SUPPORTING INFORMATION

Indaceno [2,1-b:6,5-b'] dithiophene (IDT) as electron rich bridge for high intramolecular charge transfer (ITC) dye sensitized solar cell

Barłóg Maciej,[1] Cagdas Yavuz,[2] Abdulrahman K. Ali,[2] Zafer Kandemir,[3] Marc Comí,[1] Hassan S. Bazzi,[1] Mohammed Al-Hashimi*[1] and Sule Erten-Ela*[2]

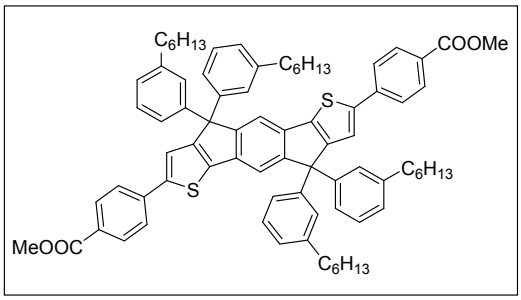
[1] Department of Chemistry, Texas A&M University at Qatar, P.O. Box 23874, Doha, Qatar.

[2] Institute of Solar Energy, Ege University, 35100, Izmir, Turkey.

[3]Department of Mechanical Engineering, Eskisehir Technical University, 26555, Eskisehir, Turkey

EXPERIMENTAL SECTION

General. All starting materials were received from Sigma-Aldrich or Alfa Aesar. IDT stannlylated reagent was obtained from SOLARMER MATERIALS INC. Tetrakis(triphenyl-phosphine)palladium ($Pd(PPh_3)_4$, 99% (99.9+%-Pd)) was received from Strem Chemicals. All solvents were received from Sigma Aldrich and used without any further drying or purification unless stated otherwise. The Stille coupling reaction was performed by use of BIOTAGE® Initiator+ microwave reactor. All the syntheses were performed using standard Schlenk techniques involving oven-dried glassware, Teflon coated stir bars and sleeve stopper septa under a dry argon atmosphere. Products were purified with flash chromatography on silica gel (pore size 60Å, particle size 230-400 mesh) received from Sigma Aldrich. Celite (Supleco R566) was used for filtration. Reactions were controlled with TLC on Merck Silica Gel 60Å F-254 precoated plates (0.25 mm thickness), and components were visualized under ultraviolet light (254 and 365 nm). NMR spectra were recorded using a Bruker Ultrashield 400MHz spectrometer in $CDCl_3$ or $CDCl_3$/DMSO-d_6 mixture at 298 K. Chemical shifts are expressed in parts per million with residual solvent signals as internal reference (^1H and ^{13}C NMR). Mass analysis was conducted using Advion Expression CMS spectrometer.



Dimethyl 4,4'-(4,4,9,9-tetrakis(3-hexylphenyl)-4,9-dihydro-s-indaceno[1,2-b:5,6-b']dithiophene-2,7-diyl)dibenzoate (1).

An oven dried microwave vial was charged with (4,4,9,9-tetrakis(3-hexylphenyl)-4,9-dihydro-s-indaceno[1,2-b:5,6-b']dithiophene-2,7-diyl)bis(trimethylstannane) (123mg, 0.1 mmol), methyl p-bromo benzoate (65 mg, 0.3 mmol), and $Pd(PPh_3)_4$ (6mg, 5% mol), degassed and dissolved in dry o-xylene (0.5 mL), then purged with argon for 30 minutes. Reaction mixture was heated at 160°C for 1h, cooled down and transferred on chromatography column, purified with slow gradient of EtOAc/n-hexane (0-10%) to obtain the product as bright yellow solid (80 mg, 68%).

^{1}H NMR (400 MHz, $CDCl_3$, 298 K) δ 8.00 (d, J = 8.6 Hz, 4H), 7.61 (br. d, J = 8.6Hz), 7.45 (s, 2H), 7.32 (s, 2H), 7.04-7.20 (m, 16H) 3.92 (s, 6H), 2.55 (t, J = 7.7 Hz, 8H), 1.54-1.58 (m, 8H), 1.25-1.30 (m, 24H), 0.84 (t, J = 6.3 Hz, 12H).

^{13}C NMR (100 MHz, $CDCl_3$, 298 K) δ 166.7, 156.9, 153.4, 153.4. 145.6, 144.2, 143.1, 142.1, 139.2, 135.4, 130.2, 128.5, 128.4, 128.2, 127.1, 125.1, 124.8, 120.4, 117.5, 63.7, 52.1, 36.0-22.6 (multiple aliphatic CH_2), 14.1 (CH_3).

MS MS-APCI: *m/z* found 1176.2 ($M+H^+$, 100%). calculated for $C_{80}H_{87}O_4S_2^+$:1175.6.

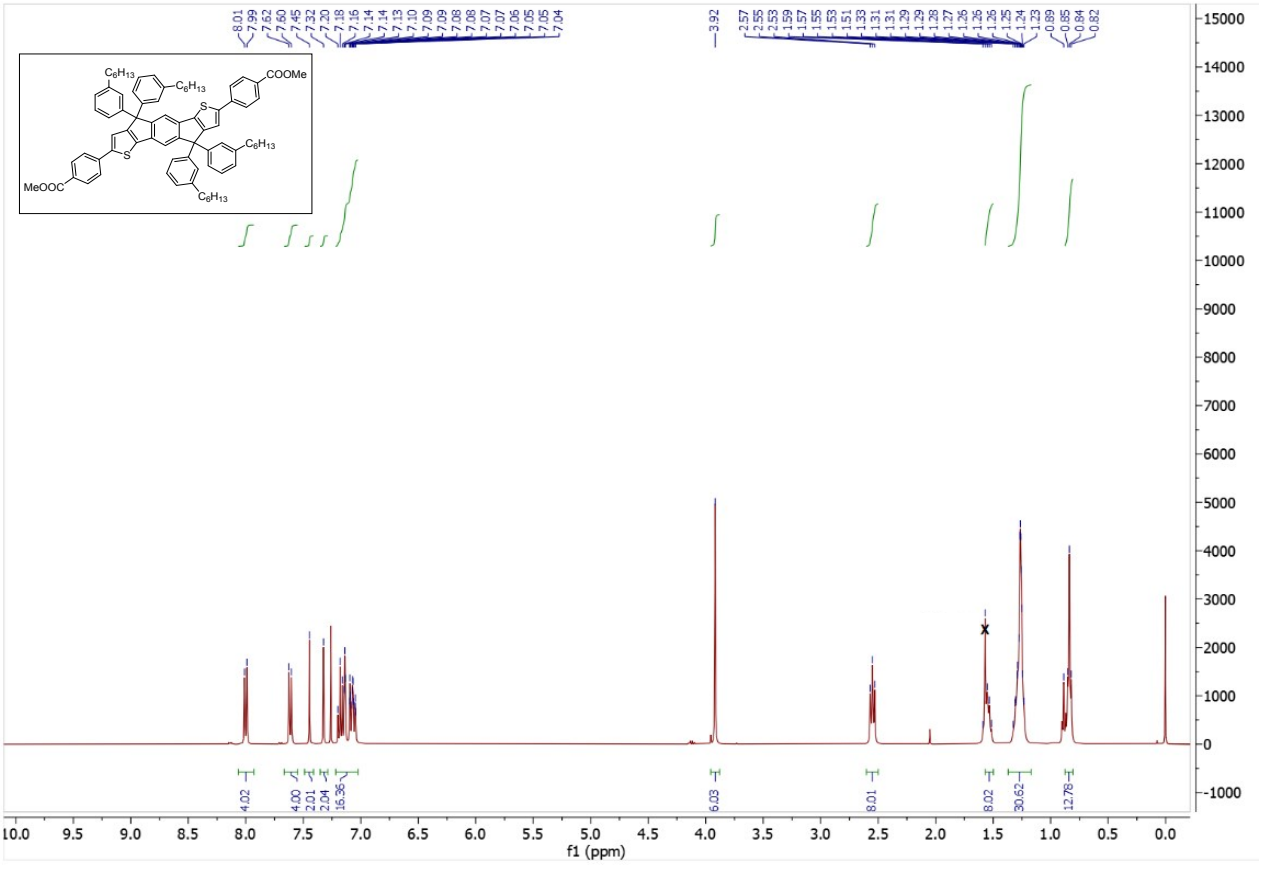


Figure S1. ^{1}H NMR spectrum of Dimethyl 4,4'-(4,4,9,9-tetrakis(3-hexylphenyl)-4,9-dihydro-s-indaceno[1,2-b:5,6-b']dithiophene-2,7-diyl)dibenzoate ($CDCl_3$, 400 MHz, 298 K).

