

## Electronic Supplementary Information (ESI)

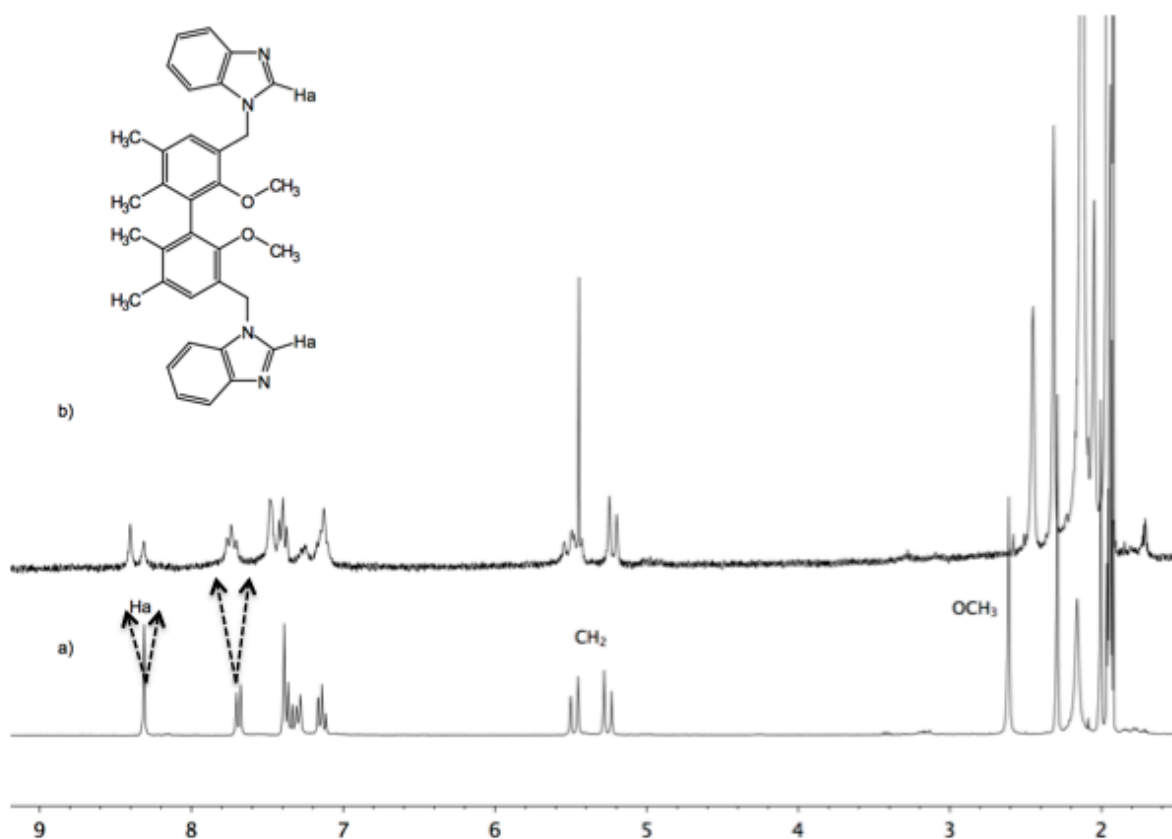
### Chiral Two Bladed $ML_2$ Metallamacrocycles: Design, Structures and Solution Behavior

Hannah Soudry,<sup>a</sup> Christophe Desmarests\*<sup>a</sup>, Geoffrey Gontard<sup>a</sup>, Tiffany Edgington,<sup>b</sup> Andrew L. Cooksy,<sup>b</sup> and Hani Amouri\*

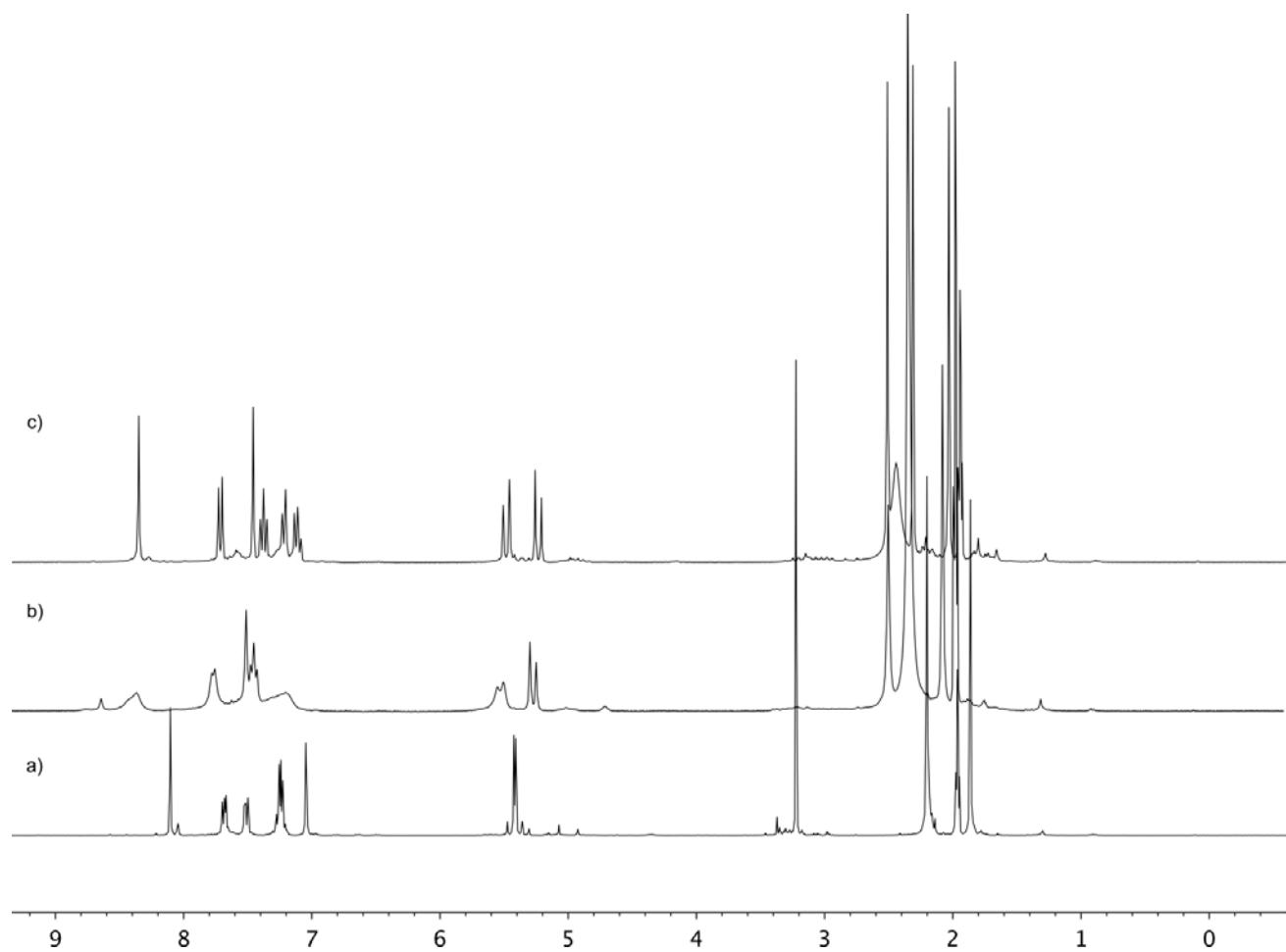
<sup>a</sup>*Sorbonne Universités, UPMC Univ Paris 06, Université Pierre et Marie Curie, Institut Parisien de Chimie Moléculaire (IPCM) UMR 8232, 4 place Jussieu, 75252 Paris cedex 05, France: christophe.desmarests@upmc.fr, hani.amouri@upmc.fr*

<sup>b</sup>Department of Chemistry, San Diego State U., San Diego CA 92182-1030, USA.

**Figure SI.**  $^1H$  NMR spectra in  $CD_3CN$  for: a)  $\{[Zn(L)_2(BF_4)_2]\}$  (**2**) and b) the pair of diastereomers  $\{[Zn((R_{ax})-L)_2(\Delta\text{-TRISPHAT})_2]\}$  (**3a**) and  $\{[Zn((S_{ax})-L)_2(\Delta\text{-TRISPHAT})_2]\}$  (**3b**)



**Figure SII.**  $^1\text{H}$  NMR spectra in  $\text{CD}_3\text{CN}$  recorded at room temperature. a) ligand **L** b)  $[1+1]$  **L**/ $\text{Zn}(\text{BF}_4)_2$  after 30 minutes c)  $[2+1]$  **L**/ $\text{Zn}(\text{BF}_4)_2$  after 5 minutes and no further changes occur upon standing for 24 hours.



## Computational Data

ML2\_R,R+2CH3CN

stoich ; program ; method ; basis ; num\_basis ; energy (Eh) ; Gibbs E (Eh)

C72H74CoN10O4(2+,4) ; Gaussian ; UB3LYP ; 3-21G,LANL2DZ ; 944 ; -3761.73071554 ; -3760.385367

