

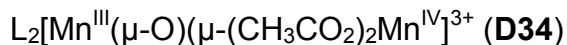
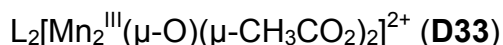
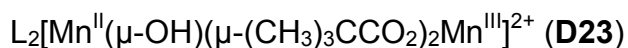
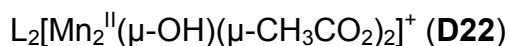
Electronic supplementary information

The effect of Mn oxidation state on metal core electron excitations in manganese dimers - a time dependent density functional investigation

Adrian R. Jaszewski, Rob Stranger, Ronald J. Pace*

*Department of Chemistry, Faculty of Science, Australian National University, Canberra
ACT 0200, Australia*

*Corresponding author, phone: +61-(0)2-61254546, fax: +61-(0)2-61258997, e-mail:
Ron.Pace@anu.edu.au



L=1,4,7-trimethyl-1,4,7-triazacyclononane, PhBO_2^{2-} = dianion of phenylboronic acid

D22 ANTIFERRO GEOMETRY

1.Mn	1.778391	-0.117510	13.278689
2.O	1.706413	1.701545	14.244094
3.O	1.451979	-1.362288	14.977386
4.O	-0.196301	-0.197347	12.466807
5.C	0.520395	-1.238011	15.838448
6.C	0.214404	-2.430697	16.731174
7.N	2.647877	0.744236	11.198474
8.N	2.275639	-2.065622	11.959354
9.N	4.184404	-0.392893	13.442943
10.C	2.775042	-0.349785	10.192649
11.C	1.990343	-1.606580	10.574789
12.C	3.691824	-2.484872	12.138964
13.C	4.340424	-1.868066	13.382168
14.C	4.863214	0.307555	12.317281
15.C	3.958191	1.311060	11.594070
16.C	1.750972	1.807619	10.711885
17.C	1.351229	-3.155287	12.333232
18.C	4.663452	0.105539	14.746663
19.Mn	-0.118255	1.778188	15.202686
20.C	-1.238161	0.518991	12.643075
21.O	-0.196711	-0.196519	16.014538
22.O	-1.362739	1.450987	13.503418
23.N	0.742710	2.647778	17.281234
24.N	-2.067901	2.276339	16.518954
25.N	-0.392502	4.185067	15.035929
26.C	-2.431776	0.211540	11.752370
27.C	-0.350992	2.773494	18.286584
28.C	1.310627	3.955701	16.885202
29.C	1.807646	1.750503	17.767035
30.C	-1.608411	1.989870	17.903242
31.C	-2.484553	3.692564	16.339857
32.C	-3.155980	1.353761	16.142872
33.C	-1.866636	4.341782	15.096356
34.C	0.309389	4.864987	16.161956
35.C	0.104819	4.661036	13.732521
36.H	-0.804252	-2.780651	16.524383
37.H	0.238509	-2.127449	17.789650
38.H	0.921927	-3.250789	16.565479
39.H	3.835360	-0.590264	10.048800
40.H	2.412685	-0.002441	9.206473
41.H	0.909413	-1.388314	10.545853
42.H	2.195850	-2.397329	9.834794
43.H	3.758786	-3.585344	12.228736
44.H	4.269076	-2.225576	11.246073
45.H	5.401893	-2.165528	13.419725
46.H	3.848407	-2.266715	14.286705
47.H	5.753237	0.850600	12.683678
48.H	5.244558	-0.433017	11.602862
49.H	4.504367	1.723465	10.725736
50.H	3.738447	2.159271	12.265398
51.H	1.579210	2.534542	11.519495
52.H	0.785888	1.371709	10.441131
53.H	2.170950	2.334034	9.831853
54.H	1.547341	-3.451728	13.371156
55.H	0.317790	-2.786939	12.275232
56.H	4.074831	-0.359920	15.548704
57.H	4.521109	1.189263	14.802680
58.H	5.735012	-0.121332	14.906600
59.H	-2.779419	-0.808408	11.959788
60.H	-2.129204	0.234700	10.692467
61.H	-3.252158	0.917059	11.917640
62.H	-0.591355	3.834394	18.432061

63.H	-0.004976	2.409893	19.272580
64.H	1.723793	4.503358	17.754752
65.H	2.158480	3.736502	16.214529
66.H	2.532413	1.579011	16.958515
67.H	1.370518	0.783879	18.037002
68.H	2.332746	2.168957	18.646352
69.H	-1.391635	0.909453	17.932626
70.H	-2.400177	2.196616	18.643850
71.H	-3.585922	3.760742	16.248881
72.H	-2.226296	4.269719	17.233001
73.H	-3.450430	1.551013	15.104474
74.H	-2.789763	0.319432	16.201072
75.H	-2.164593	5.402454	15.059156
76.H	-2.265709	3.849100	14.192179
77.H	0.850992	5.751949	15.797452
78.H	-0.433171	5.244491	16.877191
79.H	-0.357771	4.076889	12.931772
80.H	1.190727	4.524739	13.676632
81.H	-0.121579	5.738184	13.572432
82.H	1.465699	-4.033251	11.672390
83.H	-4.036184	1.468593	16.801565
84.H	2.376387	2.400494	14.218200

D22 ANTIFERRO TDDFT

E/eV	fx10 ³ /au	Initial orbital
6429.15	0.10	2a
6433.04	0.13	2a
6439.25	0.13	2a
6443.04	0.13	2a
6466.46	0.25	2a
6466.48	0.23	2a
6466.50	0.14	2a
6466.76	0.17	2a
6466.76	0.50	2a
6466.86	0.22	2a
6466.90	0.19	2a
6466.98	0.16	1a
6467.01	0.18	1a
6467.11	0.15	1a
6467.12	0.12	1a
6467.32	0.20	2a
6467.33	0.21	2a
6467.52	0.18	1a
6467.53	0.25	1a
6467.60	0.17	1a
6467.92	0.30	2a
6467.93	0.31	2a
6467.96	0.12	2a
6468.23	0.21	1a
6468.26	0.21	1a
6468.54	0.17	1a
6468.55	0.36	1a
6469.16	0.34	2a
6469.18	0.10	1a
6469.19	0.26	1a
6469.72	0.21	1a
6469.73	0.23	1a
6469.99	0.12	2a
6470.08	0.20	2a
6470.09	0.24	2a
6470.10	0.10	1a
6470.11	0.15	1a
6470.30	0.15	1a

6470.31	0.18	1a	6486.81	0.17	1a
6471.11	0.27	1a	6487.19	0.14	1a
6471.12	0.17	1a	6490.36	0.11	1a
6471.67	0.11	1a	6490.88	0.14	2a
6472.61	0.11	2a	6490.89	0.13	1a
6472.82	0.15	1a	6491.62	0.13	2a
6474.43	0.14	2a	6491.86	0.17	1a
6474.46	0.13	2a	6491.86	0.16	1a
6474.78	0.23	2a	6502.74	0.16	2a
6474.79	0.12	1a	6502.75	0.15	1a
6474.79	0.18	2a	6525.28	0.12	1a
6474.81	0.13	1a			
6475.12	0.36	2a	D22 FERRO TDDFT		
6475.13	0.31	2a	E/eV	fx10 ³ /au	Initial orbital
6475.35	0.12	2a	6433.25	0.11	2a
6475.36	0.21	1a	6439.38	0.10	2a
6475.37	0.13	1a	6443.15	0.12	2a
6475.50	0.17	2a	6465.97	0.11	2a
6475.50	0.14	2a	6466.29	0.19	2a
6475.68	0.13	1a	6466.29	0.13	1a
6475.79	0.19	1a	6466.70	0.22	1a
6475.81	0.17	1a	6466.71	0.14	1a
6476.10	0.31	1a	6466.72	0.23	2a
6476.16	0.11	1a	6466.80	0.26	2a
6476.30	0.10	1a	6466.80	0.17	1a
6476.80	0.10	1a	6466.91	0.18	2a
6477.20	0.12	1a	6466.91	0.12	1a
6479.70	0.16	2a	6467.14	0.19	1a
6480.46	0.17	2a	6467.19	0.25	2a
6480.92	0.10	2a	6467.19	0.11	2a
6480.93	0.11	1a	6467.19	0.14	1a
6481.39	0.38	2a	6467.53	0.15	2a
6481.54	0.29	1a	6467.53	0.15	1a
6481.83	0.17	2a	6467.59	0.12	2a
6481.83	0.27	2a	6467.60	0.11	1a
6482.06	0.13	1a	6467.68	0.13	2a
6482.07	0.12	1a	6467.86	0.16	2a
6482.19	0.11	2a	6467.89	0.12	1a
6482.37	0.12	2a	6467.90	0.11	2a
6482.40	0.12	2a	6467.90	0.16	1a
6482.53	0.25	1a	6468.31	0.21	2a
6482.55	0.26	1a	6468.35	0.24	2a
6483.22	0.26	2a	6468.35	0.17	1a
6483.23	0.15	2a	6468.35	0.11	2a
6483.23	0.18	1a	6468.36	0.31	1a
6483.25	0.19	1a	6468.64	0.11	2a
6483.43	0.30	1a	6468.65	0.18	1a
6483.43	0.30	1a	6468.85	0.11	1a
6483.63	0.16	2a	6468.90	0.12	2a
6483.64	0.25	1a	6468.90	0.13	1a
6484.00	0.22	1a	6468.94	0.11	1a
6484.00	0.26	1a	6469.44	0.10	2a
6484.99	0.10	2a	6469.50	0.11	1a
6485.01	0.11	1a	6469.68	0.13	2a
6485.01	0.10	1a	6469.81	0.19	2a
6485.42	0.13	2a	6469.81	0.21	1a
6485.44	0.11	2a	6469.87	0.12	2a
6485.72	0.11	2a	6469.87	0.22	1a
6486.31	0.12	1a	6470.38	0.18	1a
6486.31	0.18	1a	6470.42	0.21	2a
6486.78	0.22	2a	6470.43	0.23	1a
6486.79	0.14	2a	6470.50	0.19	1a
6486.80	0.15	1a	6470.86	0.18	2a