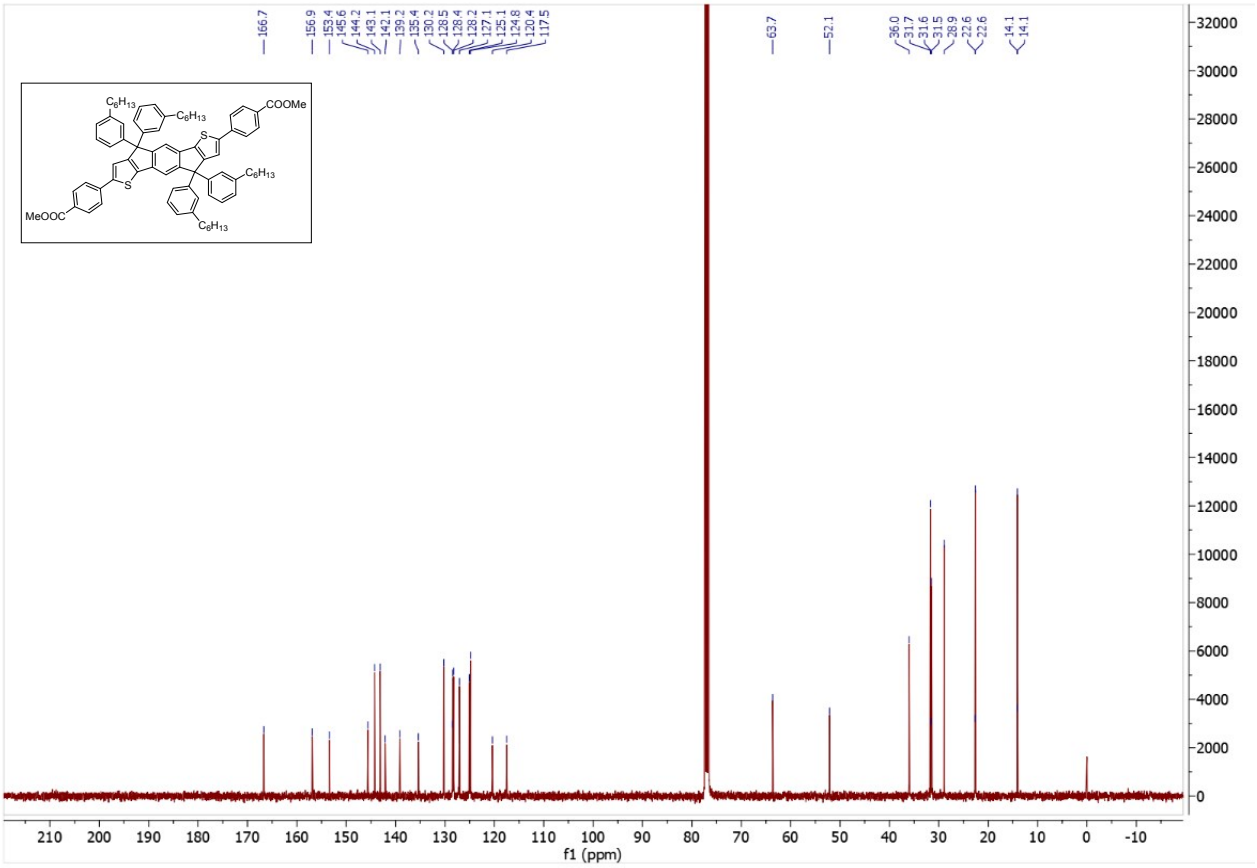


Figure S2. ^{13}C NMR spectrum of Dimethyl 4,4'-(4,4,9,9-tetrakis(3-hexylphenyl)-4,9-dihydro-s-indaceno[1,2-b:5,6-b']dithiophene-2,7-diyl)dibenzoate **1** ($CDCl_3$, 100 MHz, 298 K).

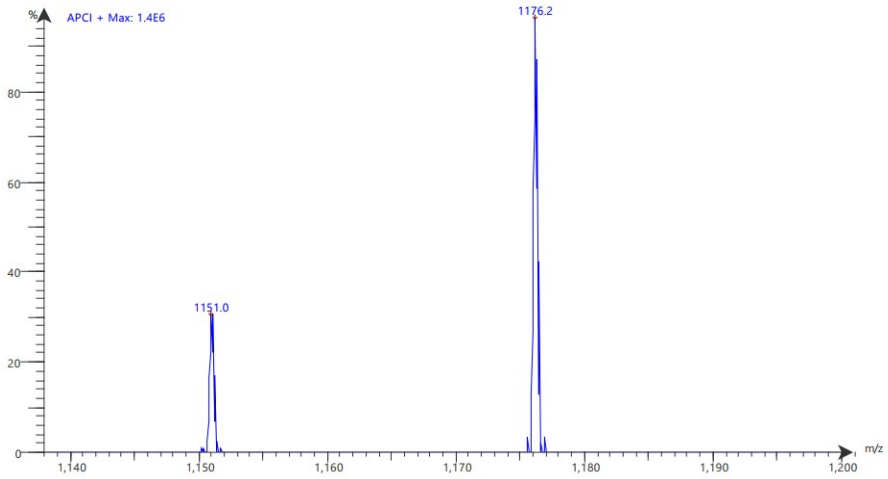
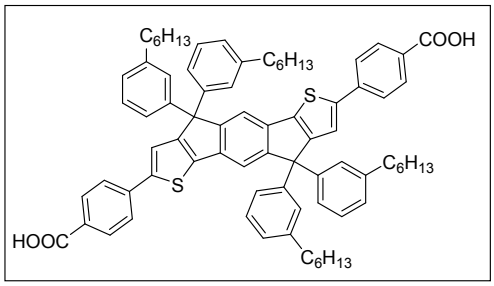


Figure S3 MS-APCI+ Spectrum of Dimethyl 4,4'-(4,4,9,9-tetrakis(3-hexylphenyl)-4,9-dihydro-s-indaceno[1,2-b:5,6-b']dithiophene-2,7-diyl)dibenzoate **1**



4,4'-(4,4,9,9-tetrakis(3-hexylphenyl)-4,9-dihydro-s-indaceno[1,2-b:5,6-b']dithiophene-2,7-diyl)dibenzoic acid (2).

Material from the previous step was dissolved in THF (4 mL), MeOH (1 mL) and LiOH solution (1M, 0.5 mL) was added. Reaction mixture was stirred over night and complete saponification of the esters confirmed by TLC. The solution was evaporated, and solids washed with HCl (0.1M, 2 x 5 mL). Orange solid was dried under high vacuum and used in the next step without further purification. 73mg, 91%.

^{1}H NMR (400 MHz, $CDCl_3$/DMSO-d_6 (4:1, v/v), 298 K) δ 7.90 (d, J = 8.1 Hz, 4H), 7.55 (d, J = 8.1 Hz, 4H) 7.37 (s, 2H), 7.29 (s, 2H), 6.95-7.11 (m, 16H), 2.47 (t, J = 7.6 Hz, 8H), 1.44-1.48 (m, 8H), 1.17 (br. s, 24H), 0.74 (br. s, 12H).

^{13}C NMR (400 MHz, $CDCl_3$/DMSO-d_6 (4:1, v/v), 298 K) δ 167.2, 156.5, 152.9, 145.4. 143.6, 142.6, 141.1, 138.1, 134.7, 129.9, 129.2, 127.9, 126.7, 124.4, 124.3, 119.9, 116.9, 63.1, 35.4-22.0 (multiple aliphatic CH_2), 13.7 (CH_3).

MS MS-APCI: *m/z* found 1145.8 (M-H^+, 5%). calculated for $C_{78}H_{81}O_4S_2^-$ 1145.6.

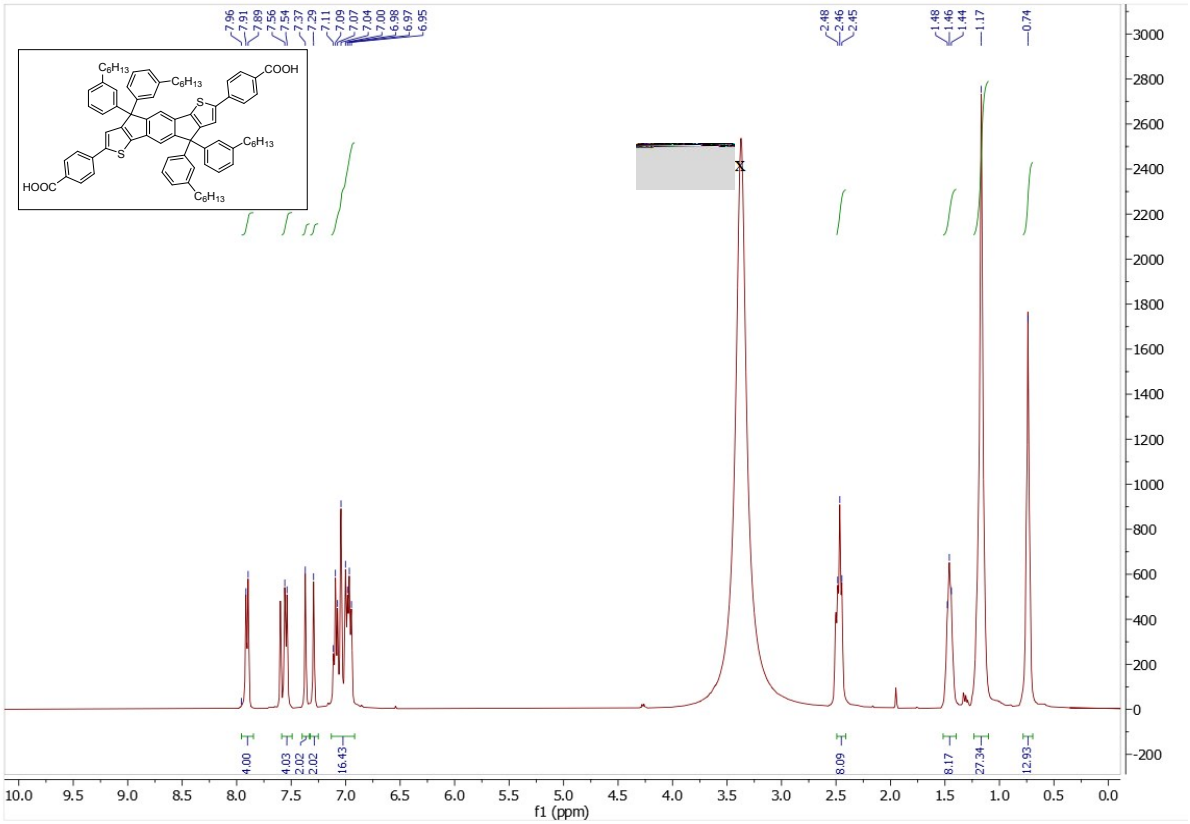


Figure S4. ^{1}H NMR spectrum of 4,4'-(4,4,9,9-tetrakis(3-hexylphenyl)-4,9-dihydro-s-indaceno[1,2-b:5,6-b']dithiophene-2,7-diyl)dibenzoic acid **2** ($CDCl_3$/DMSO-d_6, 400 MHz, 298 K).

