

# Binuclear Homoleptic Rhodium Carbonyls: Structures, Energetics, and Vibrational Spectra

Xuejun Feng,<sup>a\*</sup> Chanyuan Xie,<sup>a</sup> Zhaohui Liu, Yaoming Xie,<sup>b</sup> R. Bruce King,<sup>b\*</sup> and  
Henry F. Schaefer III<sup>b</sup>

<sup>a</sup>*School of Chemical and Material Engineering, Jiangnan University, Wuxi 214122, P. R.  
China,*

<sup>b</sup>*Center for Computational Chemistry and Department of Chemistry, University of  
Georgia, Athens, Georgia 30602*

## Supporting Information

**Tables S1 to S23.** The harmonic vibrational frequencies (in  $\text{cm}^{-1}$ ) and their infrared intensities (in  $\text{km/mol}$ ) for the  $\text{Rh}_2(\text{CO})_n$  ( $n = 8, 7, 6, 5$ ) derivatives.

**Table S24.** Coordinates of the optimized  $\text{Rh}_2(\text{CO})_n$  ( $n = 8, 7, 6, 5$ ) structures using the B3LYP method.

The complete Gaussian 03 reference (reference 39).

The complete MOLPRO reference (Reference 42).

**Table S1.** The harmonic vibrational frequencies (in  $\text{cm}^{-1}$ ) and their IR intensities (in  $\text{km/mol}$ ) for  $\text{Rh}_2(\text{CO})_8$  (**8S-1**).

	B3LYP	BP86	MPW1PW91
a <sub>1</sub>	35 (0)	35 (0)	37 (0)
	60 (0)	60 (0)	62 (0)
	74 (0)	72 (0)	75 (0)
	97 (1)	95 (0)	98 (0)
	186 (0)	181 (0)	198 (0)
	293 (16)	298 (9)	311 (16)
	345 (3)	355 (3)	368 (5)
	362 (31)	396 (26)	392 (30)
	404 (1)	415 (1)	424 (1)
	460 (3)	455 (1)	474 (3)
	485 (2)	489 (1)	502 (1)
	547 (54)	531 (60)	563 (61)
	1931 (273)	1868 (232)	1973 (292)
	2110 (1696)	2020 (1528)	2153 (1686)
2166 (41)	2075 (44)	2210 (40)	
a <sub>2</sub>	31 (0)	30 (0)	32 (0)
	56 (0)	55 (0)	57 (0)
	79 (0)	77 (0)	81 (0)
	194 (0)	195 (0)	209 (0)
	281 (0)	283 (0)	295 (0)
	310 (0)	308 (0)	323 (0)
	366 (0)	388 (0)	389 (0)
	409 (0)	408 (0)	425 (0)
	540 (0)	537 (0)	560 (0)
	2102 (0)	2012 (0)	2145 (0)
b <sub>1</sub>	37 (0)	35 (0)	37 (0)
	64 (0)	64 (0)	66 (0)
	81 (0)	78 (0)	83 (0)
	287 (1)	285 (0)	301 (1)
	311 (14)	313 (7)	330 (10)
	356 (67)	378 (69)	378 (73)
	405 (13)	396 (2)	422 (14)
	423 (31)	427 (36)	441 (33)
	528 (29)	515 (27)	543 (34)
	1917 (926)	1860 (719)	1959 (926)
2109 (1444)	2019 (1298)	2153 (1422)	
b <sub>2</sub>	63 (0)	63 (0)	64 (0)
	74 (0)	72 (0)	75 (0)
	88 (0)	86 (0)	90 (0)
	220 (11)	218 (9)	230 (9)
	292 (37)	294 (32)	309 (39)
	351 (29)	387 (1)	381 (15)

368	(21)	393	(47)	388	(37)
459	(82)	453	(65)	473	(82)
480	(75)	487	(109)	497	(84)
642	(540)	621	(478)	669	(578)
2103	(66)	2012	(101)	2146	(65)
2132	(1509)	2042	(1352)	2175	(1450)

**Table S2.** The harmonic vibrational frequencies (in  $\text{cm}^{-1}$ ) and their IR intensities (in  $\text{km/mol}$ ) for  $\text{Rh}_2(\text{CO})_8$  (**8S-2**).

	B3LYP	BP86	MPW1PW91
a <sub>1</sub>	49 (0)	52 (0)	52 (0)
	90 (0)	90 (0)	95 (0)
	151 (0)	151 (0)	167 (0)
	378 (0)	405 (0)	403 (0)
	442 (0)	449 (0)	462 (0)
	471 (0)	477 (0)	489 (0)
	541 (0)	526 (0)	556 (0)
	2083 (0)	1999 (0)	2127 (0)
	2166 (0)	2078 (0)	2210 (0)
a <sub>2</sub>	76 (0)	73 (0)	76 (0)
	290 (0)	285 (0)	301 (0)
	473 (0)	466 (0)	489 (0)
b <sub>1</sub>	24 (0)	25 (0)	25 (0)
	77 (0)	75 (0)	78 (0)
	294 (0)	290 (0)	306 (0)
	467 (0)	458 (0)	482 (0)
b <sub>2</sub>	54 (1)	57 (1)	57 (1)
	104 (7)	102 (6)	109 (9)
	375 (5)	397 (5)	398 (2)
	423 (229)	432 (227)	436 (249)
	450 (68)	456 (78)	473 (59)
	510 (389)	509 (303)	527 (397)
	2091 (345)	2007 (598)	2135 (340)
	2112 (1298)	2032 (881)	2155 (1270)
e	32 (0)	33 (0)	34 (0)
	54 (1)	48 (1)	55 (1)
	82 (0)	80 (0)	85 (0)
	85 (0)	83 (0)	87 (0)
	266 (2)	265 (0)	282 (1)
	316 (0)	306 (0)	327 (0)
	384 (2)	407 (0)	407 (2)
	421 (27)	434 (15)	444 (24)
	465 (61)	456 (65)	480 (71)
	520 (31)	506 (29)	536 (34)
	2068 (166)	1986 (129)	2110 (201)
	2095 (2014)	2010 (1714)	2139 (1938)

**Table S3.** The harmonic vibrational frequencies (in  $\text{cm}^{-1}$ ) and their IR intensities (in  $\text{km/mol}$ ) for  $\text{Rh}_2(\text{CO})_8$  (**8S-3**).

	B3LYP		BP86		MPW1PW91	
$a_{1g}$	84	(0)	82	(0)	87	(0)
	147	(0)	147	(0)	162	(0)
	390	(0)	406	(0)	411	(0)
	432	(0)	455	(0)	457	(0)
	500	(0)	496	(0)	519	(0)
	2102	(0)	2017	(0)	2145	(0)
	2166	(0)	2078	(0)	2209	(0)
$a_{1u}$	42	(0)	42	(0)	43	(0)
	296	(0)	289	(0)	310	(0)
$a_{2g}$	294	(0)	289	(0)	306	(0)
$a_{2u}$	92	(1)	91	(1)	95	(2)
	368	(45)	388	(48)	388	(53)
	425	(6)	443	(34)	447	(17)
	474	(315)	479	(251)	494	(320)
	2076	(109)	1992	(139)	2119	(122)
	2137	(1548)	2054	(1237)	2181	(1516)
	$e_g$	52	(0)	51	(0)	54
73		(0)	68	(0)	73	(0)
84		(0)	82	(0)	86	(0)
292		(0)	302	(0)	311	(0)
358		(0)	361	(0)	377	(0)
456		(0)	457	(0)	475	(0)
508		(0)	504	(0)	527	(0)
2074		(0)	1989	(0)	2115	(0)
$e_u$	32	(0)	30	(0)	33	(0)
	72	(0)	71	(0)	74	(0)
	85	(0)	83	(0)	87	(0)
	293	(40)	307	(17)	312	(35)
	372	(48)	378	(51)	395	(54)
	453	(0)	452	(3)	472	(0)
	507	(62)	502	(64)	525	(71)
	2087	(1971)	2002	(1722)	2129	(1945)

**Table S4.** The harmonic vibrational frequencies (in  $\text{cm}^{-1}$ ) and their IR intensities (in  $\text{km/mol}$ ) for  $\text{Rh}_2(\text{CO})_7$  (**7S-1**)

