409	-1.765566
O	-3.009198	0.550586	-1.228099
O	-0.937657	1.707614	-0.461561
Mn	0.153355	0.388309	0.774595
C	2.257089	5.982217	-0.733470
C	3.386116	5.412779	-0.228795
C	1.844674	3.837245	-0.373888
N	1.304532	4.979910	-0.818516
H	2.044978	6.997227	-1.030151
H	4.350159	5.838070	0.001220
H	1.348365	2.880803	-0.312489
N	3.109166	4.075484	-0.010714
C	-0.070419	5.138596	-1.301133
H	-0.058923	5.410804	-2.359706
H	-0.562741	5.926989	-0.726337
H	-0.617221	4.203817	-1.174138
C	4.047822	3.069434	0.533263
H	3.432289	2.253018	0.913569
H	4.549301	3.539290	1.385349
C	5.051106	2.587688	-0.517504
H	5.636757	3.441078	-0.890551
H	4.495251	2.172883	-1.366102
C	5.995260	1.517885	0.049406
H	5.409516	0.644010	0.359344
H	6.490282	1.903023	0.952538
C	7.054266	1.078335	-0.966607
H	6.586046	0.662122	-1.866333
H	7.706241	0.306498	-0.543959
H	7.687374	1.919180	-1.277316
H	0.459578	-3.511304	1.808242
Cl	-1.636744	-0.597841	2.402076
Cl	0.976102	2.076034	2.286101
Cl	2.051342	0.414421	-0.905462
H	0.031381	-3.663129	-0.665231

TS₃₋₄

C	5. 148827	-2. 857817	-0. 229472
C	5. 910007	-1. 783579	-0. 572123
C	4. 643997	-1. 202371	1. 141264
N	4. 375582	-2. 476811	0. 848477
H	5. 052656	-3. 831812	-0. 679183
H	6. 635922	-1. 652407	-1. 358564
H	4. 114284	-0. 625142	1. 888857
N	5. 586891	-0. 757907	0. 299854
C	3. 373011	-3. 308536	1. 525202
H	2. 740979	-3. 758682	0. 759322
H	2. 766451	-2. 666611	2. 165565
H	3. 877319	-4. 076804	2. 117566
C	6. 148954	0. 605579	0. 261013
H	7. 120637	0. 515012	-0. 231643
H	6. 333613	0. 913937	1. 294643
C	5. 274168	1. 632000	-0. 469740
H	5. 891718	2. 524284	-0. 626014
H	4. 989785	1. 249010	-1. 455002
C	4. 023923	2. 023719	0. 316482
H	4. 265913	2. 341015	1. 336189
H	3. 289956	1. 215894	0. 367717
S	3. 180462	3. 444854	-0. 431186
O	2. 708969	2. 976050	-1. 787745
O	4. 123138	4. 565106	-0. 476822
O	2. 008448	3. 691833	0. 526418
C	-1. 649095	3. 597638	0. 540642
C	-0. 024585	2. 423749	-1. 039064
C	-0. 481738	2. 646936	0. 262153
C	-4. 112632	4. 132732	0. 010039
C	-3. 023381	3. 037924	0. 078726
H	-1. 463855	4. 544038	0. 027914
H	-5. 070917	3. 607887	0. 143100
H	-2. 917478	2. 593654	-0. 918870
O	-3. 975535	5. 156406	0. 998044
O	-0. 338329	1. 601913	1. 181075
O	0. 769319	1. 436852	-1. 316292
H	1. 590634	1. 824881	-1. 789270
O	-1. 717291	3. 863991	1. 936479
H	-2. 116001	3. 049970	2. 307996
O	-3. 435981	2. 035764	1. 006873
H	-3. 062757	1. 186675	0. 684440
C	-4. 136963	4. 867903	-1. 335374
H	-5. 052493	5. 477589	-1. 383089

H	-4.158329	4.160263	-2.170972
O	-2.982392	5.681522	-1.501734
H	-2.962862	6.225003	-0.693115
H	-3.325754	4.856559	1.663160
H	0.442269	1.734552	1.764276
S	1.769010	-2.015470	-1.506186
C	0.831345	-1.644582	-3.000907
H	0.257532	-0.732628	-2.830430
H	0.157680	-2.477639	-3.210350
H	1.540342	-1.517640	-3.821746
O	2.379114	-3.356849	-1.691883
O	2.714367	-0.893480	-1.305041
O	0.708146	-2.093048	-0.402601
Mn	-0.168496	-0.741178	0.952396
C	-2.991931	-5.824060	-0.313603
C	-4.081296	-5.113395	0.090418
C	-2.432832	-3.684980	-0.249581
N	-1.971058	-4.911154	-0.523375
H	-2.849279	-6.883167	-0.458791
H	-5.071980	-5.435862	0.369343
H	-1.876881	-2.762151	-0.319775
N	-3.713124	-3.781019	0.123127
C	-0.598106	-5.221437	-0.934254
H	-0.584886	-5.538596	-1.980381
H	-0.212770	-6.024802	-0.302340
H	0.020739	-4.332352	-0.806175
C	-4.550302	-2.642607	0.560319
H	-3.869545	-1.933444	1.035604
H	-5.221797	-3.033193	1.331020
C	-5.326705	-1.998359	-0.589758
H	-6.004623	-2.736740	-1.042236
H	-4.614185	-1.685140	-1.361384
C	-6.122965	-0.777215	-0.108311
H	-5.427544	-0.033560	0.301362
H	-6.788954	-1.071526	0.715633
C	-6.949197	-0.138325	-1.228860
H	-6.305393	0.197427	-2.050369
H	-7.502120	0.732774	-0.860963
H	-7.678160	-0.845759	-1.643765
H	0.671895	3.298048	0.284351
Cl	1.755686	-0.087368	2.409142
Cl	-1.431176	-2.151187	2.399654
Cl	-2.050710	-0.269191	-0.718873
H	-0.134351	3.232419	-1.766295

IM4

C	6. 041177	1. 931217	-0. 842425
C	6. 396222	0. 685751	-1. 258622
C	4. 222624	0. 921713	-1. 578950
N	4. 687042	2. 060975	-1. 059444
H	6. 621802	2. 717324	-0. 387807
H	7. 350850	0. 184554	-1. 258032
H	3. 180720	0. 745126	-1. 830816
N	5. 248015	0. 066275	-1. 718133
C	3. 859401	3. 201789	-0. 642494
H	3. 715664	3. 157170	0. 437675
H	2. 886461	3. 139413	-1. 128168
H	4. 363647	4. 125686	-0. 932443
C	5. 198400	-1. 299754	-2. 275245
H	6. 242731	-1. 593762	-2. 401823
H	4. 754677	-1. 240567	-3. 274425
C	4. 472206	-2. 339636	-1. 407567
H	4. 857800	-3. 317921	-1. 717105
H	4. 720576	-2. 197695	-0. 351241
C	2. 950875	-2. 343195	-1. 591185
H	2. 667225	-2. 299700	-2. 647457
H	2. 446312	-1. 539073	-1. 051679
S	2. 243936	-3. 903337	-0. 986178
O	2. 284128	-3. 927283	0. 476056
O	2. 818444	-4. 987771	-1. 774201
O	0. 699847	-3. 744094	-1. 465480
C	-2. 594107	-2. 712149	0. 391799
C	-0. 276558	-1. 916543	0. 979047
C	-1. 342153	-1. 898130	0. 159372
C	-4. 941039	-2. 683579	1. 524251
C	-3. 604219	-1. 950012	1. 297541
H	-2. 353835	-3. 658255	0. 884402
H	-5. 574231	-1. 973532	2. 073370
H	-3. 121847	-1. 851461	2. 282024
O	-5. 619538	-3. 014488	0. 309259
O	-1. 481684	-1. 053153	-0. 908539
O	0. 713100	-0. 971872	0. 847695
H	1. 586950	-1. 256289	1. 232168
O	-3. 178843	-3. 048241	-0. 880066
H	-2. 914293	-2. 336270	-1. 489921
O	-3. 899676	-0. 660172	0. 776584
H	-3. 166965	-0. 071162	1. 049757
C	-4. 822154	-3. 965814	2. 363612
H	-5. 832272	-4. 247659	2. 700701

H	-4.205497	-3.802633	3.254935
O	-4.225152	-5.026864	1.632638
H	-4.712305	-5.043678	0.789375
H	-4.936448	-3.025454	-0.391692
H	-0.651505	-0.556815	-1.105977
S	3.555429	0.289016	2.132466
C	3.584024	0.243522	3.930228
H	2.608082	-0.088874	4.288482
H	3.801048	1.248718	4.295824
H	4.363623	-0.454922	4.240483
O	4.870276	0.777003	1.674575
O	3.215620	-1.095606	1.673847
O	2.436190	1.266281	1.806096
Mn	0.614305	1.486206	0.822646
C	-3.674340	5.427504	-1.016921
C	-4.003935	4.379780	-1.822714
C	-2.819247	3.591005	-0.131698
N	-2.937303	4.914577	0.034143
H	-3.886477	6.481428	-1.102897
H	-4.558724	4.345358	-2.746693
H	-2.304571	2.911202	0.543705
N	-3.462802	3.241662	-1.251534
C	-2.361346	5.672329	1.151930
H	-3.034648	5.635165	2.012140
H	-2.227501	6.706598	0.831271
H	-1.388830	5.236251	1.395403
C	-3.592129	1.867348	-1.785370
H	-2.861045	1.244563	-1.265999
H	-3.300772	1.913278	-2.839671
C	-5.007838	1.305694	-1.618869
H	-5.741796	2.027839	-2.005032
H	-5.211318	1.160221	-0.552526
C	-5.165627	-0.032057	-2.352987
H	-4.404967	-0.724279	-1.976882
H	-4.969940	0.115574	-3.425177
C	-6.549559	-0.656620	-2.151206
H	-6.686811	-0.963403	-1.109738
H	-6.666707	-1.550894	-2.773471
H	-7.349913	0.043662	-2.422910
H	0.177077	-3.343702	-0.723835
Cl	0.775745	1.014707	-1.636401
Cl	0.646153	3.904497	0.662381
Cl	-1.531036	1.234128	1.948811
H	-0.204592	-2.609080	1.811375

