

**RUHR
UNIVERSITÄT
BOCHUM**

RUB

Zur Synthese, Struktur und Reaktivität von ylidsubstituierten Hauptgruppenverbindungen

Dissertation

Vorgelegt von: Henning Steinert, M. Sc.

Betreuende Gutachterin:	Prof. Dr. Viktoria H. Däschlein-Gessner
Zweiter Gutachter:	Prof. Dr. Stefan M. Huber
Dritter Gutachter:	Prof. Dr. Rochus Schmid

Mülheim an der Ruhr, 3. Mai 2021

Die Experimente und Rechnungen zur vorliegenden Arbeit wurden unter Anleitung von Prof. Dr. Viktoria Däschlein-Gessner von September 2018 bis Februar 2021 an der Fakultät für Chemie und Biochemie der Ruhr-Universität Bochum durchgeführt. Einige Ergebnisse der vorliegenden Facharbeit wurden bereits in den folgenden naturwissenschaftlichen Fachzeitschriften veröffentlicht:

1. „Towards the Preparation of Stable Cyclic Amino(ylide)-carbenes”
H. Steinert, C. Schwarz, A. Kroll, V. H. Gessner, *Molecules* **2020**, 25, 796.
2. „A diamino-substituted carbodiphosphorane as strong C-donor and weak N-donor: isolation of monomeric trigonal-planar $L \cdot ZnCl_2$ ”
A. Kroll, H. Steinert, L. T. Scharf, T. Scherpf, B. Mallick, V. H. Gessner, *Chem. Comm.* **2020**, 56, 8051.
3. „Efficient Pd-Catalyzed Direct Coupling of Aryl Chlorides with Alkylolithium Reagents”
T. Scherpf, H. Steinert, A. Großjohann, K. Dilchert, J. Tappen, I. Rodstein, V. H. Gessner, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, 59, 20596; *Angew. Chem.* **2020**, 132, 20777.
4. „Cationic Phosphorus Compounds Based on a Bis(1-piperidinyI)-Substituted Carbodiphosphorane: Syntheses, Structures, and Csp^3-H Activation”
A. Kroll, H. Steinert, M. Jörges, T. Steinke, B. Mallick, V. H. Gessner, *Organometallics* **2020**, 39, 4312.
5. „Synthesis of Low-Valent Dinuclear Group 14 Compounds with Element-Element Bonds by Transylidation”
C. Mohapatra, H. Darmandeh, H. Steinert, B. Mallick, K.-S. Feichtner, V. H. Gessner, *Chem. Eur. J.* **2020**, 26, 15145.
6. „Towards the Rational Design of Ylide-Substituted Phosphines for Gold(I)-Catalysis: From Inactive to ppm-level Catalysis”
J. Handelsmann, C. N. Babu, H. Steinert, C. Schwarz, T. Scherpf, A. Kroll, V. H. Gessner, *Chem. Sci.* **2021**, 12, 4329.

Danksagung

Zunächst einmal gilt mein herzlichster Dank Prof. Dr. VIKTORIA DÄSCHLEIN-GESSNER für die Möglichkeit, in ihrer Arbeitsgruppe promovieren zu dürfen, das spannende Thema, die stete Diskussionsbereitschaft und motivierende Worte in Phasen, in denen es nicht so gut lief wie erhofft. Weiterhin gilt mein Dank Prof. Dr. STEFAN HUBER für die Übernahme der Cobetreuung sowie des zweiten Gutachtens. Außerdem möchte ich mich bei Prof. Dr. ROCHUS SCHMID bedanken, zum einen für die Übernahme des dritten Gutachtens, zum anderen für die vielseitigen technischen Hilfen bei Problemen mit dem Rechencluster.

Weiterhin gilt mein Dank Herrn MARTIN GARTMANN für die vielfältigen Diskussionen und Hilfestellungen zu NMR-spektroskopischen Experimenten und die Einrichtung diverser Messmethoden für Heterokerne. Ebenfalls gilt mein Dank HANS-JOCHEN HAUSWALD und PARASTOO NASROLLAHZADEH MASOULEH für das Instandhalten der entsprechenden Gerätschaften. Ebenso möchte ich mich bei MANUELA WINTER für die Messung diverser Elementaranalysen bedanken. Dafür und für die Messung einiger Massenspektren gilt mein Dank LISA FELDHAUS. Auch HARISH PARALA gebührt mein Dank für die Messung vieler Elementaranalysen, sowie für das Instandhalten vieler Gerätschaften. Frau DAGMAR MÜLLER gebührt weiterhin mein Dank für die Pflege unserer Chemikaliendatenbank. Nicht zu Vergessen ist an dieser Stelle Dr. BERT MALICK für die stete Hilfsbereitschaft bei Fragen aller Art.

