

Supporting information for:

**Pd(II) and Ni(II) complexes featuring a
“phosphasalen” ligand: synthesis and DFT study**

*Thi-Phuong-Anh Cao, Stéphanie Labouille, Audrey Auffrant, * Yves Jean, * Xavier F. Le Goff,
and Pascal Le Floch[†]*

Laboratoire Hétéroéléments et Coordination, Ecole Polytechnique, CNRS, 91128 Palaiseau
Cedex, France. Fax: (+33)(0)169334440;

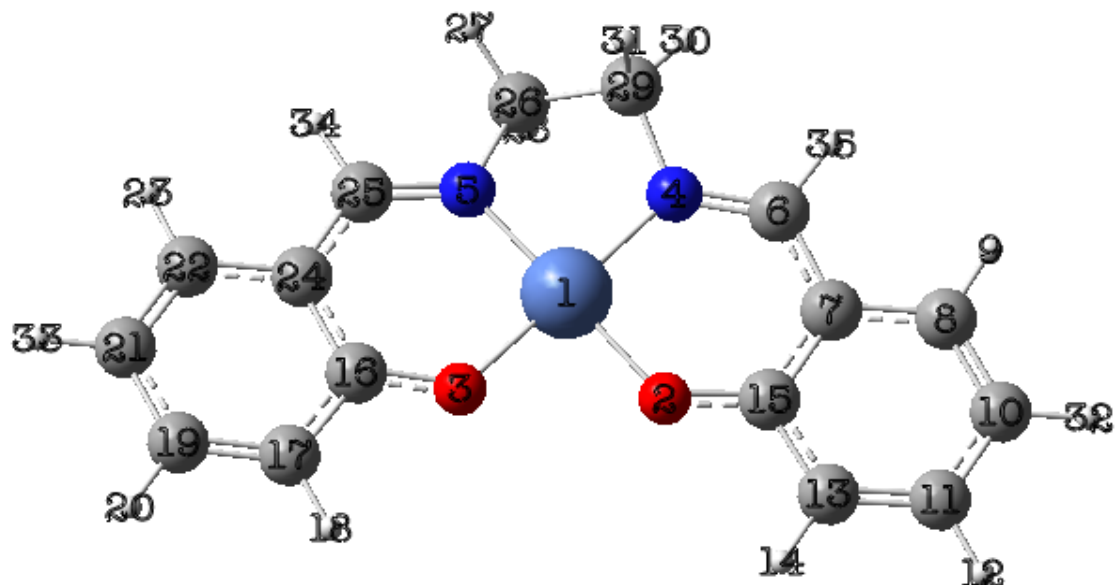
E-mail: audrey.auffrant@polytechnique.edu; yves.jean@polytechnique.edu

Table of contents

Complete Gaussian reference.....	S3
Optimized structure of [Ni(salen)] complex in singlet state.....	S4
Optimized structure of [Ni(salen)] complex in triplet state.....	S6
Optimized structure of [Ni(phosphasalen)] complex in singlet state.....	S8
Optimized structure of [Ni(phosphasalen)] complex in triplet state.....	S12

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

Optimized structure of [Ni(salen)] complex in singlet state



HF=-1047.1931335

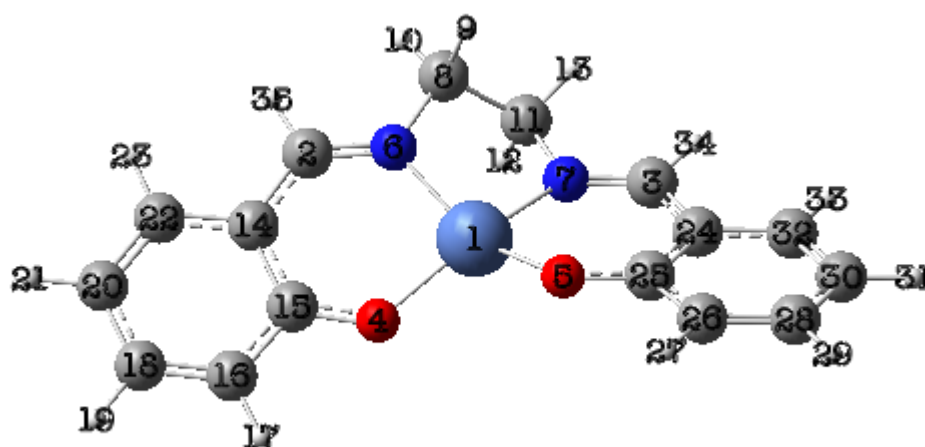
Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	28	0	0.000041	0.238643	0.000259
2	8	0	1.254095	-1.116537	0.067676
3	8	0	-1.254114	-1.116633	-0.065993
4	7	0	1.260488	1.594082	0.151163
5	7	0	-1.260394	1.594110	-0.150925
6	6	0	2.554255	1.461939	0.134831
7	6	0	3.253939	0.231302	0.033816
8	6	0	4.670272	0.242065	-0.015934
9	1	0	5.182484	1.203108	-0.000577
10	6	0	5.391795	-0.926979	-0.080686
11	6	0	4.694858	-2.155970	-0.090578
12	1	0	5.256561	-3.086518	-0.139128
13	6	0	3.319583	-2.204423	-0.039193
14	1	0	2.782729	-3.148223	-0.045968
15	6	0	2.540698	-1.013120	0.020552
16	6	0	-2.540702	-1.013179	-0.020032
17	6	0	-3.319721	-2.204409	0.039754
18	1	0	-2.782928	-3.148237	0.047457
19	6	0	-4.695029	-2.155851	0.090012
20	1	0	-5.256822	-3.086347	0.138576
21	6	0	-5.391915	-0.926838	0.078966
22	6	0	-4.670285	0.242139	0.014253
23	1	0	-5.182454	1.203192	-0.001945
24	6	0	-3.253921	0.231308	-0.034416
25	6	0	-2.554168	1.461920	-0.135163
26	6	0	-0.662066	2.906644	-0.372684
27	1	0	-1.321844	3.715743	-0.034281
28	1	0	-0.479786	3.036548	-1.448369
29	6	0	0.662173	2.906536	0.373311
30	1	0	1.321942	3.715737	0.035127