	B3LYP	BP86	MPW1PW91
a <sub>1</sub>	51 (0)	53 (0)	54 (0)
	82 (1)	80 (1)	85 (1)
	94 (4)	91 (4)	96 (5)
	159 (0)	161 (0)	173 (0)
	372 (15)	399 (1)	398 (13)
	426 (51)	434 (120)	441 (75)
	443 (1)	452 (10)	460 (4)
	448 (9)	459 (41)	467 (18)
	456 (61)	463 (15)	475 (54)
	499 (394)	495 (255)	514 (378)
	545 (16)	530 (33)	560 (21)
	2078 (392)	1994 (438)	2120 (397)
	2098 (563)	2014 (587)	2142 (656)
	2119 (823)	2036 (569)	2162 (777)
2170 (47)	2083 (47)	2216 (51)	
a <sub>2</sub>	27 (0)	29 (0)	29 (0)
	73 (0)	70 (0)	74 (0)
	281 (0)	277 (0)	298 (0)
	329 (0)	320 (0)	339 (0)
	467 (0)	461 (0)	484 (0)
b <sub>1</sub>	31 (0)	15i (0)	31 (0)
	50 (0)	46 (0)	51 (0)
	61 (0)	52 (1)	61 (0)
	78 (0)	76 (0)	81 (0)
	310 (0)	297 (0)	323 (0)
	370 (17)	366 (10)	387 (16)
	431 (41)	443 (2)	456 (37)
	458 (29)	448 (63)	475 (41)
	473 (0)	456 (1)	488 (1)
	2064 (1302)	1981 (1090)	2105 (1333)
b <sub>2</sub>	23 (0)	24 (0)	24 (0)
	60 (1)	58 (1)	61 (1)
	83 (0)	79 (0)	84 (0)
	88 (0)	86 (0)	90 (0)
	246 (1)	247 (0)	268 (1)
	341 (3)	332 (1)	354 (5)
	382 (11)	407 (18)	408 (16)
	400 (29)	411 (3)	414 (19)
	496 (96)	481 (95)	512 (110)
	525 (0)	515 (1)	543 (0)
	2076 (35)	1991 (6)	2118 (35)
	2098 (2221)	2012 (1944)	2142 (2250)

**Table S5.** The harmonic vibrational frequencies (in  $\text{cm}^{-1}$ ) and their IR intensities (in  $\text{km/mol}$ ) for  $\text{Rh}_2(\text{CO})_7$  (**7S-2**).

	B3LYP		BP86		MPW1PW91	
a <sub>-</sub>	31	(0)	30	(0)	32	(0)
	61	(0)	60	(0)	63	(0)
	72	(1)	68	(1)	74	(1)
	79	(0)	75	(0)	81	(0)
	80	(1)	77	(0)	82	(0)
	89	(0)	87	(0)	92	(0)
	175	(0)	171	(0)	185	(0)
	218	(9)	216	(6)	227	(8)
	288	(15)	290	(10)	308	(15)
	340	(18)	351	(21)	361	(18)
	359	(18)	364	(6)	381	(33)
	372	(7)	394	(13)	392	(13)
	381	(13)	401	(38)	401	(22)
	424	(27)	436	(18)	442	(29)
	457	(11)	451	(16)	473	(11)
	472	(92)	476	(99)	491	(100)
	513	(20)	504	(26)	528	(18)
	520	(30)	507	(14)	535	(37)
	614	(480)	594	(412)	637	(517)
	1946	(214)	1875	(187)	1985	(218)
	2103	(914)	2015	(837)	2147	(940)
	2131	(1761)	2042	(1610)	2175	(1790)
	2164	(58)	2073	(60)	2209	(55)
a <sub>-</sub>	19	(0)	13	(0)	20	(0)
	32	(0)	30	(0)	33	(0)
	60	(0)	59	(0)	62	(0)
	73	(0)	71	(0)	76	(0)
	77	(0)	77	(0)	79	(0)
	191	(1)	198	(1)	206	(1)
	271	(1)	269	(0)	285	(0)
	281	(0)	278	(0)	298	(0)
	338	(6)	337	(0)	357	(3)
	348	(21)	346	(6)	363	(12)
	359	(45)	380	(25)	382	(28)
	393	(28)	390	(3)	412	(24)
	400	(1)	411	(10)	417	(4)
	436	(55)	440	(58)	455	(64)
	508	(33)	496	(38)	523	(38)
	550	(4)	545	(2)	570	(4)
	1922	(1025)	1861	(794)	1959	(1082)
	2102	(274)	2013	(227)	2145	(253)
	2109	(1222)	2020	(1097)	2152	(1283)

**Table S6.** The harmonic vibrational frequencies (in  $\text{cm}^{-1}$ ) and their IR intensities (in  $\text{km/mol}$ ) for  $\text{Rh}_2(\text{CO})_7$  (**7S-3**).

	B3LYP	BP86	MPW1PW91
a <sub>-</sub>	30 (0)	20 (0)	32 (0)
	50 (0)	48 (0)	53 (0)
	63 (0)	57 (0)	64 (0)
	72 (0)	65 (0)	73 (0)
	82 (0)	79 (0)	85 (0)
	90 (1)	95 (1)	95 (1)
	102 (2)	100 (3)	105 (2)
	150 (1)	151 (0)	162 (1)
	303 (10)	290 (9)	319 (9)
	352 (49)	351 (39)	374 (55)
	389 (22)	386 (28)	407 (27)
	403 (1)	406 (10)	422 (2)
	416 (5)	434 (12)	438 (2)
	427 (13)	444 (11)	446 (12)
	448 (0)	454 (23)	467 (1)
	462 (36)	456 (99)	482 (79)
	465 (91)	463 (12)	484 (41)
	474 (65)	469 (1)	491 (88)
	503 (54)	500 (52)	521 (61)
	550 (125)	537 (114)	566 (125)
	2048 (1058)	1951 (778)	2086 (1078)
	2077 (296)	1992 (308)	2119 (317)
	2103 (689)	2018 (693)	2146 (765)
	2129 (959)	2041 (834)	2173 (946)
	2180 (90)	2091 (94)	2225 (91)
a <sub>-</sub>	11i (0)	11i (0)	13i (0)
	35 (0)	33 (0)	36 (0)
	59 (0)	58 (0)	59 (0)
	75 (0)	72 (0)	78 (0)
	82 (0)	78 (0)	83 (0)
	100 (0)	97 (0)	103 (0)
	280 (3)	278 (1)	297 (2)
	306 (2)	308 (0)	323 (1)
	333 (1)	327 (0)	344 (1)
	351 (14)	348 (5)	365 (13)
	377 (28)	378 (14)	401 (23)
	405 (50)	414 (53)	421 (61)
	434 (2)	430 (1)	452 (1)
	515 (33)	509 (43)	533 (38)
	524 (16)	510 (5)	542 (18)
	2065 (336)	1983 (233)	2107 (358)
	2108 (1795)	2019 (1638)	2151 (1821)

**Table S7.** The harmonic vibrational frequencies (in  $\text{cm}^{-1}$ ) and their IR intensities (in  $\text{km/mol}$ ) for  $\text{Rh}_2(\text{CO})_7$  (**7S-4**).

	B3LYP	BP86	MPW1PW91
a <sub>1</sub>	44 (0)	46 (0)	46 (0)
	66 (1)	63 (0)	68 (0)
	113 (0)	106 (0)	120 (0)
	164 (0)	164 (0)	177 (0)
	267 (7)	308 (3)	292 (7)
	391 (1)	396 (2)	407 (1)
	425 (23)	437 (24)	446 (23)
	439 (2)	459 (0)	463 (1)
	501 (21)	498 (17)	517 (27)
	532 (1)	524 (0)	549 (1)
	2026 (645)	1923 (547)	2067 (662)
	2092 (34)	2007 (344)	2136 (332)
	2158 (6)	2069 (8)	2203 (6)
a <sub>2</sub>	21 (0)	20 (0)	19 (0)
	67 (0)	63 (0)	66 (0)
	88 (0)	85 (0)	90 (0)
	329 (0)	325 (0)	345 (0)
	363 (0)	358 (0)	379 (0)
	430 (0)	444 (0)	452 (0)
	504 (0)	491 (0)	522 (0)
	2065 (0)	1980 (0)	2106 (0)
	b <sub>1</sub>	49 (0)	50 (0)
72 (1)		70 (0)	74 (0)
112 (0)		105 (0)	118 (0)
258 (7)		273 (3)	273 (6)
329 (7)		322 (3)	344 (7)
350 (0)		345 (1)	364 (0)
393 (60)		411 (46)	414 (62)
499 (41)		485 (38)	516 (46)
2086 (2370)		1998 (2020)	2128 (2443)
b <sub>2</sub>		192i (99)	68i (31)
	52 (0)	71 (1)	55 (1)
	74 (0)	83 (0)	76 (0)
	90 (1)	117 (31)	92 (2)
	159 (9)	174 (13)	166 (8)
	368 (10)	369 (5)	384 (9)
	405 (43)	418 (63)	423 (59)
	433 (19)	446 (3)	454 (13)
	485 (236)	482 (168)	506 (239)
	519 (0)	517 (1)	536 (0)
	2072 (4)	1988 (0)	2115 (1)
	2111 (2539)	2027 (2130)	2154 (2660)