Geometry

at. no. ; x ; y ; z

27 ; 0.000029 ; 0.476352 ; -0.000204  
8 ; 4.432634 ; -0.894101 ; 1.366943  
8 ; 5.035016 ; -0.057836 ; -1.459678  
7 ; 1.383264 ; -1.157283 ; -0.324974  
7 ; 2.677003 ; -2.874092 ; 0.335111  
7 ; 3.464721 ; 2.615337 ; -1.447680  
7 ; 1.471217 ; 1.891350 ; -0.698650  
6 ; 1.766616 ; -1.896989 ; -1.471590  
6 ; 1.480526 ; -1.714215 ; -2.825662  
1 ; 0.861969 ; -0.890645 ; -3.150168  
6 ; 2.021147 ; -2.616206 ; -3.738579  
1 ; 1.813769 ; -2.498002 ; -4.795366  
6 ; 2.836767 ; -3.685257 ; -3.316066  
1 ; 3.239014 ; -4.369761 ; -4.052740  
6 ; 3.134602 ; -3.877308 ; -1.969297  
1 ; 3.773826 ; -4.689631 ; -1.651333  
6 ; 2.589156 ; -2.975224 ; -1.057195  
6 ; 1.950900 ; -1.777456 ; 0.709081  
1 ; 1.868747 ; -1.463847 ; 1.729928  
6 ; 3.640621 ; -3.579775 ; 1.219709  
1 ; 3.513611 ; -4.657243 ; 1.089361  
1 ; 3.368055 ; -3.322129 ; 2.246729  
6 ; 5.063291 ; -3.166232 ; 0.892347  
6 ; 6.023775 ; -4.094843 ; 0.484858  
1 ; 5.775589 ; -5.151763 ; 0.481480  
6 ; 7.303295 ; -3.696552 ; 0.086836  
6 ; 7.610375 ; -2.317856 ; 0.021517  
6 ; 6.648647 ; -1.375992 ; 0.436247  
6 ; 5.403767 ; -1.813561 ; 0.912841  
6 ; 8.332462 ; -4.734102 ; -0.319724  
1 ; 7.939236 ; -5.744986 ; -0.182436  
1 ; 9.244027 ; -4.638446 ; 0.281726  
1 ; 8.619124 ; -4.619211 ; -1.372368  
6 ; 8.952718 ; -1.875198 ; -0.529157  
1 ; 9.766530 ; -2.175543 ; 0.142748  
1 ; 8.986688 ; -0.791358 ; -0.650857  
1 ; 9.145921 ; -2.341233 ; -1.502320  
6 ; 4.767793 ; -0.246489 ; 2.659789  
1 ; 4.926051 ; -0.996841 ; 3.441579  
1 ; 3.899981 ; 0.371187 ; 2.893960  
1 ; 5.655065 ; 0.379479 ; 2.555552  
6 ; 6.793368 ; 0.100991 ; 0.255520  
6 ; 7.633960 ; 0.914284 ; 1.039604  
6 ; 7.591667 ; 2.319984 ; 0.879265  
6 ; 6.687243 ; 2.879904 ; -0.026297  
1 ; 6.645287 ; 3.958967 ; -0.132924  
6 ; 5.856152 ; 2.077429 ; -0.813119  
6 ; 5.932698 ; 0.691848 ; -0.684798  
6 ; 8.565635 ; 0.308222 ; 2.072754  
1 ; 8.390715 ; -0.764001 ; 2.176583

1 ; 8.426725 ; 0.782513 ; 3.051317  
1 ; 9.613349 ; 0.461506 ; 1.784853  
6 ; 8.508997 ; 3.215076 ; 1.691224  
1 ; 8.351518 ; 4.265830 ; 1.433129  
1 ; 9.561450 ; 2.972651 ; 1.501852  
1 ; 8.332993 ; 3.098095 ; 2.767555  
6 ; 5.623269 ; -0.923882 ; -2.515298  
1 ; 6.183994 ; -0.319638 ; -3.236061  
1 ; 4.768346 ; -1.399571 ; -2.994235  
1 ; 6.273640 ; -1.678424 ; -2.071229  
6 ; 4.909642 ; 2.658247 ; -1.837604  
1 ; 5.146326 ; 3.711831 ; -1.998043  
1 ; 5.008744 ; 2.126302 ; -2.787123  
6 ; 2.522570 ; 3.551015 ; -1.888134  
6 ; 2.649543 ; 4.720836 ; -2.640106  
1 ; 3.607224 ; 5.060981 ; -3.011937  
6 ; 1.490495 ; 5.444185 ; -2.899664  
1 ; 1.551925 ; 6.359468 ; -3.475125  
6 ; 0.238287 ; 5.013157 ; -2.414729  
1 ; -0.639449 ; 5.617748 ; -2.610232  
6 ; 0.114042 ; 3.844907 ; -1.667910  
1 ; -0.840376 ; 3.531441 ; -1.271165  
6 ; 1.270593 ; 3.099590 ; -1.411841  
6 ; 2.794310 ; 1.641886 ; -0.754174  
1 ; 3.282318 ; 0.775891 ; -0.342022  
8 ; -4.433004 ; -0.893848 ; -1.367069  
8 ; -5.034793 ; -0.057751 ; 1.459704  
7 ; -1.383413 ; -1.157389 ; 0.324682  
7 ; -2.677211 ; -2.874095 ; -0.335615  
7 ; -3.464486 ; 2.615339 ; 1.447720  
7 ; -1.471064 ; 1.891225 ; 0.698555  
6 ; -1.766569 ; -1.897388 ; 1.471184  
6 ; -1.480245 ; -1.714971 ; 2.825253  
1 ; -0.861588 ; -0.891523 ; 3.149868  
6 ; -2.020748 ; -2.617174 ; 3.738033  
1 ; -1.813195 ; -2.499237 ; 4.794816  
6 ; -2.836472 ; -3.686091 ; 3.315392  
1 ; -3.238629 ; -4.370758 ; 4.051964  
6 ; -3.134508 ; -3.877814 ; 1.968620  
1 ; -3.773807 ; -4.690040 ; 1.650557  
6 ; -2.589178 ; -2.975522 ; 1.056657  
6 ; -1.951181 ; -1.777329 ; -0.709418  
1 ; -1.869209 ; -1.463510 ; -1.730218  
6 ; -3.640974 ; -3.579570 ; -1.220190  
1 ; -3.514001 ; -4.657068 ; -1.090032  
1 ; -3.368544 ; -3.321795 ; -2.247215  
6 ; -5.063593 ; -3.166029 ; -0.892580  
6 ; -6.024039 ; -4.094681 ; -0.485066  
1 ; -5.775864 ; -5.151604 ; -0.481863  
6 ; -7.303484 ; -3.696419 ; -0.086802  
6 ; -7.610535 ; -2.317718 ; -0.021264  
6 ; -6.648861 ; -1.375820 ; -0.436018  
6 ; -5.404060 ; -1.813360 ; -0.912859  
6 ; -8.332615 ; -4.733989 ; 0.319795  
1 ; -7.939435 ; -5.744866 ; 0.182333  
1 ; -9.244269 ; -4.638242 ; -0.281506  
1 ; -8.619115 ; -4.619209 ; 1.372495  
6 ; -8.952781 ; -1.875107 ; 0.529683  
1 ; -9.766723 ; -2.175462 ; -0.142057  
1 ; -8.986747 ; -0.791271 ; 0.651418

1 ; -9.145774 ; -2.341167 ; 1.502879  
6 ; -4.768368 ; -0.246262 ; -2.659882  
1 ; -4.926638 ; -0.996629 ; -3.441654  
1 ; -3.900641 ; 0.371500 ; -2.894145  
1 ; -5.655682 ; 0.379627 ; -2.555543  
6 ; -6.793517 ; 0.101156 ; -0.255131  
6 ; -7.634211 ; 0.914523 ; -1.039033  
6 ; -7.591810 ; 2.320213 ; -0.878677  
6 ; -6.687182 ; 2.880053 ; 0.026735  
1 ; -6.645149 ; 3.959111 ; 0.133394  
6 ; -5.856013 ; 2.077511 ; 0.813397  
6 ; -5.932631 ; 0.691924 ; 0.685055  
6 ; -8.566123 ; 0.308525 ; -2.072014  
1 ; -8.391195 ; -0.763683 ; -2.175976  
1 ; -8.427477 ; 0.782908 ; -3.050568  
1 ; -9.613770 ; 0.461750 ; -1.783832  
6 ; -8.509252 ; 3.215374 ; -1.690428  
1 ; -8.351781 ; 4.266102 ; -1.432218  
1 ; -9.561677 ; 2.972891 ; -1.500980  
1 ; -8.333354 ; 3.098539 ; -2.766794  
6 ; -5.622698 ; -0.924139 ; 2.515223  
1 ; -6.183207 ; -0.320116 ; 3.236341  
1 ; -4.767620 ; -1.399954 ; 2.993754  
1 ; -6.273194 ; -1.678560 ; 2.071139  
6 ; -4.909380 ; 2.658236 ; 1.837811  
1 ; -5.146019 ; 3.711806 ; 1.998396  
1 ; -5.008353 ; 2.126173 ; 2.787274  
6 ; -2.522257 ; 3.550964 ; 1.888108  
6 ; -2.649131 ; 4.720822 ; 2.640039  
1 ; -3.606779 ; 5.061043 ; 3.011886  
6 ; -1.490017 ; 5.444068 ; 2.899576  
1 ; -1.551363 ; 6.359370 ; 3.475018  
6 ; -0.237846 ; 5.012908 ; 2.414669  
1 ; 0.639949 ; 5.617404 ; 2.610194  
6 ; -0.113705 ; 3.844632 ; 1.667862  
1 ; 0.840694 ; 3.531028 ; 1.271200  
6 ; -1.270329 ; 3.099430 ; 1.411788  
6 ; -2.794178 ; 1.641845 ; 0.754189  
1 ; -3.282258 ; 0.775865 ; 0.342088  
6 ; -1.056732 ; 1.233554 ; -3.134212  
6 ; 1.056610 ; 1.233236 ; 3.134539  
6 ; 1.280279 ; 1.927267 ; 4.392240  
1 ; 2.351226 ; 1.995349 ; 4.610150  
1 ; 0.864703 ; 2.938712 ; 4.316162  
1 ; 0.784682 ; 1.399787 ; 5.214240  
6 ; -1.280496 ; 1.927560 ; -4.391905  
1 ; -2.351475 ; 1.995688 ; -4.609686  
1 ; -0.864877 ; 2.938992 ; -4.315897  
1 ; -0.785046 ; 1.400036 ; -5.213960  
7 ; 0.858276 ; 0.701985 ; 2.120635  
7 ; -0.858154 ; 0.702354 ; -2.120337  
vib. constant (cm-1); IR intensity (km/mol)  
9.0433 ; 0.0763  
9.5770 ; 0.1319  
13.2893 ; 0.0319  
25.5404 ; 0.0173  
27.2907 ; 1.5323  
30.7118 ; 0.0618  
33.2549 ; 0.0026  
36.1927 ; 0.3536

39.0433 ; 2.9009  
41.3029 ; 0.0878  
45.1542 ; 1.6923  
47.2769 ; 0.2999  
49.3022 ; 0.7757  
53.1304 ; 0.4187  
54.1106 ; 1.0245  
55.9654 ; 0.5787  
66.4819 ; 2.9028  
70.0269 ; 2.4299  
70.3017 ; 0.6340  
75.8200 ; 0.3996  
78.2934 ; 1.2146  
84.2255 ; 0.2098  
86.2753 ; 1.3249  
87.8730 ; 2.8947  
88.6407 ; 0.5881  
95.4895 ; 0.3837  
98.8136 ; 0.0893  
106.4075 ; 0.0929  
106.7028 ; 1.4326  
108.8164 ; 1.8661  
109.8026 ; 7.9026  
112.3202 ; 2.5935  
113.7685 ; 0.0101  
115.5145 ; 1.2147  
117.2185 ; 3.9109  
119.9410 ; 0.0087  
122.9464 ; 0.6195  
124.2224 ; 0.6719  
129.4059 ; 0.3755  
129.6049 ; 0.1500  
130.6426 ; 1.9224  
130.8508 ; 0.7465  
134.3676 ; 1.9989  
138.6139 ; 0.7225  
144.1569 ; 0.0934  
144.2700 ; 0.0407  
146.9603 ; 0.0098  
147.2749 ; 0.0001  
149.3285 ; 0.0102  
158.0480 ; 0.4227  
158.1265 ; 0.0391  
160.5675 ; 4.1171  
162.2417 ; 0.5987  
167.4782 ; 1.0206  
168.0749 ; 0.7926  
169.7732 ; 0.1358  
174.4934 ; 4.1586  
177.1189 ; 0.8988  
178.3076 ; 0.9904  
180.8531 ; 0.0543  
182.5982 ; 3.1007  
185.0412 ; 1.2762  
186.5600 ; 17.6906  
189.0771 ; 1.8118  
189.4567 ; 1.0407  
193.7894 ; 1.0814  
194.7370 ; 3.5727  
198.3152 ; 2.5447