31	1	0	0.479925	3.036121	1.449037
32	1	0	6.476699	-0.909358	-0.120174
33	1	0	-6.476850	-0.909179	0.117555
34	1	0	-3.156580	2.372453	-0.219204
35	1	0	3.156686	2.372477	0.218659

		1	2	3
		A	A	A
Frequencies	--	29.6272	57.9980	83.4556
Red. masses	--	6.2569	4.2643	5.6874
Frc consts	--	0.0032	0.0085	0.0233
IR Inten	--	1.8842	0.0069	0.0940

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	28	0.00	0.00	0.13	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.03	0.00
2	8	0.00	0.00	0.20	-0.01	0.01	0.10	0.00	-0.02	0.22
3	8	0.00	0.00	0.20	0.01	0.01	-0.10	0.00	-0.02	-0.22
4	7	0.01	0.00	0.04	0.01	0.01	-0.06	-0.02	-0.02	0.14
5	7	0.01	0.00	0.04	-0.01	0.01	0.06	0.02	-0.02	-0.14
6	6	0.01	0.01	-0.06	0.01	0.01	-0.14	-0.02	0.00	0.15
7	6	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	-0.09	-0.01	0.01	0.09
8	6	-0.01	0.00	-0.23	-0.01	-0.01	-0.15	-0.02	0.03	-0.06
9	1	-0.01	0.01	-0.34	0.00	-0.02	-0.29	-0.03	0.04	-0.11
10	6	-0.01	0.00	-0.25	-0.01	-0.03	-0.04	-0.01	0.04	-0.18
11	6	-0.01	0.00	-0.10	-0.02	-0.03	0.16	0.01	0.03	-0.10
12	1	-0.01	0.00	-0.11	-0.02	-0.03	0.26	0.01	0.04	-0.18
13	6	0.00	0.00	0.06	-0.02	-0.01	0.21	0.01	0.01	0.07
14	1	0.00	0.00	0.17	-0.02	-0.01	0.35	0.03	0.00	0.12
15	6	0.00	0.00	0.06	-0.01	0.00	0.07	0.00	0.00	0.13
16	6	0.00	0.00	0.06	0.01	0.00	-0.07	0.00	0.00	-0.13
17	6	0.00	0.00	0.06	0.02	-0.01	-0.21	-0.01	0.01	-0.07
18	1	0.00	0.00	0.17	0.02	-0.01	-0.35	-0.03	0.00	-0.12
19	6	-0.01	0.00	-0.10	0.02	-0.03	-0.16	-0.01	0.03	0.10
20	1	-0.01	0.00	-0.11	0.02	-0.03	-0.26	-0.01	0.04	0.18
21	6	-0.01	0.00	-0.25	0.01	-0.03	0.04	0.01	0.04	0.18
22	6	-0.01	0.00	-0.23	0.01	-0.01	0.15	0.02	0.03	0.06
23	1	-0.01	-0.01	-0.34	0.00	-0.02	0.29	0.03	0.04	0.11
24	6	0.00	0.00	-0.08	0.00	0.00	0.09	0.01	0.01	-0.09
25	6	0.01	-0.01	-0.06	-0.01	0.01	0.14	0.02	0.00	-0.15
26	6	0.01	0.00	0.03	-0.03	0.02	0.04	0.06	-0.03	-0.10
27	1	0.01	0.00	0.03	-0.01	0.01	0.10	0.01	-0.02	-0.23
28	1	0.01	-0.01	0.03	-0.10	0.03	0.03	0.23	-0.07	-0.08
29	6	0.01	0.00	0.03	0.03	0.02	-0.04	-0.06	-0.03	0.10
30	1	0.01	0.00	0.03	0.01	0.01	-0.10	-0.01	-0.02	0.23
31	1	0.01	0.01	0.03	0.10	0.03	-0.03	-0.23	-0.07	0.08
32	1	-0.02	0.00	-0.37	-0.01	-0.04	-0.08	-0.02	0.06	-0.31
33	1	-0.02	0.00	-0.37	0.01	-0.04	0.08	0.02	0.06	0.31
34	1	0.01	-0.01	-0.14	-0.01	0.01	0.22	0.03	0.00	-0.17
35	1	0.01	0.01	-0.14	0.01	0.01	-0.22	-0.03	0.00	0.17