IM5

C	5. 492778	3. 762157	-0. 058469
C	4. 242671	3. 924957	-0. 576891
C	4. 336435	1. 920879	0. 348677
N	5. 531482	2. 501309	0. 513179
H	6. 348723	4. 418503	-0. 053997
H	3. 801403	4. 749361	-1. 114678
H	4. 086466	0. 914204	0. 649912
N	3. 538950	2. 763210	-0. 312868
C	6. 675646	1. 866642	1. 176950
H	6. 463986	0. 799277	1. 261119
H	7. 568845	2. 020113	0. 567395
H	6. 823068	2. 308424	2. 166002
C	2. 144022	2. 462076	-0. 690251
H	2. 033846	2. 663910	-1. 756308
H	2. 007943	1. 392712	-0. 526789
C	1. 158243	3. 262195	0. 169602
H	1. 204604	4. 333539	-0. 058172
H	1. 436038	3. 123714	1. 220224
C	-0. 278922	2. 756924	0. 047464
H	-0. 321175	1. 672245	0. 176744
H	-0. 909953	3. 219064	0. 813213
S	-1. 133653	3. 161535	-1. 493656
O	-2. 448232	2. 511690	-1. 442515
O	-1. 007782	4. 592324	-1. 747127
O	-0. 236744	2. 438026	-2. 640588
C	-1. 759152	-1. 510281	-2. 659848
C	-0. 480479	-0. 781959	-2. 329177
C	0. 451460	-0. 492850	-3. 260042
C	-4. 261684	-1. 722952	-2. 303409
C	-2. 971615	-1. 030189	-1. 833605
H	0. 209165	-0. 601831	-4. 313655
H	-1. 978390	-1. 352861	-3. 724432
H	-4. 078194	-2. 803713	-2. 343333
H	-3. 095736	0. 053317	-1. 906903
O	-4. 521456	-1. 198983	-3. 620861
O	1. 715814	-0. 064004	-3. 036745
O	-0. 154601	-0. 648373	-0. 979400
H	-1. 000425	-0. 724775	-0. 473262
O	-1. 662427	-2. 904354	-2. 363326
H	-0. 717008	-3. 177049	-2. 301607
O	-2. 717819	-1. 309540	-0. 441859
H	-2. 404872	-2. 241222	-0. 390553
C	-5. 479537	-1. 436127	-1. 425314

H	-6.317538	-2.067413	-1.769754
H	-5.272511	-1.694251	-0.383443
O	-5.833268	-0.063635	-1.468653
H	-5.737284	0.195224	-2.402766
H	-5.000426	-1.874512	-4.124202
H	2.091023	-0.453744	-2.215915
S	4.129652	-1.678827	0.043846
C	4.883819	-2.826379	-1.110920
H	4.072735	-3.337101	-1.634858
H	5.507964	-2.257060	-1.802851
H	5.488294	-3.533994	-0.539976
O	5.220474	-0.977451	0.765355
O	3.245438	-2.515008	0.938309
O	3.272700	-0.737767	-0.763447
Mn	1.198420	-2.120681	0.370430
C	-1.963021	0.008730	5.304020
C	-3.014610	0.587987	4.660814
C	-2.025942	-0.796829	3.248035
N	-1.365142	-0.857700	4.409343
H	-1.593114	0.132992	6.309541
H	-3.743213	1.305415	5.002440
H	-1.774612	-1.394484	2.376089
N	-3.039853	0.069384	3.376618
C	-0.154481	-1.655737	4.648322
H	0.723771	-1.043166	4.436163
H	-0.167529	-1.998434	5.685015
H	-0.162077	-2.503657	3.961984
C	-4.048931	0.380605	2.340822
H	-3.826297	-0.254576	1.479782
H	-5.023018	0.084142	2.745889
C	-4.055625	1.859235	1.939581
H	-4.043667	2.491458	2.839132
H	-3.140120	2.079586	1.378844
C	-5.284393	2.204493	1.086180
H	-5.331579	1.535067	0.219389
H	-6.192599	2.014897	1.677521
C	-5.273988	3.659848	0.608652
H	-4.418910	3.845323	-0.049724
H	-6.184172	3.889114	0.043763
H	-5.219692	4.362165	1.450954
H	-0.457330	1.472792	-2.714264
C1	1.035995	-0.035047	1.837034
C1	-0.721538	-3.248786	1.394299
C1	1.374724	-3.493013	-1.667079

TS₅₋₆

C	-2. 731453	5. 100558	1. 172403
C	-1. 509023	5. 261579	0. 592381
C	-1. 689090	3. 150789	1. 220888
N	-2. 822664	3. 775878	1. 564269
H	-3. 534272	5. 802518	1. 338850
H	-1. 043596	6. 129795	0. 155386
H	-1. 468194	2. 106514	1. 419219
N	-0. 874107	4. 032419	0. 635694
C	-3. 958429	3. 140929	2. 238846
H	-3. 769593	2. 067508	2. 327615
H	-4. 083734	3. 580663	3. 232383
H	-4. 863183	3. 305170	1. 648272
C	0. 473779	3. 688490	0. 136171
H	1. 205487	4. 201858	0. 764152
H	0. 582304	2. 619471	0. 308490
C	0. 667274	4. 025738	-1. 358006
H	1. 175291	4. 988153	-1. 476226
H	-0. 316630	4. 101218	-1. 833601
C	1. 414382	2. 931740	-2. 131576
H	0. 857254	1. 994049	-2. 063271
H	1. 510334	3. 200947	-3. 187064
S	3. 109037	2. 598117	-1. 578234
O	3. 482798	1. 314230	-2. 288258
O	3. 949924	3. 753080	-1. 895023
O	2. 990758	2. 367563	-0. 061413
C	4. 107875	-1. 479075	-0. 063401
C	2. 797020	-0. 726270	-0. 148756
C	2. 220385	0. 014592	0. 884048
C	6. 468570	-1. 614287	0. 859772
C	5. 240598	-0. 710548	0. 639690
H	2. 534489	-0. 157915	1. 911134
H	3. 884457	-2. 389431	0. 512447
H	6. 842960	-1. 931265	-0. 120548
H	4. 899674	-0. 369339	1. 623941
O	6. 028209	-2. 749107	1. 631625
O	0. 881273	0. 362937	0. 689960
O	2. 207794	-0. 655920	-1. 335748
H	2. 718470	0. 061288	-1. 905714
O	4. 588340	-1. 792685	-1. 359125
H	3. 830842	-2. 094192	-1. 894111
O	5. 599508	0. 441340	-0. 098324
H	5. 520287	0. 221004	-1. 043752
C	7. 566825	-0. 891471	1. 646230

H	8.486158	-1.503614	1.623942
H	7.785004	0.075670	1.187848
O	7.147681	-0.650103	2.979138
H	6.763846	-1.493450	3.276208
H	6.571899	-3.512243	1.387368
H	0.326026	0.287483	1.516790
S	-2.164756	-0.697258	2.091182
C	-1.836246	-2.077541	3.195264
H	-0.869613	-2.499200	2.915470
H	-1.834166	-1.708698	4.223394
H	-2.627763	-2.816451	3.058201
O	-3.524507	-0.185437	2.389084
O	-2.027887	-1.258650	0.703765
O	-1.089462	0.319990	2.404735
Mn	-0.348401	-1.029148	-0.772271
C	-4.080435	-4.163835	0.283187
C	-4.892826	-3.072090	0.186363
C	-3.371854	-2.934389	-1.402859
N	-3.138472	-4.059703	-0.721474
H	-4.091572	-4.994367	0.971130
H	-5.734481	-2.771055	0.786236
H	-2.741016	-2.566280	-2.208459
N	-4.434360	-2.317544	-0.875392
C	-1.978179	-4.938670	-0.927706
H	-1.245577	-4.758562	-0.137954
H	-2.315385	-5.977637	-0.933053
H	-1.514364	-4.675588	-1.880411
C	-4.902448	-0.987471	-1.332139
H	-4.005968	-0.371122	-1.466311
H	-5.383408	-1.123330	-2.306092
C	-5.857477	-0.318565	-0.345411
H	-6.766820	-0.924646	-0.223308
H	-5.368003	-0.241303	0.632104
C	-6.252086	1.080441	-0.840920
H	-5.345385	1.692100	-0.931284
H	-6.677945	1.008977	-1.853223
C	-7.261639	1.766776	0.083275
H	-6.868584	1.858226	1.104541
H	-7.508824	2.772075	-0.276220
H	-8.197842	1.198782	0.144127
H	2.840532	1.111127	0.414590
C1	-1.565604	1.066227	-1.403443
C1	-0.551405	-2.181928	-2.888232
C1	0.742936	-2.874283	0.557846