Mein besonderer Dank gilt weiterhin SABINE PANKAU für die Abnahme von allem möglichem bürokratischem Schnickschnack und fundierten Ratschlägen in vielen derartigen Aspekten.

Großer Dank gebührt weiterhin dem „synthetischen Kern“ der Arbeitsgruppe:

Bedanken möchte ich mich hier zunächst herzlichst bei MAURICE „MORRIS“ PAAßEN, der nicht nur einen gehörigen Anteil an der Verbesserung des Arbeitskreisklimas trägt, sondern auch fleißig Edukte für mich nachgezogen hat. Ebenso gilt mein herzlichster Dank Dr. LENNART SCHARF, der mir das Rechnen beigebracht hat und ohne den damit diese Arbeit eine ganz andere Form angenommen hätte.

Weiterhin möchte ich mich herzlichst bei „meinen“ Studenten STEFANIE HUTSCH, JULIAN LÖFFLER, ZAHER JLAILATI und DANIEL KNYSZEK für die Abnahme von viel Arbeit und das Einbringen vieler Ideen bedanken.

Meinen thematischen „Leidens“genossen Dr. SWAMY VARRE, HEIDAR DARMANDEH und MIKE „EKIM“ JÖRGES gilt mein Dank für den gemeinsamen Weg, viele Diskussionen und Ideen. Woher kommt eigentlich immer diese protonierte Spezies? Apropos protonierte Spezies: an dieser Stelle auch vielen Dank an die Heerscharen von Kristallographen, die zwar sehr oft Ylid, aber manchmal auch coole Dinge für mich aufgesetzt haben.

Neben diversen fachlichen Diskussionen und Ratschlägen möchte ich mich zusätzlich bei ILJA „ILLY JAY“ RODSTEIN für die ausführlichen Diskussionen über das, was im Deutschlandfunk berichtet wurde, und bei JULIAN LÖFFLER und JENS „JUNS“ HANDELMANN für stundenlange Diskussionen über Gitarren bedanken. Dank gilt weiterhin meiner Konzertbegleitung JENS „JESN“ TAPPEN sowie dem Genossen TOBIAS „STADELMANN“ STALDER. ANGELA „ANGIE“ GROßJOHANN gilt mein Dank für ihre entspannte und sachliche Art und das damit verbundene Entschärfen mancher Situation. Dr. KAI-STEFAN FEICHTNER und Dr. THORSTEN SCHERPF gilt mein Dank für vielfältige Antworten auf diverse Fragestellungen und für viele gute Ratschläge. Bei meinen Büronachbarinnen JANA-ALINA „JAZ“ ZUR und MICHELLE „MICHEL“ SCHMIDT möchte ich mich außerdem für das bereitwillige Überlassen von Stauraum auf ihren Schreibtischen bedanken.

Mein Dank für die meist angenehme Arbeitsatmosphäre gebührt weiterhin allen bisher nicht genannten aktuellen und ehemaligen Mitstreitern: Dr. CHATLA NAGA BABU, Dr. KATHARINA DILCHERT, Dr. RICHARD GAULD, Dr. ALEXANDER KROLL, Dr. SÉBASTIEN LAPOINTE, Dr. CHANDRAJEET MOHAPATRA, Dr. ABIR SARBAJNA, Dr. CHRISTOPHER SCHWARZ, FELIX KRISCHER, PHILIPP NEIGENFIND, LEIF KELLING und JONAS „DER GALLIER“ WOLF.

Nicht zuletzt gilt mein großer Dank auch den vielen Korrekturlesern dieser Arbeit.

Weiterhin möchte ich mich bei den Mitgliedern des Arbeitskreises ROCHUS für die Pflege des Rechenclusters sowie für die Hilfe bei technischen Fragestellungen bedanken. Bei den Mitgliedern des Arbeitskreises DEVI möchte ich mich für das Füllen und das gemeinsame Leeren des Bierkühlschranks bedanken.

