

Supporting Information for the Paper entitled

## **DFT Investigation of the Ring Contraction Reaction of ( $\eta^4$ -1,2-disilacyclohexadiene)iron Tricarbonyls: A Crucial Intramolecular Si–Si Bond Activation**

**Changzhi Lin,<sup>a</sup> Qian Liu,<sup>\*b</sup> Yang Zhang,<sup>c</sup> Jie Liu<sup>c</sup> and Chenggang Zheng<sup>a</sup>**

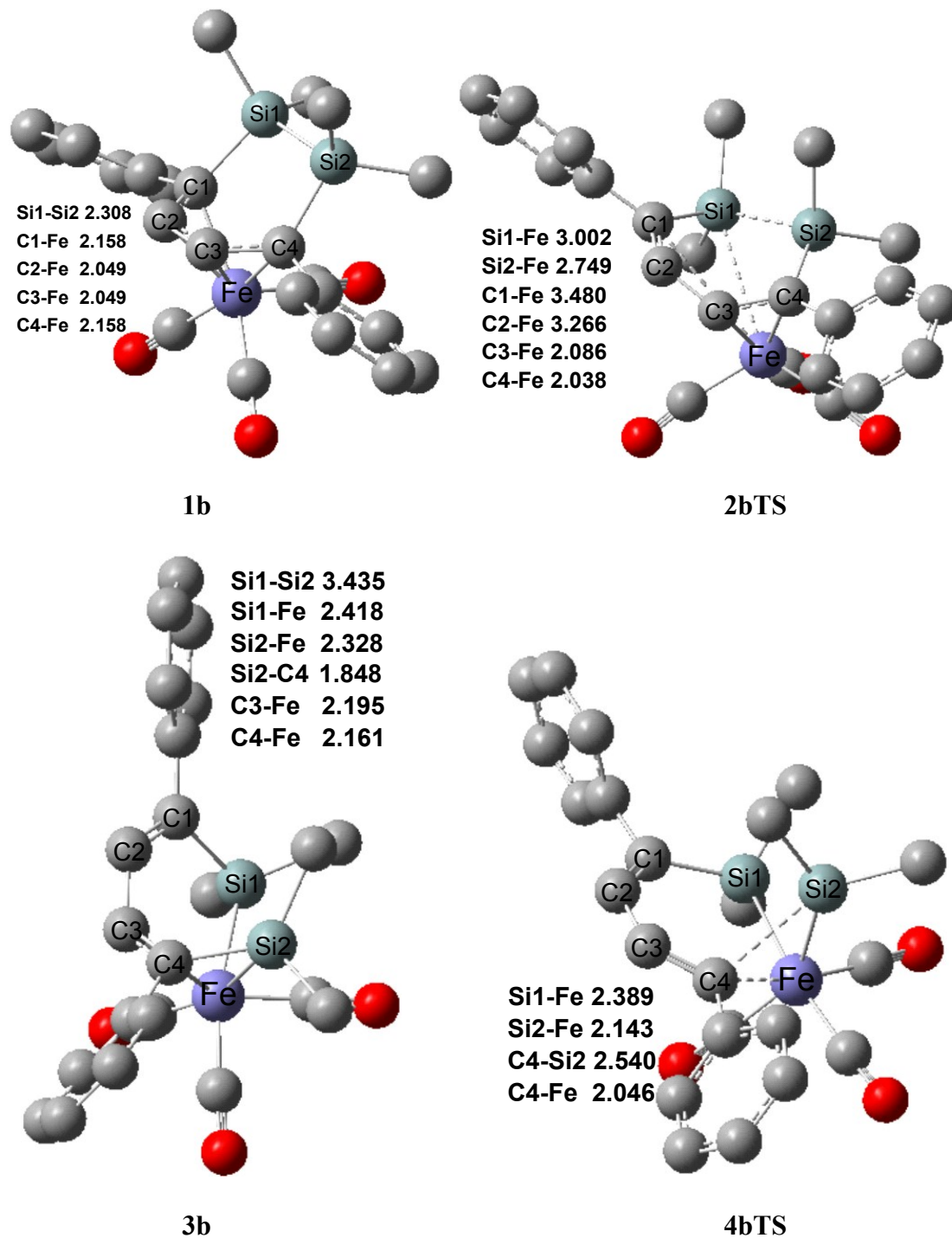
<sup>a</sup> State Key Laboratory of Shale Oil and Gas Enrichment Mechanisms and Effective Development, Petroleum exploration and production research institute, Sinopec, Beijing 100083, China; <sup>b</sup> Department of Chemical and Materials Engineering, University of Alberta, Edmonton, AB, T6G 2V4, Canada; <sup>c</sup>Department of Chemistry, Nankai University, Tianjin 300071, People's Republic of China.

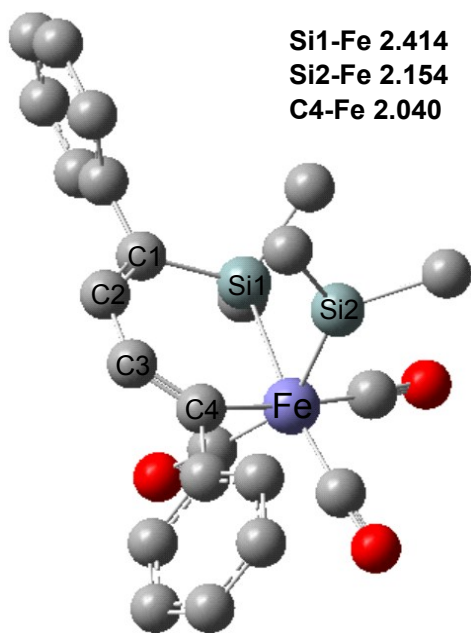
E-mail: <sup>\*b</sup> liuqian331@sdu.edu.cn.

Gaussian 09, Revision B.01,

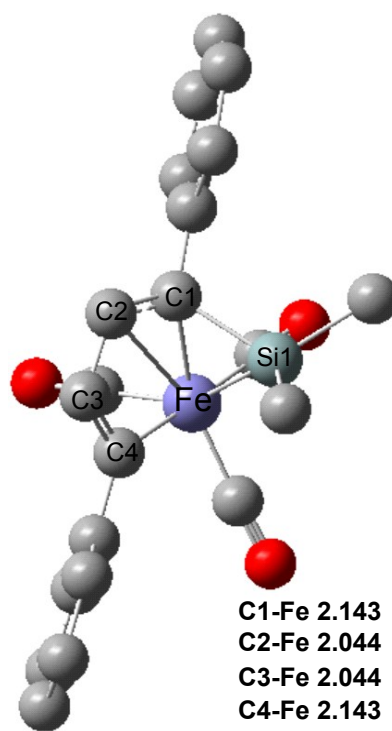
M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H. P. Hratchian, A. F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa,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

Figure S1. Optimized structures and bond lengths (Å) in the ring contraction reaction of 1b. The hydrogen atoms are omitted.

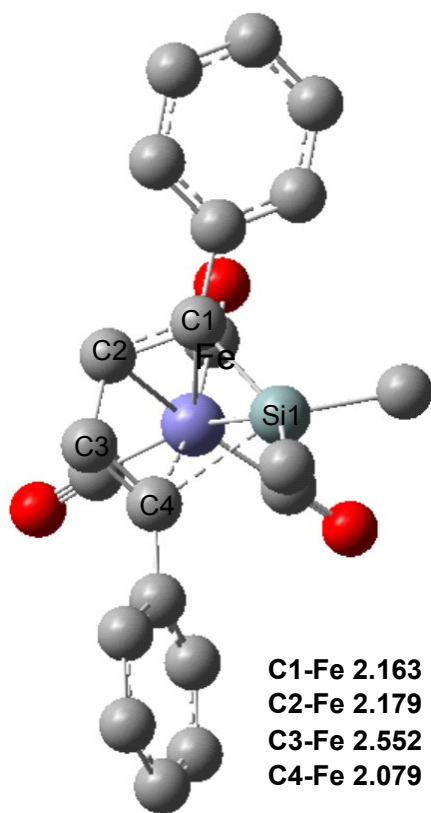




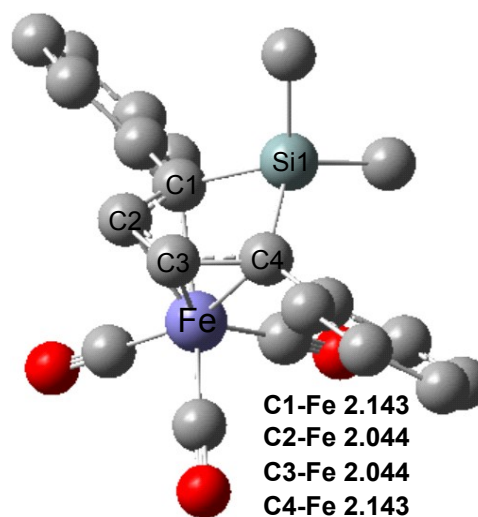
**5b**



**6b**



**7bTS**



**8b**

**Table S1. M06-optimized energies and thermochemistry (Hartree) for three reaction systems at 298 K and 1 atm.**

<b>Complexes</b>	$E_{\text{SCF}}$	$H_{\text{corr}}$	$G_{\text{corr}}$
<b>1a</b>	-1356.502131	0.267164	0.194110
<b>2aTS</b>	-1356.449075	0.266169	0.195149
<b>3a</b>	-1356.483478	0.267690	0.196078
<b>4aTS</b>	-1356.445646	0.265695	0.193525
<b>5a</b>	-1356.448366	0.266911	0.193581
<b>6a</b>	-987.1979425	0.184577	0.122077
<b>7aTS</b>	-987.1878915	0.183290	0.123411
<b>8a</b>	-987.2539221	0.185596	0.125580
<b>SiMe<sub>2</sub></b>	-369.161014	0.077780	0.043679
<b>SiP2</b>	-738.415632	0.161116	0.112895
<b>SiP3</b>	-1107.691960	0.242239	0.176264
<b>SiP4</b>	-1476.975360	0.324603	0.253005
<b>SiP5</b>	-1846.242950	0.405661	0.321011
<b>SiP6</b>	-2215.502185	0.487162	0.388008
<b>1b</b>	-1818.244506	0.438276	0.345187
<b>2bTS</b>	-1818.188103	0.437436	0.344710
<b>3b</b>	-1818.223983	0.438586	0.344475
<b>4bTS</b>	-1818.187738	0.436679	0.343089
<b>5b</b>	-1818.188876	0.437991	0.343054
<b>6b</b>	-1448.95096	0.355868	0.271425
<b>7bTS</b>	-1448.933288	0.354589	0.272789
<b>8b</b>	-1448.997767	0.356379	0.272256
<b>1c</b>	-2279.956307	0.608808	0.496175
<b>2cTS</b>	-2279.912734	0.606686	0.494827
<b>3c</b>	-2279.954473	0.609460	0.495768
<b>4cTS</b>	-2279.913365	0.607035	0.493010
<b>5c</b>	-2279.914414	0.608140	0.493366
<b>6c</b>	-1910.690242	0.527452	0.423742

<b>7cTS</b>	-1910.676217	0.525909	0.424388
<b>8c</b>	-1910.734709	0.527079	0.424001

