

**Dichtefunktionalrechnungen zur homogenen
Katalyse mit Übergangsmetallen:
Olefinpolymerisation und asymmetrische
Hydrierung**

Inaugural-Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades der Naturwissenschaften
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

vorgelegt von
Martin Graf
aus Nürnberg

Oktober 2007

Gedruckt mit der Genehmigung der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der
Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf
Referent: Herr Prof. Dr. Walter Thiel
Korreferentin: Frau Prof. Dr. Christel Marian
Tag der mündlichen Prüfung: 4. Dezember 2007

Den Unterstützern

Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand am Max-Planck-Institut für Kohlenforschung in Mülheim an der Ruhr.

Mein Dank gilt Herrn Prof. Dr. W. Thiel für die interessante und komplexe Aufgabenstellung und den gewährten Freiraum bei der Erstellung der Arbeit.

Frau Prof. Dr. C. Marian danke ich für die Übernahme des Korreferates.

Herrn Prof. Dr. G. Fink möchte ich für die bereichernden und anregenden wissenschaftlichen Diskussionen und seine Hilfsbereitschaft danken.

Herrn Priv. Doz. K. Angermund möchte ich für die Hilfe beim Ordnen der Datenmengen danken.

Mein besonderer Dank gilt all den Menschen, die mich während der Dissertation unterstützt haben, allen voran meinen Eltern.

Ohne die herausragende Unterstützung durch die IT-Abteilung wäre es nicht möglich gewesen, diese Arbeit fertig zu stellen. Hier sei besonders H. Lenk und Dr. A. Koslowski für unbürokratische und schnelle Hilfe gedankt.

Danken möchte ich schließlich noch den Kollegen, die in Diskussionen wissenschaftlicher und nicht wissenschaftlicher Natur dazu beitrugen, dass ich die Zeit in Mülheim nicht vergessen werde.

Inhaltsverzeichnis

1 Methoden	1
1.1 Einleitung	1
1.2 Theorie	2
1.3 Technische Details	4
1.3.1 Rechnungen zur Polymerisation	4
1.3.2 Rechnungen zur asymmetrischen Hydrierung	6
2 Mechanismus der homogenen Propenpolymerisation mit Zirconocenen	7
2.1 Einleitung	7
2.1.1 Allgemeines	7
2.1.2 Mikrostruktur des Polymers	8
2.1.3 Mechanismus der Polymerisation	11
2.1.4 Definitionen	19
2.2 DFT-Studie zur Polymerisation von Propen	22
2.2.1 Propenpolymerisation mit $\text{iPr(3-R-CpFlu)ZrCl}_2$	22
2.2.2 CPMD Simulation von $\text{iPr(3-iPr-CpFlu)Zr(C}_4\text{H}_9\text{)}^+$	27
2.3 Der back-skip Mechanismus	32
2.3.1 n-Propyl als Modell für die wachsende Polymerkette	35

2.3.2	iso-Butyl als Modell für die wachsende Polymerkette . . .	45
2.3.3	Zum Einfluss von Lösungsmittel und Gegenion	53
3	Asymmetrische Hydrierung von Olefinen mit Rhodiumkatalysatoren	61
3.1	Einleitung	61
3.1.1	Beschreibung des in dieser Arbeit untersuchten Systems .	66
3.1.2	Beschreibung des Reaktionsmechanismus	69
3.2	Ergebnisse	74
3.2.1	Verifikation der Methode	74
3.2.2	Ergebnisse für das Reetz-System	80
4	Zusammenfassung	91
4.1	Homogene Olefinpolymerisation	91
4.2	Asymmetrische Hydrierung	92
4.3	Homogeneous Olefin Polymerization	94
4.4	Asymmetric Hydrogenation	95
	Veröffentlichungen aus dieser Arbeit	97
	Erklärung	98
	Abbildungsverzeichnis	100
	Tabellenverzeichnis	104
	Literaturverzeichnis	107
A	Rohdaten der Rechnungen zur homogenen Olefinpolymerisation	133
A.1	Energien	133

A.2	Kartesische Koordinaten der optimierten Strukturen	139
A.2.1	Propyl als Modell für die Kette	140
A.2.2	Butyl als Modell für die Kette	145
A.2.3	Untersuchungen mit Gegenion	152
B	Rohdaten der Rechnungen zur homogenen asymmetrischen Hydrie-	
	rung	165
B.1	Energien	165
B.2	Strukturen	173
B.2.1	Strukturen der _01 Spezies	174
B.2.2	Strukturen der _02 Spezies	191
B.2.3	Strukturen der _03 Spezies	195
B.2.4	Strukturen der _04 Spezies	205
B.2.5	Strukturen der _05 Spezies	209
B.2.6	Strukturen der _06 Spezies	220
B.2.7	Strukturen der _07 Spezies	231
B.2.8	Strukturen der _08 Spezies	241
B.2.9	Strukturen der _09 Spezies	249
B.2.10	Strukturen der _10 Spezies	260
B.2.11	Strukturen der _11 Spezies	264

Kapitel 1

Methoden

1.1 Einleitung

Die Verwendung der Dichtefunktionaltheorie (DFT) zur Bestimmung molekularer Eigenschaften, wie beispielsweise Bindungsenergien, Molekülgeometrien oder Schwingungsfrequenzen, hat in den letzten fünfzehn Jahren sehr stark zugenommen. DFT-Rechnungen liefern meist Ergebnisse von akzeptabler Genauigkeit, insbesondere auch für metallorganische Verbindungen und Übergangsmetallkomplexe. Verglichen mit korrelierten ab initio Rechnungen zeichnen sie sich durch einen wesentlich geringeren Rechenzeitverbrauch aus und sind daher oft die Methode der Wahl zur Behandlung größerer Moleküle. Allerdings lässt sich ihre Genauigkeit nicht systematisch verbessern. Für hochgenaue Rechnungen bleibt man daher auf korrelierte ab initio Verfahren wie Coupled Cluster (CCSD(T)) [1, 2] angewiesen, welche jedoch nur für kleinere Moleküle möglich sind.

Der Grundgedanke der Dichtefunktionaltheorie ist es, an Stelle der komplizierten N-Elektronen-Wellenfunktion der Schrödinger-Gleichung einen einfacheren Ausdruck, nämlich die Elektronendichte $\rho(\vec{r})$ zu betrachten [3]. Hohenberg und Kohn bewiesen formal [4], dass die Elektronendichte als alleinige Größe ausreichend ist, um die Grundzustandsenergie eines N-Elektronensystems zu beschreiben. Die ersten Arbeiten zur Dichtefunktionaltheorie stammen von Thomas [5] und Fermi [6], die versuchten, durch statistische Ansätze die Verteilung der Elektronen

in einem Atom anzunähern. Allerdings war dieser Ansatz relativ ungenau und nicht auf Moleküle anwendbar. Kohn und Sham [7] erkannten die Schwächen des Thomas-Fermi-Modells und erstellten ein den Hartree-Fock (HF)-Gleichungen ähnliches System, welches Korrekturen für die Korrelationseffekte beinhaltet, jedoch nicht schwerer zu lösen ist als die nicht-korrelierte HF-Methode.

1.2 Theorie

In der nichtrelativistischen Quantenchemie wird versucht, die Schrödinger-Gleichung approximativ zu lösen. In der Born-Oppenheimer-Näherung lautet die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung für die Elektronen:

$$\hat{H}\Psi(x_1, x_2, \dots, x_n) = E\Psi(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (1.1)$$

Dabei sind $\hat{H}$ der elektronische Hamilton-Operator, E die elektronische Energie und $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_n)$ die Wellenfunktion des Systems. Die Koordinaten x_i des i -ten Elektrons enthalten die räumlichen Koordinaten r_i und die Spinkoordinate s_i . In der Hartree-Fock-Theorie ist die Energie eines Systems in folgender Form gegeben:

$$E_{HF} = V + \langle hP \rangle + \frac{1}{2}\langle PJ(P) \rangle - \frac{1}{2}\langle PK(P) \rangle \quad (1.2)$$

wobei V die Kernabstoßungsenergie, P die Dichtematrix, $\langle hP \rangle$ die Ein-Elektronen-Energie, $\frac{1}{2}\langle PJ(P) \rangle$ die klassische Coulomb-Abstoßung der Elektronen und $-\frac{1}{2}\langle PK(P) \rangle$ die aus der Quantennatur der Elektronen herrührende Austauschenergie sind.

In der HF-Theorie wird die Elektronenkorrelation nicht berücksichtigt. Es gibt mehrere Methoden zur Behandlung der Elektronenkorrelation, unter anderem störungstheoretische Ansätze wie die Møller-Plesset-Methoden oder Variationsverfahren wie die Konfigurations-Wechselwirkung, die aufgrund ihrer hohen Rechenzeitkosten jedoch vorwiegend für kleine Systeme eingesetzt werden. Die Dichtefunktionaltheorie bietet einen leichten und wenig rechenzeitintensiven Weg, um große Systeme mit hinreichend guter Genauigkeit untersuchen zu können.

In der Dichtefunktionaltheorie wird der HF-Austauschterm durch einen allgemeineren Ausdruck ersetzt, das Austausch-Korrelations-Funktional, welches auch die in der Hartree-Fock-Theorie vernachlässigte Elektronenkorrelation berücksichtigt,

$$E_{KS} = V + \langle hP \rangle + \frac{1}{2} \langle PJ(P) \rangle + E_X[P] + E_C[P] \quad (1.3)$$

wobei $E_X[P]$ das Austauschfunktional und $E_C[P]$ das Korrelationsfunktional bezeichnen. Formal sind sich Hartree-Fock Theorie und Dichtefunktionaltheorie somit ähnlich, da sie sich nur durch den Austausch-Korrelationsterm unterscheiden.

Die ersten Ansätze zur Dichtefunktionaltheorie gingen von einer lokalen Elektronendichte, wie im homogenen Elektronengas, aus (local density approximation, LDA), was zur Folge hatte, dass Bindungsenergien in Molekülen überschätzt wurden. Somit wurde die Einführung nichtlokaler, gradientenkorrigierter Zusatzterme nötig. Nichtlokal soll bedeuten, dass nicht nur die Dichte in einem bestimmten Punkt berechnet wird (lokale Näherung), sondern auch deren Ableitung, so dass die Inhomogenität der Elektronendichteverteilung berücksichtigt werden kann.

Die normalerweise in der Dichtefunktionaltheorie eingesetzten Funktionale sind Integrale einer Funktion der Elektronendichte und möglicherweise des Gradienten der Elektronendichte.

$$E_X[P] = \int f_X(\rho_\alpha(r), \rho_\beta(r), \nabla \rho_\alpha(r), \nabla \rho_\beta(r)) dr \quad (1.4)$$

$$E_C[P] = \int f_C(\rho_\alpha(r), \rho_\beta(r), \nabla \rho_\alpha(r), \nabla \rho_\beta(r)) dr \quad (1.5)$$

Die Methoden unterscheiden sich darin, welche Funktionen f_X und f_C verwendet werden.

Hybridfunktionale enthalten eine Linearkombination aus einem DFT-Austauschfunktional des Typs 1.4 und dem Hartree-Fock-Austauschfunktional, wobei das Mischungsverhältnis auf empirischer Grundlage gewählt wird.

In der vorliegenden Arbeit kommen nur reine Funktionale wie BPW91 und BP86 zum Einsatz, da sie für die Behandlung der untersuchten Systeme gut geeignet und rechentechnisch effizienter sind (siehe unten).

Als Basisfunktionen für Hartree-Fock oder Kohn-Sham Orbitale können ebene Wellen, atomzentrierte Slater-Funktionen oder kontrahierte Gauss-Funktionen dienen. In dieser Arbeit wurden durchgängig Gauss-Funktionen verwendet. Um die Berechnung der kernnahen Schalen zu vermeiden, wurden für die Übergangsmetallatome jeweils Pseudopotenziale benutzt. Die Wahl des Basissatzes ist für die Genauigkeit der Ergebnisse von enormer Wichtigkeit. Der Basissatz sollte über eine genügend große Flexibilität verfügen. Daher werden in der Regel mehrere Basisfunktionen pro Atomorbital (Split-Valence, Doppel- ζ , Tripel- ζ , usw.) verwendet und nötigenfalls auch Polarisationsfunktionen sowie diffuse Funktionen hinzugefügt.

1.3 Technische Details

1.3.1 Rechnungen zur Polymerisation

Im ersten Teil dieser Arbeit wurde hauptsächlich das Gaussian-Programmpaket in den Versionen 98 und 03 eingesetzt [8, 9]. Als Funktional kam BPW91 zur Anwendung. Dieses Funktional besteht aus dem von Vosko et al. entwickelten lokalen Austausch-Korrelationsfunktional [10], das mit Beckes nicht-lokalem Austauschkorrekturen [11] und Perdew und Wangs nicht-lokalen Korrelationskorrekturen [12] erweitert wurde. BPW91 ist sehr gut für die Berechnung der Insertionsreaktion bei übergangsmetallkatalysierten Olefinpolymerisationen geeignet [13].

Die Molekülgeometrien wurden minimiert und die erhaltenen stationären Punkte durch Berechnung der zweiten Ableitung der Energie als Minimum oder Übergangszustand charakterisiert. In einigen Fällen wurden die Übergangszustände mit den Minima durch eine Intrinsic Reaction Coordinate (IRC) Rechnung verbunden [14, 15]. Hierbei wurden massengewichtete Internkoordinaten verwendet und die Schrittweite betrug $0.1 \text{ amu}^{1/2}\text{bohr}$.

Als Grid für die numerische Integration wurde das in Gaussian mit dem Keyword 'Ultrafine' zugängliche Gitter verwendet. Die Konvergenzkriterien für die Self Consistent Field (SCF) Rechnung und Geometrieoptimierung waren die in

Gaussian implementierten Standardwerte. So wurde die SCF-Prozedur als konvergiert angesehen, wenn die RMS-Änderung der Dichte kleiner als 10^{-6} war. Die Berechnungen der thermochemischen Größen wurden unter der Annahme des harmonischen Oszillators, starren Rotators und idealen Gases durchgeführt.

In den Zirkonocen-Komplexen wurde für das Zirkon-Atom das effektive Rumpfpotential (effective core potential, ECP) von Hay und Wadt [16, 17] verwendet, welches die (1s-3d) Elektronen ersetzt. In den Geometrieoptimierungen wurden die 4s, 4p, 4d und 5s Elektronen durch einen auf [3s3p2d] kontrahierten Basissatz beschrieben [16], während für die Kohlenstoff- und Wasserstoffatome der Standard Dunning-Huzinaga Doppel- ζ Basissatz eingesetzt wurde [18]. Die Kohlenstoff- und Wasserstoffatome des Monomers und der wachsenden Polymerkette wurden mit Polarisationsfunktionen versehen (C: $\alpha_d=0.7$, H: $\alpha_p=1.0$).

Für die Single-Point Energien wurde ein größerer Basissatz verwendet: Die Kohlenstoff- und Wasserstoffatome des Monomers und der wachsenden Polymerkette wurden mit dem augmentierten Tripel- ζ Basissatz TZD2P beschrieben, um Ergebnisse zu erhalten, die bezüglich der Basis hinreichend konvergiert sind [13]. Die Kohlenstoffatome der Cp-Ringe erhielten eine zusätzliche Polarisationsfunktion ($\alpha_d=0.75$). Durch die Abspaltung der äußersten primitiven Funktionen der kontrahierten 5s, 5p und 4d Funktionen des oben beschriebenen Zirkon-Basissatzes entstand ein [4s, 4p, 3d]-Basissatz. Die Kontraktionen für die 5s, 5p und 4d Funktionen sind demnach 311, 111 und 211.

Die Untersuchung der Solvens- und Gegenioneneffekte erfolgte mit Turbomole in der Version 5.71 [19]. Das verwendete Funktional war BP86 [11, 20, 21]. Da BP86 ein reines Dichtefunktional ist, konnte die RI (Resolution of the Identity) Näherung verwendet werden [22, 23], was zu einer deutlichen Verringerung der Rechenzeit beitrug. Die verwendeten Konvergenzkriterien (10^{-7} au für die SCF-Energie) und Gitter für die numerische Integration [23] wurden äquivalent zu jenen in Gaussian gewählt. Die Effekte des Lösungsmittels wurden mittels des Continuum Solvation Models (COSMO) [24] wie in Turbomole implementiert [25] erfasst. Die in COSMO verwendeten Radien der Atome wurden aus der Literatur übernommen [26]. Die Übergangszustände wurden dabei mittels ChemShell [27] und dem darin implementierten HDLC Optimierer [28] gefunden.

Für die Studie der Gegenion- und Lösungsmittelleffekte wurde der Doppel- ζ Basissatz (LANL2DZ) [16–18] in Turbomole verwendet, analog zu den Gaussian Rechnungen.

1.3.2 Rechnungen zur asymmetrischen Hydrierung

In diesem Projekt wurde das Turbomole Programmpaket Version 5.71 [19] in Verbindung mit dem BP86-Funktional [11, 20, 21] eingesetzt. Die RI-Näherung [22, 23] fand hier ebenso Anwendung. Das Kriterium für die Konvergenz der SCF-Energie war 10^{-7} au. Für die Suche der Übergangszuständen diente der in Chem-Shell [27] implementierte HDLC Optimierer [28]. Für die Charakterisierung der stationären Punkte und die numerische Berechnung der thermochemischen Daten kam das Programm SNF in der Version 2.3.1c [29] zum Einsatz. Bei diesen Berechnungen wurde das SCF-Konvergenzkriterium für die SCF-Energien auf 10^{-8} au heraufgesetzt.

Das zur Beschreibung des Rhodium-Atoms verwendete ECP ersetzt 28 Rumpfelektronen (1s–3d), wobei die 4s, 4p, 4d und 5s Elektronen durch einen kontrahierten [6s,5p,3d] Basissatz beschrieben werden [30]. Als Basissatz für die Nichtmetallatome wurde 6-31G* [31, 32] gewählt.

Um zu überprüfen, ob dieser Basissatz ausreichend für die Beschreibung des gewählten Modellsystems ist und ob die Wahl des Funktionals Auswirkungen auf die Ergebnisse hat, wurden vergleichende Rechnungen durchgeführt (siehe Kapitel 3.2.1). Dabei wurden einige ausgewählte Strukturen mit dem PBE-Funktional [12, 33–35] und dem oben beschriebenen Basissatz erneut optimiert und die relativen Energien mit den RI-BP86 Werten verglichen. Da nicht auszuschließen ist, dass die Verwendung der RI-Näherung die Ergebnisse beeinflussen könnte, wurden die selben ausgewählten Strukturen nochmals mit dem Funktional BP86 ohne Verwendung der RI-Näherung und mit dem selben Basissatz wie in den vorherigen Rechnungen optimiert und ebenso verglichen. Schließlich wurden noch Single-Point Rechnungen an den optimierten Strukturen mit einem deutlich vergrößerten Basissatz (TZVP) [22, 23, 36] durchgeführt.

Kapitel 2

Mechanismus der homogenen Propenpolymerisation mit Zirconocenen

2.1 Einleitung

2.1.1 Allgemeines

Seit Zieglers Erfindung des Mülheimer Normaldruck-Verfahrens zur Übergangsmetallkatalysierten Polymerisation von Olefinen, die jetzt schon über 50 Jahre zurück liegt [37], wurde die industrielle Herstellung von Polymeren ein wirtschaftlich bedeutender Prozess. Um einen Einblick in die Wirkungsweise der heterogenen Ziegler-Katalysatoren zu erhalten, wurden schon früh Metallocenkatalysatoren als homogene Modellsysteme eingesetzt [38, 39]. Allerdings waren die Aktivitäten der damaligen Katalysatoren sehr gering und es konnte lediglich Ethlen polymerisiert werden. Für die industrielle Einsetzbarkeit der Metallocenkatalysatoren war die Entdeckung der aktivierenden Wirkung von Methylalumin-oxan (MAO) durch Sinn und Kaminsky [40] im Jahr 1980 ein wichtiger Schritt. Durch die Verwendung von MAO konnte die Effektivität der homogenen Metallocenkatalysatoren drastisch gesteigert werden, jedoch konnte mit den damaligen

Katalysatoren hauptsächlich Polyethylen hergestellt werden. Bei der Propenpolymerisation erhielt man lediglich ataktisches Polymer, wobei die Katalysatoren nur geringe Aktivität aufwiesen [41]. Durch die von Brintzinger synthetisierten verbrückten Metallocenkatalysatoren [42, 43] konnte dieses Problem beseitigt werden. So war das rac-Ethylenbis[(4,5,6,7,-Tetrahydro-1-indenyl)]zirkoniumdichlorid der erste Metallocenkatalysator-Precursor, mit dem unter Verwendung von MAO als Co-Katalysator ein isotaktisches, kristallines Polypropen gewonnen werden konnte. Durch die Weiterentwicklung der Katalysatoren für die Olefinpolymerisation konnten die Eigenschaften des erhaltenen Polymeren bereits gut gesteuert werden. So gelang es Ewen und Razavi, mit $iPr(3 - R - CpFlu)ZrCl_2$ [44] zum ersten Mal syndiotaktisches Polypropen herzustellen. Das erste Stereoblockpolymer wurde von Waymouth mit einem unverbrückten Metallocenkatalysator erhalten [45].

Die Intention, maßgeschneiderte Polymere mit genau vorhersehbaren Eigenschaften herzustellen, machte die Erforschung der Mikrostruktur und des Reaktionsmechanismus der Polymerisation zu einem vorrangigen Ziel. Auf Grund der hieraus gewonnenen Erkenntnisse kann man zielgerichtet an einem rationalen Design der Katalysatoren arbeiten.

2.1.2 Mikrostruktur des Polymers

Die Eigenschaften eines Polymers werden durch viele Faktoren bestimmt. Zum einen ist entscheidend, ob das Polymer aus einem Monomer (Homo-Polymer) oder aus verschiedenen Monomeren (Co-Polymer) hergestellt wird. Außerdem ist der Polymerisationsgrad – also die Kettenlänge – von großer Bedeutung. In dieser Arbeit wird der Mechanismus der Homo-Polymerisation von Ethen und Propen untersucht.

Polypropen kann verschiedene Taktizitäten aufweisen, die einen starken Einfluss auf die Eigenschaften des Polymers haben. In Abbildung 2.1 sind mögliche Taktizitäten in Polypropen analog einer Fischer-Projektion dargestellt. Die Polymerkette ist waagerecht angeordnet, die vor der Papierebene liegenden Methylgruppen zeigen nach oben, die hinter der Papierebene liegenden nach unten.

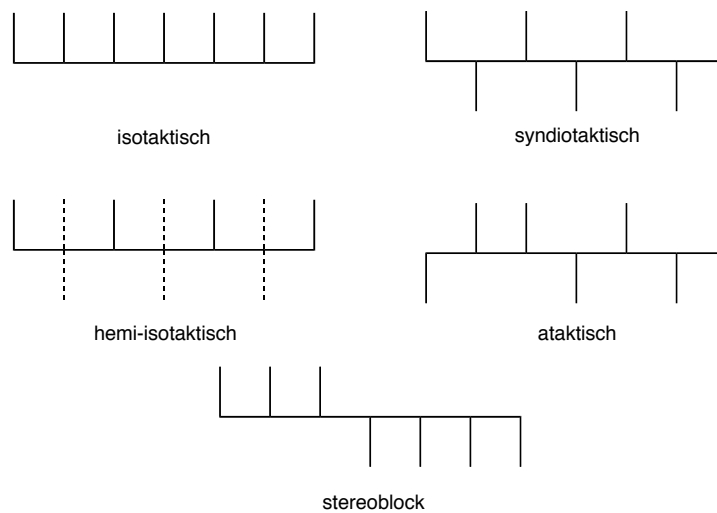


Abbildung 2.1: Mögliche Taktizitäten im Polypropylen

In isotaktischem Polypropylen bilden sich durch die gleichmäßige Anordnung der Methylgruppen lange Helices aus, die sich parallel aneinander lagern können. Hieraus resultiert die große Kristallinität (60% kristalline Bereiche). Isotaktisches Polypropylen hat eine Dichte von ca. $0,91 \text{ g/cm}^3$, einen Schmelzpunkt von ca. $165 \text{ }^\circ\text{C}$ und eine hohe Steifigkeit und Härte. Daher eignet es sich als Konstruktionswerkstoff. Dieses Polyolefin findet Verwendung in nahezu allen Lebens- und Anwendungsbereichen: im Automobilbau (Stoßfänger, Innenraumverkleidungen, Sitzbezüge) und in Elektrogeräten (Gehäuse, Isolatoren), in Vliesen (Fasern) und in Verpackungen (Folien, Behälter). Syndiotaktisches Polypropylen hingegen hat einen Schmelzpunkt von $135 \text{ }^\circ\text{C}$ und ist sowohl transparenter als auch schlagzäher als das isotaktische Polypropylen; es hat jedoch noch keine industrielle Anwendung, da es durch herkömmliche Ziegler-Katalysatoren nicht hergestellt werden kann. Ataktisches Polypropylen reicht in seiner Beschaffenheit von ölig bis wachsartig. Dieses Polymer fiel mit den frühen Ziegler-Katalysatoren oft in großer Menge als unerwünschtes Nebenprodukt an und musste aufwändig vom erwünschten isotaktischen Polypropylen abgetrennt werden. Heutzutage dient es als Additiv zu anderen Polymeren oder als Grundstoff für Wachse [41].

Ein geeignetes Mittel zur Aufklärung der Mikrostruktur des Polypropylen ist die

^{13}C -NMR Spektroskopie. Bei der Analyse des ^{13}C -NMR Spektrums des Polymers richtet sich das Augenmerk auf die chemische Verschiebung der Methylkohlenstoffatome, da diese stark von der Stereochemie der benachbarten Atome beeinflusst wird. Der Effekt auf die Verschiebung der einzelnen Methylgruppen lässt sich mit den heutigen NMR-Geräten innerhalb einer Sequenz von 5 aufeinanderfolgenden Gruppen nachweisen und unterscheiden. Eine solche Sequenz wird eine Pentade genannt. Die Häufigkeit einer Pentade innerhalb des untersuchten Polymers berechnet sich aus dem Verhältnis der Intensität des ^{13}C Signals der entsprechenden Pentade zur Summe aller anderen Pentaden. Diese Häufigkeit wird in Prozent angegeben [46–51].

In der von Bovey eingeführten Nomenklatur [52] wird die relative Orientierung zweier aufeinanderfolgender Methylgruppen mit m (meso) bezeichnet, wenn die zweite auf der selben Seite – also ‘cis’ – relativ zur ersten Methylgruppe steht. Wenn sie relativ zur ersten Methylgruppe auf der entgegengesetzten Seite – also ‘trans’ – steht, wird sie r (racemo) genannt.

Da es für das Propen nur 2 mögliche stabile Anordnungen für die Insertion gibt, lassen sich innerhalb einer Pentade nur 10 mögliche Anordnungen konstruieren. Die 10 für das Polypropen möglichen Pentaden sind in Abbildung 2.2 gezeigt.

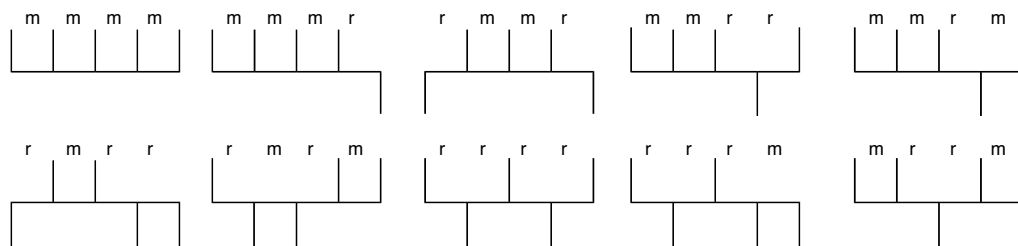


Abbildung 2.2: Die 10 möglichen Pentaden

Tabelle 2.1 vergleicht die Pentadenverteilungen bei idealer Taktizität eines Polymers mit der eines realen Systems bei verschiedenen Polymerisationstemperaturen. Wie sich aus dem Vergleich der Pentadenhäufigkeiten für das ideal hemiisotaktische und das reale System bei 10 °C erkennen lässt, gibt es einen Anteil von 3% an Pentaden (mmrm/rmrr), die nicht der idealen Verteilung entsprechen.

Pentaden, die nicht in der idealen, aber in der experimentell gefundenen Pentadenverteilung auftauchen, werden Fehlerpentaden genannt.

2.1.3 Mechanismus der Polymerisation

Für die Betrachtung des Mechanismus der Polymerisation ist es zunächst nicht erheblich, ob Ethen oder Propen als Monomer eingesetzt wird. Deshalb findet die Diskussion des Reaktionsmechanismus im Folgenden mit Ethen als Monomereinheit statt.

1964 stellten Cossee und Arlman einen Mechanismus für die Polymerisation von α -Olefinen auf, der über lange Zeit die Vorstellung über die Vorgänge bei der Polymerisation prägte [54–56]. Das Modell beschreibt die Reaktion bei der heterogenen Katalyse mit Ziegler-Katalysatoren. Die Vorstellung über den Reaktionsmechanismus wurde von den Kristallstrukturdaten und der im Kristall vorliegenden oktaedrischen Koordination des Ti-Atoms geprägt. Im ersten Schritt nähert sich das Olefin der leeren Koordinationsstelle (in Abbildung 2.3 durch die gestrichelte Linie dargestellt) am Metall an (A). R steht in dieser Abbildung für die wachsende Polymerkette, X steht für Chloridionen im Kristallgitter des Katalysators. Anschließend wird das Olefin π -koordiniert (B); im nächsten Schritt insertiert das Olefin in die Metall–Kohlenstoffbindung (C) und die freie Koordinationsstelle am Metall wird wieder zurückgebildet (D). Allerdings sind nach der Insertion die Positionen der freien Koordinationsstelle und der wachsenden Polymerkette getauscht.

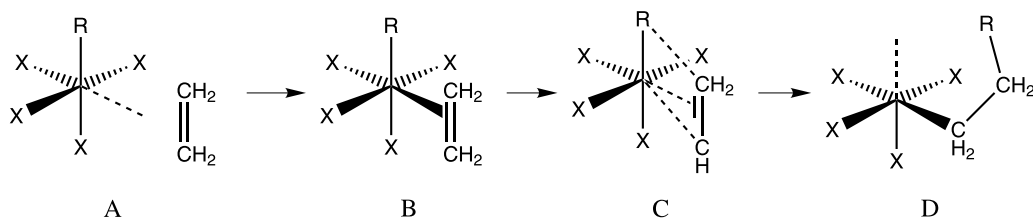


Abbildung 2.3: Mechanismus nach Cossee und Arlman

Pentade[%]	ideal isotaktisch	ideal syndiotaktisch	ideal hemisotaktisch	ideal ataktisch	reale Verteilung bei 10 °C ^a	reale Verteilung bei 70 °C ^a
mmmm	100	-	18.75	6.25	15	44
mmmr	-	-	12.50	12.50	13	17
rmrr	-	-	6.25	6.25	7	3
mmrr	-	-	25.00	12.50	23	15
mmrm/rmr	-	-	-	25.00	3	7
rmrm	-	-	-	12.50	0	0
rrrr	-	100	18.75	6.25	19	3
rrrm	-	-	12.50	12.50	13	3
mrmm	-	-	6.25	6.25	7	9

^a Daten für den Katalysator $iPr(3-iPr-CpFlu)Zr-iBu^+$ (aus [53])

Tabelle 2.1: Verteilung der Pentaden in idealisierten und realen Polymeren

Im Jahre 1967 stellten Henrici-Olivé und Olivé einen auf dem hier vorgestellten basierenden, eigenen Mechanismus für die Ethylenpolymerisation in homogener Phase auf [57]. Hierbei wurde auch die Wichtigkeit der vakanten Koordinationsstelle herausgehoben. Des weiteren wurde die Bedeutung des Aluminium-Alkyls für die Reaktion in homogener Phase betont. Das Alkyl dient laut diesem Mechanismus dazu, dem Ti-Atom eine oktaedrische Koordination aufzuzwingen. Im Jahre 1972 wurde die Vorstellung, dass eine vakante Koordinationsstelle notwendig sei, durch theoretische Berechnungen von Armstrong et al. [58] widerlegt. Allerdings war der Mechanismus der Insertion immer noch nicht ausreichend geklärt. Fink et al. konnten Anfang der 1980er Jahre mit einer Serie von NMR-spektroskopischen Untersuchungen klären, wie die Insertion des Monomeren in die Ti–C Bindung stattfindet [59–62]. Brookhart und Green veröffentlichten 1983 eine Studie, in der ein verfeinerter Mechanismus für die Olefinpolymerisation mit Ziegler-Katalysatoren beschrieben wurde [63]. Hierbei ist die wachsende Polymerkette (R in Abbildung 2.4) mittels einer α -agostischen Wechselwirkung am Metallzentrum fixiert, während sich das Olefin anlagert (A). Während der Insertion (B) bleibt die agostische Bindung bestehen und die anfangs α -agostische Bindung ist nach der Insertion γ -agostisch (C). Im von Brookhart und Green publizierten Mechanismus lagert der γ -agostische Komplex direkt in A um und setzt die Propagation der Kette fort. Durch die von Ziegler durchgeführten DFT-Studien [64–66] konnte geklärt werden, dass die Umlagerung nach der Insertion zu einer β -agostischen Struktur (D) führt, die als ‘resting state’ des Systems bezeichnet wird. Von D aus findet dann die durch das hinzukommende Monomer unterstützte Umlagerung zum α -agostischen π -Komplex A statt und der Zyklus der Insertion beginnt von vorne. Auch in diesem Mechanismus haben die wachsende Polymerkette und die Koordinationsstelle durch die Insertion die Positionen getauscht.

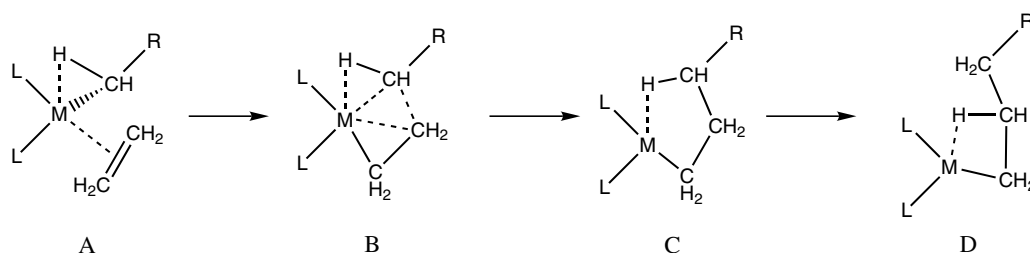


Abbildung 2.4: Mechanismus nach Brookhart und Green, mit Ergänzungen nach T. Ziegler

Zieglers Berechnungen zeigen, dass es für die Insertion des Olefins in die Metall–Kohlenstoffbindung nur eine kleine Barriere zu überwinden gibt. Der höchste Punkt des Energieprofils der Insertion liegt bei der Rotation der Metall–C $_{\alpha}$ –Bindung, die vom β –agostischen Zustand zu einer α –agostischen Struktur führt.

Die bisher betrachteten Modelle sagen nichts über die Art der alternierend zur Verfügung stehenden Koordinationsstellen aus. In einem symmetrischen Katalysator sind beide Stellen chemisch äquivalent und somit findet keine Unterscheidung bei der Anlagerung und damit auch bei der Insertion statt. Bei Ethen als Monomer sind unterschiedliche Anlagerungen und Insertionen ununterscheidbar. Aus diesem Grund beschäftigen sich die nachfolgenden Überlegungen mit Propen als Monomereinheit.

Für das Propenmolekül gibt es zunächst zwei enantiomere Anlagerungsmöglichkeiten an ein Metallzentrum, die im Folgenden mit *re* und *si* bezeichnet werden (siehe Abbildung 2.5). Die Bezeichnung *re* oder *si* gibt an, ob die Liganden am trigonalen Kohlenstoffatom von der Seite, mit der die Koordination stattfinden soll, nach den Prioritätsregeln von Cahn, Ingold und Prelog im Uhrzeigersinn *re* oder gegen den Uhrzeigersinn *si* angeordnet sind.

Da α –Olefine prochiral sind, können sie sich auf 4 verschiedene Arten an das Metallzentrum des Katalysators anlagern (siehe Abbildung 2.6). Die Insertion eines α –Olefins findet bis auf wenige Ausnahmen, die im Rahmen dieser Arbeit nicht besprochen werden, meistens 1,2 statt [67].

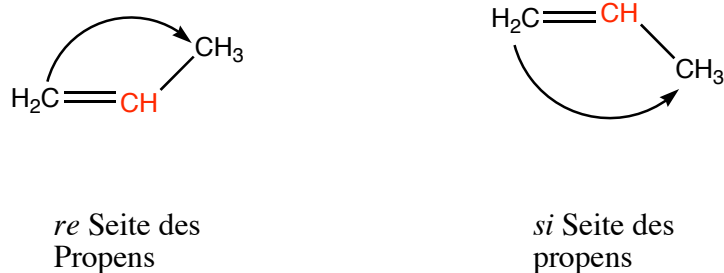


Abbildung 2.5: *re* und *si* Seite des Propens (aus Blickrichtung des koordinierenden Atoms)

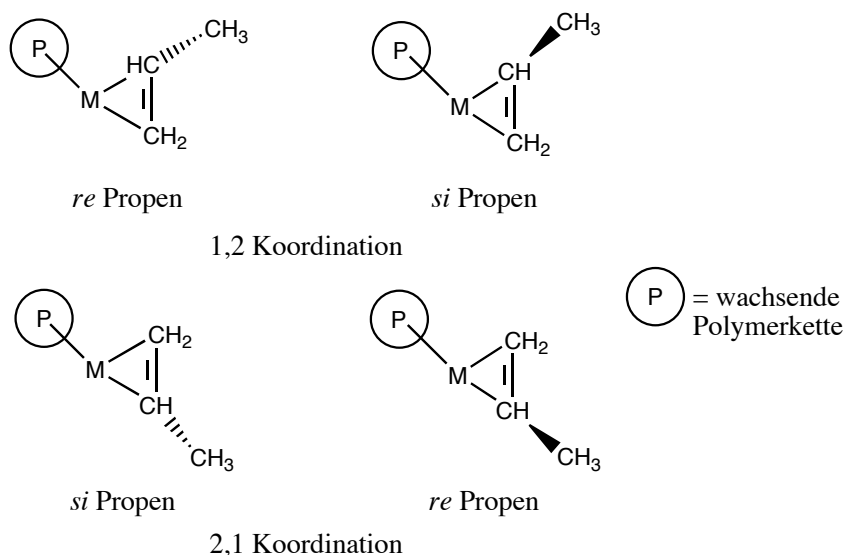


Abbildung 2.6: 1,2 und 2,1 Anlagerung des Propens am Metallzentrum

Ein weiterer Aspekt der Chiralität ergibt sich aus der Tatsache, dass in C_s und C_1 symmetrischen Katalysatoren das Metallatom ein stereogenes Zentrum mit zwei unterschiedlichen Koordinationsstellen darstellt. Die Koordination an die eine oder andere Seite des Metallatoms führt zu R beziehungsweise S Komplexen [68, 69]. Somit ergeben sich 4 mögliche Anordnungen, die mit R_{re} , R_{si} , S_{re} und S_{si} bezeichnet werden (siehe Abbildung 2.7).

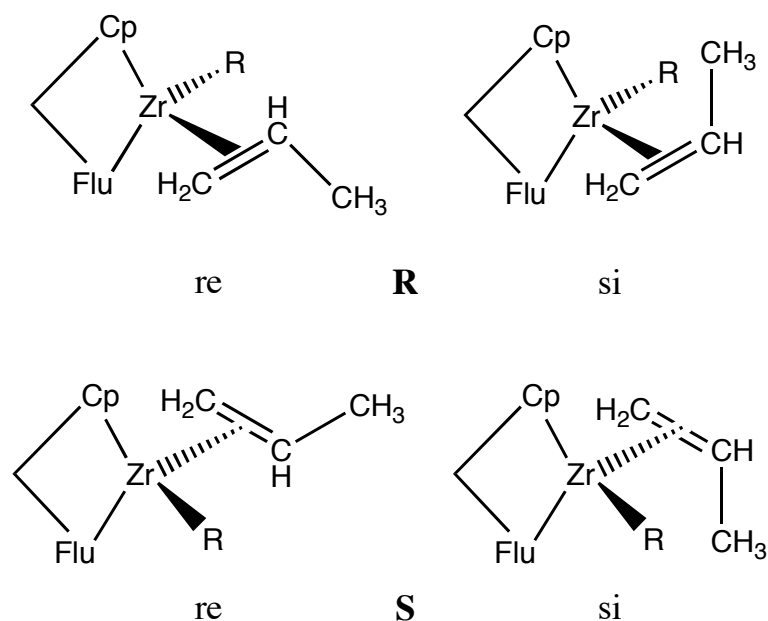


Abbildung 2.7: Die vier möglichen Anordnungen des Propens an einem Katalysator (R=wachsende Polymerkette)

Das Propenmolekül kann lediglich an die nicht von der wachsenden Polymerkette besetzte Seite koordinieren. Während einer normalen Kettenfortpflanzung wandert die Polymerkette zwischen den beiden Seiten hin und her. Daher spielt die entsprechende chirale Induktion der Seiten eine entscheidende Rolle für die Mikrostruktur des entstehenden Polymers.

Ist die Selektivität beider Seiten identisch (homotope Zentren), so ist das entstehende Polymer isotaktisch. Bevorzugt hingegen eine Enantioseite die *re*- und die andere die *si*-Anlagerung des Propens (siehe Abbildung 2.7), so entsteht syndiotaktisches Polymer und man spricht von enantiotopen Zentren. Man erhält schließlich hemiisotaktisches Polymer, wenn eine Seite enantioselektiv und die andere nicht selektiv ist. Der Zusammenhang zwischen der Insertionssequenz bei der Propenpolymerisation und den erhaltenen Pentaden ist in Tabelle 2.2 erläutert.

Pentade	Sequenz
<i>mmmm</i>	$R_{re} \rightarrow S_{re} \rightarrow R_{re} \rightarrow S_{re} \rightarrow R_{re}$
<i>mmmr</i>	$R_{re} \rightarrow S_{re} \rightarrow R_{re} \rightarrow S_{re} \rightarrow R_{si}$
<i>rmmr</i>	$R_{re} \rightarrow S_{si} \rightarrow R_{si} \rightarrow S_{si} \rightarrow R_{re}$
<i>mmrr</i>	$R_{re} \rightarrow S_{re} \rightarrow R_{re} \rightarrow S_{si} \rightarrow R_{re}$
<i>mrmm</i>	$R_{re} \rightarrow S_{re} \rightarrow R_{si} \rightarrow S_{si} \rightarrow R_{si}$
<i>rrmr</i>	$R_{re} \rightarrow S_{si} \rightarrow R_{si} \rightarrow S_{re} \rightarrow R_{si}$
<i>mrmr</i>	$R_{re} \rightarrow S_{re} \rightarrow R_{si} \rightarrow S_{si} \rightarrow R_{re}$
<i>rrrr</i>	$R_{re} \rightarrow S_{si} \rightarrow R_{re} \rightarrow S_{si} \rightarrow R_{re}$
<i>rrrm</i>	$R_{re} \rightarrow S_{si} \rightarrow R_{re} \rightarrow S_{si} \rightarrow R_{si}$
<i>mrrm</i>	$R_{re} \rightarrow S_{re} \rightarrow R_{si} \rightarrow S_{re} \rightarrow R_{re}$

Tabelle 2.2: Insertionssequenz und resultierende Pentade. R und S bezeichnen jeweils die Enantioseite und _{re} und _{si} die Orientierung des Propens (aus [70]).

Angermund, Fink et al. entwickelten ein Modell, um die zu erwartende Verteilung der Pentaden voraussagen [71]. Das Modell setzt den inneren Teil der Struktur des jeweiligen Insertionsübergangszustandes als konstantes ‘Aggregat’ voraus (siehe Abbildung 2.8). Der umgebende Katalysator wird dann mittels eines speziell parametrisierten Kraftfelds optimiert. Aus den erhaltenen Energien können nun über eine Boltzmannverteilung Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten einer bestimmten Insertion berechnet und letztendlich hieraus die Verteilung der Pentaden abgeleitet werden. Für niedrige Reaktionstemperaturen sind die Vorhersagen des Modells sehr nahe an den experimentell gefundenen Werten.

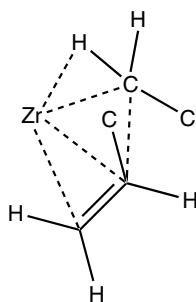


Abbildung 2.8: Schematische Darstellung des in [71] konstant gehaltenen Aggregates

Die Pentadenverteilung und auch das Anwachsen der Fehlerpentaden bei höheren Reaktionstemperaturen lässt sich mittels dieses statistischen Modells qualitativ beschreiben. Das erhaltene Produkt ist also mit zunehmender Temperatur weniger geordnet. Einige Katalysatoren zeigen allerdings ein nicht intuitives Verhalten, das heißt die Ordnung in der Struktur des Polymers nimmt mit steigender Reaktionstemperatur zu. Ein besonders interessantes Beispiel hierfür ist der Katalysatorprecursor $iPr(CpFlu)ZrCl_2$. Die von $iPr(3-R-CpFlu)ZrCl_2$ [44] abgeleiteten C_1 symmetrischen Katalysatoren mit $R = \text{Methyl, Ethyl, iso-Propyl und tert-Butyl}$ ($Cp = \text{Cyclopentadienyl-}$, $Flu = \text{Fluorenyl-Ligand}$; siehe Abbildung 2.9) [46, 53, 70, 72] zeigen alle eine bemerkenswerte Zunahme der Isotaktizität des produzierten Polypropens mit steigender Reaktionstemperatur [53, 70].

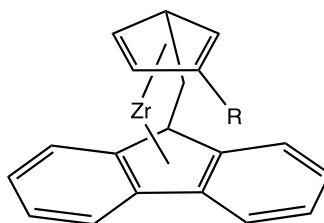


Abbildung 2.9: $iPr(3-R-CpFlu)Zr^+$

Diese Zunahme lässt sich am Anwachsen der Intensität der *mmmm* Pentade im ^{13}C NMR Spektrum des Polypropens ablesen. Der stärkste Effekt konnte im iso-Propyl substituierten Katalysator ($R = iPr$) nachgewiesen werden. Hier stieg die Intensität der *mmmm* Pentade um 29% (von 15 auf 44%) bei einer Erhöhung der Reaktionstemperatur von 10 auf 70°C (siehe Tabelle 2.3) [53]. Fink und Corradini entwickelten Modelle, um den Einfluss der Katalysatorstruktur auf die Mikrostruktur des Polymers zu erklären [70, 73].

Da das auf Kraftfeldrechnungen beruhende Modell allem Anschein nach nicht in der Lage ist, das Verhalten des Katalysators bei erhöhter Reaktionstemperatur korrekt vorherzusagen, liegt es nahe, die Berechnungen für die Energien der Übergangszustände mittels DFT durchzuführen.

Pentade [%]	experimentell bei 10 °C	experimentell bei 70 °C	berechnet bei 10 °C	berechnet bei 70 °C
mmmm	15	44	34	36
mmmr	13	17	15	15
rmmr	7	3	4	4
mmrr	23	15	22	21
mrmm/rmr	3	7	1	2
mrmr	0	0	1	1
rrrr	19	3	8	6
rrrm	13	3	8	7
mrrm	7	9	8	8

Tabelle 2.3: Vergleich zwischen experimentellen und berechneten Pentadenverteilungen für $\text{iPr(3-iPr-CpFlu)Zr}^+\text{Bu}^+$ (aus [53])

2.1.4 Definitionen

Um die nachfolgenden Diskussionen zu vereinfachen, werden hier die später verwendeten Begriffe definiert.

Die Bezeichnung α , β ...-agostische Struktur zeigt an, von welchem Kohlenstoffatom der wachsenden Polymerkette die agostische Wechselwirkung zwischen dem H-Atom und dem Zr-Atom ausgeht. Die Benennung der Kohlenstoffatome in der Kette beginnt bei dem an das Zirkon gebunden C-Atom mit α und wird entlang der Hauptkette weitergeführt.

Im Verlauf der Car-Parrinello Moleküldynamik (CPMD)-Untersuchung werden zwei Torsionswinkel benötigt, die wie folgt definiert sind: Der Torsionswinkel θ_1 wird vom C-Atom der Methylgruppe des Propens über die zu bildende C–C Bindung zum β -C Atoms der Butylkette gebildet. Der Torsionswinkel ϕ_1 wird vom C4 und C3 des Cp-Ringes und dem C_α und H_α des iPr-Substituenten eingeschlossen (siehe Abbildung 2.10).

Für die Untersuchungen mit dem Katalysator $\text{CH}_2\text{Cp}_2\text{Zr}^+$ ist es notwendig, eine Standard-Blickrichtung für das Katalysatormolekül zu definieren. In dieser Arbeit wird der ‘resting state’ des Systems $\text{CH}_2\text{Cp}_2\text{Zr}^+\text{C}_3\text{H}_7$ (1/β2) als Referenz gewählt (siehe Abbildung 2.11).

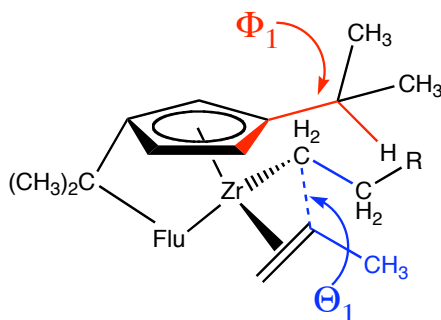
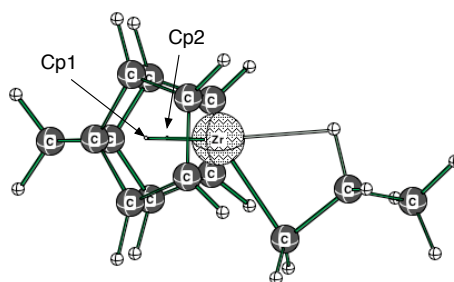


Abbildung 2.10: Definition der betrachteten Torsionswinkel Θ_1 und Φ_1



1β2

Abbildung 2.11: Referenz für die Benennung der Konformere; Cp1 liegt oberhalb der Papierebene, Cp2 darunter.

Alle hieraus abgeleiteten Strukturen werden entsprechend der agostischen Wechselwirkung bezeichnet; die hierzu enantiomeren Strukturen werden mit einem ' gekennzeichnet. Der in dieser Orientierung oberhalb der Papierebene liegende Mittelpunkt des Cp-Rings wird mit Cp1 bezeichnet, der unterhalb der Papierebene liegende mit Cp2. Die beiden Abstände d_α und d_β geben jeweils den Abstand von C_α beziehungsweise C_β von der durch die Mittelpunkte der Cp-Ringe und das Zr-Atom definierten Ebene E_1 an. Hierbei wird durch das Vorzeichen angezeigt, ob das jeweilige Atom über oder unter der Ebene E_1 liegt. Um die relative Lage von C_α und C_β zu beschreiben, wird der Torsionswinkel $\phi(\text{Cp2ZrC}_\alpha\text{C}_\beta)$

eingeführt. Des weiteren wird der Winkel θ wie folgt definiert: $\theta = 360^\circ - \angle \text{Cp1ZrCp2} - \angle \text{Cp1ZrC}\alpha - \angle \text{Cp2ZrC}\alpha$. Dieser Winkel stellt ein Maß für die Nichtplanarität am Zr-Atom dar.

Im Rahmen der ‘Intrinsic Reaction Coordinate’ (IRC) Rechnungen wird von der Reaktionslaufzahl s die Rede sein. Diese Größe stellt ein Maß für den Fortschritt der Reaktion dar. Die absolute Pfadlänge betrug in dem hier untersuchten Fall $94.892 \text{ amu}^{\frac{1}{2}} \text{ bohr}$.

Für die wachsende Polymerkette wurden drei verschiedene α -agostische Komplexe gefunden. Das Kriterium für deren Unterscheidung mit n-Propyl als Modell für die wachsende Polymerkette ist der Torsionswinkel $\angle \text{H}_\alpha \text{C}_\alpha \text{C}_\beta \text{C}_\gamma$. Für i-Butyl als Kettenanalogon dient der Torsionswinkel $\angle \text{H}_\alpha \text{C}_\alpha \text{C}_\beta \text{H}_\beta$ als Kriterium. Die Strukturen mit n-Propyl als Kettenmodell werden durch eine vorgestellte 1 kenntlich gemacht, die Strukturen mit i-Butyl als Kette durch eine vorgestellte 2. Ist der Torsionswinkel $\approx 180^\circ$, so wird die Struktur anti genannt und das Konformer mit $\alpha 1$ benannt. In den gauche Konformeren hat der Torsionswinkel einen Absolutwert von etwa 60° . Ist er negativ, beziehungsweise positiv, so wird das Konformer in dieser Arbeit als gauche 1 ($\alpha 2$) beziehungsweise gauche 2 ($\alpha 3$) bezeichnet (siehe Abbildung 2.12).

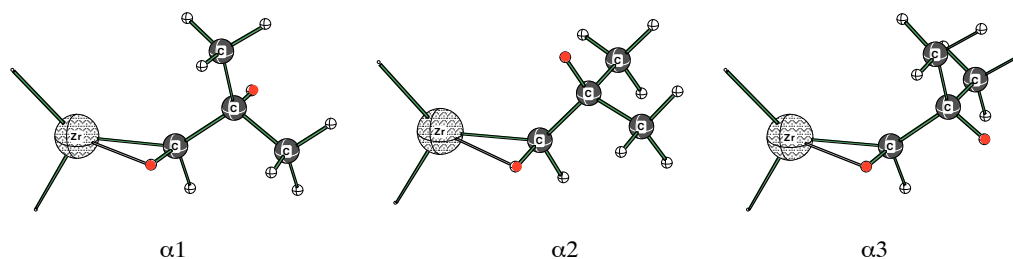


Abbildung 2.12: Definition der drei unterschiedlichen α -agostischen Minima mit i-Bu als Modell für die wachsende Kette. Von links nach rechts: anti, gauche1 und gauche2. Die Cp-Ringe wurden zur klareren Darstellung durch die geometrischen Mittelpunkte ersetzt. Die für die Benennung entscheidenden Wasserstoffatome sind rot eingefärbt.

2.2 DFT-Studie zur Polymerisation von Propen

Übersichtsartikel [67, 71, 74] und spezielle Untersuchungen zur Stereoselektivität der Metallocenkatalysatoren [75–78] belegen, dass DFT als Methode zur Untersuchung von Reaktionen an Metallocenkatalysatoren geeignet ist. Daher lag es nahe, die Übergangszustände der Insertion mit DFT Methoden zu untersuchen. Die verwendeten Funktionale und Basissätze sind in Kapitel 1.3.1 zusammen mit den Details der Rechnungen beschrieben.

2.2.1 Propenpolymerisation mit $\text{iPr}(3\text{-R-CpFlu})\text{ZrCl}_2$

Das bereits weiter oben beschriebene statistische Modell [71] konnte die Pentadenverteilung bis zu einer Reaktionstemperatur von 50 °C gut beschreiben, die auftretenden Pentadenverteilungen bei 70 °C jedoch nicht mehr quantitativ vorher-sagen. Dieses Modell benutzte ein festgehaltenes reaktives Zentrum (Aggregat) in Verbindung mit Kraftfeldrechnungen. Um zu einer besseren und einheitlichen Beschreibung des Katalysators zu kommen, wurden die Übergangszustände der Insertion neu vollständig mit DFT Methoden optimiert. Als Katalysatorprecursor wurde das bereits erwähnte $\text{iPr}(3\text{-R-CpFlu})\text{ZrCl}_2$ (siehe Abbildung 2.9) mit H, iPr und tBu als Rest R gewählt.

Es wurden die vier diastereomeren Übergangszustände für die Insertion des Monomers in die Zr–C Bindung der wachsenden Polymerkette berechnet. Die relativen Energien der vier diastereomeren Übergangszustände zeigen das Muster, welches nach Kenntnis der Taktizität zu erwarten ist (siehe Tabelle 2.4): Der unsubstituierte Katalysator ($\text{R} = \text{H}$) bevorzugt bei der Annäherung des Monomers aus R die *re* Orientierung und bei Annäherung aus S die *si* Orientierung des Monomers. Diese Insertionssequenz ist im Einklang mit dem erhaltenen syndiotaktischen Polymer. Der isopropylsubstituierte Katalysator zeigt eine klare Bevorzugung der *re* Seite für die R Übergangszustände und annähernd gleiche Barrieren für die beiden S Übergangszustände, was gut vereinbar mit dem hemiisotaktischen Polymer ist. Die t-Butylgruppe als Substituent destabilisiert deutlich die R_{si} und die S_{si}

Diastereomere und bevorzugt damit auch gleichzeitig die *re* Anlagerung an R und S. Durch diese Insertionssequenz wird isotaktisches Polymer erhalten.

Katalysator	Energie	R _{re}	R _{si}	S _{re}	S _{si}
R = H	ΔE_0	-1.7	0.3	0.3	-1.7
	ΔG_{283}	11.4	13.2	13.2	11.4
	ΔG_{343}	14.4	16.1	16.1	14.4
R = iPr	ΔE_0	-0.6	2.4	2.6	2.6
	ΔG_{283}	12.6	15.3	15.4	15.7
	ΔG_{343}	15.6	18.2	18.2	18.6
R = tBu	ΔE_0	-1.2	3.3	2.0	3.5
	ΔG_{283}	11.5	15.5	14.4	15.9
	ΔG_{343}	15.3	19.1	18.0	19.6

Tabelle 2.4: Energien [kcal/mol] der Übergangszustände der Propeninsertion relativ zu Katalysator (siehe Abbildung 2.9) und Propen in unendlichem Abstand.

Eine genauere Betrachtung der Energien der Übergangszustände zeigt, dass trotz unterschiedlicher Substituenten die Übergangszustände sehr ähnliche Energiedifferenzen aufweisen. Wie man aus den in Abbildung 2.13 dargestellten Strukturen für die Insertionsübergangszustände ablesen kann, ist im Übergangszustand der Insertion R_{re} der Substituent am Cp-Ring so weit von der wachsenden Polymerkette und dem Propen entfernt, dass er nur einen geringen Einfluss auf die Energie des Übergangszustandes nehmen kann. Die relativen Energien der Übergangszustände für R_{si} und S_{si} sind hingegen stark von dem sterischen Anspruch des Substituenten R abhängig. Der Abstand zwischen dem Substituenten (für R=iPr oder tBu) und der Methylgruppe des Propens (R_{si}) oder der wachsenden Kette (S_{si}) kann zu sterischer Wechselwirkung und daraus folgend zu höheren Energien der Übergangszustände führen.

Für den Katalysator mit R = tBu wurde in der Literatur postuliert, dass die Insertionssequenz auf Grund des großen sterischen Anspruchs des Substituenten nur (R_{re}-R_{re}-R_{re}-R_{re}) sei, der Katalysator also nach jeder Insertion von R aus durch eine Inversion am Zr-Atom direkt wieder zu einem Ruhezustand mit R Konformation zurückkehren solle (back-skip, siehe Abbildung 2.17) [46, 79–81]. Dies

ist eine mögliche Erklärung für das erhaltene isotaktische Polypropen, die sich aber nach unseren Rechnungen als unrichtig herausstellt. Der im Fall $R = tBu$ auftretende Energieunterschied zwischen R_{re} und S_{re} (3.2 kcal/mol) ist ebenso hoch wie im Fall $R = iPr$ und kann nicht als unüberwindbar angesehen werden.

Die erhaltenen Energien der Übergangszustände lassen sich mit den experimentell bestimmten Pentadenverteilungen [53] mittels des statistischen Modells von Angermund et al. [71] in Relation setzen. Das Modell führt zu unterschiedlichen Präferenzen der Enantioseiten. Seine Vorhersagen sind für niedrige Reaktionstemperaturen sehr genau (siehe Tabelle 2.5). So beträgt die mittlere quadratische Abweichung (root mean square derivation RMS) der aus den $\Delta\Delta E_0$ (DFT) berechneten von den experimentell bestimmten Pentadenverteilungen weniger als 2 % für alle drei Katalysatoren. Die Vorhersagen werden bei höheren Temperaturen weniger präzise (siehe Tabelle 2.5), wie auch schon bei den früheren molekülmechanischen Rechnungen [71, 82] gefunden wurde.

Aus der Beobachtung, dass sich im Falle $R = \text{Ethyl}$ oder iso-Propyl der Substituent immer so ausrichtet, dass ein Wasserstoff-Atom in Richtung des Zirkons zeigt, entstand die Idee zu überprüfen, ob es dynamische Effekte gibt, die den sterischen Anspruch des Substituenten größer werden lassen. So könnte während der Reaktion die iso-Propyl Gruppe durch Rotation einen ähnlich großen sterischen Anspruch wie die tBu -Gruppe haben, oder es könnten andere dynamische Effekte auftreten. Um Aufschluss über solche und andere in den statischen Rechnungen vernachlässigten Effekte zu erhalten, wurden im Folgenden dynamische Simulationen durchgeführt.

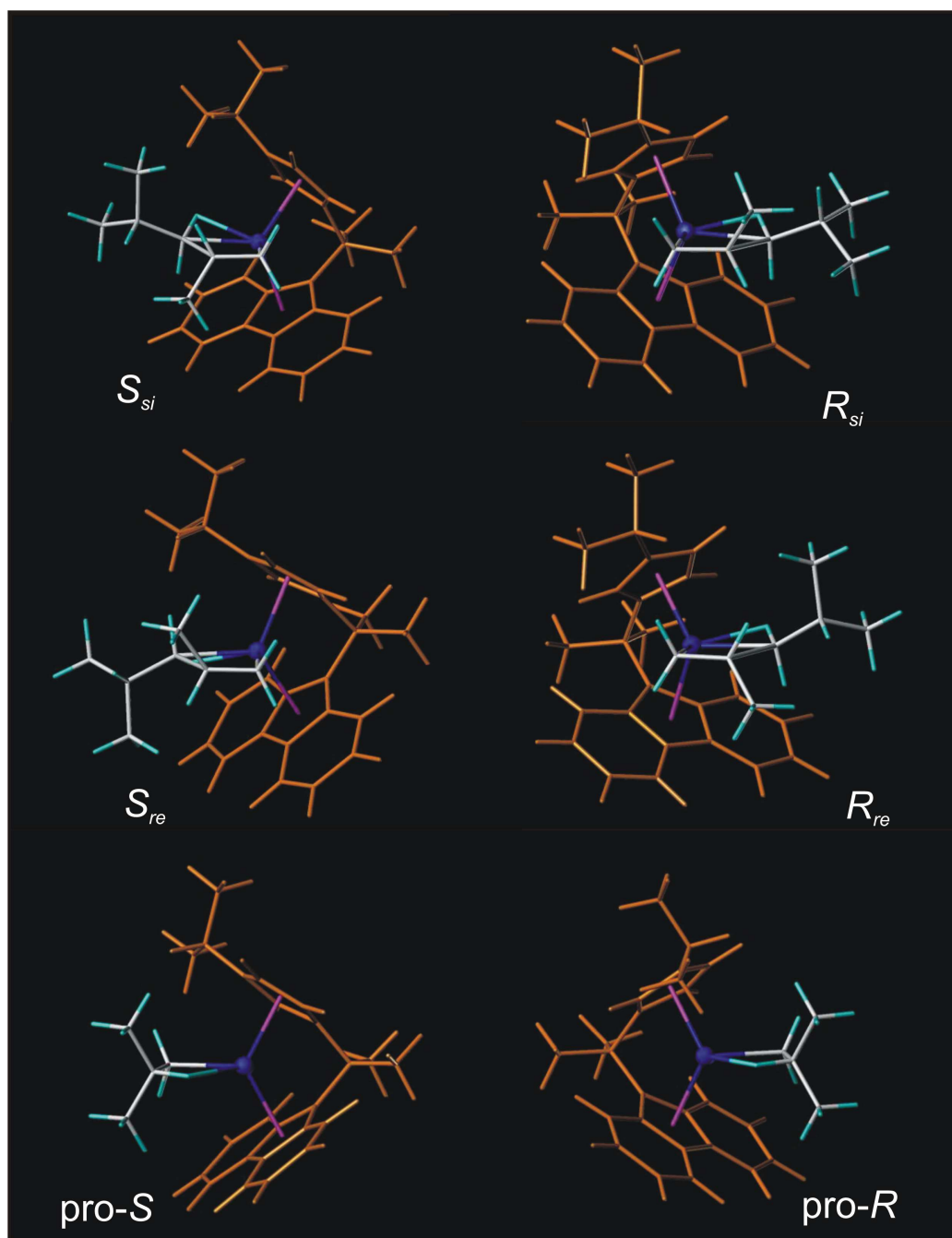


Abbildung 2.13: Optimierte Strukturen der β -agostischen ‘Ruhezustände’ für $[iPr(3-iPr-CpFlu)Zr-iBu]^+$ (unten) und die Übergangszustände der Propenininsertion für $[iPr(3-iPr-CpFlu)Zr-iBu(C_3H_6)]^+$. Farbschema: Ligand: braun; Mittelpunkt der Cp-Ringe: pink; Zr-Atom: blau; Wasserstoffatome des Propens und der iBu-Gruppe: hellblau; Kohlenstoffatome des Propens und der iBu-Gruppe: hellgrau.

Katalysator ^a	T [°C]	Level	Selektivität ^b		Pentaden [%]												Fit [%] ^c RMS
			$\Delta E(R)$	$\Delta E(S)$	<i>mmmm</i>	<i>mmmr</i>	<i>mmrr</i>	<i>mmrr</i>	<i>mmrr</i>	<i>mmrr</i>	<i>mmrr</i>	<i>rrrr</i>	<i>rrrr</i>	<i>rrrr</i>	<i>rrrr</i>	<i>rrrr</i>	
R = H	10	ΔE_0	2.0	-2.0	0	0	2	5	0	0	0	87	5	0	0	0	1.42
	10	ΔG	1.8	-1.8	0	0	3	7	1	0	0	81	7	0	0	0	2.70
	10	Expt.	2.4	-2.4	0	0	1	2	1	0	0	93	3	0	0	0	0.29
	70	ΔE_0	2.0	-2.0	0	0	4	8	1	0	0	78	8	0	0	0	5.45
	70	ΔG	1.8	-1.8	0	1	5	11	2	1	1	69	11	0	0	0	4.43
	70	Expt.	1.5	-1.5	0	2	2	5	12	3	59	18	0	0	0	0	3.14
R = iPr	10	ΔE_0	3.0	0.1	21	13	6	25	1	0	16	12	7	7	7	7	1.75
	10	ΔG	2.6	0.3	33	15	4	23	1	0	9	8	7	7	7	7	4.50
	10	Expt.	2.0	0.0	15	13	7	23	3	0	19	13	7	7	7	7	0.50
	70	ΔE_0	3.0	0.1	20	13	6	24	1	1	16	12	7	7	7	7	7.84
	70	ΔG	2.5	0.4	31	15	4	22	2	1	8	8	7	7	7	7	4.55
	70	Expt.	1.2	1.1	44	17	3	15	7	0	3	4	9	9	9	9	0.98
R = tBu	10	ΔE_0	4.5	1.5	85	6	0	6	0	0	0	0	0	3	3	3	0.83
	10	ΔG	4.0	1.5	86	5	0	6	0	0	0	0	0	3	3	3	1.00
	10	Expt.	3.6	1.4	82	7	0	8	0	0	0	0	0	3	3	3	0.31
	70	ΔE_0	4.5	1.5	78	8	0	8	0	0	0	1	4	4	4	4	2.04
	70	ΔG	3.9	1.5	80	7	0	8	0	0	0	1	4	4	4	4	1.74
	70	Expt.	3.8	1.9	88	6	0	5	0	0	0	0	2	2	2	2	0.28

^a siehe Abbildung 2.9^b Selektivität der Enantioseiten, d. h. $\Delta E(R) = E(R_{si}) - E(R_{re})$. Die experimentellen Werte wurden unter der Annahme enantiomorpher Stereokontrolle und alternierender Propagation auf die experimentell gefundenen Pentadenverteilungen gefittet.^c Berechnet aus der Intensität der Pentadensignale, mit einer Nachkommastelle.**Tabelle 2.5:** Berechnete und experimentell gefundene Pentadenverteilung im Polypropen

2.2.2 CPMD Simulation von $\text{iPr(3-iPr-CpFlu)Zr(C}_4\text{H}_9\text{)}^+$

Die Car-Parrinello-Molekül-Dynamik (CPMD) ist eine attraktive Methode zur Untersuchung großer Reaktionssysteme. Sie wurde schon mehrfach auf übergangsmetallkatalysierte Olefinpolymerisation angewandt. Eine Serie von Untersuchungen an heterogenen, auf MgCl_2 als Trägermaterial aufgetragenen Ziegler-Natta Katalysatoren [83–88] ermöglichte ein tieferes Verständnis dieser heterogenen Katalysereaktionen. Aus Untersuchungen mit einem ‘constrained’ CPMD Ansatz konnten Einblicke in die Reaktionswege des Kettenwachstums und der Kettenabbruchsreaktionen bei der homogenen Metallocenkatalyse gewonnen werden [65, 89–93].

Bei der Untersuchung von $\text{iPr(3-iPr-CpFlu)Zr(C}_4\text{H}_9\text{)}^+ + \text{C}_3\text{H}_6$ mit CPMD, die nachfolgend beschrieben wird, richteten wir besonderes Augenmerk auf das Verhalten des iPr-Substituenten an Position 3 des Cp-Ringes [94].

Im Vorfeld der MD-Simulationen wurden mit dem CPMD Programm eine Serie von Geometrieoptimierungen der Zirkon-Propen Komplexe durchgeführt. Wie in den vorherigen Rechnungen wurde hier auch iBu als Modell für die wachsende Polymerkette verwendet. Als energetisch günstigstes Kettenkonformer stellte sich die mit $\alpha 1$ bezeichnete Struktur heraus (siehe Abbildung 2.12). Das Propen wurde ‘backside’ zur α -agostischen Wechselwirkung platziert und diese Strukturen als Startpunkte für die Berechnung der Reaktionspfade der Propenininsertion in die Zr-iBu Bindung ausgewählt (α -agostische π -Komplexe). Die vier diastereomeren Übergangszustände der Insertion zeigten relativ zu den α -agostischen π -Komplexen Barrieren im Bereich von 0.5–1.1 kcal/mol. Daher könnte eine spontane Insertion im Verlauf der Simulation beobachtet werden.

Es wurden Simulationen mit konstant gehaltener Teilchenzahl, Volumen und Temperatur (NVT) der vier diastereomeren π -Komplexe R_{re} , R_{si} , S_{re} und S_{si} bei 70° C durchgeführt, was einer typischen Reaktionstemperatur im Experiment entspricht, bei der das Anwachsen der Fehlerpentaden beobachtet werden konnte.

Die Abstände zwischen dem Zirkonatom und dem Mittelpunkt der C–C Doppelbindung (BMP) des Propens sind in Abbildung 2.14 gezeigt. Drei der vier α -agostischen π -Komplexe (R_{re} , R_{si} und S_{si}) verlieren das Propen im Laufe der Si-

mulation. Die beiden Komplexe mit *re* Orientierung des Propens sind gegenüber der Dissoziation des π -Komplexes deutlich stabiler als die beiden *si* Komplexe. Das R_{re} Diastereomer existiert für mehr als 12 ps und die S_{re} Form bleibt die gesamten 22.45 ps der Simulation intakt. Bei beiden *si* Diastereomeren beginnt die Dissoziation des π -Komplexes innerhalb der ersten Picosekunde. Dieser Befund wurde durch je zwei unabhängige CPMD Rechnungen für beide Komplexe bestätigt.

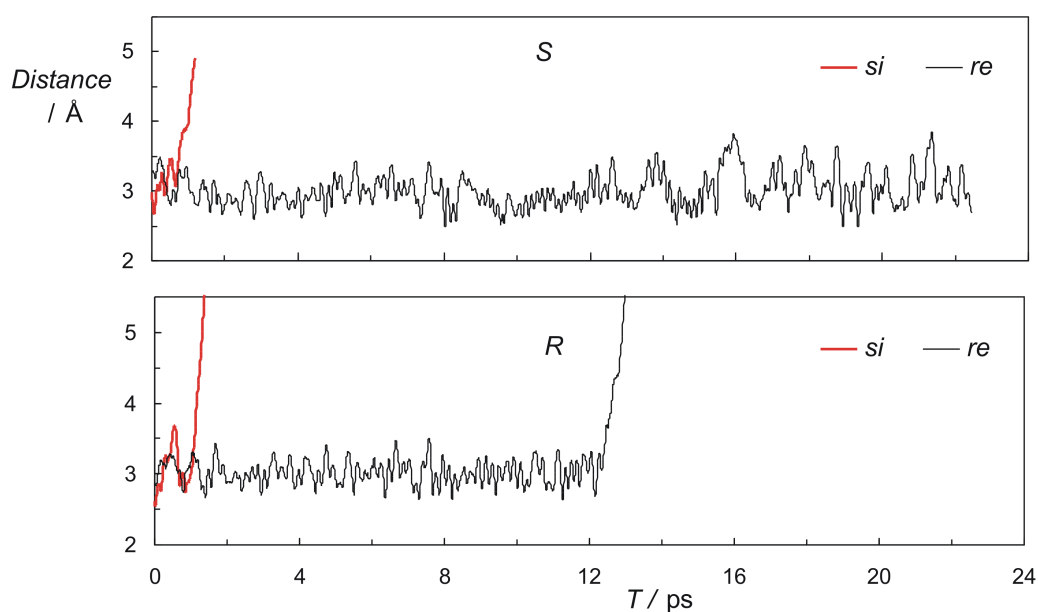


Abbildung 2.14: Abstand zwischen Zr und dem Bindungsmittelpunkt der Doppelbindung des Propens

Deshalb werden nunmehr die *re* Trajektorien genauer analysiert, insbesondere die des R_{re} Diastereomers. Es ist auf Grund der kleinen Barrieren aus den statischen Rechnungen (siehe oben) überraschend, dass keinerlei Anzeichen einer beginnenden Insertion des Propens während der Simulation gefunden werden konnten. Die C–C Abstände der zu bildenden Bindung bleiben bei durchschnittlich hohen Werten (4.21 Å für S_{re} und 3.88 Å für R_{re} (Abbildung 2.15)). Diese sind deutlich größer als jene in den α -agostischen Ausgangsstrukturen und nicht vereinbar mit einer beginnenden Insertion des Propens. Nur einmal während aller Simulatio-

nen fiel der C–C Abstand unter 3 Å (S_{re} nach 17.48 ps). Der durchschnittliche Zr–BMP Abstand ist auch deutlich größer als in den Ausgangsstrukturen.

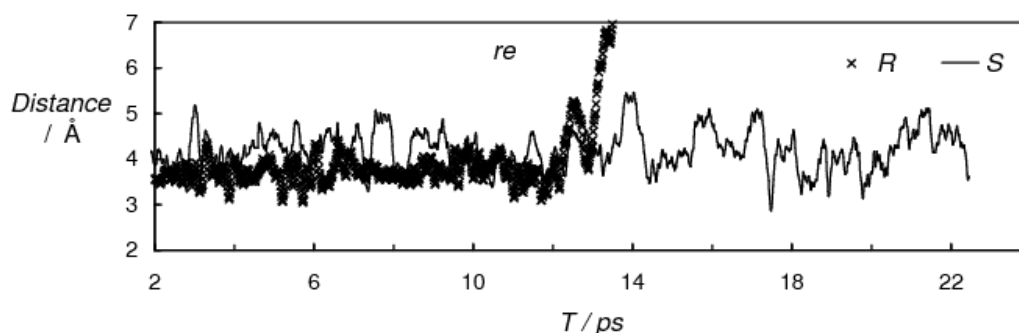


Abbildung 2.15: Abstand zwischen den beiden Kohlenstoff-Atomen der zu bildenden Bindung

Ein indirektes Indiz für die Vorgänge während der Reaktion sind die Abstände der Wasserstoffatome, die mit dem Zr-Atom agostisch wechselwirken können. Wie aus Abbildung 2.16 oben hervorgeht, bleibt der Abstand zwischen H_β und Zr über die gesamte Trajektorie zu groß (> 2.66 Å), um eine agostische Wechselwirkung zu ermöglichen. Für die beiden H_α Atome zeigt sich jedoch ein anderes Bild. Zu Beginn der Simulation besteht eine agostische Wechselwirkung mit einem H_α Atom, die etwa 10 ps lang erhalten bleibt. Dann bildet das andere H_α Atom eine agostische Bindung zum Zr, die allerdings auch nur einige ps bestehen bleibt. In der Folge bilden sich zwei etwa gleich starke agostische Wechselwirkungen zwischen den beiden H_α Atomen und dem Zr Atom aus. Bei der Annäherung des Monomeren wird sich diese zweifach agostische Struktur in eine einfach α -agostische Struktur umlagern, um anschließend zu insertieren.

Um dem Verlauf der Reaktion folgen zu können, wurden zwei Torsionswinkel genauer betrachtet. Θ_1 und Φ_1 sind wie in Abbildung 2.10 definiert. Θ_1 beschreibt die relative Position des Propenmoleküls und Φ_1 die Rotation des iso-Propylsubstituenten am Cp-Ring.

Die Ergebnisse für den Torsionswinkel Θ_1 zeigen, dass das Propenmolekül in dem schwach koordinierten Komplex relativ ungehindert rotieren kann (siehe Abbildung 2.16). Bei etwa 11 ps findet eine stärkere Auslenkung des Propens statt,

bei der sich die anfangs annähernd parallel zur $\text{Zr}-\text{C}_\alpha$ Bindung liegende Doppelbindung aufrichtet. Der iPr -Substituent oszilliert bei Werten zwischen 60 und 80 ° über einen Großteil der Trajektorie (siehe Abbildung 2.16). Nach etwa 12 ps findet eine Rotation um die Cp-iPr Bindung statt, die gleichzeitig mit einer Vergrößerung des Abstandes zwischen dem Mittelpunkt der Doppelbindung des Propens und des Zr -Atoms einhergeht (siehe Abbildung 2.14 unten, schwarze R_{re} Kurve).

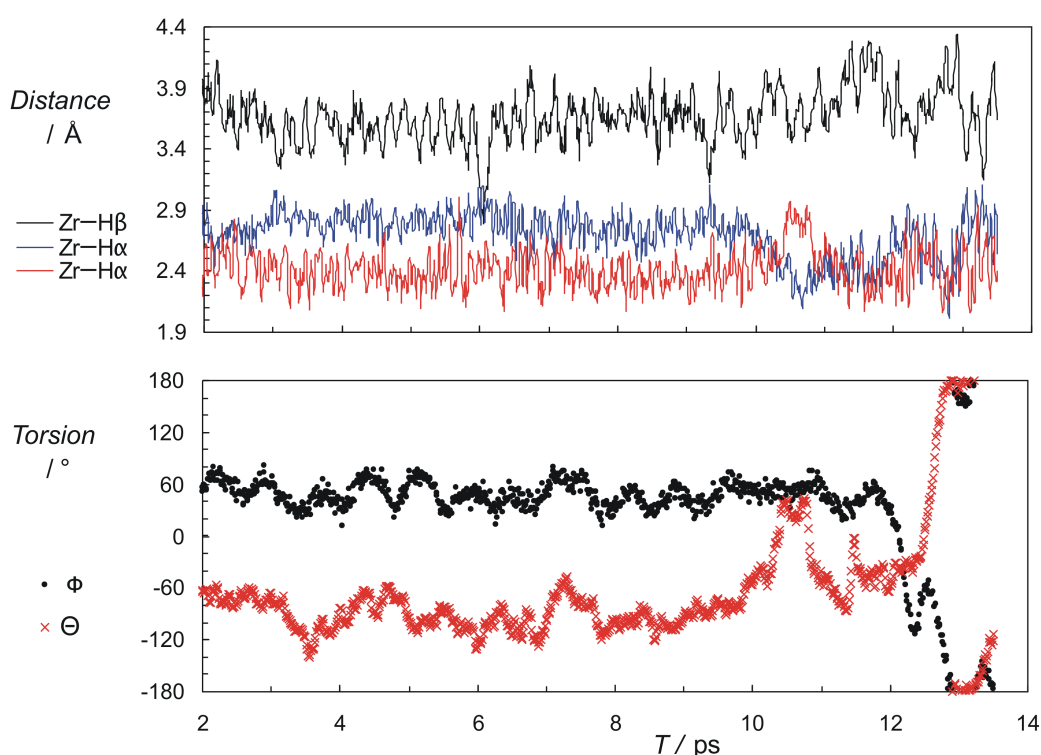


Abbildung 2.16: C–H Abstände und Torsionswinkel Θ_1 und Φ_1

Aus diesen Ergebnissen lässt sich folgern, dass die Rotation des iPr -Substituenten nicht frei, sondern an die sterischen Gegebenheiten während der Insertion gekoppelt ist. Die Frage, welcher Effekt für die Zunahme der S_{re} Insertionen verantwortlich ist, lässt sich also noch nicht abschließend beantworten. Die von Fink et al. postulierte These, der sterische Anspruch des iPr -Substituenten gleiche durch Ro-

tation dem einer tBu-Gruppe, kann durch unsere Rechnungen somit nicht bestätigt werden.

Der untersuchte Zirkonocen-Propenkomplex bevorzugt in den CPMD-Simulationen eindeutig die Dissoziation an Stelle der Insertion. Wie auch in den Propagationsmodellen angenommen worden war, werden daher jeder Insertion einige Anlagerungs- und Abspaltungszyklen vorangehen, so dass jede Insertion unabhängig voneinander betrachtet werden kann. Während der Dynamikrechnung wurde die normalerweise mit einer kleinen Amplitude stattfindende Rotation um die Cp-iPr Bindung zu einer Bewegung mit großer Amplitude, die eher Dissoziation als Insertion auszulösen vermag.

Zu den Auswirkungen der Substituenten am Cp-Ring auf die relativen Energien der Übergangszustände der Propeninsertion: Wie bereits weiter oben berichtet, werden die R_{re} und S_{re} Übergangszustände kaum durch den sterischen Druck des Substituenten beeinflusst. Der S_{re} Übergangszustand wird jedoch durch die Substituenten $R = iPr$ und tBu destabilisiert. Die von uns berechneten Barrieren für die Insertion (Tabelle 2.4) legen die Vermutung nahe, dass der t-Butyl substituierte Katalysator hauptsächlich durch Insertionssequenzen der Art $R_{re}-S_{re}-R_{re}-S_{re}$ isotaktisches Polypropen erzeugen kann. Auf Grund der Tatsache, dass wir keinen Hinweis auf eine Blockade der S-Seite durch den tBu Substituenten finden konnten, besteht kein Anlass zu postulieren, der Katalysator verwende nur Insertionssequenzen mit R_{re} -Diastereomeren ($R_{re}-R_{re}-R_{re}-R_{re}$) [46, 79–81].

Zusammenfassend ist festzuhalten, dass die Aussagekraft der durchgeführten CPMD-Simulationen wegen des Fehlens von Insertionsvorgängen begrenzt ist. So kann die experimentell beobachtete deutliche Zunahme der isotaktischen *mmmm* Pentaden bei höherer Reaktionstemperatur im Falle $R=iPr$ nicht erklärt werden.

Die Diskrepanz zwischen der beobachteten starken Bevorzugung der Abdissoziation des Propens und der experimentell gesicherten Aktivität des Katalysators könnte durch die unterschiedlichen Konzentrationsverhältnisse im Experiment und in der Simulation bedingt sein. Im realen System liegt viel mehr Monomer vor, was die Insertionsreaktion begünstigt. Auch könnte ein Käfigeffekt des Solvens eine Rolle spielen. Aus den Experimenten ist bekannt, dass mit steigender Konzentration des Monomers weniger Stereofehler auftreten [95].

2.3 Der back-skip Mechanismus

Die Modelle für die Polymerisation, die strenge Alternanz der Stereoseiten voraussetzen, können die Pentadenverteilung in Polypropen bei höheren Reaktionstemperaturen nicht korrekt beschreiben. Daher liegt es nahe, nach Reaktionswegen zu suchen, die eine ähnlich hohe Barriere wie die Insertion aufweisen. Ein möglicher Reaktionsweg ist die insertionslose Inversion am Metallzentrum. Für diesen Vorgang gibt es unterschiedliche Reaktionsmechanismen, wie die Epimerisierung des reaktiven Zentrums, die über eine Ablösung des α -Wasserstoffatoms mit anschließender Umlagerung und Rückübertragung des Wasserstoffatoms abläuft [96], oder das "Zurückspringen" der Kette, welches auch back-skip genannt wird und Gegenstand der folgenden Untersuchung ist [97, 98]. Bei diesem Vorgang wechselt die wachsende Polymerkette die Stereoseite, ohne ein weiteres Monomer zu insertieren (siehe Abbildung 2.17). Hieraus resultieren zwei Insertionen auf der selben Enantioseite.

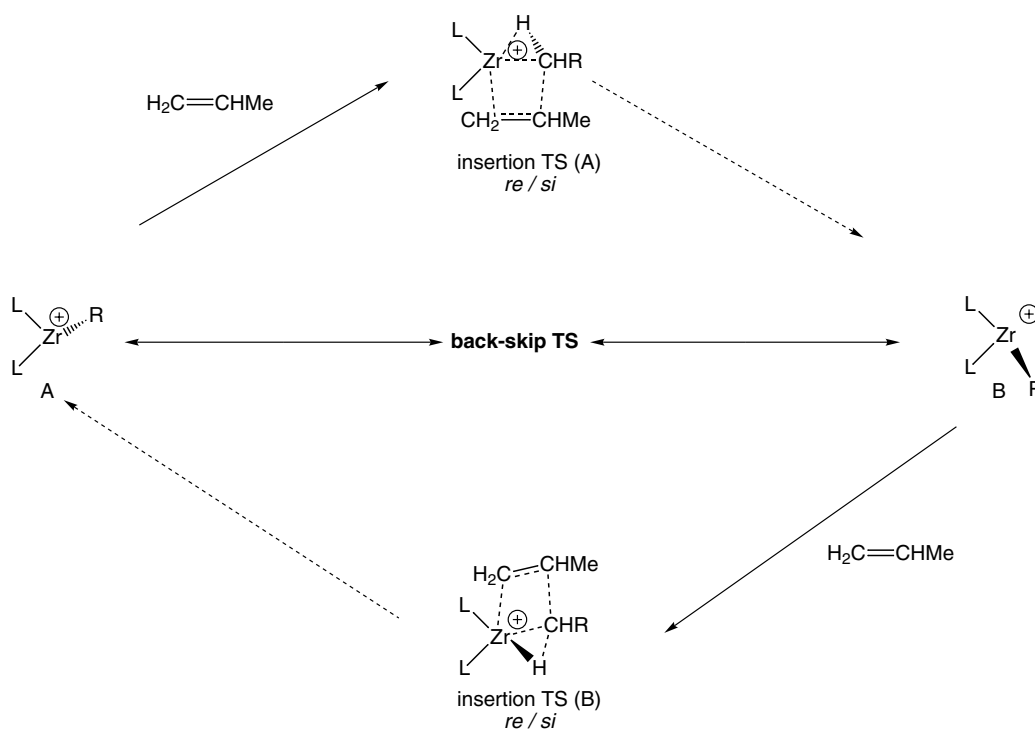


Abbildung 2.17: Kettenfortpflanzung und back-skip

Bei einem Katalysator mit homotopen Zentren führt diese insertionslose Inversion zu keiner Änderung der Mikrostruktur des Polymers, aber bei Katalysatoren mit stark unterschiedlichen Bevorzugung einer Enantioseite kann diese Reaktion der Hauptgrund für das Auftreten von Stereofehlern sein. Als Beispiel mag der syndio-spezifische Katalysator $\text{Me}_2\text{C}(\text{CpFlu})\text{ZrCl}_2$ dienen. Bei diesem Katalysator ist die vorherrschende Pentade *rrrr*, die bei 10° C mit 93% dem ideal syndiotaktischen Polymer sehr nahe kommt. Führt man die Polymerisation allerdings bei 70° C durch, so sinkt die Häufigkeit der *rrrr* Pentade auf 59%. Ein so drastischer Abfall der syndio-Spezifität kann durch ein Modell, das auf alternierender Insertion beruht und keine konkurrierende Reaktionen in Betracht zieht, nicht erklärt werden. Ähnlich große Temperaturabhängigkeiten der Stereoselektivität wurden auch bei der C_1 -symmetrischen Klasse von Katalysatoren der Form $\text{Me}_2\text{C}(3 - \text{R} - \text{CpFlu})\text{ZrCl}_2$ gefunden. Für diese Art von Katalysatoren ist die Entwicklung eines theoretischen Modells zur genauen Vorhersage der Mikrostruktur des entstehenden Polymers besonders wichtig und hilfreich, da es oft schwierig ist, mittels Symmetriebetrachtungen oder visueller Inspektion die Stereoselektivität der Enantioseiten abzuschätzen.

In Analogie zu den für die Insertion gefundenen Strukturen sind in dieser Untersuchung vier Kettenorientierungen anzunehmen. Diese vier unterscheidbaren Orientierungen sind in Abbildung 2.18 dargestellt.

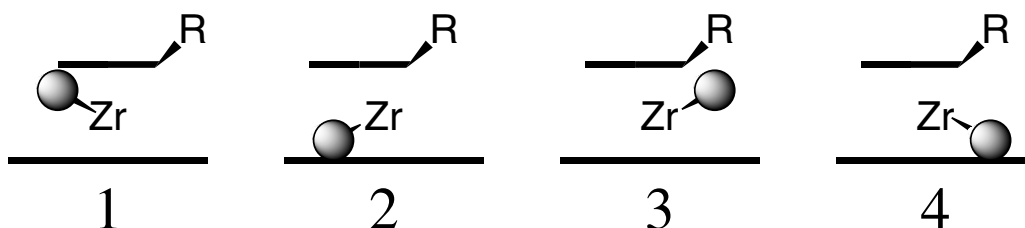


Abbildung 2.18: Die vier prinzipiellen Anordnungsmöglichkeiten einer punktförmigen Kette an einem Katalysator mit zwei unterscheidbaren π -Liganden

Um die Komplexität des zu untersuchenden Problems niedrig zu halten, wurde ein möglichst kleines Modellsystem für den Katalysator ausgewählt. Die beiden

π -Liganden werden durch zwei Cp-Ringe modelliert. Um die Stereorigidität der ansa-Zirkonocene mit möglichst geringem Aufwand nachbilden zu können, wurde Methyliden (CH_2) als Modell für die Brücke zwischen den beiden Cp-Ringen gewählt. Da durch die Ununterscheidbarkeit der beiden π -Liganden die in Abbildung 2.18 mit 1 und 4 sowie die mit 3 und 2 bezeichneten Strukturen identisch werden, gibt es dann nur noch zwei relevante Anordnungen (siehe Abbildung 2.19).



Abbildung 2.19: Die zwei enantiomeren Anordnungen einer punktförmigen Kette an einem Katalysator mit ununterscheidbaren π -Liganden

In dem hier untersuchten System muss also nur jeweils eine Struktur des Enantiomerenpaares berechnet werden, da sich die anderen für den Mechanismus relevanten Strukturen durch Inversion und Drehung erzeugen lassen. Damit verringert sich der Rechenaufwand im Vergleich zum in Abbildung 2.18 dargestellten Fall auf ein Viertel. Die Komplexität des zu untersuchenden Problems hängt auch von der Struktur und Länge der als Modell für die wachsende Polymerkette verwendeten Alkylkette ab, da jedes Kettenkonformer betrachtet werden muss. Die einfachste vorstellbare Kette ist n-Propyl, wie es im Experiment nach der ersten Insertion von Ethen in die Zr-Methylbindung entsteht. In dem entsprechenden Modellsystem ist die Unterscheidung des back-skips von einer regulären Insertion experimentell nicht möglich, weil aus der Struktur des Polymeren bei Ethen – im Gegensatz zu Propen – auf Grund der fehlenden Methylgruppe kein Rückschluss von der Polymerstruktur auf die Insertionssequenz gezogen werden kann. Trotz dieser Beschränkungen ist das System wegen seiner Größe und geringen Komplexität für eine erste theoretische Untersuchung des back-skip Mechanismus geeignet.

2.3.1 n-Propyl als Modell für die wachsende Polymerkette

Die Hauptreaktionswege der Ethenpolymerisation wurden in den Veröffentlichungen von Ziegler et al. [64–66] geklärt. Der ‘resting state’ (Ruhezustand) der Ethenpolymerisation ist der β -agostische Komplex, an den ‘frontside’ oder ‘backside’ zur β -agostischen Wechselwirkung ein neues Monomer koordinieren kann, siehe Abbildung 2.4. Hierauf findet die Insertion des Monomers in die Zr-C $_{\alpha}$ Bindung statt. Die anschließende Umlagerung aus der resultierenden γ - bzw. δ -agostischen Struktur zurück zum β -agostischen ‘resting state’ ist sehr leicht möglich. Dem Mechanismus des back-skip ist bisher in der Literatur erstaunlich wenig Aufmerksamkeit geschenkt worden. Aus diesem Grund ist eine mechanistische Studie des back-skips erforderlich. Um mit den anderen Arbeiten aus unserer Gruppe [99] konsistent zu sein und um die erhaltenen Ergebnisse mit den bereits vorhandenen zu einem gemeinsamen Modell zusammenführen zu können, wurde im Rahmen dieser Arbeit mit den bereits etablierten und erprobten Basissätzen und Funktionalen gearbeitet (siehe Kapitel 1.3.1).

Durch die Insertion von Ethen in die Zr-Methyl-Bindung entsteht eine γ -agostische Struktur $1\gamma1$, die sich in den 3 kcal/mol stabileren β -agostischen ‘resting state’ $1\beta2$ überführen lässt (siehe Abbildung 2.20).

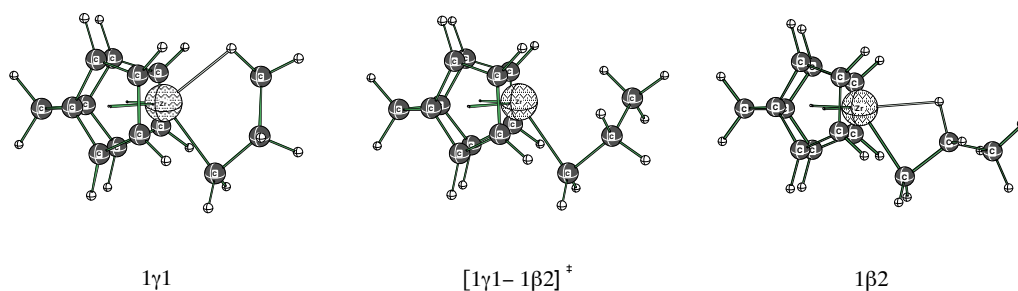


Abbildung 2.20: Strukturen $1\gamma1$, $[1\gamma1 - 1\beta2]^{\ddagger}$ und $1\beta2$

Das nahezu energiegeliche Konformer $1\beta1$ ist von $1\beta2$ über eine niedrige Barriere zugänglich (siehe Abbildung 2.21).

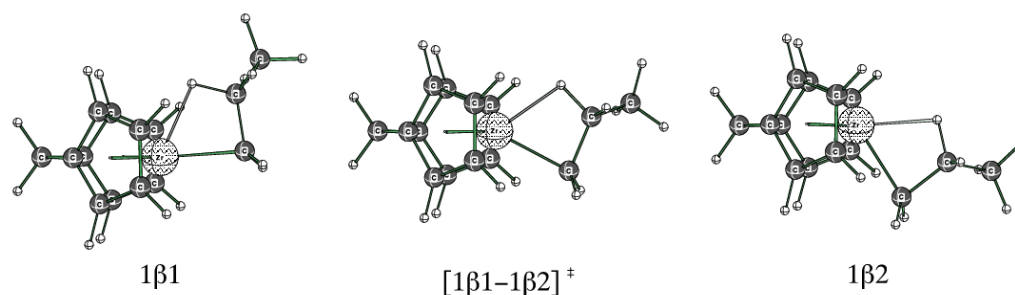


Abbildung 2.21: Strukturen $1\beta 1$, $[1\beta 1 - 1\beta 2]^{\ddagger}$ und $1\beta 2$

Der back-skip soll als insertionslose Umlagerung eines ‘resting state’ in den ‘resting state’ der anderen Enantioseite (von 1 nach 3 in Abbildung 2.18) definiert werden. Als Ausgangspunkt wurde deshalb der ‘resting state’ $1\beta 2$ gewählt. Durch Vergleich der beiden enantiomeren Strukturen $1\beta 2$ und $1\beta 2'$ wird es offensichtlich, dass es keinen einstufigen Mechanismus gibt, der beide ‘resting states’ miteinander verbindet. Als mögliche Zwischenstufen für die Inversion der Stereochemie am Metallzentrum kommen die α -agostischen Komplexe in Betracht, da sie bereits nahe an einer planaren Koordination am Zr sind, die ja im Übergangszustand des back-skips durchlaufen werden muss.

Der β -agostische Komplex $1\beta 2$ ist über den Übergangszustand $[1\beta 2 - 1\alpha 3]^{\ddagger}$ mit der α -agostischen Struktur $1\alpha 3$ verbunden (siehe Abbildung 2.22). $1\alpha 3$ kann über den C_s symmetrischen Übergangszustand $[1\alpha 3 - 1\alpha 2']^{\ddagger}$ in $1\alpha 2'$ umgelagert werden (siehe Abbildung 2.23). Hierbei ist zu beachten, dass die Bezeichnung der α -agostischen Strukturen nach geometrischen Kriterien erfolgt (siehe Abbildung 2.12) und daher $1\alpha 2'$ die zu $1\alpha 3$ enantiomere Struktur ist. Der Reaktionsweg auf der anderen Enantioseite entspricht dem bisher beschriebenen Weg, lediglich ist die Chiralität der einzelnen Strukturen invertiert (siehe Abbildung 2.29). Für eine Hälfte des Reaktionspfades $1\beta 2 \rightarrow 1\alpha 3 \rightarrow 1\alpha 2' \rightarrow 1\beta 2'$ wurde eine IRC (Intrinsic Reaction Coordinate) Rechnung durchgeführt, die später diskutiert werden wird.

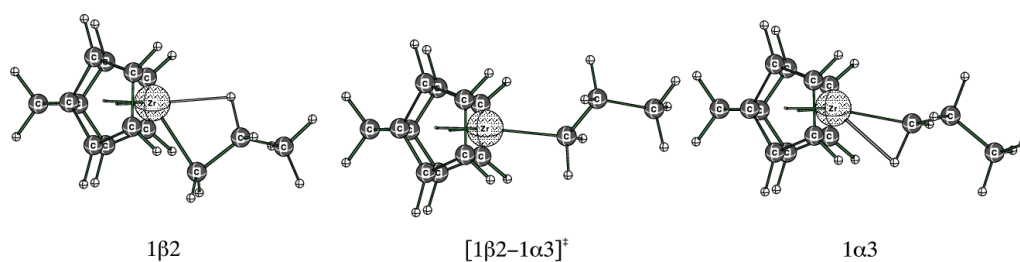


Abbildung 2.22: Strukturen $1\beta 2$, $[1\beta 2 - 1\alpha 3]^{\ddagger}$ und $1\alpha 3$

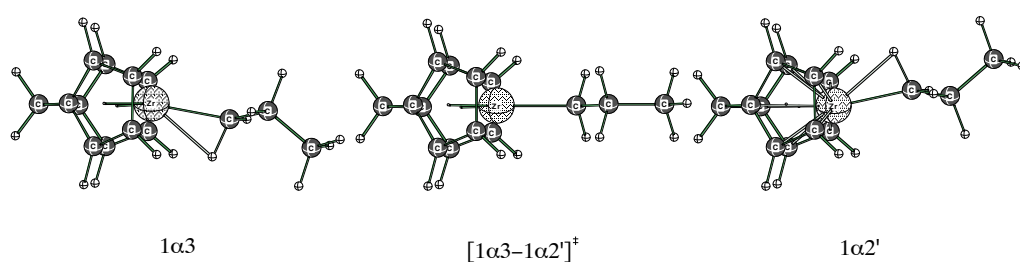


Abbildung 2.23: Strukturen $1\alpha 3$, $[1\alpha 3 - 1\alpha 2']^{\ddagger}$ und $1\alpha 2'$

Es gibt noch zwei weitere α -agostische Konformere mit unterschiedlicher Orientierung der n-Propyl Kette, $1\alpha 1$ und $1\alpha 2$. Für die Umwandlung aus $1\gamma 1$ nach $1\alpha 1$ wurde ein Übergangszustand gefunden (siehe Abbildung 2.24). Die dritte α -agostische Struktur, $1\alpha 2$ ist schließlich von $1\beta 1$ aus über $[1\beta 1 - 1\alpha 2]^{\ddagger}$ zugänglich (siehe Abbildung 2.25).

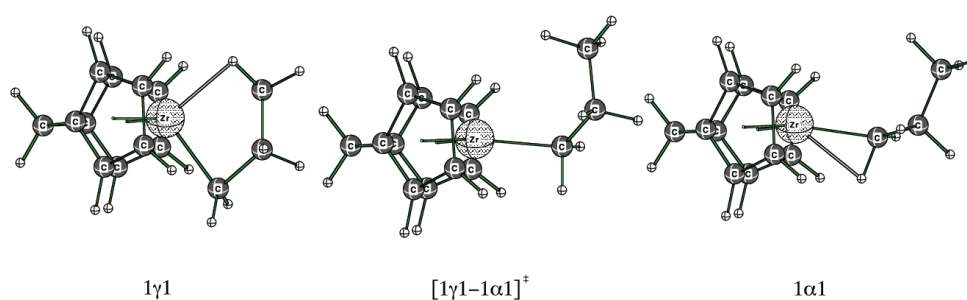


Abbildung 2.24: Strukturen $1\gamma 1$, $[1\gamma 1 - 1\alpha 1]^{\ddagger}$ und $1\alpha 1$

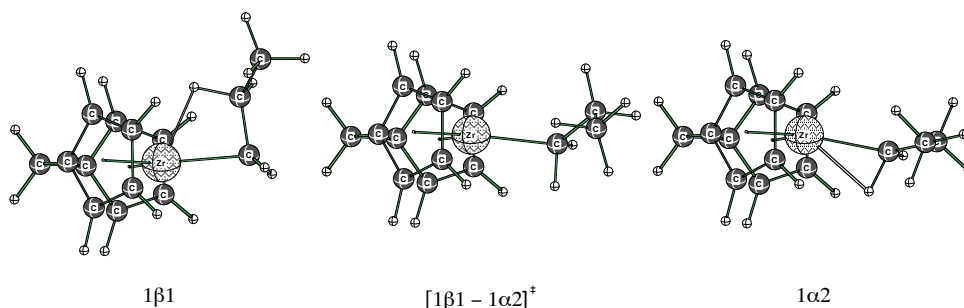


Abbildung 2.25: Strukturen $1\beta 1$, $[1\beta 1 - 1\alpha 2]^{\ddagger}$ und $1\alpha 2$

$1\alpha 2$ kann über einen C_s symmetrischen Sattelpunkt zweiter Ordnung weiter nach $1\alpha 3'$ umlagern. Diese C_s symmetrische Struktur $[1\alpha 2 - 1\alpha 3']^{\ddagger}$ ist ein Sattelpunkt zweiter Ordnung, über die auch die Umlagerung von $1\alpha 1$ nach $1\alpha 1'$ stattfindet (siehe Abbildung 2.26). Folgt man den jeweiligen Schwingungsmoden der imaginären Frequenzen, so wird die Symmetrie so gebrochen, dass die entsprechenden α -agostischen Minima erreicht werden.

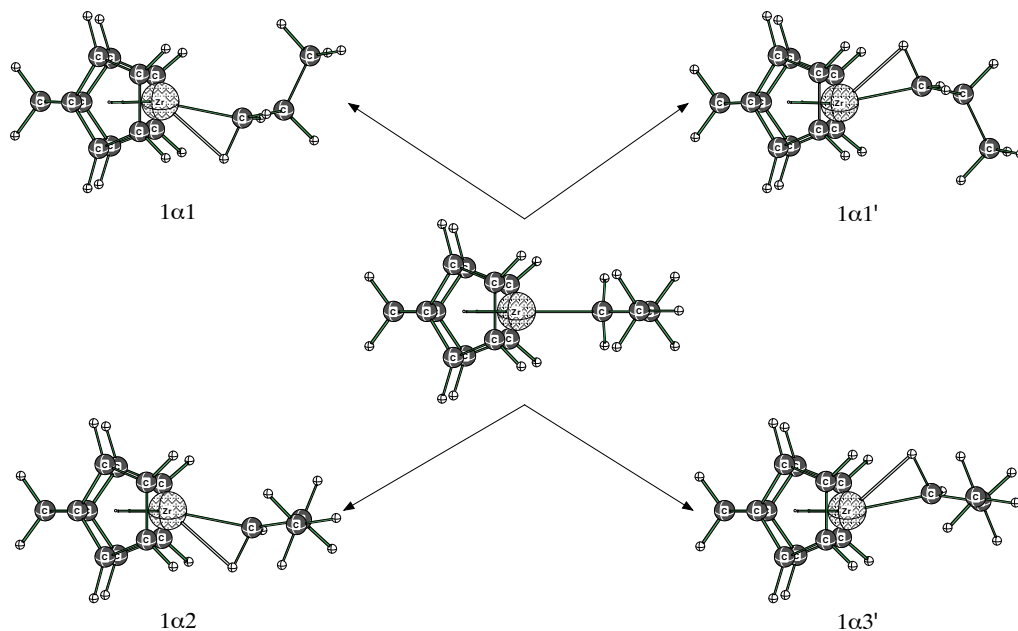


Abbildung 2.26: Strukturen, die über den Sattelpunkt 2. Ordnung miteinander verbunden sind

Es existieren noch zwei enantiomere, unsymmetrische Übergangszustände zwischen $1\beta 1$ und $1\alpha 1'$ sowie zwischen $1\alpha 1$ und $1\beta 1'$ (siehe Abbildung 2.27).

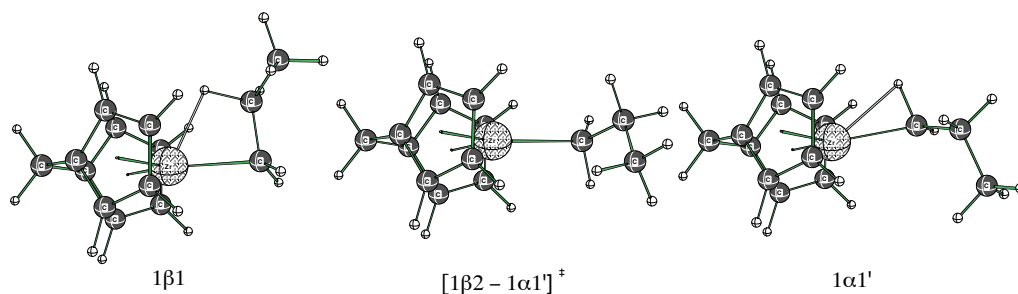


Abbildung 2.27: Strukturen $1\beta 1$, $[1\beta 1 - 1\alpha 1']^\ddagger$ und $1\alpha 1'$

Mit den gefundenen Minima und Übergangszuständen lassen sich mehrere Reaktionspfade aufstellen (siehe Abbildung 2.28):

- $1\beta 2 \rightarrow 1\alpha 3 \rightarrow 1\alpha 2' \rightarrow 1\beta 2'$: Dieser Reaktionsweg wurde durch IRC Rechnungen verifiziert und hat als höchsten Punkt (10.7 kcal/mol) den Übergangszustand $[1\alpha 3 - 1\alpha 2']^\ddagger$.
- $1\gamma 1 \rightarrow 1\alpha 1 \rightarrow 1\alpha 1' \rightarrow 1\gamma 1'$: Hier ist der C_s -symmetrische Sattelpunkt zweiter Ordnung $[1\alpha 1 - 1\alpha 1']^\ddagger$ mit 17.1 kcal/mol der höchste Punkt.
- $1\beta 2 \rightarrow 1\beta 1 \rightarrow 1\alpha 2 \rightarrow 1\alpha 3' \rightarrow 1\beta 1' \rightarrow 1\beta 2'$ ist der andere, über den Sattelpunkt zweiter Ordnung verlaufende Mechanismus. Die relative Energie des höchsten Punktes beträgt hier auch 17.1 kcal/mol.
- $1\gamma 1 \rightarrow 1\alpha 1 \rightarrow 1\alpha 3 \rightarrow 1\alpha 2' \rightarrow 1\beta 2'$: Die relative Energie des höchsten Punktes dieses Reaktionspfades beträgt 11.6 kcal/mol bei dem Übergangszustand $[1\alpha 1 \rightarrow 1\alpha 3]^\ddagger$.
- $1\gamma 1 \rightarrow 1\alpha 1 \rightarrow 1\alpha 3' \rightarrow 1\beta 1' \rightarrow 1\beta 2'$ hat den höchsten Punkt bei dem Übergangszustand $[1\alpha 1 - 1\alpha 3']^\ddagger$ mit einer relativen Energie von 12.3 kcal/mol.

- $1\beta 2 \rightarrow 1\beta 1 \rightarrow 1\alpha 2 \rightarrow 1\alpha 1' \rightarrow 1\gamma 1'$ geht über den zu $[1\alpha 1 - 1\alpha 3']^\ddagger$ enantiomeren Übergangszustand $[1\alpha 2 - 1\alpha 1']^\ddagger$. Die relative Energie des höchsten Punktes beträgt hier ebenso 12.3 kcal/mol.

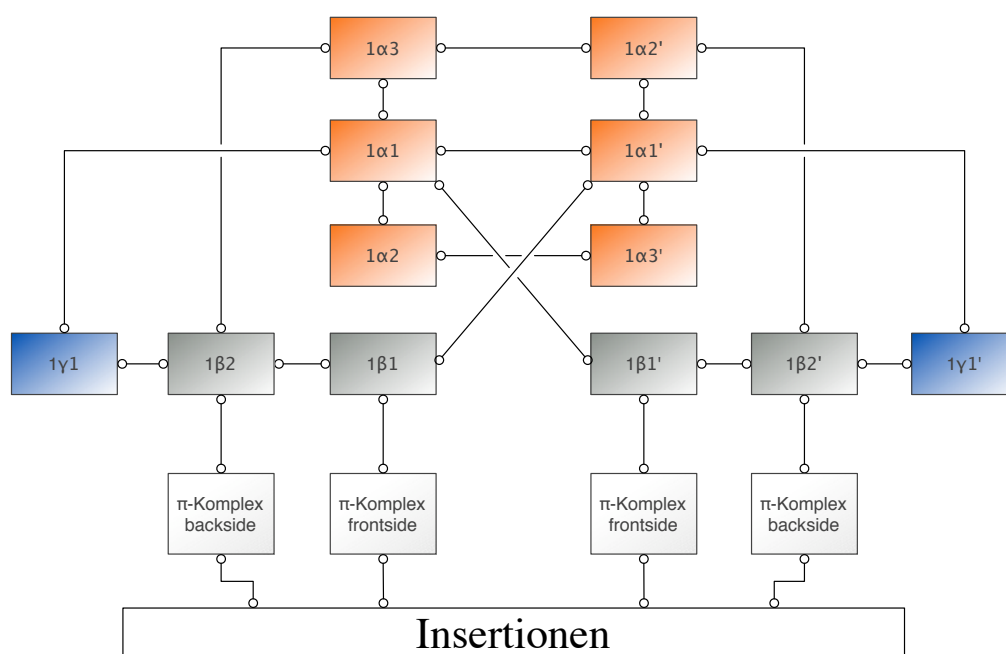


Abbildung 2.28: Die Reaktionswege des Systems $[\text{H}_2\text{C}(\text{Cp})_2\text{ZrC}_3\text{H}_7]^+ + \text{C}_2\text{H}_4$. Auf die Darstellung der Übergangszustände wurde der Übersichtlichkeit halber verzichtet

Um den Reaktionspfad des back-skip Prozesses mit den niedrigsten Barrieren zu identifizieren und die Minima mit den Übergangszuständen zu verknüpfen, wurden von den Übergangszuständen ausgehend ‘Intrinsic Reaction Coordinate’ (IRC) Rechnungen durchgeführt. Der hier untersuchte Pfad führt von $1\beta 2$ über $[1\beta 2 - 1\alpha 3]^\ddagger$ nach $1\alpha 3$ und von dort über $[1\alpha 3 - 1\alpha 2']^\ddagger$ nach $1\alpha 2'$. In Abbildung 2.29 ist der energetische Verlauf dieses Pfades des back-skip Mechanismus aufgetragen, wie er aus den IRC Rechnungen erhalten wurde.

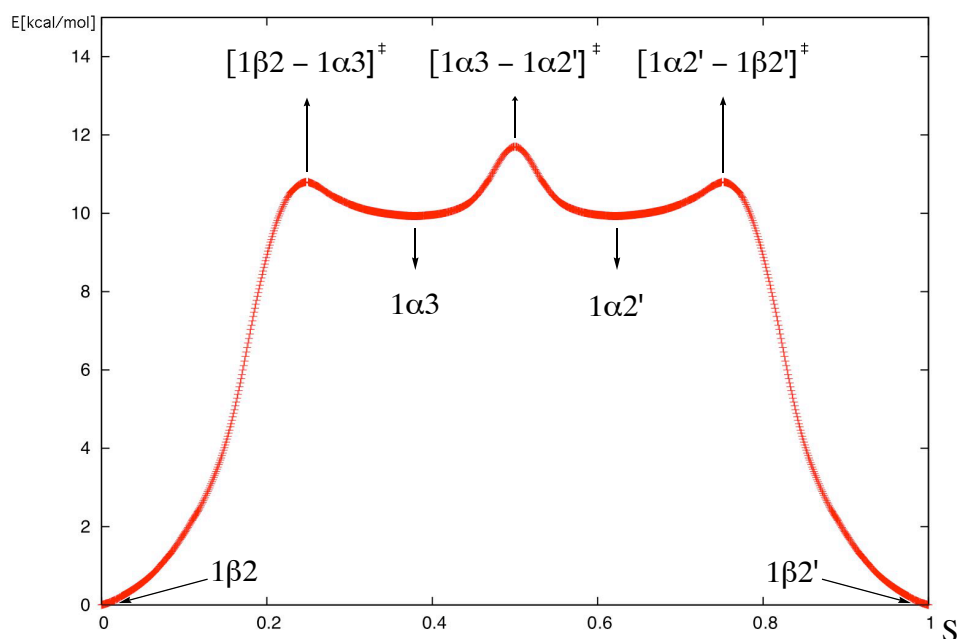


Abbildung 2.29: Verlauf der Energien für den back-skip Pfad $1\beta2 - 1\alpha3 - 1\alpha2' - 1\beta2'$ als Funktion der Reaktionslaufzahl S

Der Ausgangspunkt für den back-skip Prozess ist der 'resting state' $1\beta2$. Der Weg bis zum ersten Übergangszustand $[1\beta2 - 1\alpha3]^\ddagger$ kann in zwei Phasen aufgeteilt werden: eine Phase mit moderatem Anstieg der Energie (bis $s \approx 0.12$) und einer Phase sehr steilen Anstiegs der Energie. Die Bewegung der Propylgruppe auf dem Weg zum Übergangszustand $[1\beta2 - 1\alpha3]^\ddagger$ entspricht in der ersten Phase einer reinen Änderung des Winkels zwischen dem Kohlenstoffatom der verbrückenden Methylidengruppe, dem Zr-Atom und C_α von 127° in $1\beta2$ zu 149° . Während dieser ersten Phase bleibt die β -agostische Wechselwirkung bestehen und die Energie steigt nur langsam. Steigt der Wert der Reaktionslaufzahl S über 0.12, kann die starke β -agostische Wechselwirkung nicht mehr aufrecht erhalten werden, was einen starken Anstieg der Energie zur Folge hat. Die Rotation um die Zr- C_α Bindung bringt eines der H_α Atome in die Nähe des Zr-Atoms, so dass eine agostische

Wechselwirkung gebildet werden kann. Der Winkel $\angle \text{ZrC}_\alpha\text{H}_\alpha$ verringert sich auf dem Weg zum Übergangszustand von 118° ($1\beta 2$) zu 98° in $[1\beta 2 - 1\alpha 3]^\ddagger$. Mit der Verringerung des Winkels $\angle \text{ZrC}_\alpha\text{H}_\alpha$ auf schließlich 77° in $1\alpha 3$ geht auch die Bildung der α -agostischen Bindung einher. Die $\text{C}_\alpha - \text{H}_\alpha$ Bindung wird von $1.095 \text{ \AA}$ in $1\beta 2$ über $1.121 \text{ \AA}$ in $[1\beta 2 - 1\alpha]^\ddagger$ auf $1.155 \text{ \AA}$ in $1\alpha 3$ elongiert. Die imaginäre Frequenz beträgt für den Übergangszustand $77i \text{ cm}^{-1}$. Die zugehörige Schwingungsmode zeigt eine große Änderung im $\angle \text{ZrC}_\alpha\text{C}_\beta$ Winkel. Wie man aus den kleinen Werten für θ ($\theta = 360^\circ - \angle \text{Cp1ZrCp2} - \angle \text{Cp1ZrC}_\alpha - \angle \text{Cp2ZrC}_\alpha$) ($< 2^\circ$) ablesen kann, ist der Komplex in der Region um die α -agostische Struktur quasi planar. Die starke Elongation der α -agostischen Bindung (5 pm) zeigt, dass die hier vorliegende agostische Wechselwirkung ähnlich stark wie im β -agostischen Fall ist (6 pm). Auf dem Weg zum Übergangszustand $[1\alpha 3 \rightarrow 1\alpha 2']^\ddagger$ beobachten wir nun einen Austausch dieser starken α -agostischen Wechselwirkung gegen zwei schwächere α -agostische Wechselwirkungen (Elongation nur 2 pm), was einen Anstieg in der Energie zur Folge hat. Der Abstand d_α , der ein sensibleres Maß für die Abweichung von der Planarität darstellt, zeigt, dass das $\text{L}_2\text{ZrC}_\alpha$ -Gerüst in der Nähe der Übergangszustände $[1\beta 2 \rightarrow 1\alpha 3]^\ddagger$ ($0.26 \text{ \AA}$) und $[1\alpha 3 \rightarrow 1\alpha 2']^\ddagger$ ($0.00 \text{ \AA}$) beinahe planar, jedoch in der Nähe des α -agostischen Minimums etwas gebogen ist ($0.47 \text{ \AA}$). Im Übergangszustand des back-skips liegt C_β in E_1 ($\beta = 0$), was aus der Rotation um die $\text{Zr}-\text{C}_\alpha$ Bindung resultiert. Im Übergangszustand sind beide agostischen $\text{C}_\alpha - \text{H}_\alpha$ Bindungen wenig ($1\text{-}2 \text{ pm}$) elongiert. Die der imaginären Frequenz von $99i \text{ cm}^{-1}$ entsprechende Schwingungsmode zeigt lediglich eine die C_s Symmetrie brechende Rotation der Propylkette. Diese Rotation, die sich auch gut an Hand des Torsionswinkels ϕ ablesen lässt, bewirkt ebenfalls, dass ein Wechsel der agostischen Wechselwirkung von einem zum anderen der beiden α -Wasserstoffatomen stattfindet.

