			96	55	58	61	64	67	79	73	175	76	178	181	291	294	297	300	303	192	195	309	312	Notes
MOs :	occ:	E/eV	NH3, z	Ru,(z2)	Ru,(x2-y2)	Ru,(xy)	Ru,(xz)	Ru,(yz)	N(CN),(z)	N(CN),(x)	C(CN),(x)	N(CN),(y)	C(CN),(y)	C(CN),(z)	Cr,(z2)	Cr,(x2-y2)	Cr,(xy)	Cr,(xz)	Cr,(yz)	C(CO),x	C(CO),y	O(CO),x	O(CO),y	
51	1	-10.71								0.11		0.19	0.15									-0.18	-0.20	CN/CO
52	1	-10.50								-0.27	-0.20	0.26	0.17									0.18	-0.09	CN/CO
53	1	-10.38	**0.61**	0.24					0.23					0.28										$NH_3(\sigma)$
54	1	-10.03						0.16		0.16	0.10	0.43	0.20											cis-$NH_3(\sigma)$/CN
55	1	-9.98					-0.16			-0.45	-0.22											-0.16		cis-$NH_3(\sigma)$/CN
56	1	-9.57	0.38						0.43					-0.31	-0.13									trans-NH_3/CN(σ)
57	1	-9.41						0.13		-0.13		0.34	0.22											cis-$NH_3(\sigma)$/CN(x)
58	1	-9.38					-0.10			-0.34	-0.23	-0.18	-0.12											cis-$NH_3(\sigma)$/CN(y)
59	1	-7.09					-0.44	**0.54**			0.16		-0.20					-0.28	0.39			0.12	-0.18	Ru/Cr, xz,yz
60	1	-6.90					0.40	0.27		0.14	-0.15	0.11	-0.11					0.47	0.39	0.10		-0.21	-0.18	Ru/Cr, xz,yz
61	1	-6.77															**0.72**							Cr,xy/cis-CO(π)
62	1	-6.30				-0.11	0.39	-0.48		-0.20	-0.10	0.23	0.13					-0.38	0.42	-0.10	0.12	0.17	-0.19	Ru, xz,yz
63	1	-6.22				**0.98**																		Ru, xy
64	1	-6.00					**-0.61**	**-0.53**		0.18	0.18	0.16	0.17					0.29	0.25			-0.14	-0.12	Ru, xz,yz
65	0	-2.65												0.10										cis-CO*(nb)
66	0	-2.61	-0.14	0.33										0.34	-0.13									cis-CO*(nb)
67	0	-2.27			**0.88**																			Ru, x^2-y^2
68	0	-2.26			-0.16					-0.12		0.12								0.13	-0.13	-0.12	0.12	CO*
69	0	-2.21		-0.23																				CO*
70	0	-2.15	0.23	**-0.62**					-0.18					0.17										CO*, Ru-z^2
71	0	-1.75	0.11	-0.42					-0.15						0.11									Ru, z2
72	0	-1.56											0.13				**-0.72**		0.11		0.14			Cr, xy
73	0	-1.52						0.11		-0.22	0.28	-0.31	0.34				0.20	-0.38	0.18	**0.54**	0.35	-0.39	-0.23	
74	0	-1.51						0.12		0.19	-0.28	-0.36	0.42					0.33	0.19	-0.45	0.47	0.32	-0.30	
75	0	-1.38										0.15	-0.23						**0.62**		**-0.62**		0.45	
76	0	-1.34					-0.15			0.48	**-0.53**					-0.14		-0.42		-0.43	-0.10	0.26		
77	0	-1.05														**-0.71**		0.14						Cr, x2-y2
78	0	-0.83														-0.37								
79	0	-0.82														-0.19		0.17		-0.32		0.20		
80	0	-0.79																	0.12				0.19	
81	0	-0.57	0.28	-0.25											0.14									
82	0	-0.52								0.29	-0.36		0.09	0.16	**-0.70**			-0.16		0.19		-0.11		Cr, z^2
83	0	-0.23						0.16		0.16	-0.22	**-0.59**	**0.79**		0.21				0.20	0.21	**-0.52**	-0.13	0.32	CN(y)*
84	0	-0.14					-0.13			**0.50**	**-0.66**	0.25	-0.33	-0.10	0.24			-0.16	-0.10	**0.55**	0.22	-0.34	-0.13	CN(x)*
85	0	0.16	-0.26	0.23					0.20	0.10	-0.15				0.23					0.14				
86	0	0.33			-0.32											0.12								