---

## Cartesian Coordinates of M06-Optimized Structures in Gas

### 1a

Fe	-1.39670400	0.00001900	-0.10599000
C	-2.62518800	1.28070400	-0.12014400
C	-0.97749900	-0.00015500	1.62019700
C	-2.62522600	-1.28061800	-0.12028300
O	-3.39827400	2.13497000	-0.13133900
O	-0.72070600	-0.00036900	2.74492000
O	-3.39833600	-2.13486100	-0.13156700
C	-0.48536500	-0.70902500	-1.79782100
C	0.06679700	-1.43047200	-0.69615800
C	0.06681800	1.43051000	-0.69613500
C	-0.48534100	0.70908500	-1.79780800
H	-1.06992000	-1.21517100	-2.56837900
H	-1.06989400	1.21526400	-2.56834600
Si	1.78705000	-1.15845400	0.02932300
Si	1.78699900	1.15847500	0.02944700
C	3.06285600	-1.89473600	-1.15745300
H	2.93810500	-2.98166600	-1.25616800
H	2.96054100	-1.45284600	-2.15794000
H	4.08821400	-1.70626800	-0.81159200
C	1.91911800	-2.03555400	1.69253100
H	1.26390500	-1.59405700	2.45272000
H	1.65190400	-3.09663100	1.58987500
H	2.94934400	-1.98943100	2.06892200
C	3.06278500	1.89490500	-1.15727000
H	4.08816300	1.70637500	-0.81149500
H	2.96039900	1.45313000	-2.15780100
H	2.93806200	2.98185000	-1.25586200
C	1.91902400	2.03547800	1.69271100
H	1.26496400	1.59305500	2.45335600
H	2.94959200	1.99067400	2.06832600
H	1.65033400	3.09621800	1.59041400
H	-0.27008300	2.47519900	-0.66670200
H	-0.27015700	-2.47514200	-0.66669800

### 2aTS

Fe	0.00000000	0.00000000	0.00000000
C	0.00000000	0.00000000	1.72944476
C	1.76711295	0.00000000	0.05939951
C	-0.27480874	-1.66064940	-0.61493047
O	-0.04112010	-0.03780542	2.88556684
O	2.92158589	0.04179416	0.06910321
O	-0.48274645	-2.76111567	-0.88658100

C	-2.22854857	0.33364265	-1.95852318
C	-1.41645838	0.72128661	-2.96101989
C	-1.37960558	1.43736154	0.21855438
C	-1.98887360	0.36267210	-0.49608808
H	-3.21851374	-0.06049038	-2.21588098
H	-2.70158880	-0.24868680	0.06446384
Si	0.32412743	1.35858831	-2.70476998
Si	-0.15742768	2.55897005	-0.64925180
C	0.66790847	2.75672812	-3.93829964
H	0.81001812	2.31506504	-4.93500613
H	-0.15380255	3.47805833	-4.00437805
H	1.58638121	3.30484129	-3.69003548
C	1.66019069	0.08306772	-3.10172344
H	1.49140856	-0.89874093	-2.64818685
H	1.68410300	-0.04589510	-4.19329969
H	2.65272120	0.43782095	-2.79417057
C	-1.09452896	4.00859990	-1.44346129
H	-0.40948360	4.70152147	-1.94835652
H	-1.85569255	3.67426265	-2.15789443
H	-1.59995560	4.55855625	-0.63763324
C	1.12308007	3.28424518	0.53263099
H	0.88603193	2.98378868	1.56252807
H	2.13999134	2.93483820	0.31857493
H	1.12554759	4.38093002	0.48795020
H	-1.73833791	1.65829029	1.22745031
H	-1.83590375	0.67487170	-3.97090414

### 3a

Fe	-0.24405900	0.74534900	-0.05557700
C	-1.58085000	1.90352000	-0.25067400
C	-0.35113200	0.11597900	-1.67064900
C	0.96292700	2.03415100	0.09925000
O	-2.44106400	2.65207800	-0.42485100
O	-0.46877400	-0.28440000	-2.75744000
O	1.71874100	2.90110600	0.20090800
C	1.12051200	-0.57911000	2.40873300
C	1.89939600	-1.18556900	1.50831100
C	-1.24766300	0.04605600	1.69612000
C	0.04601400	0.39748600	2.11227700
H	1.23342700	-0.78392300	3.48096600
H	0.11647400	1.31968700	2.70143200
Si	1.74145300	-0.61607800	-0.26736500
Si	-1.58296900	-1.13764500	0.34184000
C	1.76623600	-2.07571600	-1.47386600

H	2. 63921000	-2. 70243000	-1. 23914000
H	0. 87558000	-2. 71227300	-1. 45015300
H	1. 88902900	-1. 70933800	-2. 50136200
C	3. 29856100	0. 33995800	-0. 75840000
H	3. 61509400	1. 06999400	-0. 00558700
H	4. 11772000	-0. 37829600	-0. 90521600
H	3. 15103900	0. 87309700	-1. 70796800
C	-1. 03090000	-2. 92561900	0. 39388100
H	-1. 07521800	-3. 37545300	-0. 60614700
H	-0. 02633900	-3. 06173000	0. 80477700
H	-1. 74135100	-3. 47380100	1. 02849300
C	-3. 32521200	-1. 03909800	-0. 34126900
H	-3. 77448600	-0. 05830900	-0. 14157300
H	-3. 31019600	-1. 17910100	-1. 43073800
H	-3. 97680000	-1. 81398200	0. 08268400
H	2. 61776000	-1. 93661200	1. 85106200
H	-2. 04274700	0. 75301800	1. 94961400

#### 4aTS

Fe	-0. 59064100	-0. 65473000	-0. 13443800
C	-2. 19457600	-1. 14399000	-0. 72840300
C	-1. 03647700	-0. 89277400	1. 55733300
C	0. 42030700	-2. 07079200	-0. 53520100
O	-3. 24256500	-1. 44972000	-1. 10051200
O	-1. 32544500	-0. 98392400	2. 67398700
O	1. 09518200	-2. 94460000	-0. 86504100
C	2. 37453700	0. 57319700	-1. 83591400
C	2. 62598800	0. 57215600	-0. 51026700
C	-0. 08545500	-0. 03189100	-1. 99210700
C	1. 10762900	0. 32983100	-2. 51284800
H	3. 19999100	0. 80653400	-2. 51610900
H	1. 15205200	0. 46807600	-3. 59841600
Si	1. 43320600	0. 14626100	0. 85807600
Si	-0. 90829400	1. 46153600	-0. 15911700
C	1. 27843600	1. 60412300	2. 08119300
H	2. 26191700	1. 80187000	2. 53273300
H	0. 93353100	2. 55705600	1. 65367500
H	0. 59604700	1. 32838600	2. 89935400
C	2. 22008000	-1. 19183500	1. 93965600
H	2. 44208600	-2. 10793400	1. 38000500
H	3. 16494500	-0. 80931300	2. 35292300
H	1. 57219100	-1. 45520600	2. 78656900
C	-0. 09650600	2. 95288400	-0. 95185200
H	-0. 15053400	3. 81062300	-0. 26728800



H	0.93909200	2.77869400	-1.25724300
H	-0.67666300	3.22202800	-1.84742200
C	-2.36326800	2.20387200	0.79021600
H	-3.19152000	1.49226000	0.89009600
H	-2.00497300	2.42141700	1.81073700
H	-2.73219200	3.14681600	0.36701400
H	-0.87464800	-0.15682100	-2.74056300
H	3.65503800	0.80660600	-0.21441100

### 5a

Fe	-0.69864500	-0.59032000	0.10924900
C	-2.29353100	-1.17211300	-0.40882800
C	-1.27388600	0.04124600	1.66132900
C	0.13158700	-2.08611500	0.61519500
O	-3.32318900	-1.54791400	-0.76556200
O	-1.62891400	0.50661800	2.65845700
O	0.70231900	-3.04912600	0.88618600
C	2.51853300	-0.80994000	-1.59332800
C	2.70752100	-0.13082800	-0.44427500
C	0.00876800	-1.13752200	-1.69665700
C	1.25684900	-1.21451700	-2.19844600
H	3.40146400	-1.08651500	-2.17887700
H	1.36175500	-1.63300000	-3.20540400
Si	1.38981200	0.44997300	0.72589500
Si	-0.68934500	1.36642800	-0.78649000
C	1.52741700	2.36323100	0.84898500
H	2.55016000	2.55286600	1.20991100
H	1.41905800	2.94564500	-0.07695400
H	0.83454600	2.77002100	1.59974300
C	1.82483400	-0.06474500	2.49116800
H	1.84233500	-1.15455800	2.60921200
H	2.82510100	0.32076000	2.73673800
H	1.11818100	0.35029800	3.22141300
C	0.04774700	1.93951300	-2.41483700
H	0.00888300	3.03104000	-2.51823800
H	1.08397500	1.59185300	-2.51194500
H	-0.50784300	1.48826100	-3.24881700
C	-1.62794200	2.84459700	-0.09291100
H	-1.91028500	2.71053600	0.95767300
H	-1.06557500	3.78123000	-0.20152800
H	-2.55636400	2.95819300	-0.67374000
H	-0.76100800	-1.51554000	-2.37764300
H	3.74473800	0.09414800	-0.17070500

**6a**

Fe	0.59497400	0.16897700	0.09521800
C	-0.09633000	0.54956900	1.64377900
C	0.66188200	1.84272000	-0.53276500
C	2.37426300	-0.01806000	0.25219600
O	-0.55578800	0.73468400	2.69296300
O	0.69531700	2.92074300	-0.93935800
O	3.50264800	-0.16199600	0.42832900
C	0.58904100	-1.34938600	-1.65109600
C	-0.47985700	-0.47156400	-1.71310100
C	0.56024500	-1.77103600	0.58813000
C	0.65340700	-2.38217400	-0.59235500
H	1.34305500	-1.32664600	-2.44478000
H	0.76056600	-3.44730800	-0.81369700
Si	-1.64710400	-0.18072600	-0.30525000
C	-2.61614800	-1.51576900	0.57973000
H	-2.18622600	-2.51078900	0.43726400
H	-2.63129000	-1.30127200	1.65723400
H	-3.65501500	-1.51926800	0.22566000
C	-2.72244300	1.33386400	-0.56636800
H	-2.21452500	2.09038600	-1.17743200
H	-3.67616900	1.08122100	-1.04779900
H	-2.95620000	1.79387800	0.40354400
H	0.57496600	-2.25588300	1.56527400
H	-0.45079900	0.27602200	-2.51180500

**7aTS**

Fe	0.64899200	0.05229400	0.03914900
C	0.29191700	1.13879400	1.37767800
C	1.34125500	1.33629600	-0.95326800
C	2.22606600	-0.72713100	0.49393900
O	0.06998500	1.81500400	2.28979100
O	1.76011600	2.17542000	-1.62607900
O	3.22223900	-1.19164000	0.83457800
C	0.24285100	-1.54399100	-1.35324700
C	-0.59869700	-0.44577400	-1.60869900
C	-0.42946400	-1.53516200	0.83182600
C	-0.14337500	-2.36516300	-0.18789200
H	0.97452400	-1.89331100	-2.08315400
H	-0.13071500	-3.45936100	-0.19228100
Si	-1.69617300	0.00169900	-0.19682600
C	-3.21261900	-0.95494200	0.39924500
H	-3.30720700	-0.88191600	1.49132500
H	-4.11650800	-0.51107600	-0.03935800