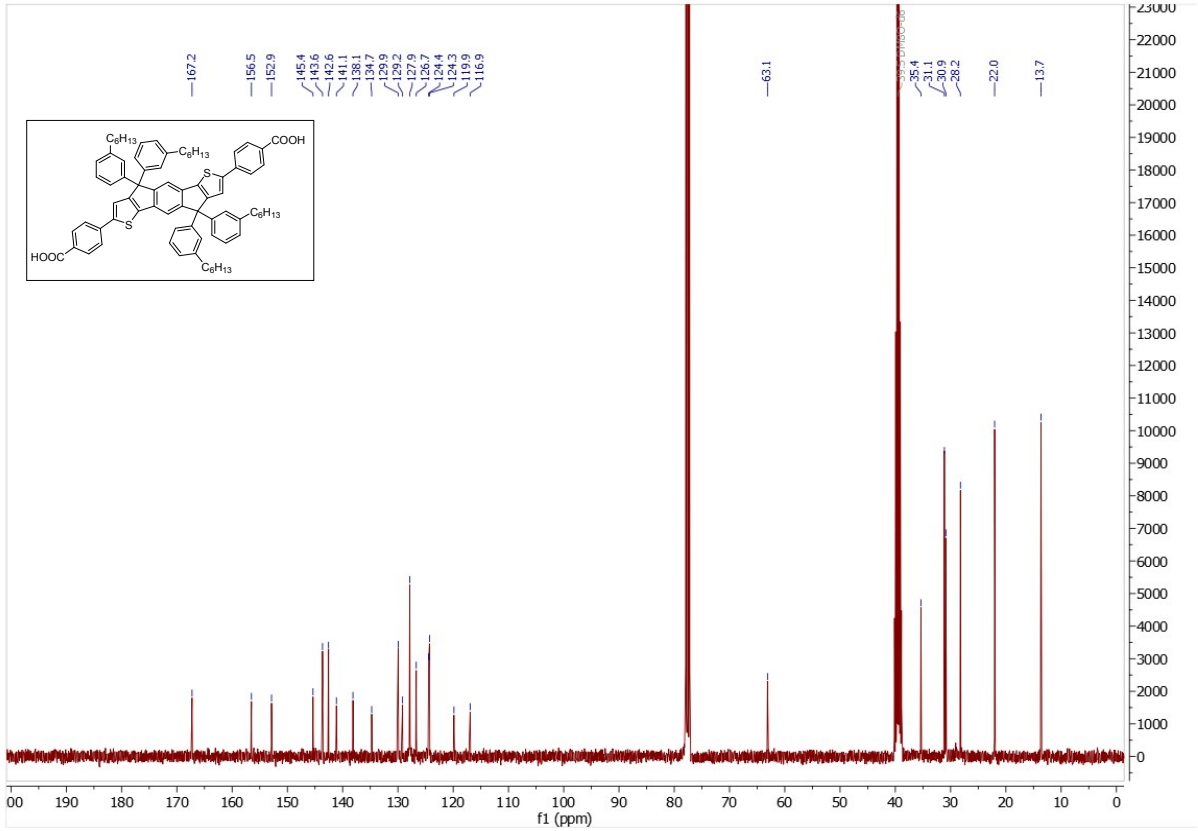


Figure S5 ^{13}C NMR spectrum of 4,4'-(4,4,9,9-tetrakis(3-hexylphenyl)-4,9-dihydro-s-indaceno[1,2-b:5,6-b']dithiophene-2,7-diyl)dibenzoic acid **2** ($CDCl_3$/DMSO-d_6, 100 MHz, 298 K).

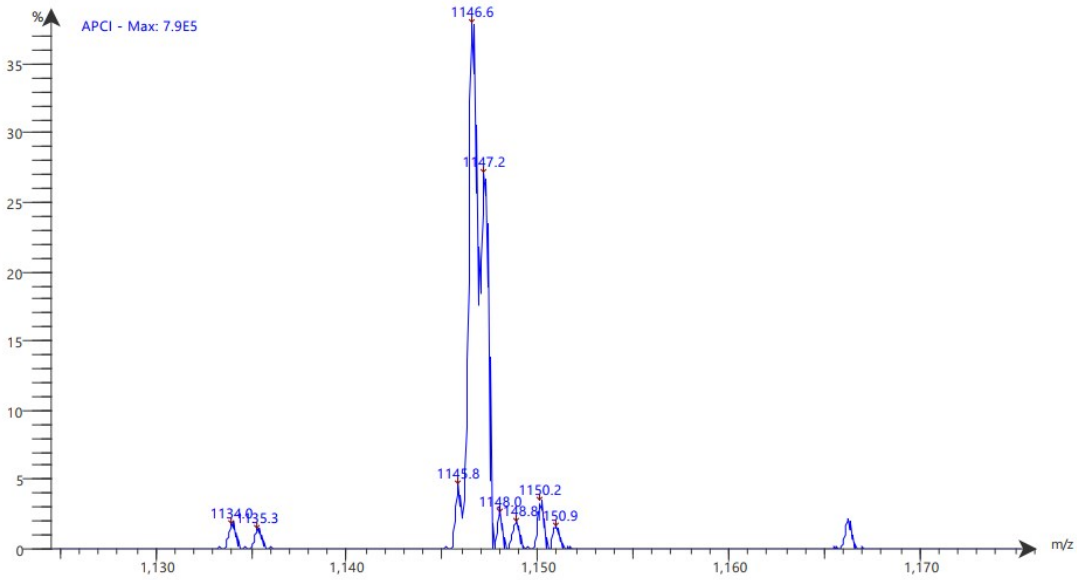


Figure S6 MS-APCI- spectrum of 4,4'-(4,4,9,9-tetrakis(3-hexylphenyl)-4,9-dihydro-s-indaceno[1,2-b:5,6-b']dithiophene-2,7-diyl)dibenzoic acid **2**

DFT CALCULATIONS

Geometry optimized structures of the IDT dye molecule were performed by using Gaussian 09 package program for two different B3LYP and PBE0 functionals with 6-31G(d,p) basis set. The IDT dye molecule contains 166 atoms with 614 electrons and its chemical formula is $C_{78}H_{82}O_4S_2$. The atom labels and symbols for this dye molecule are shown in Fig. S-1 by using GaussView program. Bond lengths, bond angles and dihedral angles of this dye molecule are given in Table S-1 for B3LYP/6-31G(d,p) level, and in Table S-2 for PBE0/6-31G(d,p) level. Finally, optimized Cartesian coordinates of IDT dye molecule are given in Table S-3 for the B3LYP and PBE0 functionals with 6-31G(d,p) basis set.

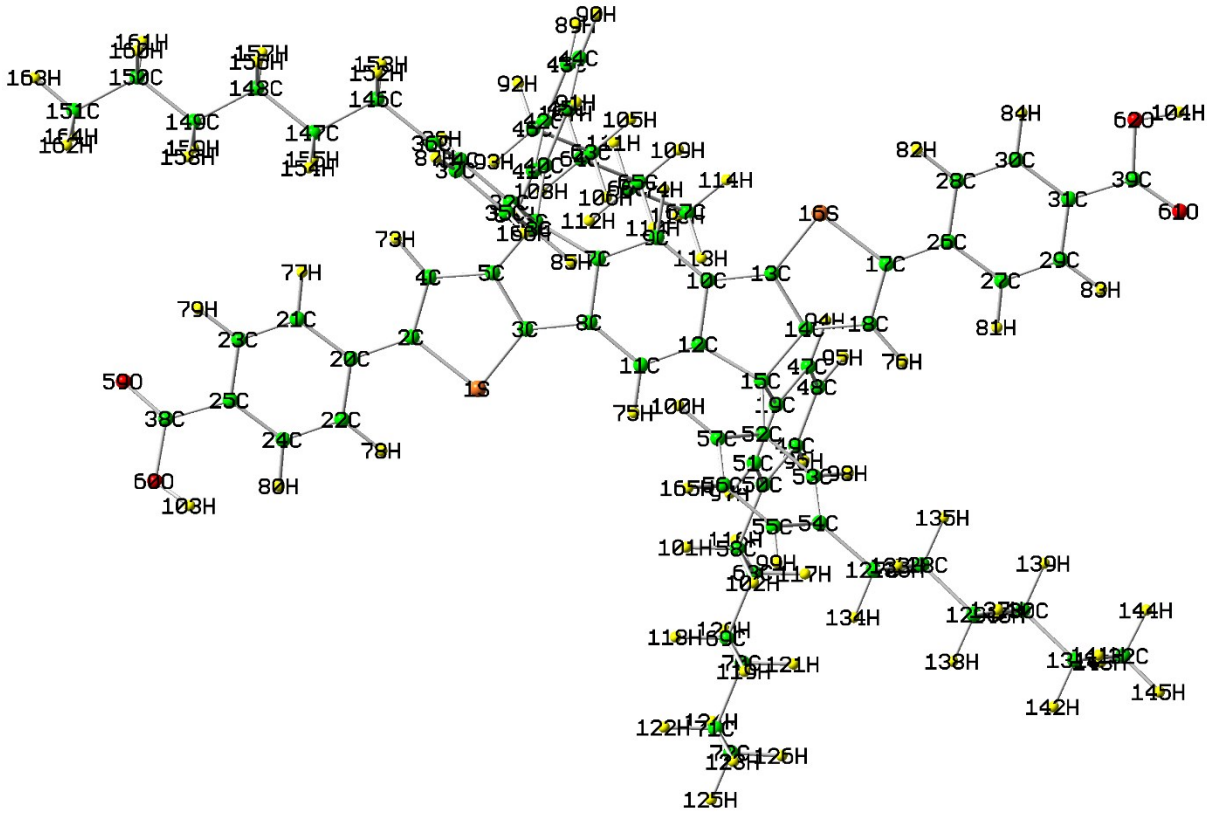


Fig. S-1 Schematic plot of the IDT dye molecule with atom labels and symbols.

Table S-1 Bond lengths, bond angles and dihedral angles of optimized geometry for the IDT dye molecule are calculated at DFT/B3LYP/6-31G(d,p).

Bond length (Å)		Bond angle (°)		Dihedral angle (°)	
1S − 2C	1.786	2C − 1S − 3C	90.666	3C − 1S − 2C − 4C	-0.332
1S − 3C	1.740	1S − 2C − 4C	110.677	1S − 2C − 4C − 5C	0.430
2C − 4C	1.404	2C − 4C − 5C	113.168	2C − 4C − 5C − 6C	-178.456

