

Supporting Information

Prebiotic synthesis of triazines from urea: Free radical routes to melamine, ammeline, ammelide and cyanuric acid

Yassin A. Jeilani,^{*,a} Thomas M. Orlando,^{*,b} Albryona Pope,^a Claire Pirim,^b Minh Tho Nguyen^{*,c}

^{a)} *Department Chemistry and Biochemistry, Spelman College, Atlanta, GA 30314, USA*

^{b)} *School of Chemistry and Biochemistry, Georgia Institute of Technology, Atlanta, GA 30332, USA*

^{c)} *Department of Chemistry, University of Leuven, B-3001 Leuven, Belgium*

The supporting information includes: (1) coordinates for optimized geometries of all species, (2) coordinates of geometries for all transition states

(1) Coordinates for optimized geometries of all species

Optimized Geometry of 1 Urea

Urea

0 1

C

N	1	B1				
H	2	B2	1	A1		
H	2	B3	1	A2	3	D1 0
N	1	B4	2	A3	3	D2 0
H	5	B5	1	A4	2	D3 0
H	5	B6	1	A5	2	D4 0
O	1	B7	5	A6	2	D5 0

B1	1.38839192
B2	1.00865497
B3	1.00921229

B4	1.38839192
B5	1.00865497
B6	1.00921229
B7	1.21399300
A1	112.93333051
A2	117.73348168
A3	113.65250170
A4	112.93333051
A5	117.73348168
A6	123.17374915
D1	136.91347244
D2	-167.14660986
D3	-167.14660986
D4	-30.23313742
D5	180.00000000

Optimized Geometry of 2

C2-Ur

0 2

C						
N	1	B1				
H	2	B2	1	A1		
H	2	B3	1	A2	3	D1 0
N	1	B4	2	A3	4	D2 0
H	5	B5	1	A4	2	D3 0
O	1	B6	2	A5	5	D4 0

B1	1.36104777
B2	1.00717537
B3	1.00662558
B4	1.39542036
B5	1.02399115
B6	1.22621805
A1	118.15148338
A2	119.14338106
A3	114.24130605
A4	106.52295277
A5	124.58387455
D1	158.05797034
D2	-11.56151778
D3	-149.39988788
D4	175.72077600

Optimized Geometry of 3

C3-Ure

0 2

C

N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
N	3	B3	2	A2	1	D1 0
H	4	B4	3	A3	2	D2 0
H	4	B5	3	A4	2	D3 0
O	3	B6	2	A5	1	D4 0
H	2	B7	1	A6	3	D5 0
N	1	B8	2	A7	3	D6 0
H	9	B9	1	A8	2	D7 0
H	9	B10	1	A9	2	D8 0
N	1	B11	9	A10	2	D9 0
H	12	B12	1	A11	9	D10 0
H	12	B13	1	A12	9	D11 0
O	1	B14	9	A13	12	D12 0

B1	1.46898354
B2	1.38555538
B3	1.38993267
B4	1.00906070
B5	1.01278518
B6	1.21527917
B7	1.00934536
B8	1.44889911
B9	1.01411593
B10	1.01591176
B11	1.47732199
B12	1.01559263
B13	1.01620221
B14	1.34638738
A1	127.28307086
A2	114.29034984
A3	112.58284811
A4	116.94186724
A5	122.53339041
A6	114.52109315
A7	116.87780372
A8	108.56784071
A9	110.86936904
A10	107.47968303
A11	109.98662873
A12	111.34400143
A13	112.20246055
D1	19.09086506
D2	168.87715031
D3	31.66559205
D4	-159.80031550
D5	-155.74878897
D6	45.82812216
D7	87.08157976
D8	-32.83004377
D9	121.71827304

D10	50.45833698
D11	175.41938938
D12	110.09451776

Optimized Geometry of 4

C4-Ure

0 2

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
N	3	B3	2	A2	1	D1 0
H	4	B4	3	A3	2	D2 0
H	4	B5	3	A4	2	D3 0
O	3	B6	2	A5	1	D4 0
H	2	B7	1	A6	3	D5 0
N	1	B8	2	A7	3	D6 0
H	9	B9	1	A8	2	D7 0
N	1	B10	9	A9	2	D8 0
H	11	B11	1	A10	9	D9 0
H	11	B12	1	A11	9	D10 0
O	1	B13	11	A12	9	D11 0
H	14	B14	1	A13	11	D12 0

B1	1.48031409
B2	1.37934669
B3	1.37896590
B4	1.00812736
B5	1.00822583
B6	1.22468671
B7	1.01025489
B8	1.44097852
B9	1.02677319
B10	1.43704229
B11	1.01411721
B12	1.01512223
B13	1.40445214
B14	0.96430875
A1	121.14008740
A2	114.62711621
A3	114.00921075
A4	119.24694705
A5	122.97659523
A6	113.44287295
A7	110.01537053
A8	105.80012274
A9	108.96652535
A10	109.82418401
A11	110.35592235
A12	109.90776413

A13	105.29816357
D1	-171.23103643
D2	-167.95393850
D3	-25.29810129
D4	8.08828104
D5	-152.27797224
D6	64.67296153
D7	-68.84834454
D8	126.75217251
D9	162.23803276
D10	-75.57763011
D11	-120.30330350
D12	92.73971130

Optimized Geometry of 5

C5-Ure

0 1

C					
N	1	B1			
H	2	B2	1	A1	
H	2	B3	1	A2	3
N	1	B4	2	A3	3
H	5	B5	1	A4	2
C	5	B6	1	A5	2
N	7	B7	5	A6	1
H	8	B8	7	A7	5
H	8	B9	7	A8	5
N	7	B10	5	A9	1
H	11	B11	7	A10	5
O	1	B12	2	A11	5

B1	1.39057379
B2	1.00826831
B3	1.00854583
B4	1.40125839
B5	1.00884767
B6	1.41075424
B7	1.40381418
B8	1.01176117
B9	1.01005139
B10	1.26724830
B11	1.01892243
B12	1.20552062
A1	113.02747632
A2	119.99422245
A3	112.08076788
A4	117.90573972
A5	126.21611922
A6	109.41461402

A7	114.66336011
A8	114.19706387
A9	122.19086855
A10	110.82084221
A11	122.77441911
D1	140.64491123
D2	-165.47789771
D3	-1.53895973
D4	-165.54338918
D5	-157.53397352
D6	46.03122080
D7	177.68419581
D8	26.70110348
D9	-174.89806789
D10	-179.86823982

Optimized Geometry of 6

C6-Ure

0 2

C					
N	1	B1			
H	2	B2	1	A1	
C	2	B3	1	A2	3
O	4	B4	2	A3	1
N	4	B5	2	A4	1
H	6	B6	4	A5	2
H	6	B7	4	A6	2
N	1	B8	2	A7	4
H	9	B9	1	A8	2
C	9	B10	1	A9	2
N	11	B11	9	A10	1
H	12	B12	11	A11	9
H	12	B13	11	A12	9
N	11	B14	9	A13	1
H	15	B15	11	A14	9
N	1	B16	2	A15	4
H	17	B17	1	A16	2
H	17	B18	1	A17	2
O	1	B19	2	A18	4

B1	1.45212526
B2	1.00983418
B3	1.39717423
B4	1.21769189
B5	1.37147949
B6	1.01117195
B7	1.00721862
B8	1.46182856
B9	1.00664301

B10	1.38417389
B11	1.39411654
B12	1.00905223
B13	1.01081035
B14	1.28249865
B15	1.01537729
B16	1.46507894
B17	1.02851359
B18	1.01483134
B19	1.34145782
A1	115.96058871
A2	128.31336340
A3	120.53780107
A4	115.70341898
A5	118.27001072
A6	114.10087182
A7	108.87241514
A8	116.06329144
A9	124.94886341
A10	111.77313313
A11	114.97308304
A12	115.26621937
A13	121.32035595
A14	112.13495728
A15	108.26755577
A16	108.97351269
A17	111.72982800
A18	115.25682518
D1	-158.66942335
D2	163.09283080
D3	-16.23807389
D4	-22.03876792
D5	-168.15427747
D6	-87.44476820
D7	-0.34377164
D8	-167.43201643
D9	-167.70180996
D10	175.82809699
D11	41.76536177
D12	15.16105892
D13	-173.17332919
D14	151.93628398
D15	167.66215968
D16	-63.64393807
D17	40.75655979

Optimized Geometry of 7

C7-Ure

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
O	3	B3	2	A2	1	D1 0
N	3	B4	2	A3	1	D2 0
H	5	B5	3	A4	2	D3 0
H	5	B6	3	A5	2	D4 0
N	1	B7	2	A6	3	D5 0
H	8	B8	1	A7	2	D6 0
C	8	B9	1	A8	2	D7 0
N	10	B10	8	A9	1	D8 0
H	11	B11	10	A10	8	D9 0
H	11	B12	10	A11	8	D10 0
N	10	B13	8	A12	1	D11 0
H	14	B14	10	A13	8	D12 0
N	1	B15	8	A14	10	D13 0
H	16	B16	1	A15	8	D14 0
H	16	B17	1	A16	8	D15 0
O	1	B18	16	A17	2	D16 0
H	19	B19	1	A18	16	D17 0

B1	1.45796292
B2	1.40736601
B3	1.23163336
B4	1.35653416
B5	1.00560157
B6	1.00633894
B7	1.43962357
B8	1.00643898
B9	1.38053315
B10	1.39825827
B11	1.00926658
B12	1.01126016
B13	1.28296491
B14	1.01545678
B15	1.43084545
B16	1.01284023
B17	1.02223570
B18	1.42425506
B19	0.97282455
A1	113.88950928
A2	125.49451526
A3	111.43610459
A4	119.94972827
A5	119.16585728
A6	105.61387131
A7	113.67851768
A8	125.34752664
A9	111.97749861
A10	114.28771514
A11	115.09834572

A12	121.40543256
A13	111.77437137
A14	110.83931489
A15	111.15789901
A16	110.20505770
A17	115.76270422
A18	105.29220719
D1	21.78272988
D2	-160.37756307
D3	2.63760677
D4	177.49901852
D5	178.91455561
D6	26.88535838
D7	-172.20927203
D8	-154.24975498
D9	177.97491724
D10	45.76982108
D11	30.22014276
D12	-175.32449563
D13	-54.45628735
D14	163.13064381
D15	37.10761122
D16	121.16009729
D17	-60.64541997

Optimized Geometry of 8

C8-Ure

0 1

C					
N	1	B1			
C	2	B2	1	A1	
N	3	B3	2	A2	1
H	4	B4	3	A3	2
H	4	B5	3	A4	2
O	3	B6	2	A5	1
N	1	B7	2	A6	3
H	8	B8	1	A7	2
C	8	B9	1	A8	2
N	10	B10	8	A9	1
H	11	B11	10	A10	8
N	10	B12	8	A11	1
H	13	B13	10	A12	8
H	13	B14	10	A13	8
N	1	B15	2	A14	3
H	16	B16	1	A15	2
H	16	B17	1	A16	2

B1	1.31611049
B2	1.37656269

B3	1.36585026
B4	1.00512839
B5	1.00499755
B6	1.24596338
B7	1.38118377
B8	1.03203591
B9	1.38674340
B10	1.28480215
B11	1.01542232
B12	1.38651959
B13	1.00957340
B14	1.00768112
B15	1.34045019
B16	1.00531020
B17	1.01891894
A1	120.39142602
A2	112.15124494
A3	118.09006528
A4	118.97526608
A5	128.02725930
A6	122.66541898
A7	109.84703359
A8	128.68131114
A9	121.94036506
A10	111.95468946
A11	111.87166064
A12	117.27716561
A13	115.77083898
A14	119.33327031
A15	116.94769739
A16	118.45567672
D1	178.77253912
D2	171.32433167
D3	9.70788677
D4	-0.30220369
D5	-0.01008047
D6	-1.71594117
D7	-179.28135479
D8	0.93080305
D9	-179.81557051
D10	178.44327981
D11	24.94127949
D12	163.79980382
D13	179.64301610
D14	1.86611258
D15	177.66238805

Optimized Geometry of 9

C9-Ure

02

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
N	3	B3	2	A2	1	D1 0
C	4	B4	3	A3	2	D2 0
O	5	B5	4	A4	3	D3 0
N	5	B6	4	A5	3	D4 0
H	7	B7	5	A6	4	D5 0
H	7	B8	5	A7	4	D6 0
N	3	B9	2	A8	1	D7 0
H	10	B10	3	A9	2	D8 0
H	10	B11	3	A10	2	D9 0
H	2	B12	1	A11	3	D10 0
N	1	B13	2	A12	3	D11 0
H	14	B14	1	A13	2	D12 0
N	1	B15	14	A14	2	D13 0
H	16	B16	1	A15	14	D14 0

B1	1.40700633
B2	1.38312026
B3	1.29141291
B4	1.40241938
B5	1.21889226
B6	1.37417035
B7	1.00653550
B8	1.00715734
B9	1.37362037
B10	1.00835724
B11	1.00894394
B12	1.01024058
B13	1.33472706
B14	1.02201948
B15	1.31948330
B16	1.02188909
A1	129.92083902
A2	128.74103594
A3	121.85798911
A4	126.37721720
A5	110.91574780
A6	118.21547173
A7	116.56050533
A8	112.27242050
A9	114.08295006
A10	118.27240483
A11	112.96609073
A12	112.80641563
A13	106.27677296
A14	120.89241942
A15	112.16262509
D1	-23.24674805