202.2338 ; 5.0211  
210.2845 ; 30.0266  
218.8059 ; 0.4014  
226.8984 ; 29.7444  
231.3451 ; 23.5088  
233.1735 ; 6.1079  
237.6581 ; 5.2531  
241.0422 ; 21.4232  
241.1767 ; 1.1334  
251.3164 ; 1.0265  
252.4678 ; 8.2093  
253.8882 ; 13.2694  
257.8772 ; 1.2994  
261.2086 ; 0.5693  
263.3461 ; 3.6933  
274.6619 ; 8.5394  
282.2227 ; 8.8840  
286.4928 ; 8.1665  
287.5709 ; 7.0386  
288.8877 ; 5.4450  
293.3439 ; 8.3339  
321.2732 ; 0.3365  
321.5214 ; 4.8957  
326.5797 ; 0.1081  
326.6960 ; 0.5382  
334.3828 ; 0.0985  
335.9689 ; 1.4265  
350.0376 ; 5.5318  
351.9763 ; 1.9146  
352.0032 ; 16.0139  
354.3942 ; 5.5025  
354.5706 ; 13.3147  
356.2020 ; 1.0675  
374.3548 ; 2.9361  
384.0420 ; 0.8834  
395.8742 ; 8.6014  
395.9449 ; 0.6865  
414.8793 ; 1.2886  
415.0516 ; 6.4910  
442.6913 ; 4.1115  
442.7462 ; 0.0472  
456.0404 ; 14.7437  
457.4218 ; 9.9407  
470.0941 ; 4.9506  
471.2968 ; 14.8469  
485.0663 ; 0.5700  
487.0136 ; 0.0076  
488.5997 ; 4.7842  
488.9398 ; 3.8633  
490.5622 ; 1.5372  
490.7599 ; 7.7928  
496.8559 ; 11.1295  
497.0262 ; 8.1272  
499.7196 ; 23.2371  
500.3869 ; 9.3366  
503.9070 ; 0.9071  
506.2234 ; 25.2952  
529.6463 ; 4.5960  
530.2538 ; 11.4753  
540.5264 ; 4.6245

540.7937 ; 0.8952  
544.7431 ; 27.4468  
545.2935 ; 0.5929  
560.5291 ; 2.9658  
560.7868 ; 0.0247  
571.1042 ; 0.2748  
571.7108 ; 2.9641  
590.5985 ; 2.9018  
590.7754 ; 2.0912  
603.8338 ; 10.4118  
604.5152 ; 0.5794  
613.1277 ; 6.8006  
614.5161 ; 0.1115  
619.2673 ; 0.0597  
620.9298 ; 0.4258  
626.8211 ; 8.6681  
627.3941 ; 0.2885  
638.0488 ; 2.3725  
638.7300 ; 3.5934  
640.5291 ; 0.0495  
640.6919 ; 0.2013  
659.6511 ; 12.3061  
660.0498 ; 3.3172  
661.9953 ; 5.6514  
665.0287 ; 6.7438  
668.9416 ; 0.7086  
670.3175 ; 3.4395  
682.2741 ; 9.8115  
682.4903 ; 2.9040  
709.3095 ; 5.0670  
709.8027 ; 0.3209  
715.6256 ; 58.9956  
716.1435 ; 0.2040  
757.9944 ; 4.7512  
758.9414 ; 7.6914  
759.8576 ; 20.4760  
760.2730 ; 4.8039  
769.7121 ; 2.5241  
769.7817 ; 0.4450  
791.3319 ; 130.3953  
792.7529 ; 83.6575  
794.8709 ; 13.4247  
795.8562 ; 15.0780  
795.9344 ; 112.6187  
797.4536 ; 36.0304  
799.9871 ; 1.3497  
800.4796 ; 21.2239  
820.7733 ; 5.2458  
820.7889 ; 0.0514  
834.5403 ; 1.3632  
835.2814 ; 2.5114  
841.1453 ; 0.9775  
843.4734 ; 0.4202  
854.9134 ; 17.1478  
855.0152 ; 7.9021  
876.4793 ; 6.6107  
876.4936 ; 0.5067  
881.3461 ; 5.2033  
881.3803 ; 0.0636  
897.8102 ; 0.0217



898.5960 ; 13.5378  
918.1811 ; 20.0661  
918.2100 ; 1.3117  
924.2768 ; 0.9026  
924.6066 ; 5.4678  
925.7661 ; 3.0421  
926.1978 ; 0.4842  
926.6585 ; 1.2921  
927.4409 ; 2.6949  
927.8082 ; 1.0667  
928.3309 ; 7.6933  
929.1677 ; 0.0861  
931.9473 ; 9.0661  
934.3386 ; 61.1789  
935.5925 ; 2.0359  
941.5735 ; 5.9388  
941.6216 ; 4.6873  
953.9366 ; 18.9597  
954.1296 ; 3.4960  
965.2261 ; 56.9632  
965.3422 ; 11.6993  
975.3368 ; 2.8841  
975.4007 ; 3.4192  
989.8907 ; 23.3744  
990.3340 ; 31.5069  
995.6457 ; 7.0979  
995.9112 ; 3.7348  
1005.4835 ; 1.0700  
1006.2440 ; 0.0307  
1007.3297 ; 9.2772  
1008.2677 ; 3.1629  
1041.0655 ; 0.1775  
1041.0765 ; 0.6689  
1042.8750 ; 0.2886  
1043.0507 ; 3.2927  
1043.5014 ; 4.3408  
1043.5275 ; 3.6761  
1047.0038 ; 1.3563  
1047.2520 ; 10.4375  
1047.2610 ; 6.1007  
1048.2577 ; 18.7382  
1048.3053 ; 4.4996  
1049.2840 ; 0.0111  
1066.5188 ; 44.6948  
1066.5462 ; 62.9667  
1078.5072 ; 36.8179  
1078.6562 ; 3.1543  
1081.4566 ; 43.1571  
1081.4679 ; 11.6026  
1082.7148 ; 38.4928  
1082.7589 ; 4.6782  
1091.0970 ; 21.2346  
1091.2642 ; 4.5347  
1107.4489 ; 0.6317  
1107.4515 ; 0.8231  
1109.0232 ; 0.0352  
1109.0237 ; 0.0250  
1113.0394 ; 2.6839  
1113.3841 ; 0.0356  
1117.7983 ; 6.8053

1118.5757 ; 12.6439  
1119.4895 ; 7.1352  
1119.5635 ; 19.6564  
1120.3585 ; 3.3048  
1120.3760 ; 0.1551  
1126.2720 ; 0.1749  
1126.3351 ; 9.6952  
1150.2970 ; 1.8901  
1150.3028 ; 0.7149  
1150.3469 ; 0.9557  
1150.3586 ; 0.2559  
1153.9098 ; 2.8705  
1154.3341 ; 3.9037  
1154.4435 ; 2.0287  
1156.0979 ; 0.5533  
1190.6919 ; 1.9241  
1190.7691 ; 1.0306  
1194.2585 ; 3.9830  
1194.3500 ; 1.7245  
1198.0792 ; 27.5441  
1200.1196 ; 46.7343  
1205.8447 ; 30.4013  
1207.7826 ; 10.0198  
1213.6545 ; 9.0298  
1213.8633 ; 26.2778  
1225.4974 ; 50.8068  
1226.1659 ; 29.4884  
1227.9876 ; 8.2818  
1229.1164 ; 39.0269  
1230.8345 ; 215.1851  
1233.4064 ; 2.0166  
1237.3115 ; 197.4341  
1237.9186 ; 0.1760  
1257.0315 ; 59.9397  
1257.3113 ; 5.1734  
1266.0375 ; 88.3659  
1266.8620 ; 12.2675  
1270.3972 ; 2.4887  
1270.5026 ; 8.4481  
1272.5733 ; 3.3521  
1272.9958 ; 13.4899  
1278.0873 ; 9.6288  
1278.7339 ; 93.1420  
1287.0325 ; 21.1560  
1287.1335 ; 5.5217  
1297.7866 ; 3.0454  
1297.8237 ; 14.7779  
1301.0601 ; 8.6317  
1302.3182 ; 18.9374  
1303.9202 ; 2.1026  
1304.1760 ; 11.4897  
1320.6569 ; 23.4580  
1320.8703 ; 16.7487  
1337.2840 ; 24.3323  
1337.6920 ; 59.0756  
1349.8443 ; 3.2344  
1349.8940 ; 19.5813  
1354.6597 ; 3.2488  
1354.7072 ; 24.0155  
1368.7999 ; 10.8288

1370.0446 ; 0.3398  
1371.5594 ; 26.4974  
1371.6740 ; 0.7777  
1381.3648 ; 15.4851  
1384.1752 ; 0.0442  
1390.9058 ; 27.3291  
1391.2846 ; 14.7049  
1406.6853 ; 85.2635  
1408.0160 ; 25.6489  
1416.9572 ; 10.3541  
1417.0292 ; 15.2830  
1432.3967 ; 5.0761  
1432.6221 ; 16.8583  
1448.5978 ; 17.1122  
1448.8441 ; 4.7064  
1457.5795 ; 293.2442  
1458.6147 ; 9.0878  
1463.6151 ; 6.5781  
1463.6955 ; 0.0340  
1465.1923 ; 2.9719  
1465.2330 ; 0.6028  
1467.8705 ; 3.2281  
1468.4538 ; 64.7213  
1472.3590 ; 86.0160  
1474.5399 ; 35.7798  
1474.6153 ; 13.2094  
1475.7189 ; 0.5875  
1477.0494 ; 94.1277  
1478.7841 ; 7.6691  
1479.4107 ; 36.3846  
1480.6006 ; 24.9191  
1482.3270 ; 9.2354  
1482.6937 ; 6.3688  
1500.7931 ; 13.9917  
1500.8230 ; 3.9340  
1502.4247 ; 3.1786  
1502.5025 ; 14.8959  
1505.3082 ; 22.1277  
1506.9666 ; 15.6112  
1507.2339 ; 16.6733  
1507.3886 ; 12.7514  
1528.1546 ; 10.4296  
1528.2096 ; 8.8920  
1531.0469 ; 4.1933  
1531.1809 ; 1.4404  
1531.9775 ; 0.9227  
1532.0378 ; 0.6010  
1535.9065 ; 12.5833  
1535.9161 ; 8.2668  
1539.8657 ; 19.3894  
1539.9040 ; 0.6047  
1541.9233 ; 3.0178  
1541.9469 ; 65.8184  
1546.0420 ; 1.0468  
1546.0491 ; 0.3189  
1547.2629 ; 3.6256  
1547.2900 ; 2.4032  
1547.5952 ; 18.8880  
1547.6145 ; 8.2386  
1548.9597 ; 1.6973