4C − 5C	1.394	4C − 5C − 6C	135.992	4C − 5C − 6C − 7C	179.334
5C − 6C	1.530	5C − 6C − 7C	100.026	2C − 1S − 3C − 8C	-179.795
6C − 7C	1.548	1S − 3C − 8C	136.422	5C − 6C − 7C − 9C	177.607
3C − 8C	1.414	6C − 7C − 9C	128.471	6C − 7C − 9C − 10C	-179.154
7C − 9C	1.374	7C − 9C − 10C	118.146	1S − 3C − 8C − 11C	1.392
9C − 10C	1.418	3C − 8C − 11C	131.792	3C − 8C − 11C − 12C	179.464
8C − 11C	1.418	8C − 11C − 12C	118.133	7C − 9C − 10C − 13C	179.312
11C − 12C	1.375	9C − 10C − 13C	131.789	9C − 10C − 13C − 14C	-178.306
10C − 13C	1.414	10C − 13C − 14C	111.672	10C − 13C − 14C − 15C	-1.797
13C − 14C	1.406	13C − 14C − 15C	110.332	9C − 10C − 13C − 16S	1.565
14C − 15C	1.530	10C − 13C − 16S	136.317	10C − 13C − 16S − 17C	-179.946
13C − 16S	1.737	13C − 16S − 17C	90.685	10C − 13C − 14C − 18C	-179.916
16S − 17C	1.785	13C − 14C − 18C	113.401	13C − 14C − 15C − 19C	117.072
14C − 18C	1.393	14C − 15C − 19C	113.612	3C − 1S − 2C − 20C	179.773
15C − 19C	1.543	1S − 2C − 20C	120.867	1S − 2C − 20C − 21C	174.884
2C − 20C	1.442	2C − 20C − 21C	121.017	1S − 2C − 20C − 22C	-5.456
20C − 21C	1.422	2C − 20C − 22C	121.867	2C − 20C − 21C − 23C	-179.980
20C − 22C	1.419	20C − 21C − 23C	121.275	2C − 20C − 22C − 24C	179.555
21C − 23C	1.381	20C − 22C − 24C	121.296	20C − 22C − 24C − 25C	-0.001
22C − 24C	1.385	22C − 24C − 25C	121.059	13C − 16S − 17C − 26C	179.859
24C − 25C	1.408	16S − 17C − 26C	120.895	16S − 17C − 26C − 27C	-175.632
17C − 26C	1.442	17C − 26C − 27C	120.840	16S − 17C − 26C − 28C	4.322
26C − 27C	1.421	17C − 26C − 28C	121.767	17C − 26C − 27C − 29C	-179.947
26C − 28C	1.419	26C − 27C − 29C	121.098	17C − 26C − 28C − 30C	179.942
27C − 29C	1.382	26C − 28C − 30C	121.376	26C − 28C − 30C − 31C	0.051
28C − 30C	1.385	28C − 30C − 31C	120.447	4C − 5C − 6C − 32C	60.317
30C − 31C	1.407	5C − 6C − 32C	107.731	5C − 6C − 32C − 33C	94.889
6C − 32C	1.545	6C − 32C − 33C	122.120	5C − 6C − 32C − 34C	-80.859
32C − 33C	1.400	6C − 32C − 34C	119.332	6C − 32C − 33C − 35C	-176.315
32C − 34C	1.403	32C − 33C − 35C	120.278	6C − 32C − 34C − 36C	176.164
33C − 35C	1.396	32C − 34C − 36C	122.006	32C − 33C − 35C − 37C	0.417
34C − 36C	1.399	33C − 35C − 37C	120.532	22C − 24C − 25C − 38C	179.505
35C − 37C	1.393	24C − 25C − 38C	124.016	28C − 30C − 31C − 39C	179.936
25C − 38C	1.487	30C − 31C − 39C	122.742	4C − 5C − 6C − 40C	-65.255
31C − 39C	1.476	5C − 6C − 40C	113.781	5C − 6C − 40C − 41C	-21.501
6C − 40C	1.543	6C − 40C − 41C	121.105	6C − 40C − 41C − 42C	-176.412
40C − 41C	1.400	40C − 41C − 42C	121.828	40C − 41C − 42C − 43C	0.203
41C − 42C	1.402	41C − 42C − 43C	118.489	41C − 42C − 43C − 44C	0.030
42C − 43C	1.400	42C − 43C − 44C	120.439	42C − 43C − 44C − 45C	-0.146
43C − 44C	1.395	43C − 44C − 45C	120.398	40C − 41C − 42C − 46C	178.484
44C − 45C	1.394	41C − 42C − 46C	120.657	14C − 15C − 19C − 47C	-23.761
42C − 46C	1.514	15C − 19C − 47C	120.918	15C − 19C − 47C − 48C	-176.333
19C − 47C	1.402	19C − 47C − 48C	120.106	19C − 47C − 48C − 49C	0.380
47C − 48C	1.393	47C − 48C − 49C	120.715	47C − 48C − 49C − 50C	0.025
48C − 49C	1.396	48C − 49C − 50C	120.365	14C − 15C − 19C − 51C	160.477
49C − 50C	1.399	15C − 19C − 51C	120.476	13C − 14C − 15C − 52C	-117.129
19C − 51C	1.399	14C − 15C − 52C	107.678	14C − 15C − 52C − 53C	-79.607
15C − 52C	1.545	15C − 52C − 53C	119.085	15C − 52C − 53C − 54C	176.096
52C − 53C	1.407	52C − 53C − 54C	121.938	52C − 53C − 54C − 55C	-0.021
53C − 54C	1.397	53C − 54C − 55C	118.142	53C − 54C − 55C − 56C	-0.136
54C − 55C	1.405	54C − 55C − 56C	120.663	14C − 15C − 52C − 57C	96.034
55C − 56C	1.390	15C − 52C − 57C	122.110	48C − 49C − 50C − 58C	179.572
52C − 57C	1.397	49C − 50C − 58C	123.150	24C − 25C − 38C − 59O	-163.670
50C − 58C	1.521	25C − 38C − 59O	123.547	24C − 25C − 38C − 60O	16.322
38C − 59O	1.213	25C − 38C − 60O	117.088	30C − 31C − 39C − 61O	-179.986

38C − 60O	1.366	31C − 39C − 61O	125.083	30C − 31C − 39C − 62O	0.013
39C − 61O	1.219	31C − 39C − 62O	113.212	41C − 42C − 46C − 63C	-90.088
39C − 62O	1.361	42C − 46C − 63C	113.037	42C − 46C − 63C − 64C	-178.932
46C − 63C	1.542	46C − 63C − 64C	113.172	46C − 63C − 64C − 65C	-179.953
63C − 64C	1.533	63C − 64C − 65C	113.380	63C − 64C − 65C − 66C	-179.483
64C − 65C	1.534	64C − 65C − 66C	113.583	64C − 65C − 66C − 67C	-179.968
65C − 66C	1.534	65C − 66C − 67C	113.223	49C − 50C − 58C − 68C	5.762
66C − 67C	1.532	50C − 58C − 68C	116.763	50C − 58C − 68C − 69C	178.701
58C − 68C	1.533	58C − 68C − 69C	112.680	58C − 68C − 69C − 70C	179.544
68C − 69C	1.534	68C − 69C − 70C	113.457	68C − 69C − 70C − 71C	179.956
69C − 70C	1.534	69C − 70C − 71C	113.579	69C − 70C − 71C − 72C	179.781
70C − 71C	1.534	70C − 71C − 72C	113.238	1S − 2C − 4C − 73H	179.971
71C − 72C	1.532	2C − 4C − 73H	122.619	6C − 7C − 9C − 74H	0.183
4C − 73H	1.082	7C − 9C − 74H	121.360	3C − 8C − 11C − 75H	0.042
9C − 74H	1.085	8C − 11C − 75H	120.554	13C − 14C − 18C − 76H	178.875
11C − 75H	1.085	14C − 18C − 76H	124.210	2C − 20C − 21C − 77H	-0.475
18C − 76H	1.082	20C − 21C − 77H	119.737	2C − 20C − 22C − 78H	-1.628
21C − 77H	1.085	20C − 22C − 78H	119.797	20C − 21C − 23C − 79H	-179.586
22C − 78H	1.086	21C − 23C − 79H	120.846	20C − 22C − 24C − 80H	177.422
23C − 79H	1.085	22C − 24C − 80H	118.090	17C − 26C − 27C − 81H	0.582
24C − 80H	1.088	26C − 27C − 81H	119.829	17C − 26C − 28C − 82H	0.390
27C − 81H	1.085	26C − 28C − 82H	119.733	26C − 27C − 29C − 83H	-179.856
28C − 82H	1.086	27C − 29C − 83H	120.870	26C − 28C − 30C − 84H	-179.846
29C − 83H	1.085	28C − 30C − 84H	120.057	6C − 32C − 33C − 85H	4.085
30C − 84H	1.084	32C − 33C − 85H	120.151	6C − 32C − 34C − 86H	-4.972
33C − 85H	1.084	32C − 34C − 86H	119.220	33C − 35C − 37C − 87H	-179.684
34C − 86H	1.087	35C − 37C − 87H	120.020	6C − 40C − 41C − 88H	3.971
37C − 87H	1.087	40C − 41C − 88H	119.395	41C − 42C − 43C − 89H	-179.497
41C − 88H	1.086	42C − 43C − 89H	119.613	42C − 43C − 44C − 90H	-179.542
43C − 89H	1.087	43C − 44C − 90H	119.955	43C − 44C − 45C − 91H	-178.618
44C − 90H	1.087	44C − 45C − 91H	119.700	41C − 42C − 46C − 92H	148.292
45C − 91H	1.085	42C − 46C − 92H	109.464	41C − 42C − 46C − 93H	31.808
46C − 92H	1.098	42C − 46C − 93H	109.697	15C − 19C − 47C − 94H	3.810
46C − 93H	1.097	19C − 47C − 94H	120.078	19C − 47C − 48C − 95H	-179.558
47C − 94H	1.085	47C − 48C − 95H	119.584	47C − 48C − 49C − 96H	-179.788
48C − 95H	1.087	48C − 49C − 96H	119.318	15C − 19C − 51C − 97H	-4.918
49C − 96H	1.085	19C − 51C − 97H	119.254	15C − 52C − 53C − 98H	-4.860
51C − 97H	1.087	52C − 53C − 98H	118.612	53C − 54C − 55C − 99H	179.787
53C − 98H	1.084	54C − 55C − 99H	119.431	15C − 52C − 57C − 100H	4.059
55C − 99H	1.088	52C − 57C − 100H	120.288	49C − 50C − 58C − 101H	-117.375
57C − 100H	1.084	50C − 58C − 101H	108.428	49C − 50C − 58C − 102H	129.041
58C − 101H	1.100	50C − 58C − 102H	108.317	25C − 38C − 60O − 103H	11.337
58C − 102H	1.099	38C − 60O − 103H	110.064	31C − 39C − 62O − 104H	179.970
60O − 103H	0.967	39C − 62O − 104H	105.399	42C − 46C − 63C − 105H	-56.661
62O − 104H	0.971	46C − 63C − 105H	108.993	42C − 46C − 63C − 106H	58.654
63C − 105H	1.098	46C − 63C − 106H	109.053	46C − 63C − 64C − 107H	57.873
63C − 106H	1.098	63C − 64C − 107H	109.269	46C − 63C − 64C − 108H	-57.688
64C − 107H	1.100	63C − 64C − 108H	109.368	63C − 64C − 65C − 109H	-57.252
64C − 108H	1.099	64C − 65C − 109H	109.287	63C − 64C − 65C − 110H	58.253
65C − 109H	1.100	64C − 65C − 110H	109.300	64C − 65C − 66C − 111H	57.782
65C − 110H	1.099	65C − 66C − 111H	109.198	64C − 65C − 66C − 112H	-57.693
66C − 111H	1.099	65C − 66C − 112H	109.223	65C − 66C − 67C − 113H	59.875
66C − 112H	1.099	66C − 67C − 113H	111.183	65C − 66C − 67C − 114H	-59.815
67C − 113H	1.096	66C − 67C − 114H	111.191	65C − 66C − 67C − 115H	-179.977
67C − 114H	1.096	66C − 67C − 115H	111.498	50C − 58C − 68C − 116H	-59.612