H	-3.16707000	-2.01693600	0.13747300
C	-2.28786300	1.79231100	-0.31598100
H	-1.57371000	2.40128900	-0.88498400
H	-3.27504200	1.85927500	-0.79399600
H	-2.38015900	2.24409300	0.68110900
H	-0.70978400	-1.84292500	1.83848400
H	-0.44084000	0.15574500	-2.50484800

**8a**

Fe	-0.81695700	-0.06885900	0.00005000
C	-2.02987300	-0.17846100	-1.28821600
C	-0.60954900	1.70343100	-0.00155400
C	-2.02939100	-0.17556000	1.28887300
O	-2.79086600	-0.25436900	-2.15022100
O	-0.56127000	2.85454600	-0.00248300
O	-2.79013900	-0.24939400	2.15127400
C	0.14705300	-1.71478400	0.71489200
C	0.81517800	-0.58057200	1.26521100
C	0.81543000	-0.58244600	-1.26466500
C	0.14721800	-1.71578000	-0.71281000
H	-0.38183400	-2.47131200	1.29293500
H	-0.38173400	-2.47311200	-1.28975900
Si	2.07268200	0.00768000	0.00000400
C	3.67241900	-0.99110900	0.00078100
H	4.28264600	-0.76513300	0.88598200
H	3.46087700	-2.06824800	0.00144700
H	4.28301700	-0.76623900	-0.88443400
C	2.51972400	1.83590000	-0.00120400
H	2.13254400	2.35697600	-0.88491200
H	2.13247500	2.35803100	0.88185800
H	3.61169500	1.94524600	-0.00123300
H	0.76615600	-0.42003000	2.34149900
H	0.76644400	-0.42333900	-2.34114800

**SiMe<sub>2</sub>**

Si	0.00001700	-0.77283100	-0.00002300
C	1.42293300	0.50712000	-0.00989700
H	1.49137800	0.91194300	1.01500700
H	2.40365400	0.08613400	-0.25696800
H	1.22381800	1.36913200	-0.66315400
C	-1.42294900	0.50709600	0.00983600
H	-2.40365200	0.08571700	0.25632100
H	-1.22413000	1.36841500	0.66410300
H	-1.49121300	0.91300100	-1.01462100

**SiP2**

Si	-1.06282000	-0.00000100	0.25675100
Si	1.06282000	-0.00000100	-0.25675100
C	-2.07981700	1.55720800	-0.08244200
H	-1.44456800	2.45109300	-0.07765400
H	-2.58529400	1.50000000	-1.05475100
H	-2.85083800	1.69316000	0.68663400
C	-2.07982600	-1.55720600	-0.08242700
H	-2.58530300	-1.50001300	-1.05473700
H	-1.44458200	-2.45109500	-0.07762300
H	-2.85084800	-1.69314300	0.68665100
C	2.07982600	-1.55720600	0.08242700
H	1.44458200	-2.45109500	0.07762300
H	2.85084800	-1.69314300	-0.68665100
H	2.58530300	-1.50001300	1.05473700
C	2.07981700	1.55720800	0.08244200
H	2.85083800	1.69316000	-0.68663400
H	1.44456800	2.45109300	0.07765400
H	2.58529400	1.50000000	1.05475100

**SiP3**

Si	-0.67450500	1.16885900	0.00000000
Si	1.34951400	-0.00029100	0.00000000
Si	-0.67500900	-1.16856800	0.00000000
C	-1.19112700	2.06309300	1.58414700
H	-0.74522000	3.06375300	1.64499800
H	-2.28125100	2.16903900	1.64918800
H	-0.85727700	1.49424000	2.46245900
C	-1.19112700	2.06309300	-1.58414700
H	-2.28125100	2.16903900	-1.64918800
H	-0.74522000	3.06375300	-1.64499800
H	-0.85727700	1.49424000	-2.46245900
C	-1.19112700	-2.06309300	1.58414700
H	-2.28067800	-2.17725600	1.64499800
H	-0.73781700	-3.06014000	1.64918800
H	-0.86541100	-1.48954300	2.46245900
C	-1.19112700	-2.06309300	-1.58414700
H	-0.73781700	-3.06014000	-1.64918800
H	-2.28067800	-2.17725600	-1.64499800
H	-0.86541100	-1.48954300	-2.46245900
C	2.38225400	0.00000000	1.58414700
H	3.02589800	-0.88649700	1.64499800
H	3.01906800	0.89110200	1.64918800

H	1. 72268800	-0. 00469700	2. 46245900
C	2. 38225400	0. 00000000	-1. 58414700
H	3. 01906800	0. 89110200	-1. 64918800
H	3. 02589800	-0. 88649700	-1. 64499800
H	1. 72268800	-0. 00469700	-2. 46245900
<b>SiP4</b>			
Si	1. 63917300	0. 01309200	0. 22375600
Si	-0. 01280600	1. 63911900	-0. 22344000
Si	-1. 63857600	-0. 01292700	0. 22442300
Si	0. 01321200	-1. 63862000	-0. 22469300
C	0. 02654900	-3. 20090800	0. 84818300
H	-0. 85675000	-3. 82496600	0. 66043900
H	0. 91760500	-3. 81260200	0. 65634700
H	0. 02709300	-2. 93442300	1. 91409000
C	0. 01593200	-2. 08244600	-2. 07114100
H	0. 90860700	-2. 66016500	-2. 34499800
H	-0. 86921800	-2. 67147000	-2. 34530400
H	0. 01028200	-1. 17148800	-2. 68702300
C	-2. 08253000	-0. 01663800	2. 07084100
H	-2. 67163700	0. 86833500	2. 34539600
H	-2. 66018100	-0. 90948800	2. 34426700
H	-1. 17159000	-0. 01118100	2. 68675700
C	-3. 20074000	-0. 02558100	-0. 84863400
H	-3. 81278300	-0. 91643300	-0. 65696700
H	-3. 82450100	0. 85792700	-0. 66089300
H	-2. 93411100	-0. 02612000	-1. 91450500
C	-0. 02577200	3. 20066700	0. 85050700
H	0. 85729000	3. 82502600	0. 66265300
H	-0. 91706500	3. 81232100	0. 65965600
H	-0. 02561200	2. 93344200	1. 91622900
C	-0. 01622800	2. 08404200	-2. 06962600
H	-0. 90902300	2. 66186700	-2. 34286600
H	0. 86880300	2. 67322500	-2. 34382700
H	-0. 01077600	1. 17338300	-2. 68596000
C	2. 08395800	0. 01545700	2. 06997000
H	2. 67298600	-0. 86981100	2. 34373700
H	2. 66191400	0. 90801800	2. 34369300
H	1. 17327000	0. 00983600	2. 68626000
C	3. 20082200	0. 02664300	-0. 85004200
H	3. 81257600	0. 91771300	-0. 65846600
H	3. 82505000	-0. 85664000	-0. 66279600
H	2. 93369000	0. 02730500	-1. 91578600

SiP5

Si	0.30503800	-1.92842200	0.00029900
Si	1.96067200	-0.25552900	0.23233000
Si	0.85133100	1.72399200	-0.37491200
Si	-1.33998000	1.38344100	0.40408900
Si	-1.77706200	-0.83343500	-0.23514100
C	0.66653800	-2.98568900	-1.53603800
H	1.64400700	-3.48051500	-1.45906500
H	-0.09748500	-3.76205000	-1.67702100
H	0.67864600	-2.36265600	-2.44123200
C	3.44014400	-0.62059800	-0.90110600
H	4.21384500	0.15392200	-0.81485100
H	3.90293800	-1.58719800	-0.66071300
H	3.11735000	-0.65798600	-1.95043100
C	0.79862400	1.79174500	-2.27506100
H	0.12276300	2.57695200	-2.63980600
H	1.79618900	1.98169700	-2.69426600
H	0.44788200	0.83326000	-2.68674000
C	1.65403900	3.29883800	0.31561200
H	2.66473000	3.44264500	-0.08907000
H	1.06331600	4.19143700	0.06991300
H	1.73684300	3.24087100	1.40933600
C	-2.55757100	2.63394300	-0.34184100
H	-3.58313900	2.45947200	0.00968300
H	-2.28551100	3.66659800	-0.08528300
H	-2.56080600	2.55066200	-1.43750200
C	-1.37756500	1.46166100	2.30276500
H	-0.98793300	2.41257500	2.68993200
H	-2.40148600	1.33759600	2.68097900
H	-0.77052000	0.65140400	2.73345200
C	-2.33612100	-0.87127200	-2.05058600
H	-2.41106100	-1.89748800	-2.43439200
H	-3.31890700	-0.39395400	-2.16607000
H	-1.62789200	-0.32615200	-2.69080500
C	-3.09220900	-1.65373000	0.86345100
H	-4.06779700	-1.16049300	0.75862200
H	-3.22318000	-2.71433600	0.60999200
H	-2.80012100	-1.59813400	1.92094800
C	0.26592300	-3.02694800	1.55000600
H	-0.51326600	-3.79720400	1.47213700
H	1.22685000	-3.53280700	1.71382000
H	0.05010500	-2.42537100	2.44414700
C	2.53961200	-0.14626000	2.03825400
H	2.92875500	-1.10715500	2.40018100
H	3.33366500	0.60478300	2.14855400

H	1. 71274500	0. 14882600	2. 69949400
<b>SiP6</b>			
Si	-1. 71703600	-1. 45986800	-0. 32993900
Si	0. 40276700	-2. 20041400	0. 34904400
Si	-2. 12115800	0. 75347900	0. 33624900
Si	-0. 40449600	2. 19961600	-0. 34815400
Si	1. 71610100	1. 45990300	0. 32937500
Si	2. 12010400	-0. 75450200	-0. 33412000
C	2. 27647200	-0. 87085900	-2. 22407200
H	3. 00811600	-0. 15066100	-2. 61497500
H	2. 60624500	-1. 87657000	-2. 51981700
H	1. 31607700	-0. 67886400	-2. 72223600
C	3. 75206600	-1. 34419500	0. 44455100
H	3. 97117000	-2. 38289200	0. 15943300
H	4. 59957900	-0. 72246700	0. 12404500
H	3. 70029900	-1. 30122100	1. 54101700
C	0. 72791900	-3. 90430500	-0. 43036800
H	1. 70210700	-4. 30713300	-0. 11945000
H	-0. 04433100	-4. 62991600	-0. 13859300
H	0. 72805400	-3. 83690800	-1. 52683800
C	0. 39496600	-2. 39279300	2. 23904600
H	-0. 31258000	-3. 17711800	2. 54205600
H	1. 38675200	-2. 67248400	2. 62026800
H	0. 09245800	-1. 46277500	2. 73962800
C	-3. 02372500	-2. 60258800	0. 44613700
H	-4. 03839900	-2. 31878100	0. 13389600
H	-2. 86175100	-3. 64920900	0. 15296200
H	-2. 98293200	-2. 55209100	1. 54269000
C	-1. 87539000	-1. 53885600	-2. 22090400
H	-1. 61616000	-2. 53168900	-2. 61279900
H	-2. 90563900	-1. 31430800	-2. 52973700
H	-1. 21800900	-0. 80315600	-2. 70452200
C	-3. 75429500	1. 34343500	-0. 43970700
H	-4. 60123400	0. 72146000	-0. 11818200
H	-3. 97308600	2. 38197600	-0. 15380300
H	-3. 70416900	1. 30093500	-1. 53626800
C	-2. 27453000	0. 86849700	2. 22651500
H	-2. 60550100	1. 87342700	2. 52356100
H	-3. 00415500	0. 14671200	2. 61827300
H	-1. 31287000	0. 67782800	2. 72275400
C	-0. 39623600	2. 39200000	-2. 23822800
H	-1. 38948100	2. 66395900	-2. 62120300
H	0. 30578700	3. 18172500	-2. 54006200