1548.9642 ; 17.4618  
1549.3433 ; 4.1011  
1549.3470 ; 9.2855  
1550.6196 ; 1.9304  
1550.6287 ; 0.2685  
1556.6998 ; 6.0759  
1556.7095 ; 0.6912  
1557.1304 ; 0.9747  
1557.1327 ; 11.7298  
1565.1106 ; 5.2213  
1565.1175 ; 36.0491  
1566.5369 ; 7.9530  
1566.5432 ; 9.1379  
1575.8704 ; 5.5225  
1575.8913 ; 5.8434  
1580.4199 ; 2.8294  
1580.4344 ; 5.6027  
1604.5633 ; 1.0853  
1604.6068 ; 10.9191  
1607.1562 ; 1.5684  
1607.1645 ; 3.9455  
1612.4277 ; 4.8310  
1612.5479 ; 3.7102  
1613.8043 ; 11.5489  
1613.9082 ; 1.0898  
1617.8814 ; 2.4011  
1617.8851 ; 1.4403  
1621.1251 ; 37.7178  
1621.1266 ; 11.4115  
1638.3314 ; 18.3760  
1639.6611 ; 1.6173  
1646.0398 ; 21.0696  
1646.7603 ; 1.9037  
2363.6014 ; 16.8664  
2363.9188 ; 51.4540  
3050.1688 ; 5.8042  
3050.1703 ; 4.3778  
3051.1166 ; 10.4793  
3051.1210 ; 4.6919  
3051.5275 ; 14.5153  
3051.5286 ; 9.1653  
3053.0404 ; 32.6327  
3053.0491 ; 1.5830  
3056.2544 ; 1.5857  
3056.2797 ; 69.2483  
3058.2660 ; 45.3818  
3058.2774 ; 7.0889  
3061.6837 ; 2.7183  
3061.6960 ; 2.7402  
3091.0969 ; 13.8571  
3091.1033 ; 14.7252  
3095.8045 ; 1.6872  
3095.8244 ; 1.5806  
3095.8554 ; 17.6625  
3095.8673 ; 24.2301  
3097.5609 ; 5.7560  
3097.5646 ; 7.4895  
3097.8606 ; 4.7552  
3097.8635 ; 10.1044  
3099.3099 ; 1.0755

3099.3145 ; 1.0492  
3129.5969 ; 3.5645  
3129.6042 ; 3.5842  
3132.9481 ; 2.6953  
3132.9513 ; 18.0729  
3134.0243 ; 3.7442  
3134.0287 ; 16.7755  
3134.4901 ; 0.6667  
3134.5289 ; 0.6424  
3137.3612 ; 4.2409  
3137.3788 ; 12.4388  
3138.5754 ; 2.9809  
3138.5954 ; 18.5632  
3143.0883 ; 5.5447  
3143.1122 ; 17.4972  
3144.7428 ; 1.2402  
3144.7729 ; 1.4169  
3153.4245 ; 6.3252  
3153.4322 ; 10.9366  
3155.0733 ; 1.7134  
3155.0749 ; 4.6181  
3165.7710 ; 33.2116  
3165.7954 ; 4.4872  
3182.2888 ; 2.8709  
3182.3205 ; 2.6749  
3182.9919 ; 2.3129  
3182.9982 ; 9.9600  
3189.9023 ; 1.1388  
3189.9063 ; 10.6163  
3206.1359 ; 2.0953  
3206.1647 ; 2.1088  
3206.1664 ; 0.2599  
3206.1788 ; 0.1706  
3218.4512 ; 5.0957  
3218.4890 ; 1.9423  
3220.6940 ; 1.0557  
3220.6972 ; 6.2496  
3232.2443 ; 3.0907  
3232.2987 ; 2.9937  
3238.7674 ; 2.6271  
3238.8011 ; 2.9701  
3255.0752 ; 3.1130  
3255.6017 ; 0.0319  
3259.8612 ; 1.0154  
3259.9598 ; 4.0988  
3310.3058 ; 67.3299  
3310.4855 ; 76.0728  
3356.3415 ; 3.2235  
3356.3618 ; 4.0661

ML2-R,S+2CH3CN

stoich ; program ; method ; basis ; num\_basis ; energy (Eh) ; Gibbs E (Eh)

C72H74CoN10O4(2+,4) ; Gaussian ; UB3LYP ; 3-21G,LANL2DZ ; 944 ; -3761.75554830 ; -3760.388254

Geometry

at. no. ; x ; y ; z

27 ; -0.052896 ; 0.119897 ; 0.814376

8 ; -3.966217 ; -0.770433 ; -1.683008

8 ; -5.359508 ; 0.414840 ; 0.776027

7 ; -1.624163 ; -1.326259 ; 0.791472  
7 ; -2.975774 ; -2.885494 ; -0.094487  
7 ; -3.440504 ; 2.724217 ; 1.273986  
7 ; -1.497609 ; 1.598867 ; 1.280492  
6 ; -2.514740 ; -1.768539 ; 1.799948  
6 ; -2.659413 ; -1.381018 ; 3.133859  
1 ; -2.045935 ; -0.594333 ; 3.549799  
6 ; -3.637160 ; -2.016575 ; 3.894740  
1 ; -3.773072 ; -1.737276 ; 4.932715  
6 ; -4.463377 ; -3.015522 ; 3.339969  
1 ; -5.209085 ; -3.493707 ; 3.963361  
6 ; -4.344147 ; -3.393840 ; 2.004710  
1 ; -4.997274 ; -4.142368 ; 1.577394  
6 ; -3.363148 ; -2.758373 ; 1.244961  
6 ; -1.948344 ; -2.007839 ; -0.304599  
1 ; -1.476433 ; -1.887697 ; -1.260705  
6 ; -3.750259 ; -3.537397 ; -1.181855  
1 ; -3.875460 ; -4.596158 ; -0.941439  
1 ; -3.141285 ; -3.459736 ; -2.087022  
6 ; -5.103089 ; -2.869554 ; -1.353221  
6 ; -6.292244 ; -3.596104 ; -1.251596  
1 ; -6.248341 ; -4.673231 ; -1.122552  
6 ; -7.540709 ; -2.971274 ; -1.320876  
6 ; -7.604713 ; -1.562264 ; -1.419974  
6 ; -6.410607 ; -0.823150 ; -1.522588  
6 ; -5.175440 ; -1.488216 ; -1.536768  
6 ; -8.811015 ; -3.796518 ; -1.242900  
1 ; -8.577490 ; -4.863234 ; -1.188217  
1 ; -9.440485 ; -3.630466 ; -2.125055  
1 ; -9.405131 ; -3.531347 ; -0.359698  
6 ; -8.953153 ; -0.868697 ; -1.381849  
1 ; -9.543339 ; -1.119439 ; -2.272252  
1 ; -8.834304 ; 0.215139 ; -1.339797  
1 ; -9.531516 ; -1.189974 ; -0.507757  
6 ; -3.749929 ; -0.237809 ; -3.052011  
1 ; -3.801809 ; -1.041026 ; -3.794701  
1 ; -2.749323 ; 0.193103 ; -3.024911  
1 ; -4.486941 ; 0.533123 ; -3.281277  
6 ; -6.343033 ; 0.669617 ; -1.464073  
6 ; -6.695006 ; 1.519625 ; -2.529573  
6 ; -6.447917 ; 2.909202 ; -2.423783  
6 ; -5.823750 ; 3.409467 ; -1.278191  
1 ; -5.620363 ; 4.473090 ; -1.208090  
6 ; -5.485096 ; 2.572437 ; -0.211329  
6 ; -5.770279 ; 1.210934 ; -0.300813  
6 ; -7.312431 ; 0.964562 ; -3.800028  
1 ; -7.314575 ; -0.126869 ; -3.789478  
1 ; -6.762744 ; 1.305756 ; -4.685170  
1 ; -8.347721 ; 1.311368 ; -3.908995  
6 ; -6.842667 ; 3.848370 ; -3.548303  
1 ; -6.585514 ; 4.881182 ; -3.297805  
1 ; -7.922018 ; 3.803322 ; -3.736338  
1 ; -6.334974 ; 3.587273 ; -4.485122  
6 ; -6.434000 ; -0.222194 ; 1.581305  
1 ; -7.098725 ; 0.539097 ; 2.002852  
1 ; -5.907214 ; -0.754880 ; 2.371301  
1 ; -7.004294 ; -0.922861 ; 0.969975  
6 ; -4.872010 ; 3.101425 ; 1.063821  
1 ; -4.903469 ; 4.193753 ; 1.060826  
1 ; -5.432795 ; 2.737271 ; 1.929335

