

RuN₄^{HS}:

1.0000000000000000

17.0433999999999983	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	9.839999999999999	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	20.000000000000000

C	N	Ru
58	4	1

Selective dynamics

Direct

0.0400636500000005	0.1854374099999987	0.2307176799999979
0.0400829812308406	0.4345194836335483	0.2328330420437394
0.1652041222085168	0.0600498181438656	0.2292216603977094
0.1666961432480790	0.3104828755226838	0.2329684882917307
0.0814899255685292	0.0599741961114169	0.2298082786497944
0.0824755429392197	0.3102488568049550	0.2322184555523935
0.2074925431990225	0.1849181273568797	0.2308532257694376
0.2103366256716059	0.4345242334975618	0.2347038795020002
0.2912603667501885	0.1839803648555278	0.2304342006481797
0.2952119369489469	0.4345357739976892	0.2370255950855650
0.4149603878832734	0.0581016248849374	0.2222367346942449
0.3315510755908239	0.0588310483240299	0.2255575415412350
0.3361310387350618	0.3064321013832654	0.2360958135306642
0.4554517758188888	0.1813975215028386	0.2296685449896920
0.5406286385346146	0.1813978242174817	0.2296777150228608
0.6645430890592319	0.0588377662735326	0.2256159196499147
0.6599429912269366	0.3064389882731706	0.2361643819482384
0.5811338685223393	0.0581090334952961	0.2222500954399002
0.7048259397550261	0.1839870490005732	0.2305513250097662
0.7008637148740139	0.4345436081956280	0.2370944928083581
0.7885937135263139	0.1849216496903216	0.2310734978533858
0.7857435373151144	0.4345332910072712	0.2348269903850799
0.9145948052961286	0.0599740753211263	0.2300656935092066
0.9136116829317261	0.3102582719121060	0.2324644697684981
0.8308830481684443	0.0600502912865719	0.2294642956875347
0.8293844341861235	0.3104905730364643	0.2332020804939759
0.9560022786168300	0.1854482183571257	0.2310123667217880
0.9560116963204986	0.4345251111269511	0.2329048349558966
0.0400859491517503	0.6836140293453322	0.2315589435507889
0.0399009621561593	0.9345225707215492	0.2298366738690560
0.1666998471347627	0.5585750772295335	0.2332512052326305
0.1652057238300355	0.8090132688012376	0.2295062149763768
0.0824803842962584	0.5587963314440776	0.2326966582160989
0.0814953417481647	0.8090784430421900	0.2302892114981130
0.2074915332537403	0.6841500332039284	0.2311326042124638

0.2063807253024981	0.9345281493990409	0.2279791902474407
0.2912571136932867	0.6850996978599635	0.2305256833344276
0.2896624880320770	0.9345345757851015	0.2254590739977168
0.4149527362311525	0.8109998420454310	0.2221915935234032
0.3361336751706413	0.5626528010461993	0.2361020076195303
0.3315470755263296	0.8102434140841090	0.2255784061554590
0.4554524935462618	0.6877196153432598	0.2295681529989739
0.4567007905509597	0.9345526792341541	0.2181699084902114
0.5406296203442513	0.6877216211091389	0.2295673191975599
0.5393981352809828	0.9345539852100671	0.2181696310253424
0.6599423975781804	0.5626566760534479	0.2361292217526073
0.6645475399748426	0.8102439090054939	0.2255935434122543
0.5811419861273405	0.8109974818161265	0.2221887573852655
0.7048314966228817	0.6850968457296825	0.2305558896554930
0.7064322569941973	0.9345381683419713	0.2255186291267023
0.7885980157445774	0.6841501374690351	0.2311891318632203
0.7897115438508460	0.9345313955991265	0.2281086315909922
0.9136158982026963	0.5588006975302522	0.2327498525020274
0.9145995313690473	0.8090806890036951	0.2303531376143597
0.8293869214339559	0.5585780885483950	0.2333302013196819
0.8308877177021097	0.8090136231840153	0.2295971982244537
0.9560112205110322	0.6836157031637355	0.2315742209502742
0.9561912721675483	0.9345255134245649	0.2299179131593679
0.4161172412997191	0.2996808543887647	0.2399097117074956
0.5799425617965969	0.2996898800778816	0.2399301240767081
0.4161254313582150	0.5694486017464491	0.2398102304520522
0.5799397382699314	0.5694472037277274	0.2398200198169517
0.4980286915125434	0.4346308297942528	0.2934611221752402

RuN₄¹⁸:

1.0000000000000000

17.0433998108000004	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	9.8400001526000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	20.0000000000000000

C N Ru

58 4 1

Direct

0.0400689263436792	0.1859260442869903	0.2307331868347258
0.0400916859254651	0.4348315725367137	0.2307340382461540
0.1647285680919510	0.0603492015378260	0.2307309430875764
0.1665512729642556	0.3108932068453900	0.2307323733136672
0.0812229664036458	0.0603574138593181	0.2307327380602782
0.0824284907755068	0.3106771383042109	0.2307327146255069
0.2069797265073430	0.1850458605923143	0.2307315264748268

0.2102252247551066	0.4348324466077002	0.2307364568032469
0.2905239092875724	0.1836132254411855	0.2307421243944515
0.2952176602994347	0.4348347064851452	0.2307628401142854
0.4140059355176723	0.0554536707909991	0.2307340045522098
0.3306535083085689	0.0582379270533780	0.2307335177278730
0.3352722222600413	0.3058114728730569	0.2307810503857972
0.4555467730212343	0.1753935338693386	0.2307900314216945
0.5406516976701728	0.1753880317637289	0.2307901646042353
0.6655565214973066	0.0582336578620784	0.2307337064060357
0.6609260928619661	0.3058058453012021	0.2307811229386715
0.5822021242020292	0.0554614188084591	0.2307342314080897
0.7056835977296557	0.1836180285889006	0.2307420479924170
0.7009751985719509	0.4348330536217065	0.2307628371936546
0.7892319489446629	0.1850483190200980	0.2307313100158272
0.7859769720032213	0.4348305636811113	0.2307362722726586
0.9149911995505319	0.0603587933758737	0.2307327482189067
0.9137900143810993	0.3106854239509977	0.2307324569936581
0.8314857731241120	0.0603463698765011	0.2307309232289802
0.8296603493044715	0.3109022349852580	0.2307320699806073
0.9561462290668300	0.1859299957767221	0.2307330942121534
0.9561297987004157	0.4348306822901975	0.2307338648966200
0.0400686727420824	0.6837390258569853	0.2307330816969206
0.0398513516519133	0.9348336768788266	0.2307337685161787
0.1665489658582168	0.5587686069531121	0.2307322397777055
0.1647276030332633	0.8093138507733127	0.2307308142571537
0.0824267983055779	0.5589870812306197	0.2307326069006867
0.0812221123396540	0.8093084959781394	0.2307326622229469
0.2069769838953155	0.6846159140612025	0.2307314071535805
0.2056021723376340	0.9348311624066769	0.2307308023751130
0.2905206028417240	0.6860504195653402	0.2307423650004582
0.2886939269286732	0.9348311050050631	0.2307281417975667
0.4140009443835792	0.8142106682465390	0.2307341543216316
0.3352733535169828	0.5638581761719271	0.2307817233202737
0.3306503035283722	0.8114238305869643	0.2307336442702831
0.4555471750143060	0.6942874813910617	0.2307907850261065
0.4567598439388062	0.9348285931748399	0.2307158303685454
0.5406513618661927	0.6942920869404885	0.2307906692104397
0.5394500543141182	0.9348275551843942	0.2307158738496670
0.6609252506763551	0.5638611755705814	0.2307815023356107
0.6655600165884504	0.8114252719097228	0.2307337297504528
0.5822078322591139	0.8142018897592110	0.2307342272316992
0.7056871285208300	0.6860435891984454	0.2307422076175086
0.7075207936042266	0.9348293814086017	0.2307283603512361
0.7892347344808145	0.6846102793173308	0.2307312181448832