67C − 115H	1.095	58C − 68C − 116H	109.742	50C − 58C − 68C − 117H	56.753
68C − 116H	1.098	58C − 68C − 117H	109.639	58C − 68C − 69C − 118H	57.342
68C − 117H	1.098	68C − 69C − 118H	109.298	58C − 68C − 69C − 119H	-58.204
69C − 118H	1.099	68C − 69C − 119H	109.312	68C − 69C − 70C − 120H	-57.831
69C − 119H	1.099	69C − 70C − 120H	109.293	68C − 69C − 70C − 121H	57.698
70C − 120H	1.100	69C − 70C − 121H	109.320	69C − 70C − 71C − 122H	57.527
70C − 121H	1.099	70C − 71C − 122H	109.205	69C − 70C − 71C − 123H	-57.942
71C − 122H	1.099	70C − 71C − 123H	109.219	70C − 71C − 72C − 124H	-60.017
71C − 123H	1.099	71C − 72C − 124H	111.190	70C − 71C − 72C − 125H	179.856
72C − 124H	1.096	71C − 72C − 125H	111.468	70C − 71C − 72C − 126H	59.717
72C − 125H	1.095	71C − 72C − 126H	111.204	52C − 53C − 54C − 127C	179.816
72C − 126H	1.096	53C − 54C − 127C	122.927	53C − 54C − 127C − 128C	-0.997
54C − 127C	1.521	54C − 127C − 128C	116.967	54C − 127C − 128C − 129C	-179.396
127C − 128C	1.532	127C − 128C − 129C	112.672	127C − 128C − 129C − 130C	179.647
128C − 129C	1.534	128C − 129C − 130C	113.452	128C − 129C − 130C − 131C	-179.918
129C − 130C	1.534	129C − 130C − 131C	113.554	129C − 130C − 131C − 132C	179.599
130C − 131C	1.534	130C − 131C − 132C	113.230	53C − 54C − 127C − 133H	122.324
131C − 132C	1.532	54C − 127C − 133H	108.279	53C − 54C − 127C − 134H	-124.215
127C − 133H	1.099	54C − 127C − 134H	108.270	54C − 127C − 128C − 135H	58.852
127C − 134H	1.099	127C − 128C − 135H	109.694	54C − 127C − 128C − 136H	-57.487
128C − 135H	1.099	127C − 128C − 136H	109.716	127C − 128C − 129C − 137H	-58.067
128C − 136H	1.098	128C − 129C − 137H	109.323	127C − 128C − 129C − 138H	57.489
129C − 137H	1.099	128C − 129C − 138H	109.268	128C − 129C − 130C − 139H	57.835
129C − 138H	1.099	129C − 130C − 139H	109.326	128C − 129C − 130C − 140H	-57.704
130C − 139H	1.100	129C − 130C − 140H	109.292	129C − 130C − 131C − 141H	-58.104
130C − 140H	1.100	130C − 131C − 141H	109.219	129C − 130C − 131C − 142H	57.379
131C − 141H	1.098	130C − 131C − 142H	109.198	130C − 131C − 132C − 143H	-59.794
131C − 142H	1.099	131C − 132C − 143H	111.174	130C − 131C − 132C − 144H	59.953
132C − 143H	1.096	131C − 132C − 144H	111.230	130C − 131C − 132C − 145H	-179.913
132C − 144H	1.096	131C − 132C − 145H	111.459	32C − 34C − 36C − 146C	-178.126
132C − 145H	1.095	34C − 36C − 146C	120.569	34C − 36C − 146C − 147C	87.723
36C − 146C	1.514	36C − 146C − 147C	112.993	36C − 146C − 147C − 148C	-179.642
146C − 147C	1.542	146C − 147C − 148C	113.289	146C − 147C − 148C − 149C	179.558
147C − 148C	1.533	147C − 148C − 149C	113.407	147C − 148C − 149C − 150C	-179.847
148C − 149C	1.534	148C − 149C − 150C	113.603	148C − 149C − 150C − 151C	179.888
149C − 150C	1.534	149C − 150C − 151C	113.234	34C − 36C − 146C − 152H	-150.538
150C − 151C	1.532	36C − 146C − 152H	109.575	34C − 36C − 146C − 153H	-34.031
146C − 152H	1.097	36C − 146C − 153H	109.625	36C − 146C − 147C − 154H	57.826
146C − 153H	1.097	146C − 147C − 154H	109.047	36C − 146C − 147C − 155H	-57.349
147C − 154H	1.098	146C − 147C − 155H	108.961	146C − 147C − 148C − 156H	-58.188
147C − 155H	1.099	147C − 148C − 156H	109.314	146C − 147C − 148C − 157H	57.342
148C − 156H	1.100	147C − 148C − 157H	109.299	147C − 148C − 149C − 158H	57.855
148C − 157H	1.100	148C − 149C − 158H	109.317	147C − 148C − 149C − 159H	-57.634
149C − 158H	1.099	148C − 149C − 159H	109.295	148C − 149C − 150C − 160H	-57.822
149C − 159H	1.100	149C − 150C − 160H	109.211	148C − 149C − 150C − 161H	57.637
150C − 160H	1.099	149C − 150C − 161H	109.202	149C − 150C − 151C − 162H	59.738
150C − 161H	1.099	150C − 151C − 162H	111.207	149C − 150C − 151C − 163H	179.871
151C − 162H	1.096	150C − 151C − 163H	111.452	149C − 150C − 151C − 164H	-60.000
151C − 163H	1.095	150C − 151C − 164H	111.222	54C − 55C − 56C − 165H	179.974
151C − 164H	1.096	55C − 56C − 165H	119.962	32C − 33C − 35C − 166H	-179.349
56C − 165H	1.086	33C − 35C − 166H	119.526		
35C − 166H	1.087				

Table S-2 Bond lengths, bond angles and dihedral angles of optimized geometry for the IDT dye molecule are calculated at DFT/PBE0/6-31G(d,p).

Bond length (Å)		Bond angle (°)		Dihedral angle (°)	
1S − 2C	1.768	2C − 1S − 3C	90.891	3C − 1S − 2C − 4C	-0.289
1S − 3C	1.726	1S − 2C − 4C	110.952	1S − 2C − 4C − 5C	0.408
2C − 4C	1.401	2C − 4C − 5C	112.798	2C − 4C − 5C − 6C	-178.742
4C − 5C	1.389	4C − 5C − 6C	136.156	4C − 5C − 6C − 7C	179.469
5C − 6C	1.520	5C − 6C − 7C	100.226	2C − 1S − 3C − 8C	-179.708
6C − 7C	1.537	1S − 3C − 8C	136.550	5C − 6C − 7C − 9C	178.086
3C − 8C	1.410	6C − 7C − 9C	128.158	6C − 7C − 9C − 10C	-179.501
7C − 9C	1.370	7C − 9C − 10C	117.900	1S − 3C − 8C − 11C	1.053
9C − 10C	1.415	3C − 8C − 11C	131.902	3C − 8C − 11C − 12C	179.703
8C − 11C	1.414	8C − 11C − 12C	117.895	7C − 9C − 10C − 13C	179.971
11C − 12C	1.371	9C − 10C − 13C	131.942	9C − 10C − 13C − 14C	-178.866
10C − 13C	1.410	10C − 13C − 14C	111.552	10C − 13C − 14C − 15C	-1.047
13C − 14C	1.404	13C − 14C − 15C	110.333	9C − 10C − 13C − 16S	1.282
14C − 15C	1.519	10C − 13C − 16S	136.488	10C − 13C − 16S − 17C	179.778
13C − 16S	1.724	13C − 16S − 17C	90.916	10C − 13C − 14C − 18C	-179.649
16S − 17C	1.767	13C − 14C − 18C	113.323	13C − 14C − 15C − 19C	115.923
14C − 18C	1.388	14C − 15C − 19C	113.391	3C − 1S − 2C − 20C	179.691
15C − 19C	1.533	1S − 2C − 20C	120.682	1S − 2C − 20C − 21C	178.798
2C − 20C	1.437	2C − 20C − 21C	121.067	1S − 2C − 20C − 22C	-1.642
20C − 21C	1.417	2C − 20C − 22C	121.651	2C − 20C − 21C − 23C	-179.898
20C − 22C	1.414	20C − 21C − 23C	121.172	2C − 20C − 22C − 24C	179.422
21C − 23C	1.378	20C − 22C − 24C	121.223	20C − 22C − 24C − 25C	0.103
22C − 24C	1.382	22C − 24C − 25C	120.960	13C − 16S − 17C − 26C	179.947
24C − 25C	1.403	16S − 17C − 26C	120.709	16S − 17C − 26C − 27C	179.314
17C − 26C	1.438	17C − 26C − 27C	120.854	16S − 17C − 26C − 28C	-0.638
26C − 27C	1.416	17C − 26C − 28C	121.552	17C − 26C − 27C − 29C	-179.959
26C − 28C	1.415	26C − 27C − 29C	120.985	17C − 26C − 28C − 30C	179.964
27C − 29C	1.379	26C − 28C − 30C	121.285	26C − 28C − 30C − 31C	-0.002
28C − 30C	1.381	28C − 30C − 31C	120.336	4C − 5C − 6C − 32C	60.584
30C − 31C	1.402	5C − 6C − 32C	107.788	5C − 6C − 32C − 33C	93.685
6C − 32C	1.534	6C − 32C − 33C	121.830	5C − 6C − 32C − 34C	-81.528
32C − 33C	1.397	6C − 32C − 34C	119.408	6C − 32C − 33C − 35C	-175.716
32C − 34C	1.397	32C − 33C − 35C	119.993	6C − 32C − 34C − 36C	175.875
33C − 35C	1.390	32C − 34C − 36C	122.124	32C − 33C − 35C − 37C	0.207
34C − 36C	1.397	33C − 35C − 37C	120.742	22C − 24C − 25C − 38C	179.567
35C − 37C	1.392	24C − 25C − 38C	123.961	28C − 30C − 31C − 39C	-179.990
25C − 38C	1.483	30C − 31C − 39C	122.671	4C − 5C − 6C − 40C	-65.273
31C − 39C	1.472	5C − 6C − 40C	113.353	5C − 6C − 40C − 41C	-23.546
6C − 40C	1.533	6C − 40C − 41C	120.573	6C − 40C − 41C − 42C	-176.180
40C − 41C	1.396	40C − 41C − 42C	121.730	40C − 41C − 42C − 43C	0.313
41C − 42C	1.398	41C − 42C − 43C	118.497	41C − 42C − 43C − 44C	0.023
42C − 43C	1.396	42C − 43C − 44C	120.462	42C − 43C − 44C − 45C	-0.224
43C − 44C	1.392	43C − 44C − 45C	120.406	40C − 41C − 42C − 46C	-177.534
44C − 45C	1.391	41C − 42C − 46C	120.420	14C − 15C − 19C − 47C	-22.987
42C − 46C	1.506	15C − 19C − 47C	120.851	15C − 19C − 47C − 48C	-176.343
19C − 47C	1.398	19C − 47C − 48C	119.977	19C − 47C − 48C − 49C	0.354
47C − 48C	1.389	47C − 48C − 49C	120.690	47C − 48C − 49C − 50C	-0.033
48C − 49C	1.393	48C − 49C − 50C	120.421	14C − 15C − 19C − 51C	161.151
49C − 50C	1.396	15C − 19C − 51C	120.313	13C − 14C − 15C − 52C	-118.243
19C − 51C	1.395	14C − 15C − 52C	107.812	14C − 15C − 52C − 53C	-80.971
15C − 52C	1.534	15C − 52C − 53C	118.990	15C − 52C − 53C − 54C	176.261