Großer Dank gebührt außerdem meinen Freunden für die stets offenen Ohren und die manchmal benötigte Ablenkung.

An dieser Stelle möchte ich mich auch bei meiner Familie und insbesondere bei meinen Eltern für das Wecken meines Interesses an einem solch spannenden Fach wie der Chemie und ihre stete Unterstützung bedanken.

Zuletzt gilt ein ausgesprochen großer Dank HANNA HINRIKA CRAMER für die tolle gemeinsame Zeit und die großartige moralische und fachliche Unterstützung.

Kein Dank gebührt dem Virus SARS-CoV-2.

Inhalt

Danksagung.....	I
Inhalt.....	IV
1 Einleitung und Grundlagen	1
1.1 Ylide und verwandte Verbindungen	1
1.2 Amino(ylid)stabilisierte Carbene	6
1.3 Ylidsubstituierte schwere Tetrylene	11
1.4 Ylidstabilisierte Phospheniumkationen.....	14
1.5 Ylidsubstituierte Phosphanliganden	17
1.6 Schwere ylidsubstituierte Gruppe XV-Verbindungen.....	21
1.7 Ylidsubstituierte Gruppe XIII-Verbindungen	23
2 Zielsetzung.....	26
3 Ergebnisse	30
3.1 Amino(ylid)stabilisierte Carbene	30
3.1.1 Studien zur Synthese und Stabilität von alkylsubstituierten AYCs.....	30
3.1.2 Studien zur Stabilität endocyclischer AYCs.....	40
3.2 Ylidsubstituierte schwere Tetrylene	46
3.2.1 Synthese und Struktur eines ylidsubstituierten Plumbylens	46
3.2.2 Untersuchung der elektronischen Eigenschaften von ylidsubstituierten Tetrylenen und ihrer Reaktivität	51
3.2.3 Studien zur thermodynamischen Stabilität und den elektronischen Eigenschaften von ylidsubstituierten Gruppe XIV-Verbindungen	95
3.3 Untersuchung der elektronischen Struktur neuartiger ylidsubstituierter Phospheniumkationen.....	101
3.4 Ylidsubstituierte Phosphane	105
3.4.1 Gold–Aren-Wechselwirkungen in YPhos-substituierten Goldkomplexen.....	105
3.4.2 Untersuchungen zur MURAHASHI-FERINGA-Kupplung mit YPhos-Liganden	111
3.5 Schwere ylidsubstituierte Gruppe XV-Elemente.....	128
3.6 Ylidsubstituierte Gruppe XIII-Elemente	132

3.7	Quantenchemische Untersuchungen zur Struktur und Reaktivität von Carbodiphosphoranverbindungen	146
4	Zusammenfassung und Ausblick	156
5	Experimentelles	168
5.1	Spezielle Arbeitstechniken	168
5.2	Lösungsmittel und Reagenzien	168
5.3	Verwendete Analysemethoden und -geräte	168
5.4	DFT-Rechnungen	170
5.5	Synthesen der Verbindungen	171
5.5.1	Synthesen der literaturbekannten Verbindungen	171
5.5.2	Synthesen von neuen Verbindungen	176
5.5.3	Weitere versuchte Umsetzungen	189
6	Abkürzungsverzeichnis	196
7	Literaturverzeichnis	198

1 Einleitung und Grundlagen

Ein Großteil der chemischen Prozesse in der chemischen Industrie verläuft über katalytische Reaktionen.^[1] Gleichzeitig benötigen ein Großteil dieser Katalysen und auch viele stöchiometrische Reaktionen Übergangsmetalle und ihre Verbindungen, die häufig teuer^[2] oder gesundheitsschädlich^[3] sind. Im Hinblick auf eine nachhaltigere Chemie(industrie), im Einklang mit den Prinzipien der *Grünen Chemie*,^[4] ist ihr Einsatz daher nicht immer zielführend und kritisch zu betrachten. Hauptgruppenelemente kommen hingegen häufiger vor,^[5,6] was sie zu günstigeren Alternativen macht.^[2] Gleichzeitig gibt es innerhalb einer jeden Gruppe große Differenzen zwischen den chemischen Eigenschaften von Hauptgruppenelementen, wie beispielsweise die Aufteilung in Metalle, Nichtmetalle und Halbmetalle oder das Verhalten beim Ausbilden von Mehrfachbindungen zeigt.^[7,8] Dementsprechend sind sie vielversprechende Alternativen in vielen Prozessen.^[4]