6 ; -2.610570 ; 3.385598 ; 2.187147  
6 ; -2.819492 ; 4.506609 ; 2.991921  
1 ; -3.760150 ; 5.041590 ; 2.995978  
6 ; -1.766076 ; 4.912810 ; 3.804101  
1 ; -1.889906 ; 5.777840 ; 4.443612  
6 ; -0.539645 ; 4.217936 ; 3.809678  
1 ; 0.259375 ; 4.568276 ; 4.451866  
6 ; -0.335394 ; 3.100769 ; 3.007100  
1 ; 0.609047 ; 2.577726 ; 3.004825  
6 ; -1.387233 ; 2.678483 ; 2.188453  
6 ; -2.745074 ; 1.657027 ; 0.773462  
1 ; -3.169266 ; 0.940164 ; 0.091016  
6 ; -0.054031 ; 0.952580 ; -2.484982  
6 ; 0.877985 ; -0.427249 ; 4.018237  
6 ; 1.276812 ; -0.745461 ; 5.379536  
1 ; 1.807150 ; -1.703690 ; 5.401473  
1 ; 1.934451 ; 0.034703 ; 5.777289  
1 ; 0.393150 ; -0.818398 ; 6.022934  
6 ; 0.273188 ; 1.628268 ; -3.730450  
1 ; -0.592482 ; 1.645008 ; -4.400767  
1 ; 0.572901 ; 2.659011 ; -3.507713  
1 ; 1.100184 ; 1.118918 ; -4.236349  
7 ; 0.553035 ; -0.180711 ; 2.931955  
7 ; -0.302843 ; 0.442908 ; -1.471180  
8 ; 4.501370 ; -0.515221 ; -1.986084  
8 ; 5.229078 ; 0.053775 ; 1.035463  
7 ; 1.300762 ; -1.552090 ; 0.337937  
7 ; 2.692535 ; -2.795193 ; -0.922718  
7 ; 3.505334 ; 2.570407 ; 0.981689  
7 ; 1.508668 ; 1.595908 ; 0.627311  
6 ; 1.289204 ; -2.881686 ; 0.831183  
6 ; 0.587514 ; -3.472983 ; 1.887107  
1 ; -0.106638 ; -2.899860 ; 2.483262  
6 ; 0.790584 ; -4.826897 ; 2.131658  
1 ; 0.255733 ; -5.308265 ; 2.941449  
6 ; 1.673159 ; -5.592368 ; 1.342543  
1 ; 1.807366 ; -6.644074 ; 1.563273  
6 ; 2.373533 ; -5.020961 ; 0.285918  
1 ; 3.052016 ; -5.613727 ; -0.313709  
6 ; 2.171791 ; -3.661788 ; 0.041854  
6 ; 2.157509 ; -1.552308 ; -0.689156  
1 ; 2.479171 ; -0.693815 ; -1.246357  
6 ; 3.666820 ; -3.148746 ; -1.996826  
1 ; 3.559861 ; -4.219003 ; -2.183222  
1 ; 3.368943 ; -2.606066 ; -2.895333  
6 ; 5.088956 ; -2.806421 ; -1.608902  
6 ; 6.023507 ; -3.776291 ; -1.239738  
1 ; 5.751572 ; -4.825848 ; -1.286294  
6 ; 7.312285 ; -3.426584 ; -0.826747  
6 ; 7.651906 ; -2.059300 ; -0.700820  
6 ; 6.709518 ; -1.076117 ; -1.059058  
6 ; 5.458416 ; -1.462823 ; -1.564016  
6 ; 8.320195 ; -4.504852 ; -0.476200  
1 ; 7.899141 ; -5.499226 ; -0.647289  
1 ; 9.225659 ; -4.408598 ; -1.086844  
1 ; 8.623996 ; -4.439755 ; 0.575893  
6 ; 9.012398 ; -1.670880 ; -0.152981  
1 ; 9.806397 ; -1.957979 ; -0.853803  
1 ; 9.073168 ; -0.594068 ; 0.014009  
1 ; 9.215794 ; -2.183565 ; 0.794466

6 ; 4.866548 ; 0.234085 ; -3.215372  
1 ; 5.071922 ; -0.453673 ; -4.042164  
1 ; 3.995812 ; 0.851628 ; -3.441057  
1 ; 5.732736 ; 0.869273 ; -3.029698  
6 ; 6.867903 ; 0.382830 ; -0.770203  
6 ; 7.675227 ; 1.260802 ; -1.518415  
6 ; 7.619541 ; 2.650179 ; -1.258214  
6 ; 6.719631 ; 3.132023 ; -0.303137  
1 ; 6.653694 ; 4.202003 ; -0.133334  
6 ; 5.923495 ; 2.265626 ; 0.448401  
6 ; 6.033267 ; 0.891790 ; 0.237834  
6 ; 8.585050 ; 0.738591 ; -2.614883  
1 ; 8.413390 ; -0.324788 ; -2.791753  
1 ; 8.419849 ; 1.281004 ; -3.553083  
1 ; 9.638617 ; 0.878470 ; -2.341653  
6 ; 8.503958 ; 3.613063 ; -2.027449  
1 ; 8.338526 ; 4.641167 ; -1.694166  
1 ; 9.563959 ; 3.374382 ; -1.880099  
1 ; 8.302699 ; 3.566990 ; -3.104818  
6 ; 5.969594 ; -0.807372 ; 1.995794  
1 ; 6.581915 ; -0.198030 ; 2.668751  
1 ; 5.197024 ; -1.335965 ; 2.555429  
1 ; 6.594744 ; -1.521906 ; 1.461075  
6 ; 4.908562 ; 2.756186 ; 1.457301  
1 ; 5.039317 ; 3.821587 ; 1.658485  
1 ; 5.000805 ; 2.211002 ; 2.397962  
6 ; 2.743896 ; 3.502338 ; 0.270240  
6 ; 3.026058 ; 4.792278 ; -0.181524  
1 ; 3.993411 ; 5.251195 ; -0.026088  
6 ; 2.013220 ; 5.472925 ; -0.848033  
1 ; 2.196091 ; 6.476302 ; -1.211982  
6 ; 0.745934 ; 4.886115 ; -1.044208  
1 ; -0.028349 ; 5.460115 ; -1.539068  
6 ; 0.463924 ; 3.601449 ; -0.590340  
1 ; -0.521039 ; 3.171656 ; -0.699292  
6 ; 1.481529 ; 2.894747 ; 0.059992  
6 ; 2.732945 ; 1.451597 ; 1.151324  
1 ; 3.121988 ; 0.554352 ; 1.590490  
vib. constant (cm-1); IR intensity (km/mol)  
-21.4282 ; 0.0254  
8.4568 ; 0.5673  
9.8821 ; 0.2104  
11.7366 ; 0.4364  
21.0793 ; 0.1940  
24.6323 ; 1.2935  
29.2683 ; 0.9478  
31.5799 ; 2.5751  
33.4195 ; 2.6984  
33.9027 ; 1.4043  
37.7241 ; 0.1472  
39.3213 ; 0.8023  
45.1297 ; 0.7423  
47.7730 ; 0.0064  
50.1632 ; 0.4270  
52.0086 ; 0.7832  
53.2450 ; 0.1285  
54.7779 ; 3.8889  
60.4918 ; 0.2834  
67.0677 ; 0.5769  
70.6643 ; 0.0880



76.8287 ; 0.7932  
79.3430 ; 2.6259  
84.0865 ; 0.7681  
87.2979 ; 0.4928  
89.1664 ; 1.0575  
92.2865 ; 0.3748  
95.8566 ; 2.9209  
100.2360 ; 0.3021  
102.2581 ; 0.4062  
106.5640 ; 0.9227  
109.3631 ; 1.0380  
111.8245 ; 4.9001  
113.9723 ; 1.7056  
115.3657 ; 0.1487  
120.5429 ; 1.9251  
121.7280 ; 1.8062  
122.7164 ; 1.2760  
123.3213 ; 0.6325  
127.4475 ; 0.9087  
131.0027 ; 1.1775  
135.1797 ; 0.7540  
136.5881 ; 0.2447  
138.4431 ; 2.8744  
141.1658 ; 0.2834  
142.7733 ; 0.6494  
144.4264 ; 0.2347  
145.0716 ; 0.6065  
147.8406 ; 0.4692  
149.0291 ; 0.2410  
152.2625 ; 0.4998  
155.1157 ; 1.4044  
159.1216 ; 1.1325  
163.4741 ; 0.3233  
166.3647 ; 0.1452  
168.4025 ; 2.2523  
171.7699 ; 0.3189  
172.1971 ; 0.6252  
175.3471 ; 0.2860  
176.3292 ; 0.9068  
180.2516 ; 0.4147  
183.8978 ; 2.4398  
184.0463 ; 1.4413  
187.7552 ; 0.9343  
188.8330 ; 6.8123  
190.9890 ; 1.2404  
196.2353 ; 13.4543  
196.7588 ; 7.0782  
198.6468 ; 6.2695  
210.0957 ; 17.2136  
217.7486 ; 0.2769  
226.5849 ; 27.2132  
230.7529 ; 11.5372  
233.1078 ; 8.8518  
235.1755 ; 6.2047  
238.8474 ; 0.2706  
242.6757 ; 2.4191  
245.2449 ; 28.6551  
251.3405 ; 11.8385  
254.7561 ; 14.7783  
256.4612 ; 4.4772

263.2798 ; 0.3804  
267.4705 ; 7.4577  
271.7986 ; 2.8861  
275.3178 ; 0.9599  
284.0189 ; 12.9025  
287.5847 ; 10.5672  
307.5473 ; 3.6891  
311.5264 ; 0.2861  
317.6155 ; 1.9482  
323.2657 ; 0.5393  
328.8508 ; 4.5112  
331.1307 ; 2.0056  
331.3463 ; 2.9029  
341.6755 ; 4.5340  
344.8644 ; 3.2492  
350.6680 ; 8.1638  
352.5352 ; 5.3431  
354.3221 ; 5.6639  
357.1319 ; 16.8285  
364.6015 ; 5.2027  
367.0202 ; 0.0635  
378.5178 ; 2.4887  
395.8661 ; 4.6639  
398.3020 ; 4.4827  
415.9154 ; 3.2902  
417.5936 ; 5.3962  
443.0539 ; 2.3261  
443.4998 ; 3.0207  
457.8529 ; 8.9633  
460.7794 ; 20.5012  
463.2419 ; 8.5816  
467.5831 ; 18.4985  
481.8548 ; 1.5273  
484.8298 ; 1.2194  
487.9664 ; 4.7874  
490.9146 ; 6.0796  
492.7396 ; 3.3833  
494.0728 ; 3.1744  
495.8422 ; 2.3830  
496.8817 ; 8.3276  
497.9872 ; 16.0041  
501.9559 ; 17.3401  
508.3870 ; 18.2267  
514.1480 ; 17.6726  
526.0419 ; 5.8491  
528.7989 ; 1.9518  
531.0911 ; 11.2572  
539.3333 ; 2.8336  
542.6286 ; 3.1131  
546.7073 ; 13.7219  
557.3679 ; 3.8396  
560.9203 ; 1.2441  
570.4866 ; 1.2456  
576.7105 ; 3.7798  
578.3956 ; 2.7272  
592.0199 ; 1.9772  
600.0226 ; 7.6991  
604.9529 ; 6.4459  
611.4614 ; 4.3611  
613.2446 ; 1.5472