6470.86	0.11	1a
6471.23	0.17	2a
6471.23	0.11	1a
6472.12	0.11	1a
6472.74	0.17	1a
6473.04	0.11	2a
6474.36	0.17	2a
6474.64	0.11	2a
6474.64	0.14	1a
6474.94	0.13	2a
6474.94	0.15	1a
6475.07	0.35	2a
6475.07	0.20	1a
6475.41	0.12	1a
6475.47	0.19	2a
6475.48	0.12	1a
6475.56	0.15	2a
6475.57	0.11	1a
6475.69	0.21	2a
6475.69	0.20	1a
6475.89	0.17	2a
6475.89	0.11	1a
6475.92	0.15	1a
6476.18	0.14	1a
6476.21	0.12	1a
6476.63	0.11	2a
6476.72	0.11	1a
6477.29	0.15	2a
6478.40	0.13	1a
6478.59	0.11	1a
6480.31	0.18	2a
6480.58	0.11	2a
6481.04	0.18	2a
6481.31	0.15	2a
6481.32	0.22	1a
6481.60	0.10	2a
6481.60	0.15	1a
6481.70	0.21	2a
6481.70	0.11	1a
6482.01	0.10	1a
6482.21	0.17	2a
6482.27	0.15	2a
6482.31	0.10	1a
6482.39	0.19	2a
6482.40	0.14	1a
6482.57	0.11	2a
6482.60	0.13	2a
6482.61	0.37	1a
6482.93	0.15	2a
6482.93	0.19	1a
6483.00	0.14	1a
6483.06	0.12	1a
6483.50	0.13	2a
6483.51	0.23	2a
6483.51	0.36	1a
6483.72	0.16	2a
6483.92	0.26	2a
6483.92	0.17	1a
6484.04	0.15	1a
6484.51	0.10	2a
6484.51	0.11	1a
6485.08	0.12	2a
6485.08	0.11	1a

6485.29	0.12	1a
6485.62	0.10	1a
6485.82	0.12	2a
6486.40	0.14	2a
6486.40	0.20	1a
6486.58	0.12	2a
6486.59	0.18	1a
6487.01	0.13	1a
6487.04	0.15	2a
6487.04	0.11	1a
6490.47	0.11	1a
6490.72	0.15	2a
6491.31	0.10	2a
6491.32	0.10	1a
6491.53	0.10	2a
6491.94	0.20	2a
6491.94	0.18	1a
6494.02	0.21	2a
6494.02	0.12	1a
6499.40	0.12	2a
6502.63	0.12	2a
6502.83	0.18	2a
6525.35	0.11	1a

D22 FERRO GEOMETRY

1.Mn	1.788140	-0.129857	13.261828
2.O	1.707573	1.699885	14.247173
3.O	1.455257	-1.363694	14.974720
4.O	-0.187694	-0.175901	12.443831
5.C	0.528915	-1.238404	15.845182
6.C	0.220204	-2.435157	16.731861
7.N	2.658673	0.738196	11.189751
8.N	2.274736	-2.069776	11.949696
9.N	4.185807	-0.399581	13.438487
10.C	2.782917	-0.354210	10.183345
11.C	1.991424	-1.609274	10.570273
12.C	3.689714	-2.495655	12.140709
13.C	4.332769	-1.874981	13.383629
14.C	4.870010	0.299243	12.315107
15.C	3.964853	1.305190	11.591094
16.C	1.762937	1.807030	10.702753
17.C	1.342676	-3.155859	12.324929
18.C	4.658578	0.100733	14.743613
19.Mn	-0.128781	1.786848	15.220174
20.C	-1.237319	0.526647	12.636433
21.O	-0.173148	-0.188502	16.037600
22.O	-1.361788	1.454166	13.505844
23.N	0.735889	2.658551	17.289474
24.N	-2.071111	2.276725	16.527754
25.N	-0.399124	4.186946	15.040216
26.C	-2.435312	0.216985	11.751407
27.C	-0.356709	2.783325	18.295718
28.C	1.304072	3.964809	16.887986
29.C	1.804780	1.762628	17.775716
30.C	-1.612292	1.992972	17.907737
31.C	-2.496223	3.692063	16.336645
32.C	-3.157912	1.345329	16.151295
33.C	-1.874845	4.334359	15.094105
34.C	0.298855	4.870434	16.164275
35.C	0.101146	4.660946	13.735273
36.H	-0.798548	-2.787162	16.513646
37.H	0.234665	-2.134768	17.788136
38.H	0.929033	-3.252384	16.565596

39.H	3.844625	-0.600457	10.045238	6466.28	0.12	1a
40.H	2.425524	-0.010019	9.199358	6466.40	0.10	1a
41.H	0.916057	-1.387933	10.535533	6466.68	0.39	1a
42.H	2.198567	-2.403288	9.824930	6466.70	0.18	2a
43.H	3.751742	-3.592139	12.231588	6466.78	0.13	1a
44.H	4.270800	-2.238604	11.244401	6466.81	0.26	2a
45.H	5.398760	-2.177283	13.423447	6466.81	0.12	1a
46.H	3.840631	-2.268129	14.284252	6466.91	0.27	2a
47.H	5.758374	0.839167	12.682014	6467.09	0.27	1a
48.H	5.248970	-0.443641	11.600565	6467.15	0.41	2a
49.H	4.517416	1.717682	10.722627	6467.19	0.16	2a
50.H	3.746204	2.150566	12.260835	6467.51	0.21	2a
51.H	1.589241	2.528867	11.510385	6467.51	0.11	1a
52.H	0.795682	1.369052	10.430021	6467.59	0.12	2a
53.H	2.184516	2.330592	9.824635	6467.65	0.11	1a
54.H	1.532660	-3.450357	13.363141	6467.82	0.14	2a
55.H	0.313770	-2.783492	12.258747	6467.82	0.21	1a
56.H	4.064484	-0.357554	15.543394	6467.91	0.16	2a
57.H	4.517587	1.187585	14.794486	6467.91	0.18	1a
58.H	5.728588	-0.125872	14.909412	6468.27	0.22	2a
59.H	-2.786673	-0.801802	11.970365	6468.33	0.18	1a
60.H	-2.136821	0.231529	10.694648	6468.35	0.39	2a
61.H	-3.252681	0.925490	11.918853	6468.35	0.15	1a
62.H	-0.602059	3.845166	18.434236	6468.61	0.21	1a
63.H	-0.013008	2.425003	19.279511	6468.80	0.14	1a
64.H	1.716845	4.516482	17.756619	6468.86	0.25	1a
65.H	2.148931	3.744246	16.218262	6469.14	0.10	2a
66.H	2.525844	1.589847	16.967189	6469.41	0.22	1a
67.H	1.366832	0.795445	18.048420	6469.44	0.12	2a
68.H	2.328689	2.183954	18.653904	6469.69	0.12	2a
69.H	-1.391641	0.917421	17.942455	6469.69	0.13	1a
70.H	-2.406763	2.200539	18.652276	6469.79	0.22	2a
71.H	-3.592617	3.754772	16.245569	6469.79	0.17	1a
72.H	-2.238892	4.272895	17.233030	6469.89	0.11	2a
73.H	-3.450518	1.535205	15.112538	6469.90	0.29	1a
74.H	-2.786510	0.316147	16.218562	6470.11	0.10	1a
75.H	-2.176378	5.400631	15.053857	6470.34	0.12	2a
76.H	-2.267599	3.842345	14.193237	6470.34	0.13	1a
77.H	0.839302	5.759252	15.798481	6470.49	0.67	1a
78.H	-0.444258	5.249700	16.878400	6470.80	0.24	2a
79.H	-0.355164	4.065326	12.935126	6471.18	0.20	2a
80.H	1.188576	4.523386	13.685624	6471.70	0.14	2a
81.H	-0.127483	5.730076	13.568993	6472.11	0.15	1a
82.H	1.457986	-4.035850	11.665397	6472.49	0.15	1a
83.H	-4.038525	1.461945	16.809614	6472.55	0.13	2a
84.H	2.371424	2.406306	14.208012	6472.73	0.23	1a

D22 FERRO TDDFT

E/eV	fx10 ³ /au	Initial orbital		
6429.76	0.12	1a	6473.01	0.11
6430.72	0.12	2a	6474.38	0.15
6431.14	0.10	1a	6474.65	0.12
6431.24	0.10	2a	6474.66	0.14
6433.23	0.19	2a	6474.96	0.15
6439.10	0.14	2a	6474.96	0.16
6439.36	0.16	2a	6475.07	0.23
6442.67	0.11	2a	6475.08	0.46
6442.91	0.11	2a	6475.32	0.11
6443.13	0.18	2a	6475.39	0.23
6462.95	0.11	1a	6475.41	0.10
6464.47	0.11	1a	6475.48	0.24
6464.86	0.11	2a	6475.56	0.14
6466.28	0.20	2a	6475.59	0.11
			6475.62	0.10
			6475.68	0.15
			6475.68	0.23