Gleichzeitig benötigen viele chemische Reaktionen, unabhängig davon, ob sie in der Haupt- oder Nebengruppenchemie angesiedelt sind, elektronenreiche Liganden oder starke Donoren.^[9,10,11] Diese Eigenschaft konnte unter anderem die Stoffklasse der Ylide in vielen Fällen eindrucksvoll beweisen.^[12,13] In der vorliegenden Arbeit soll dieses Potential in Bezug auf Hauptgruppenelementverbindungen unter den Aspekten der strukturellen Eigenschaften, der Reaktivität und der Anwendung weiter untersucht werden.

1.1 Ylide und verwandte Verbindungen

Die ersten Ylide wurden bereits im 19. Jahrhundert von MICHAELIS und VON GIMBORN synthetisiert,^[14] allerdings nicht richtig als **1b** sondern als **1a** identifiziert.^[15,16] Danach dauerte es nochmals 25 Jahre, bis STAUDINGER und MEYER 1919 in der Lage waren ein weiteres Ylid **2** zu isolieren und erste Reaktivitätsstudien mit diesem durchzuführen (Abbildung 1.1).^[17]

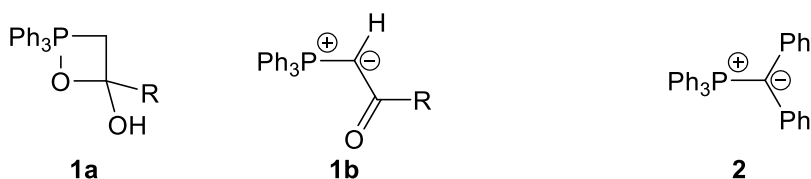
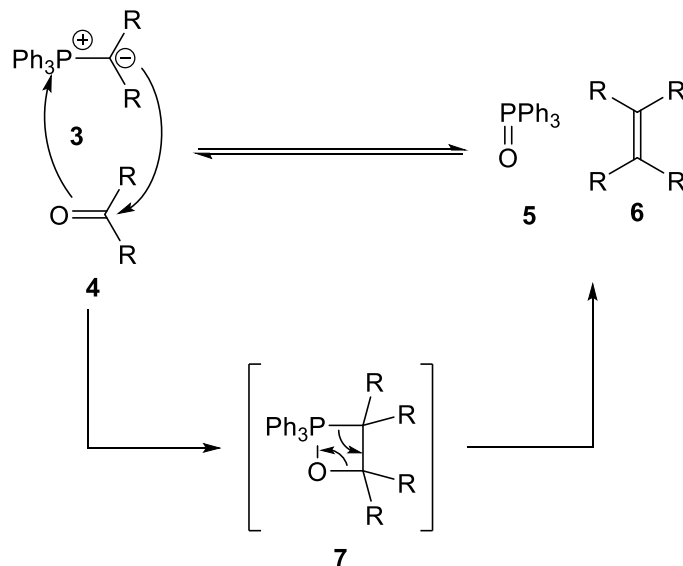


Abbildung 1.1. Die ersten Ylide von MICHAELIS und VON GIMBORN mit der ursprünglich vorgeschlagenen Struktur **1a**^[14] sowie ihren später aufgedeckten tatsächlichen ylidischen Strukturen **1b**^[16] (R = Me, Ph) und das erste als solches von STAUDINGER und MEYER isolierte Ylid **2**.^[17]

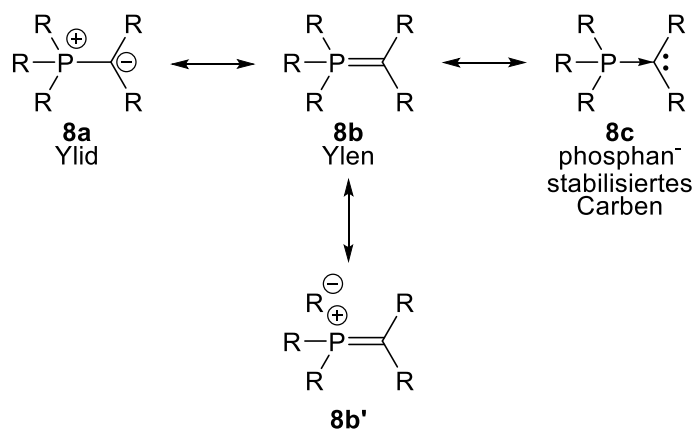
Nach dieser Isolierung dauerte es noch weitere 34 Jahre bis WITTIG zusammen mit SCHÖLLKOPF mit der nach ihm benannten WITTIG-Reaktion^[18] eine wichtige Anwendung dieser Stoffklasse fand, die ihr viel Aufmerksamkeit und ihm den Nobelpreis für Chemie des Jahres 1979 einbrachte.^[19]