620.0282 ; 0.2952  
620.6490 ; 0.5215  
625.6544 ; 7.1734  
628.8354 ; 5.1668  
635.8176 ; 3.5405  
639.8292 ; 2.6427  
640.3461 ; 2.0393  
640.6170 ; 0.8302  
656.4112 ; 3.7408  
659.7510 ; 16.1408  
661.3724 ; 7.6497  
661.8943 ; 9.2733  
668.1245 ; 0.1864  
668.7293 ; 1.9374  
681.9491 ; 6.1940  
683.3086 ; 6.0404  
703.7726 ; 3.2467  
711.3512 ; 3.0399  
711.4756 ; 47.7643  
717.2922 ; 23.2702  
756.1166 ; 10.8556  
759.7786 ; 14.9908  
760.9809 ; 10.9357  
761.1619 ; 2.4506  
769.1127 ; 0.3410  
770.2696 ; 2.0379  
789.6402 ; 51.0093  
790.3719 ; 67.2051  
791.0895 ; 18.3368  
791.4280 ; 86.6476  
793.4561 ; 114.9274  
795.7726 ; 89.5929  
795.9904 ; 5.4449  
803.2703 ; 6.8071  
820.5377 ; 1.2551  
821.6900 ; 2.5967  
834.3263 ; 1.0552  
835.6323 ; 0.1498  
836.5770 ; 1.4852  
841.4992 ; 1.9486  
854.9440 ; 19.3196  
855.4481 ; 12.1509  
875.4724 ; 1.6858  
876.1128 ; 3.0811  
878.4333 ; 0.1809  
880.6798 ; 2.4715  
888.4034 ; 20.1549  
894.1121 ; 6.7723  
898.5721 ; 33.8985  
915.0707 ; 8.3407  
917.6578 ; 13.7283  
922.1786 ; 5.7743  
922.6568 ; 1.4943  
924.5957 ; 1.8776  
926.1020 ; 0.6251  
926.6816 ; 13.2746  
927.4236 ; 8.6619  
928.6302 ; 7.1641  
930.1086 ; 5.2879  
931.2100 ; 1.0865

932.2622 ; 3.4005  
934.2862 ; 11.0043  
942.0492 ; 29.0485  
942.5477 ; 7.2900  
949.9420 ; 16.5416  
956.8533 ; 9.4004  
961.5098 ; 29.9345  
965.0402 ; 38.0176  
972.7840 ; 0.5182  
977.3521 ; 42.5868  
977.7723 ; 0.9614  
993.6140 ; 30.0962  
996.2206 ; 9.0099  
997.8305 ; 2.1137  
998.8907 ; 8.8370  
999.8281 ; 3.0223  
1005.0345 ; 8.2579  
1009.5176 ; 2.2477  
1041.4641 ; 1.4156  
1041.6465 ; 0.9440  
1043.0061 ; 2.3392  
1044.5119 ; 4.6312  
1044.6963 ; 3.3791  
1044.7467 ; 0.4430  
1045.4149 ; 0.8150  
1047.0320 ; 2.2212  
1047.0683 ; 16.1648  
1047.2753 ; 1.0474  
1048.0034 ; 11.9182  
1048.6824 ; 11.3967  
1065.1042 ; 52.6061  
1066.5238 ; 59.0592  
1077.5816 ; 25.6189  
1079.0418 ; 20.3170  
1081.6029 ; 17.6132  
1081.6815 ; 29.3106  
1082.1272 ; 13.0633  
1082.5356 ; 26.1588  
1090.1048 ; 16.2618  
1091.2033 ; 12.3689  
1107.1304 ; 0.6395  
1107.1600 ; 0.6129  
1108.6821 ; 0.0892  
1108.7627 ; 0.0634  
1111.4335 ; 4.5189  
1112.4538 ; 3.1804  
1113.2285 ; 0.9789  
1119.0946 ; 10.7936  
1119.4545 ; 6.8117  
1119.9060 ; 0.7355  
1120.3240 ; 5.1800  
1120.5477 ; 7.0740  
1121.7600 ; 5.8356  
1124.5551 ; 4.6872  
1150.7105 ; 5.7857  
1150.9918 ; 2.8445  
1151.7140 ; 1.1858  
1151.9803 ; 1.3117  
1152.1239 ; 2.2713  
1152.6267 ; 0.5126

1156.4441 ; 3.7833  
1157.1730 ; 1.1679  
1186.0187 ; 18.4871  
1190.1608 ; 22.7027  
1191.3726 ; 1.1965  
1192.7631 ; 20.9411  
1195.1287 ; 60.0158  
1195.4465 ; 12.9912  
1197.5158 ; 17.6369  
1207.7015 ; 24.8088  
1210.6813 ; 10.2971  
1212.5002 ; 2.6001  
1214.1751 ; 18.7705  
1220.4530 ; 17.4819  
1223.6984 ; 194.9244  
1226.1159 ; 11.9024  
1227.5795 ; 26.3550  
1232.8205 ; 36.9430  
1233.3028 ; 37.8461  
1240.1992 ; 135.7281  
1256.9316 ; 24.6828  
1257.1517 ; 3.2698  
1263.5703 ; 22.6113  
1266.2086 ; 99.4682  
1268.4467 ; 27.5215  
1270.3377 ; 7.6728  
1270.8016 ; 3.4073  
1272.6159 ; 5.4743  
1274.3008 ; 0.2561  
1279.2530 ; 45.3063  
1285.9122 ; 18.3624  
1288.0054 ; 17.3711  
1296.7465 ; 10.0928  
1300.0257 ; 0.3656  
1302.5289 ; 8.7904  
1303.6372 ; 1.5383  
1303.7245 ; 21.0524  
1317.5225 ; 11.1336  
1319.2044 ; 13.9679  
1322.7967 ; 21.2719  
1331.5327 ; 35.4774  
1347.2416 ; 49.6674  
1349.9944 ; 20.8849  
1350.0713 ; 12.0241  
1353.0474 ; 5.0498  
1354.0687 ; 13.4530  
1368.0724 ; 6.7360  
1369.8847 ; 13.8546  
1372.9420 ; 12.6342  
1374.0443 ; 33.0257  
1381.5861 ; 6.0831  
1390.6764 ; 21.0327  
1397.0721 ; 30.9445  
1400.0461 ; 16.3800  
1400.1780 ; 53.3776  
1404.7839 ; 58.0436  
1405.9042 ; 11.0121  
1416.7837 ; 19.4159  
1428.9834 ; 8.4267  
1430.4121 ; 9.2833

1448.1903 ; 20.6332  
1449.3666 ; 1.5015  
1457.7327 ; 241.3015  
1458.8669 ; 50.1956  
1462.3610 ; 5.8854  
1463.0595 ; 9.2511  
1464.7005 ; 13.8045  
1465.4899 ; 1.8073  
1466.1981 ; 22.5496  
1467.4542 ; 41.9042  
1468.4819 ; 55.8673  
1469.7627 ; 25.7313  
1474.7624 ; 27.7186  
1476.4604 ; 33.8966  
1478.5612 ; 25.9925  
1478.7313 ; 6.9740  
1479.0113 ; 6.3249  
1481.1991 ; 14.4658  
1481.9490 ; 2.5447  
1483.7871 ; 68.1109  
1499.6662 ; 13.5109  
1500.6946 ; 27.9134  
1500.8898 ; 7.4485  
1502.0518 ; 9.6589  
1504.6295 ; 2.2813  
1506.5985 ; 23.8506  
1507.3910 ; 12.1032  
1507.9787 ; 9.1790  
1529.3942 ; 7.9464  
1530.5186 ; 16.7504  
1530.9583 ; 2.3192  
1531.5361 ; 17.8429  
1532.6963 ; 3.7875  
1533.2058 ; 2.0732  
1534.1589 ; 1.9123  
1534.9388 ; 12.1990  
1538.2322 ; 23.6040  
1539.3052 ; 11.2465  
1540.2576 ; 10.6654  
1541.7016 ; 28.5838  
1542.4883 ; 38.3218  
1543.6524 ; 5.9724  
1546.6799 ; 2.2747  
1546.9228 ; 0.0770  
1548.1579 ; 6.6519  
1548.5771 ; 2.8804  
1548.6007 ; 5.3282  
1548.7568 ; 3.7656  
1548.8782 ; 2.4644  
1548.9121 ; 7.7850  
1549.4336 ; 2.8792  
1554.0278 ; 15.1851  
1555.9412 ; 6.3132  
1556.1667 ; 4.5925  
1556.2485 ; 3.9132  
1557.5830 ; 1.5653  
1563.3555 ; 21.2561  
1564.2480 ; 23.7399  
1566.6711 ; 7.4366  
1566.8728 ; 8.3290

1575.9565 ; 5.4964  
1578.9546 ; 5.2155  
1579.7655 ; 5.2465  
1579.8805 ; 4.1051  
1603.7366 ; 4.9307  
1605.3931 ; 8.0594  
1606.6427 ; 2.7045  
1607.5898 ; 4.1472  
1611.1628 ; 6.6661  
1611.4992 ; 3.5829  
1612.8187 ; 5.6865  
1615.4415 ; 6.0135  
1617.9606 ; 1.3574  
1618.1967 ; 1.6714  
1620.8360 ; 25.0011  
1621.3385 ; 24.7838  
1642.0283 ; 11.5509  
1643.5889 ; 1.7955  
1643.9743 ; 14.5205  
1644.9975 ; 8.5516  
2364.7502 ; 25.0813  
2378.3269 ; 37.2789  
3048.1114 ; 9.6384  
3050.2000 ; 9.3354  
3050.3930 ; 7.7518  
3050.6519 ; 9.3614  
3050.9242 ; 9.9736  
3051.4596 ; 6.8975  
3052.4799 ; 17.3939  
3052.9245 ; 13.3447  
3057.5034 ; 52.2493  
3057.7799 ; 6.6981  
3058.1532 ; 64.1360  
3058.4246 ; 1.0536  
3061.8175 ; 2.3830  
3065.1508 ; 3.3953  
3085.4050 ; 8.5035  
3088.5946 ; 15.3181  
3094.3656 ; 17.2869  
3095.5658 ; 20.3429  
3095.6452 ; 2.1741  
3096.2117 ; 3.8294  
3096.6002 ; 7.6155  
3097.8915 ; 2.6293  
3098.1651 ; 1.6999  
3098.6579 ; 2.7145  
3108.2369 ; 10.8512  
3110.7336 ; 11.9655  
3128.6795 ; 1.7391  
3130.7894 ; 4.7403  
3131.9633 ; 1.1151  
3132.3742 ; 10.3827  
3132.9880 ; 10.8297  
3133.2571 ; 10.2842  
3133.6693 ; 9.7314  
3134.0425 ; 0.8045  
3134.4520 ; 3.2729  
3134.5432 ; 0.3821  
3140.4896 ; 12.3999  
3141.0735 ; 19.0839