Die relativen Energien und wichtige geometrische Parameter der optimierten Strukturen sind in Abbildung 2.30 und Tabelle 2.6 dargestellt.

Verbindung	Zr-C α [Å]	d α [Å] ^a	d β [Å] ^a	ϕ [°] ^b	θ [°] ^c	ΔG_{298} [kcal/mol] ^d
1 γ 1	2.216	-1.806	-0.868	133.9	27.7	3.0
1 β 1	2.244	0.142	1.629	84.4	9.1	0.1
1 β 2	2.157	-1.861	-0.912	121.7	28.5	0.0
1 α 1	2.192	-0.477	-0.287	164.9	1.7	8.9
1 α 2	2.198	-0.464	-0.278	158.7	1.6	11.0
1 α 3	2.197	-0.474	-0.293	165.9	1.6	8.9
[1 γ 1 - 1 α 1] [‡]	2.207	-0.334	0.477	139.2	0.8	10.8
[1 γ 1 - 1 β 2] [‡]	2.239	-1.874	-0.934	131.7	30.3	5.3
[1 β 1 - 1 β 2] [‡]	2.233	1.062	-0.330	108.6	8.1	1.7
[1 β 2 - 1 α 3] [‡]	2.209	-0.234	0.279	132.4	0.4	10.3
[1 α 1 - 1 α 2] [‡]	2.197	-0.614	-0.479	160.2	2.8	13.4
[1 α 1 - 1 α 3] [‡]	2.191	-0.523	-0.364	164.7	2.1	11.6
1 α 1 - 1 α 1'	2.211	0.000	0.000	0.0	0.0	17.1
1 α 2 - 1 α 3'	2.210	0.000	0.000	0.0	0.0	10.7
1 α 3 - 1 α 2'	2.215	0.001	0.370	0.0	162.4	12.3
1 β 1 - 1 α 1'						
1 α 1 - 1 β 1'						

^a Abstand zu E₁ (siehe Kapitel 2.1.4)^b Torsionswinkel Cp2ZrC α C β ,^c $\theta = 360^\circ - \angle \text{Cp1ZrCp2} - \angle \text{Cp1ZrC}\alpha - \angle \text{Cp2ZrC}\alpha$,^d $\Delta \Delta G_{298}$ relativ zu 1 β 2**Tabelle 2.6:** Geometrische Daten und Energien der berechneten stationären Punkte

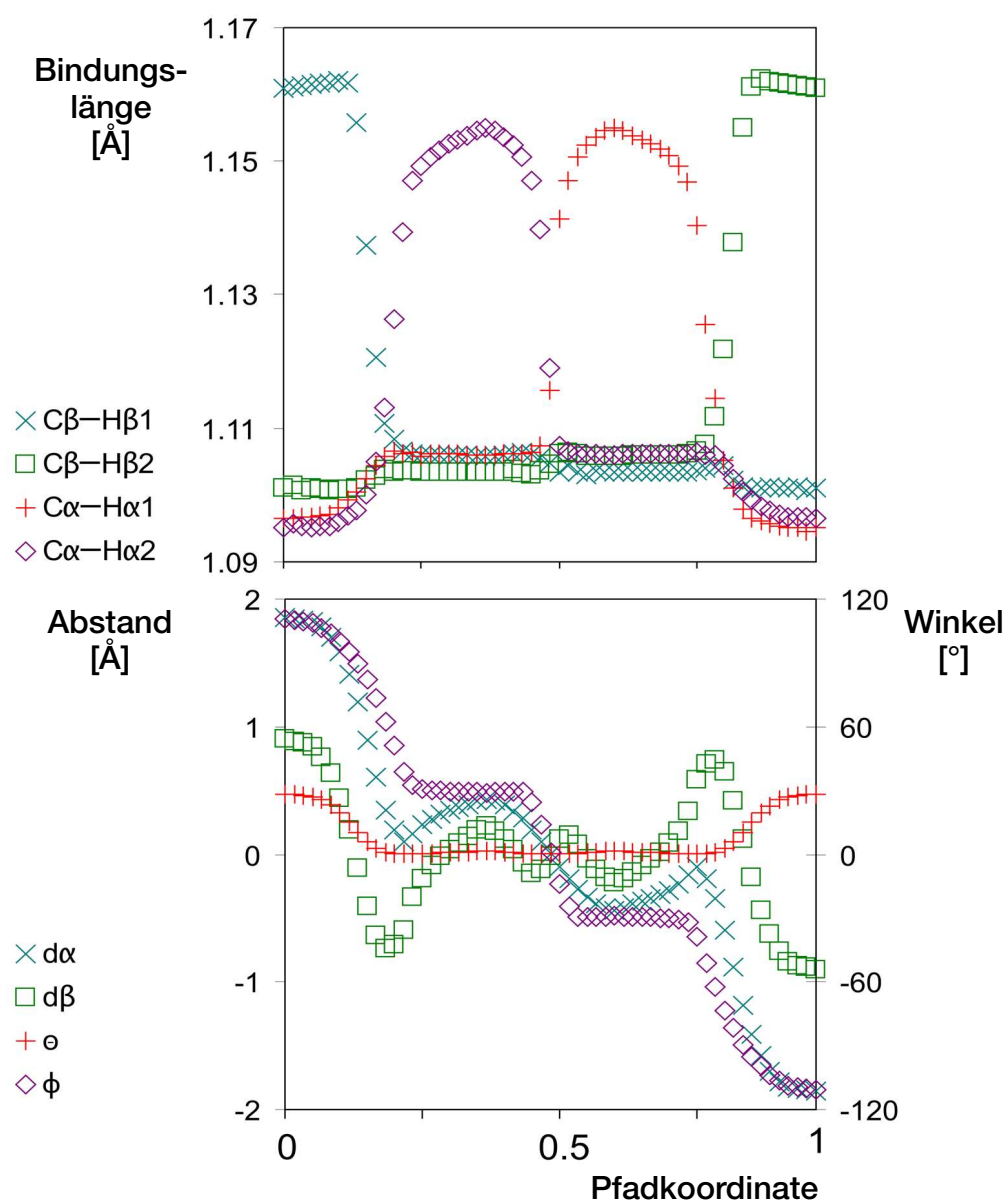


Abbildung 2.30: Auftragung wichtiger Winkel und Abstände gegen die Reaktionslaufzahl S

Die günstigste unimolekulare Inversion am Zr-Atom hat eine Barriere von ca. 11 kcal/mol und wird kaum von der Entropie beeinflusst. Die freie Aktivierungsenergie ist nur 0.4 kcal/mol niedriger als die entsprechende Enthalpie bei 298 K. Zum Vergleich wurden auch die Übergangszustände der Ethyleninsertion in die Zr-C α Bindung und die entsprechenden Vorstufen berechnet. Sowohl die Annäherung des Ethylens ‘frontside’ als auch von ‘backside’ wurden berücksichtigt, je nachdem ob die Bildung des Komplexes *syn* oder *anti* zur bereits vorhandenen β -agostischen Bindung stattfindet. In Übereinstimmung mit der Literatur [65] ist die ‘frontside’ gegenüber der ‘backside’ Insertion (6.4 kcal/mol bzw. 9.7 kcal/mol gegenüber dem jeweiligen ‘resting state’) bevorzugt. Der mit dem back-skip konkurrierende Prozess ist demnach die ‘frontside’ Insertion, deren Barriere mit 6.4 kcal/mol deutlich unter der berechneten Barriere von 11.1 kcal/mol für den back-skip liegt. Demnach sollte in dem hier untersuchten Stammsystem der ansa-Zirkonocene die Insertion gegenüber dem back-skip deutlich bevorzugt sein. Die Mikrostruktur des Polymeren ist durch einen strikt alternierenden Mechanismus erklärbar, da das Ereignis eines back-skip sehr unwahrscheinlich ist.

Die Koordinierung und Insertion des Monomeren ist, im Gegensatz zum back-skip, deutlicher von der Temperatur abhängig: Die freie Aktivierungsenthalpie für die Insertion (ΔG) wird mit steigender Temperatur aus entropischen Gründen größer, wohingegen jene für den back-skip praktisch konstant bleibt. Im hier vorliegenden Fall bleibt die freie Aktivierungsenthalpie für die Insertion im relevanten Temperaturbereich stets kleiner als jene für den back-skip, so dass die Insertion bevorzugt abläuft. Bei höherer Temperatur kann sich das Gleichgewicht zwischen Insertion und Inversion zu Gunsten der Inversion verschieben, und der back-skip Vorgang kann somit bei höheren Temperaturen wichtiger werden [67, 82].

2.3.2 iso-Butyl als Modell für die wachsende Polymerkette

Um ein realistischeres Bild des back-skips zu erhalten, wird nun der Mechanismus mit iso-Butyl als Kettenmodell untersucht. Diese Kette ergibt sich aus der Insertion von Propen in die Zr-Me Bindung. Die Benennung der Kettenkonformere der

α -agostischen Minima bezieht sich hier auf das β -Wasserstoffatom (siehe Kapitel 2.1.4). Die Minima und Reaktionswege sind in Abbildung 2.31 dargestellt.

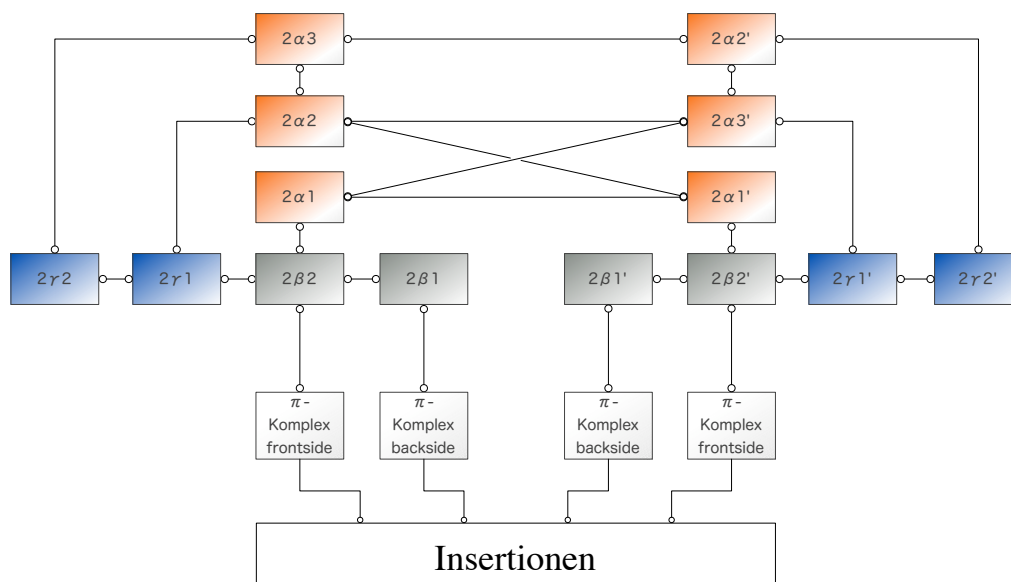


Abbildung 2.31: Mögliche Reaktionswege im System $\text{CH}_2\text{Cp}_2\text{Zr}^+$ mit iso-Butyl als Modell für die wachsende Polymerkette

Der ‘resting state’ und damit auch Referenzpunkt für die relativen Energien ist hier ebenso wie im vorherigen Fall das β -agostische Minimum $2\beta 2$. Es wurden gleichfalls eine nahezu energiegleiche β -agostische Struktur $2\beta 1$ und der die beiden verbindende Übergangszustand $[2\beta 1 - 2\beta 2]^\ddagger$ gefunden (siehe Abbildung 2.32). Im Vergleich zum vorher diskutierten System ist eine weitere γ -agostische Struktur $2\gamma 2$ hinzugekommen. Die beiden γ -agostischen Strukturen unterscheiden sich in der Orientierung des β -Wasserstoffatoms (siehe Abbildung 2.33). Sie sind enantiomer und daher energiegleich. Auf Grund der unterschiedlichen Stellung des β -Wasserstoffatoms führen $2\gamma 1$ und $2\gamma 2$ zu unterschiedlichen α -agostischen Strukturen. Es gibt einen C_s symmetrischen Übergangszustand zwischen den beiden Strukturen.

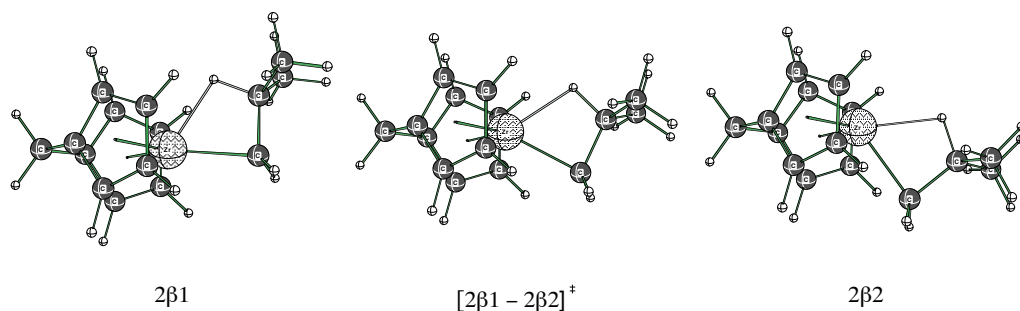


Abbildung 2.32: Strukturen $2\beta 1$, $[2\beta 1 - 2\beta 2]^{\ddagger}$ und $2\beta 2$

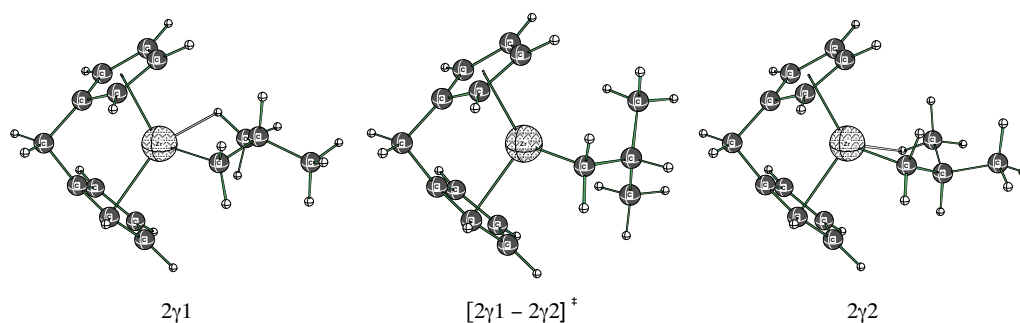


Abbildung 2.33: Strukturen $2\gamma 1$, $[2\gamma 1 - 2\gamma 2]^{\ddagger}$ und $2\gamma 2$

So ist $2\gamma 1$ mit $2\alpha 2$ verbunden und $2\gamma 2$ mit $2\alpha 3$. $2\alpha 1$ ist von $2\beta 2$ aus erreichbar (siehe Abbildungen 2.34, 2.35 und 2.36).

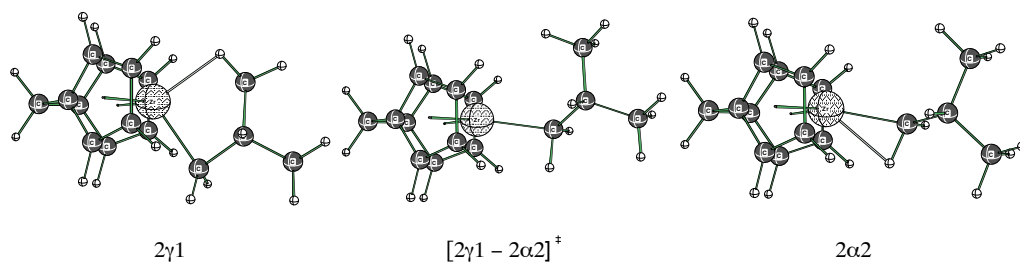


Abbildung 2.34: Strukturen $2\gamma 1$, $[2\gamma 1 - 2\alpha 2]^{\ddagger}$ und $2\alpha 2$

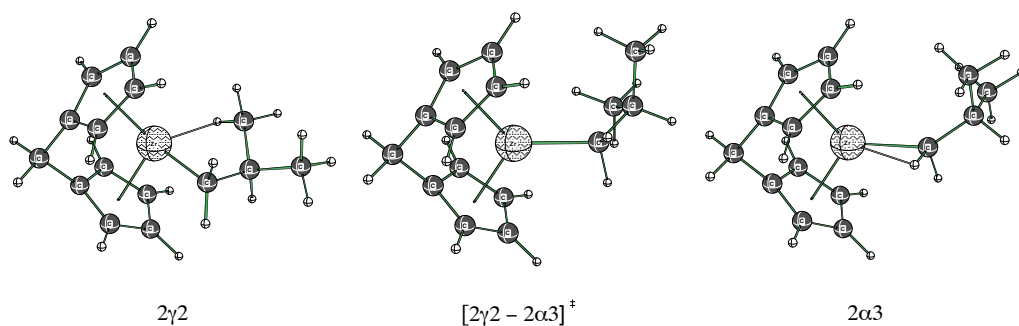


Abbildung 2.35: Strukturen $2\gamma 2$, $[2\gamma 2 - 2\alpha 3]^{\ddagger}$ und $2\alpha 3$

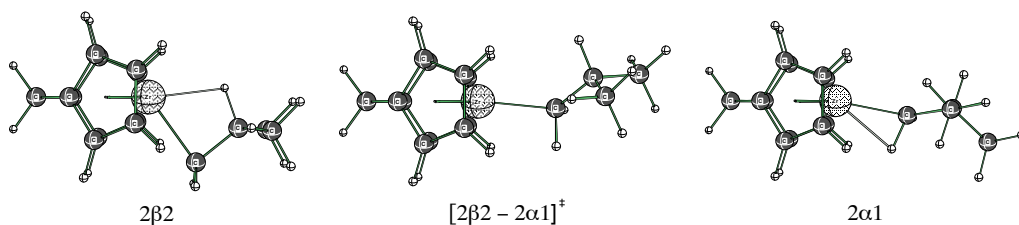


Abbildung 2.36: Strukturen $2\beta 2$, $[2\beta 2 - 2\alpha 1]^{\ddagger}$ und $2\alpha 1$

Im Gegensatz zum n-Propylfall wurde hier nur ein Übergangszustand zwischen zwei α -agostischen Minima auf der selben Enantioseite gefunden: $[2\alpha 2 - 2\alpha 3]^{\ddagger}$ (siehe Abbildung 2.37).

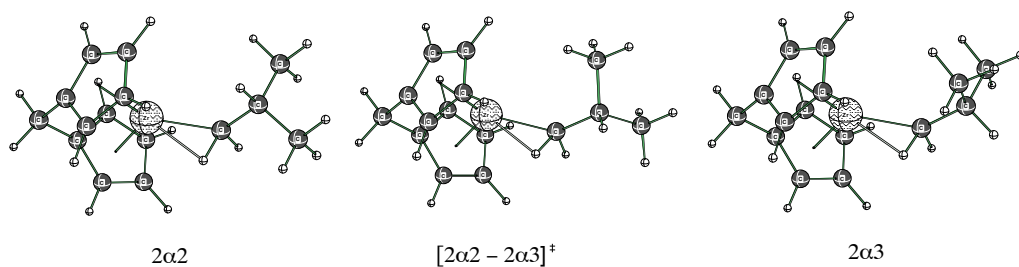


Abbildung 2.37: Strukturen $2\alpha 2$, $[2\alpha 2 - 2\alpha 3]^{\ddagger}$ und $2\alpha 3$

Im Fall der n-Propylkette stellten $1\alpha1$ und $1\alpha3$ die α -agostischen Minima mit niedrigster Energie dar, und $1\alpha2$ lag um etwa 2 kcal/mol höher als die beiden anderen α -agostischen Strukturen. Hier liegt $2\alpha2$ um ca. 2 kcal/mol energetisch tiefer als die beiden anderen α -agostischen Strukturen.

Für den Wechsel der Enantioseite wurden analog dem vorherigen System zwei C_s symmetrische Übergangszustände gefunden, von denen einer einen Sattelpunkt zweiter Ordnung darstellt, da er auch zwei Enantiomerenpaare ($2\alpha2$ und $2\alpha3'$ sowie $2\alpha1$ und $2\alpha1'$) miteinander verbindet (siehe Abbildung 2.38). Der andere Übergangszustand mit C_s Symmetrie weist nur eine imaginäre Frequenz auf und verbindet $2\alpha3$ und $2\alpha2'$ (siehe Abbildung 2.39)

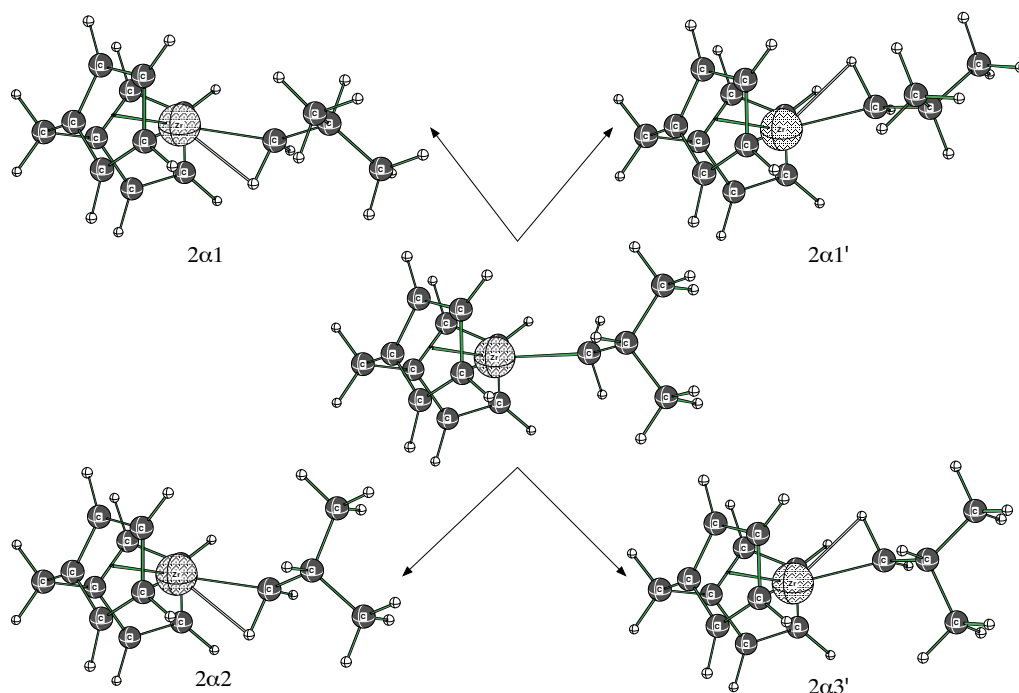


Abbildung 2.38: Die über den Sattelpunkt zweiter Ordnung verbundenen Minima $2\alpha1$ und $2\alpha1'$ sowie $2\alpha3$ und $2\alpha2'$

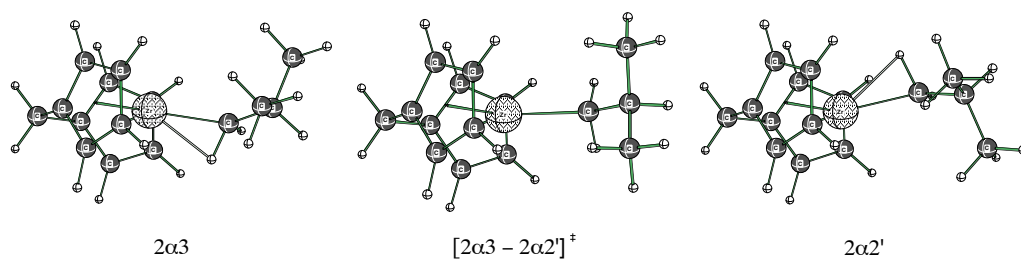


Abbildung 2.39: Strukturen $2\alpha 3$, $[2\alpha 3 - 2\alpha 2']^{\ddagger}$ und $2\alpha 2'$

In diesem System findet sich ebenfalls ein Paar enantiomerer, asymmetrischer Übergangszustände, die $2\alpha 1$ und $2\alpha 3'$ sowie $2\alpha 2$ und $2\alpha 1'$ miteinander verbinden (siehe Abbildung 2.40).

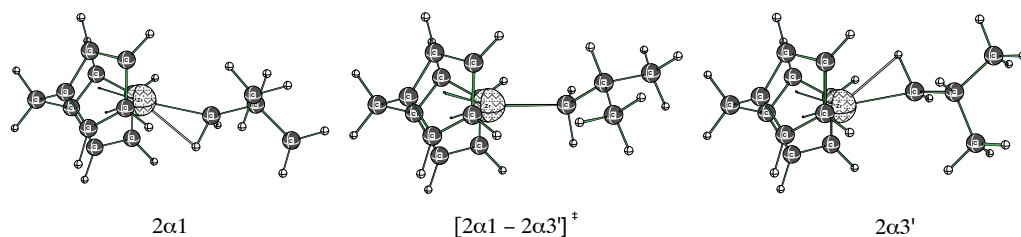


Abbildung 2.40: Strukturen $2\alpha 1$, $[2\alpha 1 - 2\alpha 3']^{\ddagger}$ und $2\alpha 3'$; der Übergangszustand zwischen $2\alpha 2$ und $2\alpha 1'$ ist zu dem in dieser Abbildung dargestellten enantiomer.

Die geometrischen Parameter der optimierten Strukturen sind ähnlich wie im n-Propylfall, so dass in Tabelle 2.7 lediglich die Energien der Minima und Übergangszustände angegeben sind.

Struktur	$\Delta\Delta H_{298\text{ K}}$	$\Delta\Delta G_{298\text{ K}}$
2 γ 1		
2 γ 2	1.83	2.23
2 γ 1 – 2 γ 2	8.79	10.68
2 γ 1 – 2 α 2	9.82	9.53
2 γ 2 – 2 α 3	12.25	11.79
2 γ 1 – 2 β 2	2.82	4.30
2 β 1	0.03	0.20
2 β 2	0.00	0.00
2 β 1 – 2 β 2	0.15	1.44
2 β 2 – 2 α 1	12.15	11.62
2 α 1	11.55	10.27
2 α 2	9.64	8.23
2 α 3	11.42	10.24
2 α 2 – 2 α 3	13.06	13.07
2 α 1 – 2 α 1'		
2 α 2 – 2 α 3'	12.81	13.23
2 α 3 – 2 α 2'	13.24	12.99
2 α 1 – 2 α 3'	12.45	11.60
Insertion frontside	–2.13	11.27
Insertion backside	–0.64	13.45

Tabelle 2.7: Energien der Strukturen mit iso-Butyl als Modell für die wachsende Polymerkette in kcal/mol

Mit den gefundenen Minima und Übergangszuständen lassen sich mehrere Reaktionspfade aufstellen:

- In $2\gamma 1 \rightarrow 2\beta 2 \rightarrow 2\alpha 1 \rightarrow 2\alpha 3' \rightarrow 2\gamma 1'$ und $2\gamma 1 \rightarrow 2\alpha 2 \rightarrow 2\alpha 1' \rightarrow 2\beta 2' \rightarrow 2\gamma 1'$ liegt die höchste Barriere (11.6 kcal/mol) beim Übergangszustand $[2\alpha 1 - 2\alpha 3']^\ddagger$ beziehungsweise $[2\alpha 2 - 2\alpha 1']^\ddagger$ (siehe Abbildung 2.40).
- Bei $2\gamma 1 \rightarrow 2\beta 2 \rightarrow 2\alpha 1 \rightarrow 2\alpha 1' \rightarrow 2\beta 2 \rightarrow 2\gamma 2$ liegt der höchste Punkt beim Sattelpunkt zweiter Ordnung $[2\alpha 1 \rightarrow 2\alpha 1']$ mit 13.2 kcal/mol.
- Bei $2\gamma 1 \rightarrow 2\alpha 2 \rightarrow 2\alpha 3' \rightarrow 2\gamma 1$ muss der selbe Übergangszustand $[2\alpha 2 \rightarrow 2\alpha 3']$ mit 13.2 kcal/mol überwunden werden (siehe Abbildung 2.38).

- Im Reaktionspfad $2\gamma 2 \rightarrow 2\alpha 3 \rightarrow 2\alpha 2' \rightarrow 2\gamma 2'$ ist der höchste Punkt der Übergangszustand $[2\alpha 3 - 2\alpha 2']^\ddagger$ mit 13.1 kcal/mol.

Für die bisher betrachteten agostischen Konformere und Übergangszustände ist der Einfluss der Entropie auf die relativen freien Enthalpien klein, und aus diesem Grund liegen die ΔH und ΔG Werte nahe beieinander (siehe Tabelle 2.7). Bei den Übergangszuständen für die Insertion von Propen in $[\text{H}_2\text{C}(\text{Cp})_2 \text{Zr-}^i\text{Bu}]^+$ gibt es eine große entropische Benachteiligung, die hauptsächlich auf den Verlust von sechs Freiheitsgraden bei der Anlagerung zurückzuführen ist. Die Größenordnung dieses Effektes wird sicherlich durch die Berechnung in der Gasphase überschätzt, da der Einfluss von Solvation und Desolvation nicht berücksichtigt wird. Betrachtet man die freien Enthalpien ohne Berücksichtigung der gerade erwähnten Faktoren, so sind die Barrieren für die Insertion ähnlich hoch wie die für den back-skip. Die 'frontside' Insertion ist gegenüber der 'backside' Insertion etwas bevorzugt (11.3 gegen 13.5 kcal/mol) und somit die relevante Konkurrenzreaktion zum besten back-skip Pfad.

Wie bereits weiter oben ausgeführt, sollte die freie Enthalpie für den intramolekularen back-skip beinahe unabhängig von der Temperatur sein, wohingegen sie bei dem intermolekularen Prozess der Insertion mit der Temperatur ansteigen sollte. Abbildung 2.41 zeigt die berechnete Temperaturabhängigkeit der Barrieren für $[\text{H}_2\text{C}(\text{Cp})_2 \text{Zr-}^i\text{Bu}]^+$: wie erwartet sind die beiden ΔH und ΔG Kurven für den back-skip annähernd horizontal, wohingegen die ΔG Kurve für die Insertion zwischen 273 und 353 K um beinahe 4 kcal/mol ansteigt und die ΔG Kurve für den back-skip sogar kreuzt. Dieses Beispiel zeigt, dass höhere Temperaturen den back-skip im Vergleich zur Insertion begünstigen können. Hierbei ist aber zu beachten, dass die Gasphasenmodelle die tatsächlichen Gegebenheiten mit Gegenionen und Lösungsmittel nicht exakt widerspiegeln können.

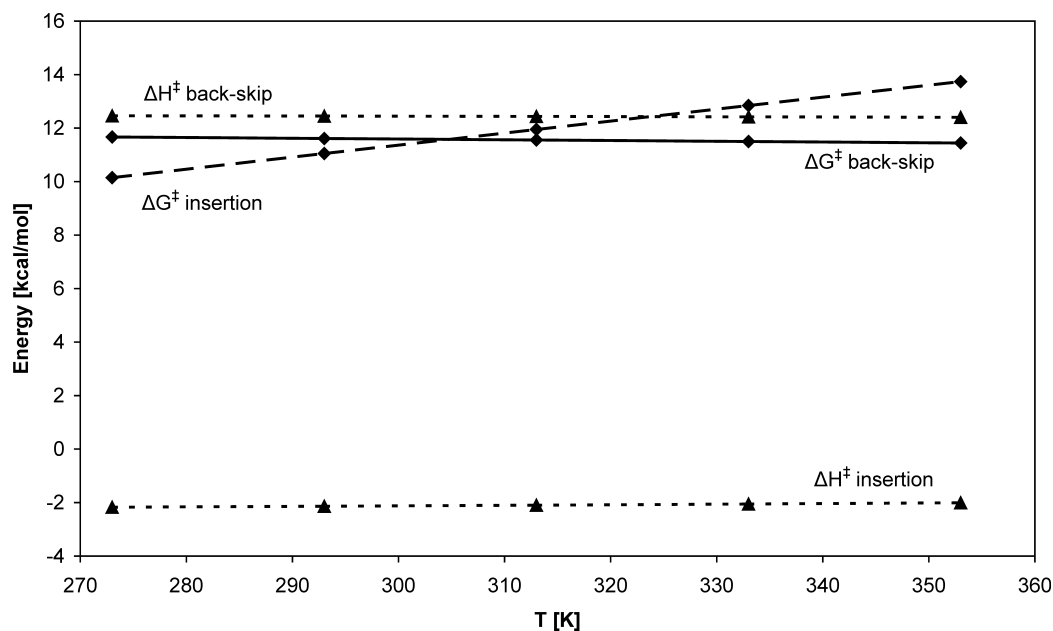


Abbildung 2.41: Temperaturabhängigkeit der Barrieren des back-skip und der Propeninsertion für $[\{H_2C(Cp)_2\}Zr-^iBu]^+$

2.3.3 Zum Einfluss von Lösungsmittel und Gegenion

Im Experiment reagieren die ansa-Zirkonocene empfindlich auf die Polarität des Lösungsmittels [100]. In den bisherigen Rechnungen wurde dieser Einfluss außer Acht gelassen. Um den Effekt des Lösungsmittels rechnerisch zu untersuchen, gibt es zwei unterschiedliche Ansätze; die explizite Berücksichtigung der Lösungsmittelmoleküle innerhalb einer Solvensbox und die implizite Berücksichtigung des Lösungsmittels durch ein Kontinuumsverfahren wie COSMO [24]. Die explizite Berücksichtigung des Solvens ist mit der von uns gewählten DFT Methode auf Grund des damit verbundenen hohen Rechenaufwands nicht möglich. Die Berücksichtigung der Lösungsmittelleffekte durch implizite Methoden wie COSMO, bei der sowohl der sterische Anspruch des Lösungsmittels als auch die lokale Polarisierung berücksichtigt wird, hat sich in der Literatur als geeignete Vorgehensweise bewährt [26, 101–111].

Der Einfluss des Solvens auf die Barrieren des back-skip soll zunächst anhand der an einem Reaktionspfad beteiligten Strukturen untersucht werden. Hierzu wer-

den $2\beta 2$, $2\alpha 1$ und die Übergangszustände $[2\beta 2 - 2\alpha 1]^\ddagger$ und $[2\alpha 1 - 2\alpha 1']^\ddagger$ unter Verwendung von COSMO optimiert. Die Dielektrizitätskonstante ϵ wurde hierbei auf 2.38 gesetzt, was dem im Experiment verwendenden Lösungsmittel Toluol entspricht. Die Parameter für die Radien der Atome in COSMO wurden aus der Literatur [111] übernommen. Durchgeführt wurden die Rechnungen mit dem Turbomole-Programmpaket, für die Optimierung der Übergangszustände kam der in ChemShell implementierte HDLC Optimierer zum Einsatz.

Die nach der Optimierung unter COSMO gefundenen stationären Punkte sind mit den durch Optimierung in der Gasphase gefundenen strukturell nahezu identisch. Lediglich die Stärke der agostischen Wechselwirkung wurde etwas vermindert, was sich an einer Verkürzung der entsprechenden C-H_{agostisch} Bindungen ablesen lässt (siehe Tabelle 2.8).

Struktur	Abstand H _{agost} -C (Gasphase)	Abstand H _{agost} -C (COSMO)
$2\beta 2$	1.179	1.175
$2\alpha 1$	1.160	1.152

Tabelle 2.8: Ausgewählte Bindungsabstände

Bei den relativen Energien zeigt sich, dass die Übergangszustände etwas besser stabilisiert werden als die Minima, so dass die Barrieren um ca. 0.5 kcal/mol niedriger sind als bei den Rechnungen in der Gasphase. Der Effekt der Solvatisierung ist, wie zu erwarten war, für einzelne isolierte Ionen nicht stark. Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die Berücksichtigung des Lösungsmittels durch COSMO im Falle der kationischen Komplexe ohne Gegenion keinen großen Einfluss auf die Barrieren des back-skips hat (siehe Tabelle 2.9).

Im Experiment hängt die Selektivität des Katalysators stark von der Natur des Gegenions ab. Es gibt in der Literatur viele Untersuchungen, die sich mit dem Einfluss des Gegenions ohne Berücksichtigung des Solvens [112–122] und des Gegenions in Gegenwart von Solvens [26, 101–111] auf die Olefinpolymerisation befassen.

Das in der Praxis oft verwendete Gegenion Methylaluminoxan (MAO) hat den für theoretische Untersuchungen entscheidenden Nachteil, dass es keine einheit-

“Bedingung”	Struktur	ΔE_{rel}	ΔG_{rel}
Gasphase	$2\beta 2$	0.0	0.0
	$[2\beta 2 - 2\alpha 1]^{\ddagger}$	12.47	11.37
	$2\alpha 1$	12.10	11.27
	$[2\alpha 1 - 2\alpha 1']^{\ddagger}$	14.22	12.84
COSMO	$2\beta 2$	0.0	0.0
	$[2\beta 2 - 2\alpha 1]^{\ddagger}$	12.04	11.00
	$2\alpha 1$	11.92	10.98
	$[2\alpha 1 - 2\alpha 1']^{\ddagger}$	13.58	12.07
SP-COSMO	$2\beta 2$	0.0	
	$[2\beta 2 - 2\alpha 1]^{\ddagger}$	12.05	
	$2\alpha 1$	11.98	
	$[2\alpha 1 - 2\alpha 1']^{\ddagger}$	13.57	

Tabelle 2.9: Relative Energien für den kationischen Katalysator-Kette Komplex. “Bedingung” zeigt an, ob die jeweilige Energie aus einer Optimierung unter Gasphasenbedingungen, unter Einbeziehung von COSMO oder aus einer Optimierung unter Gasphasenbedingungen und anschließender COSMO Single-Point Rechnung erhalten wurde. Die unter “Struktur” verwendete Nomenklatur ist mit der bisher verwendeten identisch. Die Energien sind auf $2\beta 2$ unter den jeweiligen Bedingungen als Nullpunkt bezogen und in kcal/mol angegeben.

liche Struktur gibt, die als Startgeometrie für die Rechnungen verwendet werden könnte. Eine wohldefinierte Familie von Gegenionen, die auch im Experiment eingesetzt werden, sind die Borat-Anionen. Ein für unsere Untersuchung geradezu perfekter Vertreter dieser Familie ist $[(\text{C}_6\text{F}_5)_3\text{BCH}_3]^-$. Dieses Gegenion ist deshalb so gut geeignet, weil es wegen seiner Größe sterisch gehindert ist, am Katalysator zu koordinieren. Des weiteren hat dieses Gegenion zwei unterschiedliche “Gesichter”, mit denen es sich dem Metall annähern kann. Das eine ist die stark koordinierende Methylgruppe und das andere sind die weniger stark koordinierenden F-Atome der C_6F_5 -Ringe. So kann also durch die Orientierung des Gegenions die Stärke der Koordination eingestellt werden.

Da die Suche nach Übergangszuständen durch die stark vergrößerte Anzahl an Atomen zu aufwändig geworden wäre, wurden in dieser Untersuchung die Minima $2\beta 2$ und $2\alpha 3$ als Modellkomplexe ausgewählt.

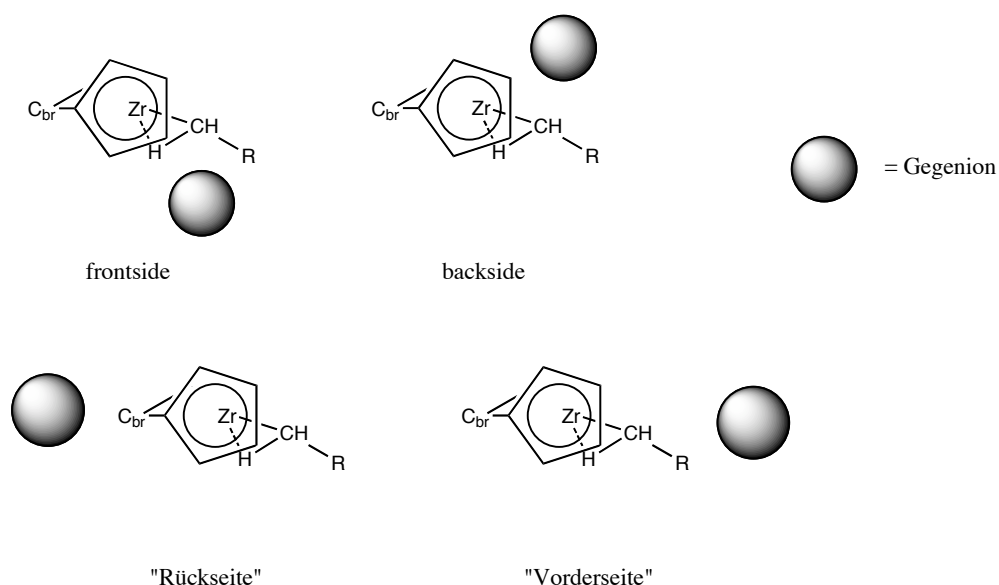


Abbildung 2.42: Mögliche Positionen für das Gegenion am Beispiel des α -agostischen Komplexes (der unterhalb der Papierebene liegende Cp-Ring wurde aus Gründen der besseren Darstellbarkeit weggelassen)

Eine fixe Orientierung des Katalysator-Kette Komplexes vorausgesetzt, bieten sich für die Platzierung des Gegenions prinzipiell vier unterschiedliche Positionen an (siehe Abbildung 2.42):

- frontside zur agostischen Bindung
- backside zur agostischen Bindung
- in einer Achse mit Zr und C_{br} auf der "Rückseite" des Komplexes
- in einer Achse mit Zr und C_{br} auf der "Vorderseite" des Komplexes

Die Startstrukturen wurden unter Berücksichtigung der von Nifant'ev et al [117] gefundenen Strukturen definiert. Der Abstand zwischen dem Katalysator-Kette Komplex und dem Gegenion wurde größer gewählt, da in den Rechnungen von Nifant'ev keine Lösungsmittelleffekte berücksichtigt worden waren und somit die Abstände wahrscheinlich zu klein berechnet wurden.

Für die drei ausgewählten Positionen (die Position an der “Vorderseite” wurde im Hinblick auf die durch diese Anordnung hervorgerufene Störung der Polymerisationsreaktion nicht berechnet) wurde das Gegenion sowohl mit der Methylgruppe als auch mit einem C_6F_5 -Ring auf das Zr-Atom ausgerichtet und mit und ohne Berücksichtigung von COSMO optimiert.

Bei der Optimierung unter Gasphasenbedingungen bildete sich in allen Fällen, bei denen das Gegenion front- oder backside zur α -agostischen Bindung stand, eine Koordination des Gegenions an das Zr-Atom aus, die zu einer Verschiebung der Kette führte. Dies gilt für beide untersuchten Ausrichtungen (Methylgruppe bzw. C_6F_5 -Ring). Die Verschiebung der Kette ist auf sterische Gründe zurückzuführen, da das Gegenion einen großen sterischen Anspruch hat. Die starke Tendenz zur Koordination ist nicht überraschend, da unter Gasphasenbedingungen die räumliche Trennung von Ladungen energetisch sehr ungünstig ist. Für die Platzierung des Gegenions auf der “Rückseite” des Katalysators mit den C_6F_5 -Ringern gegen die Brücke gerichtet konnte eine stabile Konformation gefunden werden, die jedoch eine 17 kcal/mol höhere Energie als die Referenzstruktur von 2/β2 aufweist.

Die Koordination des Gegenions beeinflusst die β -agostischen Strukturen weniger, die Annäherung backside zur agostischen Bindung verursachte keine Änderung der Lage der Kette. Allerdings kam es bei der Annäherung frontside zur β -agostischen Bindung zu einer Wechselwirkung zwischen der Methylgruppe und dem Zr-Atom (siehe Tabelle 2.10).

Wie in der vorherigen Untersuchung wurden auch hier mit den unter Gasphasenbedingungen optimierten Strukturen COSMO-Single Point Rechnungen durchgeführt.

Danach wurden die Gasphasen-Strukturen unter Einbeziehung von COSMO neu optimiert. Hierbei zeigte sich, dass die koordinierende Wirkung der Methylgruppe immer noch stark ist. So wurde in allen vier α -agostischen Komplexen eine Koordination der Methylgruppe an das Zr-Atom gefunden. Ebenso koordinierte die Methylgruppe bei der Annäherung frontside zur β -agostischen Bindung. Bei einer Orientierung der Methylgruppe backside zur β -agostischen Wechselwirkung fand keine konformelle Änderung der Kette statt, und es konnte keine Bindung

zwischen der Methylgruppe und dem Zr-Atom gefunden werden.

Für die Annäherung des Gegenions über einen der C_6F_5 Ringe zeigt sich ein ähnliches Bild wie für die Methylgruppe: auch hier ist die Tendenz zur Koordination sehr hoch, so dass die Kette durch das Gegenion verschoben wird. Auch hier ist die β -agostische Struktur mit dem von backside angenäherten Gegenion die einzige "ungestörte" Struktur.

Die in Tabelle 2.10 auftauchenden stark negativen relativen Energien lassen sich auf das Vorhandensein einer Bindung zwischen der Methyl-Gruppe oder eines der F-Atome mit dem Zr-Atom erklären.

Aus der exemplarischen Untersuchung lässt sich schließen, dass sich der Effekt des durch COSMO implizit berücksichtigten Lösungsmittels im Falle der reinen Kationen vernachlässigen lässt. Hier ist es ausreichend, den Effekt der Solvation durch COSMO mittels einer Single-Point Rechnung einzubeziehen. Am Beispiel des in der "bridge" Position sitzenden Gegenions ist der Effekt der Berücksichtigung impliziter Solvation besonders augenfällig. Beträgt die relative freie Energie aus der Gasphasen-Optimierung 18 kcal/mol, so beträgt sie in der komplett mit COSMO optimierten Struktur nur noch 11 kcal/mol. Die Single-Point Rechnung hingegen findet eine relative Energie von 14 kcal/mol. Es ist auch anzumerken, dass die Optimierung des in der "bridge" Position sitzenden Gegenions sich unter Gasphasenbedingungen als sehr schwierig herausstellte, wohingegen unter COSMO Bedingungen die Optimierung sehr einfach gelang. Werden Ionenpaare berechnet, so erscheint es ratsam, die Effekte des COSMO bereits während der Geometrieoptimierung zu berücksichtigen.

Aus unseren Rechnungen lässt sich ableiten, dass die Einbeziehung von Gegenionen in beinahe allen Fällen zu einer koordinierenden Wechselwirkung zwischen dem Gegenion und dem Metallzentrum führt, die mit einer Verschiebung der Kette einhergeht. Dieser Effekt ist bei der Hinzunahme von COSMO während der Optimierung erwartungsgemäß weniger stark ausgeprägt. Bei der Platzierung des Gegenions auf der "Rückseite" des Katalysators ("bridge" Position) findet man keine Koordination; diese Spezies sind jedoch zu energiereich, um im Mechanismus der Polymerisation relevant zu sein. Im Falle der koordinierenden Komplexe muss man annehmen, dass eine beständige Ablösung und Wiederanlagerung des

Gegenions zwischen den einzelnen Insertionsschritten erfolgt, was jedoch schwer vereinbar ist mit den experimentell für die Propenpolymerisation bestimmten hohen Reaktionsraten. Für reale Systeme ist es denkbar, dass es für das Gegenion einen Platz ähnlich der hier gefundenen “bridge” Position geben kann, an dem es verweilen kann, ohne in die Polymerisationsreaktion einzugreifen, wie von Brintzinger et al. für ein vereinfachtes Modell des Gegenions vorgeschlagen [123]. Das Gegenion sollte bei erhöhten Temperaturen eher weiter entfernt vom Katalysator sein, so dass sein Einfluss dann abnehmen dürfte.

Bedingung	Orientierung	Struktur	front-/backside	ΔE_{rel}	ΔG_{rel}
Gasphase	Me	$2\alpha 3$	frontside	-17.87	-16.94
			backside	-16.32	-15.83
		$2\beta 2$	frontside	-20.52	-19.84
			backside	0.0	0.0
	F	$2\alpha 3$	frontside	-8.63	-4.54
			backside	-8.45	-4.07
		$2\beta 2$	bridge	17.46	17.60
			frontside	-10.57	-7.93
COSMO	Me	$2\alpha 3$	backside	0.0	0.0
			backside	-14.57	-11.94
		$2\beta 2$	frontside	10.97	-9.43
			backside	-17.64	-13.21
	F	$2\alpha 3$	frontside	0.0	0.0
			backside	-5.20	-2.76
		$2\beta 2$	bridge	-2.25	-1.41
			frontside	13.76	11.84
SP-COSMO	Me	$2\alpha 3$	backside	-5.99	-2.35
			backside	0.0	0.0
		$2\beta 2$	frontside	-12.22	-11.29
			backside	-10.43	-10.03
	F	$2\alpha 3$	frontside	-7.17	-6.49
			backside	0.0	0.0
		$2\beta 2$	bridge	-4.17	-0.09
			frontside	-4.28	0.10

Tabelle 2.10: Vergleich der relativen Energien aus den verschiedenen Optimierungen. Die Bezeichnungen sind analog zu Tabelle 2.9. Die hier hinzugekommene zweite Spalte bezieht sich auf die Orientierung des Gegenions relativ zum Katalysator; Me bedeutet, dass die CH_3 Gruppe auf das Zr-Atom gerichtet ist, wohingegen F die Ausrichtung eines der F-Atome der C_6F_5 Ringe bedeutet. Die Benennung front-/backside bezeichnet die Richtung, aus welcher das Gegenion an die agostische Bindung angenähert wurde. Alle Energien sind in kcal/mol angegeben und relativ zu $2\beta 2$ backside unter der jeweiligen Optimierungsbedingung. Für die COSMO-Single-Point ΔG -Werte wurden die Korrekturwerte der jeweiligen Gasphasenoptimierung verwendet.

Kapitel 3

Asymmetrische Hydrierung von Olefinen mit Rhodiumkatalysatoren

3.1 Einleitung

Das Gebiet der asymmetrischen Hydrierung von Olefinen mit Übergangsmetallkatalysatoren wurde durch Horner [124] und Knowles [125] erschlossen, die beide unabhängig voneinander im Jahre 1968 über die ersten enantioselektiven Abwandlungen des Wilkinson-Katalysators durch chirale Monophosphinliganden berichteten. Trotz der nach heutigen Maßstäben niedrigen Enantiomerenüberschüsse (enantiomeric excess ee) von etwa 15% war doch ein großer Durchbruch gelungen. Der ee -Wert ist über die Produktkonzentrationen $[P]$ wie folgt definiert:

$$ee_{P_R}(\%) = \frac{[P_R] - [P_S]}{[P_R] + [P_S]} \cdot 100$$

wobei P_R für das R-konfigurierte Produkt und P_S für das S-konfigurierte Produkt stehen. Die Verwendung anderer Monophosphinliganden verbesserte zwar die ee -Werte bei der Hydrierung einiger Olefine, aber erst die unabhängig voneinander erschienenen Arbeiten von Kagan [126] 1971 und Knowles [127, 128] 1975 zeigten, dass die Verwendung chiraler, chelatisierender Diphosphinliganden zu einer starken Verbesserung der Enantioselektivität führt. Noyori [129, 130] berichtete

1980 über die Synthese eines der in der asymmetrischen Hydrierung und vielen anderen übergangsmetallkatalysierten Reaktionen am weitesten verbreiteten Liganden: 2,2'-Bis(diphenylphosphino)-1,1'-binaphthyl (BINAP). Seither wurde eine Vielzahl anderer effizienter chiraler Diphosphine hergestellt [131–142]. Trotz der großen Unterschiede in den Strukturen, des Aufwands bei der Synthese – und damit auch der Kosten – und der Effizienz in der Katalyse sind diese Liganden alle bidentat. Dies begründete die Auffassung, dass nur chelatisierende Liganden zu effizienter Stereoselektivität führen können [143–154].

Parallel zu diesen Entwicklungen untersuchten mehrere Gruppen den Mechanismus der rhodiumkatalysierten asymmetrischen Hydrierung von Olefinen. Halpern zeigte in einer Serie von Veröffentlichungen [146, 149, 150, 152, 154, 155], dass nicht die Stabilitäten der Katalysator-Substratkomplexe die Ursache der Enantioselektivität ist, sondern dass die Reaktion kinetisch kontrolliert wird. Diese Entdeckung wurde unter dem Begriff 'anti-Schlüssel-Schloss' Prinzip bekannt. Landis et al. veröffentlichten zwischen 1999 und 2001 eine Reihe von kombinierten quantenmechanischen und molekülmechanischen (QM/MM) Untersuchungen [147, 148, 151, 153], in denen dieses Prinzip untermauert wurde.

Der von Halpern veröffentlichte [149] und von Landis mittels QM/MM Methoden untersuchte Reaktionsmechanismus geht von folgenden Schritten aus:

- Anlagerung des Substrates und Bildung des Adduktes (proR/proS)
- Anlagerung von H₂ unter Bildung des Wasserstoffadduktes (MolH₂)
- Spaltung von H₂ und Bildung des Dihydridkomplexes (DiHy)
- Übertragung des ersten Wasserstoffatoms unter Bildung des trans-Alkylhydridkomplexes (AlHy_t)
- Übertragung des zweiten Wasserstoffatoms und Bildung des noch an den Katalysator gebundenen Produktes (Prod)

Die Untersuchungen von Halpern und Landis zeigten, dass für die von ihnen verwendeten Systeme die Bildung des H₂-Adduktes schnell und reversibel vonstatten geht und sich auf diese Weise ein Gleichgewicht zwischen der thermodynamisch

stabileren und der instabileren Form (Major und Minor) einstellen kann. Das instabilere (Minor) Isomer besitzt eine höhere Reaktivität bezüglich der Anlagerung des Wasserstoffs als die stabilere (Major) Form [152]. Ein experimenteller Befund, der für diese Annahme spricht, ist das Verhalten der Halpern-Systeme bei Erhöhung des H_2 -Druckes: Die sonst langsame Reaktion der Major-Form wird durch das erhöhte Angebot von Wasserstoff schnell genug, um eine Konkurrenzreaktion zur schnellen Anlagerung an die Minor-Form zu werden. Dies lässt sich an der Abnahme des *ee*-Wertes ablesen. In einem Fall kehrt sich der *ee*-Wert sogar um, von 80% für R bei einem H_2 Druck von 1 atm auf 8.4% *ee* für S bei einem Druck von 100 atm H_2 . Aus diesem Befund lässt sich auch schließen, dass in dieser Art von Systemen nicht die Bildung der Addukte, sondern eine nachgelagerte Energiebarriere über den *ee*-Wert des Produktes entscheidet. In den von Landis untersuchten Systemen stellt die Bildung der Alkylhydrid-Zwischenstufe die entscheidende Barriere dar.

Im Jahr 2000 wurde von drei unabhängigen Gruppen berichtet, dass bestimmte, vom 1,1'-Binaphthalin-2,2'-diol (BINOL) abgeleitete *monodentate* Phosphorverbindungen sich außergewöhnlich gut als Liganden für die rhodiumkatalysierte Hydrierung von Olefinen eignen. Die untersuchten Liganden waren Phosphite (1) [156], Phosphonite (2) [157, 158] und Phosphoamitide (3) [159] (siehe Abbildung 3.1). In vielen der untersuchten Fälle lagen die *ee*-Werte der Rh-katalysierten Olefinhydrierung im Bereich zwischen 90% und 99%. Dieser Befund erregte einige Aufmerksamkeit, da hier Chelatisierung offensichtlich keine Rolle spielen kann. Die für die Enantioselektivität der Katalyse wichtige Eigenschaft des Katalysators ist es, eine stabile chirale Umgebung am Reaktionszentrum (dem Metallatom) zu schaffen und während der Reaktion beizubehalten.

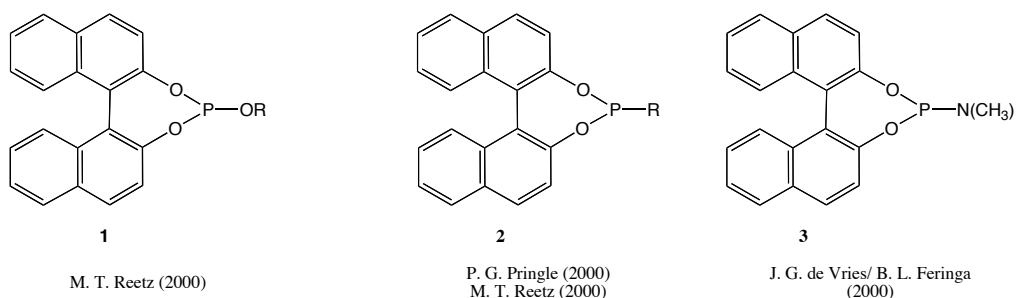


Abbildung 3.1: Monodentate Phosphorliganden für die Rh-katalysierte Olefinhydrierung

Es gibt mehrere Gründe, warum das Interesse von Industrie und Wissenschaft an diesem neuen Kapitel der asymmetrischen Hydrierung in den letzten vier Jahren stark zugenommen hat [160–171]. BINOL ist eines der billigsten kommerziell enantiomerenrein zu erhaltenden chiralen Auxiliare. Ein weiterer Grund ist der leichte synthetische Zugang zu den Liganden **1–3**. Um aus BINOL **1** zu erhalten, sind nur zwei einfache Schritte nötig (siehe Abbildung 3.2). Außerdem kann eine Vielzahl verfügbarer achiraler und chiraler Alkohole als zweite Komponente dienen. Deshalb kann man die Suche nach dem idealen Katalysator für die asymmetrische Hydrierung eines gegebenen Substrates rein empirisch angehen. Als letzter Punkt ist noch anzuführen, dass Phosphite **1** deutlich weniger zu unerwünschter Oxidation neigen als Phosphine. Die Beschaffenheit der R-Gruppe im Liganden **1** hat einen entscheidenden Einfluss auf die Enantioselectivität der jeweiligen Reaktion [156, 160–165].

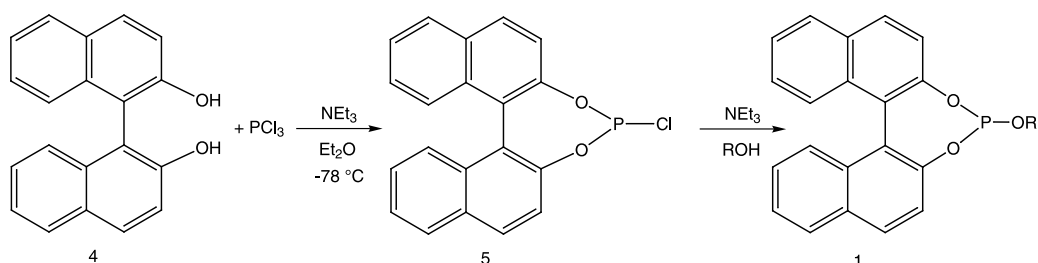


Abbildung 3.2: Synthese der Phosphitliganden **1**

R	<i>ee</i> [%]
CH ₃	89.2
C ₂ H ₅	93.4
CH(CH ₃) ₂	97.6
C(CH ₃) ₃	91.4
CH ₂ C(CH ₃) ₃	98.6
<i>n</i> -C ₆ H ₁₁	96.8
C ₆ H ₅	96.6
CH ₂ C ₆ H ₅	98.2
CH ₂ CH ₂ OCH ₃	96.0
2-Br-C ₆ H ₄	89.8
2,6-(CH ₃) ₂ -C ₆ H ₃	39.2
2,6-(C ₆ H ₅) ₂ -C ₆ H ₃	28.6

Tabelle 3.1: *ee*-Werte für die asymmetrische Hydrierung von Ithaconsäuredimethylester mit **1** und verschiedenen Liganden R

Ein Beispiel hierfür ist die Rh-katalysierte Hydrierung von Ithaconsäuredimethylester (siehe Abbildung 3.3). In Tabelle 3.1 ist ein Teil der vorhandenen experimentellen Daten aufgelistet, der zeigt, dass der *ee*-Wert bei gleichem Grundkörper des Katalysators (**1**, Abbildung 3.1) zwischen 28% und 99% liegen kann und somit stark von der Gruppe R im Liganden abhängt.

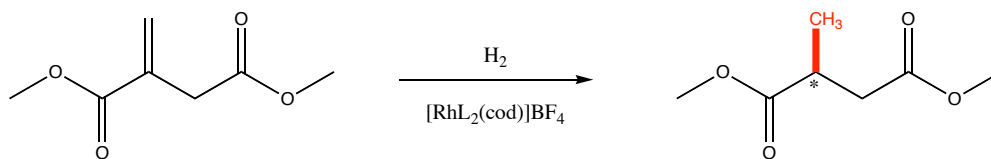


Abbildung 3.3: Hydrierung von Ithaconsäuredimethylester zu (R/S)-Methyl-Bernsteinsäuredimethylester

Seither haben sowohl Reetz als auch andere Gruppen [172–175] diese Erkenntnisse durch die Untersuchung weiterer vom BINOL abgeleiteter Liganden in Kombination mit vielen chiralen und achiralen Alkoholen und unterschiedlichsten Olefinen verallgemeinert. Des weiteren können außer BINOL auch andere chirale Diole verwendet werden.

3.1.1 Beschreibung des in dieser Arbeit untersuchten Systems

Der in dieser Arbeit untersuchte Katalysator stammt aus einer in der Gruppe von Prof. Reetz entwickelten Familie von Katalysatoren, die sich durch hohe Enantioselektivitäten und Ausbeuten auszeichnet. Die Liganden sind synthetisch leicht aus Phosphortrichlorid, (R oder S)-BINOL und dem entsprechenden Alkohol zugänglich. Die Herstellung des Katalysators erfolgt anschließend durch die Reaktion von $[\text{Rh}(\text{cod})_2]\text{BF}_4$ mit zwei Äquivalenten des Liganden.

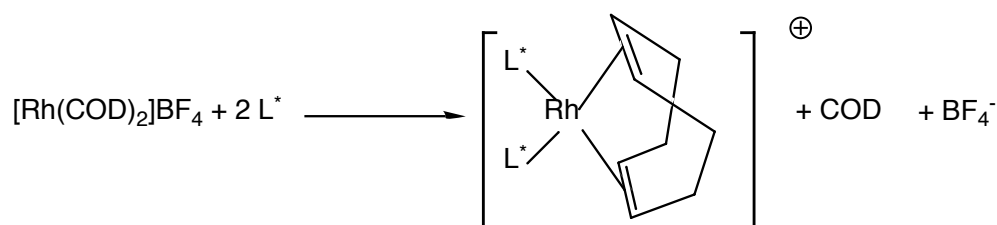


Abbildung 3.4: Synthese des Katalysators

Aus der Vielzahl der Katalysatoren (siehe Tabelle 3.1) stellt der Fall mit $\text{R} = \text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_3$ den für unsere Berechnungen optimalen Kompromiss zwischen der Größe des Liganden R und des *ee*-Wertes dar.

Die von Halpern et al. untersuchten Katalysatoren weisen geringe konformelle Flexibilität auf, da sie einen an das Rhodium gebundenen chelatisierenden Phosphorliganden enthalten. Die in der Gruppe von Reetz entwickelten Katalysatoren haben unverbrückte, monodentate Phosphor-Liganden am Rhodium-Atom gebunden und sind wegen der freien Drehbarkeit um die Rh-P Bindung flexibler als die Halpern-Systeme. Es lassen sich 6 Torsionswinkel definieren, die zur Klassifizierung der einzelnen Konformere des Liganden herangezogen werden können (siehe Abbildung 3.5):

- im P–Rh–P Fragment: die Torsionswinkel $\text{O}_{\text{iPr}}\text{-P-Rh-P}$ (θ_1 und θ_2)
- in den P–Liganden: die Torsionswinkel $\text{O-P-O-C}_{\text{iPr}}$ (θ_3 und θ_4) sowie $\text{P-O-C}_{\text{iPr}}\text{-H}$ (θ_5 und θ_6).

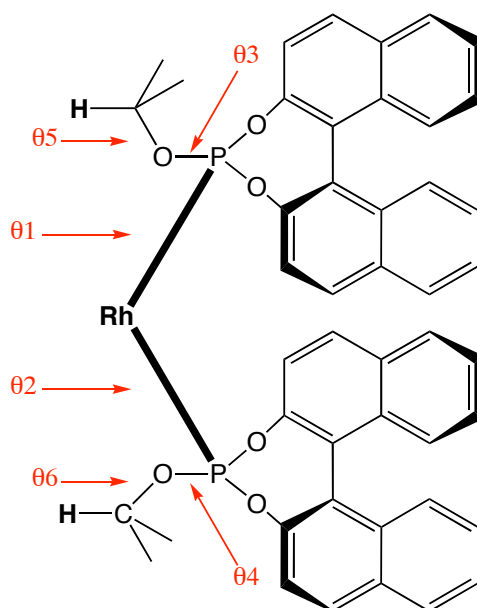


Abbildung 3.5: Die für die Flexibilität des Katalysatorfragmentes verantwortlichen Torsionswinkel

Die beiden Torsionen um die Rh-P Bindung (θ_1 und θ_2) haben im substratfreien Zustand die größte Auswirkung auf die zugängliche Fläche am Metallzentrum. Die anderen Torsionswinkel (θ_3 , θ_4 , θ_5 und θ_6) sind wegen der sterischen Wechselwirkung der raumgreifenden BINOL-Reste nicht unabhängig von θ_1 und θ_2 einstellbar. Nach der Koordination des Substrates an den Katalysator ist die unabhängige Drehbarkeit um die definierten Torsionswinkel nicht mehr gegeben, so dass für die Klassifizierung der einzelnen Konformere des Katalysators andere geometrische Parameter herangezogen werden (siehe Abbildung 3.6).

Ein weiteres Maß für die Unterschiedlichkeit der Katalysator-Substrataddukte ist der Abstand der C-Atome der zu hydrierenden Doppelbindung des Substrates zu der durch die beiden Phosphor- und das Rhodium-Atom definierte Ebene. Diese Abstände bestimmen den bevorzugten Reaktionsweg. Ist der Abstand von C_α zur Ebene kleiner als der Abstand von C_β zur Ebene, so wird der Reaktionsweg mit 'a' bezeichnet. Sind die Verhältnisse entgegengesetzt ($|d(C_\alpha)| > |d(C_\beta)|$), so liegt ein 'c' Reaktionsweg vor. Die hier verwendete Nomenklatur bezüglich 'a' und 'c' ähnelt der von Landis [147, 148, 151, 153] verwendeten. Im Folgenden

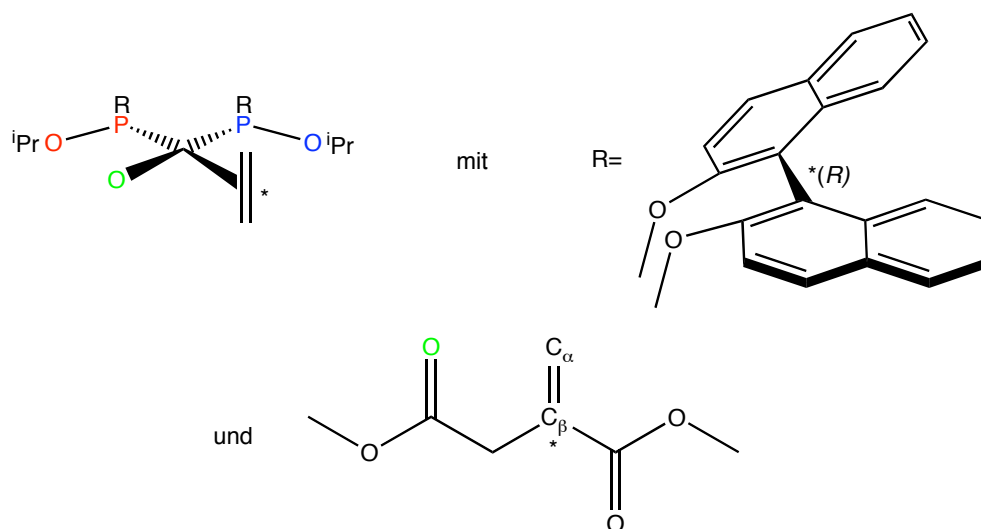


Abbildung 3.6: Formeln zur Definition der Torsionswinkel in Tabelle 3.2

ist die Benennung der Strukturen wie folgt definiert: R oder S geben die Chiralität des Produktes an, die nachfolgende Zahl (1 - 5) bezeichnet das Konformer des Katalysators, und a oder c gibt die jeweilige Richtung der Annäherung des H_2 Moleküls während der Reaktion an. Die durch einen Unterstrich abgetrennte Zahl steht für die Stelle im Reaktionsweg. So entspricht _01 dem Katalysator-Substratkomplex und _02 dem Übergangszustand der Anlagerung des Wasserstoffs an die Struktur _01. Die Minima sind also mit ungeraden Zahlen bezeichnet und die Übergangszustände mit geraden.

Konformer des Katalysators	O-P-P-O Torsionswinkel in °	O-P-Rh-O Torsionswinkel in °	$ dC_\alpha $ [Å]	$ dC_\beta $ [Å]	Name	ΔG [kcal/mol]
1	33	141	1.8	0.8	R1c_01	0
	58	108	0.2	1.1	R1a_01	5.9
	30	103	1.7	0.6	S1c_01	3.1
	30	148	0.5	1.6	S1a_01	2.4
2	27	-75	1.6	0.5	R2c_01	2.5
	27	-84	0.4	1.6	R2a_01	3.6

Fortsetzung auf der folgenden Seite

<i>Fortsetzung der vorherigen Seite</i>						
Konformer des Katalysators	O-P-P-O Torsionswinkel in °	O-P-Rh-O Torsionswinkel in °	$ dC_\alpha $ [Å]	$ dC_\beta $ [Å]	Name	ΔG [kcal/mol]
3	27	-79	1.9	1.0	S2c.01	2.2
	20	-73	0.2	1.1	S2a.01	5.0
	151	-78	1.8	0.7	R3c.01	0.8
					R3a.01	
	161	-81	1.5	0.3	S3c.01	4.0
	147	-82	0.1	1.4	S3a.01	3.8
	-90	142	1.5	0.2	R4c.01	2.1
	-77	138	0.2	1.4	R4a.01	2.8
	-105	117	1.9	0.9	S4c.01	2.3
	-101	154	0.2	1.4	S4a.01	4.5
5					R5c.01	
	-119	-60	0.0	1.3	R5a.01	4.1
	-122	-61	1.8	0.7	S5c.01	4.9
	-112	-61	0.2	1.4	S5a.01	5.4

Tabelle 3.2: Geometrische Parameter der verschiedenen Gruppen von Katalysator-Substratkomplexen (für die Definitionen der Torsionswinkel siehe Abbildung 3.6)

3.1.2 Beschreibung des Reaktionsmechanismus

Die beiden Reaktionswege für a und c sollen im Folgenden der Gegenstand der Betrachtung sein. Hierbei wird das R-Addukt als Beispiel genommen, der Reaktionsweg für S ist hierzu enantiomer. Im ersten von uns berechneten Schritt lagert sich molekularer Wasserstoff an das Addukt .01 an, hierbei muss der Übergangszustand .02 durchschritten werden. Das Wasserstoffmolekül im entstehenden Komplex .03 ist mit einem Ende auf ein C-Atom der Doppelbindung des Substrats ausgerichtet (siehe Abbildung 3.8). Versuche, die b und d Orientierung

gen des Wasserstoffmoleküls zu optimieren (siehe Abbildung 3.7) gelangen nur durch Fixierung des Wasserstoffs und führten zu hohen relativen Energien (4.65, 5.14, 4.88 und 4.05 kcal/mol für R1b_03, R1d_03, S1b_03 und S1d_03 relativ zum jeweiligen a beziehungsweise c Addukt). In freien Optimierungen kehrte der Wasserstoff stets in die a beziehungsweise c Orientierung zurück.

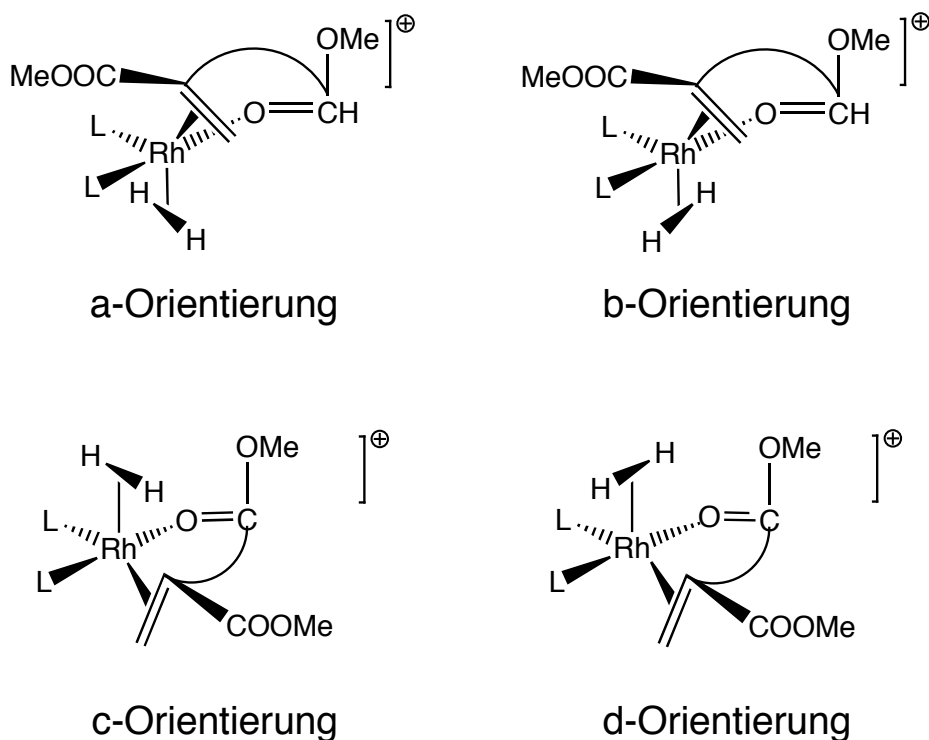


Abbildung 3.7: Die vier prinzipiellen Anordnungen von Substrat und H₂ für eine Katalysatorkonformation

Aus dem mit MolH₂ bezeichneten Komplex bildet sich durch eine Spaltung der H-H Bindung der Dihydrid-Komplex (DiHy). In diesem Komplex steht eines der Wasserstoffatome bereits cis zu einem der Kohlenstoffatome der Doppelbindung, so dass im nächsten Schritt die Addition leicht stattfinden kann (siehe Abbildung 3.9).

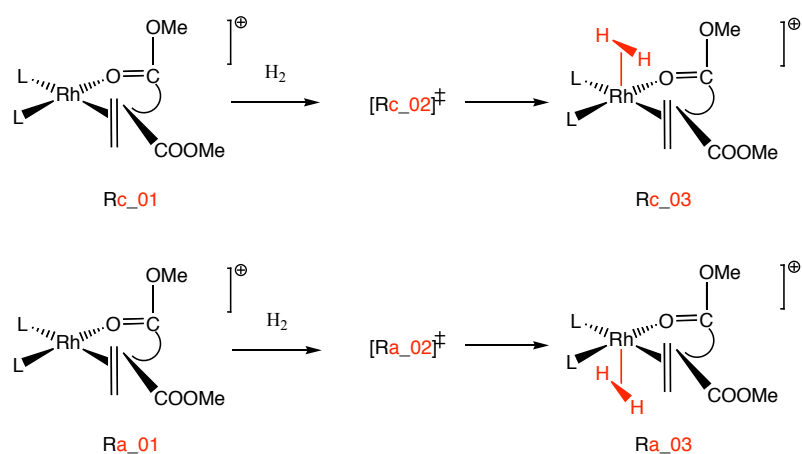


Abbildung 3.8: Anlagerung des Wasserstoffs an das Katalysator-Substrataddukt (_01) und Bildung von MolH2 (_03)

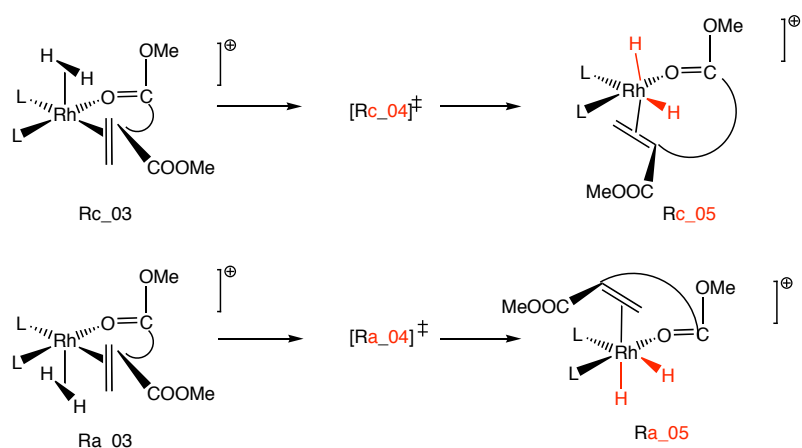


Abbildung 3.9: Spaltung des als H_2 gebundenen Wasserstoffs in MolH2 (_03) und Bildung von DiHy (_05)

Die Addition des cis stehenden H-Atoms an das α bzw. β -Kohlenstoffatom der Doppelbindung im Fall a beziehungsweise c findet über den Übergangszustand _06 statt. Im entstehenden Komplex (AlHy) ist das Wasserstoff-Atom trans-ständig zu dem noch an das Rh-Atom gebundene C-Atom der ehemaligen Doppelbindung (siehe Abbildung 3.10).

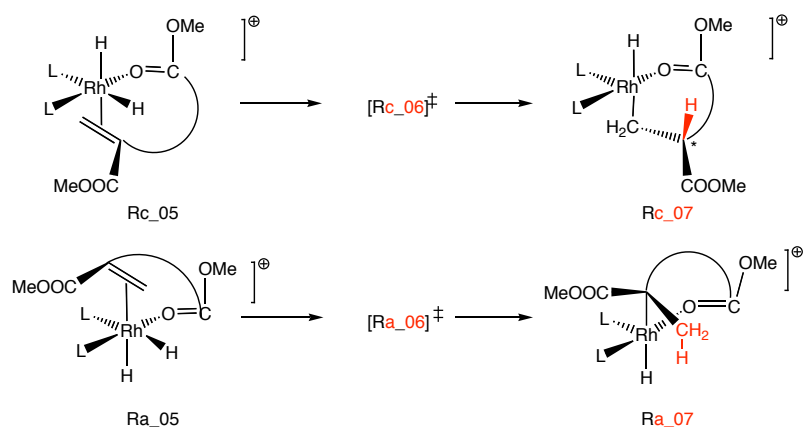


Abbildung 3.10: Übertragung des ersten H-Atoms von DiHy (.05) und Bildung von AlHy_t(.07)

Um aus .07 erneut ein H-Atom übertragen zu können, muss das H-Atom aus der trans- in die cis-Position umlagern (siehe Abbildung 3.11). Bei einigen Konformeren ist es aus sterischen Gesichtspunkten denkbar, dass an die jetzt vakant gewordene Position des ehemals trans-ständigen Wasserstoffatoms ein Solvensmolekül anlagern könnte. Diese mögliche Anlagerung wurde in keiner unserer Rechnungen berücksichtigt.

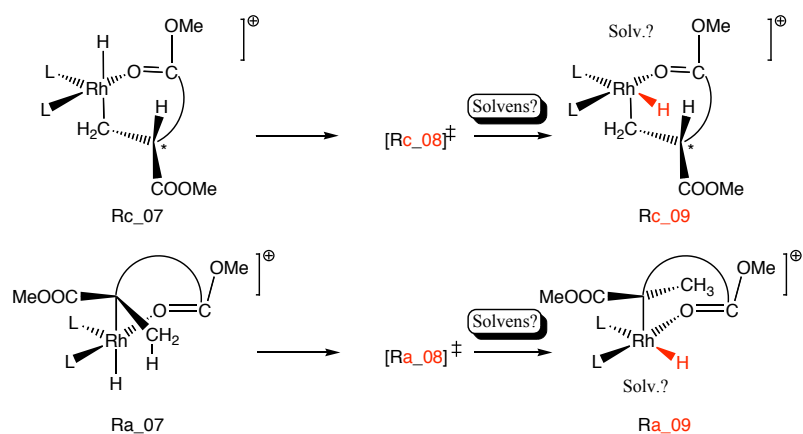


Abbildung 3.11: Umlagerung vom trans-ständigen AlHy_t (.07) zum cis-ständigen Alkylhydridkomplex AlHy (.09)

Die Übertragung des zweiten H-Atoms auf das jetzt cis-ständige C-Atom des Substrates (siehe Abbildung 3.12) ist der letzte in diesem Reaktionsmechanismus betrachtete Schritt. Aus sterischen Überlegungen ist es sehr wahrscheinlich, dass sich ein oder mehrere Solvens-Moleküle an das Rh-Atom anlagern.

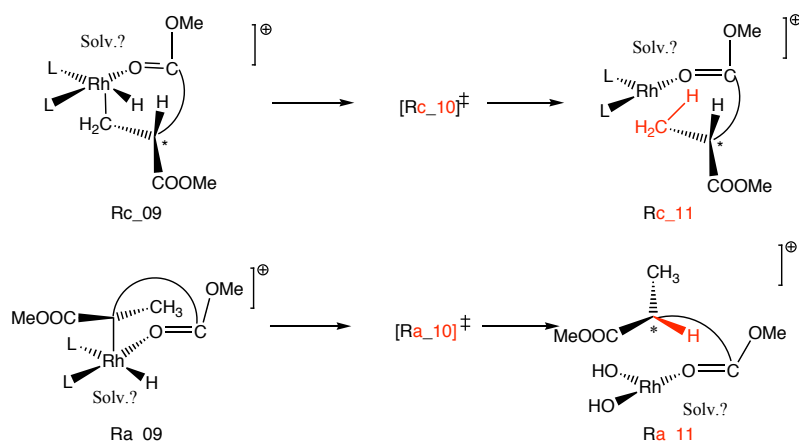


Abbildung 3.12: Übertragung des zweiten H-Atoms auf den Alkylhydrid-Komplex (_09) und Bildung des Produkt-Komplexes Prod (_11)

Die mit der Ablösung des Produktes vom Katalysator einhergehende Solvation wurde nicht berechnet. Ebenso wurde die Anlagerung des Substrates an den Katalysator, die zur Bildung einer _01 Spezies führt nicht berechnet, da auch hier die Anzahl der beteiligten Lösungsmittelmoleküle und der Reaktionsweg unklar sind (siehe Abbildung 3.13).

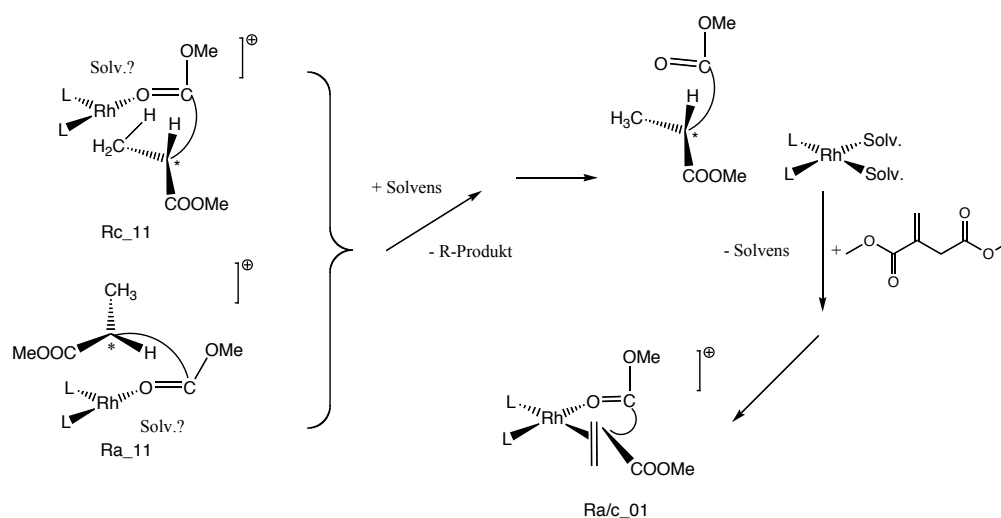


Abbildung 3.13: Ablösung des Produktes, Regeneration des Katalysators und Neubildung des Katalysator-Substratadduktes

Der hier dargestellte Reaktionsmechanismus ist analog zu dem von Halpern und Landis publizierten Mechanismus.

3.2 Ergebnisse

3.2.1 Verifikation der Methode

Im folgenden wird zunächst untersucht, ob die von uns gewählte Methode mit den Literaturdaten [147] vergleichbare Ergebnisse liefert. Des weiteren wird die Abhängigkeit der Ergebnisse von der Wahl des Funktional, des Basissatzes und der RI-Näherung überprüft.

Landis et al. verwendeten in ihren Untersuchungen [147] einen QM/MM-Ansatz (d. h. einen dreischichtigen ONIOM-Ansatz, bei dem ein kleiner innerer Teil mit DFT und einem großen Basissatz, ein etwas größerer Teil mit DFT und einem verkleinertem Basissatz und das restliche Molekül mit einer MM Methode beschrieben wird) und fixierten in einigen ihrer Geometrieoptimierungen ausgewählte Freiheitsgrade. Unsere Rechnungen wurden auf einem einheitlichen DFT-Niveau

(BP86 mit einem ECP-Basissatz für das Rhodium und 6-31G* für alle anderen Atome, siehe auch Kapitel 1.3.2) jeweils mit kompletter Geometrieoptimierung durchgeführt und sollten deshalb von der Methodik her qualitativ überlegen sein. Trotzdem erscheint es sinnvoll, die publizierten Ergebnisse [147] mit unseren Resultaten zu vergleichen, um deren Empfindlichkeit gegenüber dem gewählten Ansatz zu prüfen. Die technischen Details zu den von uns durchgeführten Rechnungen sind in Kapitel 1.3.2 zusammengefasst. Als Ausgangspunkt für unsere Optimierungen dienten die von Landis und Feldgus veröffentlichten stationären Punkte (Supplementary Material zu [147]). Die von Landis und Feldgus veröffentlichten ΔG -Werte für die einzelnen Strukturen sind unseren Werten in Tabelle 3.2.1 gegenübergestellt. Die weiter oben eingeführte Nomenklatur mit (.01 usw.) wurde hier aus Gründen der besseren direkten Vergleichbarkeit mit der Originalliteratur noch nicht verwendet.

Tabelle 3.2.1 enthält 14 Strukturen, die nur von uns und nicht in der publizierten Arbeit [147] lokalisiert wurden. Dabei handelt es sich um die zum gebundenen Produkt führenden Übergangszustände und die Übergangszustände der H₂ Anlagerung.

Die von Landis als nahezu energiegelich gefundenen Strukturen pro R und pro S (pro S ist um 0.07 kcal/mol energiereicher als pro R) sind in unseren Rechnungen um 0.47 kcal/mol verschieden: Das pro S Addukt ist stabiler, und somit hat das experimentell gefundene Produkt die selbe Chiralität (S) wie das stabilere Addukt.

Die Energieprofile aus unseren und den publizierten Rechnungen [147] sind sowohl im Falle des a-Weges als auch des c-Weges recht ähnlich, wie in Abbildung 3.14 sichtbar wird. Die Lage der Minima und der Punkte mit der höchsten Energie entsprechen einander, so dass davon ausgegangen werden kann, dass die Energie-Hyperflächen für beide Methoden ähnlich sind. Kleinere quantitative Unterschiede in den berechneten Energieprofilen sind angesichts der Unterschiede in den verwendeten Rechenmethoden (siehe oben) nicht überraschend.

An ausgewählten Verbindungen wurde die Abhängigkeit der Ergebnisse vom verwendeten Funktional und von der Größe des verwendeten Basissatzes überprüft. Die Ergebnisse sind in Tabelle 3.4 dargestellt. Als Referenz dient in allen folgenden Fällen das mit RI-BP86 und dem in Kapitel 1.3.2 angegebenen Basissatz

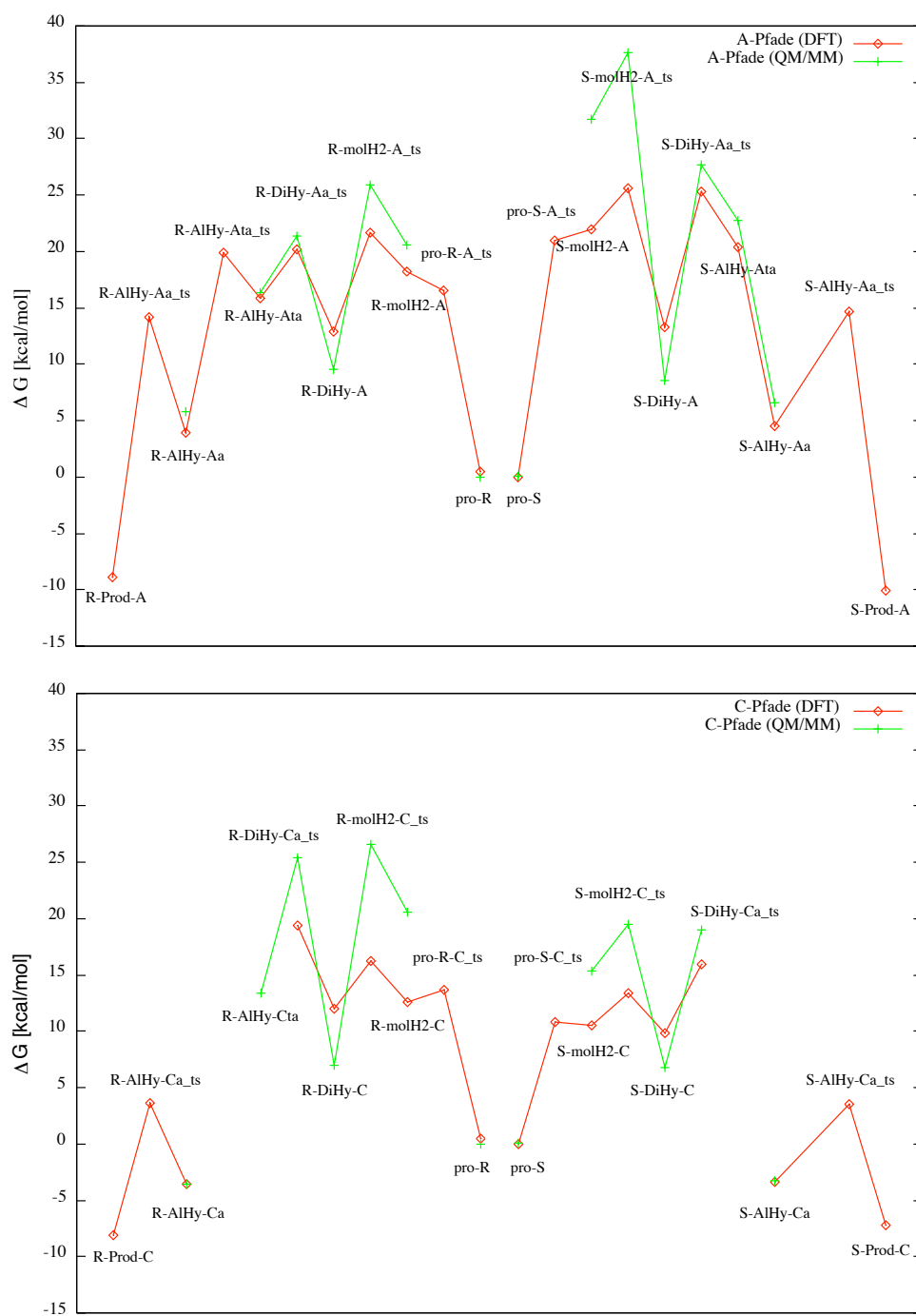


Abbildung 3.14: Vergleich der relativen Energien der DFT und QM/MM Rechnungen. Die Bezeichnungen der Übergangszustände sind jeweils über dem jeweiligen Datenpunkt angeordnet, die Bezeichnungen der Minima unterhalb des Datenpunktes.

Struktur	ΔG_{298}		Struktur	ΔG_{298}	
	DFT ^a	QM/MM ^b		DFT ^a	QM/MM ^b
R-Prod-C	−8.14		R-Prod-A	−8.92	
R-AlHy-Ca_ts	3.65		R-AlHy-Aa_ts	14.17	
R-AlHy-Ca	−3.52	−3.55	R-AlHy-Aa	3.88	5.84
			R-AlHy-Ata_ts	19.87	
R-AlHy-Cta		13.36	R-AlHy-Ata	15.88	16.32
R-DiHy-Ca_ts	19.37	25.37	R-DiHy-Aa_ts	20.22	21.40
R-DiHy-C	11.96	6.95	R-DiHy-A	12.93	9.50
R-MolH2-C_ts	16.22	26.58	R-MolH2-A_ts	21.64	25.92
R-molH2-C	12.60	20.59	R-molH2-A	18.19	20.59
proR-C_ts	13.70		proR-A_ts	16.51	
proR	0.47	0.00	proR	0.47	0.00
proS	0.00	0.07	proS	0.00	0.07
proS-C_ts	10.83		proS-A_ts	20.99	
S-molH2-C	10.49	15.39	S-molH2-A	22.01	31.72
S-MolH2-C_ts	13.35	19.52	S-MolH2-A_ts	25.64	37.66
S-DiHy-C	9.80	6.80	S-DiHy-A	13.33	8.58
S-DiHy-Ca_ts	15.98	19.05	S-DiHy-Aa_ts	25.31	27.72
			S-AlHy-Ata	20.39	22.77
S-AlHy-Ca	−3.41	−3.26	S-AlHy-Aa	4.47	6.56
S-AlHy-Ca_ts	3.52		S-AlHy-Aa_ts	14.71	
S-Prod-C	−7.24		S-Prod-A	−10.12	

^a RI-BP86 mit ECP-Basissatz für das Rh und 6-31G* für alle anderen Atome (siehe Kapitel 1.3.2)

^b dreischichtiger ONIOM-Ansatz (siehe [147])

Tabelle 3.3: Vergleich der relativen freien Energien [kcal/mol] aus unseren und publizierten Rechnungen [147]

erhaltene Ergebnis.

Aus Tabelle 3.4 geht hervor, dass für die ersten drei von uns berechneten Schritte der Reaktion keine signifikante Abhängigkeit der Ergebnisse von dem verwendeten Funktional, dem Basissatz oder der RI-Näherung besteht. Um die Basissatzabhängigkeit für die späteren Reaktionsschritte zu prüfen, wurden Single-Point-Rechnungen mit einem größeren Basissatz (TZVP) für je einen R- und einen S-Reaktionsweg durchgeführt. Die Ergebnisse dieser Berechnungen sind in Tabelle 3.5 dargestellt.

	TZVP ^a	PBE	Non-RI	Referenz ^b	TZVP ^a	PBE	Non-RI
	relative Energie				Abweichung zur Referenz		
R1c_01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
R1c_02	1.62		1.76	1.80	0.18		0.04
R1c_03	-7.51	-6.39	-5.86	-5.56	1.95	0.83	0.30
S2c_01	1.13	1.98	1.49	1.65	0.52	-0.34	0.15
S2c_02	1.77		1.98	2.15	0.38		0.17
S2c_03	-7.53	-7.12	-5.83	-5.63	1.91	1.50	0.21

^a TZVP-Single-Point-Rechnungen an optimierten Strukturen

^b Mittels des in Kapitel 1.3.2 angegebenen Basissatzes und RI-BP86 erhaltene Energien

Tabelle 3.4: Vergleich der relativen Energien [kcal/mol] ausgewählter Strukturen bei verschiedenem Basissatz, geändertem Funktional und Weglassen der RI-Näherung.

In Abbildung 3.15 sind die relativen Energien aus Tabelle 3.5 graphisch aufgetragen. Aus dieser Auftragung lässt sich leicht ablesen, dass die Energieprofile in beiden Fällen sehr ähnlich sind. Insbesondere die Barrieren der einzelnen Reaktionsschritte werden durch eine Vergrößerung des Basissatzes nicht stark beeinflusst.

Demnach sind die von uns verwendete Methode und die Basissätze gut geeignet, das zu untersuchende System zu beschreiben.

Struktur	TZVP ^a ΔE [kcal/mol]	Referenz ^b	Barriere	TZVP ^a Barrieren [kcal/mol]	Referenz ^b
R1c_01	0.00	0.00			
R1c_02	1.62	1.80	R01→03	1.62	1.80
R1c_03	-7.51	-5.56	R03→01	9.13	7.36
R1c_04	-3.81	-1.56	R03→05	3.70	4.00
R1c_05	-7.88	-7.20	R05→03	4.07	5.64
R1c_06	6.49	8.01	R05→07	14.37	15.21
R1c_07	5.74	6.72	R07→05	0.75	1.29
R1c_08	7.96	9.23	R07→09	2.22	2.51
R1c_09	-4.65	-5.53	R09→07	-12.61	-14.76
S2c_01	1.13	1.65			
S2c_02	1.77	2.15	S01→03	0.64	0.50
S2c_03	-7.53	-5.63	S03→01	9.30	7.77
S2c_04	-3.93	-1.72	S03→05	3.60	3.91
S2c_05	-7.93	-7.38	S05→03	4.00	5.66
S2c_06	6.90	7.75	S05→07	14.83	15.13
S2c_07	6.49	7.09	S07→05	0.42	0.66
S2c_08	9.00	10.00	S07→09	2.51	2.91
S2c_09	-4.63	-3.25	S09→07	-13.63	-13.25

^a TZVP-Single-Point-Rechnungen an optimierten Strukturen

^b Mittels des in Kapitel 1.3.2 angegebenen Basissatzes und RI-BP86 erhaltene Energien

Tabelle 3.5: Vergleich der relativen Energien [kcal/mol] und der dazugehörigen Barrieren mit TZVP-Basis und dem in dieser Arbeit verwendeten Basissatz

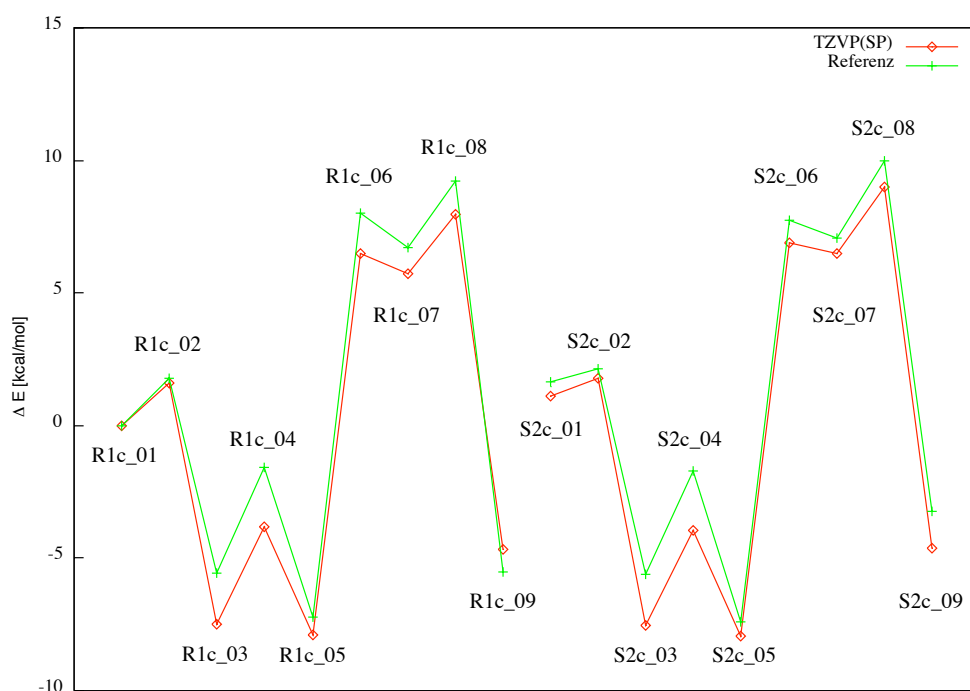


Abbildung 3.15: Vergleich der relativen Energien [kcal/mol] zweier Reaktionspfade mit dem Standard-Basissatz und TZVP-Single-Point Rechnungen. Die Bezeichnungen der Übergangszustände sind jeweils über dem jeweiligen Datenpunkt angeordnet, die Bezeichnungen der Minima unterhalb des Datenpunktes.

3.2.2 Ergebnisse für das Reetz-System

Die von Landis et al. untersuchten Katalysatoren mit bidentaten Phosphinliganden haben nur wenige mögliche Konformere und daher auch nur vier relevante Reaktionswege (a und c für jeweils R- und S-Produkt). Wie bereits aus Tabelle 3.2 abzulesen ist, sind die Rhodiumkatalysatoren mit monodentaten Phosphinliganden viel komplexer: Es gibt fünf verschiedene Konformere des Katalysatorgerüsts. Die energetisch günstigsten Formen für die R- und S-Anlagerung des Substrates sind in Abbildung 3.16 dargestellt.

Zu jeder Konformation existieren jeweils zwei Anlagerungsmöglichkeiten für das Substrat (R und S) sowie zwei Wege, über die der Wasserstoff energetisch günstig anlagern kann (siehe Abbildung 3.17).

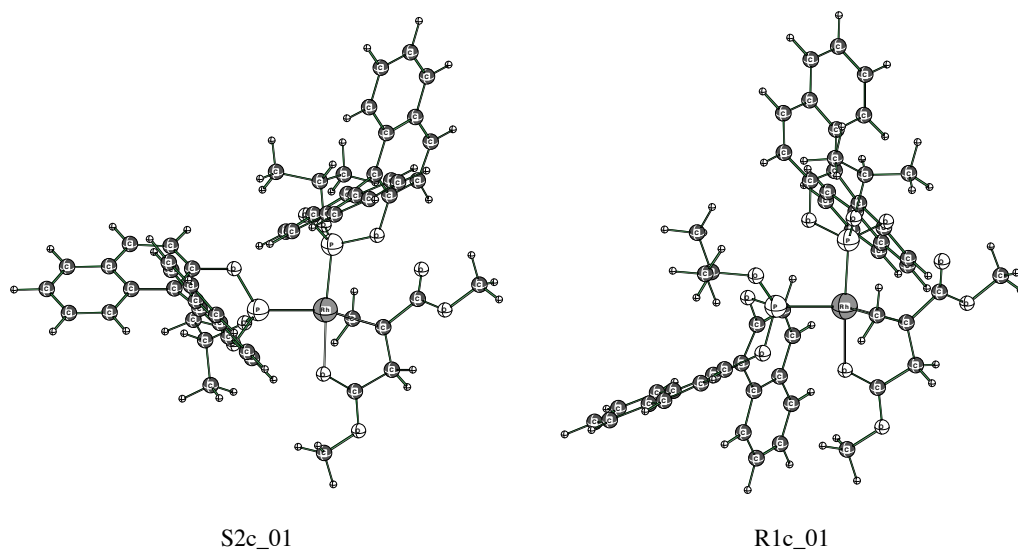


Abbildung 3.16: Darstellung der energetisch günstigsten Konformere: S2c_01 und R1c_01

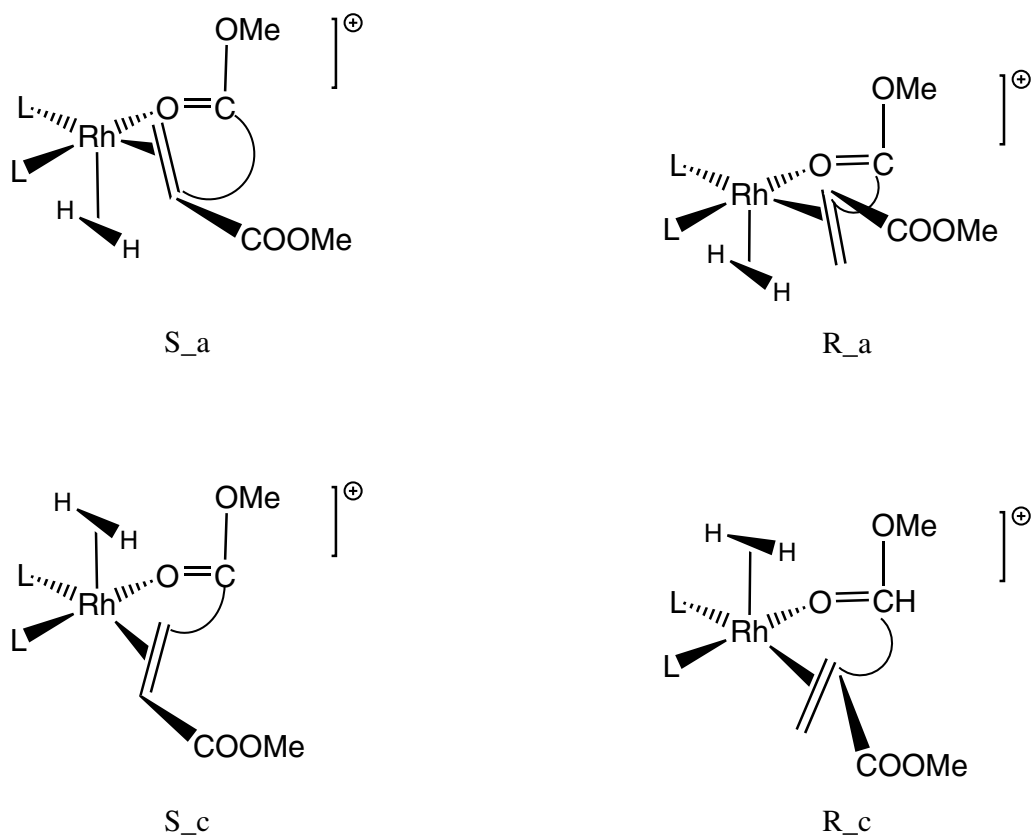


Abbildung 3.17: Die vier untersuchten Anordnungen von Substrat und H₂ für eine Katalysatorkonformation

In Tabelle 3.6 sind die berechneten Reaktionswege aufgelistet.

Trägt man die ΔG Werte aus Tabelle 3.6 nach a- und c-Reaktionspfaden gruppiert gegen die Nummer der Struktur im Reaktionspfad wie in Abbildung 3.18 auf, so wird die Ähnlichkeit der R und S Produkt ergebenden Reaktionswege offensichtlich.

Auf Grund der ähnlichen Barrieren ist nicht einfach vorhersagbar, welches Enantiomer im Laufe der Reaktion bevorzugt gebildet werden wird. Experimentell ist bekannt, dass die Reaktion mit einem *ee*-Wert 98% für R abläuft. Hier entsteht also aus dem stabileren Addukt das Hauptprodukt. Dieses Verhalten ist entgegengesetzt zu den von Halpern et al. untersuchten Systemen.

Betrachten wir zunächst die jeweils zwei energieniedrigsten Reaktionspfade für R und S (R1c, R3c, S2c und S1a), unter der Annahme, die Produktverteilung sei nur durch die relativen Stabilitäten der Addukte .01 bestimmt. Das Verhältnis der Konzentrationen von P_R zu P_S lässt sich dann wie folgt schreiben:

$$\frac{[P_R]}{[P_S]} = \frac{[A_R]}{[A_S]} = \frac{\sum_i [A_{Ri}]}{\sum_j [A_{Sj}]} = \frac{\sum_i \exp\left[-\frac{\Delta G_{A_{Ri}}}{RT}\right]}{\sum_j \exp\left[-\frac{\Delta G_{A_{Sj}}}{RT}\right]}$$

Aus der obigen Gleichung erhält man mit R1c, R3c, S2c und S1a einen *ee*-Wert von 92% R. Berücksichtigt man alle Addukte X.01 bis zu einer Energie von 3 kcal/mol (X= R1c, R3c, R4c, R2c, R4a, S2c, S4c und S1a), so ergibt sich ein *ee*-Wert von 91% R.

Betrachtet man die Produktverteilung als Ergebnis kinetischer Kontrolle, so ergibt sich der Ausdruck für das Verhältnis der Produkte als:

$$\begin{aligned} \frac{\frac{d[P_R]}{dt}}{\frac{d[P_S]}{dt}} &= \frac{[P_R]}{[P_S]} = \frac{\sum_i k_{A_{Ri} \rightarrow P_R} [A_{Ri}]}{\sum_j k_{A_{Sj} \rightarrow P_S} [A_{Sj}]} \\ &= \frac{\sum_i \exp\left[\frac{\Delta G_{TS(A_{Ri} \rightarrow P_R)}}{RT}\right]}{\sum_j \exp\left[-\frac{\Delta G_{TS(A_{Sj} \rightarrow P_S)}}{RT}\right]} \end{aligned}$$

X	X_01	X_02	X_03	X_04	X_05	X_06	X_07	X_08	X_09	X_10	X_11
R1c	0	9.47	6.59	9.20	5.36	18.31	18.61	19.96	6.71	14.20	3.96
R3c	0.78	8.31	7.79	12.66	8.98	21.99	23.40	23.15	9.73	15.70	1.87
R4c	2.09		11.08		9.69	21.89	20.78		8.74		
S2c	2.19	9.59	6.64	9.36	6.00	18.79	19.72	21.39	8.58	12.99	0.43
S4c	2.26		8.31		6.85	19.82	19.54	22.26	9.34		
S1a	2.35	11.02	8.25	10.41	6.90	11.48	8.96	20.13	10.44	13.38	0.28
R2c	2.46										
R4a	2.84		13.85		12.30	16.51	14.04	26.67	13.38		
S1c	3.14		11.07		11.33	23.38	23.17		8.40		
R2a	3.56		9.89		7.78	13.18	10.75	22.71	11.63		
S3a	3.76										
S3c	4.01		11.76		9.28	21.47	20.31		10.72		
R5a	4.12										
S2a	4.52		13.93		11.46	16.31	13.55	24.51	14.30		
S4a	4.90										
S5c	5.02										
S5a	5.40										
R1a	5.87										
R3a											
R5c											

Tabelle 3.6: ΔG_{298} Werte für die untersuchten Reaktionspfade

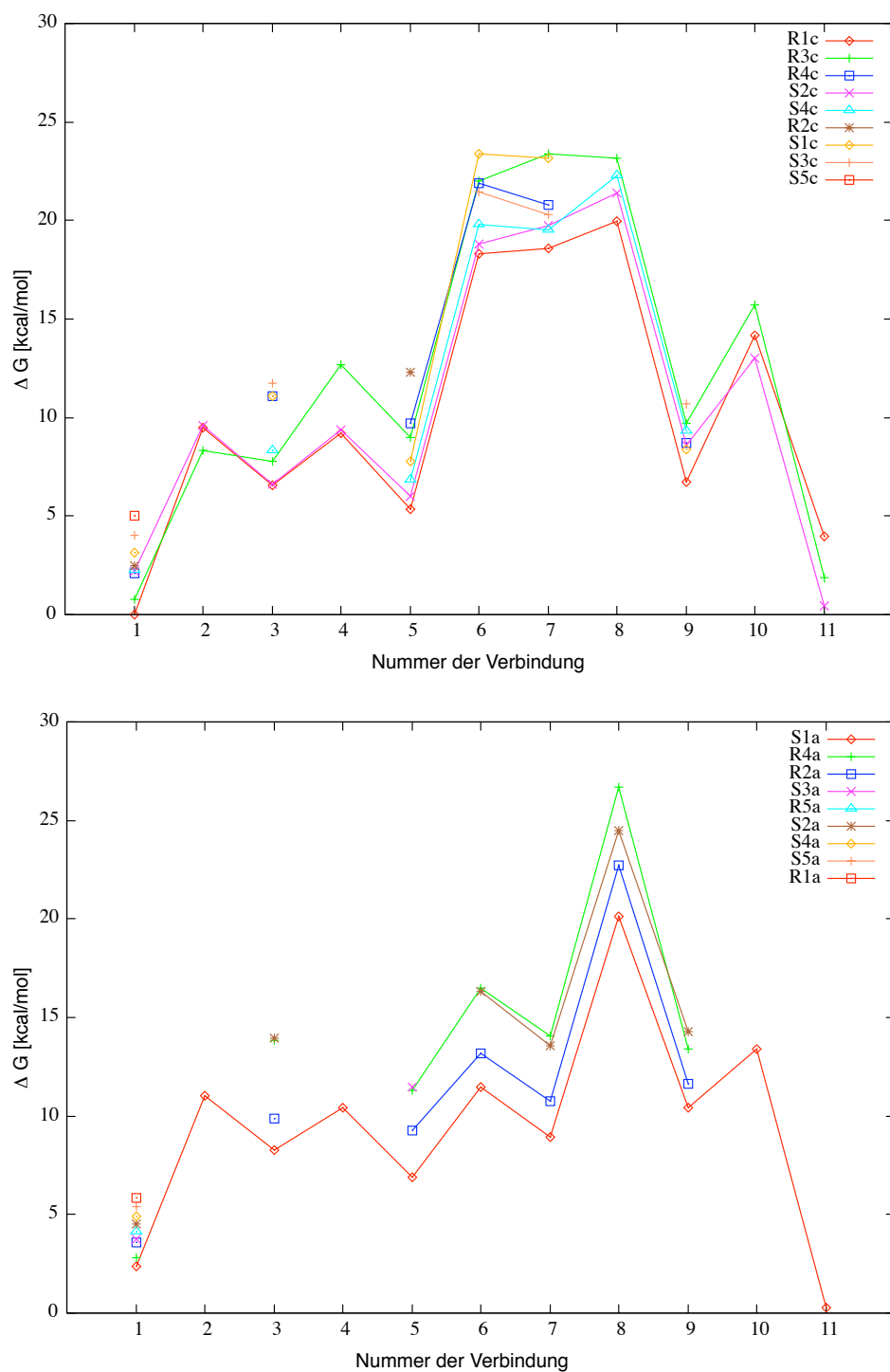


Abbildung 3.18: Auftragung der ΔG Werte für die a- und c-Reaktionswege

Setzt man den jeweils höchsten Punkt der jeweiligen Reaktionswege ein (19.96, 22.62, 19.20 und 17.78 kcal/mol für R1c, R3c, S2c und S1a), so erhält man einen *ee*-Wert von 95% S. Betrachtet man die jeweils höchste Barriere für einzelne Elementarschritte auf den Reaktionswegen (13.25, 14.42, 13.72 und 11.17 kcal/mol für R1c, R3c, S2c und S1a), so resultiert ein *ee*-Wert von 94% S. Diese Ergebnisse decken sich nicht mit dem experimentellen Befund, einem *ee*-Wert von 98% R.

Da in Halpern-Systemen die Analyse mittels der höchsten Barriere zum richtigen *ee*-Wert führt, stellt sich die Frage, worin sich die Halpern- von den Reetz-Systemen unterscheiden.

Aus den von Halpern veröffentlichten Messungen zur Kinetik der asymmetrischen Hydrierung von Methyl-(Z)-acetaminosäure [152] geht hervor, dass hier die Einstellung des Gleichgewichtes Katalysator + Substrat $\rightleftharpoons$ Addukt im Vergleich zu den Folgereaktionen sehr schnell vonstatten geht. Somit entscheiden die Barrieren im weiteren Reaktionsverlauf über die Konfiguration des Produktes. Ein weiteres Indiz ist die starke Abhängigkeit des *ee*-Wertes vom Wasserstoffdruck. Bei den Reetz-Systemen wurde experimentell keine Abhängigkeit der Produktzusammensetzung vom Wasserstoffdruck beobachtet [176].

In der folgenden Diskussion beziehen sich die Begriffe "thermodynamische Kontrolle" und "kinetische Kontrolle" nicht auf die Gesamtreaktion, sondern auf die ersten Elementarschritte, d. h. Adduktbildung und -zerfall sowie Wasserstoffanlagerung. Bei den "kinetisch kontrollierten" Halpern-Systemen ist das Gleichgewicht Katalysator + Substrat $\rightleftharpoons$ Addukt schnell im Vergleich zur nachfolgenden H₂ Addition. In anderen Worten: Die Barriere für den Zerfall des Adduktes in Katalysator und Substrat ist hier kleiner als die Barriere der Wasserstoffaddition. In dem von uns untersuchten Reetz-System kann in erster Näherung angenommen werden, dass die H₂ Addition leichter abläuft als der Zerfall des Adduktes zu Substrat + Katalysator. Für eine quantitative Aussage über die energetischen Verhältnisse der relativen Energien für die Zerfallsreaktion fehlen in unseren Rechnungen die Effekte der wahrscheinlich im Mechanismus beteiligten Lösungsmittelmoleküle. Um qualitativ abschätzen zu können, ob es einen Unterschied in der für den Zerfall benötigten Energie gibt, wurden Rechnungen durchgeführt, in deren Verlauf der Abstand des Substrates zum Rhodium-Atom

kontinuierlich in Schritten von 0.15 Å vergrößert wurde. Für die Landis-Systeme wurde der Abstand zwischen dem Rh-Atom und dem N-Atom der NH-Gruppe des Substrates gewählt und für die Reetz-Systeme der Abstand zwischen dem Rh-Atom und der CH₂-Gruppe des Substrates. Der Abstand des N- beziehungsweise C-Atoms vom Rh-Atom wurde eingefroren und alle anderen Freiheitsgrade optimiert. Der Verlauf der relativen Energien ist in Abbildung 3.19 dargestellt. Aus dieser Auftragung lässt sich ablesen, dass für den Zerfall der Reetz-Systeme (R1c und S2c) etwa 8 kcal/mol mehr Energie aufzuwenden ist als im Fall der Landis-Systeme (pro R und pro S).