In der WITTIG-Reaktion reagieren Phosphorylide **3** mit Carbonylverbindungen **4** unter C=C-Bindungsknüpfung zu Phosphanoxiden **5** und Alkenen **6** (Schema 1.1).^[18,20] Die Reaktion verläuft dabei über einen viergliedrigen Übergangszustand **7** und ist im Gleichgewicht abhängig von Einflüssen wie Sterik oder elektronenziehenden und -schiebenden Effekten.^[20]



Schema 1.1. Die WITTIG-Reaktion und ihr Mechanismus (R = H, Organyl).^[20]

Ermöglicht wird sie durch die besonderen elektronischen Eigenschaften der Ylide. So können sie in verschiedenen mesomeren Grenzstrukturen **8a-c** beschrieben werden (Schema 1.2). Der primäre Unterschied liegt dabei in der Beschreibung der P–C-Bindung.



Schema 1.2. Mögliche Beschreibungen der Struktur eines Ylids.^[21–24]

Zum einen existiert die zwitterionische Beschreibung **8a** mit einer P–C-Einfachbindung zwischen einem Phosphonium- und einem carbanionischem Zentrum.^[21,22] Aus dieser resultiert auch der Name Ylid, der sich aus der kovalenten Endung **yl** und der ionischen Endung **id** zusammensetzt.^[23] Alternativ wurde allerdings auch die Beschreibung **8b** mit einer P=C-Doppelbindung vorgeschlagen. Eine solche Struktur wird mit der typischen Endung für Doppelbindungen **en** entsprechend als Ylen bezeichnet. Da in dieser Struktur allerdings die Oktettregel verletzt wird, besteht hier alternativ noch die Formulierung einer No-Bond-Struktur

8b'.^[23] Für die Ylenstruktur zeigten allerdings quantenchemische Rechnungen, dass eine solche Beschreibung die elektronische Struktur kaum beziehungsweise nur unzureichend wiedergibt.^[22,25] In letzter Zeit wurde zusätzlich noch eine dritte strukturelle Beschreibung in Form eines phosphanstabilisierten Carbens **8c** vorgeschlagen,^[24,26–29] die allerdings nicht die Voraussetzungen der IUPAC erfüllt.^[29–31]

Die bisher beschriebenen Verbindungen mit einer ylidischen Bindung zwischen einem Phosphor- und Kohlenstoffatom werden als *P*-Ylide bezeichnet. Weiterhin existieren allerdings auch noch viele Ylide, die eine andere Oniumgruppe als eine Phosphoniumgruppe haben. So existieren beispielsweise *N*- (in Form von Ammonium-,^[32,33] Azomethin-^[32,34,35] und weiteren^[34,36]), *As*-,^[37,38] *S*- (in Form von Sulfonium-^[39–41] oder Sulfoxonium-^[42]), *Se*-Ylide^[43] oder *Halogen*-Ylide^[44] (Abbildung 1.2).