**Table S8.** The harmonic vibrational frequencies (in  $\text{cm}^{-1}$ ) and their IR intensities (in  $\text{km/mol}$ ) for  $\text{Rh}_2(\text{CO})_7$  (**7S-5**)

	B3LYP	BP86	MPW1PW91
a <sub>1</sub>	66 (0)	63 (0)	68 (0)
	74 (0)	73 (0)	78 (0)
	87 (0)	87 (0)	95 (0)
	191 (0)	188 (0)	206 (0)
	333 (37)	356 (7)	358 (35)
	361 (3)	369 (27)	383 (5)
	413 (25)	412 (23)	435 (29)
	429 (1)	450 (1)	454 (1)
	473 (19)	474 (14)	493 (22)
	508 (14)	504 (16)	529 (14)
	1935 (641)	1869 (548)	1972 (667)
	2102 (1399)	2013 (1240)	2145 (1438)
	2154 (7)	2063 (2)	2199 (2)
a <sub>2</sub>	30 (0)	28 (0)	31 (0)
	56 (0)	54 (0)	57 (0)
	70 (0)	68 (0)	73 (0)
	302 (0)	301 (0)	322 (0)
	330 (0)	338 (0)	351 (0)
	398 (0)	394 (0)	417 (0)
	426 (0)	446 (0)	452 (0)
	2079 (0)	1990 (0)	2125 (0)
	28i (0)	37i (0)	27i (0)
b <sub>1</sub>	52 (0)	48 (0)	53 (0)
	79 (1)	77 (0)	83 (0)
	230 (3)	204 (4)	251 (3)
	302 (1)	295 (0)	319 (1)
	343 (13)	330 (12)	362 (14)
	417 (65)	442 (51)	444 (66)
	506 (31)	496 (31)	525 (38)
	2093 (1601)	2003 (1431)	2138 (1627)
	27i (0)	37i (0)	27i (0)
b <sub>2</sub>	52 (0)	50 (0)	53 (0)
	81 (0)	78 (0)	83 (0)
	82 (1)	80 (0)	84 (1)
	205 (0)	210 (0)	216 (0)
	295 (28)	319 (11)	314 (31)
	351 (4)	361 (8)	371 (1)
	361 (8)	376 (26)	380 (20)
	459 (48)	467 (178)	480 (51)
	473 (200)	479 (53)	497 (216)
	597 (50)	594 (53)	619 (57)
	2073 (74)	1982 (69)	2114 (94)
	2122 (1731)	2035 (1369)	2167 (1776)

**Table S9.** The harmonic vibrational frequencies (in  $\text{cm}^{-1}$ ) and their IR intensities (in  $\text{km/mol}$ ) for  $\text{Rh}_2(\text{CO})_7$  (**7T-1**).

	B3LYP	BP86	MPW1PW91
a <sub>-</sub>	35 (0)	42 (0)	37 (0)
	45 (0)	49 (0)	46 (0)
	46 (1)	63 (0)	47 (0)
	65 (0)	67 (0)	67 (0)
	73 (0)	72 (0)	76 (0)
	75 (0)	116 (1)	78 (0)
	140 (0)	167 (0)	156 (0)
	206 (9)	193 (1)	216 (7)
	288 (6)	247 (0)	305 (4)
	319 (59)	312 (31)	343 (50)
	335 (32)	343 (11)	356 (39)
	356 (76)	366 (21)	381 (96)
	377 (18)	393 (14)	398 (17)
	387 (1)	401 (16)	409 (2)
	402 (6)	407 (14)	425 (5)
	417 (31)	433 (32)	438 (37)
	446 (2)	459 (26)	465 (2)
	471 (47)	477 (26)	490 (71)
	478 (30)	479 (38)	497 (17)
	523 (58)	526 (73)	545 (72)
	1931 (583)	1863 (584)	1969 (611)
	2078 (9)	1886 (258)	2121 (3)
	2088 (1221)	2003 (1555)	2131 (1229)
	2104 (1703)	2014 (779)	2148 (1691)
	2144 (65)	2055 (372)	2190 (67)
a <sub>-</sub>	12i (0)	9i (0)	2 (0)
	21 (0)	18 (0)	22 (0)
	28 (0)	45 (0)	28 (0)
	57 (0)	55 (0)	56 (0)
	77 (0)	71 (0)	79 (0)
	82 (0)	84 (0)	84 (0)
	228 (6)	239 (1)	248 (5)
	260 (4)	270 (0)	272 (3)
	288 (2)	286 (0)	307 (2)
	293 (0)	306 (1)	313 (0)
	322 (2)	360 (16)	340 (3)
	375 (32)	398 (2)	395 (30)
	389 (11)	425 (0)	414 (12)
	453 (5)	438 (64)	470 (4)
	488 (40)	473 (1)	509 (48)
	2072 (498)	1972 (649)	2113 (683)
	2080 (1743)	2006 (982)	2124 (1640)

**Table S10.** The harmonic vibrational frequencies (in  $\text{cm}^{-1}$ ) and their IR intensities (in  $\text{km/mol}$ ) for  $\text{Rh}_2(\text{CO})_7$  (**7T-2**)

	B3LYP	BP86	MPW1PW91
a <sub>1</sub>	27 (0)	41 (0)	43 (0)
	41 (0)	55 (0)	58 (0)
	55 (0)	62 (0)	65 (0)
	63 (0)	157 (0)	169 (0)
	157 (0)	327 (2)	341 (7)
	321 (8)	371 (36)	367 (35)
	343 (35)	405 (9)	409 (0)
	385 (1)	407 (2)	427 (29)
	407 (21)	431 (34)	438 (24)
	416 (25)	480 (1)	481 (4)
	463 (3)	1858 (458)	1948 (575)
	1914 (551)	2000 (1395)	2137 (1613)
2094 (1567)	2051 (27)	2191 (27)	
a <sub>2</sub>	59 (0)	27 (0)	28 (0)
	83 (0)	59 (0)	61 (0)
	268 (0)	83 (0)	87 (0)
	319 (0)	266 (0)	285 (0)
	382 (0)	315 (0)	336 (0)
	422 (0)	405 (0)	408 (0)
	467 (0)	434 (0)	441 (0)
	2089 (0)	1997 (0)	2133 (0)
	b <sub>1</sub>	73i (4)	20i (0)
40 (0)		52 (0)	38 (0)
79 (1)		80 (0)	79 (1)
214 (6)		240 (1)	168 (10)
246 (0)		268 (0)	265 (0)
297 (5)		319 (2)	312 (5)
365 (70)		392 (47)	389 (71)
501 (20)		490 (32)	518 (21)
2074 (2120)		1985 (1749)	2111 (2330)
b <sub>2</sub>	503i (5)	222i (8)	580i (37)
	24 (12)	42 (2)	26i (24)
	65 (0)	66 (0)	67 (0)
	71 (0)	91 (1)	75 (0)
	205 (29)	214 (0)	210 (59)
	269 (139)	295 (29)	274 (153)
	320 (64)	342 (199)	353 (64)
	337 (134)	365 (0)	360 (149)
	399 (0)	427 (3)	419 (0)
	554 (11)	553 (38)	576 (10)
	2081 (69)	1987 (1)	2123 (494)
	2089 (2923)	2008 (2038)	2130 (2740)

**Table S11.** The harmonic vibrational frequencies (in  $\text{cm}^{-1}$ ) and their IR intensities (in  $\text{km/mol}$ ) for  $\text{Rh}_2(\text{CO})_7$  (**7T-3**)

	B3LYP	BP86	MPW1PW91
a <sub>1</sub>	59 (0)	58 (0)	62 (0)
	70 (0)	68 (0)	71 (0)
	93 (0)	90 (0)	95 (0)
	187 (0)	197 (0)	200 (0)
	309 (2)	330 (1)	337 (1)
	362 (1)	372 (1)	384 (1)
	399 (0)	413 (4)	419 (1)
	426 (18)	421 (14)	444 (20)
	473 (1)	470 (2)	491 (1)
	530 (24)	517 (21)	547 (30)
	1893 (730)	1839 (640)	1935 (780)
	2001 (349)	1917 (270)	2037 (340)
	2149 (85)	2053 (62)	2195 (97)
a <sub>2</sub>	42 (0)	41 (0)	45 (0)
	57 (0)	47 (0)	65 (0)
	169 (0)	159 (0)	184 (0)
	198 (0)	186 (0)	235 (0)
	272 (0)	264 (0)	294 (0)
	359 (0)	383 (0)	385 (0)
	432 (0)	423 (0)	449 (0)
	2091 (0)	1994 (0)	2136 (0)
b <sub>1</sub>	71 (0)	69 (0)	73 (0)
	75 (2)	80 (2)	80 (2)
	139 (0)	164 (0)	162 (0)
	187 (1)	187 (0)	198 (0)
	256 (2)	266 (1)	268 (1)
	366 (27)	392 (20)	389 (29)
	426 (43)	423 (46)	442 (47)
	468 (13)	470 (3)	491 (14)
	594 (182)	586 (210)	624 (228)
2111 (2503)	2018 (2126)	2157 (2433)	
b <sub>2</sub>	45 (1)	43 (1)	46 (1)
	64 (0)	63 (0)	67 (0)
	80 (1)	80 (1)	83 (1)
	291 (1)	292 (2)	307 (1)
	308 (4)	317 (1)	329 (4)
	344 (18)	340 (5)	356 (15)
	370 (7)	379 (4)	390 (10)
	401 (13)	409 (17)	423 (16)
	505 (32)	491 (34)	521 (37)
	1896 (685)	1841 (539)	1937 (706)
	2096 (1703)	2000 (1514)	2141 (1742)

**Table S12.** The harmonic vibrational frequencies (in  $\text{cm}^{-1}$ ) and their IR intensities (in  $\text{km/mol}$ ) for  $\text{Rh}_2(\text{CO})_6$  (**6S-1**).