0.7906116009698945	0.9348292000037348	0.2307309789246029
0.9137920073212789	0.5589765749225016	0.2307323756332799
0.9149917790520262	0.8093052616938088	0.2307326604056780
0.8296627558843325	0.5587560892234359	0.2307319698431053
0.8314865873917449	0.8093133041389494	0.2307308235859954
0.9561467194721274	0.6837338340882708	0.2307330006506937
0.9563601768928781	0.9348330473502834	0.2307337778583691
0.4153300656833795	0.2956347242541155	0.2308527623951634
0.5808597460255607	0.2956255164689546	0.2308529434658339
0.4153318200818994	0.5740478214353447	0.2308539781972675
0.5808579616331720	0.5740551679635226	0.2308535393987670
0.4980964088969587	0.4348403009430509	0.2308549777493258

RuN₄LS:

1.0000000000000000

17.0433998108000004	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	9.8400001526000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	20.0000000000000000

C N Ru
58 4 1

Direct

0.0400879445523297	0.1858102056895360	0.2307397137946126
0.0400883766402893	0.4348341339669072	0.2307402937011186
0.1649450475311783	0.0603694163903731	0.2307386095382243
0.1665372548220021	0.3108527837753901	0.2307390367182938
0.0813500689448586	0.0603139336522195	0.2307394046352527
0.0824016882673645	0.3105878230163058	0.2307396387440609
0.2071956309195313	0.1851627131780392	0.2307384840203817
0.2100099385993238	0.4348323594235817	0.2307404209925287
0.2908430744914214	0.1840294054351707	0.2307450350203840
0.2950079488825768	0.4348307495722510	0.2307560059040589
0.4144967126657605	0.0567663200763953	0.2307401231006578
0.3310293589165736	0.0586397074026558	0.2307401841096895
0.3353499904479446	0.3066785140377712	0.2307691613252490
0.4559651077337656	0.1774944904592483	0.2307737185004280
0.5402340234266407	0.1774951444747720	0.2307736094406545
0.6651870432124640	0.0586413188134129	0.2307399890895774
0.6608366972243119	0.3066736822527025	0.2307689669020108
0.5817211781422861	0.0567705320766925	0.2307398135054012
0.7053675033047430	0.1840344121459850	0.2307446840876695
0.7011826600104388	0.4348284896358321	0.2307559287808138
0.7890204840800457	0.1851719057295200	0.2307382571392154
0.7861933182026396	0.4348296415457562	0.2307403022545590
0.9148647718020070	0.0603228416711497	0.2307393940827920

0.9138190141530439	0.3105891323265403	0.2307395241844856
0.8312681961703288	0.0603714195914300	0.2307385613881819
0.8296767651435704	0.3108579330565722	0.2307388775983617
0.9561355658430697	0.1858156521763214	0.2307396526296153
0.9561237814727771	0.4348327217525073	0.2307401986809552
0.0400878839990404	0.6838632834641446	0.2307396458439465
0.0398963242890728	0.9348378270656692	0.2307400194538306
0.1665347901147760	0.5588102682888637	0.2307389441452485
0.1649422233440028	0.8092962459526821	0.2307385629616099
0.0823998024880568	0.5590812049848978	0.2307395744821623
0.0813480456466350	0.8093603516266903	0.2307393587377799
0.2071913115409791	0.6844996604362430	0.2307384427403343
0.2059174615893208	0.9348306222181563	0.2307392123552313
0.2908383592657711	0.6856271720119983	0.2307451666783208
0.2891534623976869	0.9348279531971567	0.2307378933903472
0.4144907502256849	0.8128913176088668	0.2307401652485392
0.3353495980446246	0.5629864471065840	0.2307693587144851
0.3310256442703303	0.8110141978933352	0.2307403569691031
0.4559649030280913	0.6921838067943339	0.2307736766719594
0.4569188150840360	0.9348241647316374	0.2307299543892301
0.5402337298491106	0.6921829731694317	0.2307735911275006
0.5393082711803450	0.9348236942810793	0.2307296598790945
0.6608371424691671	0.5629877532345607	0.2307690764520944
0.6651913313420020	0.8110090557171515	0.2307400999821896
0.5817275386567120	0.8128843503020032	0.2307397877601952
0.7053721087832068	0.6856178499700704	0.2307448338405497
0.7070602014491338	0.9348259979575417	0.2307378726901222
0.7890241999130859	0.6844854745030198	0.2307382364341327
0.7902978533679117	0.9348282706249553	0.2307393266306067
0.9138211396093413	0.5590767993230119	0.2307394381601907
0.9148663370998499	0.8093496248509267	0.2307393500466781
0.8296788807546664	0.5588003547716891	0.2307387882903296
0.8312702946993918	0.8092891953661970	0.2307385213332698
0.9561359802172453	0.6838565004304877	0.2307395784827871
0.9563131916696752	0.9348373118692707	0.2307399931488167
0.4157968083711356	0.2988843145509384	0.2308169216340180
0.5803746910928611	0.2988940551968972	0.2308169204849107
0.4157952112888154	0.5708105021008353	0.2308171703340700
0.5803762693317600	0.5708004799110100	0.2308171398759031
0.4980802979233959	0.4348435351929721	0.2308057707662357

RuN₄^{IS*}OO:

1.0000000000000000

17.0433998108000004

0.0000000000000000

0.0000000000000000

	0.0000000000000000	9.8400001526000000	0.0000000000000000
	0.0000000000000000	0.0000000000000000	20.0000000000000000
C	N	Ru	O
58	4	1	2
Direct			
0.0390141438891396	0.1868846878574573	0.2335021937577241	
0.0390301605414515	0.4359796696627282	0.2349365517100816	
0.1643137952224788	0.0616254682318538	0.2303961515687618	
0.1657752558086517	0.3119624456067926	0.2341159797699441	
0.0805216373715203	0.0614758282103086	0.2321238074622995	
0.0814535815710257	0.3117006512660750	0.2342965110179736	
0.2067401550505963	0.1866538755927395	0.2314335069048652	
0.2093761586875775	0.4360078012139570	0.2353786924524782	
0.2906533757460446	0.1859212603209328	0.2299573112112544	
0.2943822171022448	0.4360067969049028	0.2371808588549811	
0.4137165783621184	0.0592098086803549	0.2210461307925261	
0.3305584192223905	0.0602647208225889	0.2247158134656627	
0.3353869429296080	0.3085495391085878	0.2353373223396538	
0.4548620373700715	0.1819240701336260	0.2275173704206900	
0.5390286448107999	0.1818605636037143	0.2278617914202228	
0.6633293661193895	0.0601694374804257	0.2263604545686209	
0.6584859194973099	0.3084866040183986	0.2362507885465443	
0.5802242489074855	0.0591143780490865	0.2220020527746215	
0.7032344544972378	0.1858324395886855	0.2314320245785137	
0.6994673725752714	0.4359502782817402	0.2381656384073272	
0.7871366851294094	0.1865819832653763	0.2329293190886531	
0.7844878777067676	0.4359555878410026	0.2365803731345864	
0.9133604271046443	0.0614426057486305	0.2330355927431071	
0.9124258967785460	0.3116733866417257	0.2349911788782519	
0.8295599079169679	0.0615647431630589	0.2319901943279522	
0.8280936762709789	0.3119173545898150	0.2352750126964727	
0.9548672245738443	0.1868703771168425	0.2339070043817889	
0.9548506961164984	0.4359626182143276	0.2352900029587364	
0.0390168089649884	0.6850583445961939	0.2334757307992598	
0.0388510814543368	0.9359642961027371	0.2323273181305991	
0.1657823633566007	0.5600484158566466	0.2340295563108340	
0.1643177752684243	0.8103727977713248	0.2302614438907161	
0.0814605828627135	0.5602627261391011	0.2342699703252315	
0.0805273069128375	0.8104697333962252	0.2320555605834260	
0.2067471750393982	0.6853511130745876	0.2312453016092280	
0.2053697567789174	0.9360056587170363	0.2284206494420130	
0.2906584158711999	0.6860754027011480	0.2297822765888835	
0.2886227372609977	0.9360028659244665	0.2249599465184436	
0.4137172117106893	0.8127285984282524	0.2209554533871452	