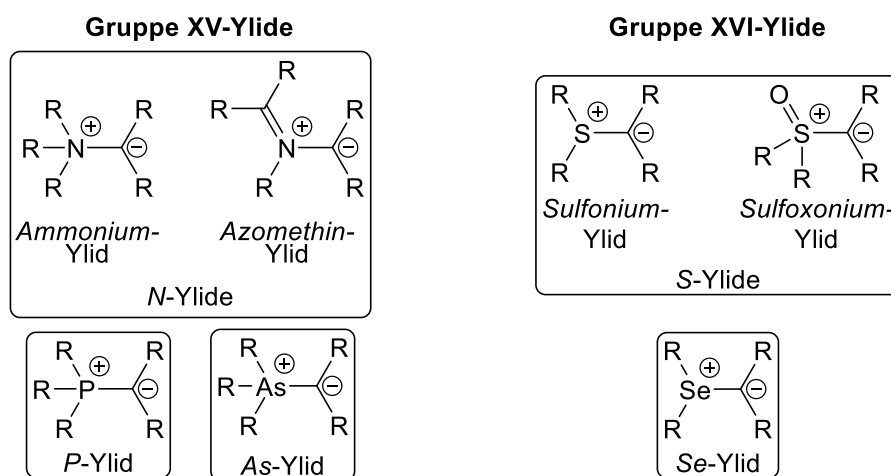
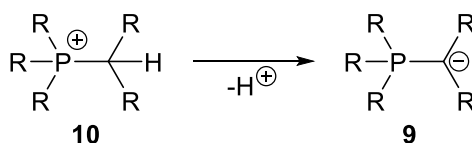


Abbildung 1.2. Beispiele für verschiedene Arten von Yliden mit auf Pnictogenen oder Chalkogenen basierenden Oniumgruppen (R = H, Organyl).

Entsprechend ihrer Diversität kommen sie in einer Vielzahl von organischen Reaktionen vor, die unterschiedlichste Anwendungen finden. Neben der bereits erwähnten WITTIG-Reaktion^[20,45,46,47] sind die JOHNSON-COREY-CHAYKOVSKY-Reaktion^[46,47] oder die STEVENS-Umlagerung^[46,48] weitere bekannte Beispiele.

Ebenso konnten sie in der Chemie der Übergangsmetalle^[13,49,50,51] und seltenen Erden^[37,52] interessante Reaktivitäten zeigen.

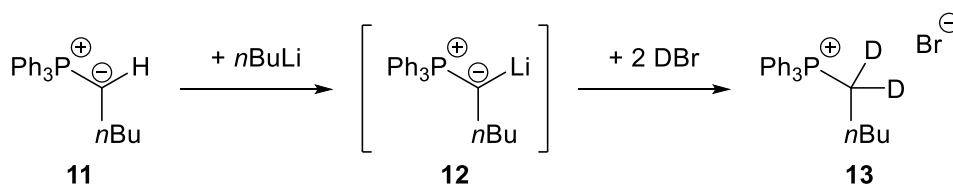
Die Synthese von *P*-Yliden **9** erfolgt meist durch Deprotonierung in α -Position von geeigneten Phosphoniumsalzen **10** (Schema 1.3).^[16,23,53–55]



Schema 1.3. Allgemeine Syntheseroute zur Darstellung von *P*-Yliden **9** (R = H, Organyl).^[16,23,53–55]

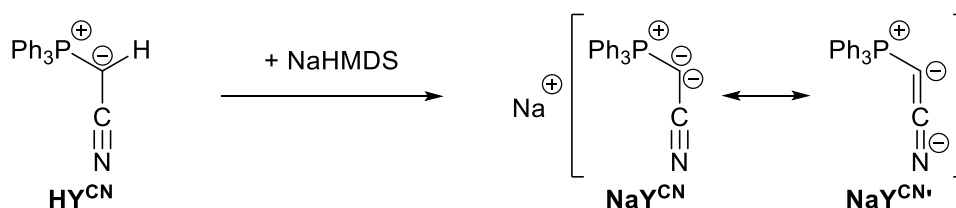
Andere Möglichkeiten zur Synthese sind beispielsweise Multikomponentenreaktionen von Phosphanen mit Alkinen und BRØNSTEDT-sauren Verbindungen^[15] oder eine Stickstoffabspaltung von Phosphazinen.^[17]

Durch erneute Deprotonierung in anionischer Position können wiederum sogenannte Ylidiide (teils auch als metallierte Ylide bezeichnet) synthetisiert werden, wie SCHLOSSER et al. 1966 feststellten. So erhielten sie durch Umsetzung des Ylids **11** mit *n*-Butyllithium das Lithiumylidiid **12**. Dieses konnten sie zwar nicht isolieren, allerdings war es ihnen möglich, das korrespondierende Phosphoniumsalz **13** mit Deuteriumbromid abzufangen (Schema 1.4).^[56]