D2	-26.72505269
D3	-24.14522345
D4	156.66077661
D5	16.33353695
D6	166.89745041
D7	156.97283027
D8	-178.77510111
D9	-37.02475668
D10	-174.15776425
D11	169.59369161
D12	179.11754026
D13	-175.53953712
D14	175.93794819

Optimized Geometry of 10

C10-Ure

0 2

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
N	3	B3	2	A2	1	D1 0
H	4	B4	3	A3	2	D2 0
H	4	B5	3	A4	2	D3 0
N	3	B6	2	A5	1	D4 0
H	7	B7	3	A6	2	D5 0
C	7	B8	3	A7	2	D6 0
N	9	B9	7	A8	3	D7 0
H	10	B10	9	A9	7	D8 0
N	9	B11	7	A10	3	D9 0
H	12	B12	9	A11	7	D10 0
O	1	B13	2	A12	3	D11 0
N	1	B14	14	A13	10	D12 0
H	15	B15	1	A14	14	D13 0
H	15	B16	1	A15	14	D14 0

B1	1.43140102
B2	1.28131017
B3	1.38101121
B4	1.00973964
B5	1.00955951
B6	1.38131744
B7	1.00957651
B8	1.39893263
B9	1.37510684
B10	1.00895256
B11	1.27666692
B12	1.01709883
B13	1.34691421
B14	1.48345477

B15	1.01610607
B16	1.01639638
A1	118.95231142
A2	120.34652038
A3	116.48109640
A4	112.41274794
A5	125.12542429
A6	120.15356445
A7	121.36820830
A8	112.79066809
A9	116.51415430
A10	117.94973006
A11	111.53752811
A12	114.83920732
A13	99.45843837
A14	109.62146214
A15	111.83254698
D1	-178.05236462
D2	-146.54345032
D3	-12.60304382
D4	0.37642760
D5	-165.61129112
D6	-13.18602316
D7	15.77630133
D8	-162.04803057
D9	-164.00318298
D10	-178.41884378
D11	136.31573061
D12	114.83157400
D13	68.84735098
D14	-54.65066702

Optimized Geometry of 11

C11-Ure

0 2

C

N	1	B1					
C	2	B2	1	A1			
N	3	B3	2	A2	1	D1	0
H	4	B4	3	A3	2	D2	0
C	4	B5	3	A4	2	D3	0
N	6	B6	4	A5	3	D4	0
N	6	B7	4	A6	3	D5	0
H	8	B8	6	A7	4	D6	0
N	3	B9	2	A8	1	D7	0
H	10	B10	3	A9	2	D8	0
H	10	B11	3	A10	2	D9	0
N	1	B12	2	A11	3	D10	0
H	13	B13	1	A12	2	D11	0

H	13	B14	1	A13	2	D12	0
O	1	B15	13	A14	7	D13	0
H	16	B16	1	A15	13	D14	0

B1	1.43488568
B2	1.27629497
B3	1.38743497
B4	1.00940689
B5	1.39723686
B6	1.33429151
B7	1.31731754
B8	1.02137629
B9	1.38265601
B10	1.01025691
B11	1.01038888
B12	1.43139612
B13	1.01304301
B14	1.01310339
B15	1.44380865
B16	0.96571298
A1	117.02310646
A2	123.83704800
A3	119.99563600
A4	118.98379625
A5	120.26721339
A6	116.77476992
A7	106.88862839
A8	121.36903368
A9	111.87300963
A10	115.80287407
A11	108.43967741
A12	111.79455090
A13	110.15169571
A14	115.02443743
A15	106.62532021
D1	2.86269777
D2	165.09151239
D3	12.94357129
D4	-11.44359772
D5	167.37101101
D6	-179.94579506
D7	-179.89068602
D8	13.59076470
D9	145.21232760
D10	-140.85011136
D11	-175.22040197
D12	-51.06479990
D13	-114.18976540
D14	60.84106787

Optimized Geometry of 12

C12-Ure

0 1

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
N	3	B3	2	A2	1	D1 0
C	4	B4	3	A3	2	D2 0
N	1	B5	2	A4	3	D3 0
H	6	B6	1	A5	2	D4 0
N	5	B7	4	A6	3	D5 0
H	8	B8	5	A7	4	D6 0
N	3	B9	2	A8	1	D7 0
H	10	B10	3	A9	2	D8 0
H	10	B11	3	A10	2	D9 0
N	1	B12	2	A11	3	D10 0
H	13	B13	1	A12	2	D11 0
H	13	B14	1	A13	2	D12 0

B1	1.30899547
B2	1.37649307
B3	1.31459599
B4	1.37127083
B5	1.35134484
B6	1.00977885
B7	1.27666832
B8	1.01776157
B9	1.35576468
B10	1.00458482
B11	1.00522526
B12	1.36476441
B13	1.00741859
B14	1.00804702
A1	114.29519581
A2	128.01666005
A3	117.81327229
A4	122.55098805
A5	122.78534101
A6	128.56001468
A7	108.53668897
A8	113.88141488
A9	118.75269931
A10	118.30678485
A11	119.30890994
A12	119.16338948
A13	114.39316485
D1	-1.56506703
D2	1.46361699
D3	0.87514599
D4	-176.56097127

D5	179.25676923
D6	-0.17047278
D7	178.08406281
D8	9.37159989
D9	171.86642088
D10	-177.23868039
D11	-156.56107458
D12	-12.32600587

Optimized Geometry of 13

C13-Ure

0 2

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
N	3	B3	2	A2	1	D1 0
C	4	B4	3	A3	2	D2 0
N	1	B5	2	A4	3	D3 0
N	5	B6	4	A5	3	D4 0
H	7	B7	5	A6	4	D5 0
N	3	B8	2	A7	1	D6 0
H	9	B9	3	A8	2	D7 0
H	9	B10	3	A9	2	D8 0
N	1	B11	2	A10	3	D9 0
H	12	B12	1	A11	2	D10 0
H	12	B13	1	A12	2	D11 0

B1	1.34186807
B2	1.34236277
B3	1.34491173
B4	1.34442541
B5	1.34351097
B6	1.36734944
B7	1.02644033
B8	1.35142922
B9	1.00496580
B10	1.00455451
B11	1.35310746
B12	1.00487512
B13	1.00491931
A1	114.43269611
A2	125.94687643
A3	114.16979223
A4	125.59077414
A5	116.03208723
A6	105.34752533
A7	117.28432336
A8	118.77797174
A9	119.53592676

A10	117.22247972
A11	119.10438326
A12	118.77614411
D1	-0.14512752
D2	0.38165710
D3	-0.33782347
D4	179.86645554
D5	-179.65847657
D6	179.42654859
D7	176.15142484
D8	4.65544973
D9	179.02791924
D10	7.18451867
D11	173.62049645

Optimized Geometry of Melamine (15)

Melamine

0 1

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
N	3	B3	2	A2	1	D1 0
C	4	B4	3	A3	2	D2 0
N	1	B5	2	A4	3	D3 0
N	5	B6	4	A5	3	D4 0
H	7	B7	5	A6	4	D5 0
H	7	B8	5	A7	4	D6 0
N	3	B9	2	A8	1	D7 0
H	10	B10	3	A9	2	D8 0
H	10	B11	3	A10	2	D9 0
N	1	B12	2	A11	3	D10 0
H	13	B13	1	A12	2	D11 0
H	13	B14	1	A13	2	D12 0

B1	1.34068295
B2	1.34076591
B3	1.34073666
B4	1.34073523
B5	1.34074227
B6	1.35847488
B7	1.00530726
B8	1.00529706
B9	1.35841626
B10	1.00529388
B11	1.00529890
B12	1.35839794
B13	1.00528914
B14	1.00529002
A1	113.67447919

A2	126.32406129
A3	113.67235340
A4	126.32605662
A5	116.84426534
A6	117.95609640
A7	117.96413640
A8	116.84224937
A9	117.97779173
A10	117.96950194
A11	116.82778376
A12	117.98227885
A13	117.97948881
D1	-0.62101305
D2	0.62500867
D3	0.61318813
D4	178.51636505
D5	11.85020920
D6	168.88764674
D7	178.52229964
D8	11.82612105
D9	168.95767381
D10	-178.53002294
D11	-168.98178041
D12	-11.78378700

Optimized Geometry of 16

C16-Ure

0 2

C					
N	1	B1			
C	2	B2	1	A1	
N	3	B3	2	A2	1
H	4	B4	3	A3	2
O	3	B5	2	A4	1
N	1	B6	2	A5	3
H	7	B7	1	A6	2
C	7	B8	1	A7	2
N	9	B9	7	A8	1
H	10	B10	9	A9	7
N	9	B11	7	A10	1
H	12	B12	9	A11	7
H	12	B13	9	A12	7
N	1	B14	2	A13	3
H	15	B15	1	A14	2
H	15	B16	1	A15	2

B1	1.29302054
B2	1.37045397
B3	1.38304073

B4	1.02452774
B5	1.23511023
B6	1.40886399
B7	1.01376848
B8	1.42693378
B9	1.27926087
B10	1.01760345
B11	1.36848039
B12	1.02209204
B13	1.00828264
B14	1.36169271
B15	1.00878818
B16	1.00767689
A1	124.78414133
A2	112.96991284
A3	108.32793617
A4	128.03147099
A5	128.30974553
A6	112.44578984
A7	124.66209438
A8	114.86075543
A9	111.34109752
A10	115.20074464
A11	115.82160714
A12	114.86004848
A13	117.68009678
A14	116.61243001
A15	119.47343247
D1	-141.54348232
D2	141.05590510
D3	46.53821385
D4	-4.14549709
D5	143.59895007
D6	-84.84199250
D7	-137.61705583
D8	-175.31861773
D9	39.34306526
D10	33.99581089
D11	172.37500048
D12	168.17080538
D13	3.78175761
D14	156.41054835

Optimized Geometry of 17

C17-Ure

0 2

C

N	1	B1		
C	2	B2	1	A1

N	3	B3	2	A2	1	D1	0
C	4	B4	3	A3	2	D2	0
N	5	B5	4	A4	3	D3	0
H	6	B6	5	A5	4	D4	0
O	5	B7	4	A6	3	D5	0
N	3	B8	2	A7	1	D6	0
H	9	B9	3	A8	2	D7	0
H	9	B10	3	A9	2	D8	0
H	2	B11	1	A10	6	D9	0
N	1	B12	6	A11	5	D10	0
H	13	B13	1	A12	6	D11	0
H	13	B14	1	A13	6	D12	0
N	1	B15	6	A14	5	D13	0
H	16	B16	1	A15	6	D14	0

B1	1.45281385
B2	1.37616215
B3	1.29513117
B4	1.38728092
B5	1.41295498
B6	1.01113142
B7	1.21107282
B8	1.36982003
B9	1.00874082
B10	1.00921667
B11	1.01100670
B12	1.47518100
B13	1.01634790
B14	1.01627805
B15	1.43328372
B16	1.02511074
A1	119.16226217
A2	125.73975566
A3	118.51353704
A4	116.55878453
A5	112.35936515
A6	123.76874867
A7	114.61238937
A8	117.57377951
A9	113.36006996
A10	113.59706139
A11	111.03156997
A12	110.54709259
A13	111.59774432
A14	114.52894465
A15	107.27038552
D1	1.00393290
D2	12.04554477
D3	0.38279667
D4	-172.67071120
D5	177.40342758

D6	-179.78933711
D7	34.80456503
D8	174.06482724
D9	123.08137845
D10	-82.15881150
D11	-179.79628769
D12	-57.89858777
D13	156.40563694
D14	40.03020166

Optimized Geometry of 18

C18-Ure

0 2

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
N	3	B3	2	A2	1	D1 0
C	4	B4	3	A3	2	D2 0
N	5	B5	4	A4	3	D3 0
O	5	B6	4	A5	3	D4 0
N	3	B7	2	A6	1	D5 0
H	8	B8	3	A7	2	D6 0
H	8	B9	3	A8	2	D7 0
H	2	B10	1	A9	6	D8 0
N	1	B11	6	A10	5	D9 0
H	12	B12	1	A11	6	D10 0
H	12	B13	1	A12	6	D11 0
N	1	B14	6	A13	5	D12 0
H	15	B15	1	A14	6	D13 0
H	15	B16	1	A15	6	D14 0

B1	1.45631422
B2	1.36379733
B3	1.30274473
B4	1.38310858
B5	1.41722305
B6	1.21875551
B7	1.36665610
B8	1.00798861
B9	1.00880962
B10	1.00958120
B11	1.45031522
B12	1.01650761
B13	1.01666783
B14	1.46664072
B15	1.01678886
B16	1.01681141
A1	120.83677705