IM6

C	0. 220820	5. 677869	-2. 129227
C	-0. 728736	5. 255848	-1. 247283
C	1. 154280	4. 216425	-0. 762000
N	1. 391719	5. 013804	-1. 810176
H	0. 165968	6. 379977	-2. 946141
H	-1. 772349	5. 511210	-1. 163806
H	1. 880957	3. 534753	-0. 343472
N	-0. 121969	4. 349659	-0. 395102
C	2. 677628	5. 104608	-2. 506966
H	3. 243831	4. 198310	-2. 281886
H	2. 490676	5. 162139	-3. 581131
H	3. 222918	5. 994265	-2. 179949
C	-0. 775879	3. 493865	0. 621487
H	-1. 258746	2. 667859	0. 097595
H	0. 016674	3. 062369	1. 235595
C	-1. 779764	4. 265543	1. 480797
H	-2. 594018	4. 661281	0. 863565
H	-1. 279716	5. 121517	1. 952322
C	-2. 368833	3. 401120	2. 602603
H	-1. 584693	2. 878102	3. 156075
H	-2. 952782	4. 010140	3. 296480
S	-3. 557483	2. 127593	1. 999712
O	-3. 002627	0. 779499	2. 673894
O	-4. 862262	2. 382499	2. 597413
O	-3. 435041	2. 062918	0. 535844
C	-3. 535443	-2. 547432	-0. 408147
C	-2. 370197	-1. 609006	-0. 129722
C	-2. 062053	-0. 459343	-1. 059313
C	-5. 960859	-2. 794097	-1. 130922
C	-4. 851966	-1. 813964	-0. 709020
H	-1. 912517	-0. 859742	-2. 070388
H	-3. 249872	-3. 146475	-1. 288056
H	-6. 155390	-3. 475689	-0. 292858
H	-4. 709623	-1. 099564	-1. 526280
O	-5. 475362	-3. 523342	-2. 276420
O	-0. 914429	0. 207448	-0. 572457
O	-1. 666596	-1. 833572	0. 850453
H	-2. 005266	0. 676461	2. 534562
O	-3. 755970	-3. 375003	0. 719783
H	-2. 942050	-3. 320693	1. 258652
O	-5. 256143	-1. 072397	0. 427147
H	-5. 071423	-1. 643739	1. 195152
C	-7. 243919	-2. 059701	-1. 534719

H	-8.062356	-2.794419	-1.639326
H	-7.524959	-1.340629	-0.761291
O	-7.046043	-1.341805	-2.741185
H	-6.575799	-1.964695	-3.323671
H	-5.898599	-4.394806	-2.280483
H	-0.369317	0.609533	-1.292645
S	2.316616	0.994382	-1.468897
C	2.934423	-0.050955	-2.794850
H	2.258072	-0.906708	-2.873161
H	2.944962	0.537870	-3.714218
H	3.946346	-0.378041	-2.545845
O	3.294912	2.107598	-1.285508
O	2.226320	0.114373	-0.247254
O	0.976326	1.486698	-1.931431
Mn	0.508074	-1.029307	0.737541
C	5.199697	-4.609342	0.308786
C	5.724966	-3.508515	0.912253
C	3.810521	-2.919728	-0.021418
N	4.007654	-4.217773	-0.278121
H	5.555989	-5.625650	0.252061
H	6.629679	-3.379325	1.484889
H	2.946635	-2.357041	-0.345853
N	4.847473	-2.461332	0.690438
C	3.039693	-5.093036	-0.946730
H	2.202020	-4.480174	-1.290507
H	3.523336	-5.593313	-1.789768
H	2.674120	-5.831801	-0.229461
C	4.960033	-1.098472	1.244667
H	3.943558	-0.713520	1.333496
H	5.365360	-1.205699	2.255355
C	5.829221	-0.175884	0.388217
H	6.836441	-0.602750	0.276155
H	5.395135	-0.110035	-0.616684
C	5.916306	1.232390	0.990716
H	4.899860	1.620018	1.125796
H	6.373752	1.175868	1.988701
C	6.708455	2.199306	0.106350
H	6.208007	2.327508	-0.859842
H	6.788729	3.186104	0.576380
H	7.727219	1.835701	-0.079034
H	-2.923464	0.221722	-1.053784
C1	0.040614	0.727300	2.512144
C1	1.688256	-2.589300	2.117686
C1	0.637339	-2.476937	-1.485694

IM7

C	2. 377413	4. 104059	2. 330988
C	2. 621983	4. 501266	1. 052050
C	0. 792392	3. 255911	1. 049501
N	1. 228438	3. 335330	2. 309730
H	2. 925208	4. 284325	3. 242251
H	3. 438740	5. 069069	0. 637731
H	-0. 101043	2. 725381	0. 735046
N	1. 621907	3. 958841	0. 264500
C	0. 608048	2. 663796	3. 461567
H	-0. 405128	2. 367791	3. 185426
H	1. 174619	1. 764691	3. 709018
H	0. 592425	3. 361179	4. 301920
C	1. 419630	4. 151034	-1. 183501
H	0. 592914	3. 492758	-1. 463144
H	1. 112696	5. 191634	-1. 335613
C	2. 642068	3. 856600	-2. 059862
H	3. 489318	4. 498299	-1. 795289
H	2. 341551	4. 154327	-3. 071734
C	3. 108845	2. 396322	-2. 141779
H	2. 283795	1. 678271	-2. 066093
H	3. 626359	2. 225623	-3. 090220
S	4. 366004	1. 926135	-0. 912082
O	3. 529158	1. 549226	0. 399623
O	5. 026441	0. 716603	-1. 429935
O	5. 168929	3. 099719	-0. 573805
C	3. 327721	-2. 024415	1. 453961
C	2. 309241	-1. 705242	0. 362707
C	1. 327487	-2. 783359	-0. 037809
C	5. 388398	-2. 387874	-0. 039072
C	4. 469258	-2. 980820	1. 028864
H	1. 829287	-3. 388173	-0. 810446
H	3. 776124	-1. 071141	1. 771899
H	5. 831945	-1. 461788	0. 348834
H	4. 024323	-3. 905966	0. 630916
O	4. 586701	-2. 124844	-1. 198689
O	0. 148264	-2. 189120	-0. 552022
O	2. 240277	-0. 597779	-0. 166209
O	2. 696370	-2. 683148	2. 542494
H	1. 932405	-2. 130761	2. 819824
O	5. 254929	-3. 253304	2. 174334
H	4. 620475	-3. 465462	2. 881450
C	6. 501624	-3. 356986	-0. 452316
H	7. 233983	-2. 807243	-1. 066567

H	7.012964	-3.751545	0.429149
O	5.963717	-4.459991	-1.163621
H	5.389877	-4.058040	-1.839423
H	4.698038	-1.186334	-1.439444
S	-2.998182	-2.537813	-1.222953
C	-2.636752	-2.115639	-2.940317
H	-3.321211	-1.328153	-3.260595
H	-1.605082	-1.763973	-3.004618
H	-2.781742	-3.012540	-3.546087
O	-2.059876	-3.645039	-0.874533
O	-4.435534	-2.855919	-1.140822
O	-2.654274	-1.270898	-0.442521
Mn	-0.905655	-0.309712	0.249400
H	3.061764	0.647794	0.253857
Cl	0.217226	-0.724639	2.416028
Cl	-2.223975	1.603509	1.351063
H	1.123218	-3.423632	0.824757
Cl	-0.424640	1.132020	-1.717490
C	-5.738950	0.592619	-2.770457
C	-6.240151	-0.141695	-1.738107
C	-4.527342	1.020434	-0.969299
N	-4.664195	1.311468	-2.269354
H	-6.036714	0.657883	-3.804999
H	-7.039136	-0.864389	-1.709014
H	-3.753778	1.396451	-0.299893
N	-5.476775	0.148602	-0.623936
C	-3.789120	2.219303	-3.016776
H	-2.774755	2.141680	-2.614602
H	-3.781190	1.909542	-4.063286
H	-4.158224	3.246208	-2.942956
C	-5.595029	-0.479659	0.708744
H	-5.520315	-1.557599	0.544311
H	-4.711359	-0.167512	1.269822
C	-6.885459	-0.078787	1.426125
H	-6.918967	1.013743	1.534277
H	-7.757375	-0.363518	0.819863
C	-6.986198	-0.741460	2.807320
H	-6.937063	-1.832375	2.689994
H	-6.111547	-0.457761	3.407389
C	-8.268375	-0.360882	3.553649
H	-8.311352	-0.845922	4.534723
H	-8.328031	0.722397	3.714335
H	-9.160900	-0.664081	2.992590
H	-0.554114	-2.887541	-0.651034