0.3353845818360862	0.5634618390239297	0.2353124374052417
0.3305596840037033	0.8117311396236740	0.2245887809284425
0.4548587121226697	0.6900119270117294	0.2274784559246782
0.4556208592097510	0.9359684539841844	0.2175097423571787
0.5390219965753241	0.6900053600328818	0.2277312521244280
0.5383504877667895	0.9359436025593222	0.2180422522374184
0.6584726785166440	0.5633977169978669	0.2361663496016385
0.6633252318094423	0.8117138826948871	0.2262215570131532
0.5802218187986643	0.8127447076182833	0.2218440457076383
0.7032219183833878	0.6860533830157602	0.2313223807874797
0.7052516142547718	0.9359431182995994	0.2269595224695650
0.7871229844239519	0.6853256478953769	0.2329335074032356
0.7884959834573387	0.9359511740149277	0.2303970137326258
0.9124199473362424	0.5602416655795921	0.2350504000856681
0.9133548467357232	0.8104519653974845	0.2330489696856491
0.8280857544469425	0.5600028907718316	0.2353279280668020
0.8295529382501531	0.8103366720981554	0.2319932618182571
0.9548668350380045	0.6850387399787551	0.2339417931148585
0.9550356217920416	0.9359466388574040	0.2328431890222565
0.4160156875628206	0.3014811233571932	0.2377249522688984
0.5778402377221751	0.3013991881070301	0.2380846304319152
0.4160057322480814	0.5705319874746164	0.2378387854683686
0.5778216135393228	0.5704688009730309	0.2379978726643333
0.4970066127149683	0.4359147844330296	0.2770115481422168
0.4555126319755092	0.4353696943469754	0.3694733432097351
0.5401049170984662	0.4352149619055061	0.3688131905119473

RuN₄^{LS*}OO:

1.0000000000000000

17.0433998108000004	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	9.8400001526000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	20.0000000000000000

C	N	Ru	O
58	4	1	2

Direct

0.0406267259611990	0.1806760764866956	0.2313821101193617
0.0406565464932994	0.4297494672945971	0.2329605277538906
0.1657430690355768	0.0553379391773255	0.2288787283562470
0.1672812002664670	0.3057688110376307	0.2328018496910360
0.0820353930404558	0.0552308758359132	0.2300607895824787
0.0829991908297419	0.3054819773577211	0.2325892734097789
0.2080879775929738	0.1802777175348947	0.2303191032361776
0.2108236764351723	0.4297306327842407	0.2339890036800546
0.2918552291677756	0.1793680016113287	0.2298165422103659

0.2959427608118463	0.4296278192909245	0.2362507459192500
0.4152231334852989	0.0525110559163992	0.2223459134241887
0.3318995764941027	0.0538188951613940	0.2248731928474317
0.3363375303614780	0.3016582384879993	0.2361520581594175
0.4565379056524332	0.1733805824806305	0.2310708157818236
0.5406404693577359	0.1733654802139910	0.2309714333528533
0.6652725090246719	0.0538017619817289	0.2243687909282106
0.6608489276950953	0.3016263085585472	0.2357860062766668
0.5819295434529576	0.0525017046658736	0.2220979283404150
0.7053177354300868	0.1793528063431459	0.2292527529182946
0.7012363591552991	0.4296040203395896	0.2358598042032561
0.7890934005929069	0.1802636122639492	0.2296622286790352
0.7863535335248890	0.4297106404163391	0.2335354448019784
0.9151466668478878	0.0552213368299170	0.2296149121279828
0.9141817692854667	0.3054724681086609	0.2322724296861413
0.8314351066053186	0.0553254463132084	0.2281828284585830
0.8298930604081102	0.3057508143105813	0.2322901938221137
0.9565524164820522	0.1806731927983210	0.2311782910961849
0.9565224209322745	0.4297401239051733	0.2328199835287538
0.0406328275052955	0.6788077129825265	0.2310835588771711
0.0404567569906384	0.9297390286907350	0.2297766081850491
0.1673180627112480	0.5537776422127759	0.2322549332148888
0.1657611158465495	0.8041667226096457	0.2284264635668218
0.0830351336667266	0.5540191785847942	0.2322931511975839
0.0820517455750949	0.8042486590981996	0.2298224823698494
0.2081165381952771	0.6792510387930609	0.2293670310701274
0.2067640857103582	0.9298044162584509	0.2269203882979777
0.2919015250409522	0.6801685944022240	0.2275762371070261
0.2899883412722427	0.9299035211705254	0.2239004514746812
0.4150656043046222	0.8074068270015274	0.2192848243155375
0.3365303022495341	0.5577491689473487	0.2332233484292329
0.3318747619315132	0.8057208512564790	0.2228832612616640
0.4564321856259657	0.6857022456007695	0.2249484769546633
0.4572209885289507	0.9300392107671500	0.2169614796224541
0.5407201996166348	0.6856908283725389	0.2248330522968228
0.5399178327542511	0.9300265007109360	0.2168269098562267
0.6606423675490609	0.5577269391748716	0.2328861295063137
0.6652896839526663	0.8056889799131330	0.2224103802255429
0.5820769476890063	0.8073916314600794	0.2190235921362203
0.7052640914330592	0.6801374676027300	0.2271066581455412
0.7071760252745836	0.9298772162300923	0.2232862818500554
0.7890612586998658	0.6792280701016141	0.2288290754238851
0.7904223336100715	0.9297835450783876	0.2262033114379897
0.9141463810177196	0.5540146013098568	0.2320130425995934

0.9151302235663618	0.8042381106536701	0.2294060798215900
0.8298541600085717	0.5537579692895566	0.2318177668349338
0.8314143965685723	0.8041402356919206	0.2278023798967647
0.9565455494379684	0.6787961666044322	0.2309037692251896
0.9567206812963316	0.9297334357828857	0.2295284121433578
0.4168323438300630	0.2928867582731505	0.2420016107660530
0.5803691076266132	0.2928557289711358	0.2418429425883546
0.4169677204269494	0.5664228833141817	0.2352369085450005
0.5802020022195907	0.5664138146619588	0.2350496937619795
0.4986315444632346	0.4322557943029640	0.2608696808113881
0.4988441212722373	0.4637712877570117	0.3517123971024104
0.4989572178372861	0.5891294113215845	0.3772435463606996

RuN₄^{HS*}OOH:

1.0000000000000000

17.0433998108000004	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	9.8400001526000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	20.0000000000000000

C	N	Ru	O	H
58	4	1	2	1

Direct

0.0394840189238838	0.1852479366000817	0.2319918367236578
0.0394944614142503	0.4344081988898362	0.2331171169310005
0.1646025988676976	0.0597790991076785	0.2287391485293734
0.1660188134055861	0.3102358941130645	0.2319370563220500
0.0809226240367260	0.0597989432180312	0.2306048458777116
0.0818367112868623	0.3100727584204466	0.2325121618819594
0.2068198247202712	0.1847045077858572	0.2294467233437610
0.2095361222263555	0.4343793992582285	0.2326655022271929
0.2905186284275944	0.1837498562998112	0.2280114113238174
0.2943311670810860	0.4343528323480767	0.2338417207764074
0.4142817240256329	0.0578679540517254	0.2207026363974334
0.3309567022633875	0.0585785777004138	0.2236114762299174
0.3350652586512919	0.3063628898160638	0.2327743978834394
0.4548360135435556	0.1816476103640196	0.2270182670795128
0.5398787822671732	0.1817810581352478	0.2275409189370479
0.6638977571127754	0.0588426505813277	0.2252276688133983
0.6595874656173444	0.3067343947648092	0.2341761542338644
0.5805902203228016	0.0580951961161968	0.2216877854907727
0.7042414440249924	0.1840810068814754	0.2297713753317570
0.7004832731754335	0.4345895004885502	0.2353571222000028
0.7879906056854347	0.1849115548546283	0.2312167421635620
0.7853299336578514	0.4345247023081669	0.2342297645169257
0.9139690424417286	0.0598817187512427	0.2315067162975577