	B3LYP	BP86	MPW1PW91
a	31 (0)	37 (0)	32 (0)
	72 (0)	70 (0)	74 (0)
	188 (0)	191 (0)	197 (0)
	327 (0)	324 (0)	339 (0)
	372 (0)	391 (0)	389 (0)
	436 (0)	450 (0)	455 (0)
	488 (0)	478 (0)	508 (0)
	1945 (0)	1875 (0)	987 (0)
	2157 (0)	2062 (0)	2202 (0)
b <sub>1</sub>	59 (0)	58 (0)	60 (0)
	76 (0)	76 (0)	79 (0)
	357 (6)	357 (0)	375 (6)
	398 (2)	406 (0)	413 (2)
	405 (27)	426 (2)	423 (24)
	455 (90)	458 (75)	473 (105)
	1923 (1317)	1066 (1037)	1963 (1340)
	2099 (868)	2003 (521)	2143 (907)
	b <sub>2</sub>	14i (0)	7i (0)
43 (1)		34 (0)	45 (1)
94 (0)		94 (0)	96 (0)
228 (0)		239 (0)	240 (0)
290 (0)		284 (1)	305 (0)
345 (6)		343 (7)	358 (5)
379 (18)		376 (7)	397 (16)
461 (1)		452 (5)	476 (1)
545 (31)		525 (39)	564 (33)
2102 (961)		2009 (1085)	2145 (894)
b <sub>3</sub>	23 (0)	30 (0)	26 (0)
	79 (0)	77 (0)	81 (0)
	207 (2)	196 (1)	212 (2)
	311 (1)	302 (0)	324 (1)
	391 (16)	401 (2)	410 (16)
	461 (122)	460 (119)	479 (123)
	503 (43)	505 (29)	516 (52)
	602 (237)	570 (89)	624 (264)
	2121 (2346)	2027 (2048)	2164 (2346)

**Table S13.** The harmonic vibrational frequencies (in  $\text{cm}^{-1}$ ) and their IR intensities (in  $\text{km/mol}$ ) for  $\text{Rh}_2(\text{CO})_6$  (**6S-2**)

	B3LYP	BP86	MPW1PW91
a <sub>1</sub>	77 (0)	74 (0)	79 (0)
	165 (0)	167 (0)	177 (0)
	430 (0)	445 (0)	449 (0)
	446 (0)	459 (0)	465 (0)
	548 (0)	531 (0)	562 (0)
	2096 (0)	2012 (0)	2139 (0)
	2169 (0)	2081 (0)	2213 (0)
a <sub>2</sub>	323 (0)	313 (0)	332 (0)
b <sub>1</sub>	35 (0)	38 (0)	37 (0)
	334 (0)	326 (0)	345 (0)
b <sub>2</sub>	82 (4)	77 (4)	82 (5)
	419 (1)	436 (11)	438 (0)
	440 (20)	450 (15)	457 (27)
	495 (431)	485 (357)	507 (448)
	2087 (1379)	2003 (1350)	2130 (1481)
	2131 (665)	2048 (458)	2173 (652)
	27 (0)	12i (0)	26 (0)
	53 (1)	44 (0)	52 (1)
	62 (0)	56 (0)	61 (0)
	82 (0)	80 (0)	83 (0)
	344 (1)	332 (0)	356 (1)
	373 (18)	374 (9)	388 (18)
	418 (34)	423 (21)	434 (32)
	461 (4)	443 (3)	474 (4)
	506 (44)	500 (48)	524 (54)
	2080 (1475)	1994 (1279)	2121 (1507)

**Table S14.** The harmonic vibrational frequencies (in  $\text{cm}^{-1}$ ) and their IR intensities (in  $\text{km/mol}$ ) for  $\text{Rh}_2(\text{CO})_6$  (**6S-3**).

	B3LYP	BP86	MPW1PW91
$a_g$	77 (0)	75 (0)	80 (0)
	200 (0)	204 (0)	213 (0)
	342 (0)	365 (0)	362 (0)
	458 (0)	479 (0)	480 (0)
	530 (0)	522 (0)	550 (0)
	2020 (0)	1924 (0)	2062 (0)
	2141 (0)	2051 (0)	2186 (0)
$a_u$	34i (0)	49i (0)	35i (0)
	270 (0)	235 (0)	286 (0)
$b_{1g}$	84 (0)	78 (0)	87 (0)
	383 (0)	383 (0)	402 (0)
	454 (0)	471 (0)	477 (0)
	2074 (0)	1986 (0)	2118 (0)
$b_{2g}$	71 (0)	69 (0)	73 (0)
	176 (0)	193 (0)	187 (0)
	319 (0)	331 (0)	335 (0)
	485 (0)	470 (0)	503 (0)
$b_{3g}$	56 (0)	56 (0)	58 (0)
	297 (0)	289 (0)	312 (0)
	509 (0)	517 (0)	528 (0)
$b_{1u}$	63 (0)	61 (0)	65 (0)
	327 (22)	355 (11)	348 (22)
	463 (34)	468 (29)	482 (39)
	2011 (1435)	1918 (1173)	2052 (1490)
$b_{2u}$	19 (0)	22 (0)	21 (0)
	64 (0)	65 (0)	66 (0)
	298 (2)	297 (1)	315 (1)
	428 (85)	426 (52)	448 (78)
	452 (24)	471 (34)	473 (39)
	2084 (1790)	1996 (1576)	2128 (1823)
$b_{3u}$	76 (1)	76 (0)	72 (5)
	121 (12)	139 (2)	109 (19)
	161 (18)	281 (26)	164 (15)
	412 (12)	418 (24)	429 (16)
	511 (126)	510 (76)	532 (132)
	2108 (2130)	2018 (1858)	2153 (2213)

**Table S15.** The harmonic vibrational frequencies (in  $\text{cm}^{-1}$ ) and their IR intensities (in  $\text{km/mol}$ ) for  $\text{Rh}_2(\text{CO})_6$  (**6S-4**).

	B3LYP		BP86		MPW1PW91	
$a_g$	131	(0)	132	(0)	141	(0)
	147	(0)	144	(0)	153	(0)
	429	(0)	438	(0)	445	(0)
	456	(0)	473	(0)	478	(0)
	562	(0)	548	(0)	579	(0)
	2096	(0)	2014	(0)	2139	(0)
	2171	(0)	2085	(0)	2215	(0)
$a_u$	38i	(0)	38i	(0)	40i	(0)
	327	(0)	319	(0)	336	(0)
$b_{1g}$	324	(0)	316	(0)	334	(0)
$b_{2g}$	24	(0)	24i	(0)	23	(0)
	68	(0)	56	(0)	67	(0)
	397	(0)	391	(0)	413	(0)
	459	(0)	431	(0)	472	(0)
$b_{3g}$	32	(0)	14	(0)	19	(0)
	90	(0)	87	(0)	91	(0)
	349	(0)	346	(0)	363	(0)
	435	(0)	447	(0)	455	(0)
	526	(0)	515	(0)	542	(0)
	2057	(0)	1972	(0)	2097	(0)
$b_{1u}$	100	(4)	95	(4)	100	(5)
	411	(21)	419	(31)	425	(28)
	457	(28)	474	(11)	478	(28)
	560	(385)	554	(303)	578	(397)
	2080	(513)	1999	(583)	2122	(522)
	2123	(1702)	2043	(1299)	2165	(1779)
$b_{2u}$	72	(0)	70	(0)	74	(0)
	144	(0)	141	(0)	150	(0)
	356	(7)	351	(1)	370	(8)
	428	(133)	438	(115)	447	(140)
	527	(14)	515	(9)	545	(15)
	2092	(2719)	2007	(2339)	2133	(2809)
$b_{3u}$	22	(0)	4i	(0)	23	(0)
	59	(1)	48	(1)	59	(2)
	345	(3)	336	(2)	361	(3)
	457	(1)	435	(0)	470	(1)



**Table S16.** The harmonic vibrational frequencies (in  $\text{cm}^{-1}$ ) and their IR intensities (in  $\text{km/mol}$ ) for  $\text{Rh}_2(\text{CO})_6$  (**6T-1**).