52C − 53C	1.402	52C − 53C − 54C	121.789	52C − 53C − 54C − 55C	-0.089
53C − 54C	1.393	53C − 54C − 55C	118.169	53C − 54C − 55C − 56C	-0.155
54C − 55C	1.401	54C − 55C − 56C	120.707	14C − 15C − 52C − 57C	94.734
55C − 56C	1.387	15C − 52C − 57C	121.978	48C − 49C − 50C − 58C	179.895
52C − 57C	1.393	49C − 50C − 58C	123.001	24C − 25C − 38C − 59O	-163.215
50C − 58C	1.512	25C − 38C − 59O	123.344	24C − 25C − 38C − 60O	16.864
38C − 59O	1.209	25C − 38C − 60O	116.897	30C − 31C − 39C − 61O	179.936
38C − 60O	1.354	31C − 39C − 61O	124.883	30C − 31C − 39C − 62O	-0.062
39C − 61O	1.215	31C − 39C − 62O	113.196	41C − 42C − 46C − 63C	86.673
39C − 62O	1.350	42C − 46C − 63C	112.659	42C − 46C − 63C − 64C	-179.761
46C − 63C	1.533	46C − 63C − 64C	113.157	46C − 63C − 64C − 65C	-179.621
63C − 64C	1.525	63C − 64C − 65C	113.309	63C − 64C − 65C − 66C	-179.763
64C − 65C	1.525	64C − 65C − 66C	113.518	64C − 65C − 66C − 67C	-179.745
65C − 66C	1.526	65C − 66C − 67C	113.074	49C − 50C − 58C − 68C	2.927
66C − 67C	1.524	50C − 58C − 68C	116.548	50C − 58C − 68C − 69C	179.326
58C − 68C	1.524	58C − 68C − 69C	112.625	58C − 68C − 69C − 70C	179.895
68C − 69C	1.526	68C − 69C − 70C	113.345	68C − 69C − 70C − 71C	-179.806
69C − 70C	1.525	69C − 70C − 71C	113.523	69C − 70C − 71C − 72C	179.987
70C − 71C	1.526	70C − 71C − 72C	113.076	1S − 2C − 4C − 73H	-179.495
71C − 72C	1.524	2C − 4C − 73H	122.854	6C − 7C − 9C − 74H	0.031
4C − 73H	1.083	7C − 9C − 74H	121.307	3C − 8C − 11C − 75H	0.208
9C − 74H	1.086	8C − 11C − 75H	120.774	13C − 14C − 18C − 76H	179.410
11C − 75H	1.086	14C − 18C − 76H	124.320	2C − 20C − 21C − 77H	0.047
18C − 76H	1.083	20C − 21C − 77H	119.781	2C − 20C − 22C − 78H	-1.382
21C − 77H	1.085	20C − 22C − 78H	119.829	20C − 21C − 23C − 79H	-179.428
22C − 78H	1.087	21C − 23C − 79H	121.024	20C − 22C − 24C − 80H	177.457
23C − 79H	1.085	22C − 24C − 80H	118.053	17C − 26C − 27C − 81H	-0.050
24C − 80H	1.089	26C − 27C − 81H	119.872	17C − 26C − 28C − 82H	-0.097
27C − 81H	1.085	26C − 28C − 82H	119.759	26C − 27C − 29C − 83H	179.960
28C − 82H	1.087	27C − 29C − 83H	121.049	26C − 28C − 30C − 84H	179.991
29C − 83H	1.085	28C − 30C − 84H	120.193	6C − 32C − 33C − 85H	4.186
30C − 84H	1.085	32C − 33C − 85H	120.098	6C − 32C − 34C − 86H	-5.005
33C − 85H	1.085	32C − 34C − 86H	119.112	33C − 35C − 37C − 87H	179.872
34C − 86H	1.088	35C − 37C − 87H	119.459	6C − 40C − 41C − 88H	3.677
37C − 87H	1.085	40C − 41C − 88H	119.336	41C − 42C − 43C − 89H	179.895
41C − 88H	1.088	42C − 43C − 89H	119.533	42C − 43C − 44C − 90H	179.882
43C − 89H	1.088	43C − 44C − 90H	119.943	43C − 44C − 45C − 91H	-178.975
44C − 90H	1.087	44C − 45C − 91H	119.976	41C − 42C − 46C − 92H	-34.989
45C − 91H	1.086	42C − 46C − 92H	109.615	41C − 42C − 46C − 93H	-151.562
46C − 92H	1.097	42C − 46C − 93H	109.612	15C − 19C − 47C − 94H	3.797
46C − 93H	1.097	19C − 47C − 94H	119.974	19C − 47C − 48C − 95H	-179.632
47C − 94H	1.086	47C − 48C − 95H	119.600	47C − 48C − 49C − 96H	-179.836
48C − 95H	1.086	48C − 49C − 96H	119.358	15C − 19C − 51C − 97H	-5.027
49C − 96H	1.085	19C − 51C − 97H	119.221	15C − 52C − 53C − 98H	-4.805
51C − 97H	1.088	52C − 53C − 98H	118.612	53C − 54C − 55C − 99H	179.774
53C − 98H	1.086	54C − 55C − 99H	119.366	15C − 52C − 57C − 100H	3.907
55C − 99H	1.088	52C − 57C − 100H	120.153	49C − 50C − 58C − 101H	-120.214
57C − 100H	1.085	50C − 58C − 101H	108.416	49C − 50C − 58C − 102H	126.175
58C − 101H	1.099	50C − 58C − 102H	108.346	25C − 38C − 60O − 103H	10.990
58C − 102H	1.099	38C − 60O − 103H	109.752	31C − 39C − 62O − 104H	179.979
60O − 103H	0.963	39C − 62O − 104H	105.305	42C − 46C − 63C − 105H	-57.454
62O − 104H	0.968	46C − 63C − 105H	108.979	42C − 46C − 63C − 106H	57.808
63C − 105H	1.098	46C − 63C − 106H	109.035	46C − 63C − 64C − 107H	58.164
63C − 106H	1.098	63C − 64C − 107H	109.310	46C − 63C − 64C − 108H	-57.386
64C − 107H	1.099	63C − 64C − 108H	109.372	63C − 64C − 65C − 109H	-57.509

64C − 108H	1.100	64C − 65C − 109H	109.337	63C − 64C − 65C − 110H	57.998
65C − 109H	1.099	64C − 65C − 110H	109.321	64C − 65C − 66C − 111H	57.985
65C − 110H	1.099	65C − 66C − 111H	109.170	64C − 65C − 66C − 112H	-57.431
66C − 111H	1.098	65C − 66C − 112H	109.198	65C − 66C − 67C − 113H	-59.696
66C − 112H	1.098	66C − 67C − 113H	111.151	65C − 66C − 67C − 114H	-179.889
67C − 113H	1.096	66C − 67C − 114H	111.596	65C − 66C − 67C − 115H	59.925
67C − 114H	1.094	66C − 67C − 115H	111.147	50C − 58C − 68C − 116H	-58.957
67C − 115H	1.096	58C − 68C − 116H	109.730	50C − 58C − 68C − 117H	57.408
68C − 116H	1.098	58C − 68C − 117H	109.670	58C − 68C − 69C − 118H	57.694
68C − 117H	1.099	68C − 69C − 118H	109.328	58C − 68C − 69C − 119H	-57.852
69C − 118H	1.099	68C − 69C − 119H	109.366	68C − 69C − 70C − 120H	-57.578
69C − 119H	1.099	69C − 70C − 120H	109.330	68C − 69C − 70C − 121H	57.920
70C − 120H	1.099	69C − 70C − 121H	109.346	69C − 70C − 71C − 122H	57.700
70C − 121H	1.099	70C − 71C − 122H	109.183	69C − 70C − 71C − 123H	-57.703
71C − 122H	1.098	70C − 71C − 123H	109.205	70C − 71C − 72C − 124H	-59.741
71C − 123H	1.098	71C − 72C − 124H	111.140	70C − 71C − 72C − 125H	-179.924
72C − 124H	1.096	71C − 72C − 125H	111.598	70C − 71C − 72C − 126H	59.876
72C − 125H	1.094	71C − 72C − 126H	111.155	52C − 53C − 54C − 127C	179.588
72C − 126H	1.096	53C − 54C − 127C	122.755	53C − 54C − 127C − 128C	0.409
54C − 127C	1.512	54C − 127C − 128C	116.789	54C − 127C − 128C − 129C	-179.732
127C − 128C	1.524	127C − 128C − 129C	112.493	127C − 128C − 129C − 130C	179.765
128C − 129C	1.525	128C − 129C − 130C	113.433	128C − 129C − 130C − 131C	-179.969
129C − 130C	1.525	129C − 130C − 131C	113.431	129C − 130C − 131C − 132C	179.745
130C − 131C	1.525	130C − 131C − 132C	113.088	53C − 54C − 127C − 133H	123.740
131C − 132C	1.524	54C − 127C − 133H	108.290	53C − 54C − 127C − 134H	-122.772
127C − 133H	1.099	54C − 127C − 134H	108.286	54C − 127C − 128C − 135H	58.527
127C − 134H	1.099	127C − 128C − 135H	109.761	54C − 127C − 128C − 136H	-57.848
128C − 135H	1.099	127C − 128C − 136H	109.780	127C − 128C − 129C − 137H	-57.946
128C − 136H	1.099	128C − 129C − 137H	109.340	127C − 128C − 129C − 138H	57.549
129C − 137H	1.099	128C − 129C − 138H	109.282	128C − 129C − 130C − 139H	57.802
129C − 138H	1.099	129C − 130C − 139H	109.387	128C − 129C − 130C − 140H	-57.733
130C − 139H	1.099	129C − 130C − 140H	109.349	129C − 130C − 131C − 141H	-57.942
130C − 140H	1.099	130C − 131C − 141H	109.189	129C − 130C − 131C − 142H	57.446
131C − 141H	1.098	130C − 131C − 142H	109.166	130C − 131C − 132C − 143H	-59.738
131C − 142H	1.098	131C − 132C − 143H	111.136	130C − 131C − 132C − 144H	59.895
132C − 143H	1.096	131C − 132C − 144H	111.168	130C − 131C − 132C − 145H	-179.924
132C − 144H	1.096	131C − 132C − 145H	111.588	32C − 34C − 36C − 146C	178.924
132C − 145H	1.094	34C − 36C − 146C	119.002	34C − 36C − 146C − 147C	165.732
36C − 146C	1.512	36C − 146C − 147C	116.384	36C − 146C − 147C − 148C	-175.832
146C − 147C	1.525	146C − 147C − 148C	112.592	146C − 147C − 148C − 149C	-179.416
147C − 148C	1.526	147C − 148C − 149C	113.340	147C − 148C − 149C − 150C	-179.836
148C − 149C	1.525	148C − 149C − 150C	113.497	148C − 149C − 150C − 151C	-179.995
149C − 150C	1.526	149C − 150C − 151C	113.077	34C − 36C − 146C − 152H	-71.082
150C − 151C	1.523	36C − 146C − 152H	108.592	34C − 36C − 146C − 153H	42.654
146C − 152H	1.100	36C − 146C − 153H	108.318	36C − 146C − 147C − 154H	62.611
146C − 153H	1.098	146C − 147C − 154H	109.890	36C − 146C − 147C − 155H	-53.774
147C − 154H	1.098	146C − 147C − 155H	109.532	146C − 147C − 148C − 156H	-57.159
147C − 155H	1.098	147C − 148C − 156H	109.360	146C − 147C − 148C − 157H	58.383
148C − 156H	1.099	147C − 148C − 157H	109.320	147C − 148C − 149C − 158H	57.914
148C − 157H	1.099	148C − 149C − 158H	109.353	147C − 148C − 149C − 159H	-57.599
149C − 158H	1.100	148C − 149C − 159H	109.329	148C − 149C − 150C − 160H	-57.686
149C − 159H	1.099	149C − 150C − 160H	109.191	148C − 149C − 150C − 161H	57.711
150C − 160H	1.098	149C − 150C − 161H	109.182	149C − 150C − 151C − 162H	59.765
150C − 161H	1.098	150C − 151C − 162H	111.153	149C − 150C − 151C − 163H	179.961
151C − 162H	1.096	150C − 151C − 163H	111.591	149C − 150C − 151C − 164H	-59.866