A2	124.82786696
A3	117.13074616
A4	119.50983074
A5	123.18595084
A6	116.17957033
A7	118.86134558
A8	113.81542552
A9	115.46111991
A10	112.47064514
A11	108.07205862
A12	109.26472377
A13	108.70665353
A14	109.76917607
A15	109.87069860
D1	1.39946101
D2	-2.25052934
D3	19.81269653
D4	-161.65036098
D5	-176.85735698
D6	-28.24507423
D7	-171.02727060
D8	-177.78060530
D9	152.38563329
D10	-56.16255038
D11	59.26363874
D12	-88.26496312
D13	-61.14691353
D14	56.31989531

Optimized Geometry of 19

C19

0 2

C					
N	1	B1			
C	2	B2	1	A1	
N	3	B3	2	A2	1
C	4	B4	3	A3	2
N	5	B5	4	A4	3
H	6	B6	5	A5	4
N	5	B7	4	A6	3
H	8	B8	5	A7	4
H	8	B9	5	A8	4
O	3	B10	2	A9	1
N	1	B11	2	A10	3
H	12	B12	1	A11	2
H	12	B13	1	A12	2
N	6	B14	5	A13	4
H	15	B15	6	A14	5
H	15	B16	6	A15	5
				D1	0
				D2	0
				D3	0
				D4	0
				D5	0
				D6	0
				D7	0
				D8	0
				D9	0
				D10	0
				D11	0
				D12	0
				D13	0
				D14	0

B1	1.28509157
B2	1.41509565
B3	1.41703275
B4	1.28374463
B5	1.38362691
B6	1.02300303
B7	1.38064942
B8	1.01033899
B9	1.01056543
B10	1.20794829
B11	1.37700539
B12	1.01010773
B13	1.00973316
B14	2.97136958
B15	1.02681928
B16	1.02757381
A1	118.62362901
A2	118.78206046
A3	118.48495825
A4	123.93855780
A5	119.30797983
A6	121.18297030
A7	116.25779761
A8	111.82976077
A9	120.66808492
A10	121.12443458
A11	112.23226782
A12	116.93890692
A13	109.24807315
A14	144.90237282
A15	107.13715990
D1	4.85776310
D2	-4.83864033
D3	3.14852268
D4	-161.22622012
D5	-174.71914195
D6	-145.20342924
D7	-11.45479062
D8	-176.36564388
D9	174.83677606
D10	10.76320911
D11	146.05608983
D12	-154.84760520
D13	-175.44677902
D14	29.91472688

Optimized Geometry of 20

C20-Ure

0 2

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
N	3	B3	2	A2	1	D1 0
C	4	B4	3	A3	2	D2 0
N	5	B5	4	A4	3	D3 0
H	6	B6	5	A5	4	D4 0
H	6	B7	5	A6	4	D5 0
O	3	B8	2	A7	1	D6 0
N	5	B9	4	A8	3	D7 0
N	1	B10	2	A9	3	D8 0
H	11	B11	1	A10	2	D9 0
H	11	B12	1	A11	2	D10 0

B1	1.34017031
B2	1.35570996
B3	1.35569509
B4	1.34039496
B5	1.35153407
B6	1.00523835
B7	1.00564604
B8	1.27897503
B9	1.34700505
B10	1.35149264
B11	1.00564045
B12	1.00522915
A1	114.15500939
A2	125.21927921
A3	114.15531790
A4	117.60179074
A5	119.01630845
A6	118.35207614
A7	117.39539056
A8	125.29405567
A9	117.61215898
A10	118.37666243
A11	119.04419920
D1	-4.65804914
D2	-4.66484497
D3	-171.45858899
D4	-169.79257132
D5	-6.89995263
D6	175.34847710
D7	10.15944461
D8	-171.48944855
D9	-6.75253759
D10	-169.91883662

Optimized Geometry of 21

C21-Ure

0 2

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
N	3	B3	2	A2	1	D1 0
C	4	B4	3	A3	2	D2 0
N	5	B5	4	A4	3	D3 0
N	5	B6	4	A5	3	D4 0
H	7	B7	5	A6	4	D5 0
H	7	B8	5	A7	4	D6 0
O	3	B9	2	A8	1	D7 0
N	1	B10	2	A9	3	D8 0
H	11	B11	1	A10	2	D9 0
H	11	B12	1	A11	2	D10 0

B1	1.34022864
B2	1.35580898
B3	1.35597387
B4	1.34024280
B5	1.34705392
B6	1.35161871
B7	1.00526594
B8	1.00567223
B9	1.27874820
B10	1.35165223
B11	1.00570196
B12	1.00529355
A1	114.16617237
A2	125.19380717
A3	114.17045205
A4	125.28845935
A5	117.61218956
A6	119.04125349
A7	118.36471294
A8	117.42127149
A9	117.61343187
A10	118.31672136
A11	119.00027185
D1	4.65619408
D2	4.65904694
D3	-10.16347048
D4	171.46587487
D5	169.83645779
D6	6.81153790
D7	-175.36036493
D8	171.46065759
D9	7.08601279
D10	169.60498843

Optimized Geometry of 22

Ammeline

0 1

C							
N	1	B1					
C	2	B2	1	A1			
N	3	B3	2	A2	1	D1	0
C	4	B4	3	A3	2	D2	0
N	1	B5	2	A4	3	D3	0
N	5	B6	4	A5	3	D4	0
H	7	B7	5	A6	4	D5	0
H	7	B8	5	A7	4	D6	0
O	3	B9	2	A8	1	D7	0
H	10	B10	3	A9	2	D8	0
N	1	B11	6	A10	5	D9	0
H	12	B12	1	A11	6	D10	0
H	12	B13	1	A12	6	D11	0

B1	1.34660006
B2	1.33315453
B3	1.32326771
B4	1.34609968
B5	1.33814628
B6	1.35078297
B7	1.00429775
B8	1.00469909
B9	1.34029036
B10	0.96690242
B11	1.35360413
B12	1.00481206
B13	1.00491926
A1	113.49165462
A2	127.55832802
A3	113.13979105
A4	125.66985532
A5	116.59015001
A6	119.46405720
A7	119.04135568
A8	116.47470476
A9	105.76629603
A10	117.38774893
A11	118.73566726
A12	118.61947804
D1	-0.09118663
D2	-0.18370274
D3	0.36973935
D4	-179.46308938
D5	-177.43121557
D6	-2.28758588

D7	179.89574518
D8	-0.17512570
D9	178.81339216
D10	171.50923265
D11	8.45624181

Optimized Geometry of 23

C23-Ure

0 1

C						
N	1	B1				
H	2	B2	1	A1		
H	2	B3	1	A2	3	D1 0
N	1	B4	2	A3	3	D2 0
H	5	B5	1	A4	2	D3 0
C	5	B6	1	A5	2	D4 0
N	7	B7	5	A6	1	D5 0
H	8	B8	7	A7	5	D6 0
O	7	B9	5	A8	1	D7 0
H	10	B10	7	A9	5	D8 0
O	1	B11	2	A10	5	D9 0

B1	1.39044903
B2	1.00893242
B3	1.00949338
B4	1.40706508
B5	1.00835523
B6	1.38996532
B7	1.26152122
B8	1.01745167
B9	1.37630319
B10	0.96311530
B11	1.20338982
A1	112.68792855
A2	118.02687225
A3	110.75221295
A4	117.19099913
A5	126.61461471
A6	124.49629909
A7	112.16538486
A8	106.82130737
A9	108.53632821
A10	123.72119758
D1	136.87497080
D2	-172.50170075
D3	-21.62505737
D4	174.97461328
D5	-22.76257613
D6	178.11835293

D7	158.71200720
D8	172.85994981
D9	-177.16143901

Optimized Geometry of 24

C24-Ure

0 2

C					
N	1	B1			
H	2	B2	1	A1	
C	2	B3	1	A2	3
O	4	B4	2	A3	1
N	4	B5	2	A4	1
H	6	B6	4	A5	2
H	6	B7	4	A6	2
N	1	B8	2	A7	4
H	9	B9	1	A8	2
C	9	B10	1	A9	2
N	11	B11	9	A10	1
H	12	B12	11	A11	9
O	11	B13	9	A12	1
H	14	B14	11	A13	9
N	1	B15	2	A14	4
H	16	B16	1	A15	2
H	16	B17	1	A16	2
O	1	B18	2	A17	4

B1	1.44939077
B2	1.01038050
B3	1.40079773
B4	1.21710576
B5	1.36967563
B6	1.01060155
B7	1.00695361
B8	1.47277801
B9	1.00965650
B10	1.37633110
B11	1.27479650
B12	1.01474255
B13	1.36429337
B14	0.96324058
B15	1.46106926
B16	1.02602882
B17	1.01416856
B18	1.34043476
A1	114.94391746
A2	128.78519283
A3	120.17956490
A4	116.10629133

A5	118.77419984
A6	114.43770820
A7	108.32611280
A8	113.47475581
A9	123.02402978
A10	123.18084557
A11	113.43064420
A12	109.18408206
A13	109.12007132
A14	109.00358831
A15	110.17825510
A16	111.40711057
A17	115.12507582
D1	-154.00037721
D2	162.34465403
D3	-17.04609825
D4	-19.83616682
D5	-168.72605301
D6	-94.80708661
D7	41.48882771
D8	-173.60557311
D9	26.81509257
D10	-179.65915335
D11	-155.08835240
D12	-172.52495661
D13	146.72554896
D14	168.72770962
D15	-61.73667575
D16	34.72905921

Optimized Geometry of 25

C25-Ure

0 2

C							
N	1	B1					
C	2	B2	1	A1			
O	3	B3	2	A2	1	D1	0
N	3	B4	2	A3	1	D2	0
H	5	B5	3	A4	2	D3	0
H	5	B6	3	A5	2	D4	0
N	1	B7	2	A6	3	D5	0
H	8	B8	1	A7	2	D6	0
C	8	B9	1	A8	2	D7	0
N	10	B10	8	A9	1	D8	0
H	11	B11	10	A10	8	D9	0
O	10	B12	8	A11	1	D10	0
H	13	B13	10	A12	8	D11	0
N	1	B14	2	A13	3	D12	0
H	15	B15	1	A14	2	D13	0

H	15	B16	1	A15	2	D14	0
O	1	B17	15	A16	2	D15	0
H	18	B18	1	A17	15	D16	0

B1	1.45567112
B2	1.41297768
B3	1.22105606
B4	1.35645705
B5	1.00615377
B6	1.00680448
B7	1.47104045
B8	1.00851546
B9	1.35863961
B10	1.28350582
B11	1.01416822
B12	1.36189804
B13	0.96301332
B14	1.44062980
B15	1.01519552
B16	1.01611663
B17	1.40121579
B18	0.98105207
A1	114.71066992
A2	122.51329531
A3	112.81558815
A4	120.32442292
A5	118.20175027
A6	105.09086196
A7	115.16084695
A8	122.26396988
A9	122.29349860
A10	113.84648453
A11	110.32164039
A12	108.96761218
A13	107.44999287
A14	109.94941201
A15	109.16426109
A16	116.43471712
A17	105.86419339
D1	-56.26158035
D2	129.10681980
D3	-10.11038907
D4	-175.18614559
D5	-168.39242509
D6	-39.83525499
D7	166.54138557
D8	-11.81524119
D9	-175.95898944
D10	169.21753273
D11	178.83548219
D12	75.13789300

D13	173.55484314
D14	-64.60715119
D15	121.03948741
D16	77.84648641

Optimized Geometry of 26

C26-Ure

0 1

C					
N	1	B1			
C	2	B2	1	A1	
O	3	B3	2	A2	1
N	3	B4	2	A3	1
H	5	B5	3	A4	2
H	5	B6	3	A5	2
N	1	B7	2	A6	3
H	8	B8	1	A7	2
C	8	B9	1	A8	2
N	10	B10	8	A9	1
H	11	B11	10	A10	8
O	10	B12	8	A11	1
H	13	B13	10	A12	8
N	1	B14	2	A13	3
H	15	B15	1	A14	2
H	15	B16	1	A15	2

B1	1.31090000
B2	1.38154517
B3	1.24143622
B4	1.36531050
B5	1.00491099
B6	1.00517057
B7	1.38561177
B8	1.03177867
B9	1.37242340
B10	1.27762210
B11	1.01516901
B12	1.36021463
B13	0.96300911
B14	1.34239422
B15	1.01595389
B16	1.00522506
A1	120.48922185
A2	127.84087503
A3	111.87219403
A4	119.17145812
A5	118.15721705
A6	122.94134070
A7	111.56036098

A8	128.36768884
A9	124.04282770
A10	113.16490952
A11	108.56280690
A12	109.14685165
A13	119.32370967
A14	119.29527727
A15	116.84884664
D1	0.76503139
D2	-178.44789036
D3	-9.07261689
D4	-171.87601576
D5	0.14365513
D6	-0.36056905
D7	179.66794477
D8	0.01803615
D9	-179.98300543
D10	-179.98323616
D11	179.90598608
D12	-179.81214765
D13	-179.52066179
D14	-0.62157784

Optimized Geometry of 27
C27-Ure

0 2

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
O	3	B3	2	A2	1	D1 0
N	3	B4	2	A3	1	D2 0
H	5	B5	3	A4	2	D3 0
N	1	B6	2	A5	3	D4 0
C	7	B7	1	A6	2	D5 0
O	8	B8	7	A7	1	D6 0
H	9	B9	8	A8	7	D7 0
N	8	B10	7	A9	1	D8 0
H	11	B11	8	A10	7	D9 0
H	7	B12	1	A11	2	D10 0
N	1	B13	2	A12	3	D11 0
H	14	B14	1	A13	2	D12 0
H	14	B15	1	A14	2	D13 0