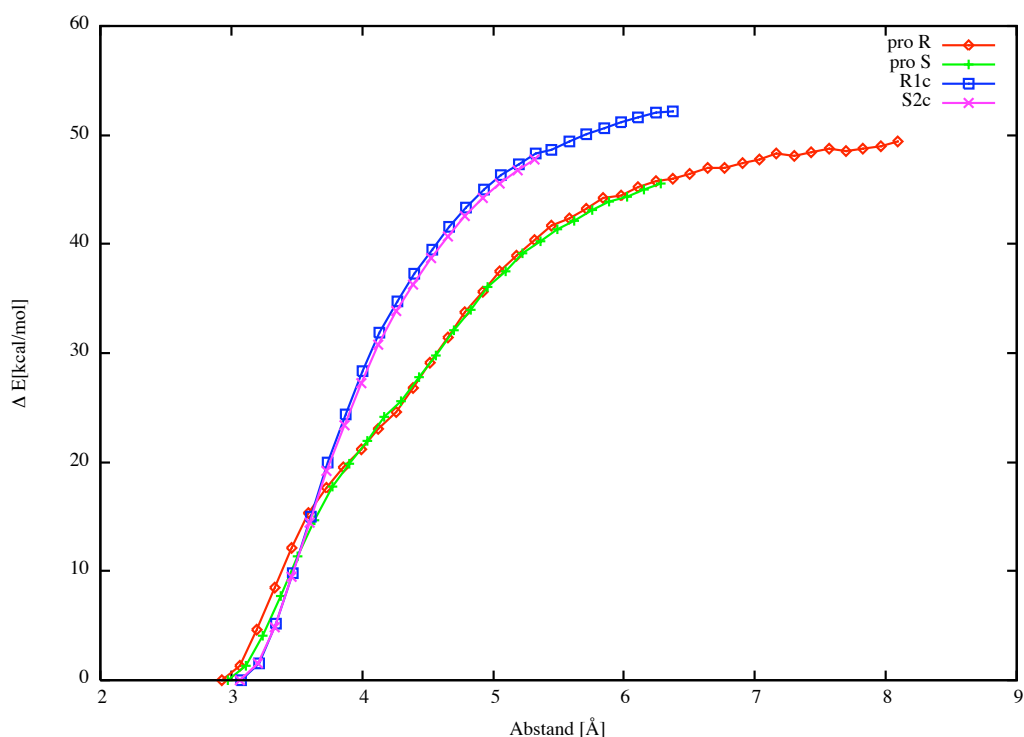


Abbildung 3.19: Auftragung der relativen Energien [kcal/mol] gegen den Abstand des Substrats

Mit den bisher berechneten Ergebnissen lässt sich der Ursprung der Enantioselektivität bei den Halpern- und Reetz-Systemen wie folgt zusammenfassen:

- In den von Halpern untersuchten Systemen ist die Umwandlung der Addukte viel schneller als die nachfolgenden Schritte der Hydrierung. Daher bestimmt der schnellste Reaktionspfad der Hydrierung die Stereochemie des Produktes; die Reaktion ist also kinetisch durch die höchste Barriere des schnellsten Pfades für die Hydrierung kontrolliert. Dieser Ansatz erklärt das Halpern-, nicht aber das Reetz-System.
- In den von Reetz untersuchten Systemen ist die Umwandlung der Addukte langsamer als die geschwindigkeitsbestimmenden Schritte der weiterführenden Reaktionspfade. So reagiert näherungsweise jedes Addukt zum entsprechenden Produkt weiter: die Reaktion ist also thermodynamisch durch die relativen Stabilitäten der Addukte kontrolliert. Dieser Ansatz kann das Reetz-, jedoch nicht das Halpern-System erklären.

Es ist schwierig, das Ergebnis einer Reaktion vorherzusagen, die in vielen Elementarschritten und auf miteinander verbundenen Pfaden abläuft. Betrachtet man lediglich die Energieunterschiede, so muss man annehmen, dass die Konzentrationen der Zwischenstufen keinen nennenswerten Einfluss auf die Produktverteilung haben werden. In einer Reaktion mit mehreren Elementarschritten wäre diese Annahme nur zutreffend, wenn die Konzentrationen der Reaktanden (und der Zwischenstufen) zumindest ähnlich wären. Da wir hier aber katalytische Reaktionen untersuchen, in denen üblicherweise eine Komponente (der Katalysator) in sehr geringer Konzentration vorliegt und mindestens eine andere Komponente (wie z. B. der Wasserstoff) in großem Überschuss vorliegt, kann eine Simulation der Kinetik mittels einer stochastischen Methode realistischere Ergebnisse liefern als die bloße Betrachtung der Energiedifferenzen.

Die im Folgenden dargestellten Ergebnisse entstammen den kinetischen Simulationen von Angermund [177]. Für drei Reaktionspfade (R1c, S2c und S1a) wurden drei verschiedene Szenarien für die Bildung des ersten Adduktes (X_01) betrachtet. In allen dreien ist das R-Addukt (R1c_01) das thermodynamisch bevorzugte Produkt. Allen drei Szenarien liegt die Annahme zugrunde, dass der Katalysator und das Substrat in unendlicher Entfernung eine um 11 kcal/mol höhere Ener-

gie aufweisen als das jeweilige Addukt X_01. Für alle nachfolgenden Barrieren wurden die mit DFT-Methoden berechneten Werte eingesetzt.

Im ersten Szenario ist die Energie des Übergangszustandes der Adduktbildung (R1c_00) 5 kcal/mol höher als die Edukte. Für S2c und S1a wurde angenommen, dass die Energie der jeweiligen Übergangszustände um den selben Betrag höher liegt, um den die Addukte gegenüber R1c_01 erhöht sind. In anderen Worten: die Barriere der Rückreaktion $X_{01} \rightarrow \text{Katalysator} + \text{Substrat}$ ist für alle drei Pfade gleich hoch. Dieser Satz von Annahmen ergibt einen *ee*-Wert von 86% R, was in gutem Einklang mit dem experimentell gefundenen Wert steht. Hier ist die Bildung des R1c_01 Adduktes sowohl thermodynamisch als auch kinetisch bevorzugt, und die Synergie beider Effekte führt zu dem gefundenen *ee*-Wert.

Im zweiten Szenario wird die Energie des Übergangszustandes X_00 für alle drei Pfade 5 kcal/mol über der Energie von Katalysator und Substrat angenommen. Die Barriere der Rückreaktion ist hier also für die beiden S-Pfade im Vergleich zum ersten Szenario verringert, die Barriere der Hinreaktion ist für R und S gleich. Dieser Satz von Annahmen führt zu einem berechneten *ee*-Wert von 14% S. Hier reicht allem Anschein nach die thermodynamische Bevorzugung des R1c_01 Adduktes nicht aus, um die in den Folgereaktionen auftretende, gegenläufige kinetische Kontrolle auszugleichen.

Im dritten Szenario wird nun die Energie von R1c_00 bei 16 kcal/mol konstant gehalten und die beiden Übergangszustände für die S-Pfade um den selben Betrag erniedrigt, um den die X_01 Addukte gegenüber R1c_01 erhöht sind. Mit anderen Worten: sowohl die Hin- als auch die Rückreaktion der S-Pfade wird hier bevorzugt. Diese Annahmen führen zu einem berechneten *ee*-Wert von 56% S, was in klarem Widerspruch zu der im Experiment gefundenen Stereoselektivität steht. Die kinetische Benachteiligung der Bildung des R1c_01 Adduktes wirkt offensichtlich mit der in den Folgereaktionen zusammen, so dass der *ee*-Wert nicht mit dem im Experiment gefundenen übereinstimmt.

Für das von uns untersuchte Reetz-System legen die Simulationen somit nahe, dass die Stereoselektivität auf dem Zusammenwirken der thermodynamischen und der kinetischen Bevorzugung des ersten Reaktionsschrittes für R1c beruht.

Ausgehend von diesen Ergebnissen kann man der Frage nachgehen, ob die höhere Stabilität eines der Addukte bei einem Reetz-System immer zur bevorzugten Bildung des Produktes mit der gleichen Chiralität führen muss. In der Praxis wurden einige Fälle kooperativer Effekte bei der Mischung verschiedener Chiralitäten der BINOL-Liganden und der Größe der Alkoxy-Gruppe gefunden. Sperrige Alkoxy-Liganden (z. B. t-Butyl) führen dazu, dass die im Experiment ermittelte Konfiguration des Produktes entgegengesetzt zu der des stabilsten Adduktes ist. Für diese Fälle sollte eine systematische Untersuchung der Reaktionspfade mit anschließender Übertragung der berechneten Barrieren in ein stochastisches Modell zur Klärung der Frage des Ursprungs der Stereoselektivität beitragen können.

Kapitel 4

Zusammenfassung

4.1 Homogene Olefinpolymerisation

Ausgangspunkt für dieses Projekt war die Tatsache, dass in dem von Angermund et al. aufgestellten statistischen Modell die bei erhöhter Temperatur zunehmende Isotaktizität des Katalysators $\text{iPr(3-iPr-CpFlu)ZrCl}_2$ nicht wiedergegeben werden konnte, während die hohe Isotaktizität des tert-Butyl substituierten Katalysators richtig vorhergesagt wurde.

Eine Berechnung der relevanten Strukturen mit DFT-Methoden an Stelle der vorherigen QM/MM Methode brachte keine signifikante Verbesserung der Vorhersage. Daher wurde die Annahme, der iPropyl Substituent am Cp-Ring rotiere bei höheren Temperaturen und hätte somit den gleichen sterischen Anspruch wie eine tert-Butyl Gruppe, mittels CPMD-Rechnungen überprüft. Hierbei stellte sich heraus, dass die Rotation der iso-Propylgruppe nicht stattfindet. Des weiteren wurde die dem oben genannten statistischen Modell zu Grunde liegende Annahme unabhängiger Insertionsereignisse bestätigt.

Das auf strikter Alternanz der Enantioseiten beruhende Modell kann somit die erhöhte Isotaktizität nicht erklären. Deshalb wurde die insertionslose Inversion am Metallzentrum via back-skip in dieser Arbeit an Modellsystemen erstmalig berechnet. Im System $\text{CH}_2\text{Cp}_2\text{ZrC}_4\text{H}_9^+$ steigt die Barriere für die Insertion bei Temperaturerhöhung stärker an als die Barriere für den back-skip, so dass ab

einer bestimmten Temperatur der back-skip bevorzugt ablaufen kann, was eine Erklärung für das experimentell gefundene Ansteigen der Isotaktizität bietet.

Um den im Experiment vorliegenden Bedingungen Rechnung zu tragen, wurde eine COSMO Studie durchgeführt. Der Einfluss des Lösungsmittels auf die Strukturen und relativen Energien der Katalysator-Kette Komplexe war nicht signifikant.

Um die Effekte der Gegenionen zu studieren, wurde $[\text{CH}_3\text{B}(\text{C}_6\text{F}_5)_3]^-$ als Modell-anion gewählt, welches sowohl koordinierend über die Methylgruppe als auch nicht-koordinierend mit den Fluor-Atomen der C_6F_5 -Ringe mit dem Katalysator wechselwirken kann. Im Falle der Koordination fand immer eine Wechselwirkung mit dem Metallzentrum und eine damit einhergehenden Verschiebung der Kette statt. Das Gegenion blockierte somit die Koordinationsstelle für das nächste Monomer. Eine wiederholt stattfindende Koordination/Ablösung des Gegenions widerspricht allerdings den experimentell bestimmten hohen Reaktionsraten für die Propenpolymerisation. Bei erhöhten Temperaturen sollte der Einfluss der Gegenionen weniger stark bemerkbar sein.

4.2 Asymmetrische Hydrierung

Bis zum Jahr 2000 war es die allgemein anerkannte Meinung, dass hohe Enantioselektivitäten für die asymmetrische Hydrierung nur mit bidentaten, chelatisierenden Phosphor-Liganden erreichbar seien. Die von Reetz und anderen Gruppen entdeckten monodentaten Phosphor-Liganden geben jedoch ähnlich hohe Enantioselektivitäten wie die chelatisierenden Liganden. In diesem Projekt wurde eine DFT Studie unternommen, ob die für die chelatisierenden Liganden formulierten Konzepte ebenso für monodentate Systeme gelten.

Ausgehend von dem allgemein anerkannten Mechanismus für die bidentaten Systeme, der auch in unserer Validierungsstudie bestätigt wurde, finden sich für die Systeme mit bidentaten Phosphorliganden zwei relevante Katalysator-Substrat Addukte: Für die von uns untersuchten Systeme mit monodentaten Liganden gibt es hingegen fünf Katalysatorkonformere, die sich durch die Torsionen um die Rhodium-Phosphor Bindung unterscheiden lassen. Jedes dieser Konformere kann

das Substrat auf Grund der fehlenden C_2 Symmetrie in vier verschiedenen Orientierungen anlagern. Jede dieser Orientierungen kann prinzipiell vier verschiedene Arten der cis-Addition des H_2 -Moleküls durchführen, von denen aber jeweils eine stark bevorzugt ist. So ergeben sich 20 mögliche Addukte, die jeweils Ausgangspunkt eines Reaktionspfades sind.

Alle Addukte wurden bestimmt, und für das jeweils energieniedrigste Addukt (R1c und S2c) sowie zwei weitere Addukte (R3c und S1a) wurde der komplette Reaktionspfad berechnet. Das energieniedrigste Addukt hat die selbe Konfiguration wie das Hauptprodukt. Berechnet man auf Grund der relativen Energien der Addukte bis zu einem Wert von 3 kcal/mol den *ee*-Wert, so ergeben sich 91%. Der experimentell gefundene Wert beträgt 98%. In dem von uns untersuchten Reetz-System kann man also von einem Schlüssel-Schloss Prinzip sprechen, im Gegensatz zu den Landis-Systemen.

In dem von Landis berechneten, bidentate Liganden enthaltenen System hat die Wasserstoff-Addition die höchste Barriere, in den von uns untersuchten Systemen ist die höchste Barriere dagegen für die "c" Wege die Übertragung des ersten Wasserstoffatoms und für die "a" Wege die Umlagerung vom trans- zum cis Alkylhydridkomplex. Dieser Unterschied der Barrieren reicht laut stochastischer Simulationen der Kinetik nicht aus, um das unterschiedliche Verhalten zu erklären. Eine Erklärung wird möglich, wenn man das Verhältnis der Barriere der Rückreaktion von Addukt $\rightleftharpoons$ Katalysator + Substrat zur Barriere der Wasserstoffaddition betrachtet.

In dem von Landis untersuchten System muss, um die experimentellen Ergebnisse reproduzieren zu können, in der kinetischen Simulation die Barriere für die Rückreaktion kleiner sein als die höchsten Barrieren der betrachteten Reaktionspfade; die Reaktion kann als durch die Wasserstoffanlagerung kinetisch kontrolliert betrachtet werden. In dem von uns untersuchten System müssen, um die experimentellen Ergebnisse reproduzieren zu können, in der kinetischen Simulation die Barrieren der Rückreaktion höher sein als die höchsten Barrieren der betrachteten Reaktionspfade; die Reaktion kann als durch die Adduktstabilitäten thermodynamisch kontrolliert angesehen werden.

4.3 Homogeneous Olefin Polymerization

The statistical model proposed by Angermund et al. was not able to reproduce the increased isotacticity of the catalyst $\text{iPr}(3\text{-iPr-CpFlu})\text{ZrCl}_2$ at higher temperatures. However, the high isotacticity of the same catalyst with a tertiary butyl group substituent was well reproduced.

Re-calculating the relevant structures with DFT methods instead of the previously used QM/MM approach did not significantly improve the predictions. CPMD calculations were carried out to check whether the steric demand of the rotating iPr substituent would become similar to that of a tertiary butyl group due to rotations at higher temperatures. It was found that such rotation did not occur. The CPMD simulations confirmed the assumption that all insertion events are independent, which is an essential part of the statistical model.

A model that is based on a strictly alternating polymerization scheme cannot explain the observed increase in isotacticity at higher temperatures. Therefore, the mechanism of insertionless inversion of the stereo-center via back-skip was calculated in a model system. For $\text{CH}_2\text{Cp}_2\text{ZrC}_4\text{H}_9^+$ the free-energy barrier of insertion increases more strongly with rising temperature than that of the back-skip. At a certain temperature, the back-skip becomes the preferred pathway of the reaction. This provides a possible explanation for the experimental observations.

Solvent effects were studied using the COSMO approach. However, their effect on the relative energies of the catalyst-chain adducts was not significant. $[\text{CH}_3\text{B}(\text{C}_6\text{F}_5)]^-$ was chosen as model anion to investigate the influence of the counter-ion in coordinating and non-coordinating arrangements. In the cases of coordination via the methyl group there was always an interaction with the metal that caused displacement of the chain. The counter-ion was thus blocking the coordination site for the next monomer. The high reaction rate of propene polymerization makes it improbable that the counter-ion is constantly attaching and detaching from the metal center. At increased reaction temperatures, the effect of the counter-ions should become smaller.

4.4 Asymmetric Hydrogenation

Until the year 2000, bidentate chelating phosphorous-containing ligands were believed to be necessary to obtain high enantioselectivity in asymmetric hydrogenation. Reetz and other groups have since discovered monodentate P-ligands that yield enantioselectivities comparable to that of chelating ligands. We have carried out a DFT study to check whether the concepts that apply to chelating ligands also hold true for the monodentate systems.

In the case of chelating ligands, we verified the accepted mechanism for hydrogenation which involves two relevant catalyst-substrate adducts. In our monodentate system, we found five conformers of the catalyst that show different torsions around the Rh-P bonds. Each of these conformers can add the substrate – due to the missing C_2 symmetry – in four different orientations. Each of the resulting adducts can add H_2 in four different ways, but one of the cis additions is most strongly favored. This leads to 20 possible adducts and each of them is the starting point of an independent reaction path.

All adducts were characterized. For the two adducts of lowest energy (R1c and S2c) as well as for two other adducts (R3c and S1a), the complete reaction path was calculated. The adduct with the lowest energy has the same conformation as the main product. Calculations of the *ee* value that take adducts up to a relative energy of 3 kcal/mol into account yield 91% *ee*. The experimentally observed value is 98%. Therefore our system can be regarded as following the ‘lock and key’ principle, as opposed to the Landis systems with bidentate ligands.

In the Landis systems, the addition of hydrogen encounters the highest barrier in the reaction path whereas in our system the highest barrier corresponds to the transfer of the first hydrogen atom to the substrate in the case of the ‘c’ pathways and to the rearrangement from the trans- to the cis-alkyl complex in the case of the ‘a’ pathways. Stochastic simulations show that the computed differences in barrier heights are not sufficient to explain the different behaviour of the systems. It is the relative height of the barrier for the back-reaction adduct $\rightleftharpoons$ catalyst + substrate to the barrier for the hydrogen addition that offers the explanation for the observed enantioselectivity.

To reproduce the experimental results for the Landis system in the kinetic simulation, the barrier for the back-reaction has to be smaller than the highest barrier of the reaction pathway: the reaction can be considered as being kinetically controlled by the hydrogen addition. To reproduce the experimental results for our system, the barrier for the back-reaction has to be higher than the highest barrier in the following reaction pathways: the reaction can be considered as being thermodynamically controlled by the adduct stabilities.

Im Rahmen dieser Dissertation entstanden bisher folgende Veröffentlichungen:

- JENSEN, V. R., M. GRAF UND W. THIEL: *Unusual temperature effects in propene polymerization using stereorigid zirconocene catalysts*. ChemPhysChem, 6(9):1929—1933, 2005.
- GRAF, M., K. ANGERMUND, G. FINK, W. THIEL UND V. R. JENSEN: *Site epimerization in ansa-zirconocene polymerization catalysts*. Journal of Organometallic Chemistry, 691(21):4367—4378, 2006.
- REETZ, M. T., A. MEISWINKEL, G. MEHLER, K. ANGERMUND, M. GRAF, W. THIEL, R. MYNOTT UND D. G. BLACKMOND: *Why are BINOL-based monophosphites such efficient ligands in Rh-catalyzed asymmetric olefin hydrogenation?* Journal of the American Chemical Society, 127(29): 10305—10313, 2005.

Hiermit erkläre ich, Martin Graf, geboren am 27. Juli 1971 in Nürnberg, dass ich diese Arbeit eigenständig verfasst und ohne unerlaubte Hilfe angefertigt und diese in der vorgelegten oder ähnlichen Form noch keiner anderen Institution eingereicht habe.

Mülheim an der Ruhr, den 12. Oktober 2007

Abbildungsverzeichnis

2.1	Mögliche Taktizitäten im Polypropen	9
2.2	Die 10 möglichen Pentaden	10
2.3	Mechanismus nach Cossee und Arlman	11
2.4	Mechanismus nach Brookhart und Green, mit Ergänzungen nach T. Ziegler	14
2.5	<i>re</i> und <i>si</i> Seite des Propens (aus Blickrichtung des koordinieren- den Atoms)	15
2.6	1,2 und 2,1 Anlagerung des Propens am Metallzentrum	15
2.7	Die vier möglichen Anordnungen des Propens an einem Kataly- sator (R=wachsende Polymerkette)	16
2.8	Schematische Darstellung des in [71] konstant gehaltenen Aggre- gates	17
2.9	$iPr(3 - R - CpFlu)Zr^{+}$	18
2.10	Definition der betrachteten Torsionswinkel Θ_1 und Φ_1	20
2.11	Referenz für die Benennung der Konformere; Cp1 liegt oberhalb der Papierebene, Cp2 darunter.	20
2.12	Definition der drei unterschiedlichen α -agostischen Minima mit i-Bu als Modell für die wachsende Kette	21

2.13	Strukturen der ‘Ruhezustände’ für $[\text{iPr}(3 - \text{iPr} - \text{CpFlu})\text{Zr} - \text{iBu}]^+$ und die Übergangszustände der Propeninsertion für diesen Katalysator.	25
2.14	Abstand zwischen Zr und dem Bindungsmittelpunkt der Doppelbindung des Propens	28
2.15	Abstand zwischen den beiden Kohlenstoff-Atomen der zu bildenden Bindung	29
2.16	C–H Abstände und Torsionswinkel Θ_1 und Φ_1	30
2.17	Kettenfortpflanzung und back-skip	32
2.18	Die vier prinzipiellen Anordnungsmöglichkeiten einer punktförmigen Kette an einem Katalysator mit zwei unterscheidbaren π -Liganden	33
2.19	Die zwei enantiomeren Anordnungen einer punktförmigen Kette an einem Katalysator mit ununterscheidbaren π -Liganden	34
2.20	Strukturen $1\gamma 1$, $[1\gamma 1 - 1\beta 2]^\ddagger$ und $1\beta 2$	35
2.21	Strukturen $1\beta 1$, $[1\beta 1 - 1\beta 2]^\ddagger$ und $1\beta 2$	36
2.22	Strukturen $1\beta 2$, $[1\beta 2 - 1\alpha 3]^\ddagger$ und $1\alpha 3$	37
2.23	Strukturen $1\alpha 3$, $[1\alpha 3 - 1\alpha 2']^\ddagger$ und $1\alpha 2'$	37
2.24	Strukturen $1\gamma 1$, $[1\gamma 1 - 1\alpha 1]^\ddagger$ und $1\alpha 1$	37
2.25	Strukturen $1\beta 1$, $[1\beta 1 - 1\alpha 2]^\ddagger$ und $1\alpha 2$	38
2.26	Strukturen, die über den Sattelpunkt 2.Ordnung miteinander verbunden sind	38
2.27	Strukturen $1\beta 1$, $[1\beta 1 - 1\alpha 1']^\ddagger$ und $1\alpha 1'$	39
2.28	Die Reaktionswege des Systems $[\text{H}_2\text{C}(\text{Cp})_2\text{ZrC}_3\text{H}_7]^+ + \text{C}_2\text{H}_4$	40
2.29	Verlauf der Energien für den back-skip Pfad $1\beta 2 - 1\alpha 3 - 1\alpha 2' - 1\beta 2'$ als Funktion der Reaktionslaufzahl S	41
2.30	Auftragung wichtiger Winkel und Abstände gegen die Reaktionslaufzahl S	44

2.31	Mögliche Reaktionswege im System $\text{CH}_2\text{Cp}_2\text{Zr}^+$ mit iso-Butyl als Modell für die wachsende Polymerkette	46
2.32	Strukturen $2\beta 1$, $[2\beta 1 - 2\beta 2]^\ddagger$ und $2\beta 2$	47
2.33	Strukturen $2\gamma 1$, $[2\gamma 1 - 2\gamma 2]^\ddagger$ und $2\gamma 2$	47
2.34	Strukturen $2\gamma 1$, $[2\gamma 1 - 2\alpha 2]^\ddagger$ und $2\alpha 2$	47
2.35	Strukturen $2\gamma 2$, $[2\gamma 2 - 2\alpha 3]^\ddagger$ und $2\alpha 3$	48
2.36	Strukturen $2\beta 2$, $[2\beta 2 - 2\alpha 1]^\ddagger$ und $2\alpha 1$	48
2.37	Strukturen $2\alpha 2$, $[2\alpha 2 - 2\alpha 3]^\ddagger$ und $2\alpha 3$	48
2.38	Die über den Sattelpunkt zweiter Ordnung verbundenen Minima $2\alpha 1$ und $2\alpha 1'$ sowie $2\alpha 3$ und $2\alpha 2'$	49
2.39	Strukturen $2\alpha 3$, $[2\alpha 3 - 2\alpha 2']^\ddagger$ und $2\alpha 2'$	50
2.40	Strukturen $2\alpha 1$, $[2\alpha 1 - 2\alpha 3']^\ddagger$ und $2\alpha 3'$; der Übergangszustand zwischen $2\alpha 2$ und $2\alpha 1'$ ist zu dem in dieser Abbildung dargestell- ten enantiomer.	50
2.41	Temperaturabhängigkeit der Barrieren des back-skips und der Pro- peninsertion für $[\{\text{H}_2\text{C}(\text{Cp})_2\}\text{Zr-}^i\text{Bu}]^+$	53
2.42	Mögliche Positionen für das Gegenion am Beispiel des α -agosti- schen Komplexes	56
3.1	Monodentate Phosphorliganden für die Rh-katalysierte Olefinhy- drierung	64
3.2	Synthese der Phosphitliganden 1	64
3.3	Hydrierung von Ithaconsäuredimethylester zu (R/S)Methyl-Bern- steinsäuredimethylester	65
3.4	Synthese des Katalysators	66
3.5	Die für die Flexibilität des Katalysatorfragmentes verantwortli- chen Torsionswinkel	67
3.6	Formeln zur Definition der Torsionswinkel in Tabelle 3.2	68

3.7	Die vier prinzipiellen Anordnungen von Substrat und H ₂ für eine Katalysatorkonformation	70
3.8	Anlagerung des Wasserstoffs an das Katalysator-Substrataddukt (_01) und Bildung von MolH ₂ (_03)	71
3.9	Spaltung des als H ₂ gebundenen Wasserstoffs in MolH ₂ (_03) und Bildung von DiHy (_05)	71
3.10	Übertragung des ersten H-Atoms von DiHy (_05) und Bildung von AlHy_t(_07)	72
3.11	Umlagerung vom trans-ständigen AlHy_t (_07) zum cis-ständigen Alkylhydridkomplex AlHy (_09)	72
3.12	Übertragung des zweiten H-Atoms auf den Alkylhydrid-Komplex (_09) und Bildung des Produkt-Komplexes Prod (_11)	73
3.13	Ablösung des Produktes, Regeneration des Katalysators und Neubildung des Katalysator-Substratadduktes	74
3.14	Vergleich der relativen Energien der DFT und QM/MM Rechnungen.	76
3.15	Vergleich der relativen Energien kcal/mol zweier Reaktionspfade mit dem Standard-Basissatz und TZVP-Single-Point Rechnungen.	80
3.16	Darstellung der energetisch günstigsten Konformere: S2c_01 und R1c_01	81
3.17	Die vier untersuchten Anordnungen von Substrat und H ₂ für eine Katalysatorkonformation	81
3.18	Auftragung der ΔG Werte für die a- und c-Reaktionswege	84
3.19	Auftragung der relativen Energien [kcal/mol] gegen den Abstand des Substrats	86

Tabellenverzeichnis

2.1	Verteilung der Pentaden in idealisierten und realen Polymeren . . .	12
2.2	Insertionssequenz und resultierende Pentade. R und S bezeichnen jeweils die Enantioseite und r_e und s_i die Orientierung des Propens (aus [70]).	17
2.3	Vergleich zwischen experimentellen und berechneten Pentadenverteilungen für $iPr(3-iPr-CpFlu)Zr^+Bu^+$ (aus [53])	19
2.4	Energien [kcal/mol] der Übergangszustände der Propeninsertion relativ zu Katalysator (siehe Abbildung 2.9) und Propen in unendlichem Abstand.	23
2.5	Berechnete und experimentell gefundene Pentadenverteilung im Polypropen	26
2.6	Geometrische Daten und Energien der berechneten stationären Punkte	43
2.7	Energien der Strukturen mit iso-Butyl als Modell für die wachsende Polymerkette in kcal/mol	51
2.8	Ausgewählte Bindungsabstände	54
2.9	Relative Energien für den kationischen Katalysator-Kette Komplex	55
2.10	Vergleich der relativen Energien aus den verschiedenen Optimierungen	60

3.1	<i>ee</i> -Werte für die asymmetrische Hydrierung von Ithaconsäuredimethylester mit 1 und verschiedenen Liganden R	65
3.2	Geometrische Parameter der verschiedenen Gruppen von Katalysator-Substratkomplexen (für die Definitionen der Torsionswinkel siehe Abbildung 3.6)	69
3.3	Vergleich der relativen freien Energien [kcal/mol] aus unseren und publizierten Rechnungen [147]	77
3.4	Vergleich der relativen Energien ausgewählter Strukturen bei verschiedenem Basissatz, geändertem Funktional und Weglassen der RI-Näherung	78
3.5	Vergleich der relativen Energien [kcal/mol] und der dazugehörigen Barrieren mit TZVP-Basis und dem in dieser Arbeit verwendeten Basissatz	79
3.6	ΔG_{298} Werte für die untersuchten Reaktionspfade	83
A.1	Total Energies, ΔG und ΔH Korrekturwerte und die Single-Point Energien der berechneten Spezies in Hartree	134
A.2	Total Energies, ΔG und ΔH Korrekturwerte und die Single-Point Energien der berechneten Spezies in Hartree	135
A.3	Total Energies in hartrees und ΔG -Korrekturwerte in kJ/mol der unter COSMO berechneten Spezies.	136
A.4	Total Energies in hartrees und ΔG -Korrekturwerte in kJ/mol der unter Gasphasenbedingungen berechneten Spezies.	136
A.5	Total Energies in hartrees und ΔG -Korrekturwerte in kJ/mol der COSMO Single-Point Rechnungen. Die ΔG Korrekturwerte sind die der entsprechenden Struktur in der Gasphase.. . . .	137
B.1	Total Energies der für den Vergleich der Funktionale herangezogenen Strukturen	165

B.3	Total Energies, ΔG_{298} und ΔH Korrekturfaktoren sowie der Korrekturfaktor für die Nullpunktsenergie.	168
B.2	Total Energies der zur Überprüfung der Basissätze ausgewählten Strukturen. Referenz hierbei ist der in Kapitel 1.3.2 beschriebene Basissatz.	169
B.4	Total Energies, ΔG_{298} und ΔH Korrekturfaktoren sowie der Korrekturfaktor für die Nullpunktsenergie der von uns nachgerechneten Strukturen	171

Literaturverzeichnis

- [1] PURVIS, G. D. und R. J. BARTLETT: *A full coupled-cluster singles and doubles model: the inclusion of disconnected triples*. Journal of Chemical Physics, 76(4):1910–1918, 1982.
- [2] RAGHAVACHARI, K., G. W. TRUCKS, J. A. POPLE und M. HEAD-GORDON: *A 5th-order perturbation comparison of electron correlation theories*. Chemical Physics Letters, 157(6):479–483, 1989.
- [3] PARR, R. G. und W. YANG: *Density Functional Theory of Atoms and Molecules*. Academic Press, Oxford, 1989.
- [4] HOHENBERG, P. und W. KOHN: *Inhomogeneous electron gas*. Physical Review B, 136(3B):B864, 1964.
- [5] THOMAS, L. H.: *The calculation of atomic fields*. Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, 23:542–548, 1927.
- [6] FERMI, E.: *Eine statistische Methode zur Bestimmung einiger Eigenschaften des Atoms und ihre Anwendung auf die Theorie des periodischen Systems der Elemente*. Zeitschrift für Physik, 48(1–2):73—79, 1928.
- [7] KOHN, W. und L. J. SHAM: *Self-consistent equations including exchange and correlation effects*. Physical Review, 140(4A):1133–1138, 1965.
- [8] FRISCH, M. J., G. W. TRUCKS, H. B. SCHLEGEL, G. E. SCUSERIA, M. A. ROBB, J. R. CHEESEMAN, JR. J. A. MONTGOMERY, T. VREVEN, K. N. KUDIN, J. C. BURANT, J. M. MILLAM, S. S. IYENGAR, J. TOMASI, V. BARONE, B. MENNUCCI, M. COSSI, G. SCALMANI, N. REGA,

- G. A. PETERSSON, H. NAKATSUJI, M. HADA, M. EHARA, K. TOYOTA, R. FUKUDA, J. HASEGAWA, M. ISHIDA, T. NAKAJIMA, Y. HONDA, O. KITAO, H. NAKAI, M. KLENE, X. LI, J. E. KNOX, H. P. HRATCHIAN, J. B. CROSS, C. ADAMO, J. JARAMILLO, R. GOMPERTS, R. E. STRATMANN, O. YAZYEV, A. J. AUSTIN, R. CAMMI, C. POMELLI, J. W. OCHTERSKI, P. Y. AYALA, K. MOROKUMA, G. A. VOTH, P. SALVADOR, J. J. DANNENBERG, V. G. ZAKRZEWSKI, S. DAPPRICH, A. D. DANIELS, M. C. STRAIN, O. FARKAS, D. K. MALICK, A. D. RABUCK, K. RAGHAVACHARI, J. B. FORESMAN, J. V. ORTIZ, Q. CUI, A. G. BABOUL, S. CLIFFORD, J. CIOSLOWSKI, B. B. STEFANOV, G. LIU, A. LIASHENKO, P. PISKORZ, R. L. KOMAROMI, I. AND MARTIN, D. J. FOX, T. KEITH, M. A. AL-LAHAM, C. Y. PENG, A. NANAYAKKARA, M. CHALLACOMBE, P. M. W. GILL, B. JOHNSON, W. CHEN, M. W. WONG, C. GONZALEZ und J. A. POPLE: *Gaussian 03*. Gaussian, Inc., Pittsburg PA, 2003.
- [9] FRISCH, M. J., G. W. TRUCKS, H. B. SCHLEGEL, G. E. SCUSERIA, M. A. ROBB, J. R. CHEESEMAN, V. G. ZAKRZEWSKI, JR. MONTGOMERY, J. A., R. E. STRATMANN, J. C. BURANT, S. DAPPRICH, J. M. MILLAM, A. D. DANIELS, K. N. KUDIN, M. C. STRAIN, O. FARKAS, J. TOMASI, V. BARONE, M. COSMI, R. CAMMI, B. MENNUCCI, C. POMELLI, C. ADAMO, S. CLIFFORD, J. OCHTERSKI, G. A. PETERSSON, P. Y. AYALA, Q. CUI, K. MOROKUMA, D. K. MALICK, A. D. RABUCK, K. RAGHAVACHARI, J. B. FORESMAN, J. CIOSLOWSKI, J. V. ORTIZ, A. G. BABOUL, B. B. STEFANOV, G. LIU, A. LIASHENKO, P. PISKORZ, I. KOMAROMI, R. GOMPERTS, R. L. MARTIN, D. J. FOX, T. KEITH, M. A. AL-LAHAM, C. Y. PENG, A. NANAYAKKARA, C. GONZALEZ, M. CHALLACOMBE, P. M. W. GILL, B. JOHNSON, W. CHEN, M. W. WONG, J. L. ANDRES, C. GONZALEZ, M. HEAD-GORDON, E. S. REPLEGUE und J. A. POPLE: *Gaussian 98, Revision A.7*. Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 1998.
- [10] VOSKO, S. H., L. WILK und M. NUSAIR: *Accurate spin-dependent electron liquid correlation energies for local spin density calculations: a criti-*

- cal analysis*. Canadian Journal of Physics, 58:1200–1211, 1980.
- [11] BECKE, A. D.: *Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior*. Physical Review A, 38(6):3098—3100, 1988.
- [12] PERDEW, J. P. und Y. WANG: *Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation-energy*. Physical Review B, 45(23):13244—13249, 1992.
- [13] JENSEN, V. R. und K. J. BØRVE: *An investigation of the quantum chemical description of the ethylenic double bond in reactions: II. Insertion of ethylene into a titanium-carbon bond*. Journal of Computational Chemistry, 19(8):947—960, 1998.
- [14] GONZALEZ, C. und H. B. SCHLEGEL: *Reaction Path Following in Mass-Weighted Internal Coordinates*. Journal of Physical Chemistry, 94:5523, 1990.
- [15] GONZALEZ, C. und H. B. SCHLEGEL: *An Improved Algorithm for Reaction Path Following*. Journal of Chemical Physics, 90:2154, 1989.
- [16] HAY, P. J. und W. R. WADT: *Ab initio effective core potentials for molecular calculations. Potentials for main group elements Na to Bi*. Journal of Chemical Physics, 82:284—298, 1985.
- [17] HAY, P. J. und W. R. WADT: *Ab initio effective core potentials for molecular calculations. Potentials for K to Au including the outermost core orbitals*. Journal of Chemical Physics, 82:299—310, 1985.
- [18] DUNNING JR., T. H. und P. J. HAY. In: SCHAEFER III, H. F. (Herausgeber): *Methods of Electronic Structure Theory*, Modern theoretical chemistry, Seiten 1—27. Plenum Press, New York, 1977.
- [19] AHLRICHS, R., M. BÄR, M. HÄSER, H. HORN und C. KÖLMEL: *Electronic-structure calculations on workstation computers: the program system TURBOMOLE*. Chemical Physics Letters, 162(3):165—169, 1989.

- [20] PERDEW, J. P.: *Density-Functional Approximation for the Correlation-Energy of the Inhomogeneous Electron-Gas*. Physical Review B, 33(12):8822—8824, 1986.
- [21] PERDEW, J. P.: *Correction*. Physical Review B, 34(10):7406—7406, 1986.
- [22] EICKORN, K., O. TREUTLER, H. OHM, M. HÄSER und R. AHLRICHS: *Auxiliary basis sets to approximate Coulomb potentials*. Chemical Physics Letters, 240(4):283—289, 1995.
- [23] EICKORN, K., F. WEIGEND, O. TREUTLER und R. AHLRICHS: *Auxiliary basis sets for main row atoms and transition metals and their use to approximate Coulomb potentials*. Theoretical Chemistry Accounts, 97(1-4):119—124, 1997.
- [24] KLAMT, A. und G. SCHÜÜRMAN: *COSMO - A new approach to dielectric screening in solvents with explicit expressions for the screening energy and its gradient*. Journal of the Chemical Society-Perkin Transactions 2, 5(5):799—805, 1993.
- [25] SCHÄFER, A., A. KLAMT, D. SATTEL, J. C. W. LOHRENZ und F. ECKERT: *COSMO Implementation in TURBOMOLE: Extension of an efficient quantum chemical code towards liquid systems*. Physical Chemistry Chemical Physics, 2(10):2187—2193, 2000.
- [26] VANKA, K., M. S. W. CHAN, C. C. PYE und T. ZIEGLER: *A density functional study of ion-pair formation and dissociation in the reaction between boron- and aluminum-based Lewis acids with (1,2-Me₂Cp)₂ZrMe₂*. Organometallics, 19(10):1841—1849, 2000.
- [27] SHERWOOD, P., A. H. DE VRIES, M. F. GUEST, G. SCHRECKENBACH, C. R. A. CATLOW, S. A. FRENCH, A. A. SOKOL, S. T. BROMLEY, W. THIEL, A. J. TURNER, S. BILLETER, F. TERSTEGEN, S. THIEL, J. KENDRICK, S. C. ROGERS, J. CASCI, M. WATSON, F. KING, E. KARLSEN, M. SJØVOLL, A. FAHMI, A. SCHÄFER und C. LENNARTZ: *QUASI: A general purpose implementation of the QM/MM approach and*

- its application to problems in catalysis.* Journal of Molecular Structure-Theochem, 632:1—28, 2003.
- [28] BILLETER, S. R., A. J. TURNER und W. THIEL: *Linear scaling geometry optimisation and transition state search in hybrid delocalised internal coordinates.* Physical Chemistry Chemical Physics, 2(10):2177—2186, 2000.
- [29] NEUGEBAUER, J., M. REIHER, C. KIND und B. A. HESS: *Quantum chemical calculation of vibrational spectra of large molecules Raman and IR spectra for buckminsterfullerene.* Journal of Computational Chemistry, 23(9):895—910, 2002.
- [30] ANDRAE, D., U. HÄUSSERMANN, M. DOLG, H. STOLL und H. PREUSS: *Energy-adjusted ab-initio pseudopotentials for the 2nd and 3rd row transition elements.* Theoretica Chimica Acta, 77(2):123—141, 1990.
- [31] FRANCL, M. M., W. J. PIETRO, W. J. HEHRE, J. S. BINKLEY, M. S. GORDON, D. J. DEFREES und J. A. POPLE: *Self-consistent molecular-orbital methods 23. A polarization-type basis set for 2nd-row elements.* Journal of Chemical Physics, 77(7):3654—3665, 1982.
- [32] HARIHARAN, P. C. und J. A. POPLE: *Influence of polarization functions on molecular-orbital hydrogenation energies.* Theoretica Chimica Acta, 28(3):213—222, 1973.
- [33] DIRAC, P. A. M.: *Quantum mechanics of many-electron systems.* Proceedings of the Royal Society of London Series A, 123(792):714—733, 1929.
- [34] SLATER, J. C.: *A Simplification of the Hartree-Fock Method.* Physical Review, 81(3):385—390, 1951.
- [35] PERDEW, J. P., K. BURKE und M. ERNZERHOF: *Generalized gradient approximation made simple.* Physical Review Letters, 77(18):3865—3868, 1996.

- [36] SCHÄFER, A., C. HUBER und R. AHLRICHS: *Fully optimized contracted gaussian basis sets of triple zeta valence quality for atoms Li to Kr*. Journal of Chemical Physics, 100(8):5829—5835, 1994.
- [37] ZIEGLER, K., E. HOLZKAMP, H. BREIL und H. MARTIN: *Das Mülheimer Normaldruck-Polyäthylen-Verfahren*. Angewandte Chemie, 67:541—547, 1955.
- [38] BRESLOW, D. S. und N. R. NEWBURG: *bis-(Cyclopentadienyl)-Titanium Dichloride-Alkylaluminum Complexes as Catalysts for the Polymerization of Ethylene*. Journal of the American Chemical Society, 79(18):5072—5073, 1957.
- [39] NATTA, G., P. PINO, G. MAZZANTI, U. GIANNINI, E. MANTICA und M. PERALDO: *The nature of some soluble catalysts for low pressure ethylene polymerization*. Journal of Polymer Science, 26(112):120—123, 1957.
- [40] SINN, H., W. KAMINSKY, H. J. VOLLMER und R. WOLDT: *Living Polymers on Polymerization with Extremely Productive Ziegler Catalysts*. Angewandte Chemie International Edition, 19:390—392, 1980.
- [41] AULBACH, M., KÜBER F.: *Metallocene - maßgeschneiderte Werkzeuge zur Herstellung von Polyolefinen*. Chemie in unserer Zeit, 28(4):197—208, 1994.
- [42] WILD, F. R. W. P., L. ZSOLNAI, G. HUTTNER und H. H. BRINTZINGER: *Ansa-metallocene derivatives 4. Synthesis and molecular structures of chiral ansa-titanocene derivatives with bridged tetrahydroindenyl ligands*. Journal of Organometallic Chemistry, 232(3):233—247, 1982.
- [43] WILD, F. R. W. P., M. WASIUCIONEK, G. HUTTNER und H. H. BRINTZINGER: *Ansa-metallocene derivatives 7. Synthesis and crystal structure of a chiral ansa-zirconocene derivative with ethylene-bridged tetrahydroindenyl ligands*. Journal of Organometallic Chemistry, 288(1):63—67, 1985.

- [44] EWEN, J. A., R. L. JONES, A. RAZAVI und J. D. FERRARA: *Syndiospecific Propylene Polymerizations with Group-4 Metallocenes*. Journal of the American Chemical Society, 110(18):6255—6256, 1988.
- [45] COATES, G. W. und R. M. WAYMOUTH: *Oscillating stereocontrol: A strategy for the synthesis of thermoplastic elastomeric polypropylene*. Science, 267(5195):217–219, 1995.
- [46] EWEN, J. A., M. J. ELDER, R. L. JONES, L. HASPESLAGH, J. L. ATWOOD, S. G. BOTT und K. ROBINSON: *Metallocene Polypropylene Structural Relationships - Implications on Polymerization and Stereochemical Control Mechanisms*. Die Makromolekulare Chemie. Macromolecular symposia, 48/49:253—295, 1991.
- [47] HAYASHI, T., Y. INOUE, R. CHUJO und T. ASAKURA: *Pentad Assignments of Methine Carbon Resonances in Stereoregular Ethylene Propylene Copolymer based on Two-dimensional INADEQUATE NMR-Spectrum*. Polymer Journal, 20(10):895–902, 1988.
- [48] KOENIG, J. L.: *NMR Imaging of Diffusion in Polymers*. Abstracts of Papers of the American Chemical Society, 203:540, 1992.
- [49] SCHILLING, F. C. und A. E. TONELLI: *C-13 Nuclear Magnetic-Resonance of Atactic Polypropylene*. Macromolecules, 13(2):270–275, 1980.
- [50] ZAMBELLI, A., P. LOCATELLI, G. BAJO und F. A. BOVEY: *Model Compounds and C-13 NMR Observation of Stereo-Sequences of Polypropylene*. Macromolecules, 8(5):687–689, 1975.
- [51] RANDALL, J. C.: *Polymer Sequence Determination by the Carbon 13 NMR Method*. Academic Press, New York, 1977.
- [52] BOVEY, F. A.: *High Resolution NMR of Macromolecules*. Academic Press, New York, 1972.

- [53] KLEINSCHMIDT, R., M. REFFKE und G. FINK: *Investigation of the microstructure of poly(propylene) in dependence of the polymerization temperature for the systems $iPr[3-RCpFlu]ZrCl_2/MAO$, with $R=H, Me, Et, iPr, tBu$, and $iPr[IndFlu]ZrCl_2/MAO$.* Macromolecules Rapid Communication, 20:284, 1999.
- [54] ARLMAN, E. J.: *Ziegler-Natta catalysis 2. Surface structure of layer-lattice transition metal chlorides.* Journal of Catalysis, 3:89—98, 1964.
- [55] ARLMAN, E. J. und P. COSSEE: *Ziegler-Natta catalysis 3. Stereospecific polymerization of propene with the catalyst system $TiCl_3-AlEt_3$.* Journal of Catalysis, 3:99—104, 1964.
- [56] COSSEE, P.: *Ziegler-Natta Catalysis I. Mechanism of Polymerization of α -Olefins with Ziegler-Natta Catalysts.* Journal of Catalysis, 3:80, 1964.
- [57] HENRICI-OLIVÉ, G. und S. OLIVÉ: *Die aktive Spezies in homogenen Ziegler-Natta-Katalysatoren für die Äthylenpolymerisation.* Angewandte Chemie, 79:764—773, 1967.
- [58] ARMSTRONG, D. R., J. J. P. STEWART und P. G. PERKINS: *Theoretical Investigation of Ziegler-Type Catalysis I. Soluble Catalyst Systems.* Journal of the Chemical Society-Dalton Transactions, Seiten 1972—1980, 1972.
- [59] FINK, G., R. RÖTTLER und C. G. KREITER: *Formation of Primary Complexes in Soluble Ziegler-Catalyst Systems - Kinetic And Thermodynamic Data by Dynamic C-13-NMR Spectroscopy.* Angewandte Makromolekulare Chemie, 96:1—20, 1981.
- [60] FINK, G. und D. SCHNELL: *Elementarprozesse der Ziegler-Katalyse, 3. Ermittlung der Kettenwachstumsgeschwindigkeitskonstanten aus der Molmassenverteilung.* Angewandte Makromolekulare Chemie, 105:31—38, 1982.
- [61] FINK, G. und D. SCHNELL: *Elementarprozesse der Ziegler-Katalyse, 2. Molmassenverteilung und Reaktionsschema.* Angewandte Makromolekulare Chemie, 105:15—30, 1982.

- [62] FINK, G. und W. ZOLLER: *Elementarprozesse löslicher Ziegler-Katalysatoren. Polymerisationskinetische Analyse und mathematische Modellierung im System $Cp_2TiPropylCl/AlEtCl_2$ /Ethylen*. Makromolekulare Chemie-Macromolecular Chemistry and Physics, 182(11):3265–3278, 1981.
- [63] BROOKHART, M. und M. L. H. GREEN: *Carbon—hydrogen-transition metal bonds*. Journal of Organometallic Chemistry, 250:395—408, 1983.
- [64] MARGL, P., L. Q. DENG und T. ZIEGLER: *A unified view of ethylene polymerization by d^0 and $d^0 f^n$ transition metals. 1. Precursor compounds and olefin uptake energetics*. Organometallics, 17(5):933—946, 1998.
- [65] MARGL, P., L. Q. DENG und T. ZIEGLER: *A unified view of ethylene polymerization by d^0 and $d^0 f^n$ transition metals. Part 2: Chain propagation*. Journal of the American Chemical Society, 120(22):5517—5525, 1998.
- [66] MARGL, P., L. Q. DENG und T. ZIEGLER: *A unified view of ethylene polymerization by d^0 and $d^0 f^n$ transition metals. 3. Termination of the growing polymer chain*. Journal of the American Chemical Society, 121(1):154—162, 1999.
- [67] RESCONI, L., L. CAVALLO, A. FAIT und F. PIEMONTESE: *Selectivity in Propene Polymerization with Metallocene Catalysts*. Chemical Reviews, 100:1253—1346, 2000.
- [68] CAHN, R. S., C. INGOLD und V. PRELOG: *Specification of molecular chirality*. Angewandte Chemie International Edition, 5:385, 1966.
- [69] SCHLÖGL, K. *Topics in Stereochemistry*, 1:39, 1966.
- [70] LEEK, Y. VAN DER, K. ANGERMUND, M. REFFKE, R. KLEINSCHMIDT, R. GORETZKI und G. FINK: *On the Mechanism of Stereospecific Polymerization-Development of a Universal Model to Demonstrate the Relationship between Metallocene Structure and Polymer Microstructure*. Chemistry - European Journal, 3:585—591, 1997.

- [71] ANGERMUND, K., G. FINK, V. R. JENSEN und R. KLEINSCHMIDT: *Toward quantitative prediction of stereospecificity of metallocene-based catalysts for α -olefin polymerization*. Chemical Reviews, 100(4):1457—1470, 2000.
- [72] EWEN, J. A. und M. J. ELDER. In: FINK, G., R. MÜLHAUPT und H. H. BRINTZINGER (Herausgeber): *Ziegler Catalysts*, Seite 99. Springer, Berlin, 1995.
- [73] GUERRA, G., L. CAVALLO, G. MOSCARDI, M. VACATELLO und P. CORRADINI: *Back-skip of the growing chain at model complexes for the metallocene polymerization catalysis*. Macromolecules, 29(14):4834, 1996.
- [74] RAPPÉ, A. T., W. M. SKIFF und C. J. CASEWIT: *Modeling metal-catalyzed olefin polymerization*. Chemical Reviews, 100(4):1435—1456, 2000.
- [75] LOHRENZ, J. C. W., M. BÜHL, M. WEBER und W. THIEL: *A density functional study on the formation of stereoerrors in the stereoselective propene polymerization with zirconocene catalysts*. Journal of Organometallic Chemistry, 529:11—21, 1999.
- [76] MOSCARDI, G., L. RESCONI und L. CAVALLO: *Propene polymerization with the isospecific, highly regioselective $rac\text{-Me}_2\text{C}(3\text{-}t\text{-Bu-1-Ind})_2\text{ZrCl}_2/\text{MAO}$ catalyst. 2. Combined DFT/MM analysis of chain propagation and chain release reactions*. Organometallics, 20(10):1918—1931, 2001.
- [77] PETITJEAN, L., D. PATTOU und M. F. RUIZ-LOPEZ: *Theoretical study of selectivity mechanisms in propylene polymerization with metallocene catalysts*. Journal of Molecular Structure-Theochem, 541:227—235, 2001.
- [78] BORRELLI, M., V. BUSICO, R. CIPULLO, S. RONCA und P. H. M. BUDZELAAR: *Selectivity of metallocene-catalyzed olefin polymerization: A combined experimental and quantum mechanical study. The $ansa\text{-Me}_2\text{Si}(\text{Ind})_2\text{Zr}$ and $ansa\text{-Me}_2\text{C}(\text{Cp})(\text{Flu})\text{Zr}$ systems*. Macromolecules, 36(21):8171—8177, 2003.

- [79] BRINTZINGER, H. H., D. FISCHER, R. MÜLHAUPT, B. RIEGER und R. M. WAYMOUTH: *Stereospecific Olefin Polymerization with Chiral Metallocene Catalysts*. Angewandte Chemie International Edition, 34:1143—1170, 1995.
- [80] RAZAVI, A. und J. L. ATWOOD: *Synthesis and characterization of the catalytic isotactic-specific metallocene complex (η^5 -C₅H₃C₄H₉-CMe₂- η^5 -C₁₃H₈)ZrCl₂- Mechanistic aspects of the formation of isotactic polypropylene, the stereoregulative effect of the distal substituent and the relevance of C₂ symmetry*. Journal of Organometallic Chemistry, 520:115, 1996.
- [81] YOSHIDA, T., N. KOGA und K. MOROKUMA: *A combined ab initio MO-MM study on isotacticity control in propylene polymerization with silylene-bridged group 4 metallocenes. C₂ symmetrical and asymmetrical catalysts*. Organometallics, 15(2):766—777, 1996.
- [82] ANGERMUND, K., G. FINK, V. R. JENSEN und R. KLEINSCHMIDT: *The role of intermediate chain migration in propene polymerization using substituted iPr(CpFlu)ZrCl₂/MAO catalysts*. Macromolecular Rapid Communications, 21(2):91—97, 2000.
- [83] BOERO, M., M. PARRINELLO und K. TERAURA: *Ziegler-Natta heterogeneous catalysis by first principles computer experiments*. Surface Science, 438(1-3):1—8, 1999.
- [84] BOERO, M., M. PARRINELLO und K. TERAURA: *First principles molecular dynamics study of Ziegler-Natta heterogeneous catalysis*. Journal of the American Chemical Society, 120(12):2746—2752, 1998.
- [85] BOERO, M., M. PARRINELLO, K. TERAURA und H. WEISS: *Car-Parrinello study of Ziegler-Natta heterogeneous catalysis: stability and destabilization problems of the active site models*. Molecular Physics, 100(18):2935—2940, 2002.
- [86] BOERO, M., M. PARRINELLO, H. WEISS und S. HUFFER: *A first principles exploration of a variety of active surfaces and catalytic sites in*

- Ziegler-Natta heterogeneous catalysis*. Journal of Physical Chemistry A, 105(21):5096—5105, 2001.
- [87] COSTUAS, K. und M. PARRINELLO: *Structure and chemical activity of point defects on MgCl₂ (001) surface*. Journal of Physical Chemistry B, 106(17):4477—4481, 2002.
- [88] WEISS, H., M. BOERO und M. PARRINELLO: *Car-Parrinello molecular dynamics investigation of active surfaces and Ti catalytic sites in Ziegler-Natta heterogeneous catalysis*. Macromolecular Symposia, 173:137–147, 2001.
- [89] MARGL, P., J. C. W. LOHRENZ, T. ZIEGLER und P. E. BLÖCHL: *A dynamical density functional study on the reaction of ethylene with Cp₂ZrC₂H₅⁺*. Journal of the American Chemical Society, 118(18):4434—4441, 1996.
- [90] MEIER, R. J., G. H. J. VAN DOREMAELE, S. IARLORI und F. BUDA: *Ab Initio Molecular Dynamics Study of Metallocene-Catalyzed Ethylene Polymerization*. Journal of the American Chemical Society, 116:7274, 1994.
- [91] WOO, T. K., P. M. MARGL, P. E. BLÖCHL und T. ZIEGLER: *A combined Car-Parrinello QM/MM implementation for ab initio molecular dynamics simulations of extended systems: Application to transition metal catalysis*. Journal of Physical Chemistry B, 101(40):7877—7880, 1997.
- [92] WOO, T. K., P. M. MARGL, J. C. W. LOHRENZ, P. E. BLÖCHL und T. ZIEGLER: *Combined static and dynamic density functional study of the Ti(IV) constrained geometry catalyst (CpSiH₂NH)TiR⁺ 1. Resting states and chain propagation*. Journal of the American Chemical Society, 118(51):13021—13030, 1996.
- [93] WOO, T. K., P. M. MARGL, T. ZIEGLER und P. E. BLÖCHL: *Static and ab initio molecular dynamics study of the titanium(IV)-constrained geometry catalyst (CpSiH₂NH)Ti-R⁺ 2. Chain termination and long chain branching*. Organometallics, 16(15):3454—3468, 1997.

- [94] JENSEN, V. R., M. GRAF und W. THIEL: *Unusual temperature effects in propene polymerization using stereorigid zirconocene catalysts*. ChemPhysChem, 6(9):1929—1933, 2005.
- [95] BUSICO, V. und R. CIPULLO: *Influence of monomer concentration on the stereospecificity of 1-alkene polymerization promoted by C₂-symmetrical ansa-metallocene catalysts*. Journal of the American Chemical Society, 116(20):9329—9330, 1994.
- [96] PROSENC, M. H. und H. H. BRINTZINGER: *Zirconium-alkyl isomerizations in zirconocene-catalyzed olefin polymerization: A density functional study*. Organometallics, 16(18):3889—3894, 1997.
- [97] GRAF, M., V. R. JENSEN und W. THIEL: *Density functional studies of intermediate chain migration in ansa-zirconocenes*. In: *1st. Blue Sky Conference on Catalytic Olefin Polymerization*, Sorrento, Italy, 2002. Poster abstract.
- [98] GRAF, M., K. ANGERMUND, G. FINK, W. THIEL und V. R. JENSEN: *Site epimerization in ansa-zirconocene polymerization catalysts*. Journal of Organometallic Chemistry, 691(21):4367—4378, 2006.
- [99] JENSEN, V. R., D. KOLEY, M. N. JAGADEESH und W. THIEL: *DFT Investigation of the Single-Center, Two-State Model for the Broken Rate Order of Transition Metal Catalyzed Olefin Polymerization*. Macromolecules, 38:10266—10278, 2005.
- [100] HERFERT, N. und G. FINK: *Elementarprozesse der Ziegler-Katalyse, 5. Lösungsmiteleinflüsse am Beispiel stereorigider Zirkonocen/Methylaluminoxan Ziegler-Katalysatoren*. Makromolekulare Chemie-Macromolecular Chemistry and Physics, 193(3):773—778, 1992.
- [101] CHAN, M. S. W., K. VANKA, C. C. PYE und T. ZIEGLER: *Density functional study on activation and ion-pair formation in group IV metallocene and related olefin polymerization catalyses*. Organometallics, 18(22):4624—4636, 1999.

- [102] LANZA, G., I. L. FRAGALA und T. J. MARKS: *Energetic, structural, and dynamic aspects of ethylene polymerization mediated by homogeneous single-site "constrained geometry catalysts" in the presence of cocatalyst and solvation: An investigation at the ab initio quantum chemical level.* Organometallics, 21(25):5594—5612, 2002.
- [103] LANZA, G., I. L. FRAGALA und T. J. MARKS: *Ligand substituent, anion, and solvation effects on ion pair structure, thermodynamic stability, and structural mobility in "constrained geometry" olefin polymerization catalysts: An ab initio quantum chemical investigation.* Journal of the American Chemical Society, 122(51):12764—12777, 2000.
- [104] SILANES, M. und J. M. UGALDE: *Comparative study of various mechanisms for metallocene-catalyzed α -olefin polymerization.* Organometallics, 24(13):3233—3246, 2005.
- [105] VANKA, K., Z. T. XU und T. ZIEGLER: *A combined density functional theory and molecular mechanics (QM/MM) study of single site ethylene polymerization catalyzed by $\text{CpNC}(\text{t-Bu})_2\text{TiR}^+$ in the presence of the counterion, $\text{CH}_3\text{B}(\text{C}_6\text{F}_5)_3^-$.* Macromolecular Symposia, 213:275—286, 2004.
- [106] VANKA, K., Z. T. XU und T. ZIEGLER: *A density functional study of ethylene insertion into the M-methyl ($M = \text{Ti}, \text{Zr}$) bond for different catalysts, with a QM/MM model for the counterion, $\text{B}(\text{C}_6\text{F}_5)_3\text{CH}_3$.* Israel Journal of Chemistry, 42(4):403—415, 2002.
- [107] VANKA, K. und T. ZIEGLER: *A density functional study of the competing processes occurring in solution during ethylene polymerization by the catalyst $(1,2\text{-Me}_2\text{Cp})_2\text{ZrMe}^+$.* Organometallics, 20(5):905—913, 2001.
- [108] XU, Z. T., K. VANKA, T. FIRMAN, A. MICHALAK, E. ZUREK, C. B. ZHU und T. ZIEGLER: *Theoretical study of the interactions between cations and anions in group IV transition-metal catalysts for single-site homogeneous olefin polymerization.* Organometallics, 21(12):2444—2453, 2002.
- [109] XU, Z. T., K. VANKA und T. ZIEGLER: *The influence of the counter-ion $\text{MeB}(\text{C}_6\text{F}_5)_3^-$ and solvent effects on ethylene polymerization catalyzed by*

- (CpSiMe₂NR)TiMe⁺: A combined density functional theory and molecular mechanism study. *Macromolecular Symposia*, 206:457—469, 2004.
- [110] YANG, S. H., J. HUH und W. H. JO: *Effect of solvent polarity on the initiation and the propagation of ethylene polymerization with constrained geometry catalyst/MAO catalytic system: A density functional study with the conductor-like screening model*. *Macromolecules*, 38(4):1402—1409, 2005.
- [111] ZUREK, E. und T. ZIEGLER: *Toward the identification of dormant and active species in MAO (methylaluminoxane)-activated, dimethylzirconocene-catalyzed olefin polymerization*. *Organometallics*, 21(1):83—92, 2002.
- [112] BELELLI, P. G., M. M. BRANDA und N. J. CASTELLANI: *DFT studies of zirconocene/MAO interaction*. *Journal of Molecular Catalysis A Chemical*, 192(1-2):9—24, 2003.
- [113] BRAGA, D., F. GREPIONI, E. TEDESCO und M. J. CALHORDA: *Zirconocene catalysts: Ion-pairs, zwitterions, or weakly bound molecules?* *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie*, 626(2):462—470, 2000.
- [114] FUSCO, R., L. LONGO, F. MASI und F. GARBASSI: *Ethylene polymerization with homogeneous Ziegler-Natta catalysts: Theoretical study on the role of ion pairs in the polymerization mechanism*. *Macromolecular Rapid Communications*, 18(5):433—441, 1997.
- [115] FUSCO, R., L. LONGO, A. PROTO, F. MASI und F. GARBASSI: *Ethylene polymerization catalyzed by metallocene/methylaluminoxane systems: quantum-mechanical study on the role of olefin separated ion pairs (OSIP) in the polymerization mechanism*. *Macromolecular Rapid Communications*, 19(5):257—262, 1998.
- [116] LIEBER, S., M. H. PROSENC und H. H. BRINTZINGER: *Zirconocene allyl complexes: Dynamics in solution, reaction with aluminum alkyls, B(C₆F₅)₃-induced propene insertion, and density-functional calculations on possible formation and reaction pathways*. *Organometallics*, 19(4):377—387, 2000.

- [117] NIFANT'EV, I. E., L. Y. USTYNYUK und D. N. LAIKOV: *A DFT study of ethylene polymerization by zirconocene catalysts. I. Model system $Cp_2ZrEt^+ + C_2H_4$* . Russian Chemical Bulletin, 49(7):1164—1173, 2000.
- [118] VANKA, K., Z. T. XU und T. ZIEGLER: *Combined density functional theory and molecular mechanics QM/MM study of single-site ethylene polymerization and chain termination for the catalysts $(C_6R_5N=CH)(C_4H_3N)_2PrTi^+$ ($R = F, H$) and bis(η^5 -1-indenyl)dimethylsilane $PrZr^+$ in the presence of the counterion $CH_3B(C_6F_5)_3^-$* . Organometallics, 24(3):419—430, 2005.
- [119] ZAKHAROV, II und V. A. ZAKHAROV: *A DFT quantum-chemical study of ion-pair formation for the catalyst Cp_2ZrMe_2/MAO* . Macromolecular Theory and Simulations, 11(3):352—358, 2002.
- [120] ZAKHAROV, V. A., E. P. TALZI, I. I. ZAKHAROV, D. E. BABUSHKIN und N. V. SEMIKOLENOVA: *Structure of methylaluminoxane and the mechanism of active center formation in the zirconocene/methylaluminoxane catalytic system*. Kinetics and Catalysis, 40(6):836—850, 1999.
- [121] ZUREK, E. und T. ZIEGLER: *Theoretical studies of the structure and function of MAO (methylaluminoxane)*. Progress in Polymer Science, 29(2):107—148, 2004.
- [122] ZUREK, E. und T. ZIEGLER: *A combined quantum mechanical and statistical mechanical study of the equilibrium of trimethylaluminum (TMA) and oligomers of $(AlOCH_3)_n$ found in methylaluminoxane (MAO) solution*. Inorganic Chemistry, 40(14):3279—3292, 2001.
- [123] SCHAPER, F., A. GEYER und H. H. BRINTZINGER: *Displacement of $H_3CB(C_6F_5)_3^-$ anions from zirconocene methyl cations by neutral ligand molecules: Equilibria, kinetics, and mechanisms*. Organometallics, 21(3):473—483, 2002.
- [124] HORNER, L., H. SIEGEL und H. BÜTHE: *Asymmetric Catalytic Hydrogenation with an Optically Active Phosphine-Rhodium Complex in Homo-*

- geneous Solution*. Angewandte Chemie International Edition, 7(12):942—943, 1968.
- [125] KNOWLES, W. S. und M. J. SABACKY: *Catalytic Asymmetric Hydrogenation Employing a Soluble Optically Active Rhodium Complex*. Chemical Communications, (22):1445—1446, 1968.
- [126] DANG, T. P. und H. B. KAGAN: *Asymmetric synthesis of hydratropic acid and amino-acids by homogeneous catalytic hydrogenation*. Journal of the Chemical Society D-Chemical Communications, (10):481, 1971.
- [127] KNOWLES, W. S., M. J. SABACKY, B. D. VINEYARD und D. J. WEINKAUFF: *Asymmetric Hydrogenation With a Complex of Rhodium and a Chiral Bisphosphine*. Journal of the American Chemical Society, 97(9):2567—2568, 1975.
- [128] KNOWLES, W. S.: *Asymmetric hydrogenations (Nobel lecture)*. Angewandte Chemie International Edition, 41(12):1999—2007, 2002.
- [129] MIYASHITA, A., A. YASUDA, H. TAKAYA, K. TORIUMI, T. ITO, T. SOUCHI und R. NOYORI: *Synthesis of 2,2'-bis(diphenylphosphino)-1,1'-binaphthyl (BINAP), an atropisomeric chiral bis(triaryl)phosphine, and its use in the Rhodium(I)-catalyzed asymmetric hydrogenation of α -(acylamino)acrylic acids*. Journal of the American Chemical Society, 102(27):7932—7934, 1980.
- [130] NOYORI, R.: *Asymmetric catalysis: Science and opportunities (Nobel lecture)*. Angewandte Chemie International Edition, 41(12):2008–2022, 2002.
- [131] BIRCHER, H., B. R. BENDER und W. VON PHILIPSBORN: *Interconversion of diastereomeric complexes involved in Rh(I)-catalyzed asymmetric hydrogenation: A (^{31}P , ^{31}P) EXSY NMR-study*. Magnetic Resonance in Chemistry, 31(3):293—298, 1993.
- [132] BLASER, H. U., C. MALAN, B. PUGIN, F. SPINDLER, H. STEINER und M. STUDER: *Selective hydrogenation for fine chemicals: Recent trends and*

- new developments*. Advanced Synthesis & Catalysis, 345(1-2):103—151, 2003.
- [133] BÖRNER, A. und D. HELLER: *The economic use of precious chiral diphosphine ligands-DuPHOS and its rhodium(I) COD and NBD complexes*. Tetrahedron Letters, 42(2):223—225, 2001.
- [134] CREPY, K. V. L. und T. IMAMOTO: *Recent developments in catalytic asymmetric hydrogenation employing P-chirogenic diphosphine ligands*. Advanced Synthesis & Catalysis, 345(1-2):79—101, 2003.
- [135] DWARS, T. und G. OEHME: *Complex-catalyzed hydrogenation reactions in aqueous media*. Advanced Synthesis & Catalysis, 344(3-4):239—260, 2002.
- [136] GRIDNEV, I. D. und T. IMAMOTO: *On the mechanism of stereoselection in Rh-catalyzed asymmetric hydrogenation: A general approach for predicting the sense of enantioselectivity*. Accounts of Chemical Research, 37(9):633—644, 2004.
- [137] GRIDNEV, I. D., Y. YAMANOI, N. HIGASHI, H. TSURUTA, M. YASUTAKE und T. IMAMOTO: *Asymmetric hydrogenation catalyzed by (S,S)-R-BisP*-Rh and (R,R)-R-miniPHOS complexes: Scope, limitations, and mechanism*. Advanced Synthesis & Catalysis, 343(1):118—136, 2001.
- [138] HELLER, D., R. THEDE und D. HABERLAND: *Kinetic models for catalytic selection processes as applied to asymmetric hydrogenation*. Journal of Molecular Catalysis A-Chemical, 115(2):273—281, 1997.
- [139] JEULIN, S., S. D. DE PAULE, V. RATOVELOMANANA-VIDAL, J. P. GENET, N. CHAMPION und P. DELLIS: *Chiral biphenyl diphosphines for asymmetric catalysis: Stereoelectronic design and industrial perspectives*. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 101(16):5799—5804, 2004.
- [140] NOYORI, R.: *Chemical multiplication of chirality: Science and applications*. Chemical Society Reviews, 18(2):187—208, 1989.

- [141] SALUZZO, C. und M. LEMAIRE: *Homogeneous-supported catalysts for enantioselective hydrogenation and hydrogen transfer reduction*. Advanced Synthesis & Catalysis, 344(9):915—928, 2002.
- [142] TANG, W. J. und X. M. ZHANG: *New chiral phosphorus ligands for enantioselective hydrogenation*. Chemical Reviews, 103(8):3029—3069, 2003.
- [143] BROWN, J. M. und P. A. CHALONER: *The mechanism of asymmetric homogeneous hydrogenation: Rhodium(I) complexes of dehydroamino acids containing asymmetric ligands related to bis(1,2-diphenylphosphino)ethane*. Journal of the American Chemical Society, 102(9):3040—3048, 1980.
- [144] BROWN, J. M., P. L. EVANS und A. R. LUCY: *Stereochemistry of intermediates in homogeneous hydrogenation catalysed by tris(phenylphosphine)rhodium chloride, employing nuclear magnetic resonance magnetisation transfer*. Journal of the Chemical Society-Perkin Transactions 2, (11):1589—1596, 1987.
- [145] BROWN, J. M., M. ROSE, F. I. KNIGHT und A. WIENAND: *Ruthenium diphosphine complexes for catalysis: A general synthesis and direct comparisons with rhodium complexes*. Recueil des Travaux Chimiques des Pays-bas-Journal of the Royal Netherlands Chemical Society, 114(4-5):242—251, 1995.
- [146] CHAN, A. S. C., J. J. PLUTH und J. HALPERN: *Identification of the enantioselective step in the asymmetric catalytic hydrogenation of a prochiral olefin*. Journal of the American Chemical Society, 102(18):5952—5954, 1980.
- [147] FELDGUS, S. und C. R. LANDIS: *Origin of enantio-reversal in the rhodium-catalyzed asymmetric hydrogenation of prochiral enamides and the effect of the α -substituent*. Organometallics, 20(11):2374—2386, 2001.
- [148] FELDGUS, S. und C. R. LANDIS: *Large-scale computational modeling of [Rh(DuPHOS)](+) -catalyzed hydrogenation of prochiral enamides: Reac-*

- tion pathways and the origin of enantioselection.* Journal of the American Chemical Society, 122(51):12714—12727, 2000.
- [149] HALPERN, J.: *Mechanism and stereoselectivity of asymmetric hydrogenation.* Science, 217(4558):401—407, 1982.
- [150] HALPERN, J., D. P. RILEY, A. S. C. CHAN und J. J. PLUTH: *Novel coordination chemistry and catalytic properties of cationic 1,2-bis(diphenylphosphino)ethanerhodium(I) complexes.* Journal of the American Chemical Society, 99(24):8055—8057, 1977.
- [151] LANDIS, C. R. und S. FELDGUS: *A simple model for the origin of enantioselection and the anti lock-and-key motif in asymmetric hydrogenation of enamides as catalyzed by chiral diphosphine complexes of Rh(I).* Angewandte Chemie International Edition, 39(16):2863—2866, 2000.
- [152] LANDIS, C. R. und J. HALPERN: *Asymmetric hydrogenation of methyl-(Z)- α -acetamidocinnamate catalyzed by (1,2-bis((phenyl-ortho-anisoyl)phosphino)ethane)rhodium(I): kinetics, mechanism, and origin of enantioselection.* Journal of the American Chemical Society, 109(6):1746—1754, 1987.
- [153] LANDIS, C. R., P. HILFENHAUS und S. FELDGUS: *Structures and reaction pathways in rhodium(I)-catalyzed hydrogenation of enamides: A model DFT study.* Journal of the American Chemical Society, 121(38):8741—8754, 1999.
- [154] MCCULLOCH, B., J. HALPERN, M. R. THOMPSON und C. R. LANDIS: *Catalyst substrate adducts in asymmetric catalytic-hydrogenation - crystal and molecular-structure of [((R,R)-1,2-bis(phenyl-ortho-anisoylphosphino)ethane)(methyl-(Z)- β -propyl- α -acetamidoacrylate)]-rhodium tetrafluoroborate, [Rh(DIPAMP)(MPAA)]BF₄.* Organometallics, 9(5):1392—1395, 1990.
- [155] HALPERN, J. In: MORRISON, J. D. (Herausgeber): *Chiral Catalysis*, Band 5, Seiten 41—69. Academic Press: Orlando, FL, 1985.

- [156] REETZ, M. T. und G. MEHLER: *Highly enantioselective Rh-catalyzed hydrogenation reactions based on chiral monophosphite ligands*. Angewandte Chemie International Edition, 39(21):3889—3890, 2000.
- [157] REETZ, M. T. und T. SELL: *Rhodium-catalyzed enantioselective hydrogenation using chiral monophosphonite ligands*. Tetrahedron Letters, 41(33):6333—6336, 2000.
- [158] CLAVER, C., E. FERNANDEZ, A. GILLON, K. HESLOP, D. J. HYETT, A. MARTORELL, A. G. ORPEN und P. G. PRINGLE: *Biarylphosphonites: a class of monodentate phosphorus(III) ligands that outperform their chelating analogues in asymmetric hydrogenation catalysis*. Chemical Communications, (11):961—962, 2000.
- [159] BERG, M. VAN DEN, A. J. MINNAARD, E. P. SCHUDDE, J. VAN ESCH, A. H. M. DE VRIES, J. G. DE VRIES und B. L. FERGINGA: *Highly enantioselective rhodium-catalyzed hydrogenation with monodentate ligands*. Journal of the American Chemical Society, 122(46):11539—11540, 2000.
- [160] REETZ, M. T., G. MEHLER, A. MEISWINKEL und T. SELL: *Enantioselective hydrogenation of enamides catalyzed by chiral rhodium-monodentate phosphite complexes*. Tetrahedron Letters, 43(44):7941—7943, 2002.
- [161] REETZ, M. T.: *Chiral monophosphites and monophosphonites as ligands in asymmetric transition metal catalysis*. Russian Journal of Organic Chemistry, 39(3):392—396, 2003.
- [162] REETZ, M. T.: *Mixtures of chiral monodentate P-ligands: A new principle in combinatorial asymmetric transition metal catalysis*. Chimica Oggi-Chemistry Today, 21(10-11):5—8, 2003.
- [163] REETZ, M. T., L. J. GOOSSEN, A. MEISWINKEL, J. PAETZOLD und J. F. JENSEN: *Enantioselective Rh-catalyzed hydrogenation of vinyl carboxylates with monodentate phosphite ligands*. Organic Letters, 5(17):3099—3101, 2003.

- [164] REETZ, M. T., J. A. MA und R. GODDARD: *Binol-derived monodentate phosphites and phosphoramidites with phosphorus stereogenic centers: Novel ligands for transition-metal catalysis*. *Angewandte Chemie International Edition*, 44(3):412—415, 2005.
- [165] REETZ, M. T. In: WARD, M. D. (Herausgeber): *Comprehensive Coordination Chemistry II*, Band 9, Seiten 509—548. University of Bristol: Bristol, U.K., 2004.
- [166] MINNAARD, A. J., M. VAN DEN BERG, E. P. SCHUDDE, J. VAN ESCH, A. H. M. DE VRIES, J. G. DE VRIES und B. L. FERGINGA: *Yes! Asymmetric hydrogenation with cheap ligands!* *Chimica Oggi-Chemistry Today*, 19(3-4):12—13, 2001.
- [167] BERG, M. VAN DEN, A. J. MINNAARD, R. M. HAAK, M. LEEMAN, E. P. SCHUDDE, A. MEETSMA, B. L. FERGINGA, A. H. M. DE VRIES, C. E. P. MALJAARS, C. E. WILLANS, D. HYETT, J. A. F. BOOGERS, H. J. W. HENDERICKX und J. G. DE VRIES: *Monodentate phosphoramidites: A breakthrough in rhodium-catalysed asymmetric hydrogenation of olefins*. *Advanced Synthesis & Catalysis*, 345(1-2):308—323, 2003.
- [168] PEÑA, D., A. J. MINNAARD, J. G. DE VRIES und B. L. FERGINGA: *Highly enantioselective rhodium-catalyzed hydrogenation of β -dehydroamino acid derivatives using monodentate phosphoramidites*. *Journal of the American Chemical Society*, 124(49):14552—14553, 2002.
- [169] BERNSMANN, H., M. VAN DEN BERG, R. HOEN, A. J. MINNAARD, G. MEHLER, M. T. REETZ, J. G. DE VRIES und B. L. FERGINGA: *PipPhos and MorfPhos: Privileged monodentate phosphoramidite ligands for rhodium-catalyzed asymmetric hydrogenation*. *Journal of Organic Chemistry*, 70(3):943—951, 2005.
- [170] WU, S. L., W. C. ZHANG, Z. G. ZHANG und X. M. ZHANG: *Synthesis of new monodentate spiro phosphoramidite ligand and its application in Rh-catalyzed asymmetric hydrogenation reactions*. *Organic Letters*, 6(20):3565—3567, 2004.

- [171] HU, A. G., Y. FU, J. H. XIE, H. ZHOU, L. X. WANG und Q. L. ZHOU: *Monodentate chiral spiro phosphoramidites: Efficient ligands for rhodium-catalyzed enantioselective hydrogenation of enamides*. *Angewandte Chemie International Edition*, 41(13):2348—2350, 2002.
- [172] CHEN, W. P. und J. L. XIAO: *Enantioselective hydrogenation with inexpensive, easily available monodentate phosphite ligands*. *Tetrahedron Letters*, 42(15):2897—2899, 2001.
- [173] HUA, Z. H., V. C. VASSAR und I. OJIMA: *Synthesis of new chiral monodentate phosphite ligands and their use in catalytic asymmetric hydrogenation*. *Organic Letters*, 5(21):3831—3834, 2003.
- [174] HUANG, H. M., Z. ZHENG, H. L. LUO, C. M. BAI, X. Q. HU und H. L. CHEN: *A novel class of P-O monophosphite ligands derived from D-mannitol: Broad applications in highly enantioselective Rh-catalyzed hydrogenations*. *Journal of Organic Chemistry*, 69(7):2355—2361, 2004.
- [175] JERPHAGNON, T., J. L. RENAUD, P. DEMONCHAUX, A. FERREIRA und C. BRUNEAU: *Enantioselective hydrogenation of β -acylamino acrylates catalyzed by rhodium(I)-monophosphite complexes*. *Advanced Synthesis & Catalysis*, 346(1):33—36, 2004.
- [176] REETZ, M. T., A. MEISWINKEL, G. MEHLER, K. ANGERMUND, M. GRAF, W. THIEL, R. MYNOTT und D. G. BLACKMOND: *Why are BINOL-based monophosphites such efficient ligands in Rh-catalyzed asymmetric olefin hydrogenation?* *Journal of the American Chemical Society*, 127(29):10305—10313, 2005.
- [177] ANGERMUND, K.: *Persönliche Mitteilung*. 2007.

Anhang A

Rohdaten der Rechnungen zur homogenen Olefinpolymerisation

Rohdaten zu Kapitel 2

A.1 Energien

Struktur	Etot (dzt)	ΔG Korrektur	ΔH Korrektur	SP Energie
		[hartree]		
1 γ 1	−590.04504	0.223683	0.279088	−590.16343
1 γ 1 − 1 α 1	−590.02804	0.220226	0.277051	−590.14757
1 γ 1 − 1 β 2	−590.04031	0.224074	0.278149	−590.16021
1 β 1	−590.04683	0.222290	0.278193	−590.16660
1 β 1 − 1 β 2	−590.04303	0.222376	0.277187	−590.16417
1 β 2	−590.04600	0.222125	0.279058	−590.16663
1 β 2 − 1 α 3	−590.02866	0.219898	0.277299	−590.15561
1 α 1	−590.02934	0.219636	0.278008	−590.14937
1 α 1 − 1 α 2	−590.02381	0.220736	0.277186	−590.14391
1 α 2	−590.02701	0.219999	0.277996	−590.14704
1 α 1 − 1 α 3	−590.02628	0.220205	0.276936	−590.14623
1 α 3	−590.03007	0.219644	0.278008	−590.14998
1 α 3 − 1 α 2'	−590.02723	0.219440	0.277067	−590.14692
1 α 1 − 1 α 1'	−590.01819	0.220970	0.276093	−590.13821
1 α 2 − 1 α 3'	−590.02461	0.219308	0.276990	−590.14429
π -Komplex	−668.64598	0.268416	0.335136	−668.78380
TS Ins BS	−668.64373	0.275610	0.335705	−668.77979
Ethen	−78.58233	0.028819	0.053754	−78.60387

Tabelle A.1: Total Energies, ΔG und ΔH Korrekturwerte und die Single-Point Energien der berechneten Spezies in Hartree

Struktur	Etot (dzp)	ΔG Korrektur	ΔH Korrektur	SP Energie
		[hartree]		
2 γ 1	−629.35689	0.249174	0.307927	−629.48360
2 γ 2				
2 γ 1 − 2 γ 2	−629.34554	0.250734	0.307130	−629.47171
2 γ 1 − 2 α 2	−629.34070	0.245716	0.305592	−629.46853
2 γ 2 − 2 α 3	−629.33703	0.245843	0.305973	−629.46505
2 γ 1 − 2 β 2	−629.35383	0.250026	0.307074	−629.48117
2 β 1	−629.35711	0.247564	0.306693	−629.48524
2 β 2	−629.35732	0.248141	0.307546	−629.48613
2 β 1 − 2 β 2	−629.35508	0.248507	0.305855	−629.48420
2 β 2 − 2 α 1	−629.33708	0.245498	0.305757	−629.46497
2 α 1	−629.33867	0.245304	0.306742	−629.46693
2 α 2	−629.34159	0.245047	0.306688	−629.46992
2 α 3	−629.33874	0.245468	0.306757	−629.46715
2 α 2 − α 3	−629.33523	0.246371	0.305755	−629.46353
2 α 1 − 2 α 1'				
2 α 2 − 2 α 3'	−629.33453	0.245975	0.304717	−629.46289
2 α 3 − 2 α 2'	−629.33483	0.245798	0.305605	−629.46309
2 α 1 − 2 α 3'	−629.46440	0.244889	0.305649	−629.46440
Insertion frontside	−747.26648	0.325146	0.392394	−747.41892
Insertion backside	−747.26525	0.327053	0.393201	−747.41735
Propen	−117.89647	0.081876	0.077317	−117.92642

Tabelle A.2: Total Energies, ΔG und ΔH Korrekturwerte und die Single-Point Energien der berechneten Spezies in Hartree

Orientierung	Struktur	Position	Energie [hartree]	ΔG Korrektur [kJ/mol]
Me	α	frontside	-2878.00648	1014.80
		backside	-2878.00433	1019.68
	β	frontside	-2878.01137	1022.33
		backside	-2877.98326	1003.78
F	α	frontside	-2877.99742	1023.21
		backside	-2877.99272	1016.56
		bridge1	-2877.96709	998.08
		bridge2	-2877.96722	1004.98
	β	frontside	-2877.99868	1028.25
		backside	-2877.98914	1013.02

Tabelle A.3: Total Energies in hartrees und ΔG -Korrekturwerte in kJ/mol der unter COSMO berechneten Spezies.

Orientierung	Struktur	Position	Energie [hartree]	ΔG Korrektur [kJ/mol]
Me	α	frontside	-2877.99277	1020.07
		backside	-2877.99016	1017.85
	β	frontside	-2877.99700	1019.04
		backside	-2877.96430	1016.18
F	α	frontside	-2877.98206	1023.20
		backside	-2877.98178	1024.43
		bridge	-2877.94049	1006.67
	β	frontside	-2877.98515	1017.10
		backside	-2877.96831	1006.09

Tabelle A.4: Total Energies in hartrees und ΔG -Korrekturwerte in kJ/mol der unter Gasphasenbedingungen berechneten Spezies.

Orientierung	Struktur	Position	Energie [hartree]	ΔG Korrektur [kJ/mol]
Me	α	frontside	-2878.00694	1020.07
		backside	-2878.00408	1017.85
	β	frontside	-2877.99888	1019.04
		backside	-2877.98746	1016.18
F	α	frontside	-2877.99578	1023.20
		backside	-2877.99595	1024.43
		bridge	-2877.96674	1006.67
	β	frontside	-2877.99888	1017.10
		backside	-2877.98913	1006.09

Tabelle A.5: Total Energies in hartrees und ΔG -Korrekturwerte in kJ/mol der COSMO Single-Point Rechnungen. Die ΔG Korrekturwerte sind die der entsprechenden Struktur in der Gasphase..

A.2 Kartesische Koordinaten der optimierten Strukturen

A.2.1 Propyl als Modell für die Kette

1gamma1

32

Zr	0.302181	-0.123206	-0.158801
C	-0.831908	-2.362557	-0.821278
C	-0.657683	-2.444330	0.598543
C	-1.404812	-1.371981	1.206275
C	-2.098662	-0.646403	0.158824
C	-1.710478	-1.246181	-1.098639
H	-0.436756	-3.058910	-1.559799
H	-0.077237	-3.194386	1.132044
H	-1.480978	-1.176753	2.274801
H	-2.072302	-0.947821	-2.082274
C	0.566340	2.348467	-0.887127
C	-0.778800	1.882571	-1.144921
C	-1.425093	1.622721	0.123865
C	-0.444830	1.888817	1.159604
C	0.762764	2.361381	0.534238
H	1.273515	2.700527	-1.636871
H	-1.248634	1.799027	-2.124559
H	-0.610812	1.793155	2.231275
H	1.659903	2.688762	1.055702
C	1.753609	-0.485585	1.475822
C	2.881681	-0.351699	0.396656
H	1.919792	0.217713	2.299512
H	1.710956	-1.507200	1.878635
H	3.281319	0.672302	0.361381
C	2.595005	-0.818120	-1.083792
H	3.542561	-0.809403	-1.642020
H	2.205880	-1.849257	-1.150429
H	1.975269	-0.130949	-1.730468
H	3.707597	-1.008560	0.718353
C	-2.682774	0.763956	0.300937
H	3.147982	0.917898	1.285463
H	-3.435485	0.975734	-0.472732

1γ1 – 1α1

32

Zr	0.149553	-0.142224	-0.174027
C	-1.006809	-2.382765	-0.762248
C	-0.720092	-2.448041	0.635335
C	-1.448367	-1.377139	1.294270
C	-2.231021	-0.673026	0.302138
C	-1.909345	-1.266255	-0.980992
H	-0.638548	-3.065474	-1.526238
H	-0.093717	-3.190751	1.127356
H	-1.466747	-1.190649	2.368521
H	-2.347749	-0.983995	-1.938638
C	0.397397	2.342390	-0.869988
C	-0.970908	1.887078	-1.055430
C	-1.550809	1.625924	0.247386
C	-0.498220	1.827525	1.219230
C	0.687777	2.302215	0.526382

H	1.067574	2.685196	-1.656523
H	-1.503443	1.852056	-2.006184
H	-0.604096	1.728430	2.299964
H	1.620869	2.607294	0.996956
C	2.127883	-0.753871	-0.937577
C	3.411302	-0.156725	-0.326848
H	2.210878	-1.854133	-1.010194
H	1.963577	-0.380091	-1.985003
H	4.302720	-0.538110	-0.856263
C	3.531226	-0.507073	1.171822
H	2.684071	-0.101352	1.762637
H	3.555315	-1.597751	1.327935
H	4.448606	-0.085096	1.611310
H	3.425158	0.939389	-0.453272
C	-2.790139	0.747403	0.480105
H	-3.203497	0.893928	1.489126
H	-3.582319	0.964242	-0.251938

1γ1 – 1beta2

32

Zr	-0.282767	-0.071661	-0.224858
C	-0.274937	2.456823	-0.809799
C	-0.548229	2.407007	0.593024
C	0.572337	1.778201	1.248800
C	1.582216	1.488764	0.248685
C	1.031207	1.870688	-1.033465
H	-0.906010	2.911947	-1.572370
H	-1.440018	2.786615	1.086927
H	0.670177	1.611216	2.320067
H	1.549320	1.810513	-1.989989
C	0.680978	-2.354525	-0.984686
C	1.663811	-1.306244	-1.148326
C	2.042783	-0.824665	0.162448
C	1.247294	-1.555746	1.128918
C	0.439986	-2.515097	0.421128
H	0.259029	-2.963980	-1.783255
H	2.092403	-0.975922	-2.094218
H	1.291363	-1.435966	2.210001
H	-0.229658	-3.241120	0.878341
C	-1.761809	-0.433028	1.402959
C	-2.665991	-0.962610	0.255315
H	-2.194656	0.457614	1.877001
H	-1.583609	-1.203245	2.162785
H	-3.498580	-1.534620	0.699553
C	-3.258299	0.102765	-0.702051
H	-3.825395	0.860581	-0.138225
H	-3.925319	-0.366138	-1.441159
H	-2.511239	0.675638	-1.300301
H	-2.144522	-1.752338	-0.344276
C	2.745801	0.509664	0.428912
H	3.168481	0.555620	1.443064
H	3.556003	0.698049	-0.290796

1β1

32

Zr	-0.144377	-0.120654	-0.354737
----	-----------	-----------	-----------

C	0.600784	-2.452596	0.540470	H	-4.293187	-0.142917	-1.572668
C	1.126859	-2.332235	-0.782024	H	-4.769963	-0.373597	0.129393
C	2.036664	-1.201081	-0.797487	H	-3.810032	1.051709	-0.333063
C	2.105800	-0.646557	0.539937	H	-1.963610	-0.527166	-1.110031
C	1.173214	-1.396863	1.353863	C	2.836370	0.679273	-0.135300
H	-0.086240	-3.221771	0.889038	H	3.512841	0.832207	0.718644
H	0.918841	-2.996938	-1.618973	H	3.405873	0.851958	-1.060604
H	2.636616	-0.879708	-1.649249				
H	0.995535	-1.250181	2.418730				
C	-0.836242	2.302928	0.312263	$1\beta 2$			
C	0.203671	1.817182	1.199281				
C	1.416105	1.639975	0.429434	32			
C	1.086407	1.942737	-0.949181				
C	-0.297583	2.377106	-1.008664	Zr	-0.177181	-0.083398	-0.297981
H	-1.840408	2.594888	0.613070	C	-0.185060	2.418402	-0.908710
H	0.109192	1.691780	2.277451	C	-0.572419	2.383178	0.471758
H	1.785760	1.933612	-1.785579	C	0.504656	1.795422	1.227887
H	-0.816418	2.740100	-1.894448	C	1.601069	1.510027	0.320582
C	-2.158439	-0.793332	-1.080729	C	1.152734	1.871894	-1.007746
C	-2.511510	-0.894476	0.379289	H	-0.760767	2.850993	-1.726169
H	-2.135320	-1.752761	-1.615037	H	-1.509724	2.751396	0.883321
H	-2.728800	-0.030250	-1.628864	H	0.513637	1.640947	2.305750
H	-2.552700	-1.938343	0.726583	H	1.748534	1.803926	-1.917782
C	-3.730427	-0.094431	0.870032	C	0.845916	-2.355562	-0.939853
H	-3.801764	-0.085207	1.968383	C	1.838242	-1.304560	-1.028996
H	-4.642596	-0.563464	0.470884	C	2.101658	-0.806650	0.305432
H	-3.704510	0.944621	0.508719	C	1.223787	-1.530786	1.206134
H	-1.624810	-0.491520	1.064237	C	0.481157	-2.499515	0.439600
C	2.605245	0.769552	0.862682	H	0.495615	-2.975239	-1.764544
H	3.515045	1.016366	0.295343	H	2.350185	-0.985231	-1.936588
H	2.824381	0.887488	1.934184	H	1.171333	-1.399102	2.285708
				H	-0.223417	-3.223896	0.843155
				C	-1.854669	-0.464030	1.154997
$1\beta 1 - 1\beta 2$				C	-2.703027	-0.778116	-0.081019
				H	-2.218559	0.415672	1.699179
32				H	-1.760475	-1.315281	1.837426
				H	-2.827209	-1.863856	-0.216384
Zr	-0.192517	-0.113004	0.010734	C	-4.061747	-0.053537	-0.168280
C	-0.542758	2.361555	-0.634848	H	-4.578991	-0.279361	-1.113538
C	-0.468677	2.327947	0.801209	H	-4.702031	-0.387010	0.661888
C	0.837938	1.831655	1.161752	H	-3.940262	1.037615	-0.088235
C	1.602217	1.594593	-0.052324	H	-2.177411	-0.476026	-1.070828
C	0.728235	1.908242	-1.159049	C	2.759139	0.545832	0.611591
H	-1.377312	2.734549	-1.226401	H	3.093980	0.611399	1.656991
H	-1.236579	2.662894	1.494423	H	3.624160	0.736974	-0.040375
H	1.211302	1.707060	2.178687				
H	0.993342	1.843622	-2.215091				
C	0.700113	-2.409588	-0.763347	$1\beta 2 - 1\alpha 3$			
C	1.580884	-1.368253	-1.247339				
C	2.204694	-0.723642	-0.114367	32			
C	1.669073	-1.364283	1.076022				
C	0.765785	-2.415726	0.673313	Zr	-0.089339	-0.112220	-0.061061
H	0.143714	-3.111046	-1.383113	C	0.673330	-2.465275	0.714848
H	1.767773	-1.129772	-2.295122	C	0.779446	-2.463309	-0.709416
H	1.947029	-1.124370	2.102797	C	1.739278	-1.440112	-1.084531
H	0.265622	-3.116253	1.337929	C	2.275701	-0.844444	0.123177
C	-2.050891	-0.631443	1.134300	C	1.571242	-1.447662	1.233922
C	-2.688048	-0.833121	-0.237847	H	0.054603	-3.134923	1.310623
H	-2.512569	0.190959	1.696919	H	0.255938	-3.129468	-1.393306
H	-2.022565	-1.548271	1.736221	H	2.071761	-1.224731	-2.100437
H	-2.834835	-1.900771	-0.463035	H	1.747508	-1.236297	2.289029
C	-3.962628	-0.020644	-0.529719	C	-0.317658	2.383903	0.622498

C	0.903834	1.818370	1.169874	32			
C	1.797433	1.504457	0.075429				
C	1.074939	1.789892	-1.148297	Zr	-0.106184	-0.203694	0.032390
C	-0.212523	2.369830	-0.800126	C	1.203923	-2.369002	-0.561765
H	-1.150081	2.780700	1.201296	C	1.190611	-2.292457	0.864426
H	1.144249	1.734645	2.230111	C	1.889810	-1.079393	1.254951
H	1.471812	1.688429	-2.158707	C	2.371897	-0.422022	0.061208
H	-0.949891	2.754371	-1.502975	C	1.892859	-1.197498	-1.067096
C	-2.214215	-0.575029	-0.448951	C	-0.791727	2.147454	-0.819646
C	-3.302455	0.071185	0.433156	C	0.557664	1.817234	-1.245400
H	-2.376231	-1.667096	-0.518169	C	1.408912	1.762923	-0.072611
H	-2.276786	-0.181812	-1.497243	C	0.551964	1.966106	1.075282
H	-3.229197	1.171815	0.388563	C	-0.795387	2.231788	0.605591
C	-4.737130	-0.353944	0.045484	C	-2.003830	-1.153790	-0.534429
H	-5.477184	0.121620	0.708785	C	-3.519422	-0.902554	-0.417966
H	-4.966856	-0.059843	-0.991052	C	-3.936097	0.010876	0.755023
H	-4.861550	-1.445718	0.124110	C	2.772417	1.058490	-0.020157
H	-3.134430	-0.210961	1.491893	H	0.789387	-3.173274	-1.167105
C	2.975450	0.522836	0.174423	H	0.773879	-3.035508	1.543015
H	3.677719	0.648383	-0.663132	H	2.087849	-0.763799	2.279748
H	3.532126	0.655482	1.114102	H	2.101239	-0.988275	-2.116461
				H	-1.640099	2.328132	-1.477281
1 α 1				H	0.892364	1.730826	-2.279096
				H	0.880266	2.002385	2.114350
32				H	-1.645623	2.493774	1.232300
				H	-1.795491	-2.235898	-0.616946
Zr	-0.107525	-0.151224	-0.030201	H	-1.591766	-0.700857	-1.513260
C	0.974147	-2.405343	-0.718148	H	-4.029583	-1.872875	-0.307659
C	0.866353	-2.432470	0.706110	H	-3.901670	-0.468852	-1.358597
C	1.672325	-1.345217	1.236702	H	3.352388	1.369365	0.861535
C	2.317276	-0.667580	0.132864	H	3.371843	1.267190	-0.918682
C	1.835694	-1.295888	-1.082142	H	-3.579761	-0.388517	1.719365
C	-0.458525	2.306351	-0.778074	H	-5.033796	0.081709	0.811783
C	0.876708	1.853916	-1.123380	H	-3.545649	1.033289	0.632925
C	1.616872	1.624495	0.102048				
C	0.695088	1.853916	1.194925	1 α 2			
C	-0.573719	2.300099	0.645938				
C	-2.124228	-0.774276	-0.621872	32			
C	-3.492857	-0.097963	-0.495511				
C	-4.180727	-0.469684	0.835194	Zr	0.073584	-0.232243	-0.086755
C	2.884030	0.759662	0.199333	C	-1.322280	-2.295764	0.662822
H	0.512816	-3.107011	-1.411236	C	-1.406242	-2.250070	-0.761927
H	0.316442	-3.165835	1.294149	C	-2.052566	-1.001110	-1.131899
H	1.829651	-1.130096	2.294189	C	-2.409708	-0.291849	0.077018
H	2.144527	-1.039891	-2.095736	C	-1.900078	-1.072925	1.186872
H	-1.225193	2.621475	-1.483813	C	0.963404	2.084950	0.669717
H	1.283185	1.791889	-2.132792	C	-0.370047	1.856844	1.195015
H	0.938402	1.784875	2.255724	C	-1.302399	1.827862	0.085693
H	-1.442332	2.616941	1.220961	C	-0.516501	1.947245	-1.124073
H	-2.239069	-1.874078	-0.643008	C	0.875481	2.133029	-0.755611
H	-1.633642	-0.501231	-1.630359	C	1.961642	-1.321640	0.194005
H	-4.147159	-0.412705	-1.330068	C	3.459783	-1.215073	-0.097738
H	-3.395806	0.998333	-0.570697	C	4.083596	0.183017	0.016842
H	3.420598	0.936805	1.143335	C	-2.708357	1.212952	0.147381
H	3.574856	0.960053	-0.633099	H	-0.914701	-3.111457	1.257827
H	-5.173723	0.000985	0.898924	H	-1.088568	-3.032538	-1.449572
H	-3.591885	-0.132511	1.705182	H	-2.305386	-0.694495	-2.147402
H	-4.321271	-1.559158	0.922447	H	-2.018881	-0.830177	2.242951
				H	1.865716	2.221993	1.261660
1 α 1 – 1 α 2				H	-0.636245	1.813811	2.251089
				H	-0.914277	1.980913	-2.138768

H	1.695735	2.327654	-1.443866	C	-1.697739	1.576682	0.189943
H	1.675616	-2.390203	0.236710	C	-1.041597	1.892740	-1.061586
H	1.729588	-0.901521	1.244977	C	0.303726	2.359983	-0.775120
H	3.615494	-1.613088	-1.118309	C	2.173207	-0.715383	-0.043980
H	4.009365	-1.910668	0.565111	C	3.465464	0.020351	-0.405744
H	-3.329449	1.541809	-0.699114	C	4.696999	-0.435996	0.408542
H	-3.226840	1.479959	1.080201	C	-2.931410	0.668932	0.320230
H	5.160591	0.140679	-0.206020	H	-0.162279	-3.174874	1.171529
H	3.977155	0.587612	1.037398	H	-0.554928	-3.099283	-1.512008
H	3.627357	0.894622	-0.689371	H	-2.303985	-1.078456	-2.052084
$1\alpha 1 - 1\alpha 3$				H	-1.663413	-1.206643	2.301344
32				H	1.393142	2.604150	1.178553
Zr				H	-0.891945	1.650883	2.306376
C	0.084155	-0.105197	-0.063675	H	-1.507238	1.864839	-2.047305
C	-0.668595	-2.469865	0.684878	H	1.018240	2.735598	-1.505877
C	-0.722671	-2.471081	-0.742862	H	2.323133	-1.809589	-0.104296
C	-1.693723	-1.471797	-1.156000	H	1.902281	-0.515055	1.061812
C	-2.274081	-0.876289	0.027778	H	3.336038	1.111010	-0.300280
C	-1.594210	-1.461979	1.167322	H	3.659229	-0.167517	-1.478134
C	0.259706	2.370667	0.685172	H	-3.664409	0.869461	-0.475334
C	-0.970828	1.771574	1.170563	H	-3.430870	0.802626	1.291312
C	-1.819892	1.477145	0.031944	H	5.599631	0.101429	0.077614
C	-1.060330	1.815557	-1.153188	H	4.879922	-1.515079	0.282364
C	0.208497	2.390269	-0.741792	H	4.560132	-0.237537	1.484076
C	2.198036	-0.505230	0.353851	$1\alpha 3 - \alpha 2'$			
C	3.475274	0.322335	0.099324	32			
C	4.703478	-0.542385	-0.239189	Zr			
C	-2.991676	0.482750	0.058663	C	0.075386	-0.133950	0.000000
H	-0.061022	-3.126059	1.305865	C	-0.854079	-2.449822	-0.713146
H	-0.168827	-3.135285	-1.404922	C	-0.854079	-2.449822	0.713147
H	-1.992197	-1.264612	-2.184197	C	-1.735800	-1.383766	1.161934
H	-1.810923	-1.250118	2.214438	C	-2.335994	-0.761210	0.000000
H	1.065954	2.760233	1.304120	C	-1.735801	-1.383766	-1.161934
H	-1.250213	1.658080	2.217923	H	-0.316282	-3.145607	-1.355322
H	-1.415813	1.731506	-2.180657	H	-0.316281	-3.145606	1.355323
H	0.966789	2.802986	-1.405354	H	-1.982504	-1.160849	2.200441
H	2.421947	-1.587198	0.370533	H	-1.982505	-1.160850	-2.200441
H	1.767636	-0.282184	1.398994	C	0.368225	2.338015	-0.714239
H	3.697360	0.945184	0.984082	C	-0.915863	1.828870	-1.162271
H	3.304833	1.040742	-0.724437	C	-1.737668	1.561705	0.000000
H	-3.648568	0.611787	-0.814432	C	-0.915863	1.828870	1.162271
H	-3.599795	0.598626	0.968111	C	0.368225	2.338015	0.714239
H	5.581464	0.089912	-0.443637	H	1.174862	2.689305	-1.355285
H	4.523201	-1.160908	-1.133658	H	-1.239302	1.748923	-2.200537
H	4.958054	-1.214851	0.595458	H	-1.239301	1.748922	2.200537
$1\alpha 3$				H	1.174862	2.689304	1.355286
32				C	2.202160	-0.737662	-0.000001
Zr				C	3.403029	0.230226	0.000000
C	0.061938	-0.136206	-0.148894	H	2.265755	-1.423972	0.879480
C	-0.782262	-2.460081	0.632785	H	2.265756	-1.423972	-0.879482
C	-0.984592	-2.416074	-0.780815	H	3.350462	0.889902	0.884547
C	-1.915675	-1.336844	-1.066291	C	4.764643	-0.497661	0.000001
C	-2.324238	-0.736715	0.185398	H	5.595234	0.226438	0.000001
C	-1.574342	-1.402758	1.232774	H	4.873144	-1.137418	0.890875
C	0.499941	2.294684	0.638491	H	4.873145	-1.137419	-0.890872
C	-0.715846	1.775858	1.238055	H	3.350464	0.889902	-0.884548
				C	-2.967678	0.639606	0.000000
				H	-3.591851	0.800704	0.891585
				H	-3.591851	0.800704	-0.891585

1 α 1 – α 1' 1 α 2 – α 3'

32

Zr	-0.231754	0.091603	0.000000
C	-2.271137	-1.367315	0.712254
C	-2.271137	-1.367315	-0.712254
C	-1.025423	-1.970233	-1.161343
C	-1.025423	-1.970233	1.161343
C	-0.283456	-2.413801	0.000000
H	-3.074000	-1.010683	1.355534
H	-3.074000	-1.010683	-1.355534
H	-0.751364	-2.158771	-2.199862
H	-0.751364	-2.158771	2.199862
C	2.117666	0.923297	0.714945
C	2.117666	0.923297	-0.714945
C	1.909257	-0.441076	1.161834
C	1.909257	-0.441076	-1.161834
C	1.833067	-1.300817	0.000000
H	2.289308	1.784933	1.356093
H	2.289308	1.784933	-1.356093
H	1.903263	-0.774403	2.200065
H	1.903263	-0.774403	-2.200065
C	-1.428916	1.949428	0.000000
C	-1.198218	3.483556	0.000000
H	-2.075761	1.666732	-0.870410
H	-2.075761	1.666732	0.870410
H	-1.710200	3.913262	0.877705
H	-1.710200	3.913262	-0.877705
C	0.257167	3.982684	0.000000
H	0.281038	5.083894	0.000000
H	0.802906	3.641808	0.894650
H	0.802906	3.641808	-0.894650
C	1.222211	-2.709472	0.000000
H	1.522676	-3.279663	-0.891614
H	1.522676	-3.279663	0.891614

1 α 1 – α 3'

32

Zr	-0.077421	-0.234651	-0.025840
C	1.384229	-2.295119	-0.632302
C	1.333410	-2.258114	0.792290
C	1.932150	-1.007526	1.230497
C	2.414252	-0.294058	0.066489
C	2.011537	-1.065966	-1.091131
C	-0.898282	2.098683	-0.788350
C	0.478510	1.881848	-1.197529
C	1.309914	1.829736	-0.012426
C	0.421154	1.926372	1.125602
C	-0.931328	2.128434	0.639585
C	-1.980570	-1.365382	-0.098069
C	-3.373027	-0.859698	-0.535422
C	-4.122671	-0.057087	0.539815
C	2.715448	1.211534	0.038220
H	1.042792	-3.111606	-1.266643
H	0.944876	-3.041242	1.441638
H	2.085282	-0.707894	2.267623
H	2.236581	-0.818501	-2.129100

H	-1.746661	2.251812	-1.452959
H	0.837889	1.857504	-2.226887
H	0.727608	1.941885	2.171736
H	-1.806713	2.313471	1.258643
H	-2.027478	-1.767801	0.946166
H	-1.693190	-2.248696	-0.713153
H	-3.993304	-1.731170	-0.815889
H	-3.287192	-0.259065	-1.460579
H	3.263857	1.531174	0.936827
H	3.310146	1.487626	-0.845257
H	-5.110924	0.261537	0.174162
H	-3.572101	0.849967	0.838007
H	-4.282990	-0.664900	1.445648

 π -Komplex

38

C	1.374102	-2.367300	0.105497
C	0.570598	-2.356219	-1.082000
C	0.949517	-1.211986	-1.869976
C	2.029036	-0.525024	-1.189954
C	2.267471	-1.233034	0.048765
C	0.160844	2.292034	1.206362
C	1.468272	1.843850	0.776034
C	1.449129	1.703433	-0.661845
C	0.101848	2.013921	-1.102136
C	-0.671603	2.406335	0.048895
C	2.480545	0.911043	-1.469993
C	-1.907823	-0.515337	-0.823958
C	-3.142232	0.364394	-0.607086
C	-4.466267	-0.421873	-0.761161
C	0.407474	-0.652799	3.012733
C	-0.859171	-0.975458	2.623737
Zr	0.030987	-0.131990	0.222184
H	1.361903	-3.135906	0.876594
H	-0.184876	-3.092029	-1.350673
H	0.533834	-0.938828	-2.838012
H	3.035283	-0.983855	0.779828
H	-0.118677	2.570160	2.221421
H	2.342979	1.713196	1.411567
H	-0.246660	2.013440	-2.133540
H	-1.699332	2.758669	0.031588
H	2.434983	1.153120	-2.541910
H	3.506710	1.095169	-1.119072
H	-1.940942	-0.991639	-1.814609
H	-1.913823	-1.380933	-0.083202
H	-3.130601	0.838097	0.391901
H	-4.542746	-0.872900	-1.763334
H	-4.542316	-1.233158	-0.018574
H	-5.331407	0.245790	-0.621308
H	-3.125981	1.184734	-1.345703
H	1.203968	-1.401881	3.035125
H	0.650009	0.340771	3.398969
H	-1.122690	-2.005035	2.357233
H	-1.679538	-0.253298	2.714869

Ethen

6

C	0.000000	0.000000	0.673810
---	----------	----------	----------

C	0.000000	0.000000	-0.673810
H	0.000000	0.932555	1.246988
H	0.000000	-0.932555	1.246988
H	0.000000	-0.932555	-1.246988
H	0.000000	0.932555	-1.246988

A.2.2 Butyl als Modell für die Kette

$2\gamma_1 2\gamma_2$

35

Zr	-0.055128	-0.032944	-0.231106
C	0.308524	2.445491	-0.884111
C	-0.021388	2.479519	0.511661
C	0.983257	1.739042	1.229306
C	1.979620	1.277854	0.281354
C	1.536971	1.694844	-1.031822
H	-0.224684	2.958667	-1.683196
H	-0.872175	2.989712	0.958484
H	1.015698	1.590953	2.307375
H	2.072613	1.524146	-1.965300
C	0.617171	-2.459385	-0.862231
C	1.744447	-1.563752	-1.013318
C	2.126758	-1.084594	0.296101
C	1.188179	-1.652504	1.245757
C	0.288664	-2.522474	0.531131
H	0.154369	-3.039026	-1.659922
H	2.260037	-1.338599	-1.946612
H	1.197651	-1.494712	2.323130
H	-0.493499	-3.131825	0.979329
C	-1.707341	-0.087026	1.250914
C	-2.725082	0.316566	0.130663
H	-1.915715	-1.106853	1.608313
H	-1.769641	0.603034	2.100828
C	-4.126387	-0.250339	0.479180
C	-2.382239	-0.165874	-1.332266
H	-1.590437	0.413189	-1.888277
H	-2.184653	-1.252115	-1.399097
H	-3.251436	0.020562	-1.981016
H	-2.801151	1.415602	0.088896
C	2.991355	0.156626	0.544483
H	3.378082	0.187895	1.573533
H	3.845959	0.205564	-0.146373
H	-4.123701	-1.352297	0.464298
H	-4.884488	0.105797	-0.238164
H	-4.422767	0.074117	1.487192

$2\gamma_1 - 2\gamma_2$

35

Zr	0.000297	-0.005098	0.000000
C	-0.348718	0.756801	2.463795
C	-0.348718	0.756801	-2.463795
C	-0.418177	-0.672245	2.510648

C	-0.418177	-0.672245	-2.510648
C	-1.523637	-1.096807	1.690653
C	-1.523637	-1.096807	-1.690653
C	-2.189740	0.083313	1.176411
C	-2.189740	0.083313	-1.176411
C	-1.430503	1.228196	1.626072
C	-1.430503	1.228196	-1.626072
C	1.082619	-1.965897	0.000000
C	2.510232	-1.303629	0.000000
C	2.835996	-0.470084	-1.264431
C	2.835996	-0.470084	1.264431
C	-3.167065	0.098424	0.000000
H	0.351589	1.385905	3.011560
H	0.351589	1.385905	-3.011560
H	0.240914	-1.329767	3.072547
H	0.240914	-1.329767	-3.072547
H	-1.842384	-2.126041	1.535167
H	-1.842384	-2.126041	-1.535167
H	-1.677247	2.270852	1.427245
H	-1.677247	2.270852	-1.427245
H	0.967303	-2.600900	-0.889298
H	0.967303	-2.600900	0.889298
H	3.893739	-0.163246	1.259064
H	3.893739	-0.163246	-1.259064
H	3.216254	-2.154991	0.000000
H	-3.825414	-0.782353	0.000000
H	-3.797143	0.999941	0.000000
H	2.640040	-1.027177	2.191929
H	2.640040	-1.027177	-2.191929
H	2.265828	0.486177	1.333050
H	2.265828	0.486177	-1.333050

$2\gamma_1 - 2\alpha_2$

35

Zr	-0.095466	-0.116546	-0.098847
C	-1.025665	1.826943	1.161950
C	-1.266255	1.804035	-1.149838
C	-1.971931	-1.412994	-1.078250
C	-1.738633	-1.437111	1.234275
C	0.187029	2.375694	0.578882
C	0.038281	2.365535	-0.840197
C	-1.016618	-2.451606	-0.736550
C	-0.869785	-2.463615	0.684117
C	-1.955353	1.525606	0.094767
C	-2.465369	-0.817037	0.147705
C	-3.143451	0.559886	0.226454
C	1.981658	-0.601186	-0.640270
C	3.192482	0.120918	-0.011914
C	4.524626	-0.287587	-0.675477
C	3.216826	-0.165629	1.507759
H	1.041977	2.760925	1.131877
H	0.758964	2.740927	-1.564831
H	-0.521713	-3.120026	-1.439198
H	-0.243984	-3.145293	1.258308
H	2.160535	-1.692930	-0.665716
H	1.828951	-0.283304	-1.712814
H	4.520930	-0.065532	-1.754550
H	4.710827	-1.367700	-0.552830
H	-1.234660	1.743007	2.228848