0.9130704733574435	0.3101360165893797	0.2333781273993509
0.8302612218293411	0.0599702882212962	0.2303448223066761
0.8288518304403159	0.3103852095587675	0.2334309664681152
0.9554276443274740	0.1852930525385462	0.2324529677847536
0.9554366753035822	0.4344368346439162	0.2335423548079326
0.0394933900263762	0.6835706757856240	0.2317170488271602
0.0393056848642653	0.9344112376097835	0.2308300792460631
0.1660345820998116	0.5584969691516439	0.2316769986921988
0.1646343765485780	0.8088803576799687	0.2284773690343178
0.0818440274241208	0.5587211933385982	0.2323079059464959
0.0809370523695042	0.8089884204387253	0.2303987421012807
0.2069078265949594	0.6839301244727468	0.2290284627165070
0.2058194489380261	0.9343252654590566	0.2268345560337484
0.2906443315469918	0.6847714967991394	0.2273752794557367
0.2891037316827634	0.9342898336819957	0.2236752096573516
0.4143317268431921	0.8108208255896747	0.2198800918385339
0.3353197808807057	0.5621473373643024	0.2320807533577808
0.3310047867682483	0.8100294485434284	0.2230567901471487
0.4549884153543875	0.6870529355573702	0.2257227862019250
0.4560788049185078	0.9344361487116550	0.2171727642693427
0.5400074969915415	0.6872695612675543	0.2261992939852967
0.5389036334961398	0.9345857419768527	0.2176224136255543
0.6596475335340664	0.5625507023412923	0.2334386952008449
0.6639611681350041	0.8103168350382135	0.2245390009281715
0.5806779255102466	0.8110815391888505	0.2207170924083345
0.7043472944693207	0.6850925446336895	0.2289179368873499
0.7058035256934325	0.9345980618256837	0.2254246445202590
0.7880564632459538	0.6841299274608387	0.2306136231518874
0.7890798767157293	0.9345340265141316	0.2285800305033447
0.9130837111530972	0.5587718670766394	0.2331268883999632
0.9139914507096870	0.8090629082886371	0.2312554508998014
0.8288768186196653	0.5586112374606693	0.2330776483080612
0.8302949572080293	0.8090617083771915	0.2299758484537459
0.9554380933399100	0.6836029813807698	0.2321427836426283
0.9556020944108342	0.9344634642173593	0.2312837217829270
0.4151100167404622	0.3000708802458890	0.2358877002914871
0.5793452299590485	0.3005601461496623	0.2365654037632368
0.4154653678472902	0.5685269744939253	0.2347038647931527
0.5795273963963387	0.5689898560350125	0.2356928636762058
0.4974535929678587	0.4333992287055667	0.2897046211173505
0.4622830519084757	0.5031414393030152	0.3811056578193909
0.5114824503981887	0.4557003240881234	0.4370461423505573
0.4856018451505809	0.5020461318660591	0.4744460473980077

RuN₄IS*OOH:

1.0000000000000000

17.0433998108000004	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	9.8400001526000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	20.0000000000000000

C N Ru O H

58 4 1 2 1

Direct

0.0383301345816092	0.1861498788392178	0.2328434001540122
0.0383420166783848	0.4352211483978503	0.2345163610723346
0.1634396653085805	0.0608229915591886	0.2288946269733210
0.1649664129799948	0.3112108430131840	0.2329584814080146
0.0797351837704509	0.0607116758641180	0.2310210742255899
0.0807199769051752	0.3109628088125038	0.2336161979851356
0.2057656182737906	0.1857666001201704	0.2299656298191072
0.2085468450629178	0.4352811654718655	0.2339487810642669
0.2895529353460994	0.1848374314955754	0.2285355663196791
0.2934700329520689	0.4353237872323760	0.2356026892979976
0.4129853379504999	0.0579565930310665	0.2203985135721057
0.3296669589027490	0.0594195582092176	0.2232751038739509
0.3341143842011585	0.3072445769392272	0.2343916656927191
0.4540990040303945	0.1796146781069069	0.2284538344435195
0.5385353664520496	0.1794748774917977	0.2297321507352258
0.6629589242021274	0.0591873652255952	0.2263770177611406
0.6583494207323225	0.3069417946310759	0.2377567352652293
0.5797510482706677	0.0578164414693287	0.2222858076963388
0.7029892877526228	0.1846430288390696	0.2318453424761219
0.6989532681095079	0.4351565046203846	0.2390417727768184
0.7867833263545178	0.1856316927479241	0.2329478930345728
0.7839435667908984	0.4351615996501400	0.2370054583987717
0.9128304386305838	0.0606614546572933	0.2324748706873443
0.9118425172254971	0.3109177072983859	0.2350444339639914
0.8291143549807102	0.0607138651330483	0.2315499078526442
0.8275690341838509	0.3111209717784019	0.2355448520647285
0.9542425362737033	0.1861284402171403	0.2335684113463266
0.9542360774282568	0.4351889787766521	0.2352519170745570
0.0383270958751984	0.6842919536347923	0.2326421151333236
0.0381385356790385	0.9352299715644106	0.2312620288488458
0.1649601859625539	0.5593237076239901	0.2326455620858723
0.1634169613452296	0.8097336749094552	0.2285974057445273
0.0807192845331136	0.5594964720067085	0.2334294486758972
0.0797227667833816	0.8097649715153679	0.2308486150556396
0.2057273583584381	0.6847999276863742	0.2294206292781066
0.2044772892372537	0.9352916392369665	0.2266092177461385

0.2894861601297910	0.6857961098444966	0.2276604065255106
0.2877084712990340	0.9353415505224626	0.2230176658047083
0.4129228620003105	0.8126723913287642	0.2193802043543844
0.3340761832585544	0.5634469029565169	0.2335365906008858
0.3296255068496481	0.8112353019869134	0.2225746486519382
0.4539978952023948	0.6907919710629701	0.2266739824295963
0.4550325951664148	0.9353575820619245	0.2163467655466128
0.5384615808351777	0.6907738651934660	0.2277982414736536
0.5377693074436820	0.9352789200156670	0.2172552325122011
0.6582999776831259	0.5631970466416899	0.2367089486264848
0.6629527273782194	0.8110496546558441	0.2257343636756393
0.5797405240312932	0.8125728988653866	0.2212918419961082
0.7029776976087996	0.6855447625642231	0.2311228852657674
0.7048755066153114	0.9351070504704055	0.2263860716458287
0.7867625680343937	0.6846371053774500	0.2326495837548600
0.7880855430272057	0.9351284348469537	0.2297833797119829
0.9118421011767682	0.5594372279239040	0.2349199435866393
0.9128302102081248	0.8096916857368449	0.2323832553852790
0.8275656661315628	0.5591805217206386	0.2353540049701888
0.8291116980911366	0.8095758274962526	0.2314155455838792
0.9542423107822096	0.6842424163569869	0.2334201537692250
0.9544185191685760	0.9351881414858586	0.2320265612893955
0.4143245876011455	0.2984027838036884	0.2383817420374873
0.5780776415045009	0.2979566152637103	0.2414021951872679
0.4142140002936059	0.5722567441645113	0.2369668134143743
0.5779289661555129	0.5721260256566014	0.2391628404787100
0.4957457300259557	0.4357367201417450	0.2672098732748167
0.4760331478203602	0.4404521885533536	0.3699008452559930
0.5428122907543056	0.4740869050534603	0.4134333280026793
0.5149648723174776	0.4964238693505945	0.4549385654987321