TS₇₋₈

C	2. 596339	4. 137640	2. 111155
C	2. 858187	4. 480325	0. 820266
C	0. 964215	3. 339685	0. 856093
N	1. 407787	3. 431455	2. 113906
H	3. 156226	4. 314468	3. 015676
H	3. 701463	4. 993508	0. 387596
H	0. 039318	2. 850823	0. 560843
N	1. 826998	3. 973445	0. 051468
C	0. 751404	2. 837984	3. 288018
H	-0. 234803	2. 477438	2. 991435
H	1. 339028	1. 991287	3. 646777
H	0. 664337	3. 601821	4. 064354
C	1. 653182	4. 112397	-1. 405961
H	0. 786392	3. 499674	-1. 668338
H	1. 416632	5. 163441	-1. 605430
C	2. 866589	3. 694555	-2. 245215
H	3. 769921	4. 238423	-1. 945300
H	2. 637200	4. 033368	-3. 263071
C	3. 167047	2. 191667	-2. 318971
H	2. 256275	1. 583770	-2. 281260
H	3. 694508	1. 968597	-3. 250585
S	4. 297093	1. 567385	-1. 040673
O	3. 519787	1. 481573	0. 255679
O	4. 631454	0. 174053	-1. 542194
O	5. 443738	2. 481616	-0. 978120
C	3. 354026	-1. 776270	1. 679601
C	2. 406658	-1. 664887	0. 470007
C	1. 381378	-2. 785473	0. 328597
C	4. 802448	-2. 556460	-0. 107003
C	4. 368938	-2. 862154	1. 323582
H	1. 842468	-3. 635505	-0. 187499
H	3. 883347	-0. 813536	1. 771030
H	5. 585590	-1. 792459	-0. 093745
H	3. 862192	-3. 837391	1. 363551
O	3. 608325	-1. 963453	-0. 732869
O	0. 249343	-2. 304521	-0. 369642
O	1. 892315	-0. 488368	0. 158626
O	2. 717588	-2. 148280	2. 873254
H	1. 903942	-1. 600073	2. 993884
O	5. 511365	-2. 854721	2. 153889
H	5. 195611	-3. 023352	3. 057105
C	5. 232623	-3. 762094	-0. 934112
H	5. 631600	-3. 424132	-1. 900952

H	6.036368	-4.274212	-0.395286
O	4.183907	-4.702021	-1.105062
H	3.542283	-4.301287	-1.712820
H	3.905053	-1.027954	-1.123750
S	-2.934005	-2.643384	-0.877660
C	-2.650505	-2.535478	-2.657802
H	-3.326946	-1.788297	-3.076747
H	-1.612685	-2.243645	-2.830500
H	-2.855808	-3.516017	-3.092448
O	-2.003435	-3.705922	-0.390457
O	-4.371629	-2.903457	-0.680844
O	-2.524083	-1.274256	-0.347913
Mn	-0.754651	-0.294575	0.292789
H	2.527672	0.294209	0.317104
Cl	-0.043754	-0.685679	2.639965
Cl	-2.051045	1.796425	1.149004
H	1.116585	-3.097766	1.344315
Cl	-0.303022	0.982321	-1.818033
C	-5.542789	0.368242	-2.896362
C	-6.050004	-0.150586	-1.743046
C	-4.244808	1.009426	-1.223171
N	-4.410258	1.089475	-2.549928
H	-5.873744	0.282284	-3.919265
H	-6.890868	-0.802937	-1.572718
H	-3.432203	1.441744	-0.641572
N	-5.232687	0.271263	-0.712359
C	-3.513095	1.805882	-3.460715
H	-2.501013	1.779997	-3.045643
H	-3.516921	1.295037	-4.425453
H	-3.853094	2.837183	-3.592173
C	-5.341137	-0.120826	0.709695
H	-5.303655	-1.213112	0.728026
H	-4.437738	0.253539	1.196337
C	-6.603094	0.437707	1.369934
H	-6.602843	1.533186	1.289965
H	-7.497993	0.081473	0.839321
C	-6.686842	0.024372	2.845902
H	-6.668338	-1.071493	2.916446
H	-5.790355	0.380371	3.370042
C	-7.939782	0.564148	3.542182
H	-7.971733	0.253525	4.592103
H	-7.966715	1.660410	3.518092
H	-8.853812	0.198005	3.058400
H	-0.481036	-2.982392	-0.322603

IM8

C	2. 670190	3. 788382	2. 507449
C	2. 893956	4. 330621	1. 279047
C	1. 026050	3. 147310	1. 178067
N	1. 498466	3. 058388	2. 425516
H	3. 242405	3. 847139	3. 419768
H	3. 701589	4. 948465	0. 920701
H	0. 097172	2. 694210	0. 834554
N	1. 857735	3. 915861	0. 460718
C	0. 879248	2. 277738	3. 509747
H	-0. 132145	2. 001051	3. 206517
H	1. 453743	1. 365764	3. 680588
H	0. 857460	2. 892766	4. 412004
C	1. 641526	4. 274928	-0. 951788
H	0. 747466	3. 731860	-1. 269532
H	1. 436768	5. 350228	-0. 988053
C	2. 811035	3. 947943	-1. 889611
H	3. 742247	4. 420451	-1. 555326
H	2. 560558	4. 431426	-2. 841093
C	3. 042295	2. 457653	-2. 190555
H	2. 118905	1. 867852	-2. 124205
H	3. 468058	2. 334850	-3. 190043
S	4. 266556	1. 672462	-1. 118455
O	3. 695609	1. 437872	0. 229044
O	4. 447570	0. 262870	-1. 855435
O	5. 518024	2. 414894	-1. 211381
C	3. 187433	-2. 045844	1. 689163
C	2. 402152	-1. 802406	0. 371042
C	1. 326206	-2. 870620	0. 103482
C	4. 702308	-2. 435361	-0. 106816
C	4. 302724	-2. 991073	1. 255596
H	1. 780987	-3. 678471	-0. 481436
H	3. 650065	-1. 080348	1. 964678
H	5. 436515	-1. 632390	0. 040329
H	3. 885801	-4. 002416	1. 142448
O	3. 473339	-1. 861586	-0. 650464
O	0. 233858	-2. 291735	-0. 597669
O	1. 800387	-0. 554597	0. 272718
O	2. 479166	-2. 607043	2. 756767
H	1. 643799	-2. 096331	2. 892664
O	5. 429502	-2. 998806	2. 111488
H	5. 116049	-3. 320405	2. 972485
C	5. 243496	-3. 447903	-1. 109861
H	5. 599900	-2. 919605	-2. 007388

H	6.098692	-3.960843	-0.658220
O	4.290386	-4.443180	-1.442613
H	3.555419	-3.980226	-1.876532
H	3.923923	-0.481299	-1.402628
S	-2.914033	-2.425231	-1.308326
C	-2.498889	-2.069870	-3.029779
H	-3.110787	-1.234096	-3.373954
H	-1.440954	-1.805903	-3.085113
H	-2.709738	-2.962884	-3.621874
O	-2.065538	-3.592102	-0.924797
O	-4.371901	-2.640649	-1.245394
O	-2.492033	-1.167549	-0.557558
Mn	-0.695971	-0.386307	0.283229
H	2.454358	0.153061	0.461247
Cl	-0.275404	-1.113632	2.619418
Cl	-1.961696	1.688785	1.339676
H	0.995670	-3.276677	1.062994
Cl	-0.223890	1.194438	-1.682483
C	-5.530527	0.829886	-2.792534
C	-6.040665	0.157386	-1.723773
C	-4.200527	1.179894	-1.058476
N	-4.375601	1.462126	-2.355970
H	-5.870381	0.902863	-3.813471
H	-6.894502	-0.495211	-1.643641
H	-3.372565	1.504797	-0.430106
N	-5.203653	0.399776	-0.651646
C	-3.467591	2.284508	-3.158643
H	-2.457226	2.189253	-2.749817
H	-3.473799	1.911285	-4.184664
H	-3.793726	3.328723	-3.148636
C	-5.305282	-0.204948	0.693518
H	-5.297506	-1.287242	0.540962
H	-4.386416	0.065392	1.218539
C	-6.543519	0.275150	1.452645
H	-6.511836	1.368967	1.547387
H	-7.453620	0.032684	0.884917
C	-6.625658	-0.365114	2.845372
H	-6.640353	-1.458299	2.740671
H	-5.713568	-0.123465	3.406459
C	-7.854755	0.093257	3.635985
H	-7.885512	-0.378106	4.624269
H	-7.848844	1.179916	3.785129
H	-8.784299	-0.165992	3.114088
H	-0.506877	-2.953130	-0.665950

IM9

C	4. 843019	-3. 113219	1. 011611
C	4. 666407	-2. 537696	2. 232170
C	2. 794009	-2. 286670	1. 081619
N	3. 660721	-2. 950346	0. 313712
H	5. 696364	-3. 611079	0. 579530
H	5. 336146	-2. 443012	3. 071942
H	1. 781555	-1. 996211	0. 818822
N	3. 380454	-2. 030575	2. 260338
C	3. 412620	-3. 378392	-1. 067799
H	3. 687076	-4. 431329	-1. 166055
H	2. 352217	-3. 243740	-1. 295361
H	4. 014812	-2. 753882	-1. 730153
C	2. 750824	-1. 321042	3. 390243
H	1. 773093	-1. 780020	3. 554139
H	3. 380354	-1. 525458	4. 261372
C	2. 545707	0. 184676	3. 191095
H	2. 007578	0. 520861	4. 085303
H	1. 851701	0. 344908	2. 360756
C	3. 804833	1. 051068	3. 028667
H	3. 710261	1. 986026	3. 588195
H	4. 728752	0. 565776	3. 358068
S	4. 115954	1. 631096	1. 334628
O	2. 829138	2. 052373	0. 752994
O	5. 204785	2. 601626	1. 391221
O	4. 602913	0. 259447	0. 682981
C	-0. 774702	3. 959681	-0. 974795
C	0. 169360	2. 794559	-1. 354940
C	-0. 189516	2. 176366	-2. 687038
C	-2. 529003	3. 021717	0. 671342
C	-2. 259484	3. 539341	-0. 759236
H	-0. 256321	2. 868092	-3. 538614
H	-0. 376249	4. 397161	-0. 043106
H	-1. 680207	2. 392977	0. 964505
H	-2. 503309	2. 728161	-1. 457498
O	-3. 752120	2. 289082	0. 743110
O	-0. 397347	0. 980957	-2. 841587
O	0. 195926	1. 788674	-0. 348247
O	-0. 690915	4. 895761	-2. 032556
H	-1. 569853	5. 329361	-2. 026951
O	-3. 079859	4. 655352	-1. 124855
H	-3. 496989	5. 009901	-0. 310513
C	-2. 705037	4. 141437	1. 701521
H	-2. 708829	3. 711592	2. 712240