Optimized structure of [Ni(salen)] complex in triplet state



HF=-1047.1788011

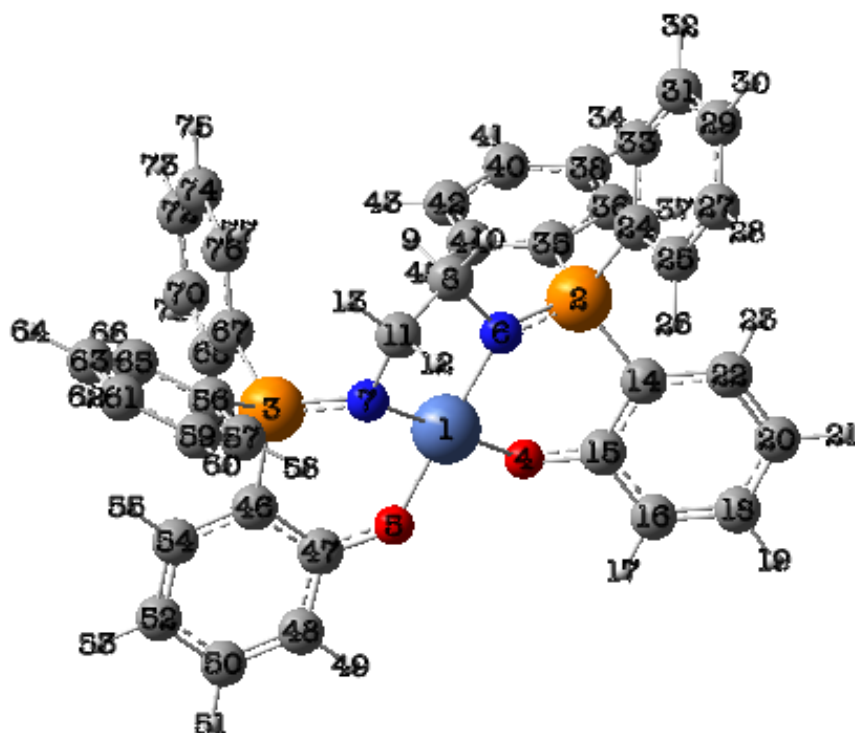
Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	28	0	-0.439718	-0.476050	-0.156478
2	6	0	-0.213068	0.276291	2.682256
3	6	0	1.863645	-0.426269	-1.986523
4	8	0	-2.139610	0.085336	0.476245
5	8	0	-0.806197	-1.598057	-1.644983
6	7	0	0.402299	-0.087837	1.602616
7	7	0	1.379793	-0.067044	-0.839880
8	6	0	1.852221	-0.069477	1.517601
9	1	0	2.227011	-1.102133	1.537245
10	1	0	2.311583	0.482025	2.349865
11	6	0	2.213568	0.566884	0.166856
12	1	0	1.977377	1.639355	0.205246
13	1	0	3.285225	0.455293	-0.049540
14	6	0	-1.628994	0.425759	2.816973
15	6	0	-2.519224	0.342150	1.690828
16	6	0	-3.898349	0.580558	1.940498
17	1	0	-4.570207	0.521685	1.089264
18	6	0	-4.365053	0.862506	3.207427
19	1	0	-5.429736	1.028342	3.357837
20	6	0	-3.488363	0.945117	4.307696
21	1	0	-3.867168	1.174158	5.299224
22	6	0	-2.142745	0.736549	4.098733
23	1	0	-1.444532	0.804750	4.932042
24	6	0	1.158085	-1.162499	-2.988668
25	6	0	-0.142178	-1.730157	-2.751988
26	6	0	-0.709993	-2.501040	-3.803274
27	1	0	-1.689988	-2.932946	-3.622826
28	6	0	-0.053388	-2.682414	-5.002328

29	1	0	-0.527699	-3.270050	-5.785505
30	6	0	1.221338	-2.125292	-5.229041
31	1	0	1.730927	-2.280263	-6.175295
32	6	0	1.809116	-1.387236	-4.225554
33	1	0	2.797880	-0.955065	-4.374368
34	1	0	2.907306	-0.171891	-2.215514
35	1	0	0.387628	0.516598	3.569886

		1		2		3
		A		A		A
Frequencies	--	19.2790		47.9351		62.5985
Red. masses	--	7.3292		4.7518		5.9456
Frc consts	--	0.0016		0.0064		0.0137
IR Inten	--	0.8226		0.0359		0.0885

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	28	-0.03	0.18	-0.07	-0.05	-0.02	-0.02	0.06	0.01	0.03
2	6	-0.01	-0.08	-0.01	0.00	-0.14	0.01	0.00	0.01	0.01
3	6	0.04	-0.06	0.00	-0.07	0.13	-0.03	0.01	-0.01	-0.01
4	8	-0.02	0.17	-0.02	-0.01	0.08	0.00	0.09	0.18	-0.09
5	8	-0.05	0.15	-0.03	0.03	-0.08	0.00	0.08	-0.13	0.14
6	7	-0.01	0.04	-0.05	-0.02	-0.12	-0.01	0.03	0.06	0.02
7	7	0.02	0.05	-0.04	-0.08	0.09	-0.03	0.06	-0.03	0.02
8	6	-0.01	0.00	-0.04	-0.03	-0.09	-0.05	0.03	0.05	0.03
9	1	-0.03	-0.01	-0.06	0.00	-0.08	-0.17	0.03	0.05	0.09
10	1	0.00	-0.03	-0.03	-0.01	-0.16	-0.01	0.03	0.10	0.01
11	6	0.02	0.02	-0.03	-0.09	0.06	0.00	0.06	-0.02	0.00
12	1	0.05	0.02	-0.01	-0.16	0.04	0.11	0.09	-0.01	-0.05
13	1	0.02	-0.01	-0.02	-0.09	0.14	-0.03	0.06	-0.05	0.02
14	6	0.00	-0.09	0.01	0.01	-0.07	0.02	-0.01	-0.01	-0.03
15	6	-0.01	0.04	0.01	0.01	0.06	0.01	0.04	0.10	-0.08
16	6	-0.01	0.03	0.04	0.03	0.19	0.02	0.03	0.10	-0.13
17	1	-0.01	0.13	0.04	0.03	0.31	0.01	0.08	0.19	-0.18
18	6	0.00	-0.10	0.07	0.05	0.17	0.03	-0.04	-0.05	-0.13
19	1	0.01	-0.11	0.10	0.07	0.27	0.03	-0.04	-0.06	-0.16
20	6	0.01	-0.23	0.08	0.05	0.02	0.04	-0.09	-0.19	-0.07
21	1	0.02	-0.34	0.11	0.07	0.00	0.05	-0.14	-0.30	-0.06
22	6	0.01	-0.22	0.05	0.03	-0.10	0.04	-0.08	-0.16	-0.03
23	1	0.01	-0.32	0.06	0.03	-0.21	0.04	-0.12	-0.25	0.02
24	6	0.03	-0.07	0.02	-0.02	0.08	-0.03	-0.04	-0.01	0.02
25	6	-0.01	0.03	0.00	0.04	-0.05	0.00	0.01	-0.08	0.10
26	6	-0.02	0.01	0.03	0.12	-0.15	0.04	-0.03	-0.08	0.12
27	1	-0.06	0.09	0.01	0.17	-0.26	0.06	0.01	-0.14	0.19
28	6	0.02	-0.12	0.07	0.13	-0.12	0.04	-0.13	0.01	0.06
29	1	0.01	-0.14	0.08	0.19	-0.20	0.06	-0.16	0.01	0.07
30	6	0.07	-0.22	0.09	0.06	0.02	0.00	-0.18	0.10	-0.03
31	1	0.10	-0.32	0.12	0.07	0.05	0.00	-0.26	0.17	-0.09
32	6	0.07	-0.20	0.06	-0.01	0.12	-0.03	-0.13	0.08	-0.05
33	1	0.11	-0.28	0.08	-0.06	0.22	-0.05	-0.17	0.14	-0.12
34	1	0.07	-0.15	0.04	-0.08	0.19	-0.03	-0.01	0.01	-0.06
35	1	0.00	-0.19	0.02	0.02	-0.19	0.01	-0.04	-0.02	0.04