RuN₄^{LS*}OOH:

1.0000000000000000

17.0433998108000004	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	9.8400001526000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	20.0000000000000000

C	N	Ru	O	H
58	4	1	2	1

Direct

0.0393961321426237	0.1835962751069123	0.2340204626727772
0.0394208800499110	0.4326137244091605	0.2357576238305197
0.1644042517799242	0.0581552377586677	0.2318479993243427
0.1660463433276473	0.3086196659226293	0.2359722981182804
0.0807411997670462	0.0580992021207514	0.2328645382600514

0.0817866773163992	0.3083775912951809	0.2354062043846766
0.2067299163535622	0.1830070301962091	0.2333764923857914
0.2096430105306972	0.4325883977448775	0.2377534013637613
0.2904471786895519	0.1819414426542418	0.2326143998132345
0.2947540559832096	0.4325494670302490	0.2403938411664051
0.4138095944141147	0.0548566246733087	0.2241117446264977
0.3305060082453015	0.0565107671413426	0.2273364536588919
0.3350509984068444	0.3040288119578312	0.2390757138683958
0.4550985793107997	0.1758078320482477	0.2321104062179172
0.5396078248695315	0.1758291659363233	0.2314580743002804
0.6641977740228616	0.0565681466609569	0.2256930708061718
0.6597492965666251	0.3041145251588982	0.2372380583044013
0.5808465364194522	0.0548755020564977	0.2231182112776654
0.7043092645513819	0.1819849210165314	0.2308487560007570
0.7000423018362844	0.4325815938901018	0.2384686777250216
0.7880233356144811	0.1830374256376043	0.2317899275265863
0.7851123774164003	0.4326123634866321	0.2361053576077463
0.9140026456930581	0.0581103573335476	0.2321035264998905
0.9129603624433568	0.3083861250280099	0.2346570977642709
0.8303435948893243	0.0581706569471832	0.2304539335274373
0.8287005257444857	0.3086284772387233	0.2345944971241312
0.9553484627633194	0.1835955439901499	0.2336403823246994
0.9553186889851332	0.4326192970411450	0.2353756548903417
0.0393961361559271	0.6816333368485376	0.2341145809587669
0.0392055909529678	0.9326104210993257	0.2326250655937906
0.1660538360581664	0.5565824911060142	0.2360181485904665
0.1644128182487571	0.8070262589463640	0.2319138618429332
0.0817925404780515	0.5568476071472260	0.2354691589002707
0.0807460511086628	0.8071159819414155	0.2329348983464892
0.2067447925799090	0.6821778700516961	0.2334391038840023
0.2053979875299954	0.9325931806234335	0.2301556112693378
0.2904753258847895	0.6832045388433191	0.2324767097465180
0.2885877544428956	0.9325890046717333	0.2271036507138090
0.4138001223800669	0.8103818505726259	0.2237779118479086
0.3351041247946001	0.5610677442348180	0.2386867469417109
0.3305139737462899	0.8086285198134375	0.2271723491027920
0.4551334004640843	0.6893527777279075	0.2312723509360447
0.4559196493358842	0.9326314591057876	0.2194669472183892
0.5396646849530513	0.6893083611810081	0.2306269126437894
0.5386943707786357	0.9326326781758579	0.2189861221697151
0.6596886744565507	0.5611317744298018	0.2368549749969691
0.6642074323818861	0.8086660628210681	0.2254790386948050
0.5808912713467309	0.8104112499444553	0.2227491315766862
0.7042956064204604	0.6832723501182801	0.2306187882964752

0.7061369248194824	0.9326574607084308	0.2253175783080778
0.7880152086745850	0.6822132737184170	0.2317629801669224
0.7893401514010100	0.9326331529543970	0.2284856128905382
0.9129507842815749	0.5568624838680927	0.2346997905331859
0.9139962067759272	0.8071322543733942	0.2321496554177732
0.8286936090236074	0.5566263637461980	0.2345956554023199
0.8303369066269551	0.8070710925803867	0.2304662686272011
0.9553446496820537	0.6816501158258432	0.2337188787467477
0.9555398085535097	0.9326197924281183	0.2322283714204175
0.4153172607341793	0.2944611545772284	0.2431366446302095
0.5795186296961309	0.2945535000416686	0.2415568633683312
0.4154058282146797	0.5706645450647972	0.2419964289260264
0.5795168978703876	0.5706767622334640	0.2405800232349815
0.4977148590364002	0.4329770844825193	0.2603684974764585
0.5011684759779689	0.4283642292504869	0.3553502145228457
0.5085935819854541	0.5639627833129197	0.3878309928538828
0.4534962551665165	0.5830322600234107	0.3987666736616915

RuN₄HS*O:

1.0000000000000000

17.0433998108000004	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	9.8400001526000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	20.0000000000000000

C	N	Ru	O
58	4	1	1

Direct

0.0395365936249400	0.1851691553943541	0.2320983390217402
0.0395819342459673	0.4343028862279708	0.2335402925572233
0.1647071047308204	0.0596150989784183	0.2298274449594823
0.1661282135665803	0.3101178552986902	0.2335901612169468
0.0809818457775704	0.0596943176549375	0.2307586795470236
0.0818937150691867	0.3099700594765025	0.2332461869947594
0.2069556301230049	0.1845732342325122	0.2315426654030290
0.2096965516751413	0.4340936749405224	0.2342399660055684
0.2906744603733879	0.1835145885380360	0.2318267908381989
0.2946289548429556	0.4338454391625675	0.2357563677688124
0.4142916286769275	0.0573169909180542	0.2240080732024975
0.3309784571501266	0.0581186106142812	0.2270127618845300
0.3349707143622883	0.3061723886112362	0.2377858046280941
0.4550719147626453	0.1802214009402828	0.2312457856163444
0.5395058093412703	0.1809022879046872	0.2281382032014954
0.6638714144365812	0.0590567032436628	0.2249355643261201
0.6595353312428336	0.3073614783561464	0.2346308453354869
0.5805676211127764	0.0577724601090478	0.2217670957493433

0.7040549336799062	0.1845639123457526	0.2294003486404438
0.7005430346445350	0.4349027648818308	0.2381133344435265
0.7878808374531557	0.1851996652845305	0.2308301022643803
0.7854544337646887	0.4346526021736359	0.2357138499819580
0.9139749024135091	0.0599366533908553	0.2308269814764737
0.9131083341800770	0.3101559328452368	0.2332685108388216
0.8302176738753164	0.0601776513336593	0.2297492991105360
0.8288521125176292	0.3105187289228192	0.2335336747102818
0.9554582976717058	0.1853057777762442	0.2320276648911096
0.9554877636634405	0.4344227081375818	0.2338258979360137
0.0395819141398190	0.6834409929827931	0.2317613798064802
0.0393747410283185	0.9343052947158628	0.2305233329783959
0.1662033243207447	0.5582465925195103	0.2324733055099015
0.1647637266763366	0.8085821448611541	0.2291358229462623
0.0819707871422976	0.5585807663927123	0.2327007607160581
0.0810245529103873	0.8088250346021912	0.2304259256819166
0.2071188787993718	0.6836335076340218	0.2299591962861882
0.2058813745096560	0.9341266733810131	0.2279774151235837
0.2909204646444408	0.6842990164428997	0.2278444616298365
0.2891813385032320	0.9340917562043861	0.2254144919530338
0.4143982521134043	0.8105006343759521	0.2207739732466148
0.3359278749743435	0.5614822474868847	0.2310800390161712
0.3311303888311283	0.8096008203582566	0.2237500820879183
0.4551124266966137	0.6862703454318209	0.2253238885069917
0.4561230341444742	0.9340821087548713	0.2190421626690276
0.5398110001990936	0.6879060776003654	0.2302226929460164
0.5388847246906302	0.9342485711160203	0.2189204728422312
0.6600307525479889	0.5628478194394356	0.2389380675258669
0.6639699956445096	0.8104714457126131	0.2273816180386445
0.5806835836331004	0.8108819634757293	0.2236268149791674
0.7043632188388812	0.6852923903254543	0.2325131965150493
0.7057832460439397	0.9347158192951126	0.2261541568542006
0.7881076118049183	0.6841901588696039	0.2324437931148201
0.7891139839736019	0.9346316100800470	0.2287123589654469
0.9131799185356482	0.5587787466060362	0.2337168184210056
0.9140457552652923	0.8090557611721561	0.2311710119445716
0.8289473512025672	0.5586800731436158	0.2345441746866490
0.8303141490319619	0.8091394517669679	0.2305452267254438
0.9555120824048583	0.6835822413402940	0.2322907270803173
0.9556318165536124	0.9344607923784439	0.2307326701483724
0.4152177965822895	0.2984479263749533	0.2435111450611437
0.5790729003442658	0.3006009984010904	0.2366707600690296
0.4158076734250816	0.5669480388676122	0.2294091379318807
0.5797639485763529	0.5709700348883368	0.2438041260299870