3142.8458 ; 9.3060  
3144.8338 ; 14.1819  
3150.9785 ; 9.3325  
3152.1412 ; 7.4035  
3153.7666 ; 3.8769  
3157.0993 ; 1.5006  
3157.4487 ; 4.3688  
3159.5950 ; 1.8243  
3168.4044 ; 9.8626  
3174.1029 ; 8.3803  
3174.3687 ; 16.8742  
3182.6939 ; 6.1141  
3185.6549 ; 2.1168  
3185.7859 ; 7.7793  
3188.2804 ; 6.9537  
3189.7140 ; 6.0120  
3205.5830 ; 0.8164  
3206.9550 ; 0.9770  
3207.1776 ; 1.0740  
3207.4372 ; 0.4250  
3217.7151 ; 5.2086  
3218.4675 ; 4.3483  
3219.7227 ; 3.2833  
3219.8780 ; 3.5164  
3230.9488 ; 4.8297  
3232.0655 ; 4.0610  
3234.0016 ; 4.2498  
3239.1366 ; 3.0407  
3247.6141 ; 2.6705  
3253.1142 ; 2.3352  
3257.5901 ; 1.3991  
3260.3490 ; 6.1012  
3299.4918 ; 57.6957  
3333.6633 ; 1.5876  
3341.2422 ; 24.8684  
3358.3585 ; 17.2625

filename ; stoich ; program ; job\_type ; method ; basis ; num\_basis ;  
energy (Eh) ; stat\_pt ; completed

ML2-R,R

ESI/ML2-4.f.b3.sbko\_gd2 ; C68H68CoN8O4(2+,4) ; Gaussian ; FOpt Freq ;  
UB3LYP UB3LYP ; cc-pVDZ,CEP-121G ; 1491 ; -3516.52317863 ; opt ; done

Geometry

at. no. ; x ; y ; z

27 ; 0.000098 ; -0.882080 ; 0.000450  
8 ; -4.539228 ; -1.511962 ; -0.959364  
8 ; -4.378372 ; 1.120995 ; 0.509763  
7 ; -1.433828 ; -1.950483 ; 0.914427  
7 ; -3.327130 ; -3.110158 ; 1.154649  
7 ; -2.200297 ; 2.231926 ; -1.439434  
7 ; -0.790092 ; 0.506366 ; -1.264659  
6 ; -1.870154 ; -1.808810 ; 2.241023  
6 ; -1.316032 ; -1.109527 ; 3.321699  
1 ; -0.381666 ; -0.560614 ; 3.214251  
6 ; -2.014679 ; -1.142041 ; 4.527300  
1 ; -1.614488 ; -0.607647 ; 5.390787  
6 ; -3.229969 ; -1.850363 ; 4.662523  
1 ; -3.744685 ; -1.845862 ; 5.624889



6 ; -3.783590 ; -2.556989 ; 3.596196  
1 ; -4.724242 ; -3.098306 ; 3.692504  
6 ; -3.074132 ; -2.525325 ; 2.391776  
6 ; -2.340932 ; -2.724744 ; 0.322700  
1 ; -2.324820 ; -3.009881 ; -0.724946  
6 ; -4.591839 ; -3.739539 ; 0.745114  
1 ; -4.814266 ; -4.559732 ; 1.442338  
1 ; -4.419230 ; -4.170159 ; -0.251635  
6 ; -5.705944 ; -2.719229 ; 0.744740  
6 ; -6.796303 ; -2.819444 ; 1.615001  
1 ; -6.879289 ; -3.692194 ; 2.268985  
6 ; -7.790625 ; -1.836610 ; 1.663648  
6 ; -7.668701 ; -0.687757 ; 0.847462  
6 ; -6.571129 ; -0.569573 ; -0.027811  
6 ; -5.619212 ; -1.600602 ; -0.087715  
6 ; -8.967731 ; -1.985365 ; 2.592859  
1 ; -8.925883 ; -2.936532 ; 3.143577  
1 ; -9.919114 ; -1.949225 ; 2.034900  
1 ; -9.004471 ; -1.160392 ; 3.325667  
6 ; -8.709700 ; 0.398029 ; 0.938942  
1 ; -9.682908 ; 0.035032 ; 0.564651  
1 ; -8.429186 ; 1.286515 ; 0.358163  
1 ; -8.873007 ; 0.697678 ; 1.987609  
6 ; -4.872761 ; -1.860892 ; -2.312112  
1 ; -5.262279 ; -2.893867 ; -2.362768  
1 ; -3.942326 ; -1.782995 ; -2.894941  
1 ; -5.622923 ; -1.164959 ; -2.722205  
6 ; -6.311951 ; 0.625038 ; -0.883015  
6 ; -7.083997 ; 0.922926 ; -2.023366  
6 ; -6.666522 ; 1.950180 ; -2.902827  
6 ; -5.464454 ; 2.614425 ; -2.649998  
1 ; -5.121123 ; 3.377682 ; -3.353450  
6 ; -4.696474 ; 2.343024 ; -1.510393  
6 ; -5.157046 ; 1.381324 ; -0.607463  
6 ; -8.334101 ; 0.145113 ; -2.348684  
1 ; -8.459593 ; -0.731438 ; -1.700519  
1 ; -8.324627 ; -0.191329 ; -3.398550  
1 ; -9.226303 ; 0.786053 ; -2.236527  
6 ; -7.489549 ; 2.295808 ; -4.117211  
1 ; -7.044290 ; 3.132060 ; -4.675936  
1 ; -8.517838 ; 2.576272 ; -3.831952  
1 ; -7.578954 ; 1.432308 ; -4.799523  
6 ; -4.969011 ; 1.488633 ; 1.764118  
1 ; -5.195851 ; 2.569832 ; 1.782236  
1 ; -4.222274 ; 1.248936 ; 2.535050  
1 ; -5.889741 ; 0.914799 ; 1.954606  
6 ; -3.403706 ; 3.069099 ; -1.258546  
1 ; -3.304405 ; 3.911532 ; -1.956360  
1 ; -3.356384 ; 3.457325 ; -0.229483  
6 ; -0.924480 ; 2.751509 ; -1.631716  
6 ; -0.474560 ; 4.056416 ; -1.853134  
1 ; -1.160570 ; 4.902280 ; -1.905733  
6 ; 0.901939 ; 4.225114 ; -1.996240  
1 ; 1.300422 ; 5.224867 ; -2.177628  
6 ; 1.791826 ; 3.130644 ; -1.918618  
1 ; 2.860686 ; 3.303374 ; -2.052068  
6 ; 1.338190 ; 1.833292 ; -1.687473  
1 ; 2.031041 ; 0.996217 ; -1.614386  
6 ; -0.043299 ; 1.657570 ; -1.541205  
6 ; -2.064030 ; 0.906645 ; -1.215983

1 ; -2.902211 ; 0.249406 ; -0.998001  
8 ; 4.539407 ; -1.511505 ; 0.960354  
8 ; 4.378426 ; 1.120620 ; -0.510510  
7 ; 1.433981 ; -1.951019 ; -0.912959  
7 ; 3.327195 ; -3.110957 ; -1.152604  
7 ; 2.200387 ; 2.232919 ; 1.438152  
7 ; 0.790236 ; 0.507194 ; 1.264635  
6 ; 1.870102 ; -1.810369 ; -2.239729  
6 ; 1.315786 ; -1.111968 ; -3.320874  
1 ; 0.381400 ; -0.563034 ; -3.213726  
6 ; 2.014233 ; -1.145430 ; -4.526566  
1 ; 1.613877 ; -0.611738 ; -5.390411  
6 ; 3.229516 ; -1.853828 ; -4.661425  
1 ; 3.744079 ; -1.850075 ; -5.623876  
6 ; 3.783314 ; -2.559611 ; -3.594632  
1 ; 4.723956 ; -3.100992 ; -3.690667  
6 ; 3.074046 ; -2.527014 ; -2.390124  
6 ; 2.341165 ; -2.724845 ; -0.320782  
1 ; 2.325191 ; -3.009206 ; 0.727077  
6 ; 4.591945 ; -3.740075 ; -0.742801  
1 ; 4.814318 ; -4.560707 ; -1.439525  
1 ; 4.419440 ; -4.170058 ; 0.254240  
6 ; 5.705978 ; -2.719710 ; -0.743196  
6 ; 6.796184 ; -2.820324 ; -1.613603  
1 ; 6.879140 ; -3.693441 ; -2.267099  
6 ; 7.790396 ; -1.837423 ; -1.662990  
6 ; 7.668537 ; -0.688135 ; -0.847398  
6 ; 6.571109 ; -0.569548 ; 0.027992  
6 ; 5.619273 ; -1.600605 ; 0.088609  
6 ; 8.967314 ; -1.986526 ; -2.592377  
1 ; 8.925265 ; -2.937812 ; -3.142872  
1 ; 9.918805 ; -1.950369 ; -2.034597  
1 ; 9.004020 ; -1.161710 ; -3.325357  
6 ; 8.709395 ; 0.397706 ; -0.939800  
1 ; 9.683071 ; 0.034622 ; -0.566834  
1 ; 8.429550 ; 1.286061 ; -0.358510  
1 ; 8.871430 ; 0.697620 ; -1.988605  
6 ; 4.873154 ; -1.859913 ; 2.313177  
1 ; 5.262473 ; -2.892947 ; 2.364192  
1 ; 3.942871 ; -1.781568 ; 2.896186  
1 ; 5.623564 ; -1.163970 ; 2.722805  
6 ; 6.311954 ; 0.625517 ; 0.882577  
6 ; 7.084000 ; 0.924053 ; 2.022751  
6 ; 6.666553 ; 1.951845 ; 2.901596  
6 ; 5.464545 ; 2.616033 ; 2.648341  
1 ; 5.121245 ; 3.379722 ; 3.351338  
6 ; 4.696551 ; 2.343981 ; 1.508899  
6 ; 5.157063 ; 1.381667 ; 0.606594  
6 ; 8.334073 ; 0.146403 ; 2.348566  
1 ; 8.459972 ; -0.730117 ; 1.700445  
1 ; 8.324182 ; -0.190067 ; 3.398428  
1 ; 9.226227 ; 0.787481 ; 2.236855  
6 ; 7.489569 ; 2.298091 ; 4.115808  
1 ; 7.044233 ; 3.134526 ; 4.674197  
1 ; 8.517818 ; 2.578555 ; 3.830397  
1 ; 7.579109 ; 1.434878 ; 4.798463  
6 ; 4.969119 ; 1.487733 ; -1.764986  
1 ; 5.195620 ; 2.568994 ; -1.783695  
1 ; 4.222584 ; 1.247342 ; -2.535898  
1 ; 5.890070 ; 0.914086 ; -1.954980