151C − 163H	1.094	150C − 151C − 164H	111.150	54C − 55C − 56C − 165H	-179.970
151C − 164H	1.096	55C − 56C − 165H	119.946	32C − 33C − 35C − 166H	-179.904
56C − 165H	1.086	33C − 35C − 166H	119.546		
35C − 166H	1.087				

Table S-3 The optimized Cartesian coordinates in units angstrom of IDT dye molecule for the B3LYP hyrid and PBE0 exchange-correlation functionals with 6-31G(d,p) basis set.

B3LYP/6-31G(d,p)				PBE0/6-31G(d,p)			
S	-3.07311996	2.01739456	-1.17510945	S	-2.54880696	2.30063552	-1.37169773
C	-4.73988491	1.47950082	-0.82607467	C	-4.24458748	1.87546613	-1.10871630
C	-2.44708183	0.47762583	-0.66199131	C	-2.04098643	0.77594189	-0.74263800
C	-4.74472408	0.16039338	-0.34590097	C	-4.35989756	0.59137257	-0.56022357
C	-3.46897320	-0.39361283	-0.25157647	C	-3.12889932	-0.01801231	-0.35313828
C	-2.88437013	-1.74584308	0.16055720	C	-2.64448170	-1.35996428	0.16991969
C	-1.37821780	-1.46679704	-0.06022535	C	-1.12524579	-1.17332504	0.03429031
C	-1.17202125	-0.12442629	-0.55040490	C	-0.81411169	0.12026295	-0.51479571
C	-0.31093218	-2.29704695	0.18130705	C	-0.13038073	-2.04676696	0.38664085
C	0.99240878	-1.80627408	-0.08640789	C	1.20919673	-1.64502588	0.17387732
C	0.13104075	0.36641123	-0.81639756	C	0.52497520	0.52364482	-0.72253612
C	1.19745220	-0.47277747	-0.59573362	C	1.51983964	-0.35843820	-0.38806542
C	2.26992907	-2.39364959	0.06425405	C	2.43732090	-2.29134480	0.42131411
C	3.29658970	-1.50425095	-0.29954872	C	3.52705663	-1.48135543	0.06571023
C	2.70485056	-0.18183428	-0.79122782	C	3.03915593	-0.16008508	-0.50334098
S	2.89306345	-3.92913881	0.58544267	S	2.94406410	-3.81707349	1.04351357
C	4.56510954	-3.36888973	0.30804381	C	4.64075646	-3.37413303	0.82611775
C	4.57223856	-2.04764234	-0.16645807	C	4.75686368	-2.08614424	0.28739505
C	3.08627652	1.02944987	0.08476882	C	3.43175412	1.05168737	0.34919248
C	-5.86161913	2.35806269	-1.04476788	C	-5.29294827	2.79838841	-1.44691425
C	-7.19655436	1.89929278	-0.87115523	C	-6.65597583	2.45630881	-1.26306576
C	-5.68837872	3.71143888	-1.43303052	C	-5.01149484	4.08331131	-1.96593896
C	-8.27523672	2.73633601	-1.07963355	C	-7.66305522	3.33885844	-1.58858555
C	-6.77505563	4.54281866	-1.64884690	C	-6.02678683	4.95934237	-2.29923874
C	-8.09250372	4.07228299	-1.48996903	C	-7.37322346	4.60162566	-2.13081668
C	5.68873544	-4.23388638	0.56941035	C	5.69028857	-4.28882709	1.18550977
C	7.02134647	-3.75763355	0.43648902	C	7.05103077	-3.94259029	0.99913189
C	5.51485176	-5.58485001	0.96776724	C	5.40726410	-5.56145005	1.73435042
C	8.10209459	-4.58228482	0.68456797	C	8.05955297	-4.81792686	1.34201614
C	6.59975339	-6.40873141	1.21553266	C	6.41991642	-6.43617751	2.07697850
C	7.91161004	-5.92053465	1.07776668	C	7.76118188	-6.07642254	1.88561687
C	-3.46305788	-2.81782647	-0.78946185	C	-3.21031645	-2.45212680	-0.74667528
C	-2.78334814	-3.23925890	-1.93802248	C	-2.48644965	-2.95089288	-1.83200224
C	-4.74838401	-3.32770176	-0.54919089	C	-4.52159870	-2.89550534	-0.55700281
C	-3.37577788	-4.15431661	-2.81081810	C	-3.06991642	-3.87612318	-2.69046035
C	-5.35804861	-4.24043945	-1.41649021	C	-5.12236083	-3.82521239	-1.40997082
C	-4.65131632	-4.65205988	-2.55530843	C	-4.37527736	-4.31242264	-2.48519547
C	-9.30475387	4.90873570	-1.69376874	C	-8.51398975	5.49144086	-2.45732964
C	9.10415547	-6.75340831	1.33012284	C	8.88044849	-6.96807319	2.23214324
C	-3.10406617	-2.09131097	1.64832636	C	-2.97276046	-1.58979941	1.64932385
C	-3.36255562	-1.09060709	2.59266956	C	-3.19045024	-0.50859734	2.50438917
C	-3.49114692	-1.37850889	3.95847047	C	-3.41360260	-0.68676959	3.87241185
C	-3.35080602	-2.70706901	4.37695699	C	-3.40948167	-1.98569730	4.38441802
C	-3.08841279	-3.71587597	3.45020083	C	-3.18707329	-3.07381340	3.54594969
C	-2.96560169	-3.41403027	2.09471029	C	-2.97054451	-2.88158105	2.18569757
C	-3.73685423	-0.27123232	4.96086898	C	-3.70014987	0.49650459	4.75870574
C	3.45503629	0.86026930	1.42699643	C	3.72610406	0.90702517	1.70796448
C	3.72220513	1.97107017	2.22338917	C	4.00566328	2.02709252	2.48070509
C	3.61995363	3.26292170	1.70309887	C	3.98939267	3.30102735	1.91799044