H	-1.902279	4.881928	1.644505
O	-3.933855	4.841141	1.457780
H	-4.586714	4.126897	1.325030
H	-3.660662	1.511782	0.148690
S	2.825788	0.156603	-2.265915
C	2.575663	-0.745978	-3.801117
H	3.350577	-0.436132	-4.504871
H	2.620688	-1.818153	-3.609441
H	1.585228	-0.482733	-4.176390
O	1.809275	-0.379557	-1.284309
O	2.676624	1.587891	-2.580019
O	4.210021	-0.234571	-1.791537
Mn	-0.392488	-0.432441	-1.038498
Cl	-0.237507	-2.761791	-1.958235
Cl	-0.322791	-1.100511	1.404507
C	-5.348082	-3.722382	-0.927407
C	-5.321261	-3.489516	0.413410
C	-3.287930	-3.139377	-0.378195
N	-4.066409	-3.507100	-1.402212
H	-6.154453	-4.018928	-1.579375
H	-6.100407	-3.546181	1.156573
H	-2.235245	-2.900847	-0.462507
N	-4.022721	-3.134736	0.739284
C	-3.650199	-3.515484	-2.808363
H	-4.081758	-2.647072	-3.311560
H	-2.561181	-3.444632	-2.844393
H	-3.992292	-4.440835	-3.277898
C	-3.554044	-2.669001	2.059440
H	-3.812635	-3.442021	2.791949
H	-2.466002	-2.587957	1.995685
C	-4.158635	-1.310753	2.426536
H	-3.914200	-0.599782	1.630110
H	-5.254653	-1.389650	2.471788
C	-3.618832	-0.788226	3.763169
H	-3.816224	-1.519846	4.561174
H	-2.529113	-0.690291	3.683555
C	-4.234603	0.565363	4.134189
H	-3.795994	0.961717	5.057135
H	-4.070987	1.294080	3.332345
H	-5.317493	0.480191	4.291035
Cl	-2.890143	-0.144184	-1.154813
H	1.170370	3.219463	-1.498595
H	4.438157	0.181424	-0.343849
H	1.113230	1.710663	-0.013477

IM10

C	4. 810535	-3. 068971	1. 278228
C	4. 711599	-2. 385723	2. 450708
C	2. 759419	-2. 257393	1. 423610
N	3. 577765	-2. 981755	0. 656579
H	5. 639875	-3. 593600	0. 831368
H	5. 440660	-2. 200431	3. 223210
H	1. 724077	-1. 998611	1. 207954
N	3. 422543	-1. 894971	2. 528701
C	3. 227420	-3. 563877	-0. 642164
H	3. 344434	-4. 649571	-0. 594428
H	2. 192628	-3. 310757	-0. 884935
H	3. 892834	-3. 144363	-1. 398966
C	2. 862799	-1. 082550	3. 626188
H	1. 928089	-1. 558937	3. 933485
H	3. 573876	-1. 167440	4. 453264
C	2. 585986	0. 385563	3. 284183
H	2. 108916	0. 798854	4. 181725
H	1. 827698	0. 441562	2. 496849
C	3. 801009	1. 255022	2. 926957
H	3. 688947	2. 259546	3. 343784
H	4. 748247	0. 849842	3. 297662
S	4. 029759	1. 554453	1. 143048
O	2. 701027	2. 028250	0. 653819
O	5. 129891	2. 518055	1. 024463
O	4. 370860	0. 167193	0. 603417
C	-0. 543407	3. 894812	-1. 046378
C	0. 295528	2. 646956	-1. 412344
C	-0. 115471	2. 049352	-2. 735846
C	-2. 365678	3. 123430	0. 611609
C	-2. 057430	3. 602751	-0. 824624
H	-0. 161917	2. 739979	-3. 589165
H	-0. 106708	4. 309559	-0. 121836
H	-1. 565872	2. 437358	0. 913267
H	-2. 369467	2. 807274	-1. 514430
O	-3. 639405	2. 483080	0. 690024
O	-0. 377768	0. 862524	-2. 880702
O	0. 239516	1. 644370	-0. 406459
O	-0. 383080	4. 805472	-2. 117687
H	-1. 218201	5. 318044	-2. 112196
O	-2. 781906	4. 779177	-1. 200909
H	-3. 177886	5. 167841	-0. 391590
C	-2. 458244	4. 264469	1. 628546
H	-2. 496932	3. 847424	2. 643745

H	-1.600974	4.940691	1.565746
O	-3.629195	5.054414	1.374195
H	-4.338031	4.393367	1.255475
H	-3.602319	1.688841	0.113701
S	2.832688	-0.104375	-2.373156
C	2.740466	-1.188478	-3.797017
H	3.559037	-0.936782	-4.473302
H	2.792130	-2.226236	-3.469009
H	1.772933	-0.999441	-4.265895
O	1.828625	-0.547471	-1.372634
O	2.763003	1.280188	-2.840628
O	4.262977	-0.471760	-1.809014
Mn	-0.479419	-0.472762	-1.026864
Cl	-0.351624	-2.781875	-1.958598
Cl	-0.385525	-1.127503	1.395885
C	-5.493675	-3.604347	-0.859297
C	-5.462003	-3.341772	0.475947
C	-3.420170	-3.061540	-0.320444
N	-4.206755	-3.431903	-1.337313
H	-6.306683	-3.895502	-1.505420
H	-6.242773	-3.361990	1.219316
H	-2.362762	-2.848577	-0.407145
N	-4.155559	-3.012451	0.795558
C	-3.791516	-3.482361	-2.742931
H	-4.200587	-2.614211	-3.264991
H	-2.701098	-3.440789	-2.782128
H	-4.158514	-4.408479	-3.191620
C	-3.677618	-2.526591	2.105510
H	-3.964362	-3.270922	2.856841
H	-2.587381	-2.483340	2.045107
C	-4.239113	-1.139606	2.432031
H	-3.978539	-0.462808	1.611175
H	-5.336705	-1.183669	2.485275
C	-3.674778	-0.591319	3.748213
H	-3.896161	-1.287098	4.571501
H	-2.582386	-0.537363	3.662523
C	-4.237705	0.796505	4.073864
H	-3.786495	1.203247	4.986119
H	-4.042296	1.493736	3.251262
H	-5.323573	0.758931	4.228765
Cl	-2.946730	-0.071220	-1.149105
H	1.331254	2.984000	-1.554414
H	4.343989	-0.113548	-0.802061
H	1.121231	1.615983	0.043585

TS₁₀₋₁₁

C	4. 731298	-2. 865767	1. 933679
C	4. 541509	-1. 966848	2. 937670
C	2. 618164	-2. 212476	1. 874221
N	3. 515583	-3. 009365	1. 288461
H	5. 611477	-3. 405444	1. 622355
H	5. 227090	-1. 573964	3. 671499
H	1. 574922	-2. 075534	1. 576944
N	3. 215066	-1. 579114	2. 891764
C	3. 242246	-3. 894711	0. 152845
H	3. 344282	-4. 935844	0. 469699
H	2. 230027	-3. 704150	-0. 203332
H	3. 949914	-3. 665881	-0. 645323
C	2. 555922	-0. 610097	3. 788635
H	1. 630790	-1. 075453	4. 138290
H	3. 222288	-0. 496246	4. 648886
C	2. 230439	0. 748297	3. 157927
H	1. 691391	1. 303850	3. 935105
H	1. 511774	0. 606529	2. 344024
C	3. 436768	1. 581600	2. 692346
H	3. 324972	2. 631395	2. 975437
H	4. 388223	1. 229817	3. 104979
S	3. 650190	1. 620313	0. 885135
O	2. 343130	2. 201979	0. 396931
O	4. 824653	2. 453790	0. 609253
O	3. 801057	0. 164117	0. 513330
C	0. 072776	3. 370944	-1. 961162
C	0. 077029	1. 864573	-2. 020932
C	-0. 338729	1. 097610	-3. 163650
C	-1. 245923	3. 570800	0. 292593
C	-1. 222944	3. 853128	-1. 244918
H	-0. 886635	1. 651592	-3. 934539
H	0. 948317	3. 712612	-1. 385678
H	-0. 385639	2. 951907	0. 578228
H	-2. 074175	3. 320457	-1. 692775
O	-2. 466378	2. 947065	0. 682279
O	-0. 411720	-0. 205343	-3. 106939
O	0. 478223	1. 165183	-0. 992437
O	0. 097878	3. 871675	-3. 280241
H	-0. 302460	4. 758883	-3. 216369
O	-1. 289838	5. 237872	-1. 578623
H	-1. 911611	5. 656845	-0. 945495
C	-1. 208313	4. 860302	1. 112256
H	-1. 135360	4. 610658	2. 178829