6475.78	0.15	2a
6475.87	0.26	2a
6475.90	0.22	1a
6475.99	0.14	2a
6476.15	0.10	1a
6476.16	0.24	1a
6476.63	0.18	2a
6476.67	0.14	2a
6476.67	0.10	1a
6477.29	0.19	2a
6478.40	0.18	1a
6478.58	0.15	1a
6478.79	0.10	1a
6479.57	0.11	2a
6479.77	0.14	2a
6480.27	0.25	2a
6480.58	0.11	2a
6480.98	0.10	2a
6481.03	0.24	2a
6481.26	0.12	2a
6481.33	0.34	1a
6481.61	0.24	1a
6481.70	0.23	2a
6481.77	0.15	1a
6481.90	0.11	2a
6481.99	0.15	1a
6482.21	0.17	2a
6482.24	0.18	2a
6482.30	0.16	2a
6482.32	0.12	2a
6482.32	0.20	1a
6482.54	0.10	2a
6482.63	0.45	1a
6482.89	0.44	1a
6483.07	0.16	1a
6483.39	0.17	2a
6483.47	0.44	1a
6483.50	0.19	2a
6483.68	0.11	1a
6483.76	0.19	2a
6483.85	0.13	1a
6483.93	0.46	2a
6484.04	0.15	1a
6484.47	0.12	1a
6484.54	0.13	1a
6485.02	0.13	2a
6485.02	0.10	1a
6485.18	0.13	1a
6485.53	0.15	1a
6485.75	0.17	2a
6486.32	0.23	1a
6486.49	0.23	1a
6486.91	0.27	1a
6486.96	0.17	2a
6487.17	0.15	2a
6490.21	0.13	1a
6490.44	0.18	1a
6490.76	0.21	2a
6491.00	0.16	2a
6491.17	0.12	1a
6491.53	0.16	2a
6491.69	0.10	2a
6491.90	0.30	2a

6491.90	0.14	1a
6492.58	0.10	2a
6493.97	0.27	2a
6499.30	0.13	2a
6502.59	0.17	2a
6502.79	0.25	2a
6510.10	0.12	2a
6518.49	0.10	1a
6522.84	0.10	2a
6525.20	0.12	1a
6525.38	0.15	1a
6526.06	0.11	2a

D23 ANTIFERRO GEOMETRY

1.Mn	1.233070	12.252949	2.922315
2.Mn	2.835993	11.958625	-0.121257
3.N	1.141123	12.846899	5.135623
4.N	-0.890770	13.324482	3.062157
5.N	-0.161984	10.589161	3.790703
6.N	2.597409	10.071166	-1.215934
7.N	1.800734	12.705235	-2.186344
8.N	4.547869	12.117683	-1.406302
9.O	1.181406	11.781503	0.806609
10.O	2.978543	11.178616	3.294893
11.O	4.018395	10.925371	1.308570
12.O	2.084308	14.151097	2.362393
13.O	3.179936	13.813470	0.405739
14.C	-0.039225	13.730586	5.399371
15.C	-0.622289	14.339357	4.122503
16.C	-1.938679	12.336790	3.469720
17.C	-1.504013	10.891099	3.224271
18.C	-0.144102	10.687886	5.288328
19.C	1.024962	11.524023	5.813714
20.C	2.397319	13.514953	5.556918
21.C	-1.291663	14.014737	1.816801
22.C	0.269085	9.238912	3.359649
23.C	1.847228	10.232710	-2.514069
24.C	1.016597	11.511564	-2.580678
25.C	2.924882	13.001920	-3.125515
26.C	4.240107	13.218161	-2.380885
27.C	4.794534	10.802018	-2.113324
28.C	4.020524	9.667579	-1.460157
29.C	1.932014	9.039033	-0.376328
30.C	0.919359	13.882937	-2.044915
31.C	5.762185	12.498559	-0.624941
32.C	3.951724	10.766670	2.582566
33.C	5.138708	10.072660	3.288949
34.C	6.263588	11.131176	3.414171
35.C	5.646256	8.881390	2.452880
36.C	4.740155	9.587983	4.693650
37.C	2.809573	14.553564	1.413613
38.C	3.345194	16.003651	1.440230
39.C	4.581471	15.994555	2.375617
40.C	2.268951	16.942716	2.020766
41.C	3.763565	16.495934	0.044454
42.H	0.554871	12.432552	0.432892
43.H	-0.805595	13.158076	5.937752
44.H	0.247581	14.552264	6.073037
45.H	0.092787	15.054057	3.693493
46.H	-1.541941	14.897371	4.378884
47.H	-2.183395	12.486265	4.528749
48.H	-2.874619	12.520949	2.919798
49.H	-1.440565	10.698713	2.142453

50.H	-2.274779	10.209536	3.629729	6469.17	0.12	2a
51.H	-0.079307	9.682389	5.731641	6469.25	0.17	2a
52.H	-1.099701	11.104364	5.632006	6469.29	0.10	2a
53.H	1.970283	10.997426	5.627319	6469.30	0.14	2a
54.H	0.917002	11.645157	6.906939	6469.52	0.16	2a
55.H	2.490965	14.471393	5.030905	6469.55	0.11	2a
56.H	3.249342	12.882583	5.283743	6469.71	0.16	1a
57.H	2.411407	13.695266	6.644903	6469.80	0.14	2a
58.H	-1.517810	13.271425	1.038968	6470.12	0.10	1a
59.H	-0.474542	14.663906	1.478122	6470.98	0.11	2a
60.H	-2.195109	14.633050	1.960368	6471.55	0.12	2a
61.H	1.272582	9.036358	3.750218	6471.58	0.14	2a
62.H	0.306942	9.202876	2.264314	6471.70	0.16	2a
63.H	-0.423597	8.458021	3.717794	6471.97	0.39	2a
64.H	1.184177	9.368058	-2.660988	6472.27	0.13	1a
65.H	2.568854	10.206519	-3.339570	6472.55	0.81	2a
66.H	0.598906	11.608573	-3.600070	6472.59	0.23	2a
67.H	0.164868	11.440576	-1.888888	6473.39	0.18	2a
68.H	2.708038	13.907243	-3.713667	6473.68	0.17	2a
69.H	3.016214	12.187973	-3.856702	6473.80	0.15	1a
70.H	5.069120	13.317116	-3.101043	6473.94	0.19	2a
71.H	4.189923	14.140590	-1.790368	6474.29	0.20	1a
72.H	5.868612	10.572539	-2.096130	6474.75	0.12	1a
73.H	4.517602	10.915167	-3.168401	6474.84	0.23	1a
74.H	4.064086	8.763470	-2.090790	6475.06	0.15	1a
75.H	4.450177	9.428764	-0.480294	6475.25	0.25	2a
76.H	0.893175	9.336320	-0.201845	6475.30	0.16	2a
77.H	2.451570	8.969128	0.584450	6475.38	0.13	2a
78.H	1.956746	8.060496	-0.880940	6475.48	0.20	2a
79.H	1.502123	14.735374	-1.678308	6475.76	0.24	2a
80.H	0.120781	13.670483	-1.320676	6475.96	0.10	2a
81.H	0.442102	14.156068	-3.001841	6476.09	0.15	1a
82.H	5.989239	11.700829	0.087583	6476.15	0.15	2a
83.H	5.556429	13.420970	-0.074629	6476.66	0.22	1a
84.H	6.612814	12.653491	-1.305537	6476.73	0.13	2a
85.H	6.601030	11.478850	2.427831	6476.79	0.10	1a
86.H	7.126543	10.686228	3.930515	6476.95	0.19	1a
87.H	5.933733	12.002896	3.998013	6477.05	0.11	2a
88.H	4.869808	8.110956	2.330230	6477.06	0.19	1a
89.H	6.499192	8.411581	2.962878	6477.12	0.13	1a
90.H	5.984233	9.200527	1.458243	6477.19	0.11	2a
91.H	4.422234	10.421095	5.333327	6477.42	0.11	2a
92.H	5.602242	9.104559	5.174158	6477.43	0.18	1a
93.H	3.924371	8.851724	4.653095	6477.59	0.26	2a
94.H	4.311996	15.673106	3.390841	6477.81	0.24	1a
95.H	4.995158	17.011645	2.436356	6477.92	0.24	1a
96.H	5.372250	15.331007	1.996255	6478.05	0.11	1a
97.H	2.668737	17.964731	2.077993	6478.14	0.21	2a
98.H	1.972210	16.636041	3.031089	6478.29	0.10	1a
99.H	1.370848	16.972669	1.385373	6478.29	0.16	1a
100.H	4.110001	17.536438	0.113930	6478.37	0.14	2a
101.H	2.923223	16.476340	-0.665235	6478.38	0.18	2a
102.H	4.587958	15.901038	-0.369934	6478.44	0.10	2a
D23 ANTIFERRO TDDFT				6479.11	0.10	1a
E/eV				6479.20	0.14	1a
fx10 ³ /au				6479.34	0.12	1a
Initial orbital				6479.44	0.15	1a
6442.09	0.12	2a		6479.82	0.36	1a
6447.79	0.11	1a		6480.02	0.21	1a
6467.77	0.15	1a		6480.06	0.11	1a
6468.06	0.12	2a		6480.09	0.10	1a
6468.20	0.15	2a		6480.53	0.23	1a
6468.31	0.14	2a		6481.15	0.16	1a
6468.56	0.10	2a				