H	-1.694187	1.708639	-2.148033	C	-0.178757	2.498492	0.316472
H	-2.329366	-1.186365	-2.083100	C	0.443554	-2.475229	0.631047
H	-1.880553	-1.228557	2.295141	C	0.829316	-2.462518	-0.746297
H	5.371272	0.254854	-0.223000	C	1.895156	1.409593	0.241148
H	3.066769	1.210788	-0.151585	C	2.189451	-0.927507	0.393520
H	2.288915	0.173311	2.012709	C	2.962741	0.375907	0.611133
H	3.332331	-1.244323	1.706647	C	-1.687275	-0.165300	1.214170
H	4.052719	0.356866	1.999937	C	-2.639722	0.058269	0.007080
H	-3.668444	0.696003	1.183719	C	-4.067676	0.440233	0.474484
H	-3.869707	0.699435	-0.588139	C	-2.704874	-1.147339	-0.970538
$2\gamma_2 - 2\alpha_3$				Zr	-0.032803	-0.058859	-0.278455
35				H	-0.317504	2.827880	-1.911808
				H	-1.079283	2.978163	0.694998
				H	-0.317393	-3.110836	1.078560
				H	0.439678	-3.112037	-1.529328
				H	-1.851700	-1.147472	1.678425
Zr	-0.041096	-0.044139	-0.229003	H	-1.806201	0.620395	1.970590
C	-0.894849	-2.408891	-0.889655	H	-4.044644	1.330937	1.119699
C	-0.535419	-2.497341	0.487224	H	-4.505271	-0.387683	1.053624
C	-1.376756	-1.574546	1.231881	H	2.073490	1.529798	-2.010360
C	-2.303101	-0.952477	0.312877	H	0.826024	1.778554	2.203652
C	-1.956445	-1.423995	-1.012943	H	1.201712	-1.295013	2.400317
H	-0.470134	-2.993466	-1.704140	H	2.440069	-1.287743	-1.825164
H	0.211565	-3.163547	0.914566	H	-4.721981	0.649859	-0.387403
H	-1.372832	-1.446518	2.314660	H	-2.295092	0.950473	-0.581786
H	-2.476924	-1.165392	-1.935631	H	-1.738318	-1.448162	-1.446136
C	-0.206481	2.489632	-0.771948	H	-3.057595	-2.050726	-0.448958
C	-1.496271	1.840620	-0.935191	H	-3.381574	-0.931124	-1.811155
C	-1.967483	1.417325	0.368194	H	3.844358	0.443884	-0.043157
C	-0.914130	1.720862	1.311110	H	3.297661	0.486203	1.652766
C	0.151645	2.413228	0.606920	$2\beta_1$			
H	0.368805	2.974191	-1.558914	35			
H	-2.060330	1.776825	-1.866235	Zr	-0.009051	0.000000	-0.333810
H	-0.954351	1.546138	2.386587	C	-0.084229	2.478555	0.499085
H	1.045590	2.836503	1.060064	C	-0.552132	2.470178	-0.852158
C	1.997279	-0.315536	-1.062658	C	-1.752747	1.655361	-0.896863
C	3.298334	-0.369087	-0.221499	C	-2.048527	1.193357	0.444626
H	1.875971	-1.275187	-1.611272	C	-0.979396	1.666640	1.296029
H	2.061793	0.489292	-1.829108	H	0.773166	3.029750	0.879174
H	4.096362	-0.808230	-0.849463	H	-0.122378	3.022027	-1.686077
C	3.777942	1.028677	0.211761	H	-2.376543	1.490275	-1.776166
H	3.910382	1.696761	-0.654448	H	-0.902475	1.507548	2.371132
H	3.064195	1.505554	0.905800	C	-0.084229	-2.478555	0.499085
H	4.746011	0.963052	0.733002	C	-0.979396	-1.666640	1.296029
C	3.107217	-1.299334	0.997752	C	-2.048527	-1.193357	0.444626
C	-3.054749	0.356624	0.592532	C	-1.752747	-1.655361	-0.896863
H	-3.441154	0.387829	1.622191	C	-0.552132	-2.470178	-0.852158
H	-3.900764	0.492778	-0.097545	H	0.773166	-3.029750	0.879174
H	2.321845	-0.915521	1.683310	H	-0.902475	-1.507548	2.371132
H	4.029285	-1.369692	1.596919	H	-2.376543	-1.490275	-1.776166
H	2.828114	-2.320367	0.691635	H	-0.122378	-3.022027	-1.686077
$2\gamma_1 - 2\beta_2$				C	2.041779	0.000000	-1.250628
35				C	2.579960	0.000000	0.158389
C	1.488309	1.721603	-1.111243	H	2.267834	-0.910641	-1.823175
C	0.832856	1.860691	1.118149	H	2.267834	0.910641	-1.823175
C	1.248742	-1.506756	1.333496	C	3.350170	1.275365	0.557989
C	1.893872	-1.492344	-0.904909	C	3.350170	-1.275366	0.557989
C	0.211924	2.400373	-1.060911	H	3.515004	-1.330969	1.645325

H	4.335303	-1.253145	0.065808	H	-0.481241	3.007045	-1.297516
H	2.837736	-2.190801	0.229576	H	-0.296440	3.003684	1.423125
H	1.655148	0.000000	0.926574	H	1.847870	1.485898	2.110686
C	-2.957771	0.000000	0.768937	H	1.560898	1.510513	-2.281188
H	-3.863997	0.000000	0.145044	C	0.245447	-2.458882	-0.702127
H	-3.265894	0.000000	1.824930	C	1.346436	-1.679683	-1.225218
H	3.515004	1.330969	1.645325	C	2.141170	-1.197581	-0.118896
H	4.335304	1.253145	0.065808	C	1.492095	-1.664869	1.094828
H	2.837736	2.190801	0.229576	C	0.343324	-2.460501	0.732907
$2\beta_2$				H	-0.483138	-3.006385	-1.297622
35				H	1.559919	-1.511077	-2.281293
Zr	0.015297	0.000128	-0.259470	H	1.847025	-1.486856	2.110577
C	-3.040904	-0.000929	0.478898	H	-0.298206	-3.003311	1.423005
H	-3.880711	-0.001130	-0.231480	C	-1.919162	0.000477	1.239211
H	-3.451858	-0.001188	1.498925	C	-2.652531	0.000281	-0.099414
C	-2.094994	-1.185860	0.243334	H	-2.107997	0.904847	1.832645
C	-1.654587	-1.636454	-1.059131	H	-2.108147	-0.903561	1.833097
C	-0.466853	-2.448509	-0.888533	C	-3.466271	-1.280604	-0.374257
C	-0.164287	-2.492445	0.513136	C	-3.465289	1.281651	-0.374931
C	-1.136741	-1.690479	1.209988	H	-3.844030	1.307718	-1.408695
C	-2.095783	1.184691	0.243615	H	-4.331287	1.305023	0.305393
C	-1.655645	1.635843	-1.058741	H	-2.873493	2.191977	-0.195494
C	-0.468424	2.448628	-0.887945	H	-1.866299	-0.000354	-0.989424
C	-0.165909	2.492441	0.513725	C	3.105097	-0.000797	-0.184734
C	-1.137845	1.689661	1.210389	H	3.810474	-0.001046	0.659425
C	1.729736	0.000462	1.206018	H	3.686576	-0.000924	-1.118726
C	2.655155	0.000222	-0.017226	H	-3.844773	-1.307044	-1.408100
C	3.508721	-1.278896	-0.154897	H	-2.875311	-2.191328	-0.194055
C	3.506835	1.280382	-0.156855	H	-4.332472	-1.302756	0.305851
H	0.052018	-2.994293	-1.675542	$2\beta_2 - 2\alpha_1$			
H	-2.167914	1.444433	-2.001744	35			
H	0.050085	2.994942	-1.674824	Zr	0.123850	-0.129070	-0.065153
H	0.645620	3.048072	0.978134	C	0.960725	-2.481771	0.639006
H	-1.178098	1.533160	2.287387	C	1.079087	-2.433780	-0.782706
H	1.838818	0.899001	1.824252	C	2.007327	-1.369001	-1.119484
H	1.838933	-0.897759	1.824691	C	2.515474	-0.794215	0.109540
H	2.027354	-0.001203	-1.007810	C	1.819723	-1.449813	1.195929
H	2.894598	2.193177	-0.103965	H	0.361233	-3.189668	1.209549
H	4.064379	1.291442	-1.106519	H	0.582121	-3.094301	-1.491613
H	4.237267	1.314326	0.666726	H	2.340123	-1.112769	-2.125762
H	4.066474	-1.290463	-1.104433	H	1.982920	-1.266006	2.258234
H	4.239016	-1.310604	0.668890	C	-0.181424	2.327600	0.700944
H	2.897788	-2.192494	-0.100863	C	1.053588	1.780477	1.234913
H	-2.166975	-1.445141	-2.002088	C	1.963111	1.535813	0.135724
H	0.647582	-3.047696	0.977405	C	1.241898	1.848628	-1.081153
H	-1.177083	-1.534255	2.287023	C	-0.064379	2.373420	-0.721048
$2\beta_1 - 2\beta_2$				H	-1.029392	2.676109	1.288019
35				H	1.290113	1.663555	2.292846
Zr	-0.025916	0.000106	0.046297	H	1.647591	1.797557	-2.091779
C	0.246950	2.459027	-0.702019	H	-0.807695	2.760416	-1.415868
C	0.344776	2.460510	0.733018	C	-1.976890	-0.687763	-0.453459
C	1.493068	1.664182	1.094939	C	-3.226996	-0.193090	0.320940
C	2.141863	1.196541	-0.118789	H	-1.989655	-1.791550	-0.534609
C	1.347476	1.679197	-1.225113	H	-1.984452	-0.302525	-1.510328
				C	-3.750338	1.156403	-0.208057
				C	-4.347775	-1.258447	0.309351
				H	-5.216254	-0.918084	0.896142
				H	-4.688426	-1.453792	-0.720851

H	-4.004104	-2.212326	0.741547	H	0.434529	-3.145119	-1.296177
H	-2.941176	-0.049568	1.385955	H	2.088579	-1.192204	-2.220399
C	3.171834	0.590956	0.208417	H	2.261631	-1.154211	2.178150
H	3.872513	0.766162	-0.621510	C	-0.122266	2.365047	0.697822
H	3.720606	0.710892	1.154444	C	1.174332	1.861979	1.117415
H	-4.594403	1.514842	0.401453	C	1.954247	1.552767	-0.062645
H	-2.976056	1.939945	-0.197105	C	1.095106	1.792497	-1.205636
H	-4.109404	1.051387	-1.245785	C	-0.166830	2.328700	-0.729682
2 α 1				H	-0.903049	2.744960	1.354720
35				H	1.530881	1.806218	2.146485
				H	1.382211	1.681291	-2.251171
				H	-0.990106	2.668132	-1.355895
				C	-1.964640	-0.653565	-0.289163
				C	-3.280357	0.097001	-0.039691
Zr	-0.136371	-0.131282	-0.128259	H	-1.575722	-0.434421	-1.355191
C	-0.983250	-2.492785	0.563785	H	-2.141358	-1.745983	-0.266583
C	-1.147519	-2.405554	-0.851989	H	-3.098008	1.183306	-0.133480
C	-2.081398	-1.325519	-1.127903	C	-4.369028	-0.292915	-1.066547
C	-2.529686	-0.771942	0.130631	H	-4.051489	-0.073820	-2.099010
C	-1.798633	-1.461185	1.175533	H	-4.603266	-1.368621	-1.003442
H	-0.369051	-3.216381	1.097348	H	-5.298792	0.266890	-0.874793
H	-0.693968	-3.062132	-1.593071	C	-3.756009	-0.186107	1.403997
H	-2.449011	-1.041697	-2.114529	C	3.175485	0.619302	-0.078323
H	-1.915817	-1.298353	2.247056	H	3.778938	0.758619	-0.987624
C	0.232625	2.295928	0.713516	H	3.822956	0.789104	0.794849
C	-0.983249	1.741449	1.279561	H	-3.948673	-1.261597	1.554196
C	-1.940204	1.544296	0.209167	H	-4.694283	0.352160	1.610937
C	-1.266865	1.894425	-1.023305	H	-3.012708	0.134553	2.153897
C	0.061860	2.383348	-0.702262	2 α 3			
H	1.108940	2.613261	1.274641	35			
H	-1.177115	1.592404	2.341745	Zr	0.099619	-0.153716	-0.012602
H	-1.713896	1.877710	-2.017689	C	1.138078	-2.449207	0.597139
H	0.777886	2.793445	-1.411785	C	1.196970	-2.367842	-0.827160
C	1.961315	-0.764122	0.011869	C	2.025798	-1.230525	-1.178767
C	3.393619	-0.345902	-0.345068	C	2.542034	-0.642165	0.041302
H	1.908461	-1.870275	0.038746	C	1.944738	-1.368066	1.140345
H	1.709038	-0.422325	1.086810	H	0.621809	-3.213399	1.176270
H	3.528121	-0.654134	-1.401337	H	0.720946	-3.048589	-1.531093
C	4.435948	-1.130336	0.491298	H	2.293579	-0.930879	-2.192149
H	5.458116	-0.882218	0.163984	H	2.137840	-1.191232	2.198915
H	4.303731	-2.219177	0.387551	C	-0.352483	2.257975	0.804108
H	4.354208	-0.876179	1.561562	C	0.941052	1.797724	1.276266
C	3.645069	1.169107	-0.252903	C	1.817658	1.635131	0.136015
C	-3.161869	0.617885	0.294256	C	1.025700	1.917219	-1.044343
H	-3.884800	0.830059	-0.507493	C	-0.297123	2.338060	-0.621459
H	-3.678879	0.716626	1.260302	H	-1.195322	2.541837	1.431305
H	4.674000	1.407790	-0.563141	H	1.230144	1.679695	2.321004
H	3.525973	1.528426	0.783967	H	1.390079	1.909931	-2.071577
H	2.962356	1.739871	-0.901415	H	-1.096054	2.679730	-1.275947
2 α 2				C	-1.909551	-0.859585	-0.550723
35				C	-3.393952	-0.528569	-0.341276
				H	-1.526078	-0.397301	-1.535285
Zr	0.132928	-0.125770	0.052277	H	-1.798407	-1.954470	-0.674215
C	1.058732	-2.439454	0.747257	H	-3.968593	-1.060510	-1.125420
C	1.008292	-2.454369	-0.680408	C	-3.849501	-1.108099	1.019821
C	1.881912	-1.405176	-1.171509	H	-3.641573	-2.187787	1.094512
C	2.528703	-0.774509	-0.037131	H	-3.341567	-0.599684	1.857609
C	1.975990	-1.386801	1.151678	H	-4.933853	-0.967007	1.149875
H	0.538595	-3.124853	1.414867				

C	-3.729725	0.967304	-0.460836
C	3.097255	0.786046	0.141871
H	3.748275	1.028718	-0.711126
H	3.673071	0.931594	1.067981
H	-3.233972	1.556540	0.328074
H	-4.814438	1.125232	-0.356542
H	-3.432325	1.373787	-1.441935

 $2\alpha_2 - \alpha_3$

35

Zr	0.103757	-0.093248	0.032700
C	0.829050	-2.434674	0.886117
C	0.818285	-2.527675	-0.539090
C	1.781220	-1.576152	-1.057810
C	2.445476	-0.936172	0.061506
C	1.815641	-1.435676	1.262680
H	0.239217	-3.039977	1.573084
H	0.210280	-3.206009	-1.135196
H	2.032496	-1.437951	-2.109552
H	2.090770	-1.169713	2.283731
C	0.063507	2.444670	0.580857
C	1.299164	1.846176	1.051567
C	2.071394	1.420428	-0.095499
C	1.258158	1.679660	-1.267559
C	0.040187	2.348963	-0.843255
H	-0.687913	2.922894	1.206111
H	1.630111	1.807192	2.089668
H	1.555495	1.500653	-2.300788
H	-0.735985	2.734995	-1.501658
C	-1.980811	-0.531754	-0.496668
C	-3.410181	0.036816	-0.338239
H	-1.502541	-0.153975	-1.475791
H	-2.018710	-1.631990	-0.602923
H	-3.667948	0.579653	-1.266940
C	-4.437973	-1.100303	-0.159878
H	-4.432884	-1.787215	-1.021157
H	-4.225387	-1.687408	0.749957
H	-5.456748	-0.693845	-0.060925
C	-3.509541	1.052688	0.824646
C	3.209957	0.392061	-0.036919
H	3.839218	0.431417	-0.938437
H	3.853593	0.553978	0.840557
H	-3.248934	0.578724	1.786957
H	-4.538622	1.436133	0.912804
H	-2.847000	1.918010	0.667764

 $2\alpha_1 - 2\alpha_1' 2\alpha_2 - 2\alpha_3'$

35

Zr	0.000000	0.203601	0.000000
C	-2.799308	1.632608	0.000000
H	-3.374785	1.923106	0.891549
H	-3.374785	1.923106	-0.891549
C	-1.400815	2.268982	0.000000
C	-0.538980	2.339763	1.161753
C	-0.538980	2.339763	-1.161753
C	0.827113	2.559381	0.713144

C	0.827113	2.559381	-0.713144
C	-2.483162	0.128298	0.000000
C	-2.042222	-0.614892	1.162049
C	-2.042222	-0.614892	-1.162049
C	-1.412386	-1.844248	0.714314
C	-1.412386	-1.844248	-0.714314
C	1.993145	-0.740931	0.000000
C	2.339999	-2.259695	0.000000
C	3.121291	-2.648799	1.273326
C	3.121291	-2.648799	-1.273326
H	1.689836	2.728490	1.355670
H	1.689836	2.728490	-1.355670
H	-2.231902	-0.340788	2.200299
H	-2.231902	-0.340788	-2.200299
H	-1.037242	-2.639427	1.356331
H	-1.037242	-2.639427	-1.356331
H	2.469212	-0.232604	-0.874251
H	2.469212	-0.232604	0.874251
H	1.406003	-2.852890	0.000000
H	2.556864	-2.404259	-2.189473
H	2.556864	-2.404259	2.189473
H	3.330377	-3.730546	-1.290113
H	3.330377	-3.730546	1.290113
H	4.087350	-2.119126	-1.318778
H	4.087350	-2.119126	1.318778
H	-0.871188	2.334561	2.200379
H	-0.871188	2.334561	-2.200379

 $2\alpha_3 - 2\alpha_2'$

35

Zr	-0.194014	-0.099621	0.000000
C	-2.348471	-1.377262	0.712410
C	-2.348471	-1.377262	-0.712410
C	-1.158570	-2.083061	-1.161579
C	-1.158570	-2.083061	1.161579
C	-0.455617	-2.586119	0.000000
H	-3.117011	-0.951208	1.355326
H	-3.117011	-0.951208	-1.355326
H	-0.901377	-2.293723	-2.200116
H	-0.901377	-2.293723	2.200116
C	2.224060	0.531923	0.714342
C	2.224060	0.531923	-0.714342
C	1.896976	-0.809230	1.161885
C	1.896976	-0.809230	-1.161885
C	1.748994	-1.659327	0.000000
H	2.473583	1.373673	1.356575
H	2.473583	1.373673	-1.356575
H	1.864286	-1.140409	2.200244
H	1.864286	-1.140409	-2.200244
C	-1.242832	1.851777	0.000000
C	-0.787233	3.327464	0.000000
H	-1.914014	1.673996	-0.878916
H	-1.914014	1.673996	0.878916
H	-1.711943	3.938717	0.000000
C	-0.008878	3.701275	1.276416
C	-0.008878	3.701275	-1.276416
H	0.203197	4.781639	1.301520
H	0.203197	4.781639	-1.301520
H	-0.579263	3.454661	2.187686

	H	-0.579263	3.454661	-2.187686	C	-3.387315	-0.710595	-0.405950
	H	0.959805	3.175608	1.323338	C	4.375192	-0.203976	-0.127400
	H	0.959805	3.175608	-1.323338	C	1.860568	0.089532	-0.600011
	C	1.019070	-3.010140	0.000000	C	3.029149	-0.900807	-0.418520
	H	1.269192	-3.604012	-0.891685	C	3.163052	-1.775053	-1.691718
	H	1.269192	-3.604012	0.891685	C	0.390001	1.236291	1.962043
					C	1.681644	1.206606	1.333658
					C	2.315638	2.510211	0.882483
					H	0.733623	-3.075485	0.338629
					H	0.057689	-1.956622	2.716262
					H	-2.369823	-0.767605	2.43012
					H	-1.271973	-2.570386	-1.429632
	Zr	0.127880	-0.141338	-0.037050	H	-0.165352	2.173836	-2.515181
	C	1.063243	-2.497710	0.529085	H	-1.696391	-0.057036	-2.799956
	C	1.131920	-2.382730	-0.890609	H	-2.850508	1.916140	0.959408
	C	2.017270	-1.274242	-1.209211	H	-0.887715	3.391988	-0.195738
	C	2.549351	-0.739283	0.026180	H	-4.216320	-0.479558	0.279264
	C	1.901780	-1.458197	1.104261	H	-3.796297	-1.255515	-1.269840
	H	0.506496	-3.248916	1.086939	H	4.654985	0.475827	-0.949752
	H	0.635175	-3.029811	-1.612047	H	4.370538	0.373321	0.809319
	H	2.310426	-0.966222	-2.213208	H	1.099777	-0.464979	-1.276962
	H	2.093880	-1.315080	2.168159	H	2.166100	0.956153	-1.206349
	C	-0.227063	2.277263	0.813215	H	3.988139	-2.494850	-1.572704
	C	1.034611	1.744019	1.296879	H	3.385157	-1.156361	-2.576990
	C	1.924916	1.568151	0.167659	H	2.244487	-2.349814	-1.898025
	C	1.169409	1.912076	-1.017396	H	2.794622	-1.573761	0.426825
	C	-0.141153	2.382020	-0.609036	H	0.237429	0.574976	2.818563
	H	-1.071587	2.581041	1.429050	H	-0.099656	2.210987	2.042172
	H	1.299402	1.592256	2.343865	H	3.192022	2.374316	0.023584
	H	1.552311	1.909665	-2.038098	H	1.593002	3.164993	0.373905
	H	-0.905063	2.783909	-1.271517	H	2.655282	3.039293	1.790537
	C	-1.970709	-0.836861	-0.132725	H	2.375536	0.450263	1.712546
	C	-3.262933	-0.090662	0.282802	H	5.171843	-0.958536	-0.037655
	H	-2.032840	-1.140480	-1.210516				
	H	-1.911574	-1.805692	0.414143				
	H	-3.066146	0.452149	1.229209				
	C	-3.703637	0.936180	-0.777260				
	H	-3.954541	0.432481	-1.726518	Zr	0.163108	-0.046231	0.151072
	H	-4.599335	1.484360	-0.446149	C	-0.058404	-1.636184	-1.936656
	H	-2.918393	1.679566	-0.988264	C	0.319621	-2.491057	-0.859001
	C	-4.405242	-1.094171	0.571449	C	1.614712	-2.066243	-0.379779
	C	3.164175	0.660454	0.169650	C	2.068307	-0.970810	-1.204382
	H	3.836447	0.894836	-0.669141	C	1.003534	-0.707340	-2.134623
	H	3.734077	0.756880	1.105797	H	-0.951431	-1.730602	-2.549326
	H	-4.649198	-1.680480	-0.330202	H	-0.246002	-3.342966	-0.487446
	H	-5.318675	-0.564777	0.888257	H	2.183998	-2.536201	0.420517
	H	-4.131696	-1.800019	1.372581	H	1.041564	0.085068	-2.918697
					C	0.795166	2.394922	0.890422
					C	1.565864	1.995500	-0.266363
					C	2.465162	0.935830	0.133090
					C	2.184234	0.641286	1.519916
					C	1.174505	1.560869	1.986603
	Zr	-0.366929	0.074609	0.068557	H	0.094981	3.226130	0.934505
	C	-0.157169	-2.484133	0.539721	H	1.537912	2.468418	-1.247385
	C	-0.521450	-1.904081	1.796171	H	2.690689	-0.110043	2.123992
	C	-1.813450	-1.278314	1.645036	H	0.792562	1.626401	3.003672
	C	-2.278337	-1.506754	0.293024	C	-2.137059	0.710008	0.567836
	C	-1.229146	-2.224421	-0.397269	C	-2.032064	1.091221	-0.921650
	C	-0.899753	1.810839	-1.798272	H	-1.900372	1.559487	1.225320
	C	-1.718674	0.627487	-1.952372	H	-3.166780	0.397448	0.760059
	C	-2.638092	0.556671	-0.836128	H	-2.963335	0.227345	-1.797590
	C	-2.334891	1.674757	0.030677	C	-2.317108	2.599729	-1.134255
	C	-1.285140	2.454751	-0.579658				

H	-2.242433	2.861573	-2.201962
H	-3.339659	2.832553	-0.798275
H	-1.620858	3.240742	-0.575289
H	-0.980984	0.975734	-1.362971
C	3.191937	-0.002767	-0.831488
H	4.031972	-0.519068	-0.343974
H	3.579569	0.533291	-1.710440
H	-2.763438	0.376645	-2.869851
H	-4.008066	0.523456	-1.609536
H	-2.875459	-0.844631	-1.570244
C	-1.718621	-0.928444	1.879380
C	-0.335575	-1.310482	2.055920
C	-2.723975	-1.989517	1.461077
H	-2.098457	-0.222993	2.626209
H	0.175361	-0.889100	2.925353
H	-0.100397	-2.362127	1.873881
H	-3.715740	-1.578213	1.221970
H	-2.374700	-2.584552	0.604835
H	-2.849572	-2.682417	2.311433

Propen

9

C	-1.307816	0.145953	0.000000
C	0.000000	0.480859	0.000000
C	1.156076	-0.503481	0.000000
H	-1.636459	-0.899029	0.000000
H	-2.089712	0.911299	0.000000
H	0.259393	1.547100	0.000000
H	2.126663	0.014849	0.000000
H	1.125278	-1.157102	0.887609
H	1.125278	-1.157102	-0.887609

A.2.3 Untersuchungen mit Gegenion

Die Strukturen für die Single-Point Rechnungen werden hier nicht aufgeführt, da sie gleich den Strukturen für die unter Gasphasen-Bedingungen optimierten Strukturen sind.

COSMO Me alpha frontside
73

Zr	-2.278592	0.700939	0.471034
C	-3.541353	0.479683	-1.849058
C	-2.761054	-0.709681	-1.682128
C	-3.242344	-1.398330	-0.503628
C	-4.341978	-0.640821	0.048560
C	-4.495726	0.543227	-0.771731
C	-2.392360	1.711144	2.899292
C	-3.718250	1.383164	2.434757
C	-3.810552	-0.054865	2.288424
C	-2.508876	-0.596936	2.603567
C	-1.644338	0.495011	2.997084
C	-2.149771	2.855813	-0.112351
C	-2.914806	4.207084	-0.083597
C	-4.325015	4.110313	-0.721142
C	-2.999991	4.820518	1.338320
C	-4.880438	-0.789158	1.474884
H	-3.432785	1.208499	-2.649650
H	-1.982209	-1.065679	-2.354219
H	-2.867202	-2.345934	-0.118636
H	-5.234902	1.326837	-0.620079
H	-2.026370	2.707861	3.133805
H	-4.529805	2.088243	2.262053
H	-2.239843	-1.652426	2.586272
H	-0.619035	0.396898	3.347725
H	-1.202838	2.985049	0.479858
H	-1.859296	2.633508	-1.170735
H	-2.327437	4.921479	-0.701495
H	-4.286694	3.651700	-1.724995
H	-4.995291	3.504155	-0.085410
H	-4.771826	5.115695	-0.821749
H	-4.966485	-1.845481	1.773215
H	-5.869571	-0.317598	1.584394
H	-3.608802	4.193040	2.011316
H	-3.472691	5.817910	1.294940
H	-1.996364	4.941368	1.784457
C	0.180990	0.052514	0.053532
B	1.799096	-0.461284	0.005735
C	2.552946	0.515465	-1.094638
C	2.416234	-0.288230	1.533522
C	1.810614	-2.045345	-0.471326
C	3.740264	2.268472	-3.070198
C	3.396823	0.067481	4.239361
C	1.768582	-4.832909	-1.266405
C	2.013643	0.716557	-2.385684
C	2.205561	0.884244	2.295273
C	0.923286	-3.000710	0.070382
C	3.747625	1.232693	-0.871652
C	3.176847	-1.262478	2.216679
C	2.693760	-2.590968	-1.428972
C	4.339484	2.097405	-1.813533
C	3.655894	-1.116557	3.533912
C	2.690348	-3.939982	-1.833517
C	2.563934	1.560786	-3.363983
C	2.664960	1.085459	3.607485
C	0.874530	-4.355989	-0.295811
F	0.860397	0.000552	-2.784093
F	1.531481	1.988723	1.722285
F	0.024537	-2.630617	1.102686
F	4.455806	1.094577	0.333661

F	3.538501	-2.466066	1.589602
F	3.691756	-1.798039	-2.017895
F	5.517429	2.776832	-1.513284
F	4.388118	-2.134160	4.139032
F	3.599549	-4.399725	-2.782591
F	1.962919	1.697781	-4.614392
F	2.410076	2.280435	4.279591
F	-0.037459	-5.225699	0.302076
F	4.305382	3.118102	-4.014098
F	3.857377	0.233181	5.539817
F	1.746527	-6.167921	-1.650747
H	-0.250770	-0.514861	0.903562
H	-0.251848	-0.214702	-0.922378
H	0.227189	1.141976	0.225180

COSMO Me alpha backside
73

Zr	-3.080310	-0.240349	0.425306
C	-2.583394	-2.132001	2.168356
C	-3.676756	-1.394316	2.727992
C	-4.795248	-1.493657	1.825006
C	-4.412393	-2.339312	0.715063
C	-3.028248	-2.704820	0.917804
C	-2.950829	0.297133	-2.141671
C	-3.273795	-1.096341	-1.932594
C	-4.588711	-1.173948	-1.338725
C	-5.038830	0.185754	-1.120560
C	-4.039594	1.082855	-1.647204
C	-3.722634	1.510508	1.721734
C	-3.790550	3.036167	1.418810
C	-2.591106	3.568702	0.596083
C	-5.156064	3.456872	0.814969
C	-5.141640	-2.411151	-0.628757
H	-1.602380	-2.258869	2.620062
H	-3.661434	-0.846650	3.668087
H	-5.775102	-1.039489	1.967434
H	-2.434652	-3.335216	0.255800
H	-2.055271	0.680775	-2.626341
H	-2.655587	-1.948347	-2.212107
H	-5.990350	0.476463	-0.676817
H	-4.114231	2.165261	-1.692788
H	-4.588521	1.245665	2.357562
H	-2.816419	1.316619	2.370969
H	-3.730703	3.539446	2.410529
H	-1.636035	3.326988	1.096943
H	-2.559951	3.141259	-0.420127
H	-2.643974	4.666815	0.493547
H	-6.233817	-2.356769	-0.503171
H	-4.897328	-3.335038	-1.175403
H	-5.320316	3.017964	-0.183084
H	-5.210913	4.555526	0.712759
H	-5.988594	3.134303	1.466671
C	-0.520764	0.045744	0.327962
B	1.153807	0.044871	0.023168
C	1.668382	1.544481	0.487802
C	1.889882	-1.177333	0.862644
C	1.339744	-0.216313	-1.604000
C	2.370945	4.234177	1.300582
C	3.148340	-3.360337	2.300236
C	1.543102	-0.738981	-4.448185
C	1.096154	2.708038	-0.076514

C	1.482026	-1.607719	2.143688	H	-3.952160	4.344881	0.181342
C	0.695057	-1.293565	-2.250154	H	-2.312925	4.055615	-0.469187
C	2.630229	1.821918	1.481461	H	-3.627710	2.912157	-0.839263
C	2.999024	-1.899758	0.365415	H	-5.462998	-2.121481	-0.191862
C	2.129983	0.560996	-2.478824	H	-2.590048	0.615800	-2.090356
C	2.985574	3.122692	1.894774	H	-1.191960	-1.118678	-0.529146
C	3.624084	-2.965554	1.040879	C	-6.191629	1.183663	1.043436
C	2.237798	0.331693	-3.863919	B	-7.790675	1.744297	1.218150
C	1.413819	4.023304	0.294023	C	-7.785933	3.383574	0.990929
C	2.067621	-2.664038	2.862816	C	-8.719301	0.994534	0.072266
C	0.765733	-1.569638	-3.626644	C	-8.260064	1.326647	2.749667
F	0.160600	2.578500	-1.127813	C	-8.727683	4.098203	0.218013
F	0.448202	-0.927289	2.828670	C	-9.979797	0.402296	0.304855
F	-0.063297	-2.220575	-1.490574	C	-8.771878	2.204973	3.728344
F	3.324009	0.787037	2.129898	F	-9.825995	3.445483	-0.364984
F	3.588947	-1.548371	-0.859911	F	-10.582475	0.470022	1.572049
F	2.914819	1.615953	-1.989814	F	-9.026739	3.552971	3.428747
F	3.943637	3.312818	2.887291	C	-8.680299	5.488897	-0.004473
F	4.711978	-3.625016	0.475212	C	-10.744413	-0.247309	-0.683643
F	3.035658	1.149495	-4.658889	C	-9.088059	1.821384	5.047834
F	0.803517	5.111452	-0.327038	F	-9.649702	6.116692	-0.782699
F	1.592718	-3.016504	4.125975	F	-11.981594	-0.806930	-0.372620
F	0.081902	-2.655358	-4.173781	F	-9.579325	2.753142	5.958820
F	2.705647	5.524054	1.695549	C	-7.651208	6.249543	0.570190
F	3.746149	-4.410515	2.985815	C	-10.259677	-0.322734	-1.998092
F	1.632208	-0.979724	-5.813806	C	-8.912296	0.487848	5.446058
H	-0.841923	-0.995265	0.093373	F	-7.580957	7.621865	0.360210
H	-0.923270	0.802888	-0.370123	F	-10.997037	-0.960239	-2.989209
H	-0.668413	0.303880	1.389429	F	-9.214130	0.090213	6.743323
COSMO ME beta frontside				C	-6.697701	5.600587	1.370809
73				C	-9.022508	0.268079	-2.298803
Zr	-3.657136	0.165623	1.047657	C	-8.430945	-0.441373	4.508975
C	-2.917032	-2.907993	1.163788	F	-5.676738	6.336063	1.974629
H	-3.620950	-3.751057	1.235813	F	-8.528678	0.228652	-3.602783
H	-1.891301	-3.307419	1.145356	F	-8.268412	-1.778295	4.871941
C	-3.208216	-2.028197	-0.055636	C	-6.795192	4.212693	1.560663
C	-4.534771	-1.621470	-0.465923	C	-8.302343	0.903912	-1.273258
C	-4.405450	-0.497030	-1.368779	C	-8.127630	-0.003229	3.209405
C	-3.016716	-0.180103	-1.482736	F	-5.834305	3.658567	2.439514
C	-2.273762	-1.101266	-0.654096	F	-7.096182	1.523773	-1.679147
C	-3.114480	-1.907002	2.305922	F	-7.694881	-1.010220	2.314999
C	-4.403541	-1.458719	2.790362	H	-5.695744	1.441562	1.997020
C	-4.201656	-0.258639	3.568435	H	-5.749096	1.704000	0.177253
C	-2.805020	0.058692	3.539897	H	-6.265259	0.094763	0.880901
C	-2.133471	-0.939875	2.746837	COSMO ME beta backside			
C	-1.877392	1.574387	0.912427	73			
C	-2.812758	2.769026	1.223237	Zr	1.095501	-4.058837	0.031877
C	-3.208890	3.564001	-0.051069	C	0.672311	-3.061468	-2.920233
C	-2.253394	3.712840	2.323338	H	0.651790	-3.688015	-3.824499
H	-5.221183	0.012633	-1.877462	H	0.519801	-2.013112	-3.216220
H	-5.354286	-1.963569	2.628227	C	-0.367847	-3.514408	-1.886687
H	-4.969718	0.293217	4.106721	C	-0.627066	-4.894007	-1.533267
H	-2.332053	0.903557	4.036521	C	-1.311345	-4.919198	-0.255302
H	-1.065551	-0.978595	2.538082	C	-1.466603	-3.561453	0.184733
H	-1.086363	1.443856	1.664737	C	-0.859095	-2.696389	-0.792966
H	-1.427227	1.640627	-0.089164	C	1.975291	-3.244637	-2.130339
H	-3.794285	2.396071	1.677501	C	2.604013	-4.522606	-1.869986
H	-2.005530	3.158617	3.245189	C	3.522691	-4.363627	-0.760232
H	-2.984834	4.498701	2.577469	C	3.456353	-2.995582	-0.329575
H	-1.330409	4.194540	1.955959	C	2.484371	-2.311836	-1.141838

C	1.136051	-2.736074	1.850373	Zr	-2.737517	-0.369740	-0.063943
C	1.393870	-4.015558	2.682190	C	-3.650707	-1.788262	-2.088270
C	0.230864	-4.358039	3.652231	C	-2.228471	-1.697631	-2.233021
C	2.765343	-4.006079	3.408791	C	-1.622602	-2.356403	-1.092786
H	-1.695643	-5.806724	0.247017	C	-2.669351	-2.856409	-0.241638
H	2.438014	-5.437993	-2.439386	C	-3.929642	-2.459755	-0.845807
H	4.189340	-5.130538	-0.366447	C	-3.483724	0.248793	2.372833
H	4.037949	-2.542139	0.470016	C	-3.825228	-1.120473	2.086187
H	2.202175	-1.264447	-1.046597	C	-2.595954	-1.873262	1.916623
H	1.960529	-2.013102	1.898016	C	-1.509040	-0.935630	2.026059
H	0.188913	-2.240162	2.100074	C	-2.059148	0.376075	2.305342
H	1.462538	-4.959991	1.990326	C	-4.555724	0.856179	-0.540869
H	3.595232	-3.788057	2.716625	C	-6.102148	0.911654	-0.398949
H	2.962408	-4.974222	3.900949	C	-6.813014	-0.270852	-1.105300
H	2.752379	-3.220032	4.183186	C	-6.589741	1.047562	1.065709
H	0.397935	-5.329527	4.149152	C	-2.506777	-3.242671	1.232799
H	0.174414	-3.576558	4.429034	H	-4.392629	-1.405365	-2.785206
H	-0.741452	-4.392033	3.132768	H	-1.694440	-1.262393	-3.076378
H	-0.379657	-5.762403	-2.144736	H	-0.553035	-2.454284	-0.919732
H	-1.958347	-3.231789	1.097615	H	-4.917022	-2.690443	-0.451305
H	-0.800016	-1.610382	-0.733668	H	-4.186896	1.048843	2.587981
C	0.624796	0.678881	0.444228	H	-4.829405	-1.539806	2.060816
B	0.628446	2.343096	0.481541	H	-0.452871	-1.173136	1.905471
C	1.179668	2.869116	-0.993425	H	-1.490337	1.284930	2.487173
C	-0.919810	2.862426	0.770899	H	-4.126928	1.750104	-0.011513
C	1.639070	2.802592	1.713459	H	-4.312612	0.954986	-1.625915
C	0.549767	3.820158	-1.824557	H	-6.429158	1.836791	-0.924674
C	-1.286804	3.870068	1.689427	H	-6.491551	-0.366946	-2.157916
C	2.711952	3.713630	1.616661	H	-6.602971	-1.223587	-0.588249
F	-0.596590	4.512591	-1.392703	H	-7.907155	-0.118254	-1.100179
F	-0.305562	4.612977	2.371965	H	-1.535451	-3.724483	1.419519
F	2.951702	4.424086	0.425590	H	-3.305363	-3.922524	1.567031
C	0.999426	4.173776	-3.113485	H	-6.367813	0.139341	1.650929
C	-2.614962	4.240898	1.977361	H	-7.683784	1.200792	1.086633
C	3.598589	4.012865	2.670563	H	-6.121783	1.913268	1.567610
F	0.311756	5.120411	-3.874386	C	4.271222	1.371643	-0.084110
F	-2.892261	5.240920	2.910657	B	2.727560	0.801989	-0.070895
F	4.646829	4.916505	2.488411	C	2.346540	0.733504	1.539865
C	2.158302	3.577768	-3.630976	C	1.653280	1.742171	-0.937690
C	-3.670177	3.602985	1.309203	C	2.679024	-0.681183	-0.832288
C	3.417992	3.404160	3.920766	C	2.026188	0.730132	4.429033
F	2.624325	3.911500	-4.900921	C	-0.313056	3.248685	-2.501320
F	-4.992783	3.953481	1.571897	C	2.814642	-3.208377	-2.256951
F	4.276156	3.689156	4.981243	C	3.067105	-0.122839	2.409720
C	2.847975	2.643634	-2.841276	C	1.967752	2.908815	-1.677604
C	-3.370482	2.612230	0.361253	C	3.217014	-0.818278	-2.135079
C	2.349409	2.509406	4.089629	C	1.474423	1.600566	2.228481
F	4.016646	2.050720	-3.328428	C	0.296352	1.410648	-1.053092
F	-4.405814	1.982145	-0.334719	C	2.164754	-1.891426	-0.320918
F	2.138320	1.907618	5.333827	C	1.292720	1.614027	3.626169
C	2.347268	2.317952	-1.569907	C	-0.670846	2.106261	-1.777912
C	-2.027654	2.274151	0.120739	C	2.227773	-3.132827	-0.984727
C	1.503833	2.235398	3.001153	C	2.926125	-0.152471	3.807397
F	3.126458	1.393252	-0.837521	C	1.034090	3.645338	-2.443643
F	-1.827129	1.305881	-0.888138	C	3.301896	-2.029989	-2.845326
F	0.435331	1.354973	3.275359	F	3.988904	-1.039410	1.875892
H	1.628524	0.283521	0.674408	F	3.260722	3.434294	-1.687641
H	0.323982	0.322339	-0.556736	F	3.681553	0.314989	-2.825241
H	-0.078678	0.264879	1.186345	F	0.690082	2.550993	1.530211
COSMO F alpha frontside				F	-0.260364	0.286062	-0.333111
73				F	1.498270	-1.931314	0.925624

F	0.386996	2.501978	4.213897	C	2.153591	-2.453641	-0.085169
F	-2.015071	1.651198	-1.723944	C	-1.028268	-0.923735	-1.109099
F	1.699145	-4.284687	-0.394887	C	-0.932748	-1.761313	2.821037
F	3.666415	-1.043524	4.582767	C	3.544646	-2.533131	0.129137
F	1.436081	4.776556	-3.144755	C	-1.572603	-0.237175	-2.201164
F	3.855195	-2.074329	-4.124049	C	-1.776198	-1.298556	3.850926
F	1.866696	0.725557	5.811328	C	3.109974	-3.833262	2.115098
F	-1.249081	3.961765	-3.235733	C	-1.784923	-2.358249	-3.310920
F	2.889454	-4.422670	-2.931512	C	-3.683204	-1.972197	2.530567
H	4.668009	1.532457	-1.096793	F	0.892039	-4.317985	2.804575
H	4.932904	0.650062	0.425606	F	-1.070611	-4.365492	-2.299341
H	4.337832	2.329881	0.461485	F	-3.399833	-2.954075	0.382621
COSMO F alpha backside				F	1.785004	-1.708986	-1.232975
73				F	-0.554317	-0.020538	-0.049543
Zr	0.440505	2.169642	-0.043504	F	0.443859	-1.550289	3.050466
C	1.472446	1.525872	-2.359949	F	4.435522	-1.909998	-0.751421
C	1.039197	2.880590	-2.531637	F	-1.702395	1.160007	-2.173199
C	1.759930	3.703830	-1.595044	F	-1.240447	-0.711848	5.000081
C	2.696055	2.862944	-0.875947	F	3.571223	-4.524350	3.233932
C	2.486760	1.507880	-1.332039	F	-2.137870	-3.106831	-4.426873
C	0.664570	1.588933	2.490878	F	-5.062959	-2.070163	2.357220
C	1.952414	1.543910	1.840169	F	5.400212	-3.330469	1.476020
C	2.308685	2.890050	1.447716	F	-2.522757	-0.326470	-4.429232
C	1.194937	3.745476	1.800087	F	-4.020340	-0.952506	4.709088
C	0.205488	2.941927	2.472853	H	-1.896328	-4.830722	0.049687
C	-1.124272	3.775348	-0.451595	H	-0.834956	-5.078569	1.454845
C	-2.495139	3.808149	0.306870	H	-0.186878	-5.268061	-0.194685
C	-2.940866	2.425923	0.864658	COSMO F alpha bridge			
C	-2.571420	4.925319	1.379494	73			
C	3.397772	3.233267	0.430902	Zr	-2.821588	0.252835	-1.583233
H	1.148450	0.665211	-2.941039	C	-2.559965	0.784310	0.932203
H	0.289002	3.227060	-3.239111	C	-2.528688	-0.640550	0.829334
H	1.657462	4.781887	-1.478939	C	-1.383413	-1.005911	0.014516
H	3.038515	0.629920	-1.001881	C	-0.662674	0.201563	-0.335742
H	0.161594	0.743888	2.949822	C	-1.425882	1.311552	0.189599
H	2.580753	0.661447	1.728715	C	-2.438467	1.141694	-3.978490
H	1.138409	4.819092	1.628389	C	-1.343509	1.548494	-3.114883
H	-0.717488	3.304255	2.915091	C	-0.604243	0.370514	-2.717763
H	-0.718113	4.800157	-0.542159	C	-1.305921	-0.769531	-3.271636
H	-1.316058	3.436387	-1.496774	C	-2.411979	-0.284249	-4.079613
H	-3.250012	4.078417	-0.463901	C	-4.987973	-0.179235	-1.564783
H	-2.945443	1.658262	0.069008	C	-6.211847	0.293530	-2.389242
H	-2.291203	2.079507	1.688456	C	-6.490385	1.791194	-2.076061
H	-3.968237	2.481270	1.265965	C	-6.069604	0.058753	-3.912247
H	3.663936	4.300818	0.462384	C	0.328369	0.305787	-1.502006
H	4.310107	2.638909	0.589907	H	-3.285862	1.374056	1.491016
H	-1.814974	4.804107	2.172106	H	-3.229886	-1.336956	1.227023
H	-3.565219	4.932519	1.862311	H	-1.070196	-2.022751	-0.224397
H	-2.412789	5.916358	0.916902	H	-1.155220	2.364285	0.104603
C	-0.874617	-4.674031	0.430192	H	-3.129481	1.812414	-4.486911
B	-0.451276	-3.078792	0.449218	H	-1.080319	2.576755	-2.865148
C	1.174628	-3.026984	0.750275	H	-1.003251	-1.811932	-3.169124
C	-0.865559	-2.309942	-0.980504	H	-3.085105	-0.902498	-4.670874
C	-1.382979	-2.367333	1.631195	H	-4.658022	-1.224562	-1.897822
C	4.032341	-3.234829	1.239730	H	-5.283436	-0.271527	-0.498117
C	-1.976257	-0.967908	-3.326455	H	-7.099812	-0.282296	-2.050109
C	-3.167197	-1.408419	3.709064	H	-6.611348	1.959095	-0.990817
C	1.733820	-3.718922	1.854681	H	-5.655481	2.424695	-2.432842
C	-1.242178	-2.985399	-2.169498	H	-7.413643	2.129738	-2.578884
C	-2.795124	-2.425524	1.538867	H	0.991424	-0.568025	-1.543529

H	0.950584	1.206207	-1.417206	C	4.383914	1.097841	0.162764
H	-5.247933	0.663034	-4.335194	C	4.277280	0.944997	2.722461
H	-7.000172	0.346263	-4.432943	H	1.480530	-1.203855	-1.910754
H	-5.871464	-1.004744	-4.138342	H	-0.040015	-3.481746	2.223026
C	6.517445	0.763197	-0.950368	H	0.930953	-1.673016	4.013127
B	4.871334	0.562389	-1.040538	H	3.607291	-2.100388	4.252206
C	4.261325	1.840520	-1.907371	H	4.286574	-4.152714	2.615903
C	4.566306	-0.884897	-1.796118	H	5.099732	-1.490890	2.262517
C	4.286933	0.545180	0.513452	H	5.253622	-1.371888	0.473492
C	3.404738	4.152972	-3.439212	H	2.838397	0.173152	1.333688
C	4.261078	-3.467116	-3.084251	H	3.956753	0.342318	3.588853
C	3.487907	0.534986	3.303565	H	3.757732	1.915748	2.765130
C	4.633302	3.170162	-1.592991	H	5.363233	1.124035	2.810085
C	5.268490	-1.262681	-2.964981	H	3.864524	2.070642	0.197913
C	4.876494	-0.289823	1.493160	H	5.471400	1.285727	0.183632
C	3.411659	1.758783	-3.030076	H	4.137588	0.609525	-0.794976
C	3.672535	-1.878916	-1.347558	H	0.202788	-3.248908	-0.623520
C	3.248832	1.346476	1.028631	H	4.147431	-1.664046	-1.759831
C	2.984105	2.863471	-3.793755	H	4.538291	-3.953292	-0.358006
C	3.510047	-3.142627	-1.946145	C	-4.197143	-0.186789	-0.665308
C	2.846181	1.369259	2.378291	B	-2.639342	-0.695662	-0.400341
C	4.238178	4.306374	-2.318653	C	-2.231274	-1.545449	-1.756474
C	5.143530	-2.507302	-3.606370	C	-1.621672	0.596346	-0.101706
C	4.511562	-0.312491	2.850586	C	-2.709981	-1.592855	1.000598
F	5.410863	3.428188	-0.451091	C	-1.245845	-1.168933	-2.690778
F	6.124662	-0.345687	-3.597839	C	-0.482580	0.553166	0.724378
F	5.869702	-1.213923	1.121870	C	-2.429274	-2.964102	1.160546
F	2.879297	0.518501	-3.452958	F	-0.383729	-0.074344	-2.434683
F	2.808285	-1.640240	-0.250389	F	0.098099	-0.719593	1.124903
F	2.486406	2.187522	0.180683	F	-1.804814	-3.702323	0.128007
F	2.128007	2.689570	-4.888118	C	-1.016463	-1.812948	-3.923545
F	2.594150	-4.067404	-1.431319	C	0.209845	1.669178	1.221847
F	1.801251	2.200231	2.799164	C	-2.691889	-3.708305	2.328119
F	4.649180	5.584331	-1.935995	F	-0.005072	-1.370382	-4.779053
F	5.875405	-2.799065	-4.758304	F	1.255825	1.521478	2.142941
F	5.144097	-1.172037	3.750549	F	-2.392374	-5.072067	2.386424
F	2.994547	5.262342	-4.177409	C	-1.809973	-2.909515	-4.285093
F	4.118966	-4.711055	-3.696599	C	-0.166962	2.952321	0.802338
F	3.108774	0.536826	4.644487	C	-3.236288	-3.065983	3.449945
H	7.022338	-0.191512	-0.727330	F	-1.604924	-3.567412	-5.494090
H	6.781500	1.478068	-0.153538	F	0.511047	4.074332	1.265982
H	6.925663	1.148566	-1.899007	F	-3.505184	-3.777115	4.614739
COSMO F beta frontside				C	-2.818837	-3.332408	-3.402941
73				C	-1.226023	3.069525	-0.110773
Zr	2.465604	-1.996435	1.109864	C	-3.491374	-1.686433	3.377006
C	2.040048	-5.108626	0.841305	F	-3.619475	-4.421817	-3.743051
H	1.064985	-5.603766	0.723471	F	-1.590024	4.327773	-0.580619
H	2.826516	-5.878923	0.848208	F	-4.005181	-1.018864	4.487787
C	2.278732	-4.059801	-0.251153	C	-3.006808	-2.649781	-2.189612
C	1.279218	-3.129525	-0.731122	C	-1.917755	1.916098	-0.527454
C	1.956461	-2.043235	-1.409128	C	-3.224725	-0.998270	2.179810
C	3.364191	-2.288512	-1.334821	F	-4.042284	-3.137413	-1.374539
C	3.573208	-3.506433	-0.593453	F	-2.939918	2.152472	-1.453439
C	2.081571	-4.236895	2.101027	F	-3.494783	0.382334	2.207488
C	0.996021	-3.388265	2.536477	H	-4.891507	-1.031703	-0.518261
C	1.514939	-2.420419	3.478335	H	-4.329998	0.185019	-1.694473
C	2.922130	-2.650703	3.610229	H	-4.497201	0.619180	0.024003
C	3.284824	-3.743306	2.740280	COSMO F beta backside			
C	4.588715	-1.206619	1.331970	73			
C	3.996804	0.216070	1.380578	Zr	0.329434	-3.226975	1.254277

C	-2.796960	-2.899122	1.370871	F	-2.788497	3.975339	4.901583
H	-3.520727	-3.727153	1.421641	C	-2.943863	2.607222	-1.794845
H	-3.349239	-1.949398	1.364431	C	1.427546	3.404372	-0.465111
C	-1.782091	-2.967260	2.519991	C	-2.056569	3.417605	2.644685
C	-1.156097	-4.187343	2.981476	F	-3.833463	3.448919	-1.104893
C	0.033209	-3.839353	3.735131	F	1.018281	4.041839	-1.648724
C	0.150920	-2.409255	3.729103	F	-1.171991	4.501165	2.772571
C	-0.937257	-1.869060	2.954726	H	-2.428341	5.000758	0.084898
C	-1.873967	-3.029625	0.151939	H	-1.145065	4.986097	-1.151652
C	-1.279242	-4.267695	-0.302932	H	-0.736298	5.308608	0.553340
C	-0.153859	-3.948341	-1.160636				
C	-0.046884	-2.518031	-1.228550				
C	-1.075035	-1.949578	-0.396959				
C	1.815264	-1.541022	1.159885				
C	2.920220	-2.623458	1.107279	Zr	-2.255402	0.779828	0.587543
C	3.824891	-2.636801	2.368001	C	-3.497922	0.377186	-1.712416
C	3.753534	-2.589490	-0.201232	C	-2.653301	-0.758890	-1.496441
H	0.681607	-4.537667	4.263820	C	-3.091879	-1.411742	-0.284000
H	-1.644261	-5.268308	-0.068583	C	-4.236767	-0.705065	0.323462
H	0.458216	-4.665513	-1.706752	C	-4.454895	0.433074	-0.636458
H	0.677790	-1.951034	-1.807650	C	-2.523976	1.985666	2.914266
H	-1.250002	-0.889334	-0.228859	C	-3.805317	1.510616	2.454568
H	1.772466	-0.918278	0.257040	C	-3.778155	0.062673	2.435359
H	1.873941	-0.911374	2.055963	C	-2.447969	-0.340584	2.825553
H	2.449705	-3.698411	1.094450	C	-1.680840	0.848694	3.131951
H	3.111163	-2.600193	-1.097658	C	-2.098093	2.881055	-0.159738
H	4.446586	-3.447145	-0.255962	C	-2.877515	4.207884	-0.355295
H	4.348256	-1.660603	-0.219528	C	-4.161866	4.031920	-1.202307
H	4.528992	-3.487097	2.344612	C	-3.201440	4.914113	0.984726
H	4.409668	-1.702273	2.398296	C	-4.763668	-0.822228	1.665534
H	3.234509	-2.700927	3.297405	H	-3.431990	1.075178	-2.544762
H	-1.540532	-5.195073	2.819919	H	-1.843764	-1.089325	-2.146086
H	0.922503	-1.824867	4.226059	H	-2.661806	-2.324376	0.142966
H	-1.107821	-0.811664	2.758829	H	-5.242100	1.177106	-0.523053
C	-1.382588	4.711845	-0.110513	H	-2.249816	3.026300	3.072588
B	-1.159484	3.084497	0.138179	H	-4.664530	2.132164	2.202708
C	-1.680258	2.305328	-1.232085	H	-2.091816	-1.369165	2.896783
C	0.460794	2.839925	0.401559	H	-0.656262	0.871710	3.500366
C	-2.057583	2.640263	1.461439	H	-1.225309	3.094351	0.516678
C	-0.946158	1.376237	-1.996497	H	-1.675546	2.565177	-1.150415
C	1.033154	2.156844	1.493353	H	-2.210672	4.894681	-0.924130
C	-2.926701	1.534190	1.535830	H	-3.948882	3.544261	-2.171216
F	0.302276	0.884134	-1.542047	H	-4.906092	3.421575	-0.658917
F	0.226816	1.449417	2.417552	H	-4.622227	5.014427	-1.414118
F	-2.987069	0.585460	0.482566	H	-4.734237	-1.863866	2.024068
C	-1.376767	0.826045	-3.219975	H	-5.799638	-0.456827	1.753424
C	2.416387	2.071420	1.747525	H	-3.912063	4.321382	1.588124
C	-3.756011	1.232428	2.632846	H	-3.664834	5.899836	0.796282
F	-0.577553	-0.092610	-3.910738	H	-2.287933	5.083405	1.584452
F	2.897707	1.371256	2.861644	C	0.185876	0.153837	0.280406
F	-4.584106	0.102822	2.613421	B	1.784447	-0.404329	0.077236
C	-2.628060	1.188415	-3.738060	C	2.470731	0.601508	-1.044290
C	3.321564	2.671369	0.861552	C	2.517787	-0.293292	1.556514
C	-3.731492	2.060693	3.763706	C	1.725856	-1.963752	-0.475364
F	-3.078499	0.658829	-4.944946	C	3.550246	2.391890	-3.060716
F	4.695215	2.592364	1.087406	C	3.733454	0.000888	4.178868
F	-4.542202	1.788117	4.862680	C	1.597226	-0.709304	-1.423335
C	-3.426044	2.084365	-3.007536	C	1.836889	0.866933	-2.280737
C	2.817602	3.339041	-0.267159	C	2.463043	0.898471	2.318974
C	-2.858519	3.161205	3.771148	C	0.828685	-2.929374	0.034747
F	-4.688420	2.433084	-3.488597	C	3.704842	1.277864	-0.898796
F	3.701574	3.916123	-1.179852	C	3.236443	-1.328607	2.198455

C	2.575290	-2.480460	-1.483390	H	-3.181852	5.432625	-2.021830
C	4.245861	2.155619	-1.862040	H	-4.407414	4.647577	-0.986742
C	3.830436	-1.210953	3.474167	C	-0.191348	-0.012136	-0.370788
C	2.529614	-3.806347	-1.963284	B	1.479088	-0.322450	-0.167746
C	2.328395	1.730361	-3.276043	C	2.245464	0.517779	-1.366106
C	3.038636	1.072995	3.589718	C	1.939754	0.154842	1.347644
C	0.737858	-4.263048	-0.404291	C	1.685114	-1.958484	-0.321401
F	0.624662	0.204038	-2.607157	C	3.442928	1.985447	-3.564588
F	1.830849	2.047028	1.782603	C	2.718758	0.952492	4.028807
F	-0.036524	-2.601843	1.113223	C	1.921774	-4.843456	-0.530060
F	4.505193	1.076237	0.235835	C	1.866651	0.352503	-2.718268
F	3.430629	-2.568882	1.569763	C	1.346933	1.228446	2.047382
F	3.576637	-1.678300	-2.051270	C	0.873147	-2.864850	0.395239
F	5.467065	2.785693	-1.639983	C	3.276752	1.468010	-1.188229
F	4.523784	-2.280354	4.034206	C	2.973805	-0.480165	2.077947
F	3.402542	-4.231316	-2.960372	C	2.650313	-2.598032	-1.134852
F	1.625809	1.927035	-4.464462	C	3.873183	2.194019	-2.243047
F	2.938754	2.292059	4.259668	C	3.368085	-0.114404	3.380963
F	-0.183630	-5.141444	0.166805	C	2.778321	-3.997472	-1.257483
F	4.063304	3.258122	-4.018796	C	2.421235	1.048101	-3.805803
F	4.318435	0.142406	5.431223	C	1.697594	1.637569	3.347916
F	1.532378	-6.020526	-1.878157	C	0.957321	-4.267177	0.315077
H	-0.242591	-0.513405	1.056961	F	0.875049	-0.605603	-3.046321
H	-0.268042	0.032089	-0.719594	F	0.337368	2.008647	1.428890
H	0.283323	1.203464	0.609839	F	-0.104861	-2.366919	1.294088
Gasphase Me alpha backside				F	3.791525	1.743701	0.088016
73				F	3.712889	-1.519410	1.493880
Zr	-2.705298	0.399939	-0.544458	F	3.584940	-1.847537	-1.861330
C	-2.905119	-0.879229	1.748758	F	4.885245	3.114417	-1.985350
C	-3.697468	0.302003	1.915772	F	4.395586	-0.791983	4.030336
C	-4.765014	0.267224	0.948433	F	3.750541	-4.551477	-2.085343
C	-4.665236	-0.967004	0.200755	F	1.976707	0.817809	-5.107522
C	-3.486271	-1.655790	0.677511	F	1.045221	2.707611	3.959584
C	-2.347998	-0.010317	-3.113608	F	0.098830	-5.079762	1.056369
C	-3.123905	-1.081024	-2.529313	F	4.012039	2.694711	-4.615547
C	-4.403359	-0.547494	-2.118237	F	3.084567	1.327780	5.315910
C	-4.376863	0.873519	-2.390053	F	2.029323	-6.224818	-0.639901
C	-3.121897	1.188794	-3.028679	H	-0.630209	-0.235322	0.619784
C	-2.812936	2.589364	0.051045	H	-0.515527	-0.701793	-1.175471
C	-2.366091	3.877228	-0.701298	H	-0.274133	1.053074	-0.667958
C	-1.026700	3.736648	-1.468156	Gasphase Me beta frontside			
C	-3.494759	4.466631	-1.585129	73			
C	-5.351499	-1.242629	-1.138858	Zr	3.040300	-1.158058	-0.180456
H	-2.040066	-1.170787	2.341762	C	3.783190	-4.229138	-0.055414
H	-3.520474	1.094103	2.641621	H	3.081268	-5.074889	0.019829
H	-5.540132	1.023524	0.825160	H	4.810093	-4.628788	-0.075052
H	-3.120811	-2.619511	0.322393	C	3.489508	-3.355258	-1.278106
H	-1.357709	-0.111224	-3.555690	C	2.162300	-2.951837	-1.689974
H	-2.820904	-2.126817	-2.463293	C	2.288211	-1.832090	-2.598461
H	-5.184792	1.576250	-2.187592	C	3.676238	-1.513161	-2.712755
H	-2.828760	2.164662	-3.406370	C	4.421764	-2.429563	-1.880870
H	-3.745288	2.821349	0.602031	C	3.586476	-3.227392	1.085762
H	-2.047999	2.362715	0.851053	C	2.298355	-2.779271	1.572379
H	-2.179931	4.632622	0.096122	C	2.500624	-1.577526	2.347486
H	-0.215738	3.421912	-0.785883	C	3.896242	-1.257810	2.314183
H	-1.093248	3.003233	-2.292923	C	4.566658	-2.257724	1.521778
H	-0.728818	4.704454	-1.911290	C	4.815196	0.256281	-0.325688
H	-6.365093	-0.811688	-1.173893	C	3.898187	1.462657	-0.000179
H	-5.427625	-2.322645	-1.343702	C	3.504430	2.269547	-1.266777
H	-3.766485	3.795040	-2.417614	C	4.480216	2.396305	1.096063

H	1.467778	-1.328313	-3.107661	H	0.849709	-2.768517	-2.885661
H	1.343437	-3.281817	1.419553	C	-0.840557	-4.005478	-2.244238
H	1.728186	-1.030236	2.886022	C	-1.472536	-5.292831	-2.045277
H	4.371174	-0.412822	2.809943	C	-2.745523	-5.081510	-1.381703
H	5.635085	-2.295532	1.312071	C	-2.895266	-3.669153	-1.162542
H	5.618863	0.123129	0.414885	C	-1.717106	-3.007882	-1.655981
H	5.260079	0.329295	-1.330892	C	1.244392	-4.002093	-1.114564
H	2.915910	1.104467	0.458078	C	1.421579	-5.293624	-0.484752
H	4.727194	1.838206	2.016934	C	1.565620	-5.091729	0.943805
H	3.760933	3.191633	1.357711	C	1.472006	-3.681097	1.199481
H	5.408204	2.866458	0.724341	C	1.240581	-3.010462	-0.052716
H	2.782538	3.067350	-1.021883	C	-1.628461	-2.997685	1.688604
H	4.406168	2.741936	-1.696981	C	-2.053222	-4.219076	2.527916
H	3.056875	1.629709	-2.050254	C	-3.590167	-4.366406	2.675784
H	1.233033	-3.451479	-1.414961	C	-1.325352	-4.312620	3.894937
H	4.102446	-0.720132	-3.325795	H	-3.488693	-5.849338	-1.165244
H	5.504549	-2.445373	-1.758754	H	1.485435	-6.249383	-1.007185
C	0.558492	-0.137014	-0.184411	H	1.791431	-5.863418	1.680221
B	-1.049296	0.416745	-0.010306	H	1.572432	-3.191211	2.166693
C	-1.045327	2.055259	-0.237904	H	1.115164	-1.937266	-0.193484
C	-1.972631	-0.339029	-1.154351	H	-0.893191	-2.349319	2.182376
C	-1.512514	-0.006352	1.520559	H	-2.474545	-2.390174	1.337307
C	-1.990067	2.769917	-1.012245	H	-1.741367	-5.224667	1.988441
C	-3.236758	-0.928980	-0.919946	H	-0.230887	-4.243755	3.780937
C	-2.039876	0.866916	2.499424	H	-1.567232	-5.255332	4.418041
F	-3.079556	2.112234	-1.603695	H	-1.650648	-3.469963	4.528935
F	-3.831688	-0.865575	0.349731	H	-3.858545	-5.310639	3.182444
F	-2.292031	2.214766	2.202271	H	-3.969715	-3.528573	3.286116
C	-1.948732	4.164083	-1.228149	H	-4.102224	-4.334074	1.699280
C	-4.006726	-1.575402	-1.909163	H	-1.080308	-6.252588	-2.385807
C	-2.374077	0.472872	3.813858	H	-3.751192	-3.174046	-0.707031
F	-2.921592	4.789138	-2.002750	H	-1.498445	-1.940877	-1.612513
F	-5.244670	-2.129668	-1.595068	C	-1.489381	0.646245	0.243685
F	-2.886625	1.396047	4.720661	B	-0.253815	1.740671	0.080929
C	-0.919488	4.928693	-0.652268	C	1.161227	1.187973	0.765157
C	-3.524278	-1.652225	-3.227626	C	0.025268	1.926151	-1.551155
C	-2.193074	-0.863895	4.210142	C	-0.793854	3.129460	0.805932
F	-0.852128	6.301360	-0.860479	C	2.443678	1.603014	0.324064
F	-4.263966	-2.289765	-4.216714	C	0.027007	3.143180	-2.275870
F	-2.507127	-1.270361	5.501694	C	-0.211163	3.764992	1.924179
C	0.037979	4.278224	0.146144	F	2.559041	2.591868	-0.664293
C	-2.281395	-1.067655	-3.528630	F	-0.116792	4.369305	-1.614232
C	-1.690058	-1.785437	3.273350	F	1.010401	3.308826	2.458995
F	1.062978	5.011459	0.747575	C	3.666899	1.123740	0.834587
F	-1.782709	-1.115278	-4.830826	C	0.200672	3.238396	-3.673306
F	-1.515448	-3.122712	3.630827	C	-0.769660	4.877423	2.591628
C	-0.057508	2.888208	0.333708	F	4.883510	1.588227	0.336621
C	-1.557853	-0.434427	-2.501441	F	0.176579	4.477256	-4.312112
C	-1.375497	-1.337122	1.978277	F	-0.128334	5.442458	3.695530
F	0.908677	2.334519	1.211517	C	3.658947	0.159656	1.858446
F	-0.343711	0.175487	-2.907811	C	0.419860	2.075037	-4.433234
F	-0.923771	-2.339125	1.082804	C	-1.982385	5.420710	2.137854
H	1.044794	0.145644	0.767322	F	4.848462	-0.352145	2.370284
H	0.988927	0.375944	-1.062247	F	0.596782	2.145253	-5.812668
H	0.477211	-1.229174	-0.329288	F	-2.555639	6.515802	2.780565
Gasphase Me beta backside				C	2.420178	-0.275209	2.353859
73				C	0.468867	0.839592	-3.766961
				C	-2.608818	4.839038	1.019697
				F	2.377753	-1.240988	3.373579
Zr	-0.803866	-4.458151	0.185703	F	0.711003	-0.341682	-4.482589
C	0.654231	-3.785398	-2.515189	F	-3.809892	5.369445	0.545560
H	1.050575	-4.512965	-3.241150	C	1.226974	0.246300	1.815092

C	0.275181	0.808673	-2.374718	C	0.953122	1.282553	-2.753014
C	-2.012019	3.728264	0.397624	C	1.512094	-0.843374	2.769250
F	0.051539	-0.237832	2.439535	C	2.682245	4.798598	3.319632
F	0.382146	-0.494531	-1.798435	C	3.115291	1.921286	-3.586184
F	-2.690901	3.226579	-0.730221	C	3.029103	-1.899691	1.212848
H	-1.871034	0.628536	1.279616	F	3.645039	2.623008	3.362248
H	-1.174817	-0.380864	-0.017333	F	4.846517	2.615670	-2.133754
H	-2.325240	0.925592	-0.421604	F	4.189004	-0.616769	-0.420725
Gasphase F alpha frontside				F	1.579151	4.392347	-0.699617
73				F	0.389119	1.408477	-0.440116
				F	1.118968	1.497425	2.733617
				F	0.969851	6.673171	0.626626
Zr	-2.029471	1.373684	-0.385243	F	-0.383801	0.864194	-2.925327
C	-2.753460	-1.072177	-1.068008	F	0.548596	-0.931693	3.783274
C	-1.538131	-1.189457	-0.320507	F	3.029719	4.947577	4.660981
C	-1.781419	-0.683709	1.011159	F	3.984749	2.133683	-4.649454
C	-3.162858	-0.269864	1.095855	F	3.620680	-3.046775	0.686186
C	-3.750648	-0.476692	-0.213535	F	1.688155	7.019477	3.324547
C	-2.771079	3.805380	0.265410	F	1.371838	1.228615	-5.145064
C	-3.763345	2.853319	0.704995	F	1.808140	-3.255200	2.823659
C	-3.168263	2.011581	1.720922	H	5.414138	1.370496	0.006929
C	-1.783997	2.413925	1.850142	H	5.179234	1.968503	1.669107
C	-1.552968	3.529979	0.961932	H	5.267571	3.118309	0.309564
C	-3.087706	1.925528	-2.280310	Gasphase F alpha backside			
C	-4.416784	2.428240	-2.906795	backside			
C	-5.609073	1.492133	-2.580660	73			
C	-4.763519	3.901989	-2.576967	Zr	2.255970	0.875603	0.147669
C	-3.719278	0.657556	2.179520	C	2.157590	0.122156	-2.335427
H	-2.897415	-1.372384	-2.104694	C	3.392854	0.840503	-2.230390
H	-0.600665	-1.610234	-0.682774	C	4.231159	0.155199	-1.279267
H	-1.068197	-0.659447	1.833934	C	3.536472	-1.032669	-0.828286
H	-4.782801	-0.268100	-0.487153	C	2.238371	-1.029875	-1.463514
H	-2.925236	4.597497	-0.463803	C	1.413907	0.170762	2.499825
H	-4.796753	2.806864	0.366118	C	1.764922	-0.998052	1.725179
H	-1.048778	1.978853	2.525773	C	3.191980	-0.992032	1.510143
H	-0.618048	4.076729	0.860862	C	3.707569	0.224877	2.104768
H	-2.300674	2.724621	-2.431229	C	2.611975	0.913252	2.744780
H	-2.760865	1.027931	-2.852602	C	3.502009	2.812584	0.129927
H	-4.273419	2.384244	-4.010182	C	3.624384	3.971503	1.171545
H	-5.386129	0.444416	-2.855109	C	2.289297	4.423534	1.818340
H	-5.852300	1.524562	-1.502291	C	4.725361	3.713033	2.234307
H	-6.510974	1.803944	-3.137923	C	3.889763	-1.826213	0.432850
H	-3.356387	0.385901	3.182923	H	1.317600	0.370943	-2.983530
H	-4.821010	0.650862	2.193171	H	3.652256	1.752945	-2.765400
H	-5.042825	4.036862	-1.517670	H	5.237420	0.450084	-0.983471
H	-5.621869	4.233496	-3.189760	H	1.454014	-1.772476	-1.317167
H	-3.916741	4.576758	-2.803793	H	0.417265	0.419074	2.863413
C	4.890613	2.125754	0.614612	H	1.082885	-1.775686	1.384511
B	3.251131	2.036681	0.480938	H	4.749757	0.540884	2.110952
C	2.675218	3.378982	1.255998	H	2.688098	1.828380	3.325446
C	2.725712	1.947503	-1.107184	H	4.524310	2.603835	-0.243567
C	2.765116	0.591965	1.154144	H	2.944968	3.206749	-0.762641
C	2.009204	5.842099	2.655350	H	3.983644	4.846756	0.581553
C	1.807362	1.470999	-3.848976	H	1.564663	4.747498	1.051046
C	2.121062	-2.012018	2.282409	H	1.817337	3.617398	2.408750
C	2.993814	3.619151	2.618386	H	2.462143	5.277529	2.499007
C	3.539441	2.147009	-2.255526	H	4.978638	-1.877605	0.592510
C	3.316383	-0.626295	0.681452	H	3.492963	-2.852772	0.395712
C	1.999333	4.460768	0.653154	H	4.467985	2.886527	2.918003
C	1.433856	1.540896	-1.464243	H	4.883211	4.616133	2.852377
C	1.840281	0.405185	2.202386				
C	1.660261	5.665680	1.306725				

H	5.688888	3.465208	1.750053	H	-0.997391	2.360132	0.133348
C	-4.495972	-1.075804	-1.493519	H	-3.029851	1.814078	-4.484076
B	-2.911211	-0.833027	-1.125110	H	-0.951167	2.576100	-2.885209
C	-2.077047	-1.689444	-2.273869	H	-0.903302	-1.812780	-3.175445
C	-2.469419	0.779155	-1.124164	H	-3.003869	-0.893675	-4.656272
C	-2.630813	-1.357712	0.430074	H	-4.536236	-1.208461	-1.827657
C	-0.937541	-3.296707	-4.417377	H	-5.167466	-0.224593	-0.450067
C	-1.569739	3.576372	-1.055384	H	-6.982578	-0.326868	-1.995658
C	-2.394682	-2.306522	3.169695	H	-6.557551	1.947107	-0.968094
C	-2.246747	-3.095313	-2.378062	H	-5.631845	2.422111	-2.429819
C	-3.268833	1.875689	-1.547025	H	-7.377997	2.065428	-2.550312
C	-3.447444	-0.894569	1.492588	H	1.104621	-0.572483	-1.559113
C	-1.304299	-1.155574	-3.325996	H	1.069717	1.200283	-1.429813
C	-1.216792	1.207690	-0.666807	H	-5.167523	0.641000	-4.302609
C	-1.650081	-2.279961	0.853877	H	-6.913347	0.292351	-4.387041
C	-0.734095	-1.908194	-4.375307	H	-5.762235	-1.037304	-4.087315
C	-0.751235	2.521894	-0.636639	C	6.439610	0.753330	-0.956189
C	-1.522564	-2.770523	2.169913	B	4.794379	0.562537	-1.060480
C	-1.705508	-3.896456	-3.400206	C	4.196525	1.854575	-1.917721
C	-2.857017	3.231143	-1.513620	C	4.483024	-0.878999	-1.828865
C	-3.361005	-1.342744	2.826266	C	4.197892	0.539377	0.490604
F	-2.986122	-3.776289	-1.397612	C	3.326317	4.206296	-3.394987
F	-4.544903	1.673308	-2.066681	C	4.127194	-3.434585	-3.177677
F	-4.401425	0.109450	1.253985	C	3.374036	0.489793	3.281255
F	-1.029044	0.236733	-3.393841	C	4.560640	3.181274	-1.567915
F	-0.201881	0.269010	-0.227995	C	5.184512	-1.249553	-3.004868
F	-0.665651	-2.756149	-0.045046	C	4.772978	-0.317877	1.463714
F	0.032294	-1.282638	-5.362202	C	3.352376	1.798280	-3.048087
F	0.597906	2.744248	-0.205355	C	3.573092	-1.870285	-1.402866
F	-0.520123	-3.690934	2.492349	C	3.162907	1.341317	1.014729
F	-1.914983	-5.274046	-3.417563	C	2.914828	2.921173	-3.783513
F	-3.711118	4.238239	-1.945696	C	3.379372	-3.116613	-2.033194
F	-4.210457	-0.836297	3.808715	C	2.745358	1.344212	2.361608
F	-0.388953	-4.065276	-5.439850	C	4.159990	4.335085	-2.267745
F	-1.130749	4.892091	-1.027752	C	5.037188	-2.481621	-3.671584
F	-2.286672	-2.770037	4.477360	C	4.398076	-0.358222	2.820119
H	-5.180841	-0.469275	-0.880677	F	5.325575	3.414700	-0.414944
H	-4.750605	-2.138537	-1.331385	F	6.059006	-0.338357	-3.616276
H	-4.700795	-0.841364	-2.553891	F	5.755194	-1.246378	1.082810
Gasphase F alpha bridge				F	2.828643	0.564110	-3.506988
73				F	2.715282	-1.645312	-0.292797
				F	2.408643	2.205237	0.174878
				F	2.058761	2.768469	-4.882766
Zr	-2.700099	0.263563	-1.567535	F	2.436223	-4.028910	-1.538851
C	-2.421560	0.785824	0.947082	F	1.696893	2.172581	2.783806
C	-2.398245	-0.638899	0.837011	F	4.552227	5.605618	-1.844496
C	-1.260108	-1.006519	0.013160	F	5.762850	-2.761730	-4.829849
C	-0.536779	0.199317	-0.339864	F	5.012498	-1.241448	3.708616
C	-1.290084	1.311007	0.198948	F	2.906115	5.332352	-4.103327
C	-2.342110	1.144465	-3.968592	F	3.957637	-4.660041	-3.820574
C	-1.236801	1.548683	-3.116835	F	2.980424	0.469457	4.618557
C	-0.498819	0.368196	-2.721454	H	6.937994	-0.202250	-0.718464
C	-1.211248	-0.770045	-3.267790	H	6.703598	1.479060	-0.168121
C	-2.322766	-0.281777	-4.066221	H	6.858050	1.122545	-1.907994
C	-4.876295	-0.153907	-1.520644	Gasphase F beta frontside			
C	-6.114936	0.273605	-2.347750	73			
C	-6.438965	1.764559	-2.051694				
C	-5.975476	0.025384	-3.867801	Zr	2.531286	-1.070307	0.487866
C	0.442323	0.302091	-1.514832	C	2.787091	-4.211374	0.763178
H	-3.133625	1.372194	1.527917	H	2.086289	-4.997206	0.440088
H	-3.096768	-1.330890	1.307394	H	3.659359	-4.691474	1.234204
H	-0.940194	-2.023118	-0.221450				

C	3.196255	-3.299871	-0.395575	C	-4.092860	-0.775402	0.257667
C	2.263964	-2.745944	-1.357283	F	-2.769312	1.290467	-3.627762
C	2.916164	-1.655873	-2.037551	F	-0.897968	3.653683	-0.625058
C	4.221066	-1.489679	-1.471628	F	-4.855853	0.274085	0.782143
C	4.393997	-2.492541	-0.447104	H	-4.230633	1.540554	-1.757077
C	2.119020	-3.200498	1.696040	H	-3.167871	2.950722	-1.510742
C	0.820774	-2.607163	1.442041	H	-4.123520	2.303328	-0.153398
C	0.678666	-1.448058	2.286939				
C	1.895780	-1.285416	3.023090				
C	2.795004	-2.353350	2.650794				
C	4.356234	-0.045616	1.396905				
C	3.747704	1.359331	1.121155	Zr	-0.517813	-3.704048	-0.042144
C	4.620554	2.197583	0.147078	C	-3.355575	-2.375094	-0.269539
C	3.452802	2.155261	2.420970	H	-4.306991	-2.908629	-0.425448
H	2.494921	-1.081307	-2.859229	H	-3.562855	-1.296203	-0.208767
H	0.070724	-3.018994	0.768416	C	-2.617710	-2.885141	0.976146
H	-0.215264	-0.834119	2.367533	C	-2.485927	-4.280912	1.336433
H	2.099398	-0.512077	3.761582	C	-1.384400	-4.413232	2.272027
H	3.796045	-2.515852	3.048136	C	-0.831027	-3.104569	2.483007
H	4.534398	-0.217987	2.469645	C	-1.558225	-2.168918	1.664012
H	5.298850	-0.199232	0.847887	C	-2.335909	-2.695629	-1.371225
H	2.736074	1.269532	0.602035	C	-2.089499	-4.014311	-1.916333
H	2.804940	1.591676	3.113581	C	-0.795628	-4.004397	-2.572682
H	2.956605	3.115961	2.194969	C	-0.241112	-2.685741	-2.430488
H	4.402286	2.373878	2.942034	C	-1.164386	-1.890429	-1.665760
H	4.130099	3.153764	-0.106940	C	1.432689	-2.636984	0.289230
H	5.589330	2.421027	0.629543	C	2.125140	-4.011377	0.163199
H	4.816458	1.657267	-0.793846	C	2.792305	-4.488262	1.479894
H	1.261863	-3.119864	-1.565246	C	3.088980	-4.110300	-1.047471
H	4.959187	-0.748670	-1.773103	H	-1.087142	-5.328323	2.785096
H	5.286959	-2.640585	0.158819	H	-2.784095	-4.855592	-1.879458
C	-3.538665	2.020591	-1.044860	H	-0.362580	-4.824424	-3.146151
B	-2.287910	1.026759	-0.616626	H	0.703563	-2.329748	-2.837656
C	-1.129249	1.052455	-1.828344	H	-1.029911	-0.849828	-1.373632
C	-1.642711	1.759557	0.732725	H	1.725248	-1.920049	-0.488765
C	-2.837440	-0.512560	-0.351437	H	1.542032	-2.190463	1.286117
C	0.257114	0.989939	-1.621214	H	1.329029	-4.854838	-0.061196
C	-1.733486	1.298020	2.063409	H	2.602077	-3.800340	-1.987160
C	-2.168640	-1.692026	-0.740403	H	3.475332	-5.137748	-1.172596
F	0.783367	0.523720	-0.334723	H	3.946964	-3.437702	-0.874505
F	-2.247320	0.011788	2.346581	H	3.178634	-5.519027	1.385281
F	-0.869645	-1.636904	-2.314984	H	3.640019	-3.820964	1.713026
C	1.255228	1.321409	-0.549528	H	2.092771	-4.450997	2.332691
C	-1.314134	2.023780	3.199371	H	-3.141698	-5.085976	0.999354
C	-2.662999	-3.001489	-0.573144	H	-0.005948	-2.845790	3.144777
F	2.610493	1.350687	-2.182134	H	-1.354340	-1.100314	1.599484
F	-1.435275	1.477906	4.478690	C	0.893019	4.367358	-0.033990
F	-1.897618	-4.104457	-0.972893	B	0.500902	2.757381	0.002877
C	0.876587	1.646417	-3.862852	C	0.262486	2.274758	-1.569977
C	-0.751340	3.300089	3.035305	C	1.749848	1.916989	0.706711
C	-3.923917	-3.193697	0.011071	C	-0.885161	2.585715	0.905016
F	1.837271	1.972979	-4.813669	C	0.85269	1.190828	-2.223304
F	-0.317222	4.034066	4.136212	C	1.619155	0.906744	1.682252
F	-4.441600	-4.472824	0.184860	C	-2.031447	1.850291	0.541234
C	-0.490936	1.608465	-4.189538	F	1.691413	0.267625	-1.505081
C	-0.623322	3.818249	1.732890	F	0.340526	0.425793	2.068614
C	-4.641518	-2.060551	0.437682	F	-2.045158	1.065571	-0.643810
F	-0.889839	1.873886	-5.494655	C	0.740230	0.882194	-3.591810
F	-0.052823	5.077189	1.543275	C	2.693439	0.240882	2.304627
F	-5.881408	-2.226134	1.050074	C	-3.213346	1.762530	1.303591
C	-1.443844	1.321373	-3.187041	F	1.400023	-0.227106	-4.144957
C	-1.067070	3.052806	0.638135	F	2.455348	-0.780991	3.239562

F	-4.291441	0.979765	0.861490
C	-0.087570	1.677365	-4.399263
C	4.010912	0.572942	1.954076
C	-3.296942	2.441334	2.530073
F	-0.248501	1.391642	-5.753305
F	5.090696	-0.081644	2.546402
F	-4.452136	2.371861	3.304961
C	-0.764612	2.758623	-3.803800
C	4.214309	1.556858	0.968896
C	-2.178414	3.175964	2.966703
F	-1.618421	3.543725	-4.577953
F	5.514631	1.877733	0.578073
F	-2.225630	3.831444	4.196882
C	-0.580536	3.022772	-2.432691
C	3.102400	2.188432	0.376325
C	-1.020233	3.222886	2.164856
F	-1.342587	4.081307	-1.914469
F	3.406929	3.096319	-0.648116
F	0.066527	3.916671	2.718625
H	-0.011813	4.991098	-0.132637
H	1.555683	4.598994	-0.885174
H	1.413975	4.675114	0.888699

Anhang B

Rohdaten der Rechnungen zur homogenen asymmetrischen Hydrierung

B.1 Energien

Struktur	TZVP	PBE [hartree]	Non-RI
R1c_01	−3595.37501	−3590.39268	−3594.38256
R1c_02	−3596.54987		−3595.55347
R1c_03	−3596.56441	−3591.56511	−3595.56560
S2c_01	−3595.37320	−3590.38952	−3594.38018
S2c_02	−3596.54962		−3595.55312
S2c_03	−3596.56445	−3591.56628	−3595.56556
H ₂	−1.17744	−1.16225	−1.17371

Tabelle B.1: Total Energies der für den Vergleich der Funktionale herangezogenen Strukturen

Struktur	Total Energy	ΔG	ΔH [kJ/mol]	Nullpunktskorrektur
R1c_01	−3594.39345	2033.20	2463.04	2300.11
<i>Fortsetzung auf der folgenden Seite</i>				

<i>Fortsetzung der vorherigen Seite</i>				
Struktur	Total Energy [hartree]	ΔG	ΔH [kJ/mol]	Nullpunktskorrektur
R3c_01	-3594.39293	2035.10	2463.00	2300.14
R4c_01	-3594.38928	2030.99	2462.83	2299.52
S2c_01	-3594.39082	2035.45	2463.04	2300.22
S4c_01	-3594.39117	2036.65	2463.41	2300.79
S1a_01	-3594.38937	2032.31	2462.49	2299.38
R2c_01	-3594.38797	2029.09	2462.43	2298.94
R4a_01	-3594.38891	2033.19	2462.76	2299.74
S1c_01	-3594.38932	2035.52	2463.40	2300.68
R2a_01	-3594.38796	2033.70	2462.45	2299.35
S3a_01	-3594.38688	2031.67	2462.69	2299.44
S3c_01	-3594.38750	2034.36	2463.19	2300.07
R5a_01	-3594.38719	2034.01	2462.72	2299.70
S4a_01	-3594.38570	2031.77	2462.48	2299.26
S5c_01	-3594.38546	2032.73	2462.44	2299.28
S2a_01	-3594.38407	2029.61	2462.56	2298.99
S5a_01	-3594.38401	2031.01	2462.67	2299.28
R1a_01	-3594.38311	2030.63	2463.25	2300.11
R1c_02	-3595.56456	2056.86	2499.11	2329.93
R3c_02	-3595.56617	2056.27	2499.33	2329.60
S2c_02	-3595.56401	2055.94	2499.00	2329.05
S1a_02	-3595.56183	2056.21	2498.68	2329.19
R1c_03	-3595.57629	2075.60	2505.60	2341.03
R3c_03	-3595.57488	2076.91	2505.01	2340.37
R4c_03	-3595.56960	2076.85	2504.94	2340.53
S2c_03	-3595.57640	2076.12	2505.46	2340.83
S4c_03	-3595.57521	2079.98	2505.67	2341.50
S1a_03	-3595.57383	2076.12	2505.11	2340.65
R4a_03	-3595.56839	2085.25	2502.45	2340.52
S1c_03	-3595.57015	2078.25	2505.29	2340.74
R2a_03	-3595.57097	2075.43	2504.58	2340.11
S3c_03	-3595.56779	2074.92	2504.76	2339.89
S2a_03	-3595.56592	2079.10	2505.10	2340.93
R1c_04	-3595.56991	2069.77	2500.07	2336.41
R3c_04	-3595.56605	2074.12	2500.03	2336.67
<i>Fortsetzung auf der folgenden Seite</i>				

<i>Fortsetzung der vorherigen Seite</i>				
Struktur	Total Energy [hartree]	ΔG	ΔH [kJ/mol]	Nullpunktskorrektur
S2c_04	-3595.57017	2071.13	2499.87	2336.16
S1a_04	-3595.56871	2071.72	2499.95	2336.44
R1c_05	-3595.57891	2077.36	2508.10	2344.10
R3c_05	-3595.57424	2080.23	2508.15	2344.31
R4c_05	-3595.57393	2082.42	2508.79	2345.15
S2c_05	-3595.57919	2080.76	2508.33	2344.59
S4c_05	-3595.57784	2080.77	2508.89	2345.10
S1a_05	-3595.57715	2079.17	2508.56	2344.80
R4a_05	-3595.56942	2081.48	2508.30	2344.63
S1c_05	-3595.57157	2083.07	2508.80	2345.17
R2a_05	-3595.57496	2077.12	2507.78	2343.76
S3c_05	-3595.57386	2080.50	2508.26	2344.42
S2a_05	-3595.57060	2081.04	2508.38	2344.48
R1c_06	-3595.55467	2067.91	2501.13	2337.52
R3c_06	-3595.55019	2071.49	2501.00	2337.74
R4c_06	-3595.55161	2074.84	2501.76	2338.85
S2c_06	-3595.55509	2070.99	2501.01	2337.84
S4c_06	-3595.55498	2075.04	2501.64	2338.78
S1a_06	-3595.56781	2073.83	2503.62	2340.57
R4a_06	-3595.56155	2078.41	2503.82	2341.03
S1c_06	-3595.54973	2076.14	2501.38	2338.49
R2a_06	-3595.56580	2075.64	2503.14	2340.05
S3c_06	-3595.55075	2070.79	2500.72	2337.34
S2a_06	-3595.56172	2078.06	2503.83	2340.71
R1c_07	-3595.55672	2074.53	2508.68	2344.40
R3c_07	-3595.55109	2079.78	2505.82	2343.95
R4c_07	-3595.55431	2077.28	2509.29	2344.97
S2c_07	-3595.55614	2077.63	2508.43	2344.57
S4c_07	-3595.55629	2077.29	2508.52	2344.57
S1a_07	-3595.57483	2081.69	2510.60	2346.91
R4a_07	-3595.56890	2087.41	2510.71	2347.76
S1c_07	-3595.55113	2078.95	2509.21	2345.29
R2a_07	-3595.57218	2082.23	2510.18	2346.39
S3c_07	-3595.55281	2071.38	2508.14	2343.65
<i>Fortsetzung auf der folgenden Seite</i>				

<i>Fortsetzung der vorherigen Seite</i>				
Struktur	Total Energy [hartree]	ΔG	ΔH [kJ/mol]	Nullpunktskorrektur
S2a_07	-3595.56779	2082.44	2510.30	2346.56
R1c_08	-3595.55272	2069.68	2509.27	2345.08
R3c_08	-3595.54854	2072.06	2508.80	2344.52
S2c_08	-3595.55150	2072.48	2506.97	2343.49
S4c_08	-3595.55096	2074.66	2507.44	2343.94
S1a_08	-3595.55527	2077.10	2507.54	2343.05
R4a_08	-3595.54663	2081.78	2507.05	2342.93
R2a_08	-3595.55121	2077.19	2507.01	2342.55
S2a_08	-3595.54875	2078.28	2506.96	2342.46
R1c_09	-3595.57625	2075.98	2517.60	2352.59
R3c_09	-3595.57221	2078.02	2517.66	2352.83
R4c_09	-3595.57401	2078.61	2517.54	2352.54
S2c_09	-3595.57261	2074.28	2517.33	2352.10
S4c_09	-3595.57411	2081.40	2517.25	2352.74
S1a_09	-3595.57540	2089.39	2515.47	2351.18
R4a_09	-3595.56770	2076.43	2516.03	2350.72
S1c_09	-3595.57412	2077.47	2517.40	2352.21
R2a_09	-3595.57109	2083.06	2515.58	2350.67
S3c_09	-3595.56963	2075.43	2517.38	2352.20
S2a_09	-3595.56856	2087.56	2514.66	2350.05
R1c_10	-3595.56241	2071.00	2512.28	2347.70
R3c_10	-3595.56150	2074.90	2512.03	2347.66
S2c_10	-3595.56493	2072.58	2511.95	2347.15
S1a_10	-3595.56619	2077.51	2510.93	2346.19
R1c_11	-3595.58418	2085.32	2523.63	2357.73
R3c_11	-3595.58685	2083.59	2524.40	2358.75
S2c_11	-3595.58928	2083.93	2524.55	2358.86
S1a_11	-3595.58533	2079.98	2521.19	2356.29
H ₂	-1.17399	-8.41	32.19	25.99

Tabelle B.3: Total Energies, ΔG_{298} und ΔH Korrekturfaktoren sowie der Korrekturfaktor für die Nullpunktsenergie.

Struktur	Energie Standard [hartree]	SP-Energie
R1c_01	−3594.39345	−3595.37501
R1c_02	−3595.56456	−3596.54987
R1c_03	−3595.57629	−3596.56441
R1c_04	−3595.56991	−3596.55852
R1c_05	−3595.57891	−3596.56500
R1c_06	−3595.55467	−3596.54210
R1c_07	−3595.55672	−3596.54330
R1c_08	−3595.55272	−3596.53976
R1c_09	−3595.57625	−3596.55986
S2c_01	−3594.39082	−3595.37320
S2c_02	−3595.56401	−3596.54962
S2c_03	−3595.57640	−3596.56445
S2c_04	−3595.57017	−3596.55871
S2c_05	−3595.57919	−3596.56508
S2c_06	−3595.55509	−3596.54145
S2c_07	−3595.55614	−3596.54211
S2c_08	−3595.55150	−3596.53811
S2c_09	−3595.57261	−3596.55982
H ₂	−1.17399	−1.17744

Tabelle B.2: Total Energies der zur Überprüfung der Basissätze ausgewählten Strukturen. Referenz hierbei ist der in Kapitel 1.3.2 beschriebene Basissatz.

Struktur	Total Energy	ΔG	ΔH [kJ/mol]	Nullpunktskorrektur
proR	−1900.70540	1416.56	1679.30	1586.98
proS	−1900.70623	1416.76	1679.15	1586.83
R-MolH2-A	−1901.87064	1459.32	1720.50	1627.04
R-MolH2-A_ts	−1901.86404	1456.42	1716.23	1624.24
R-MolH2-C	−1901.87921	1458.43	1721.38	1627.78
R-MolH2-C_ts	−1901.87244	1455.80	1716.00	1623.69
S-MolH2-A	−1901.86479	1459.97	1720.95	1627.60
S-MolH2-A_ts	−1901.85853	1458.68	1716.84	1625.01
S-MolH2-C	−1901.88350	1460.88	1721.53	1628.31
S-MolH2-C_ts	−1901.87733	1456.64	1716.19	1624.00
R-DiHy-A	−1901.87613	1451.71	1723.22	1628.62
R-DiHy-Aa_ts	−1901.86731	1459.08	1719.97	1627.91
R-DiHy-C	−1901.87660	1448.92	1723.65	1628.21
R-DiHy-Cb_ts	−1901.86770	1456.56	1716.76	1624.53
S-DiHy-A	−1901.87621	1453.60	1723.07	1628.87
S-DiHy-Aa_ts	−1901.86062	1462.81	1721.00	1629.62
S-DiHy-Ata	−1901.87620	1452.73	1723.03	1628.68
S-DiHy-C	−1901.88489	1461.63	1723.78	1630.93
S-DiHy-Cb_ts	−1901.87320	1456.79	1716.98	1624.73
R-AlHy-A	−1901.87615	1452.48	1723.23	1628.75
R-AlHy-Aa	−1901.89724	1469.30	1730.88	1638.17
R-AlHy-Ata	−1901.87741	1467.41	1727.84	1635.49
R-AlHy-Cb	−1901.90556	1460.16	1731.61	1637.37
R-AlHy-Ctb	−1901.90556	1460.60	1731.69	1637.52
S-AlHy-Aa	−1901.89669	1470.31	1730.86	1638.34
S-AlHy-Aa_ts	−1901.87805	1464.22	1726.82	1633.75
S-AlHy-Ata	−1901.87115	1469.86	1728.40	1636.28
S-AlHy-Cb	−1901.90556	1460.64	1731.66	1637.54
S-AlHy-Cb_ts	−1901.89315	1457.03	1728.17	1634.57
R-Prod-A	−1901.91735	1468.55	1740.74	1646.06
R-Prod-C	−1901.91425	1463.68	1739.56	1644.11
S-Prod-A	−1901.91867	1466.96	1740.16	1645.26
S-Prod-C	−1901.91284	1463.73	1739.89	1644.89
ProR-C_ts	−1901.87419	1449.86	1716.00	1620.55
ProR-A_ts	−1901.86738	1443.73	1714.62	1617.31
<i>Fortsetzung auf der folgenden Seite</i>				

Fortsetzung der vorherigen Seite

Struktur	Total Energy [hartree]	ΔG	ΔH [kJ/mol]	Nullpunktskorrektur
ProS-C_ts	−1901.87874	1449.79	1715.47	1619.91
ProS-A_ts	−1901.86304	1451.09	1715.98	1621.01
H ₂	−1.17399	−8.40	32.19	25.99

Tabelle B.4: Total Energies, ΔG_{298} und ΔH Korrekturfaktoren sowie der Korrekturfaktor für die Nullpunktsenergie der von uns nachgerechneten Strukturen

B.2 Strukturen

Alle folgenden Strukturen sind in kartesischen Koordinaten in Å angegeben. Der Energiewert ist in hartree.

B.2.1 Strukturen der _01 Spezies

R1c_01

114

Energy = -3594.393445270

Rh	-0.002743	-0.006042	1.863164
C	0.284802	0.508621	3.902374
C	0.657615	-0.869541	3.841427
C	-0.341085	-1.967183	4.209917
C	-1.635129	-1.824155	3.456075
C	2.108799	-1.191235	4.016834
O	-2.635781	-2.562435	3.905077
O	-1.758589	-1.081159	2.451316
O	2.999827	-0.364615	4.171253
O	2.336753	-2.543051	4.019020
C	3.961991	2.543846	1.835349
C	3.716889	-2.918775	4.264691
C	2.416057	-3.590387	-0.419951
C	2.581033	-2.565432	0.494706
C	2.955407	-1.280825	0.031369
C	3.191264	-0.989997	-1.313143
C	3.005623	-1.814617	-3.688691
C	2.758152	-2.841892	-4.587054
C	2.437676	-4.146431	-4.127891
C	2.342570	-4.392781	-2.768178
C	2.571275	-3.355107	-1.816414
C	2.942764	-2.036617	-2.279987
O	3.137830	-0.269175	0.999225
O	2.564089	2.008175	1.984389
C	-1.549572	3.963465	-0.248094
C	3.823774	4.059347	1.768800
C	4.782577	2.052474	3.018940
C	-1.752841	5.105215	0.740632
C	-0.702384	4.337089	-1.458275
P	1.898220	0.836243	1.120524
C	-1.647342	-2.521948	-2.011822
C	-1.156332	-1.248214	-1.785912
C	-2.046439	-0.234407	-1.356215
C	-3.414967	-0.437170	-1.171300
C	-5.264827	-2.142133	-1.021972
C	-5.710953	-3.446899	-1.176003
C	-4.836719	-4.461335	-1.648337
C	-3.517051	-4.153588	-1.934199
C	-3.018611	-2.827269	-1.769849
C	-3.917346	-1.783015	-1.329043
O	-1.507973	1.047345	-1.114394
O	-0.832243	2.885772	0.500104
P	-1.268622	1.334074	0.511057
C	3.623701	0.379697	-1.704543
C	2.875312	1.484220	-1.290739
C	3.147288	2.805826	-1.720395
C	4.236968	3.041562	-2.538470
C	6.277542	2.226462	-3.693081
C	7.149348	1.199562	-4.013866
C	6.884100	-0.118453	-3.558764
C	5.746127	-0.397112	-2.816193
C	4.814164	0.631297	-2.485059
C	5.108219	1.979181	-2.916093
O	1.742715	1.309032	-0.468764
C	-4.281475	0.713242	-0.790524

C	-3.964857	1.494090	0.324647
C	-4.800366	2.536320	0.798330
C	-5.956675	2.847736	0.108563
C	-7.446150	2.526126	-1.849756
C	-7.744720	1.890101	-3.042923
C	-6.890187	0.866217	-3.527633
C	-5.770739	0.475918	-2.807959
C	-5.444392	1.091644	-1.562953
C	-6.295195	2.160705	-1.092491
O	-2.822176	1.224076	1.100125
C	-3.899951	-2.483721	3.172276
H	-0.710654	0.798358	4.264924
H	1.071276	1.255912	4.044060
H	3.715122	-4.015672	4.293537
H	4.363485	-2.548143	3.454821
H	4.059683	-2.501208	5.223001
H	2.145077	-4.594839	-0.078098
H	2.443756	-2.723881	1.567500
H	3.245417	-0.816207	-4.060720
H	2.808767	-2.642962	-5.661868
H	2.259373	-4.950445	-4.848191
H	2.083145	-5.391077	-2.399536
H	4.366090	2.147447	0.890760
H	-2.521307	3.559811	-0.575492
H	0.074724	-2.959882	3.962005
H	-0.551869	-1.994809	5.295580
H	4.822852	4.514117	1.659083
H	3.206858	4.368944	0.910937
H	3.367041	4.447420	2.694072
H	-0.976500	-3.313589	-2.360878
H	-0.104209	-0.997959	-1.945913
H	-5.950273	-1.372956	-0.658393
H	-6.748585	-3.695697	-0.932865
H	-5.205101	-5.483427	-1.777142
H	-2.827942	-4.929354	-2.284836
H	5.814975	2.430643	2.921260
H	4.362009	2.426120	3.966295
H	4.806056	0.954743	3.061055
H	-2.274427	5.940078	0.242920
H	-2.358147	4.782476	1.602563
H	-0.782184	5.473996	1.112164
H	-1.213300	5.124561	-2.038008
H	0.277229	4.728118	-1.136511
H	-0.546101	3.467499	-2.114593
H	2.478118	3.609308	-1.404276
H	4.453593	4.056308	-2.888139
H	6.479922	3.251786	-4.020664
H	8.047268	1.402918	-4.604745
H	7.588025	-0.923504	-3.790717
H	5.563767	-1.415658	-2.465451
H	-4.512840	3.067038	1.710058
H	-6.615829	3.644121	0.469681
H	-8.084768	3.332568	-1.473072
H	-8.627769	2.183027	-3.618629
H	-7.112816	0.382249	-4.483632
H	-5.118504	-0.305951	-3.203820
H	-4.573850	-3.156854	3.714181
H	-4.271822	-1.449467	3.187629
H	-3.753457	-2.814973	2.134696

R3c_01

114

Energy = -3594.392929583

```

Rh  0.210713 -1.810146  0.024737
C   1.580308 -1.877476  4.948843
C   0.487112 -1.936730  4.103094
C  -0.123261 -0.730496  3.683967
C   0.296963  0.530780  4.111478
C   2.108664  1.834346  5.284857
C   3.256707  1.860594  6.062541
C   3.848912  0.656087  6.524147
C   3.292483 -0.561808  6.171630
C   2.123161 -0.626327  5.358427
C   1.491863  0.598944  4.924067
H   2.052957 -2.801651  5.297392
H   0.074555 -2.892946  3.770119
O  -1.252549 -0.840432  2.833405
H   1.673069  2.771552  4.932091
H   3.712225  2.821756  6.319854
H   4.748717  0.692658  7.145461
H   3.749870 -1.500309  6.503152
O  -2.539369 -0.266246  0.717068
C  -3.634971  0.521759  1.365364
C   3.536184  1.209617 -1.431338
C  -4.284736  1.325243  0.245865
C  -4.579642 -0.453967  2.053591
H  -3.172369  1.194133  2.104653
C   3.990308  2.345100 -0.522930
C   4.646212  0.228746 -1.793571
H   3.059621  1.605591 -2.341833
H  -5.104845  1.937022  0.657973
H  -3.557041  1.997227 -0.235540
H  -4.703286  0.653559 -0.521795
H  -5.428557  0.101549  2.487325
P  -1.027591 -0.440267  1.232136
C  -0.718888 -2.370967 -5.029535
C   0.261703 -2.110889 -4.089494
C   0.523462 -0.772963 -3.706079
C  -0.135310  0.321526 -4.270341
C  -2.068816  1.080151 -5.696744
C  -3.104590  0.785912 -6.571145
C  -3.347039 -0.549672 -6.986301
C  -2.559525 -1.576455 -6.492935
C  -1.498223 -1.311894 -5.578365
C  -1.221350  0.051702 -5.186536
H  -0.919022 -3.398562 -5.351084
H   0.861000 -2.907864 -3.642653
O   1.543875 -0.565512 -2.759372
H  -1.902306  2.112601 -5.381663
H  -3.743701  1.593104 -6.941768
H  -4.161305 -0.765616 -7.684214
H  -2.747364 -2.614050 -6.789436
O   2.494601  0.456781 -0.664641
H  -4.976348 -1.186438  1.331229
H  -4.064986 -0.988225  2.865503
H   4.771230  2.934727 -1.032270
H   3.153157  3.017593 -0.279703
H   4.409929  1.947523  0.415746
H   5.446840  0.759243 -2.336771
H   5.081247 -0.215226 -0.882568
H   4.263377 -0.575237 -2.441095
O   1.618373 -3.137898 -0.927439
C   1.414227 -4.363130 -0.734298
P   1.090815 -0.107993 -1.216684

```

```

C  -0.448137  1.749019  3.690774
C  -0.693646  1.977259  2.336597
C  -1.283969  3.166508  1.841757
C  -1.695795  4.138016  2.735414
C  -2.064378  4.896318  5.069978
C  -1.989760  4.671336  6.434379
C  -1.425229  3.462881  6.919919
C  -0.920456  2.513170  6.043994
C  -0.958082  2.720799  4.632997
C  -1.571820  3.933848  4.140573
O  -0.280913  1.033761  1.372752
H  -1.396559  3.288048  0.761039
H  -2.143957  5.068219  2.370948
H  -2.516231  5.815032  4.680788
H  -2.376393  5.414566  7.137849
H  -1.391512  3.275253  7.997456
H  -0.496412  1.585543  6.434777
C   0.273945  1.704591 -3.896682
C   0.335834  2.070981 -2.551010
C   0.628387  3.386778 -2.116134
C   0.913636  4.360762 -3.055282
C   1.324609  5.024498 -5.410791
C   1.421440  4.699898 -6.753553
C   1.165204  3.369449 -7.177178
C   0.791072  2.393934 -6.265033
C   0.655912  2.697024 -4.877320
C   0.959602  4.042576 -4.443547
O   0.033364  1.127789 -1.547048
H   0.615176  3.602288 -1.044615
H   1.130447  5.386046 -2.738117
H   1.540272  6.041736 -5.066832
H   1.707709  5.460711 -7.485772
H   1.268806  3.108316 -8.234736
H   0.607552  1.373372 -6.607905
C   0.252313 -4.882997  0.057959
C  -0.781017 -3.806240  0.384071
C  -1.409512 -3.035274 -0.635817
C  -1.399491 -4.037152  1.726035
O   2.238313 -5.290494 -1.195666
O  -0.835994 -4.660059  2.628973
O  -2.655207 -3.539058  1.836636
C  -3.285302 -3.782227  3.120976
C   3.435777 -4.835773 -1.897089
H  -0.193889 -5.745450 -0.472535
H  -1.195104 -3.236538 -1.694559
H  -2.379568 -2.568504 -0.445962
H   0.644422 -5.285695  1.011566
H  -4.333331 -3.488175  2.986420
H  -3.205375 -4.845733  3.388715
H  -2.805235 -3.169762  3.899120
H   3.958767 -5.757009 -2.177885
H   3.153634 -4.254346 -2.786379
H   4.049800 -4.220942 -1.223628

```

R4c_01

114

Energy = -3594.389277607

```

Rh  -0.183750 -0.812650  0.521483
O   -1.836065 -1.594874  1.660700
C   -1.691559 -2.784568  2.034736
C   -0.463677 -3.578978  1.705993
C    0.724319 -2.680579  1.356995

```

C	1.076769	-1.543068	2.124090	H	0.517195	-1.272053	3.028781
C	1.721709	-3.444505	0.520976	H	2.100779	-1.163463	2.082610
O	-2.619706	-3.426552	2.722323	H	-0.693592	-4.208985	0.824969
O	1.403237	-4.149785	-0.431661	H	4.889725	-4.032966	0.904227
O	2.977061	-3.352283	1.020769	H	3.657215	-5.175629	0.227070
C	3.974231	-4.124912	0.306779	H	4.125593	-3.710382	-0.701272
C	-1.478674	3.808922	-0.034291	H	-2.950887	-3.096279	-2.953530
C	-3.326383	-2.279385	-2.328898	H	-1.644737	-0.957975	-2.713332
C	-2.601269	-1.106669	-2.205448	H	-6.646771	-0.835131	0.597852
C	-3.121982	-0.059827	-1.405775	H	-7.838231	-2.994599	0.444444
C	-4.341192	-0.133081	-0.732016	H	-6.986783	-4.818621	-1.052371
C	-6.258641	-1.622842	-0.051675	H	-4.884306	-4.477343	-2.347980
C	-6.926698	-2.836402	-0.140137	H	-2.557640	3.604378	0.059168
C	-6.443082	-3.871855	-0.983248	H	2.774680	0.740170	-3.095266
C	-5.277736	-3.680977	-1.707102	H	-1.522629	5.687462	1.033213
C	-4.556041	-2.452680	-1.628804	H	-1.242190	4.268762	2.082752
C	-5.069000	-1.380217	-0.803733	H	0.074974	4.887794	1.036078
O	-2.347222	1.116164	-1.275815	H	2.861680	2.691005	3.861981
O	-0.749690	2.510622	0.134530	H	1.478872	2.542915	1.760996
C	1.715093	0.750915	-3.394389	H	6.693743	-0.349777	1.138059
C	-1.011884	4.712255	1.100712	H	7.960569	-0.317339	3.256507
C	-1.164573	4.346976	-1.423883	H	7.084639	0.928584	5.248939
C	1.489415	-0.166974	-4.589236	H	4.883668	2.091967	5.112386
C	1.240955	2.181189	-3.614945	H	-1.684689	5.309014	-1.571495
P	-1.470716	1.067278	0.141561	H	-0.081799	4.518133	-1.539447
C	3.243140	2.173377	2.975586	H	-1.504033	3.647148	-2.202352
C	2.476968	2.103618	1.825895	H	2.067930	0.202208	-5.452805
C	3.002244	1.444357	0.688767	H	1.814238	-1.196117	-4.368965
C	4.277440	0.876819	0.648426	H	0.423590	-0.184969	-4.871677
C	6.298559	0.198873	1.995606	H	1.799704	2.629859	-4.454170
C	7.007944	0.216617	3.187390	H	0.167079	2.199180	-3.864006
C	6.509999	0.915616	4.318160	H	1.412456	2.792282	-2.716337
C	5.289511	1.565504	4.241812	H	-3.715615	2.993012	2.678196
C	4.525172	1.553472	3.037895	H	-6.009085	3.973764	2.421485
C	5.049794	0.878541	1.871554	H	-8.124430	4.125145	1.179999
O	2.193403	1.402958	-0.466669	H	-9.596955	3.386205	-0.692400
O	0.918281	0.169575	-2.266480	H	-8.814920	1.587951	-2.255019
P	1.440815	-0.050275	-0.754673	H	-6.625550	0.499683	-1.925223
C	-4.805084	1.037313	0.064691	H	3.796799	-2.180838	-2.842090
C	-3.974446	1.601668	1.038431	H	6.041182	-1.649781	-3.836907
C	-4.401003	2.642042	1.901966	H	8.057885	-0.251041	-3.890027
C	-5.666500	3.176949	1.753058	H	9.414832	1.632121	-2.979135
C	-7.807366	3.322223	0.505821	H	8.580172	2.924389	-0.999327
C	-8.622650	2.913836	-0.536313	H	6.457721	2.309554	0.100246
C	-8.181744	1.890834	-1.415384	H	-4.440007	-3.390997	3.632095
C	-6.952422	1.275975	-1.229218	H	-3.627979	-1.773028	3.549523
C	-6.095691	1.653707	-0.152332	H	-4.382016	-2.477116	2.069503
C	-6.531477	2.722660	0.716309				
O	-2.680670	1.105654	1.282590	S2c_01			
C	4.769044	0.261015	-0.616243	114			
C	3.997257	-0.703153	-1.269080	Energy = -3594.390818342			
C	4.442309	-1.408062	-2.415437	Rh	0.214949	-2.117004	0.498673
C	5.677463	-1.106049	-2.958738	C	1.655957	-3.794963	0.945807
C	7.718101	0.304458	-3.009217	C	0.917392	-3.970384	-0.264014
C	8.469113	1.352977	-2.505311	O	-0.821494	-4.969422	3.423815
C	7.999259	2.078609	-1.379888	C	-0.268354	-4.177374	2.519170
C	6.807889	1.733198	-0.759325	C	3.128883	-3.542371	0.826295
C	6.019672	0.643441	-1.234959	O	-0.912097	-3.255110	1.957646
C	6.479866	-0.065591	-2.407462	O	3.753484	-3.518039	-0.229982
O	2.738991	-1.081718	-0.758372	O	3.705675	-3.379000	2.050365
C	-3.857616	-2.702439	3.009388	C	1.186572	-4.439441	2.249670
H	-0.229154	-4.274234	2.532981	C	-2.218961	-4.725179	3.768131

H	-2.471674	-5.517925	4.481362	H	3.891207	-2.149142	-3.493310
H	-2.319646	-3.733079	4.231599	H	2.497479	-2.598025	-4.525505
C	-3.742467	-2.859402	-1.691560	H	1.538158	0.350106	-5.197714
H	0.024001	-4.608218	-0.289886	H	0.471858	-0.987054	-4.676870
H	1.446194	-3.876050	-1.217112	H	0.510259	0.551767	-3.748692
C	5.136556	-3.156642	2.029895	P	1.492764	-0.858643	-0.796055
H	5.440167	-3.136195	3.084163	C	-3.917676	1.103160	-0.793578
H	5.362865	-2.196658	1.542122	C	-3.022686	0.538310	-1.706785
H	5.642917	-3.971290	1.490455	C	-3.242687	0.532254	-3.105633
C	-2.941777	1.178126	3.443422	C	-4.418540	1.058555	-3.607712
C	-2.855471	0.007272	2.713204	C	-6.669468	2.036921	-3.238295
C	-3.152119	0.028969	1.329199	C	-7.664357	2.478067	-2.382041
C	-3.558492	1.181296	0.651316	C	-7.450106	2.449699	-0.979121
C	-3.810721	3.687409	0.770692	C	-6.243229	2.011757	-0.454202
C	-3.807220	4.860845	1.510244	C	-5.185972	1.573085	-1.306366
C	-3.566304	4.836597	2.909530	C	-5.423878	1.561972	-2.732363
C	-3.300797	3.632029	3.540754	O	-1.797527	0.000794	-1.259307
C	-3.276534	2.408500	2.807303	H	-2.467011	0.123752	-3.758075
C	-3.568815	2.424251	1.390846	H	-4.597886	1.074981	-4.687737
H	-2.729063	1.176773	4.517364	H	-6.828481	2.033322	-4.322011
H	-2.575370	-0.943591	3.173180	H	-8.618096	2.834720	-2.781960
O	-3.080787	-1.192080	0.636214	H	-8.247119	2.772969	-0.302592
H	-3.991206	3.726559	-0.305616	H	-6.100355	1.988354	0.628520
H	-3.990048	5.815775	1.008210	C	3.833934	1.485541	-0.464947
H	-3.581497	5.768343	3.482753	C	3.956205	0.099585	-0.566535
H	-3.095517	3.599851	4.616093	C	5.075320	-0.553716	-1.136877
O	-2.321619	-2.627976	-1.282211	C	6.092396	0.215130	-1.673811
C	2.251472	-0.719336	-3.462718	C	7.006681	2.429943	-2.322530
C	-3.697704	-3.276486	-3.155937	C	6.887470	3.807812	-2.393697
C	-4.328383	-3.921182	-0.767238	C	5.742587	4.445834	-1.848662
H	-4.284148	-1.907922	-1.574475	C	4.751430	3.707603	-1.219441
C	3.114371	-1.756952	-4.167578	C	4.851685	2.288849	-1.105744
C	1.117811	-0.167762	-4.318635	C	5.998280	1.637459	-1.699372
H	2.871899	0.100448	-3.068339	O	2.949289	-0.731961	-0.025315
H	1.754830	-4.023163	3.101550	H	5.102890	-1.646581	-1.121079
H	1.371906	-5.529908	2.270305	H	6.974616	-0.265734	-2.109428
H	-4.722160	-3.472674	-3.515020	H	7.875463	1.923061	-2.756430
H	-3.259585	-2.482666	-3.780702	H	7.665651	4.404177	-2.879246
H	-3.103244	-4.196542	-3.281624	H	5.637541	5.532045	-1.929690
P	-1.765889	-1.408198	-0.376908	H	3.872700	4.213461	-0.812824
C	0.367541	3.211303	1.508023	H	-2.843584	-4.787108	2.866004
C	0.218724	2.252683	0.522550				
C	1.371189	1.685792	-0.070429	S4c_01			
C	2.672684	2.071109	0.260380	114			
C	4.111172	3.352545	1.886526	Energy = -3594.391165383			
C	4.228823	4.253812	2.934257	Rh	-1.014060	-0.085734	0.802537
C	3.078556	4.862140	3.501161	C	2.316683	-3.511875	2.550321
C	1.821374	4.531583	3.024151	C	2.124028	-2.637917	1.495403
C	1.662316	3.595223	1.960721	C	1.384791	-3.068104	0.367353
C	2.833995	3.008786	1.350165	C	0.860929	-4.356433	0.240402
H	-0.515738	3.669919	1.963941	C	0.354260	-6.523735	1.425209
H	-0.765038	1.930532	0.175869	C	0.490848	-7.347385	2.533164
O	1.156019	0.736793	-1.094743	C	1.267259	-6.939844	3.649524
H	5.007347	2.888317	1.469534	C	1.874104	-5.694862	3.646792
H	5.220181	4.494550	3.330154	C	1.740408	-4.815350	2.532015
H	3.187739	5.578675	4.320753	C	0.985793	-5.244486	1.375696
H	0.922484	4.975599	3.465262	H	2.899015	-3.201665	3.424321
O	1.635305	-1.424865	-2.292194	H	2.522556	-1.620578	1.501788
H	-5.371898	-4.131367	-1.058208	O	1.231055	-2.148466	-0.688886
H	-3.754001	-4.859978	-0.842275	H	-0.252217	-6.851512	0.578183
H	-4.324514	-3.575037	0.277711	H	-0.008465	-8.321059	2.546515
H	3.608494	-1.293997	-5.038332	H	1.374070	-7.603492	4.512554