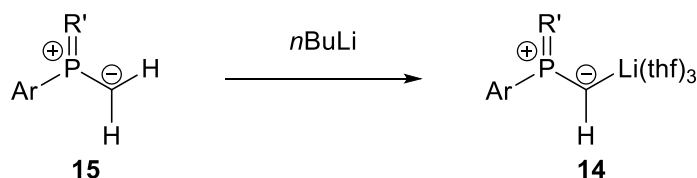
Schema 1.4. Die Synthese des Ylidiids **12** und die nachfolgende Abfangreaktion zum Phosphoniumsalz **13** nach SCHLOSSER et al.^[56]

In der Folge dauerte es allerdings noch mehr als 20 Jahre, bis es SCHMIDT und BESTMANN 1987 gelang, das Ylid **HY_{CN}** zum Natriumylidiid **NaY_{CN}** zu deprotonieren und das Produkt dieser Reaktion zu isolieren. Auf Basis von Infrarot- und NMR-spektroskopischen Daten gingen sie weiterhin davon aus, dass die Heterokumulenstruktur **NaY_{CN}⁺** entscheidende Beiträge zur Beschreibung der Struktur liefert (Schema 1.5).^[57]



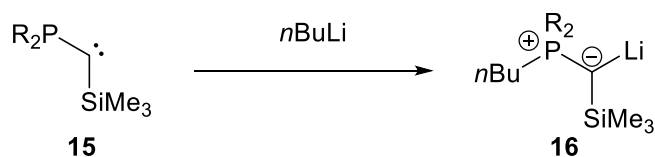
Schema 1.5. Synthese des Ylidiids **NaY_{CN}** nach Bestmann und SCHMIDT und dessen mesomere Heterokumulenstruktur **NaY_{CN}⁺**.^[57]

Der erste strukturelle Nachweis dieser Verbindungsklasse mittels Einkristallstrukturanalysen erfolgte nochmals 10 Jahre später durch NIECKE et al. in Form des Lithiumylidiids **14**. Auch hier erfolgte die Synthese ausgehend vom korrespondierenden Ylid **15** (Schema 1.6).^[58]



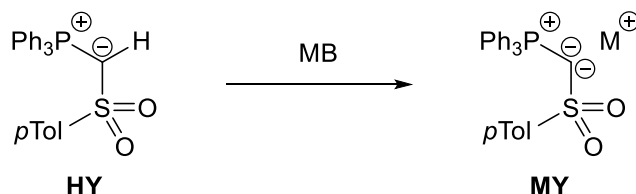
Schema 1.6. Synthese des Ylidiids **14** nach NIECKE et al. (Ar = 2,4,6-*t*Bu₃Ph; R' = C(SiMe₃)₂, Ar).^[58]

Weitere zwei Jahre später war es BERTRAND et al. möglich eine neue Syntheseroute zur Synthese von Ylidiiden einzuführen. So führte die Reaktion des Carbens **15** mit *n*-Butyllithium zur Lithiumverbindung **16** (Schema 1.7).^[59]



Schema 1.7. Synthese de Ylidiids **16** nach BERTRAND et al. (R = NcHex₂).^[59]

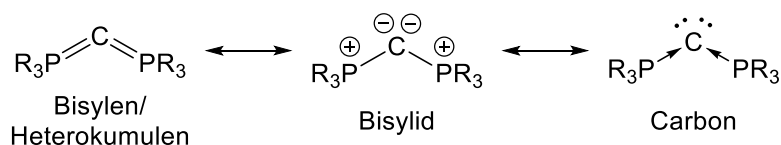
Neben dem korrespondierenden Lithiumylid **LiY** war es GESSNER und Mitarbeitern 2015 weiterhin möglich die ersten Natrium- und Kaliumylidide **NaY** und **KY** ausgehend vom entsprechenden Ylid **YH** zu synthetisieren und strukturell zu charakterisieren. (Schema 1.8).^[55] Dabei koordinieren sowohl das ylidische Kohlenstoffatom als auch das Sauerstoffatom zum Metall.^[55] Ein analoges Verhalten konnte die Gruppe später bei den tricyclohexylphosphoniumsubstituierten Analogen beobachten.^[54]



Schema 1.8. Synthese des Ylidiids **NaY** nach GESSNER et al. (M = Li, Na, K; B = *n*BuLi, HMDS).^[55]