6481.33	0.41	1a	6471.89	0.13	2a
6481.62	0.10	1a	6472.05	0.41	2a
6481.89	0.13	1a	6472.10	0.10	1a
6481.90	0.13	2a	6472.25	0.10	1a
6481.91	0.21	1a	6472.56	0.16	2a
6482.10	0.18	2a	6472.76	0.85	2a
6482.51	0.12	2a	6473.59	0.12	1a
6482.65	0.11	2a	6473.78	0.15	1a
6482.88	0.11	2a	6473.89	0.17	2a
6482.95	0.15	2a	6474.09	0.15	1a
6483.15	0.11	2a	6474.15	0.18	2a
6483.26	0.23	2a	6474.27	0.14	1a
6483.38	0.12	2a	6474.62	0.13	1a
6483.61	0.12	1a	6474.82	0.19	1a
6483.80	0.10	2a	6475.09	0.12	1a
6484.43	0.12	2a	6475.28	0.21	2a
6484.64	0.18	2a	6475.43	0.18	2a
6484.76	0.11	2a	6475.71	0.18	2a
6484.84	0.14	2a	6475.73	0.23	2a
6485.05	0.36	2a	6476.10	0.12	2a
6485.33	0.12	2a	6476.38	0.11	2a
6485.37	0.13	1a	6476.55	0.26	1a
6485.95	0.17	1a	6476.76	0.14	1a
6487.07	0.14	1a	6477.09	0.20	1a
6487.60	0.14	1a	6477.17	0.20	1a
6487.77	0.42	1a	6477.23	0.13	2a
6487.84	0.14	2a	6477.42	0.11	1a
6488.03	0.30	1a	6477.48	0.19	2a
6488.24	0.11	2a	6477.61	0.14	1a
6488.97	0.29	1a	6477.69	0.10	2a
6489.51	0.23	1a	6477.72	0.12	1a
6491.93	0.13	2a	6477.80	0.18	2a
6495.83	0.10	2a	6477.81	0.12	1a
6496.72	0.11	1a	6477.93	0.13	1a
6497.48	0.15	1a	6478.11	0.14	1a
6498.63	0.11	1a	6478.33	0.14	2a
6499.10	0.10	1a	6478.38	0.13	2a
6499.26	0.10	1a	6478.64	0.16	2a
6505.55	0.13	1a	6478.92	0.11	1a
6506.11	0.10	1a	6479.22	0.13	1a
6516.26	0.14	1a	6479.23	0.15	1a
6529.32	0.12	1a	6479.40	0.12	1a
			6479.57	0.20	1a
			6479.78	0.12	1a
			6479.83	0.22	1a
			6480.08	0.14	1a
			6480.51	0.13	1a
			6481.07	0.12	1a
			6481.30	0.38	1a
			6481.68	0.12	1a
			6481.93	0.18	1a
			6481.99	0.12	2a
			6482.27	0.16	2a
			6482.60	0.10	2a
			6482.82	0.12	2a
			6483.01	0.18	2a
			6483.40	0.25	2a
			6483.49	0.21	2a
			6483.99	0.25	2a
			6484.54	0.12	2a
			6484.73	0.15	2a
			6484.78	0.16	2a
			6485.19	0.43	2a
D23 FERRO TDDFT					
E/eV	fx10 ³ /au	Initial orbital			
6442.27	0.11	2a			
6467.76	0.11	1a			
6468.08	0.17	2a			
6468.30	0.12	2a			
6468.52	0.20	2a			
6468.53	0.16	2a			
6468.71	0.11	2a			
6469.25	0.16	2a			
6469.27	0.14	2a			
6469.38	0.15	2a			
6469.45	0.14	2a			
6469.52	0.14	1a			
6469.70	0.18	2a			
6469.75	0.11	2a			
6469.82	0.11	2a			
6470.08	0.13	1a			
6471.55	0.17	2a			
6471.65	0.14	2a			

6485.91	0.15	1a	48.H	-2.844586	12.526956	2.898658
6486.80	0.14	1a	49.H	-1.432548	10.672906	2.153520
6487.11	0.15	1a	50.H	-2.284393	10.210505	3.639496
6487.43	0.19	1a	51.H	-0.091243	9.673041	5.754284
6487.80	0.34	1a	52.H	-1.101764	11.101851	5.649150
6488.00	0.27	1a	53.H	1.969620	10.971154	5.630124
6488.75	0.11	1a	54.H	0.930702	11.649014	6.906711
6488.96	0.23	1a	55.H	2.512846	14.440719	5.003222
6489.51	0.18	1a	56.H	3.263384	12.848702	5.266266
6492.13	0.12	2a	57.H	2.425693	13.671632	6.622687
6493.25	0.10	1a	58.H	-1.486748	13.253919	1.031442
6494.67	0.10	1a	59.H	-0.409407	14.625316	1.460124
6498.50	0.11	1a	60.H	-2.129952	14.632113	1.951141
6505.51	0.11	1a	61.H	1.280098	9.033758	3.775014

D23 FERRO GEOMETRY

1.Mn	1.207133	12.262660	2.949635
2.Mn	2.825573	11.960671	-0.139778
3.N	1.153959	12.823631	5.120503
4.N	-0.853027	13.305826	3.055546
5.N	-0.167675	10.573383	3.809960
6.N	2.604583	10.045384	-1.246757
7.N	1.810993	12.681523	-2.202518
8.N	4.588338	12.110942	-1.461489
9.O	1.159152	11.798309	0.939653
10.O	2.932978	11.195570	3.297446
11.O	3.992618	10.938176	1.319718
12.O	2.092735	14.177727	2.395215
13.O	3.160179	13.853989	0.419974
14.C	-0.021444	13.720509	5.390285
15.C	-0.592410	14.331569	4.113254
16.C	-1.919552	12.330407	3.461145
17.C	-1.502027	10.877298	3.232456
18.C	-0.150168	10.676286	5.305045
19.C	1.029380	11.505975	5.816226
20.C	2.416916	13.488770	5.535863
21.C	-1.240295	13.997099	1.802130
22.C	0.279161	9.229701	3.374950
23.C	1.853145	10.206429	-2.540774
24.C	1.023622	11.488007	-2.597182
25.C	2.929923	12.976546	-3.152275
26.C	4.257251	13.203403	-2.429322
27.C	4.813763	10.789535	-2.151441
28.C	4.033410	9.661015	-1.485389
29.C	1.949964	9.008765	-0.405188
30.C	0.930730	13.861247	-2.063129
31.C	5.798907	12.496369	-0.684487
32.C	3.918578	10.786048	2.585420
33.C	5.102927	10.094659	3.299033
34.C	6.229861	11.150314	3.420046
35.C	5.607027	8.905262	2.454961
36.C	4.710734	9.602526	4.702628
37.C	2.812303	14.583157	1.433510
38.C	3.352726	16.031700	1.468831
39.C	4.588011	16.016867	2.404362
40.C	2.281305	16.977322	2.047079
41.C	3.775875	16.522157	0.073374
42.H	0.458854	12.339719	0.523773
43.H	-0.790818	13.150299	5.926119
44.H	0.276838	14.535521	6.066070
45.H	0.126652	15.041957	3.684815
46.H	-1.516931	14.886396	4.354788
47.H	-2.170341	12.493683	4.516457

48.H	-2.844586	12.526956	2.898658
49.H	-1.432548	10.672906	2.153520
50.H	-2.284393	10.210505	3.639496
51.H	-0.091243	9.673041	5.754284
52.H	-1.101764	11.101851	5.649150
53.H	1.969620	10.971154	5.630124
54.H	0.930702	11.649014	6.906711
55.H	2.512846	14.440719	5.003222
56.H	3.263384	12.848702	5.266266
57.H	2.425693	13.671632	6.622687
58.H	-1.486748	13.253919	1.031442
59.H	-0.409407	14.625316	1.460124
60.H	-2.129952	14.632113	1.951141
61.H	1.280098	9.033758	3.775014
62.H	0.331317	9.203007	2.280189
63.H	-0.410864	8.441521	3.721379
64.H	1.187866	9.343571	-2.690610
65.H	2.571689	10.183738	-3.369077
66.H	0.596503	11.591089	-3.612022
67.H	0.176406	11.414354	-1.898818
68.H	2.701037	13.875703	-3.745156
69.H	3.016660	12.156932	-3.877430
70.H	5.067110	13.314914	-3.170618
71.H	4.207978	14.127674	-1.840064
72.H	5.884522	10.541392	-2.137708
73.H	4.535836	10.889405	-3.208032
74.H	4.090433	8.748562	-2.103759
75.H	4.462165	9.435989	-0.501353
76.H	0.907683	9.294895	-0.229296
77.H	2.468859	8.947745	0.556866
78.H	1.981950	8.026522	-0.903094
79.H	1.516087	14.712233	-1.697397
80.H	0.134450	13.651054	-1.336146
81.H	0.454152	14.133079	-3.020755
82.H	6.027391	11.704325	0.035049
83.H	5.590870	13.420835	-0.136649
84.H	6.657069	12.650251	-1.357217
85.H	6.553634	11.506068	2.431993
86.H	7.099200	10.699814	3.920937
87.H	5.909701	12.018213	4.015380
88.H	4.829040	8.137342	2.328932
89.H	6.460681	8.432014	2.960112
90.H	5.941782	9.231192	1.461782
91.H	4.396852	10.431758	5.349894
92.H	5.575965	9.117697	5.176031
93.H	3.896787	8.864432	4.662247
94.H	4.317071	15.691686	3.418232
95.H	5.006549	17.031681	2.470315
96.H	5.375847	15.351129	2.022382
97.H	2.683506	17.998717	2.100162
98.H	1.984743	16.675853	3.059356
99.H	1.382524	17.007866	1.412354
100.H	4.137715	17.557494	0.143192
101.H	2.934199	16.513977	-0.634910
102.H	4.588875	15.913805	-0.343686