6 ; 3.403796 ; 3.069948 ; 1.256640  
1 ; 3.304571 ; 3.912841 ; 1.953910  
1 ; 3.356434 ; 3.457501 ; 0.227322  
6 ; 0.924554 ; 2.752596 ; 1.630098  
6 ; 0.474569 ; 4.057625 ; 1.850661  
1 ; 1.160531 ; 4.903568 ; 1.902639  
6 ; -0.901928 ; 4.226336 ; 1.993794  
1 ; -1.300445 ; 5.226190 ; 2.174555  
6 ; -1.791766 ; 3.131762 ; 1.917046  
1 ; -2.860623 ; 3.304516 ; 2.050511  
6 ; -1.338068 ; 1.834277 ; 1.686752  
1 ; -2.030862 ; 0.997090 ; 1.614362  
6 ; 0.043415 ; 1.658551 ; 1.540430  
6 ; 2.064157 ; 0.907478 ; 1.215618  
1 ; 2.902354 ; 0.250121 ; 0.998055

ML2-R,S

ESI/ML2-RS-4.b3.sbko\_gd2 ; C68H68CoN8O4(2+,4) ; Gaussian ; ; ; ; -  
3516.52422981 ; non-opt ; partial

Geometry

at. no. ; x ; y ; z

27 ; -0.105431 ; -1.159844 ; 0.162415  
8 ; 4.153441 ; 0.385924 ; 1.878834  
8 ; 4.676442 ; -0.616322 ; -1.100128  
7 ; 1.490952 ; -2.023500 ; 1.031796  
7 ; 3.319010 ; -2.345137 ; 2.277080  
7 ; 2.240603 ; 0.681845 ; -2.648867  
7 ; 0.609476 ; -0.403363 ; -1.578171  
6 ; 2.280211 ; -2.997033 ; 0.410171  
6 ; 2.075766 ; -3.700745 ; -0.783233  
1 ; 1.173115 ; -3.551139 ; -1.379625  
6 ; 3.068983 ; -4.600437 ; -1.168590  
1 ; 2.946822 ; -5.174065 ; -2.089050  
6 ; 4.231262 ; -4.794485 ; -0.387408  
1 ; 4.983208 ; -5.510261 ; -0.724476  
6 ; 4.442067 ; -4.095326 ; 0.801081  
1 ; 5.346012 ; -4.231142 ; 1.393807  
6 ; 3.441131 ; -3.196928 ; 1.182404  
6 ; 2.163876 ; -1.665391 ; 2.124071  
1 ; 1.849375 ; -0.892230 ; 2.819228  
6 ; 4.382275 ; -2.031809 ; 3.251848  
1 ; 4.671692 ; -2.962029 ; 3.761587  
1 ; 3.933514 ; -1.354252 ; 3.992210  
6 ; 5.567783 ; -1.415757 ; 2.545168  
6 ; 6.828637 ; -2.022013 ; 2.520743  
1 ; 7.001464 ; -2.924803 ; 3.113716  
6 ; 7.879261 ; -1.491876 ; 1.763649  
6 ; 7.636023 ; -0.379214 ; 0.921862  
6 ; 6.361614 ; 0.219464 ; 0.914265  
6 ; 5.375470 ; -0.260148 ; 1.788302  
6 ; 9.243109 ; -2.132466 ; 1.794594  
1 ; 9.271374 ; -2.981896 ; 2.492801  
1 ; 10.013792 ; -1.405235 ; 2.103057  
1 ; 9.539469 ; -2.494178 ; 0.794308  
6 ; 8.738207 ; 0.117357 ; 0.021711  
1 ; 9.581824 ; 0.500846 ; 0.621733  
1 ; 8.397538 ; 0.918055 ; -0.647667  
1 ; 9.145848 ; -0.703918 ; -0.592153  
6 ; 4.235088 ; 1.572502 ; 2.686950  
1 ; 4.593435 ; 1.323000 ; 3.701820

1 ; 3.221904 ; 1.993923 ; 2.730156  
1 ; 4.918174 ; 2.306656 ; 2.228320  
6 ; 5.921948 ; 1.209808 ; -0.116771  
6 ; 6.288649 ; 2.567110 ; -0.129178  
6 ; 5.775811 ; 3.420424 ; -1.136196  
6 ; 4.900416 ; 2.901596 ; -2.095642  
1 ; 4.503340 ; 3.567857 ; -2.866352  
6 ; 4.527366 ; 1.552083 ; -2.099253  
6 ; 5.056663 ; 0.716508 ; -1.111861  
6 ; 7.225041 ; 3.126190 ; 0.910784  
1 ; 7.487411 ; 2.377634 ; 1.670381  
1 ; 6.779024 ; 4.000717 ; 1.414410  
1 ; 8.157534 ; 3.483685 ; 0.440169  
6 ; 6.169058 ; 4.875082 ; -1.165111  
1 ; 5.702397 ; 5.399838 ; -2.011864  
1 ; 7.263705 ; 4.987816 ; -1.248445  
1 ; 5.874314 ; 5.387055 ; -0.232180  
6 ; 5.633662 ; -1.514309 ; -1.685960  
1 ; 5.822622 ; -1.244731 ; -2.741084  
1 ; 5.190650 ; -2.517985 ; -1.620851  
1 ; 6.581733 ; -1.491267 ; -1.125806  
6 ; 3.595736 ; 0.988588 ; -3.148830  
1 ; 3.471595 ; 1.703378 ; -3.972185  
1 ; 4.000097 ; 0.055990 ; -3.566540  
6 ; 1.072108 ; 1.397281 ; -2.896701  
6 ; 0.819940 ; 2.564793 ; -3.623507  
1 ; 1.615055 ; 3.111761 ; -4.131587  
6 ; -0.503796 ; 3.000165 ; -3.667279  
1 ; -0.748025 ; 3.904562 ; -4.227197  
6 ; -1.538190 ; 2.292898 ; -3.013171  
1 ; -2.563965 ; 2.657921 ; -3.093530  
6 ; -1.282864 ; 1.132787 ; -2.285447  
1 ; -2.081170 ; 0.593823 ; -1.776317  
6 ; 0.046001 ; 0.695421 ; -2.230939  
6 ; 1.908956 ; -0.363747 ; -1.862107  
1 ; 2.655903 ; -1.050631 ; -1.478058  
8 ; -4.521551 ; -0.850059 ; 1.714679  
8 ; -4.260276 ; 1.023961 ; -0.615254  
7 ; -1.743874 ; -2.274247 ; -0.153783  
7 ; -3.738826 ; -3.208517 ; 0.213969  
7 ; -1.797627 ; 2.493256 ; 0.599508  
7 ; -0.581173 ; 0.651115 ; 0.958166  
6 ; -2.368344 ; -2.479598 ; -1.394614  
6 ; -1.937200 ; -2.206133 ; -2.700011  
1 ; -0.955879 ; -1.775890 ; -2.889751  
6 ; -2.817557 ; -2.503937 ; -3.738929  
1 ; -2.515341 ; -2.302645 ; -4.768258  
6 ; -4.091558 ; -3.063760 ; -3.494915  
1 ; -4.749579 ; -3.279218 ; -4.338523  
6 ; -4.523516 ; -3.352496 ; -2.201762  
1 ; -5.506925 ; -3.778353 ; -2.006868  
6 ; -3.634132 ; -3.054053 ; -1.165033  
6 ; -2.608906 ; -2.716602 ; 0.756246  
1 ; -2.455236 ; -2.676064 ; 1.830693  
6 ; -4.978675 ; -3.509028 ; 0.947390  
1 ; -5.354379 ; -4.487550 ; 0.615894  
1 ; -4.705501 ; -3.583556 ; 2.009631  
6 ; -5.998596 ; -2.425624 ; 0.685443  
6 ; -7.194541 ; -2.689870 ; 0.010734  
1 ; -7.438087 ; -3.721260 ; -0.259828

6 ; -8.089240 ; -1.668684 ; -0.325620  
6 ; -7.755899 ; -0.328796 ; -0.019312  
6 ; -6.552922 ; -0.047679 ; 0.658462  
6 ; -5.704280 ; -1.103809 ; 1.028972  
6 ; -9.381138 ; -1.987339 ; -1.033007  
1 ; -9.497419 ; -3.070307 ; -1.186232  
1 ; -10.248486 ; -1.623974 ; -0.455534  
1 ; -9.430621 ; -1.489464 ; -2.017143  
6 ; -8.689019 ; 0.777583 ; -0.439362  
1 ; -9.640650 ; 0.714553 ; 0.116813  
1 ; -8.255291 ; 1.771010 ; -0.265521  
1 ; -8.947663 ; 0.686559 ; -1.507499  
6 ; -4.719180 ; -0.636697 ; 3.121098  
1 ; -5.183552 ; -1.524082 ; 3.588297  
1 ; -3.722643 ; -0.463763 ; 3.555124  
1 ; -5.355208 ; 0.246400 ; 3.297375  
6 ; -6.080937 ; 1.330512 ; 0.977847  
6 ; -6.693069 ; 2.125489 ; 1.968130  
6 ; -6.087394 ; 3.341047 ; 2.365061  
6 ; -4.862376 ; 3.704300 ; 1.802217  
1 ; -4.373883 ; 4.622547 ; 2.139100  
6 ; -4.251574 ; 2.935294 ; 0.803630  
6 ; -4.894000 ; 1.774474 ; 0.363303  
6 ; -7.968987 ; 1.692002 ; 2.644622  
1 ; -8.241434 ; 0.658268 ; 2.397448  
1 ; -7.881575 ; 1.781404 ; 3.739825  
1 ; -8.805425 ; 2.347878 ; 2.345285  
6 ; -6.738273 ; 4.213280 ; 3.407862  
1 ; -6.161211 ; 5.134733 ; 3.574290  
1 ; -7.761943 ; 4.493761 ; 3.106671  
1 ; -6.830275 ; 3.684190 ; 4.372657  
6 ; -4.944356 ; 0.934206 ; -1.873992  
1 ; -5.097962 ; 1.940921 ; -2.302575  
1 ; -4.292936 ; 0.339339 ; -2.531290  
1 ; -5.915258 ; 0.425838 ; -1.764757  
6 ; -2.934301 ; 3.352116 ; 0.210170  
1 ; -2.682181 ; 4.370708 ; 0.535246  
1 ; -2.968434 ; 3.334779 ; -0.890515  
6 ; -0.467750 ; 2.866974 ; 0.430978  
6 ; 0.122072 ; 4.074143 ; 0.044350  
1 ; -0.470685 ; 4.964997 ; -0.165469  
6 ; 1.512008 ; 4.078514 ; -0.075815  
1 ; 2.016661 ; 4.998341 ; -0.377083  
6 ; 2.281164 ; 2.921660 ; 0.177562  
1 ; 3.364288 ; 2.961834 ; 0.064718  
6 ; 1.683605 ; 1.720889 ; 0.553612  
1 ; 2.284550 ; 0.830912 ; 0.732279  
6 ; 0.291364 ; 1.709349 ; 0.678620  
6 ; -1.810228 ; 1.174674 ; 0.896557  
1 ; -2.725427 ; 0.605357 ; 1.039114