	B3LYP	BP86	MPW1PW91
$a_g$	43 (0)	47 (0)	45 (0)
	69 (0)	68 (0)	73 (0)
	180 (0)	189 (0)	191 (0)
	278 (0)	281 (0)	297 (0)
	334 (0)	368 (0)	351 (0)
	393 (0)	410 (0)	415 (0)
	446 (0)	444 (0)	473 (0)
	493 (0)	503 (0)	511 (0)
	1956 (0)	1870 (0)	1993 (0)
	2130 (0)	2037 (0)	2175 (0)
$a_u$	29 (0)	33 (0)	25 (1)
	73 (0)	71 (0)	77 (0)
	179 (3)	185 (1)	186 (4)
	260 (5)	278 (4)	260 (8)
	361 (17)	417 (24)	375 (14)
	398 (52)	441 (44)	422 (47)
	466 (76)	474 (69)	492 (93)
	2095 (2804)	2007 (2315)	2140 (2905)
$b_g$	28i (0)	32i (0)	31i (0)
	78 (0)	76 (0)	81 (0)
	187 (0)	221 (0)	200 (0)
	239 (0)	266 (0)	255 (0)
	302 (0)	298 (0)	324 (0)
	357 (0)	361 (0)	377 (0)
	414 (0)	438 (0)	445 (0)
	2076 (0)	1984 (0)	2120 (0)
	$b_u$	12 (0)	16 (0)
31 (1)		30 (0)	30 (0)
63 (1)		66 (0)	64 (0)
280 (0)		277 (0)	298 (0)
324 (4)		318 (3)	345 (3)
354 (11)		375 (4)	374 (12)
392 (34)		414 (10)	415 (23)
426 (63)		444 (64)	447 (81)
1955 (1208)		1861 (933)	1993 (1253)
2082 (1831)		1990 (1630)	2125 (1841)

**Table S17.** The harmonic vibrational frequencies (in  $\text{cm}^{-1}$ ) and their IR intensities (in  $\text{km/mol}$ ) for  $\text{Rh}_2(\text{CO})_6$  (**6T-2**).

	B3LYP	BP86	MPW1PW91
a <sub>g</sub>	56 (0)	57 (0)	58 (0)
	198 (0)	202 (0)	211 (0)
	371 (0)	400 (0)	390 (0)
	396 (0)	412 (0)	417 (0)
	442 (0)	466 (0)	459 (0)
	1967 (0)	1883 (0)	2008 (0)
	2136 (0)	2036 (0)	2179 (0)
a <sub>u</sub>	36 (0)	37 (0)	37 (0)
	315 (0)	320 (0)	330 (0)
b <sub>1g</sub>	56 (0)	53 (0)	57 (0)
	296 (0)	287 (0)	311 (0)
	352 (0)	389 (0)	372 (0)
	2077 (0)	1979 (0)	2119 (0)
b <sub>2g</sub>	24i (0)	8i (0)	47i (0)
	202 (0)	207 (0)	200 (0)
	239 (0)	262 (0)	244 (0)
	283 (0)	295 (0)	301 (0)
b <sub>3g</sub>	95i (0)	107i (0)	100i (0)
	130 (0)	120 (0)	138 (0)
	302 (0)	318 (0)	312 (0)
b <sub>1u</sub>	73i (1)	73i (0)	84i (1)
	194 (0)	186 (0)	198 (0)
	373 (15)	392 (10)	396 (15)
	1949 (1207)	1866 (940)	1989 (1259)
b <sub>2u</sub>	18 (0)	17 (0)	17 (0)
	72 (1)	70 (1)	73 (1)
	259 (6)	254 (2)	272 (6)
	364 (44)	392 (14)	382 (40)
	429 (43)	430 (53)	445 (52)
	2086 (2090)	1989 (1838)	2128 (2137)
b <sub>3u</sub>	48 (0)	54 (0)	47 (0)
	162 (1)	174 (0)	161 (1)
	324 (7)	378 (23)	330 (8)
	354 (145)	390 (108)	370 (148)
	428 (26)	472 (8)	440 (36)
	2092 (2585)	1996 (2201)	2133 (2696)

**Table S18.** The harmonic vibrational frequencies (in  $\text{cm}^{-1}$ ) and their IR intensities (in  $\text{km/mol}$ ) for  $\text{Rh}_2(\text{CO})_6$  (**6T-3**).

	B3LYP	BP86	MPW1PW91
a'	40 (0)	25 (0)	37 (0)
	54 (0)	52 (0)	58 (0)
	62 (1)	62 (0)	67 (0)
	74 (0)	73 (0)	76 (0)
	85 (0)	82 (1)	88 (0)
	88 (0)	86 (0)	92 (0)
	139 (0)	148 (0)	155 (0)
	320 (3)	309 (5)	335 (4)
	342 (0)	347 (2)	364 (0)
	392 (26)	409 (32)	411 (32)
	399 (43)	417 (13)	415 (40)
	414 (21)	438 (3)	437 (22)
	428 (0)	451 (42)	446 (2)
	442 (6)	459 (12)	459 (12)
	448 (0)	466 (8)	468 (1)
	492 (2)	490 (17)	509 (10)
	501 (58)	496 (33)	521 (57)
	511 (196)	499 (96)	529 (208)
	2057 (146)	1968 (348)	2099 (165)
	2076 (1254)	1987 (932)	2117 (1259)
	2084 (790)	2001 (546)	2127 (812)
	2094 (1438)	2011 (1186)	2137 (1435)
	2150 (85)	2062 (109)	2196 (103)
a''	4 (0)	7i (0)	4i (1)
	28 (0)	16 (0)	30 (0)
	46 (0)	42 (0)	47 (0)
	65 (0)	62 (0)	66 (0)
	76 (0)	76 (0)	78 (0)
	283 (1)	285 (0)	298 (0)
	312 (0)	304 (0)	323 (0)
	326 (1)	326 (1)	344 (1)
	358 (3)	364 (1)	382 (5)
	378 (37)	397 (17)	399 (36)
	424 (14)	416 (1)	445 (13)
	432 (1)	427 (21)	450 (4)
	2062 (1588)	1972 (1329)	2103 (1645)

**Table S19.** The harmonic vibrational frequencies (in  $\text{cm}^{-1}$ ) and their IR intensities (in  $\text{km/mol}$ ) for  $\text{Rh}_2(\text{CO})_6$  (**6T-5**)\*

	B3LYP	BP86	MPW1PW91
a <sub>1</sub> <sup>+</sup>	53 (0)	53 (0)	54 (0)
	175 (0)	172 (0)	189 (0)
	394 (0)	421 (0)	413 (0)
	455 (0)	481 (0)	469 (0)
	2135 (0)	2037 (0)	2179 (0)
a <sub>1</sub> <sup>g</sup>	9 (0)	7 (0)	9 (0)
	263 (0)	260 (0)	276 (0)
a <sub>2</sub> <sup>+</sup>	259 (0)	257 (0)	273 (0)
a <sub>2</sub> <sup>g</sup>	94i (44)	52i (0)	127i (79)
	166 (120)	215 (48)	157 (111)
	390 (35)	424 (19)	406 (41)
	2068 (2814)	1988 (2036)	2108 (2993)
e <sup>+</sup>	11i (1)	8i (0)	22i (1)
	61 (0)	63 (0)	63 (0)
	241 (5)	245 (2)	249 (6)
	367 (113)	400 (95)	390 (120)
	444 (12)	456 (4)	460 (14)
	2071 (2094)	1977 (1800)	2114 (2161)
e <sup>g</sup>	267i (0)	69i (0)	332i (0)
	29 (0)	29 (0)	15 (0)
	90 (0)	167 (0)	90 (0)
	277 (0)	294 (0)	284 (0)
	375 (0)	411 (0)	396 (0)
	2058 (0)	1960 (0)	2099 (0)

\*Only one line for each frequency for the degenerate modes

**Table S20.** The harmonic vibrational frequencies (in  $\text{cm}^{-1}$ ) and their IR intensities (in  $\text{km/mol}$ ) for  $\text{Rh}_2(\text{CO})_6$  (**6T-4**).