D23 FERRO TDDFT

E/eV	fx10 ³ /au	Initial orbital
6467.66	0.10	2a
6468.50	0.11	2a
6468.78	0.13	2a
6468.97	0.12	2a
6469.42	0.15	1a

6469.67	0.23	1a
6469.68	0.11	2a
6469.86	0.11	2a
6469.95	0.11	2a
6470.11	0.10	2a
6470.16	0.14	2a
6470.54	0.15	2a
6471.64	0.11	1a
6471.80	0.12	1a
6472.67	0.12	2a
6472.98	0.10	2a
6473.11	0.15	2a
6473.20	0.11	1a
6473.21	0.40	2a
6473.38	0.17	1a
6473.40	0.14	2a
6473.66	0.18	1a
6473.70	0.13	2a
6473.76	0.20	1a
6473.88	0.14	2a
6473.95	0.12	1a
6473.99	0.49	2a
6474.26	0.25	1a
6474.41	0.16	2a
6474.47	0.11	1a
6474.71	0.15	1a
6474.72	0.13	1a
6474.82	0.12	2a
6474.89	0.19	2a
6474.96	0.11	2a
6474.97	0.21	1a
6475.29	0.15	1a
6475.38	0.13	1a
6475.44	0.11	1a
6475.52	0.10	1a
6475.62	0.26	2a
6475.77	0.23	1a
6475.99	0.38	2a
6476.06	0.25	1a
6476.25	0.17	2a
6476.46	0.17	2a
6476.50	0.22	1a
6476.54	0.12	1a
6476.78	0.11	1a
6476.81	0.13	1a
6476.92	0.13	2a
6477.22	0.19	1a
6477.23	0.10	2a
6477.43	0.25	1a
6477.47	0.14	1a
6477.53	0.13	2a
6477.78	0.23	2a
6477.81	0.11	1a
6477.95	0.15	2a
6478.21	0.25	2a
6478.44	0.13	1a
6478.54	0.13	2a
6478.83	0.24	2a
6478.93	0.11	1a
6479.03	0.15	2a
6479.10	0.14	1a
6479.11	0.13	1a
6479.16	0.11	2a

6479.39	0.29	1a
6480.23	0.16	1a
6480.81	0.15	1a
6482.49	0.13	2a
6482.78	0.17	2a
6483.54	0.15	2a
6483.99	0.22	2a
6484.43	0.18	2a
6484.99	0.16	1a
6485.19	0.13	1a
6485.46	0.11	2a
6485.52	0.12	2a
6485.56	0.13	1a
6485.77	0.46	2a
6486.27	0.15	1a
6486.31	0.16	1a
6486.60	0.12	1a
6486.71	0.16	1a
6486.81	0.13	1a
6487.36	0.18	1a
6488.45	0.10	1a
6489.07	0.13	2a
6489.08	0.16	1a
6491.10	0.12	1a
6491.87	0.11	1a
6493.10	0.11	2a
6496.44	0.13	2a
6497.00	0.13	1a
6515.66	0.11	1a

D33 FERRO GEOMETRY

1.Mn	3.277184	1.567234	3.537058
2.O	3.297669	-0.004810	2.619613
3.O	1.694830	1.141743	4.726808
4.N	4.651364	2.665201	2.112132
5.N	3.279231	3.474583	4.522560
6.C	1.214938	0.011638	5.102415
7.C	4.762084	4.092350	2.564713
8.C	6.005306	2.056657	2.057142
9.C	0.005973	0.034672	6.011244
10.C	3.348969	3.367445	6.012891
11.C	4.015784	2.547259	0.773425
12.C	4.507499	4.208157	4.062374
13.O	4.909921	1.120120	4.785791
14.N	1.831438	2.817466	2.068576
15.Mn	3.312864	-1.574645	3.541484
16.C	1.981657	4.152631	4.193453
17.O	1.686759	-1.125506	4.776903
18.C	2.514917	2.933773	0.745993
19.C	5.376919	-0.015641	5.124845
20.C	1.631034	4.158843	2.710173
21.C	0.522051	2.135928	1.924718
22.O	4.894222	-1.148017	4.757441
23.N	1.902500	-2.687014	2.109328
24.N	4.722042	-2.766061	2.094412
25.N	3.289170	-3.485067	4.522561
26.C	6.571881	-0.043194	6.051153
27.C	1.733929	-4.091582	2.615848
28.C	0.570955	-2.031523	2.035439
29.C	2.529626	-2.662023	0.758519
30.C	4.860324	-4.154114	2.647008
31.C	6.062653	-2.134674	2.013192
32.C	4.084962	-2.769432	0.748621

33.C	3.273939	-3.382981	6.014457	6470.15	0.12	1a
34.C	2.025416	-4.183657	4.108001	6470.22	0.11	2a
35.C	4.551725	-4.200399	4.137840	6470.24	0.11	1a
36.H	4.066951	4.706933	1.986374	6470.37	0.17	1a
37.H	5.768899	4.481741	2.344466	6470.48	0.17	2a
38.H	5.908628	0.990182	1.831517	6470.53	0.10	2a
39.H	6.496944	2.166821	3.028735	6470.61	0.14	2a
40.H	6.618301	2.540985	1.279736	6470.64	0.22	1a
41.H	-0.427402	1.036669	6.080903	6470.80	0.13	2a
42.H	0.312088	-0.292841	7.015565	6470.82	0.12	1a
43.H	-0.745716	-0.680881	5.654673	6470.93	0.28	1a
44.H	3.344074	4.372194	6.462262	6471.12	0.24	2a
45.H	4.264895	2.841680	6.292490	6471.40	0.21	2a
46.H	2.482217	2.804508	6.370318	6471.69	0.11	2a
47.H	4.127483	1.495533	0.483583	6471.74	0.28	2a
48.H	4.563049	3.157784	0.034699	6471.76	0.16	1a
49.H	5.343835	3.753135	4.607856	6473.79	0.11	2a
50.H	4.451031	5.266910	4.364553	6473.94	0.11	2a
51.H	1.214668	3.600436	4.750180	6474.02	0.15	2a
52.H	1.995157	5.186577	4.578541	6474.05	0.12	1a
53.H	2.019766	2.260059	0.036076	6474.35	0.14	2a
54.H	2.379018	3.949313	0.346070	6474.39	0.13	2a
55.H	0.579433	4.472379	2.609350	6474.44	0.16	1a
56.H	2.216653	4.911532	2.173512	6474.62	0.16	2a
57.H	-0.139371	2.676470	1.228243	6474.73	0.15	2a
58.H	0.036274	2.073038	2.903038	6475.25	0.21	2a
59.H	0.683126	1.118609	1.553183	6475.31	0.16	2a
60.H	6.205570	-0.072261	7.088783	6475.34	0.14	1a
61.H	7.177247	0.862156	5.934927	6475.41	0.10	1a
62.H	7.180248	-0.938943	5.886159	6475.63	0.13	2a
63.H	0.701347	-4.432851	2.438195	6475.81	0.14	2a
64.H	2.374673	-4.762825	2.036981	6475.84	0.16	1a
65.H	0.707523	-0.973299	1.791209	6475.97	0.10	1a
66.H	0.073003	-2.105886	3.007507	6476.31	0.12	2a
67.H	-0.059302	-2.508692	1.266820	6476.57	0.11	1a
68.H	2.250205	-1.702860	0.307635	6476.58	0.11	2a
69.H	2.088744	-3.452907	0.129597	6476.68	0.11	2a
70.H	5.887337	-4.521176	2.492498	6476.70	0.15	1a
71.H	4.214228	-4.833368	2.084555	6476.86	0.11	2a
72.H	5.947715	-1.083406	1.729929	6477.09	0.10	1a
73.H	6.699120	-2.644450	1.271349	6477.10	0.13	1a
74.H	6.546622	-2.178762	2.994459	6477.11	0.19	2a
75.H	4.409087	-3.656943	0.182713	6477.13	0.11	1a
76.H	4.472437	-1.897374	0.210057	6477.21	0.11	1a
77.H	2.383211	-2.831674	6.325168	6477.24	0.17	2a
78.H	4.167595	-2.846463	6.344298	6477.38	0.10	2a
79.H	3.261354	-4.389045	6.460602	6477.41	0.28	1a
80.H	1.219545	-3.692405	4.668463	6477.50	0.10	2a
81.H	2.057922	-5.239260	4.427236	6477.68	0.12	2a
82.H	5.354745	-3.698915	4.693301	6477.82	0.21	2a
83.H	4.509272	-5.247081	4.484972	6478.08	0.18	1a