H	-0.08553100	1.46435600	-2.73823300
C	-0.72967700	3.90338200	0.43153200
H	0.04305500	4.62882200	0.14057000
H	-1.70350500	4.30670600	0.12016500
H	-0.73055000	3.83552300	1.52797800
C	3.02115900	2.60128100	-0.45149400
H	2.85994200	3.64832800	-0.15938000
H	4.03659500	2.31788100	-0.14137300
H	2.97766800	2.54926900	-1.54787200
C	1.87787900	1.54398800	2.21979200
H	2.90813300	1.31815100	2.52764500
H	1.62168000	2.53883600	2.60859600
H	1.21954600	0.81170900	2.70724000

**1b**

Fe	-0.00014300	-1.22345500	0.13429700
C	-1.24580700	-2.49120700	0.08998500
C	-0.00074100	-0.83150700	1.86793300
C	1.24552400	-2.49124200	0.09127800
O	-2.03516700	-3.32901000	0.07349900
O	-0.00129400	-0.60796700	3.00103700
O	2.03484000	-3.32910500	0.07582200
C	0.70853100	-0.27422300	-1.53714300
C	1.47255000	0.24284900	-0.44622100
C	-1.47246900	0.24321700	-0.44616200
C	-0.70856500	-0.27402100	-1.53712600
H	1.20432700	-0.85993800	-2.31591200
H	-1.20448100	-0.85964800	-2.31588600
Si	1.15434700	1.98443700	0.25057600
Si	-1.15389100	1.98478500	0.25041200
C	1.91023400	3.20760200	-0.97553500
H	2.99769500	3.06880200	-1.04935600
H	1.48143700	3.06486900	-1.97749700
H	1.72059200	4.24676400	-0.67482200
C	1.96276300	2.23604200	1.93301000
H	1.58253400	1.54873200	2.69889200
H	3.05176900	2.10934800	1.86679400
H	1.76467800	3.26012900	2.27826400
C	-1.90900500	3.20812800	-0.97600000
H	-1.71753100	4.24720300	-0.67611100
H	-1.48110700	3.06412200	-1.97816400
H	-2.99673500	3.07105400	-1.04896800
C	-1.96264500	2.23675800	1.93262100
H	-1.58267900	1.54948300	2.69867200



H	-1.76459500	3.26087400	2.27779600
H	-3.05164200	2.11011300	1.86608300
C	-2.92729600	-0.08734900	-0.45003700
C	-3.60036200	-0.44692700	0.72550400
C	-3.67940700	0.03218900	-1.62655100
C	-4.96546700	-0.70489100	0.71776100
H	-3.03421200	-0.54833000	1.65263700
C	-5.04667800	-0.22282100	-1.63440100
H	-3.18423200	0.34537400	-2.54705700
C	-5.69554400	-0.59673300	-0.46278600
H	-5.46177500	-0.99892900	1.64136100
H	-5.60676100	-0.12578800	-2.56339100
H	-6.76466400	-0.80118300	-0.46761700
C	2.92736800	-0.08775200	-0.45010300
C	3.60048400	-0.44719600	0.72544000
C	3.67945100	0.03180800	-1.62665600
C	4.96561700	-0.70505200	0.71766900
H	3.03436100	-0.54858300	1.65259400
C	5.04673700	-0.22307800	-1.63452100
H	3.18419900	0.34494000	-2.54713700
C	5.69565100	-0.59689200	-0.46289400
H	5.46197600	-0.99903300	1.64126000
H	5.60680700	-0.12601300	-2.56351500
H	6.76479400	-0.80121900	-0.46772100

## 2bTS

Fe	1.03005500	1.30025300	-0.63294100
C	2.76145100	1.44179600	-0.48093200
C	0.98098900	2.90019100	0.10202200
C	0.36137700	1.79953500	-2.20541400
O	3.91001500	1.57046200	-0.47330100
O	0.95208800	3.92314400	0.63774800
O	0.07965900	2.12275800	-3.27645100
C	-1.08114200	-0.75817600	-1.19625100
C	-2.03347100	-0.32392700	-0.33742600
C	1.27772500	-0.64894500	-0.09003900
C	0.38715200	-0.59864000	-1.20802700
H	-1.43074100	-1.34201500	-2.05748400
H	0.80370300	-0.93792400	-2.16042000
Si	-1.60672600	0.76075800	1.14545000
Si	0.51672800	-0.21777800	1.60034700
C	-2.66511900	0.24751000	2.62941900
H	-3.68441400	0.64042800	2.51626900
H	-2.73838000	-0.84289600	2.71941500

H	-2. 25795000	0. 64246500	3. 57020100
C	-1. 98784100	2. 59131000	0. 86219300
H	-1. 78018400	2. 91963200	-0. 16315000
H	-3. 05537300	2. 76037500	1. 06241500
H	-1. 42348400	3. 23667400	1. 54702200
C	-0. 10487800	-1. 83858700	2. 38321100
H	-0. 50857600	-1. 66051500	3. 38892000
H	-0. 89269400	-2. 29828900	1. 77203700
H	0. 71549200	-2. 56314500	2. 46873500
C	1. 71884300	0. 63135700	2. 78930700
H	2. 72445000	0. 71202800	2. 35634300
H	1. 38660800	1. 64955800	3. 03065600
H	1. 79957800	0. 07287800	3. 73192300
C	2. 58208800	-1. 36499200	-0. 20818500
C	3. 22751400	-1. 54700100	-1. 44101800
C	3. 20771700	-1. 89345700	0. 92663500
C	4. 43041700	-2. 23051300	-1. 53183000
H	2. 79936100	-1. 12023700	-2. 34801100
C	4. 41401100	-2. 58178600	0. 83969500
H	2. 74693200	-1. 77264200	1. 90658300
C	5. 03163800	-2. 75770000	-0. 39087800
H	4. 90742200	-2. 34711300	-2. 50383500
H	4. 86838600	-2. 98199900	1. 74472400
H	5. 97565000	-3. 29456200	-0. 46354800
C	-3. 42215400	-0. 79580300	-0. 51457200
C	-4. 50774500	0. 08441300	-0. 40332700
C	-3. 69315600	-2. 14619100	-0. 77373200
C	-5. 81208100	-0. 36337400	-0. 57078900
H	-4. 32018100	1. 14247200	-0. 21250600
C	-4. 99773100	-2. 59660400	-0. 93757700
H	-2. 86135100	-2. 84927900	-0. 82534200
C	-6. 06260700	-1. 70649000	-0. 83864300
H	-6. 63842900	0. 34174600	-0. 49443400
H	-5. 18435400	-3. 65133300	-1. 13483700
H	-7. 08500600	-2. 05906300	-0. 96338100

### 3b

Fe	-0. 79301900	-1. 16551100	-0. 14251600
C	-2. 51874800	-1. 59811500	-0. 09801400
C	-0. 42846500	-2. 24381200	1. 16762900
C	-0. 56714600	-1. 83752200	-1. 76868600
O	-3. 60841800	-1. 96715600	-0. 02997800
O	-0. 25936400	-2. 96817100	2. 06421400
O	-0. 45618800	-2. 26216400	-2. 83712000

C	1. 01644300	1. 17981300	-1. 03701400
C	2. 05091000	0. 45937700	-0. 57779700
C	-1. 33247300	0. 92400100	-0. 03677300
C	-0. 40378000	0. 77501500	-1. 09161700
H	1. 19307300	2. 18359900	-1. 44826300
H	-0. 83747100	0. 92180900	-2. 09007500
Si	1. 61969600	-1. 31034200	-0. 08538900
Si	-0. 85723300	0. 32328900	1. 64538600
C	2. 51424500	-1. 76755500	1. 51865600
H	3. 58423200	-1. 54890900	1. 39103700
H	2. 16404000	-1. 22494300	2. 40346300
H	2. 41202200	-2. 84122100	1. 72104800
C	2. 30676900	-2. 55979200	-1. 33158700
H	2. 18423000	-2. 23736200	-2. 37224700
H	3. 37636800	-2. 72740900	-1. 14198000
H	1. 80011000	-3. 52854300	-1. 21891400
C	0. 61451100	0. 98258100	2. 60261700
H	0. 85722500	0. 29280700	3. 42242600
H	1. 51571100	1. 15137200	2. 00587800
H	0. 31780600	1. 93647100	3. 06140200
C	-2. 26323100	0. 07557900	2. 86152800
H	-3. 21866200	-0. 11952900	2. 36028500
H	-2. 03354900	-0. 79151000	3. 49718000
H	-2. 38940400	0. 94282000	3. 52345800
C	-2. 72746400	1. 34308000	-0. 35398300
C	-3. 35536900	2. 26219500	0. 49221100
C	-3. 41423300	0. 93396600	-1. 50447200
C	-4. 62594800	2. 75347300	0. 20801500
H	-2. 82616300	2. 61429900	1. 37887700
C	-4. 68148000	1. 42086100	-1. 79109600
H	-2. 95664500	0. 20337100	-2. 17310600
C	-5. 29494300	2. 33303900	-0. 93448400
H	-5. 09014000	3. 47035200	0. 88339000
H	-5. 19869200	1. 08031900	-2. 68663400
H	-6. 29059500	2. 71147000	-1. 15890800
C	3. 39981400	1. 04199700	-0. 45193500
C	4. 54432200	0. 28845100	-0. 74614700
C	3. 57562500	2. 36315800	-0. 01582800
C	5. 81421500	0. 83930000	-0. 62909000
H	4. 43140300	-0. 73756500	-1. 09794100
C	4. 84518900	2. 91463200	0. 10471500
H	2. 69714000	2. 95371800	0. 24709300
C	5. 97006900	2. 15496800	-0. 20211000
H	6. 68813500	0. 23798500	-0. 87499100