0.5001657860045542	0.4298096359839935	0.2857740901922284
0.4594794062867704	0.5055174791216888	0.3598500090693376

RuN₄IS*O:

1.0000000000000000

17.0433998108000004	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	9.8400001526000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	20.0000000000000000

C	N	Ru	O
58	4	1	1

Direct

0.0390174158982317	0.1862375333000130	0.2323190837987553
0.0390491138477119	0.4352874384056689	0.2338538708430355
0.1640901577863573	0.0608559281434360	0.2293085692844254
0.1656516474967443	0.3112780226469145	0.2332712549267534
0.0804004753979465	0.0607738017392178	0.2307695842547152
0.0813889899739596	0.3110328562048651	0.2332504001955166
0.2064128404466570	0.1857699373484839	0.2307714694537248
0.2091749092468834	0.4352880681776256	0.2346122647671830
0.2901812596691181	0.1848013606993140	0.2301898348913878
0.2942467562807123	0.4352999562782149	0.2369774746295798
0.4135740041584233	0.0577028963150424	0.2228559005711897
0.3302621728316531	0.0592896562605585	0.2252645148291802
0.3346913728357827	0.3071081025446588	0.2362567591538728
0.4547391033767169	0.1789800647558709	0.2309067749079488
0.5391999168395015	0.1789830867932576	0.2314463137060937
0.6637297730853643	0.0592801057678646	0.2271283387759263
0.6591918977772478	0.3071227859439299	0.2378442130197131
0.5804622172999128	0.0576873740258406	0.2239476708255448
0.7037672672571665	0.1848126696170562	0.2321092632438852
0.6996511293555593	0.4353067753629421	0.2387304317879886
0.7875402170876215	0.1857803441844831	0.2326836227603529
0.7847589970402886	0.4352960497229876	0.2363663161402317
0.9135716802660988	0.0607796548903838	0.2318265905659148
0.9125821463074746	0.3110409768130266	0.2341791977989749
0.8298738451634620	0.0608701977062417	0.2311551009940308
0.8283025198991487	0.3112988879979346	0.2348732760447250
0.9549578507149716	0.1862481013585339	0.2328272331728424
0.9549303864616966	0.4352895832472665	0.2343214515658603
0.0390166643059290	0.6843273497565003	0.2320768164496649
0.0388360904945110	0.9352863384110802	0.2307986166831451
0.1656551999737841	0.5592849744323690	0.2329347175455701
0.1640825658145508	0.8097074345973904	0.2289942507113028
0.0813902008565304	0.5595337953890394	0.2330402948264209

0.0803974072729063	0.8097945320677842	0.2305731688943158
0.2064085530259080	0.6847825024600859	0.2301893722261076
0.2050956280826149	0.9352851804112882	0.2273985205354517
0.2901692113974863	0.6857185378850944	0.2291270697527051
0.2883351514963973	0.9352938938594889	0.2245623953247380
0.4135505803400046	0.8129221082340978	0.2215700030096870
0.3347016742455704	0.5634183118267366	0.2350979435800193
0.3302489837519089	0.8112769652983524	0.2243791573110253
0.4547510654500467	0.6914229441377324	0.2285896594378792
0.4556625966149834	0.9353847100340006	0.2185600906744539
0.5392150437937525	0.6914315922200746	0.2291468794181534
0.5384372890105988	0.9353885573182176	0.2191369890191253
0.6591920901374773	0.5634241208907237	0.2367387038734581
0.6637489210081254	0.8113015019142001	0.2262951607907144
0.5805002478737785	0.8129435252366429	0.2226864190622392
0.7037857708991153	0.6857332454429469	0.2311456676993274
0.7056529854974914	0.9353000363774781	0.2267157238010304
0.7875474467970197	0.6847954442443054	0.2321955639691596
0.7888770430038415	0.9352935501601917	0.2295422016473320
0.9125810854708367	0.5595348081578930	0.2339992384275484
0.9135747786312273	0.8097985438712206	0.2316660692858665
0.8282993452666906	0.5592807167154080	0.2345923803299685
0.8298812780721873	0.8097132195042686	0.2309013412390762
0.9549577328733554	0.6843232581836284	0.2326093482177852
0.9551373729475874	0.9352901836427969	0.2313673607370232
0.4150001459909388	0.2979441051145499	0.2404862143726131
0.5788070027795097	0.2979521214684817	0.2414677646339408
0.4150621919310176	0.5724933063212997	0.2383508443538148
0.5787681679144006	0.5725040713347478	0.2393586157388790
0.4967207137508681	0.4359310921795507	0.2635927820748402
0.4957617095161118	0.4395812039009382	0.3524258782278085

RuN₄^{LS*}O:

1.0000000000000000

17.0433998108000004	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	9.8400001526000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	20.0000000000000000

C	N	Ru	O
58	4	1	1

Direct

0.0390522616451940	0.1865148879790396	0.2323114222017695
0.0390770196446261	0.4355347850929409	0.2336968050143905
0.1644264208867476	0.0621381121380937	0.2292798181336000
0.1658615263627032	0.3122720141160771	0.2330212433865958

0.0805891906546216	0.0613418908668626	0.2307963625221576
0.0814612159057096	0.3114513293169340	0.2331298405867414
0.2070027352760317	0.1873369623232250	0.2305257939131434
0.2092742123096961	0.4363731193130477	0.2344424250684023
0.2910501295503951	0.1874127914466066	0.2290879502869862
0.2944791622396904	0.4368639430774868	0.2368929461066529
0.4140398477569723	0.0593641090244761	0.2225736983532192
0.3307214392757796	0.0612426262567830	0.2244996962482183
0.3355280936528294	0.3102255986483365	0.2339738647192338
0.4560307951145714	0.1801563027810215	0.2295455830507163
0.5396573400612584	0.1782220424250099	0.2328356586057264
0.6637506752659458	0.0575099205821837	0.2277906362359789
0.6592793874468235	0.3051426684155202	0.2396340733235500
0.5807407686602337	0.0566420711993345	0.2248115923133640
0.7037090670945820	0.1832530696147657	0.2325764584272408
0.6994114127434953	0.4337546152559092	0.2384920424299770
0.7874610820513357	0.1846494439952518	0.2325462266163794
0.7846505773251817	0.4342130522445692	0.2360821141914344
0.9134668371260926	0.0602453284078655	0.2316995973121046
0.9125365846559641	0.3105538077411100	0.2341141917488933
0.8297191281512429	0.0597272877832595	0.2309057532386542
0.8282042347957398	0.3102993261814378	0.2348151506105984
0.9549250623936091	0.1859079945862404	0.2327963899975064
0.9548828232139664	0.4350268206370652	0.2341381479608796
0.0390262150116369	0.6846480301590580	0.2319076643416687
0.0388884976229674	0.9356380905596344	0.2307518539665732
0.1657348126856618	0.5602759729344141	0.2328895897689486
0.1642133775683894	0.8108455614261617	0.2287872929726749
0.0814211568678231	0.5600078254555643	0.2329168261843098
0.0804853244413766	0.8103098409509972	0.2304271224708774
0.2064727355522184	0.6859028613325542	0.2300620775407972
0.2052811342532484	0.9366860163651130	0.2272650005699502
0.2902160580176270	0.6872972626969611	0.2297258747282752
0.2886000972367578	0.9373379355620309	0.2245554340780814
0.4132415858466643	0.8139955448261813	0.2225891973277012
0.3346089075077340	0.5654883705108819	0.2372162487382624
0.3302062598014016	0.8130558188925481	0.2251285661699442
0.4542636856291958	0.6922884968696920	0.2304723170756938
0.4557076859637538	0.9360963303367345	0.2192681921932109
0.5379388693120397	0.6903398057212276	0.2281854539056260
0.5383644260117724	0.9346724512165031	0.2198793498362654
0.6583855924646709	0.5603237410683960	0.2344970866311677
0.6632772082766778	0.8093716133323530	0.2255287840617410
0.5800133500355839	0.8113058220922493	0.2225834849524899