D33 FERRO TDDFT

E/eV	fx10 ³ /au	Initial orbital		
6433.67	0.13	2a	6478.33	0.12
6448.52	0.11	1a	6478.34	0.12
6460.33	0.11	2a	6478.37	0.26
6468.88	0.11	2a	6478.52	0.14
6468.91	0.18	1a	6478.55	0.16
6469.24	0.16	2a	6478.92	0.11
6469.74	0.16	1a	6479.19	0.12
6469.91	0.14	1a	6480.21	0.11
6470.02	0.11	2a	6480.67	0.11
			6480.72	0.11
			6480.91	0.18

6481.01	0.12	1a	8.C	1.892732	1.879164	0.307189	
6481.46	0.18	2a	9.C	0.961020	1.538528	-0.825539	
6481.61	0.11	2a	10.C	4.930287	0.761699	2.316226	
6481.70	0.17	2a	11.C	5.841505	-0.430424	2.420809	
6481.73	0.17	1a	12.N	6.016679	4.463675	1.752502	
6481.90	0.14	1a	13.N	5.570347	3.286621	-0.775800	
6482.01	0.14	1a	14.N	3.785783	5.237179	0.225944	
6482.19	0.19	2a	15.C	7.207062	3.934566	0.997455	
6482.21	0.14	2a	16.C	6.928124	3.892326	-0.494985	
6482.21	0.13	1a	17.C	4.406510	5.437617	-1.148705	
6482.27	0.12	2a	18.C	4.801978	4.110008	-1.763831	
6482.30	0.11	1a	19.C	4.331945	6.221569	1.219979	
6482.48	0.10	2a	20.C	5.798774	5.939585	1.476791	
6482.51	0.24	1a	21.C	5.741063	1.911268	-1.336579	
6483.92	0.16	1a	22.C	6.256173	4.279996	3.211985	
6484.04	0.15	2a	23.C	2.312569	5.431723	0.107781	
6484.25	0.13	2a	24.N	2.964146	2.080194	5.451852	
6484.33	0.25	2a	25.N	1.204245	0.275392	4.055743	
6485.70	0.13	1a	26.N	0.756928	3.095154	3.968387	
6485.81	0.13	2a	27.C	2.835532	0.662896	5.917930	
6486.01	0.13	2a	28.C	1.502498	0.048172	5.511767	
6486.15	0.13	2a	29.C	-0.192978	0.758829	3.847804	
6486.85	0.16	2a	30.C	-0.363582	2.157788	4.411168	
6487.16	0.14	2a	31.C	1.294580	3.893964	5.128759	
6487.45	0.16	2a	32.C	1.985505	2.997333	6.140720	
6487.48	0.27	1a	33.C	4.351701	2.549057	5.705531	
6487.49	0.15	2a	34.C	1.408312	-0.989230	3.293732	
6487.52	0.12	2a	35.C	0.211326	4.044305	2.955910	
6487.77	0.29	2a	36.H	0.238723	0.773907	-0.523080	
6488.09	0.15	1a	37.H	1.525230	1.207538	-1.705636	
6488.30	0.14	1a	38.H	0.405925	2.446205	-1.112526	
6488.49	0.13	2a	39.H	6.727406	-0.312916	1.791106	
6488.51	0.12	1a	40.H	5.288829	-1.331364	2.114960	
6488.85	0.15	2a	41.H	6.143543	-0.580481	3.467160	
6488.86	0.18	2a	42.H	7.402506	2.928450	1.384602	
6488.88	0.13	1a	43.H	8.090591	4.556811	1.209093	
6488.89	0.38	1a	44.H	6.970882	4.895301	-0.936491	
6488.96	0.20	2a	45.H	7.707379	3.301645	-0.995528	
6489.92	0.15	1a	46.H	5.269022	6.106210	-1.050625	
6490.17	0.23	1a	47.H	3.685787	5.951658	-1.798769	
6491.56	0.13	2a	48.H	3.915273	3.528450	-2.040248	
6492.45	0.10	1a	49.H	5.395500	4.272988	-2.677144	
6492.77	0.16	1a	50.H	3.743620	6.102155	2.138468	
6492.96	0.10	2a	51.H	4.192567	7.251274	0.853382	
6499.82	0.10	1a	52.H	6.418275	6.232355	0.621692	
6500.47	0.14	1a	53.H	6.151624	6.529055	2.333578	
6500.73	0.17	2a	54.H	4.758197	1.453387	-1.479805	
6500.75	0.15	1a	55.H	6.328011	1.303405	-0.643169	
6500.85	0.12	2a	56.H	6.262710	1.967409	-2.303296	
6501.01	0.11	2a	57.H	5.404510	4.686043	3.763208	
6501.32	0.16	2a	58.H	7.174234	4.808985	3.506585	
6501.52	0.17	2a	59.H	6.367415	3.215868	3.434839	
6502.98	0.10	1a	60.H	1.847288	5.251536	1.078685	
6503.10	0.16	2a	61.H	1.909902	4.733308	-0.632633	
			62.H	2.099977	6.462012	-0.214391	
D34 ANTIFERRO GEOMETRY			63.H	3.666559	0.107198	5.466987	
1.Mn	4.354724	3.356117	1.030661	64.H	2.952901	0.610653	7.012719
2.Mn	2.441458	2.024579	3.266403	65.H	1.529093	-1.029692	5.724428
3.O	3.386052	3.445498	2.538827	66.H	0.683351	0.454945	6.117337
4.O	3.005929	2.459364	-0.017656	67.H	-0.380121	0.748972	2.767784
5.O	1.540540	1.588026	1.493608	68.H	-0.922521	0.079044	4.319202
6.O	5.268434	1.711332	1.527010	69.H	-1.324016	2.576831	4.083552
7.O	3.859406	0.739043	3.027762	70.H	-0.385143	2.145479	5.506489

71.H	2.002356	4.619257	4.705197	6479.83	0.19	2a
72.H	0.474973	4.458238	5.601373	6479.86	0.13	1a
73.H	2.507687	3.617641	6.882738	6479.91	0.21	2a
74.H	1.260772	2.395180	6.700560	6479.97	0.20	1a
75.H	4.447569	3.590527	5.385154	6480.03	0.11	1a
76.H	5.058027	1.925647	5.148385	6480.20	0.22	1a
77.H	4.589029	2.480890	6.778324	6480.44	0.11	1a
78.H	1.262517	-0.801453	2.225700	6480.44	0.14	2a
79.H	0.692426	-1.755566	3.627806	6480.55	0.15	1a
80.H	2.426090	-1.354724	3.459890	6480.69	0.23	1a
81.H	-0.166973	3.485250	2.094522	6480.98	0.18	1a
82.H	1.009964	4.720891	2.645197	6481.01	0.26	2a
83.H	-0.607617	4.629243	3.398738	6481.11	0.11	2a
				6481.13	0.23	1a
D34 ANTIFERRO TDDFT				6481.19	0.18	2a
E/eV	fx10 ³ /au	Initial orbital		6481.22	0.14	2a
6443.12	0.10	2a		6481.25	0.10	1a
6443.24	0.16	1a		6481.31	0.15	1a
6444.58	0.10	1a		6481.36	0.16	1a
6449.05	0.13	1a		6481.61	0.10	2a
6456.81	0.11	1a		6481.75	0.19	1a
6457.52	0.12	1a		6482.16	0.10	2a
6457.53	0.13	2a		6482.19	0.23	1a
6459.98	0.14	1a		6482.25	0.24	2a
6471.50	0.10	2a		6482.34	0.21	2a
6471.60	0.20	2a		6482.49	0.47	1a
6471.94	0.13	1a		6482.84	0.21	1a
6472.56	0.10	1a		6482.87	0.41	1a
6472.65	0.11	2a		6483.11	0.15	1a
6472.75	0.19	2a		6483.12	0.10	2a
6473.00	0.11	2a		6483.24	0.18	1a
6473.49	0.11	1a		6483.44	0.11	1a
6473.72	0.12	2a		6483.51	0.12	2a
6474.20	0.12	1a		6483.66	0.11	2a
6474.53	0.13	1a		6483.79	0.26	1a
6474.65	0.14	2a		6483.92	0.14	2a
6474.82	0.17	2a		6484.40	0.15	1a
6474.83	0.16	2a		6484.61	0.25	2a
6474.97	0.18	1a		6484.65	0.25	2a
6475.26	0.10	2a		6484.74	0.16	1a
6475.39	0.14	1a		6484.91	0.11	2a
6475.51	0.20	2a		6485.04	0.14	1a
6475.84	0.35	2a		6485.27	0.14	1a
6476.40	0.21	2a		6485.51	0.11	1a
6476.52	0.10	1a		6485.69	0.14	1a
6476.61	0.13	2a		6486.25	0.10	1a
6476.72	0.18	2a		6486.62	0.12	2a
6477.11	0.11	2a		6486.77	0.32	2a
6477.21	0.16	1a		6487.46	0.18	1a
6477.23	0.23	2a		6487.66	0.20	2a
6477.34	0.12	1a		6487.82	0.15	2a
6477.86	0.21	1a		6488.05	0.14	2a
6478.31	0.11	1a		6488.45	0.14	1a
6478.33	0.12	2a		6488.87	0.17	1a
6478.41	0.11	2a		6489.32	0.13	2a
6478.50	0.11	2a		6489.47	0.19	2a
6478.61	0.17	2a		6489.74	0.13	2a
6478.74	0.13	1a		6489.86	0.12	1a
6478.89	0.25	2a		6490.04	0.14	1a
6479.01	0.19	1a		6490.22	0.10	1a
6479.15	0.11	2a		6490.24	0.23	1a
6479.31	0.11	2a		6490.42	0.10	2a
6479.72	0.13	2a		6490.87	0.16	1a