H	4. 95730900	3. 94151400	0. 44974400
H	6. 96529800	2. 58487900	-0. 10213300

#### 4bTS

Fe	0. 95555300	0. 99275600	-0. 49273100
C	2. 70767200	1. 31924200	-0. 63397400
C	0. 62412000	2. 72188800	-0. 55994700
C	0. 59556700	0. 35107300	-2. 12152900
O	3. 81305000	1. 61887500	-0. 75419900
O	0. 39849500	3. 85691200	-0. 53346900
O	0. 36632700	-0. 14821600	-3. 13500200
C	-1. 17189200	-1. 89590100	-0. 06860700
C	-2. 00005300	-0. 83036800	-0. 17986900
C	1. 21877000	-0. 98650200	-0. 04632000
C	0. 27698700	-1. 96167100	-0. 02624600
H	-1. 65309500	-2. 87678500	0. 02903100
H	0. 65628700	-2. 98566200	0. 07438400
Si	-1. 42416900	0. 95448900	-0. 28144100
Si	0. 74375600	0. 85654000	1. 63500700
C	-2. 18332600	1. 88194700	1. 20284400
H	-3. 27846800	1. 87664300	1. 09848300
H	-1. 96458200	1. 44036500	2. 18718400
H	-1. 85707200	2. 93283800	1. 21207000
C	-2. 19147400	1. 83993000	-1. 76838300
H	-1. 96431100	1. 33468900	-2. 71585900
H	-3. 28304800	1. 88810000	-1. 65331600
H	-1. 82092700	2. 87122800	-1. 83795200
C	0. 08089100	-0. 40946700	2. 85130600
H	-0. 36238500	0. 09766700	3. 71910200
H	-0. 64313800	-1. 09969200	2. 40797400
H	0. 92758300	-1. 00870300	3. 21980000
C	1. 34405900	2. 24297500	2. 76823700
H	1. 91574100	3. 00998600	2. 23429400
H	0. 46861000	2. 72465100	3. 23240200
H	1. 95304600	1. 84506600	3. 59289800
C	2. 62434600	-1. 45529100	-0. 00592000
C	3. 49728400	-1. 13490500	1. 04045500
C	3. 11262900	-2. 25650400	-1. 04607200
C	4. 80134900	-1. 61193800	1. 06270800
H	3. 15439600	-0. 49549700	1. 86116100
C	4. 42302800	-2. 72183800	-1. 03618200
H	2. 44625800	-2. 49746700	-1. 87522500
C	5. 27137500	-2. 40614700	0. 01993000
H	5. 45613400	-1. 35681900	1. 89447400

H	4.78244700	-3.33551800	-1.86093100
H	6.29726400	-2.76978000	0.02886000
C	-3.46118500	-1.04960800	-0.06024400
C	-4.34447800	-0.72487800	-1.09815100
C	-3.99616600	-1.56996100	1.12564800
C	-5.71265200	-0.92856300	-0.95907700
H	-3.94452600	-0.33874200	-2.03572400
C	-5.36555100	-1.76527200	1.26855400
H	-3.31927600	-1.81270100	1.94617000
C	-6.22920200	-1.44507000	0.22601300
H	-6.37977800	-0.68477100	-1.78465500
H	-5.75964600	-2.16771600	2.20085100
H	-7.30167700	-1.59703000	0.33591700

### 5b

Fe	1.00804500	0.95516600	-0.48432700
C	2.77179100	1.24640900	-0.51136000
C	0.71172700	2.67582300	-0.76472400
C	0.72054700	0.23422000	-2.09198000
O	3.88836800	1.52033200	-0.56395400
O	0.50439300	3.80640400	-0.89321500
O	0.52298200	-0.29344500	-3.09732200
C	-1.13430000	-1.93911300	0.00802100
C	-1.97064900	-0.89136700	-0.17780000
C	1.24754700	-1.01156900	0.00351700
C	0.31415500	-1.98800600	0.07710000
H	-1.60896500	-2.91798400	0.14932300
H	0.69975700	-2.99993800	0.25130200
Si	-1.40006000	0.88338300	-0.33774200
Si	0.53820900	1.14261300	1.60969900
C	-2.27594900	1.84814200	1.07023100
H	-3.35187300	1.77869500	0.84894500
H	-2.15250200	1.45889300	2.09171200
H	-2.00305000	2.91323500	1.06422100
C	-2.10411700	1.72534300	-1.87896700
H	-1.81271900	1.20483900	-2.79994800
H	-3.20101700	1.73864900	-1.81918600
H	-1.76523600	2.76640400	-1.95320100
C	0.12774500	-0.15971200	2.90199500
H	-0.22295400	0.29888600	3.83506100
H	-0.63554500	-0.85150400	2.52286100
H	1.01338400	-0.77164700	3.12220200
C	0.58340300	2.77434300	2.54968200
H	0.58979300	3.64928400	1.89014500

H	-0.24876200	2.86090700	3.26080500
H	1.51264800	2.79609300	3.14039200
C	2.65390000	-1.47829600	0.08680600
C	3.47284400	-1.20845000	1.18938400
C	3.19766000	-2.21725900	-0.97142700
C	4.78521400	-1.66185900	1.23650100
H	3.07808400	-0.62858700	2.02621400
C	4.51634100	-2.65767200	-0.93355900
H	2.56956100	-2.43963900	-1.83501200
C	5.31639900	-2.38273400	0.17055900
H	5.39934100	-1.44455400	2.10936700
H	4.91939100	-3.22253800	-1.77302800
H	6.34862800	-2.72695500	0.20128500
C	-3.43207800	-1.11606800	-0.06773100
C	-4.30857400	-0.82508100	-1.12122000
C	-3.97556800	-1.60675500	1.12719600
C	-5.67738000	-1.02985000	-0.98753400
H	-3.90293200	-0.46488000	-2.06691800
C	-5.34470800	-1.80730400	1.26346900
H	-3.30380700	-1.82123900	1.95990300
C	-6.20145900	-1.51819000	0.20604700
H	-6.33892800	-0.81056500	-1.82442100
H	-5.74434000	-2.18804600	2.20253600
H	-7.27408500	-1.67237000	0.31122600

**6b**

Fe	-0.96193300	1.13481200	-0.06188400
C	-2.76054400	1.41036800	-0.22177100
C	-0.64369000	2.89299200	-0.04687400
C	-0.60129600	0.83734100	1.59684500
O	-3.87818200	1.67163400	-0.25870500
O	-0.42987100	4.02471600	0.01687500
O	-0.36542000	0.61508600	2.70745200
C	1.16924000	-1.79337800	0.03442500
C	1.98755600	-0.71892500	-0.11484700
C	-1.20730400	-0.86466500	0.02656600
C	-0.27280300	-1.84980400	-0.01395300
Si	1.19952700	0.88582500	-0.57425400
C	0.09497100	0.75493100	-2.14134000
H	0.18537800	-0.25779200	-2.54908400
H	-1.01008100	0.92091900	-2.05943900
H	0.43310800	1.51721300	-2.85251400
C	2.39513100	2.32738900	-0.69629100
H	2.60498800	2.76999700	0.28576800

H	3. 35259800	2. 00817500	-1. 12738100
H	1. 97424000	3. 11892200	-1. 32913200
C	3. 44934800	-0. 88308200	0. 02124000
C	4. 11216800	-1. 92777200	-0. 63708600
C	4. 21176300	-0. 01407400	0. 81271700
C	5. 48387800	-2. 10357700	-0. 50049200
H	3. 53694100	-2. 59616900	-1. 27778100
C	5. 58315400	-0. 19070500	0. 95210000
H	3. 71423100	0. 79305600	1. 35182200
C	6. 22584000	-1. 23574200	0. 29473600
H	5. 97783200	-2. 92053000	-1. 02470400
H	6. 15292200	0. 48910300	1. 58382200
H	7. 30077000	-1. 37130500	0. 40062500
C	-2. 61620400	-1. 32021000	0. 05543700
C	-3. 22742000	-1. 76125600	-1. 12347600
C	-3. 37024100	-1. 29403000	1. 23392500
C	-4. 56512700	-2. 14337100	-1. 12889600
H	-2. 64038800	-1. 78582500	-2. 04360000
C	-4. 70425700	-1. 68253300	1. 22768800
H	-2. 90373400	-0. 95568400	2. 16000300
C	-5. 30967200	-2. 10114800	0. 04531500
H	-5. 02738000	-2. 47630300	-2. 05734800
H	-5. 27700000	-1. 65685500	2. 15362600
H	-6. 35749700	-2. 39607700	0. 04079300
H	1. 64694300	-2. 75793600	0. 24155900
H	-0. 66614100	-2. 87355200	-0. 02929100

### 7bTS

Fe	-0. 04661200	1. 02847300	-0. 10239800
C	0. 73729300	2. 15051200	-1. 29249300
C	0. 59798000	1. 48692500	1. 46724200
C	-1. 47791500	2. 05118500	0. 09356600
O	1. 31163500	2. 86252900	-1. 99026700
O	1. 02417100	1. 83240700	2. 48777100
O	-2. 40605200	2. 72441600	0. 21061100
C	-0. 66822400	-0. 38193100	-1. 64223400
C	-1. 31569200	-0. 69313200	-0. 42632600
C	1. 41147900	-0. 34662000	-0. 65513400
C	0. 74731100	-0. 73684300	-1. 76604300
Si	-0. 08922700	-1. 09090200	0. 91614800
C	0. 88416600	-2. 70739100	0. 94646000
H	0. 99737700	-3. 14923000	-0. 04900900
H	1. 88823800	-2. 55518200	1. 36452700
H	0. 35491100	-3. 41633400	1. 59818900

C	-0.73245500	-0.99724200	2.69137400
H	-1.24231800	-0.06305900	2.94826200
H	-1.41515200	-1.83770800	2.88567900
H	0.11731000	-1.10886000	3.38012400
C	-2.79137500	-0.69263600	-0.33736300
C	-3.49370400	-0.28602000	0.80523600
C	-3.53306900	-1.18917800	-1.41887500
C	-4.87913300	-0.35384900	0.85553300
H	-2.94857800	0.11704800	1.65684000
C	-4.92030000	-1.25992900	-1.36762100
H	-3.01069000	-1.55051200	-2.30411000
C	-5.60125700	-0.84002700	-0.23089000
H	-5.39943600	-0.01794300	1.75101100
H	-5.46988100	-1.65109800	-2.22241600
H	-6.68753900	-0.89350900	-0.18860000
C	2.84609800	-0.46897300	-0.41374800
C	3.56140900	-1.56035400	-0.93427400
C	3.54874100	0.48833900	0.32834700
C	4.92735900	-1.68277600	-0.72454800
H	3.02490200	-2.32766300	-1.49342700
C	4.91835600	0.36555200	0.53601000
H	3.01618200	1.35130600	0.72491100
C	5.61299300	-0.71919200	0.01267900
H	5.46104500	-2.53884300	-1.13488200
H	5.44471300	1.12724800	1.10886300
H	6.68429300	-0.81733700	0.17922400
H	-1.25362200	-0.08666200	-2.51691700
H	1.18094100	-1.16266000	-2.67830700

### 8b

Fe	0.00391000	1.15583800	-0.17449700
C	1.32361000	2.31801800	-0.43118900
C	-0.01798300	1.19230300	1.60708800
C	-1.26850400	2.36261000	-0.46145200
O	2.21041300	3.03427400	-0.59118800
O	-0.03769500	1.29552000	2.75630000
O	-2.11952500	3.11730300	-0.63992200
C	-0.72415900	-0.02575400	-1.67554800
C	-1.29155800	-0.51065100	-0.45721400
C	1.27771700	-0.54135400	-0.47627200
C	0.69965600	-0.03571500	-1.68300200
H	-1.30879600	0.40558700	-2.48946600
H	1.27682400	0.39469400	-2.50228800
Si	-0.01747900	-1.67868500	0.29036900