0.7029090216305582	0.6831395864688035	0.2299510299165445
0.7053632951854022	0.9332819834797965	0.2266361189246943
0.7869450524300646	0.6832222662151310	0.2316912958132543
0.7886718846839762	0.9338957227348531	0.2292624640014655
0.9124924095601039	0.5591008160789971	0.2336931186870894
0.9133686829935418	0.8092119529907265	0.2314572710549578
0.8280724108199552	0.5582802581821306	0.2341369513830741
0.8295205984055807	0.8084281857842379	0.2306112285152900
0.9548994131969397	0.6840293645217476	0.2323701579423806
0.9550628511027467	0.9349226556565549	0.2312564307681129
0.4173594782608684	0.3024086541996597	0.2359782339709988
0.5790294894101643	0.2965985839276961	0.2464076216440933
0.4147835607336132	0.5741233961470616	0.2440237928075599
0.5765048758380891	0.5680824265749116	0.2352167539459326
0.4968111440773733	0.4358884802804050	0.2649704195205657
0.4960798204721397	0.4390223538732362	0.3530442113879153

RuN₄^{HS*}OH:

1.0000000000000000

17.0433998108000004	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	9.8400001526000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	20.0000000000000000

C	N	Ru	O	H
58	4	1	1	1

Direct

0.0393688775148315	0.1868326126094666	0.2322196056449743
0.0393755625358870	0.4360024134832372	0.2338014694919032
0.1645106866394058	0.0614453397165186	0.2291385568299230
0.1659056603936767	0.3118732650332156	0.2328662278403698
0.0808054020656754	0.0613982233902269	0.2307221188800106
0.0817135417818392	0.3116724220246800	0.2330908215766216
0.2067462530559718	0.1863997870183422	0.2303030861603782
0.2093978752057035	0.4360090962741907	0.2340401646193201
0.2904826041737159	0.1854928376194376	0.2293977018897421
0.2941955730960635	0.4359989173776925	0.2357909567226052
0.4142404203548050	0.0596172568097891	0.2222841135966243
0.3308907204684240	0.0603096996621335	0.2248280230413129
0.3350253345723669	0.3080868825018573	0.2349010334108163
0.4548200990254233	0.1831993459296650	0.2294501534383930
0.5397694893610441	0.1832133422250802	0.2301009359787932
0.6637693660841099	0.0603491531610127	0.2265702742600214
0.6594690143057725	0.3081477993642606	0.2366268541763987
0.5804565433257816	0.0596648072861175	0.2233174728356966
0.7041097509902458	0.1855884430832418	0.2312666391427070

0.7003419064961582	0.4360455541963497	0.2375744476186910
0.7878708052514733	0.1864508096719139	0.2320811165447342
0.7852031981012150	0.4360346411549097	0.2357142846625714
0.9138528329643217	0.0614194027987635	0.2316267158768084
0.9129620205440252	0.3116937039595913	0.2339724038769131
0.8301333478922431	0.0614942463130190	0.2307635108966422
0.8287335954494712	0.3119234275405146	0.2343849220935958
0.9553022764651448	0.1868471374292671	0.2326801387052966
0.9553196070443152	0.4360069630344252	0.2342518040851577
0.0393691484687897	0.6851712581782450	0.2321869933977828
0.0391855765804598	0.9360075281523021	0.2308703827346140
0.1659088833796920	0.5601343002289582	0.2327165494322589
0.1645225697343593	0.8105410105675732	0.2290273259189466
0.0817140260509467	0.5603308512521273	0.2330372255422126
0.0808104109237124	0.8106045333111200	0.2306895932807982
0.2067659718698544	0.6855853453457637	0.2300361970527702
0.2057129283589066	0.9359982443688361	0.2273620593865919
0.2905025176141828	0.6864833502988873	0.2287563105220234
0.2890231629323089	0.9360088766393815	0.2245248907982811
0.4142274939135885	0.8124934325183905	0.2214069880842136
0.3351111627458713	0.5638587187942212	0.2339910242273175
0.3308907593015724	0.8117018978671323	0.2242726301010127
0.4548476689992371	0.6887531149995660	0.2276865797631536
0.4559883651640407	0.9361084187217044	0.2185634679590280
0.5398047512605100	0.6888273507397824	0.2283156275196427
0.5387705816810163	0.9361428961084317	0.2190523709268933
0.6594659682455637	0.5639482252040543	0.2356840553630996
0.6637930050352849	0.8117611500223744	0.2259823472051141
0.5804985228807988	0.8125440253506355	0.2224124847636527
0.7041437551490289	0.6865125405027576	0.2305785378954980
0.7056522693887012	0.9360612305651648	0.2264309596379762
0.7878868466128482	0.6856139028464442	0.2317828866268065
0.7889499585462834	0.9360340102465602	0.2292159398817852
0.9129672199700105	0.5603302096012641	0.2339102163720973
0.9138582973347320	0.8106146279692209	0.2315885924380624
0.8287383180285091	0.5601303471763653	0.2342183152105201
0.8301384921919909	0.8105652781641581	0.2306371546489810
0.9553082604788328	0.6851724498907253	0.2326420461811119
0.9554705301460298	0.9360191660455695	0.2313338076469539
0.4150866518048866	0.3016066350151774	0.2386614586597898
0.5793047988307606	0.3017003443098336	0.2400103691456527
0.4152090060724521	0.5702761544780415	0.2367400239829809
0.5793053861741765	0.5703696497106624	0.2380919033664087
0.4967162579703002	0.4368016473105413	0.2927717920581366

0.4760867919856138	0.4734326018259735	0.3908021239534484
0.5219813187749723	0.4747271458271023	0.4199332147704536

RuN₄IS*OH:

1.0000000000000000

17.0433998108000004	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	9.8400001526000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	20.0000000000000000