H	2.459871	-5.358832	4.509020	C	0.765684	4.029160	1.007831
O	-0.125509	-0.913085	-2.395442	C	1.477704	4.505520	2.135266
C	0.606043	-1.593129	-3.514387	C	2.214026	5.670875	2.013630
C	3.297518	1.773645	0.604465	C	3.120433	7.511088	0.613527
C	-0.301670	-1.503874	-4.734951	C	3.236660	8.146443	-0.611592
C	1.946983	-0.891077	-3.691216	C	2.534290	7.642612	-1.737938
H	0.757154	-2.643595	-3.221764	C	1.709422	6.533683	-1.621016
C	4.099711	1.772522	1.898485	C	1.549511	5.865836	-0.370297
C	3.987861	1.068014	-0.555077	C	2.296952	6.356790	0.766229
H	3.020568	2.800661	0.321346	O	0.034320	2.833395	1.181763
H	0.182680	-2.004694	-5.589999	H	1.407275	3.943957	3.070777
H	-1.268154	-1.998443	-4.549679	H	2.762728	6.067380	2.874326
H	-0.485690	-0.452641	-5.012484	H	3.670577	7.879184	1.486153
H	2.495375	-1.349810	-4.531589	H	3.876419	9.027556	-0.716881
P	-0.274283	-1.454561	-0.878230	H	2.647235	8.131848	-2.710180
C	-1.885477	3.117201	-3.319322	H	1.180011	6.154012	-2.498113
C	-0.956031	2.307357	-2.692215	C	-1.504300	0.344237	2.969120
C	-0.135678	2.856095	-1.678719	C	-0.435049	-0.581717	2.791527
C	-0.196950	4.193842	-1.282254	O	-4.440373	-1.847964	2.472546
C	-1.480018	6.359101	-1.451058	C	-3.352769	-1.158398	2.172317
C	-2.472640	7.123378	-2.046261	C	-1.157994	1.685344	3.547962
C	-3.258907	6.596920	-3.104031	O	-2.740588	-1.325412	1.088185
C	-3.053871	5.295160	-3.528671	O	-0.042329	2.011973	3.939936
C	-2.053788	4.475878	-2.927493	O	-2.253891	2.491056	3.622270
C	-1.219475	5.023618	-1.882039	C	-2.935351	-0.140356	3.196377
H	-2.520414	2.712704	-4.114710	C	-4.920287	-2.801224	1.473306
H	-0.829560	1.254552	-2.952187	H	-5.780919	-3.287325	1.946425
O	0.822300	1.992832	-1.096212	H	-5.220931	-2.261615	0.563504
H	-0.893226	6.780507	-0.632463	H	-0.605711	-1.663937	2.860993
H	-2.653890	8.142688	-1.691916	H	0.577658	-0.256906	3.047051
H	-4.032821	7.214221	-3.569882	C	-2.015966	3.797813	4.200698
H	-3.667871	4.866558	-4.328176	H	-3.000753	4.280317	4.236289
O	2.027531	1.031243	0.907942	H	-1.324056	4.372123	3.566706
H	1.800021	0.178496	-3.917050	H	-1.590492	3.696989	5.210882
H	2.561443	-0.986307	-2.783607	H	-4.128636	-3.526088	1.238471
H	5.044191	2.321682	1.745885				
H	3.541775	2.261132	2.711845	S1a_01			
H	4.347027	0.742210	2.204821	114			
H	4.939040	1.579305	-0.782777	Energy = -3594.389366744			
H	4.214150	0.020074	-0.296209	Rh	-0.030507	1.109419	1.234028
H	3.360261	1.088496	-1.458724	O	-1.795168	0.669178	2.386372
H	-3.080420	-0.557925	4.210442	C	-2.211000	1.661379	3.031534
H	-3.637744	0.708790	3.117313	C	-1.524684	2.996291	2.945642
P	0.541965	1.443074	0.447178	C	-0.044104	2.816297	2.591819
C	0.169687	-4.758188	-1.017281	C	0.743630	1.784714	3.166013
C	-0.878984	-3.982331	-1.516216	C	0.666310	4.044917	2.075597
C	-1.659722	-4.361434	-2.635210	O	-3.284079	1.609499	3.800506
C	-1.346664	-5.523184	-3.316039	O	1.867704	4.246708	2.191229
C	0.149873	-7.469351	-3.675156	O	-0.204969	4.918075	1.504830
C	1.269049	-8.207046	-3.327916	C	3.748737	3.047011	-0.875592
C	2.061690	-7.805964	-2.221152	C	0.397232	6.138945	1.005611
C	1.714789	-6.696581	-1.464797	C	3.348663	-2.131441	3.219275
C	0.555945	-5.925521	-1.778299	C	3.221302	-0.820096	2.798229
C	-0.226069	-6.313757	-2.930142	C	3.393644	-0.509811	1.427166
O	-1.259978	-2.794312	-0.862035	C	3.746837	-1.464775	0.470766
H	-2.502891	-3.729752	-2.927653	C	3.984735	-3.922297	-0.031540
H	-1.947695	-5.837053	-4.175991	C	4.020218	-5.238987	0.403323
H	-0.460272	-7.755243	-4.538782	C	3.873844	-5.553095	1.780036
H	1.551084	-9.088827	-3.911048	C	3.666534	-4.538068	2.698853
H	2.960377	-8.375116	-1.964064	C	3.605775	-3.175000	2.284437
H	2.342868	-6.397651	-0.622204	C	3.795372	-2.848251	0.889075
C	0.709159	4.699913	-0.214819	O	3.265720	0.842824	1.048702

O	2.363056	2.688962	-0.412794	H	-6.848945	-3.344240	2.252461
C	-1.477901	1.732741	-3.299763	H	-5.337564	-5.089041	3.233533
C	3.557439	3.853061	-2.153296	H	-2.934410	-5.158504	2.574815
C	4.447767	3.809931	0.240320	H	5.446729	4.124335	-0.107995
C	-1.759274	3.186619	-3.659438	H	3.871265	4.703825	0.524023
C	-0.550360	1.023504	-4.279211	H	4.571726	3.180015	1.132978
P	1.906884	1.273873	0.183280	H	-2.252328	3.237360	-4.644848
C	-1.692175	-3.493909	0.857501	H	-2.421324	3.658814	-2.916497
C	-1.169601	-2.548200	-0.006389	H	-0.820156	3.762090	-3.709669
C	-2.038844	-1.594950	-0.589576	H	-1.025032	0.979768	-5.274374
C	-3.416618	-1.571320	-0.367429	H	0.400434	1.574300	-4.377002
C	-5.319037	-2.479920	1.013395	H	-0.341236	-0.005270	-3.948123
C	-5.798764	-3.387066	1.947315	H	2.451974	0.617306	-3.492470
C	-4.943217	-4.371779	2.507482	H	4.542723	-0.046164	-4.718802
C	-3.608855	-4.413524	2.138710	H	6.789660	-1.032727	-4.695148
C	-3.076771	-3.485263	1.195978	H	8.647775	-2.165081	-3.478161
C	-3.954753	-2.507197	0.592881	H	8.385177	-2.727148	-1.048756
O	-1.470815	-0.632959	-1.449538	H	6.279944	-2.226415	0.137557
O	-0.805855	1.751234	-1.964962	H	-4.478670	2.844687	-1.447213
P	-1.250046	0.845131	-0.704777	H	-6.542122	2.208320	-2.724132
C	4.035503	-1.042461	-0.927999	H	-7.979329	0.473791	-3.702707
C	3.101443	-0.282727	-1.633695	H	-8.507306	-1.929386	-4.109843
C	3.257271	0.070962	-2.995731	H	-7.020285	-3.709123	-3.156057
C	4.410698	-0.299818	-3.661789	H	-5.070754	-3.108233	-1.767435
C	6.678198	-1.307298	-3.640605	H	0.945563	6.650478	1.810884
C	7.710946	-1.932977	-2.962993	H	1.088354	5.905212	0.181967
C	7.558146	-2.257402	-1.589795	H	-4.871687	0.531504	4.483899
C	6.374741	-1.979249	-0.922250	H	-4.291249	0.022178	2.842545
C	5.280454	-1.356860	-1.593710	H	-3.349126	-0.431291	4.308541
C	5.454621	-0.990596	-2.981176				
O	1.897592	0.115396	-1.012275	R2c_01			
C	-4.258376	-0.571096	-1.083425	114			
C	-3.943214	0.789667	-1.017974	Energy = -3594.387967518			
C	-4.761299	1.797946	-1.587198	Rh	0.044346	-1.987435	0.348865
C	-5.895981	1.438447	-2.289902	C	0.859393	-1.346068	2.229297
C	-7.353881	-0.314485	-3.270352	C	1.486486	-2.594566	1.975659
C	-7.644038	-1.649166	-3.499119	C	0.946665	-3.903850	2.553890
C	-6.805580	-2.655617	-2.952501	C	-0.525073	-4.077566	2.312102
C	-5.711257	-2.319735	-2.169068	C	2.967908	-2.587081	1.705479
C	-5.394744	-0.956071	-1.891968	O	-1.100863	-5.035224	3.022104
C	-6.227689	0.066411	-2.483564	O	-1.162218	-3.394344	1.472849
O	-2.822918	1.240677	-0.295364	O	3.710223	-1.634443	1.894962
C	-3.996995	0.332270	3.854664	O	3.397115	-3.808918	1.269084
H	-2.031413	3.577835	2.154552	C	1.559194	-0.556864	-3.747419
H	0.323699	1.112607	3.923784	C	4.825347	-3.898169	1.044667
H	1.825019	1.939062	3.201821	C	1.220033	2.805872	2.055274
H	-1.649691	3.565520	3.884855	C	0.780377	2.140889	0.924974
H	3.237000	-2.382230	4.279273	C	1.734213	1.548850	0.063549
H	3.015792	-0.011420	3.502717	C	3.112863	1.627236	0.265055
H	4.093494	-3.699602	-1.095484	C	4.939788	2.227860	1.892920
H	4.160912	-6.044143	-0.324367	C	5.343010	2.824173	3.078081
H	3.915391	-6.595483	2.109425	C	4.401740	3.466741	3.924449
H	3.535816	-4.766773	3.762003	C	3.060138	3.472131	3.582035
H	4.275981	2.104140	-1.091089	C	2.607233	2.851580	2.380731
H	-2.420653	1.171467	-3.198045	C	3.570625	2.239562	1.492928
H	-0.441718	6.749839	0.650021	O	1.240028	0.882800	-1.080969
H	4.543211	4.138712	-2.557406	O	0.917860	-1.155565	-2.536862
H	3.025721	3.266717	-2.918885	C	-3.850001	-2.470435	-2.258027
H	2.986814	4.775168	-1.952244	C	1.975008	-1.724072	-4.633866
H	-1.039513	-4.248866	1.307962	C	0.544863	0.379105	-4.392874
H	-0.107467	-2.523191	-0.264426	C	-3.754787	-2.638042	-3.768855
H	-5.992050	-1.731078	0.588671	C	-4.487521	-3.657805	-1.545678

P	1.283703	-0.771028	-1.012243	H	-0.350953	-0.183389	-4.706755
C	-3.087019	0.582249	3.557898	H	0.247473	1.175714	-3.693898
C	-3.024156	-0.439251	2.627981	H	-4.766906	-2.752216	-4.192651
C	-3.263945	-0.152882	1.262298	H	-3.282894	-1.759582	-4.235673
C	-3.609384	1.118588	0.799433	H	-3.167499	-3.535620	-4.024283
C	-3.770777	3.568660	1.366514	H	-5.521277	-3.794918	-1.906611
C	-3.742987	4.588156	2.306678	H	-3.923026	-4.581991	-1.754610
C	-3.538187	4.302072	3.681873	H	-4.520073	-3.490914	-0.458169
C	-3.337430	2.993780	4.089865	H	4.695228	-1.884340	-2.382877
C	-3.342585	1.922951	3.148280	H	6.623164	-0.550863	-3.280194
C	-3.591452	2.206389	1.752470	H	7.788001	1.596139	-3.507669
O	-3.205582	-1.231181	0.360185	H	7.977935	4.027433	-2.984488
O	-2.442478	-2.343156	-1.764375	H	6.293794	5.108653	-1.472382
P	-1.887188	-1.303092	-0.664069	H	4.491140	3.777941	-0.443197
C	4.047071	1.080795	-0.758507	H	-2.497872	0.815523	-3.718212
C	3.917079	-0.231157	-1.219483	H	-4.590383	1.976333	-4.481725
C	4.839160	-0.835456	-2.109838	H	-6.794871	2.925473	-3.968498
C	5.895626	-0.092876	-2.602144	H	-8.576363	3.505387	-2.323098
C	7.076519	2.076584	-2.827387	H	-8.230841	3.013860	0.111344
C	7.178884	3.427121	-2.539519	H	-6.117414	2.016585	0.905301
C	6.229831	4.035690	-1.677613	H	-2.763937	-6.133986	3.434535
C	5.216903	3.288102	-1.095437	H	-3.114811	-4.418723	2.975365
C	5.095228	1.888681	-1.346986	H	-2.640190	-5.606780	1.706364
C	6.036648	1.282790	-2.260888				
O	2.885303	-1.070508	-0.755119	R4a_01			
C	-3.948933	1.315889	-0.638151	114			
C	-3.062712	0.888310	-1.629196	Energy = -3594.388912880			
C	-3.267871	1.129169	-3.009296	Rh	0.155187	0.646436	-0.732227
C	-4.422307	1.770292	-3.419556	C	0.112182	2.798069	-1.233192
C	-6.646742	2.739742	-2.899281	C	1.189863	2.176811	-1.907766
C	-7.637028	3.058066	-1.985146	O	-2.484501	1.988538	-3.684198
C	-7.437090	2.785958	-0.606520	C	-1.642754	1.785453	-2.685642
C	-6.249022	2.227997	-0.158184	C	0.287663	3.740449	-0.066604
C	-5.197084	1.907780	-1.067810	O	-1.212235	0.642477	-2.392771
C	-5.420310	2.148850	-2.475561	O	-0.656426	4.240496	0.539167
O	-1.860592	0.240640	-1.273223	O	1.585004	4.022947	0.190622
C	-2.510423	-5.310681	2.757111	C	-1.250943	2.998652	-1.898835
H	-0.028318	-1.270972	2.870648	C	-2.937267	0.807407	-4.417756
H	1.465547	-0.437634	2.169509	H	-3.662259	1.193992	-5.142835
H	5.000704	-4.926602	0.704164	H	-2.082513	0.336862	-4.924525
H	5.135879	-3.170642	0.279984	C	2.288883	0.713583	3.485266
H	5.372478	-3.695784	1.978288	H	1.081487	1.862918	-2.953318
H	0.499638	3.286030	2.725359	H	2.212055	2.345426	-1.564053
H	-0.279499	2.064414	0.670753	C	1.791333	4.974342	1.264622
H	5.674429	1.725276	1.260660	H	2.878032	5.115473	1.316799
H	6.398194	2.793176	3.366151	H	1.285753	5.924099	1.033024
H	4.736535	3.942245	4.851224	H	1.395472	4.576334	2.211148
H	2.319668	3.944621	4.236484	C	2.665419	-2.833500	-2.265230
H	2.443778	0.010657	-3.416384	C	2.169504	-2.381488	-1.054359
H	-4.378906	-1.538647	-2.002320	C	2.950053	-1.483909	-0.286135
H	1.458369	-4.759781	2.077520	C	4.219824	-1.047936	-0.664968
H	1.153232	-3.996395	3.637088	C	5.921908	-0.955466	-2.521783
H	2.447538	-1.341664	-5.554361	C	6.354225	-1.363607	-3.775120
H	2.697405	-2.376861	-4.119007	C	5.600028	-2.295494	-4.535310
H	1.096895	-2.327245	-4.918311	C	4.404814	-2.784231	-4.034935
H	-2.921919	0.374490	4.620357	C	3.920663	-2.372697	-2.758080
H	-2.810472	-1.471948	2.914824	C	4.708562	-1.456828	-1.963103
H	-3.922349	3.807916	0.311704	H	2.086413	-3.540602	-2.868435
H	-3.877492	5.624604	1.982812	H	1.207149	-2.713397	-0.657523
H	-3.529264	5.115454	4.413476	O	2.406772	-1.024564	0.937697
H	-3.161336	2.760381	5.145605	H	6.511335	-0.232633	-1.953691
H	0.989193	0.846436	-5.288164	H	7.285742	-0.959494	-4.182669

H	5.958093	-2.615248	-5.518291	C	-3.582219	-1.985628	-0.393862
H	3.803321	-3.489148	-4.618899	C	-3.731502	-3.349827	-0.747862
O	1.356876	0.838746	2.319108	C	-4.904212	-4.008937	-0.429748
C	-1.416943	-3.020640	2.026971	C	-7.119760	-4.038368	0.688687
C	2.098838	1.977270	4.315041	C	-8.103523	-3.402325	1.427089
C	1.950333	-0.568936	4.233863	C	-7.936240	-2.043329	1.800755
H	3.316376	0.666075	3.090464	C	-6.810621	-1.333408	1.410256
C	-0.882008	-4.401296	1.668353	C	-5.787391	-1.948502	0.628645
C	-1.225000	-2.647491	3.491064	C	-5.941558	-3.344085	0.286075
H	-2.479170	-2.934852	1.750189	O	-2.363893	-1.379909	-0.757008
H	-2.012976	3.160204	-1.111310	H	-2.913740	-3.848913	-1.274507
H	-1.260309	3.902813	-2.534964	H	-5.038788	-5.059610	-0.707369
H	2.748121	1.937645	5.205658	H	-7.225706	-5.092605	0.410724
H	2.361980	2.876831	3.736055	H	-9.000841	-3.947033	1.735255
H	1.052909	2.066905	4.652009	H	-8.701537	-1.550237	2.407870
P	1.748046	0.494675	0.794381	H	-6.694646	-0.290729	1.714794
C	-4.029098	3.007663	0.944430	H	-3.405149	0.096296	-3.723074
C	-3.086027	2.082805	1.357636				
C	-3.295603	0.711858	1.076404	Slc_01			
C	-4.426763	0.226697	0.415563	114			
C	-6.485963	0.834716	-0.909137	Energy = -3594.389323350			
C	-7.371449	1.793271	-1.379364	Rh	-0.122167	-0.050105	2.170518
C	-7.196926	3.164403	-1.055127	C	0.383141	-1.856300	3.437121
C	-6.115714	3.555296	-0.283171	C	-0.012014	-2.175717	2.104460
C	-5.175456	2.598905	0.202493	O	-2.872873	-1.286043	5.110185
C	-5.374083	1.196493	-0.089760	C	-1.849411	-1.085308	4.296058
H	-3.883960	4.070284	1.163285	C	1.816310	-2.050264	3.831335
H	-2.184165	2.385168	1.893828	O	-1.888198	-0.229400	3.379346
O	-2.319630	-0.196723	1.532284	O	2.712176	-2.452689	3.094693
H	-6.634973	-0.214714	-1.172114	O	2.014257	-1.764626	5.151552
H	-8.213490	1.488007	-2.008136	C	-0.633533	-1.917818	4.578191
H	-7.909567	3.908237	-1.423496	C	-4.055478	-0.451298	4.907807
H	-5.958153	4.611467	-0.039284	H	-4.786563	-0.827016	5.632614
O	-0.647392	-2.047715	1.184983	H	-3.803650	0.600080	5.108897
H	2.624409	-0.676410	5.100764	C	3.995779	1.812653	2.219802
H	0.912217	-0.540132	4.602891	H	-0.940799	-2.956529	4.803491
H	2.078717	-1.447078	3.582749	H	-1.038601	-2.506010	1.989591
H	-1.403920	-5.166648	2.266914	H	0.735927	-2.543724	1.397622
H	-1.045562	-4.627961	0.602855	C	3.352278	-2.025626	5.641990
H	0.197162	-4.469363	1.885274	H	3.308737	-1.817865	6.718536
H	-1.794016	-3.349519	4.124577	H	4.077703	-1.363830	5.146398
H	-0.161828	-2.711701	3.772925	C	2.839637	-3.605772	-1.254307
H	-1.591197	-1.628636	3.688584	C	2.868817	-2.783669	-0.142880
P	-1.282585	-0.803531	0.374098	C	3.001547	-1.385218	-0.322844
C	4.986662	-0.156178	0.248195	C	3.193528	-0.788081	-1.571827
C	4.405809	1.018682	0.732334	C	3.054295	-1.109761	-4.067147
C	5.114908	1.961372	1.517998	C	2.920543	-1.946705	-5.165146
C	6.422598	1.699655	1.880994	C	2.797478	-3.350646	-4.996767
C	8.370925	0.163956	1.943149	C	2.782553	-3.891876	-3.721777
C	8.956427	-1.050003	1.625303	C	2.897430	-3.059044	-2.569577
C	8.230970	-2.003956	0.865161	C	3.064999	-1.633048	-2.739542
C	6.949815	-1.725249	0.412540	O	3.037855	-0.599464	0.845040
C	6.323351	-0.476293	0.700038	O	2.542386	1.445778	2.218038
C	7.049168	0.475558	1.509563	C	-1.779449	3.820654	-0.125755
O	3.091275	1.382122	0.378284	C	4.049326	3.299393	2.544940
H	4.610708	2.885963	1.810812	C	4.704498	0.930500	3.240048
H	6.985207	2.426061	2.476411	C	-2.310777	4.907796	0.799524
H	8.910943	0.902007	2.546044	C	-0.745015	4.317798	-1.127219
H	9.969273	-1.281038	1.968166	P	1.802233	0.447947	1.188651
H	8.684651	-2.973323	0.637026	C	-1.249602	-2.492120	-2.245527
H	6.403782	-2.475811	-0.163284	C	-0.837012	-1.248569	-1.802839
C	-4.597641	-1.239778	0.210721	C	-1.807602	-0.313695	-1.371787

C	-3.181073	-0.561901	-1.404011	H	6.207742	4.131025	-3.257994
C	-4.972091	-2.311836	-1.695053	H	7.865799	2.548843	-4.241160
C	-5.348083	-3.595534	-2.062058	H	7.541506	0.077391	-3.965744
C	-4.386494	-4.525614	-2.537095	H	5.561436	-0.808090	-2.793004
H	3.629500	-3.073681	5.453941	H	-4.781447	2.581477	1.648325
H	-0.183776	-1.530537	5.509013	H	-6.740379	3.221068	0.214859
C	-3.052948	-4.159151	-2.608738	H	-7.940309	3.074969	-1.921369
C	-2.627777	-2.853949	-2.222126	H	-8.158815	2.149780	-4.226539
C	-3.611136	-1.890350	-1.780144	H	-6.465934	0.505371	-5.073548
O	-1.342093	0.947637	-0.942826	H	-4.618413	-0.256491	-3.624859
O	-1.117883	2.806862	0.754993	H	-4.418783	-0.562205	3.876563
P	-1.354756	1.211437	0.696932				
C	3.520800	0.661340	-1.665611	R2a_01			
C	2.719124	1.606653	-1.024167	114			
C	2.928920	3.003036	-1.125805	Energy =	-3594.387963254		
C	3.999740	3.473573	-1.862763	Rh	0.169552	-1.738851	1.037371
C	6.063612	3.048722	-3.171347	C	1.011514	-3.693958	1.558349
C	6.986057	2.169538	-3.713004	C	1.767214	-2.684034	2.203883
C	6.796932	0.770979	-3.563496	O	-1.656305	-4.007183	4.057141
C	5.681931	0.271076	-2.907104	C	-0.989855	-3.480583	3.042717
C	4.695212	1.145426	-2.360877	C	1.492276	-4.494236	0.371448
C	4.916038	2.569753	-2.473758	O	-1.096683	-2.270040	2.722044
O	1.593730	1.191555	-0.280273	O	0.808996	-5.364219	-0.160622
C	-4.137039	0.517828	-1.030486	O	2.757914	-4.191333	0.002562
C	-3.996373	1.185617	0.188297	C	-0.121487	-4.429841	2.276581
C	-4.929453	2.143893	0.657289	C	1.930171	-1.081300	-3.270799
C	-6.005362	2.490472	-0.138436	C	-2.561527	-3.127987	4.792110
C	-7.223415	2.335584	-2.294499	C	1.037765	3.089846	1.778528
C	-7.341715	1.824337	-3.575917	C	0.712728	2.181552	0.786834
C	-6.386999	0.888056	-4.051393	C	1.753947	1.521147	0.093489
C	-5.349693	0.456506	-3.238056	C	3.108631	1.763194	0.325280
C	-5.209910	0.942017	-1.903637	C	4.795974	2.843536	1.854690
C	-6.159967	1.926709	-1.437650	C	5.086832	3.693096	2.911764
O	-2.941083	0.867982	1.064740	C	4.052425	4.393557	3.585820
H	2.757196	-4.691042	-1.133127	C	2.734316	4.206748	3.204584
H	2.827658	-3.167992	0.879695	C	2.396753	3.326029	2.135045
H	3.140415	-0.030742	-4.215122	C	3.451961	2.646077	1.417758
H	2.906331	-1.518061	-6.171859	O	1.378471	0.611025	-0.919649
H	2.704583	-3.999533	-5.872620	O	1.392509	-1.669285	-2.000274
H	2.674854	-4.972265	-3.575915	C	-3.747619	-2.840069	-1.230470
H	4.384435	1.620331	1.207338	C	2.642221	-2.210436	-4.003880
H	-2.607393	3.319216	-0.650859	C	0.753232	-0.495950	-4.041685
H	5.100828	3.631487	2.573796	C	-3.620418	-3.561528	-2.566123
H	3.520684	3.891645	1.781954	C	-4.471373	-3.650316	-0.161043
H	3.595088	3.499589	3.529597	P	1.526010	-0.998603	-0.541668
H	-0.512463	-3.217310	-2.604384	C	-2.792062	2.090904	3.095570
H	0.216194	-0.958896	-1.795450	C	-2.786970	0.798595	2.603459
H	-5.724371	-1.611198	-1.326276	C	-3.077480	0.577105	1.235570
H	-6.397790	-3.894137	-1.982349	C	-3.393816	1.605958	0.344503
H	-4.699358	-5.531289	-2.833120	C	-3.474099	4.099319	-0.017822
H	-2.296965	-4.872513	-2.954324	C	-3.396036	5.388612	0.486851
H	5.779935	1.176858	3.255827	C	-3.162116	5.614564	1.868647
H	4.295494	1.107027	4.249503	C	-2.981370	4.537920	2.720855
H	4.593618	-0.134045	2.982748	C	-3.036646	3.198500	2.232864
H	-2.800333	5.696232	0.203307	C	-3.319335	2.964442	0.833790
H	-3.050724	4.502807	1.507430	O	-3.092620	-0.755331	0.783327
H	-1.487494	5.366021	1.372119	O	-2.348786	-2.601270	-0.754060
H	-1.212689	5.050128	-1.807703	P	-1.765138	-1.237615	-0.117395
H	0.088116	4.818649	-0.606108	C	4.134524	1.083549	-0.513689
H	-0.348891	3.486913	-1.729816	C	4.110996	-0.305920	-0.654521
H	2.226312	3.676725	-0.630624	C	5.115988	-1.032668	-1.337853
H	4.167249	4.550633	-1.966377	C	6.148295	-0.348213	-1.952139

C	7.203553	1.791747	-2.634907	H	-7.958612	3.288752	-0.977231
C	7.208172	3.176245	-2.662833	H	-5.870162	2.565981	0.122219
C	6.180868	3.897988	-2.000601	H	-0.743048	-4.939794	1.515949
C	5.184736	3.233706	-1.300624	H	0.269623	-5.223657	2.939269
C	5.160930	1.808775	-1.229467	H	-3.319701	-2.717573	4.109860
C	6.184598	1.076165	-1.940280				
O	3.103801	-1.067794	-0.028306				
C	-3.751190	1.274824	-1.064010	S3a_01			
C	-2.893714	0.482525	-1.832386	114			
C	-3.111991	0.214414	-3.205742	Energy = -3594.386875008			
C	-4.248702	0.706530	-3.820251	Rh	-0.456920	-1.864895	-0.085442
C	-6.429397	1.883841	-3.685751	C	-1.663997	-2.326224	-5.063816
C	-7.393938	2.549442	-2.948220	C	-0.599710	-2.393529	-4.183780
C	-7.183731	2.786806	-1.564691	C	0.082226	-1.206258	-3.822734
C	-6.009801	2.383775	-0.945801	C	-0.232996	0.043617	-4.361856
C	-4.983268	1.716803	-1.678704	C	-1.912921	1.378618	-5.682831
C	-5.218808	1.439459	-3.077661	C	-3.036811	1.428294	-6.493839
O	-1.708326	-0.036238	-1.268263	C	-3.705995	0.238012	-6.881284
H	-3.020185	-3.772894	5.550083	C	-3.249437	-0.986738	-6.424291
H	-1.989280	-2.314724	5.261562	C	-2.108043	-1.073033	-5.574505
H	1.572122	-2.442064	3.256419	C	-1.398934	0.133036	-5.212584
H	2.759600	-2.422590	1.832037	H	-2.188236	-3.238964	-5.365259
C	3.256639	-4.979161	-1.109029	H	-0.253979	-3.346660	-3.778087
H	4.305978	-4.679886	-1.224034	O	1.169725	-1.334841	-2.932891
H	0.244752	3.625051	2.310377	H	-1.416098	2.305413	-5.387992
H	-0.323825	1.977746	0.507387	H	-3.413497	2.397324	-6.835425
H	5.603985	2.306122	1.353649	H	-4.585786	0.292057	-7.529401
H	6.125508	3.820574	3.231669	H	-3.766686	-1.912162	-6.699698
H	4.297849	5.068066	4.411534	O	2.487023	-0.655544	-0.885183
H	1.923994	4.725073	3.728354	C	3.654912	-0.190498	-1.710422
H	2.642551	-0.287388	-2.997702	C	-3.416226	1.659207	0.930010
H	-4.230674	-1.858900	-1.360761	C	4.498119	0.664121	-0.772426
H	3.180209	-6.052146	-0.878790	C	4.382725	-1.409525	-2.260702
H	2.679567	-4.758507	-2.019132	H	3.252791	0.424343	-2.530852
H	3.033897	-1.835803	-4.964516	C	-3.660911	2.753647	-0.101437
H	3.490768	-2.594187	-3.415814	C	-4.661292	0.848374	1.272600
H	1.945164	-3.038806	-4.213836	H	-2.964862	2.077786	1.843019
H	-2.584994	2.279207	4.154417	H	5.373433	1.054630	-1.318299
H	-2.565698	-0.062986	3.237689	H	3.922100	1.517729	-0.381959
H	-3.648364	3.944864	-1.085006	H	4.862053	0.065142	0.079080
H	-3.513385	6.240902	-0.189189	H	5.273695	-1.074644	-2.819585
H	-3.114825	6.637303	2.254234	P	0.964395	-0.769484	-1.376133
H	-2.786332	4.697915	3.787085	C	0.009973	-1.849446	5.325067
H	1.115029	-0.050748	-4.984361	C	-0.842011	-1.614212	4.261481
H	0.025871	-1.287674	-4.288563	C	-0.858671	-0.340154	3.641345
H	0.250976	0.287222	-3.454654	C	-0.090220	0.732082	4.102806
H	-4.625339	-3.784864	-2.962684	C	1.824993	1.438927	5.577346
H	-3.088444	-2.939839	-3.302818	C	2.736203	1.153594	6.583740
H	-3.074188	-4.511496	-2.444604	C	2.740531	-0.115109	7.220681
H	-5.499193	-3.871753	-0.495508	C	1.844378	-1.090720	6.816483
H	-3.953773	-4.608566	0.014816	C	0.906834	-0.837144	5.772427
H	-4.530230	-3.088788	0.783926	C	0.871528	0.466887	5.150291
H	5.060875	-2.123860	-1.344961	H	0.013402	-2.822487	5.827438
H	6.941721	-0.896189	-2.470908	H	-1.538378	-2.378270	3.906240
H	7.978839	1.221345	-3.157722	O	-1.755453	-0.165709	2.574079
H	7.992408	3.714345	-3.203458	H	1.839690	2.417564	5.092988
H	6.171153	4.991260	-2.046203	H	3.460765	1.915371	6.887082
H	4.397130	3.805065	-0.804274	H	3.457730	-0.322120	8.020349
H	-2.366769	-0.367341	-3.753554	H	1.847738	-2.079656	7.287464
H	-4.425476	0.517658	-4.884206	O	-2.420568	0.727299	0.318041
H	-6.586777	1.675945	-4.749613	H	4.701602	-2.075903	-1.444764
H	-8.321598	2.880570	-3.424254	H	3.737770	-1.981264	-2.943582
				H	-4.402402	3.470534	0.290132

H	-2.732952	3.302951	-0.323712	S3c_01		
H	-4.052276	2.323982	-1.038027	114		
H	-5.431693	1.514193	1.697778	Energy =	-3594.387495318	
H	-5.074928	0.374240	0.366747	Rh	0.000658	-0.305020 2.009794
H	-4.430436	0.068792	2.014493	C	1.561807	-1.122994 3.240677
O	-2.013222	-2.967859	0.951589	C	1.007920	-0.051651 3.992603
C	-1.569062	-3.967439	1.565864	C	1.784406	1.221963 4.160267
P	-1.144459	0.043115	1.024764	C	1.763323	3.390864 5.123256
C	0.603158	1.230136	-4.029941	C	-0.048621	-0.320569 5.066943
C	0.855334	1.550995	-2.695581	C	-1.126872	-1.230556 4.559053
C	1.561097	2.712113	-2.294189	C	5.714392	-1.224561 1.478018
C	2.079400	3.554964	-3.260172	C	4.701169	-0.305091 1.677515
C	2.544200	4.068008	-5.643103	C	3.945530	0.145166 0.566402
C	2.461664	3.734545	-6.984579	C	4.234250	-0.223253 -0.750776
C	1.781921	2.551566	-7.375850	C	5.471745	-1.847009 -2.226527
C	1.174354	1.736654	-6.432001	C	6.425470	-2.841826 -2.383802
C	1.217674	2.060526	-5.043080	C	7.189956	-3.295817 -1.277423
C	1.946489	3.244096	-4.644680	C	6.964356	-2.760471 -0.020329
O	0.336687	0.742091	-1.665268	C	5.978662	-1.750345 0.180463
H	1.681781	2.911489	-1.226181	C	5.227178	-1.256590 -0.950819
H	2.620832	4.460998	-2.968919	C	1.499942	3.430369 -0.149941
H	3.083745	4.966365	-5.324464	C	-1.768492	-3.733683 -0.615843
H	2.929820	4.371125	-7.741085	C	0.510622	4.185054 -1.027677
H	1.741162	2.274794	-8.433767	C	2.011322	4.236316 1.038563
H	0.664171	0.825354	-6.751281	C	-0.881273	-4.484056 -1.600466
C	-0.272337	2.088265	3.512871	C	-2.308600	-4.603291 0.513455
C	-0.185512	2.264187	2.131514	C	-4.888432	1.507839 1.971563
C	-0.266244	3.530272	1.502452	C	-4.084190	0.383384 1.939914
C	-0.486383	4.655316	2.275705	C	-3.720606	-0.176862 0.691700
C	-0.978972	5.692906	4.474727	C	-4.161060	0.336730 -0.530070
C	-1.218055	5.577972	5.833711	C	-5.303359	2.256980 -1.694997
C	-1.172127	4.300874	6.450896	C	-6.042796	3.428659 -1.634749
C	-0.863784	3.166890	5.714121	C	-6.453529	3.964837 -0.386215
C	-0.588010	3.249198	4.316546	C	-6.089096	3.328503 0.788337
C	-0.676382	4.545921	3.683624	C	-5.313946	2.132125 0.764052
O	0.054593	1.155588	1.296121	C	-4.932313	1.558942 -0.507051
H	-0.148222	3.587967	0.417440	C	3.536334	0.436153 -1.888838
H	-0.540846	5.643969	1.807936	C	2.142976	0.488618 -1.915780
H	-1.031221	6.668851	3.980250	C	1.400660	1.027960 -2.994429
H	-1.455357	6.464423	6.429151	C	2.078091	1.569346 -4.071551
H	-1.387448	4.207602	7.519714	C	4.201552	2.262149 -5.151316
H	-0.842431	2.191970	6.206059	C	5.581175	2.379579 -5.129708
C	-0.097606	-4.262737	1.633679	C	6.313151	1.879921 -4.021139
C	0.620684	-3.720577	0.395216	C	5.665890	1.247165 -2.970425
C	0.061526	-3.829047	-0.899018	C	4.248308	1.083860 -2.970101
C	2.118480	-3.573542	0.514324	C	3.501827	1.635151 -4.079109
O	-2.356902	-4.803699	2.224590	C	-3.782017	-0.352185 -1.794928
O	2.894722	-3.645127	-0.428748	C	-2.437260	-0.626822 -2.051255
O	2.496087	-3.392108	1.806648	C	-1.976962	-1.188108 -3.267439
C	3.924965	-3.257580	2.010718	C	-2.896097	-1.531662 -4.242370
C	-3.790497	-4.513792	2.209021	C	-5.249772	-1.791695 -4.985976
H	0.293177	-3.762427	2.539107	C	-6.608176	-1.681077 -4.741360
H	-0.892243	-4.344251	-1.062545	C	-7.061161	-1.148749 -3.505808
H	0.745031	-3.794738	-1.751127	C	-6.158460	-0.711364 -2.548020
H	0.082327	-5.345452	1.764523	C	-4.751842	-0.787624 -2.774348
H	4.054718	-3.179114	3.097031	C	-4.293481	-1.368647 -4.016503
H	4.451950	-4.136900	1.610480	C	-2.902163	-2.738246 5.045612
H	4.289856	-2.349772	1.507447	O	1.062622	2.151590 4.851503
H	-4.241114	-5.312717	2.808473	O	-1.813554	-1.872653 5.491622
H	-3.976587	-3.526735	2.655861	O	-1.383909	-1.344284 3.336307
H	-4.162112	-4.535970	1.174644	O	2.928351	1.419933 3.765920
				O	2.935526	1.088923 0.840590

O	0.754579	2.244509	0.380953	C	1.391746	1.467522	-2.069777
O	-2.922432	-1.338774	0.712084	C	1.254566	0.253294	-2.744083
O	-0.901291	-2.676485	-0.004309	C	2.378075	-1.918647	-3.363489
O	1.403531	-0.065697	-0.850743	C	3.520790	-2.701404	-3.438463
O	-1.454116	-0.278720	-1.101303	C	4.771927	-2.204016	-2.988466
P	1.331277	0.752968	0.588362	C	4.849369	-0.933363	-2.441842
P	-1.312375	-1.151576	0.303704	C	3.691099	-0.107041	-2.335982
H	0.397004	-0.736321	5.988909	C	2.424147	-0.593237	-2.835244
H	1.257520	-2.157465	3.444840	H	4.725980	1.542665	-1.359002
H	2.555914	-1.017758	2.798592	H	2.653189	2.922423	-1.068387
H	1.074161	3.981017	5.740052	O	0.265312	2.306799	-1.922412
H	1.990732	3.913558	4.182425	H	1.423129	-2.323583	-3.704353
H	2.700775	3.188367	5.662904	H	3.454426	-3.714822	-3.845895
H	6.317721	-1.569785	2.324025	H	5.668374	-2.826621	-3.066181
H	4.472484	0.117366	2.659207	H	5.804594	-0.541621	-2.075544
H	4.886257	-1.516627	-3.087571	O	-2.129852	2.752854	-1.263251
H	6.586748	-3.283680	-3.371926	C	-2.659381	2.871746	-2.656815
H	7.945526	-4.074393	-1.418312	C	2.802449	-0.544904	3.227127
H	7.533261	-3.113833	0.846365	C	-4.169540	2.701369	-2.546019
H	2.341705	3.049783	-0.749004	C	-2.231765	4.222619	-3.215802
H	-2.593006	-3.227674	-1.141068	H	-2.223461	2.056545	-3.254534
H	0.997647	5.085183	-1.439331	C	4.223423	-0.334932	2.720288
H	0.170786	3.560067	-1.868092	C	2.632924	-0.285826	4.719947
H	-0.367620	4.502291	-0.441225	H	2.448329	-1.556605	2.973481
H	2.567559	5.117504	0.675078	H	-4.625141	2.775866	-3.547752
H	-5.191343	1.943977	2.929176	H	-4.428243	1.719077	-2.120621
H	-3.724639	-0.096565	2.852740	H	-4.604460	3.488629	-1.908008
H	-4.989549	1.863653	-2.664226	H	-2.660319	4.354924	-4.224110
H	-6.309099	3.947097	-2.560920	P	-0.866769	1.868581	-0.782560
H	-7.044728	4.884895	-0.354775	C	-3.774144	-1.539890	2.610753
H	-6.381021	3.742323	1.759601	C	-2.592884	-0.927344	2.988848
H	1.166536	4.591602	1.653084	C	-1.362416	-1.482143	2.562155
H	2.687975	3.631473	1.661567	C	-1.266518	-2.640211	1.789834
H	-1.462166	-5.289970	-2.080134	C	-2.526320	-4.338500	0.418403
H	-0.506808	-3.811887	-2.387893	C	-3.727975	-4.887801	-0.003117
H	-0.020062	-4.936340	-1.082010	C	-4.965554	-4.370528	0.461781
H	-2.930469	-5.412173	0.092949	C	-4.977302	-3.287199	1.324215
H	-1.479411	-5.062513	1.077342	C	-3.761240	-2.686908	1.765377
H	-2.931527	-4.010098	1.200354	C	-2.498204	-3.239680	1.328402
H	0.309712	0.993993	-2.950596	H	-4.736240	-1.137117	2.944413
H	1.523902	1.978387	-4.922958	H	-2.579102	-0.035455	3.620913
H	3.621581	2.663022	-5.989638	O	-0.178185	-0.835785	2.975461
H	6.106212	2.868356	-5.955740	H	-1.583785	-4.744428	0.044611
H	7.400413	1.999163	-3.991513	H	-3.720899	-5.728306	-0.703940
H	6.245552	0.877921	-2.121749	H	-5.905547	-4.821277	0.129563
H	-0.902193	-1.327307	-3.411198	H	-5.925087	-2.865920	1.676626
H	-2.557613	-1.955753	-5.193422	O	1.947934	0.437442	2.490624
H	-4.886045	-2.219256	-5.926418	H	-2.594692	5.042942	-2.574681
H	-7.332382	-2.014501	-5.490433	H	-1.136427	4.282575	-3.295557
H	-8.134851	-2.086520	-3.303862	H	4.905891	-1.038370	3.226438
H	-6.524535	-0.312033	-1.599722	H	4.285365	-0.510360	1.634809
H	-0.534374	0.626965	5.362221	H	4.564073	0.692589	2.931226
H	-3.291356	-3.190158	5.964944	H	3.264369	-0.985951	5.293016
H	-3.675115	-2.139891	4.542666	H	2.945024	0.742022	4.972167
H	-2.513035	-3.503920	4.359678	H	1.585697	-0.437216	5.025032
R5a_01				C	-0.040504	4.265218	1.506023
114				C	-1.444368	4.120777	1.443663
Energy = -3594.387194553				P	0.530769	0.100469	1.788028
Rh	-0.532072	2.123626	1.385412	C	-0.066361	-0.154652	-3.300018
C	3.759914	1.177767	-1.723246	C	-1.203506	-0.170774	-2.487442
C	2.623657	1.949882	-1.567085	C	-2.448720	-0.700396	-2.908110
				C	-2.588017	-1.156721	-4.205340

C	-1.671300	-1.439683	-6.495014	C	-5.227179	-2.920378	0.263150
C	-0.636844	-1.292931	-7.404013	C	-5.484388	-1.504920	0.114580
C	0.601515	-0.745036	-6.978892	H	-3.832376	-4.546657	-0.129108
C	0.798491	-0.379161	-5.655524	H	-2.105205	-3.056695	-1.188227
C	-0.236585	-0.536277	-4.685905	O	-2.327459	-0.485215	-1.574413
C	-1.509529	-1.055829	-5.131521	H	-6.872889	0.096930	0.623941
O	-1.145589	0.281829	-1.153915	H	-8.481477	-1.365217	1.796925
H	-3.269368	-0.746485	-2.187784	H	-8.069294	-3.833209	1.973083
H	-3.540239	-1.579935	-4.541376	H	-5.984949	-4.811964	1.017856
H	-2.639172	-1.842037	-6.812968	O	-0.656559	1.392815	-1.547573
H	-0.775167	-1.584814	-8.449277	C	-1.285369	2.013620	-2.758997
H	1.409145	-0.603962	-7.703629	C	1.895962	-2.719594	-2.205598
H	1.754995	0.049666	-5.348426	C	-0.907972	3.489607	-2.736506
C	0.078159	-3.180811	1.442727	C	-0.771815	1.266401	-3.983350
C	1.032746	-2.357817	0.837514	H	-2.376568	1.894443	-2.668397
C	2.285120	-2.832406	0.375793	C	1.856172	-4.236295	-2.071692
C	2.622426	-4.157387	0.580913	C	1.242630	-2.195407	-3.477891
C	2.120732	-6.380419	1.565597	H	2.930625	-2.351395	-2.125301
C	1.288081	-7.214401	2.292914	H	-1.366783	3.999392	-3.600364
C	0.047075	-6.723143	2.776069	H	-1.266890	3.979251	-1.817684
C	-0.355844	-5.423817	2.504857	H	0.185440	3.616990	-2.806024
C	0.464309	-4.543487	1.737372	H	-1.195605	1.718059	-4.896646
C	1.746143	-5.033779	1.283936	P	-1.422780	0.425494	-0.503597
O	0.749437	-1.000837	0.577290	C	3.548343	3.423494	-0.432680
H	2.949523	-2.143480	-0.151829	C	2.686000	2.400809	-0.783954
H	3.580573	-4.542104	0.216992	C	3.148451	1.064795	-0.741271
H	3.090529	-6.738892	1.203956	C	4.446547	0.709977	-0.371718
H	1.588987	-8.244032	2.507563	C	6.602271	1.511994	0.660634
H	-0.597824	-7.374324	3.374056	C	7.415020	2.550717	1.089238
H	-1.309551	-5.060248	2.893799	C	6.990577	3.900217	0.973889
O	0.330361	3.813651	5.121971	C	5.736337	4.183873	0.460401
C	0.160706	3.451004	3.861342	C	4.866141	3.138640	0.030341
C	0.801829	4.770311	0.360381	C	5.317025	1.766517	0.096385
O	-0.405128	2.377245	3.539514	H	3.219431	4.466751	-0.488792
O	2.031163	4.755060	0.380937	H	1.659138	2.585434	-1.107102
O	0.064341	5.286451	-0.646646	O	2.251406	0.070455	-1.182431
C	0.709688	4.394565	2.833791	H	6.942432	0.480191	0.768006
C	-0.150671	2.892489	6.149669	H	8.392924	2.325470	1.525514
H	0.123222	3.368244	7.098054	H	7.647819	4.709937	1.304614
H	-1.241051	2.779492	6.064722	H	5.385732	5.219213	0.386104
H	-2.045033	4.137475	2.361289	O	1.131406	-2.175844	-1.037661
H	-1.977029	4.354728	0.520411	H	0.327390	1.331406	-4.043408
C	0.839846	5.823611	-1.751579	H	-1.069794	0.207663	-3.950728
H	0.112978	6.350942	-2.380910	H	2.401978	-4.695248	-2.913184
H	1.609868	6.512116	-1.373950	H	2.329624	-4.565482	-1.133495
H	1.316119	5.002741	-2.307780	H	0.816327	-4.603463	-2.092975
H	1.772873	4.140406	2.659950	H	1.777684	-2.591642	-4.357971
H	0.691984	5.434796	3.207789	H	0.190323	-2.519540	-3.537866
H	0.341836	1.916665	6.035778	H	1.282162	-1.096339	-3.513974
S4a_01				O	-2.012328	-0.676113	2.343496
114				C	-1.931070	-0.063241	3.435456
Energy = -3594.385697695				P	1.586640	-0.961905	-0.070318
Rh	-0.203835	-0.591669	1.179512	C	-4.732170	0.775581	-0.822781
C	-4.011042	-3.471607	-0.235750	C	-3.792699	1.711659	-0.379485
C	-3.056554	-2.660995	-0.822939	C	-3.992236	3.111128	-0.479057
C	-3.321435	-1.278105	-0.968515	C	-5.132853	3.593134	-1.093884
C	-4.517358	-0.678279	-0.571693	C	-7.224400	3.189354	-2.367984
C	-6.674590	-0.974685	0.699127	C	-8.121397	2.318662	-2.963862
C	-7.577181	-1.797735	1.357686	C	-7.903402	0.918460	-2.883203
C	-7.342187	-3.193829	1.463707	C	-6.814915	0.408329	-2.191234
C	-6.186335	-3.738853	0.929436	C	-5.882063	1.273752	-1.545409
				C	-6.085431	2.699887	-1.663755

O	-2.615806	1.297979	0.274114	H	3.069737	-5.132316	2.625052
H	-3.239945	3.780855	-0.054078	H	2.578842	-4.584923	5.024483
H	-5.305194	4.671932	-1.167515	H	2.131556	-2.222612	5.687329
H	-7.368552	4.272795	-2.439382	O	1.810093	2.741738	-1.370933
H	-8.988266	2.706197	-3.507138	C	3.210339	2.700641	-1.919728
H	-8.598213	0.232661	-3.377517	C	-3.242624	-0.540217	2.896515
H	-6.657454	-0.671860	-2.149443	C	3.070918	3.031221	-3.400663
C	4.883715	-0.712433	-0.434872	C	4.084244	3.674945	-1.142048
C	4.132611	-1.713635	0.186095	H	3.578965	1.670609	-1.796248
C	4.566994	-3.057908	0.290994	C	-2.712582	-0.782788	4.304278
C	5.757179	-3.434191	-0.302584	C	-4.635229	0.079517	2.859584
C	7.700054	-2.898332	-1.749976	H	-3.225929	-1.473325	2.311856
C	8.408795	-1.999675	-2.529461	H	4.064626	3.006286	-3.878313
C	7.951864	-0.661707	-2.652691	H	2.420627	2.304493	-3.912953
C	6.818850	-0.233531	-1.976983	H	2.647319	4.040298	-3.537829
C	6.076268	-1.124316	-1.145481	H	5.096146	3.677157	-1.583202
C	6.519378	-2.497459	-1.058786	P	1.193827	1.739125	-0.276335
O	2.906312	-1.414055	0.813646	C	-2.851756	-0.286884	-3.747872
H	3.954968	-3.764975	0.857062	C	-3.081700	0.148917	-2.455398
H	6.114270	-4.465559	-0.216842	C	-2.770461	-0.707097	-1.371629
H	8.028350	-3.939580	-1.661994	C	-2.258748	-1.995138	-1.533073
H	9.309953	-2.320679	-3.060303	C	-1.284124	-3.660437	-3.154474
H	8.496413	0.040107	-3.291809	C	-0.997958	-4.041659	-4.456919
H	6.478125	0.797797	-2.091032	C	-1.354995	-3.211644	-5.551829
C	-0.700674	0.712372	3.807152	C	-1.971062	-1.993607	-5.318664
C	0.538631	0.122824	3.122756	C	-2.265682	-1.562494	-3.991524
C	0.736587	-1.277496	3.026314	C	-1.943589	-2.425770	-2.876796
C	1.745666	1.033095	3.067160	H	-3.103273	0.353609	-4.599709
O	-2.923064	-0.033621	4.307378	H	-3.515808	1.130235	-2.245064
O	2.900617	0.654522	2.946046	O	-3.029494	-0.228491	-0.071236
O	1.379768	2.335702	3.226450	H	-0.994516	-4.307958	-2.324025
C	2.487747	3.271815	3.274113	H	-0.488306	-4.992406	-4.641259
C	-4.150881	-0.739899	3.938883	H	-1.132863	-3.530727	-6.574540
H	-0.853853	1.754183	3.473136	H	-2.235059	-1.334007	-6.152516
H	0.024663	-1.974024	3.485628	O	-2.296102	0.421980	2.253276
H	1.756708	-1.644508	2.889381	H	3.672233	4.694250	-1.181639
H	-0.573097	0.751755	4.904260	H	4.164635	3.378443	-0.086053
H	2.028245	4.248620	3.471314	H	-3.373522	-1.490725	4.832534
H	3.183394	2.993460	4.079982	H	-1.698423	-1.210156	4.276551
H	3.022886	3.272556	2.313390	H	-2.684920	0.159296	4.876629
H	-4.833341	-0.560560	4.777124	H	-5.357548	-0.600155	3.343070
H	-4.551797	-0.332894	3.000514	H	-4.644798	1.037506	3.406620
H	-3.939197	-1.812277	3.822686	H	-4.959464	0.247304	1.820889
S5c_01				C	-0.623120	4.573693	0.580522
114				C	-0.326124	3.776664	1.724652
Energy = -3594.385460766				P	-1.673386	0.272765	0.768548
Rh	-0.869140	2.356188	0.236095	C	3.229593	-0.882677	-0.066869
C	2.116454	-0.075711	4.058706	C	2.407112	-0.491218	-1.126589
C	2.099636	0.929254	3.110318	C	2.675196	-0.819517	-2.478861
C	2.422429	0.621250	1.766810	C	3.839299	-1.494131	-2.793607
C	2.808135	-0.652002	1.343386	C	6.034137	-2.429702	-2.109476
C	2.965576	-3.089844	1.966147	C	6.978094	-2.693788	-1.131237
C	2.900528	-4.092820	2.922085	C	6.710567	-2.343919	0.217832
C	2.613660	-3.785797	4.277906	C	5.501690	-1.764580	0.574245
C	2.368833	-2.473394	4.647600	C	4.496182	-1.498144	-0.402625
C	2.413610	-1.419236	3.687591	C	4.789457	-1.817133	-1.781408
C	2.747284	-1.722964	2.314052	O	1.205162	0.201631	-0.886015
H	1.888829	0.149593	5.105697	H	1.945747	-0.536643	-3.241945
H	1.862304	1.963044	3.372702	H	4.055670	-1.764813	-3.832340
O	2.415235	1.689599	0.849685	H	6.234690	-2.674854	-3.158005
H	3.176542	-3.347391	0.926404	H	7.932901	-3.157097	-1.396680
				H	7.468440	-2.526830	0.985695

H	5.318964	-1.491629	1.616076	C	3.879298	2.266915	1.044983
C	-2.026478	-2.850622	-0.334697	O	1.477551	0.372449	-1.083135
C	-1.256845	-2.375400	0.731293	O	1.263000	-1.877996	-2.174713
C	-0.899172	-3.173265	1.845854	C	-3.754946	-2.423186	-2.350341
C	-1.378159	-4.467058	1.931714	C	2.433901	-2.702353	-4.116661
C	-2.817404	-6.292598	1.061397	C	0.979704	-0.606392	-4.240046
C	-3.710435	-6.776334	0.120118	C	-3.519893	-2.722664	-3.825003
C	-4.083568	-5.961411	-0.980362	C	-4.579615	-3.484669	-1.631191
C	-3.543216	-4.694006	-1.140045	P	1.434130	-1.240397	-0.699729
C	-2.601966	-4.171325	-0.203466	C	-3.417903	1.026224	3.268378
C	-2.256515	-4.987734	0.937968	C	-3.323184	-0.076944	2.440390
O	-0.717339	-1.072915	0.703843	C	-3.342377	0.100065	1.035687
H	-0.232171	-2.753641	2.603087	C	-3.505039	1.348132	0.429802
H	-1.099314	-5.100943	2.779767	C	-3.505279	3.844272	0.772435
H	-2.536237	-6.902047	1.927072	C	-3.508339	4.940067	1.622965
H	-4.139155	-7.776980	0.229140	C	-3.523534	4.766095	3.031617
H	-4.810283	-6.333797	-1.708919	C	-3.506671	3.488755	3.566739
H	-3.850611	-4.077100	-1.987574	C	-3.483742	2.340151	2.722026
O	-4.320778	4.740253	0.681712	C	-3.511489	2.513030	1.287044
C	-3.113836	4.217806	0.536879	O	-3.264859	-1.060076	0.245249
C	0.518259	5.284663	-0.082189	O	-2.401557	-2.388220	-1.713207
O	-2.927067	2.977585	0.476052	P	-1.859564	-1.334987	-0.621443
O	1.682433	5.251179	0.297659	C	4.299100	0.458987	-0.736167
O	0.091141	6.024726	-1.147963	C	4.086699	-0.920906	-0.783962
C	-1.999573	5.214328	0.403951	C	4.988534	-1.824407	-1.398606
C	-5.449229	3.814977	0.742648	C	6.108859	-1.333118	-2.041685
H	-6.323785	4.454817	0.906429	C	7.439563	0.588836	-2.873013
H	-5.532521	3.268080	-0.207577	C	7.625337	1.953968	-3.012849
H	-1.068565	3.634959	2.521080	C	6.698976	2.853642	-2.424168
H	0.719438	3.707655	2.040282	C	5.623945	2.382929	-1.684776
C	1.116752	6.812023	-1.797416	C	5.414172	0.983808	-1.497045
H	0.586894	7.422140	-2.539847	C	6.334767	0.070597	-2.135580
H	1.847587	6.153047	-2.290113	O	2.970759	-1.503491	-0.151984
H	1.636267	7.446292	-1.063305	C	-3.643152	1.445642	-1.051093
H	-2.080687	5.660271	-0.603555	C	-2.684035	0.863225	-1.881272
H	-2.165021	6.047375	1.113087	C	-2.690778	0.997306	-3.290464
H	-5.309773	3.109007	1.573139	C	-3.719444	1.694181	-3.897287
S2a_01				C	-5.890288	2.887107	-3.751455
114				C	-6.953746	3.363952	-3.003631
Energy = -3594.384072914				C	-6.956059	3.194882	-1.594423
Rh	-0.087151	-2.225592	0.568404	C	-5.891389	2.581539	-0.951165
O	-1.552724	-3.481189	1.564374	C	-4.767522	2.098508	-1.685739
C	-1.372551	-3.576961	2.801884	C	-4.788282	2.234258	-3.125307
C	-0.335929	-2.756772	3.512480	O	-1.604861	0.148577	-1.317372
C	0.839135	-2.429009	2.587018	C	-3.148026	-5.152798	2.907395
C	1.378115	-3.389015	1.706686	H	-0.823234	-1.819307	3.836296
C	1.708904	-1.275383	3.035646	H	0.989366	-4.414238	1.683569
O	-2.101889	-4.373714	3.567438	H	2.399403	-3.245753	1.346367
O	2.884928	-1.130646	2.739931	H	0.007156	-3.264537	4.432065
O	1.022108	-0.447412	3.871117	H	1.132804	1.160653	5.112760
C	1.962781	-1.432603	-3.418724	H	0.875473	3.812374	1.838142
C	1.806826	0.644072	4.418000	H	0.029451	2.066607	0.239267
C	1.567058	3.110453	1.360515	H	5.948461	1.583848	1.030844
C	1.091302	2.156151	0.480468	H	6.731661	3.201364	2.721641
C	2.008589	1.281795	-0.149808	H	5.142578	4.852640	3.741553
C	3.389265	1.340397	0.048271	H	2.732748	4.809019	3.100985
C	5.243709	2.298170	1.461704	H	2.822802	-0.813978	-3.117984
C	5.681359	3.205483	2.414683	H	-4.210319	-1.428114	-2.223073
C	4.781066	4.133635	3.000070	H	2.688905	0.248310	4.943699
C	3.443389	4.112793	2.642021	H	2.131742	1.317659	3.612259
C	2.955024	3.178916	1.680551	H	2.949531	-2.438496	-5.055645
				H	3.137099	-3.265142	-3.483337

H	1.577713	-3.353223	-4.360310	H	2.263469	-3.324929	-5.228113
H	-3.425499	0.902237	4.356434	H	2.929206	-2.684767	-3.698797
H	-3.263349	-1.092618	2.839740	H	2.196067	-4.326531	-3.748101
H	-3.488133	3.997654	-0.309023	H	-0.313447	-3.605766	-5.458732
H	-3.497843	5.949912	1.201506	P	-0.072099	-1.604330	-1.397382
H	-3.538394	5.639730	3.689808	C	3.385483	-0.712668	3.056771
H	-3.501102	3.339298	4.651962	C	2.020989	-0.918674	3.155536
H	1.464073	-0.275233	-5.174516	C	1.139020	0.154495	2.883096
H	0.096256	-1.212512	-4.503147	C	1.572109	1.435229	2.537338
H	0.657146	0.284701	-3.679733	C	3.539217	2.856534	1.860188
H	-4.488199	-2.773246	-4.350525	C	4.907797	3.013066	1.698993
H	-2.913132	-1.934391	-4.297120	C	5.802265	1.959521	2.023423
H	-3.005600	-3.690173	-3.948159	C	5.304613	0.750262	2.479244
H	-5.577108	-3.556830	-2.097350	C	3.902167	0.548295	2.639907
H	-4.089933	-4.470038	-1.705136	C	2.991731	1.634843	2.354024
H	-4.711949	-3.225708	-0.569403	H	4.085135	-1.524435	3.281428
H	4.783250	-2.896209	-1.335209	H	1.602235	-1.882426	3.456501
H	6.823605	-2.019803	-2.506755	O	-0.246672	-0.092630	3.002781
H	8.133456	-0.118677	-3.339564	H	2.864388	3.674798	1.599662
H	8.473554	2.339706	-3.586094	H	5.301456	3.959063	1.314724
H	6.829708	3.931682	-2.559456	H	6.880323	2.101860	1.902709
H	4.916435	3.091435	-1.248632	H	5.982082	-0.077579	2.714972
H	-1.872090	0.558163	-3.865648	O	-2.567726	-0.271487	2.004849
H	-3.733294	1.819967	-4.984831	H	-0.377535	-4.555711	-3.939665
H	-5.883885	2.992532	-4.841566	H	-1.371006	-3.070103	-4.126826
H	-7.796693	3.857806	-3.495676	H	-4.939050	1.906216	3.057615
H	-7.809948	3.548236	-1.008160	H	-4.264501	1.688716	1.415249
H	-5.915919	2.451632	0.133012	H	-5.155162	0.349169	2.203932
H	-3.604757	-5.740639	3.711488	H	-3.807094	0.603521	5.054980
H	-3.880370	-4.476320	2.444158	H	-4.023461	-0.930660	4.163689
H	-2.699919	-5.804556	2.143947	H	-2.385259	-0.420100	4.701530
S5a_01				O	-1.118879	-3.080637	2.593629
114				C	-0.993701	-4.315577	2.767050
Energy = -3594.384008952				P	-1.023882	-0.298117	1.539267
Rh	-0.568778	-2.366610	0.611555	C	0.201595	1.127977	-3.242597
C	-3.918580	1.347180	-1.864654	C	1.179113	0.436191	-2.521787
C	-3.253271	0.136909	-1.917826	C	2.543773	0.399438	-2.897866
C	-1.898256	0.106604	-2.328018	C	2.941439	1.028764	-4.062678
C	-1.188816	1.244809	-2.718114	C	2.376132	2.236769	-6.154923
C	-1.174849	3.766055	-2.763759	C	1.438516	2.799831	-7.004553
C	-1.839821	4.974652	-2.618461	C	0.066942	2.796038	-6.640345
C	-3.216632	5.008476	-2.273444	C	-0.343905	2.262876	-5.427557
C	-3.896717	3.823325	-2.044729	C	0.596210	1.697877	-4.514227
C	-3.237594	2.563289	-2.163679	C	1.986086	1.660696	-4.910313
C	-1.849116	2.523248	-2.566932	O	0.844110	-0.229175	-1.325100
H	-4.974912	1.384666	-1.579295	H	3.253528	-0.115531	-2.245585
H	-3.748157	-0.805516	-1.670483	H	3.995139	1.024704	-4.360174
O	-1.303622	-1.159848	-2.427646	H	3.435345	2.211476	-6.432426
H	-0.113775	3.760703	-3.021465	H	1.749295	3.232745	-7.959937
H	-1.295397	5.911651	-2.770037	H	-0.676997	3.213925	-7.325234
H	-3.733947	5.968242	-2.180056	H	-1.405429	2.260081	-5.169985
H	-4.954537	3.833947	-1.760216	C	0.567720	2.516825	2.336650
O	0.671986	-2.692831	-2.313621	C	-0.498473	2.328747	1.452598
C	0.754751	-2.712621	-3.814314	C	-1.425890	3.348837	1.129949
C	-3.159028	0.681876	2.995144	C	-1.322292	4.577905	1.754367
C	2.123868	-3.297040	-4.134332	C	-0.257944	6.054220	3.443191
C	-0.403078	-3.539196	-4.360749	C	0.685230	6.262659	4.435599
H	0.688553	-1.668313	-4.156368	C	1.594211	5.225576	4.772832
C	-4.456698	1.185340	2.375917	C	1.568195	4.012930	4.100206
C	-3.350945	-0.068143	4.307768	C	0.627415	3.771107	3.054251
H	-2.447487	1.512469	3.129030	C	-0.324127	4.813758	2.743463
				O	-0.646038	1.107709	0.757740

H	-2.191142	3.148829	0.376402	C	-3.332187	-1.123260	0.661664
H	-2.023160	5.380795	1.503521	C	-5.539416	-0.909666	1.860383
H	-0.979166	6.837603	3.185904	C	-6.257649	-0.778325	3.039650
H	0.723530	7.217430	4.968409	C	-5.592444	-0.724708	4.292453
H	2.321032	5.382193	5.575522	C	-4.209322	-0.774505	4.338460
H	2.268924	3.222986	4.380089	C	-3.438395	-0.889261	3.144301
C	-0.413030	-5.217223	1.718390	C	-4.114323	-0.989902	1.870649
C	-0.470745	-4.597314	0.319021	O	-1.141368	-1.097978	-0.382846
C	-1.669500	-4.047303	-0.196465	O	-0.548376	-0.357027	-2.732774
C	0.560444	-5.154294	-0.629014	P	-1.088299	0.257136	-1.349520
O	-1.323848	-4.910977	3.902549	C	3.856603	-1.344544	-0.266519
O	0.346309	-5.503789	-1.781212	C	3.246544	-0.755366	-1.375237
O	1.766673	-5.289295	-0.005447	C	3.776261	-0.828021	-2.686934
C	2.809245	-5.895448	-0.808135	C	4.979565	-1.477399	-2.893873
C	-1.827088	-4.062271	4.979526	C	6.991853	-2.614757	-1.994699
H	0.639965	-5.402784	1.998151	C	7.730394	-3.086359	-0.922595
H	-2.597061	-4.065005	0.389797	C	7.213437	-2.969598	0.393978
H	-1.804691	-4.006244	-1.281436	C	5.962987	-2.413354	0.619324
H	-0.916484	-6.201209	1.747595	C	5.161579	-1.940222	-0.462403
H	3.648336	-6.055754	-0.119356	C	5.711509	-2.019284	-1.797773
H	2.459858	-6.847543	-1.234950	O	2.010514	-0.098153	-1.229408
H	3.101340	-5.214265	-1.621421	C	-3.957366	-1.309896	-0.677687
H	-2.054237	-4.756685	5.796469	C	-3.644603	-0.428262	-1.714350
H	-1.053544	-3.339963	5.276471	C	-4.276325	-0.467484	-2.981969
H	-2.730014	-3.531928	4.645002	C	-5.208782	-1.455232	-3.242286
R1a_01				C	-6.408386	-3.517861	-2.556703
114				C	-6.657428	-4.512146	-1.625279
Energy = -3594.383110530				C	-6.001561	-4.479570	-0.366685
Rh	-0.085927	2.239583	-0.655232	C	-5.131147	-3.448156	-0.046635
C	-0.125425	3.878075	0.865491	C	-4.866839	-2.394808	-0.972475
C	0.623486	4.275823	-0.261009	C	-5.506245	-2.452067	-2.267857
O	-3.420394	4.775446	-0.457061	O	-2.711438	0.605608	-1.504741
C	-2.325499	4.049448	-0.303289	H	-5.057143	5.215814	-1.587174
C	0.616004	3.608843	2.150462	H	-3.561616	4.890529	-2.553807
O	-1.918306	3.250847	-1.179113	H	0.167878	4.865149	-1.065310
O	1.830582	3.487418	2.253461	H	1.710578	4.337945	-0.179821
O	-0.243187	3.582403	3.205325	C	0.373762	3.457387	4.510511
C	-1.613462	4.211959	1.008867	H	-0.422640	3.686866	5.229493
C	4.446047	2.507282	-1.111443	H	1.819216	-0.996044	4.759929
C	-4.173376	4.577064	-1.695407	H	2.033831	1.045076	3.283136
C	2.160396	-1.083559	3.722852	H	3.542849	-3.924981	0.311292
C	2.268488	0.040373	2.924465	H	3.156779	-5.927510	1.703848
C	2.747800	-0.090308	1.597973	H	2.370516	-5.701217	4.074269
C	3.187797	-1.305648	1.064269	H	1.906789	-3.439470	5.014594
C	3.200845	-3.809455	1.342176	H	4.802738	1.548067	-0.706477
C	2.981565	-4.932986	2.125265	H	-1.811434	-2.043948	-2.837348
C	2.528752	-4.806750	3.464611	H	0.738478	2.429428	4.659382
C	2.274405	-3.550439	3.988743	H	1.213251	4.161487	4.605941
C	2.468077	-2.375550	3.204819	H	6.094772	2.844062	-2.459799
C	2.970699	-2.497761	1.855081	H	4.761971	1.896544	-3.178079
O	2.874624	1.098676	0.866851	H	4.582960	3.665967	-2.945200
O	2.959532	2.403300	-1.266542	H	-1.509299	-0.829423	4.152489
C	-0.866777	-1.709275	-3.293204	H	-0.180278	-0.909794	2.030383
C	4.997688	2.740639	-2.511782	H	-6.068114	-0.944490	0.905341
C	4.740266	3.642473	-0.137028	H	-7.349424	-0.713848	3.002556
C	-1.041121	-1.504661	-4.792738	H	-6.172637	-0.632897	5.215448
C	0.264987	-2.662178	-2.928129	H	-3.681599	-0.715700	5.296778
P	1.965072	1.390894	-0.494750	H	5.829220	3.713099	0.026869
C	-2.014363	-0.885721	3.182379	H	4.394938	4.606392	-0.548250
C	-1.272248	-0.931066	2.016413	H	4.251419	3.470198	0.834056
C	-1.943014	-1.031252	0.775047	H	-1.272416	-2.470978	-5.271815
				H	-1.865896	-0.806938	-5.006406

H	-0.115762	-1.107163	-5.241407	C	-3.204281	-0.666947	4.329899
H	0.048303	-3.660537	-3.346081	C	-3.038075	-1.132315	3.037566
H	1.222544	-2.311528	-3.345840	C	-3.586324	-0.392767	1.962049
H	0.365302	-2.757173	-1.836838	C	-4.328266	0.778068	2.134441
H	3.211525	-0.377293	-3.507214	C	-5.011159	2.587627	3.751063
H	5.397339	-1.557379	-3.902820	C	-5.082080	3.075528	5.047467
H	7.387188	-2.677499	-3.014249	C	-4.577049	2.317923	6.136679
H	8.714909	-3.534720	-1.085344	C	-3.979831	1.090717	5.901900
H	7.810317	-3.316310	1.243036	C	-3.870583	0.567943	4.579496
H	5.587989	-2.323468	1.640908	C	-4.424963	1.316231	3.473317
H	-4.015164	0.290371	-3.725118	O	-3.405295	-0.912550	0.666145
H	-5.713102	-1.494749	-4.213371	O	-2.647645	-0.760946	-1.727683
H	-6.892419	-3.540821	-3.538930	P	-2.278340	-0.131896	-0.286766
H	-7.346875	-5.328145	-1.860951	C	0.206436	-4.978919	1.119136
H	-6.179954	-5.279784	0.357965	C	-0.727023	-4.423113	0.241062
H	-4.627587	-3.443869	0.922482	C	-1.614956	-5.203485	-0.538500
H	-2.089200	3.519181	1.726536	C	-1.522772	-6.582566	-0.493440
H	-1.763266	5.228392	1.415550	C	-0.359506	-8.637130	0.274535
H	-4.451416	3.518689	-1.794463	C	0.651621	-9.248379	0.996966

B.2.2 Strukturen der _02 Spezies

Rlc_02				C	1.551665	-8.457631	1.758340
116				C	1.414896	-7.078437	1.810169
Energy = -3595.564563896				C	0.371867	-6.415612	1.096509
Rh	-0.010332	0.026242	-0.011689	C	-0.517003	-7.220198	0.289104
H	0.378289	-0.002937	3.337591	O	-0.875700	-3.021207	0.151098
H	-0.371649	-0.013864	3.358774	C	-4.956842	1.441429	0.957126
O	-0.202583	2.011969	0.779700	C	-4.186427	1.766439	-0.162664
C	0.836459	2.716147	0.745906	C	-4.690998	2.507439	-1.260342
C	2.147970	2.212894	0.207538	C	-6.020485	2.885825	-1.270858
C	1.973552	0.928288	-0.601278	C	-8.283575	2.819825	-0.254114
C	1.010665	0.860733	-1.659085	C	-9.140703	2.398881	0.748924
C	3.168443	0.037475	-0.721762	C	-8.635693	1.630255	1.830244
O	0.859059	3.951461	1.218836	C	-7.286850	1.316751	1.909390
O	3.339972	-0.794686	-1.605062	C	-6.369291	1.753376	0.907455
O	4.092612	0.282847	0.260695	C	-6.894731	2.499664	-0.213817
C	1.005887	-3.718514	-2.687233	O	-2.818449	1.441494	-0.211832
C	5.321917	-0.478441	0.132296	C	-0.378713	4.459881	1.808995
C	2.612721	-2.380502	3.633543	H	2.634872	3.016172	-0.377761
C	2.523794	-2.166199	2.269730	H	0.429915	1.751672	-1.935371
C	1.707792	-3.018810	1.488080	H	1.177740	0.145206	-2.469499
C	0.995694	-4.094689	2.020240	H	2.810205	2.034563	1.073323
C	0.215078	-5.241943	4.126286	H	3.253471	-1.741367	4.250117
C	0.266894	-5.385572	5.504870	H	3.073265	-1.359333	1.778591
C	1.124049	-4.569217	6.288407	H	-0.455944	-5.874783	3.541744
C	1.899312	-3.599350	5.674883	H	-0.362117	-6.136317	5.993027
C	1.859246	-3.413686	4.261502	H	1.161386	-4.700768	7.373998
C	1.019977	-4.272404	3.455842	H	2.549594	-2.948367	6.269243
O	1.684087	-2.791972	0.095673	H	1.081368	-4.449671	-1.866653
O	0.468340	-2.441104	-2.101757	H	-4.731976	-0.446191	-1.595280
C	-4.031249	-0.999461	-2.240341	H	5.966801	-0.121511	0.945238
C	-0.015019	-4.170930	-3.723088	H	0.335004	-5.103324	-4.197452
C	2.380091	-3.422655	-3.269818	H	-0.995292	-4.366694	-3.261718
C	-4.059770	-0.446101	-3.659325	H	-0.134331	-3.406068	-4.508216
C	-4.307372	-2.495861	-2.154912	H	-2.801779	-1.233840	5.175681
P	0.320116	-2.093810	-0.546053	H	-2.506659	-2.062051	2.819305
				H	-5.402209	3.185648	2.924764
				H	-5.530609	4.056749	5.231856
				H	-4.651339	2.709677	7.155555
				H	-3.568529	0.503878	6.730304
				H	2.800976	-4.352866	-3.688749
				H	2.305474	-2.679827	-4.081375
				H	3.063749	-3.031744	-2.503507
				H	-5.059498	-0.602332	-4.099166

H	-3.844633	0.633936	-3.668210	C	-1.961750	1.901814	2.618648
H	-3.316854	-0.959533	-4.291942	C	-1.578612	3.244569	2.649316
H	-5.318894	-2.711415	-2.538990	C	-0.390983	5.042936	3.954383
H	-3.579585	-3.055739	-2.766877	C	0.191318	5.485818	5.132771
H	-4.250760	-2.843650	-1.111716	C	0.226193	4.654217	6.282703
H	-2.366428	-4.694239	-1.146465	C	-0.301550	3.375290	6.222615
H	-2.211158	-7.200006	-1.079760	C	-0.891142	2.881304	5.022301
H	-1.048899	-9.232983	-0.333201	C	-0.966912	3.740584	3.862069
H	0.767124	-10.335897	0.972615	H	-1.349159	0.913011	5.832451
H	2.365959	-8.940522	2.307239	H	-2.265126	0.032259	3.660895
H	2.122209	-6.484792	2.393727	O	-2.505126	1.353719	1.442058
H	-4.008876	2.773748	-2.072026	H	-0.402835	5.693203	3.077193
H	-6.420760	3.470275	-2.105674	H	0.631617	6.486723	5.174446
H	-8.662290	3.396076	-1.105245	H	0.680343	5.020513	7.208103
H	-10.205712	2.644869	0.703620	H	-0.263897	2.715812	7.096296
H	-9.318727	1.275701	2.608187	O	-2.517109	0.913939	-1.036097
H	-6.918245	0.715686	2.743612	H	5.094879	0.183394	0.934633
H	5.118925	-1.555242	0.235319	H	4.892791	-0.656029	-0.639919
H	5.784382	-0.288866	-0.847999	H	-4.726068	2.665965	-2.909565
H	-0.143402	5.490478	2.097877	H	-2.941327	2.698727	-2.977034
H	-1.187089	4.426726	1.065358	H	-3.822619	1.180657	-3.333532
H	-0.647929	3.853038	2.685411	H	-5.889135	1.389455	-0.930451
R3c_02				H	-4.986034	-0.089105	-1.372255
116				H	-4.859287	0.585365	0.287842
Energy = -3595.566174688				O	-1.852587	-1.720962	1.519433
Rh	-0.173672	-0.831151	0.499412	C	-1.598585	-2.785199	2.138242
H	-1.669587	-2.812944	-1.919409	P	-1.461168	1.030771	0.176166
H	-2.292244	-2.532755	-1.609787	C	1.969730	0.367162	-4.043907
C	0.732174	-3.778051	-3.673840	C	1.618300	1.301821	-3.069448
C	1.346331	-3.127834	-2.618311	C	1.938162	2.679344	-3.158941
C	1.692745	-1.762797	-2.759636	C	2.683788	3.130783	-4.232285
C	1.485731	-1.036592	-3.934809	C	3.998903	2.666897	-6.284752
C	0.340399	-0.997677	-6.180226	C	4.509274	1.773111	-7.211155
C	-0.356545	-1.653567	-7.183962	C	4.210032	0.390534	-7.095132
C	-0.669184	-3.033250	-7.068976	C	3.388763	-0.075220	-6.078923
C	-0.300670	-3.728290	-5.929633	C	2.825348	0.038648	-5.120329
C	0.400606	-3.080759	-4.870490	C	3.165956	2.220440	-5.217162
C	0.760378	-1.687632	-5.003904	O	0.841338	0.912515	-1.959174
H	0.475572	-4.839152	-3.587828	H	1.584813	3.353008	-2.373953
H	1.583258	-3.649369	-1.686854	H	2.932563	4.193142	-4.323658
O	2.342452	-1.148375	-1.660670	H	4.237433	3.733935	-6.350026
H	0.562716	0.066727	-6.283288	H	5.151932	2.126742	-8.022793
H	-0.672204	-1.098712	-8.072878	H	4.635361	-0.317893	-7.812518
H	-1.211049	-3.539585	-7.873312	H	3.175590	-1.143645	-6.001287
H	-0.553979	-4.787978	-5.816647	C	-1.782498	4.099283	1.446187
O	2.625462	0.710117	0.040580	C	-1.283153	3.687108	0.209346
C	3.897570	1.271406	-0.514791	C	-1.356377	4.480843	-0.961475
C	-3.772717	1.706934	-1.226566	C	-1.991504	5.708137	-0.907190
C	4.037750	2.659863	0.096158	C	-3.328560	7.386121	0.339395
C	5.033761	0.322346	-0.157429	C	-3.972690	7.794248	1.495312
H	3.784757	1.340221	-1.607639	C	-3.925728	6.976107	2.654326
C	-3.812338	2.083952	-2.701723	C	-3.218742	5.782842	2.652677
C	-4.944073	0.839884	-0.779753	C	-2.522357	5.341524	1.487850
H	-3.697278	2.606479	-0.596174	C	-2.607217	6.156962	0.296954
H	4.959475	3.136785	-0.277870	O	-0.609396	2.453654	0.095429
H	3.181905	3.299382	-0.170430	H	-0.902537	4.104905	-1.882110
H	4.100063	2.596422	1.195109	H	-2.047727	6.339684	-1.799900
H	5.989716	0.747079	-0.508068	H	-3.373306	7.996894	-0.568643
P	1.463705	-0.053417	-0.763690	H	-4.527892	8.736727	1.514013
C	-1.389297	1.548694	4.941747	H	-4.457469	7.287101	3.558720
C	-1.895385	1.056170	3.752791	H	-3.202285	5.162152	3.551144
				C	-0.225561	-3.383164	2.202210

C	0.859197	-2.434007	1.697872	C	0.326335	-4.302978	-1.796938
C	1.021087	-1.125735	2.241770	C	3.828018	0.786016	-3.822801
C	1.972060	-3.182737	1.036732	C	3.276033	2.904061	-2.506987
O	-2.543144	-3.475525	2.757523	H	4.462940	1.233370	-1.794127
O	1.823466	-4.291571	0.518285	C	-0.639607	-4.636784	-2.925519
O	3.167541	-2.546357	1.106350	C	1.795597	-4.442139	-2.176573
C	4.269278	-3.271750	0.501824	H	0.100360	-4.901077	-0.900549
C	-3.913748	-2.983286	2.648741	H	-5.613825	-1.444412	-0.027618
H	-0.028319	-3.736703	3.232193	H	-3.010055	1.763206	0.740023
H	0.391272	-0.791517	3.077846	H	4.681265	1.278760	-4.318403
H	1.988128	-0.621510	2.168461	H	4.055341	-0.287424	-3.731818
H	-0.218114	-4.289054	1.566608	H	2.937411	0.908237	-4.461109
H	5.171765	-2.726811	0.804173	P	2.259088	0.196648	-0.340855
H	4.290890	-4.307272	0.871092	C	2.184481	-2.694196	4.303778
H	4.164617	-3.273865	-0.593637	C	2.146809	-2.599034	2.924716
H	-4.512380	-3.701642	3.220099	C	1.101759	-3.235227	2.214516
H	-3.987392	-1.974945	3.080670	C	0.114381	-4.006223	2.833418
H	-4.219067	-2.963838	1.592811	C	-0.959697	-4.636234	5.024657
S2c_02				C	-0.948451	-4.637581	6.411531
116				C	0.119153	-4.037604	7.129017
Energy = -3595.564013470				C	1.147328	-3.417646	6.439297
Rh	0.015376	-0.011282	0.010106	C	1.157949	-3.380522	5.013952
H	0.346596	-0.002146	3.431215	C	0.096128	-4.030094	4.279760
H	-0.393177	0.015415	3.307583	H	2.996943	-2.220156	4.864025
C	-2.091369	0.396257	-0.674246	H	2.910234	-2.057069	2.363214
C	-1.164370	0.191273	-1.742504	O	1.139357	-3.128976	0.807897
O	-1.433855	3.944887	0.128126	H	-1.794274	-5.095042	4.490067
C	-1.219397	2.641061	0.047451	H	-1.775027	-5.102861	6.957355
C	-3.136819	-0.654667	-0.451765	H	0.119551	-4.054940	8.222948
O	-0.077014	2.142905	0.208808	H	1.967424	-2.931709	6.978771
O	-3.281517	-1.658982	-1.142734	O	0.078642	-2.864466	-1.455726
O	-3.940618	-0.340430	0.603860	H	4.117232	3.451605	-2.965261
C	-2.444041	1.808726	-0.207890	H	2.375515	3.081755	-3.118778
C	-0.288003	4.796241	0.433505	H	3.113657	3.305155	-1.494513
H	-0.684937	5.817380	0.404856	H	-0.512795	-5.693385	-3.216287
H	0.100020	4.553110	1.433377	H	-1.683277	-4.484692	-2.611002
C	3.600301	1.414935	-2.453922	H	-0.439487	-4.007773	-3.808902
H	-3.101962	2.336235	-0.924490	H	2.008933	-5.490466	-2.446710
H	-0.726577	1.045181	-2.276594	H	2.029686	-3.806379	-3.047195
H	-1.235292	-0.730935	-2.326569	H	2.447439	-4.160464	-1.335116
C	-4.999985	-1.290454	0.872854	P	-0.004162	-2.226311	0.015845
H	-5.592889	-0.840359	1.679118	C	5.362560	-0.314569	0.764307
H	-4.573066	-2.251692	1.195645	C	4.635428	-1.014872	-0.202130
C	3.323984	1.569945	4.110784	C	5.240699	-1.699419	-1.283810
C	2.905032	1.784297	2.810583	C	6.613650	-1.641097	-1.437330
C	3.568634	1.124008	1.748365	C	8.820776	-0.742623	-0.744120
C	4.663425	0.276463	1.941089	C	9.588931	0.050551	0.091601
C	6.041176	-0.993999	3.627483	C	8.970171	0.762571	1.152233
C	6.381805	-1.258299	4.945918	C	7.606698	0.651575	1.380855
C	5.753298	-0.561477	6.011482	C	6.787384	-0.176670	0.556804
C	4.768365	0.372945	5.735832	C	7.413901	-0.865834	-0.549036
C	4.379391	0.655096	4.392988	O	3.234170	-1.127031	-0.088976
C	5.048736	-0.020058	3.303597	H	4.606830	-2.273939	-1.963820
H	2.831770	2.084671	4.942225	H	7.099354	-2.176961	-2.259354
H	2.080169	2.460433	2.572666	H	9.281476	-1.281385	-1.578938
O	3.123770	1.398414	0.443803	H	10.667169	0.140090	-0.070338
H	6.529784	-1.545065	2.821091	H	9.574068	1.410385	1.794855
H	7.141437	-2.014553	5.165843	H	7.146485	1.214334	2.196090
H	6.041514	-0.770602	7.045987	C	-0.893453	-4.734913	2.014238
H	4.262728	0.905504	6.548531	C	-1.628905	-4.048103	1.047986
O	2.420109	0.709628	-1.866176	C	-2.677612	-4.628566	0.294432
				C	-2.972167	-5.966769	0.485314

C	-2.455875	-8.160374	1.526374	P	2.262063	0.145699	-0.520479
C	-1.675575	-8.943918	2.360041	C	-0.153439	4.537212	2.347468
C	-0.601908	-8.356077	3.078724	C	0.806607	4.155592	1.409946
C	-0.340567	-6.997631	2.977874	C	1.790525	5.036710	0.900619
C	-1.139350	-6.154346	2.148944	C	1.782843	6.360460	1.299076
C	-2.205031	-6.763829	1.384599	C	0.713380	8.230155	2.530526
O	-1.374550	-2.674725	0.824262	C	-0.298761	8.714022	3.342242
H	-3.227998	-3.994025	-0.405361	C	-1.299730	7.829946	3.822752
H	-3.787838	-6.436024	-0.074754	C	-1.262286	6.478826	3.511508
H	-3.274461	-8.604882	0.950204	C	-0.221317	5.939675	2.698217
H	-1.875028	-10.015377	2.455909	C	0.772533	6.850427	2.176283
H	0.030492	-8.981428	3.716186	O	0.874827	2.816296	0.968472
H	0.494993	-6.563405	3.531166	C	4.702209	-2.152474	-0.434013
H	0.496939	4.652823	-0.322399	C	3.874356	-1.795617	-1.501921
Sla_02				C	4.248359	-1.964267	-2.858565
116				C	5.507549	-2.447517	-3.161268
Energy = -3595.561833917				C	7.770332	-3.160464	-2.433007
Rh	0.019681	0.008319	0.013819	C	8.694206	-3.390256	-1.427439
H	0.241301	-0.291726	3.255520	C	8.323780	-3.191480	-0.071896
H	-0.404606	0.003568	3.499044	C	7.037207	-2.795096	0.261437
O	0.253769	-2.103999	0.367389	C	6.051426	-2.571745	-0.745798
C	-0.273303	-2.801659	-0.533174	C	6.444554	-2.735064	-2.127130
C	-0.955858	-2.172617	-1.715911	O	2.569507	-1.320650	-1.271328
C	-1.465065	-0.772763	-1.356584	C	0.473639	-4.754476	0.591604
C	-2.095837	-0.505149	-0.109348	H	-0.208679	-2.105200	-2.527025
C	-1.781567	0.139564	-2.516605	H	-2.280347	-1.312115	0.608937
O	-0.241384	-4.121923	-0.517771	H	-2.783878	0.342730	-0.070019
O	-2.557346	1.084760	-2.461645	H	-1.772584	-2.817229	-2.089367
O	-1.119425	-0.239820	-3.641893	H	-3.832016	1.045389	4.298125
C	-0.801658	4.376013	-1.655906	H	-3.455394	1.282788	1.835424
C	-1.382707	0.580418	-4.808040	H	0.408422	4.643779	4.942723
C	-3.048570	1.708721	3.916991	H	0.119118	4.274578	7.366060
C	-2.843673	1.831438	2.554894	H	-1.685477	2.757367	8.220492
C	-1.842530	2.711390	2.077218	H	-3.162731	1.559054	6.607494
C	-1.082809	3.525100	2.920840	H	-0.752545	4.898075	-0.687711
C	-0.383976	3.980924	5.297750	H	4.700482	0.752824	-1.725305
C	-0.546610	3.770367	6.658909	H	-0.836612	0.098556	-5.628580
C	-1.562982	2.906176	7.143620	H	-0.099926	6.033600	-2.844448
C	-2.386096	2.243183	6.249062	H	1.209258	4.983701	-2.230823
C	-2.234414	2.422174	4.842715	H	0.181345	4.435452	-3.593746
C	-1.227920	3.332763	4.346980	H	3.068773	-1.590884	4.724498
O	-1.689327	2.808806	0.679210	H	2.893941	0.308972	3.088611
O	-0.324901	2.967894	-1.430113	H	4.895758	-4.672121	0.418374
C	4.077531	1.625016	-1.978878	H	4.902685	-6.563011	2.008198
C	0.186875	4.988318	-2.639827	H	4.260920	-6.214783	4.407771
C	-2.235283	4.329099	-2.166406	H	3.545134	-3.956057	5.183194
C	4.000088	1.805372	-3.490003	H	-2.577687	5.357609	-2.374236
C	4.580174	2.858695	-1.237920	H	-2.302194	3.738416	-3.092967
P	-0.308377	2.198716	-0.024687	H	-2.907306	3.880513	-1.420672
C	3.358187	-1.727297	3.677467	H	5.004411	2.026685	-3.889054
C	3.257223	-0.676179	2.784122	H	3.627401	0.892235	-3.980151
C	3.658070	-0.869612	1.439924	H	3.330824	2.642943	-3.747156
C	4.201185	-2.066442	0.967471	H	5.614771	3.082694	-1.549231
C	4.605767	-4.505793	1.458453	H	3.953410	3.734094	-1.478077
C	4.609566	-5.566585	2.353184	H	4.573506	2.693252	-0.149696
C	4.240944	-5.372179	3.710294	H	2.543350	4.641711	0.214558
C	3.847218	-4.116589	4.142632	H	2.544306	7.053407	0.926023
C	3.812036	-3.007739	3.246493	H	1.481291	8.903858	2.135342
C	4.226325	-3.192958	1.873401	H	-0.336675	9.775779	3.602812
O	3.536171	0.225029	0.564975	H	-2.114037	8.218333	4.441975
O	2.684871	1.346064	-1.515420	H	-2.047103	5.815932	3.882366
				H	3.523290	-1.717522	-3.638765

```

H   5.805498  -2.594954  -4.204570
H   8.047868  -3.290501  -3.484565
H   9.710526  -3.710924  -1.674718
H   9.062702  -3.347107   0.720118
H   6.774347  -2.636412   1.309747
H  -2.462446   0.611810  -5.016896
H  -1.012078   1.602394  -4.637750
H   0.398327  -5.828859   0.389778
H   1.520840  -4.421204   0.601741
H  -0.015411  -4.494719   1.541308

```

B.2.3 Strukturen der _03 Spezies

```

Rlc_03
116
Energy = -3595.576289391
Rh -0.007102  -0.338081   1.713316
O  -1.651449  -1.587239   2.361712
C  -1.461461  -2.174615   3.454844
C  -0.167813  -2.072586   4.211928
C   0.638690  -0.855349   3.756875
C  -0.005809   0.436472   3.670045
C   2.099556  -0.875769   4.076672
O  -2.382549  -2.955144   3.996486
O   2.811848   0.115249   4.191343
O   2.565987  -2.151414   4.266346
C   3.387786   2.947164   1.697125
C   3.954489  -2.228072   4.678770
C   3.614049  -3.467179  -0.069210
C   3.404243  -2.376197   0.755006
C   3.427557  -1.074844   0.197519
C   3.679477  -0.823757  -1.152712
C   3.916638  -1.835746  -3.449719
C   4.042320  -2.952660  -4.262513
C   4.075041  -4.257051  -3.703760
C   3.950460  -4.421850  -2.334641
C   3.800862  -3.297047  -1.471229
C   3.813574  -1.964644  -2.031894
O   3.234634   0.004513   1.083700
O   2.102642   2.163746   1.783183
C  -1.990793   3.719516   0.109570
C   2.976811   4.392275   1.449935
C   4.156319   2.738497   2.993135
C  -2.353881   4.707529   1.211685
C  -1.113448   4.313572  -0.986844
P   1.775669   0.796718   1.024250
C  -1.809861  -2.268524  -2.759508
C  -1.351968  -1.062694  -2.258815
C  -2.255384  -0.209067  -1.580316
C  -3.610753  -0.501431  -1.414847
C  -5.399554  -2.265764  -1.614907
C  -5.810888  -3.514094  -2.058288
C  -4.923264  -4.358140  -2.775988
C  -3.623014  -3.944528  -3.013399
C  -3.160915  -2.674784  -2.557296
C  -4.075418  -1.794758  -1.863535
O  -1.748838   1.006380  -1.085763
O  -1.218022   2.622491   0.767150

```

```

P  -1.487030   1.041811   0.565410
C   3.760085   0.579556  -1.644929
C   2.716190   1.470001  -1.382608
C   2.659412   2.778751  -1.919557
C   3.708510   3.236253  -2.695797
C   5.977321   2.918069  -3.651065
C   7.112818   2.144462  -3.824130
C   7.172530   0.843556  -3.259053
C   6.094733   0.325142  -2.556904
C   4.899690   1.084142  -2.378340
C   4.857965   2.423952  -2.919283
O   1.608202   1.056162  -0.610268
C  -4.508271   0.500135  -0.772003
C  -4.186541   1.036226   0.478303
C  -5.049709   1.905436   1.191282
C  -6.244246   2.298909   0.617397
C  -7.785938   2.338754  -1.326582
C  -8.095797   1.970476  -2.625003
C  -7.210282   1.129441  -3.348256
C  -6.050693   0.646612  -2.759919
C  -5.711213   0.983281  -1.415135
C  -6.592859   1.876333  -0.697985
O  -3.004158   0.661344   1.142134
C  -3.630656  -3.121479   3.253471
H  -0.372337  -2.059523   5.298811
H  -1.044211   0.542873   4.012537
H   0.612529   1.327959   3.808542
H   0.396072  -3.003691   4.021886
H   0.060248  -1.458532   0.206967
H   3.617833  -4.479899   0.347705
H   3.225782  -2.489301   1.827525
H   3.887453  -0.840435  -3.899182
H   4.114960  -2.825407  -5.347064
H   4.186494  -5.128065  -4.356196
H   3.953799  -5.423306  -1.890955
H   3.954663   2.550217   0.839807
H  -2.899624   3.278402  -0.329392
H   0.576172  -1.820427   0.739636
H   4.147463  -3.296084   4.841994
H   3.879982   5.022793   1.392205
H   2.422892   4.495971   0.504096
H   2.348198   4.762468   2.276431
H  -1.130877  -2.933169  -3.303475
H  -0.316828  -0.736286  -2.389116
H  -6.094272  -1.630183  -1.061489
H  -6.831427  -3.851073  -1.851704
H  -5.264833  -5.335418  -3.129664
H  -2.921859  -4.592899  -3.549857
H   5.100675   3.307227   2.942998
H   3.574116   3.103476   3.854667
H   4.384250   1.676473   3.156709
H  -2.917538   5.552857   0.781987
H  -2.980638   4.230506   1.981686
H  -1.444525   5.103945   1.692400
H  -1.654001   5.131242  -1.493367
H  -0.186936   4.728720  -0.555023
H  -0.857367   3.550084  -1.737179
H   1.776433   3.390829  -1.721440
H   3.675168   4.240079  -3.131426
H   5.925682   3.931002  -4.064300
H   7.967649   2.537014  -4.382488
H   8.080572   0.244038  -3.373979

```

H	6.161365	-0.674158	-2.121105	H	-3.868018	1.620155	-6.778286
H	-4.753670	2.236078	2.190424	H	-4.361261	-0.727858	-7.507759
H	-6.927078	2.958347	1.162950	H	-2.936821	-2.603724	-6.689925
H	-8.448258	3.004542	-0.762977	O	2.659997	0.385915	-0.841004
H	-9.011499	2.336706	-3.098555	H	-4.877328	-0.604670	0.899130
H	-7.441397	0.862389	-4.383943	H	-4.119415	-0.499676	2.523045
H	-5.376579	0.009620	-3.336703	H	4.977964	2.777753	-1.442268
H	4.612335	-1.826021	3.893137	H	3.415964	2.936413	-0.590403
H	4.108199	-1.655866	5.605854	H	4.684494	1.851503	0.059695
H	-4.247097	-3.766779	3.889720	H	5.503114	0.540717	-2.709844
H	-4.104619	-2.142319	3.097684	H	5.207754	-0.371691	-1.200762
H	-3.425496	-3.598442	2.284331	H	4.278871	-0.761007	-2.687371
R3c_03				O	1.634371	-3.228262	-0.860499
116				C	1.253072	-4.419788	-0.737009
Energy = -3595.574879052				P	1.203654	-0.156689	-1.285364
Rh	0.354467	-1.784084	0.141886	C	-0.340002	1.758473	3.803021
C	0.992791	-2.111886	5.251937	C	-0.395901	2.027042	2.435276
C	0.019695	-2.022019	4.272107	C	-0.772663	3.284337	1.902527
C	-0.353420	-0.743444	3.792248	C	-1.157300	4.294661	2.764307
C	0.180117	0.449325	4.285697	C	-1.690673	5.079174	5.057392
C	1.995816	1.490748	5.691088	C	-1.803964	4.837534	6.416244
C	3.029760	1.359048	6.606071	C	-1.459822	3.562467	6.936360
C	3.381962	0.085859	7.125596	C	-0.983147	2.561176	6.103173
C	2.706589	-1.043325	6.694313	C	-0.829068	2.781447	4.702140
C	1.651556	-0.947102	5.740065	C	-1.221879	4.066866	4.169639
C	1.260398	0.352557	5.243034	O	0.005688	1.046935	1.500888
H	1.282056	-3.091340	5.646947	H	-0.747613	3.425349	0.818853
H	-0.475174	-2.912226	3.872759	H	-1.439807	5.276924	2.371535
O	-1.362205	-0.699735	2.799797	H	-1.972411	6.051450	4.639226
H	1.745213	2.477787	5.296076	H	-2.169835	5.620368	7.087127
H	3.582457	2.247172	6.927394	H	-1.575981	3.364337	8.006229
H	4.193117	-0.001348	7.854496	H	-0.731131	1.583619	6.520115
H	2.980691	-2.034627	7.070940	C	0.304056	1.652311	-3.949349
O	-2.295469	0.025799	0.555568	C	0.448195	2.034194	-2.614045
C	-3.362200	0.938986	1.082420	C	0.804506	3.346314	-2.217065
C	3.668909	1.079013	-1.699171	C	1.066185	4.299235	-3.184045
C	-3.789242	1.795529	-0.102340	C	1.367325	4.919899	-5.567154
C	-4.478719	0.083307	1.662607	C	1.383475	4.575078	-6.908158
H	-2.908140	1.563895	1.867451	C	1.067865	3.247013	-7.297387
C	4.215236	2.230250	-0.863408	C	0.715426	2.294884	-6.352482
C	4.725550	0.053546	-2.096736	C	0.662202	2.619754	-4.964000
H	3.147279	1.458896	-2.591550	C	1.026741	3.961719	-4.567710
H	-4.571260	2.504260	0.218098	O	0.171207	1.114533	-1.583424
H	-2.939422	2.369261	-0.502935	H	0.862455	3.576471	-1.149930
H	-4.199778	1.166355	-0.909241	H	1.331179	5.321313	-2.894107
H	-5.299124	0.737473	2.004313	H	1.630061	5.934799	-5.249712
P	-0.894449	-0.321331	1.249499	H	1.652069	5.317361	-7.665661
C	-0.819935	-2.402222	-5.031384	H	1.108171	2.968485	-8.354834
C	0.204559	-2.162489	-4.134063	H	0.486115	1.275852	-6.670978
C	0.501654	-0.831807	-3.749751	C	0.034022	-4.799481	0.044814
C	-0.159312	0.276357	-4.285663	C	-0.876443	-3.598712	0.301919
C	-2.144288	1.073468	-5.616823	C	-1.283335	-2.747232	-0.790007
C	-3.225686	0.800692	-6.441552	C	-1.698484	-3.808050	1.533230
C	-3.510669	-0.528755	-6.849250	O	1.929382	-5.427421	-1.267959
C	-2.717694	-1.570858	-6.398530	O	-1.341222	-4.522741	2.472537
C	-1.609622	-1.328296	-5.534893	O	-2.897454	-3.172067	1.497890
C	-1.291673	0.028348	-5.150626	C	-3.728107	-3.393767	2.666193
H	-1.048476	-3.424525	-5.350774	C	3.174378	-5.106951	-1.959971
H	0.811877	-2.971837	-3.720824	H	-0.494148	-5.625297	-0.468556
O	1.562556	-0.650802	-2.846406	H	-1.006030	-3.018096	-1.817319
H	-1.944522	2.101645	-5.306815	H	-2.225094	-2.197422	-0.715758
				H	0.364271	-5.212231	1.017770

H	1.860032	-1.413286	1.247219	C	-6.973352	1.780843	-1.020192
H	1.473358	-2.006162	1.651487	C	-6.067513	1.833623	0.081213
H	-4.713334	-2.992544	2.398828	C	-6.354917	2.762938	1.150461
H	-3.787517	-4.467969	2.893376	O	-2.743670	0.596570	1.267163
H	-3.312977	-2.858477	3.533838	C	4.765166	0.201832	-0.815496
H	3.559403	-6.074886	-2.300374	C	4.032341	-0.882488	-1.305545
H	2.971955	-4.440260	-2.810252	C	4.471677	-1.699152	-2.375996
H	3.874927	-4.625020	-1.262879	C	5.650053	-1.384649	-3.026703
R4c_03				C	7.561951	0.154829	-3.386531
116				C	8.253296	1.310633	-3.065456
Energy = -3595.569598771				C	7.790276	2.137850	-2.009420
Rh	-0.180263	-1.156299	0.446994	C	6.668058	1.788028	-1.273642
O	-1.835254	-2.069992	1.494755	C	5.944087	0.592158	-1.559246
C	-1.507769	-2.987322	2.288962	C	6.393186	-0.224649	-2.663945
C	-0.087516	-3.426192	2.451628	O	2.819545	-1.272148	-0.694240
C	0.889470	-2.363181	1.944001	C	-3.805377	-3.258119	2.828121
C	0.750885	-0.988747	2.352283	H	0.105499	-3.700636	3.505969
C	2.216134	-2.998293	1.626985	H	-0.022882	-0.715418	3.082916
O	-2.405771	-3.640001	3.007789	H	1.642464	-0.357961	2.393726
O	2.327027	-4.128119	1.157530	H	0.059822	-4.352781	1.862933
O	3.267114	-2.228467	2.002006	H	-0.956691	-1.940832	-1.098800
C	4.564755	-2.826317	1.759429	H	-0.414436	-2.498290	-0.835111
C	-1.510023	3.489589	0.104638	H	5.291479	-2.081437	2.106570
C	-3.932041	-1.882392	-2.952473	H	4.659959	-3.765914	2.324945
C	-3.034083	-0.883661	-2.618998	H	4.695913	-3.034706	0.686907
C	-3.355997	0.016549	-1.573532	H	-3.709449	-2.575939	-3.769855
C	-4.564750	-0.021208	-0.875349	H	-2.087543	-0.754079	-3.150513
C	-6.657501	-1.345935	-0.406266	H	-6.901187	-0.675861	0.421273
C	-7.499001	-2.408018	-0.704315	H	-8.402683	-2.564802	-0.107292
C	-7.200857	-3.292223	-1.774570	H	-7.879503	-4.118625	-2.005407
C	-6.044185	-3.110668	-2.514308	H	-5.793333	-3.795166	-3.331681
C	-5.146776	-2.040481	-2.223933	H	-2.593808	3.298338	0.067322
C	-5.468689	-1.113249	-1.161359	H	2.760600	0.575235	-3.108180
O	-2.411964	1.012292	-1.262501	H	-1.665799	5.318789	1.243128
O	-0.820151	2.174302	0.295686	H	-1.493706	3.856950	2.253780
C	1.717736	0.435883	-3.431988	H	-0.075571	4.518272	1.377069
C	-1.162774	4.340333	1.320868	H	3.050054	2.990603	3.533061
C	-1.033888	4.083368	-1.215179	H	1.508980	2.506336	1.596506
C	1.644689	-0.548755	-4.591967	H	6.866932	-0.070859	0.810177
C	1.066760	1.781931	-3.721290	H	8.295972	0.284691	2.789147
P	-1.528833	0.726632	0.134055	H	7.494571	1.685287	4.709547
C	3.393611	2.401422	2.676491	H	5.206027	2.674233	4.648221
C	2.541104	2.148401	1.617584	H	-1.509599	5.066892	-1.371128
C	3.017051	1.398934	0.515396	H	0.059354	4.226397	-1.203768
C	4.323626	0.918486	0.414175	H	-1.304271	3.430774	-2.058817
C	6.498521	0.538710	1.637988	H	2.179760	-0.132762	-5.462200
C	7.301617	0.740104	2.751885	H	2.110682	-1.511232	-4.328584
C	6.847390	1.527735	3.841869	H	0.597328	-0.729488	-4.885852
C	5.578260	2.080723	3.806383	H	1.584633	2.267842	-4.565733
C	4.719634	1.879148	2.685663	H	0.006262	1.650980	-3.994437
C	5.193395	1.112091	1.555161	H	1.132426	2.445069	-2.845752
O	2.116924	1.197477	-0.551179	H	-3.512475	2.301740	3.037346
O	0.969570	-0.199138	-2.298096	H	-5.667118	3.588427	3.044952
P	1.477970	-0.312626	-0.771509	H	-7.754065	4.234919	1.923928
C	-4.865523	1.029186	0.139457	H	-9.323006	4.058746	-0.006437
C	-3.961923	1.293103	1.173392	H	-8.786563	2.515287	-1.909096
C	-4.243047	2.194181	2.231272	H	-6.753268	1.118012	-1.859672
C	-5.431897	2.899383	2.227242	H	3.873946	-2.572544	-2.650163
C	-7.546300	3.544605	1.099228	H	6.012081	-2.014705	-3.845882
C	-8.415202	3.449111	0.025044	H	7.895079	-0.482498	-4.212793
C	-8.114386	2.569311	-1.047363	H	9.145670	1.594809	-3.631041
				H	8.321603	3.065422	-1.774982

H	6.321278	2.442964	-0.470823	C	-2.774381	2.051595	-0.307535
H	-4.359510	-3.912249	3.510834	C	-4.299399	3.292181	-1.885098
H	-3.937875	-2.199858	3.093685	C	-4.476825	4.191406	-2.925990
H	-4.107888	-3.424567	1.784619	C	-3.363905	4.837156	-3.525193
S2c_03				C	-2.083199	4.545444	-3.087225
116				C	-1.862630	3.611819	-2.032131
Energy = -3595.576397107				C	-2.996561	2.987482	-1.388450
Rh	-0.180094	-2.047803	-0.621899	H	0.311765	3.755832	-2.100010
C	-1.456962	-3.836337	-0.834296	H	0.668460	2.016809	-0.328580
C	-0.612580	-3.878663	0.335422	O	-1.168833	0.757283	0.986216
O	0.988240	-5.121681	-3.271001	H	-5.167461	2.798396	-1.443338
C	0.407042	-4.261141	-2.448766	H	-5.486671	4.400952	-3.291646
C	-2.936325	-3.707487	-0.628709	H	-3.520052	5.551409	-4.339095
O	1.006764	-3.244976	-2.017062	H	-1.212753	5.018770	-3.553772
O	-3.490352	-3.597256	0.461505	O	-1.561883	-1.405955	2.209343
O	-3.609739	-3.758736	-1.814309	H	5.513265	-4.007813	1.043881
C	-1.023545	-4.564565	-2.107464	H	3.924518	-4.787878	0.797152
C	2.359922	-4.836532	-3.680062	H	4.463982	-3.467518	-0.297173
H	2.644342	-5.686418	-4.310756	H	-3.477352	-1.329886	4.997853
H	2.390794	-3.896643	-4.249981	H	-3.755089	-2.205535	3.462006
C	3.832760	-2.801598	1.674430	H	-2.329930	-2.597223	4.472168
H	-1.163680	-5.659343	-2.034043	H	-1.444236	0.375893	5.109421
H	0.298455	-4.491075	0.328562	H	-0.354956	-0.933928	4.566529
H	-1.087705	-3.784623	1.315711	H	-0.455533	0.600211	3.636017
C	-5.050247	-3.665424	-1.708134	P	-1.487737	-0.845165	0.710623
H	-5.426363	-3.832503	-2.725577	C	3.885554	1.184785	0.814505
H	-5.339852	-2.666489	-1.348358	C	3.009065	0.579878	1.719436
C	2.942485	1.253104	-3.430096	C	3.226737	0.569038	3.118757
C	2.894840	0.074509	-2.708509	C	4.381574	1.133199	3.628662
C	3.174404	0.097087	-1.320342	C	6.596805	2.194318	3.273696
C	3.529613	1.259832	-0.631377	C	7.577125	2.678634	2.423944
C	3.686221	3.774237	-0.731307	C	7.366807	2.656098	1.020503
C	3.644375	4.952293	-1.462376	C	6.177861	2.179404	0.488751
C	3.416120	4.929228	-2.863773	C	5.135151	1.695330	1.334100
C	3.203150	3.720166	-3.506051	C	5.369821	1.680551	2.760399
C	3.220149	2.491403	-2.781808	O	1.806695	0.002784	1.263091
C	3.497592	2.507638	-1.362430	H	2.466103	0.125300	3.765915
H	2.745557	1.250397	-4.507046	H	4.558075	1.146070	4.709114
H	2.662608	-0.884152	-3.179218	H	6.753564	2.186258	4.357630
O	3.136988	-1.128761	-0.637367	H	8.516851	3.064920	2.829314
H	3.856499	3.811623	0.346674	H	8.153215	3.013618	0.348947
H	3.786569	5.909618	-0.952026	H	6.038558	2.159594	-0.594459
H	3.399834	5.865146	-3.430106	C	-3.895121	1.432449	0.453704
H	3.009361	3.688144	-4.583592	C	-3.975283	0.043392	0.557976
O	2.410921	-2.615748	1.251001	C	-5.051766	-0.643324	1.167894
C	-2.169667	-0.717379	3.396164	C	-6.072813	0.095143	1.738579
C	3.787204	-3.241445	3.132387	C	-7.032862	2.281873	2.413800
C	4.466996	-3.828862	0.742553	C	-6.953850	3.662731	2.480818
H	4.343161	-1.830182	1.577335	C	-5.847164	4.334857	1.899422
C	-2.982705	-1.780882	4.121143	C	-4.854604	3.626683	1.238767
C	-1.030504	-0.132899	4.222094	C	-4.914971	2.205510	1.127992
H	-2.823416	0.083347	3.016730	C	-6.021280	1.519848	1.758680
H	-5.434569	-4.430570	-1.016774	O	-2.963656	-0.755034	-0.022552
H	-1.638804	-4.237582	-2.965966	H	-5.041423	-1.736598	1.159863
H	4.813604	-3.407007	3.500841	H	-6.924620	-0.410948	2.204881
H	3.314551	-2.472716	3.763364	H	-7.871089	1.749087	2.875558
H	3.223820	-4.183344	3.238130	H	-7.734028	4.235488	2.990801
P	1.819210	-1.398713	0.363706	H	-5.773198	5.423867	1.976593
C	-0.542810	3.267900	-1.620493	H	-4.005599	4.159103	0.804085
C	-0.335000	2.309627	-0.645466	H	-0.053454	-0.631710	-1.841497
C	-1.451183	1.704040	-0.021198	H	-0.722385	-1.051461	-2.092106
				H	3.007702	-4.764227	-2.795008


```

S4c_03
116
Energy = -3595.575208574
Rh -0.019304 -0.747661 1.178966
C -3.535953 -2.498588 -2.393461
C -2.645599 -1.465347 -2.165251
C -3.063405 -0.343445 -1.409514
C -4.360001 -0.199770 -0.909458
C -6.557062 -1.351380 -0.459049
C -7.399171 -2.440695 -0.628447
C -7.000024 -3.550945 -1.418134
C -5.745640 -3.561183 -2.004885
C -4.847457 -2.466245 -1.836780
C -5.266550 -1.315341 -1.068328
H -3.232921 -3.367473 -2.986869
H -1.621799 -1.486254 -2.545781
O -2.126081 0.689506 -1.222633
H -6.878835 -0.508557 0.156648
H -8.381099 -2.444224 -0.145376
H -7.678378 -4.398777 -1.551426
H -5.416485 -4.419132 -2.600875
O -0.908621 2.384497 0.160661
C -1.555283 3.496639 -0.606816
C 1.782464 -0.772911 -3.156148
C -1.495071 4.727741 0.289309
C -0.804805 3.657790 -1.923703
H -2.600944 3.207704 -0.794473
C 1.759096 -2.109528 -3.884635
C 1.070090 0.352509 -3.894052
H 2.815714 -0.481713 -2.913167
H -1.968534 5.580571 -0.225606
H -2.031144 4.557526 1.236083
H -0.450353 5.000476 0.514309
H -1.244098 4.490418 -2.499535
P -1.461093 0.866990 0.301231
C 3.250055 3.468161 1.719882
C 2.412720 2.777408 0.862972
C 2.933069 1.697384 0.110611
C 4.270654 1.296425 0.166234
C 6.464541 1.537524 1.386207
C 7.255905 2.195982 2.315598
C 6.756966 3.315170 3.031841
C 5.455577 3.739088 2.822497
C 4.608517 3.074289 1.887877
C 5.127400 1.962284 1.123864
H 2.868222 4.314942 2.300105
H 1.357733 3.033464 0.743173
O 2.035798 1.053940 -0.770639
H 6.864698 0.672666 0.853349
H 8.275474 1.844591 2.501308
H 7.395445 3.829833 3.756042
H 5.048742 4.587427 3.383576
O 1.062026 -1.003882 -1.857006
H 0.258787 3.886989 -1.742123
H -0.877037 2.742255 -2.529413
H 2.300241 -2.015344 -4.841163
H 2.242300 -2.895437 -3.284736
H 0.723001 -2.417772 -4.103978
H 1.567008 0.525204 -4.864294
H 0.017130 0.088958 -4.089505
H 1.105688 1.288143 -3.315953

```

```

C 0.198256 -2.917328 1.506550
C -0.734201 -2.599236 0.452240
P 1.510166 -0.480546 -0.407992
C -4.754609 1.058275 -0.214927
C -3.992396 1.535745 0.853330
C -4.368330 2.655979 1.634125
C -5.511202 3.359405 1.302769
C -7.419505 3.762557 -0.230778
C -8.139782 3.436426 -1.367354
C -7.740942 2.329336 -2.160602
C -6.652016 1.551570 -1.797132
C -5.899616 1.842953 -0.620106
C -6.284275 2.995636 0.162662
O -2.825629 0.856812 1.254350
H -3.749418 2.930288 2.492818
H -5.822800 4.220268 1.903793
H -7.703461 4.626201 0.380318
H -9.005982 4.036198 -1.662416
H -8.295768 2.088886 -3.072789
H -6.354519 0.709014 -2.425734
C 4.755471 0.175278 -0.685613
C 4.082614 -1.046766 -0.659641
C 4.531038 -2.209953 -1.329683
C 5.676602 -2.131937 -2.101717
C 7.501581 -0.791700 -3.120629
C 8.139551 0.422025 -3.315670
C 7.657278 1.586277 -2.661839
C 6.567996 1.519020 -1.805858
C 5.899922 0.282056 -1.563114
C 6.367341 -0.894760 -2.262386
O 2.910227 -1.176030 0.119586
H 3.959305 -3.133865 -1.206275
H 6.052793 -3.020044 -2.620115
H 7.852072 -1.693714 -3.633777
H 9.005385 0.489079 -3.981015
H 8.147443 2.548688 -2.837723
H 6.205188 2.425067 -1.315073
O -2.117867 -2.561606 4.345855
C -1.323999 -2.200674 3.350328
C 1.477455 -3.594821 1.115888
O -1.385504 -1.056707 2.836117
O 1.808307 -3.865395 -0.035615
O 2.226877 -3.913375 2.208890
C -0.322291 -3.229297 2.910299
C -3.060250 -1.559232 4.838892
H -3.634970 -2.077881 5.614547
H -2.507632 -0.706638 5.259405
H -0.767422 -4.239141 2.978778
H -1.813600 -2.661364 0.642180
H -0.442147 -2.840835 -0.573025
C 3.469109 -4.599992 1.925177
H 3.880152 -4.869796 2.906260
H 4.157740 -3.930478 1.387729
H 3.281077 -5.497846 1.317233
H 0.506962 -3.211542 3.640924
H 0.807267 0.584805 2.235796
H 1.182336 -0.112712 2.459014
H -3.708391 -1.221198 4.018414