C	-0.08258300	-3.38624600	-0.50462400
H	-1.00368200	-3.90979400	-0.21180700
H	-0.07126200	-3.30953500	-1.59971500
H	0.76670300	-4.01138600	-0.19773900
C	-0.03153800	-1.90260100	2.15870000
H	0.83496900	-1.44926900	2.65435200
H	-0.93277600	-1.47398400	2.61500500
H	-0.02207100	-2.97557800	2.38798800
C	2.73720200	-0.53648800	-0.26614200
C	3.62296300	-0.75629200	-1.32863100
C	3.27696000	-0.33950700	1.01212600
C	4.99793900	-0.77323300	-1.12106800
H	3.22493000	-0.93660900	-2.32751200
C	4.64952100	-0.35431800	1.21992300
H	2.60342200	-0.14659300	1.84812700
C	5.51772100	-0.57070000	0.15276400
H	5.66710900	-0.94888200	-1.96213500
H	5.04553400	-0.18940000	2.22077300
H	6.59413800	-0.58103600	0.31432100
C	-2.74955300	-0.52322700	-0.23906100
C	-3.60937800	-0.99658100	-1.23849700
C	-3.30920200	-0.12172600	0.98078800
C	-4.98244700	-1.05923300	-1.02818900
H	-3.18743700	-1.33635500	-2.18540000
C	-4.68100300	-0.18404800	1.19075700
H	-2.65309500	0.26417900	1.76220400
C	-5.52423500	-0.65236000	0.18687100
H	-5.63273800	-1.43067600	-1.81889600
H	-5.09494700	0.14435800	2.14293800
H	-6.59933800	-0.69860700	0.35105200

**1c**

Fe	-0.01922700	-0.60767000	1.31570900
C	1.16906700	-0.09622900	2.52708600
C	0.08493600	-2.36664800	1.55089000
C	-1.22413900	-0.28559900	2.58489800
O	1.88692500	0.19349800	3.38231000
O	0.19647500	-3.49862700	1.74348900
O	-1.90457300	-0.13101800	3.50210000
C	-0.78040400	0.53408700	-0.26789700
C	-1.51795500	-0.71547200	-0.28769700
C	1.46077600	-0.61424300	-0.20579500
C	0.66143300	0.58895800	-0.23607000
Si	-1.04151000	-2.05808400	-1.56970900

Si	1. 24454300	-1. 88134200	-1. 60217600
C	-1. 76862800	-1. 56779800	-3. 25188600
H	-2. 86412500	-1. 49773600	-3. 25744100
H	-1. 36882100	-0. 58634700	-3. 54750600
H	-1. 46904400	-2. 28671800	-4. 02708900
C	-1. 57727400	-3. 81129200	-1. 06260000
H	-1. 99103000	-3. 83994100	-0. 04657900
H	-2. 34012600	-4. 20996500	-1. 74539100
H	-0. 72202100	-4. 49911000	-1. 08607200
C	1. 92590300	-1. 12979900	-3. 19870300
H	1. 71828500	-1. 78771500	-4. 05409500
H	1. 46988300	-0. 15252900	-3. 41186600
H	3. 01390000	-0. 99175700	-3. 13607400
C	2. 20075900	-3. 46662000	-1. 25523900
H	1. 88613600	-3. 96200900	-0. 32846000
H	2. 05924200	-4. 17690000	-2. 08143800
H	3. 27506000	-3. 24901200	-1. 17718100
C	2. 92655800	-0. 55070100	0. 11160200
C	3. 48480900	-1. 41633000	1. 06184500
C	3. 81151700	0. 23015700	-0. 64996100
C	4. 85809100	-1. 47804600	1. 27017700
H	2. 82678800	-2. 06164900	1. 64404500
C	5. 18509200	0. 16711300	-0. 44456700
H	3. 41754900	0. 90333100	-1. 41079600
C	5. 71701300	-0. 68366200	0. 51889400
H	5. 25587100	-2. 15692100	2. 02303000
H	5. 84338600	0. 79148100	-1. 04715100
H	6. 79277200	-0. 73076200	0. 67920400
C	-2. 98655900	-0. 68669800	0. 06482500
C	-3. 57919900	0. 24824300	0. 93496900
C	-3. 86628900	-1. 62753000	-0. 49620200
C	-4. 93566500	0. 23640600	1. 22449900
H	-2. 97793300	1. 02042800	1. 40105900
C	-5. 22814300	-1. 64563800	-0. 21485000
H	-3. 49640900	-2. 38224700	-1. 18400000
C	-5. 77664300	-0. 71243700	0. 65260700
H	-5. 33571200	0. 98303900	1. 90879500
H	-5. 85776800	-2. 40095400	-0. 68265900
H	-6. 84096200	-0. 72147700	0. 88074300
C	-1. 48853900	1. 84977100	-0. 31285600
C	-2. 27460700	2. 11636800	-1. 43552900
C	-1. 34985700	2. 84212800	0. 66040200
C	-2. 89135000	3. 35199900	-1. 59547200
H	-2. 40118300	1. 33931100	-2. 19170000

C	-1.97093700	4.07477600	0.50615000
H	-0.75008800	2.64208900	1.54870200
C	-2.73918100	4.33671600	-0.62533400
H	-3.49557300	3.54433600	-2.48056700
H	-1.85354900	4.83653500	1.27522500
H	-3.22149000	5.30521600	-0.74693900
C	1.31067100	1.93351300	-0.31388600
C	1.23754000	2.58497100	-1.55037500
C	2.02380200	2.53841700	0.71891300
C	1.85053900	3.81576300	-1.74552100
H	0.67704200	2.11718500	-2.36212800
C	2.63924200	3.77074300	0.52521600
H	2.10294000	2.05070700	1.68800100
C	2.55385100	4.41461000	-0.70424800
H	1.77527600	4.30937200	-2.71306500
H	3.18801900	4.23020400	1.34565900
H	3.03312700	5.38109700	-0.85118100

## 2cTS

Fe	0.97401100	-0.84245700	1.40704900
C	2.18957200	0.05574800	2.24041800
C	1.71711500	-2.41349400	1.88541100
C	-0.26890300	-0.51585500	2.68302200
O	3.00398300	0.64171800	2.80995600
O	2.19290700	-3.39914300	2.25106300
O	-1.05704600	-0.30253800	3.49708100
C	-0.96140300	0.44544400	-0.16305400
C	-1.71868000	-0.69885800	-0.14203100
C	1.49815600	-0.38528100	-0.44629600
C	0.53094200	0.59221900	0.04697300
Si	-1.13272800	-2.50012700	-0.14022500
Si	0.91680000	-2.01863800	-1.19734600
C	-2.15451100	-3.43199200	-1.43473000
H	-3.17200300	-3.59695000	-1.05321000
H	-2.23656500	-2.87926800	-2.37791000
H	-1.70765800	-4.41349500	-1.64614700
C	-1.36560300	-3.50862100	1.44247800
H	-1.10280400	-2.98574900	2.36770300
H	-2.41339700	-3.83309600	1.51136500
H	-0.74287700	-4.41277900	1.38375100
C	0.32448500	-1.74012400	-2.98242800
H	-0.05244000	-2.67307500	-3.42192900
H	-0.46738800	-0.98094000	-3.04211800
H	1.17596200	-1.40546000	-3.59098900

C	2. 30591600	-3. 28196700	-1. 30848200
H	2. 80257700	-3. 50093600	-0. 35783300
H	1. 90955300	-4. 22427300	-1. 71090000
H	3. 06677500	-2. 91366800	-2. 01181500
C	2. 86272600	-0. 08261900	-0. 96898500
C	4. 03704800	-0. 42346500	-0. 29175900
C	2. 99174300	0. 40507000	-2. 28163500
C	5. 28649400	-0. 25377200	-0. 88319600
H	3. 97029800	-0. 84814400	0. 70867000
C	4. 23526200	0. 57824100	-2. 87329000
H	2. 08647000	0. 65536600	-2. 83966800
C	5. 39403700	0. 25059500	-2. 17294700
H	6. 18187900	-0. 52320900	-0. 32492200
H	4. 30019500	0. 96694200	-3. 88862700
H	6. 37166300	0. 38310800	-2. 63307400
C	-3. 19433900	-0. 64840800	-0. 33102300
C	-4. 03308800	-1. 07621700	0. 70503300
C	-3. 77347400	-0. 29505800	-1. 55509000
C	-5. 41212900	-1. 13018400	0. 53066000
H	-3. 58885900	-1. 35182100	1. 66420400
C	-5. 15000900	-0. 35959000	-1. 73295400
H	-3. 12902300	0. 03234800	-2. 37217900
C	-5. 97509000	-0. 77568700	-0. 69136000
H	-6. 04851800	-1. 45145200	1. 35397700
H	-5. 58266900	-0. 08206400	-2. 69314100
H	-7. 05344000	-0. 82419100	-0. 83269200
C	0. 95391700	2. 00648700	0. 37970500
C	0. 54740700	2. 59948000	1. 58334300
C	1. 67084800	2. 80676900	-0. 51402100
C	0. 84456300	3. 92115900	1. 88381500
H	-0. 02883300	2. 01294500	2. 29838400
C	1. 98347600	4. 12967200	-0. 21356900
H	1. 97848400	2. 40580000	-1. 47478900
C	1. 57243800	4. 69577400	0. 98559000
H	0. 50733400	4. 34510300	2. 82839600
H	2. 54716900	4. 72098800	-0. 93379000
H	1. 81311200	5. 73160000	1. 21918700
C	-1. 68858300	1. 73350100	-0. 36798700
C	-1. 46416800	2. 46897000	-1. 53399900
C	-2. 60367200	2. 21386700	0. 56993100
C	-2. 14775200	3. 65678900	-1. 76285800
H	-0. 74558400	2. 09463500	-2. 26700800
C	-3. 27543600	3. 40998800	0. 35051200
H	-2. 77989500	1. 64287000	1. 48249800

C	-3.05093100	4.13340900	-0.81697900
H	-1.96925200	4.21598300	-2.68000400
H	-3.98055700	3.77821700	1.09398700
H	-3.58000700	5.06902700	-0.99077900
<b>3c</b>			
Fe	-0.80646200	-1.19980700	-0.02747400
C	-2.49950500	-1.68332700	0.22544100
C	-0.32082900	-1.94779500	1.45421100
C	-0.72686700	-2.23619000	-1.46115700
O	-3.54768800	-2.11225500	0.44327100
O	-0.09122100	-2.47525700	2.47004800
O	-0.73445400	-2.97165300	-2.35306500
C	0.98580200	1.24058000	-1.05851100
C	2.01340300	0.45917600	-0.67875000
C	-1.37868100	0.90086100	-0.18077000
C	-0.44109800	0.78581200	-1.22570300
Si	1.59601400	-1.31668800	-0.19930200
Si	-0.87122500	0.49128200	1.55715100
C	2.61290100	-1.72592300	1.34534800
H	3.67526600	-1.57151600	1.10879700
H	2.36713600	-1.10381700	2.21464600
H	2.47989500	-2.77478600	1.63927000
C	2.25367900	-2.55689800	-1.47403900
H	2.01523600	-2.29526800	-2.51251200
H	3.34699100	-2.61455100	-1.37736300
H	1.85621700	-3.56299200	-1.28419200
C	0.62486000	1.17384500	2.45581300
H	0.72412900	0.62739400	3.40490100
H	1.56679800	1.08915100	1.90746000
H	0.45801600	2.23178900	2.70400800
C	-2.27621000	0.40560300	2.79387000
H	-3.24439900	0.20652200	2.32068300
H	-2.06893200	-0.40626000	3.50559800
H	-2.35898500	1.33645500	3.37099300
C	-2.81121100	1.25165700	-0.42750000
C	-3.30302100	2.39296700	0.21623500
C	-3.66423300	0.57646500	-1.30795500
C	-4.59463300	2.85547600	-0.01579200
H	-2.65045600	2.93700500	0.90247100
C	-4.95558000	1.03185300	-1.53872200
H	-3.30339200	-0.30700100	-1.83335900
C	-5.42667000	2.17399900	-0.89614600
H	-4.94916300	3.74853500	0.49637400