B1	1.30984677
B2	1.36124856
B3	1.23792148
B4	1.38420391
B5	1.02127213
B6	1.39063993
B7	1.37774221

B8	1.35921779
B9	0.96320197
B10	1.27490898
B11	1.01490904
B12	1.02214538
B13	1.34031103
B14	1.01672586
B15	1.00607511
A1	124.90982269
A2	122.60652987
A3	121.39902741
A4	108.79295404
A5	124.20740538
A6	128.36822092
A7	108.22591369
A8	109.37052704
A9	123.95596799
A10	113.44201804
A11	113.98694901
A12	118.66450978
A13	119.44090533
A14	116.41769549
D1	157.25198660
D2	-18.58396350
D3	-147.89944767
D4	-5.34292079
D5	-175.57915107
D6	-179.80219957
D7	179.48266263
D8	0.25827170
D9	179.39398105
D10	8.12376007
D11	176.10289843
D12	175.10194010
D13	3.52634390

Optimized Geometry of 28

C28-Ure

0 2

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
N	3	B3	2	A2	1	D1 0
C	4	B4	3	A3	2	D2 0
O	5	B5	4	A4	3	D3 0
N	5	B6	4	A5	3	D4 0
H	7	B7	5	A6	4	D5 0
N	3	B8	2	A7	1	D6 0
H	9	B9	3	A8	2	D7 0

H	9	B10	3	A9	2	D8	0
H	2	B11	1	A10	7	D9	0
N	1	B12	7	A11	5	D10	0
H	13	B13	1	A12	7	D11	0
O	1	B14	13	A13	7	D12	0
H	15	B15	1	A14	13	D13	0

B1	1.45621247
B2	1.37488627
B3	1.29648310
B4	1.38532452
B5	1.21095322
B6	1.41010794
B7	1.01037485
B8	1.36800553
B9	1.00840083
B10	1.00902855
B11	1.01003561
B12	1.43863929
B13	1.02426092
B14	1.40148007
B15	0.96522779
A1	121.16852437
A2	125.77485638
A3	118.54387416
A4	123.91102041
A5	116.73810362
A6	115.06876921
A7	114.85249078
A8	118.39795525
A9	113.62858812
A10	113.02892802
A11	106.78633911
A12	107.35257654
A13	108.01195759
A14	105.87706779
D1	-3.39007687
D2	11.33927025
D3	176.55869008
D4	-1.36906693
D5	-176.05329702
D6	176.59154022
D7	32.08048138
D8	173.34959506
D9	137.03715344
D10	-101.18683077
D11	80.57036413
D12	120.48810433
D13	-9.05685295

Optimized Geometry of 29

C29-Ure

0 2

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
N	3	B3	2	A2	1	D1 0
C	4	B4	3	A3	2	D2 0
O	5	B5	4	A4	3	D3 0
N	5	B6	4	A5	3	D4 0
N	3	B7	2	A6	1	D5 0
H	8	B8	3	A7	2	D6 0
H	8	B9	3	A8	2	D7 0
H	2	B10	1	A9	7	D8 0
N	1	B11	7	A10	5	D9 0
H	12	B12	1	A11	7	D10 0
H	12	B13	1	A12	7	D11 0
O	1	B14	12	A13	7	D12 0
H	15	B15	1	A14	12	D13 0

B1	1.47177004
B2	1.38038750
B3	1.30005495
B4	1.38196670
B5	1.21343451
B6	1.41284712
B7	1.36364978
B8	1.00774236
B9	1.00872192
B10	1.01327283
B11	1.43489613
B12	1.01415543
B13	1.01319496
B14	1.41412217
B15	0.96611940
A1	117.62502404
A2	125.21404348
A3	116.89136322
A4	124.61801426
A5	117.11804426
A6	115.45769380
A7	118.83333783
A8	114.42350742
A9	113.22021726
A10	107.64091383
A11	112.04641394
A12	110.54108871
A13	108.86962245
A14	106.01849492
D1	-9.74371281

D2	3.40999325
D3	160.38250771
D4	-23.32714148
D5	169.58703793
D6	27.08825386
D7	171.26363210
D8	171.53982242
D9	-175.68399143
D10	164.28520472
D11	40.93805451
D12	121.90230617
D13	-44.97786491

Optimized Geometry of 30

C30-Ure

0 2

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
O	3	B3	2	A2	1	D1 0
N	3	B4	2	A3	1	D2 0
C	5	B5	3	A4	2	D3 0
N	1	B6	2	A5	3	D4 0
H	7	B7	1	A6	2	D5 0
O	6	B8	5	A7	3	D6 0
H	9	B9	6	A8	5	D7 0
N	1	B10	2	A9	3	D8 0
H	11	B11	1	A10	2	D9 0
H	11	B12	1	A11	2	D10 0
N	9	B13	6	A12	5	D11 0
H	14	B14	9	A13	6	D12 0
H	14	B15	9	A14	6	D13 0

B1	1.28205750
B2	1.41853574
B3	1.20570016
B4	1.41800150
B5	1.27234712
B6	1.38603828
B7	1.01127957
B8	1.33655704
B9	0.97723028
B10	1.37862366
B11	1.01049008
B12	1.01075392
B13	2.88387169
B14	1.02664334
B15	1.02648652
A1	118.73911167

A2	120.41933353
A3	118.85959781
A4	118.88690298
A5	123.21119974
A6	121.51837466
A7	120.93371503
A8	110.42769393
A9	121.52763784
A10	116.76421797
A11	111.69454959
A12	109.12877139
A13	118.19699536
A14	127.15026863
D1	178.86814935
D2	-1.61883688
D3	1.57586279
D4	2.06260723
D5	-168.35117875
D6	178.70858184
D7	-177.34630470
D8	-175.81845321
D9	-142.91112873
D10	-9.71567601
D11	-172.62492949
D12	105.07496435
D13	-113.82891012

Optimized Geometry of 31

C31-Ure

0 2

C					
N	1	B1			
C	2	B2	1	A1	
O	3	B3	2	A2	1
N	3	B4	2	A3	1
C	5	B5	3	A4	2
N	6	B6	5	A5	3
O	6	B7	5	A6	3
H	8	B8	6	A7	5
N	1	B9	2	A8	3
H	10	B10	1	A9	2
H	10	B11	1	A10	2

B1	1.34007724
B2	1.34771444
B3	1.28711093
B4	1.35269520
B5	1.32663781
B6	1.33595630

B7	1.33329541
B8	0.96714967
B9	1.34667319
B10	1.00523062
B11	1.00567042
A1	114.02213547
A2	117.14249837
A3	125.98235402
A4	113.19042607
A5	126.45945059
A6	116.42578588
A7	106.85014821
A8	118.02791104
A9	119.51781655
A10	118.83629429
D1	-175.48489473
D2	4.70531402
D3	4.79195379
D4	-10.04714599
D5	172.64620369
D6	177.59620330
D7	171.56540997
D8	172.55440886
D9	3.88603730

Optimized Geometry of 33

C33-Ammelide

0 1

C					
N	1	B1			
C	2	B2	1	A1	
O	3	B3	2	A2	1
H	4	B4	3	A3	2
N	3	B5	2	A4	1
C	6	B6	3	A5	2
N	7	B7	6	A6	3
O	7	B8	6	A7	3
H	9	B9	7	A8	6
N	1	B10	2	A9	3
H	11	B11	1	A10	2
H	11	B12	1	A11	2

B1	1.34324400
B2	1.32368955
B3	1.33540498
B4	0.96754981
B5	1.33734208
B6	1.32890104
B7	1.32939828

B8	1.33623638
B9	0.96712595
B10	1.34758143
B11	1.00450704
B12	1.00497501
A1	113.45775617
A2	116.18652294
A3	106.02014363
A4	127.33309513
A5	113.07438557
A6	126.83110054
A7	115.96502293
A8	106.17383750
A9	117.14737199
A10	119.67698408
A11	119.09164888
D1	179.99518298
D2	179.99887370
D3	-0.00873596
D4	-0.00060016
D5	0.00680282
D6	-179.99390417
D7	-179.99366984
D8	-179.96893287
D9	-179.86729529
D10	-0.16009473

Optimized Geometry of 34

C34-Ure

0 1

C					
N	1	B1			
H	2	B2	1	A1	
H	2	B3	1	A2	3
N	1	B4	2	A3	3
H	5	B5	1	A4	2
C	5	B6	1	A5	2
N	7	B7	5	A6	1
H	8	B8	7	A7	5
H	8	B9	7	A8	5
O	7	B10	5	A9	1
O	1	B11	2	A10	5

B1	1.37527962
B2	1.00755310
B3	1.00768348
B4	1.38759343
B5	1.00928830
B6	1.42123380

B7	1.35108708
B8	1.00516616
B9	1.01258695
B10	1.21496361
B11	1.22144926
A1	120.46874847
A2	114.42741292
A3	113.84415466
A4	119.74171030
A5	128.79865722
A6	115.32638187
A7	116.86271486
A8	119.98305379
A9	118.70487999
A10	122.18786416
D1	-146.09811286
D2	-23.96757548
D3	-5.07012539
D4	-178.51162899
D5	-3.94445450
D6	176.85286136
D7	5.91511387
D8	176.82534381
D9	-178.26761885

Optimized Geometry of 35

C35-Ure

0 2

C					
N	1	B1			
H	2	B2	1	A1	
C	2	B3	1	A2	3
O	4	B4	2	A3	1
N	4	B5	2	A4	1
H	6	B6	4	A5	2
H	6	B7	4	A6	2
N	1	B8	2	A7	4
H	9	B9	1	A8	2
C	9	B10	1	A9	2
N	11	B11	9	A10	1
H	12	B12	11	A11	9
H	12	B13	11	A12	9
O	11	B14	9	A13	1
O	1	B15	9	A14	11
N	1	B16	16	A15	2
H	17	B17	1	A16	16
H	17	B18	1	A17	16

B1	1.45689379
----	------------

B2	1.01201979
B3	1.40314986
B4	1.21183716
B5	1.38864926
B6	1.01026308
B7	1.01132803
B8	1.44329379
B9	1.01303757
B10	1.40597985
B11	1.37413366
B12	1.00799271
B13	1.01151039
B14	1.21486068
B15	1.34336466
B16	1.49767870
B17	1.01773723
B18	1.01599125
A1	109.80290995
A2	128.97835059
A3	121.82173023
A4	114.72343734
A5	112.24038153
A6	115.84024440
A7	111.59488506
A8	113.84830967
A9	125.70754421
A10	116.24983131
A11	113.89842016
A12	118.09417043
A13	120.06944466
A14	115.66811562
A15	98.20953589
A16	111.91745379
A17	113.19930140
D1	-139.54702434
D2	131.59547626
D3	-50.03088378
D4	-173.61635322
D5	-40.20524605
D6	49.99612607
D7	-44.91144041
D8	174.20783152
D9	-19.54786128
D10	-167.44210545
D11	-21.74437941
D12	159.26552653
D13	47.83074181
D14	-115.39574980
D15	-67.17426096
D16	59.80349045

Optimized Geometry of 36

C36-Ure

0 1

C						
N	1	B1				
H	2	B2	1	A1		
C	2	B3	1	A2	3	D1 0
N	4	B4	2	A3	1	D2 0
H	5	B5	4	A4	2	D3 0
H	5	B6	4	A5	2	D4 0
O	4	B7	2	A6	1	D5 0
N	1	B8	2	A7	4	D6 0
C	9	B9	1	A8	2	D7 0
N	10	B10	9	A9	1	D8 0
H	11	B11	10	A10	9	D9 0
H	11	B12	10	A11	9	D10 0
O	10	B13	9	A12	1	D11 0
H	9	B14	1	A13	2	D12 0
O	1	B15	9	A14	10	D13 0

B1	1.41967828
B2	1.01122873
B3	1.39718831
B4	1.39831043
B5	1.01146648
B6	1.01245874
B7	1.20878485
B8	1.39058978
B9	1.41633781
B10	1.38342529
B11	1.00806407
B12	1.00799207
B13	1.20206696
B14	1.01221367
B15	1.20076588
A1	111.40939237
A2	135.05772339
A3	115.42619221
A4	110.72565879
A5	115.61339740
A6	121.56613208
A7	113.95217786
A8	125.27030019
A9	111.09272115
A10	120.71433582
A11	113.97888477
A12	125.21895218
A13	116.10431521
A14	126.44712274

D1	-169.09769167
D2	-22.52234801
D3	-173.37125070
D4	-43.22531271
D5	156.79359877
D6	-5.71863633
D7	-178.38432327
D8	175.25593053
D9	25.53400603
D10	170.50636504
D11	-2.99250918
D12	-10.15254902
D13	0.30875011