```

```

S1a_03
116
Energy = -3595.573834769

```

Rh	1.457674	0.394690	-0.053082	C	-1.857963	-0.298822	5.649271
O	2.528695	-0.449447	1.622302	C	-1.992809	0.910922	6.428921
C	3.279070	0.380816	2.193668	O	0.278343	1.020989	2.882118
C	3.374925	1.807122	1.734190	C	3.875965	-1.309110	3.751829
C	2.953452	1.924054	0.264748	H	2.694880	2.395948	2.375057
C	3.424411	0.963956	-0.700450	H	4.146960	0.195023	-0.401506
C	2.668588	3.316633	-0.225442	H	3.511066	1.304593	-1.736007
O	4.009147	0.057299	3.246241	H	4.393001	2.201515	1.908109
O	2.767775	3.680421	-1.390941	H	3.851479	-2.751127	-4.194720
O	2.324321	4.147493	0.798796	H	3.453663	-0.393076	-3.436439
C	-0.425620	3.338291	-3.265472	H	-1.689983	-3.082699	-4.928425
C	2.081697	5.521008	0.409545	H	-1.287902	-5.443929	-5.526925
C	2.839921	-2.332285	-4.183953	H	1.041264	-6.370968	-5.571786
C	2.630005	-1.031829	-3.763172	H	2.966288	-4.915699	-4.944319
C	1.317065	-0.502332	-3.779367	H	-0.817522	2.566280	-3.946491
C	0.210949	-1.213660	-4.250352	H	-2.662184	1.799273	2.612393
C	-0.668992	-3.470198	-4.944423	H	1.913653	6.062586	1.349053
C	-0.441261	-4.796934	-5.277846	H	-1.926256	4.821611	-3.709272
C	0.876160	-5.324986	-5.296649	H	-2.376725	3.721432	-2.375065
C	1.946191	-4.516623	-4.951705	H	-1.167883	5.016715	-2.101973
C	1.746919	-3.153086	-4.586008	H	-0.428600	-4.780233	1.447207
C	0.411213	-2.600667	-4.607267	H	-1.288270	-2.640828	0.446993
O	1.159416	0.831750	-3.351232	H	0.226058	-1.887713	6.199047
O	0.018649	2.637685	-2.007746	H	1.209090	-3.962204	7.114090
C	-2.615020	2.374877	1.675041	H	1.346007	-6.036194	5.710591
C	-1.542304	4.277957	-2.829926	H	0.543299	-5.990327	3.350644
C	0.774571	4.043178	-3.880823	H	0.441902	4.610632	-4.767199
C	-2.571059	3.869912	1.967152	H	1.230536	4.737878	-3.159321
C	-3.753915	1.963134	0.748492	H	1.540138	3.319828	-4.196329
P	0.412311	1.093804	-1.890318	H	-3.507170	4.178861	2.462375
C	-0.502195	-3.870910	2.052375	H	-1.730160	4.119079	2.633011
C	-0.972893	-2.696566	1.492406	H	-2.466309	4.445025	1.032616
C	-1.079852	-1.537760	2.299858	H	-4.722566	2.200128	1.220726
C	-0.777484	-1.525746	3.663475	H	-3.692243	2.514904	-0.204691
C	0.286438	-2.780774	5.572932	H	-3.722682	0.881476	0.546144
C	0.837186	-3.946935	6.084925	H	-3.339803	1.080299	-2.283166
C	0.920567	-5.120309	5.289757	H	-4.741042	1.034635	-4.369334
C	0.470880	-5.096767	3.979894	H	-4.961615	0.539057	-6.762604
C	-0.083402	-3.910789	3.414245	H	-4.006904	-0.338633	-8.892628
C	-0.206740	-2.725012	4.233584	H	-1.676033	-1.261740	-8.925325
O	-1.549176	-0.362341	1.689459	H	-0.337733	-1.372154	-6.854641
O	-1.327470	2.041334	0.995373	H	-0.117693	3.026206	4.462939
P	-0.374256	0.786984	1.354831	H	-1.426364	3.006642	6.604220
C	-1.118256	-0.548059	-4.347331	H	-2.882198	1.824811	8.187908
C	-1.664198	0.091042	-3.232612	H	-4.102479	-0.233157	8.891610
C	-2.964558	0.650936	-3.215310	H	-3.942339	-2.312210	7.498786
C	-3.727677	0.620147	-4.368011	H	-2.539509	-2.361911	5.469546
C	-3.954784	0.108916	-6.785707	H	2.952058	5.926838	-0.127767
C	-3.422209	-0.375152	-7.968776	H	1.193648	5.579718	-0.237698
C	-2.105361	-0.904914	-7.984210	H	4.551290	-1.350206	4.613854
C	-1.352510	-0.969983	-6.821036	H	2.835151	-1.498011	4.050652
C	-1.876582	-0.502906	-5.578791	H	4.182722	-2.023530	2.974546
C	-3.202227	0.074752	-5.575173	H	0.844689	-1.325199	-0.363306
O	-0.941277	0.137432	-2.020092	H	1.539940	-1.268640	-0.823217
C	-1.028518	-0.293080	4.463914				
C	-0.491953	0.931198	4.056876				
C	-0.612332	2.119136	4.820086	R4a_03			
C	-1.335165	2.099194	5.998272	116			
C	-2.800509	0.902008	7.603593	Energy =	-3595.568389686		
C	-3.480641	-0.240180	7.991557	Rh	0.124420	-0.573682	1.199899
C	-3.382839	-1.418430	7.206230	C	-0.257082	-2.704841	1.450905
C	-2.592279	-1.449071	6.066936	C	0.804266	-2.268800	2.320136
				O	-2.987283	-1.797320	3.725013

C	-2.018066	-1.628273	2.841185	H	-8.398951	-3.642622	0.789764
C	-0.030009	-3.683492	0.331287	H	-6.349572	-4.453212	-0.377830
O	-1.420472	-0.530319	2.712442	O	-0.615174	1.955417	-0.957819
O	-0.932180	-4.141176	-0.364786	H	2.168311	-0.184714	-4.782806
O	1.265292	-4.081972	0.228152	H	0.586421	-0.671791	-4.105441
C	-1.687624	-2.813994	1.988917	H	1.490174	0.701188	-3.386983
C	-3.374847	-0.630971	4.515661	H	-1.381310	5.037170	-2.144001
H	-4.229470	-0.972392	5.110575	H	-1.192278	4.515697	-0.447639
H	-2.539062	-0.328085	5.162912	H	0.199244	4.428347	-1.577367
C	2.307676	-1.253025	-2.914710	H	-1.421725	3.207029	-4.029695
H	0.594280	-2.096472	3.383295	H	0.180665	2.655510	-3.466599
H	1.828365	-2.578871	2.104171	H	-1.190292	1.498193	-3.563864
C	1.485149	-5.126435	-0.751612	P	-1.316656	0.715373	-0.182100
H	2.558702	-5.349566	-0.699810	C	5.065744	-0.034922	-0.229084
H	0.893254	-6.017782	-0.493736	C	4.386597	-1.252657	-0.154214
H	1.201171	-4.782028	-1.756116	C	4.932956	-2.477779	-0.605878
C	3.312980	3.611808	1.357513	C	6.176693	-2.480305	-1.210244
C	2.591578	2.787638	0.512884	C	8.128894	-1.246782	-2.118597
C	3.178212	1.581557	0.059846	C	8.789981	-0.056134	-2.369370
C	4.478523	1.189667	0.384243	C	8.221409	1.170189	-1.936723
C	6.463808	1.614094	1.876593	C	7.022388	1.189929	-1.240068
C	7.126387	2.415102	2.794626	C	6.323831	-0.018348	-0.943840
C	6.565251	3.647091	3.221345	C	6.884706	-1.261897	-1.422502
C	5.328489	4.042764	2.740315	O	3.120311	-1.320211	0.465586
C	4.610078	3.234491	1.811204	H	4.362799	-3.395735	-0.444722
C	5.199679	2.001136	1.340110	H	6.622728	-3.420247	-1.551041
H	2.883805	4.557129	1.705613	H	8.546368	-2.198913	-2.463237
H	1.584672	3.037940	0.169696	H	9.741047	-0.056605	-2.909860
O	2.407086	0.791979	-0.816803	H	8.731940	2.112229	-2.158541
H	6.906262	0.665003	1.566616	H	6.596054	2.143827	-0.922375
H	8.090463	2.090212	3.197188	C	-4.613614	1.299037	-0.357757
H	7.104072	4.273069	3.938601	C	-3.634840	1.980483	0.369980
H	4.874090	4.980512	3.077559	C	-3.756402	3.343547	0.738860
O	1.479327	-1.380947	-1.665607	C	-4.852158	4.068426	0.308866
C	-1.307839	2.892629	-1.898979	C	-6.918816	4.235213	-1.056401
C	2.461014	-2.657632	-3.479826	C	-7.839246	3.665838	-1.920106
C	1.588977	-0.291263	-3.849780	C	-7.697791	2.306969	-2.304887
H	3.287001	-0.845445	-2.621021	C	-6.663071	1.531500	-1.803422
C	-0.892424	4.299926	-1.485239	C	-5.708746	2.077403	-0.894071
C	-0.905722	2.533568	-3.324118	C	-5.831024	3.473098	-0.538440
H	-2.392218	2.757561	-1.768211	O	-2.494032	1.307299	0.845458
H	-2.400845	-2.841718	1.141516	H	-2.981493	3.788407	1.368732
H	-1.846081	-3.750557	2.554760	H	-4.966512	5.118488	0.597410
H	3.041275	-2.611276	-4.416723	H	-7.004253	5.288052	-0.766409
H	2.998806	-3.312798	-2.777784				

O	1.872794	-5.193266	-1.583477	C	-6.395262	4.050429	0.539607
C	-0.770998	-4.637699	-1.367310	C	-5.394041	3.160801	0.178699
C	-4.141940	-4.763585	0.249406	C	-5.154969	1.974805	0.935374
H	-4.932732	-5.443539	-0.087254	C	-5.963193	1.746600	2.112275
H	-3.854242	-4.976323	1.289251	O	-2.820648	-0.922326	1.254092
C	4.405071	-2.077359	1.459111	H	2.131109	1.056852	-4.785559
H	-1.133236	-4.928497	-2.371175	H	2.393612	-0.929628	-3.246876
H	-1.292652	-1.997435	-1.962349	H	3.060836	4.219340	-0.257858
H	0.440742	-1.461760	-2.228938	H	2.633174	6.149798	-1.737170
C	3.146089	-5.687264	-2.064977	H	2.133808	5.807251	-4.170364
H	3.146469	-6.758842	-1.828269	H	2.000942	3.495286	-5.094528
H	3.975131	-5.176104	-1.553489	H	4.705263	-1.066644	1.143414
C	2.344540	1.197274	-3.720531	H	-2.315641	1.400499	3.141877
C	2.481445	0.100042	-2.890209	H	5.881095	-2.299879	3.015531
C	2.791129	0.305488	-1.523581	H	4.360541	-1.545238	3.570225
C	3.047944	1.565617	-0.974359	H	4.424231	-3.309085	3.250110
C	2.845408	4.053233	-1.315950	H	-1.024005	1.724686	-3.825417
C	2.602788	5.136012	-2.147843	H	0.000613	1.470727	-1.552358
C	2.311813	4.943062	-3.523605	H	-5.952189	0.804268	-1.328884
C	2.239921	3.659406	-4.038138	H	-6.918847	0.903768	-3.598987
C	2.462398	2.522174	-3.207080	H	-5.462521	1.366810	-5.587120
C	2.801857	2.717224	-1.815414	H	-3.005685	1.662148	-5.280788
O	2.947934	-0.853566	-0.740990	H	6.053727	-3.088555	0.501361
O	2.907216	-2.137529	1.410441	H	4.636731	-4.134229	0.808357
C	-1.394577	1.064430	3.643356	H	4.601573	-2.934887	-0.531148
C	4.782799	-2.322133	2.914119	H	-2.110967	1.350499	5.661650
C	4.950843	-3.123964	0.495730	H	-2.462970	-0.269344	4.994857
C	-1.710879	0.534497	5.036518	H	-0.800894	0.141367	5.519911
C	-0.352838	2.176305	3.628742	H	-0.735474	3.044103	4.193127
P	1.939900	-1.204685	0.518790	H	0.583029	1.841726	4.105454
C	-1.654394	1.537144	-2.950556	H	-0.134607	2.499015	2.600087
C	-1.079590	1.398112	-1.700936	H	2.730546	0.681371	3.597371
C	-1.911720	1.179871	-0.577274	H	4.757141	2.054896	4.171271
C	-3.306240	1.144776	-0.653695	H	6.703593	3.355270	3.450945
C	-5.303731	1.006590	-2.184463	H	8.115311	4.325300	1.638659
C	-5.844708	1.061196	-3.460338	H	7.450395	4.011073	-0.758997
C	-5.020410	1.315994	-4.587599	H	5.375306	2.814618	-1.341911
H	3.234559	-5.524409	-3.149912	H	-4.420648	-1.103162	3.278667
H	-0.299497	-5.541675	-0.941804	H	-6.331793	0.436478	3.812454
C	-3.656407	1.483751	-4.417894	H	-7.605284	2.479370	3.332608
C	-3.063620	1.415086	-3.123054	H	-8.004690	4.508918	1.940200
C	-3.906149	1.199887	-1.967977	H	-6.551269	4.956328	-0.053961
O	-1.279561	1.057680	0.674644	H	-4.767113	3.373555	-0.689904
O	-0.856592	-0.101497	2.874254	H	0.187820	-2.915607	2.156620
P	-1.218361	-0.470240	1.342816	H	0.531017	-3.486661	1.688939
C	3.572268	1.689519	0.414612	H	-4.446421	-3.712461	0.149738
C	2.921045	1.054908	1.473341				
C	3.322154	1.179409	2.825379	R2a_03			
C	4.439655	1.934357	3.130404	116			
C	6.409840	3.251706	2.400920	Energy =	-3595.570968032		
C	7.195594	3.786096	1.393690	Rh	0.012613	-1.690560	1.223246
C	6.813549	3.614858	0.037639	C	0.398791	-3.824425	1.245226
C	5.645067	2.943982	-0.291950	C	1.333518	-3.139781	2.100174
C	4.795584	2.403088	0.719184	O	-2.251104	-4.159340	3.757511
C	5.212942	2.538837	2.097291	C	-1.499087	-3.568710	2.842910
O	1.765002	0.282402	1.226749	C	0.806134	-4.540887	-0.013332
C	-4.115551	1.028325	0.592082	O	-1.349767	-2.319342	2.808251
C	-3.858268	-0.004048	1.497518	O	0.030235	-5.213071	-0.685387
C	-4.652731	-0.241404	2.647286	O	2.134219	-4.434012	-0.281753
C	-5.701924	0.612111	2.934436	C	-0.856293	-4.472455	1.837693
C	-6.995140	2.673118	2.443973	C	1.852379	-1.115889	-3.058648
C	-7.213763	3.802239	1.672395	C	-2.925266	-3.300634	4.726621

C	1.500360	3.392539	1.619658	H	6.658125	3.559137	2.997952
C	1.038203	2.421877	0.749844	H	5.040137	5.183928	4.013705
C	1.964965	1.535865	0.150398	H	2.633800	5.103417	3.365871
C	3.345585	1.616696	0.347453	H	2.588920	-0.345438	-2.784644
C	5.186047	2.624198	1.742625	H	-4.419053	-1.570903	-1.247783
C	5.607881	3.543498	2.691282	H	2.345901	-6.277766	-1.263927
C	4.691638	4.458336	3.272700	H	2.059286	-4.870469	-2.338482
C	3.355777	4.416710	2.910823	H	2.926663	-1.875558	-4.762851
C	2.883355	3.471908	1.953324	H	3.362598	-2.675973	-3.229744
C	3.821577	2.566670	1.328656	H	1.800902	-3.056688	-4.035190
O	1.436200	0.582822	-0.741901	H	-2.355809	2.623237	4.094302
O	1.312648	-1.697546	-1.780698	H	-2.630581	0.256181	3.292490
C	-4.054984	-2.591577	-1.051061	H	-3.173109	4.149987	-1.231522
C	2.525278	-2.256752	-3.808577	H	-2.753988	6.452974	-0.446744
C	0.684785	-0.493807	-3.813327	H	-2.314910	6.915436	1.978349
C	-3.991123	-3.400544	-2.340769	H	-2.237764	5.027014	3.606073
C	-4.888843	-3.246835	0.045045	H	1.052679	-0.053560	-4.755989
P	1.453962	-1.023047	-0.328404	H	-0.065306	-1.263943	-4.059337
C	-2.572856	2.410997	3.042116	H	0.206924	0.298256	-3.218763
C	-2.725598	1.105544	2.611104	H	-5.008342	-3.531549	-2.746968
C	-3.026986	0.853572	1.249989	H	-3.379159	-2.887975	-3.099258
C	-3.210998	1.870118	0.309147	H	-3.557594	-4.396899	-2.154131
C	-2.982992	4.333990	-0.171677	H	-5.930756	-3.360552	-0.299444
C	-2.745087	5.626771	0.270558	H	-4.497051	-4.250175	0.284386
C	-2.487869	5.888940	1.641760	H	-4.893500	-2.629561	0.956572
C	-2.446582	4.840829	2.546788	H	4.792380	-2.629263	-0.920772
C	-2.668331	3.496519	2.123610	H	6.799529	-1.755461	-2.164173
C	-2.972570	3.231240	0.734820	H	8.067006	0.139766	-3.069567
O	-3.187269	-0.485432	0.858987	H	8.374243	2.594755	-3.377918
O	-2.647696	-2.488040	-0.554987	H	6.732363	4.192831	-2.359197
P	-1.910676	-1.156179	-0.004986	H	4.849425	3.362737	-0.996315
C	4.269008	0.735163	-0.421581	H	-2.464925	-0.414953	-3.689028
C	4.081303	-0.648111	-0.423147	H	-4.407809	0.659523	-4.858102
C	4.981359	-1.558148	-1.027149	H	-6.409360	2.079558	-4.777427
C	6.081895	-1.067583	-1.705376	H	-7.974307	3.550011	-3.510200
C	7.372235	0.849703	-2.608146	H	-7.543795	4.031703	-1.087431
C	7.539885	2.213189	-2.781940	H	-5.549425	3.116959	0.041689
C	6.614066	3.116957	-2.198399	H	-1.581175	-4.651035	1.021097
C	5.556585	2.652526	-1.430436	H	-0.642580	-5.460168	2.285646
C	5.365447	1.255922	-1.209567	H	-3.612716	-2.618424	4.206143
C	6.285621	0.336369	-1.840962	H	-0.036734	0.010828	1.973338
O	2.986932	-1.211115	0.267813	H	0.609716	-0.373414	2.342134
C	-3.611513	1.518937	-1.083159	S3c_03			
C	-2.863084	0.590773	-1.812391	116			
C	-3.126027	0.283074	-3.170012	Energy = -3595.567788942			
C	-4.199282	0.879162	-3.805875	Rh	2.124445	-0.052872	0.071180
C	-6.218886	2.319482	-3.725786	C	3.947127	-0.464388	-1.086225
C	-7.089578	3.132931	-3.020283	C	2.933408	-1.480290	-1.259153
C	-6.840351	3.411165	-1.650949	O	5.448688	-1.887940	1.950218
C	-5.718603	2.899642	-1.015353	C	4.576907	-1.222635	1.207490
C	-4.786600	2.077067	-1.716062	C	4.302731	0.449101	-2.219817
C	-5.066101	1.761765	-3.098944	O	3.402486	-0.997042	1.588860
O	-1.744100	-0.037473	-1.228631	C	0.824505	-2.194216	-5.287204
H	-3.473458	-3.992298	5.376169	C	1.314198	-1.157242	-4.515674
H	-2.180911	-2.727962	5.298697	C	0.403085	-0.304011	-3.846234
H	1.182354	-3.158075	3.187333	C	-0.984417	-0.402510	-3.989320
H	2.376593	-3.055891	1.789135	C	-2.888616	-1.857050	-4.772357
C	2.567072	-5.211640	-1.425101	C	-3.347270	-2.961985	-5.474333
H	3.650359	-5.048228	-1.492566	C	-2.442408	-3.811662	-6.162341
H	0.797665	4.097570	2.075429	C	-1.082935	-3.553227	-6.109231
H	-0.020777	2.332914	0.493422	C	-0.575908	-2.437220	-5.381588
H	5.903553	1.921135	1.313847				

C	-1.497144	-1.544737	-4.716396	H	-0.198198	3.070141	-2.987825
C	0.536202	3.521221	-2.302332	H	-1.223952	-3.010576	2.457795
C	-0.689637	-3.500279	1.629421	H	-0.374896	5.472765	-2.214227
C	-0.090358	4.666076	-1.517854	H	-0.994750	4.332869	-0.986037
C	1.804780	3.906612	-3.053936	H	0.625248	5.076529	-0.786114
C	-1.671110	-4.170654	0.676591	H	1.565084	4.671581	-3.811917
C	0.381480	-4.440926	2.170079	H	2.839898	1.862142	5.526451
C	1.892680	1.457570	5.154343	H	2.809331	-0.053367	3.894643
C	1.887018	0.400811	4.262645	H	-2.741327	1.840608	5.104616
C	0.652419	-0.121249	3.805943	H	-2.680069	3.810663	6.589121
C	-0.583050	0.366506	4.238933	H	-0.500264	4.670608	7.481638
C	-1.782997	2.199271	5.486269	H	1.633226	3.568122	6.811019
C	-1.746445	3.308004	6.318527	H	2.549374	4.332015	-2.359584
C	-0.512788	3.800513	6.818552	H	2.239807	3.034485	-3.566119
C	0.672081	3.186070	6.450084	H	-2.205372	-4.978168	1.205071
C	0.672510	2.054997	5.582370	H	-2.415063	-3.449822	0.303774
C	-0.584751	1.522812	5.107203	H	-1.140647	-4.609402	-0.184636
C	-1.887882	0.623707	-3.400215	H	-0.094309	-5.259654	2.736569
C	-1.774656	0.959694	-2.051125	H	0.960141	-4.885068	1.342715
C	-2.658933	1.840146	-1.382408	H	1.066093	-3.906032	2.846510
C	-3.671616	2.446453	-2.103609	H	-2.526399	2.004519	-0.310345
C	-4.784301	2.921710	-4.269758	H	-4.378387	3.117373	-1.604413
C	-4.865530	2.760887	-5.642774	H	-5.473622	3.592240	-3.745494
C	-3.944962	1.909471	-6.308098	H	-5.626112	3.298113	-6.216918
C	-2.981677	1.210629	-5.595618	H	-3.991778	1.805915	-7.396456
C	-2.884359	1.330682	-4.177086	H	-2.276917	0.566589	-6.125609
C	-3.793589	2.234912	-3.508075	H	-3.355834	-0.933551	0.734932
C	-1.838232	-0.269839	3.752138	H	-5.219596	-1.663505	2.255698
C	-2.041538	-0.421323	2.378835	H	-6.049822	-2.125190	4.521807
C	-3.252434	-0.902337	1.822679	H	-5.710167	-2.149666	6.991539
C	-4.272292	-1.300478	2.667955	H	-3.540613	-1.348515	7.959479
C	-5.116060	-1.754901	4.958532	H	-1.755316	-0.475493	6.492248
C	-4.925104	-1.771571	6.330053	H	4.878594	2.883681	-3.245317
C	-3.698949	-1.310810	6.877367	H	6.086950	1.655932	-3.746997
C	-2.696236	-0.818260	6.055536	H	5.644643	0.215089	0.097792
C	-2.865698	-0.764951	4.639721	H	2.006190	1.472885	1.239643
C	-4.099810	-1.272213	4.082556	H	2.644400	1.624948	0.760727
O	3.851672	0.396940	-3.359679	H	4.091227	-2.958691	3.154058
O	5.247237	1.363298	-1.841859				
C	5.094966	-0.722468	-0.105344				
C	5.004281	-2.356272	3.259202	S2a_03			
H	5.838353	-2.959104	3.636234	116			
O	0.975085	0.747730	-3.099296	Energy = -3595.565923270			
O	0.897842	2.481125	-1.284034	Rh	-1.104526	0.972477	0.193878
O	0.701418	-1.217335	2.924615	C	0.683688	3.494368	4.313186
O	-0.003569	-2.436081	0.834679	C	1.180011	2.690042	3.303037
O	-0.763626	0.362416	-1.269397	C	1.124988	1.281578	3.445017
O	-1.039770	-0.025117	1.471253	C	0.635478	0.649585	4.590660
P	0.792909	0.881906	-1.462130	C	-0.636098	0.938817	6.747594
P	0.346219	-0.934135	1.310845	C	-1.208234	1.766640	7.703151
H	4.817241	-1.495930	3.917877	C	-1.132137	3.178903	7.579017
H	5.839286	-1.431017	-0.513937	C	-0.502938	3.739695	6.479856
H	3.039348	-2.438976	-0.733123	C	0.078627	2.919779	5.468348
H	2.433885	-1.567794	-2.227443	C	0.038660	1.480969	5.611215
C	5.702930	2.242541	-2.898692	H	0.734603	4.584683	4.226746
H	6.500056	2.846273	-2.446548	H	1.638339	3.110842	2.403875
H	1.515300	-2.852020	-5.825048	O	1.632637	0.505349	2.391653
H	2.381655	-0.945535	-4.417412	H	-0.701864	-0.145960	6.859777
H	-3.600356	-1.220413	-4.242095	H	-1.721332	1.324781	8.562948
H	-4.419190	-3.181595	-5.494388	H	-1.576918	3.819414	8.346323
H	-2.819234	-4.673444	-6.721213	H	-0.450077	4.827649	6.364263
H	-0.370379	-4.210875	-6.618671	O	1.479200	-1.289573	0.652868
				C	2.671742	-1.955496	1.270803

C	2.281958	2.649593	-2.357165	C	1.410791	2.685178	-7.968388
C	2.591242	-3.432438	0.904441	C	2.182395	1.764591	-8.657146
C	3.919318	-1.258832	0.740614	C	2.355619	0.458002	-8.130838
H	2.597635	-1.826882	2.361820	C	1.735773	0.080621	-6.948931
C	2.270925	4.163124	-2.532332	C	0.910978	0.993130	-6.225166
C	3.527328	2.120671	-1.656236	C	0.775625	2.336925	-6.740329
H	2.141816	2.145976	-3.325942	O	-0.927700	1.422367	-2.999614
H	3.436540	-3.969923	1.366386	H	-1.064120	3.709685	-4.173914
H	1.656175	-3.883716	1.270786	H	-0.093738	4.307703	-6.413373
H	2.654646	-3.573473	-0.187616	H	1.284595	3.703857	-8.350556
H	4.819436	-1.742349	1.157471	H	2.669068	2.045026	-9.595972
P	0.493707	-0.253671	1.415126	H	2.989951	-0.259688	-8.660085
C	0.463030	-3.447700	-3.505037	H	1.888499	-0.926722	-6.556234
C	0.788740	-2.384133	-2.684428	C	-3.416349	-0.722599	1.030885
C	0.657904	-1.065726	-3.177774	C	-2.825875	-0.255924	-0.306393
C	0.239516	-0.766229	-4.475068	C	-3.029065	1.102576	-0.741623
C	-0.854195	-1.679562	-6.554622	C	-2.705365	-1.320981	-1.364583
C	-1.273805	-2.759864	-7.316321	O	-4.033495	0.295339	3.111820
C	-1.077705	-4.089666	-6.860870	O	-2.549137	-1.115084	-2.560176
C	-0.493409	-4.312240	-5.625338	O	-2.857867	-2.564931	-0.824346
C	-0.073615	-3.223488	-4.805983	C	-2.889428	-3.643881	-1.792237
C	-0.222074	-1.869909	-5.290046	C	-3.804575	1.265472	4.182507
H	0.592844	-4.477171	-3.153694	H	-2.906731	-1.639435	1.376742
H	1.155835	-2.520557	-1.665072	H	-3.672285	1.769349	-0.154300
O	1.086318	-0.040867	-2.310738	H	-3.010972	1.298884	-1.816462
H	-1.025483	-0.664239	-6.917906	H	-4.488741	-0.973690	0.945885
H	-1.766387	-2.583306	-8.277352	H	-3.025899	-4.557446	-1.199260
H	-1.402085	-4.932492	-7.478432	H	-3.729420	-3.501347	-2.489366
H	-0.356858	-5.332147	-5.249255	H	-1.948570	-3.673213	-2.360330
O	1.098207	2.324759	-1.500762	H	-4.615677	1.083293	4.896422
H	3.966057	-1.332055	-0.358865	H	-2.822065	1.089956	4.643653
H	3.930372	-0.197884	1.032671	H	-3.856455	2.285483	3.775932
H	3.130206	4.466856	-3.153697	H	-0.297569	2.547679	0.775545
H	1.349203	4.497214	-3.033175	H	-0.939836	2.797408	0.311905
H	2.352740	4.670097	-1.556480				
H	4.418981	2.353128	-2.263022				
H	3.648968	2.595770	-0.668179				
H	3.471808	1.029455	-1.526187				
O	-2.255459	1.145687	2.014359				
C	-3.197533	0.317221	2.089058				
P	0.056810	1.105763	-1.715687				
C	0.723415	-0.834009	4.713110				
C	0.200853	-1.654943	3.710295				
C	0.155833	-3.067395	3.813759				
C	0.700570	-3.684820	4.924202				
C	1.971048	-3.554529	7.051715				
C	2.636385	-2.812205	8.012901				
C	2.703790	-1.399833	7.889621				
C	2.087983	-0.749239	6.830662				
C	1.373177	-1.478469	5.833834				
C	1.341558	-2.919882	5.941149				
O	-0.392906	-1.094369	2.563825				
H	-0.322999	-3.638298	3.013658				
H	0.661602	-4.774549	5.023702				
H	1.928257	-4.646779	7.122100				
H	3.120475	-3.310612	8.857935				
H	3.252902	-0.816577	8.634982				
H	2.161388	0.337285	6.746907				
C	0.254814	0.633521	-4.984083				
C	-0.359027	1.664521	-4.268882				
C	-0.508645	2.980638	-4.769771				
C	0.029084	3.300379	-6.002351				

B.2.4 Strukturen der _04 Spezies

R1c_04			
116			
Energy =	-3595.569908928		
Rh	1.290538	-0.378555	2.174410
O	-0.325038	-1.334410	3.261015
C	0.042080	-1.987687	4.266933
C	1.488653	-2.158642	4.637516
C	2.357428	-1.069082	4.006545
C	1.985521	0.304153	4.130911
C	3.815053	-1.385934	3.840353
O	-0.824956	-2.607909	5.051596
O	4.706054	-0.552027	3.733620
O	4.051315	-2.732732	3.865362
C	5.147233	2.084893	1.051070
C	5.453504	-3.098401	3.798281
C	3.402766	-4.067341	-0.716023
C	3.706024	-3.024409	0.140468
C	3.830288	-1.715384	-0.384108
C	3.688889	-1.413409	-1.740182
C	2.956619	-2.268763	-3.994945
C	2.568988	-3.320227	-4.811969

O	-0.866959	2.289661	-0.333419	H	4.590861	1.826741	0.337160
Rh	-0.139539	-0.925154	0.456728	H	4.824705	0.444490	-0.785130
C	0.719114	0.024304	2.251458	H	-4.877360	1.752409	-3.435497
C	1.078244	-1.354469	2.269378	H	-3.104138	1.966624	-3.444628
C	2.474285	-1.852925	2.026326	H	-3.810830	0.331366	-3.640740
O	3.374130	-0.858802	1.833044	H	-6.005288	0.623773	-1.366268
C	4.739198	-1.314820	1.645751	H	-4.947326	-0.802253	-1.577248
P	1.403742	-0.255897	-0.989473	H	-4.971659	0.079943	-0.014153
O	0.689167	-0.066138	-2.468747	H	0.783941	2.019829	-3.984081
C	1.442796	-0.017574	-3.662576	H	2.036755	2.246101	-6.150032
C	2.122824	-1.147436	-4.119671	H	3.615683	1.325078	-7.789320
C	2.927938	-0.999923	-5.314341	H	5.090526	-0.525062	-8.577645
C	2.886122	0.242461	-6.052516	H	5.236283	-2.650398	-7.254314
C	2.081448	1.316588	-5.573432	H	3.883284	-2.955968	-5.213278
C	1.386247	1.200286	-4.384325	H	-1.093831	3.578373	-2.571242
C	3.668659	0.381408	-7.236252	H	-2.353769	5.720068	-2.938073
C	4.490583	-0.645081	-7.670865	H	-3.854127	7.466443	-2.091840
C	4.566159	-1.850500	-6.925199	H	-5.210438	8.453080	-0.246353
C	3.804543	-2.025243	-5.778936	H	-5.239383	7.348226	2.004478
C	2.032922	-2.435326	-3.377230	H	-3.884527	5.332016	2.433425
C	2.330124	-2.483302	-2.013834	H	0.443749	-2.233276	4.180913
C	2.370981	-3.682645	-1.262980	H	-0.087564	0.379522	2.902718
C	2.065404	-4.876106	-1.893575	H	1.469642	0.773629	1.990306
C	1.662851	-4.900785	-3.260104	H	0.636713	-3.380949	2.851402
C	1.624302	-3.668080	-4.014285	H	-0.786248	-1.797279	-0.770368
C	1.139497	-3.717230	-5.355889	H	0.052698	-2.434882	-0.166041
C	0.753668	-4.917867	-5.933069	H	5.350863	-0.404854	1.667114
C	0.835444	-6.133306	-5.204075	H	5.025145	-2.001700	2.455473
C	1.276339	-6.119591	-3.891470	H	4.836899	-1.828092	0.677223
O	2.657387	-1.286853	-1.331943	H	-3.837753	-3.534699	4.209640
O	-1.655917	-1.771053	1.763298	H	-3.822584	-1.969826	3.300483
C	-1.190588	-2.309859	2.797353	H	-3.544003	-3.517676	2.422720
O	-1.973536	-2.907349	3.684508				
C	-3.398257	-2.981730	3.371737	S2c_04			
O	2.178058	1.076884	-0.554719	116			
C	3.223472	1.802155	-1.347207	Energy = -3595.570170421			
C	4.579795	1.514863	-0.719996	Rh	0.152986	-1.935241	2.036519
C	2.822334	3.271063	-1.310488	C	1.596361	-2.860828	3.463596
C	0.276417	-2.362585	3.095389	C	1.403713	-3.704812	2.331321
O	-2.606064	0.466029	-1.281419	O	-1.313703	-3.940749	5.448068
C	-3.913713	1.108750	-1.614022	C	-0.648073	-3.314978	4.488608
C	-5.023011	0.192653	-1.107828	C	2.922076	-2.165792	3.614835
C	-3.920212	1.299849	-3.125748	O	-1.216481	-2.889343	3.453458
O	2.778639	-3.046077	2.056003	O	3.839349	-2.216022	2.801870
H	2.107844	-5.816817	-1.335118	O	2.996782	-1.499671	4.799736
H	2.654514	-3.645109	-0.207286	C	0.815905	-3.110797	4.754843
H	1.061185	-2.791155	-5.929250	C	-2.756355	-4.084500	5.276203
H	0.378299	-4.926560	-6.960837	H	-3.086915	-4.644357	6.158430
H	0.538055	-7.074332	-5.676268	H	-3.226872	-3.091148	5.4241732
H	1.324212	-7.046510	-3.310006	C	-1.759314	-5.515877	-0.489060
H	3.187960	1.418120	-2.378890	H	1.218070	-3.969689	5.323022
H	-3.952682	2.080990	-1.098672	H	0.742822	-4.576074	2.397040
H	3.546288	3.866942	-1.891490	H	2.209326	-3.779592	1.595918
H	1.819829	3.419148	-1.740871	C	4.247124	-0.811974	5.044785
H	2.815130	3.645571	-0.273555	H	4.176450	-0.445161	6.076483
H	5.358713	2.082051	-1.257942	H	4.357539	0.028111	4.342583
H	-2.101233	1.735936	5.563060	C	-4.605298	0.110462	1.384215
H	-2.745121	0.417764	3.521343	C	-3.901739	-1.072450	1.516933
H	-1.053080	5.968765	2.051915	C	-3.441005	-1.739247	0.356149
H	-0.270378	7.193380	4.047995	C	-3.682208	-1.275258	-0.939530
H	-0.374629	6.134827	6.318109	C	-4.506436	0.650558	-2.343003
H	-1.211645	3.798188	6.557958	C	-5.140718	1.880062	-2.440952

C	-5.650249	2.527970	-1.284961	C	-3.602031	-3.186357	-4.318219
C	-5.489107	1.941023	-0.040419	O	-0.985211	-2.183436	-1.169944
C	-4.824613	0.686454	0.099414	H	-0.301908	-3.394855	-3.355597
C	-4.343099	0.003510	-1.080809	H	-1.814664	-3.987096	-5.270822
H	-4.982806	0.631054	2.270460	H	-4.070424	-4.100048	-6.233528
H	-3.695933	-1.518571	2.492986	H	-6.519564	-3.659067	-6.076140
O	-2.756546	-2.951759	0.540363	H	-7.453487	-2.531044	-4.040934
H	-4.114645	0.170023	-3.242040	H	-5.963842	-1.795080	-2.215757
H	-5.246389	2.356464	-3.420308	C	2.872429	2.191543	0.408447
H	-6.159926	3.491608	-1.378569	C	3.368107	1.061137	1.060266
H	-5.864752	2.435816	0.862030	C	4.746203	0.777959	1.213081
O	-0.843284	-4.523461	0.152823	C	5.669829	1.640504	0.651030
C	3.350827	-1.426935	-1.316533	C	6.193541	3.614521	-0.758024
C	-0.877626	-6.415257	-1.347016	C	5.780616	4.676829	-1.544434
C	-2.495874	-6.257155	0.621749	C	4.394502	4.925293	-1.722349
H	-2.472720	-4.958308	-1.115574	C	3.445271	4.132443	-1.094498
C	4.647351	-2.199525	-1.117563	C	3.833316	3.044342	-0.256944
C	2.621024	-1.757216	-2.611814	C	5.245605	2.767687	-0.112162
H	3.526526	-0.342988	-1.237508	O	2.467574	0.158894	1.670110
H	5.094549	-1.504104	4.929376	H	5.034290	-0.114224	1.775684
H	0.900235	-2.234310	5.422737	H	6.742157	1.451229	0.766347
H	-1.498644	-7.185205	-1.834999	H	7.259524	3.398809	-0.628266
H	-0.366721	-5.836254	-2.131875	H	6.518009	5.316126	-2.038774
H	-0.118919	-6.922604	-0.728350	H	4.070052	5.749058	-2.365603
P	-1.099675	-2.933911	0.309998	H	2.382753	4.333571	-1.248954
C	-1.413895	2.898845	0.212494	H	-0.023483	-0.536344	2.890592
C	-0.881206	1.672252	-0.138962	H	-0.815998	-0.598302	2.002924
C	0.513598	1.467268	-0.021715	H	-2.970978	-4.638316	4.351328
C	1.406372	2.457425	0.398156				
C	1.631029	4.732999	1.458066	S1a_04			
C	1.056714	5.919801	1.888222	116			
C	-0.334937	6.151095	1.731839	Energy = -3595.568712334			
C	-1.135245	5.170705	1.170015	Rh	0.633232	-1.073943	-0.386964
C	-0.581984	3.930473	0.735183	O	2.777673	-1.275014	-0.172213
C	0.842207	3.710000	0.851585	C	3.407162	-1.316680	-1.257913
H	-2.489213	3.078005	0.110329	C	2.723766	-1.201955	-1.2591873
H	-1.503803	0.860383	-0.522436	C	1.242277	-1.568378	-2.484733
O	0.997661	0.205485	-0.425974	C	0.848731	-2.740056	-1.772149
H	2.702212	4.569950	1.595321	C	0.344911	-1.092048	-3.588888
H	1.684057	6.683854	2.357390	O	4.723663	-1.435363	-1.296722
H	-0.772598	7.095814	2.067753	O	-0.734537	-1.592597	-3.879539
H	-2.213977	5.326664	1.061408	O	0.903623	-0.052281	-4.273855
O	2.459456	-1.824584	-0.176721	C	-3.774495	-0.576649	-2.004878
H	-3.157486	-7.022570	0.181372	C	0.123763	0.420390	-5.398642
H	-1.779970	-6.765767	1.289767	C	-1.346150	-5.239210	1.992285
H	-3.115455	-5.564215	1.211862	C	-1.444332	-4.463384	0.851450
H	5.362437	-1.925659	-1.911594	C	-2.254319	-3.302292	0.872552
H	5.099431	-1.967775	-0.141494	C	-3.001724	-2.908593	1.985183
H	4.465406	-3.285535	-1.173053	C	-3.422067	-3.270606	4.442674
H	3.255228	-1.477595	-3.470424	C	-3.242374	-4.023352	5.593422
H	2.416374	-2.839518	-2.672597	C	-2.467328	-5.212240	5.569167
H	1.672460	-1.204351	-2.682593	C	-1.859716	-5.613812	4.391422
P	1.566922	-0.843745	0.720224	C	-2.009455	-4.855217	3.193318
C	-3.229123	-2.079813	-2.110243	C	-2.833655	-3.667324	3.204558
C	-1.896210	-2.489823	-2.202905	O	-2.342483	-2.562358	-0.324092
C	-1.368972	-3.159558	-3.333821	O	-2.330555	-0.393940	-1.616712
C	-2.209387	-3.480886	-4.383845	C	-0.358660	3.632938	-1.188058
C	-4.488169	-3.585266	-5.361703	C	-4.240746	0.795857	-2.471941
C	-5.848641	-3.343249	-5.271809	C	-3.861347	-1.653779	-3.076262
C	-6.375063	-2.697868	-4.122347	C	-0.463165	4.112948	-2.630072
C	-5.539190	-2.281209	-3.096878	C	-1.590302	3.939097	-0.343172
C	-4.129426	-2.492125	-3.164735	P	-1.590810	-1.084223	-0.382572

```

C 2.500323 0.645883 3.954540
C 1.520739 1.008288 3.047382
C 1.874875 1.802674 1.929929
C 3.165052 2.290159 1.712637
C 5.586312 2.145171 2.394515
C 6.562709 1.688932 3.268529
C 6.213678 0.913184 4.405397
C 4.887436 0.585895 4.634127
C 3.859266 1.022017 3.747205
C 4.207077 1.844429 2.609295
O 0.853830 2.135193 1.021576
O -0.207329 2.146613 -1.250249
P 0.870210 1.281585 -0.415554
C -3.911436 -1.731657 1.894855
C -3.422104 -0.501913 1.449057
C -4.191762 0.686062 1.438506
C -5.516139 0.634143 1.833136
C -7.503098 -0.677844 2.533466
C -8.097438 -1.889632 2.843653
C -7.323617 -3.079492 2.826268
C -5.969993 -3.041084 2.526402
C -5.318267 -1.808268 2.223438
C -6.117856 -0.603689 2.203530
O -2.073975 -0.386707 1.043777
C 3.421858 3.216280 0.572353
C 3.048372 2.855352 -0.724557
C 3.343748 3.644214 -1.863742
C 3.987711 4.856547 -1.700109
C 4.913376 6.618116 -0.218740
C 5.185314 7.104792 1.048866
C 4.857895 6.323935 2.188020
C 4.290820 5.065962 2.047124
C 4.017682 4.521613 0.756583
C 4.316046 5.336404 -0.399457
O 2.414253 1.620956 -0.968408
C 5.423796 -1.472163 -0.012478
H 2.837002 -0.152003 -2.914515
H 1.607305 -3.415967 -1.361746
H -0.098755 -3.211226 -2.048953
H 3.251297 -1.819969 -3.341400
H -0.740040 -6.151120 1.987949
H -0.931671 -4.733708 -0.074966
H -4.013572 -2.353248 4.481943
H -3.700693 -3.693636 6.530838
H -2.342314 -5.800721 6.482792
H -1.243097 -6.518766 4.363653
H -4.318476 -0.880831 -1.096453
H 0.543433 4.044904 -0.708997
H 0.744828 1.187619 -5.878494
H -5.299689 0.738421 -2.774926
H -4.150657 1.542738 -1.667483
H -3.649621 1.130591 -3.340184
H 2.243190 0.045199 4.832937
H 0.475499 0.714638 3.174997
H 5.871113 2.743086 1.525589
H 7.612906 1.932313 3.079812
H 6.992929 0.570374 5.092481
H 4.606147 -0.025540 5.498167
H -4.909767 -1.741620 -3.410063
H -3.227675 -1.395113 -3.937547
H -3.538836 -2.630057 -2.685622
H -0.586883 5.208890 -2.647605

```

```

H 0.445694 3.859931 -3.198203
H -1.333519 3.656857 -3.130095
H -1.746360 5.030227 -0.293307
H -2.488237 3.481884 -0.792253
H -1.463634 3.560133 0.682646
H -3.714545 1.620067 1.131075
H -6.123829 1.544732 1.844680
H -8.092287 0.245141 2.522885
H -9.162649 -1.934767 3.088138
H -7.800452 -4.039452 3.046504
H -5.393023 -3.968367 2.508297
H 3.065551 3.268620 -2.851958
H 4.235144 5.471804 -2.571382
H 5.141964 7.217291 -1.106787
H 5.638454 8.092501 1.174910
H 5.049870 6.720096 3.189797
H 4.035886 4.484470 2.935756
H -0.085562 -0.405796 -6.094983
H -0.826490 0.851443 -5.048842
H 6.481090 -1.583864 -0.278312
H 5.247837 -0.535883 0.536285
H 5.071481 -2.329797 0.578438
H 0.537358 -1.051520 1.253416
H 0.486950 -2.144681 0.854867

```

B.2.5 Strukturen der _05 Spezies

```

R1c_05
116
Energy = -3595.578908769
Rh -0.015944 -0.812483 1.265410
O -1.581723 -2.318501 1.258034
C -1.614961 -3.050872 2.272018
C -0.598860 -2.963519 3.379920
C 0.093243 -1.600837 3.424865
C -0.647500 -0.411257 3.442214
C 1.498487 -1.555240 3.973506
O -2.525095 -4.001088 2.424136
O 2.061374 -0.540327 4.360333
O 2.053371 -2.798358 4.040484
C 3.096259 2.536982 2.318144
C 3.372626 -2.839058 4.644970
C 4.160476 -3.347396 -0.514360
C 3.737614 -2.454960 0.453963
C 3.693258 -1.073899 0.147456
C 4.091128 -0.546548 -1.082966
C 4.722416 -1.074966 -3.465425
C 5.060173 -2.001271 -4.440626
C 5.149700 -3.383455 -4.129365
C 4.869952 -3.818187 -2.844766
C 4.501504 -2.895654 -1.821702
C 4.451956 -1.482666 -2.124623
O 3.273216 -0.204491 1.173926
O 1.876916 1.693211 2.069149
C -2.169503 3.541053 1.051628
C 2.612445 3.981213 2.320122
C 3.718680 2.097757 3.635372
C -2.540264 4.222051 2.362816

```

C	-1.275731	4.383697	0.148940	H	4.615539	2.710902	3.830924
P	1.769672	0.479951	1.028143	H	3.010149	2.235104	4.467257
C	-1.941444	-1.366921	-3.377781	H	4.012867	1.039443	3.603438
C	-1.494009	-0.354608	-2.548116	H	-3.095333	5.151843	2.152683
C	-2.399299	0.234987	-1.633775	H	-3.178899	3.572322	2.981487
C	-3.746660	-0.119564	-1.546336	H	-1.635555	4.480475	2.937754
C	-5.507699	-1.784966	-2.235707	H	-1.798071	5.316174	-0.125024
C	-5.904086	-2.857346	-3.020879	H	-0.342812	4.651007	0.673069
C	-5.014434	-3.432413	-3.965879	H	-1.030092	3.839771	-0.776229
C	-3.727520	-2.936157	-4.089137	H	1.891800	3.564655	-1.160942
C	-3.280097	-1.846439	-3.285540	H	3.872903	4.792688	-2.099489
C	-4.196942	-1.232000	-2.351443	H	6.245774	4.818917	-2.728639
O	-1.904311	1.261979	-0.805956	H	8.434099	3.651933	-2.984040
O	-1.410466	2.305995	1.423689	H	8.626493	1.222452	-2.394302
P	-1.631870	0.842545	0.781472	H	6.652509	-0.044758	-1.624667
C	4.101488	0.928448	-1.295507	H	-4.880602	1.430721	2.711634
C	2.954065	1.681726	-1.035832	H	-7.068196	2.399111	1.954299
C	2.847136	3.062118	-1.332532	H	-8.609320	2.987965	0.136404
C	3.942270	3.728802	-1.850109	H	-9.191256	3.019741	-2.288542
C	6.337389	3.751828	-2.499401	H	-7.627802	1.990641	-3.957113
C	7.553175	3.103777	-2.637278	H	-5.546807	0.889514	-3.218163
C	7.658800	1.726579	-2.310573	H	4.089258	-2.273486	4.030755
C	6.550596	1.012391	-1.880011	H	3.340248	-2.407493	5.656307
C	5.276368	1.640615	-1.748341	H	-4.135631	-4.989661	1.664550
C	5.182025	3.053056	-2.041623	H	-4.038012	-3.249830	1.165256
O	1.796468	1.053861	-0.529307	H	-2.938924	-4.460574	0.411642
C	-4.651134	0.632332	-0.629980				
C	-4.323354	0.783626	0.720099	R3c_05			
C	-5.184480	1.399482	1.661970	116			
C	-6.387510	1.930747	1.236049	Energy = -3595.574237734			
C	-7.948877	2.518864	-0.600708	Rh	-0.416752	-1.409665	-0.199900
C	-8.269361	2.539323	-1.947712	C	-0.298440	-2.824901	-5.220376
C	-7.387008	1.949726	-2.890400	C	0.493468	-2.356465	-4.187211
C	-6.218146	1.327975	-2.476748	C	0.551005	-0.963083	-3.947151
C	-5.866420	1.265910	-1.095125	C	-0.120867	-0.017347	-4.724163
C	-6.746849	1.904184	-0.142425	C	-1.880423	0.347507	-6.491706
O	-3.123440	0.249605	1.233066	C	-2.732505	-0.162061	-7.459675
C	-3.477268	-4.180681	1.328503	C	-2.765353	-1.553571	-7.738467
H	-1.073000	-3.210117	4.346874	C	-1.960244	-2.418494	-7.017172
H	-1.741538	-0.440584	3.457302	C	-1.086293	-1.931723	-6.001255
H	-0.167405	0.509502	3.784117	C	-1.017851	-0.510392	-5.745576
H	0.147113	-3.755715	3.191098	H	-0.343943	-3.898133	-5.432392
H	0.111480	-0.970950	-0.296415	H	1.082880	-3.033398	-3.562573
H	4.215430	-4.418052	-0.291799	O	1.383751	-0.527062	-2.890325
H	3.443025	-2.783211	1.453670	H	-1.876418	1.419821	-6.284603
H	4.650209	-0.016844	-3.725531	H	-3.390119	0.516740	-8.011337
H	5.256145	-1.662115	-5.462306	H	-3.436220	-1.939736	-8.511674
H	5.426546	-4.101723	-4.906826	H	-1.990500	-3.496806	-7.206640
H	4.915197	-4.883807	-2.595253	O	1.850027	0.790648	-0.791276
H	3.792193	2.362357	1.482917	C	2.796533	1.755683	-1.435274
H	-3.075201	3.228451	0.508085	C	-3.172809	1.875359	1.836298
H	1.025325	-2.008659	1.065574	C	2.865137	2.961449	-0.507022
H	3.639303	-3.902713	4.679878	C	4.133140	1.052031	-1.626438
H	3.466961	4.653134	2.507507	H	2.373229	2.043113	-2.410124
H	2.166803	4.254012	1.350796	C	-3.334753	3.221935	1.141890
H	1.866958	4.139235	3.116840	C	-4.471205	1.083467	1.948409
H	-1.261093	-1.826596	-4.102214	H	-2.711387	2.002014	2.828357
H	-0.465873	0.014102	-2.585205	H	3.565457	3.706530	-0.920569
H	-6.205170	-1.354918	-1.512662	H	1.877069	3.437443	-0.404797
H	-6.914295	-3.263708	-2.910416	H	3.220522	2.663663	0.492969
H	-5.344274	-4.270534	-4.587144	H	4.865915	1.762637	-2.045462
H	-3.025511	-3.380767	-4.803002	P	0.636440	0.025758	-1.515682

C	-0.095084	-2.759262	5.263348	H	-0.793280	1.021649	7.021334
C	-0.897930	-2.238616	4.264982	C	0.294295	-4.322520	0.493558
C	-0.828866	-0.856370	3.957357	C	1.129500	-3.063760	0.262489
C	-0.021586	0.035830	4.668029	C	1.270295	-2.078427	1.244636
C	1.879457	0.272580	6.303650	C	2.130266	-3.262555	-0.849327
C	2.740031	-0.289165	7.235054	O	-1.779294	-5.078132	1.387784
C	2.654518	-1.666985	7.564807	O	2.030926	-4.158005	-1.686042
C	1.721124	-2.469162	6.929994	O	3.176482	-2.409434	-0.783296
C	0.834347	-1.928601	5.953777	C	4.197285	-2.634058	-1.791841
C	0.888963	-0.517143	5.646532	C	-3.201503	-4.896035	1.665053
H	-0.153372	-3.821513	5.523197	H	0.764342	-4.991319	1.237400
H	-1.608224	-2.858913	3.713053	H	0.814294	-2.217309	2.230160
O	-1.676365	-0.392455	2.939425	H	2.073559	-1.341551	1.179890
H	1.965053	1.333128	6.057101	H	0.264282	-4.893311	-0.454702
H	3.495409	0.337526	7.718871	H	-1.691264	-0.850752	-0.928876
H	3.333079	-2.093616	8.309325	H	-0.518580	-2.275783	-1.536595
H	1.656570	-3.538032	7.160167	H	5.029176	-1.978879	-1.507367
O	-2.230097	1.082499	0.989533	H	4.506552	-3.689317	-1.788474
H	4.519005	0.682087	-0.662459	H	3.809776	-2.366821	-2.786070
H	4.032996	0.208723	-2.325354	H	-3.544086	-5.877454	0.012047
H	-4.042741	3.847100	1.711542	H	-3.340800	-4.131651	2.443121
H	-2.373371	3.755855	1.085410	H	-3.724247	-4.594014	0.746086
H	-3.731360	3.088134	0.121801				
H	-5.204100	1.655820	2.542338	R4c_05			
H	-4.900167	0.901482	0.949129	116			
H	-4.301393	0.116856	2.447507	Energy =	-3595.573934034		
O	-1.671575	-2.919184	0.746893	Rh	-0.176673	-1.127494	0.675030
C	-1.123114	-4.034713	0.896164	O	-1.956908	-1.849072	1.676640
P	-1.018064	0.146984	1.493612	C	-1.837820	-2.080499	2.901779
C	0.072969	1.438464	-4.471739	C	-0.536287	-1.953397	3.635019
C	-0.122322	1.964109	-3.192996	C	0.480136	-1.067754	2.917828
C	-0.091126	3.351727	-2.909933	C	0.183560	0.242523	2.540674
C	0.213675	4.241977	-3.922610	C	1.892473	-1.564771	3.142211
C	0.933716	4.678624	-6.257321	O	-2.854039	-2.505820	3.636223
C	1.296077	4.216709	-7.511663	O	2.138552	-2.705277	3.521150
C	1.283784	2.823009	-7.779840	O	2.822192	-0.603513	2.966035
C	0.885967	1.916830	-6.808000	C	4.182842	-1.037724	3.231396
C	0.484492	2.357122	-5.511432	C	-1.439255	3.197175	-1.273965
C	0.538296	3.773781	-5.228966	C	-4.076084	-2.766379	-2.100720
O	-0.453734	1.114116	-2.116748	C	-3.118396	-1.768962	-2.127470
H	-0.325438	3.686782	-1.896446	C	-3.378044	-0.545074	-1.465510
H	0.228543	5.318861	-3.725084	C	-4.581023	-0.264381	-0.814829
H	0.956825	5.749939	-6.030233	C	-6.742821	-1.216866	0.063561
H	1.603205	4.920415	-8.290968	C	-7.646680	-2.266127	0.146879
H	1.595678	2.457620	-8.762929	C	-7.410173	-3.483994	-0.543143
H	0.891097	0.847275	-7.029055	C	-6.252113	-3.639368	-1.286574
C	-0.101433	1.499785	4.398867	C	-5.291766	-2.589312	-1.378925
C	0.057785	1.982823	3.098808	C	-5.549665	-1.332303	-0.712193
C	0.106490	3.363085	2.786029	O	-2.375978	0.443258	-1.518259
C	-0.060701	4.292623	3.795770	O	-0.802001	2.094186	-0.480077
C	-0.577854	4.828704	6.162747	C	2.156192	-1.181971	-3.304967
C	-0.887286	4.420883	7.449365	C	-1.159530	4.490454	-0.519193
C	-0.969201	3.035930	7.748796	C	-0.846563	3.161590	-2.677070
C	-0.715140	2.082480	6.774110	C	2.300637	-2.527767	-4.003883
C	-0.368203	2.464641	5.443660	C	1.410775	-0.139146	-4.129346
C	-0.328407	3.875897	5.131862	P	-1.502332	0.680366	-0.116902
O	-2.744758	1.083626	2.030248	C	3.279279	3.301208	1.305239
H	0.291220	3.661131	1.751154	C	2.480461	2.532588	0.479211
H	-0.011503	5.363713	3.573926	C	3.026954	1.379195	-0.132090
H	-0.531423	5.893996	5.912148	C	4.354046	0.976961	0.029887
H	-1.081978	5.161153	8.230991	C	6.494814	1.341755	1.318335
H	-1.241197	2.715371	8.759020	C	7.246952	2.092134	2.211066

C	6.722066	3.279116	2.785457	H	1.970616	0.063762	-5.058425
C	5.432938	3.678303	2.475292	H	0.407889	-0.505090	-4.405042
C	4.625226	2.921216	1.576613	H	1.310111	0.805197	-3.573603
C	5.171646	1.736506	0.952827	H	-3.371253	3.199349	2.071293
O	2.181830	0.670883	-1.006487	H	-5.440780	4.537063	1.595789
O	1.356982	-1.447760	-2.067079	H	-7.490951	4.877450	0.288426
P	1.617567	-0.835970	-0.598090	H	-9.080109	4.136722	-1.484549
C	-4.814745	1.088454	-0.233763	H	-8.653005	2.000456	-2.725686
C	-3.894899	1.638380	0.662589	H	-6.708362	0.587881	-2.166136
C	-4.110283	2.864448	1.338562	H	4.140269	-3.576377	-0.958408
C	-5.253550	3.594453	1.071121	H	6.314268	-3.571346	-2.219883
C	-7.330698	3.933652	-0.243602	H	8.160834	-2.322395	-3.251775
C	-8.210744	3.523030	-1.230709	H	9.313388	-0.166067	-3.740292
C	-7.972032	2.309411	-1.926778	H	8.362481	1.981409	-2.862820
C	-6.881104	1.513133	-1.611722	H	6.332686	1.976252	-1.456833
C	-5.965912	1.891597	-0.584082	H	-4.809619	-3.063682	3.728470
C	-6.189271	3.148887	0.093300	H	-4.464538	-1.809420	2.467009
O	-2.717447	0.940144	0.996391	H	-3.986434	-3.520908	2.181577
C	4.870833	-0.222195	-0.689286				
C	4.192404	-1.441448	-0.603332	S2c_05			
C	4.701453	-2.653894	-1.128222	116			
C	5.897657	-2.640509	-1.821769	Energy = -3595.579193780			
C	7.771493	-1.380179	-2.851370	Rh	0.054764	0.748569	1.897842
C	8.408687	-0.181625	-3.125456	C	0.916870	0.659154	4.029697
C	7.874029	1.032572	-2.621013	C	-0.042948	-0.353273	3.906376
C	6.735234	1.031695	-1.829468	O	-1.258868	3.535145	4.803043
C	6.065966	-0.186044	-1.505013	C	-0.671955	2.619496	4.044065
C	6.587163	-1.415884	-2.058422	C	2.373951	0.253877	4.048907
O	2.958123	-1.531839	0.079224	O	-1.097085	2.324475	2.903621
C	-4.119529	-2.738138	2.941919	O	2.783213	-0.886563	3.869954
H	-0.714829	-1.604322	4.667862	O	3.172232	1.312905	4.340251
H	-0.795209	0.674664	2.773503	C	0.569210	2.015529	4.643079
H	0.987790	0.944378	2.306608	C	-2.409384	4.231516	4.236528
H	-0.097500	-2.966463	3.724420	H	-2.733572	4.920172	5.025093
H	-0.681418	-1.899320	-0.594684	H	-2.103567	4.781460	3.334465
H	0.454907	-2.578026	0.861022	C	-4.224855	-1.410370	2.650531
H	4.458901	-1.850072	2.543568	H	0.463492	1.950718	5.740718
H	4.804896	-0.151201	3.063901	H	-1.064483	-0.212261	4.269871
H	4.266597	-1.392474	4.269639	H	0.288604	-1.384180	3.758899
H	-3.899129	-3.714709	-2.618456	C	4.590282	1.018917	4.405046
H	-2.169494	-1.892867	-2.655350	H	5.059539	1.943915	4.762359
H	-6.941296	-0.286484	0.600675	H	4.962788	0.755699	3.403706
H	-8.552684	-2.152213	0.750228	C	-2.673141	3.352443	-1.620327
H	-8.137931	-4.298461	-0.478894	C	-2.755937	2.715636	-0.395989
H	-6.049341	-4.579661	-1.810619	C	-3.109108	1.345529	-0.350074
H	-2.521449	2.998442	-1.308976	C	-3.404633	0.591918	-1.488402
H	3.139786	-0.797188	-2.995839	C	-3.353946	0.519079	-4.008437
H	-1.624360	5.335255	-1.055033	C	-3.183644	1.162521	-5.225262
H	-1.579870	4.457426	0.497994	C	-2.888539	2.550314	-5.277328
H	-0.075576	4.683021	-0.453868	C	-2.738496	3.266133	-4.100689
H	2.878783	4.205051	1.776196	C	-2.886865	2.632120	-2.831323
H	1.437192	2.782593	0.273982	C	-3.233789	1.229081	-2.775748
H	6.916598	0.429405	0.892338	H	-2.416153	4.415317	-1.673362
H	8.256351	1.762497	2.475189	H	-2.561131	3.237503	0.543839
H	7.330309	3.866064	3.479795	O	-3.215835	0.752262	0.919971
H	5.005594	4.580032	2.926710	H	-3.574292	-0.550296	-3.987578
H	-1.275929	3.979315	-3.280728	H	-3.275262	0.592577	-6.154777
H	0.247140	3.296859	-2.639794	H	-2.771346	3.047836	-6.244707
H	-1.075273	2.207496	-3.175785	H	-2.496403	4.334196	-4.125056
H	2.874029	-2.397732	-4.937163	O	-2.770459	-1.062415	2.588848
H	2.835496	-3.249459	-3.367912	C	1.805426	-3.368372	0.653415
H	1.311387	-2.942017	-4.259900	C	-4.298998	-2.836979	3.179141

C	-4.909115	-0.385171	3.548343	C	6.222650	-2.012835	-3.898418
H	-4.627114	-1.353044	1.627096	C	5.219025	-1.295035	-3.264962
C	2.362287	-4.215215	1.789960	C	5.116081	-1.273005	-1.842073
C	0.698018	-4.047379	-0.141839	C	6.065054	-2.054174	-1.079599
H	2.613438	-3.036749	-0.016930	O	2.945722	-0.091005	0.949437
H	4.775972	0.187120	5.100773	H	4.753092	-1.559642	2.072528
H	1.390678	2.729672	4.454352	H	6.674907	-2.708329	0.906488
H	-5.354446	-3.147121	3.258450	H	7.813677	-3.340922	-1.170640
H	-3.784432	-3.537562	2.503334	H	7.971046	-3.296492	-3.658548
H	-3.841178	-2.907159	4.179959	H	6.273652	-2.019904	-4.991499
P	-2.006598	-0.303971	1.380439	H	4.486316	-0.745746	-3.860251
C	1.194569	1.953249	-3.236003	H	1.265357	1.775996	1.770313
C	0.776415	0.956219	-2.374318	H	-0.159950	1.442396	0.491258
C	1.745679	0.195315	-1.680241	H	-3.200972	3.509621	3.990457
C	3.123090	0.366274	-1.843457				
C	4.932437	1.847431	-2.784035	S4c_05			
C	5.317639	2.910941	-3.586174	116			
C	4.355425	3.648742	-4.324186	Energy = -3595.577835318			
C	3.013422	3.324223	-4.220099	Rh	0.145056	-0.007321	1.345149
C	2.579423	2.249915	-3.389118	C	-3.501934	-3.206745	-1.611741
C	3.561309	1.466807	-2.672960	C	-2.661589	-2.112247	-1.699977
H	0.456883	2.538192	-3.794897	C	-3.125131	-0.843494	-1.275275
H	-0.281726	0.726285	-2.227444	C	-4.423532	-0.623695	-0.807818
O	1.259398	-0.826716	-0.838671	C	-6.554675	-1.700732	-0.000204
H	5.685974	1.297472	-2.216132	C	-7.342857	-2.830598	0.161383
H	6.374995	3.186377	-3.646460	C	-6.898104	-4.097712	-0.298219
H	4.674801	4.479125	-4.961070	C	-5.651780	-4.215807	-0.890137
H	2.257397	3.898287	-4.766633	C	-4.807589	-3.078891	-1.055028
O	1.224138	-2.146239	1.299759	C	-5.274779	-1.779280	-0.627126
H	-5.981963	-0.626996	3.636785	H	-3.162220	-4.192080	-1.947591
H	-4.469818	-0.400478	4.560231	H	-1.641793	-2.192501	-2.083288
H	-4.817690	0.627754	3.127225	O	-2.232912	0.236373	-1.405881
H	2.833298	-5.122373	1.374990	H	-6.911027	-0.735021	0.365519
H	3.116483	-3.657897	2.365168	H	-8.317418	-2.743564	0.651529
H	1.555656	-4.525469	2.475007	H	-7.534851	-4.978468	-0.173023
H	1.098611	-4.953244	-0.628170	H	-5.287477	-5.190622	-1.231650
H	-0.124319	-4.350198	0.527909	O	-1.125535	2.337293	-0.615565
H	0.301463	-3.378370	-0.920297	C	-1.843863	3.134532	-1.657624
P	1.392207	-0.630877	0.798038	C	1.638894	-1.606920	-2.785835
C	-3.846615	-0.824865	-1.346714	C	-1.832613	4.577551	-1.168413
C	-3.078448	-1.727497	-0.606804	C	-1.122219	2.929999	-2.984469
C	-3.373352	-3.109910	-0.522604	H	-2.875397	2.755329	-1.719873
C	-4.501723	-3.601063	-1.153057	C	1.462617	-3.096095	-3.050564
C	-6.595724	-3.211978	-2.426861	C	0.991930	-0.706895	-3.831075
C	-7.484133	-2.350181	-3.047964	H	2.705612	-1.359620	-2.674113
C	-7.200048	-0.960292	-3.096643	H	-2.349531	5.219527	-1.901346
C	-6.027322	-0.456219	-2.554215	H	-2.350128	4.672570	-0.201437
C	-5.076315	-1.316745	-1.928614	H	-0.798760	4.944965	-1.056642
C	-5.389973	-2.725326	-1.841665	H	-1.615138	3.528760	-3.769491
O	-1.907963	-1.291494	0.049686	P	-1.577733	0.904401	-0.021044
H	-2.689751	-3.761056	0.027590	C	3.669688	3.762446	0.498992
H	-4.735610	-4.669886	-1.111089	C	2.773909	2.915304	-0.127877
H	-6.811457	-4.283925	-2.363369	C	3.194241	1.612052	-0.485286
H	-8.408861	-2.734540	-3.488317	C	4.487903	1.131453	-0.268447
H	-7.916358	-0.276900	-3.562728	C	6.689597	1.543562	0.887417
H	-5.830761	0.617614	-2.592137	C	7.535933	2.385517	1.593176
C	4.079388	-0.540756	-1.147516	C	7.141524	3.711885	1.910419
C	3.976881	-0.734212	0.231221	C	5.886492	4.163456	1.538501
C	4.897455	-1.495482	0.990750	C	4.982837	3.318751	0.829164
C	5.942106	-2.125234	0.338956	C	5.399185	1.982593	0.463818
C	7.095182	-2.764534	-1.763342	H	3.369084	4.779184	0.771978
C	7.179291	-2.742687	-3.145440	H	1.751487	3.220052	-0.364672

O	2.248002	0.796174	-1.138718	H	-2.155181	-1.587069	1.681919
H	7.006177	0.523345	0.660753	H	-1.034482	-2.471703	0.485225
H	8.516764	2.020782	1.912895	C	2.881645	-4.056822	3.065446
H	7.823559	4.367954	2.459355	H	3.324106	-4.149895	4.064972
H	5.560324	5.176743	1.796191	H	3.608635	-3.633792	2.356060
O	0.971409	-1.335568	-1.468770	H	2.528045	-5.031329	2.697227
H	-0.071494	3.255861	-2.909959	H	0.519444	-1.622471	4.419267
H	-1.149569	1.872419	-3.287580	H	1.434231	-0.066255	2.276254
H	1.971361	-3.363634	-3.992256	H	0.760235	1.443386	1.260978
H	1.893839	-3.697266	-2.235967	H	-3.030763	1.432463	4.551614
H	0.395376	-3.354184	-3.152009				
H	1.446803	-0.902990	-4.817216	S1a_05			
H	-0.089963	-0.907443	-3.904247	116			
H	1.144588	0.354890	-3.584868	Energy = -3595.577152553			
C	-0.150302	-2.027853	2.397570	Rh	1.420743	-0.238090	0.081839
C	-1.145068	-1.915781	1.418793	O	2.523215	0.854390	-1.447858
P	1.587882	-0.454340	-0.271772	C	3.306195	0.175763	-2.151678
C	-4.880773	0.759249	-0.488851	C	3.486289	-1.313626	-1.998889
C	-4.138773	1.557350	0.384362	C	3.016438	-1.812338	-0.635898
C	-4.565657	2.835720	0.820516	C	3.425305	-1.162535	0.538841
C	-5.745504	3.360279	0.325119	C	2.571827	-3.243066	-0.507364
C	-7.683005	3.217165	-1.219128	O	4.024354	0.719566	-3.122702
C	-8.393253	2.546101	-2.200411	O	2.444876	-3.840594	0.553300
C	-7.942378	1.278850	-2.654350	O	2.390155	-3.820681	-1.728669
C	-6.811954	0.689503	-2.107404	C	-0.347396	-3.384494	3.072716
C	-6.067718	1.340127	-1.078261	C	2.036797	-5.224967	-1.681614
C	-6.506202	2.649287	-0.647826	C	2.817327	2.203750	4.473126
O	-2.933723	1.072839	0.933588	C	2.614277	0.954946	3.914425
H	-3.954654	3.375396	1.548898	C	1.309912	0.405228	3.906501
H	-6.096409	4.341630	0.660569	C	0.206195	1.039818	4.480586
H	-8.007234	4.204534	-0.873491	C	-0.685035	3.185523	5.452286
H	-9.291332	2.994198	-2.635428	C	-0.466820	4.469878	5.927254
H	-8.489804	0.761385	-3.447929	C	0.842768	5.016255	5.968386
H	-6.475602	-0.281912	-2.475559	C	1.913863	4.270971	5.505635
C	4.869797	-0.226968	-0.749595	C	1.724024	2.954027	4.993614
C	4.092520	-1.333597	-0.401584	C	0.397031	2.379336	4.988100
C	4.435486	-2.668466	-0.725078	O	1.159311	-0.873943	3.337307
C	5.577084	-2.905356	-1.468833	O	-0.026578	-2.537959	1.872272
C	7.508400	-2.057514	-2.775968	C	-2.176171	-2.754443	-2.048340
C	8.250112	-1.003697	-3.283098	C	-1.493444	-4.289115	2.638688
C	7.874265	0.331719	-2.982764	C	0.910913	-4.138003	3.481404
C	6.786735	0.595367	-2.163259	C	-1.959573	-4.188901	-2.513118
C	6.013614	-0.464833	-1.602642	C	-3.325038	-2.594809	-1.059283
C	6.373617	-1.823099	-1.945073	P	0.365155	-0.987039	1.883869
O	2.931834	-1.156805	0.381604	C	-1.046417	3.716849	-1.695876
H	3.786330	-3.473740	-0.370878	C	-1.314333	2.424867	-1.280220
H	5.869535	-3.930319	-1.719750	C	-1.222254	1.366326	-2.216083
H	7.774928	-3.092408	-3.015886	C	-0.922459	1.560090	-3.566212
H	9.115434	-1.196534	-3.924024	C	-0.076081	3.183419	-5.297490
H	8.445769	1.163628	-3.405410	C	0.273305	4.475503	-5.662748
H	6.506632	1.629387	-1.949736	C	0.155573	5.547537	-4.739474
O	-1.726155	-0.114728	5.125348	C	-0.287666	5.300002	-3.451033
C	-1.074065	-0.309482	3.988167	C	-0.637183	3.981669	-3.034689
C	0.995574	-2.975346	2.122539	C	-0.557697	2.894272	-3.984803
O	-0.969418	0.586343	3.120180	O	-1.493178	0.065261	-1.751500
O	1.184406	-3.549926	1.057327	O	-0.914992	-2.342008	-1.354961
O	1.765673	-3.146028	3.227534	P	-0.166687	-0.925326	-1.540996
C	-0.429338	-1.663936	3.855653	C	-1.110477	0.342639	4.533268
C	-2.295920	1.213237	5.338876	C	-1.677528	-0.172874	3.365696
H	-2.773676	1.154722	6.323464	C	-2.967355	-0.754667	3.316410
H	-1.495493	1.967291	5.330351	C	-3.697429	-0.875519	4.484653
H	-1.052576	-2.428140	4.353481	C	-3.862526	-0.657553	6.950946

C	-3.304327	-0.305241	8.168243	H	1.051575	-5.351698	-1.208425
C	-1.997833	0.248277	8.211210	H	4.521703	2.384753	-4.182975
C	-1.281022	0.466916	7.044167	H	2.781472	2.324107	-3.682626
C	-1.832295	0.137582	5.769902	H	4.051485	2.721289	-2.466764
C	-3.146853	-0.464313	5.733029	H	0.479971	1.007061	0.265512
O	-0.985349	-0.059028	2.139768	H	2.107117	0.722399	1.150404
C	-0.971091	0.404022	-4.506375				
C	-0.244231	-0.755959	-4.230351	R4a_05			
C	-0.177397	-1.859756	-5.115245	116			
C	-0.898571	-1.826401	-6.294467	Energy = -3595.569419341			
C	-2.534185	-0.705032	-7.785522	Rh	0.277736	-0.698246	-0.783072
C	-3.384703	0.352643	-8.060149	C	-0.274620	-0.398342	-3.039398
C	-3.473359	1.439439	-7.151396	C	0.955706	-1.060440	-2.901897
C	-2.697528	1.469034	-6.002111	O	-2.513228	-3.294936	-2.633663
C	-1.791599	0.409199	-5.697969	C	-1.688489	-2.325556	-2.267340
C	-1.734271	-0.715116	-6.605299	C	-0.367898	1.031559	-3.477189
O	0.533666	-0.844914	-3.057116	O	-1.107329	-2.337382	-1.155961
C	3.821522	2.145273	-3.374454	O	-1.420201	1.574311	-3.806796
H	2.899198	-1.786895	-2.803591	O	0.839966	1.647827	-3.539541
H	4.137312	-0.332763	0.492222	C	-1.545233	-1.208742	-3.265443
H	3.376689	-1.707615	1.485133	C	-2.750958	-4.361527	-1.663336
H	4.542961	-1.577161	-2.186070	H	-3.448397	-5.041287	-2.165928
H	3.822069	2.637801	4.502617	H	-1.804099	-4.867720	-1.426313
H	3.437475	0.368232	3.499144	C	2.744770	3.224177	0.181520
H	-1.700476	2.784395	5.420295	H	1.002840	-2.149318	-3.014157
H	-1.315058	5.069558	6.271109	H	1.896397	-0.531031	-3.060361
H	1.000483	6.027767	6.354261	C	0.787957	3.014682	-4.018227
H	2.927182	4.686731	5.514432	H	1.834771	3.337339	-4.079023
H	-0.675061	-2.704136	3.874202	H	0.308819	3.054961	-5.007738
H	-2.318572	-2.086499	-2.912536	H	0.225148	3.645866	-3.314306
H	2.012218	-5.552043	-2.728840	C	3.379024	-2.808090	2.752272
H	-1.781505	-4.942692	3.478993	C	2.746751	-1.621776	2.428973
H	-2.375269	-3.698806	2.343292	C	3.365816	-0.737667	1.513503
H	-1.185561	-4.926286	1.793595	C	4.620001	-0.972434	0.945919
H	-1.125699	4.549770	-0.989587	C	6.435507	-2.674832	0.555000
H	-1.609970	2.197602	-0.252691	C	7.000313	-3.911508	0.827804
H	0.020427	2.369892	-6.020713	C	6.406155	-4.788462	1.772625
H	0.642560	4.669464	-6.674614	C	5.233144	-4.420707	2.409542
H	0.423537	6.563198	-5.045165	C	4.613853	-3.165615	2.138192
H	-0.367309	6.115059	-2.723598	C	5.240461	-2.251419	1.209784
H	0.672074	-4.810372	4.323354	H	2.923020	-3.497937	3.469891
H	1.294143	-4.735175	2.640593	H	1.787641	-1.338417	2.869871
H	1.698630	-3.442851	3.808447	O	2.686356	0.463671	1.227347
H	-2.864010	-4.549741	-3.031381	H	6.901670	-2.017428	-0.182412
H	-1.112508	-4.255094	-3.213876	H	7.911978	-4.215947	0.304616
H	-1.766203	-4.852339	-1.653775	H	6.868571	-5.757049	1.984657
H	-4.268759	-2.916843	-1.531687	H	4.752309	-5.095987	3.125447
H	-3.153398	-3.218883	-0.166506	O	1.757596	2.208414	-0.323636
H	-3.432701	-1.543550	-0.751845	C	-1.848634	2.633607	2.001334
H	-3.362013	-1.079858	2.350504	C	2.750910	4.348429	-0.845217
H	-4.702246	-1.309701	4.464654	C	2.324367	3.666784	1.576463
H	-4.861489	-1.103944	6.904495	H	3.730958	2.736957	0.220197
H	-3.860630	-0.464175	9.096647	C	-1.257128	2.732569	3.402016
H	-1.548171	0.501265	9.176094	C	-1.837547	3.947601	1.227625
H	-0.273681	0.885390	7.096859	H	-2.871646	2.231300	2.046647
H	0.454449	-2.711011	-4.848942	H	-2.435562	-0.558325	-3.167750
H	-0.848063	-2.666116	-6.995263	H	-1.586000	-1.623595	-4.289092
H	-2.470280	-1.560272	-8.466692	H	3.448774	5.138361	-0.520217
H	-3.997570	0.346708	-8.966277	H	3.079897	3.983991	-1.830857
H	-4.165579	2.261688	-7.356518	H	1.746842	4.793216	-0.944115
H	-2.788000	2.308953	-5.309922	P	1.996724	0.619171	-0.272397
H	2.790141	-5.789732	-1.112272	C	-5.340582	0.345999	-2.893469

C	-4.217881	0.919601	-2.323685	H	1.434842	-1.778337	-0.719778
C	-3.968779	0.737757	-0.939652	H	-3.193886	-3.939854	-0.750488
C	-4.850473	0.057381	-0.093351				
C	-6.825562	-1.505478	0.027023	S1c_05			
C	-7.888803	-2.148765	-0.589482	116			
C	-8.157187	-1.949436	-1.969026	Energy =	-3595.571574210		
C	-7.332039	-1.126180	-2.716898	Rh	0.118077	0.524387	2.277088
C	-6.220004	-0.463666	-2.118975	C	-0.291253	-1.479807	3.349010
C	-5.968220	-0.629967	-0.705719	C	-0.838918	-1.561695	2.063465
H	-5.551986	0.494526	-3.957665	O	-3.005720	0.282734	5.119814
H	-3.510214	1.512548	-2.908589	C	-1.953296	0.140983	4.326812
O	-2.826647	1.376792	-0.426760	C	0.975536	-2.251289	3.633986
H	-6.631607	-1.676802	1.088072	O	-1.625320	1.012860	3.491869
H	-8.526095	-2.819017	-0.004579	O	1.609077	-2.892860	2.805050
H	-9.005971	-2.454601	-2.439366	O	1.306042	-2.194892	4.950543
H	-7.514356	-0.977405	-3.786657	C	-1.156634	-1.114070	4.554878
O	-1.001927	1.638476	1.266453	C	-3.761259	1.527406	4.994147
H	3.056341	4.398079	1.960375	H	-4.582171	1.426949	5.713523
H	1.335065	4.150767	1.552105	H	-3.115045	2.380660	5.246356
H	2.291990	2.812027	2.268343	C	4.712679	0.861006	2.245993
H	-1.837730	3.459769	3.994195	H	-1.829910	-1.944111	4.833950
H	-1.296380	1.760135	3.916815	H	-1.907317	-1.388438	1.901725
H	-0.209883	3.073639	3.363281	H	-0.313342	-2.129173	1.292303
H	-2.441641	4.695508	1.769228	C	2.478041	-2.964328	5.322394
H	-0.811453	4.337951	1.131883	H	2.542342	-2.878905	6.414302
H	-2.265879	3.817597	0.222684	H	3.374114	-2.541943	4.843835
P	-1.540555	0.524782	0.228332	C	1.972234	-3.527686	-1.584631
C	5.262734	0.066688	0.092949	C	2.147305	-2.854613	-0.389062
C	4.576064	0.611246	-0.994456	C	2.684437	-1.543720	-0.406900
C	5.163504	1.512736	-1.915311	C	3.104830	-0.902382	-1.576401
C	6.462767	1.937023	-1.709506	C	3.017821	-0.924547	-4.096085
C	8.502645	2.010599	-0.300152	C	2.734097	-1.583381	-5.283165
C	9.191164	1.637175	0.841566	C	2.239903	-2.914199	-5.274801
C	8.585643	0.752398	1.771355	C	2.005923	-3.552048	-4.068216
C	7.320238	0.234651	1.538511	C	2.265057	-2.896259	-2.828749
C	6.589287	0.579051	0.362745	C	2.814725	-1.559392	-2.833845
C	7.193017	1.512213	-0.562102	O	2.897451	-0.949480	0.850131
O	3.254744	0.204627	-1.273015	O	3.229920	1.034776	2.336382
H	4.576867	1.840872	-2.777309	C	-1.146783	3.240445	-1.464126
H	6.938169	2.622764	-2.418414	C	5.312094	2.206757	2.635000
H	8.949451	2.707561	-1.017319	C	5.107746	-0.279642	3.178066
H	10.193163	2.031200	1.035381	C	-1.415096	4.705292	-1.141989
H	9.120638	0.478471	2.685886	C	-0.015933	3.027808	-2.463630
H	6.867618	-0.437778	2.270554	P	2.126599	0.435962	1.326737
C	-4.636767	0.041695	1.381377	C	-2.188527	-3.209019	-1.463723
C	-3.409695	-0.362488	1.908599	C	-1.452199	-2.042312	-1.375341
C	-3.175308	-0.525697	3.295895	C	-2.121481	-0.811322	-1.174806
C	-4.182116	-0.216691	4.191905	C	-3.514541	-0.702789	-1.124532
C	-6.436488	0.709213	4.659113	C	-5.693760	-1.951371	-0.911373
C	-7.623363	1.269052	4.217021	C	-6.399099	-3.145605	-0.914500
C	-7.837829	1.458346	2.826790	C	-5.735687	-4.380552	-1.138521
C	-6.884042	1.062218	1.900868	H	2.358471	-4.013545	5.013988
C	-5.659325	0.459689	2.317401	H	-0.514383	-0.927133	5.433791
C	-5.425919	0.308842	3.736194	C	-4.364159	-4.398428	-1.330193
O	-2.341331	-0.683846	1.048512	C	-3.605573	-3.191307	-1.315811
H	-2.205131	-0.907046	3.624996	C	-4.283156	-1.928530	-1.128374
H	-4.024346	-0.351110	5.267112	O	-1.317720	0.341202	-1.102067
H	-6.248107	0.576031	5.729881	O	-0.751560	2.604952	-0.169547
H	-8.388647	1.577967	4.935118	P	-1.173172	1.143336	0.358074
H	-8.764128	1.926406	2.480129	C	3.823461	0.401815	-1.518799
H	-7.063286	1.224399	0.835911	C	3.286026	1.473676	-0.804518
H	0.388750	-1.149091	0.721681	C	3.851099	2.772227	-0.798022

C	5.027418	2.997755	-1.489207	116		
C	6.954631	2.137218	-2.791219	Energy =	-3595.574963629	
C	7.634199	1.087229	-3.385438	Rh	0.051313	-1.544856
C	7.079792	-0.218850	-3.351746	C	-0.077494	-3.856837
C	5.848596	-0.452665	-2.757138	C	1.192767	-3.485538
C	5.106756	0.608807	-2.157371	O	-1.849922	-4.036756
C	5.696768	1.929121	-2.153071	C	-1.293304	-3.461382
O	2.087423	1.308258	-0.079234	C	-0.319325	-4.293256
C	-4.161117	0.637144	-1.038259	O	-0.956228	-2.253076
C	-3.781861	1.524636	-0.030189	O	-1.317245	-4.918131
C	-4.417620	2.771225	0.187264	O	0.705052	-3.983098
C	-5.436702	3.165850	-0.660192	C	-1.139196	-4.362377
C	-6.815152	2.790880	-2.689265	C	1.225924	0.199432
C	-7.146909	2.025550	-3.794451	C	-2.074376	-3.197580
C	-6.478740	0.794587	-4.025734	C	2.955692	2.440778
C	-5.514694	0.333560	-3.141847	C	2.108628	2.045940
C	-5.164156	1.082979	-1.979720	C	2.640569	1.320857
C	-5.816276	2.356008	-1.769486	C	3.997160	1.015288
O	-2.760641	1.165415	0.871141	C	6.234395	0.939857
H	1.587295	-4.552941	-1.586941	C	7.039328	1.271925
H	1.908396	-3.298008	0.580541	C	6.524590	2.032856
H	3.391092	0.101525	-4.122800	C	5.196805	2.425447
H	2.890518	-1.069542	-6.236517	C	4.335015	2.084571
H	2.032173	-3.425737	-6.219214	C	4.867705	1.347340
H	1.604887	-4.570935	-4.045397	O	1.741191	0.956013
H	4.961581	0.610826	1.203440	O	0.757323	-0.672714
H	-2.066445	2.746490	-1.813837	C	-4.529481	-2.391905
H	6.412868	2.139771	2.604922	C	1.278641	-0.697988
H	4.995194	2.997609	1.937703	C	0.260601	1.370190
H	5.008046	2.487803	3.656526	C	-4.790301	-3.241921
H	-1.683806	-4.166024	-1.630998	C	-5.156193	-2.947104
H	-0.363559	-2.043400	-1.466660	P	1.336013	-0.643648
H	-6.220335	-1.011851	-0.730280	C	-1.950648	2.663431
H	-7.479148	-3.134745	-0.739241	C	-2.237129	1.347139
H	-6.306625	-5.313624	-1.147902	C	-2.810151	1.045495
H	-3.836454	-5.344940	-1.485941	C	-3.130285	2.020509
H	6.201482	-0.421476	3.146481	C	-2.884460	4.439579
H	4.819621	-0.044843	4.216586	C	-2.511825	5.738467
H	4.628106	-1.221852	2.869940	C	-1.989788	6.056298
H	-1.700930	5.238803	-2.064459	C	-1.821748	5.054739
H	-2.236655	4.808530	-0.415890	C	-2.176240	3.704938
H	-0.512153	5.184727	-0.728667	C	-2.751014	3.385810
H	-0.278000	3.510053	-3.421235	O	-3.108278	-0.303147
H	0.920465	3.476793	-2.093514	O	-3.042766	-2.382816
H	0.150648	1.956422	-2.649512	P	-2.107515	-1.105755
H	3.336555	3.568018	-0.253151	C	4.494087	0.354077
H	5.472294	3.997942	-1.509748	C	3.903678	-0.829612
H	7.380741	3.146410	-2.788776	C	4.383650	-1.570831
H	8.602049	1.257961	-3.865775	C	5.460107	-1.086874
H	7.631524	-1.053150	-3.795258	C	7.115748	0.704875
H	5.443449	-1.466480	-2.734453	C	7.659535	1.943521
H	-4.092166	3.390157	1.027797	C	7.150605	2.694322
H	-5.949633	4.119869	-0.499588	C	6.131008	2.190666
H	-7.307897	3.752374	-2.509750	C	5.562628	0.907906
H	-7.911167	2.372194	-4.496106	C	6.054954	0.163982
H	-6.723011	0.203767	-4.913889	O	2.817955	-1.385517
H	-5.003691	-0.611312	-3.340612	C	-3.811011	1.627112
H	0.972890	0.678973	3.607360	C	-3.268721	0.621055
H	0.507054	2.052811	2.272014	C	-3.797269	0.269923
H	-4.139695	1.629492	3.967562	C	-4.936609	0.905729
				C	-6.820324	2.477269
				C	-7.496505	3.375885

R2a_05

C	-6.980892	3.695157	-0.808449	C	-1.667851	-0.800545	-3.322329
C	-5.790651	3.139457	-0.363114	O	0.351383	-3.877493	-5.267981
C	-5.052657	2.229561	-1.177995	C	0.279321	-2.758019	-4.562017
C	-5.603938	1.872905	-2.466024	C	-0.825123	0.921873	-4.914733
O	-2.095656	-0.052756	-1.149281	O	0.686751	-2.687218	-3.380307
H	-2.493111	-3.877137	5.817557	C	-3.949064	2.068915	-0.516055
H	-1.121582	-2.768065	5.407828	C	-2.836558	2.157877	-1.332003
H	1.444459	-3.614320	2.200689	C	-1.569904	2.395354	-0.745422
H	2.042902	-3.427964	0.459967	C	-1.382569	2.631309	0.617327
C	0.521905	-4.447677	-2.937834	C	-2.427490	2.485091	2.905501
H	1.428369	-4.137505	-3.472452	C	-3.543813	2.300299	3.708031
H	2.567627	3.016335	3.579433	C	-4.821058	2.072099	3.132355
H	1.042641	2.287766	1.720928	C	-4.952127	2.004517	1.754740
H	6.644461	0.345172	0.823325	C	-3.822546	2.172672	0.900179
H	8.081534	0.939010	2.740876	C	-2.527698	2.446568	1.482564
H	7.174183	2.295181	4.644735	C	2.167953	3.584897	-2.210221
H	4.781291	2.995350	4.637200	C	-2.223451	-3.984610	-0.190652
H	2.234246	0.558762	-2.914079	C	3.676693	3.709915	-2.039477
H	-4.851598	-1.351284	-0.538494	C	1.627845	4.279196	-3.455198
H	0.413129	-5.542662	-2.956547	C	-3.739534	-3.845279	-0.130912
H	-0.371344	-3.985737	-3.384084	C	-1.748116	-5.258647	-0.880473
H	1.611812	-0.107816	-5.270257	C	4.015474	-2.248276	0.961966
H	1.989229	-1.526852	-4.255916	C	2.918533	-2.664321	0.229472
H	0.281930	-1.112723	-4.624959	C	1.629629	-2.582734	0.809119
H	-1.528603	2.916895	4.023040	C	1.399142	-2.129834	2.108857
H	-2.044744	0.529569	3.428992	C	2.398328	-0.992109	4.123721
H	-3.278807	4.213021	-1.135260	C	3.507263	-0.514681	4.806139
H	-2.619621	6.526150	-0.582164	C	4.808570	-0.635859	4.251862
H	-1.711019	7.087599	1.686705	C	4.972788	-1.211621	3.003162
H	-1.402789	5.281979	3.378268	C	3.852893	-1.698806	2.266501
H	0.587803	2.019380	-4.133874	C	2.531025	-1.616643	2.847556
H	-0.759217	1.014411	-3.521022	C	-0.051649	3.058756	1.134414
H	0.240153	1.970801	-2.382112	C	1.100416	2.326961	0.837917
H	-5.877351	-3.338609	-1.775403	C	2.371371	2.615825	1.391846
H	-4.348540	-2.781148	-2.511912	C	2.513227	3.712435	2.220769
H	-4.359306	-4.248280	-1.489022	C	1.570005	5.755638	3.264252
H	-6.253852	-2.971162	0.787654	C	0.511284	6.624081	3.469141
H	-4.811445	-3.977804	1.086049	C	-0.750727	6.345132	2.883125
H	-4.911186	-2.313804	1.763137	C	-0.946032	5.195819	2.131607
H	3.902040	-2.520931	-2.554305	C	0.114049	4.264193	1.920308
H	5.856365	-1.653869	-3.877597	C	1.410049	4.575981	2.480007
H	7.485151	0.123286	-4.330477	C	0.019889	-2.164405	2.674594
H	8.469843	2.350366	-3.795818	C	-1.041057	-1.562756	1.992082
H	7.563783	3.684164	-1.875468	C	-2.345461	-1.446385	2.531250
H	5.746099	2.786498	-0.467651	C	-2.618876	-2.008439	3.764435
H	-3.285732	-0.494917	-3.403471	C	-1.915576	-3.386962	5.705178
H	-5.350710	0.654754	-4.253909	C	-0.955102	-4.134418	6.365737
H	-7.216407	2.205030	-3.883894	C	0.342359	-4.266453	5.805692
H	-8.431878	3.828934	-2.433271	C	0.669991	-3.631372	4.617109
H	-7.530863	4.383882	-0.159862	C	-0.286244	-2.833007	3.920662
H	-5.415212	3.389893	0.631431	C	-1.618965	-2.736422	4.471664
H	-2.110238	-4.402902	1.115342	O	-1.462247	1.847285	-4.426146
H	-0.929134	-5.393137	1.979397	O	-0.088991	1.028342	-6.051570
H	-0.097029	-0.055682	1.522725	C	-0.274256	-1.577228	-5.313354
H	1.346364	-1.252911	1.900969	C	0.970596	-5.030663	-4.619590
H	-2.785364	-2.395744	4.820660	H	0.928492	-5.827259	-5.370998
S3c_05				O	-0.477775	2.483031	-1.628206
116				O	1.887980	2.120910	-2.347906
Energy =	-3595.573861634			O	0.545806	-3.036665	0.034877
Rh	0.462070	-0.709000	-2.459501	O	-1.726387	-2.820819	-0.987362
C	-0.805802	-0.489974	-4.379238	O	1.034488	1.186994	0.011157
				O	-0.835139	-0.965600	0.730549

P	0.703617	1.325225	-1.599962	C	-7.475508	-2.386688	0.861144
P	-0.467265	-1.873100	-0.600680	C	-7.161704	-3.766488	0.745177
H	2.010110	-4.793084	-4.351596	C	-5.954596	-4.152450	0.186529
H	-1.047606	-1.913644	-6.026773	C	-5.019055	-3.183786	-0.283152
H	-1.996810	-1.827940	-3.145226	C	-5.352720	-1.778997	-0.202968
H	-2.274560	-0.010484	-2.874441	H	-3.522811	-4.643898	-0.892758
C	-0.125000	2.332404	-6.686774	H	-1.844268	-2.910823	-1.589627
H	0.464666	2.220165	-7.604918	O	-2.177540	-0.324322	-1.497609
H	-4.940845	1.905725	-0.950865	H	-6.854505	-0.360611	0.493798
H	-2.893547	2.086772	-2.421527	H	-8.421283	-2.082460	1.320113
H	-1.450720	2.650361	3.365664	H	-7.868872	-4.519710	1.104751
H	-3.436397	2.328746	4.796655	H	-5.692450	-5.212891	0.105826
H	-5.696037	1.943007	3.776506	O	-0.689879	1.655207	-1.136404
H	-5.929086	1.815781	1.296657	C	-1.283602	2.294154	-2.357609
H	1.644580	3.947445	-1.311869	C	2.450862	-2.834081	-2.029860
H	-1.787600	-3.911942	0.817862	C	-1.076903	3.795769	-2.205110
H	3.949816	4.775073	-1.953469	C	-0.596673	1.694854	-3.579418
H	4.017561	3.191912	-1.129592	H	-2.357968	2.055136	-2.368437
H	4.203310	3.284536	-2.909813	C	2.640077	-4.342104	-1.920578
H	1.817979	5.363934	-3.386131	C	1.745426	-2.395215	-3.308231
H	5.022184	-2.320118	0.537258	H	3.414526	-2.313463	-1.922994
H	3.017818	-3.071358	-0.780012	H	-1.505186	4.314812	-3.079157
H	1.404040	-0.882791	4.562038	H	-1.576543	4.176331	-1.300571
H	3.376255	-0.037081	5.782018	H	-0.004063	4.044411	-2.151166
H	5.675699	-0.265674	4.807093	H	-1.004802	2.156015	-4.495127
H	5.968904	-1.295804	2.555089	P	-1.402945	0.494526	-0.264025
H	2.136046	3.897303	-4.356907	C	3.623874	3.354100	-0.856277
H	0.542851	4.120325	-3.554041	C	2.776095	2.282464	-1.054223
H	-4.166157	-4.687444	0.439478	C	3.225689	0.975145	-0.755956
H	-4.031341	-2.908106	0.368342	C	4.516863	0.695826	-0.303779
H	-4.174573	-3.858928	-1.144441	C	6.619904	1.677276	0.680503
H	-2.110235	-6.140243	-0.324474	C	7.409297	2.779243	0.974504
H	-2.146533	-5.314590	-1.908097	C	6.988526	4.087924	0.622538
H	-0.648290	-5.298078	-0.911688	C	5.760812	4.271877	0.008891
H	3.206205	1.948127	1.165294	C	4.914632	3.163661	-0.285605
H	3.485017	3.941399	2.670208	C	5.361329	1.825573	0.025105
H	2.556072	5.968675	3.690924	H	3.300360	4.370167	-1.106868
H	0.648183	7.530165	4.066863	H	1.758715	2.403521	-1.430342
H	-1.578935	7.047266	3.020114	O	2.321825	-0.062521	-1.061134
H	-1.922097	5.005606	1.680029	H	6.957270	0.679694	0.969890
H	-3.100095	-0.890649	1.969009	H	8.364814	2.636740	1.488562
H	-3.617910	-1.914277	4.202550	H	7.626564	4.947107	0.850271
H	-2.927233	-3.293154	6.114808	H	5.411444	5.278120	-0.247076
H	-1.196679	-4.633782	7.308729	O	1.587851	-2.447406	-0.870075
H	1.092176	-4.880364	6.314000	H	0.489277	1.884396	-3.552832
H	1.670728	-3.752183	4.196442	H	-0.770576	0.609413	-3.633259
H	0.321158	3.088357	-6.024163	H	3.264839	-4.694341	-2.758624
H	-1.163612	2.614062	-6.916184	H	3.143303	-4.610034	-0.978988
H	0.552814	-1.173636	-5.925095	H	1.669094	-4.862180	-1.968798
H	1.547786	-0.175947	-3.492214	H	2.352794	-2.685098	-4.182618
H	1.821841	-0.904062	-1.680189	H	0.760663	-2.884168	-3.396119
H	0.401068	-5.303113	-3.719697	H	1.609212	-1.303192	-3.329717
S2a_05				O	-1.928195	-1.120156	2.447972
116				C	-2.179121	-0.209316	3.270402
Energy = -3595.570601429				P	1.737395	-1.134260	0.056562
Rh	-0.139941	-0.857907	1.229603	C	-4.715981	0.660092	-0.736729
C	-3.756613	-3.577219	-0.813529	C	-3.871047	1.578493	-0.109293
C	-2.825417	-2.629509	-1.198924	C	-4.151626	2.964646	-0.033843
C	-3.156542	-1.256109	-1.104397	C	-5.286603	3.460020	-0.649005
C	-4.408207	-0.797875	-0.687622	C	-7.278181	3.115598	-2.088704
C	-6.596979	-1.417849	0.397378	C	-8.083655	2.285935	-2.850476
				C	-7.778000	0.903295	-2.948581

C	-6.695449	0.365675	-2.268482	C	2.182914	-1.987746	3.067681
C	-5.856895	1.185037	-1.454689	C	0.798853	-1.790547	3.429470
C	-6.147525	2.599853	-1.389903	C	3.207680	-1.158559	3.858468
O	-2.709490	1.137624	0.557885	O	1.898454	-5.283719	1.401162
H	-3.467438	3.611568	0.521511	O	2.917083	-0.287599	4.659937
H	-5.524697	4.527067	-0.589512	O	4.473176	-1.532932	3.547266
H	-7.489753	4.188110	-2.020434	C	1.429715	3.131933	3.118243
H	-8.945027	2.694374	-3.387091	C	5.515914	-0.822500	4.269884
H	-8.399815	0.254039	-3.572424	C	4.502211	0.373792	-2.082316
H	-6.470132	-0.698703	-2.364399	C	4.078808	0.521787	-0.774813
C	5.001442	-0.705568	-0.158793	C	3.085139	1.483937	-0.473568
C	4.269731	-1.642098	0.572779	C	2.528828	2.336837	-1.429681
C	4.735740	-2.946368	0.865253	C	2.270409	2.811032	-3.890544
C	5.955851	-3.354809	0.358851	C	2.644089	2.573914	-5.205059
C	7.924108	-2.948489	-1.095153	C	3.668868	1.640414	-5.511066
C	8.627437	-2.138828	-1.970967	C	4.284407	0.935403	-4.490295
C	8.132969	-0.846310	-2.286146	C	3.910299	1.138205	-3.129360
C	6.967540	-0.370175	-1.703777	C	2.897979	2.120221	-2.810935
C	6.228312	-1.166151	-0.778026	O	2.700459	1.606807	0.874810
C	6.710957	-2.499626	-0.495193	O	1.001145	1.748110	2.725164
O	3.005627	-1.298155	1.105015	C	-3.570077	0.350311	1.937801
H	4.124908	-3.594853	1.498459	C	0.312028	3.668951	4.002685
H	6.342119	-4.352951	0.589291	C	2.778483	3.036879	3.820288
H	8.281279	-3.956408	-0.858599	C	-4.121973	0.259561	3.354764
H	9.553653	-2.496743	-2.430081	C	-3.662750	1.744177	1.329338
H	8.674487	-0.218488	-3.000313	P	1.188443	1.052145	1.291766
H	6.599641	0.624244	-1.964119	C	-0.620198	-1.975875	-3.519921
C	-1.341946	1.036756	3.415463	C	-0.870696	-1.128150	-2.456301
C	0.059108	0.852437	2.842130	C	-1.809812	-1.519301	-1.472840
C	0.827344	-0.266211	3.189609	C	-2.535702	-2.710159	-1.529661
C	0.797059	2.058642	2.334385	C	-2.787408	-4.941365	-2.676780
O	-3.234182	-0.258841	4.069343	C	-2.456228	-5.803820	-3.711838
O	1.981341	2.073219	2.026918	C	-1.543851	-5.405517	-4.724053
O	-0.004833	3.161771	2.317685	C	-0.957485	-4.151988	-4.666262
C	0.669151	4.384398	1.928856	C	-1.261925	-3.245687	-3.607809
C	-4.124593	-1.408853	3.920085	C	-2.221204	-3.633537	-2.597415
H	-1.874625	1.840731	2.880678	O	-2.041809	-0.623947	-0.408313
H	0.451354	-0.991389	3.918512	O	-2.122700	-0.015109	2.031578
H	1.909693	-0.238586	3.043966	P	-1.349870	-1.031673	1.046019
H	-1.310020	1.336208	4.478653	C	1.587228	3.413711	-1.010552
H	-0.102592	5.163843	1.966360	C	0.464308	3.108886	-0.237748
H	1.484771	4.608682	2.632959	C	-0.517857	4.064323	0.118964
H	1.084742	4.283819	0.915562	C	-0.352988	5.380598	-0.269908
H	-4.891037	-1.265397	4.690343	C	1.020882	7.156580	-1.324866
H	-4.567794	-1.409075	2.913785	C	2.178320	7.560186	-1.969073
H	-3.563327	-2.339203	4.087173	C	3.179638	6.604298	-2.282179
H	-0.635142	-2.038887	0.323871	C	3.000569	5.262820	-1.978713
H	0.421241	-2.188898	1.891230	C	1.808779	4.805025	-1.341348
				C	0.812083	5.788657	-0.981508
				O	0.221219	1.777107	0.160393
				C	-3.560986	-3.001472	-0.487158
				C	-3.220394	-2.947007	0.866963
				C	-4.109210	-3.319634	1.905607
				C	-5.399142	-3.703105	1.589303
				C	-7.203561	-4.001069	-0.088104
				C	-7.655275	-3.930421	-1.395283
				C	-6.767278	-3.527382	-2.426736
				C	-5.442384	-3.228274	-2.145941
				C	-4.934972	-3.313258	-0.815180
				C	-5.852607	-3.683350	0.238730
				O	-1.919347	-2.580122	1.268575
				C	1.140368	-5.879032	0.301452

B.2.6 Strukturen der _06 Spezies

Rlc_06
116
Energy = -3595.554674224
Rh 0.896264 -1.123940 1.313985
O 0.972707 -3.290137 0.893731
C 1.741636 -3.980690 1.593248
C 2.613418 -3.418052 2.695947

H	2.564235	-4.076673	3.580048	C	1.838499	-5.441457	-4.380283
H	0.148780	-2.669582	3.487121	C	2.124578	-4.348001	-3.511406
H	0.566378	-0.970102	4.112836	C	2.236822	-3.016128	-4.061506
H	3.659764	-3.439025	2.344261	H	2.220213	-5.561552	-1.705304
H	1.296890	-0.854311	-0.223178	H	2.584994	-3.601488	-0.179931
H	5.281963	-0.353225	-2.331313	O	2.786217	-1.109579	-0.905351
H	4.496539	-0.076068	0.038950	H	2.039997	-1.840473	-5.886396
H	1.476369	3.528608	-3.673222	H	1.519151	-3.768120	-7.338041
H	2.140964	3.111145	-6.014730	H	1.411489	-6.087385	-6.390825
H	3.961155	1.472156	-6.551846	H	1.769088	-6.445983	-3.949394
H	5.063434	0.198429	-4.713332	O	2.288721	1.155416	0.064230
H	1.510997	3.727044	2.194901	C	3.595763	1.749343	-0.356475
H	-4.062811	-0.385470	1.283005	C	-3.435107	1.439771	-1.967325
H	2.518371	-1.371848	1.797808	C	3.409070	3.260049	-0.297111
H	6.455266	-1.285860	3.944768	C	4.673631	1.225845	0.584268
H	0.557362	4.696167	4.320902	H	3.797792	1.424492	-1.389264
H	-0.646649	3.694512	3.460802	C	-3.117470	1.950140	-3.367317
H	0.195050	3.044248	4.903334	C	-4.551972	0.402444	-1.931256
H	0.095176	-1.687439	-4.296760	H	-3.664527	2.277494	-1.289500
H	-0.369858	-0.162919	-2.352291	H	4.346367	3.760208	-0.594204
H	-3.488567	-5.265219	-1.904291	H	2.609450	3.587632	-0.979090
H	-2.903607	-6.802055	-3.747049	H	3.151451	3.579677	0.725995
H	-1.299864	-6.091924	-5.540409	H	5.645110	1.678538	0.322079
H	-0.239530	-3.837519	-5.431425	P	1.522014	-0.059589	-0.659825
H	3.072870	4.037818	4.179940	C	-3.089880	1.350768	4.556260
H	2.720073	2.352734	4.681262	C	-3.137668	0.836422	3.273918
H	3.556057	2.676700	3.129640	C	-2.850704	1.677705	2.170957
H	-5.190274	0.533579	3.353473	C	-2.575109	3.040865	2.307892
H	-4.029087	-0.763204	3.752795	C	-1.973163	4.887689	3.911919
H	-3.586044	0.950323	4.026611	C	-1.840056	5.355207	5.210961
H	-4.721487	2.042806	1.243972	C	-2.157433	4.525319	6.317632
H	-3.149501	2.478071	1.973976	C	-2.576775	3.223281	6.101999
H	-3.213579	1.764368	0.324719	C	-2.705300	2.704331	4.780641
H	-1.394102	3.732497	0.680584	C	-2.426275	3.560414	3.649935
H	-1.110301	6.129631	-0.016911	H	-3.331331	0.717559	5.416559
H	0.248687	7.885967	-1.057734	H	-3.414573	-0.202410	3.076335
H	2.329146	8.613264	-2.224218	O	-2.937559	1.097885	0.895177
H	4.106453	6.929013	-2.764648	H	-1.715867	5.538093	3.072958
H	3.786599	4.544067	-2.219320	H	-1.482599	6.375016	5.383397
H	-3.747277	-3.306812	2.937069	H	-2.057902	4.911294	7.336432
H	-6.094167	-4.006372	2.379055	H	-2.806440	2.564739	6.946620
H	-7.882688	-4.290647	0.721148	O	-2.188757	0.779986	-1.474036
H	-8.695839	-4.170317	-1.633055	H	4.435104	1.492552	1.627151
H	-7.132518	-3.446147	-3.454997	H	4.767936	0.132422	0.501051
H	-4.775865	-2.908853	-2.950001	H	-4.012968	2.431120	-3.795824
H	5.493520	0.245997	4.009543	H	-2.305119	2.693242	-3.342593
H	5.371101	-0.939392	5.353908	H	-2.819373	1.118114	-4.026236
H	1.433025	-6.935135	0.303969	H	-5.484296	0.847670	-2.318496
H	0.063210	-5.763051	0.486040	H	-4.293309	-0.464830	-2.561314
H	1.413592	-5.391627	-0.645288	H	-4.735127	0.057193	-0.902103
R3c_06				O	-1.837823	-2.022101	1.349879
116				C	-1.557733	-2.760379	2.317927
Energy = -3595.550185229				P	-1.542809	0.898428	-0.005983
Rh	-0.178024	-0.830773	0.497128	C	2.794693	-0.530921	-3.689361
C	2.282836	-4.545674	-2.109138	C	2.066844	0.555581	-3.198615
C	2.483209	-3.472149	-1.261146	C	2.188023	1.868826	-3.715329
C	2.580064	-2.171929	-1.810969	C	3.107167	2.121974	-4.716095
C	2.538967	-1.908926	-3.181485	C	4.963410	1.357413	-6.174087
C	2.000534	-2.844736	-5.458069	C	5.825963	0.362609	-6.603179
C	1.705337	-3.928489	-6.271602	C	5.720142	-0.943641	-6.058310
C	1.636482	-5.240801	-5.735406	C	4.744219	-1.244595	-5.119609
				C	3.821595	-0.252288	-4.671815

C	3.959972	1.087066	-5.197829	C	-4.182183	-2.169897	-2.397168
O	1.092631	0.366146	-2.196327	C	-3.259802	-1.149548	-2.255763
H	1.538648	2.652137	-3.316401	C	-3.529958	-0.098602	-1.347907
H	3.203480	3.128779	-5.135447	C	-4.703682	-0.011265	-0.597458
H	5.045965	2.375389	-6.569844	C	-6.789569	-1.216950	0.150743
H	6.595249	0.583163	-7.349008	C	-7.656669	-2.295185	0.045553
H	6.419151	-1.722532	-6.377800	C	-7.416109	-3.330871	-0.895109
H	4.684855	-2.253129	-4.705392	C	-6.289372	-3.280092	-1.699317
C	-2.439921	3.905690	1.101030	C	-5.368003	-2.195336	-1.606477
C	-1.550639	3.557507	0.081780	C	-5.632010	-1.117311	-0.679548
C	-1.296558	4.382223	-1.041216	O	-2.571340	0.928675	-1.247275
C	-1.986590	5.572460	-1.178083	O	-0.993349	2.408283	0.014080
C	-3.749700	7.137794	-0.405270	C	1.824773	0.322501	-3.548789
C	-4.753507	7.475173	0.487001	C	-1.446858	4.723208	0.562710
C	-5.032516	6.623479	1.587737	C	-1.282384	3.947889	-1.863199
C	-4.291406	5.470005	1.798760	C	1.916909	-0.783793	-4.592543
C	-3.232139	5.103217	0.915750	C	1.084409	1.562899	-4.033082
C	-2.981167	5.949473	-0.229746	P	-1.616564	0.920693	0.116221
O	-0.798138	2.370757	0.178926	C	3.101707	3.204818	2.197088
H	-0.546307	4.062107	-1.768618	C	2.294108	2.728698	1.181105
H	-1.791431	6.229407	-2.031751	C	2.838133	1.832996	0.229988
H	-3.537740	7.773493	-1.271443	C	4.168296	1.408602	0.243352
H	-5.340502	8.386258	0.338802	C	6.328690	1.374866	1.548461
H	-5.844844	6.875779	2.276055	C	7.092915	1.816985	2.619002
H	-4.527734	4.822722	2.645999	C	6.569991	2.756744	3.545219
C	-0.190994	-2.844630	2.953191	C	5.272919	3.217703	3.395382
C	0.741975	-1.724330	2.456717	C	4.454176	2.772642	2.316164
C	0.292635	-0.357584	2.625119	C	4.996581	1.848208	1.345815
C	2.212288	-2.121271	2.682682	O	1.990768	1.428315	-0.817526
O	-2.446338	-3.583860	2.861112	O	1.050698	-0.258546	-2.405900
O	2.596719	-3.282130	2.608331	P	1.410329	-0.126879	-0.840929
O	2.991570	-1.072068	2.998512	C	-4.942787	1.174719	0.273549
C	4.380865	-1.414349	3.267153	C	-3.983634	1.563991	1.212938
C	-3.765759	-3.636299	2.237898	C	-4.196631	2.603195	2.152584
H	-0.289802	-2.808717	4.051809	C	-5.379785	3.317697	2.118396
H	-0.631676	-0.186659	3.187048	C	-7.549460	3.834271	1.029584
H	1.040438	0.434298	2.704348	C	-8.477578	3.606815	0.027167
H	0.248398	-3.829641	2.709393	C	-8.242795	2.586655	-0.931670
H	-0.400525	-1.588085	-0.906053	C	-7.106871	1.793470	-0.860847
H	0.777776	-2.118036	1.101802	C	-6.140509	1.981630	0.172469
H	4.863527	-0.463792	3.522962	C	-6.361653	3.050587	1.120752
H	4.435835	-2.122777	4.106639	O	-2.760180	0.872228	1.325765
H	4.840180	-1.865757	2.375721	C	4.673260	0.497507	-0.822159
H	-4.310617	-4.398515	2.806409	C	3.995278	-0.690187	-1.113228
H	-4.259166	-2.656856	2.317876	C	4.495008	-1.672405	-2.002612
H	-3.667791	-3.921648	1.180768	C	5.680169	-1.436435	-2.674643
R4c_06				C	7.543096	0.088943	-3.277346
116				C	8.180022	1.313602	-3.165784
Energy = -3595.551613589				C	7.653752	2.305190	-2.297092
Rh	-0.207701	-0.821446	0.485459	C	6.523723	2.052241	-1.533860
O	-1.859321	-1.936476	1.407679	C	5.856232	0.792429	-1.601645
C	-1.582152	-2.663673	2.385993	C	6.368277	-0.197954	-2.521825
C	-0.191341	-2.813815	2.946087	O	2.775116	-0.999421	-0.471790
C	0.753299	-1.714169	2.430128	C	-3.854667	-3.345720	2.453814
C	0.343599	-0.340549	2.600818	H	-0.226389	-2.802437	4.048948
C	2.218319	-2.144802	2.624914	H	-0.582457	-0.141563	3.151222
O	-2.497782	-3.401909	2.996341	H	1.113407	0.431590	2.670873
O	2.546908	-3.322756	2.663377	H	0.204521	-3.805658	2.658963
O	3.048742	-1.102934	2.788797	H	-0.544484	-1.614801	-0.866407
C	4.439019	-1.476767	3.006833	H	0.757195	-2.112513	1.031286
C	-1.743582	3.622965	-0.448219	H	4.980204	-0.527913	3.090603
				H	4.523690	-2.069834	3.929539