C	3.24569246	3.46078494	0.36924288	C	3.69176726	3.47233229	0.56497687
C	2.98594717	2.33062027	-0.42068460	C	3.41761796	2.33410317	-0.20081762
C	3.11379210	-0.00615587	-2.27075544	C	3.53708722	-0.06010417	-1.95049763
C	4.40773915	0.45648594	-2.57234776	C	4.85595559	0.35274080	-2.18845838
C	4.86726371	0.56091177	-3.88710720	C	5.39242052	0.39061323	-3.47323838
C	3.99673013	0.18765627	-4.92506943	C	4.57584077	-0.00027466	-4.54289296
C	2.71635722	-0.27451004	-4.64459112	C	3.27136866	-0.41567189	-4.32286548
C	2.27234074	-0.37581610	-3.32253329	C	2.74874453	-0.45018560	-3.03040046
C	3.10555990	4.83856023	-0.25969279	C	3.65549683	4.82769020	-0.10534689
O	-10.40634913	4.60192088	-1.28994633	O	-9.63681741	5.30903187	-2.04909465
O	-9.14383636	6.08163139	-2.37534459	O	-8.25355803	6.55322559	-3.25695871
O	10.25808203	-6.37509690	1.22431362	O	10.05548281	-6.69843177	2.08262673
O	8.80010853	-8.02624703	1.70475639	O	8.47904326	-8.15011229	2.74719076
C	-2.43439612	0.32952986	5.52791413	C	-5.18875491	0.85934744	4.79623806
C	-2.67991410	1.43385435	6.56314586	C	-5.49100254	2.05997389	5.68610638
C	-1.38754111	2.03555106	7.12945040	C	-6.97273154	2.41844304	5.73320861
C	-1.62778676	3.13226581	8.17494679	C	-7.27985030	3.62278386	6.61782575
C	-0.33184321	3.72788967	8.73438107	C	-8.76306856	3.96811225	6.66246280
C	3.52703745	6.03555890	0.59958920	C	4.03156300	6.02493275	0.75859242
C	3.37725141	7.37369941	-0.13588011	C	3.98089105	7.34195486	-0.00956682
C	3.78391899	8.58525580	0.71205835	C	4.35216416	8.55218508	0.84079659
C	3.63624493	9.92468195	-0.02101602	C	4.29828751	9.87206680	0.07777880
C	4.03942065	11.12975761	0.83470520	C	4.67060086	11.07400715	0.93673187
H	-5.65482867	-0.35782717	-0.07317744	H	-5.31410562	0.13487234	-0.32910983
H	-0.45211145	-3.29818043	0.57627818	H	-0.35780780	-3.01490705	0.82298568
H	0.27610472	1.38053957	-1.17493513	H	0.75317919	1.50537066	-1.12666659
H	5.48589391	-1.52313555	-0.41411738	H	5.71200225	-1.62567141	0.06808146
H	-7.37818064	0.87108599	-0.57711169	H	-6.91785030	1.48348858	-0.86010614
H	-4.68707854	4.11626083	-1.54698807	H	-3.98006201	4.39975483	-2.09590814
H	-9.29035421	2.38096958	-0.93872931	H	-8.70581936	3.07791797	-1.43820982
H	-6.58184836	5.58271668	-1.90343715	H	-5.75145898	5.95063584	-2.65473868
H	7.19983674	-2.72858363	0.14405302	H	7.31013659	-2.97628474	0.57939578
H	4.51290888	-5.98992175	1.07567101	H	4.37530204	-5.86304330	1.89317938
H	9.11766378	-4.21427197	0.58421289	H	9.10266743	-4.55392492	1.19904576
H	6.44219727	-7.43831687	1.51638747	H	6.18266678	-7.40786399	2.49680188
H	-1.78990653	-2.86165061	-2.15221594	H	-1.46929345	-2.61626036	-2.00762744
H	-5.28225778	-3.02035577	0.34619812	H	-5.09126274	-2.51701645	0.28947434
H	-5.10261337	-5.36816954	-3.23781160	H	-4.81090784	-5.03370872	-3.16950242
H	-3.47348657	-0.06172885	2.26244353	H	-3.18468853	0.50063989	2.09928638
H	-3.45518256	-2.95221939	5.43116783	H	-3.57963382	-2.14366263	5.44690456
H	-2.98835327	-4.74544545	3.78272467	H	-3.18376935	-4.08095295	3.95371907
H	-2.78372279	-4.21083155	1.38074878	H	-2.81423537	-3.73694625	1.53487466
H	-4.34203949	-0.65720096	5.79113605	H	-3.12780743	1.36528070	4.40976857
H	-4.32492603	0.52784760	4.49244566	H	-3.35510289	0.28487023	5.77862424
H	3.53526053	-0.13673025	1.84735492	H	3.73831170	-0.08099912	2.15820705
H	4.01424455	1.82990218	3.26034551	H	4.23954342	1.90702063	3.53490176
H	3.83662984	4.11186965	2.34274561	H	4.21375373	4.16096710	2.54119188
H	2.71355070	2.47606910	-1.46269962	H	3.20526032	2.45503059	-1.26110542
H	5.05649565	0.75338022	-1.75578211	H	5.46303277	0.66594487	-1.34449986
H	4.33177988	0.26390450	-5.95698401	H	4.97386950	0.02530764	-5.55496133
H	1.27170213	-0.74020089	-3.11997500	H	1.72742946	-0.77923697	-2.86894047
H	2.05842657	4.97583820	-0.56635121	H	2.64681494	4.98682516	-0.51266626
H	3.68244906	4.85154990	-1.19505357	H	4.31781201	4.79790031	-0.98202731
H	-8.26853485	6.10998984	-2.78454986	H	-7.37173939	6.46739277	-3.63519901
H	9.65495194	-8.46671115	1.83886137	H	9.29382472	-8.63860480	2.93071685
H	-1.83729730	-0.47387568	5.97983695	H	-5.53311669	1.06129318	3.77295639
H	-1.83194948	0.72555267	4.69962468	H	-5.76129749	-0.01206850	5.14166825
H	-3.28459199	1.03007241	7.38794269	H	-4.91736510	2.92843652	5.33209267
H	-3.28382070	2.23213799	6.10844317	H	-5.13309079	1.85743843	6.70586560
H	-0.78016558	1.23566551	7.57692749	H	-7.33181286	2.61700586	4.71333509

H	-0.78626157	2.44593017	6.30552528	H	-7.54571863	1.55079340	6.09061958
H	-2.22736747	2.72114429	8.99849359	H	-6.71058618	4.48992005	6.25687368
H	-2.23522609	3.93110719	7.72811158	H	-6.91651799	3.42547371	7.63552948
H	0.27303806	4.17795783	7.93871513	H	-9.14506537	4.20072356	5.66233611
H	0.28111666	2.95881517	9.21833229	H	-8.95564749	4.83553509	7.30137749
H	-0.53577201	4.50617034	9.47707197	H	-9.35234706	3.13072682	7.05255322
H	2.92579468	6.06276205	1.51825317	H	3.35502734	6.08642336	1.62182643
H	4.57081015	5.91175687	0.91849950	H	5.04093666	5.88276987	1.16836628
H	2.33458482	7.49368707	-0.46316697	H	2.97193388	7.48374547	-0.42252027
H	3.98170966	7.35361898	-1.05400269	H	4.65576907	7.28508825	-0.87559558
H	3.17825140	8.60634552	1.62950210	H	3.67897226	8.60773795	1.70830889
H	4.82617925	8.46561665	1.04110477	H	5.36209671	8.41223680	1.25219935
H	2.59542855	10.04255554	-0.35217479	H	3.28885028	10.01093768	-0.33229260
H	4.24419787	9.90519452	-0.93586603	H	4.97077159	9.81611292	-0.78888393
H	3.42297416	11.19794728	1.73836406	H	3.99392119	11.17271378	1.79278305
H	3.92538731	12.06881423	0.28338802	H	4.62274672	12.00689065	0.36658032
H	5.08529600	11.05685794	1.15433487	H	5.68802078	10.97774001	1.33176674
C	6.25942722	1.06169349	-4.23887967	C	6.80809005	0.84047490	-3.75573710
C	7.16162009	1.48236163	-3.07374756	C	7.65048192	1.25200667	-2.55462712
C	8.53450130	1.98395237	-3.54006957	C	9.05579597	1.69337640	-2.95114496
C	9.44935229	2.41800531	-2.38809712	C	9.91623601	2.11567536	-1.76484770
C	10.82205152	2.92185251	-2.85189094	C	11.32132221	2.55774865	-2.16151081
C	11.72604464	3.36252383	-1.69623153	C	12.17191912	2.98369664	-0.97144306
H	6.77058038	0.28020997	-4.81911792	H	7.32536383	0.03388559	-4.29434760
H	6.15598847	1.91030303	-4.93002196	H	6.76837149	1.67940307	-4.46501545
H	7.30203838	0.63448768	-2.38940640	H	7.72189730	0.41474353	-1.84654390
H	6.66836715	2.27045254	-2.48901739	H	7.15315098	2.06899856	-2.01410107
H	9.03178260	1.19474960	-4.12167232	H	9.55559875	0.87598784	-3.49017052
H	8.39686536	2.82780938	-4.23119576	H	8.98674633	2.52686410	-3.66474280
H	9.58800721	1.57489445	-1.69604708	H	9.98652525	1.28311315	-1.05026348
H	8.95160960	3.20730861	-1.80657474	H	9.41714720	2.93362165	-1.22572030
H	11.32198749	2.13098194	-3.42743239	H	11.82003769	1.73834674	-2.69645413
H	10.68281800	3.76056008	-3.54778283	H	11.24958726	3.38658017	-2.87873142
H	11.26742328	4.17642652	-1.12301872	H	11.71240737	3.82296555	-0.43761199
H	11.91381684	2.53571012	-1.00171873	H	12.28899784	2.16315806	-0.25493297
H	12.69601304	3.71756861	-2.05937785	H	13.17300707	3.29682594	-1.28355596
C	-6.76255038	-4.73732280	-1.14807208	C	-6.53781970	-4.27466452	-1.12439625
C	-7.84976652	-3.82818843	-1.75642979	C	-7.25397506	-5.01369921	-2.24926261
C	-9.27551719	-4.32057679	-1.48112737	C	-8.70508105	-5.33697137	-1.90729917
C	-10.35931686	-3.41247428	-2.07585394	C	-9.43391799	-6.08916598	-3.01578590
C	-11.78773962	-3.89898308	-1.79986456	C	-10.88663628	-6.41082341	-2.67912736
C	-12.86321183	-2.98461369	-2.39511305	C	-11.60541175	-7.16217572	-3.79262208
H	-6.87745090	-5.75097975	-1.55230797	H	-6.52905594	-4.91311933	-0.22893549
H	-6.92593052	-4.81362635	-0.06561522	H	-7.12991782	-3.39313145	-0.84352753
H	-7.68682856	-3.75019112	-2.83963181	H	-6.72566196	-5.94914679	-2.47748110
H	-7.72781815	-2.81112723	-1.35941779	H	-7.21959664	-4.40938910	-3.16595182
H	-9.39281568	-5.33761617	-1.88216910	H	-8.73805964	-5.93033719	-0.98230088
H	-9.42759575	-4.40479004	-0.39543971	H	-9.24318060	-4.40415236	-1.68638568
H	-10.20834318	-3.32907702	-3.16165407	H	-8.89751271	-7.02340084	-3.23581403
H	-10.24042777	-2.39510248	-1.67613650	H	-9.39896843	-5.49683735	-3.94134317
H	-11.90739585	-4.91496334	-2.20062603	H	-10.92050341	-7.00207563	-1.75405214
H	-11.93767823	-3.98249520	-0.71473654	H	-11.42156685	-5.47695452	-2.45989651
H	-12.75970974	-2.90710306	-3.48348504	H	-11.11043830	-8.11520500	-4.01004489
H	-13.86981941	-3.35966104	-2.18314236	H	-12.64397936	-7.38078895	-3.52567941
H	-12.79328831	-1.97072685	-1.98501960	H	-11.61662274	-6.57875416	-4.71995252
H	2.05251320	-0.55964388	-5.45606070	H	2.64926636	-0.71653894	-5.16126366
H	-2.83281328	-4.48125762	-3.69331477	H	-2.49960542	-4.26052961	-3.53161690