H	-5.59934300	0.48849800	-2.22826100
H	-6.43993600	2.52743200	-1.07898100
C	3.39782900	0.95815300	-0.51464600
C	4.46096900	0.30345200	-1.15021100
C	3.69458700	2.05607900	0.30393300
C	5.77192400	0.73408400	-0.98127000
H	4.24813600	-0.54383600	-1.80331300
C	5.00555200	2.48100600	0.48141900
H	2.88038700	2.59002400	0.79454100
C	6.05022400	1.82221700	-0.15983500
H	6.58065300	0.21554700	-1.49436900
H	5.21244200	3.33622100	1.12313000
H	7.07691500	2.15698400	-0.02160400
C	-0.81450000	0.92738100	-2.67755000
C	-0.21292600	0.09498100	-3.62533500
C	-1.60705900	1.98700800	-3.13544200
C	-0.43544900	0.27609400	-4.98539100
H	0.44946100	-0.70211400	-3.28960200
C	-1.81998300	2.17800200	-4.49527300
H	-2.04676800	2.68217600	-2.42178100
C	-1.24422800	1.31819600	-5.42548800
H	0.03223200	-0.39680800	-5.70225000
H	-2.43547600	3.01228800	-4.82797900
H	-1.41522300	1.46803900	-6.49032500
C	1.15451100	2.65992900	-1.48764800
C	1.98459800	2.98306000	-2.56463300
C	0.45400700	3.68426400	-0.84497400
C	2.11560500	4.30067400	-2.98383700
H	2.51751200	2.18350200	-3.07906400
C	0.59458800	5.00522600	-1.25598200
H	-0.21082300	3.43731100	-0.01513700
C	1.42355900	5.31609000	-2.32915600
H	2.75877200	4.53678100	-3.83007000
H	0.05041200	5.79454100	-0.73932000
H	1.52685800	6.34859100	-2.65890700

#### 4cTS

Fe	-1.74311000	-1.60598600	-0.49514800
C	-3.51610100	-1.33485100	-0.57149600
C	-2.02017800	-3.34329400	-0.59859400
C	-1.19864700	-1.13749100	-2.12748300
O	-4.66367800	-1.26778200	-0.63992600
O	-2.19103500	-4.48818200	-0.61249500
O	-0.81076800	-0.75163400	-3.14355600

C	1. 26477300	0. 43881800	-0. 11176000
C	1. 61612800	-0. 87545200	-0. 13315700
C	-1. 30079000	0. 35485100	-0. 09166800
C	-0. 10813500	1. 01374500	-0. 07973500
Si	0. 48188300	-2. 36563300	-0. 24023900
Si	-1. 46364900	-1. 53412400	1. 63305100
C	0. 83531500	-3. 53112800	1. 23284200
H	1. 87971600	-3. 87091900	1. 17140500
H	0. 70957500	-3. 10477600	2. 23991300
H	0. 19259100	-4. 42121400	1. 16061600
C	0. 97120700	-3. 43709200	-1. 72040400
H	0. 92342000	-2. 88431600	-2. 66706300
H	1. 99620000	-3. 80978800	-1. 58813100
H	0. 30644500	-4. 30754400	-1. 80167100
C	-0. 40118500	-0. 55001700	2. 83294100
H	-0. 00254300	-1. 22014600	3. 60744300
H	0. 42024000	-0. 00722900	2. 35435500
H	-1. 04470900	0. 17707300	3. 35217500
C	-2. 53742900	-2. 60988200	2. 75047700
H	-2. 66205900	-3. 60802800	2. 30896000
H	-2. 16934200	-2. 70736400	3. 77913000
H	-3. 54356900	-2. 16219500	2. 78537500
C	-2. 54956400	1. 16560800	-0. 07666500
C	-3. 33411600	1. 28273700	1. 07544000
C	-3. 00956900	1. 77009700	-1. 25164800
C	-4. 53823800	1. 97637900	1. 05890800
H	-2. 99223700	0. 82730900	2. 01095900
C	-4. 21928400	2. 45369500	-1. 27484100
H	-2. 40941700	1. 68077500	-2. 15815100
C	-4. 99055100	2. 55884400	-0. 12089300
H	-5. 12947800	2. 05523500	1. 97013400
H	-4. 56304700	2. 90684700	-2. 20354100
H	-5. 93940100	3. 09173100	-0. 14073400
C	3. 04397800	-1. 27920900	0. 00068300
C	3. 79830500	-1. 68894400	-1. 10418800
C	3. 64235300	-1. 32309900	1. 26571700
C	5. 11655100	-2. 10641500	-0. 95274200
H	3. 34466800	-1. 65874400	-2. 09588700
C	4. 95718100	-1. 74691400	1. 41933900
H	3. 06074100	-1. 01327400	2. 13623500
C	5. 70030700	-2. 13864600	0. 30974300
H	5. 69109100	-2. 40641200	-1. 82800100
H	5. 40527000	-1. 76824200	2. 41184600
H	6. 73099000	-2. 46843100	0. 42911500

C	2. 37684100	1. 44318600	-0. 08059700
C	3. 11054500	1. 70394300	-1. 23892200
C	2. 68758000	2. 14794500	1. 08371200
C	4. 10817800	2. 67260500	-1. 24422800
H	2. 87293900	1. 15279500	-2. 14986500
C	3. 68524400	3. 11484700	1. 08259200
H	2. 12369600	1. 94870000	1. 99638300
C	4. 39334300	3. 38622500	-0. 08483600
H	4. 66259800	2. 87325400	-2. 15987900
H	3. 90861600	3. 66267400	1. 99687200
H	5. 16931500	4. 15001300	-0. 08887100
C	-0. 14157600	2. 51294500	0. 00650900
C	0. 19404600	3. 29262500	-1. 10297600
C	-0. 45596600	3. 15840100	1. 20312100
C	0. 24827500	4. 67758900	-1. 00979100
H	0. 43230900	2. 79778400	-2. 04577600
C	-0. 40698100	4. 54488500	1. 30030000
H	-0. 72215100	2. 55993200	2. 07574800
C	-0. 04547600	5. 30854500	0. 19576400
H	0. 52298600	5. 26733200	-1. 88312100
H	-0. 64644700	5. 03006800	2. 24562000
H	0. 00223000	6. 39364100	0. 27191500

### 5c

Fe	-1. 79534600	-1. 55388400	-0. 47480300
C	-3. 55479200	-1. 20650900	-0. 56233000
C	-2. 13601300	-3. 27854600	-0. 65890500
C	-1. 21068000	-1. 09730700	-2. 09478700
O	-4. 69718700	-1. 09537900	-0. 64521900
O	-2. 34597000	-4. 41413200	-0. 72434100
O	-0. 78876300	-0. 74903600	-3. 11049300
C	1. 26599500	0. 43959600	-0. 09059700
C	1. 59796400	-0. 87829400	-0. 13281600
C	-1. 29879700	0. 39916800	-0. 11250100
C	-0. 09766500	1. 03379200	-0. 04653000
Si	0. 43401300	-2. 33833900	-0. 17907400
Si	-1. 50151400	-1. 75447100	1. 65281900
C	0. 84132000	-3. 45555100	1. 33207400
H	1. 88273600	-3. 77857400	1. 18291800
H	0. 80517100	-3. 00824800	2. 33572200
H	0. 21224900	-4. 35784400	1. 32899900
C	0. 86924500	-3. 50298000	-1. 60441600
H	0. 75108500	-3. 02207400	-2. 58331200
H	1. 91331400	-3. 82929000	-1. 50283400



H	0. 23505600	-4. 39864600	-1. 58375000
C	-0. 63559500	-0. 64787900	2. 90472100
H	-0. 28716600	-1. 23440800	3. 76497100
H	0. 20812900	-0. 10649800	2. 45907500
H	-1. 34344900	0. 10224600	3. 28743500
C	-2. 23434200	-3. 15657700	2. 67619400
H	-2. 57441500	-3. 99436100	2. 05659400
H	-1. 53159200	-3. 52771200	3. 43369600
H	-3. 11178500	-2. 76506000	3. 21384800
C	-2. 52438600	1. 24508700	-0. 12334800
C	-3. 30739800	1. 43391500	1. 02031700
C	-2. 95735500	1. 82657500	-1. 32083400
C	-4. 48532100	2. 16947600	0. 97046900
H	-2. 98761500	0. 99635200	1. 96855000
C	-4. 14102600	2. 55271900	-1. 37575200
H	-2. 35473800	1. 69110300	-2. 22002100
C	-4. 91342700	2. 72543700	-0. 23102100
H	-5. 07501600	2. 30503400	1. 87620400
H	-4. 46189000	2. 98774700	-2. 32125800
H	-5. 84131800	3. 29292400	-0. 27363700
C	3. 02487200	-1. 30122100	-0. 06141500
C	3. 71882400	-1. 71603400	-1. 20318800
C	3. 68738300	-1. 34681400	1. 17098800
C	5. 04088400	-2. 13982600	-1. 11995800
H	3. 21423500	-1. 68280400	-2. 17009000
C	5. 00710100	-1. 77533800	1. 25698500
H	3. 15034900	-1. 03103900	2. 06806000
C	5. 68964300	-2. 17176200	0. 11056700
H	5. 56810600	-2. 44419900	-2. 02307700
H	5. 50634400	-1. 79638900	2. 22474800
H	6. 72408000	-2. 50482600	0. 17619800
C	2. 39272300	1. 42707800	-0. 07185800
C	2. 73838700	2. 10810900	1. 09673700
C	3. 10248900	1. 69770100	-1. 24251700
C	3. 74756500	3. 06280500	1. 08843600
H	2. 19161900	1. 89929500	2. 01776000
C	4. 11200200	2. 65411300	-1. 25466100
H	2. 83867200	1. 16308600	-2. 15608400
C	4. 43178200	3. 34515500	-0. 09071800
H	3. 99832900	3. 59308900	2. 00593500
H	4. 64839700	2. 86262700	-2. 17928200
H	5. 21696100	4. 09946100	-0. 10025600
C	-0. 10750100	2. 53095200	0. 09282200
C	0. 21542100	3. 34729100	-0. 99389600