Optimized structure of [Ni(phosphasalen)] complex in singlet state



HF=-2578.6169609

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	28	0	0.124220	-0.131232	0.056752
2	15	0	-0.054642	-0.072813	3.120225
3	15	0	2.588596	-0.051800	-1.697128
4	8	0	-1.446577	-0.962411	0.679462
5	8	0	-0.472384	-0.676303	-1.624262
6	7	0	0.686530	0.442558	1.771597
7	7	0	1.692988	0.718873	-0.587608
8	6	0	2.079740	0.884578	1.793837
9	1	0	2.784738	0.043410	1.901627
10	1	0	2.273105	1.586790	2.617980
11	6	0	2.295023	1.560429	0.450215
12	1	0	1.767143	2.524235	0.454178
13	1	0	3.358906	1.771079	0.273815
14	6	0	-1.812762	-0.055426	2.873134
15	6	0	-2.253778	-0.561199	1.614661
16	6	0	-3.659867	-0.665248	1.432999
17	1	0	-4.009304	-1.047140	0.478028
18	6	0	-4.542414	-0.299047	2.431899
19	1	0	-5.612234	-0.391692	2.254447
20	6	0	-4.088070	0.194544	3.666243
21	1	0	-4.792240	0.485643	4.440282
22	6	0	-2.723529	0.307524	3.880242

23	1	0	-2.355114	0.684675	4.831779
24	6	0	0.360262	1.040249	4.504647
25	6	0	-0.111838	2.360570	4.434343
26	1	0	-0.747921	2.660334	3.605571
27	6	0	0.228188	3.280096	5.422435
28	1	0	-0.147549	4.298237	5.364160
29	6	0	1.048866	2.895139	6.483845
30	1	0	1.313412	3.614403	7.254830
31	6	0	1.532066	1.590054	6.552469
32	1	0	2.176775	1.288589	7.373975
33	6	0	1.192160	0.664672	5.565725
34	1	0	1.574828	-0.349988	5.624180
35	6	0	0.431339	-1.759327	3.641069
36	6	0	-0.073963	-2.338525	4.813910
37	1	0	-0.752260	-1.776862	5.451917
38	6	0	0.277302	-3.640759	5.158124
39	1	0	-0.118847	-4.085324	6.067549
40	6	0	1.125853	-4.377674	4.329432
41	1	0	1.394190	-5.396613	4.597271
42	6	0	1.615459	-3.813228	3.153487
43	1	0	2.262742	-4.387957	2.496643
44	6	0	1.268302	-2.507576	2.807432
45	1	0	1.621872	-2.073656	1.876442
46	6	0	1.522734	-0.611110	-3.003789
47	6	0	0.127321	-0.803329	-2.760168
48	6	0	-0.653974	-1.196786	-3.889294
49	1	0	-1.717714	-1.335234	-3.718051
50	6	0	-0.092181	-1.406411	-5.130225
51	1	0	-0.730784	-1.711935	-5.956965
52	6	0	1.286766	-1.228902	-5.346444
53	1	0	1.722396	-1.387506	-6.328440
54	6	0	2.074326	-0.827919	-4.284158
55	1	0	3.138329	-0.661668	-4.441093
56	6	0	3.799674	1.115389	-2.405692
57	6	0	3.362674	2.428142	-2.637939
58	1	0	2.352015	2.710486	-2.354928
59	6	0	4.216355	3.356650	-3.225967
60	1	0	3.870954	4.372289	-3.400252
61	6	0	5.509837	2.983196	-3.594656
62	1	0	6.174792	3.709159	-4.055635
63	6	0	5.946800	1.678363	-3.375896
64	1	0	6.951806	1.382860	-3.665852
65	6	0	5.096150	0.745307	-2.782780
66	1	0	5.445060	-0.269489	-2.614418
67	6	0	3.577290	-1.474326	-1.083931
68	6	0	3.196318	-2.780352	-1.416192
69	1	0	2.367000	-2.938037	-2.100398
70	6	0	3.877033	-3.871469	-0.876081
71	1	0	3.574896	-4.880352	-1.145077
72	6	0	4.943035	-3.668821	-0.001118
73	1	0	5.477146	-4.519825	0.414140
74	6	0	5.327163	-2.370424	0.339703
75	1	0	6.158405	-2.208304	1.021246
76	6	0	4.647277	-1.279554	-0.195494
77	1	0	4.957315	-0.272457	0.073896