C	N	Ru	O	H
58	4	1	1	1

Direct

0.0399168785600782	0.1871974545859363	0.2343842910048846
0.0399248778768872	0.4362709180255172	0.2360413364091799
0.1650513125150516	0.0618411970722237	0.2315132100179655
0.1665829042949609	0.3122151896823117	0.2356837371622187
0.0813355423034449	0.0617561053264653	0.2329574568275254
0.0823247677212090	0.3119990326542406	0.2355926389806782
0.2073947952975696	0.1867757773539838	0.2329151121897249
0.2101979084697249	0.4362811547990718	0.2369207008177628
0.2912037446020279	0.1858171385669427	0.2318509028962965
0.2951512927256256	0.4363035756643803	0.2388043056840174
0.4144827621478447	0.0590126389191125	0.2227924909976682
0.3312485154057981	0.0603765765408438	0.2262568547590159
0.3358270664869909	0.3081406605167956	0.2379007115349562
0.4556547727686996	0.1806480251711245	0.2309933314583661
0.5400922773670120	0.1806551372430949	0.2307192705931437
0.6644990698045988	0.0604036390021941	0.2256016730203857
0.6599434788998322	0.3081756709237036	0.2371407742798597
0.5812413849728305	0.0590236400743599	0.2223863938741228
0.7045638290097942	0.1858368606154089	0.2311711443696804
0.7006149887038636	0.4363244782647735	0.2379502158432911
0.7883649528595712	0.1867868430311626	0.2323085245853677
0.7855479791600343	0.4362972313268488	0.2362329748967409
0.9144145023070280	0.0617613577586997	0.2326660073125450
0.9134245668213297	0.3120071667576606	0.2353025816413561
0.8307067142421937	0.0618521642425914	0.2309791815662167
0.8291643576387203	0.3122277246360961	0.2351458407348573
0.9558289697108543	0.1871985168728078	0.2342387649519606
0.9558211607231638	0.4362757190294728	0.2358905738207110
0.0399132535997279	0.6853382499532739	0.2341546818564083
0.0397341844253723	0.9362804558304122	0.2327759578228508
0.1665804782294961	0.5603200759317295	0.2352930913211054
0.1650254598908810	0.8107186018503215	0.2311934917409889
0.0823222440611156	0.5605348527153931	0.2353743767725552

0.0813204681571555	0.8107934043492931	0.2327842108717047
0.2073643521740951	0.6857724556431369	0.2322443495866754
0.2060731855092382	0.9362712529962400	0.2293852731826754
0.2911344264448066	0.6866978729239035	0.2304175878938433
0.2892904336660887	0.9362819405869437	0.2258310370455575
0.4144369914731902	0.8136758210080954	0.2208624398189863
0.3357636776252637	0.5643450545987757	0.2361010841562377
0.3312161933913503	0.8121885570292600	0.2250288394584345
0.4556475911905387	0.6916564384655041	0.2272520996459529
0.4564745083503885	0.9364701255600146	0.2176198878563753
0.5401452168438340	0.6916181785249297	0.2268302966179394
0.5392266405920305	0.9364806036093447	0.2174144326634121
0.6599991972614149	0.5644006016475955	0.2351260571542149
0.6645404499244024	0.8122269827915778	0.2242120585441620
0.5813040936309816	0.8137082478156360	0.2203285677211450
0.7046468520078196	0.6867500700267055	0.2295102478881652
0.7064681234962082	0.9363322265348817	0.2250786263728009
0.7884041903213505	0.6858101233689954	0.2315213344341550
0.7896832338228610	0.9363011882935007	0.2287189996362567
0.9134242852464700	0.5605438026543020	0.2350652582661979
0.9144299525732070	0.8108087260833219	0.2324755679354032
0.8291659397026858	0.5603469115009415	0.2346967322120468
0.8307359549127113	0.8107510474279370	0.2306060508735453
0.9558310223172343	0.6853487569152090	0.2339975851380599
0.9560166345353829	0.9362876224675460	0.2326234088469204
0.4160725033842883	0.2992714083681017	0.2419698904543449
0.5797158999871442	0.2993029857552185	0.2412819559678889
0.4160816938048587	0.5730614693237808	0.2383185427707497
0.5797645079631893	0.5730305164886300	0.2373182760656705
0.4980018546806413	0.4379079017802647	0.2691326987582322
0.5059554933051272	0.4543435549435389	0.3717621289730679
0.4560334381212202	0.4767603191697974	0.3929818712822583

RuN₄LS*OH:

1.0000000000000000

17.0433998108000004	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	9.8400001526000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	20.0000000000000000

C	N	Ru	O	H
58	4	1	1	1

Direct

0.0399469889080457	0.1869678960056822	0.2319039256568528
0.0399727677019199	0.4360282039748394	0.2328766338266124
0.1649311673701835	0.0615811137968549	0.2289604196409409

0.1665626673012724	0.3120541689716869	0.2329656093010080
0.0812803527252752	0.0614931682861683	0.2302743377843968
0.0823194350785882	0.3117834436385921	0.2327752544403499
0.2072341181557286	0.1864226148830013	0.2307480680906012
0.2101639291595733	0.4360678929937305	0.2337933605929766
0.2909396803155463	0.1853417915443912	0.2306827159137519
0.2952609065721253	0.4360841539846644	0.2359962819434193
0.4144379158814610	0.0583128916583525	0.2239994204768237
0.3310733520373824	0.0599914250663009	0.2257141020464390
0.3354761550779901	0.3075180525396175	0.2367439627741659
0.4556586341115982	0.1788706775375871	0.2332081404265408
0.5401947410892348	0.1788303543652660	0.2333561668363029
0.6647850015082526	0.0598885696328834	0.2263494898837687
0.6603568028875629	0.3074278184310116	0.2371020451631149
0.5814360169310057	0.0582392613047880	0.2243222447094514
0.7049157867966916	0.1852310058797187	0.2313534387283930
0.7005680396675734	0.4360095436021605	0.2361608116453314
0.7886166658834033	0.1863397151421020	0.2315161374661822
0.7856725411033627	0.4360033326161800	0.2340919012935097
0.9145727402083529	0.0614540822821006	0.2307887441185982
0.9135332963154580	0.3117550240732659	0.2331216158043174
0.8309173019765718	0.0615037461172682	0.2297928028167656
0.8292828739266936	0.3119993272908961	0.2334913110524418
0.9559080725270291	0.1869493080511061	0.2321483965006032
0.9558830191129859	0.4360097703729896	0.2329992832692692
0.0399489353626631	0.6850234145306371	0.2306764142022749
0.0397553405418512	0.9360023719933314	0.2298453007959668
0.1665917313352632	0.5600413858671099	0.2317207774947455
0.1649367127286190	0.8104925425643059	0.2277867445103751
0.0823381925653175	0.5602549632343553	0.2318499788562650
0.0812883368738198	0.8105205562936685	0.2293760078782007
0.2072613923037463	0.6856344748751633	0.2286833842865526
0.2059225510737006	0.9360845021836438	0.2266150903817571
0.2909611669450620	0.6866745865396211	0.2270037666444470
0.2891292174100957	0.9361710089713067	0.2238808315815894
0.4143052474235624	0.8142073755957252	0.2193283789474315
0.3355969482996352	0.5644665220563174	0.2326013310355702
0.3310260154440745	0.8122247988409339	0.2226013778180836
0.4556422634087982	0.6927600228826353	0.2245242936979289
0.4565636154069969	0.9364912714621656	0.2179599884968824
0.5401859103614176	0.6927152055133348	0.2244620041265881
0.5393151023814123	0.9364621194359494	0.2180979445483321
0.6602293617934651	0.5643397930090468	0.2325380039485562
0.6648270750493086	0.8121472784347354	0.2229180456612776

0.5815550700599048	0.8141621358369217	0.2194642984680425
0.7048836800132861	0.6865697396164095	0.2271797131293756
0.7067224647090078	0.9360708670769333	0.2245458187450781
0.7885810908030081	0.6855567928871292	0.2290114803740459
0.7899221060721007	0.9360060524057805	0.2273980984331593
0.9135150344162728	0.5602234732508405	0.2320352284602873
0.9145647794434466	0.8104902901305565	0.2297409139540708
0.8292512619184235	0.5599696519484906	0.2319643814890616
0.8309117967784023	0.8104257944169675	0.2283394777801411
0.9559079106956344	0.6850005158138932	0.2308036948549912
0.9560999229832994	0.9359809957574320	0.2300961750756195
0.4156473931709560	0.2980049413677851	0.2422308222456835
0.5801865021927214	0.2979245590806404	0.2424395026030239
0.4159287028008821	0.5737546182181246	0.2341872633560015
0.5798752158756667	0.5736289843377598	0.2339020847658802
0.4979385060605961	0.4378373886162636	0.2540741392672047
0.4986685423820689	0.4570781869172121	0.3507064722921600
0.4979139323786243	0.5539724642237941	0.3617141478881702