Optimized Geometry of 37

C37-Ure

0 2

C					
N	1	B1			
H	2	B2	1	A1	
C	2	B3	1	A2	3
N	4	B4	2	A3	1
H	5	B5	4	A4	2
H	5	B6	4	A5	2
O	4	B7	2	A6	1
N	1	B8	2	A7	4
C	9	B9	1	A8	2
N	10	B10	9	A9	1
H	11	B11	10	A10	9
O	10	B12	9	A11	1
H	9	B13	1	A12	2
O	1	B14	9	A13	10

B1	1.41096221
B2	1.01154494
B3	1.40358776
B4	1.39264669
B5	1.01103062
B6	1.01190749
B7	1.20762883
B8	1.39458206
B9	1.39392831
B10	1.38953062
B11	1.02433658
B12	1.21678059
B13	1.01438680
B14	1.20222384
A1	111.36663147
A2	134.48458782

A3	115.17445035
A4	111.58656079
A5	116.41215289
A6	121.26165256
A7	114.52525140
A8	125.80317933
A9	111.19648408
A10	106.58591052
A11	126.40603921
A12	118.56228020
A13	125.17316682
D1	-164.42345000
D2	-28.08958496
D3	-175.21846155
D4	-42.96676565
D5	151.33145589
D6	-0.58122214
D7	178.97537885
D8	179.28846669
D9	157.47607792
D10	4.78634307
D11	-6.07028133
D12	-1.98990377

Optimized Geometry of 38

C38-Ure

0 2

C					
N	1	B1			
C	2	B2	1	A1	
N	3	B3	2	A2	1
H	4	B4	3	A3	2
C	4	B5	3	A4	2
N	6	B6	4	A5	3
H	7	B7	6	A6	4
O	6	B8	4	A7	3
O	3	B9	2	A8	1
H	2	B10	1	A9	7
O	1	B11	7	A10	6
N	1	B12	12	A11	7
H	13	B13	1	A12	12
H	13	B14	1	A13	12
				D1	0
				D2	0
				D3	0
				D4	0
				D5	0
				D6	0
				D7	0
				D8	0
				D9	0
				D10	0
				D11	0
				D12	0

B1	1.44046691
B2	1.37712209
B3	1.39556764
B4	1.00959607
B5	1.39556238
B6	1.37713295

B7	1.00826069
B8	1.20968827
B9	1.20968977
B10	1.00825816
B11	1.33311106
B12	1.49467009
B13	1.01644064
B14	1.01644284
A1	125.04891442
A2	113.11590425
A3	115.83887492
A4	126.25612002
A5	113.11585869
A6	116.86937694
A7	122.84101046
A8	124.04014464
A9	117.55678297
A10	114.10157628
A11	99.02775331
A12	112.23871740
A13	112.23974298
D1	10.86083335
D2	176.48261215
D3	13.61371602
D4	-13.60449253
D5	177.68970997
D6	165.76130099
D7	-169.77482538
D8	158.52684039
D9	158.66227420
D10	-117.08253525
D11	-62.79421176
D12	62.79276080

Optimized Geometry of 39

C39-Ure

0	1						
C							
N	1	B1					
C	2	B2	1	A1			
N	3	B3	2	A2	1	D1	0
H	4	B4	3	A3	2	D2	0
C	4	B5	3	A4	2	D3	0
N	1	B6	2	A5	3	D4	0
H	7	B7	1	A6	2	D5	0
O	6	B8	4	A7	3	D6	0
O	3	B9	2	A8	1	D7	0
H	2	B10	1	A9	7	D8	0
O	1	B11	2	A10	3	D9	0

B1	1.39099558
B2	1.39099632
B3	1.39099585
B4	1.01028703
B5	1.39099585
B6	1.39099558
B7	1.01028660
B8	1.20467158
B9	1.20467158
B10	1.01028660
B11	1.20467206
A1	127.03470159
A2	112.96527028
A3	116.48263098
A4	127.03472314
A5	112.96530610
A6	116.48266879
A7	123.51735278
A8	123.51737676
A9	116.48266879
A10	123.51734686
D1	0.04259150
D2	-179.99634735
D3	-0.04259151
D4	-0.04259152
D5	179.99634735
D6	-179.96214952
D7	-179.96214953
D8	-179.99634735
D9	179.96214954

(2) Coordinates of geometries for all transition states

Coordinates for transition state 1 → 2

Uts-1-2

0 2

N						
H	1	B1				
C	1	B2	2	A1		
N	3	B3	1	A2	2	D1 0
H	4	B4	3	A3	1	D2 0
O	3	B5	1	A4	4	D3 0
H	1	B6	3	A5	6	D4 0
H	4	B7	3	A6	1	D5 0
N	4	B8	3	A7	1	D6 0

H	9	B9	4	A8	3	D7	0
H	9	B10	4	A9	3	D8	0

B1	1.00906812
B2	1.38827738
B3	1.39578053
B4	1.01885422
B5	1.21915959
B6	1.00960120
B7	1.32298845
B8	2.42413482
B9	1.02374702
B10	1.02137983
A1	118.04946315
A2	114.18053238
A3	112.26683676
A4	121.94679504
A5	113.52847169
A6	112.71385266
A7	102.55755039
A8	93.45249257
A9	102.34961971
D1	-25.16790805
D2	-39.11138729
D3	178.98593080
D4	15.07205845
D5	-166.98757829
D6	-157.55793079
D7	-10.29862306
D8	97.47758969

Coordinates for transition state 2 → 3
 Uts2-3

0 2						
C						
N	1	B1				
H	2	B2	1	A1		
H	2	B3	1	A2	3	D1 0
N	1	B4	2	A3	4	D2 0
H	5	B5	1	A4	2	D3 0
H	5	B6	1	A5	2	D4 0
O	1	B7	5	A6	2	D5 0
N	1	B8	8	A7	5	D6 0
H	9	B9	1	A8	8	D7 0
C	9	B10	1	A9	8	D8 0
N	11	B11	9	A10	1	D9 0
H	12	B12	11	A11	9	D10 0
H	12	B13	11	A12	9	D11 0
O	11	B14	9	A13	1	D12 0

B1	1.41858773
B2	1.01220781
B3	1.01162666
B4	1.40968932
B5	1.01247085
B6	1.01370478
B7	1.29518883
B8	1.77297418
B9	1.01708218
B10	1.40462353
B11	1.37052369
B12	1.01369764
B13	1.00870340
B14	1.21860920
A1	109.63301397
A2	111.64183945
A3	112.04363169
A4	111.05189441
A5	111.97499459
A6	118.73374225
A7	91.91706019
A8	112.57282442
A9	127.41918890
A10	115.23872623
A11	115.25888570
A12	114.18593718
A13	119.41138804
D1	122.69549293
D2	-23.17606743
D3	-174.62427259
D4	-51.68412702
D5	-144.62223701
D6	112.43881386
D7	91.92465361
D8	-54.58032057
D9	-0.87360423
D10	35.38213700
D11	175.84194725
D12	-175.05394159

Coordinates for transition state 3 → 4

Uts3-4

0 2

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
N	3	B3	2	A2	1	D1 0
H	4	B4	3	A3	2	D2 0
H	4	B5	3	A4	2	D3 0

O	3	B6	2	A5	1	D4	0
H	2	B7	1	A6	3	D5	0
N	1	B8	2	A7	3	D6	0
H	9	B9	1	A8	2	D7	0
H	9	B10	1	A9	2	D8	0
N	1	B11	2	A10	3	D9	0
H	12	B12	1	A11	2	D10	0
H	12	B13	1	A12	2	D11	0
O	1	B14	2	A13	3	D12	0

B1	1.43356794
B2	1.40383183
B3	1.36891914
B4	1.00683583
B5	1.01298408
B6	1.21599864
B7	1.00937305
B8	1.48767221
B9	1.27646745
B10	1.02421152
B11	1.43438704
B12	1.01410599
B13	1.01531741
B14	1.41436110
A1	127.21912013
A2	115.19467294
A3	114.72820905
A4	118.51541098
A5	120.40453134
A6	114.38702651
A7	119.10996844
A8	78.52531054
A9	107.43294201
A10	110.58096797
A11	110.21316648
A12	110.02160028
A13	109.52381013
D1	16.71102896
D2	169.49974069
D3	20.03152633
D4	-162.01000576
D5	-151.66187922
D6	66.54578278
D7	121.05477266
D8	14.92536781
D9	-62.13477059
D10	176.76143268
D11	-62.23414279
D12	166.55552130

Coordinates for transition state 5 → 6

Uts5-6

0 2

C						
N	1	B1				
H	2	B2	1	A1		
C	2	B3	1	A2	3	D1 0
N	4	B4	2	A3	1	D2 0
H	5	B5	4	A4	2	D3 0
H	5	B6	4	A5	2	D4 0
N	4	B7	2	A6	1	D5 0
H	8	B8	4	A7	2	D6 0
N	1	B9	2	A8	4	D7 0
H	10	B10	1	A9	2	D8 0
H	10	B11	1	A10	2	D9 0
O	1	B12	10	A11	2	D10 0
N	1	B13	13	A12	10	D11 0
C	14	B14	1	A13	13	D12 0
N	15	B15	14	A14	1	D13 0
H	16	B16	15	A15	14	D14 0
H	16	B17	15	A16	14	D15 0
O	15	B18	14	A17	1	D16 0
H	14	B19	1	A18	13	D17 0

B1	1.43881129
B2	1.01019310
B3	1.40289253
B4	1.39455029
B5	1.00695855
B6	1.00757186
B7	1.27214435
B8	1.01794774
B9	1.38427802
B10	1.01477026
B11	1.01065529
B12	1.28413993
B13	1.82871693
B14	1.40664131
B15	1.37658953
B16	1.00740353
B17	1.00887788
B18	1.21951696
B19	1.01837951
A1	114.54744996
A2	120.90910924
A3	111.80629088
A4	116.49721082
A5	118.71446597
A6	121.35905698
A7	111.14443012

A8	114.68321876
A9	111.79092757
A10	114.56294396
A11	119.27168335
A12	89.45493945
A13	115.81038891
A14	115.44271483
A15	120.07926955
A16	115.03213410
A17	121.93899558
A18	105.26365147
D1	-146.55950565
D2	-170.17166938
D3	-150.35979602
D4	-6.00347897
D5	7.03762130
D6	-170.95701713
D7	-96.70995938
D8	-162.64800748
D9	-34.85502589
D10	-148.52354735
D11	112.39965027
D12	-67.71522736
D13	137.57217534
D14	-28.99629806
D15	-175.64762083
D16	-47.49104647
D17	58.70140446

Coordinates for transition state 6 → 7

Uts6-7

0 2

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
O	3	B3	2	A2	1	D1 0
N	3	B4	2	A3	1	D2 0
H	5	B5	3	A4	2	D3 0
H	5	B6	3	A5	2	D4 0
N	1	B7	2	A6	3	D5 0
H	8	B8	1	A7	2	D6 0
C	8	B9	1	A8	2	D7 0
N	10	B10	8	A9	1	D8 0
H	11	B11	10	A10	8	D9 0
H	11	B12	10	A11	8	D10 0
N	10	B13	8	A12	1	D11 0
H	14	B14	10	A13	8	D12 0
N	1	B15	8	A14	10	D13 0
H	16	B16	1	A15	8	D14 0

H	16	B17	1	A16	8	D15	0
O	1	B18	16	A17	8	D16	0
H	19	B19	1	A18	16	D17	0

B1	1.48430323
B2	1.40803637
B3	1.22342828
B4	1.36557439
B5	1.00674428
B6	1.00754499
B7	1.43049302
B8	1.01422661
B9	1.38015650
B10	1.39516960
B11	1.01069424
B12	1.00858138
B13	1.28374785
B14	1.01578278
B15	1.41502777
B16	1.02233910
B17	1.01346437
B18	1.44626802
B19	1.23881004
A1	123.52525729
A2	124.97350923
A3	112.03239227
A4	119.62036117
A5	116.67666453
A6	114.59569036
A7	114.18218017
A8	124.25380131
A9	111.40265609
A10	115.32204281
A11	114.71911740
A12	122.09712087
A13	111.66319736
A14	113.07682008
A15	108.71472739
A16	110.51080760
A17	114.65965751
A18	81.82460308
D1	30.37569404
D2	-152.20755300
D3	-15.35612707
D4	-168.60800010
D5	-4.30679905
D6	-16.92879626
D7	-177.05041452
D8	-177.98050621
D9	36.20553680
D10	169.90394214

D11	4.06827507
D12	-175.27364688
D13	-47.62095561
D14	44.56842130
D15	166.60036405
D16	-131.58491398
D17	-102.10925882

Coordinates for transition state 7 → 8

Uts7-8

0 2

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
O	3	B3	2	A2	1	D1 0
N	3	B4	2	A3	1	D2 0
H	5	B5	3	A4	2	D3 0
H	5	B6	3	A5	2	D4 0
N	1	B7	2	A6	3	D5 0
H	8	B8	1	A7	2	D6 0
C	8	B9	1	A8	2	D7 0
N	10	B10	8	A9	1	D8 0
H	11	B11	10	A10	8	D9 0
H	11	B12	10	A11	8	D10 0
N	10	B13	8	A12	1	D11 0
H	14	B14	10	A13	8	D12 0
N	1	B15	2	A14	3	D13 0
H	16	B16	1	A15	2	D14 0
H	16	B17	1	A16	2	D15 0
O	1	B18	16	A17	2	D16 0
H	19	B19	1	A18	16	D17 0