1
A

2
A

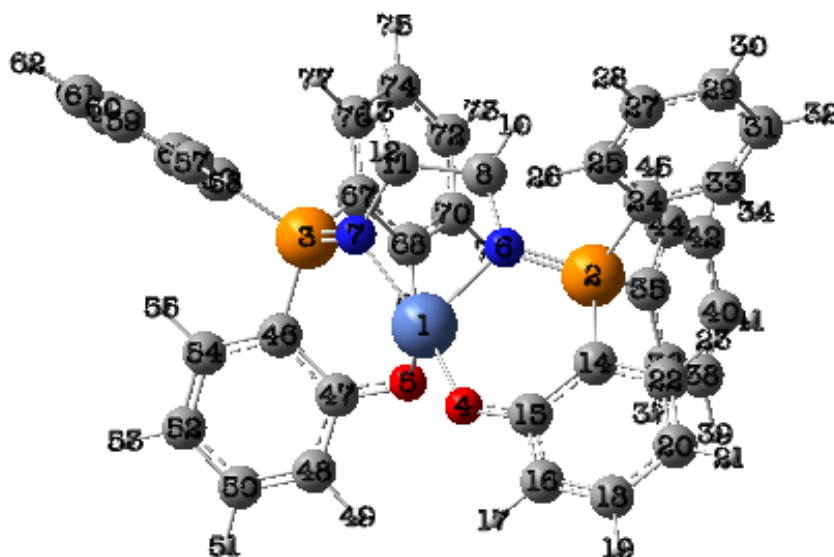
3
A

Frequencies	--	7.0978	13.3051	19.6091
Red. masses	--	5.3382	5.8200	4.7240
Frc consts	--	0.0002	0.0006	0.0011
IR Inten	--	0.0045	0.6007	0.1290

Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	28	0.00	0.00	0.01	0.04	-0.07	0.03	0.01	-0.01	0.00
2	15	0.00	0.00	0.00	0.01	-0.01	0.02	0.02	0.01	-0.01
3	15	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.03	0.02	0.00
4	8	0.00	0.01	0.02	0.06	-0.11	0.05	0.05	-0.08	0.04
5	8	0.00	-0.02	0.01	0.03	-0.08	0.03	0.00	-0.03	0.01
6	7	0.00	0.02	0.00	0.04	-0.05	0.02	0.01	0.03	-0.01
7	7	0.00	0.00	0.00	0.02	-0.04	0.02	-0.03	0.05	-0.02
8	6	0.00	0.02	0.00	0.03	-0.05	0.02	-0.01	0.09	-0.03
9	1	0.01	0.03	0.00	0.04	-0.05	0.01	0.02	0.12	-0.02
10	1	0.00	0.03	-0.01	0.03	-0.05	0.02	-0.04	0.11	-0.04
11	6	-0.01	0.02	-0.01	0.03	-0.04	0.02	-0.05	0.08	-0.04
12	1	-0.02	0.01	-0.02	0.03	-0.04	0.03	-0.08	0.06	-0.05
13	1	-0.01	0.02	-0.01	0.02	-0.05	0.01	-0.06	0.11	-0.05
14	6	0.00	0.05	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.00
15	6	-0.01	0.04	0.00	0.04	-0.05	0.00	0.03	-0.06	0.02
16	6	-0.01	0.08	0.00	0.04	-0.03	-0.03	0.04	-0.08	0.01
17	1	-0.01	0.08	0.00	0.06	-0.08	-0.02	0.05	-0.12	0.02
18	6	0.00	0.12	-0.02	0.02	0.04	-0.07	0.03	-0.05	-0.01
19	1	-0.01	0.15	-0.02	0.02	0.05	-0.10	0.03	-0.06	-0.01
20	6	0.00	0.13	-0.02	-0.01	0.11	-0.09	0.02	0.00	-0.03
21	1	0.00	0.16	-0.03	-0.02	0.17	-0.13	0.01	0.03	-0.04
22	6	0.00	0.09	-0.01	-0.01	0.09	-0.06	0.02	0.02	-0.02
23	1	0.01	0.10	-0.01	-0.03	0.14	-0.07	0.01	0.07	-0.03
24	6	0.03	-0.03	0.02	0.00	0.02	0.00	0.01	0.00	0.00
25	6	0.11	0.00	0.01	0.07	0.04	-0.07	0.09	0.02	-0.05
26	1	0.17	0.05	-0.02	0.13	0.04	-0.12	0.18	0.05	-0.11
27	6	0.13	-0.03	0.03	0.06	0.05	-0.08	0.07	0.02	-0.04
28	1	0.20	-0.01	0.03	0.11	0.07	-0.14	0.13	0.04	-0.08
29	6	0.06	-0.10	0.06	-0.02	0.05	-0.03	-0.04	-0.02	0.03
30	1	0.07	-0.12	0.08	-0.03	0.06	-0.04	-0.06	-0.03	0.05
31	6	-0.03	-0.13	0.07	-0.09	0.03	0.05	-0.12	-0.05	0.09
32	1	-0.09	-0.18	0.10	-0.15	0.03	0.09	-0.21	-0.08	0.14
33	6	-0.05	-0.10	0.05	-0.08	0.01	0.06	-0.09	-0.04	0.07
34	1	-0.11	-0.12	0.06	-0.13	-0.01	0.11	-0.16	-0.06	0.11
35	6	-0.04	-0.02	-0.04	-0.04	-0.01	0.07	0.04	0.01	-0.03
36	6	-0.11	-0.06	-0.09	-0.10	0.01	0.05	-0.04	-0.05	-0.09
37	1	-0.16	-0.08	-0.12	-0.14	0.02	0.00	-0.13	-0.10	-0.14
38	6	-0.14	-0.07	-0.11	-0.12	0.02	0.09	-0.01	-0.04	-0.09
39	1	-0.19	-0.10	-0.15	-0.17	0.03	0.07	-0.07	-0.08	-0.14
40	6	-0.08	-0.04	-0.08	-0.08	0.00	0.15	0.10	0.02	-0.03
41	1	-0.10	-0.05	-0.10	-0.09	0.01	0.18	0.13	0.03	-0.04
42	6	-0.01	0.00	-0.03	-0.01	-0.02	0.16	0.18	0.08	0.02
43	1	0.02	0.02	-0.01	0.02	-0.03	0.21	0.27	0.12	0.07
44	6	0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.02	0.12	0.15	0.07	0.03
45	1	0.06	0.03	0.02	0.06	-0.04	0.13	0.21	0.10	0.07
46	6	0.01	-0.05	0.02	-0.01	0.03	-0.02	-0.02	0.03	-0.01
47	6	0.01	-0.05	0.02	0.00	-0.02	0.01	-0.01	0.00	0.00
48	6	0.02	-0.09	0.03	-0.01	0.00	0.02	-0.02	0.01	0.00
49	1	0.02	-0.09	0.03	-0.01	-0.04	0.04	-0.02	-0.01	0.01
50	6	0.02	-0.13	0.04	-0.04	0.07	-0.01	-0.03	0.04	-0.01
51	1	0.03	-0.16	0.05	-0.05	0.08	0.00	-0.03	0.04	-0.01
52	6	0.02	-0.12	0.04	-0.05	0.12	-0.03	-0.04	0.07	-0.02
53	1	0.03	-0.15	0.05	-0.07	0.17	-0.05	-0.04	0.09	-0.03
54	6	0.01	-0.09	0.03	-0.04	0.09	-0.04	-0.03	0.06	-0.02
55	1	0.01	-0.08	0.03	-0.04	0.13	-0.06	-0.04	0.08	-0.03
56	6	-0.03	0.02	-0.02	-0.01	0.02	0.00	0.00	-0.01	0.00
57	6	-0.06	0.00	-0.04	-0.03	0.02	0.03	0.03	-0.01	-0.04
58	1	-0.06	-0.01	-0.03	-0.03	0.01	0.04	0.03	0.01	-0.07
59	6	-0.09	0.01	-0.06	-0.04	0.05	0.04	0.06	-0.04	-0.04
60	1	-0.11	0.00	-0.07	-0.06	0.05	0.07	0.08	-0.04	-0.07
61	6	-0.08	0.04	-0.07	-0.04	0.07	0.02	0.06	-0.06	-0.01