	B3LYP		BP86		MPW1PW91	
a <sub>1g</sub>	51	(0)	51	(0)	54	(0)
	174	(0)	171	(0)	189	(0)
	394	(0)	422	(0)	413	(0)
	451	(0)	478	(0)	469	(0)
	2135	(0)	2036	(0)	2179	(0)
a <sub>2g</sub>	260	(0)	257	(0)	9	(0)
a <sub>1u</sub>	11i	(15)	9i	(0)	276	(0)
	256	(0)	254	(0)	273	(0)
a <sub>2u</sub>	109i	(65)	60i	(4)	127i	(79)
	155	(117)	208	(52)	157	(111)
	390	(35)	423	(19)	406	(41)
	2068	(2829)	1988	(2027)	2108	(2993)
e <sub>g</sub>	13i	(0)	34i	(0)	22i	(1)
	65	(0)	63	(0)	63	(0)
	239	(0)	232	(0)	249	(6)
	376	(0)	408	(0)	390	(120)
	443	(0)	454	(0)	460	(13)
	2063	(0)	1966	(0)	2114	(2161)
e <sub>u</sub>	318i	(17)	74i	(3)	332i	(0)
	18i	(0)	8	(0)	16	(0)
	84	(3)	166	(13)	90	(0)
	274	(1)	291	(8)	284	(0)
	368	(98)	405	(71)	396	(0)
	2067	(2152)	1972	(1850)	2099	(0)

**Table S21.** The harmonic vibrational frequencies (in  $\text{cm}^{-1}$ ) and their IR intensities (in  $\text{km/mol}$ ) for  $\text{Rh}_2(\text{CO})_5$  (**5S-1**).

	B3LYP	BP86	MPW1PW91
a <sub>1</sub>	45 (1)	44 (1)	46 (1)
	72 (0)	70 (0)	75 (0)
	195 (0)	196 (0)	205 (0)
	367 (0)	368 (0)	382 (0)
	412 (7)	427 (4)	432 (7)
	452 (9)	474 (4)	471 (8)
	519 (10)	511 (9)	538 (11)
	1980 (760)	1897 (591)	2020 (780)
	2140 (17)	2048 (10)	2185 (12)
a <sub>2</sub>	25 (0)	29 (0)	28 (0)
	72 (0)	67 (0)	74 (0)
	321 (0)	321 (0)	336 (0)
	399 (0)	394 (0)	413 (0)
	452 (0)	471 (0)	472 (0)
	2072 (0)	1982 (0)	2115 (0)
b <sub>1</sub>	7 (0)	10 (0)	7 (0)
	70 (0)	70 (0)	72 (0)
	289 (1)	282 (0)	304 (1)
	328 (2)	322 (2)	341 (2)
	438 (88)	460 (74)	460 (91)
	492 (20)	486 (7)	510 (25)
2080 (2023)	1990 (1777)	2123 (2076)	
b <sub>2</sub>	49 (0)	48 (0)	53 (0)
	69 (0)	70 (0)	70 (0)
	179 (0)	193 (0)	188 (0)
	308 (3)	323 (4)	320 (5)
	385 (7)	389 (2)	402 (8)
	451 (52)	454 (101)	471 (55)
	493 (111)	501 (30)	513 (127)
	2107 (2010)	2018 (1671)	2151 (2097)

**Table S22.** The harmonic vibrational frequencies (in  $\text{cm}^{-1}$ ) and their IR intensities (in  $\text{km/mol}$ ) for  $\text{Rh}_2(\text{CO})_5$  (**5T-1**).

	B3LYP	BP86	MPW1PW91
a	35 (0)	39 (1)	38 (0)
	43 (0)	60 (0)	44 (0)
	59 (0)	62 (0)	60 (0)
	77 (0)	81 (0)	79 (0)
	158 (0)	196 (2)	172 (0)
	294 (1)	232 (2)	303 (1)
	309 (0)	341 (2)	324 (0)
	350 (2)	386 (3)	367 (3)
	376 (13)	402 (1)	398 (12)
	414 (4)	429 (2)	438 (4)
	423 (10)	453 (9)	444 (13)
	439 (2)	475 (1)	458 (1)
	1949 (627)	1888 (632)	1990 (651)
	2063 (491)	1934 (211)	2104 (501)
	2118 (8)	2019 (45)	2162 (12)
b	14i (0)	20i (3)	22i (0)
	56 (0)	65 (1)	57 (0)
	67 (0)	72 (0)	70 (22)
	70 (1)	81 (5)	73 (1)
	192 (0)	164 (2)	199 (1)
	274 (4)	207 (9)	279 (8)
	275 (2)	267 (3)	285 (3)
	332 (54)	339 (11)	349 (52)
	365 (14)	395 (36)	383 (13)
	394 (132)	414 (6)	416 (150)
	403 (28)	433 (10)	420 (23)
	439 (8)	441 (53)	459 (7)
	484 (49)	500 (40)	504 (58)
	2054 (1133)	1918 (909)	2094 (1146)
	2080 (2815)	1987 (2570)	2122 (2905)

**Table S23.** The harmonic vibrational frequencies (in  $\text{cm}^{-1}$ ) and their IR intensities (in  $\text{km/mol}$ ) for  $\text{Rh}_2(\text{CO})_5$  (**5T-2**).

	B3LYP	BP86	MPW1PW91
a <sub>1</sub>	18 (1)	16 (1)	24 (1)
	68 (1)	67 (17)	69 (1)
	243 (0)	253 (0)	255 (0)
	308 (1)	312 (0)	325 (1)
	331 (9)	358 (8)	355 (9)
	372 (0)	393 (0)	392 (0)
	426 (0)	452 (0)	444 (1)
	450 (0)	453 (0)	466 (0)
	1978 (999)	1888 (806)	2016 (1023)
	2004 (6)	1914 (1)	2044 (20)
	2123 (2)	2025 (2)	2167 (7)
a <sub>2</sub>	167i (0)	79i (0)	208i (0)
	91 (0)	158 (0)	90 (0)
	177 (0)	199 (0)	183 (0)
	311 (0)	320 (0)	316 (0)
b <sub>1</sub>	32i (1)	27i (1)	45i (1)
	68 (1)	67 (1)	69 (1)
	261 (0)	270 (0)	271 (0)
	284 (0)	293 (0)	283 (0)
	330 (10)	356 (7)	352 (9)
	452 (0)	455 (0)	470 (0)
	1980 (1020)	1889 (817)	2021 (1071)
b <sub>2</sub>	129i (0)	48i (0)	147i (0)
	104 (0)	162 (0)	109 (0)
	148 (2)	167 (0)	154 (2)
	177 (0)	217 (0)	179 (0)
	323 (5)	330 (1)	235 (15)
	355 (154)	388 (89)	366 (160)
	481 (54)	504 (32)	500 (54)
	2078 (3684)	1986 (2960)	2119 (3850)



**Table S24.** Coordinates of the optimized  $\text{Rh}_2(\text{CO})_n$  ( $n = 8, 7, 6, 5$ ) structures using the B3LYP method.

**8S-1**

0	1			
C	0	1.436415	2.172905	-1.531149
C	0	-1.436415	2.172905	-1.531149
O	0	0.000000	3.203053	2.175431
O	0	2.258424	2.652548	-2.175431
O	0	-2.258424	2.652548	-2.175431
C	0	-1.436415	-2.172905	-1.531149
C	0	1.436415	-2.172905	-1.531149
O	0	-2.258424	-2.652548	-2.175431
O	0	2.258424	-2.652548	-2.175431
O	0	0.000000	-3.203053	2.175431
O	0	2.462790	0.000000	0.785620
Rh	0	0.000000	1.407211	-0.395284
Rh	0	0.000000	-1.407211	-0.395284
C	0	1.391261	0.000000	0.300545
C	0	0.000000	2.491640	1.272790
C	0	0.000000	-2.491640	1.272790
O	0	-2.462790	0.000000	0.785620
C	0	-1.391261	0.000000	0.300545

**8S-2**

0	1			
Rh	0	-1.431870	0.029663	0.182144
C	0	-0.933075	1.811035	0.759277
C	0	-1.166397	-1.767487	-0.492188
C	0	-2.234436	-0.516266	1.892838
C	0	-2.614075	0.616684	-1.276031
O	0	-0.724426	2.887024	1.118973
O	0	-1.098450	-2.849274	-0.887070
O	0	-2.773163	-0.820953	2.864578
O	0	-3.365982	0.948135	-2.083603
Rh	0	1.431870	-0.029663	-0.182144
C	0	1.262650	-0.657074	1.643448
C	0	0.836853	0.613571	-1.910522
C	0	2.528305	1.545135	0.249527
C	0	2.320206	-1.645630	-0.866333
O	0	1.252701	-1.037277	2.732529
O	0	0.570175	0.999512	-2.964417
O	0	3.232025	2.427582	0.480713
O	0	2.907089	-2.554794	-1.261703