H	4.806739	-2.068160	2.155657	H	0.941449	-0.392989	-3.756590
H	-3.998756	-2.984651	-3.105228	C	5.861674	-0.293960	-3.309416
H	-2.328747	-1.125414	-2.826478	H	6.748816	-0.886272	-3.054480
H	-6.990556	-0.430854	0.882031	H	5.892473	0.689296	-2.817205
H	-8.536016	-2.346220	0.694979	C	-1.130547	-1.834137	3.787173
H	-8.114263	-4.169158	-0.976127	C	-1.166942	-2.114260	2.434358
H	-6.081146	-4.080547	-2.417327	C	-2.058393	-1.396864	1.602214
H	-2.816116	3.374381	-0.443005	C	-2.934709	-0.419774	2.079660
H	2.825252	0.591844	-3.177062	C	-3.572696	1.021977	4.048517
H	-1.989188	5.639956	0.275753	C	-3.458079	1.335091	5.394855
H	-1.772955	4.434249	1.574097	C	-2.608949	0.580533	6.245874
H	-0.369302	4.956854	0.585357	C	-1.862675	-0.462724	5.722560
H	2.704462	3.910426	2.934267	C	-1.942267	-0.800879	4.339112
H	1.246654	3.021027	1.078886	C	-2.840871	-0.063316	3.478863
H	6.748560	0.647541	0.850603	H	-0.455361	-2.388415	4.447392
H	8.110039	1.434859	2.749781	H	-0.526667	-2.874656	1.981213
H	7.187116	3.104164	4.379119	O	-2.086231	-1.749641	0.241053
H	4.848816	3.928437	4.112897	H	-4.225604	1.619228	3.408330
H	-1.801316	4.853341	-2.221752	H	-4.026775	2.175776	5.803769
H	-0.197014	4.142228	-1.881457	H	-2.538603	0.830660	7.308641
H	-1.513449	3.121445	-2.552122	H	-1.191387	-1.044563	6.363829
H	2.471418	-0.415110	-5.471891	O	-2.147937	-1.198268	-2.2207047
H	2.445918	-1.663008	-4.193539	C	0.290936	3.656439	-2.440815
H	0.910956	-1.093089	-4.921589	C	-4.127952	-1.126915	-3.583700
H	1.618957	1.998833	-4.894109	C	-3.443051	-3.262480	-2.363963
H	0.062342	1.303405	-4.355514	H	-4.100362	-1.416671	-1.431248
H	1.028377	2.322951	-3.239228	C	0.706318	3.909406	-3.884348
H	-3.421670	2.805959	2.896386	C	-1.153754	4.034189	-2.137903
H	-5.564891	4.113200	2.847375	H	0.975537	4.164177	-1.743536
H	-7.706284	4.632027	1.763402	H	5.772590	-0.161904	-4.397689
H	-9.382410	4.218261	-0.036311	H	3.761048	-2.925627	-1.637661
H	-8.962534	2.426561	-1.740149	H	-5.155092	-1.501391	-3.731117
H	-6.938281	1.019998	-1.613081	H	-4.168607	-0.029540	-3.508192
H	3.936118	-2.604152	-2.122878	H	-3.528441	-1.401232	-4.467439
H	6.088603	-2.192578	-3.352845	P	-1.416385	-0.690200	-0.859139
H	7.924594	-0.677596	-3.960057	C	1.205985	1.779830	3.824046
H	9.077982	1.523770	-3.754175	C	0.592829	1.818383	2.585798
H	8.141268	3.282607	-2.232127	C	1.275905	2.410505	1.498621
H	6.126615	2.831574	-0.879462	C	2.538956	2.997698	1.607009
H	-4.436476	-4.016748	3.095778	C	4.572303	3.290395	3.067326
H	-4.234686	-2.315932	2.504498	C	5.194837	3.158629	4.299275
H	-3.853952	-3.692473	1.411038	C	4.499031	2.611959	5.409047
S2c_06				C	3.193635	2.177258	5.254801
116				C	2.528599	2.279325	3.997694
Energy = -3595.555087960				C	3.219348	2.878055	2.877476
Rh	0.836558	-0.715241	-0.960098	H	0.682969	1.340992	4.679796
C	2.404015	-1.447807	-2.523156	H	-0.410543	1.417266	2.424377
C	1.083502	-1.245340	-3.087117	O	0.588881	2.453149	0.267712
O	1.887897	-4.867849	-1.219338	H	5.126687	3.705796	2.222849
C	1.756234	-3.549810	-1.302825	H	6.235833	3.475953	4.414904
C	3.516246	-0.556045	-3.100740	H	4.999839	2.523441	6.377916
O	0.873733	-2.923608	-0.677174	H	2.651166	1.733830	6.096925
O	3.316727	0.462997	-3.740892	O	0.433345	2.180478	-2.223497
O	4.735306	-1.061984	-2.804549	H	-4.452329	-3.693951	-2.477954
C	2.799706	-2.894775	-2.180723	H	-2.831160	-3.587884	-3.222273
C	0.962744	-5.573150	-0.338415	H	-3.003471	-3.654954	-1.434328
H	1.245222	-6.628380	-0.426352	H	0.630733	4.987560	-4.104866
H	1.086467	-5.216356	0.694231	H	1.744688	3.589472	-4.060566
C	-3.538004	-1.741157	-2.320652	H	0.046064	3.364919	-4.579694
H	2.939231	-3.488932	-3.099792	H	-1.289243	5.119349	-2.286189
H	0.468922	-2.125503	-3.300974	H	-1.839784	3.504797	-2.820269
				H	-1.416323	3.788260	-1.098061

P	1.109188	1.468247	-0.951957	C	2.110641	0.911966	-3.200073
C	-3.892953	0.241104	1.148349	C	-1.211596	4.449405	1.909837
C	-3.427431	0.834028	-0.028314	C	-0.425371	4.437429	-0.517973
C	-4.255733	1.577314	-0.903551	H	-2.331237	3.699612	0.208048
C	-5.605765	1.688458	-0.625692	C	1.963453	0.126087	-4.496459
C	-7.577960	1.066908	0.746413	C	1.706452	2.376018	-3.315290
C	-8.134981	0.377264	1.810148	H	3.136557	0.825734	-2.810249
C	-7.302453	-0.391366	2.665152	H	-1.586856	5.483234	1.827575
C	-5.930913	-0.439251	2.464882	H	-1.824792	3.917077	2.653524
C	-5.318134	0.276896	1.393318	H	-0.170163	4.488305	2.270603
C	-6.174252	1.024892	0.499846	H	-0.759188	5.479052	-0.664034
O	-2.058881	0.757691	-0.365569	P	-1.442960	1.025537	0.177510
H	-3.803180	2.058334	-1.774182	C	3.564267	1.829568	3.178211
H	-6.257971	2.271212	-1.284450	C	2.783631	1.855234	2.037103
H	-8.210545	1.647665	0.066487	C	3.230049	1.167422	0.884285
H	-9.214322	0.411587	1.985221	C	4.439258	0.471327	0.818678
H	-7.747656	-0.957009	3.489321	C	6.386912	-0.437508	2.136604
H	-5.307355	-1.043747	3.127331	C	7.102878	-0.514742	3.321825
C	3.150176	3.685334	0.434175	C	6.691306	0.215467	4.467422
C	3.258080	3.020548	-0.789165	C	5.546753	0.992658	4.412276
C	3.919903	3.557077	-1.919820	C	4.775505	1.080281	3.216125
C	4.452626	4.831072	-1.841854	C	5.216200	0.372621	2.034370
C	4.773228	6.957840	-0.603577	H	3.243687	2.365200	4.077795
C	4.572505	7.737334	0.523394	H	1.831210	2.388664	1.992355
C	3.875606	7.200035	1.637225	O	2.412115	1.247539	-0.261607
C	3.415690	5.891653	1.622131	H	6.714516	-1.013269	1.268387
C	3.624407	5.051070	0.487939	H	7.992390	-1.149886	3.374716
C	4.297116	5.615078	-0.661249	H	7.270510	0.151427	5.393318
O	2.747944	1.711282	-0.921363	H	5.205002	1.544531	5.294453
H	3.997475	2.941550	-2.820216	O	1.193125	0.254656	-2.210926
H	4.980279	5.261772	-2.699309	H	0.632655	4.453427	-0.207362
H	5.291673	7.365811	-1.477909	H	-0.510447	3.908626	-1.479168
H	4.936931	8.768450	0.552488	H	2.642984	0.544454	-5.258158
H	3.694622	7.825872	2.516376	H	2.216242	-0.934715	-4.348540
H	2.873895	5.497128	2.484603	H	0.932180	0.195068	-4.881959
H	1.051981	-0.493738	0.629159	H	2.349890	2.877224	-4.058608
H	-0.071464	-5.410565	-0.674051	H	0.659235	2.464825	-3.649531
H	2.521434	-0.914794	-1.208256	H	1.822294	2.894164	-2.351899
S4c_06				C	-0.355206	-3.076531	-0.080201
116				C	-1.259368	-2.232780	-0.832834
Energy = -3595.554980276				P	1.549829	-0.101790	-0.681500
Rh	-0.165373	-0.822712	0.490431	C	-4.635332	1.724909	-0.469164
C	-3.351791	-0.667690	-3.861767	C	-3.977996	1.633833	0.760390
C	-2.443921	0.083294	-3.138176	C	-4.379167	2.358306	1.909907
C	-2.891861	0.810080	-2.009467	C	-5.432554	3.249029	1.815728
C	-4.227856	0.847629	-1.603077	C	-7.116603	4.451655	0.445656
C	-6.517137	-0.169525	-1.881100	C	-7.713849	4.705535	-0.777643
C	-7.386183	-0.999168	-2.573924	C	-7.291760	3.991645	-1.929525
C	-6.952246	-1.704240	-3.726835	C	-6.303500	3.022486	-1.841464
C	-5.640218	-1.583627	-4.153136	C	-5.679967	2.718369	-0.594470
C	-4.715297	-0.752779	-3.455336	C	-6.085579	3.474581	0.569345
C	-5.164159	-0.002910	-2.303687	O	-2.900621	0.739960	0.926739
H	-3.026106	-1.226377	-4.745502	H	-3.848814	2.188078	2.850498
H	-1.385675	0.134683	-3.405267	H	-5.761554	3.809244	2.697014
O	-1.933928	1.574221	-1.317834	H	-7.418554	5.008469	1.339241
H	-6.866888	0.360483	-0.992413	H	-8.499616	5.462059	-0.861658
H	-8.417321	-1.112763	-2.225498	H	-7.746774	4.211446	-2.900117
H	-7.650994	-2.348906	-4.268297	H	-5.985042	2.490338	-2.740312
H	-5.286523	-2.135774	-5.030596	C	4.860606	-0.177596	-0.455950
O	-0.774757	2.378803	0.749462	C	3.994755	-1.056728	-1.110289
C	-1.286330	3.770323	0.547744	C	4.354131	-1.805908	-2.256486
				C	5.610938	-1.628929	-2.805469

C	7.781312	-0.428098	-2.868888	C	0.668854	3.063801	-1.171145
C	8.638025	0.537843	-2.368681	C	-3.210917	-0.264998	-3.067886
C	8.253667	1.303249	-1.237062	C	-2.606180	-2.742158	-3.179179
C	7.038894	1.077471	-0.607269	C	0.732382	3.591073	-2.598573
C	6.139848	0.076019	-1.081042	C	-0.654937	3.343155	-0.470512
C	6.516561	-0.673739	-2.258625	P	-0.659990	-1.563256	-0.449273
O	2.703126	-1.287861	-0.590710	C	3.011182	-0.036590	4.170431
H	3.626852	-2.511000	-2.668416	C	2.122989	0.310196	3.168523
H	5.915361	-2.206435	-3.684725	C	2.566741	1.144505	2.114901
H	8.056718	-1.013107	-3.753161	C	3.853847	1.680884	2.047062
H	9.603022	0.721603	-2.850302	C	6.190727	1.607888	2.990898
H	8.920797	2.084165	-0.859316	C	7.079988	1.172693	3.963201
H	6.755788	1.681184	0.258258	C	6.636146	0.365043	5.043120
O	-2.434545	-3.491329	2.945424	C	5.306570	-0.016132	5.115558
C	-1.661192	-2.882970	2.055596	C	4.368093	0.397155	4.124502
C	0.703028	-3.816874	-0.913795	C	4.808407	1.253816	3.045499
O	-1.518021	-1.642442	2.032263	O	1.630378	1.475519	1.114361
O	1.021905	-3.507761	-2.050427	O	0.832430	1.578822	-1.264180
O	1.221840	-4.853128	-0.216303	P	1.811110	0.691642	-0.340869
C	-0.946062	-3.834873	1.121003	C	-3.108903	-1.777711	1.764403
C	-3.104675	-2.640049	3.924938	C	-2.596709	-0.657070	1.106445
H	-3.683021	-3.334140	4.545398	C	-3.370751	0.487085	0.798545
H	-2.355840	-2.101306	4.523357	C	-4.716136	0.497137	1.117925
H	-1.642669	-4.620515	0.783002	C	-6.734683	-0.667325	1.969868
H	-2.318724	-2.231254	-0.556009	C	-7.342269	-1.796257	2.493066
H	-1.045700	-2.083848	-1.893042	C	-6.565695	-2.953145	2.763880
C	2.235227	-5.623474	-0.917695	C	-5.197632	-2.958864	2.536004
H	2.487853	-6.447693	-0.239708	C	-4.532569	-1.806061	2.021159
H	3.115203	-4.992531	-1.112118	C	-5.333447	-0.644043	1.706819
H	1.832684	-6.001796	-1.868723	O	-1.222725	-0.605503	0.780156
H	-0.153975	-4.342461	1.699520	C	4.203345	2.632294	0.953582
H	0.735103	-0.179494	1.662984	C	3.982565	2.280914	-0.380157
H	-3.760944	-1.924805	3.409179	C	4.382361	3.089439	-1.472370
H	0.621128	-2.326865	0.662025	C	4.973853	4.314842	-1.226872
Sla_06				C	5.681641	6.080916	0.365930
116				C	5.796586	6.558087	1.660732
Energy = -3595.567811394				C	5.365046	5.755046	2.748612
Rh	1.555010	-1.593793	-0.450462	C	4.852506	4.484422	2.533340
O	3.682347	-1.857596	-0.012630	C	4.740068	3.949979	1.215002
C	4.436447	-1.855034	-1.013438	C	5.142667	4.786786	0.106918
C	3.929660	-1.719587	-2.426951	O	3.401703	1.037283	-0.705697
C	2.440133	-2.035409	-2.520558	C	6.293402	-2.021331	0.456638
C	1.948610	-3.262610	-1.965028	H	4.117586	-0.678215	-2.739378
C	1.657993	-1.458019	-3.656964	H	2.681395	-4.016366	-1.646729
O	5.751950	-1.959756	-0.900025	H	1.030805	-3.665546	-2.405934
O	0.590677	-1.897615	-4.071481	H	4.538500	-2.358116	-3.094141
O	2.308100	-0.400684	-4.226580	H	-0.001735	-6.097046	2.890005
C	-2.716085	-1.492421	-2.315472	H	-0.070224	-5.112173	0.583087
C	1.638463	0.165189	-5.378838	H	-3.335160	-1.865221	4.419183
C	-0.591635	-5.198010	2.685078	H	-3.132151	-2.769963	6.707856
C	-0.621847	-4.660458	1.411601	H	-1.802556	-4.850778	7.144676
C	-1.407598	-3.509359	1.164746	H	-0.616978	-5.980921	5.264575
C	-2.207836	-2.904924	2.136884	H	-3.337423	-1.679706	-1.425060
C	-2.752561	-2.772686	4.592571	H	1.506773	3.458212	-0.575102
C	-2.635592	-3.281289	5.877514	H	2.323959	0.931091	-5.763854
C	-1.876562	-4.454712	6.127500	H	-4.226912	-0.456000	-3.452391
C	-1.220989	-5.085409	5.083406	H	-3.251502	0.615622	-2.407744
C	-1.303530	-4.579075	3.752999	H	-2.550291	-0.044924	-3.922330
C	-2.110606	-3.409100	3.488341	H	2.684160	-0.670986	5.000504
O	-1.416656	-3.012230	-0.153631	H	1.085345	-0.032028	3.168729
O	-1.340001	-1.134279	-1.831257	H	6.549149	2.229999	2.167477
				H	8.134711	1.457034	3.896397

H	7.346262	0.038701	5.808726	C	4.877672	-0.565199	3.167969
H	4.954013	-0.653153	5.933758	C	5.161842	-1.078558	1.846480
H	-3.594174	-2.975622	-3.611993	H	3.686205	0.833347	4.336285
H	-1.885142	-2.579120	-3.994691	H	2.362055	1.644923	2.360513
H	-2.282204	-3.607847	-2.581187	O	2.657945	0.873381	-0.107171
H	0.607679	4.687018	-2.593061	H	6.311157	-2.566184	0.743460
H	1.701826	3.357180	-3.065580	H	7.492489	-3.448374	2.722614
H	-0.073088	3.153243	-3.210952	H	7.060899	-2.490303	4.999712
H	-0.809535	4.432741	-0.390880	H	5.372644	-0.677557	5.281012
H	-1.492271	2.918028	-1.049640	O	1.182871	0.618880	-2.125729
H	-0.659513	2.916370	0.543908	C	-1.231833	3.745824	-0.560932
H	-2.880609	1.343644	0.329825	C	1.744964	0.924191	-4.451683
H	-5.327867	1.379142	0.901971	C	2.362436	2.702424	-2.730843
H	-7.324573	0.225565	1.736921	H	3.171004	0.698201	-2.836968
H	-8.419142	-1.804078	2.685296	C	-0.186694	4.770821	-0.138476
H	-7.051582	-3.853479	3.152015	C	-1.574921	3.781770	-2.045645
H	-4.618334	-3.861721	2.740724	H	-2.145959	3.864421	0.039675
H	4.224604	2.718384	-2.488507	H	-3.458278	-2.241877	-0.162344
H	5.300194	4.946401	-2.059597	H	-2.874854	-3.856725	0.255226
H	5.992866	6.697251	-0.484376	H	2.459084	1.352590	-5.174849
H	6.206171	7.555328	1.846715	H	1.678204	-0.159615	-4.632849
H	5.432181	6.144048	3.769206	H	0.756105	1.377530	-4.632442
H	4.516453	3.884858	3.382153	P	1.520266	-0.146548	-0.752582
H	1.454459	-0.611658	-6.136164	C	-5.965679	-0.664434	-0.258360
H	0.679532	0.614869	-5.079749	C	-4.755428	-0.153854	-0.694286
H	7.376979	-2.108645	0.317831	C	-4.116312	0.858234	0.064669
H	6.034910	-1.103497	1.003930	C	-4.683486	1.423231	1.211307
H	5.888664	-2.899612	0.979832	C	-6.459475	1.184079	2.983934
H	1.258495	-1.664458	1.108448	C	-7.619131	0.581962	3.449993
H	1.454472	-3.237525	-0.437269	C	-8.280032	-0.412287	2.681937
R4a_06				C	-7.747952	-0.807528	1.465764
116				C	-6.546515	-0.224035	0.966058
Energy = -3595.561545192				C	-5.893882	0.818039	1.725567
Rh	-0.198784	-0.809136	0.498721	H	-6.478601	-1.433953	-0.844677
C	-1.348321	-2.506443	-0.559407	H	-4.272090	-0.515087	-1.606204
C	-0.096902	-3.017867	-0.084323	C	-2.908025	1.358166	-0.451529
O	-3.285140	-2.868665	2.550350	H	-5.961511	1.943496	3.590851
C	-2.430443	-2.335622	1.690953	H	-8.026207	0.875959	4.422338
C	-1.607035	-2.259115	-2.004051	H	-9.199639	-0.870902	3.057227
O	-1.561962	-1.504779	2.053457	H	-8.236467	-1.586651	0.870707
O	-2.720768	-2.015185	-2.468084	O	-0.644849	2.406022	-0.230629
O	-0.492803	-2.387218	-2.778330	H	3.138491	3.131292	-3.388196
C	-2.595858	-2.786172	0.265715	H	1.417621	3.234745	-2.923962
C	-3.203465	-2.412248	3.935772	H	2.663856	2.866228	-1.685941
H	-3.969414	-2.992047	4.463106	H	-0.562751	5.786289	-0.348349
H	-2.201199	-2.618053	4.338305	H	0.025025	4.697649	0.939672
C	2.220658	1.217086	-3.035408	H	0.752868	4.627052	-0.696483
H	-0.127001	-3.729400	0.754294	H	-2.005951	4.766490	-2.295575
H	0.705445	-3.198424	-0.803512	H	-0.673663	3.635631	-2.661930
C	-0.729344	-2.205011	-4.195158	H	-2.311974	3.006196	-2.299714
H	0.233285	-2.420294	-4.676693	P	-1.461764	1.146335	0.358200
H	-1.503598	-2.902493	-4.548287	C	4.761434	-0.941184	-0.692334
H	-1.047550	-1.172560	-4.403623	C	3.753009	-1.426297	-1.527709
C	3.880464	0.438616	3.333787	C	3.996108	-1.939452	-2.825486
C	3.146005	0.891352	2.252488	C	5.281176	-1.910798	-3.333428
C	3.428767	0.377987	0.964042	C	7.656347	-1.222504	-3.135121
C	4.450919	-0.538750	0.708686	C	8.677117	-0.609794	-2.427900
C	6.112648	-2.135939	1.727480	C	8.417801	-0.071959	-1.140494
C	6.773671	-2.631964	2.841107	C	7.159021	-0.177034	-0.567706
C	6.524249	-2.096001	4.131778	C	6.088935	-0.821958	-1.256379
C	5.589771	-1.086291	4.288335	C	6.345827	-1.330562	-2.584782
				O	2.422713	-1.505941	-1.066140

H	3.159566	-2.358981	-3.390356	C	-1.341698	3.765529	0.750229
H	5.490137	-2.316617	-4.328758	C	5.243338	0.116988	0.760662
H	7.836601	-1.623977	-4.138189	C	4.646870	-1.905492	-0.679435
H	9.677295	-0.527310	-2.863328	C	-1.154360	4.456959	2.095061
H	9.218169	0.436317	-0.594252	C	-0.552804	4.408200	-0.384581
H	6.975827	0.251427	0.420249	P	1.601458	-0.014793	-0.542583
C	-4.052986	2.601037	1.871314	C	-3.862689	-0.445405	-3.580304
C	-2.707120	2.567496	2.239487	C	-2.863258	0.243982	-2.919210
C	-2.078691	3.599015	2.979728	C	-3.166878	0.912138	-1.709439
C	-2.801042	4.730951	3.309378	C	-4.452226	0.954164	-1.161556
C	-4.869282	6.090988	3.129075	C	-6.781972	-0.002902	-1.244415
C	-6.157523	6.264769	2.651972	C	-7.741962	-0.773292	-1.883472
C	-6.769745	5.238256	1.886742	C	-7.454349	-1.415505	-3.116271
C	-6.103872	4.048379	1.633583	H	1.673238	-6.108683	-1.854679
C	-4.784002	3.824255	2.127299	H	-0.132504	-4.359896	1.693995
C	-4.147308	4.889230	2.869557	C	-6.193142	-1.296190	-3.675203
O	-1.913937	1.444226	1.930341	C	-5.176627	-0.527499	-3.035939
H	-1.037114	3.468584	3.284715	C	-5.479206	0.163598	-1.803015
H	-2.335735	5.531487	3.893778	O	-2.117370	1.617268	-1.092662
H	-4.376816	6.882929	3.703633	O	-0.844821	2.367970	0.941683
H	-6.698647	7.194839	2.849717	P	-1.490281	1.027425	0.334595
H	-7.777267	5.388227	1.486659	C	2.691860	2.153195	-2.806682
H	-6.588516	3.274461	1.034395	C	2.550829	2.286376	-1.424380
H	0.613169	-0.033577	1.617563	C	3.374649	3.120921	-0.630552
H	0.764823	-2.070518	0.891799	C	4.408465	3.815364	-1.231715
H	-3.417577	-1.335322	3.983870	C	5.794578	4.306114	-3.229187
Slc_06				C	6.093793	4.105761	-4.566222
116				C	5.289219	3.233155	-5.344369
Energy = -3595.549729157				C	4.187031	2.599441	-4.789720
Rh	-0.162290	-0.816728	0.512337	C	3.831273	2.802156	-3.422628
C	-0.374617	-3.079400	-0.069511	C	4.680369	3.655978	-2.621417
C	-1.292299	-2.223225	-0.792091	O	1.504250	1.619034	-0.753720
O	-2.368229	-3.515493	3.013699	C	-4.719214	1.763467	0.060487
C	-1.622937	-2.900531	2.104326	C	-3.938346	1.572492	1.202473
C	0.642206	-3.849369	-0.926233	C	-4.193102	2.220086	2.436093
O	-1.478243	-1.661390	2.083761	C	-5.231992	3.128913	2.519209
O	0.914865	-3.583866	-2.086071	C	-7.033939	4.442634	1.430833
O	1.188810	-4.869530	-0.225308	C	-7.756003	4.790794	0.301679
C	-0.937412	-3.843329	1.142216	C	-7.473313	4.159945	-0.938132
C	-3.009904	-2.670234	4.017556	C	-6.498428	3.177501	-1.028447
H	-3.580420	-3.366867	4.642411	C	-5.749588	2.776509	0.118390
H	-2.243414	-2.145429	4.605917	C	-6.012137	3.450188	1.370691
C	4.333730	-0.457269	-0.318592	O	-2.875535	0.648732	1.177902
H	-1.644514	-4.623705	0.813615	H	-0.467498	-1.076729	-5.826659
H	-2.343302	-2.216870	-0.485389	H	0.567533	-1.902942	-3.678561
H	-1.111509	-2.066588	-1.857303	H	1.658636	3.929509	-4.498494
C	2.148133	-5.678753	-0.960606	H	0.480370	4.762797	-6.501273
H	2.454420	-6.464831	-0.259824	H	-0.825212	3.194901	-7.959180
H	3.007595	-5.061734	-1.261340	H	-0.995727	0.784657	-7.343970
C	0.107917	-0.400445	-5.185479	H	4.350003	0.175664	-1.218909
C	0.670151	-0.866850	-4.010876	H	-2.410109	3.708231	0.490154
C	1.442651	0.015934	-3.217448	H	6.288203	0.099953	0.407589
C	1.722593	1.334676	-3.588828	H	4.974023	1.159318	0.991024
C	1.095108	3.232733	-5.123045	H	5.178106	-0.480774	1.684713
C	0.431047	3.699455	-6.247680	H	-3.647273	-0.954114	-4.525839
C	-0.315090	2.814647	-7.069190	H	-1.845156	0.298409	-3.312455
C	-0.407334	1.475221	-6.730014	H	-7.019335	0.478523	-0.293129
C	0.244538	0.965776	-5.568914	H	-8.730952	-0.889204	-1.429550
C	1.041884	1.854959	-4.755086	H	-8.224511	-2.011903	-3.614276
O	2.026518	-0.535779	-2.063943	H	-5.951001	-1.801768	-4.616358
O	2.950250	-0.412841	0.249893	H	5.671089	-1.972622	-1.084496
				H	4.587560	-2.546077	0.216572

H	3.947905	-2.279580	-1.443863	C	0.907260	6.315827	3.958603
H	-1.495048	5.503351	2.021359	C	0.524600	5.068191	4.422145
H	-1.739258	3.957698	2.883280	C	-0.248636	4.188395	3.608685
H	-0.091317	4.457012	2.387849	C	-0.667378	4.622429	2.293961
H	-0.899664	5.446269	-0.526922	O	-2.459603	1.548139	1.185860
H	0.523236	4.431126	-0.147494	O	-2.966690	0.301979	-0.932819
H	-0.699471	3.861264	-1.327761	P	-1.687989	0.843246	-0.114507
H	3.164185	3.204052	0.438971	C	4.829225	-0.434413	-0.659044
H	5.046362	4.478169	-0.637934	C	3.891152	-1.160851	-1.395536
H	6.419349	4.959028	-2.610376	C	4.180195	-1.775936	-2.637348
H	6.954752	4.605319	-5.019945	C	5.436785	-1.617558	-3.191841
H	5.543157	3.053220	-6.393411	C	7.689372	-0.578370	-3.152888
H	3.587151	1.924020	-5.402915	C	8.623028	0.249718	-2.552974
H	-3.565436	1.977896	3.297631	C	8.311460	0.890374	-1.325364
H	-5.452102	3.630099	3.467546	C	7.091300	0.675038	-0.702419
H	-7.227574	4.935688	2.389550	C	6.114131	-0.191170	-1.277755
H	-8.532897	5.558864	0.359225	C	6.418104	-0.807811	-2.549805
H	-8.027242	4.454974	-1.834521	O	2.598637	-1.376231	-0.871327
H	-6.287822	2.709335	-1.992443	C	-2.020632	4.143402	0.153925
H	0.711709	-0.145616	1.681816	C	-1.766835	3.359275	-0.973995
H	-3.670527	-1.943063	3.524766	C	-2.172769	3.723440	-2.280904
H	0.627348	-2.330840	0.639723	C	-2.895861	4.887657	-2.465291
R2a_06				C	-4.084361	6.852760	-1.526890
116				C	-4.499176	7.601785	-0.438728
Energy = -3595.565800998				C	-4.123635	7.207608	0.872189
Rh	-0.187518	-0.814292	0.447800	C	-3.320847	6.095159	1.076347
C	-1.116259	-2.680930	-0.495831	C	-2.852747	5.313540	-0.022171
C	0.110328	-3.057529	0.145832	C	-3.273980	5.692722	-1.352292
O	-3.327474	-2.866926	2.436271	O	-1.021616	2.165024	-0.856760
C	-2.425594	-2.351795	1.612428	H	-4.168339	-2.901362	4.288692
C	-1.256879	-2.630675	-1.979536	H	-2.415498	-2.448246	4.287312
O	-1.635901	-1.446262	1.978079	H	0.042387	-3.670109	1.056259
O	-2.340971	-2.561249	-2.552986	H	0.980528	-3.271306	-0.480307
O	-0.064660	-2.728221	-2.634354	C	-0.182149	-2.732376	-4.076792
C	-2.436385	-2.922457	0.222212	H	0.836988	-2.899110	-4.448927
C	2.078949	1.251711	-3.107842	H	3.554638	1.753589	4.153465
C	-3.386582	-2.319132	3.787722	H	2.097483	2.111219	2.140312
C	3.794695	1.272449	3.199796	H	6.621217	-1.629400	0.912384
C	2.985819	1.476353	2.096536	H	7.943951	-2.081121	2.946628
C	3.331526	0.861771	0.869745	H	7.399686	-0.928393	5.105988
C	4.478663	0.084193	0.693430	H	5.461902	0.636547	5.220452
C	6.372276	-1.115918	1.843816	H	3.108617	1.073217	-2.761159
C	7.112705	-1.370561	2.988279	H	-4.150099	2.050599	-0.885579
C	6.800566	-0.724697	4.213423	H	-0.852975	-3.540284	-4.405600
C	5.726846	0.147092	4.277011	H	-0.573766	-1.767604	-4.432757
C	4.931423	0.417349	3.124730	H	2.537345	1.308610	-5.213512
C	5.274945	-0.203784	1.865061	H	2.187069	-0.330732	-4.599303
O	2.490649	1.117722	-0.232704	H	0.850612	0.839957	-4.852894
O	1.165455	0.425066	-2.246753	H	-0.277013	2.563788	5.059543
C	-4.286253	0.984126	-1.123377	H	-1.536130	0.992762	3.552819
C	1.898157	0.729259	-4.526065	H	-0.498052	6.230943	0.833488
C	1.709297	2.719551	-2.939496	H	0.865362	7.699934	2.275433
C	-4.642526	0.791917	-2.591576	H	1.502192	6.980859	4.591626
C	-5.282058	0.348903	-0.159323	H	0.818279	4.731695	5.422336
P	1.525243	-0.114364	-0.776038	H	2.374703	3.334836	-3.569349
C	-0.592866	2.880676	4.060178	H	0.669068	2.900907	-3.253470
C	-1.292842	2.011870	3.242860	H	1.826643	3.039951	-1.894058
C	-1.713876	2.452631	1.965341	H	-5.635723	1.227741	-2.793070
C	-1.474274	3.740126	1.480846	H	-3.908160	1.288605	-3.244592
C	-0.229063	5.902470	1.839587	H	-4.668236	-0.280442	-2.843522
C	0.538518	6.725334	2.650293	H	-6.270788	0.822707	-0.283326
				H	-5.392932	-0.728781	-0.367732

H	-4.963685	0.489278	0.885316	C	3.618278	3.079676	-4.792236
H	3.405422	-2.378922	-3.117825	C	3.539974	3.091476	-3.367225
H	5.685482	-2.099689	-4.143027	C	4.585087	3.774137	-2.638063
H	7.908566	-1.063312	-4.110344	C	-1.546014	4.267571	0.286333
H	9.593155	0.422186	-3.028405	C	-1.756840	3.383804	-0.775769
H	9.040091	1.565599	-0.866403	C	-2.512503	3.718311	-1.925940
H	6.865290	1.183809	0.237453	C	-3.134084	4.951422	-1.990895
H	-1.899615	3.074952	-3.117306	C	-3.761040	7.104815	-0.926544
H	-3.206994	5.190295	-3.470509	C	-3.723607	7.968821	0.155116
H	-4.383633	7.132391	-2.542684	C	-2.983910	7.614958	1.313665
H	-5.125868	8.486506	-0.584801	C	-2.274271	6.424586	1.365866
H	-4.475779	7.784219	1.733006	C	-2.269461	5.520723	0.261626
H	-3.050366	5.801736	2.093049	C	-3.057844	5.864679	-0.899854
H	-3.242275	-2.428013	-0.352126	O	0.950865	-3.435122	-2.083479
H	-2.706548	-3.993597	0.267962	O	1.084214	-4.937163	-0.369808
H	0.459171	0.185123	1.502267	C	-0.890394	-3.847632	1.162172
H	0.837504	-1.951234	1.050485	C	-2.882307	-2.727936	4.113766
H	-3.653395	-1.253339	3.746880	H	-3.371360	-3.445187	4.782746
S3c_06				O	1.824081	-0.311812	-2.176958
116				O	2.937607	-0.693005	0.023171
Energy = -3595.550745393				O	-1.850259	1.827944	1.687315
Rh	-0.159300	-0.816474	0.511120	O	-3.084199	0.442483	0.000890
C	-0.365027	-3.075802	-0.060451	O	1.682811	1.623860	-0.472724
C	-1.307813	-2.219547	-0.750669	O	-1.144530	2.112392	-0.784729
O	-2.258537	-3.550813	3.081862	P	1.591753	-0.018502	-0.560192
C	-1.569330	-2.915390	2.142093	P	-1.574762	0.945285	0.300017
C	0.628698	-3.813547	-0.968332	H	-2.112738	-2.150186	4.645564
O	-1.468864	-1.671275	2.109415	H	-1.595746	-4.636879	0.851939
C	-0.686163	0.343909	-4.770661	H	-2.346191	-2.200370	-0.405751
C	0.092394	-0.317543	-3.839555	H	-1.159651	-2.052829	-1.819087
C	1.063614	0.410785	-3.112347	C	2.007580	-5.728344	-1.168724
C	1.341282	1.760621	-3.331995	H	2.212757	-6.621258	-0.566353
C	0.549851	3.887638	-4.426958	H	-1.431605	-0.203957	-5.356316
C	-0.303994	4.543319	-5.301841	H	0.012542	-1.393130	-3.661585
C	-1.278035	3.822759	-6.041540	H	1.287424	4.458997	-3.859069
C	-1.395090	2.452676	-5.872559	H	-0.226878	5.628468	-5.419997
C	-0.543564	1.748352	-4.970771	H	-1.937325	4.350925	-6.736954
C	0.473643	2.474675	-4.242558	H	-2.150474	1.885546	-6.427339
C	4.261342	-0.721258	-0.673907	H	4.231645	0.021386	-1.486730
C	-4.327361	1.245745	0.208339	H	-4.033431	2.301052	0.321528
C	5.296225	-0.330854	0.374219	H	6.304023	-0.362334	-0.073049
C	4.454305	-2.121664	-1.244750	H	5.115593	0.689549	0.746647
C	-5.170279	1.057271	-1.047381	H	5.271031	-1.030466	1.226220
C	-4.998007	0.743892	1.482405	H	5.416798	-2.173919	-1.781575
C	0.947542	3.156041	3.667831	H	1.537070	2.888333	4.550943
C	-0.063485	2.323443	3.226049	H	-0.299662	1.382149	3.728495
C	-0.823541	2.701722	2.094501	H	0.313984	6.176047	0.187601
C	-0.634526	3.901072	1.407272	H	2.224345	7.556300	0.922570
C	0.867301	5.898272	1.087468	H	3.521103	6.948016	2.981369
C	1.942589	6.670456	1.500323	H	2.920762	4.893634	4.260803
C	2.682775	6.322481	2.659906	H	4.473397	-2.867995	-0.431431
C	2.347359	5.183862	3.373368	H	3.647248	-2.372549	-1.950120
C	1.259451	4.356917	2.966853	H	-6.114175	1.619091	-0.947663
C	0.476691	4.732823	1.811343	H	-4.640938	1.428601	-1.938738
C	2.490776	2.408983	-2.638595	H	-5.415078	-0.007720	-1.197123
C	2.621449	2.335713	-1.249501	H	-5.936393	1.298919	1.652973
C	3.631008	3.015040	-0.524928	H	-5.244515	-0.327726	1.392141
C	4.584020	3.741636	-1.213669	H	-4.343043	0.894317	2.354278
C	5.615367	4.449178	-3.356067	H	3.615676	2.967382	0.566541
C	5.647276	4.433721	-4.740392	H	5.362460	4.285148	-0.668443
C	4.645466	3.730983	-5.459057	H	6.392980	4.969693	-2.786590
				H	6.448307	4.947783	-5.279872

H	4.686309	3.695941	-6.552016	O	1.965549	1.416757	-0.999210
H	2.863726	2.535033	-5.363584	H	6.762939	0.983292	0.707485
H	-2.564120	3.001393	-2.749261	H	8.185186	2.204803	2.309350
H	-3.708354	5.231732	-2.879671	H	7.349613	4.286651	3.430907
H	-4.344780	7.355147	-1.819070	H	5.029726	5.085339	2.984522
H	-4.272109	8.915019	0.125053	O	1.200988	-0.543720	-2.340019
H	-2.976964	8.285446	2.178403	H	-0.093193	4.139167	-1.817140
H	-1.719271	6.164190	2.269662	H	-1.303563	3.049238	-2.571624
H	2.928524	-5.155996	-1.351803	H	2.677563	-0.946970	-5.356440
H	1.542837	-5.995197	-2.128901	H	2.783568	-2.007980	-3.924006
H	-0.068500	-4.355747	1.696864	H	1.199054	-1.719456	-4.713022
H	0.741942	-0.128398	1.656597	H	1.580722	1.417830	-5.098853
H	-3.615907	-2.048424	3.656894	H	0.095414	0.639845	-4.481464
H	0.643820	-2.326389	0.626395	H	0.932155	1.890500	-3.502716
S2a_06				O	-1.853335	-1.941363	1.392595
116				C	-1.984270	-1.804285	2.631723
Energy = -3595.561724916				P	1.487818	-0.154613	-0.799688
Rh	-0.193939	-0.831574	0.495945	C	-4.966540	1.123690	0.163560
C	-4.041008	-2.185961	-2.499810	C	-4.052117	1.539060	1.135155
C	-3.147223	-1.145817	-2.320977	C	-4.317494	2.582869	2.055473
C	-3.466345	-0.111386	-1.409211	C	-5.514119	3.271118	1.973056
C	-4.665832	-0.057122	-0.696481	C	-7.657321	3.727725	0.808724
C	-6.740820	-1.320382	-0.017560	C	-8.546523	3.470284	-0.221431
C	-7.577091	-2.419425	-0.155509	C	-8.257324	2.447289	-1.162409
C	-7.285116	-3.440002	-1.098427	C	-7.106163	1.681583	-1.047477
C	-6.138825	-3.353941	-1.871318	C	-6.178580	1.901056	0.015085
C	-5.246778	-2.248537	-1.742677	C	-6.455716	2.972285	0.946121
C	-5.562949	-1.185600	-0.814130	O	-2.822274	0.866448	1.294525
H	-3.819178	-2.987490	-3.211677	H	-3.573528	2.810591	2.823258
H	-2.204180	-1.092315	-2.870070	H	-5.741325	4.069560	2.686703
O	-2.534168	0.934233	-1.268275	H	-7.856097	4.527348	1.530055
H	-6.981690	-0.544157	0.712277	H	-9.462018	4.060785	-0.320161
H	-8.471963	-2.498024	0.469307	H	-8.946783	2.263168	-1.991758
H	-7.959372	-4.294843	-1.204643	H	-6.895190	0.905931	-1.786632
H	-5.891404	-4.142450	-2.590002	C	4.717343	0.546234	-0.926526
O	-1.037895	2.441582	0.049892	C	4.072220	-0.691509	-0.963961
C	-1.765519	3.622024	-0.525766	C	4.585234	-1.821597	-1.645557
C	1.934686	-0.040393	-3.543771	C	5.757840	-1.699277	-2.367842
C	-1.602812	4.762618	0.470665	C	7.569290	-0.283616	-3.299864
C	-1.168731	3.909452	-1.898435	C	8.171226	0.953702	-3.455498
H	-2.826475	3.344004	-0.620392	C	7.627566	2.088410	-2.798687
C	2.160146	-1.256992	-4.432956	C	6.517382	1.968490	-1.975717
C	1.079467	1.043714	-4.190006	C	5.884531	0.705767	-1.771427
H	2.895425	0.376312	-3.204639	C	6.412920	-0.438728	-2.479908
H	-2.128521	5.655488	0.092260	O	2.866421	-0.890341	-0.255244
H	-2.031990	4.500382	1.450271	H	4.049016	-2.771167	-1.568764
H	-0.540047	5.024379	0.604202	H	6.180763	-2.567136	-2.884246
H	-1.675447	4.781191	-2.346526	H	7.964220	-1.164603	-3.816971
P	-1.628658	0.940458	0.129706	H	9.053899	1.061671	-4.092638
C	3.218362	3.917166	1.367093	H	8.086715	3.070839	-2.945038
C	2.370894	3.187537	0.556173	H	6.109996	2.854210	-1.483937
C	2.871149	2.057386	-0.130556	C	-1.071927	-0.940952	3.464161
C	4.204756	1.648586	-0.064996	C	0.250042	-0.685736	2.749316
C	6.382187	1.889422	1.183102	C	0.980572	-1.793902	2.208423
C	7.179998	2.575495	2.086793	C	1.053306	0.514633	3.128982
C	6.705400	3.748283	2.729439	O	-2.951413	-2.408805	3.304745
C	5.418828	4.194888	2.478735	O	2.226882	0.699837	2.826055
C	4.563867	3.498892	1.575467	O	0.331000	1.367976	3.914741
C	5.061068	2.334833	0.879490	C	1.081692	2.502856	4.411703
H	2.856231	4.814938	1.880062	C	-3.891990	-3.216337	2.529429
H	1.319836	3.449667	0.421600	H	-1.599689	0.012125	3.640707
				H	0.650969	-2.808490	2.472133

H	2.061529	-1.664536	2.096839	P	-0.732442	-1.398487	-0.955110
H	-0.934388	-1.407282	4.457543	C	1.625789	3.819445	-0.664427
H	0.362940	3.089420	4.998416	C	1.149462	2.880442	-1.582130
H	1.913762	2.159983	5.046067	C	1.325125	3.000966	-2.981403
H	1.486996	3.089970	3.574477	C	1.959077	4.120206	-3.488595
H	-4.570352	-3.642641	3.277363	C	2.977678	6.356666	-3.146791
H	-4.434834	-2.578181	1.817635	C	3.347916	7.395589	-2.309512
H	-3.348855	-4.005876	1.990882	C	3.132775	7.283887	-0.910892
H	-0.635712	-1.447772	-0.890001	C	2.580631	6.133583	-0.367202
H	0.702858	-2.194831	0.687517	C	2.210266	5.032285	-1.195621

B.2.7 Strukturen der _07 Spezies

Rlc_07
116

Energy = -3595.556724003

Rh	-1.634626	-0.035878	0.532611	C	2.854999	-5.729978	-1.254785
O	-2.012777	-1.606466	2.045385	C	1.457791	-5.461800	-1.365032
C	-3.131599	-1.696906	2.589540	C	0.662443	-6.338109	-2.195332
C	-4.289763	-0.753371	2.334658	O	-1.163947	-2.937879	-0.503351
C	-3.994053	0.174781	1.137778	C	-2.321555	-3.555274	3.825198
C	-3.637130	-0.535139	-0.123175	H	-5.203893	-1.343377	2.150953
C	-5.007758	1.330377	0.963775	H	-3.828914	-1.615771	-0.128910
O	-3.404280	-2.631849	3.492506	H	-3.931970	-0.030769	-1.048681
O	-5.378298	1.774600	-0.108193	H	-4.470138	-0.174416	3.257038
O	-5.409257	1.791846	2.173633	H	-0.366707	0.462445	1.438029
C	-2.201086	3.729849	-2.083653	H	0.908729	3.172313	4.688805
C	-6.369192	2.883626	2.124993	H	-1.009496	2.948074	3.084153
C	1.070251	3.261619	3.609578	H	4.156491	3.811564	0.171920
C	0.007675	3.139566	2.733980	H	6.045250	3.865607	1.760584
C	0.236007	3.277926	1.343881	H	5.640940	3.708040	4.230511
C	1.488357	3.573544	0.799102	H	3.316820	3.427979	5.089908
C	3.962550	3.743395	1.244715	H	-1.238382	4.242755	-1.931128
C	5.022730	3.771085	2.138591	H	0.085229	-2.646165	-3.319555
C	4.795844	3.674352	3.536532	H	-3.046872	0.817029	1.527582
C	3.505049	3.522707	4.014947	H	-6.611330	3.098537	3.172831
C	2.393285	3.471433	3.123535	H	-2.624818	4.577887	-4.021983
C	2.616955	3.612335	1.702214	H	-1.679371	3.063930	-4.089363
O	-0.882337	3.167674	0.497633	H	-3.433600	3.010693	-3.721088
O	-2.053213	2.331964	-1.559686	H	3.617383	-0.979725	2.539012
C	-0.487159	-1.776964	-3.679461	H	2.326401	-0.106129	0.566649
C	-2.501658	3.579556	-3.569178	H	1.536537	-6.012905	1.235364
C	-3.310562	4.416298	-1.296465	H	2.690126	-6.814873	3.265300
C	-1.625493	-2.221784	-4.588468	H	4.072175	-5.246947	4.651706
C	0.446245	-0.754794	-4.315195	H	4.230449	-2.841611	4.013134
P	-1.000030	1.811080	-0.462513	H	-3.488126	5.422560	-1.713746
C	3.033523	-1.658617	1.908991	H	-4.245190	3.836223	-1.359961
C	2.332582	-1.167667	0.823173	H	-3.027787	4.529043	-0.238247
C	1.600130	-2.069279	0.016750	H	-1.210628	-2.693451	-5.495298
C	1.563888	-3.447421	0.234194	H	-2.273226	-2.955475	-4.084033
C	2.133654	-5.316433	1.828305	H	-2.238874	-1.358537	-4.895169
C	2.780840	-5.764873	2.970367	H	0.937410	-1.200287	-5.197066
C	3.557759	-4.877126	3.759647	H	-0.123346	0.129498	-4.648377
C	3.649747	-3.542034	3.403005	H	1.225906	-0.440438	-3.604533
C	2.983648	-3.042752	2.245322	H	0.968153	2.196002	-3.627863
C	2.227298	-3.953439	1.415451	H	2.117634	4.222824	-4.567018
O	0.914069	-1.530537	-1.091920	H	3.118380	6.436906	-4.230035
O	-1.133988	-1.131301	-2.491787	H	3.792311	8.305742	-2.722932
				H	3.400768	8.116383	-0.253288

H	2.414224	6.069948	0.710171	H	3.366020	1.592213	7.334384
H	-2.344036	-4.670510	-2.005961	H	2.853819	-0.529147	8.568658
H	-1.320460	-6.733063	-3.006584	H	1.040661	-2.031690	7.749868
H	0.659254	-8.121558	-3.436917	O	-1.983783	1.137446	0.309124
H	3.097848	-8.564657	-3.162955	H	4.204987	-2.910681	-1.707211
H	4.502783	-6.996966	-1.800324	H	3.055617	-2.772930	-3.080270
H	3.482190	-5.055319	-0.667967	H	-3.576012	4.117361	0.222592
H	-5.918329	3.760393	1.637172	H	-1.897159	3.741257	-0.259831
H	-7.265687	2.574279	1.567734	H	-3.269801	2.966397	-1.113177
H	-2.758083	-4.239282	4.562046	H	-4.971330	2.288559	1.470176
H	-1.999142	-4.093177	2.922680	H	-4.656483	1.143484	0.132047
H	-1.475196	-2.998233	4.251742	H	-4.205676	0.711535	1.814554
R3c_07				O	-2.151621	-2.791892	1.071351
116				C	-1.950990	-3.971536	1.426341
Energy = -3595.551088272				P	-0.933747	0.217253	1.104856
Rh	-0.516112	-1.693570	0.054574	C	0.635334	1.207424	-4.096793
C	-2.393807	-1.813870	-4.857097	C	1.075993	1.479900	-2.799947
C	-1.295574	-2.094238	-4.065626	C	2.049122	2.463698	-2.497782
C	-0.358336	-1.068144	-3.797955	C	2.636694	3.173277	-3.528913
C	-0.457862	0.220794	-4.327943	C	2.964653	3.563507	-5.957122
C	-1.938363	1.863845	-5.533968	C	2.686252	3.245398	-7.275747
C	-3.094012	2.137539	-6.250155	C	1.742364	2.227130	-7.570568
C	-4.019632	1.105674	-6.555835	C	1.071806	1.564501	-6.553286
C	-3.782475	-0.184540	-6.112343	C	1.312726	1.882800	-5.183237
C	-2.614009	-0.498217	-5.357906	C	2.307567	2.889461	-4.886074
C	-1.648741	0.541901	-5.081150	O	0.498888	0.810627	-1.699825
H	-3.121921	-2.598399	-5.087448	H	2.310588	2.641467	-1.451257
H	-1.121842	-3.088990	-3.648004	H	3.381247	3.946440	-3.312950
O	0.751237	-1.405904	-3.000396	H	3.706602	4.331437	-5.713833
H	-1.241145	2.671684	-5.300315	H	3.200886	3.765257	-8.089156
H	-3.295278	3.161435	-6.579844	H	1.544284	1.957115	-8.612248
H	-4.922586	1.334385	-7.129622	H	0.355612	0.777740	-6.799796
H	-4.497813	-0.986533	-6.324313	C	0.069181	2.181249	3.579345
O	2.359359	-1.036281	-1.116943	C	0.321736	2.258796	2.208445
C	3.500745	-0.892806	-2.076755	C	0.525977	3.479340	1.520969
C	-2.896958	2.176492	0.875694	C	0.437288	4.669384	2.219522
C	4.601711	-0.174136	-1.307075	C	-0.071289	5.905410	4.309708
C	3.892293	-2.284095	-2.558727	C	-0.458333	5.915097	5.639336
H	3.151458	-0.278473	-2.921556	C	-0.704612	4.688555	6.310066
C	-2.905273	3.317319	-0.133893	C	-0.534752	3.476189	5.657915
C	-4.263861	1.534275	1.085288	C	-0.111917	3.425667	4.295864
H	-2.472416	2.507841	1.836273	C	0.095359	4.678089	3.603126
H	5.484069	-0.047527	-1.956859	O	0.441897	1.073510	1.454287
H	4.269500	0.822099	-0.976174	H	0.754884	3.449293	0.452905
H	4.902762	-0.758270	-0.421572	H	0.605518	5.623079	1.708834
H	4.740387	-2.206612	-3.260235	H	0.101211	6.844441	3.772985
P	0.800395	-0.794660	-1.453471	H	-0.588124	6.863296	6.169241
C	-0.518590	-1.627538	5.586222	H	-1.037294	4.698343	7.352369
C	-1.204446	-1.324456	4.425159	H	-0.738575	2.543643	6.188084
C	-0.938705	-0.106634	3.752096	C	-0.649118	-4.713774	1.236054
C	-0.047513	0.852037	4.243199	C	0.480148	-3.781998	0.740495
C	1.807165	1.317807	5.881060	C	0.745405	-2.592491	1.588916
C	2.549801	0.948492	6.992390	C	1.653374	-4.661864	0.241695
C	2.266564	-0.256131	7.686870	O	-2.901114	-4.711219	1.989622
C	1.257205	-1.089440	7.234783	O	1.487508	-5.602847	-0.520896
C	0.487887	-0.750311	6.084090	O	2.832817	-4.302733	0.784627
C	0.743672	0.497030	5.400832	C	3.952260	-5.153988	0.410364
H	-0.728627	-2.556059	6.127499	C	-4.216747	-4.095897	2.134664
H	-1.968221	-1.989789	4.014357	H	-0.364251	-5.195402	2.187703
O	-1.689423	0.146450	2.593077	H	0.293861	-2.602804	2.588167
H	2.044827	2.244346	5.353479	H	1.766078	-2.200257	1.579526
				H	-0.813715	-5.528717	0.507505

H	-1.518022	-1.486393	-1.215289	P	1.402091	-0.472275	-0.872637
H	0.066141	-3.440592	-0.352736	C	-3.784515	-2.346797	-2.627923
H	4.823787	-4.711805	0.907983	C	-2.875035	-1.334246	-2.383123
H	3.776766	-6.181063	0.763804	C	-3.239183	-0.282098	-1.510916
H	4.077748	-5.162506	-0.682224	C	-4.484784	-0.189702	-0.888657
H	-4.840994	-4.877686	2.582318	C	-6.647882	-1.381760	-0.376608
H	-4.151574	-3.217480	2.792897	C	-7.506358	-2.452695	-0.580380
H	-4.599927	-3.796763	1.148636	C	-7.172752	-3.486174	-1.494762
R4c_07				C	-5.965440	-3.440858	-2.172307
116				C	-5.051447	-2.363884	-1.974820
Energy = -3595.554308318				C	-5.407357	-1.287811	-1.076847
Rh	-0.152391	-0.988769	0.595831	H	-3.528391	-3.164367	-3.309580
O	-1.759589	-2.139534	1.580777	H	-1.881744	-1.320718	-2.837630
C	-1.568907	-2.670180	2.694435	O	-2.290425	0.742519	-1.302800
C	-0.270927	-2.609163	3.459647	H	-6.919927	-0.597608	0.333335
C	0.742275	-1.650748	2.804887	H	-8.450224	-2.500372	-0.028668
C	0.238468	-0.253494	2.595425	H	-7.863692	-4.319267	-1.653788
C	2.118973	-1.832711	3.491396	H	-5.686389	-4.240553	-2.866642
O	-2.510408	-3.380314	3.304703	O	-0.837710	2.190735	0.146361
O	2.383150	-2.818517	4.163473	H	1.066765	1.928128	-3.307874
O	2.951686	-0.803078	3.264583	H	-1.792283	5.434575	0.388031
C	4.258060	-0.939007	3.895820	H	-1.717654	4.194809	1.671410
C	-3.780897	-3.529141	2.600419	H	-0.221408	4.708968	0.827596
H	-0.476826	-2.298544	4.498172	H	-1.388892	4.694842	-2.102856
C	1.705056	-0.128641	-3.608845	H	0.160867	3.935183	-1.636485
H	-0.670121	0.003740	3.156470	H	-1.115333	2.962797	-2.442780
H	0.994207	0.538663	2.612773	H	4.135507	-1.068958	4.981113
H	0.150249	-3.627310	3.532141	H	4.786551	-1.809087	3.479397
H	-0.271149	-2.072341	-0.622061	P	-1.485995	0.712573	0.150190
H	0.977781	-2.135169	1.744379	C	4.707517	-0.167856	-1.028788
H	4.786290	-0.008155	3.662714	C	3.906351	-1.296002	-1.226071
C	3.552864	2.874857	1.856843	C	4.265336	-2.366466	-2.080760
C	2.654018	2.415545	0.912758	C	5.436115	-2.283548	-2.812029
C	3.057312	1.404517	0.007895	C	7.409196	-0.984247	-3.572362
C	4.337013	0.845645	-0.000147	C	8.166339	0.175126	-3.555710
C	6.528172	0.650322	1.232854	C	7.780458	1.256668	-2.721193
C	7.380855	1.072824	2.242431	C	6.668823	1.156200	-1.897453
C	7.005989	2.128958	3.113798	C	5.878312	-0.031670	-1.869722
C	5.763789	2.726593	2.974549	C	6.248022	-1.113682	-2.754662
C	4.855133	2.304846	1.958990	O	2.695681	-1.450190	-0.514112
C	5.252197	1.260848	1.040579	H	3.613298	-3.242352	-2.128734
H	3.266102	3.669494	2.553592	H	5.738253	-3.109020	-3.464417
H	1.637483	2.808016	0.833534	H	7.682712	-1.819042	-4.226295
H	2.124697	1.022780	-0.971310	H	9.051014	0.265376	-4.192689
O	6.830671	-0.169657	0.578019	H	8.363017	2.182844	-2.730415
H	8.351038	0.582917	2.369776	H	6.381308	2.002295	-1.269483
H	7.692648	2.459467	3.898800	C	-4.801811	0.989237	-0.034555
H	5.453454	3.529191	3.652381	C	-3.941575	1.356448	1.003600
O	0.957759	-0.637865	-2.414912	C	-4.236335	2.390666	1.926157
C	-1.521583	3.428890	-0.358742	C	-5.399709	3.122669	1.775072
C	1.673676	-1.258230	-4.631026	C	-7.436182	3.679990	0.469852
C	1.023891	1.148956	-4.083833	C	-8.256999	3.473821	-0.626582
H	2.739033	0.081153	-3.294606	C	-7.938307	2.456745	-1.564367
C	-1.296889	4.499919	0.700622	C	-6.827228	1.646324	-1.382177
C	-0.926546	3.769653	-1.718684	C	-5.971719	1.813147	-0.251727
H	-2.594638	3.201412	-0.454695	C	-6.276127	2.877445	0.678258
H	2.206402	-0.942002	-5.543723	O	-2.743733	0.645756	1.234877
H	2.165795	-2.161805	-4.239301	H	-3.541054	2.575952	2.748920
H	0.635577	-1.508337	-4.906286	H	-5.648708	3.914865	2.488420
H	1.536151	1.528415	-4.984185	H	-7.658101	4.473792	1.190819
H	-0.030446	0.954205	-4.342418	H	-9.141001	4.099890	-0.778825
				H	-8.572235	2.313320	-2.444501

H	-6.591707	0.875479	-2.119039	C	2.929833	2.036356	0.368884
H	-4.404481	-4.123912	3.277699	C	4.703800	2.959760	1.903983
H	-4.225000	-2.541406	2.413126	C	5.060829	3.731755	2.999150
H	-3.619200	-4.052874	1.647453	C	4.075371	4.422779	3.751698
S2c_07				C	2.739216	4.301499	3.409140
116				C	2.334163	3.500055	2.301569
Energy = -3595.556136548				C	3.339316	2.833391	1.504282
Rh	0.104822	-1.873302	0.594429	H	0.200355	3.845291	2.584775
C	1.455829	-3.849025	0.815649	H	-0.485494	2.324970	0.712450
C	0.369932	-3.860766	-0.206442	O	1.104300	1.047650	-0.888254
O	-0.639238	-4.734120	3.739189	H	5.475130	2.428611	1.342204
C	-0.185390	-4.014084	2.718961	H	6.113940	3.804930	3.287901
C	2.851585	-4.163619	0.235287	H	4.372466	5.037067	4.607044
O	-0.765901	-2.981071	2.322723	H	1.965826	4.811459	3.993542
O	3.210595	-3.850800	-0.887629	O	1.148516	-1.022386	-2.303488
O	3.610518	-4.824575	1.138308	H	-5.665362	-3.969305	-0.517184
C	1.104274	-4.555736	2.138486	H	-4.078153	-4.775269	-0.357680
C	-1.848904	-4.258618	4.400417	H	-4.495010	-3.381422	0.697240
H	-2.046840	-4.998762	5.184220	H	2.775406	-0.820775	-5.264365
H	-1.669957	-3.263882	4.833964	H	3.144278	-1.853864	-3.852238
C	-4.020750	-2.847189	-1.357917	H	1.590526	-2.046388	-4.721736
H	1.007994	-5.643926	1.989234	H	0.932904	1.056994	-4.995471
H	-0.487273	-4.510887	0.006993	H	-0.217572	-0.213112	-4.487713
H	0.692979	-3.880423	-1.251583	H	0.093896	1.198241	-3.422442
C	4.945764	-5.176158	0.679544	P	1.268977	-0.590141	-0.760372
H	5.389539	-5.747227	1.503924	C	-3.919639	1.128749	-0.774838
H	5.525329	-4.263230	0.477551	C	-3.099817	0.461304	-1.688468
C	-2.725642	1.502685	3.388702	C	-3.399468	0.354251	-3.068114
C	-2.703748	0.276745	2.751585	C	-4.581730	0.888314	-3.546765
C	-3.068748	0.200016	1.387467	C	-6.773081	1.977367	-3.133828
C	-3.477281	1.305002	0.637582	C	-7.703895	2.516656	-2.261628
C	-3.654759	3.819948	0.567703	C	-7.413227	2.583080	-0.873779
C	-3.586512	5.047063	1.210488	C	-6.193757	2.141069	-0.382147
C	-3.280675	5.125242	2.594363	C	-5.199966	1.603352	-1.253730
C	-3.016836	3.966589	3.306735	C	-5.517633	1.495177	-2.659992
C	-3.058969	2.689379	2.673139	O	-1.871778	-0.092435	-1.265864
C	-3.416798	2.602903	1.274823	H	-2.678456	-0.136395	-3.726236
H	-2.458318	1.579292	4.447621	H	-4.821119	0.829578	-4.613520
H	-2.409122	-0.640642	3.266021	H	-6.991835	1.899833	-4.204215
O	-3.068286	-1.077746	0.797608	H	-8.666067	2.878089	-2.636222
H	-3.884660	3.780189	-0.499083	H	-8.161027	2.982858	-0.182110
H	-3.767980	5.964535	0.642694	H	-5.991631	2.191389	0.690093
H	-3.243909	6.099151	3.091660	C	3.912232	1.396259	-0.551532
H	-2.764131	4.012404	4.371672	C	3.852469	0.022439	-0.795363
O	-2.560925	-2.677125	-1.067927	C	4.813017	-0.683935	-1.558400
C	1.700460	-0.269626	-3.476177	C	5.848719	0.019190	-2.146254
C	-4.106490	-3.372655	-2.784885	C	6.944880	2.175576	-2.700677
C	-4.593549	-3.801010	-0.315667	C	6.986604	3.558105	-2.632060
H	-4.497360	-1.857777	-1.278051	C	5.996191	4.257193	-1.893751
C	2.341716	-1.315401	-4.378756	C	5.001042	3.570216	-1.214532
C	0.552437	0.490049	-4.128531	C	4.940219	2.144852	-1.242177
H	2.458379	0.432827	-3.095275	C	5.924615	1.438063	-2.031134
H	4.883046	-5.784086	-0.234812	O	2.824424	-0.748915	-0.210067
H	1.898337	-4.416001	2.893487	H	4.712133	-1.768700	-1.649348
H	-5.163803	-3.531711	-3.056077	H	6.611808	-0.507352	-2.729046
H	-3.671937	-2.655450	-3.498201	H	7.690568	1.624006	-3.283360
H	-3.575169	-4.334170	-2.878949	H	7.771222	4.112872	-3.155040
P	-1.869968	-1.438417	-0.299822	H	6.014447	5.350913	-1.862877
C	0.955805	3.327486	1.985085	H	4.242210	4.124578	-0.657927
C	0.566438	2.493883	0.953639	H	0.273888	-0.541651	1.530448
C	1.558269	1.853006	0.176040	H	-2.678048	-4.213623	3.679867
				H	1.681741	-2.703289	1.182530

```

S4c_07
116
Energy = -3595.556290437
Rh 0.036952 -0.330434 1.098668
C -3.514008 -2.770829 -2.162569
C -2.664023 -1.683921 -2.073465
C -3.103214 -0.516676 -1.404549
C -4.381321 -0.379824 -0.857105
C -6.498864 -1.578079 -0.197292
C -7.294109 -2.714235 -0.224156
C -6.877741 -3.874726 -0.927485
C -5.651713 -3.885571 -1.571511
C -4.800128 -2.742158 -1.548435
C -5.240239 -1.543714 -0.869786
H -3.196655 -3.677878 -2.687414
H -1.657345 -1.694141 -2.498401
O -2.207565 0.568078 -1.358300
H -6.832526 -0.696531 0.354219
H -8.251578 -2.715644 0.305804
H -7.519734 -4.760318 -0.948736
H -5.308746 -4.780695 -2.101406
O -1.001296 2.428925 -0.204085
C -1.733178 3.449146 -1.021162
C 1.716976 -0.614529 -3.256724
C -1.639933 4.756274 -0.243765
C -1.082246 3.504608 -2.397715
H -2.781270 3.122736 -1.104602
C 1.531026 -1.956141 -3.953692
C 1.147107 0.567770 -4.029399
H 2.779512 -0.445852 -3.023125
H -2.166625 5.551670 -0.797270
H -2.104329 4.661834 0.750118
H -0.588022 5.062168 -0.117458
H -1.579043 4.276569 -3.009726
P -1.499993 0.926409 0.104521
C 3.619584 3.556991 1.487914
C 2.744419 2.945086 0.609677
C 3.162124 1.780601 -0.075753
C 4.430502 1.213630 0.065432
C 6.574015 1.222681 1.391900
C 7.394998 1.810477 2.342201
C 7.006495 3.009060 2.995646
C 5.782273 3.585530 2.702486
C 4.904880 2.998599 1.744146
C 5.316292 1.801402 1.045511
H 3.320981 4.466302 2.020023
H 1.737581 3.327140 0.427024
O 2.244165 1.209513 -0.981068
H 6.886616 0.295345 0.906743
H 8.351198 1.341564 2.593825
H 7.667917 3.466166 3.737673
H 5.459799 4.499038 3.213894
O 0.978049 -0.720866 -1.955400
H -0.014368 3.766001 -2.310967
H -1.175817 2.538766 -2.916250
H 2.075610 -1.949874 -4.912668
H 1.920415 -2.780741 -3.337168
H 0.464707 -2.143795 -4.165319
H 1.656158 0.648494 -5.005031
H 0.068697 0.428078 -4.213269
H 1.300519 1.508810 -3.480215

```

```

C -0.982464 -2.235186 0.929750
C 0.114324 -2.594810 1.875391
P 1.508773 -0.202135 -0.525863
C -4.806394 0.920864 -0.265972
C -4.023649 1.536353 0.714333
C -4.417003 2.711904 1.398928
C -5.606537 3.327525 1.056253
C -7.596583 3.492651 -0.415476
C -8.348078 3.025973 -1.480540
C -7.930489 1.865321 -2.182264
C -6.791295 1.174602 -1.797194
C -6.004769 1.611660 -0.690052
C -6.409996 2.818109 -0.004227
O -2.810449 0.947778 1.125843
H -3.773941 3.098077 2.194458
H -5.933486 4.229220 1.584539
H -7.895818 4.398642 0.122673
H -9.253753 3.555572 -1.790892
H -8.510542 1.513171 -3.040870
H -6.480371 0.288594 -2.355785
C 4.810496 0.018545 -0.740705
C 3.999019 -1.118419 -0.730965
C 4.344826 -2.335260 -1.366268
C 5.520577 -2.402254 -2.091032
C 7.524578 -1.294583 -3.048760
C 8.305333 -0.165179 -3.229240
C 7.934640 1.055368 -2.606393
C 6.811035 1.125667 -1.796669
C 5.994726 -0.022355 -1.570260
C 6.352940 -1.254347 -2.237446
O 2.789601 -1.114154 -0.001805
H 3.675188 -3.192052 -1.252681
H 5.814296 -3.336600 -2.580443
H 7.788700 -2.238168 -3.538488
H 9.199072 -0.207380 -3.858907
H 8.539075 1.952784 -2.770392
H 6.535213 2.074479 -1.331336
C -0.304691 -2.644703 3.357353
C -0.951882 -1.339528 3.772388
O -0.945777 -0.297328 3.085185
C 0.986120 -3.764974 1.373273
O 1.387213 -4.542122 2.404297
C 2.205303 -5.685165 2.030835
O -1.510821 -1.388927 4.976352
C -2.115466 -0.155073 5.469699
O 1.267669 -3.953491 0.201454
H -2.506514 -0.414517 6.460173
H -1.351805 0.633069 5.538295
H -1.005336 -3.476050 3.539402
H -1.994074 -2.214320 1.353762
H -0.928071 -2.696366 -0.059813
H 2.392015 -6.221444 2.969173
H 3.147976 -5.340611 1.580644
H 1.663727 -6.319495 1.313752
H 0.563077 -2.818872 4.018329
H 1.051270 0.830875 1.635401
H -2.922704 0.160044 4.793057
H 0.982432 -1.730285 1.884509

```

```

S1a_07
116
Energy = -3595.574825447

```

Rh	1.419756	1.002748	0.054376	C	-1.982778	-1.058707	5.213674
O	2.682964	0.312993	1.700657	C	-2.434966	-0.018883	6.110633
C	3.115079	1.229923	2.440132	O	0.063545	1.030953	2.882721
C	2.821757	2.684610	2.182906	C	4.121932	-0.428811	3.808546
C	2.355975	2.894969	0.743427	H	2.028883	2.990247	2.887090
C	3.290430	2.453269	-0.336578	H	4.321293	2.255384	0.006650
C	1.615196	4.154971	0.449160	H	3.260328	3.122154	-1.207869
O	3.860598	0.976819	3.505313	H	3.715146	3.286002	2.441945
O	1.571677	4.714501	-0.644174	H	4.046035	-2.815170	-3.445676
O	0.993130	4.651085	1.563052	H	3.558659	-0.402608	-2.960642
C	-0.260749	3.267713	-3.632335	H	-1.414137	-3.332554	-4.574025
C	0.277330	5.889120	1.346963	H	-0.935356	-5.732791	-4.899782
C	3.032688	-2.417252	-3.560626	H	1.403270	-6.609787	-4.674733
C	2.772832	-1.086613	-3.290922	H	3.252958	-5.058963	-4.049314
C	1.460004	-0.588116	-3.466762	H	-0.498108	2.437481	-4.316443
C	0.403137	-1.365797	-3.946110	H	-2.949730	1.236139	2.397675
C	-0.390028	-3.698143	-4.473004	H	-0.086108	6.190200	2.338182
C	-0.119404	-5.046461	-4.653304	H	-1.607025	4.708164	-4.505072
C	1.202616	-5.545667	-4.518345	H	-2.354779	3.706038	-3.229330
C	2.231309	-4.684425	-4.174936	H	-1.215294	5.021135	-2.787070
C	1.985894	-3.296003	-3.963711	H	0.751869	-4.532350	0.707834
C	0.648827	-2.776847	-4.143238	H	-0.420229	-2.473338	-0.131508
O	1.254980	0.779798	-3.201718	H	0.319168	-2.276747	5.817034
O	-0.103759	2.681379	-2.258757	H	1.620038	-4.228319	6.590670
C	-2.956398	1.933614	1.545247	H	2.322279	-6.015314	4.977001
C	-1.433642	4.232540	-3.525046	H	1.757885	-5.791279	2.558380
C	1.053681	3.936992	-4.013980	H	0.934698	4.454982	-4.981321
C	-3.251710	3.351575	2.015227	H	1.340471	4.672106	-3.245838
C	-3.900963	1.433701	0.459716	H	1.858506	3.193388	-4.122855
P	0.348844	1.198126	-1.870993	H	-4.268356	3.394023	2.441102
C	0.423868	-3.754181	1.404432	H	-2.538314	3.669724	2.791062
C	-0.223439	-2.627278	0.931749	H	-3.199268	4.059079	1.171235
C	-0.649725	-1.644185	1.855209	H	-4.929417	1.391709	0.856942
C	-0.493758	-1.762604	3.236930	H	-3.892288	2.121080	-0.402802
C	0.620966	-3.044036	5.100243	H	-3.616133	0.425231	0.123908
C	1.352222	-4.141123	5.533124	H	-3.314268	1.078972	-2.544379
C	1.755261	-5.150524	4.619899	H	-4.526766	0.798553	-4.726973
C	1.438312	-5.029112	3.277079	H	-4.542039	0.040094	-7.059946
C	0.704336	-3.906148	2.793539	H	-3.403049	-1.043459	-8.995121
C	0.257453	-2.896622	3.727379	H	-1.072828	-1.931243	-8.730926
O	-1.304478	-0.508147	1.332355	H	0.081405	-1.805006	-6.553655
O	-1.571405	1.964408	0.969783	H	-0.882302	2.676159	4.632924
P	-0.418417	0.891657	1.296139	H	-2.336066	2.101964	6.597746
C	-0.919921	-0.738341	-4.222188	H	-3.646038	0.448917	7.852990
C	-1.566199	0.001987	-3.229787	H	-4.467833	-1.885331	8.162025
C	-2.859000	0.554373	-3.387399	H	-3.757592	-3.677610	6.558671
C	-3.518280	0.393810	-4.592286	H	-2.200261	-3.168881	4.712767
C	-3.534880	-0.376309	-6.950934	H	0.947967	6.655228	0.928872
C	-2.899910	-0.974708	-8.026069	H	-0.564105	5.729921	0.655444
C	-1.583951	-1.484006	-7.872949	H	4.751804	-0.405511	4.705192
C	-0.934701	-1.416168	-6.649445	H	3.174783	-0.952650	4.000398
C	-1.567307	-0.830367	-5.512437	H	4.648916	-0.900258	2.966638
C	-2.889904	-0.272614	-5.683610	H	1.324873	-0.520089	-0.461146
O	-0.944814	0.170444	-1.970813	H	3.049018	1.379872	-0.808905
C	-1.070193	-0.727088	4.140041				
C	-0.772103	0.623738	3.946864				
C	-1.205365	1.649272	4.822778	R4a_07			
C	-2.005402	1.323588	5.902407	116			
C	-3.322876	-0.349206	7.176240	Energy =	-3595.568902944		
C	-3.781840	-1.644860	7.344566	Rh	0.177217	-0.917642	0.789288
C	-3.372986	-2.660011	6.440636	C	-0.360246	-3.070483	1.030906
C	-2.495628	-2.376722	5.404217	C	0.899029	-2.937033	1.824668
				O	-2.690114	-2.032446	3.684500

C	-1.837034	-1.920379	2.678533	H	-8.960518	-1.778507	2.482155
C	-0.387750	-3.908772	-0.191936	H	-7.464097	-3.380520	1.292855
O	-1.232113	-0.843034	2.445096	O	-0.621765	0.959579	-1.726620
O	-1.418874	-4.266036	-0.766428	H	3.209565	-0.142970	-4.899416
O	0.855435	-4.286354	-0.616937	H	1.523643	-0.674030	-4.638156
C	-1.647897	-3.152600	1.841777	H	2.194703	0.703389	-3.697155
C	-2.934728	-0.832521	4.481975	H	-1.125679	3.476640	-3.931881
H	-3.659028	-1.148382	5.241288	H	-0.655985	3.588093	-2.213781
H	-1.996355	-0.493601	4.944206	H	0.413834	2.750676	-3.384680
C	2.913403	-1.250104	-3.073219	H	-1.977024	1.172695	-4.859600
H	0.781220	-3.184162	2.895721	H	-0.391376	0.483435	-4.409288
H	1.765359	-3.441365	1.381584	H	-1.903975	-0.255815	-3.789503
C	0.849154	-5.121985	-1.797498	P	-1.298996	0.148762	-0.510936
H	1.900028	-5.388245	-1.968428	C	5.066290	0.212428	0.082360
H	0.241821	-6.023818	-1.627333	C	4.531286	-1.070689	-0.049608
H	0.441286	-4.570556	-2.658495	C	5.294972	-2.196118	-0.444303
C	2.641431	3.554651	1.436003	C	6.626100	-2.026691	-0.776211
C	2.201583	2.724178	0.422133	C	8.568738	-0.538422	-1.182509
C	2.995481	1.614951	0.046610	C	9.127383	0.727835	-1.222450
C	4.235656	1.327017	0.618716	C	8.345636	1.854387	-0.856496
C	5.814030	1.835814	2.515382	C	7.034543	1.700659	-0.431236
C	6.180847	2.629201	3.591770	C	6.432435	0.409379	-0.353522
C	5.413150	3.768093	3.948998	C	7.218362	-0.730940	-0.768180
C	4.267475	4.076611	3.235463	O	3.186244	-1.323975	0.297270
C	3.849325	3.271390	2.136049	H	4.815696	-3.178353	-0.461661
C	4.653474	2.136651	1.741463	H	7.235411	-2.888132	-1.068304
H	2.049204	4.427045	1.731572	H	9.153355	-1.414999	-1.481604
H	1.264878	2.900547	-0.111836	H	10.163306	0.863729	-1.546894
O	2.504418	0.803180	-0.995317	H	8.779947	2.857162	-0.914157
H	6.412611	0.958164	2.260742	H	6.446443	2.580368	-0.161488
H	7.070306	2.370968	4.174660	C	-4.344130	1.475335	-0.355894
H	5.720337	4.390511	4.794754	C	-3.112635	2.016775	0.017406
H	3.653672	4.940160	3.513248	C	-2.830597	3.404507	-0.011740
O	1.843450	-1.383636	-2.025721	C	-3.789980	4.278755	-0.487920
C	-1.370577	1.630823	-2.844675	C	-5.989058	4.679634	-1.565267
C	3.174601	-2.654319	-3.599470	C	-7.169928	4.199631	-2.106497
C	2.423097	-0.279012	-4.137505	C	-7.429174	2.804323	-2.105318
H	3.813067	-0.850252	-2.580331	C	-6.527408	1.915047	-1.539323
C	-0.635608	2.939026	-3.102902	C	-5.311843	2.374696	-0.949650
C	-1.408631	0.693294	-4.044273	C	-5.030007	3.792067	-0.994878
H	-2.390971	1.827958	-2.483629	O	-2.089469	1.183720	0.515249
H	-2.514403	-3.237610	1.159943	H	-1.864550	3.752680	0.362446
H	-1.688267	-4.044006	2.498177	H	-3.596715	5.356424	-0.501036
H	3.957944	-2.615032	-4.375520	H	-5.765449	5.751771	-1.578248
H	3.519677	-3.322360	-2.795449	H	-7.895174	4.889711	-2.547470
H	2.262289	-3.077992	-4.050427	H	-8.348808	2.423496	-2.559577
P	1.922683	-0.690044	-0.576523	H	-6.741135	0.844345	-1.554775
C	-5.201248	-2.770232	-0.041637	H	0.738605	0.518044	1.248910
C	-4.032887	-2.332998	-0.640018	H	1.304293	-1.813277	1.959406
C	-3.747727	-0.945803	-0.662430	H	-3.348934	-0.040411	3.842612
C	-4.620837	0.024822	-0.160873				
C	-6.652245	0.445352	1.272978	Slc_07			
C	-7.762397	-0.032541	1.953770	116			
C	-8.075278	-1.416973	1.950635	Energy =	-3595.551133284		
C	-7.247045	-2.306934	1.287070	Rh	-0.807498	1.933702	0.028101
C	-6.086896	-1.852351	0.593998	C	1.112771	2.400990	0.907087
C	-5.790021	-0.438710	0.556948	C	0.782972	3.730974	0.300525
H	-5.442943	-3.838209	-0.029155	C	0.237372	4.767261	1.300146
H	-3.313700	-3.028454	-1.081788	C	-0.964416	4.215755	2.037681
O	-2.564310	-0.564150	-1.321500	O	-1.546536	3.152846	1.744212
H	-6.424453	1.513354	1.292894	C	1.886380	4.227044	-0.653214
H	-8.402353	0.666812	2.500564	O	2.187823	5.522261	-0.414133

C	3.250374	6.070190	-1.245088	C	-0.164661	-4.315153	6.344853
O	-1.374361	4.997608	3.030441	C	0.135000	-3.300045	5.448296
C	-2.554119	4.555243	3.768103	C	-0.867326	-2.381306	5.015227
O	2.421407	3.528118	-1.499770	C	-2.214004	-2.562886	5.508489
H	-2.706860	5.324077	4.533939	O	-1.475739	0.428129	2.640084
C	-0.922581	2.532866	-4.470084	H	4.546812	-1.186102	-1.431489
H	-3.416908	4.494635	3.089113	H	3.100414	0.869183	-1.692078
H	1.014146	5.053784	2.027611	H	0.332387	-4.003930	-3.808886
H	1.106297	2.365053	2.003695	H	1.680528	-6.028106	-3.378697
H	1.957984	1.869398	0.460719	H	3.944321	-5.850697	-2.314524
H	3.366947	7.107981	-0.910039	H	4.816121	-3.620302	-1.621834
H	2.959911	6.027051	-2.304933	H	-0.469318	1.600884	-4.840510
C	3.554773	-1.251254	-1.891122	H	-2.096542	-2.600865	1.702814
C	2.771931	-0.118939	-2.025128	H	-2.037800	2.996375	-6.257255
C	1.509136	-0.223161	-2.658700	H	-2.925253	1.962171	-5.102553
C	1.029729	-1.409841	-3.222628	H	-2.723819	3.712565	-4.769241
C	1.316590	-3.910069	-3.344326	H	4.435469	-0.467323	2.191669
C	2.074525	-5.045837	-3.100412	H	2.505895	-0.835862	0.623738
C	3.352739	-4.947560	-2.491508	H	0.658605	-0.631141	6.320766
C	3.839306	-3.708267	-2.109757	H	2.544499	-0.105615	7.824082
C	3.077970	-2.522583	-2.326235	H	4.870691	0.134353	6.918564
C	1.794643	-2.614534	-2.984387	H	5.274900	-0.092250	4.468503
O	0.790113	0.968959	-2.803447	H	0.368578	3.853096	-5.591539
O	-1.280213	2.324890	-3.030975	H	-0.370801	4.608697	-4.151385
C	-2.595252	-2.344037	0.755032	H	0.988081	3.448459	-3.963828
C	-2.236111	2.816494	-5.186975	H	-4.373352	-3.521202	1.082685
C	0.079308	3.679686	-4.540749	H	-4.481136	-1.860370	1.730904
C	-4.107356	-2.467820	0.892119	H	-4.609135	-2.144065	-0.034743
C	-2.014314	-3.160809	-0.392569	H	-2.207670	-4.232054	-0.210346
P	-0.670518	1.201380	-2.041837	H	-2.486975	-2.879388	-1.347385
C	3.417386	-0.587934	2.577109	H	-0.926668	-3.015598	-0.474650
C	2.363177	-0.791010	1.706476	H	-3.513626	-0.464749	-3.747347
C	1.058310	-0.964290	2.226075	H	-3.637430	-1.520012	-6.026540
C	0.780554	-0.998914	3.596226	H	-2.510097	-2.531397	-7.952086
C	1.665536	-0.530938	5.909236	H	-0.432299	-3.323850	-9.081322
C	2.726065	-0.233620	6.752513	H	1.769454	-3.159005	-7.891587
C	4.042005	-0.090039	6.240407	H	1.892129	-2.289851	-5.587922
H	4.178598	5.499540	-1.094572	H	-3.792039	-0.097460	3.690723
H	-0.071370	5.699417	0.793754	H	-4.268309	-1.843230	5.435245
C	4.267975	-0.219373	4.880267	H	-3.505932	-3.723079	6.814663
C	3.197969	-0.505307	3.982530	H	-1.698958	-5.265364	7.572088
C	1.864130	-0.695159	4.505305	H	0.621541	-5.010406	6.654870
O	0.029568	-1.182590	1.291176	H	1.149986	-3.205342	5.056168
O	-2.331277	-0.895315	0.483326	H	-2.296752	2.057148	-0.615706
P	-1.131171	-0.007268	1.071912	H	-2.362912	3.572562	4.222312
C	-0.213622	-1.404781	-4.044788	H	-0.125441	3.619986	-0.495790
C	-1.390671	-0.841713	-3.548126				
C	-2.628643	-0.882602	-4.234546	R2a_07			
C	-2.685976	-1.464146	-5.487636	116			
C	-1.545916	-2.494364	-7.433861	Energy = -3595.572180698			
C	-0.391301	-2.929705	-8.061722	Rh	-0.032848	-1.612693	1.153781
C	0.852662	-2.843519	-7.384161	C	-0.009828	-3.823488	1.297369
C	0.923154	-2.357242	-6.086925	C	1.263367	-3.436121	1.979449
C	-0.248785	-1.925014	-5.397015	O	-2.212074	-3.539318	4.227371
C	-1.507229	-1.969760	-6.108531	C	-1.529285	-3.154218	3.158538
O	-1.412688	-0.253846	-2.265847	C	0.017778	-4.602659	0.031749
C	-0.593880	-1.314057	4.077251	O	-1.208959	-1.951448	2.975431
C	-1.682489	-0.581370	3.599360	O	-0.958609	-5.185489	-0.437695
C	-3.003694	-0.746263	4.081453	O	1.257226	-4.643883	-0.547825
C	-3.256036	-1.710525	5.040117	C	-1.171288	-4.243104	2.190606
C	-2.482597	-3.606683	6.441982	C	1.695287	-1.074304	-3.189695
C	-1.479163	-4.465307	6.859028	C	-2.606653	-2.505232	5.177921

C	1.848753	3.289487	1.672874	H	6.986538	2.847068	3.066486
C	1.293971	2.422524	0.749363	H	5.539218	4.577739	4.161357
C	2.130514	1.485406	0.099204	H	3.142001	4.781652	3.507111
C	3.509158	1.405716	0.308287	H	2.545083	-0.431934	-2.911295
C	5.434568	2.137691	1.760381	H	-4.556797	-1.372399	-0.938152
C	5.942708	2.956959	2.757057	H	0.985982	-6.455664	-1.577444
C	5.122032	3.931457	3.383340	H	0.667085	-4.975449	-2.537922
C	3.791692	4.047911	3.017693	H	2.630374	-1.988607	-4.902952
C	3.230093	3.208309	2.011322	H	2.940635	-2.850620	-3.370896
C	4.075075	2.245519	1.340246	H	1.339036	-2.982232	-4.168548
O	1.522581	0.640331	-0.851139	H	-1.889266	3.107526	3.898821
O	1.073166	-1.577010	-1.918418	H	-2.237872	0.683652	3.326350
C	-4.251017	-2.396905	-0.674700	H	-3.005005	4.175600	-1.483598
C	2.179148	-2.303481	-3.946816	H	-2.499656	6.528299	-0.933857
C	0.643976	-0.266645	-3.938952	H	-1.915899	7.194391	1.412197
C	-4.351196	-3.325015	-1.877761	H	-1.775922	5.456090	3.195010
C	-5.019230	-2.885039	0.547988	H	1.078556	0.120520	-4.876164
P	1.339741	-0.955688	-0.458519	H	-0.218674	-0.903243	-4.196728
C	-2.181747	2.808421	2.886905	H	0.295703	0.586089	-3.337260
C	-2.381250	1.474107	2.586148	H	-5.408800	-3.440331	-2.168989
C	-2.778424	1.114873	1.276910	H	-3.797994	-2.917963	-2.738415
C	-3.004322	2.043737	0.259053	H	-3.940271	-4.317908	-1.632343
C	-2.752154	4.448291	-0.456466	H	-6.093241	-2.953403	0.304994
C	-2.465973	5.769533	-0.146192	H	-4.673149	-3.888050	0.848806
C	-2.126909	6.146441	1.179486	H	-4.902607	-2.188124	1.392520
C	-2.050555	5.181806	2.170516	H	4.489355	-2.900430	-1.199455
C	-2.319443	3.810855	1.882938	H	6.576758	-2.181529	-2.402992
C	-2.710677	3.431070	0.543972	H	8.046589	-0.388428	-3.205291
O	-3.014999	-0.251717	1.031374	H	8.621672	2.031865	-3.375740
O	-2.794635	-2.359418	-0.315214	H	7.166313	3.739422	-2.256575
P	-1.915479	-1.082145	0.101382	H	5.202584	3.044353	-0.932612
C	4.336181	0.468798	-0.504393	H	-2.585001	-0.620692	-3.548383
C	3.999754	-0.884275	-0.579864	H	-4.559814	0.421049	-4.696730
C	4.793779	-1.851642	-1.241553	H	-6.507595	1.913323	-4.626399
C	5.940591	-1.446320	-1.899818	H	-7.948971	3.540134	-3.404275
C	7.434097	0.365948	-2.699944	H	-7.357110	4.214329	-1.062990
C	7.750534	1.710621	-2.797085	H	-5.321508	3.337458	0.022032
C	6.929962	2.675630	-2.156917	H	-2.047297	-4.446315	1.545854
C	5.827474	2.286930	-1.410613	H	-0.979590	-5.179637	2.749423
C	5.483821	0.909159	-1.268110	H	0.207406	-0.083268	1.607135
C	6.297983	-0.068012	-1.955936	H	1.426577	-2.254690	2.125337
O	2.851163	-1.366419	0.086176	H	-3.280536	-1.786143	4.689571
C	-3.502310	1.584381	-1.068296	S3c_07			
C	-2.832818	0.569314	-1.756048	116			
C	-3.188838	0.147387	-3.059604	Energy = -3595.552806154			
C	-4.279569	0.725147	-3.683116	Rh	0.402979	-0.549920	-2.425870
C	-6.245496	2.237564	-3.613616	C	-1.411925	-0.548100	-3.588765
C	-7.047534	3.137937	-2.932768	C	-0.457503	-0.060010	-4.634862
C	-6.706949	3.524961	-1.610141	C	0.014193	-1.141888	-5.624562
C	-5.562114	3.034697	-0.999415	C	0.590588	-2.333727	-4.888220
C	-4.698302	2.124372	-1.678791	O	0.823923	-2.365385	-3.662461
C	-5.072398	1.697931	-3.008725	C	-0.902321	1.278201	-5.255117
O	-1.702912	-0.055597	-1.177205	O	-0.782516	1.254569	-6.601077
H	-3.124262	-3.046700	5.977888	C	-1.217839	2.468096	-7.277939
H	-1.715113	-1.988900	5.562290	O	0.862451	-3.359523	-5.688088
H	1.318951	-3.739871	3.040326	C	1.468530	-4.534695	-5.070656
H	2.166624	-3.718856	1.426007	O	-1.318818	2.222135	-4.603106
C	1.312339	-5.421406	-1.766033	H	1.606231	-5.242688	-5.895929
H	2.364618	-5.397868	-2.077520	C	-3.938060	1.863478	-0.013180
H	1.219950	4.035008	2.169913	H	2.432653	-4.262759	-4.617234
H	0.231849	2.452098	0.494656	H	-0.819113	-1.476561	-6.264065
H	6.078000	1.387056	1.295642				

H	-1.807895	-1.561348	-3.731784	C	3.266122	-0.789890	4.978147
H	-2.165811	0.172054	-3.257685	C	4.600706	-0.818701	4.496226
H	-1.076194	2.264448	-8.346194	C	4.857483	-1.265417	3.210738
H	-0.603616	3.320898	-6.953726	C	3.800605	-1.711149	2.363711
C	-2.873269	2.015982	-0.881021	C	2.445692	-1.725752	2.867614
C	-1.591873	2.310519	-0.357295	C	-0.030024	-2.325315	2.487146
C	-1.344224	2.517650	1.000933	C	-1.070031	-1.695768	1.797470
C	-2.262494	2.280994	3.335602	C	-2.408388	-1.671659	2.258389
C	-3.328967	2.039177	4.188743	C	-2.735248	-2.352443	3.416412
C	-4.624917	1.776006	3.672973	C	-2.101416	-3.885168	5.262855
C	-4.823235	1.729703	2.302765	C	-1.156895	-4.663625	5.910460
C	-3.745017	1.954539	1.396521	C	0.175993	-4.703925	5.424279
C	-2.433465	2.268034	1.918909	C	0.552492	-3.949164	4.323413
C	1.923859	3.717066	-2.094367	C	-0.387313	-3.116584	3.645010
C	3.407794	3.981995	-1.871847	C	-1.753977	-3.112289	4.116235
C	1.382589	4.289114	-3.399367	O	0.684969	-2.935871	-0.183683
H	-2.275027	2.667992	-7.049888	O	-1.576900	-2.757478	-1.242275
H	0.790894	-0.756460	-6.309470	O	-0.809748	-0.979077	0.607882
C	-0.001413	2.978041	1.454886	P	-0.374367	-1.790101	-0.760485
C	1.156515	2.295662	1.073187	H	-1.576119	-4.042681	0.434040
C	2.446772	2.617756	1.559845	H	5.089220	-2.115521	0.655076
C	2.598890	3.696084	2.410853	H	3.191513	-2.781365	-0.853141
C	1.647133	5.676028	3.563099	H	1.195037	-1.193698	4.570671
C	0.572597	6.500196	3.851717	H	3.060981	-0.411998	5.984543
C	-0.710914	6.190578	3.331523	H	5.420156	-0.477412	5.135874
C	-0.909333	5.054507	2.560936	H	5.880140	-1.275391	2.818102
C	0.168625	4.167646	2.263749	H	-3.880622	-4.951956	-0.087644
C	1.483046	4.511582	2.757159	H	-3.882614	-3.170721	0.045403
O	-0.555374	2.476391	-1.288105	H	-3.927709	-3.951048	-1.568355
O	1.771962	2.227658	-2.155018	H	-1.706559	-6.150572	-0.948387
O	1.086534	1.172808	0.221640	H	-1.787129	-5.161970	-2.434675
P	0.669366	1.355565	-1.360853	H	-0.307323	-5.141378	-1.413149
H	-4.941400	1.657081	-0.400290	H	-3.146226	-1.088966	1.701293
H	-2.988557	1.949917	-1.965721	H	-3.761348	-2.328886	3.797309
H	-1.270445	2.475558	3.749286	H	-3.138574	-3.860450	5.614452
H	-3.167726	2.049849	5.271101	H	-1.437375	-5.257718	6.785348
H	-5.460872	1.602671	4.357396	H	0.914817	-5.341062	5.919998
H	-5.814843	1.513336	1.890525	H	1.580577	-3.999474	3.958004
H	1.329818	4.078961	-1.240726				
H	3.585065	5.070479	-1.843818				
H	3.748965	3.552570	-0.917241	S2a_07			
H	4.007480	3.553194	-2.691825	116			
H	1.461121	5.389722	-3.379256	Energy = -3595.567792777			
H	1.971762	3.918221	-4.255411	Rh	-0.138228	-0.293884	1.321224
H	0.326503	4.015083	-3.544248	C	-3.675003	-3.692205	0.139578
H	3.289163	1.986257	1.267151	C	-2.754539	-2.852652	-0.460638
H	3.586749	3.948847	2.809686	C	-3.116264	-1.509664	-0.719291
H	2.648320	5.913741	3.938381	C	-4.375415	-0.980615	-0.431887
H	0.712562	7.395163	4.465257	C	-6.561520	-1.352342	0.768769
H	-1.553695	6.858475	3.534819	C	-7.429617	-2.194259	1.449272
H	-1.902575	4.841109	2.160116	C	-7.095572	-3.556235	1.670079
H	1.980387	-0.505747	-2.006591	C	-5.877543	-4.045825	1.228219
H	0.794661	-4.944758	-4.304746	C	-4.952157	-3.204538	0.543361
C	0.574966	0.303011	-4.116340	C	-5.308466	-1.828529	0.276647
C	-1.989189	-4.038231	-0.586466	H	-3.420256	-4.738597	0.336477
C	-3.512168	-4.020189	-0.548993	H	-1.755808	-3.192378	-0.744105
C	-1.407006	-5.189145	-1.399388	O	-2.151285	-0.689604	-1.341277
C	4.057985	-2.121302	1.023344	H	-6.835023	-0.307261	0.606882
C	3.022500	-2.495084	0.187710	H	-8.382621	-1.803075	1.818531
C	1.702031	-2.513694	0.693986	H	-7.795365	-4.211832	2.196724
C	1.377727	-2.197735	2.014066	H	-5.598821	-5.089530	1.408716
C	2.216505	-1.231512	4.186162	O	-0.691054	1.344073	-1.485339
				C	-1.313790	1.721591	-2.799855

```

C 2.065141 -2.901868 -1.857548
C -1.101418 3.221185 -2.958881
C -0.652345 0.884302 -3.886340
H -2.388376 1.489727 -2.737544
C 2.069661 -4.403647 -1.599923
C 1.432722 -2.510069 -3.186839
H 3.083926 -2.492573 -1.779508
H -1.554038 3.556840 -3.907146
H -1.572467 3.779789 -2.135294
H -0.026506 3.465279 -2.986692
H -1.071790 1.158300 -4.869422
P -1.398686 0.425152 -0.366371
C 3.963242 3.176624 -1.184746
C 3.014311 2.183312 -1.324200
C 3.315388 0.871072 -0.891618
C 4.555722 0.503128 -0.365183
C 6.717354 1.350254 0.614717
C 7.607996 2.388553 0.843021
C 7.336500 3.696044 0.362943
C 6.154406 3.947328 -0.313147
C 5.206568 2.908607 -0.544459
C 5.502350 1.566122 -0.101000
H 3.758026 4.192586 -1.538406
H 2.031531 2.371416 -1.762282
O 2.323293 -0.097856 -1.136343
H 6.939126 0.353271 1.001424
H 8.527444 2.197143 1.404677
H 8.053156 4.503280 0.541303
H 5.919964 4.956928 -0.668067
O 1.243706 -2.302545 -0.756831
H 0.434812 1.067606 -3.911179
H -0.833182 -0.188479 -3.720438
H 2.656359 -4.908430 -2.385778
H 2.525702 -4.636848 -0.625475
H 1.043849 -4.807993 -1.621050
H 2.002797 -2.965324 -4.014721
H 0.392540 -2.872051 -3.244766
H 1.442162 -1.418152 -3.320396
O -1.862985 -0.340626 2.669413
C -2.063843 0.725008 3.300367
P 1.584113 -0.957028 0.070751
C -4.702718 0.418403 -0.828426
C -3.871278 1.473251 -0.444240
C -4.175282 2.833811 -0.694193
C -5.322239 3.152334 -1.397543
C -7.311634 2.446375 -2.702018
C -8.103691 1.447676 -3.243400
C -7.772576 0.085899 -3.017889
C -6.678940 -0.258955 -2.237494
C -5.853901 0.742370 -1.643301
C -6.169492 2.127642 -1.910302
O -2.696160 1.226585 0.299307
H -3.501132 3.603917 -0.310414
H -5.580218 4.199641 -1.585857
H -7.543201 3.501227 -2.884183
H -8.974164 1.704171 -3.854316
H -8.383471 -0.702088 -3.468481
H -6.434207 -1.312388 -2.083654
C 4.887123 -0.925077 -0.096179
C 4.041680 -1.725449 0.673960
C 4.357160 -3.047543 1.069989
C 5.540863 -3.616238 0.637575

```

```

C 7.585513 -3.519273 -0.762959
C 8.396975 -2.851782 -1.664721
C 8.049072 -1.543025 -2.089374
C 6.921664 -0.909608 -1.587661
C 6.075754 -1.554832 -0.636692
C 6.407099 -2.906642 -0.243636
O 2.813475 -1.211146 1.149278
H 3.663678 -3.581334 1.725428
H 5.812828 -4.629823 0.949530
H 7.828895 -4.537960 -0.442519
H 9.295573 -3.333850 -2.060611
H 8.675143 -1.026984 -2.823546
H 6.667575 0.094808 -1.931641
C -1.168937 1.927141 3.162743
C 0.174382 1.529859 2.556463
C 0.962139 0.489695 3.281528
C 0.992654 2.615302 1.948778
O -3.083379 0.863018 4.134041
O 2.209831 2.577427 1.790128
O 0.227038 3.698221 1.605057
C 0.975853 4.813945 1.070607
C -3.994190 -0.273858 4.256577
H -1.684405 2.649189 2.506482
H 0.613281 0.292206 4.310400
H 2.044448 0.668051 3.225223
H -1.070217 2.421715 4.148481
H 0.234773 5.606229 0.902205
H 1.741865 5.142364 1.789878
H 1.469057 4.530387 0.128370
H -4.741607 0.048953 4.990214
H -4.458232 -0.488625 3.283322
H -3.443330 -1.155479 4.614409
H -0.432484 -1.844965 1.056853
H 0.865230 -0.628482 2.850465

```

B.2.8 Strukturen der _08 Spezies

```

R1c_08
116
Energy = -3595.552724663
Rh -0.385483 -0.292311 -0.180740
C -4.952094 0.342618 0.302291
C -0.879481 3.860616 -3.414254
C -1.360680 3.252729 -2.269897
C -2.361951 2.259194 -2.384117
C -2.930400 1.877659 -3.602053
C -2.749423 2.013347 -6.112158
C -2.184651 2.576945 -7.246659
C -1.212705 3.605767 -7.138979
H -0.172741 0.619346 -1.557674
C -0.799266 4.032450 -5.888212
C -1.343129 3.460576 -4.700722
C -2.366147 2.444581 -4.806946
O -2.833655 1.690927 -1.186885
O -3.571545 -0.234083 0.235419
C -2.247823 -4.571057 0.383435
C -5.886313 -0.824318 0.594807
C -4.953544 1.419155 1.380871

```

C	-2.650258	-5.060362	1.768441	H	-4.225875	-3.984104	-0.286211
C	-3.377990	-4.595401	-0.637707	H	-3.033315	-4.214308	-1.611393
P	-2.441058	0.107750	-0.862396	H	-4.765287	-2.295695	-2.600050
C	1.799726	-2.058861	-4.197112	H	-6.896573	-1.841302	-3.853359
C	0.660527	-2.216460	-3.429919	H	-8.348309	-0.277369	-5.063517
C	0.697693	-3.098037	-2.325097	H	-8.783007	1.987906	-6.011177
C	1.817005	-3.853026	-1.971526	H	-7.046399	3.783647	-5.791151
C	4.283083	-4.216418	-2.358930	H	-4.878706	3.310804	-4.710118
C	5.432205	-3.969030	-3.096792	H	0.937354	-4.800075	2.513746
C	5.395042	-3.122113	-4.234955	H	1.697205	-7.184235	2.330938
C	4.205329	-2.514114	-4.600432	H	2.450430	-9.069821	0.950321
C	3.009155	-2.731523	-3.855583	H	3.056584	-10.023789	-1.271872
C	3.033975	-3.626998	-2.720694	H	2.980390	-8.569718	-3.313963
O	-0.490053	-3.234675	-1.571673	H	2.379395	-6.182287	-3.135906
O	-1.821941	-3.142941	0.561426	O	1.784771	-0.214846	0.060116
P	-0.522680	-2.470806	-0.101363	C	2.408431	-0.125834	1.137669
C	-4.068155	0.914416	-3.629863	C	1.798941	0.136619	2.496945
C	-3.960452	-0.325486	-2.995812	C	0.327262	0.577773	2.419841
C	-4.954895	-1.329662	-3.074970	C	-0.595938	-0.557998	1.956942
C	-6.123363	-1.070590	-3.767261	C	-0.232183	1.112190	3.753192
C	-7.587063	0.507925	-5.000609	O	3.731263	-0.243863	1.184048
C	-7.829587	1.767557	-5.521979	O	-1.111617	1.954142	3.830481
C	-6.842114	2.780317	-5.405190	O	0.335942	0.484933	4.814252
C	-5.622611	2.516067	-4.799892	C	-0.179891	0.899619	6.108931
C	-5.327092	1.223198	-4.273389	C	4.417886	-0.520728	-0.074327
C	-6.352426	0.207297	-4.354088	H	1.895142	-0.788158	3.094326
O	-2.783037	-0.657810	-2.289717	H	-0.319002	-1.506391	2.441809
C	1.735671	-4.815674	-0.836950	H	-1.661579	-0.350815	2.129472
C	1.275037	-4.391991	0.411863	H	2.426938	0.886669	3.006568
C	1.263336	-5.222219	1.559388	H	0.232064	1.446293	1.730687
C	1.684995	-6.534491	1.449862	H	0.379890	0.307908	6.843648
C	2.447742	-8.439499	0.054801	H	-0.009914	1.976164	6.258652
C	2.780369	-8.969259	-1.180640	H	-1.258279	0.689869	6.172303
C	2.744779	-8.143023	-2.334409	H	5.479415	-0.568106	0.195482
C	2.409895	-6.800431	-2.235962	H	4.070883	-1.476966	-0.490627
C	2.088380	-6.212561	-0.975985	H	4.227125	0.291794	-0.789742
C	2.080817	-7.068166	0.189469				
O	0.862952	-3.054732	0.611899				
H	-0.115847	4.641820	-3.343847	R3c_08			
H	-1.000870	3.526308	-1.274794	116			
H	-3.492034	1.218711	-6.215127	Energy = -3595.548541634			
H	-2.490516	2.221349	-8.235423	Rh	0.231414	-1.726289	0.996728
H	-0.784841	4.049738	-8.042789	C	-4.527914	-0.640588	3.379283
H	-0.037893	4.813725	-5.789302	C	-3.870691	-1.470168	2.489230
H	-5.176520	0.782170	-0.682126	C	-3.760708	-1.075066	1.134947
H	-1.378366	-5.134874	0.009766	C	-4.320278	0.100247	0.627545
H	-6.922860	-0.454666	0.668419	C	-5.390848	2.308696	1.198257
H	-5.846409	-1.575211	-0.210098	C	-5.964323	3.158917	2.132123
H	-5.621389	-1.306657	1.550412	C	-6.114499	2.754872	3.484956
H	1.791067	-1.389213	-5.063395	C	-5.659488	1.509827	3.885496
H	-0.266503	-1.681286	-3.647774	C	-5.045922	0.618015	2.957107
H	4.331648	-4.869129	-1.484117	C	-4.930359	1.009488	1.569932
H	6.376812	-4.432847	-2.796467	H	-4.638161	-0.934954	4.428066
H	6.306160	-2.943833	-4.813740	H	-3.441575	-2.426897	2.795821
H	4.166286	-1.842988	-5.465413	O	-3.098502	-1.956007	0.258756
H	-5.965672	1.849174	1.471716	H	-5.278991	2.636494	0.162119
H	-4.669508	0.994044	2.357802	H	-6.302793	4.152502	1.822270
H	-4.254684	2.231294	1.129355	H	-6.578631	3.431322	4.208830
H	-2.986966	-6.108779	1.705349	H	-5.752931	1.191807	4.929519
H	-1.800893	-5.012770	2.467969	O	-1.402769	-2.507300	-1.510779
H	-3.476916	-4.452612	2.171770	C	-2.477791	-3.202160	-2.291772
H	-3.730534	-5.631797	-0.774741	C	0.101961	2.597081	2.275347
				C	-2.032750	-3.140451	-3.747016

C	-2.600854	-4.619438	-1.745891	C	4.956689	5.753947	-0.357255
H	-3.410266	-2.636642	-2.139305	C	4.619007	4.414983	-0.226045
C	-1.023351	3.551559	1.898548	C	3.358267	3.926252	-0.682119
C	0.150846	2.256709	3.760144	C	2.426986	4.875224	-1.250621
H	1.074520	2.982871	1.931516	O	1.204188	0.882258	-0.722511
H	-2.781331	-3.647758	-4.378851	H	-0.268745	2.777475	-1.716812
H	-1.942041	-2.097723	-4.090388	H	0.438826	5.164177	-2.090230
H	-1.064462	-3.651238	-3.873985	H	2.101179	6.943765	-1.828926
H	-3.358123	-5.174302	-2.325833	H	4.339923	7.726262	-1.058703
P	-1.581859	-1.518457	-0.254205	H	5.927074	6.104172	0.007627
C	5.695742	-0.439029	1.048028	H	5.321800	3.723288	0.243734
C	4.437640	-0.264231	1.593711	C	2.518766	-3.334368	2.286879
C	3.544535	0.668109	1.009833	C	2.769963	-4.036989	0.969764
C	3.895763	1.480691	-0.073014	C	1.756873	-3.659369	-0.128710
C	5.563370	1.873936	-1.919769	C	1.739138	-2.162356	-0.448950
C	6.792988	1.610586	-2.504972	C	1.985846	-4.461165	-1.427076
C	7.702001	0.699689	-1.906334	O	3.299768	-3.787635	3.265582
C	7.348216	0.042080	-0.740003	O	1.104231	-4.972348	-2.098271
C	6.084207	0.273668	-0.123205	O	3.305183	-4.484609	-1.743142
C	5.173790	1.233546	-0.705353	C	3.625498	-5.189603	-2.973166
H	6.403701	-1.140125	1.502345	C	3.110804	-3.200803	4.587841
H	4.112354	-0.807446	2.484155	H	3.795162	-3.785755	0.644591
O	2.290777	0.805924	1.629804	H	2.720341	-1.686136	-0.306836
H	4.873684	2.571751	-2.399495	H	1.340718	-1.927160	-1.444756
H	7.062757	2.108880	-3.441106	H	2.771742	-5.124345	1.162800
H	8.672937	0.510281	-2.373426	H	0.734653	-3.979360	0.195921
H	8.031487	-0.677891	-0.276757	H	4.715677	-5.115986	-3.069270
O	-0.167953	1.330563	1.522721	H	3.306080	-6.240099	-2.903264
H	-1.634883	-5.142812	-1.834081	H	3.121655	-4.710858	-3.826012
H	-2.917476	-4.610080	-0.690839	H	3.815427	-3.737708	5.233288
H	-0.888417	4.502734	2.441107	H	3.340960	-2.125618	4.562138
H	-1.013447	3.765250	0.818774	H	2.073524	-3.351902	4.919547
H	-2.003952	3.129661	2.172298				
H	0.327763	3.176675	4.343240	S2c_08			
H	-0.805297	1.816061	4.086952	116			
H	0.965985	1.549119	3.978090	Energy = -3595.551504821			
H	-0.916004	-2.341784	2.036094	C	-2.154476	0.900915	0.765476
O	1.688019	-2.425372	2.486821	C	-1.129020	-0.080375	0.632014
P	0.901368	0.360602	0.819189	C	-0.713763	-0.822555	1.722768
C	-4.249659	0.377950	-0.834864	C	-1.291064	-0.562861	2.989121
C	-3.019233	0.337853	-1.494710	C	-2.224599	0.449948	3.220381
C	-2.857793	0.659188	-2.864308	C	-2.724011	1.166420	2.067780
C	-3.969924	0.997889	-3.613389	C	-2.642795	1.613274	-0.369125
C	-6.428902	1.251372	-3.820315	C	-3.671269	2.532349	-0.244950
C	-7.697685	1.174439	-3.271146	C	-4.257815	2.766967	1.026237
C	-7.854500	0.808299	-1.908698	C	-3.795895	2.104241	2.153570
C	-6.749260	0.552571	-1.110687	C	-2.678108	0.741733	4.610488
C	-5.425094	0.646102	-1.634856	C	-3.189820	-0.280033	5.414261
C	-5.271436	0.977515	-3.033927	C	-3.702247	-0.067037	6.715555
O	-1.841305	0.030635	-0.780570	C	-3.678642	1.209491	7.245751
H	-1.852929	0.641761	-3.294677	C	-3.099776	2.290730	6.521151
H	-3.863546	1.261869	-4.670685	C	-2.571934	2.059515	5.195679
H	-6.293223	1.510549	-4.875881	C	-1.922832	3.144862	4.534179
H	-8.578434	1.380223	-3.886628	C	-1.833989	4.394973	5.127502
H	-8.859002	0.720554	-1.483510	C	-2.391583	4.629681	6.411498
H	-6.890361	0.261759	-0.067484	C	-3.007284	3.593566	7.092945
C	2.965239	2.539307	-0.557768	O	-3.266478	-1.592889	4.906405
C	1.649649	2.210613	-0.889799	P	-1.854028	-2.449440	4.773975
C	0.729810	3.130146	-1.446895	O	-0.831066	-1.347468	4.066997
C	1.128577	4.439401	-1.645656	Rh	-0.704132	-3.224960	6.491046
C	2.814410	6.240623	-1.385697	P	-1.821936	-5.096926	6.869348
C	4.056325	6.674935	-0.953712	O	-3.275709	-5.148736	6.079605

C	-4.256908	-6.075183	6.494728	H	-1.479757	2.980406	3.549427
C	-4.934863	-5.886444	7.701614	H	-1.323817	5.207515	4.601080
C	-5.874210	-6.910349	8.103988	H	-2.321377	5.623221	6.864490
C	-6.171198	-7.998374	7.198830	H	-3.423310	3.754908	8.093429
C	-5.506596	-8.066173	5.939938	H	-0.711994	-8.943263	9.079755
C	-4.543044	-7.134349	5.599151	H	0.564505	-8.005657	8.252838
C	-7.107379	-9.000021	7.590820	H	-0.629416	-7.174149	9.308890
C	-7.710174	-8.962348	8.837031	H	-3.236899	-4.045788	0.493538
C	-7.387912	-7.919523	9.744931	H	-1.595689	-3.743465	1.132920
C	-6.496265	-6.918581	9.388518	H	-2.493019	-5.214100	1.625027
C	-4.658866	-4.679431	8.531124	H	-5.287784	-3.779821	2.113545
C	-3.347847	-4.363856	8.892159	H	-4.539643	-4.961811	3.228050
C	-3.009806	-3.270417	9.723434	H	-4.981183	-3.327712	3.815379
C	-4.015134	-2.449209	10.199580	H	-4.001188	-7.182923	4.651388
C	-5.372394	-2.662505	9.819272	H	-5.752274	-8.881909	5.252438
C	-5.704702	-3.772993	8.954515	H	-7.330838	-9.809355	6.887748
C	-7.057939	-3.901091	8.519990	H	-8.422228	-9.739849	9.128800
C	-8.034729	-3.014041	8.948315	H	-7.844112	-7.906860	10.739452
C	-7.713788	-1.953085	9.834685	H	-6.253997	-6.128656	10.102780
C	-6.405305	-1.780743	10.254587	H	0.057488	-1.593907	1.647082
O	-2.289616	-5.192483	8.464657	H	-0.687299	-0.255309	-0.354469
C	0.800678	-4.381091	5.559137	H	-2.194186	1.408426	-1.347178
C	1.763420	-3.224370	5.672744	H	-4.041096	3.067934	-1.124282
C	2.668224	-3.286394	6.916002	H	-5.086808	3.475199	1.118146
C	1.864262	-3.410108	8.197141	H	-4.263796	2.290209	3.122931
O	0.618929	-3.404271	8.279542	H	-0.983409	-1.632371	6.908237
C	2.494766	-2.928213	4.343655	H	1.320031	-4.499887	10.584306
O	3.657551	-2.273939	4.572593	H	1.133899	-2.272915	5.791172
C	4.398212	-1.901786	3.377511				
O	2.639658	-3.513595	9.273714	S4c_08			
C	1.971131	-3.614061	10.565369	116			
O	2.057405	-3.207474	3.239715	Energy = -3595.550960571			
O	-1.060002	-6.513808	6.715563	Rh	-0.173770	-0.812452	0.503038
C	-1.417436	-7.807046	7.382424	C	-3.237968	0.070457	-4.107819
C	-0.489418	-7.985759	8.578352	C	-2.389502	0.651574	-3.183650
C	-1.264278	-8.885824	6.318473	C	-2.919239	1.111733	-1.954709
O	-2.274863	-3.568960	3.699201	C	-4.276599	1.048618	-1.630294
C	-3.212280	-3.381407	2.546743	C	-6.524115	0.100287	-2.265880
C	-4.587150	-3.894355	2.958464	C	-7.334774	-0.558956	-3.178112
C	-2.591100	-4.142722	1.382324	C	-6.820940	-0.984218	-4.431041
H	2.784931	-3.708110	11.293719	C	-5.488258	-0.765172	-4.737733
H	1.378791	-2.706319	10.751285	C	-4.622067	-0.106195	-3.816747
H	3.363842	-4.142485	6.861665	C	-5.153021	0.367580	-2.557970
H	1.063056	-5.266517	6.154108	H	-2.848492	-0.282363	-5.068346
H	0.531778	-4.646873	4.529539	H	-1.318278	0.765632	-3.366180
H	5.304666	-1.406802	3.746643	O	-2.016558	1.715339	-1.056263
H	3.798392	-1.216527	2.760511	H	-6.935172	0.413561	-1.303773
H	-3.774021	-1.608028	10.857679	H	-8.381319	-0.755661	-2.926363
H	-1.958689	-3.102721	9.969916	H	-7.474785	-1.493828	-5.144956
H	-7.323333	-4.706171	7.831533	H	-5.073127	-1.106280	-5.692143
H	-9.063675	-3.133053	8.595501	O	-1.046162	2.076379	1.229466
H	-8.496817	-1.268099	10.173058	C	-1.576629	3.477994	1.287450
H	-6.139352	-0.955238	10.923632	C	2.064180	1.703638	-2.776320
H	-2.464201	-7.732986	7.715054	C	-1.613203	3.849378	2.764205
H	-3.255451	-2.303994	2.323618	C	-0.658791	4.361595	0.452775
H	4.648860	-2.799166	2.792535	H	-2.592438	3.467065	0.862868
H	3.301555	-2.386674	6.996311	C	1.752383	1.374297	-4.231014
H	-1.503830	-9.870288	6.754642	C	1.873783	3.173336	-2.423363
H	-1.946537	-8.708533	5.472826	H	3.083478	1.377379	-2.518439
H	-0.229206	-8.917189	5.939820	H	-1.989275	4.880602	2.874634
H	-4.084594	1.398103	8.244937	H	-2.279282	3.177211	3.327117
H	-4.111753	-0.915768	7.268568	H	-0.603231	3.799747	3.203945

H	-1.016060	5.404817	0.492594	H	9.448974	0.228486	-3.396248
P	-1.603118	0.873630	0.314256	H	9.133840	1.004353	-1.032423
C	4.138195	0.369544	3.314984	H	6.995885	0.622217	0.141503
C	3.293629	0.865044	2.339126	C	-1.563072	-3.915856	0.619258
C	3.506891	0.494361	0.990133	C	-1.772932	-3.062652	1.854415
C	4.550074	-0.336312	0.574631	O	-1.345332	-1.902524	2.018034
C	6.371990	-1.912874	1.317142	C	-0.385665	-4.030695	-1.698610
C	7.148115	-2.460176	2.327905	O	-0.452724	-5.351374	-1.409078
C	6.977509	-2.050634	3.676261	C	-0.056362	-6.235429	-2.493874
C	6.005974	-1.116148	3.992909	O	-2.467157	-3.692015	2.798381
C	5.177315	-0.546852	2.981886	C	-2.706027	-2.961546	4.037666
C	5.379241	-0.927550	1.601716	O	-0.029031	-3.569957	-2.770276
H	3.999340	0.656633	4.362420	H	-3.271709	-3.658653	4.666702
H	2.467885	1.540804	2.574685	H	-1.747664	-2.693548	4.505348
O	2.636821	1.047327	0.030767	H	-2.553690	-4.231186	0.247049
H	6.511450	-2.246731	0.286732	H	-2.464020	-1.772029	-0.666091
H	7.897254	-3.219163	2.082453	H	-1.163246	-1.565579	-1.917512
H	7.603365	-2.483638	4.462252	H	-0.190312	-7.249882	-2.098941
H	5.848367	-0.806771	5.031752	H	0.994460	-6.053256	-2.764093
O	1.106432	0.902863	-1.945232	H	-0.695893	-6.066213	-3.372732
H	0.370901	4.333204	0.846004	H	-1.049027	-4.841824	0.927679
H	-0.651948	4.037920	-0.598653	H	1.170399	-1.104757	1.449163
H	2.451294	1.918966	-4.888035	H	-3.289935	-2.053597	3.829197
H	1.864029	0.296669	-4.427810	H	0.254623	-2.942648	-0.027546
H	0.726518	1.683486	-4.493048				
H	2.555150	3.790789	-3.033310	Sl_a_08			
H	0.838878	3.490826	-2.633503	116			
H	2.099726	3.355524	-1.361741	Energy = -3595.555272107			
C	-1.388910	-1.853857	-0.884608	Rh	-0.220639	-0.848590	0.555730
C	-0.771708	-3.172744	-0.471049	O	-1.767064	-2.167203	1.363550
P	1.511436	0.031422	-0.645582	C	-1.912832	-2.033894	2.602048
C	-4.767691	1.636144	-0.351713	C	-1.102291	-1.047149	3.395530
C	-4.180220	1.264379	0.860495	C	0.208192	-0.712187	2.663278
C	-4.664986	1.689468	2.121333	C	1.204751	-1.859887	2.626027
C	-5.739744	2.557725	2.174768	C	0.860403	0.581760	3.107670
C	-7.384747	4.017722	1.026015	O	-2.803436	-2.730758	3.290333
C	-7.919992	4.545200	-0.137010	O	2.062157	0.805836	3.031364
C	-7.407359	4.138606	-1.396591	O	-0.032345	1.454432	3.649924
C	-6.392638	3.196749	-1.479270	C	3.608823	1.740775	-0.364163
C	-5.832505	2.613869	-0.303351	C	0.550827	2.698595	4.110276
C	-6.328393	3.061464	0.978772	C	2.651193	-4.585108	-1.749759
O	-3.089781	0.369639	0.871044	C	2.739892	-3.445078	-0.972944
H	-4.183312	1.310018	3.026403	C	2.747073	-2.176493	-1.601069
H	-6.136480	2.885597	3.141176	C	2.715676	-2.009227	-2.987931
H	-7.756767	4.337268	2.005411	C	2.321834	-3.131939	-5.208726
H	-8.726284	5.282885	-0.087761	C	2.143076	-4.286759	-5.955754
H	-7.813298	4.576447	-2.313593	C	2.169386	-5.563407	-5.335964
H	-6.004246	2.902654	-2.456854	C	2.348123	-5.659158	-3.966135
C	4.759982	-0.612102	-0.875965	C	2.516542	-4.491872	-3.164934
C	3.711434	-1.097767	-1.661522	C	2.531556	-3.192636	-3.798367
C	3.869992	-1.508695	-3.007114	O	2.855210	-1.051808	-0.762952
C	5.105186	-1.370251	-3.612638	O	2.214583	1.273859	-0.060898
C	7.449911	-0.558866	-3.556164	C	-1.455860	3.715631	0.108363
C	8.493982	0.060029	-2.889605	C	3.511190	3.251928	-0.528886
C	8.316839	0.491542	-1.549166	C	4.517925	1.303942	0.777503
C	7.117315	0.276207	-0.887429	C	-1.271575	4.788763	1.172433
C	6.026977	-0.378690	-1.534312	C	-0.756670	4.025479	-1.209339
C	6.196915	-0.779286	-2.912812	P	1.521756	-0.067852	-0.606126
O	2.429412	-1.273116	-1.100729	C	-3.726737	-1.849342	-2.515952
H	3.012334	-1.944139	-3.526870	C	-2.818822	-0.864082	-2.172508
H	5.251448	-1.696028	-4.647843	C	-3.201008	0.123000	-1.233670
H	7.565932	-0.879501	-4.597194	C	-4.465912	0.183372	-0.646522

C	-6.649178	-1.025925	-0.284259	H	-0.915445	3.214136	-1.936254
C	-7.506388	-2.074488	-0.587598	H	1.299129	2.416295	-3.428422
C	-7.152182	-3.041924	-1.564056	H	2.963388	2.940580	-5.236605
C	-5.925745	-2.956895	-2.202666	H	4.900475	2.279643	-6.590033
C	-5.012453	-1.903421	-1.902696	H	6.626923	0.597906	-7.229450
C	-5.389245	-0.891090	-0.941106	H	6.642158	-1.653006	-6.123958
O	-2.248220	1.116342	-0.921129	H	4.923400	-2.245532	-4.454991
O	-0.848178	2.462456	0.669307	H	-3.589793	2.701896	3.180917
P	-1.483924	0.988098	0.552330	H	-5.672735	4.087734	2.948066
C	2.859008	-0.649218	-3.581951	H	-7.646072	4.744001	1.645498
C	2.015904	0.388227	-3.177292	H	-9.087050	4.509004	-0.375936
C	2.029026	1.675962	-3.765389	H	-8.497859	2.822795	-2.136166
C	2.948119	1.954920	-4.760255	H	-6.541415	1.343173	-1.855409
C	4.902555	1.283599	-6.134464	H	1.354103	2.498245	4.834868
C	5.863481	0.350429	-6.486071	H	0.958464	3.260654	3.257246
C	5.866250	-0.926154	-5.865253	H	-4.306353	-4.104492	3.282140
C	4.899946	-1.261981	-4.928588	H	-4.236961	-3.081393	1.788077
C	3.879297	-0.335514	-4.559321	H	-3.033532	-4.400961	2.028755
C	3.904852	0.978378	-5.162277	H	0.155256	-2.072669	-0.514414
O	1.044181	0.155538	-2.179800	H	0.906911	-2.642934	1.895450
C	-4.801881	1.304854	0.275644				
C	-3.969324	1.590819	1.360734	R4a_08			
C	-4.267882	2.576227	2.333118	116			
C	-5.416612	3.334148	2.196472	Energy =	-3595.546632394		
C	-7.415737	3.993416	0.882126	Rh	-0.202821	-0.815360	0.477289
C	-8.213090	3.864781	-0.243024	O	-1.419848	-1.734488	2.048062
C	-7.883043	2.903991	-1.234794	C	-2.389466	-2.377454	1.579959
C	-6.785414	2.070197	-1.077931	C	-2.700950	-2.388324	0.110777
C	-5.955752	2.155922	0.080309	C	-1.439817	-2.117138	-0.721300
C	-6.269389	3.165619	1.066911	C	-0.438396	-3.260304	-0.685750
O	-2.795202	0.835610	1.576076	C	-1.801740	-1.581190	-2.087347
C	-3.654474	-3.645124	2.530221	O	-3.217567	-3.068696	2.348242
H	-1.723802	-0.142972	3.510386	O	-2.882148	-1.064742	-2.364483
H	1.250270	-2.363905	3.613784	O	-0.817050	-1.773140	-3.000348
H	2.210714	-1.496802	2.375265	C	-1.130762	-1.295832	-4.332330
H	-0.912730	-1.435087	4.413921	C	-2.970206	-3.020988	3.787743
H	2.660287	-5.574287	-1.280414	H	-3.461304	-1.607819	-0.080717
H	2.823844	-3.493510	0.115495	C	2.448124	1.187493	-2.933035
H	2.291154	-2.157528	-5.701488	H	-0.962463	-4.232336	-0.794713
H	1.977011	-4.211323	-7.034744	H	0.322857	-3.174506	-1.469033
H	2.036262	-6.466272	-5.939246	H	-3.174665	-3.347647	-0.170565
H	2.351418	-6.636449	-3.471506	H	-0.270305	-1.581471	-4.949676
H	3.915758	1.269712	-1.311024	H	-1.260431	-0.203330	-4.323048
H	-2.526224	3.518833	-0.060075	H	-2.052656	-1.769904	-4.700842
H	-0.274046	3.246752	4.582523	C	3.976870	0.096390	3.362575
H	4.510994	3.662170	-0.749861	C	3.256374	0.613899	2.302207
H	2.840030	3.517987	-1.360888	C	3.507423	0.132407	0.994760
H	3.141709	3.720645	0.397951	C	4.478507	-0.828773	0.704336
H	-3.455265	-2.616014	-3.248746	C	6.064838	-2.537285	1.661932
H	-1.816121	-0.821681	-2.605279	C	6.709841	-3.097488	2.754465
H	-6.936931	-0.292606	0.472483	C	6.499649	-2.586223	4.061876
H	-8.465617	-2.155005	-0.067093	C	5.619054	-1.535244	4.255630
H	-7.842709	-3.856516	-1.801521	C	4.924663	-0.947589	3.157650
H	-5.630911	-3.707266	-2.943914	C	5.170127	-1.436783	1.819527
H	5.535989	1.692647	0.602313	H	3.806970	0.466985	4.378671
H	4.145730	1.692185	1.737773	H	2.502365	1.392907	2.439870
H	4.574139	0.206802	0.838568	O	2.764485	0.707438	-0.052647
H	-1.699160	5.739677	0.812649	H	6.232349	-2.949534	0.664609
H	-1.785336	4.513068	2.106714	H	7.385059	-3.945597	2.605937
H	-0.201652	4.950304	1.384203	H	7.022431	-3.031903	4.913329
H	-1.166595	4.957496	-1.634510	H	5.430951	-1.144482	5.261419
H	0.325494	4.162281	-1.047737	O	1.342171	0.592700	-2.114013

C	-1.246007	3.589140	-0.702735	C	-3.852890	6.233386	3.561090
C	2.121271	0.868311	-4.386158	C	-5.150480	6.604267	3.249940
C	2.529555	2.679573	-2.636912	C	-5.987949	5.706021	2.538597
H	3.386583	0.694674	-2.636905	C	-5.532901	4.446542	2.176583
C	-0.191451	4.617900	-0.316551	C	-4.210817	4.019145	2.502878
C	-1.579543	3.563366	-2.189401	C	-3.345845	4.954416	3.186727
H	-2.160759	3.736378	-0.109073	O	-1.766199	1.260945	1.930407
H	-3.760517	-3.641685	4.224899	H	-0.443314	3.098943	3.193433
H	-3.037180	-1.982857	4.142760	H	-1.353263	5.300928	3.995692
H	2.902407	1.291073	-5.404200	H	-3.187573	6.924226	4.089814
H	2.084001	-0.219265	-4.553911	H	-5.526212	7.590512	3.537577
H	1.153062	1.309547	-4.675784	H	-7.003308	6.010637	2.267812
P	1.579537	-0.229119	-0.745251	H	-6.189620	3.773416	1.621765
C	-6.307064	-0.153093	0.180725	H	-1.974352	-3.431590	4.008139
C	-5.089668	0.183334	-0.381717	H	1.124236	-1.180904	1.408804
C	-4.215388	1.053654	0.318863	H	0.087332	-3.308139	0.294627
C	-4.559413	1.661593	1.532328				
C	-6.140968	1.622843	3.495007	R2a_08			
C	-7.319339	1.184402	4.081295	l16			
C	-8.208042	0.332224	3.375466	Energy =	-3595.551205922		
C	-7.882740	-0.092452	2.097832	Rh	-0.158271	-0.813025	0.534100
C	-6.670292	0.322317	1.473841	O	-1.366958	-1.742774	2.128916
C	-5.783895	1.225888	2.170984	C	-2.351358	-2.366937	1.663250
H	-6.998536	-0.809265	-0.358409	C	-2.685249	-2.347012	0.200397
H	-4.770268	-0.192160	-1.356453	C	-1.425980	-2.099799	-0.643532
O	-3.011656	1.364599	-0.330084	C	-0.435310	-3.255910	-0.620105
H	-5.466422	2.272082	4.057682	C	-1.825948	-1.627331	-2.027540
H	-7.564064	1.497963	5.100712	O	-3.175416	-3.065782	2.430722
H	-9.139727	0.003747	3.845495	O	-2.979667	-1.365197	-2.349864
H	-8.548570	-0.765886	1.547649	O	-0.777444	-1.588409	-2.887681
O	-0.675306	2.254396	-0.322180	C	2.249932	1.611679	-2.728889
H	3.353462	3.123200	-3.221983	C	-1.125694	-1.191268	-4.236992
H	1.593957	3.187540	-2.922887	C	4.346311	-0.305851	3.134068
H	2.727191	2.857826	-1.569522	C	3.526158	0.322802	2.215712
H	-0.556576	5.626558	-0.573496	C	3.645789	-0.010058	0.845351
H	0.008580	4.588868	0.765636	C	4.579331	-0.926473	0.355153
H	0.750417	4.441355	-0.860283	C	6.238454	-2.725548	0.954571
H	-1.979404	4.546114	-2.492682	C	6.980664	-3.403745	1.909585
H	-0.676951	3.358342	-2.787801	C	6.902900	-3.042529	3.280174
H	-2.338237	2.797816	-2.410559	C	6.055369	-2.021450	3.675149
P	-1.498586	1.017739	0.302683	C	5.262222	-1.316446	2.723142
C	4.757412	-1.209946	-0.709617	C	5.372759	-1.651843	1.321232
C	3.720827	-1.626469	-1.549027	O	2.807175	0.673756	-0.053899
C	3.935127	-2.125771	-2.857343	O	1.243355	0.766215	-2.010110
C	5.217876	-2.149482	-3.371957	C	1.928761	1.482713	-4.212259
C	7.624523	-1.577893	-3.				