H	-0.359705	5.488943	0.834356
O	-2.398148	5.620427	0.858166
H	-3.115405	4.961674	0.926521
H	-2.581101	2.101303	0.189039
S	2.723793	-0.968934	-2.334777
C	2.821732	-2.089162	-3.725538
H	3.648363	-1.781709	-4.367578
H	2.953401	-3.108008	-3.359695
H	1.863493	-1.992382	-4.241386
O	1.702401	-1.480346	-1.395585
O	2.640252	0.405201	-2.825422
O	4.163616	-1.207932	-1.658303
Mn	-0.671572	-1.080133	-1.252372
Cl	-1.179971	-3.417064	-1.704684
Cl	-0.482361	-1.311478	1.283796
C	-6.168806	-2.457033	-0.167550
C	-5.940775	-2.140414	1.136591
C	-3.985011	-2.481372	0.166179
N	-4.935537	-2.675447	-0.754668
H	-7.087717	-2.547163	-0.724893
H	-6.623389	-1.904386	1.937190
H	-2.922464	-2.579816	-0.011322
N	-4.569731	-2.169198	1.328076
C	-4.685207	-2.898392	-2.183075
H	-4.779187	-1.945568	-2.709648
H	-3.666396	-3.273457	-2.302783
H	-5.409878	-3.623407	-2.560180
C	-3.853393	-1.751614	2.548916
H	-4.270705	-2.320494	3.387369
H	-2.807541	-2.034995	2.409413
C	-3.958575	-0.239960	2.770657
H	-3.607349	0.261134	1.862263
H	-5.010895	0.044329	2.916802
C	-3.121029	0.221062	3.969620
H	-3.449314	-0.300211	4.881602
H	-2.077559	-0.069684	3.794062
C	-3.204959	1.737427	4.175569
H	-2.574969	2.059210	5.013200
H	-2.877263	2.266495	3.273632
H	-4.233102	2.052500	4.394896
Cl	-2.879757	0.238705	-1.000400
H	0.808657	1.520574	-3.341520
H	4.181054	-0.584945	-0.845153
H	1.236505	1.571530	-0.423439

IM11

C	4. 700755	-2. 770392	1. 700516
C	5. 586153	-1. 783669	2. 001341
C	3. 561169	-1. 046289	2. 474464
N	3. 444186	-2. 294230	2. 013689
H	4. 840016	-3. 741706	1. 255391
H	6. 656368	-1. 733853	1. 883328
H	2. 731539	-0. 401152	2. 713673
N	4. 860085	-0. 714059	2. 490463
C	2. 193751	-3. 054918	1. 887856
H	2. 122181	-3. 761384	2. 720088
H	1. 345532	-2. 367032	1. 897730
H	2. 215093	-3. 580885	0. 934360
C	5. 475309	0. 534355	2. 983406
H	5. 589718	0. 427892	4. 068100
H	6. 477249	0. 560802	2. 547133
C	4. 739027	1. 846744	2. 683879
H	5. 194514	2. 585764	3. 356039
H	3. 686489	1. 778044	2. 976530
C	4. 826131	2. 400132	1. 258370
H	4. 410822	3. 411441	1. 238739
H	5. 857026	2. 445789	0. 892426
S	3. 867149	1. 453544	0. 029751
O	2. 569773	1. 198309	0. 766725
O	3. 705217	2. 338390	-1. 146371
O	4. 651627	0. 212430	-0. 221822
C	-0. 029586	3. 464315	-1. 681424
C	0. 558404	2. 035477	-1. 778079
C	0. 052562	1. 285953	-2. 980774
C	-1. 945980	3. 384387	0. 047017
C	-1. 568573	3. 508742	-1. 445911
H	0. 088751	1. 816970	-3. 943166
H	0. 488746	3. 962893	-0. 844792
H	-1. 294588	2. 624561	0. 494010
H	-2. 033905	2. 667762	-1. 977152
O	-3. 320407	3. 034937	0. 212684
O	-0. 354380	0. 133028	-2. 920236
O	0. 313708	1. 259923	-0. 614397
O	0. 285295	4. 104948	-2. 903773
H	-0. 440660	4. 753380	-3. 016904
O	-2. 063564	4. 705455	-2. 058544
H	-2. 364275	5. 311322	-1. 347946
C	-1. 796808	4. 694197	0. 825663
H	-1. 900198	4. 494474	1. 900593

H	-0.824602	5.164871	0.653736
O	-2.793803	5.635162	0.400244
H	-3.620623	5.115693	0.394523
H	-3.442271	2.146085	-0.187784
S	2.446238	-2.258003	-1.884064
C	3.570756	-1.307976	-2.894349
H	4.154698	-2.000377	-3.503189
H	2.984173	-0.634826	-3.520615
H	4.198500	-0.744626	-2.196205
O	1.591500	-1.334289	-1.108877
O	3.200618	-3.271799	-1.139179
O	1.554237	-2.953535	-3.024365
Mn	-0.740094	-0.716336	-0.810712
Cl	-1.132425	-3.079657	-1.631762
Cl	-0.716036	-1.057576	1.618027
C	-6.232722	-2.988879	0.108119
C	-6.083694	-2.445531	1.347120
C	-4.085398	-2.563102	0.412310
N	-4.972493	-3.058931	-0.458865
H	-7.111411	-3.329875	-0.416146
H	-6.808594	-2.220684	2.113051
H	-3.022900	-2.474092	0.242123
N	-4.734299	-2.192612	1.521894
C	-4.671660	-3.483989	-1.830161
H	-5.076439	-2.747574	-2.528279
H	-3.588339	-3.533780	-1.951727
H	-5.121059	-4.464043	-2.007206
C	-4.126131	-1.487333	2.669086
H	-4.463865	-1.994887	3.579346
H	-3.043726	-1.606464	2.573964
C	-4.494073	-0.001064	2.672108
H	-4.196561	0.427289	1.708634
H	-5.584264	0.115560	2.760080
C	-3.794170	0.755149	3.808372
H	-4.060164	0.306638	4.777259
H	-2.709900	0.634865	3.691233
C	-4.153469	2.244853	3.807108
H	-3.614065	2.782478	4.595378
H	-3.900371	2.700107	2.842963
H	-5.227244	2.395213	3.977588
Cl	-3.099553	0.089921	-1.052193
H	0.622388	-3.092237	-2.656068
H	1.155316	1.209382	-0.068172
H	1.643840	2.162438	-1.928322

TS₁₁₋₁₂

C	4. 941895	-2. 057692	2. 551989
C	4. 756117	-0. 907424	3. 255758
C	2. 797475	-1. 532921	2. 445129
N	3. 704329	-2. 435333	2. 063480
H	5. 832703	-2. 632909	2. 355825
H	5. 456406	-0. 287449	3. 792485
H	1. 738647	-1. 529244	2. 183716
N	3. 409654	-0. 601587	3. 187981
C	3. 414902	-3. 648586	1. 289286
H	3. 601273	-4. 525759	1. 914362
H	2. 373016	-3. 621263	0. 973857
H	4. 037915	-3. 676373	0. 395169
C	2. 740454	0. 543523	3. 834565
H	1. 876627	0. 145712	4. 373891
H	3. 449669	0. 924483	4. 575544
C	2. 279274	1. 659712	2. 891691
H	1. 743676	2. 371576	3. 532100
H	1. 532010	1. 264829	2. 195128
C	3. 393378	2. 405060	2. 139642
H	3. 205044	3. 481240	2. 116564
H	4. 383513	2. 255661	2. 583829
S	3. 549621	1. 922122	0. 391433
O	2. 177052	2. 323622	-0. 172757
O	4. 646137	2. 726996	-0. 162918
O	3. 728337	0. 446379	0. 372190
C	0. 157115	2. 655737	-2. 755808
C	0. 263129	1. 171187	-2. 484003
C	-0. 268130	0. 168739	-3. 360588
C	-1. 172793	3. 287991	-0. 607845
C	-1. 177338	3. 202122	-2. 150620
H	-0. 766372	0. 509185	-4. 271863
H	1. 019415	3. 160714	-2. 296310
H	-0. 628038	2. 426433	-0. 208204
H	-1. 968301	2. 502468	-2. 443202
O	-2. 509572	3. 293281	-0. 106647
O	-0. 332907	-1. 066727	-2. 971492
O	0. 717451	0. 722738	-1. 338591
O	0. 134642	2. 850519	-4. 154361
H	-0. 353054	3. 692116	-4. 263598
O	-1. 438034	4. 436147	-2. 813811
H	-1. 356319	5. 162035	-2. 157026
C	-0. 527101	4. 559334	-0. 060065
H	-0. 453372	4. 484177	1. 032446