B1	1.37722931
B2	1.40300258
B3	1.23038135
B4	1.35777428
B5	1.00547324
B6	1.00591863
B7	1.38604254
B8	1.01287275
B9	1.40978082
B10	1.39684914
B11	1.00959766
B12	1.01883145
B13	1.27301849
B14	1.01807889
B15	1.37244125
B16	1.00983972
B17	1.01112124

B18	1.86124821
B19	0.97147377
A1	119.53126709
A2	126.55963289
A3	110.57534419
A4	120.10207831
A5	118.95636726
A6	121.68217204
A7	114.37736233
A8	125.91651446
A9	113.75313651
A10	113.90276577
A11	113.12005221
A12	117.57929871
A13	111.17031424
A14	113.16609567
A15	112.27753787
A16	114.88045507
A17	104.53618251
A18	102.05224905
D1	-14.95947731
D2	166.02891312
D3	3.71978852
D4	179.50486277
D5	-26.01092218
D6	15.19124174
D7	164.43114419
D8	-8.74701307
D9	-172.78927907
D10	-40.89471300
D11	170.41161525
D12	174.02927890
D13	-173.33016103
D14	-38.50048338
D15	-171.84256402
D16	94.13073805
D17	175.67579307

Coordinates for transition state 9 → 10

Uts9-10a

0 2

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
N	3	B3	2	A2	1	D1 0
C	4	B4	3	A3	2	D2 0
N	5	B5	4	A4	3	D3 0
H	6	B6	5	A5	4	D4 0
N	5	B7	4	A6	3	D5 0

H	8	B8	5	A7	4	D6	0
H	4	B9	3	A8	2	D7	0
N	3	B10	2	A9	1	D8	0
H	11	B11	3	A10	2	D9	0
H	11	B12	3	A11	2	D10	0
N	1	B13	2	A12	3	D11	0
H	14	B14	1	A13	2	D12	0
H	14	B15	1	A14	2	D13	0
O	1	B16	14	A15	2	D14	0

B1	1.41731288
B2	1.28477552
B3	1.37974078
B4	1.39593253
B5	1.37131416
B6	1.01614565
B7	1.28495448
B8	1.01806028
B9	1.00863057
B10	1.38047841
B11	1.01021732
B12	1.00944403
B13	1.39705078
B14	1.00851518
B15	1.00925785
B16	1.29713975
A1	119.63894224
A2	126.24936085
A3	124.50459202
A4	112.55907299
A5	114.01301311
A6	117.71246562
A7	110.83266928
A8	120.21656701
A9	120.08420314
A10	116.66250108
A11	112.40870409
A12	111.69412182
A13	113.35747073
A14	112.53877744
A15	117.52486894
D1	-13.84996044
D2	-7.08755271
D3	-6.34973615
D4	163.58178931
D5	178.23072825
D6	-177.68426366
D7	165.94065545
D8	165.46838541
D9	140.49391952
D10	6.10890366

D11	151.09533400
D12	6.83964212
D13	138.65603168
D14	-146.74650728

Coordinates for transition state 10 → 11

Uts10-11

0 2

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
N	3	B3	2	A2	1	D1 0
H	4	B4	3	A3	2	D2 0
H	4	B5	3	A4	2	D3 0
N	3	B6	2	A5	1	D4 0
H	7	B7	3	A6	2	D5 0
C	7	B8	3	A7	2	D6 0
N	9	B9	7	A8	3	D7 0
N	9	B10	7	A9	3	D8 0
H	11	B11	9	A10	7	D9 0
N	1	B12	2	A11	3	D10 0
H	13	B13	1	A12	2	D11 0
H	13	B14	1	A13	2	D12 0
O	1	B15	2	A14	3	D13 0
H	10	B16	9	A15	7	D14 0

B1	1.42191239
B2	1.27773835
B3	1.38181378
B4	1.01039430
B5	1.01012858
B6	1.38408523
B7	1.00884911
B8	1.38986854
B9	1.38734088
B10	1.28353507
B11	1.01892905
B12	1.42410475
B13	1.01312169
B14	1.01364716
B15	1.42252633
B16	1.23222285
A1	118.11241508
A2	121.08731271
A3	116.18433361
A4	111.92819592
A5	124.58930371
A6	120.88620889

A7	122.73316592
A8	116.54135355
A9	118.94306548
A10	109.35934984
A11	109.19521095
A12	109.52975105
A13	110.97809955
A14	113.32605068
A15	116.91211855
D1	-177.27767496
D2	-142.76013243
D3	-10.54722965
D4	0.21665054
D5	-170.94338670
D6	-0.08671814
D7	-5.94693586
D8	177.08334998
D9	178.60310787
D10	133.38533915
D11	37.54402211
D12	159.40987369
D13	-95.50198124
D14	103.72616825

Coordinates for transition state 11 → 12

Uts11-12

0 2

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
N	3	B3	2	A2	1	D1 0
H	4	B4	3	A3	2	D2 0
C	4	B5	3	A4	2	D3 0
N	6	B6	4	A5	3	D4 0
N	6	B7	4	A6	3	D5 0
H	8	B8	6	A7	4	D6 0
N	3	B9	2	A8	1	D7 0
H	10	B10	3	A9	2	D8 0
H	10	B11	3	A10	2	D9 0
N	1	B12	7	A11	6	D10 0
H	13	B13	1	A12	7	D11 0
H	13	B14	1	A13	7	D12 0
O	1	B15	13	A14	2	D13 0
H	16	B16	1	A15	13	D14 0

B1	1.38167591
B2	1.29750147
B3	1.36389482
B4	1.00912295

B5	1.40776764
B6	1.36747527
B7	1.28499068
B8	1.01882833
B9	1.36778894
B10	1.00862230
B11	1.00792714
B12	1.36915299
B13	1.00831716
B14	1.00868619
B15	1.88835664
B16	0.96837240
A1	114.95481960
A2	123.11768754
A3	122.14872326
A4	121.05723027
A5	117.29626258
A6	117.13889137
A7	108.28229492
A8	119.89099429
A9	113.69612400
A10	118.30637061
A11	115.02066677
A12	115.20443829
A13	114.09074142
A14	108.99361807
A15	104.81177471
D1	4.12917358
D2	172.95614325
D3	5.87675648
D4	-6.46131417
D5	171.99961952
D6	179.37709063
D7	-178.70028949
D8	15.45475388
D9	155.69509882
D10	164.60350052
D11	32.59733959
D12	169.71575477
D13	111.22957980
D14	57.93756537

Coordinates for transition state 14 → 15

Uts14-15

0 2

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
N	3	B3	2	A2	1	D1 0

C	4	B4	3	A3	2	D2	0
N	1	B5	2	A4	3	D3	0
N	5	B6	4	A5	3	D4	0
H	7	B7	5	A6	4	D5	0
N	3	B8	2	A7	1	D6	0
H	9	B9	3	A8	2	D7	0
H	9	B10	3	A9	2	D8	0
N	1	B11	6	A10	5	D9	0
H	12	B12	1	A11	6	D10	0
H	12	B13	1	A12	6	D11	0
N	7	B14	5	A13	4	D12	0
H	15	B15	7	A14	5	D13	0
H	15	B16	7	A15	5	D14	0
H	15	B17	7	A16	5	D15	0

B1	1.34174905
B2	1.33966226
B3	1.34363921
B4	1.34424692
B5	1.33993158
B6	1.36848793
B7	1.01804573
B8	1.35567436
B9	1.00515640
B10	1.00512245
B11	1.35956404
B12	1.00607231
B13	1.00601803
B14	2.43225728
B15	1.02150511
B16	1.02247164
B17	1.20907579
A1	113.84742082
A2	126.01153014
A3	114.16903892
A4	126.25974819
A5	116.98422684
A6	109.86587834
A7	117.14269376
A8	118.50517611
A9	118.33306641
A10	116.94825870
A11	117.36506984
A12	117.39788654
A13	108.48412253
A14	102.35894623
A15	96.65053777
A16	13.44001123
D1	-0.78237268
D2	2.92115011
D3	-1.32693730

D4	174.01052883
D5	18.97799317
D6	178.97025237
D7	10.38183250
D8	171.31044003
D9	-177.84269545
D10	-14.96240581
D11	-167.20430381
D12	141.88504745
D13	-96.46677596
D14	11.99957105
D15	134.67028074

Coordinates for transition state 16 → 17

Uts16-17

0 2

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
N	3	B3	2	A2	1	D1 0
C	4	B4	3	A3	2	D2 0
N	5	B5	4	A4	3	D3 0
H	6	B6	5	A5	4	D4 0
N	5	B7	4	A6	3	D5 0
H	8	B8	5	A7	4	D6 0
H	8	B9	5	A8	4	D7 0
O	3	B10	2	A9	1	D8 0
H	2	B11	1	A10	6	D9 0
N	1	B12	6	A11	5	D10 0
H	13	B13	1	A12	6	D11 0
H	13	B14	1	A13	6	D12 0
N	1	B15	13	A14	6	D13 0
H	16	B16	1	A15	13	D14 0

B1	2.00240166
B2	1.39717408
B3	1.39101441
B4	1.29244459
B5	1.38354601
B6	1.00972670
B7	1.37436224
B8	1.00924661
B9	1.00920207
B10	1.21994336
B11	1.02021055
B12	1.39041529
B13	1.01170416
B14	1.01228862
B15	1.31960221

B16	1.01945807
A1	113.06907109
A2	117.38664591
A3	121.99385520
A4	128.56503123
A5	117.44608918
A6	118.61555012
A7	113.04112846
A8	117.81305195
A9	120.66067966
A10	108.73244904
A11	111.18801779
A12	111.10366886
A13	113.08637594
A14	118.20137072
A15	110.23075290
D1	35.00542854
D2	-7.77390649
D3	-12.27830164
D4	152.76875616
D5	166.50818035
D6	5.74286646
D7	144.47858823
D8	-149.86604226
D9	-166.30531015
D10	142.21639973
D11	169.43080537
D12	-63.76565646
D13	-153.62891893
D14	161.87581692

Coordinates for transition state 17 → 18

Uts17-18

0 2

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
N	3	B3	2	A2	1	D1 0
C	4	B4	3	A3	2	D2 0
N	5	B5	4	A4	3	D3 0
O	5	B6	4	A5	3	D4 0
N	3	B7	2	A6	1	D5 0
H	8	B8	3	A7	2	D6 0
H	8	B9	3	A8	2	D7 0
H	2	B10	1	A9	6	D8 0
N	1	B11	2	A10	3	D9 0
H	12	B12	1	A11	2	D10 0
N	1	B13	2	A12	3	D11 0
H	14	B14	1	A13	2	D12 0

H	14	B15	1	A14	2	D13	0
H	6	B16	5	A15	4	D14	0

B1	1.43800636
B2	1.36201088
B3	1.30152004
B4	1.37752879
B5	1.45174267
B6	1.21127156
B7	1.36623893
B8	1.00764305
B9	1.00860852
B10	1.00818880
B11	1.47496064
B12	1.02701023
B13	1.44104814
B14	1.01590805
B15	1.01616584
B16	1.28841344
A1	121.54423854
A2	125.27500468
A3	119.35866741
A4	119.79306435
A5	123.44080815
A6	116.27464425
A7	119.52109981
A8	113.67625602
A9	116.43727723
A10	114.41894455
A11	107.01869623
A12	107.56095690
A13	109.69473511
A14	109.56457394
A15	106.62837506
D1	5.35177203
D2	-3.13355615
D3	7.56438205
D4	-174.06340615
D5	-177.61289744
D6	27.43335986
D7	171.02502161
D8	177.36591630
D9	91.31181786
D10	143.03109728
D11	-141.39629407
D12	174.49727439
D13	57.26193702
D14	-103.16138369

Coordinates for transition state 18 → 19

Uts18-19

0 2

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
N	3	B3	2	A2	1	D1 0
C	4	B4	3	A3	2	D2 0
N	1	B5	2	A4	3	D3 0
H	6	B6	1	A5	2	D4 0
N	5	B7	4	A6	3	D5 0
H	8	B8	5	A7	4	D6 0
H	8	B9	5	A8	4	D7 0
O	3	B10	2	A9	1	D8 0
N	1	B11	2	A10	3	D9 0
H	12	B12	1	A11	2	D10 0
H	12	B13	1	A12	2	D11 0
N	5	B14	4	A13	3	D12 0
H	15	B15	5	A14	4	D13 0
H	15	B16	5	A15	4	D14 0

B1	1.29119841
B2	1.40611547
B3	1.42004370
B4	1.33416269
B5	1.37462878
B6	1.00803804
B7	1.39924324
B8	1.01290323
B9	1.01352470
B10	1.21104860
B11	1.37112576
B12	1.00908785
B13	1.00961811
B14	1.94625432
B15	1.02456798
B16	1.02546518
A1	118.65034393
A2	119.72528836
A3	118.16500803
A4	123.54251992
A5	121.50649645
A6	118.41336655
A7	109.45904524
A8	112.12715402
A9	121.17752474
A10	120.72204722
A11	117.91545788
A12	113.00525149
A13	92.86840371
A14	104.31464823