H	-3.198231	-3.281211	-0.092131	H	-5.614149	2.679145	-1.455086
H	-0.184304	-1.223773	-4.798522	H	-3.990845	2.540808	-2.185952
H	4.280625	-0.050219	4.196573	H	-5.011604	1.081794	-1.998790
H	2.793553	1.076747	2.514343	H	-5.978238	1.798520	0.989999
H	6.303680	-3.023458	-0.094230	H	-5.490672	0.183626	0.407266
H	7.630007	-4.229421	1.602711	H	-4.635733	0.944407	1.796476
H	7.501488	-3.580446	4.021318	H	-1.616934	3.772712	-2.133201
H	5.969552	-1.745761	4.731781	H	-2.502960	6.109612	-1.881707
H	3.247122	1.196481	-2.514849	H	-3.164024	7.980484	-0.434786
H	-1.547633	-0.175110	-4.239287	H	-3.395347	8.990485	1.832852
H	-1.860939	-1.891096	-4.662557	H	-2.639286	7.708071	3.850707
H	2.633006	2.100072	-4.795163	H	-1.602692	5.481037	3.608968
H	2.028506	0.439202	-4.549754				
H	0.905307	1.834529	-4.423795	S2a_08			
H	2.873934	3.675779	-2.731035	116			
H	1.136797	3.445461	-2.372848	Energy = -3595.548751491			
H	2.368496	3.077605	-1.124834	Rh	-0.170902	-0.792809	0.492540
H	2.743873	-2.111535	-3.766257	C	-3.601891	-2.189245	-2.506388
H	4.953870	-2.026873	-4.960457	C	-2.697148	-1.171423	-2.265098
H	7.346112	-1.473509	-4.954138	C	-3.103411	-0.064028	-1.484325
H	9.378006	-0.651495	-3.766268	C	-4.385363	0.077425	-0.951699
H	9.229076	0.002831	-1.350098	C	-6.594884	-1.058921	-0.516600
H	7.102669	-0.219734	-0.116133	C	-7.453852	-2.130765	-0.715100
H	-3.665997	-3.727209	4.292739	C	-7.075669	-3.220280	-1.542535
H	-2.995372	-2.047104	4.263435	C	-5.824748	-3.229351	-2.137602
H	-1.891169	-3.456748	4.052651	C	-4.910597	-2.152338	-1.942621
H	1.198636	-1.235955	1.407957	C	-5.309949	-1.020128	-1.136735
H	0.089907	-3.324575	0.358301	H	-3.311096	-3.050700	-3.116244
C	-4.141952	1.799034	-0.144873	H	-1.676848	-1.196015	-2.655858
C	-4.720574	2.037030	-1.533036	O	-2.156010	0.961947	-1.278080
C	-5.113884	1.133473	0.822512	H	-6.901477	-0.232105	0.127832
C	0.494088	1.866797	4.589672	H	-8.433061	-2.134953	-0.226579
C	-0.454058	1.309132	3.751901	H	-7.767054	-4.053470	-1.698947
C	-0.942503	2.067390	2.662053	H	-5.511141	-4.072672	-2.761989
C	-0.530594	3.372325	2.386790	O	-0.808714	2.508972	0.167356
C	1.140410	5.182594	2.925775	C	-1.451964	3.688168	-0.509828
C	2.148101	5.683892	3.736635	C	1.898984	-0.204019	-3.605317
C	2.593905	4.959478	4.872315	C	-1.300498	4.863691	0.446406
C	2.041277	3.722356	5.158089	C	-0.767774	3.893206	-1.855018
C	1.018300	3.167559	4.334411	H	-2.516175	3.445941	-0.653701
C	0.526324	3.925727	3.205951	C	1.984537	-1.429259	-4.507210
O	-1.939325	1.470328	1.863463	C	1.101438	0.946710	-4.208318
O	-2.979745	0.868365	-0.337890	H	2.905512	0.134609	-3.315902
P	-1.518046	0.953135	0.333964	H	-1.764752	5.759673	0.001251
C	-1.148808	4.125775	1.259775	H	-1.798082	4.661332	1.407798
C	-1.192498	3.565689	-0.019206	H	-0.236462	5.086993	0.632096
C	-1.662492	4.264373	-1.158072	H	-1.208009	4.769891	-2.360410
C	-2.151491	5.549270	-1.009210	P	-1.432092	1.020693	0.220742
C	-2.812195	7.442905	0.452220	C	3.820505	3.723748	1.043311
C	-2.943869	8.001392	1.712528	C	2.863296	3.053548	0.308159
C	-2.508272	7.277674	2.853268	C	3.198406	1.835559	-0.328817
C	-1.923411	6.027279	2.719279	C	4.483854	1.289251	-0.297851
C	-1.747884	5.430710	1.434829	C	6.729410	1.347165	0.845420
C	-2.233973	6.151161	0.279665	C	7.636806	1.980623	1.681479
O	-0.689912	2.265862	-0.246872	C	7.321644	3.226196	2.283840
H	-3.750487	2.733210	0.286063	C	6.082348	3.801929	2.060626
H	0.869675	1.302072	5.449550	C	5.117874	3.166331	1.225402
H	-0.841049	0.298903	3.905507	C	5.452472	1.922192	0.572601
H	0.814923	5.752971	2.052883	H	3.581072	4.677258	1.525880
H	2.605604	6.648099	3.494879	H	1.843067	3.428297	0.201357
H	3.380645	5.373209	5.510090	O	2.181558	1.255154	-1.109449
H	2.389503	3.142996	6.020231	H	6.987707	0.383952	0.399936

```

H   8.604536   1.510638   1.882091
H   8.050816   3.719396   2.933476
H   5.815126   4.751417   2.537249
O   1.196685  -0.659882  -2.364604
H   0.311611   4.076746  -1.723508
H  -0.906762   3.015520  -2.503470
H   2.492722  -1.157145  -5.447757
H   2.558665  -2.235031  -4.024747
H   0.977567  -1.804831  -4.754374
H   1.583741   1.281168  -5.142577
H   0.073939   0.625070  -4.447416
H   1.060292   1.801382  -3.516336
O  -1.708699  -2.026876   1.427205
C  -1.863336  -1.772332   2.645356
P   1.563715  -0.262965  -0.839599
C  -4.736749   1.304547  -0.184214
C  -3.937429   1.710591   0.886942
C  -4.263550   2.799590   1.731088
C  -5.399186   3.543168   1.467086
C  -7.338616   4.063916   0.008405
C  -8.094312   3.811652  -1.124348
C  -7.740852   2.738287  -1.983365
C  -6.661298   1.919258  -1.688168
C  -5.873685   2.133906  -0.517475
C  -6.211423   3.253432   0.332531
O  -2.770078   0.987288   1.220136
H  -3.615307   3.017553   2.583737
H  -5.674639   4.378584   2.119030
H  -7.587627   4.900606   0.669709
H  -8.953633   4.444191  -1.365655
H  -8.323442   2.557376  -2.891718
H  -6.398629   1.103319  -2.365212
C   4.838784   0.102768  -1.126195
C   4.067899  -1.058697  -1.073807
C   4.416920  -2.262631  -1.731615
C   5.554079  -2.295065  -2.517266
C   7.457583  -1.123262  -3.592542
C   8.181980   0.033105  -3.827573
C   7.799240   1.244507  -3.194803
C   6.725210   1.279003  -2.318000
C   5.970638   0.102363  -2.031076
C   6.334846  -1.119367  -2.713769
O   2.886457  -1.093953  -0.296680
H   3.786423  -3.143727  -1.586895
H   5.852289  -3.221673  -3.018369
H   7.727720  -2.060815  -4.090350
H   9.038143   0.019124  -4.508561
H   8.355012   2.163804  -3.403325
H   6.441749   2.221798  -1.846022
C  -1.099100  -0.672716   3.324814
C   0.213073  -0.383409   2.576420
C   1.256045  -1.484652   2.692655
C   0.806881   0.979523   2.861587
O  -2.726004  -2.431628   3.402583
O   1.984302   1.265494   2.686178
O  -0.106304   1.845407   3.386252
C   0.429049   3.148232   3.724927
C  -3.528982  -3.459208   2.741916
H  -1.750376   0.217684   3.316806
H   1.301043  -1.859089   3.736020
H   2.249469  -1.118705   2.401810
H  -0.916694  -0.925116   4.385727

```

```

H  -0.404904   3.691835   4.186796
H   1.267696   3.044314   4.429625
H   0.779374   3.660552   2.817029
H  -4.158899  -3.872129   3.538028
H  -4.137361  -3.002743   1.948423
H  -2.870392  -4.230036   2.316914
H   0.201443  -2.146895  -0.397685
H   1.002602  -2.365734   2.062712

```

B.2.9 Strukturen der _09 Spezies

```

R1c_09
116
Energy = -3595.576245523
Rh  -0.005015   1.043439   1.275712
C   -3.673865  -1.038967   3.318194
C   -3.390936   3.476226  -1.486215
C   -3.237007   2.898234  -0.238824
C   -3.498416   1.515616  -0.085054
C   -3.948104   0.697186  -1.123209
C   -4.331470   0.506134  -3.606291
C   -4.399178   1.096923  -4.859114
C   -4.174970   2.489866  -5.017538
H  -0.830887   2.341662   1.681226
C   -3.858885   3.265887  -3.914880
C   -3.763523   2.689024  -2.614082
C   -4.032279   1.278295  -2.443787
O   -3.336702   0.964633   1.203371
O   -2.308437  -0.654181   2.830418
C   1.648224  -3.544693   1.270921
C   -3.523844  -2.423207   3.935441
C   -4.134317   0.032013   4.299550
C   2.184304  -4.052229   2.604062
C   0.568677  -4.431226   0.660182
P  -1.970274   0.046807   1.424927
C   0.879308   1.142176  -3.446106
C   0.558533   0.168042  -2.516797
C   1.602856  -0.497905  -1.830300
C   2.957152  -0.246831  -2.055500
C   4.636351   1.269014  -3.167800
C   4.922888   2.304587  -4.046059
C   3.886614   2.946146  -4.774281
C   2.571195   2.554349  -4.587965
C   2.237395   1.506351  -3.679864
C   3.294904   0.821608  -2.969006
O   1.239710  -1.471834  -0.875391
O   1.037479  -2.208378   1.542667
P   1.302330  -0.868459   0.679456
C  -4.289867  -0.726144  -0.842223
C  -3.360486  -1.555366  -0.210579
C  -3.574308  -2.937455   0.009492
C  -4.777711  -3.503210  -0.369547
C  -7.081880  -3.265708  -1.259124
C  -8.103429  -2.476135  -1.759492
C  -7.892595  -1.084804  -1.944546
C  -6.664687  -0.508318  -1.655365
C  -5.581047  -1.294431  -1.161869
C  -5.812338  -2.703430  -0.935055

```

O	-2.101454	-1.047414	0.179786	H	0.781240	-0.071819	3.498267
C	3.982622	-1.043327	-1.322681	H	-0.646213	0.963073	3.838476
C	3.941703	-1.123917	0.072803	H	3.315062	2.755983	3.709685
C	4.940385	-1.778680	0.835765	H	0.705904	3.019017	3.670862
C	5.984214	-2.413603	0.188990	H	3.369849	0.154234	7.198649
C	7.077491	-3.164746	-1.908797	H	2.670918	1.766622	7.633005
C	7.102598	-3.243748	-3.291148	H	1.593684	0.338182	7.500322
C	6.080097	-2.617798	-4.050923	H	4.515508	4.480389	-0.052445
C	5.068327	-1.903375	-3.426583	H	3.708378	2.991537	-0.692807
C	5.023832	-1.778765	-2.005843	H	2.714297	4.421918	-0.225024
C	6.043040	-2.452785	-1.233889				
O	2.929796	-0.471068	0.801622	R3c_09			
H	-3.210876	4.547692	-1.622416	116			
H	-2.934958	3.479928	0.635539	Energy = -3595.572208188			
H	-4.501584	-0.568010	-3.503022	Rh	-0.633485	-1.823490	-0.059397
H	-4.626176	0.481377	-5.734864	C	-3.274252	-1.173678	-3.923499
H	-4.243330	2.944397	-6.010478	C	-2.158964	-1.872592	-3.494947
H	-3.668090	4.338998	-4.025294	C	-0.880634	-1.282798	-3.645933
H	-4.340590	-1.073842	2.442245	C	-0.669049	-0.034422	-4.230870
H	2.472498	-3.399343	0.553754	C	-1.753770	2.069519	-5.095622
H	-4.499569	-2.759670	4.324077	C	-2.895885	2.772452	-5.451868
H	-3.178623	-3.155264	3.188824	C	-4.178987	2.173882	-5.347766
H	-2.806563	-2.401339	4.772812	C	-4.297708	0.883000	-4.860709
H	0.086892	1.657213	-3.998460	C	-3.146957	0.135992	-4.470548
H	-0.476693	-0.117455	-2.310879	C	-1.834960	0.727804	-4.615192
H	5.445950	0.784783	-2.616891	H	-4.271276	-1.617687	-3.835256
H	5.959826	2.628140	-4.179426	H	-2.230264	-2.877560	-3.069986
H	4.128376	3.752842	-5.472673	O	0.234578	-2.022420	-3.194153
H	1.760138	3.051694	-5.130551	H	-0.774709	2.546295	-5.180131
H	-5.129671	-0.233795	4.694368	H	-2.805556	3.799958	-5.817297
H	-3.435859	0.108025	5.149648	H	-5.069715	2.736319	-5.643070
H	-4.210703	1.013633	3.807201	H	-5.282674	0.414553	-4.760382
H	2.644118	-5.045414	2.466770	O	2.165606	-2.351563	-1.589552
H	2.948965	-3.370998	3.010425	C	3.131571	-2.625577	-2.703079
H	1.368804	-4.146881	3.340385	C	-1.917970	2.769978	-0.147100
H	0.983434	-5.432107	0.451476	C	4.519166	-2.387366	-2.122673
H	-0.275404	-4.546936	1.360924	C	2.894097	-4.053945	-3.178347
H	0.199288	-4.004263	-0.284644	H	2.920058	-1.907201	-3.511223
H	-2.772932	-3.528818	0.459600	C	-1.349200	3.665950	-1.239796
H	-4.955215	-4.573207	-0.219398	C	-3.434259	2.618053	-0.204109
H	-7.237108	-4.336903	-1.091117	H	-1.603057	3.120156	0.848045
H	-9.075276	-2.917713	-1.998790	H	5.280074	-2.577527	-2.898005
H	-8.709497	-0.457290	-2.313664	H	4.632787	-1.348718	-1.773881
H	-6.525005	0.566253	-1.793192	H	4.709123	-3.068619	-1.277070
H	4.868619	-1.757321	1.926400	H	3.606909	-4.295947	-3.985080
H	6.768993	-2.912117	0.767442	P	0.796543	-1.521839	-1.714227
H	7.847941	-3.660468	-1.308418	C	-1.623089	-0.525337	5.452411
H	7.898459	-3.797595	-3.797748	C	-1.983256	-0.267346	4.141711
H	6.085450	-2.704688	-5.141713	C	-1.236886	0.664395	3.376334
H	4.283388	-1.438508	-4.027644	C	-0.169022	1.392658	3.909458
O	1.650590	2.325788	0.912569	C	1.460295	1.602918	5.819303
C	2.563010	2.599730	1.724075	C	1.856748	1.261583	7.104029
C	2.622191	2.111015	3.147896	C	1.090203	0.357302	7.884755
C	1.227649	2.057289	3.810447	C	-0.050475	-0.216834	7.348790
C	0.323508	0.916204	3.326677	C	-0.475742	0.096579	6.024485
C	1.335517	1.885283	5.342164	C	0.275915	1.052651	5.243166
O	3.585933	3.369125	1.376231	H	-2.209559	-1.222041	6.060790
O	0.566187	2.394945	6.138458	H	-2.858244	-0.735159	3.682944
O	2.358929	1.056371	5.676789	O	-1.676546	0.897671	2.066488
C	2.501179	0.817428	7.103322	H	2.065646	2.295666	5.231102
C	3.623919	3.844877	-0.004234	H	2.772319	1.693901	7.518680
H	3.070514	1.100103	3.125917	H	1.407498	0.108398	8.901651

H	-0.642061	-0.930299	7.932534	H	2.712228	-3.597886	5.725373
O	-1.320378	1.416224	-0.357384	H	2.774390	-5.236336	4.956311
H	3.049722	-4.768025	-2.352840	H	3.722590	-3.885775	4.250705
H	1.873059	-4.175255	-3.571498	H	-5.260103	-3.968611	2.744005
H	-1.767666	4.681425	-1.135008	H	-4.698762	-2.353881	2.148186
H	-0.253261	3.735805	-1.161874	H	-4.531128	-3.805441	1.095393
H	-1.614854	3.280830	-2.238053				
H	-3.910958	3.605232	-0.077589	R4c_09			
H	-3.744963	2.206517	-1.178683	116			
H	-3.793827	1.956661	0.599369	Energy = -3595.574005614			
H	-0.583958	-3.301378	-0.663669	Rh	-0.159431	-1.167415	-0.058979
O	-2.238065	-2.503287	1.173283	H	0.555816	-2.536768	-0.416825
P	-0.721703	0.421711	0.764092	O	-1.800618	-2.346277	0.631755
C	0.724176	0.471874	-4.384919	C	-1.992792	-2.710258	1.813026
C	1.577783	0.515795	-3.278724	C	-1.095407	-2.361763	2.971184
C	2.881901	1.066819	-3.329371	C	0.400536	-2.462417	2.588860
C	3.368996	1.547235	-4.530841	C	0.919033	-1.313786	1.716056
C	3.116464	1.877614	-6.977662	C	1.279697	-2.493335	3.859357
C	2.380766	1.732469	-8.141777	O	-3.032827	-3.463949	2.144424
C	1.090213	1.143589	-8.091026	O	2.193057	-3.278244	4.043441
C	0.543612	0.734874	-6.883588	O	0.915577	-1.510807	4.726524
C	1.261188	0.892028	-5.660231	C	1.706450	-1.457680	5.944300
C	2.592387	1.452914	-5.721504	C	-3.953380	-3.840715	1.074820
O	1.139076	0.074220	-2.013803	C	1.947599	0.635780	-3.717545
H	3.472700	1.105721	-2.410419	H	-1.336169	-1.328151	3.282417
H	4.370784	1.985582	-4.583292	H	0.808397	-0.339464	2.217899
H	4.122238	2.310132	-7.004535	H	1.976466	-1.487594	1.469822
H	2.795862	2.055959	-9.100829	H	-1.344380	-3.022361	3.815971
H	0.521778	1.003501	-9.015559	H	0.596951	-3.424798	2.087671
H	-0.445937	0.272871	-6.865753	H	1.286760	-0.625629	6.523450
C	0.476940	2.473278	3.110378	C	3.469155	2.115167	2.514885
C	0.956011	2.202333	1.827876	C	2.653132	1.956566	1.409479
C	1.673794	3.143096	1.050626	C	3.136927	1.232543	0.293891
C	1.880234	4.414868	1.553105	C	4.421465	0.688517	0.229359
C	1.482296	6.129164	3.302310	C	6.503110	0.113866	1.530373
C	0.907776	6.514520	4.501886	C	7.263649	0.215773	2.685862
C	0.155116	5.576592	5.255829	C	6.809665	0.986054	3.788437
C	0.011370	4.267690	4.820088	C	5.579426	1.618816	3.724409
C	0.610043	3.827391	3.601808	C	4.762286	1.518357	2.559958
C	1.338683	4.797181	2.814593	C	5.243128	0.774399	1.417519
O	0.783271	0.921766	1.268803	H	3.118773	2.686109	3.381183
H	2.056680	2.834194	0.074917	H	1.642277	2.368733	1.365962
H	2.445268	5.152042	0.973112	O	2.273751	1.126739	-0.818984
H	2.047892	6.847532	2.699291	H	6.864692	-0.491004	0.696396
H	1.019870	7.541273	4.862334	H	8.222131	-0.308170	2.748473
H	-0.322093	5.890423	6.189261	H	7.425576	1.066391	4.688956
H	-0.579975	3.563455	5.409383	H	5.206785	2.199955	4.574906
C	-2.149598	-3.228570	2.188917	O	1.180095	-0.149531	-2.694573
C	-0.874853	-3.569716	2.915457	C	-1.429158	3.560652	0.807638
C	0.335701	-3.785945	1.983186	C	1.956606	-0.214148	-4.981197
C	0.821817	-2.532370	1.244523	C	1.262275	1.986697	-3.883424
C	1.559877	-4.310089	2.769349	H	2.970084	0.767241	-3.331087
O	-3.237468	-3.745723	2.754201	C	-1.184665	4.203472	2.167049
O	2.372259	-5.094757	2.310690	C	-0.838444	4.340227	-0.361481
O	1.638810	-3.745183	4.000990	H	-2.506531	3.392024	0.650483
C	2.795671	-4.150192	4.781545	H	2.507711	0.316318	-5.775899
C	-4.521012	-3.439104	2.132005	H	2.452035	-1.181698	-4.805481
H	-0.669285	-2.729343	3.605868	H	0.929374	-0.398271	-5.337238
H	1.033128	-1.700151	1.935514	H	1.801623	2.581618	-4.640146
H	1.716496	-2.771492	0.654427	H	0.221432	1.858533	-4.225443
H	-1.062729	-4.454008	3.544169	P	1.580842	-0.348113	-1.143261
H	0.114033	-4.577216	1.249182	C	-3.197448	-1.534952	-3.117547

C	-2.445757	-0.494261	-2.596967	H	-4.430982	-2.944219	0.654746
C	-3.003760	0.307791	-1.570618	H	-3.407923	-4.381101	0.288063
C	-4.280872	0.112317	-1.045647				
C	-6.311565	-1.380260	-1.000381				
C	-7.012398	-2.469494	-1.499000	S2c_09			
C	-6.488015	-3.243479	-2.567504	116			
C	-5.251394	-2.925580	-3.104000	Energy = -3595.572611999			
C	-4.495633	-1.823147	-2.606357	C	5.801725	1.552041	-2.791343
C	-5.046056	-1.006702	-1.545922	C	5.266141	0.407780	-3.451106
H	-2.792350	-2.158924	-3.921085	C	4.261941	-0.340680	-2.864746
H	-1.445137	-0.259151	-2.971920	C	3.798447	0.015897	-1.575237
O	-2.209168	1.348223	-1.042809	C	4.345357	1.059160	-0.823990
H	-6.731155	-0.795369	-0.178924	C	5.331257	1.897801	-1.468488
H	-7.981523	-2.732989	-1.064087	C	6.781364	2.373455	-3.422562
H	-7.056863	-4.092611	-2.957804	C	7.264991	3.511610	-2.799258
H	-4.827198	-3.524150	-3.917509	C	6.775826	3.875400	-1.517267
O	-0.760999	2.219994	0.845570	C	5.836122	3.089430	-0.867027
H	1.264202	2.548353	-2.937152	C	3.895154	1.283559	0.579614
H	-1.669212	5.193659	2.199809	C	2.537479	1.433287	0.865994
H	-1.601505	3.588121	2.980035	C	2.036681	1.717086	2.158446
H	-0.105479	4.343665	2.346811	C	2.923570	1.820205	3.214585
H	-1.294943	5.343782	-0.404792	C	4.317773	1.600167	3.020163
H	0.250725	4.461094	-0.238466	C	4.816510	1.309937	1.694481
H	-1.037580	3.828321	-1.315253	C	6.205136	1.014549	1.551129
H	1.618030	-2.404576	6.497543	C	7.059104	1.042289	2.643745
H	2.764322	-1.276339	5.702036	C	6.573573	1.369301	3.936729
P	-1.431494	0.833120	0.346583	C	5.227146	1.637154	4.117620
C	4.885799	0.009060	-1.012245	O	1.591234	1.349485	-0.179444
C	4.120680	-1.015321	-1.572409	P	1.267156	-0.164377	-0.778645
C	4.550167	-1.796576	-2.672071	O	2.783846	-0.790493	-1.020306
C	5.760316	-1.504917	-3.273530	Rh	0.100469	-1.475362	0.546373
C	7.757844	-0.049768	-3.493839	P	-2.142059	-1.097785	-0.231675
C	8.497776	1.048095	-3.088749	O	-2.381151	0.132160	-1.326004
C	8.046912	1.839255	-2.000373	C	-3.611942	0.796595	-1.481168
C	6.884661	1.511567	-1.318552	C	-4.134722	1.585827	-0.452116
C	6.108103	0.375029	-1.693285	C	-5.428945	2.194565	-0.666268
C	6.549098	-0.405414	-2.827227	C	-6.066949	2.073713	-1.957459
O	2.877608	-1.369058	-1.003555	C	-5.424658	1.330923	-2.989718
H	3.921263	-2.625600	-3.007162	C	-4.225500	0.684618	-2.753873
H	6.116569	-2.107664	-4.115473	C	-7.339341	2.680346	-2.170075
H	8.084285	-0.658721	-4.343830	C	-7.984434	3.358657	-1.149709
H	9.420993	1.314389	-3.611918	C	-7.378678	3.445989	0.130717
H	8.619856	2.721249	-1.697800	C	-6.134330	2.880760	0.367132
H	6.548368	2.137608	-0.488501	C	-3.374773	1.747953	0.819438
C	-4.758517	1.003359	0.049890	C	-2.949938	0.611432	1.510344
C	-3.985196	1.154807	1.206915	C	-2.267422	0.667337	2.750764
C	-4.425593	1.894320	2.332867	C	-1.983766	1.900894	3.311955
C	-5.644974	2.544885	2.285767	C	-2.326958	3.106151	2.633175
C	-7.666118	3.241898	1.022905	C	-3.011114	3.038349	1.360348
C	-8.413031	3.249045	-0.143362	C	-3.262521	4.261247	0.669123
C	-7.954185	2.530946	-1.278804	C	-2.898941	5.481458	1.219055
C	-6.776747	1.799440	-1.227296	C	-2.267487	5.546928	2.488843
C	-5.992945	1.750076	-0.035801	C	-1.983869	4.379312	3.176787
C	-6.442693	2.514234	1.105506	O	-3.227479	-0.662015	0.973391
O	-2.745935	0.499065	1.336153	C	0.532738	-3.119922	-0.650614
H	-3.792262	1.924322	3.223387	C	0.689149	-4.382651	0.193413
H	-6.001577	3.109522	3.153380	C	-0.575308	-4.790978	0.993734
H	-7.998161	3.807101	1.900330	C	-0.847816	-3.886068	2.165865
H	-9.347022	3.815999	-0.196649	O	-0.720725	-2.641275	2.157984
H	-8.531990	2.559203	-2.207576	C	1.082234	-5.548279	-0.745599
H	-6.432393	1.262490	-2.114311	O	1.376256	-6.658815	-0.022798
H	-4.690443	-4.489538	1.561918	C	1.777949	-7.810925	-0.812018
				O	-1.267523	-4.530431	3.250015

C	-1.586314	-3.726677	4.424065	116		
O	1.135533	-5.481285	-1.963224	Energy =	-3595.574107065	
O	-2.852032	-2.453085	-0.774854	Rh	0.303526	-0.943217
C	-4.306590	-2.610696	-1.083477	C	-2.507217	1.635963
C	-4.937445	-3.428578	0.038073	C	-2.030576	1.816793
C	-4.387295	-3.273202	-2.453144	C	-2.825451	1.402932
O	0.603613	0.181669	-2.199838	C	-4.098342	0.847156
C	0.986520	1.308926	-3.111096	C	-5.783338	-0.114025
C	-0.002585	2.447284	-2.892374	C	-6.199762	-0.351934
C	0.962396	0.730742	-4.520275	C	-5.426580	0.095561
H	-1.868310	-4.455540	5.192513	C	-4.229184	0.754734
H	-0.703827	-3.147918	4.733284	C	-3.762992	1.003085
H	-1.459703	-4.731588	0.329263	C	-4.568051	0.584905
H	-0.308551	-3.203372	-1.355453	H	-1.910655	1.957436
H	1.461266	-2.931954	-1.205523	H	-1.058943	2.274260
H	1.979862	-8.603015	-0.080435	O	-2.305185	1.618026
H	2.680552	-7.574817	-1.395207	H	-6.388016	-0.471299
H	-1.480968	1.962951	4.282920	H	-7.134010	-0.893578
H	-1.997173	-0.269471	3.246030	H	-5.772065	-0.091843
H	-3.742091	4.229624	-0.311457	H	-3.611290	1.086574
H	-3.099107	6.404014	0.665733	O	-1.611979	0.836240
H	-1.995934	6.517573	2.914159	C	-2.573563	1.761866
H	-1.480114	4.413864	4.148798	C	1.870165	3.456326
H	-4.753345	-1.604192	-1.115520	C	-2.800052	1.195806
H	2.006245	1.624912	-2.839969	C	-1.964128	3.158907
H	0.969264	-8.104724	-1.498068	H	-3.510119	1.749681
H	-0.495045	-5.825204	1.358502	C	1.274611	4.366855
H	-5.444044	-3.413866	-2.736466	C	1.764140	4.010778
H	-3.901943	-2.653659	-3.223533	H	2.916962	3.213529
H	-3.898308	-4.261475	-2.438764	H	-3.499506	1.844447
H	2.559512	2.054139	4.220477	H	-3.233419	0.184477
H	0.960766	1.866299	2.286962	H	-1.851550	1.151341
H	6.595415	0.751484	0.565696	H	-2.643449	3.862360
H	8.118456	0.804852	2.506593	P	-1.711789	0.271028
H	7.260476	1.395556	4.787759	C	4.892044	-1.870646
H	4.834437	1.870386	5.113201	C	3.898787	-0.917742
H	-6.012228	-3.571710	-0.166099	C	3.911277	-0.054449
H	-4.467890	-4.424745	0.106476	C	4.901840	-0.082595
H	-4.836825	-2.912189	1.005308	C	6.854191	-1.368248
H	1.227606	1.517964	-5.245915	C	7.787623	-2.387987
H	1.685487	-0.093144	-4.624634	C	7.812711	-3.226197
H	-0.043693	0.354256	-4.768328	C	6.876396	-3.045898
H	0.248040	3.283236	-3.567965	C	5.890509	-2.020269
H	-1.029970	2.115715	-3.112177	C	5.891306	-1.134668
H	0.040144	2.815166	-1.856215	H	4.908721	-2.536500
H	-3.728449	0.092365	-3.526846	H	3.109952	-0.799829
H	-5.904709	1.260666	-3.971341	O	2.885015	0.909932
H	-7.803795	2.587579	-3.157752	H	6.845103	-0.739860
H	-8.963490	3.814838	-1.323305	H	8.510547	-2.549189
H	-7.901025	3.959918	0.943396	H	8.562188	-4.019067
H	-5.689254	2.948369	1.362416	H	6.869790	-3.698452
H	3.824547	-1.211192	-3.360349	O	1.082768	2.179254
H	5.646868	0.138423	-4.441694	H	-0.997875	3.162962
H	7.135961	2.090596	-4.419465	H	-1.812136	3.511790
H	8.012185	4.137093	-3.296553	H	1.805059	5.333791
H	7.140349	4.789064	-1.037928	H	1.376791	3.925129
H	5.464453	3.389210	0.115395	H	0.207279	4.557610
H	1.534004	-1.764058	1.162335	H	2.321503	4.960717
H	-2.424018	-3.051069	4.197383	H	0.711726	4.207792
H	1.530157	-4.265058	0.902616	H	2.192191	3.308306
				C	-0.015434	-1.374042
				C	-0.269870	-2.867512

S4c_09

P	1.703407	0.690663	0.340705	C	2.273605	0.209424	3.167562
C	-4.898066	0.512400	0.279192	C	1.833729	-1.195107	3.432803
C	-4.347853	-0.299016	1.274268	C	0.341192	-1.372699	3.040112
C	-5.081031	-0.744006	2.401697	C	-0.587361	-0.787733	4.107186
C	-6.387796	-0.324816	2.570584	C	0.004242	-2.836730	2.810114
C	-8.305324	1.079419	1.856316	O	3.199244	0.707830	3.970609
C	-8.863577	2.001570	0.987226	O	-1.046553	-3.361458	3.157917
C	-8.112764	2.466978	-0.123712	O	1.020625	-3.520001	2.212276
C	-6.833287	1.989735	-0.365606	C	-3.117831	-3.391056	0.016115
C	-6.233616	1.022858	0.495482	C	0.752734	-4.921337	1.970268
C	-6.985764	0.581441	1.648018	C	-3.920131	2.660932	2.483256
O	-3.023100	-0.767996	1.159077	C	-3.479100	1.350837	2.437441
H	-4.597425	-1.419603	3.112292	C	-3.568913	0.630568	1.221628
H	-6.970702	-0.668866	3.431335	C	-4.129653	1.163137	0.058125
H	-8.865027	0.726916	2.729484	C	-4.942950	3.252289	-1.092782
H	-9.874171	2.382461	1.161839	C	-5.297333	4.592037	-1.039925
H	-8.545715	3.214900	-0.795038	C	-5.244006	5.309301	0.184005
H	-6.266444	2.366421	-1.219995	C	-4.806785	4.674616	1.334407
C	4.900008	0.925080	-0.521059	C	-4.416546	3.303053	1.312669
C	3.759773	1.110141	-1.306276	C	-4.510820	2.558066	0.076982
C	3.724326	1.953830	-2.442740	O	-3.123519	-0.705703	1.232008
C	4.848663	2.687270	-2.774072	O	-1.836840	-2.641800	0.270894
C	7.150940	3.449754	-2.249526	C	2.409301	-3.400844	-2.012074
C	8.266850	3.433910	-1.429725	C	-2.762779	-4.473883	-0.995052
C	8.283515	2.604417	-0.278005	C	-3.643160	-3.928464	1.339954
C	7.204357	1.787180	0.023788	C	2.963857	-4.771744	-1.644310
C	6.046577	1.759123	-0.810112	C	1.459895	-3.417556	-3.204680
C	6.016921	2.635654	-1.959700	P	-1.700144	-1.051806	0.445631
O	2.584169	0.382408	-1.025819	C	0.775664	2.796313	-0.292770
H	2.811890	1.990550	-3.043351	C	0.698616	1.511586	-0.824943
H	4.844256	3.333388	-3.658014	C	1.909023	0.828447	-1.134807
H	7.116129	4.098808	-3.131095	C	3.176436	1.354205	-0.903120
H	9.129108	4.066699	-1.659785	C	4.495819	3.291410	0.022324
H	9.155742	2.612657	0.382613	C	4.533442	4.561181	0.585467
H	7.231452	1.162632	0.919450	C	3.337134	5.284048	0.834719
C	-1.510106	-3.423470	-0.664535	C	2.113732	4.708296	0.534252
C	-1.290078	-3.534656	0.820488	C	2.036282	3.401883	-0.034702
O	-0.639001	-2.720666	1.512779	C	3.256827	2.679641	-0.329093
C	-0.401387	-3.137838	-2.926987	O	1.807231	-0.500559	-1.591655
O	-0.646724	-4.452652	-3.159794	O	1.639192	-2.921642	-0.823129
C	-0.740158	-4.815112	-4.563621	P	1.777211	-1.438975	-0.197325
O	-1.853753	-4.605099	1.369336	C	-4.295708	0.307020	-1.150551
C	-1.700142	-4.771147	2.809921	C	-3.202239	-0.386154	-1.672576
O	-0.271246	-2.295918	-3.801160	C	-3.252187	-1.127623	-2.877967
H	-2.234678	-5.699641	3.041641	C	-4.452175	-1.228967	-3.557391
H	-0.633723	-4.855021	3.064794	C	-6.893773	-0.805763	-3.686733
H	-2.370021	-2.741369	-0.813653	C	-8.053324	-0.273412	-3.148771
H	-0.879664	-0.765816	-1.520970	C	-7.997793	0.444673	-1.925727
H	0.870642	-1.066986	-1.780543	C	-6.789982	0.643547	-1.273427
H	-0.928742	-5.895829	-4.568436	C	-5.571656	0.128875	-1.808662
H	0.202159	-4.578089	-5.079979	C	-5.637760	-0.636678	-3.033555
H	-1.565547	-4.268738	-5.044136	O	-1.946728	-0.312546	-1.030596
H	-1.796790	-4.410522	-1.054116	C	4.356858	0.476268	-1.140403
H	1.625984	-1.800595	0.576118	C	4.409711	-0.781388	-0.523476
H	-2.146417	-3.914979	3.335803	C	5.536808	-1.634619	-0.631606
H	0.618691	-3.442958	-1.083033	C	6.619021	-1.245623	-1.399403
Slia_09				C	7.679947	0.360846	-2.969203
116				C	7.629149	1.530199	-3.709894
Energy =	-3595.575395944			C	6.481374	2.362643	-3.636156
Rh	0.218968	-0.248464	1.223141	C	5.418061	2.032146	-2.808882
O	1.794058	0.858378	2.205767	C	5.446927	0.849273	-2.010687
				C	6.598276	-0.017167	-2.120888

O	3.373462	-1.232491	0.312631	C	0.054246	-2.915856	-2.231054
C	3.660697	2.064490	3.685442	O	-2.094861	-3.716613	2.039114
H	2.473888	-1.846660	2.810934	O	-1.046421	-2.739917	-2.753578
H	-0.377945	0.280694	4.278102	O	1.202810	-3.033414	-2.937551
H	-0.441630	-1.327572	5.063856	C	1.048834	-2.908314	-4.374339
H	2.009582	-1.477202	4.487055	C	-2.545645	-3.054523	3.262966
H	-3.875390	3.224782	3.420713	H	-1.855235	-3.449724	-0.774905
H	-3.081739	0.846964	3.321305	C	3.160468	0.817566	-3.359218
H	-4.984036	2.718161	-2.044785	H	1.588314	-4.003909	0.735471
H	-5.619264	5.101361	-1.953325	H	1.443370	-4.884288	-0.813028
H	-5.536997	6.362932	0.212594	H	-0.930145	-4.741213	0.024060
H	-4.743433	5.220210	2.282031	H	2.047051	-3.100446	-4.786555
H	-3.830834	-2.676534	-0.423751	H	0.706429	-1.894670	-4.627775
H	3.232981	-2.689884	-2.190441	H	0.322605	-3.647232	-4.744336
H	1.675833	-5.319520	1.531918	C	1.613455	1.373414	3.122806
H	-3.667120	-5.056226	-1.239207	C	1.494734	1.479356	1.745762
H	-2.370001	-4.036797	-1.926195	C	2.618104	1.166209	0.939857
H	-2.010454	-5.165612	-0.580347	C	3.848591	0.753495	1.446234
H	-0.141497	3.351846	-0.072279	C	5.119557	0.047104	3.504510
H	-0.256690	1.080382	-1.144681	C	5.183536	-0.105286	4.882157
H	5.427558	2.753366	-0.164771	C	4.090595	0.269038	5.706791
H	5.499416	5.010680	0.835614	C	2.933843	0.766533	5.131033
H	3.384651	6.287549	1.267432	C	2.825805	0.921466	3.717138
H	1.180635	5.246097	0.733341	C	3.956629	0.584402	2.878445
H	-4.551445	-4.526117	1.149733	H	0.765887	1.625148	3.768532
H	-2.891961	-4.565763	1.830781	H	0.572732	1.830471	1.271387
H	-3.902387	-3.108810	2.025552	O	2.453572	1.242800	-0.465714
H	3.548388	-5.175140	-2.488357	H	5.968067	-0.252439	2.885962
H	3.624566	-4.709913	-0.764880	H	6.087355	-0.522217	5.336817
H	2.145005	-5.476838	-1.424904	H	4.160646	0.152295	6.792223
H	1.992280	-3.784599	-4.098688	H	2.075053	1.040691	5.753117
H	0.607301	-4.089209	-3.009625	O	2.100610	0.012707	-2.665137
H	1.081808	-2.405891	-3.418522	C	-1.925639	2.044974	-3.159387
H	-2.335149	-1.591622	-3.250207	C	3.577887	0.016573	-4.585323
H	-4.507511	-1.786469	-4.498042	C	2.572837	2.184297	-3.684642
H	-6.924222	-1.378703	-4.619634	H	4.010248	0.923037	-2.665787
H	-9.012320	-0.415472	-3.655531	C	-1.318163	3.441685	-3.217607
H	-8.918918	0.841600	-1.488253	C	-2.067693	1.372650	-4.520450
H	-6.768634	1.189423	-0.327599	H	-2.899784	2.072498	-2.646889
H	5.530330	-2.582447	-0.086868	H	-3.034238	-3.846685	3.841329
H	7.499340	-1.891750	-1.476360	H	-3.258098	-2.257737	3.006063
H	8.549635	-0.301592	-3.033844	H	4.366315	0.562386	-5.130171
H	8.462977	1.806961	-4.361596	H	3.974621	-0.970592	-4.299841
H	6.430873	3.271006	-4.244156	H	2.723992	-0.126276	-5.268242
H	4.535663	2.675955	-2.775362	P	2.105496	-0.265594	-1.080896
H	0.511441	-5.433058	2.914368	C	-5.051659	-2.788989	-0.137095
H	-0.088680	-5.025266	1.269808	C	-4.164669	-2.158466	-0.991617
H	4.415835	2.266908	4.453525	C	-3.866359	-0.786764	-0.794557
H	4.094382	2.111619	2.676436	C	-4.491961	-0.001008	0.177331
H	2.818170	2.766553	3.763384	C	-5.872865	-0.020602	2.284111
H	-0.752079	0.755256	1.966284	C	-6.674799	-0.699923	3.189484
H	-1.641493	-0.909135	3.824071	C	-6.991272	-2.070184	2.993204
				C	-6.471489	-2.746675	1.901837
				C	-5.625654	-2.085272	0.962350
				C	-5.336443	-0.678661	1.136166
				H	-5.310327	-3.842783	-0.287542
				H	-3.698197	-2.670905	-1.837432
				O	-2.957857	-0.204888	-1.688882
				H	-5.637842	1.033522	2.449928
				H	-7.067749	-0.173074	4.064444
				H	-7.636956	-2.589573	3.707576
				H	-6.697513	-3.806955	1.744086

R4a_09
116
Energy = -3595.567701289

Rh	0.332254	-1.062874	-0.007815
O	-1.042446	-1.806886	1.454429
C	-1.368526	-2.994960	1.202838
C	-1.005688	-3.645364	-0.092589
C	0.282515	-3.057738	-0.731864
C	1.520397	-3.876770	-0.357313

O	-1.002001	1.203799	-2.336565	C	-2.936683	0.314211	-5.580935
H	3.330691	2.795770	-4.203666	O	1.098959	4.515574	-1.993109
H	1.697115	2.079186	-4.346195	H	-3.635260	0.752975	-6.302642
H	2.268452	2.710402	-2.767128	C	2.681791	-4.046462	-0.578592
H	-1.966621	4.099259	-3.821214	H	-2.013768	-0.019896	-6.076806
H	-1.230164	3.879082	-2.210583	H	-2.195335	2.132815	-1.836949
H	-0.319756	3.417143	-3.683375	H	-0.224387	1.384337	-0.341538
H	-2.730824	1.975000	-5.164531	H	1.434731	1.466501	-1.030585
H	-1.085889	1.290099	-5.016193	H	-1.286427	5.317130	0.786787
H	-2.501701	0.366233	-4.417957	H	-0.716675	6.134664	-0.725792
P	-1.448378	0.240584	-1.116626	C	4.760735	1.877868	-2.398822
C	4.952882	0.429685	0.498753	C	4.128916	0.648790	-2.464088
C	4.740983	-0.491353	-0.533142	C	3.939797	-0.090408	-1.272119
C	5.774933	-0.931018	-1.396905	C	4.401527	0.331372	-0.022833
C	7.043661	-0.397850	-1.265228	C	5.356454	2.249715	1.302976
C	8.599727	1.219173	-0.201951	C	5.914437	3.518720	1.345388
C	8.842830	2.235468	0.707068	C	6.137926	4.254012	0.151650
C	7.796145	2.693086	1.549600	C	5.771523	3.712313	-1.068827
C	6.535876	2.116639	1.492085	C	5.180896	2.416952	-1.148561
C	6.254954	1.051003	0.585092	C	4.989796	1.648904	0.061534
C	7.312324	0.614818	-0.298827	O	3.298783	-1.341118	-1.384359
O	3.487175	-1.111020	-0.703061	O	1.574532	-3.046369	-0.731990
H	5.547417	-1.698629	-2.141095	C	-3.045926	-3.715635	-0.149740
H	7.854731	-0.739191	-1.916516	C	2.183437	-5.076925	0.425579
H	9.393082	0.868942	-0.870854	C	2.983978	-4.619716	-1.957792
H	9.834300	2.693932	0.769641	C	-3.778832	-4.549079	-1.193709
H	7.983015	3.513570	2.249029	C	-2.237226	-4.543389	0.842263
H	5.739098	2.488338	2.140408	P	1.739098	-1.446141	-0.826656
C	-4.289765	1.476902	0.195513	C	-1.048896	1.803990	2.926254
C	-3.002659	2.018345	0.220097	C	-0.923022	0.580096	2.294639
C	-2.750694	3.407860	0.339102	C	-2.041422	0.027448	1.624461
C	-3.814364	4.290205	0.381740	C	-3.295129	0.643345	1.595923
C	-6.250697	4.731118	0.232121	C	-4.590777	2.753738	2.068380
C	-7.548241	4.277983	0.063486	C	-4.663566	4.017071	2.636160
C	-7.793221	2.888687	-0.091643	C	-3.560490	4.556609	3.349111
C	-6.751098	1.974198	-0.048177	H	0.480253	5.395955	0.388197
C	-5.403704	2.401053	0.149248	H	-1.894262	3.205323	-3.221925
C	-5.153980	3.820515	0.263446	C	-2.387856	3.826308	3.456418
O	-1.876352	1.177209	0.206772	C	-2.272098	2.532235	2.867620
H	-1.715196	3.751791	0.408081	C	-3.407720	1.962066	2.178810
H	-3.635194	5.365355	0.486240	O	-1.867799	-1.232834	1.019098
H	-6.042886	5.802049	0.331746	O	-2.094574	-2.845210	-0.908548
H	-8.381551	4.986592	0.035875	P	-1.777703	-1.283460	-0.650169
H	-8.815520	2.533819	-0.253744	C	4.254219	-0.563994	1.159705
H	-6.960617	0.910772	-0.181766	C	3.003164	-1.090125	1.487472
H	-1.682818	-2.639892	3.803051	C	2.765250	-1.877806	2.639322
H	1.434617	-1.659972	0.929100	C	3.822522	-2.185006	3.476260
H	2.450817	-3.414859	-0.711608	C	6.250765	-2.135681	3.982043
Slc_09				C	7.543060	-1.769102	3.646037
116				C	7.777848	-1.017761	2.464748
Energy = -3595.574116403				C	6.724172	-0.620222	1.655312
Rh	0.085014	-0.594631	-2.006957	C	5.376910	-0.956667	1.983331
C	0.369523	1.330782	-1.266733	C	5.145682	-1.759707	3.163234
C	-0.072042	2.383008	-2.289740	O	1.875721	-0.788325	0.688990
C	-1.554403	2.283020	-2.725555	C	-4.447051	-0.043134	0.945496
C	-1.798956	1.125847	-3.656664	C	-4.332331	-0.497594	-0.369716
O	-1.281397	-0.007238	-3.538110	C	-5.414715	-1.055371	-1.093088
C	0.191923	3.771406	-1.662861	C	-6.637552	-1.214633	-0.467809
O	-0.710152	4.032563	-0.682494	C	-8.040635	-1.095074	1.575387
C	-0.539348	5.311945	-0.016570	C	-8.185084	-0.799511	2.920340
O	-2.635653	1.397957	-4.651415	C	-7.087186	-0.269366	3.647157
				C	-5.876005	-0.017807	3.020230

C	-5.697093	-0.287018	1.630602	C	2.735678	0.651655	1.211542
C	-6.804620	-0.865102	0.903186	C	4.057136	0.555822	0.773737
O	-3.112704	-0.358335	-1.064508	C	6.418517	-0.051783	1.411145
H	4.926704	2.460740	-3.310371	C	7.356791	-0.366941	2.382985
H	3.782351	0.224889	-3.409733	C	6.993804	-0.415050	3.754158
H	5.184994	1.701160	2.231829	C	5.682020	-0.173533	4.126872
H	6.182246	3.958604	2.310961	C	4.687856	0.134826	3.152755
H	6.586257	5.250718	0.199929	C	5.063988	0.229462	1.759905
H	5.916794	4.277282	-1.995546	O	1.706818	0.904183	0.278966
H	3.556923	-3.508333	-0.182110	O	0.523093	0.442995	-1.906308
H	-3.748413	-3.055811	0.383592	C	0.779413	1.762344	-3.915563
H	2.960256	-5.845148	0.577261	C	-0.086023	2.805849	-1.754666
H	1.966749	-4.609679	1.398801	P	1.251982	-0.352011	-0.715143
H	1.271963	-5.574815	0.055348	C	4.381598	0.741738	-0.669261
H	-0.197213	2.237055	3.461190	C	3.719479	-0.018722	-1.635948
H	0.016849	0.023799	2.293674	C	4.055282	0.008428	-3.010700
H	-5.447493	2.357478	1.518710	C	5.047766	0.867165	-3.446419
H	-5.580984	4.604207	2.531837	C	6.669563	2.689468	-2.989151
H	-3.636899	5.548166	3.805346	C	7.266574	3.576351	-2.109183
H	-1.524525	4.234053	3.993507	C	6.903693	3.560564	-0.736930
H	3.780788	-5.378636	-1.875976	C	5.975658	2.647730	-0.258993
H	2.088105	-5.102844	-2.382265	C	5.356761	1.703505	-1.131489
H	3.328875	-3.833083	-2.646535	C	5.698410	1.749249	-2.535881
H	-4.494415	-5.222811	-0.692826	O	2.713020	-0.926142	-1.243199
H	-4.340158	-3.907837	-1.891425	C	-1.251087	-5.567777	3.186428
H	-3.068228	-5.164240	-1.770660	H	-1.797744	-4.199390	-0.715863
H	-2.911222	-5.217719	1.397856	H	1.942213	-4.515739	0.014261
H	-1.490560	-5.158073	0.312982	H	1.678887	-4.967691	-1.694652
H	-1.721043	-3.895321	1.566481	H	-0.618304	-5.535959	-0.747982
H	1.746614	-2.215376	2.848490	H	1.281176	-2.026025	-4.986970
H	3.655159	-2.779945	4.380035	H	3.055768	0.267446	4.587617
H	6.056608	-2.734088	4.878668	H	1.304272	0.704882	2.832003
H	8.383510	-2.068287	4.279257	H	6.714063	-0.029946	0.360123
H	8.802209	-0.753295	2.185472	H	8.387377	-0.585268	2.087196
H	6.924979	-0.050751	0.745341	H	7.746755	-0.656094	4.510434
H	-5.260682	-1.340497	-2.137273	H	5.383003	-0.228826	5.179127
H	-7.487246	-1.633577	-1.016846	H	1.912681	2.023850	-2.084522
H	-8.872979	-1.523470	1.006645	H	-0.239297	-1.289475	-4.335067
H	-9.136911	-0.985024	3.426843	H	-0.251773	-2.983405	-4.937992
H	-7.195180	-0.061216	4.716037	H	1.018787	2.754903	-4.333252
H	-5.039182	0.381087	3.598196	H	1.491300	1.034346	-4.334559
H	1.248535	-0.162086	-3.000587	H	-0.242358	1.492938	-4.230615
H	-3.398587	-0.524946	-5.041440	H	0.135967	3.823385	-2.119200
H	0.583688	2.342982	-3.174408	H	-1.127096	2.559464	-2.018744
R2a_09				H	0.013621	2.804638	-0.659016
116				H	3.532863	-0.667497	-3.692282
Energy = -3595.571091302				H	5.332567	0.890381	-4.503357
Rh	0.113618	-1.887277	0.400766	H	6.926357	2.703496	-4.053816
O	-0.547924	-3.430653	1.760557	H	8.007067	4.296617	-2.469486
C	-0.814003	-4.480622	1.121893	H	7.358323	4.279343	-0.048293
C	-0.791769	-4.510674	-0.373049	H	5.702102	2.654804	0.798543
C	0.254817	-3.522534	-0.947822	H	-1.541559	-6.585040	3.472463
C	1.660619	-4.122870	-0.976024	H	-2.009916	-4.836104	3.498722
C	-0.243883	-3.028680	-2.302910	H	-0.272088	-5.300977	3.609838
O	-1.167335	-5.602934	1.728670	H	1.584633	-2.278873	0.827202
O	-1.426916	-2.984851	-2.630226	H	2.414406	-3.390926	-1.292745
O	0.771938	-2.676134	-3.127793	C	-4.725911	-2.401218	0.202820
C	0.877485	1.816896	-2.397198	C	-5.377001	-3.117697	-0.973507
C	0.350710	-2.211908	-4.435777	C	-5.001216	-3.054125	1.552804
C	3.326864	0.327101	3.528481	C	-1.281794	2.322357	3.206395
C	2.356442	0.560603	2.571472	C	-1.647160	1.033881	2.859793
				C	-2.496860	0.826800	1.744353

C	-3.032268	1.873535	0.989517	H	1.452203	-8.901494	-1.742218
C	-2.927640	4.341705	0.486790	H	2.831767	-7.741891	-1.910786
C	-2.477777	5.614768	0.805402	C	2.561440	-0.985917	-2.344228
C	-1.659420	5.831836	1.944602	C	2.682452	-0.195682	-1.175422
C	-1.281016	4.758055	2.732805	C	2.662585	1.200756	-1.187432
C	-1.709725	3.433688	2.423996	C	2.134959	3.257069	-2.545311
C	-2.579213	3.214167	1.289732	C	1.841491	3.849162	-3.764889
O	-2.862554	-0.497972	1.462327	C	1.750403	3.068984	-4.947482
O	-3.250579	-2.453138	-0.034522	C	1.927238	1.696588	-4.880495
P	-2.203489	-1.222562	0.094207	C	2.212613	1.052639	-3.639610
C	-4.013583	1.582963	-0.096492	C	2.349592	1.849824	-2.441308
C	-3.710567	0.645691	-1.088387	C	4.043765	-0.759919	2.768338
C	-4.544729	0.401212	-2.207367	C	4.071371	-0.344946	4.233782
C	-5.749521	1.071518	-2.312497	C	4.992286	-1.905722	2.433265
C	-7.452843	2.598920	-1.351179	H	1.446742	-7.647937	-3.048664
C	-7.889925	3.424243	-0.328692	H	-1.252825	-6.182633	-0.558034
C	-7.064082	3.637334	0.806031	C	2.938590	1.975446	0.056343
C	-5.809637	3.051461	0.891204	C	2.215153	1.725938	1.224909
C	-5.314197	2.215890	-0.154450	C	2.333482	2.509228	2.397966
C	-6.176878	1.965285	-1.287968	C	3.252584	3.541357	2.429333
O	-2.492870	-0.061144	-1.052115	C	5.116977	4.793545	1.375537
H	-5.023239	-1.341510	0.225030	C	5.983287	4.996028	0.314793
H	-0.647816	2.502394	4.080824	C	5.875890	4.186814	-0.846087
H	-1.329602	0.165235	3.444485	C	4.893455	3.212847	-0.944358
H	-3.553152	4.193322	-0.396113	C	3.967626	2.991356	0.118877
H	-2.756556	6.460413	0.169158	C	4.108136	3.788150	1.317081
H	-1.321326	6.842849	2.190192	O	2.919230	-0.882659	0.032294
H	-0.634736	4.907665	3.604445	O	2.649501	-1.236414	2.499274
H	-6.473464	-3.102721	-0.853839	O	1.260279	0.688133	1.257896
H	-5.124537	-2.626496	-1.925654	P	1.748373	-0.889759	1.211506
H	-5.048676	-4.169290	-1.022093	H	2.282414	-0.957743	-4.477177
H	-6.086127	-3.049226	1.753545	H	2.655085	-2.072254	-2.267260
H	-4.658570	-4.102945	1.553238	H	2.192586	3.871929	-1.645009
H	-4.497138	-2.506282	2.363932	H	1.676959	4.929787	-3.813891
H	-4.206090	-0.306517	-2.968421	H	1.533748	3.551676	-5.905172
H	-6.400698	0.903973	-3.176413	H	1.846495	1.079543	-5.782026
H	-8.087861	2.407801	-2.222636	H	4.237379	0.105738	2.115482
H	-8.873452	3.899830	-0.385481	H	5.084463	0.001564	4.499136
H	-7.422432	4.266387	1.626553	H	3.363995	0.476636	4.426856
H	-5.193791	3.218022	1.777624	H	3.814065	-1.197217	4.884670
S3c_09				H	6.031011	-1.598710	2.643448
116				H	4.762170	-2.791412	3.048695
Energy = -3595.569633843				H	4.922140	-2.178307	1.368966
Rh -0.026231 -2.206805 1.087929				H	1.680701	2.288176	3.246183
C 0.917910 -3.420490 -0.301729				H	3.348176	4.166944	3.322925
C 0.480744 -4.878412 -0.185634				H	5.201194	5.395718	2.286722
C -1.036795 -5.116744 -0.397131				H	6.758190	5.765960	0.374740
C -1.869988 -4.620912 0.754929				H	6.579802	4.328062	-1.672030
O -1.665286 -3.557402 1.382295				H	4.833994	2.593338	-1.841974
C 1.265552 -5.693493 -1.240442				H	0.786297	-3.093526	2.120119
O 1.038809 -7.020174 -1.080607				H	-4.254328	-4.046801	1.884280
C 1.745448 -7.880471 -2.015502				H	0.767080	-5.290153	0.800541
C -2.886550 -5.418186 1.062269				C	-2.837833	-1.462876	-2.764497
O -3.764610 -4.995458 2.148267				C	-2.188601	-1.653446	-4.129934
O 1.998148 -5.214299 -2.093395				C	-4.060759	-2.343149	-2.530707
H -4.499071 -5.803407 2.242279				C	-2.977784	0.482474	3.676648
C 2.353791 -0.363079 -3.560719				C	-3.000086	-0.360555	2.579038
H -3.184089 -4.879579 3.074938				C	-2.946212	0.198260	1.278319
H -1.369869 -4.560306 -1.295338				C	-2.878651	1.569611	1.033038
H 0.641724 -2.998358 -1.279836				C	-2.579557	3.856577	2.049426
H 2.005353 -3.349411 -0.168680				C	-2.494979	4.670928	3.168947
				C	-2.610147	4.125384	4.474417

C	-2.781822	2.761010	4.636412	C	-0.860946	3.023524	-3.190902
C	-2.857298	1.891991	3.508072	H	-2.543675	3.065382	-1.826486
C	-2.785808	2.450324	2.175691	C	2.268648	-3.965549	-2.449336
C	-2.844589	2.058479	-0.374315	C	1.432472	-1.843544	-3.596586
C	-1.890574	1.558671	-1.265922	H	3.124756	-1.980929	-2.244478
C	-1.717364	2.068096	-2.576588	H	-1.741988	5.446785	-2.048714
C	-2.564954	3.058549	-3.035920	H	-1.706469	4.899016	-0.347839
C	-4.556067	4.506816	-2.717773	H	-0.188699	4.989337	-1.294323
C	-5.619388	4.937056	-1.941977	H	-1.335671	3.667572	-3.950876
C	-5.800833	4.404784	-0.638836	P	-1.481022	1.102539	-0.192802
C	-4.909177	3.477581	-0.120890	C	3.759577	3.457492	-0.612342
C	-3.788390	3.029309	-0.881578	C	2.841634	2.470927	-0.920206
C	-3.630865	3.541629	-2.223391	C	3.191988	1.112793	-0.734766
O	-2.972783	-0.690758	0.181768	C	4.452100	0.702963	-0.293740
O	-1.801180	-1.830477	-1.752247	C	6.597459	1.437123	0.806563
O	-0.978266	0.563033	-0.865165	C	7.455647	2.448314	1.212209
P	-1.434319	-0.969500	-0.423481	C	7.135652	3.810684	0.976441
H	-3.097206	-0.403211	-2.608671	C	5.936957	4.137620	0.365107
H	-3.037483	0.071726	4.690067	C	5.021077	3.123740	-0.041703
H	-3.080733	-1.446073	2.685281	C	5.366216	1.734296	0.150047
H	-2.480643	4.292839	1.053157	H	3.515866	4.512220	-0.780300
H	-2.334562	5.746107	3.043041	H	1.846949	2.701170	-1.308677
H	-2.552268	4.781669	5.347821	O	2.221497	0.175718	-1.136058
H	-2.852848	2.323197	5.637914	H	6.857194	0.395797	1.007749
H	-2.906134	-1.386609	-4.924016	H	8.387607	2.191143	1.724680
H	-1.298630	-1.013140	-4.235891	H	7.827530	4.597354	1.291670
H	-1.886143	-2.704230	-4.276184	H	5.664446	5.185544	0.198081
H	-4.839174	-2.101835	-3.274364	O	1.320259	-2.156585	-1.168646
H	-3.801539	-3.409994	-2.643147	H	0.221825	3.234256	-3.192152
H	-4.479296	-2.175187	-1.526553	H	-1.022511	1.973595	-3.478039
H	-0.899449	1.679630	-3.189434	H	2.865716	-4.246470	-3.333358
H	-2.433705	3.471387	-4.041539	H	2.775248	-4.354473	-1.552798
H	-4.414899	4.893230	-3.733143	H	1.277430	-4.441355	-2.536742
H	-6.326532	5.674104	-2.334353	H	2.017491	-2.054924	-4.507822
H	-6.656965	4.725065	-0.037075	H	0.429280	-2.284657	-3.726666
H	-5.070622	3.070859	0.880190	H	1.336900	-0.751950	-3.494601
S2a_09				O	-2.177471	-1.160846	2.113543
116				C	-2.188398	-0.492549	3.176324
Energy = -3595.568556929				P	1.541903	-0.942576	-0.112510
Rh	-0.412630	-0.739940	0.941260	C	-4.751266	0.633024	-0.744601
C	-2.572193	-3.125502	-0.558043	C	-4.141548	1.710049	-0.087630
C	-1.980000	-1.968885	-1.053730	C	-4.760447	2.980224	0.028058
C	-2.761551	-0.784427	-1.142910	C	-5.990212	3.198094	-0.565359
C	-4.087190	-0.700834	-0.727289	C	-7.857868	2.412179	-2.001732
C	-6.020890	-1.910709	0.344847	C	-8.443284	1.428910	-2.782017
C	-6.569419	-3.075292	0.867190	C	-7.805826	0.168519	-2.923890
C	-5.824889	-4.283904	0.892492	C	-6.613575	-0.100522	-2.268202
C	-4.525611	-4.299121	0.412496	C	-5.994070	0.879900	-1.436646
C	-3.925754	-3.119293	-0.120624	C	-6.624687	2.174973	-1.327082
C	-4.697876	-1.895752	-0.187612	O	-2.909497	1.561229	0.574288
H	-1.994556	-4.053401	-0.498134	H	-4.252150	3.761283	0.599781
H	-0.967363	-1.984806	-1.470222	H	-6.481910	4.171902	-0.470388
O	-2.116906	0.392396	-1.577125	H	-8.328735	3.395850	-1.899875
H	-6.611008	-0.992075	0.330977	H	-9.386837	1.624631	-3.299787
H	-7.590765	-3.060649	1.260058	H	-8.255727	-0.597339	-3.563014
H	-6.275828	-5.195466	1.295571	H	-6.128774	-1.071459	-2.399557
H	-3.932864	-5.219736	0.439180	C	4.834764	-0.737116	-0.275862
O	-0.799440	2.431380	-0.817473	C	4.026803	-1.684344	0.354284
C	-1.470033	3.314829	-1.824259	C	4.398018	-3.039838	0.526013
C	2.138889	-2.448487	-2.388303	C	5.597586	-3.483119	0.000634
C	-1.262929	4.745860	-1.344510	C	7.618210	-3.079207	-1.380030
				C	8.392632	-2.241786	-2.164979

C	7.992297	-0.894757	-2.363939	P	1.482241	-0.076651	-0.747291
C	6.849252	-0.396381	-1.756385	C	-4.131558	-1.811467	-2.483086
C	6.039395	-1.221944	-0.920109	C	-3.175099	-0.831353	-2.290650
C	6.425680	-2.606023	-0.757945	C	-3.431547	0.209355	-1.366523
O	2.782060	-1.309597	0.907021	C	-4.623508	0.324928	-0.649211
H	3.731611	-3.700577	1.086700	C	-6.776904	-0.813608	0.007554
H	5.910475	-4.522918	0.140183	C	-7.681434	-1.854292	-0.147866
H	7.901917	-4.127020	-1.234610	C	-7.452609	-2.877628	-1.104791
H	9.302230	-2.618149	-2.642271	C	-6.301266	-2.853151	-1.874279
H	8.589411	-0.241467	-3.007494	C	-5.341309	-1.808423	-1.729151
H	6.554301	0.640810	-1.927852	C	-5.591375	-0.741272	-0.785693
C	-1.163984	0.567802	3.419015	O	-2.434871	1.193224	-1.207772
C	0.193104	0.176574	2.772524	O	-0.785229	2.503216	0.191763
C	0.960731	-0.817387	3.648520	P	-1.522924	1.069185	0.180872
C	1.058322	1.396252	2.488521	C	2.258899	0.618351	-3.906424
O	-3.114282	-0.654491	4.107521	C	1.978560	1.477699	-2.843279
O	2.280147	1.376993	2.426476	C	2.523435	2.779408	-2.729761
O	0.321716	2.540295	2.360429	C	3.408060	3.227305	-3.693603
C	1.103816	3.749388	2.194706	C	4.773239	2.809366	-5.722235
C	-4.150466	-1.650331	3.843623	C	5.203408	1.963093	-6.730154
H	-1.559707	1.488519	2.953815	C	4.686534	0.643722	-6.810701
H	0.352441	-1.711380	3.862894	C	3.732988	0.198070	-5.907542
H	1.213863	-0.335366	4.614655	C	3.246885	1.049812	-4.871314
H	-1.048001	0.777195	4.497825	C	3.807361	2.378572	-4.766019
H	0.366768	4.555198	2.087931	O	1.060985	1.084336	-1.844708
H	1.735402	3.912409	3.081672	C	-4.840278	1.495092	0.248957
H	1.743307	3.670771	1.304346	C	-3.894155	1.812770	1.227873
H	-4.795305	-1.619467	4.729348	C	-4.093545	2.831020	2.193995
H	-4.708003	-1.382754	2.934673	C	-5.244210	3.595916	2.147029
H	-3.690763	-2.641559	3.722374	C	-7.358318	4.234850	1.014083
H	0.122518	-2.112251	1.522101	C	-8.265024	4.076319	-0.020756
H	1.900465	-1.125442	3.172661	C	-8.043120	3.077273	-1.004457

B.2.10 Strukturen der 10 Spezies

Rlc_10							
116							
Energy =	-3595.562410541						
Rh	-0.182440	-0.813448	0.496079	H	4.151859	0.696755	-1.309358
C	4.122197	0.623193	-0.210931	H	-2.522534	3.683581	-0.019801
C	0.537238	-3.363656	-4.091092	H	5.621240	2.128229	0.172809
C	1.165347	-2.913566	-2.943460	H	3.960357	2.776998	0.065972
C	1.654902	-1.585211	-2.897244	H	4.479391	1.878204	1.526570
C	1.590271	-0.710828	-3.985101	H	-3.958872	-2.614576	-3.206959
C	0.580253	-0.277389	-6.250603	H	-2.230624	-0.828299	-2.839933
C	-0.134703	-0.724156	-7.351790	H	-6.970133	-0.034876	0.748792
C	-0.607018	-2.061664	-7.416501	H	-8.581393	-1.884984	0.474019
H	-0.056142	-2.178795	-0.294936	H	-8.179477	-3.686433	-1.224768
C	-0.376653	-2.925222	-6.358596	H	-6.102656	-3.645162	-2.604292
C	0.337530	-2.493836	-5.201836	H	5.970459	-0.474965	0.000278
C	0.855233	-1.144827	-5.151097	H	4.833487	-0.698506	1.360615
O	2.291897	-1.173627	-1.708402	H	4.534867	-1.514289	-0.211969
O	2.689903	0.433126	0.190696	H	-1.355166	5.794627	0.732016
C	-1.433960	3.813116	-0.127220	H	-1.180821	4.480763	1.930853
C	4.566421	1.932222	0.428747	H	0.183344	4.890265	0.846698
C	4.905864	-0.594192	0.264893	H	-1.563077	5.151328	-1.814712
C	-0.913769	4.799618	0.910999	H	-0.000697	4.293502	-1.691835
C	-1.090120	4.186156	-1.564283	H	-1.457762	3.424981	-2.268171

H	2.224705	3.404317	-1.884645	C	0.907560	0.348277	5.105549
H	3.829398	4.235814	-3.629573	C	3.231511	0.555378	4.068231
H	5.179026	3.823033	-5.635152	H	1.489005	1.732878	3.535448
H	5.949356	2.302542	-7.454809	H	-4.901483	-0.169847	-2.585153
H	5.047992	-0.032912	-7.591079	H	-3.958488	0.550845	-1.249200
H	3.354601	-0.823802	-5.980459	H	-3.258362	0.465516	-2.896006
H	-3.331277	2.982019	2.963089	H	-4.176426	-2.518282	-3.517113
H	-5.417567	4.377443	2.893717	P	-1.258615	-1.955800	-0.057824
H	-7.504843	5.015468	1.768188	C	2.654459	2.383766	-2.517960
H	-9.142120	4.726342	-0.090468	C	2.786488	1.666817	-1.342716
H	-8.744470	2.971774	-1.837649	C	1.986288	2.007272	-0.224918
H	-6.781914	1.480547	-1.698402	C	1.077664	3.068133	-0.235140
O	-1.786653	-1.608070	1.672924	C	-0.134980	4.761056	-1.654238
C	-1.745060	-2.526154	2.522858	C	-0.305437	5.407277	-2.869499
C	-0.515379	-3.301576	2.912913	C	0.525959	5.100278	-3.978454
C	0.286210	-3.754456	1.674143	C	1.501002	4.124803	-3.856983
C	0.973295	-2.595054	0.929471	C	1.691001	3.427056	-2.628162
C	1.394020	-4.771895	2.008821	C	0.875481	3.767769	-1.483977
O	-2.840963	-2.902663	3.171133	H	3.278136	2.143884	-3.385549
O	1.984576	-5.412318	1.153035	H	3.503089	0.847895	-1.244180
C	1.657194	-4.830917	3.337352	O	2.165547	1.256340	0.953929
O	2.729435	-5.739773	3.707242	H	-0.788985	5.004947	-0.814224
C	-4.077222	-2.185963	2.863673	H	-1.093161	6.159497	-2.975047
H	0.115182	-2.647709	3.544284	H	0.385996	5.624974	-4.928172
H	1.590298	-1.992290	1.631858	H	2.137500	3.863907	-4.709476
H	1.653691	-2.994719	0.163979	O	1.304763	-0.238067	2.799121
H	-0.816061	-4.156669	3.535083	H	-2.546981	-1.859173	-3.841959
H	-0.386387	-4.289270	0.977823	H	-2.744936	-3.312850	-2.805325
H	2.822039	-5.645785	4.796257	H	1.182798	1.011915	5.942707
H	2.469029	-6.769638	3.421375	H	-0.170554	0.462540	4.912733
H	3.663626	-5.447770	3.204684	H	1.102381	-0.693946	5.408010
H	-4.820289	-2.616818	3.544540	H	3.573036	1.224347	4.876574
H	-3.940548	-1.111161	3.044892	H	3.477832	-0.481938	4.350891
H	-4.356047	-2.355070	1.814005	H	3.774423	0.820593	3.147963
R3c_10				H	0.932850	-3.319783	0.185610
116				O	3.094892	-1.673038	-0.028278
Energy = -3595.561503447				P	0.963294	0.131162	1.269344
Rh	0.930702	-1.761915	-0.089431	C	-3.682328	-3.013577	1.954713
C	-0.911454	-6.351966	1.845785	C	-3.270572	-1.713780	1.659861
C	-1.000640	-5.473259	0.780522	C	-4.133688	-0.592093	1.698973
C	-1.860362	-4.350745	0.881208	C	-5.470110	-0.783141	1.999397
C	-2.687709	-4.122391	1.984136	C	-7.377297	-2.303090	2.458981
C	-3.190394	-4.741424	4.372919	C	-7.886947	-3.580446	2.621008
C	-3.006482	-5.584234	5.458709	C	-7.019157	-4.700918	2.542042
C	-2.158264	-6.718668	5.361852	C	-5.658874	-4.531287	2.331388
C	-1.484339	-6.974757	4.179722	C	-5.094175	-3.229258	2.183419
C	-1.634589	-6.117967	3.049915	C	-5.987118	-2.092586	2.222248
C	-2.528414	-4.985399	3.132378	O	-1.913049	-1.459091	1.375462
H	-0.266864	-7.234258	1.775623	H	-3.717659	0.399125	1.501357
H	-0.447217	-5.654175	-0.145142	H	-6.152181	0.072016	2.049102
O	-1.918348	-3.478582	-0.226958	H	-8.038347	-1.430577	2.496857
H	-3.839721	-3.868145	4.467660	H	-8.956477	-3.729304	2.796609
H	-3.518038	-5.369137	6.401901	H	-7.427751	-5.710997	2.643331
H	-2.030875	-7.380106	6.223928	H	-5.007774	-5.405695	2.264753
H	-0.813020	-7.836154	4.096193	C	0.327918	3.405175	1.007282
O	-1.943379	-1.201578	-1.303883	C	-0.392892	2.409918	1.671551
C	-3.316988	-1.439884	-1.853895	C	-1.214247	2.668442	2.796657
C	1.727429	0.711852	3.873827	C	-1.277777	3.951979	3.307400
C	-3.888755	-0.062046	-2.161210	C	-0.501755	6.309950	3.306722
C	-3.180434	-2.339103	-3.077174	C	0.297484	7.313892	2.786032
H	-3.905991	-1.940722	-1.069475	C	1.142990	7.039056	1.679442
				C	1.159400	5.781621	1.094361

C	0.331824	4.729223	1.588114	C	-0.487500	3.707389	4.708055
C	-0.496932	5.001091	2.741103	C	-1.154891	4.875765	4.178857
O	-0.391137	1.089464	1.183157	C	-1.438473	4.950454	2.784478
H	-1.785841	1.844165	3.231272	C	-1.130666	3.896983	1.943464
H	-1.916230	4.171423	4.169495	C	-1.539598	5.924666	5.064686
H	-1.143638	6.502385	4.173123	C	-1.309381	5.826557	6.426616
H	0.289106	8.312853	3.231975	C	-0.690984	4.663072	6.954621
H	1.793821	7.826028	1.286267	C	-0.288491	3.631603	6.119074
H	1.823359	5.585474	0.249382	C	0.687832	1.459191	4.260606
C	3.941573	-2.324042	-0.680301	C	0.201574	0.175679	4.002594
C	3.654330	-3.286912	-1.805249	C	0.847808	-1.001952	4.448052
C	2.449391	-4.201215	-1.505632	C	2.029085	-0.899227	5.158868
C	1.112795	-3.438278	-1.434377	C	2.625150	0.372635	5.399732
C	2.277430	-5.351488	-2.516252	C	1.966032	1.570354	4.928875
O	5.241311	-2.198682	-0.422596	C	2.635277	2.818456	5.108236
O	1.377952	-6.175179	-2.426836	C	3.863004	2.887038	5.749883
O	3.215830	-5.343490	-3.490951	C	4.486728	1.714207	6.250519
C	3.094643	-6.418261	-4.463706	C	3.878394	0.482351	6.072581
C	5.623359	-1.283539	0.647843	O	-1.014644	0.022420	3.309709
H	3.446053	-2.688257	-2.713340	C	0.534829	-3.248261	-0.723395
H	1.016375	-2.728673	-2.286744	C	0.153205	-4.624417	-0.152224
H	0.273612	-4.142351	-1.497726	C	-1.306783	-4.726895	0.331637
H	4.563913	-3.869104	-2.009832	C	-1.559288	-3.914910	1.568124
H	2.624878	-4.716589	-0.541006	O	-1.149470	-2.748588	1.774987
H	3.919019	-6.260072	-5.169735	C	0.336948	-5.648627	-1.288273
H	3.185344	-7.393438	-3.962906	O	1.645960	-5.959614	-1.440138
H	2.121144	-6.359079	-4.972536	C	1.929027	-6.878362	-2.529890
H	6.718725	-1.318925	0.665172	O	-2.284976	-4.555262	2.479990
H	5.261663	-0.269293	0.426487	C	-2.613696	-3.839628	3.705929
H	5.200036	-1.630740	1.601310	O	-0.571694	-6.089417	-1.977144
S2c_10				O	-2.539342	0.417645	1.339285
116				C	-3.556732	1.141224	2.160404
Energy = -3595.564929737				C	-4.341053	0.104364	2.957637
C	4.695858	0.770421	-4.656366	C	-4.409879	1.932199	1.175836
C	3.538188	0.096030	-5.141884	O	-0.003179	0.797379	-1.797001
C	2.633274	-0.472884	-4.264891	C	0.377867	1.955709	-2.667442
C	2.890346	-0.419754	-2.873144	C	0.071346	3.235069	-1.899270
C	4.053618	0.129265	-2.328625	C	-0.423480	1.801055	-3.953605
C	4.955608	0.806285	-3.234763	H	-3.265025	-4.524570	4.260876
C	5.591486	1.429167	-5.548900	H	-1.695594	-3.626851	4.272579
C	6.687305	2.127890	-5.070890	H	-1.979534	-4.367368	-0.470455
C	6.922139	2.199641	-3.672885	H	-0.156714	-2.962694	-1.545497
C	6.081444	1.554475	-2.778126	H	1.543521	-3.283276	-1.157470
C	4.312970	0.030545	-0.864926	H	3.015890	-7.023538	-2.507122
C	3.345780	0.461896	0.044945	H	1.609198	-6.442595	-3.488394
C	3.543784	0.481874	1.445084	H	2.534647	-1.799741	5.523008
C	4.740975	0.020774	1.960716	H	0.393150	-1.968101	4.217646
C	5.744921	-0.516564	1.104219	H	2.174096	3.730352	4.723088
C	5.530202	-0.534486	-0.325314	H	4.435688	3.856270	5.868360
C	6.520597	-1.154586	-1.144476	H	5.449450	1.784732	6.765457
C	7.673867	-1.690635	-0.591191	H	4.354954	-0.432800	6.440965
C	7.901888	-1.632915	0.808546	H	-3.018233	1.820310	2.840232
C	6.950949	-1.060362	1.636377	H	1.457671	1.880293	-2.871072
O	2.117704	0.966412	-0.436238	H	1.401239	-7.830386	-2.370283
P	1.016588	-0.144188	-0.978923	H	-1.589865	-5.771420	0.528245
O	1.934219	-1.033666	-2.037608	H	-5.194061	2.481979	1.722757
Rh	-0.069954	-1.490144	0.389328	H	-3.799587	2.661323	0.620479
P	-0.963653	0.250346	1.656290	H	-4.898070	1.256630	0.453802
O	-0.193215	1.717442	1.557856	H	4.918515	0.048893	3.040710
C	-0.486326	2.752064	2.472396	H	2.751362	0.874406	2.086191
C	-0.089369	2.647583	3.807805	H	6.359011	-1.215211	-2.222972
				H	8.413949	-2.166521	-1.241831

H	8.820422	-2.051995	1.230095	C	-2.493067	-3.110837	-1.530493
H	7.103946	-1.026282	2.720520	C	-3.855471	-3.110481	-1.225860
H	-5.126455	0.605284	3.548704	C	-5.707552	-4.279030	0.025198
H	-4.827590	-0.617505	2.279902	C	-6.166341	-5.371784	0.746128
H	-3.678381	-0.434650	3.652766	C	-5.317777	-6.480829	1.001653
H	-0.194753	2.639051	-4.633300	C	-4.009013	-6.462848	0.549330
H	-0.172043	0.861043	-4.469249	C	-3.498388	-5.348616	-0.179537
H	-1.505278	1.810805	-3.741139	C	-4.372039	-4.235339	-0.477373
H	0.346478	4.109222	-2.513942	O	-1.935190	-2.001654	-2.201863
H	-1.006898	3.297644	-1.673679	O	-1.409391	0.468592	-2.390509
H	0.641390	3.274043	-0.959436	P	-1.653935	-0.658349	-1.266016
H	-1.358950	3.925878	0.875231	C	2.932333	-2.484635	-3.434700
H	-1.925691	5.847483	2.388473	C	2.219102	-1.285145	-3.420902
H	-2.033599	6.807645	4.645338	C	2.424984	-0.246817	-4.361496
H	-1.614446	6.635049	7.097369	C	3.401308	-0.396786	-5.329111
H	-0.533983	4.575564	8.034013	C	5.284578	-1.683940	-6.304996
H	0.177375	2.740118	6.544761	C	6.124930	-2.784358	-6.291841
H	1.729321	-0.977920	-4.615349	C	5.942665	-3.798488	-5.315747
H	3.362364	0.050950	-6.221623	C	4.913114	-3.715996	-4.390048
H	5.386689	1.381459	-6.623819	C	4.011829	-2.610245	-4.389261
H	7.364254	2.634376	-5.765159	C	4.227670	-1.557298	-5.356351
H	7.773414	2.774134	-3.295002	O	1.200515	-1.088019	-2.465241
H	6.272810	1.627099	-1.705245	C	-4.708286	-1.956359	-1.628305
H	1.254974	-2.341888	0.484417	C	-4.340629	-0.656776	-1.270530
H	-3.133259	-2.900813	3.467597	C	-5.163929	0.472948	-1.504072
H	0.847800	-4.896607	0.662834	C	-6.364179	0.311062	-2.170269
Sla_10				C	-7.955298	-1.129213	-3.416327
116				C	-8.308670	-2.363325	-3.935931
Energy = -3595.566191054				C	-7.464237	-3.484313	-3.724538
Rh	-0.124964	-0.735187	0.474554	C	-6.300988	-3.366032	-2.978490
O	-1.788119	-0.785575	1.824909	C	-5.917070	-2.116200	-2.406991
C	-1.496272	-0.938998	3.033609	C	-6.757360	-0.967859	-2.660619
C	-0.101026	-1.251347	3.494304	O	-3.142708	-0.416193	-0.571866
C	0.969100	-0.863784	2.451321	C	-3.791933	-0.670728	3.564509
C	2.301994	-1.569019	2.731996	H	0.091784	-0.778474	4.473065
C	1.203789	0.640908	2.366413	H	2.166273	-2.661164	2.798633
O	-2.411346	-0.894852	3.988180	H	2.714877	-1.215492	3.693765
O	2.295724	1.169773	2.211102	H	-0.064435	-2.345098	3.665652
O	0.044791	1.358253	2.561130	H	2.029982	-6.333378	0.296846
C	3.900978	0.791661	-1.243910	H	2.413251	-3.946930	0.959514
C	0.224301	2.799636	2.573939	H	2.243733	-4.526955	-4.998450
C	2.157959	-5.557279	-0.465067	H	1.712387	-6.854996	-5.626469
C	2.366846	-4.242368	-0.090860	H	1.454159	-8.624355	-3.868935
C	2.560489	-3.254487	-1.086677	H	1.666666	-8.018316	-1.459753
C	2.599117	-3.552938	-2.451798	H	4.110322	0.078954	-2.057020
C	2.133790	-5.285616	-4.220416	H	-3.184978	0.129071	-3.481315
C	1.833878	-6.593395	-4.570923	H	-0.776387	3.211156	2.755337
C	1.679007	-7.594460	-3.576402	H	4.949250	2.458816	-2.124879
C	1.798899	-7.258972	-2.238358	H	3.229062	2.360303	-2.598807
C	2.085919	-5.919587	-1.841132	H	3.677624	2.933046	-0.960285
C	2.288589	-4.907167	-2.853032	H	-1.487302	-6.160681	-0.386280
O	2.800232	-1.939229	-0.646573	H	-0.582107	-4.131686	-1.551260
O	2.483184	0.564509	-0.805223	H	-6.373702	-3.433549	-0.158608
C	-2.219074	0.634053	-3.640048	H	-7.194038	-5.377722	1.122317
C	3.933979	2.223255	-1.763780	H	-5.695981	-7.340165	1.563308
C	4.825999	0.549372	-0.057981	H	-3.337657	-7.303799	0.753705
C	-2.427050	2.134319	-3.805106	H	5.860765	0.799867	-0.349326
C	-1.468884	-0.018244	-4.794414	H	4.532940	1.179911	0.795514
P	1.619605	-0.783514	-0.890278	H	4.804841	-0.506336	0.251885
C	-2.136746	-5.305484	-0.598039	H	-3.014180	2.327829	-4.718604
C	-1.628560	-4.193343	-1.243781	H	-2.971995	2.558101	-2.946949
				H	-1.458642	2.653509	-3.898366

H	-2.061392	0.086397	-5.719503	C	-3.591740	0.730619	-2.367847
H	-0.493283	0.468864	-4.953730	O	-1.147548	1.476541	0.345526
H	-1.305931	-1.089402	-4.604533	O	-0.884172	1.163632	2.831196
H	1.803729	0.649902	-4.300550	P	-1.234040	0.303974	1.516717
H	3.566287	0.389673	-6.072793	C	3.889466	1.432843	-0.134489
H	5.427377	-0.882865	-7.038240	C	3.126268	1.604843	1.021785
H	6.936212	-2.867696	-7.020853	C	3.521152	2.434035	2.099224
H	6.624828	-4.653591	-5.288574	C	4.740595	3.083518	2.039352
H	4.794293	-4.501007	-3.640467	C	6.906844	3.493528	0.900608
H	-4.831528	1.449403	-1.141924	C	7.779021	3.257722	-0.148967
H	-7.016740	1.172299	-2.347897	C	7.391782	2.393032	-1.206123
H	-8.586491	-0.250691	-3.588997	C	6.137465	1.800818	-1.215497
H	-9.228080	-2.473670	-4.518537	C	5.202895	2.039314	-0.163420
H	-7.730520	-4.452598	-4.159185	C	5.616771	2.886914	0.932676
H	-5.658218	-4.237348	-2.834259	O	1.867621	0.975722	1.130989
H	0.919269	3.088644	3.376493	C	-3.960294	1.545621	0.047746
H	0.620729	3.140724	1.606482	C	-3.833340	0.922894	1.292146
H	-4.370742	-0.672951	4.495160	C	-4.711565	1.172195	2.376130
H	-3.869227	0.296796	3.048671	C	-5.716548	2.110772	2.233280
H	-4.110869	-1.480930	2.893750	C	-6.830832	3.882928	0.900320
H	0.569432	-1.921950	1.278102	C	-6.919206	4.645761	-0.251908
H	3.043516	-1.349814	1.952959	C	-6.011803	4.417477	-1.319106

B.2.11 Strukturen der 11 Spezies

R1c_11

116

Energy = -3595.584180440

Rh	-0.177689	-1.592151	1.344760	H	2.251765	-1.774157	-4.204869
C	4.034782	-1.109079	2.981660	H	2.263863	-2.599943	-1.845155
C	2.527629	-1.101954	-3.385305	H	3.800624	3.191125	-2.129643
C	2.527048	-1.564616	-2.082057	H	3.629726	4.015445	-4.450415
C	2.915214	-0.689705	-1.039037	H	3.012209	2.458237	-6.316334
C	3.360061	0.616726	-1.263120	H	2.501981	0.068196	-5.817746
C	3.530548	2.499072	-2.930581	H	4.517690	-0.476932	2.220135
C	3.431910	2.961028	-4.234669	H	-2.212876	2.757146	2.426963
C	3.074061	2.082519	-5.290671	H	5.329636	-0.556176	4.617547
H	0.545483	-3.445248	1.742021	H	3.905331	0.506356	4.434701
C	2.792019	0.754881	-5.014879	H	3.716319	-1.133939	5.130935
C	2.863594	0.250624	-3.682644	H	-0.571013	0.358430	-4.035417
C	3.270126	1.132285	-2.611581	H	0.295838	0.924208	-1.751959
O	2.921941	-1.218619	0.265599	H	-5.696664	0.711035	-1.803196
O	2.557146	-1.054415	2.745400	H	-6.516787	-0.004798	-4.019107
C	-1.378622	2.549767	3.115905	H	-4.913385	-0.401173	-5.906394
C	4.253525	-0.536349	4.375885	H	-2.462967	-0.137826	-5.525231
C	4.485134	-2.558036	2.836634	H	5.567301	-2.631464	3.039870
C	-1.865512	2.534560	4.559409	H	3.955161	-3.202545	3.557830
C	-0.231424	3.519037	2.863058	H	4.303530	-2.928360	1.815977
P	1.797637	-0.660184	1.374924	H	-2.230065	3.537952	4.837357
C	-1.264998	0.550736	-3.210999	H	-2.690430	1.817453	4.694248
C	-0.775851	0.865244	-1.956301	H	-1.044754	2.260915	5.243135
C	-1.689564	1.141163	-0.912412	H	-0.574602	4.551295	3.048727
C	-3.075607	1.146601	-1.082555	H	0.607988	3.308013	3.546316
C	-4.984808	0.541275	-2.614054	H	0.122885	3.449872	1.823998
C	-5.443533	0.137492	-3.859103	H	2.844670	2.551307	2.948673
C	-4.536446	-0.094815	-4.926025	H	5.056355	3.740260	2.856420
C	-3.175855	0.055059	-4.716165	H	7.199566	4.142207	1.733052
C	-2.667374	0.449896	-3.443627	H	8.768509	3.724142	-0.159057

H	-6.063525	5.040490	-2.217269	C	3.691684	-0.655148	0.112110
H	-4.357923	3.262929	-2.061895	C	4.053761	0.164929	1.184005
O	-1.974002	-2.754550	1.593613	C	5.421027	2.150541	1.917790
C	-2.306165	-3.889139	1.194558	C	6.413992	3.085377	1.664500
C	-1.559313	-4.761751	0.208969	C	7.128896	3.071324	0.438221
C	-0.211277	-4.189556	-0.257326	C	6.814528	2.131727	-0.529400
C	0.845273	-4.095555	0.865836	C	5.787341	1.167812	-0.309080
C	0.403049	-4.967671	-1.433160	C	5.086575	1.151615	0.954896
O	-3.429240	-4.464467	1.617446	H	5.980931	0.233166	-2.265922
O	1.555778	-4.808840	-1.815143	H	4.083271	-1.370003	-1.891237
O	-0.474146	-5.820241	-2.009504	O	2.653215	-1.592831	0.259381
C	0.044288	-6.556199	-3.152185	H	4.875119	2.182859	2.862847
C	-4.246154	-3.704242	2.557662	H	6.644812	3.844808	2.417650
H	-1.432136	-5.758850	0.668500	H	7.915436	3.809358	0.255555
H	1.002733	-5.077230	1.348773	H	7.343426	2.121515	-1.488460
H	1.808158	-3.747847	0.470642	O	0.365000	-2.278444	1.058682
H	-2.228611	-4.923987	-0.653355	H	-1.482041	4.063146	-2.951066
H	-0.382606	-3.163007	-0.658285	H	-2.913817	2.996922	-2.776198
H	-0.786289	-7.191218	-3.483362	H	0.230500	-4.087564	3.913175
H	0.348300	-5.857595	-3.945510	H	-0.438148	-2.460473	3.598843
H	0.909691	-7.163813	-2.848780	H	-1.027078	-3.866893	2.659069
H	-5.131069	-4.329335	2.723867	H	1.817444	-5.165676	2.132305
H	-3.689281	-3.551010	3.493784	H	0.556828	-4.943689	0.882965
H	-4.516780	-2.733301	2.119621	H	2.193994	-4.242898	0.649506
R3c_11				H	-0.877717	-0.954199	-3.511030
116				O	1.367455	-1.958546	-2.650153
Energy = -3595.586852114				P	1.077816	-1.035289	0.323762
Rh	0.159680	-0.505352	-1.585091	C	-4.065927	0.772337	1.215590
C	-4.713936	-2.436934	-1.642470	C	-2.769998	1.188396	1.525962
C	-3.899387	-1.363476	-1.950967	C	-2.481629	2.194587	2.480189
C	-3.671836	-0.359065	-0.979478	C	-3.526462	2.844167	3.111712
C	-4.274169	-0.369691	0.281000	C	-5.959482	3.261950	3.368901
C	-5.586523	-1.726602	1.950606	C	-7.270282	3.004640	3.003685
C	-6.331853	-2.854427	2.261303	C	-7.547780	2.018610	2.020895
C	-6.592124	-3.845800	1.279397	C	-6.522180	1.288252	1.439099
C	-6.074407	-3.701196	0.003194	C	-5.161243	1.508732	1.807366
C	-5.289261	-2.563337	-0.345450	C	-4.878968	2.542810	2.778221
C	-5.058048	-1.530862	0.639486	O	-1.664643	0.550538	0.927393
H	-4.911276	-3.213160	-2.389008	H	-1.436325	2.428654	2.698823
H	-3.439966	-1.256843	-2.937040	H	-3.323588	3.616960	3.860360
O	-2.849742	0.720549	-1.355329	H	-5.729119	4.034190	4.110506
H	-5.389129	-0.978714	2.721615	H	-8.090376	3.567407	3.459211
H	-6.720262	-2.981713	3.276442	H	-8.582063	1.835612	1.714100
H	-7.189627	-4.725479	1.536281	H	-6.753517	0.539869	0.677787
H	-6.250734	-4.467440	-0.759418	C	3.359992	0.029731	2.495673
O	-0.996710	2.373091	-0.934869	C	1.966682	0.094977	2.552197
C	-1.951312	3.526096	-0.897351	C	1.234960	0.080799	3.764456
C	0.955684	-3.183475	2.091224	C	1.915574	-0.053835	4.960706
C	-1.201872	4.660341	-0.209593	C	4.029535	-0.437546	6.203337
C	-2.365456	3.840588	-2.330261	C	5.397690	-0.651769	6.214589
H	-2.824329	3.218022	-0.300109	C	6.118583	-0.667870	4.991910
C	-0.139861	-3.409005	3.126188	C	5.473033	-0.445607	3.784599
C	1.408464	-4.459520	1.389498	C	4.068608	-0.197863	3.735778
H	1.816014	-2.664141	2.541084	C	3.330739	-0.222603	4.979135
H	-1.851140	5.550276	-0.152486	O	1.224425	0.246393	1.364918
H	-0.908361	4.378582	0.813625	H	0.147994	0.186338	3.723363
H	-0.295126	4.927075	-0.777494	H	1.368814	-0.054290	5.909291
H	-3.026872	4.723887	-2.337370	H	3.457088	-0.443402	7.137188
P	-1.323766	0.817931	-0.669960	H	5.921593	-0.820659	7.159999
C	5.426891	0.232344	-1.321377	H	7.195213	-0.863189	5.000259
C	4.380858	-0.650186	-1.125149	H	6.042171	-0.470446	2.852621
				C	1.868460	-1.820604	-3.788340

C	1.868769	-0.539141	-4.582685	C	-2.630282	-0.320536	2.737213
C	0.442203	-0.160016	-5.090365	C	-2.745376	0.765957	3.584466
C	-0.571958	0.022553	-3.954166	C	-3.233022	2.015912	3.103174
C	0.566560	1.151012	-5.886231	C	-3.647313	2.136287	1.722574
O	2.449193	-2.840060	-4.416415	C	-4.045673	3.423667	1.252283
O	0.183130	2.241698	-5.491142	C	-4.073944	4.519243	2.102132
O	1.177407	0.926838	-7.072608	C	-3.710233	4.387532	3.467979
C	1.370546	2.109082	-7.896654	C	-3.293097	3.159342	3.954115
C	2.462541	-4.124192	-3.721470	O	-2.942932	-1.340554	0.576418
H	2.231807	0.262473	-3.912821	C	2.416586	-2.743361	1.176378
H	-0.139126	0.745254	-3.201123	C	2.421699	-4.245772	1.508785
H	-1.498568	0.510429	-4.289578	C	1.090080	-4.953924	1.116179
H	2.551998	-0.635442	-5.438737	C	-0.097528	-4.349750	1.815771
H	0.104622	-0.945943	-5.789496	O	-0.560325	-3.209669	1.582020
H	1.873378	1.747972	-8.802034	C	3.531373	-4.927220	0.694210
H	0.398168	2.561928	-8.141163	O	4.304836	-5.708979	1.478979
H	1.992653	2.845590	-7.366246	C	5.365870	-6.418928	0.781585
H	2.975426	-4.806357	-4.409097	O	-0.627863	-5.137515	2.746797
H	3.010410	-4.030472	-2.772940	C	-1.771602	-4.619621	3.487706
H	1.432245	-4.455501	-3.527291	O	3.669192	-4.785584	-0.512893
S2c_11				O	-2.238653	-2.520665	-1.533678
116				C	-3.663889	-2.844826	-1.855138
Energy = -3595.589278554				C	-4.080288	-4.032127	-0.995034
C	5.642605	2.496597	-2.116452	C	-3.701830	-3.128014	-3.351386
C	5.684089	1.147389	-2.573796	O	0.997837	-0.452019	-2.681028
C	4.755096	0.223512	-2.132642	C	1.449437	0.500651	-3.743308
C	3.780846	0.619280	-1.182726	C	0.233178	1.287604	-4.214885
C	3.742108	1.893033	-0.610732	C	2.089735	-0.352528	-4.830887
C	4.653623	2.886347	-1.136197	H	-2.090957	-5.452025	4.125303
C	6.547187	3.473304	-2.624569	H	-1.459236	-3.758189	4.096848
C	6.473632	4.794165	-2.214701	H	0.945890	-4.832892	0.026726
C	5.478685	5.187993	-1.282327	H	2.137493	-2.631484	0.086388
C	4.591374	4.260063	-0.757318	H	3.416797	-2.288173	1.232198
C	2.767911	2.194188	0.476270	H	5.868689	-7.011739	1.554474
C	1.409878	1.932742	0.285289	H	6.061030	-5.701315	0.320866
C	0.411591	2.262825	1.231784	H	-2.440145	0.684341	4.632852
C	0.785688	2.846048	2.428539	H	-2.226161	-1.278242	3.072810
C	2.159912	3.067201	2.733994	H	-4.322062	3.544815	0.202725
C	3.172368	2.721797	1.760517	H	-4.377130	5.496178	1.713651
C	4.541194	2.880567	2.131137	H	-3.749148	5.258112	4.129437
C	4.892145	3.387004	3.373817	H	-2.995613	3.046444	5.002338
C	3.895099	3.765722	4.311021	H	-4.273776	-1.960660	-1.611002
C	2.556844	3.602577	3.994379	H	2.192227	1.178845	-3.294055
O	0.981382	1.359411	-0.930032	H	4.939954	-7.066738	0.000789
P	1.243270	-0.270664	-1.098968	H	1.144911	-6.026373	1.357462
O	2.876157	-0.379288	-0.768988	H	-4.730301	-3.389705	-3.652083
Rh	0.290456	-1.777915	0.180817	H	-3.386703	-2.245066	-3.929008
P	-1.714188	-1.347747	-0.556780	H	-3.039058	-3.972107	-3.604635
O	-1.922957	0.132508	-1.275448	H	0.023270	3.126530	3.162233
C	-3.221825	0.593654	-1.575826	H	-0.634996	2.062743	0.988940
C	-4.078034	0.994800	-0.546894	H	5.321582	2.588208	1.425043
C	-5.420655	1.390390	-0.911469	H	5.949705	3.492813	3.634844
C	-5.779587	1.478947	-2.309300	H	4.186655	4.173492	5.283484
C	-4.816257	1.143952	-3.304144	H	1.777165	3.872731	4.714991
C	-3.562447	0.683182	-2.947141	H	-5.122584	-4.310513	-1.226894
C	-7.099823	1.878869	-2.668950	H	-3.436402	-4.903831	-1.200129
C	-8.050041	2.151961	-1.699480	H	-4.021343	-3.780581	0.075069
C	-7.712525	2.026047	-0.326667	H	2.435935	0.296114	-5.653216
C	-6.432039	1.657124	0.058106	H	2.955584	-0.909960	-4.441510
C	-3.602105	0.972220	0.864931	H	1.360883	-1.072309	-5.238755
C	-3.049232	-0.197855	1.390871	H	0.537443	2.004077	-4.996833
				H	-0.520043	0.607123	-4.646299

H	-0.219676	1.849032	-3.383797	P	0.706231	-0.581122	1.251100
H	-2.816789	0.399326	-3.693534	C	0.798573	0.839098	-4.394249
H	-5.090270	1.233225	-4.360520	C	1.633987	0.252245	-3.441069
H	-7.351541	1.953069	-3.732346	C	2.965397	-0.143393	-3.712414
H	-9.061533	2.452591	-1.987989	C	3.467169	0.009537	-4.992075
H	-8.471968	2.217320	0.437695	C	3.133483	0.605042	-7.378058
H	-6.192808	1.556649	1.119397	C	2.317597	1.048838	-8.405114
H	4.757174	-0.811694	-2.484240	C	0.972988	1.411588	-8.130871
H	6.451141	0.855092	-3.298355	C	0.471405	1.351951	-6.839225
H	7.296797	3.159143	-3.358811	C	1.289242	0.921973	-5.751854
H	7.170538	5.535945	-2.615948	C	2.645934	0.514611	-6.041231
H	5.405808	6.236591	-0.977999	O	1.175528	0.087526	-2.114707
H	3.828749	4.582005	-0.044704	C	1.063335	1.017571	4.156259
H	1.780635	-2.154567	1.873258	C	1.020195	-0.357484	3.910669
H	-2.568692	-4.321798	2.792058	C	1.648525	-1.314323	4.745265
H	2.621236	-4.403837	2.581710	C	2.385784	-0.885101	5.833192
S1a_11				C	3.378111	0.956705	7.167323
116				C	3.586279	2.308345	7.384960
Energy = -3595.585327705				C	2.983161	3.261520	6.523430
Rh	-1.053403	-0.946348	0.072095	C	2.164015	2.857026	5.479891
O	-2.567376	-0.892760	1.570639	C	1.906325	1.474108	5.239869
C	-2.963551	-1.842237	2.291826	C	2.556150	0.505271	6.093469
C	-2.410586	-3.246666	2.280042	O	0.264363	-0.874552	2.835189
C	-2.294574	-3.827621	0.851135	C	-4.480603	-0.307201	3.295719
C	-3.656310	-3.998530	0.152077	H	-1.406047	-3.189234	2.736543
C	-1.499094	-5.132494	0.768260	H	-4.165926	-3.027207	0.030365
O	-3.937624	-1.657822	3.174143	H	-4.319073	-4.660609	0.735537
O	-1.378370	-5.779890	-0.262645	H	-3.035876	-3.882032	2.925677
O	-0.925381	-5.476924	1.951144	H	-4.244343	2.395562	-3.063683
C	0.722992	-3.176508	-3.493121	H	-3.427663	0.073917	-2.570114
C	-0.141131	-6.697828	1.909403	H	0.924019	3.439547	-4.949469
C	-3.216379	2.103813	-3.302006	H	0.132695	5.751016	-5.304580
C	-2.772242	0.824245	-3.022129	H	-2.241444	6.379762	-4.799002
C	-1.445217	0.461711	-3.356634	H	-3.802790	4.674058	-3.865444
C	-0.554722	1.324294	-3.998889	H	0.755159	-2.374772	-4.248480
C	-0.113649	3.696066	-4.725129	H	3.283598	-0.514537	2.328222
C	-0.559594	4.995046	-4.921606	H	0.206137	-6.852711	2.938632
C	-1.901173	5.354184	-4.628387	H	2.162428	-4.467467	-4.448698
C	-2.770083	4.406453	-4.113538	H	2.890168	-3.285564	-3.323704
C	-2.340480	3.066682	-3.882087	H	2.020904	-4.719260	-2.684283
C	-0.987056	2.686720	-4.220757	H	-1.474474	4.507672	0.844813
O	-1.050772	-0.859546	-3.064013	H	0.072597	2.741655	-0.056174
O	0.626907	-2.523419	-2.147850	H	-0.584393	2.228226	5.883489
C	3.398256	-1.160914	1.443707	H	-2.223295	3.877128	6.717907
C	2.031040	-3.956219	-3.480270	H	-3.258238	5.547975	5.159742
C	-0.513976	-4.049200	-3.677034	H	-2.680937	5.504147	2.735067
C	3.960627	-2.519611	1.840423	H	-0.432027	-4.611552	-4.623062
C	4.205717	-0.447925	0.366355	H	-0.608484	-4.769221	-2.847119
P	0.031657	-1.069249	-1.802901	H	-1.425806	-3.433615	-3.723733
C	-0.996567	3.787990	1.517507	H	4.980470	-2.393724	2.241554
C	-0.145000	2.822950	1.011530	H	3.340912	-2.995670	2.616431
C	0.473817	1.919225	1.906915	H	4.010969	-3.189339	0.966075
C	0.299166	1.959692	3.290978	H	5.218848	-0.232152	0.746624
C	-1.028617	2.947778	5.191564	H	4.301018	-1.086975	-0.527351
C	-1.950090	3.873651	5.658212	H	3.731438	0.503452	0.081430
C	-2.541790	4.815396	4.776106	H	3.571952	-0.546484	-2.897781
C	-2.218294	4.794466	3.429588	H	4.499667	-0.277363	-5.217362
C	-1.289021	3.845142	2.911617	H	4.167148	0.303339	-7.578859
C	-0.652187	2.913041	3.815200	H	2.701364	1.108154	-9.427843
O	1.339274	0.950959	1.356765	H	0.322200	1.737470	-8.947960
O	2.028911	-1.425747	0.891285	H	-0.568881	1.625727	-6.648490
				H	1.523560	-2.376016	4.516605

H	2.865330	-1.612988	6.495705
H	3.854183	0.209034	7.810678
H	4.224393	2.642662	8.208284
H	3.170854	4.328167	6.679506
H	1.718038	3.605059	4.820716
H	-0.765093	-7.539484	1.573862
H	0.709203	-6.580391	1.220665
H	-5.229290	-0.381619	4.092744
H	-3.679302	0.395311	3.564262
H	-4.944025	-0.004314	2.345768
H	-1.666043	-3.100961	0.260189
H	-3.515110	-4.446877	-0.842562