H	0.478424	4.706532	-0.461227
O	-1.302490	5.711957	-0.426813
H	-2.217757	5.482914	-0.180311
H	-2.870231	2.401999	-0.299154
S	2.501602	-2.471515	-2.103247
C	3.496046	-1.026759	-2.474484
H	4.197692	-1.298267	-3.264790
H	2.838119	-0.220456	-2.798891
H	4.000725	-0.716602	-1.556221
O	1.596297	-2.142715	-0.975983
O	3.391483	-3.619329	-1.954291
O	1.636214	-2.676476	-3.426532
Mn	-0.642073	-1.339024	-0.792284
Cl	-1.556739	-3.568761	-0.781855
Cl	-0.371144	-0.901797	1.645373
C	-6.404311	-2.030900	0.587380
C	-6.065442	-1.385994	1.737435
C	-4.203721	-2.100098	0.784629
N	-5.227557	-2.474578	0.009790
H	-7.365812	-2.213161	0.133937
H	-6.676136	-0.897751	2.479916
H	-3.165283	-2.321021	0.571478
N	-4.685772	-1.445426	1.846322
C	-5.092469	-3.140777	-1.290367
H	-5.355065	-2.434962	-2.081898
H	-4.051773	-3.450698	-1.409573
H	-5.754618	-4.009343	-1.319808
C	-3.861786	-0.774583	2.871559
H	-4.208954	-1.119346	3.851976
H	-2.833728	-1.113774	2.720625
C	-3.935074	0.749746	2.744625
H	-3.643398	1.020285	1.724079
H	-4.970597	1.089446	2.892289
C	-3.009343	1.451342	3.746328
H	-3.274273	1.155124	4.772328
H	-1.983012	1.105263	3.570980
C	-3.071858	2.976780	3.611548
H	-2.378660	3.464395	4.306831
H	-2.811641	3.285761	2.592741
H	-4.079020	3.354289	3.829550
Cl	-2.728274	0.133597	-0.982802
H	0.951743	0.642846	-3.615766
H	0.782774	-2.117436	-3.354918
H	1.388957	1.384675	-0.808605

IM12

C	5. 335422	-2. 412637	1. 488384
C	5. 516542	-1. 142294	1. 939102
C	3. 344305	-1. 472083	1. 666911
N	3. 975745	-2. 600676	1. 336309
H	6. 046382	-3. 188124	1. 252473
H	6. 414930	-0. 596992	2. 181377
H	2. 269027	-1. 322732	1. 621832
N	4. 258462	-0. 566119	2. 049395
C	3. 339231	-3. 777657	0. 728859
H	3. 637445	-4. 671677	1. 281659
H	2. 256299	-3. 656060	0. 753607
H	3. 654700	-3. 824661	-0. 314920
C	4. 028279	0. 871362	2. 298849
H	4. 816431	1. 195517	2. 986504
H	4. 160606	1. 398033	1. 350904
C	2. 646847	1. 183426	2. 880217
H	2. 569866	0. 769524	3. 892953
H	1. 847482	0. 715420	2. 295812
C	2. 383912	2. 691050	2. 965030
H	1. 518855	2. 900770	3. 598965
H	3. 236922	3. 252827	3. 361796
S	2. 000676	3. 504761	1. 382243
O	0. 545557	2. 887956	1. 050257
O	1. 830229	4. 923733	1. 665648
O	2. 949830	3. 058958	0. 353378
C	-0. 921409	2. 994943	-2. 333972
C	-0. 232705	1. 659166	-2. 202070
C	-0. 227082	0. 726295	-3. 397146
C	-2. 624685	2. 697045	-0. 391157
C	-2. 431235	2. 828203	-1. 917839
H	-1. 239795	0. 682522	-3. 810649
H	-0. 430269	3. 712620	-1. 657383
H	-1. 794075	2. 112389	0. 017378
H	-2. 798937	1. 905236	-2. 379136
O	-3. 860197	2. 046585	-0. 096818
O	0. 197528	-0. 572081	-3. 045768
O	0. 261135	1. 293506	-1. 131983
O	-0. 859859	3. 422097	-3. 675044
H	-1. 663460	3. 971017	-3. 784732
O	-3. 135093	3. 907571	-2. 520237
H	-3. 464404	4. 496468	-1. 805195
C	-2. 685446	4. 038135	0. 338712
H	-2. 691831	3. 864619	1. 421641

H	-1.826259	4.670603	0.101210
O	-3.859086	4.765463	-0.058724
H	-4.589988	4.126527	0.033122
H	-3.749762	1.118931	-0.396448
S	3.364563	-0.931672	-1.977344
C	4.271956	0.614562	-1.778172
H	4.973871	0.699885	-2.610201
H	3.572422	1.451272	-1.770704
H	4.819508	0.580480	-0.834595
O	2.281510	-0.883268	-0.911014
O	4.334920	-2.022167	-1.757493
O	2.774682	-0.860311	-3.352679
Mn	0.069736	-1.192065	-0.900391
Cl	0.086873	-3.628119	-0.976766
Cl	-0.020495	-0.899829	1.585524
C	-5.050153	-4.091528	0.140183
C	-5.038709	-3.460594	1.346489
C	-3.001798	-3.342489	0.496779
N	-3.766887	-4.013417	-0.371196
H	-5.846718	-4.585121	-0.393803
H	-5.823757	-3.300659	2.068045
H	-1.949859	-3.133364	0.353027
N	-3.747294	-3.004566	1.554470
C	-3.335193	-4.450385	-1.703607
H	-3.726494	-3.755483	-2.450328
H	-2.243959	-4.432817	-1.735352
H	-3.708875	-5.460637	-1.885087
C	-3.290737	-2.157642	2.673855
H	-3.518200	-2.688364	3.605159
H	-2.206386	-2.064144	2.574677
C	-3.944591	-0.773741	2.635525
H	-3.748623	-0.325522	1.655228
H	-5.035134	-0.872557	2.738459
C	-3.400234	0.146977	3.734964
H	-3.522624	-0.329142	4.719256
H	-2.322169	0.276625	3.577889
C	-4.096122	1.512185	3.729825
H	-3.650301	2.188673	4.467687
H	-4.018972	1.979654	2.741751
H	-5.162887	1.415706	3.968614
Cl	-2.480499	-0.714970	-1.182104
H	1.163740	-0.697146	-3.285174
H	0.565634	2.267557	0.263568
H	0.414619	1.169435	-4.169955

IM13

C	1. 087730	5. 300525	0. 328714
C	0. 617644	4. 919577	-0. 888718
C	0. 116701	3. 326467	0. 563069
N	0. 765140	4. 294266	1. 221821
H	1. 633729	6. 179280	0. 632816
H	0. 692843	5. 399292	-1. 850269
H	-0. 252286	2. 407267	1. 005425
N	0. 013448	3. 685844	-0. 722946
C	1. 104067	4. 277630	2. 648551
H	0. 951823	3. 265095	3. 023972
H	2. 154281	4. 555627	2. 761184
H	0. 473029	4. 991903	3. 184753
C	-0. 644637	2. 886647	-1. 775999
H	-0. 977347	1. 951078	-1. 321363
H	-1. 540637	3. 438965	-2. 077814
C	0. 215547	2. 625785	-3. 019848
H	0. 622272	3. 560763	-3. 421445
H	-0. 485193	2. 241941	-3. 769734
C	1. 328172	1. 575983	-2. 930573
H	0. 985529	0. 651858	-2. 454272
H	1. 665493	1. 322184	-3. 940481
S	2. 860833	2. 089134	-2. 115052
O	2. 538274	1. 984270	-0. 541423
O	3. 881544	1. 087470	-2. 467487
O	3. 117158	3. 501355	-2. 385822
C	3. 744276	-1. 290634	1. 292313
C	2. 489248	-1. 477375	0. 440339
C	1. 883786	-2. 861271	0. 393863
C	5. 445305	-1. 281633	-0. 636396
C	5. 040116	-1. 896921	0. 700240
H	2. 579822	-3. 506545	-0. 162257
H	3. 894698	-0. 207841	1. 415554
H	5. 577040	-0. 199151	-0. 509462
H	4. 880383	-2. 976129	0. 549525
O	4. 379886	-1. 562252	-1. 556041
O	0. 620130	-2. 808278	-0. 249329
O	1. 930162	-0. 535540	-0. 118283
O	3. 590839	-1. 940586	2. 544167
H	2. 924749	-1. 450072	3. 088460
O	6. 080875	-1. 671316	1. 630731
H	5. 702432	-1. 922261	2. 493062
C	6. 732400	-1. 895388	-1. 199418
H	7. 068187	-1. 284281	-2. 053962

H	7. 519357	-1. 894789	-0. 441071
O	6. 512632	-3. 241301	-1. 588789
H	5. 693271	-3. 210189	-2. 114036
H	4. 162802	-0. 735698	-2. 027930
S	0. 464640	-0. 139082	3. 143601
C	-0. 950611	-0. 114706	4. 248662
H	-1. 814510	0. 208960	3. 664057
H	-1. 100469	-1. 124087	4. 635651
H	-0. 741792	0. 580700	5. 064363
O	1. 629636	-0. 617746	3. 936701
O	0. 625187	1. 235712	2. 601037
O	0. 097614	-1. 144636	2. 069130
Mn	-0. 985388	-1. 205267	0. 252129
H	2. 406781	1. 015752	-0. 272903
Cl	-2. 321022	-3. 253723	0. 517665
Cl	-2. 443918	0. 750016	0. 865642
H	1. 815238	-3. 229656	1. 421432
Cl	-1. 233317	-0. 668772	-2. 155200
C	-5. 957665	-3. 150939	-1. 807625
C	-6. 542892	-2. 389592	-0. 842418
C	-4. 503130	-1. 609543	-1. 182583
N	-4. 689061	-2. 641057	-2. 013454
H	-6. 321830	-4. 007288	-2. 352716
H	-7. 520538	-2. 446039	-0. 390684
H	-3. 599382	-1. 018868	-1. 113069
N	-5. 618853	-1. 431285	-0. 464929
C	-3. 645898	-3. 241862	-2. 852284
H	-2. 851774	-2. 507764	-2. 999341
H	-3. 232218	-4. 107085	-2. 329575
H	-4. 086826	-3. 533584	-3. 808016
C	-5. 809365	-0. 392107	0. 564544
H	-6. 472318	-0. 821921	1. 321672
H	-4. 830785	-0. 211029	1. 017336
C	-6. 383151	0. 906391	-0. 008313
H	-5. 695756	1. 284982	-0. 775426
H	-7. 343690	0. 706754	-0. 504418
C	-6. 563437	1. 967054	1. 085736
H	-7. 232915	1. 577886	1. 866136
H	-5. 593413	2. 145912	1. 566405
C	-7. 123388	3. 285396	0. 542612
H	-7. 239872	4. 024376	1. 342856
H	-6. 455961	3. 715316	-0. 213776
H	-8. 105838	3. 140999	0. 076307
H	0. 077969	-3. 578106	0. 008246