**8S-3**

	0	1	
Rh 0	-1.383148	0.011185	0.390823
C 0	-0.736481	0.900452	2.026321
O 0	-0.408005	1.422546	3.000015
C 0	-1.658524	1.079773	-1.242004
O 0	-1.870865	1.706985	-2.185425
C 0	-1.261749	-1.950745	0.248917
O 0	-1.241302	-3.101089	0.180054
C 0	-3.233551	0.026108	0.913651
O 0	-4.340607	0.035034	1.226471
Rh 0	1.383148	-0.011185	-0.390823
C 0	1.261749	1.950745	-0.248917
O 0	1.241302	3.101089	-0.180054
C 0	3.233551	-0.026108	-0.913651
O 0	4.340607	-0.035034	-1.226471
C 0	0.736481	-0.900452	-2.026321
O 0	0.408005	-1.422546	-3.000015
C 0	1.658524	-1.079773	1.242004
O 0	1.870865	-1.706985	2.185425

**7S-1**

	0	1	
Rh 0	0.000000	0.000000	-2.061245
C 0	0.000000	1.668170	-3.113875
C 0	0.000000	-1.668170	-3.113875
C 0	1.871090	0.000000	-1.581075
C 0	-1.871090	0.000000	-1.581075
O 0	0.000000	2.610970	-3.778265
O 0	0.000000	-2.610970	-3.778265
O 0	3.003610	0.000000	-1.350105
O 0	-3.003610	0.000000	-1.350105
Rh 0	0.000000	0.000000	0.723375
C 0	0.000000	1.924560	0.496325
C 0	0.000000	-1.924560	0.496325
C 0	0.000000	0.000000	2.625035
O 0	0.000000	3.071300	0.401115
O 0	0.000000	-3.071300	0.401115
O 0	0.000000	0.000000	3.778265

**7S-2**

	0	1	
Rh 0	-0.251478	1.247951	0.000000
Rh 0	-0.390779	-1.561556	0.000000
C 0	1.285124	-2.624801	0.000000
O 0	2.190760	-3.334332	0.000000
C 0	0.209645	-0.157454	1.453826
O 0	0.638175	-0.182087	2.547003
C 0	-1.536679	-2.323281	1.429183
O 0	-2.190760	-2.839984	2.221694
C 0	-0.565979	2.535277	1.421276
O 0	-0.757828	3.334332	2.225624
C 0	0.209645	-0.157454	-1.453826
O 0	0.638175	-0.182087	-2.547003
C 0	-1.536679	-2.323281	-1.429183
O 0	-2.190760	-2.839984	-2.221694
C 0	-0.565979	2.535277	-1.421276
O 0	-0.757828	3.334332	-2.225624

**7S-3**

0	1		
O 0	2.359140	0.401337	0.000000
C 0	1.245958	0.723792	0.000000
Rh 0	-0.557690	1.426995	0.000000
C 0	-0.038255	3.294640	0.000000
O 0	0.284373	4.400452	0.000000
C 0	-1.689916	1.506133	1.617010
C 0	-1.689916	1.506133	-1.617010
O 0	-2.359140	1.667194	2.544150
O 0	-2.359140	1.667194	-2.544150
Rh 0	-0.748024	-1.357031	0.000000
C 0	-0.887399	-3.251662	0.000000
O 0	-0.986130	-4.400452	0.000000
C 0	-0.695349	-1.246833	1.936241
C 0	-0.695349	-1.246833	-1.936241
O 0	-0.629302	-1.257793	3.082990
O 0	-0.629302	-1.257793	-3.082990

**7S-4**

0	1		
O 0	0.000000	0.000000	1.841444
C 0	0.000000	0.000000	0.682390
Rh 0	0.000000	1.370519	-1.007821
Rh 0	0.000000	-1.370519	-1.007821
C 0	0.000000	3.199650	-0.434159
C 0	0.000000	-3.199650	-0.434159
O 0	0.000000	4.300205	-0.090161
O 0	0.000000	-4.300205	-0.090161
C 0	-1.874350	1.436197	-1.533774
C 0	-1.874350	-1.436197	-1.533774
C 0	1.874350	1.436197	-1.533774
C 0	1.874350	-1.436197	-1.533774
O 0	-2.968400	1.633084	-1.841444
O 0	-2.968400	-1.633084	-1.841444
O 0	2.968400	1.633084	-1.841444
O 0	2.968400	-1.633084	-1.841444

**7S-5**

0	1		
O 0	0.000000	0.000000	2.971555
C 0	0.000000	0.000000	1.794765
Rh 0	0.000000	1.306510	0.178825
Rh 0	0.000000	-1.306510	0.178825
C 0	1.406720	2.495780	0.740985
C 0	-1.406720	2.495780	0.740985
C 0	-1.406720	-2.495780	0.740985
C 0	1.406720	-2.495780	0.740985
C 0	0.000000	1.466650	-1.844655
C 0	0.000000	-1.466650	-1.844655
O 0	2.281100	3.166930	1.076065
O 0	-2.281100	3.166930	1.076065
O 0	-2.281100	-3.166930	1.076065
O 0	2.281100	-3.166930	1.076065
O 0	0.000000	1.702920	-2.971555
O 0	0.000000	-1.702920	-2.971555

**7T-1**

0	3			
O	0	2.971698	-0.182059	0.000000
C	0	1.797320	-0.183750	0.000000
Rh	0	0.269192	-1.648928	0.000000
Rh	0	0.203774	1.179315	0.000000
C	0	0.626854	-2.045074	1.880796
C	0	0.626854	-2.045074	-1.880796
C	0	0.797690	2.361731	-1.423488
C	0	0.797690	2.361731	1.423488
C	0	-1.485686	-2.521841	0.000000
C	0	-1.821598	1.102010	0.000000
O	0	0.798433	-2.285413	2.995502
O	0	0.798433	-2.285413	-2.995502
O	0	1.136964	3.085427	-2.254316
O	0	1.136964	3.085427	2.254316
O	0	-2.490776	-3.085427	0.000000
O	0	-2.971698	1.158406	0.000000

**7T-2**

0	3			
O	0	0.000000	0.000000	2.893462
C	0	0.000000	0.000000	1.713685
Rh	0	0.000000	1.386193	0.160201
Rh	0	0.000000	-1.386193	0.160201
C	0	1.589075	2.307697	0.825696
C	0	-1.589075	2.307697	0.825696
C	0	-1.589075	-2.307697	0.825696
C	0	1.589075	-2.307697	0.825696
C	0	0.000000	1.894032	-1.794865
C	0	0.000000	-1.894032	-1.794865
O	0	2.468010	2.924506	1.243368
O	0	-2.468010	2.924506	1.243368
O	0	-2.468010	-2.924506	1.243368
O	0	2.468010	-2.924506	1.243368
O	0	0.000000	2.236495	-2.893462
O	0	0.000000	-2.236495	-2.893462

**7T-3**

0	3			
Rh	0	-1.375643	0.000000	-0.557666
Rh	0	1.375643	0.000000	-0.557666
C	0	0.000000	0.000000	1.064864
C	0	-2.568179	1.484834	-0.036875
C	0	-2.568179	-1.484834	-0.036875
C	0	2.568179	-1.484834	-0.036875
C	0	2.568179	1.484834	-0.036875
C	0	0.000000	1.293869	-1.514064
C	0	0.000000	-1.293869	-1.514064
O	0	0.000000	0.000000	2.229134
O	0	-3.338441	2.315604	0.164255
O	0	-3.338441	-2.315604	0.164255
O	0	3.338441	-2.315604	0.164255
O	0	3.338441	2.315604	0.164255
O	0	0.000000	2.234636	-2.229134
O	0	0.000000	-2.234636	-2.229134

**6S-1**

0	1		
Rh 0	-1.373768	0.000000	0.000000
Rh 0	1.373768	0.000000	0.000000
C 0	0.000000	0.000000	1.524287
C 0	0.000000	0.000000	-1.524287
C 0	-2.663292	0.984336	1.070508
C 0	-2.663292	-0.984336	-1.070508
C 0	2.663292	-0.984336	1.070508
C 0	2.663292	0.984336	-1.070508
O 0	0.000000	0.000000	2.698378
O 0	0.000000	0.000000	-2.698378
O 0	-3.439609	1.644755	1.604030
O 0	-3.439609	-1.644755	-1.604030
O 0	3.439609	-1.644755	1.604030
O 0	3.439609	1.644755	-1.604030

**6S-2**

0	1		
Rh 0	0.000000	0.000000	-1.343135
Rh 0	0.000000	0.000000	1.343135
C 0	0.000000	0.000000	-3.265850
C 0	0.000000	0.000000	3.265850
C 0	1.911031	0.000000	-1.059847
C 0	-1.911031	0.000000	-1.059847
C 0	0.000000	1.911031	1.059847
C 0	0.000000	-1.911031	1.059847
O 0	0.000000	0.000000	-4.419263
O 0	0.000000	0.000000	4.419263
O 0	3.054455	0.000000	-0.916757
O 0	-3.054455	0.000000	-0.916757
O 0	0.000000	3.054455	0.916757
O 0	0.000000	-3.054455	0.916757