6492.37	0.12	2a	6480.73	0.12	2a
6492.51	0.13	1a	6480.82	0.14	1a
6492.67	0.16	1a	6480.90	0.11	1a
6493.01	0.11	1a	6480.91	0.17	2a
6493.57	0.24	2a	6480.94	0.11	1a
6494.01	0.23	1a	6480.94	0.17	2a
6494.42	0.12	1a	6481.05	0.21	1a
6495.58	0.14	1a	6481.13	0.21	2a
6497.56	0.11	2a	6481.34	0.15	1a
6497.80	0.12	2a	6481.39	0.11	1a
6500.07	0.19	2a	6481.55	0.11	1a
6501.09	0.12	2a	6481.70	0.13	1a
6501.21	0.11	1a	6481.74	0.10	1a
6501.43	0.15	2a	6481.98	0.13	2a
6502.08	0.11	2a	6482.13	0.14	1a
6503.48	0.13	1a	6482.17	0.24	2a
6503.66	0.34	1a	6482.25	0.11	2a
6504.20	0.18	1a	6482.41	0.22	1a
6504.54	0.11	1a	6482.59	0.14	1a
6505.12	0.12	2a	6482.71	0.19	1a
6516.10	0.15	1a	6482.87	0.27	1a
6520.39	0.12	1a	6483.03	0.11	1a
D34 FERRO TDDFT			6483.16	0.15	1a
E/eV	fx10 ³ /au	Initial orbital	6483.23	0.30	1a
6457.43	0.13	2a	6483.50	0.14	1a
6471.33	0.11	2a	6483.61	0.13	1a
6471.49	0.17	2a	6483.81	0.15	1a
6472.47	0.15	2a	6484.00	0.11	1a
6472.63	0.16	2a	6484.13	0.14	1a
6473.40	0.11	2a	6484.30	0.19	2a
6473.60	0.11	2a	6484.54	0.11	2a
6474.44	0.15	2a	6484.55	0.30	2a
6474.73	0.10	2a	6484.77	0.13	1a
6474.76	0.14	2a	6485.12	0.11	2a
6475.27	0.21	2a	6485.15	0.13	1a
6475.37	0.14	1a	6485.67	0.11	1a
6475.75	0.36	2a	6486.43	0.15	2a
6475.88	0.12	1a	6486.66	0.29	2a
6476.03	0.14	2a	6487.50	0.11	2a
6476.32	0.12	2a	6487.54	0.21	2a
6476.43	0.17	2a	6487.72	0.13	2a
6476.63	0.13	2a	6487.77	0.17	2a
6476.64	0.10	1a	6487.94	0.13	2a
6476.92	0.15	2a	6489.16	0.12	2a
6477.16	0.21	2a	6489.21	0.14	1a
6477.61	0.11	1a	6489.40	0.13	2a
6478.07	0.14	1a	6489.67	0.12	2a
6478.26	0.14	1a	6490.08	0.10	1a
6478.27	0.12	2a	6490.29	0.10	1a
6478.82	0.21	2a	6490.29	0.11	2a
6478.89	0.11	2a	6490.41	0.20	1a
6478.97	0.10	1a	6490.55	0.19	1a
6479.20	0.11	2a	6491.20	0.11	1a
6479.31	0.10	2a	6493.33	0.12	2a
6479.82	0.20	2a	6493.46	0.19	2a
6480.11	0.13	1a	6495.99	0.10	1a
6480.18	0.18	1a	6497.68	0.15	2a
6480.26	0.10	1a	6499.77	0.10	2a
6480.27	0.11	1a	6499.94	0.18	2a
6480.31	0.11	2a	6501.31	0.15	2a
6480.43	0.17	1a	6503.68	0.14	1a
6480.57	0.19	1a	6503.83	0.15	1a
			6504.03	0.21	1a

6504.58 0.12 1a
6505.02 0.10 2a

D34 FERRO GEOMETRY

1.Mn	4.346688	3.320119	1.025445
2.Mn	2.424610	1.980537	3.267289
3.O	3.376065	3.423427	2.546468
4.O	2.999937	2.450916	-0.053913
5.O	1.508498	1.595925	1.433151
6.O	5.283623	1.676491	1.495750
7.O	3.929374	0.666528	3.014244
8.C	1.893085	1.838304	0.254156
9.C	1.024269	1.423111	-0.905862
10.C	4.977185	0.708499	2.295557
11.C	5.932539	-0.453647	2.368420
12.N	6.028764	4.458755	1.761402
13.N	5.572936	3.303031	-0.786919
14.N	3.779002	5.249555	0.226910
15.C	7.212504	3.936232	0.995317
16.C	6.927797	3.912559	-0.496405
17.C	4.400862	5.460126	-1.140998
18.C	4.800305	4.136424	-1.766055
19.C	4.326689	6.212593	1.239433
20.C	5.796175	5.932800	1.497750
21.C	5.750618	1.934235	-1.364170
22.C	6.265624	4.255027	3.218094
23.C	2.303183	5.431276	0.121244
24.N	2.969078	2.119519	5.496188
25.N	1.225763	0.360839	4.031185
26.N	0.692051	3.154337	4.031791
27.C	2.844585	0.694559	5.934657
28.C	1.520190	0.093741	5.495660
29.C	-0.192539	0.825392	3.841085
30.C	-0.402960	2.199479	4.453617
31.C	1.252501	3.917723	5.191852
32.C	1.972931	3.012156	6.183045
33.C	4.348275	2.592780	5.776136
34.C	1.422434	-0.904529	3.253299
35.C	0.149205	4.117220	3.036445
36.H	0.332928	0.630103	-0.604180
37.H	1.631274	1.103683	-1.760435
38.H	0.429890	2.293822	-1.226825
39.H	6.837728	-0.278724	1.780790
40.H	5.419778	-1.351476	1.991406
41.H	6.193037	-0.652021	3.417178
42.H	7.409587	2.925738	1.370488
43.H	8.098784	4.555321	1.207520
44.H	6.961682	4.922074	-0.922741
45.H	7.708270	3.334358	-1.009014
46.H	5.262674	6.129060	-1.038113
47.H	3.681263	5.976805	-1.790403
48.H	3.915956	3.554515	-2.049511
49.H	5.397069	4.307856	-2.675893
50.H	3.736543	6.077623	2.155045
51.H	4.187725	7.249221	0.893050
52.H	6.416280	6.240508	0.647863
53.H	6.140318	6.517492	2.361713
54.H	4.771509	1.465159	-1.495687
55.H	6.358030	1.327916	-0.687754
56.H	6.253528	2.010190	-2.339118
57.H	5.407658	4.641371	3.774144
58.H	7.177570	4.789119	3.523887
59.H	6.387214	3.188129	3.423719

60.H	1.841507	5.183548	1.078953
61.H	1.909332	4.773296	-0.659128
62.H	2.076043	6.475567	-0.139811
63.H	3.682115	0.147404	5.484730
64.H	2.941864	0.611412	7.030430
65.H	1.536463	-0.991120	5.666165
66.H	0.691127	0.488313	6.094197
67.H	-0.375509	0.847899	2.760447
68.H	-0.886537	0.094136	4.285189
69.H	-1.380170	2.592342	4.140546
70.H	-0.428682	2.149026	5.548407
71.H	1.951086	4.654628	4.771347
72.H	0.452974	4.474507	5.708124
73.H	2.480973	3.636741	6.931650
74.H	1.258257	2.395357	6.741079
75.H	4.438512	3.643160	5.483205
76.H	5.065899	1.991650	5.207750
77.H	4.581663	2.502538	6.848742
78.H	1.267610	-0.708015	2.188827
79.H	0.697317	-1.657935	3.593534
80.H	2.437212	-1.277545	3.416158
81.H	-0.218036	3.574991	2.158796
82.H	0.946396	4.804778	2.740690
83.H	-0.676655	4.698498	3.473813

D34 FERRO TDDFT

E/eV	fx10 ³ /au	Initial orbital
6434.09	0.10	2a
6459.20	0.11	1a
6470.10	0.11	2a
6471.14	0.15	2a
6471.31	0.17	2a
6471.60	0.12	2a
6472.16	0.12	2a
6472.41	0.14	2a
6472.45	0.16	2a
6473.32	0.11	2a
6473.70	0.13	1a
6473.71	0.11	2a
6473.88	0.10	1a
6473.90	0.10	2a
6474.25	0.12	2a
6474.34	0.13	2a
6474.51	0.11	2a
6474.82	0.14	1a
6474.92	0.24	2a
6475.28	0.41	2a
6475.43	0.11	1a
6476.16	0.10	1a
6476.40	0.14	2a
6476.72	0.12	1a
6476.74	0.19	2a
6476.78	0.11	2a
6476.88	0.10	1a
6477.32	0.11	1a
6477.54	0.15	2a
6477.66	0.20	1a
6477.70	0.14	1a
6477.86	0.17	2a
6477.96	0.15	1a
6478.04	0.10	1a
6478.05	0.13	2a
6478.38	0.10	1a