TS₁₃₋₁₄

C	1. 542556	5. 337081	0. 100103
C	0. 959676	4. 997978	-1. 079902
C	0. 430328	3. 449303	0. 407469
N	1. 197539	4. 360732	1. 017519
H	2. 177475	6. 167956	0. 363237
H	0. 999573	5. 475849	-2. 044680
H	0. 025499	2. 560305	0. 878292
N	0. 265464	3. 820237	-0. 867093
C	1. 646425	4. 306504	2. 411339
H	1. 365895	3. 336507	2. 823279
H	2. 733516	4. 412264	2. 434389
H	1. 183501	5. 119208	2. 978154
C	-0. 489614	3. 068024	-1. 888523
H	-0. 886607	2. 169551	-1. 408788
H	-1. 342849	3. 693570	-2. 171597
C	0. 327697	2. 729607	-3. 144603
H	0. 860081	3. 614865	-3. 511924
H	-0. 412648	2. 473727	-3. 912041
C	1. 289342	1. 540892	-3. 071451
H	0. 793682	0. 657132	-2. 657851
H	1. 626942	1. 294019	-4. 082642
S	2. 836825	1. 784462	-2. 160553
O	2. 493343	1. 809525	-0. 679378
O	3. 617428	0. 529553	-2. 484537
O	3. 447786	3. 033460	-2. 632830
C	3. 862557	-1. 064339	1. 208624
C	2. 598705	-1. 394553	0. 393227
C	1. 959029	-2. 739609	0. 677141
C	4. 924905	-1. 767202	-0. 895155
C	5. 016914	-1. 882743	0. 621674
H	2. 644212	-3. 540867	0. 377733
H	4. 075094	0. 008051	1. 072312
H	5. 415947	-0. 845907	-1. 222846
H	4. 871267	-2. 929192	0. 926053
O	3. 492317	-1. 646037	-1. 173513
O	0. 722865	-2. 821745	-0. 010744
O	1. 721882	-0. 464760	0. 117525
O	3. 766641	-1. 434887	2. 558363
H	3. 067392	-0. 921085	3. 039437
O	6. 280036	-1. 413881	1. 045001
H	6. 279636	-1. 483348	2. 014569
C	5. 449548	-2. 977547	-1. 662511
H	5. 472295	-2. 751168	-2. 738209

H	6.473334	-3.183764	-1.334684
O	4.683826	-4.142218	-1.395433
H	3.797249	-3.974305	-1.755000
H	3.375794	-0.783400	-1.734989
S	0.513422	0.079139	3.210434
C	-0.814147	0.333934	4.392269
H	-1.695284	0.641853	3.825461
H	-0.997956	-0.608093	4.911630
H	-0.509625	1.108524	5.099248
O	1.708583	-0.362278	3.984007
O	0.715822	1.364937	2.491033
O	0.007302	-1.025049	2.307079
Mn	-0.904688	-1.100503	0.387306
H	2.101322	0.480021	-0.068566
Cl	-2.215359	-3.157244	0.798433
Cl	-2.323422	0.927176	0.804106
H	1.821392	-2.778241	1.763057
Cl	-1.154573	-0.814350	-2.055300
C	-5.876855	-3.214332	-1.449560
C	-6.452329	-2.338680	-0.580154
C	-4.412235	-1.614894	-1.027233
N	-4.608275	-2.738996	-1.724786
H	-6.247758	-4.129380	-1.883355
H	-7.426544	-2.335810	-0.117597
H	-3.503429	-1.026516	-1.036688
N	-5.521993	-1.345645	-0.328641
C	-3.577649	-3.436603	-2.501771
H	-2.764547	-2.737406	-2.705039
H	-3.189092	-4.263369	-1.903537
H	-4.021431	-3.797507	-3.432525
C	-5.706725	-0.180532	0.556687
H	-6.311242	-0.522517	1.402635
H	-4.715040	0.096704	0.925980
C	-6.365471	1.001343	-0.159540
H	-5.740350	1.285697	-1.015848
H	-7.343741	0.701253	-0.561940
C	-6.527539	2.204409	0.779063
H	-7.136236	1.912060	1.646637
H	-5.540725	2.482107	1.170644
C	-7.170021	3.410902	0.087846
H	-7.271661	4.254075	0.779821
H	-6.564459	3.748222	-0.761897
H	-8.170403	3.168691	-0.291762
H	0.148425	-3.501195	0.395799

IM14

C	1. 350080	5. 356507	0. 092281
C	0. 778317	5. 017948	-1. 093940
C	0. 312226	3. 420429	0. 366163
N	1. 046574	4. 349580	0. 990523
H	1. 947270	6. 209655	0. 372477
H	0. 786521	5. 521947	-2. 046668
H	-0. 066508	2. 509441	0. 820282
N	0. 133453	3. 807665	-0. 903242
C	1. 489464	4. 291236	2. 387860
H	1. 294175	3. 285381	2. 763690
H	2. 561854	4. 495630	2. 423304
H	0. 950329	5. 039881	2. 975020
C	-0. 600928	3. 051442	-1. 936779
H	-0. 990030	2. 144235	-1. 465992
H	-1. 459086	3. 666676	-2. 226462
C	0. 233328	2. 733667	-3. 186524
H	0. 741730	3. 629779	-3. 562254
H	-0. 492699	2. 447027	-3. 955989
C	1. 217156	1. 561779	-3. 103225
H	0. 747808	0. 681080	-2. 649415
H	1. 547359	1. 291283	-4. 110318
S	2. 764967	1. 876259	-2. 230329
O	2. 536237	1. 933308	-0. 769725
O	3. 571084	0. 528400	-2. 569842
O	3. 461971	2. 987672	-2. 868088
C	3. 772041	-1. 191163	1. 414453
C	2. 662869	-1. 495275	0. 365158
C	1. 954511	-2. 821704	0. 656907
C	4. 853894	-1. 697907	-0. 666574
C	4. 988868	-1. 911109	0. 835865
H	2. 626471	-3. 649556	0. 404849
H	3. 961832	-0. 103913	1. 383019
H	5. 360711	-0. 763511	-0. 939802
H	4. 899379	-2. 980579	1. 076229
O	3. 421076	-1. 541056	-0. 901230
O	0. 755194	-2. 884824	-0. 113907
O	1. 675584	-0. 527714	0. 218913
O	3. 565732	-1. 656918	2. 716515
H	2. 875326	-1. 124266	3. 184310
O	6. 229000	-1. 397956	1. 284832
H	6. 230386	-1. 511531	2. 249710
C	5. 353494	-2. 837121	-1. 551042
H	5. 338281	-2. 516734	-2. 604028

H	6.389981	-3.065618	-1.282307
O	4.601847	-4.025343	-1.366796
H	3.691546	-3.807048	-1.627566
H	3.332869	-0.219540	-1.932396
S	0.434496	0.093617	3.194404
C	-0.923391	0.543793	4.282033
H	-1.754414	0.858911	3.647519
H	-1.197188	-0.335396	4.867858
H	-0.596427	1.352940	4.938715
O	1.556993	-0.354761	4.063993
O	0.765558	1.307227	2.389697
O	-0.118709	-1.034946	2.357531
Mn	-0.748852	-1.136673	0.310455
H	2.040972	0.380798	0.239002
Cl	-2.194903	-3.139371	0.661146
Cl	-2.224431	0.939443	0.647244
H	1.735064	-2.850662	1.726948
Cl	-1.048581	-0.830051	-2.161586
C	-5.822974	-3.149077	-1.623650
C	-6.363381	-2.344353	-0.668061
C	-4.316547	-1.622529	-1.088917
N	-4.549685	-2.674625	-1.881416
H	-6.220886	-4.013992	-2.130228
H	-7.328293	-2.364271	-0.186829
H	-3.398941	-1.050018	-1.064873
N	-5.408075	-1.395213	-0.348336
C	-3.539591	-3.331967	-2.717372
H	-2.723340	-2.628950	-2.893360
H	-3.147004	-4.196037	-2.176561
H	-4.002676	-3.635414	-3.659115
C	-5.541348	-0.328432	0.660649
H	-6.177842	-0.729278	1.455579
H	-4.542583	-0.149845	1.066788
C	-6.118607	0.964725	0.080037
H	-5.454583	1.314611	-0.720191
H	-7.100857	0.768677	-0.373508
C	-6.239319	2.052403	1.155402
H	-6.879167	1.690319	1.972965
H	-5.246517	2.228985	1.587859
C	-6.805850	3.365436	0.606336
H	-6.877960	4.124521	1.393065
H	-6.166356	3.768287	-0.188149
H	-7.809494	3.224132	0.186346
H	0.163157	-3.578517	0.238019