A15	107.12317862
D1	-7.33363808
D2	-2.58156756
D3	7.00983198
D4	-159.84312549
D5	159.70036924
D6	16.52265081
D7	139.56036484
D8	172.96555553
D9	-171.33844284
D10	-146.02243290
D11	-7.42971345
D12	-93.51593961
D13	-46.08534691
D14	63.95508913

Coordinates for transition state 19 → 20

Uts19-20

0 2

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
N	3	B3	2	A2	1	D1 0
C	4	B4	3	A3	2	D2 0
N	5	B5	4	A4	3	D3 0
N	5	B6	4	A5	3	D4 0
H	7	B7	5	A6	4	D5 0
H	7	B8	5	A7	4	D6 0
O	3	B9	2	A8	1	D7 0
N	1	B10	2	A9	3	D8 0
H	11	B11	1	A10	2	D9 0
H	11	B12	1	A11	2	D10 0
H	6	B13	5	A12	4	D11 0
N	6	B14	5	A13	4	D12 0
H	15	B15	6	A14	5	D13 0
H	15	B16	6	A15	5	D14 0

B1	1.29264416
B2	1.40850768
B3	1.40849718
B4	1.29264556
B5	1.38304518
B6	1.37479081
B7	1.00969117
B8	1.00986797
B9	1.21393795
B10	1.37481486
B11	1.00987007
B12	1.00968898

B13	1.22957672
B14	2.47093520
B15	1.02238038
B16	1.02237044
A1	117.83226543
A2	119.61374746
A3	117.83295432
A4	124.86315858
A5	120.44065656
A6	116.75668337
A7	113.15525389
A8	120.18810287
A9	120.43811580
A10	113.15730263
A11	116.75564036
A12	116.46231032
A13	112.40580102
A14	104.76384905
A15	104.92676663
D1	0.93357850
D2	-0.93707207
D3	3.97470693
D4	-174.57028766
D5	-148.67493787
D6	-11.55492919
D7	-179.56634658
D8	174.58037345
D9	11.55910172
D10	148.68650817
D11	-147.36180308
D12	-136.32588200
D13	121.49825924
D14	9.55531253

Coordinates for transition state 21 → 22

Uts21-22

0 2

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
N	3	B3	2	A2	1	D1 0
C	4	B4	3	A3	2	D2 0
N	5	B5	4	A4	3	D3 0
N	5	B6	4	A5	3	D4 0
H	7	B7	5	A6	4	D5 0
H	7	B8	5	A7	4	D6 0
O	3	B9	2	A8	1	D7 0
N	1	B10	2	A9	3	D8 0
H	11	B11	1	A10	2	D9 0

H	11	B12	1	A11	2	D10	0
H	10	B13	3	A12	2	D11	0
N	10	B14	3	A13	2	D12	0
H	15	B15	10	A14	3	D13	0
H	15	B16	10	A15	3	D14	0

B1	1.34106212
B2	1.33698107
B3	1.35321231
B4	1.34239567
B5	1.33645123
B6	1.36145649
B7	1.00635587
B8	1.00560020
B9	1.30866972
B10	1.35487231
B11	1.00533533
B12	1.00497036
B13	1.27879242
B14	2.37331633
B15	1.02059876
B16	1.02249642
A1	114.36091136
A2	125.05092330
A3	114.40337983
A4	126.06516578
A5	117.12642410
A6	116.83104244
A7	117.84427040
A8	115.62486476
A9	116.61400386
A10	118.07314659
A11	118.65302867
A12	113.85493933
A13	105.59453272
A14	103.03207184
A15	99.33001831
D1	-1.39701871
D2	0.64426221
D3	0.35172873
D4	-178.19006883
D5	-167.31273835
D6	-16.31868561
D7	178.25093119
D8	-178.11042353
D9	-9.00276714
D10	-170.03608954
D11	-174.50693292
D12	175.18498418
D13	-102.77150475
D14	8.45708807

Coordinates for transition state 23 → 24

Uts23-24

0 2

C						
N	1	B1				
H	2	B2	1	A1		
C	2	B3	1	A2	3	D1 0
N	4	B4	2	A3	1	D2 0
H	5	B5	4	A4	2	D3 0
O	4	B6	2	A5	1	D4 0
H	7	B7	4	A6	2	D5 0
N	1	B8	2	A7	4	D6 0
H	9	B9	1	A8	2	D7 0
H	9	B10	1	A9	2	D8 0
O	1	B11	9	A10	2	D9 0
N	1	B12	12	A11	9	D10 0
C	13	B13	1	A12	12	D11 0
N	14	B14	13	A13	1	D12 0
H	15	B15	14	A14	13	D13 0
H	15	B16	14	A15	13	D14 0
O	14	B17	13	A16	1	D15 0
H	13	B18	1	A17	12	D16 0

B1	1.43797838
B2	1.00752822
B3	1.37874669
B4	1.26578066
B5	1.01639390
B6	1.37595690
B7	0.96275316
B8	1.38304627
B9	1.01466399
B10	1.01059447
B11	1.28218934
B12	1.82911268
B13	1.40898878
B14	1.37438703
B15	1.00706228
B16	1.00862869
B17	1.21886246
B18	1.01873649
A1	117.55854571
A2	123.56698072
A3	124.05202583
A4	112.62781870
A5	107.56522871
A6	108.21530546
A7	113.70179200

A8	111.98722949
A9	114.45450248
A10	119.31677214
A11	89.59000886
A12	115.64406436
A13	115.32463776
A14	120.63583369
A15	115.41448688
A16	121.90193371
A17	105.58826667
D1	-161.35655280
D2	-2.14797572
D3	-176.20828653
D4	178.17057835
D5	-174.77982021
D6	-99.34748439
D7	-162.57727515
D8	-34.01645635
D9	-148.44236955
D10	113.06445619
D11	-68.30035364
D12	138.95361365
D13	-27.26683371
D14	-176.46506028
D15	-46.10948318
D16	58.16447901

Coordinates for transition state 24 → 25

Uts24-25

0 2

C					
N	1	B1			
C	2	B2	1	A1	
O	3	B3	2	A2	1
N	3	B4	2	A3	1
H	5	B5	3	A4	2
H	5	B6	3	A5	2
N	1	B7	2	A6	3
H	8	B8	1	A7	2
C	8	B9	1	A8	2
N	10	B10	8	A9	1
H	11	B11	10	A10	8
O	10	B12	8	A11	1
H	13	B13	10	A12	8
O	1	B14	8	A13	10
N	1	B15	15	A14	2
H	16	B16	1	A15	15
H	16	B17	1	A16	15
H	15	B18	1	A17	16
					D1 0
					D2 0
					D3 0
					D4 0
					D5 0
					D6 0
					D7 0
					D8 0
					D9 0
					D10 0
					D11 0
					D12 0
					D13 0
					D14 0
					D15 0
					D16 0

B1	1.48984712
B2	1.43584031
B3	1.21194975
B4	1.36137463
B5	1.01637661
B6	1.00841771
B7	1.44397510
B8	1.00920727
B9	1.37407154
B10	1.27495510
B11	1.01474517
B12	1.36379716
B13	0.96315230
B14	1.42158203
B15	1.42709295
B16	1.01492729
B17	1.02318403
B18	1.23742874
A1	122.69046481
A2	119.81148159
A3	113.87936925
A4	117.31015600
A5	115.78038500
A6	106.93000055
A7	113.55527117
A8	125.78889581
A9	123.62926154
A10	113.41668028
A11	108.68724391
A12	109.08576009
A13	114.96067954
A14	114.81055637
A15	108.36199411
A16	108.94089843
A17	83.24170166
D1	-135.18399094
D2	50.71932337
D3	-29.54123893
D4	-178.68305565
D5	-141.48226911
D6	-28.28604008
D7	179.93438367
D8	-22.28528374
D9	-179.75488100
D10	159.44330369
D11	173.64433542
D12	-84.38209026
D13	121.05479816
D14	-18.04126965
D15	100.18194919

D16 131.20299676

Coordinates for transition state 25 → 26

Uts25-26

0 2

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
O	3	B3	2	A2	1	D1 0
N	3	B4	2	A3	1	D2 0
H	5	B5	3	A4	2	D3 0
H	5	B6	3	A5	2	D4 0
N	1	B7	2	A6	3	D5 0
H	8	B8	1	A7	2	D6 0
C	8	B9	1	A8	2	D7 0
N	10	B10	8	A9	1	D8 0
H	11	B11	10	A10	8	D9 0
O	10	B12	8	A11	1	D10 0
H	13	B13	10	A12	8	D11 0
N	1	B14	2	A13	3	D12 0
H	15	B15	1	A14	2	D13 0
H	15	B16	1	A15	2	D14 0
O	1	B17	15	A16	2	D15 0
H	18	B18	1	A17	15	D16 0

B1	1.37128201
B2	1.39705305
B3	1.23388475
B4	1.35837147
B5	1.00530301
B6	1.00573463
B7	1.39475320
B8	1.01956139
B9	1.38597763
B10	1.26759309
B11	1.01673529
B12	1.36922747
B13	0.96297326
B14	1.36594704
B15	1.00933066
B16	1.00847501
B17	1.87134326
B18	0.97178355
A1	119.95083650
A2	126.81344958
A3	110.94419043
A4	119.90305420
A5	118.82022891
A6	120.39646221

A7	111.83506691
A8	128.94736156
A9	119.61594532
A10	113.00308012
A11	112.79486892
A12	108.49965275
A13	113.51913241
A14	111.60699307
A15	115.66027838
A16	104.84288575
A17	102.51127446
D1	-12.06149980
D2	168.65385778
D3	5.42752245
D4	177.46733463
D5	-24.40456565
D6	24.76949041
D7	171.93810309
D8	-157.50464133
D9	-176.00493877
D10	23.88988815
D11	-177.00151317
D12	-173.47856340
D13	-34.32211368
D14	-168.95100756
D15	92.78627458
D16	173.11500507

Coordinates for transition state 27 → 28

Uts27-28

0 2

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
N	3	B3	2	A2	1	D1 0
C	4	B4	3	A3	2	D2 0
N	5	B5	4	A4	3	D3 0
H	6	B6	5	A5	4	D4 0
O	5	B7	4	A6	3	D5 0
N	3	B8	2	A7	1	D6 0
H	9	B9	3	A8	2	D7 0
H	9	B10	3	A9	2	D8 0
H	2	B11	1	A10	6	D9 0
N	1	B12	2	A11	3	D10 0
H	13	B13	1	A12	2	D11 0
O	1	B14	13	A13	2	D12 0
H	15	B15	1	A14	13	D13 0

B1	1.40623731
----	------------

B2	1.40241056
B3	1.29054687
B4	1.38426795
B5	1.39077886
B6	1.01909942
B7	1.22313950
B8	1.35956936
B9	1.00738906
B10	1.00840308
B11	1.01148834
B12	1.31623700
B13	1.02092176
B14	1.37486399
B15	0.96565173
A1	121.79519816
A2	127.41920610
A3	121.31960527
A4	119.69462503
A5	110.60555033
A6	122.07726793
A7	112.71053622
A8	118.35015201
A9	115.82960977
A10	113.85376841
A11	116.00276108
A12	108.91305645
A13	125.28508642
A14	106.31583847
D1	27.47651914
D2	10.74189477
D3	-31.29507037
D4	146.58631685
D5	154.90304219
D6	-156.43234628
D7	31.19317665
D8	179.71148094
D9	114.36345657
D10	-140.34642222
D11	-161.33024077
D12	146.62373405
D13	78.29421300

Coordinates for transition state 28 → 29

Uts28-29

0 2

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
N	3	B3	2	A2	1	D1 0

H	4	B4	3	A3	2	D2	0
H	4	B5	3	A4	2	D3	0
N	3	B6	2	A5	1	D4	0
C	7	B7	3	A6	2	D5	0
N	8	B8	7	A7	3	D6	0
O	8	B9	7	A8	3	D7	0
H	2	B10	1	A9	9	D8	0
O	1	B11	2	A10	3	D9	0
H	12	B12	1	A11	2	D10	0
N	1	B13	12	A12	2	D11	0
H	14	B14	1	A13	12	D12	0
H	9	B15	8	A14	7	D13	0

B1	1.44013490
B2	1.38119040
B3	1.36522870
B4	1.00871411
B5	1.00801913
B6	1.29539749
B7	1.38657105
B8	1.43312656
B9	1.20947636
B10	1.01130847
B11	1.39085554
B12	0.96467162
B13	1.46967893
B14	1.02291652
B15	1.29521904
A1	118.48756013
A2	115.28407322
A3	114.01572627
A4	118.99131405
A5	125.30620011
A6	118.96351600
A7	117.70507899
A8	123.47328316
A9	112.18999189
A10	106.17474297
A11	107.36714060
A12	112.27497983
A13	108.84108403
A14	117.45278348
D1	-163.09880082
D2	-168.93327920
D3	-25.95142873
D4	17.79798974
D5	-4.15181392
D6	-18.22101508
D7	164.53565194
D8	-148.64161415
D9	120.72078245