62	1	-0.11	0.04	-0.09	-0.05	0.09	0.03	0.08	-0.09	-0.01
63	6	-0.05	0.05	-0.06	-0.03	0.07	-0.01	0.03	-0.07	0.03
64	1	-0.05	0.07	-0.07	-0.02	0.09	-0.02	0.04	-0.09	0.06
65	6	-0.03	0.04	-0.03	-0.01	0.05	-0.02	0.01	-0.04	0.03
66	1	0.00	0.05	-0.02	0.00	0.05	-0.04	-0.01	-0.04	0.06
67	6	0.04	0.03	0.02	0.02	-0.01	-0.07	-0.06	0.01	0.03
68	6	0.07	0.02	0.05	0.03	-0.01	-0.10	-0.07	0.01	0.03
69	1	0.06	-0.01	0.06	0.03	0.01	-0.10	-0.06	0.02	0.01
70	6	0.09	0.04	0.06	0.04	-0.02	-0.14	-0.10	0.01	0.05
71	1	0.11	0.03	0.09	0.05	-0.01	-0.16	-0.11	0.01	0.05
72	6	0.10	0.08	0.05	0.05	-0.03	-0.14	-0.12	0.00	0.07
73	1	0.12	0.10	0.06	0.05	-0.04	-0.16	-0.14	-0.01	0.09
74	6	0.08	0.10	0.02	0.04	-0.04	-0.10	-0.11	0.00	0.07
75	1	0.08	0.13	0.01	0.04	-0.05	-0.10	-0.12	-0.01	0.09
76	6	0.05	0.07	0.01	0.03	-0.03	-0.07	-0.08	0.00	0.05
77	1	0.03	0.09	-0.02	0.02	-0.04	-0.04	-0.07	0.00	0.05

Optimized structure of [Ni(phosphasalen)] complex in triplet state



HF=-2578.6191862

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	28	0	0.391424	-0.586373	0.087925
2	15	0	-0.031022	-0.075297	3.117395
3	15	0	3.056662	-0.159518	-1.493694
4	8	0	-1.425223	-1.098519	0.405304
5	8	0	1.187057	-2.302429	-0.398357
6	7	0	0.665620	0.430601	1.748464
7	7	0	1.855088	0.559799	-0.680194
8	6	0	1.963349	1.096551	1.718824
9	1	0	2.781299	0.401413	1.966678
10	1	0	2.012855	1.939049	2.427011
11	6	0	2.163599	1.615434	0.290424
12	1	0	1.471195	2.452902	0.123263
13	1	0	3.182859	2.016620	0.189747
14	6	0	-1.685060	-0.674607	2.785751
15	6	0	-2.135382	-1.086238	1.486917
16	6	0	-3.491281	-1.522115	1.404467
17	1	0	-3.838870	-1.826761	0.421142
18	6	0	-4.322292	-1.568715	2.503547
19	1	0	-5.347001	-1.915116	2.383332
20	6	0	-3.863851	-1.173898	3.771279
21	1	0	-4.518355	-1.204726	4.637291
22	6	0	-2.560568	-0.729265	3.892431
23	1	0	-2.204948	-0.403861	4.867900
24	6	0	-0.164519	1.319905	4.294534
25	6	0	-0.479234	2.576250	3.757035