C	-0.38948900	3.13676700	1.31785100
C	0.28827900	4.72754300	-0.85237300
H	0.43167300	2.88382800	-1.95774500
C	-0.32256500	4.51843500	1.46412100
H	-0.64534000	2.51039900	2.17378100
C	0.02642100	5.31755600	0.38094400
H	0.55382700	5.34509300	-1.70919200
H	-0.53687400	4.97191900	2.43106800
H	0.08855400	6.39868000	0.49502000
<b>6c</b>			
Fe	0.03424600	-1.66920100	-0.71212300
C	-0.94721700	-3.04043300	-0.29642500
C	1.41204300	-2.70696200	-1.18234900
C	-0.21026700	-0.94672700	-2.33676400
O	-1.59646800	-3.95615800	-0.00170500
O	2.28521300	-3.39218000	-1.49346600
O	-0.45945200	-0.47383300	-3.36021400
C	0.62028100	0.75542700	0.12791500
C	1.31023600	-0.35061700	0.62806000
C	-1.41929100	-0.40731100	-0.18398300
C	-0.85060600	0.78317600	0.14501800
Si	0.38743400	-1.73613100	1.51658400
C	-0.92235300	-1.32598200	2.79835100
H	-1.12645600	-0.25045300	2.85321500
H	-1.86746200	-1.83395300	2.56178700
H	-0.59021900	-1.67262500	3.78547200
C	1.47119400	-3.12350300	2.16791300
H	2.34114200	-3.31182300	1.52796200
H	1.82765400	-2.92707600	3.18803000
H	0.87165200	-4.04478600	2.20225700
C	2.79544800	-0.42161400	0.54328000
C	3.48342900	-0.35003900	-0.67416100
C	3.54518300	-0.51762200	1.72028800
C	4.87127700	-0.36318500	-0.70889500
H	2.91789000	-0.26842300	-1.60322400
C	4.93575700	-0.52475700	1.68954000
H	3.02541700	-0.55980300	2.67921800
C	5.60399000	-0.44827800	0.47243900
H	5.38529000	-0.30463700	-1.66695600
H	5.49710800	-0.59001500	2.62032900
H	6.69206400	-0.45844900	0.44200200
C	1.30385100	1.95322600	-0.41647000
C	0.86754300	2.49273600	-1.63194500
C	2.34658800	2.58502500	0.26960200

C	1. 47941200	3. 62104900	-2. 16314200
H	0. 04900000	2. 00910700	-2. 16651700
C	2. 94055900	3. 72712200	-0. 25035100
H	2. 68737400	2. 18114700	1. 22225700
C	2. 51478500	4. 24268200	-1. 47152400
H	1. 13956700	4. 02071300	-3. 11695800
H	3. 74311300	4. 21613800	0. 29909100
H	2. 98737600	5. 13346700	-1. 88227800
C	-1. 53506200	2. 04708900	0. 50363000
C	-2. 55949800	2. 57777400	-0. 28807800
C	-1. 15073000	2. 74346600	1. 65461200
C	-3. 18851600	3. 76289600	0. 06958500
H	-2. 85543100	2. 04954900	-1. 19480100
C	-1. 77979400	3. 93013100	2. 01455300
H	-0. 34744400	2. 34200300	2. 27635300
C	-2. 80272600	4. 44232100	1. 22297300
H	-3. 98198100	4. 16344700	-0. 55951200
H	-1. 46990900	4. 45664500	2. 91606500
H	-3. 29702700	5. 37175700	1. 50110800
C	-2. 86010900	-0. 68224500	-0. 19600900
C	-3. 69774100	-0. 24665400	0. 84613300
C	-3. 44430300	-1. 41506700	-1. 23936300
C	-5. 05526200	-0. 53615600	0. 84150400
H	-3. 27466800	0. 32288000	1. 67193800
C	-4. 80733500	-1. 68468700	-1. 25482700
H	-2. 81593800	-1. 77008000	-2. 05519400
C	-5. 61895200	-1. 25117200	-0. 21182100
H	-5. 67839400	-0. 19810000	1. 66821300
H	-5. 23486200	-2. 24653100	-2. 08370900
H	-6. 68455100	-1. 47432200	-0. 21578400

### 7cTS

Fe	-0. 12619900	-1. 29418400	1. 03376600
C	0. 48885100	-2. 93567700	1. 09745500
C	-1. 58098300	-1. 80761000	1. 90029100
C	0. 62119100	-0. 43815000	2. 43637900
O	0. 89817700	-4. 01416100	1. 21130800
O	-2. 50076400	-2. 17389400	2. 49346200
O	1. 22256900	0. 04089400	3. 29753700
C	-0. 65370900	0. 61547000	-0. 04690900
C	-1. 27103500	-0. 49749100	-0. 66741900
C	1. 41023400	-0. 48763700	-0. 08149600
C	0. 81769700	0. 72575300	-0. 25413200
Si	-0. 03549100	-1. 73542800	-1. 28751800

C	0.99047000	-1.39313900	-2.83630600
H	1.11030700	-0.31841500	-3.01895100
H	1.99172600	-1.83799100	-2.76932500
H	0.47931400	-1.84582300	-3.69757300
C	-0.75894900	-3.45457900	-1.59011500
H	-1.60057800	-3.65590100	-0.91522600
H	-1.10067600	-3.56718800	-2.62855700
H	0.00110900	-4.22709500	-1.41133100
C	-2.73456700	-0.67286900	-0.82087100
C	-3.67767700	-0.35236100	0.16652000
C	-3.21026100	-1.14113600	-2.05248300
C	-5.03589200	-0.51156800	-0.06727700
H	-3.34314000	0.02893100	1.12914400
C	-4.57135800	-1.29495400	-2.29260300
H	-2.49479400	-1.37153600	-2.84387600
C	-5.48946000	-0.98500600	-1.29650500
H	-5.74724900	-0.26506900	0.71899600
H	-4.91258900	-1.65976400	-3.25999800
H	-6.55612200	-1.11041400	-1.47493400
C	-1.38420500	1.81651500	0.44021800
C	-1.08899100	2.39135500	1.67946300
C	-2.32158800	2.45066000	-0.38352700
C	-1.72774200	3.55381000	2.09482600
H	-0.35166600	1.91881300	2.32713500
C	-2.95618500	3.61585300	0.02823600
H	-2.55123400	2.02326500	-1.35975800
C	-2.66587200	4.16859900	1.27182900
H	-1.48919200	3.98077800	3.06744700
H	-3.68163800	4.09405200	-0.62791900
H	-3.16674800	5.07905200	1.59668000
C	1.45992400	2.02733500	-0.51012900
C	2.53343500	2.46206900	0.27462100
C	0.99318100	2.84947000	-1.54106800
C	3.13046000	3.69150100	0.02620900
H	2.89029300	1.82676900	1.08591500
C	1.59897400	4.07362400	-1.79570900
H	0.15258700	2.51533200	-2.15117200
C	2.66823100	4.49712100	-1.01143100
H	3.96156100	4.02290300	0.64647200
H	1.23360500	4.70123900	-2.60688300
H	3.13934700	5.45944600	-1.20526600
C	2.83978300	-0.80363600	-0.16726000
C	3.65225100	-0.25067000	-1.17366500
C	3.43876500	-1.67808400	0.74914400

C	5. 00072300	-0. 56534200	-1. 25610100
H	3. 21567600	0. 43769100	-1. 89630000
C	4. 79277400	-1. 98722100	0. 66917100
H	2. 83629500	-2. 10551600	1. 54858700
C	5. 57945400	-1. 43646800	-0. 33500200
H	5. 60598500	-0. 12568800	-2. 04752800
H	5. 23064900	-2. 66648800	1. 39886500
H	6. 63783100	-1. 68252800	-0. 40188500

**8c**

Fe	-0. 08660000	1. 24920600	0. 08705900
C	1. 17799400	2. 46878700	0. 28788400
C	-0. 26470300	0. 85932200	1. 82086100
C	-1. 31424700	2. 52881100	0. 00783000
O	1. 99629300	3. 25937700	0. 48040900
O	-0. 38649100	0. 69296900	2. 95488700
O	-2. 09083000	3. 38047400	-0. 02577000
C	-0. 78053200	0. 32857400	-1. 63626200
C	-1. 31680800	-0. 42530200	-0. 53310700
C	1. 23408700	-0. 27921600	-0. 48781000
C	0. 66494600	0. 38578400	-1. 63208000
Si	0. 03362000	-1. 64267200	-0. 04314100
C	0. 15638400	-3. 10059000	-1. 23464300
H	-0. 65545100	-3. 82663600	-1. 08831500
H	0. 10828000	-2. 74236100	-2. 27366300
H	1. 10773100	-3. 63589300	-1. 10707600
C	0. 10723400	-2. 26571200	1. 72888300
H	1. 06281700	-1. 98210700	2. 19133500
H	-0. 69733300	-1. 87222300	2. 36071400
H	0. 04371300	-3. 36151600	1. 74079400
C	2. 68705800	-0. 39248100	-0. 24291500
C	3. 51159400	-1. 01333500	-1. 19352100
C	3. 26091100	0. 00517300	0. 96992400
C	4. 86363300	-1. 20998200	-0. 94356900
H	3. 07948000	-1. 34176100	-2. 14003300
C	4. 61539900	-0. 19196800	1. 21946800
H	2. 63055100	0. 47956400	1. 72337500
C	5. 42295800	-0. 79790900	0. 26320500
H	5. 48548400	-1. 68935700	-1. 69830100
H	5. 03987500	0. 13351400	2. 16806700
H	6. 48334700	-0. 95093000	0. 45691900
C	-2. 75332800	-0. 57134600	-0. 22410400
C	-3. 19385900	-1. 77772200	0. 34080500
C	-3. 72106500	0. 41748400	-0. 46484200

C	-4.53261300	-1.99725300	0.64432800
H	-2.47234800	-2.57162200	0.54428200
C	-5.05704800	0.20404700	-0.15613800
H	-3.43211800	1.36970500	-0.90289100
C	-5.47277600	-1.00389500	0.39848400
H	-4.83874800	-2.94837800	1.07714700
H	-5.78234500	0.99248200	-0.35100700
H	-6.52197700	-1.16721300	0.63856300
C	-1.58017200	0.87472900	-2.75860000
C	-2.44291800	0.00303800	-3.43153300
C	-1.44636800	2.18487800	-3.22396800
C	-3.15639000	0.43181100	-4.54395400
H	-2.54643300	-1.02185500	-3.07180200
C	-2.16399600	2.61510700	-4.33352300
H	-0.76420100	2.86690100	-2.71654100
C	-3.02052400	1.74086500	-4.99641900
H	-3.82262400	-0.25909700	-5.05780700
H	-2.05116100	3.63974200	-4.68348300
H	-3.58208300	2.07943000	-5.86552600
C	1.45607000	0.88893900	-2.78186600
C	1.23602800	0.29204600	-4.02949600
C	2.48232600	1.82861300	-2.66403900
C	2.00931600	0.63612000	-5.13099400
H	0.44511600	-0.45177100	-4.13288800
C	3.25277300	2.17695700	-3.76771100
H	2.69335300	2.28842900	-1.70151900
C	3.01946800	1.58451800	-5.00418800
H	1.82038200	0.16127500	-6.09241400
H	4.04416900	2.91611200	-3.65539200
H	3.62474500	1.85921000	-5.86652500