6478.46	0.22	1a
6478.78	0.19	1a
6478.91	0.15	2a
6479.11	0.13	2a
6479.37	0.17	2a
6479.58	0.22	2a
6479.69	0.18	2a
6479.84	0.20	2a
6480.05	0.15	1a
6480.10	0.13	1a
6480.24	0.23	2a
6480.29	0.20	1a
6480.41	0.15	2a
6480.54	0.15	2a
6480.54	0.12	1a
6480.71	0.20	1a
6480.75	0.10	1a
6480.84	0.13	1a
6480.90	0.14	1a
6481.05	0.35	1a
6481.15	0.15	1a
6481.28	0.11	1a
6481.33	0.24	1a
6481.46	0.29	1a
6481.70	0.10	2a
6481.71	0.13	1a
6481.91	0.19	2a
6482.18	0.11	2a
6482.24	0.16	2a
6482.49	0.17	1a
6482.62	0.13	1a
6482.69	0.14	1a
6482.78	0.11	1a
6483.11	0.10	1a
6483.26	0.20	1a
6483.34	0.12	2a
6483.41	0.17	1a
6483.71	0.10	1a
6483.84	0.13	2a
6484.06	0.31	2a
6484.18	0.16	2a
6485.04	0.16	2a
6485.10	0.17	1a
6485.63	0.19	2a
6486.10	0.16	2a
6486.34	0.11	2a
6486.90	0.12	2a
6487.30	0.18	2a
6487.55	0.14	2a
6488.00	0.11	1a
6488.06	0.17	2a
6488.26	0.15	2a
6488.57	0.19	2a
6488.91	0.17	2a
6489.53	0.13	1a
6489.82	0.12	1a
6490.41	0.11	1a
6490.69	0.18	1a
6491.32	0.20	1a
6492.42	0.11	2a
6493.27	0.12	2a
6493.34	0.12	1a
6494.37	0.11	1a

6496.88	0.12	2a
6501.02	0.10	2a
6501.48	0.15	2a
6502.52	0.16	1a
6502.71	0.31	1a
6503.42	0.11	1a
6503.71	0.18	1a

D44 FERRO GEOMETRY

1.Mn	5.319224	1.097401	2.972435
2.Mn	4.045360	-1.483057	1.608153
3.O	5.195613	-0.727096	2.816807
4.O	5.808044	1.355564	1.238190
5.O	4.362273	-0.316580	0.244842
6.O	3.547070	1.444305	2.801339
7.O	2.550392	-0.707990	2.321502
8.N	5.579154	3.241884	3.327201
9.N	7.442372	1.108503	3.502792
10.N	5.139305	1.131931	5.159225
11.N	2.744346	-2.589822	0.236539
12.N	3.645360	-3.258264	2.843240
13.N	5.516111	-2.873139	0.745257
14.C	7.033197	3.566565	3.542060
15.C	7.926810	2.447085	3.032858
16.C	7.606574	0.933921	4.992200
17.C	6.339505	0.372772	5.618993
18.C	5.140466	2.554506	5.663503
19.C	4.767206	3.518657	4.550420
20.C	5.037020	4.032009	2.184703
21.C	8.212158	0.057714	2.789890
22.C	3.905804	0.454707	5.640452
23.C	2.158280	-3.797149	0.919932
24.C	2.268572	-3.682080	2.431169
25.C	4.675527	-4.326152	2.570280
26.C	5.905128	-3.738077	1.897795
27.C	4.887208	-3.671598	-0.371429
28.C	3.638484	-2.981347	-0.893720
29.C	1.655011	-1.709766	-0.277243
30.C	3.624562	-2.954854	4.295836
31.C	6.721170	-2.177909	0.219330
32.B	5.213163	0.768058	0.139388
33.C	5.585932	1.330192	-1.279541
34.C	4.990994	0.839350	-2.461356
35.C	5.348599	1.338761	-3.715344
36.C	6.315313	2.346231	-3.816531
37.C	6.918565	2.853064	-2.659511
38.C	6.554120	2.350249	-1.410403
39.B	2.445496	0.619181	2.683361
40.C	1.041555	1.221399	3.050244
41.C	0.872295	2.616344	3.191274
42.C	-0.354823	3.166564	3.562634
43.C	-1.446592	2.326888	3.813120
44.C	-1.307285	0.940853	3.675024
45.C	-0.079368	0.398146	3.290318
46.H	7.286058	4.501107	3.022160
47.H	7.203977	3.751091	4.609945
48.H	8.968975	2.611273	3.352548
49.H	7.902167	2.410903	1.937731
50.H	8.450113	0.259844	5.196505
51.H	7.869458	1.901398	5.436618
52.H	6.416715	0.387706	6.719110
53.H	6.187210	-0.667686	5.302746
54.H	4.426269	2.650689	6.493024

55.H	6.129431	2.787530	6.076242	6475.53	0.28	1a
56.H	4.906354	4.560971	4.881003	6476.52	0.15	2a
57.H	3.717378	3.382423	4.266205	6476.54	0.13	1a
58.H	5.636975	3.836233	1.291717	6477.85	0.13	1a
59.H	5.061012	5.105017	2.427820	6478.10	0.13	1a
60.H	4.008670	3.714255	1.990117	6478.57	0.11	1a
61.H	7.844260	-0.926458	3.096968	6478.62	0.10	2a
62.H	9.283762	0.142001	3.026909	6478.87	0.11	2a
63.H	8.066034	0.187092	1.713367	6478.89	0.15	1a
64.H	3.844879	-0.532567	5.180197	6479.09	0.18	1a
65.H	3.028319	1.041136	5.347936	6479.80	0.12	2a
66.H	3.930855	0.355855	6.736771	6480.82	0.12	1a
67.H	2.669716	-4.697071	0.556153	6480.96	0.11	2a
68.H	1.101670	-3.906049	0.638579	6481.12	0.14	2a
69.H	1.588501	-2.906821	2.802198	6481.14	0.12	1a
70.H	2.002256	-4.638582	2.910528	6481.29	0.11	2a
71.H	4.966155	-4.811418	3.512594	6481.37	0.22	1a
72.H	4.222194	-5.107183	1.948118	6481.47	0.21	2a
73.H	6.586053	-4.542526	1.572571	6481.56	0.12	1a
74.H	6.451367	-3.093191	2.598790	6481.73	0.12	1a
75.H	5.612242	-3.794251	-1.187975	6481.91	0.12	1a
76.H	4.658981	-4.679980	-0.005406	6482.00	0.11	2a
77.H	3.905864	-2.055023	-1.414593	6482.01	0.13	1a
78.H	3.104925	-3.636968	-1.601394	6482.14	0.14	2a
79.H	0.996993	-1.429696	0.549978	6482.16	0.11	1a
80.H	1.081950	-2.240360	-1.052618	6482.42	0.24	2a
81.H	2.099374	-0.801341	-0.694829	6482.50	0.23	1a
82.H	4.613160	-2.598086	4.602009	6482.65	0.10	2a
83.H	3.363566	-3.856519	4.871112	6482.83	0.10	1a
84.H	2.877378	-2.177766	4.481296	6483.85	0.12	1a
85.H	6.447376	-1.582277	-0.657610	6484.49	0.13	2a
86.H	7.489130	-2.914551	-0.063721	6484.74	0.11	1a
87.H	7.111982	-1.514504	0.993210	6485.54	0.21	2a
88.H	4.223679	0.066042	-2.396489	6485.56	0.14	1a
89.H	4.872789	0.950220	-4.616456	6485.68	0.14	1a
90.H	6.595694	2.738769	-4.794648	6487.28	0.24	1a
91.H	7.669466	3.640464	-2.736470	6487.35	0.18	2a
92.H	7.031758	2.751233	-0.514923	6488.76	0.14	2a
93.H	1.712675	3.280890	2.985007	6488.78	0.13	1a
94.H	-0.465560	4.247753	3.654667	6490.88	0.15	2a
95.H	-2.405426	2.752746	4.111134	6493.56	0.15	1a
96.H	-2.158996	0.287729	3.868398	6493.68	0.11	1a
97.H	0.015185	-0.684261	3.185190	6493.79	0.21	1a
				6493.83	0.12	2a

D44 FERRO TDDFT

E/eV	fx10 ³ /au	Initial orbital			
6444.01	0.10	1a	6494.07	0.12	2a
6444.14	0.11	2a	6494.16	0.12	1a
6444.16	0.13	1a	6494.21	0.24	2a
6470.68	0.11	2a	6494.78	0.11	1a
6472.89	0.15	1a	6496.03	0.13	1a
6473.02	0.10	2a	6496.54	0.10	2a
6473.07	0.12	1a	6500.42	0.11	1a
6473.26	0.13	2a	6500.58	0.12	2a
6474.58	0.14	2a	6501.28	0.11	2a
6474.73	0.11	2a	6501.30	0.11	1a
6474.75	0.13	1a	6501.36	0.12	2a
6474.96	0.13	2a	6501.95	0.11	1a
6474.98	0.11	1a	6502.86	0.13	2a
6475.01	0.15	2a	6503.52	0.13	2a
6475.03	0.21	1a	6503.55	0.14	1a
6475.27	0.12	2a	6503.71	0.21	2a
6475.51	0.22	2a	6503.73	0.20	1a
			6503.97	0.11	1a
			6505.13	0.13	2a