26	1	0	-0.600012	2.678181	2.681451
27	6	0	-0.636056	3.678167	4.593202
28	1	0	-0.878559	4.648659	4.168078
29	6	0	-0.485639	3.535683	5.973309
30	1	0	-0.610562	4.396178	6.625740
31	6	0	-0.177384	2.289131	6.514993
32	1	0	-0.061508	2.174268	7.589673
33	6	0	-0.014576	1.183823	5.679852
34	1	0	0.231095	0.216350	6.108916
35	6	0	0.912286	-1.371391	4.000565
36	6	0	0.461765	-2.697300	3.988897
37	1	0	-0.493121	-2.935863	3.528876
38	6	0	1.232654	-3.705789	4.564415
39	1	0	0.872587	-4.731137	4.552308
40	6	0	2.459440	-3.400850	5.151867
41	1	0	3.058238	-4.188718	5.602021
42	6	0	2.919603	-2.083598	5.161383
43	1	0	3.876707	-1.842366	5.616846
44	6	0	2.152444	-1.073030	4.587155
45	1	0	2.516252	-0.048521	4.605622
46	6	0	2.425491	-1.601842	-2.345404
47	6	0	1.567153	-2.498361	-1.632372
48	6	0	1.152493	-3.667309	-2.323758
49	1	0	0.503477	-4.352392	-1.785454
50	6	0	1.545040	-3.918538	-3.625500
51	1	0	1.199133	-4.824071	-4.120364
52	6	0	2.369930	-3.020836	-4.318946
53	1	0	2.663222	-3.215564	-5.346368
54	6	0	2.801055	-1.872683	-3.673828
55	1	0	3.434850	-1.169230	-4.206531
56	6	0	3.761846	0.978726	-2.740335
57	6	0	2.976765	2.068515	-3.134502
58	1	0	2.004837	2.210362	-2.669233
59	6	0	3.437747	2.949513	-4.111317
60	1	0	2.823162	3.794848	-4.409891
61	6	0	4.681904	2.744203	-4.705891
62	1	0	5.040392	3.430579	-5.468912
63	6	0	5.467309	1.656065	-4.323278
64	1	0	6.436627	1.492484	-4.787173
65	6	0	5.011997	0.776758	-3.342993
66	1	0	5.631025	-0.065697	-3.045192
67	6	0	4.479293	-0.643490	-0.440937
68	6	0	4.448647	-1.885352	0.212647
69	1	0	3.611258	-2.557919	0.053903
70	6	0	5.473093	-2.241999	1.085734
71	1	0	5.440786	-3.208091	1.582561
72	6	0	6.532652	-1.365969	1.324709
73	1	0	7.332209	-1.650082	2.004496
74	6	0	6.562760	-0.124699	0.692123
75	1	0	7.383200	0.564232	0.877114
76	6	0	5.541119	0.236700	-0.185631
77	1	0	5.581722	1.203214	-0.680843

	1	2	3
	A	A	A
Frequencies --	6.5842	12.4026	19.7920
Red. masses --	5.9642	6.1973	5.3852
Frc consts --	0.0002	0.0006	0.0012