**6S-3**

0	1		
Rh 0	-1.269988	0.000000	0.000000
Rh 0	1.269988	0.000000	0.000000
C 0	0.000000	0.000000	1.705131
C 0	0.000000	0.000000	-1.705131
C 0	-2.584791	1.381452	0.000000
C 0	-2.584791	-1.381452	0.000000
C 0	2.584791	-1.381452	0.000000
C 0	2.584791	1.381452	0.000000
O 0	0.000000	0.000000	2.866738
O 0	0.000000	0.000000	-2.866738
O 0	-3.355053	2.240499	0.000000
O 0	-3.355053	-2.240499	0.000000
O 0	3.355053	-2.240499	0.000000
O 0	3.355053	2.240499	0.000000

**6S-4**

0	1		
Rh 0	0.000000	0.000000	-1.442582
C 0	0.000000	0.000000	-3.341078
C 0	1.931235	0.000000	-1.370097
C 0	-1.931235	0.000000	-1.370097
O 0	0.000000	0.000000	-4.495049
O 0	3.074233	0.000000	-1.520063
O 0	-3.074233	0.000000	-1.520063
Rh 0	0.000000	0.000000	1.442582
C 0	0.000000	0.000000	3.341078
C 0	1.931235	0.000000	1.370097
C 0	-1.931235	0.000000	1.370097
O 0	0.000000	0.000000	4.495049
O 0	3.074233	0.000000	1.520063
O 0	-3.074233	0.000000	1.520063

**6T-1**

0	3		
Rh 0	0.000000	0.000000	-1.365154
Rh 0	0.000000	0.000000	1.365153
C 0	-1.499365	-0.482854	0.000000
C 0	1.499365	0.482854	0.000000
C 0	0.297976	1.432139	-2.647942
C 0	-0.297976	-1.432139	-2.647942
C 0	-0.297976	-1.432139	2.647942
C 0	0.297976	1.432139	2.647942
O 0	-2.615545	-0.830401	0.000000
O 0	2.615545	0.830401	0.000000
O 0	0.404662	2.262865	-3.439852
O 0	-0.404662	-2.262865	-3.439852
O 0	-0.404662	-2.262865	3.439852
O 0	0.404662	2.262865	3.439852

**6T-2**

0	3		
Rh 0	-1.369250	0.000000	0.000000
Rh 0	1.369250	0.000000	0.000000
C 0	0.000000	0.000000	1.520400
C 0	0.000000	0.000000	-1.520400
C 0	-2.534090	1.604600	0.000000
C 0	-2.534090	-1.604600	0.000000
C 0	2.534090	-1.604600	0.000000
C 0	2.534090	1.604600	0.000000
O 0	0.000000	0.000000	2.691650
O 0	0.000000	0.000000	-2.691650
O 0	-3.205440	2.540110	0.000000
O 0	-3.205440	-2.540110	0.000000
O 0	3.205440	-2.540110	0.000000
O 0	3.205440	2.540110	0.000000

**6T-3**

0	3		
Rh 0	0.739580	0.076735	0.000000
C 0	1.122730	-1.822745	0.000000
C 0	-0.068910	1.845015	0.000000
C 0	2.540320	0.672485	0.000000
O 0	1.444480	-2.930955	0.000000
O 0	-0.454650	2.930955	0.000000
O 0	3.638780	1.028575	0.000000
Rh 0	-1.812030	-1.010515	0.000000
C 0	-2.921910	0.549845	0.000000
C 0	-1.808870	-1.338705	1.937520
C 0	-1.808870	-1.338705	-1.937520
O 0	-3.638780	1.455905	0.000000
O 0	-1.808870	-1.410065	3.089220
O 0	-1.808870	-1.410065	-3.089220

**5S-1**

0	1		
O 0	0.000000	0.000000	-1.577107
C 0	0.000000	0.000000	-0.408454
Rh 0	1.248360	0.000000	1.230058
Rh 0	-1.248360	0.000000	1.230058
C 0	2.479970	1.440135	1.469278
C 0	2.479970	-1.440135	1.469278
C 0	-2.479970	-1.440135	1.469278
C 0	-2.479970	1.440135	1.469278
O 0	3.206901	2.329447	1.577107
O 0	3.206901	-2.329447	1.577107
O 0	-3.206901	-2.329447	1.577107
O 0	-3.206901	2.329447	1.577107

**5T-1**

0	3		
Rh 0	0.000874	1.343001	-0.691953
Rh 0	-0.000874	-1.343001	-0.691953
C 0	0.000000	0.000000	0.868219
C 0	-1.660034	1.021491	-1.574148
C 0	1.660034	-1.021491	-1.574148
C 0	0.013441	3.205976	-0.101476
C 0	-0.013441	-3.205976	-0.101476
O 0	0.000000	0.000000	2.040302
O 0	-2.711483	0.899274	-2.040302
O 0	2.711483	-0.899274	-2.040302
O 0	-0.147099	4.284213	0.276537
O 0	0.147099	-4.284213	0.276537

**5T-2**

	0	1		
Rh 0	-0.716659	0.000000	1.276551	
Rh 0	-0.716659	0.000000	-1.276551	
C 0	0.936937	0.000000	0.000000	
C 0	-1.534807	-1.437997	0.000000	
C 0	-1.534807	1.437997	0.000000	
C 0	-0.625420	0.000000	3.252443	
C 0	-0.625420	0.000000	-3.252443	
O 0	2.104486	0.000000	0.000000	
O 0	-2.104486	-2.456409	0.000000	
O 0	-2.104486	2.456409	0.000000	
O 0	-0.563466	0.000000	4.402497	
O 0	-0.563466	0.000000	-4.402497	

**Complete Gaussian 03 reference (Reference 39)**

Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; Scuseria, G. E.; Robb, M. A.; Cheeseman, J. R.; Montgomery, Jr., J. A.; Vreven, T.; Kudin, K. N.; Burant, J. C.; Millam, J. M.; Iyengar, S. S.; Tomasi, J.; Barone, V.; Mennucci, B.; Cossi, M.; Scalmani, G.; Rega, N.; Petersson, G. A.; Nakatsuji, H.; Hada, M.; Ehara, M.; Toyota, K.; Fukuda, R.; Hasegawa, J.; Ishida, M.; Nakajima, T.; Honda, Y.; Kitao, O.; Nakai, H.; Klene, M.; Li, X.; Knox, J. E.; Hratchian, H. P.; Cross, J. B.; Bakken, V.; Adamo, C.; Jaramillo, J.; Gomperts, R.; Stratmann, R. E.; Yazyev, O.; Austin, A. J.; Cammi, R.; Pomelli, C.; Ochterski, J. W.; Ayala, P. Y.; Morokuma, K.; Voth, G. A.; Salvador, P.; Dannenberg, J. J.; Zakrzewski, V. G.; Dapprich, S.; Daniels, A. D.; Strain, M. C.; Farkas, O.; Malick, D. K.; Rabuck, A. D.; Raghavachari, K.; Foresman, J. B.; Ortiz, J. V.; Cui, Q.; Baboul, A. G.; Clifford, S.; Cioslowski, J.; Stefanov, B. B.; Liu, G.; Liashenko, A.; Piskorz, P.; Komaromi, I.; Martin, R. L.; Fox, D. J.; Keith, T.; Al-Laham, M. A.; Peng, C. Y.; Nanayakkara, A.; Challacombe, M.; Gill, P. M. W.; Johnson, B.; Chen, W.; Wong, M. W.; Gonzalez, C.; and Pople, J. A. Gaussian 03, Revision C.02; Gaussian, Inc., Wallingford CT, **2004**.

**Complete MOLPRO reference (Reference 42)**

MOLPRO, version 2006.1, Werner, H.-J.; Knowles, P. J.; Lindh, R.; Manby, F. R.; Schütz, M.; Celani, P.; Korona, T.; Mitrushenkov, A.; Rauhut, G.; Adler, T. B.; Amos, R. D.; Bernhardsson, A.; Berning, A.; Cooper, D. L.; Deegan, M. J. O.; Dobbyn, A. J.; Eckert, F.; Goll, E.; Hampel, C.; Hetzer, G.; Hrenar, T.; Knizia, G.; Köppl, C.; Liu, Y.; Lloyd, A. W.; Mata, R. A.; May, A. J.; McNicholas, S. J.; Meyer, W.; Mura, M. E.; Nicklaß, A.; Palmieri, P.; Pflüger, K.; Pitzer, R.; Reiher, M.; Schumann, U.; Stoll, H.; Stone, A. J.; Tarroni, R.; Thorsteinsson, T.; Wang, M.; Wolf, A.