D10	163.10033941
D11	-130.26688346
D12	142.23513214
D13	122.16860649

Coordinates for transition state 29 → 30

Uts29-30

0 2

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
N	3	B3	2	A2	1	D1 0
C	4	B4	3	A3	2	D2 0
N	1	B5	2	A4	3	D3 0
H	6	B6	1	A5	2	D4 0
O	5	B7	4	A6	3	D5 0
H	8	B8	5	A7	4	D6 0
O	3	B9	2	A8	1	D7 0
N	1	B10	2	A9	3	D8 0
H	11	B11	1	A10	2	D9 0
H	11	B12	1	A11	2	D10 0
N	5	B13	4	A12	3	D11 0
H	14	B14	5	A13	4	D12 0
H	14	B15	5	A14	4	D13 0

B1	1.29175208
B2	1.40496914
B3	1.42269609
B4	1.32491344
B5	1.37799498
B6	1.00845547
B7	1.34998734
B8	0.96701741
B9	1.20960117
B10	1.36630488
B11	1.00796169
B12	1.00877023
B13	1.94727221
B14	1.02421150
B15	1.02541392
A1	119.07165874
A2	119.13780833
A3	117.66526484
A4	123.13076931
A5	122.96300979
A6	119.69231796
A7	105.99521594
A8	121.52877001
A9	120.57265779

A10	119.43099572
A11	113.75799055
A12	92.94737470
A13	105.28829810
A14	108.64211304
D1	-7.73400424
D2	-1.31339237
D3	2.57402725
D4	175.16886718
D5	162.73447100
D6	11.09390615
D7	172.42532199
D8	-174.38051722
D9	-152.27466785
D10	-8.99816429
D11	-92.35635485
D12	-56.17571752
D13	55.04274250

Coordinates for transition state 30 → 31

Uts30-31

0 2

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
N	3	B3	2	A2	1	D1 0
C	4	B4	3	A3	2	D2 0
N	1	B5	2	A4	3	D3 0
H	6	B6	1	A5	2	D4 0
N	5	B7	4	A6	3	D5 0
H	8	B8	5	A7	4	D6 0
H	8	B9	5	A8	4	D7 0
O	3	B10	2	A9	1	D8 0
O	1	B11	2	A10	3	D9 0
H	12	B12	1	A11	2	D10 0
N	6	B13	1	A12	2	D11 0
H	14	B14	6	A13	1	D12 0
H	14	B15	6	A14	1	D13 0

B1	1.28385654
B2	1.41638906
B3	1.40475061
B4	1.29498605
B5	1.36574997
B6	1.25510924
B7	1.36888874
B8	1.00900306
B9	1.00911138
B10	1.21151897

B11	1.34565248
B12	0.96857328
B13	2.47243442
B14	1.02159918
B15	1.02147190
A1	117.17942663
A2	118.88642237
A3	118.43927124
A4	126.38850171
A5	117.99661978
A6	120.68439983
A7	117.50883811
A8	113.99257719
A9	120.16785000
A10	120.69928558
A11	105.52743288
A12	112.47832814
A13	106.22144796
A14	106.92464672
D1	-2.89798841
D2	2.10413216
D3	-2.86145967
D4	155.96038075
D5	-175.26789937
D6	-152.21735862
D7	-11.72822597
D8	177.46427967
D9	177.80358374
D10	0.48036558
D11	146.70868387
D12	11.75158048
D13	-102.73873935

Coordinates for transition state 32 → 33

Uts32-33

0 2

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
N	3	B3	2	A2	1	D1 0
C	4	B4	3	A3	2	D2 0
N	5	B5	4	A4	3	D3 0
O	5	B6	4	A5	3	D4 0
H	7	B7	5	A6	4	D5 0
O	3	B8	2	A7	1	D6 0
N	1	B9	2	A8	3	D7 0
H	10	B10	1	A9	2	D8 0
H	10	B11	1	A10	2	D9 0
H	9	B12	3	A11	2	D10 0

N	9	B13	3	A12	2	D11	0
H	14	B14	9	A13	3	D12	0
H	14	B15	9	A14	3	D13	0

B1	1.34127259
B2	1.33452256
B3	1.35876182
B4	1.33547739
B5	1.31947469
B6	1.34106480
B7	0.96568500
B8	1.30522347
B9	1.34867173
B10	1.00469798
B11	1.00461680
B12	1.28115019
B13	2.37665046
B14	1.02036488
B15	1.02114818
A1	114.65484758
A2	124.47569864
A3	114.11223986
A4	127.33010822
A5	116.83349468
A6	106.46317760
A7	116.11583226
A8	116.99381443
A9	119.15496743
A10	119.34817853
A11	114.48359335
A12	106.56358855
A13	103.71152997
A14	101.02189633
D1	-1.12489100
D2	0.80283967
D3	-0.19128436
D4	179.94198893
D5	-0.59458497
D6	178.57182122
D7	-179.32634472
D8	-0.93175137
D9	-178.31166955
D10	-173.31350590
D11	176.50964175
D12	-102.91179405
D13	9.39615973

Coordinates for transition state 3 → 34

Uts3-34

0 2

C

N	1	B1				
H	2	B2	1	A1		
H	2	B3	1	A2	3	D1 0
N	1	B4	2	A3	3	D2 0
H	5	B5	1	A4	2	D3 0
C	5	B6	1	A5	2	D4 0
O	7	B7	5	A6	1	D5 0
N	7	B8	5	A7	1	D6 0
H	9	B9	7	A8	5	D7 0
H	9	B10	7	A9	5	D8 0
O	1	B11	5	A10	7	D9 0
N	7	B12	5	A11	1	D10 0
H	13	B13	7	A12	5	D11 0
H	13	B14	7	A13	5	D12 0

B1	1.37819731
B2	1.00764644
B3	1.00769817
B4	1.36255402
B5	1.00808903
B6	1.47487900
B7	1.23401036
B8	1.49285737
B9	1.01169449
B10	1.01705342
B11	1.23481401
B12	1.62816383
B13	1.01970811
B14	1.01685848
A1	114.17074895
A2	119.76193906
A3	115.93186982
A4	122.56994509
A5	125.80292302
A6	116.71808640
A7	108.45914456
A8	114.41760042
A9	118.42242889
A10	122.71893112
A11	105.09227785
A12	117.85089816
A13	111.54534598
D1	144.21375484
D2	-168.04828148
D3	-1.14208796
D4	-179.34858043
D5	-179.28433121
D6	44.91152971
D7	167.59508657

D8	-43.61952651
D9	-1.20662244
D10	-52.19868040
D11	55.60696160
D12	-168.87466303

Coordinates for transition state 34 → 35

Uts34-35

0 2

C					
N	1	B1			
H	2	B2	1	A1	
C	2	B3	1	A2	3
O	4	B4	2	A3	1
N	4	B5	2	A4	1
H	6	B6	4	A5	2
H	6	B7	4	A6	2
N	1	B8	2	A7	4
H	9	B9	1	A8	2
H	9	B10	1	A9	2
O	1	B11	9	A10	2
N	1	B12	12	A11	9
C	13	B13	1	A12	12
N	14	B14	13	A13	1
H	15	B15	14	A14	13
H	15	B16	14	A15	13
O	14	B17	13	A16	1
H	13	B18	1	A17	12

B1	1.41659545
B2	1.00855572
B3	1.39765043
B4	1.21386952
B5	1.37981976
B6	1.00881854
B7	1.01400908
B8	1.39484176
B9	1.01574120
B10	1.01332764
B11	1.30293869
B12	1.77371802
B13	1.40744847
B14	1.37345106
B15	1.00717705
B16	1.00832387
B17	1.21734658
B18	1.01959976
A1	117.85058476
A2	128.53225934

A3	120.62996337
A4	115.29075823
A5	112.88237255
A6	116.45872743
A7	111.59415008
A8	109.26747042
A9	113.02204184
A10	118.08848130
A11	89.34869818
A12	119.71204194
A13	114.28766663
A14	121.24047878
A15	115.81923220
A16	123.00527792
A17	108.31714347
D1	167.66629157
D2	-169.72968365
D3	8.26534303
D4	168.07682830
D5	27.98872098
D6	-179.68882615
D7	-172.43295086
D8	-50.36287294
D9	-142.62250376
D10	112.40676087
D11	-70.32694986
D12	155.49437033
D13	13.51884020
D14	165.92672209
D15	-26.49117452
D16	63.58540511

Coordinates for transition state 35 → 36

Uts35-36

0 2

C

N	1	B1					
H	2	B2	1	A1			
C	2	B3	1	A2	3	D1	0
O	4	B4	2	A3	1	D2	0
N	4	B5	2	A4	1	D3	0
H	6	B6	4	A5	2	D4	0
H	6	B7	4	A6	2	D5	0
N	1	B8	2	A7	4	D6	0
H	9	B9	1	A8	2	D7	0
C	9	B10	1	A9	2	D8	0
N	11	B11	9	A10	1	D9	0
H	12	B12	11	A11	9	D10	0
H	12	B13	11	A12	9	D11	0

O	11	B14	9	A13	1	D12	0
O	1	B15	9	A14	11	D13	0
N	1	B16	16	A15	2	D14	0
H	17	B17	1	A16	16	D15	0
H	17	B18	1	A17	16	D16	0

B1	1.42878062
B2	1.01161325
B3	1.40549245
B4	1.21064299
B5	1.38643844
B6	1.01013499
B7	1.01116212
B8	1.40974585
B9	1.01247605
B10	1.41355514
B11	1.36250167
B12	1.00655436
B13	1.01119656
B14	1.21488180
B15	1.27961875
B16	1.79606879
B17	1.02340171
B18	1.02282482
A1	110.20492152
A2	130.17831503
A3	121.36780706
A4	115.02124526
A5	112.37408461
A6	116.44146815
A7	114.15185468
A8	115.42809038
A9	127.34799115
A10	116.29590901
A11	115.50894739
A12	119.38984724
A13	119.18441015
A14	120.74021298
A15	91.73842906
A16	107.93737760
A17	109.50164108
D1	-143.01205500
D2	135.33590200
D3	-45.88165689
D4	-173.31926797
D5	-38.73245089
D6	40.16461856
D7	-39.55846111
D8	171.65676317
D9	-13.97836369
D10	-169.05034774

D11	-12.43623058
D12	165.49729954
D13	28.36967312
D14	-107.92708996
D15	-62.39628932
D16	53.72391796

Coordinates for transition state 37 → 38

Uts37-38a

0 2

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
N	3	B3	2	A2	1	D1 0
C	4	B4	3	A3	2	D2 0
N	5	B5	4	A4	3	D3 0
H	6	B6	5	A5	4	D4 0
O	5	B7	4	A6	3	D5 0
H	4	B8	3	A7	2	D6 0
O	3	B9	2	A8	1	D7 0
H	2	B10	1	A9	6	D8 0
N	1	B11	2	A10	3	D9 0
H	12	B12	1	A11	2	D10 0
H	12	B13	1	A12	2	D11 0
O	1	B14	12	A13	2	D12 0

B1	1.43717424
B2	1.38235291
B3	1.39738812
B4	1.38530924
B5	1.39388310
B6	1.01939442
B7	1.21395862
B8	1.01045857
B9	1.21006714
B10	1.01076044
B11	1.37981185
B12	1.00956933
B13	1.00925955
B14	1.26884317
A1	125.32559597
A2	115.80240027
A3	129.59838993
A4	114.13687001
A5	109.51723477
A6	122.65106651
A7	114.42737053
A8	122.91588064
A9	115.25083157

A10	110.08118790
A11	116.31675267
A12	114.11826200
A13	119.84384928
D1	-27.52078607
D2	-5.16926226
D3	-1.30723151
D4	156.20933646
D5	-176.94101850
D6	179.01426789
D7	155.08787617
D8	-162.53033539
D9	164.50454070
D10	-47.47009391
D11	174.89448187
D12	-149.92237306

Coordinates for transition state 38 → 39

Uts38-39

0 2

C						
N	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
N	3	B3	2	A2	1	D1 0
C	4	B4	3	A3	2	D2 0
N	1	B5	2	A4	3	D3 0
H	6	B6	1	A5	2	D4 0
O	5	B7	4	A6	3	D5 0
H	4	B8	3	A7	2	D6 0
O	3	B9	2	A8	1	D7 0
H	2	B10	1	A9	6	D8 0
O	1	B11	6	A10	5	D9 0
N	5	B12	4	A11	3	D10 0
H	13	B13	5	A12	4	D11 0
H	13	B14	5	A13	4	D12 0

B1	1.39298882
B2	1.39304402
B3	1.38283610
B4	1.41299257
B5	1.38285298
B6	1.00892951
B7	1.26435863
B8	1.00890816
B9	1.20793176
B10	1.00968908
B11	1.20796397
B12	1.81211548
B13	1.02338299

B14	1.02338339
A1	126.78815030
A2	112.97414473
A3	124.73361140
A4	112.97144470
A5	116.51409851
A6	119.73495930
A7	116.53529989
A8	123.13572483
A9	116.26146668
A10	123.88584687
A11	105.06962995
A12	108.06595692
A13	108.09182212
D1	-7.50099462
D2	-12.54266945
D3	7.43052427
D4	176.96411498
D5	174.65726244
D6	-176.93505690
D7	171.73613229
D8	177.45935194
D9	-168.09227077
D10	-84.06601766
D11	-178.92582785
D12	-64.40278997