IR Inten		--	0.0957			0.3318			0.6315		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z	
1	28	0.01	0.00	0.01	0.05	-0.05	0.03	-0.02	-0.05	-0.01	
2	15	-0.02	0.00	-0.01	0.00	-0.02	0.03	0.01	-0.01	0.00	
3	15	0.01	0.00	0.01	0.02	0.00	-0.01	-0.02	0.00	-0.02	
4	8	0.01	-0.01	-0.01	0.05	-0.06	0.02	-0.01	-0.09	0.05	
5	8	0.05	0.00	0.07	0.06	-0.03	-0.01	-0.04	-0.04	-0.09	
6	7	-0.01	0.03	0.00	0.04	-0.06	0.03	0.00	-0.04	-0.02	
7	7	0.01	0.00	0.01	0.04	-0.03	0.04	-0.05	-0.02	-0.04	
8	6	-0.01	0.02	0.00	0.04	-0.07	0.05	-0.03	0.00	-0.05	
9	1	-0.01	0.01	0.01	0.04	-0.07	0.04	0.00	0.02	-0.07	
10	1	-0.01	0.02	0.00	0.05	-0.08	0.06	-0.03	0.00	-0.05	
11	6	0.00	0.01	0.00	0.05	-0.04	0.05	-0.08	0.00	-0.05	
12	1	0.00	0.01	-0.01	0.05	-0.03	0.07	-0.11	-0.03	-0.05	
13	1	0.00	0.01	0.01	0.05	-0.05	0.06	-0.10	0.04	-0.08	
14	6	-0.03	0.05	-0.02	-0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	
15	6	-0.01	0.03	-0.02	0.02	-0.02	0.00	-0.01	-0.03	0.04	
16	6	-0.02	0.07	-0.04	0.02	-0.01	-0.03	-0.02	-0.01	0.06	
17	1	-0.01	0.06	-0.05	0.04	-0.03	-0.03	-0.02	-0.04	0.07	
18	6	-0.05	0.12	-0.06	-0.01	0.04	-0.05	-0.02	0.05	0.06	
19	1	-0.06	0.14	-0.08	-0.02	0.05	-0.06	-0.03	0.07	0.07	
20	6	-0.07	0.13	-0.06	-0.04	0.07	-0.05	-0.02	0.10	0.04	
21	1	-0.09	0.17	-0.07	-0.06	0.10	-0.06	-0.02	0.14	0.04	
22	6	-0.06	0.10	-0.04	-0.04	0.05	-0.02	-0.01	0.07	0.03	
23	1	-0.07	0.11	-0.04	-0.06	0.07	-0.02	0.00	0.11	0.02	
24	6	0.02	-0.02	0.03	-0.01	0.01	-0.01	0.05	0.01	-0.02	
25	6	0.03	-0.01	0.06	0.02	0.00	-0.05	0.03	0.00	-0.03	
26	1	0.01	0.02	0.07	0.04	-0.02	-0.05	-0.03	-0.02	-0.02	
27	6	0.06	-0.02	0.09	0.02	0.02	-0.08	0.07	0.01	-0.04	
28	1	0.06	-0.01	0.12	0.04	0.02	-0.10	0.05	0.00	-0.05	
29	6	0.07	-0.06	0.09	-0.01	0.05	-0.07	0.14	0.04	-0.04	
30	1	0.10	-0.08	0.11	-0.01	0.07	-0.09	0.17	0.05	-0.05	
31	6	0.06	-0.08	0.05	-0.04	0.06	-0.03	0.16	0.05	-0.04	
32	1	0.08	-0.11	0.05	-0.06	0.09	-0.03	0.22	0.07	-0.04	
33	6	0.03	-0.06	0.02	-0.04	0.04	0.00	0.12	0.03	-0.02	
34	1	0.02	-0.08	-0.01	-0.06	0.05	0.02	0.14	0.04	-0.02	
35	6	-0.04	-0.04	-0.04	-0.05	-0.02	0.08	0.00	-0.02	0.00	
36	6	-0.08	-0.03	-0.06	-0.09	0.00	0.13	-0.06	0.00	0.08	
37	1	-0.09	0.01	-0.05	-0.09	0.01	0.12	-0.08	0.02	0.12	
38	6	-0.10	-0.06	-0.09	-0.13	-0.01	0.18	-0.07	-0.01	0.09	
39	1	-0.13	-0.05	-0.10	-0.16	0.00	0.22	-0.12	0.01	0.15	
40	6	-0.09	-0.10	-0.09	-0.14	-0.02	0.19	-0.04	-0.03	0.03	
41	1	-0.11	-0.13	-0.11	-0.17	-0.02	0.23	-0.05	-0.04	0.04	
42	6	-0.05	-0.12	-0.08	-0.10	-0.03	0.15	0.01	-0.05	-0.04	
43	1	-0.04	-0.15	-0.08	-0.10	-0.04	0.16	0.04	-0.07	-0.09	
44	6	-0.03	-0.08	-0.05	-0.05	-0.03	0.09	0.03	-0.04	-0.06	
45	1	0.00	-0.10	-0.04	-0.02	-0.04	0.06	0.08	-0.06	-0.11	
46	6	0.03	-0.03	0.05	0.01	0.02	-0.02	0.02	-0.01	-0.04	
47	6	0.05	-0.03	0.08	0.03	-0.01	-0.02	0.01	-0.02	-0.07	
48	6	0.07	-0.05	0.11	0.03	0.01	-0.04	0.05	-0.02	-0.10	
49	1	0.09	-0.05	0.13	0.04	-0.01	-0.03	0.04	-0.03	-0.12	
50	6	0.07	-0.08	0.11	0.00	0.03	-0.05	0.11	-0.02	-0.08	
51	1	0.08	-0.10	0.14	-0.01	0.04	-0.06	0.14	-0.02	-0.10	
52	6	0.04	-0.08	0.09	-0.03	0.05	-0.05	0.12	-0.01	-0.04	
53	1	0.04	-0.10	0.09	-0.05	0.08	-0.06	0.17	0.00	-0.03	
54	6	0.03	-0.05	0.05	-0.02	0.04	-0.04	0.08	0.00	-0.02	
55	1	0.01	-0.06	0.03	-0.04	0.06	-0.04	0.10	0.01	0.00	
56	6	-0.03	-0.01	-0.03	-0.02	0.03	-0.01	-0.01	0.02	0.01	
57	6	-0.05	-0.03	-0.04	-0.04	0.04	0.04	-0.04	-0.01	-0.02	
58	1	-0.05	-0.04	-0.02	-0.03	0.02	0.07	-0.06	-0.04	-0.07	
59	6	-0.08	-0.04	-0.06	-0.08	0.06	0.04	-0.02	0.01	0.00	
60	1	-0.10	-0.06	-0.07	-0.10	0.06	0.08	-0.04	-0.02	-0.03	
61	6	-0.09	-0.03	-0.07	-0.10	0.08	0.00	0.01	0.05	0.05	
62	1	-0.11	-0.04	-0.09	-0.12	0.10	0.00	0.02	0.07	0.07	
63	6	-0.06	-0.01	-0.06	-0.08	0.08	-0.04	0.03	0.08	0.09	
64	1	-0.07	0.00	-0.07	-0.09	0.10	-0.07	0.06	0.12	0.13	

65	6	-0.03	0.00	-0.04	-0.04	0.06	-0.05	0.02	0.07	0.07
66	1	-0.01	0.02	-0.03	-0.02	0.06	-0.08	0.04	0.09	0.10
67	6	0.03	0.06	0.00	0.05	-0.01	-0.06	-0.04	0.01	0.02
68	6	0.07	0.07	0.03	0.07	-0.02	-0.07	-0.01	-0.01	-0.03
69	1	0.08	0.05	0.05	0.06	-0.01	-0.06	0.03	-0.05	-0.10
70	6	0.09	0.11	0.02	0.09	-0.03	-0.11	-0.04	0.01	0.01
71	1	0.12	0.12	0.04	0.11	-0.03	-0.12	-0.02	-0.01	-0.03
72	6	0.07	0.14	-0.01	0.10	-0.03	-0.13	-0.09	0.05	0.09
73	1	0.09	0.17	-0.02	0.12	-0.04	-0.15	-0.11	0.06	0.11
74	6	0.04	0.12	-0.04	0.08	-0.02	-0.11	-0.12	0.07	0.13
75	1	0.03	0.14	-0.06	0.09	-0.03	-0.13	-0.16	0.10	0.19
76	6	0.02	0.08	-0.03	0.06	-0.01	-0.08	-0.10	0.05	0.10
77	1	-0.01	0.07	-0.05	0.05	-0.01	-0.07	-0.12	0.07	0.13