Weiterhin war es GESSNER et al möglich die elektronische Struktur von Ylidiiden quantenchemisch ausführlich zu untersuchen.^[55,60] Im Anion **Y⁻** sind die negativen Ladungen dabei klar am ylidischen Kohlenstoffatom lokalisiert, dieses kann entsprechend sowohl als σ - als auch als π -Donor fungieren.^[55] In der Folge eignen sich Ylidiide hervorragend, um Ylidfunktionalitäten mittels Salzmetathesereaktionen in Komplexe einzuführen (für Beispiele siehe Kapitel 1.3 und 1.7).^[51] Weitere Möglichkeiten der Einführung von Ylidliganden sind eine *in situ* C–H-Aktivierung,^[37,49] Transsilylierung^[13] oder eine 1,2-Addition von geeigneten Metallvorstufen an phosphanstabilisierte Carbene.^[61]

Eine weitere Verbindungsklasse, die bei der Betrachtung von Yliden noch erwähnt werden sollte, sind die Bisylide. Bei diesen handelt es sich um Verbindungen, in denen das ylidische Kohlenstoffatom Bestandteil zweier ylidischer Bindungen ist (Schema 1.9). Handelt es sich bei den Oniumgruppen einer solchen Verbindung um Phosphoniumgruppen, wird die Verbindung auch als Carbodiphosphoran bezeichnet. Es sind allerdings auch Verbindungen mit anderen Oniumgruppen bekannt.^[62,63]



Schema 1.9. Die mesomeren Grenzstrukturen eines Bisylids anhand eines Carbodiphosphorans.

Analog zu Yliden kann eine solche bisylidische Struktur durch mehrere mesomere Grenzstrukturen wiedergegeben werden (Schema 1.9). Analog gibt allerdings auch hier eine Beschreibung in Form einer Bisylenstruktur (auch als Heterokumulene bezeichnet) die elektronische Struktur nicht hinreichend genau wieder.^[22] Unterstützt werden diese Rechnungen dadurch, dass der P–C–P-Winkel in experimentellen Befunden zwischen 116 und 180° bestimmt wurde^[64] und dadurch die Beschreibung mit einem sp-hybridisierten Kohlenstoffatom, dass für eine P=C=P-Bindungssituation unerlässlich ist, häufig nicht mit den Beobachtungen vereinbar ist. Die damit neben der ionischen Bisylidschreibweise verbleibende Beschreibung der Bindungssituation ist die als Carbon, also in Form eines Kohlenstoff(0)atoms, dass durch zwei Phosphoranliganden stabilisiert wird. Welche dieser Beschreibungen die Bindungssituation besser wiedergibt, wird ausführlich diskutiert^[26–29,65] und ist wahrscheinlich einzelfallabhängig.^[66]

1.2 Amino(ylid)stabilisierte Carbene

Zum besseren Verständnis der Eigenschaften von Ylidsubstituenten in der Hauptgruppenelementchemie eignet sich die Stoffklasse der amino(ylid)stabilisierten Carbene. Die ersten stabilen Carbene **17** und **18** wurden um 1990 von BERTRAND et al.^[67] und ARDUENGO et al.^[68] synthetisiert (Abbildung 1.3).

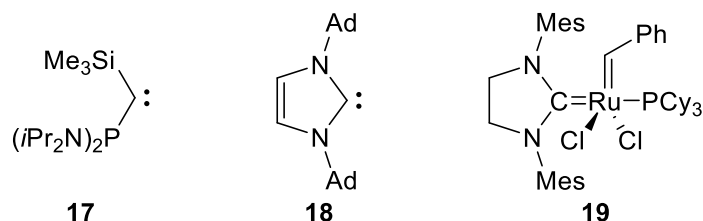


Abbildung 1.3. Das erste stabile Carbene **17** von BERTRAND et al.,^[67] das erste N-heterocyclische Carbene **18** von ARDUENGO et al.^[68] und der GRUBBS-Katalysator der zweiten Generation **19**.^[69]

Seitdem hat diese einzigartige Verbindungsklasse in allen Bereichen der Chemie eine besondere Aufmerksamkeit erfahren.^[70] Ein herausragendes Interesse besteht dabei bis heute im Einsatz als effizienter Ligand mit einer hohen Donorstärke.^[11] So lassen sich Carbenliganden beispielsweise aus der Übergangsmetallkatalyse kaum mehr wegdenken.^[71,72] Als Beispiel sei an dieser Stelle der in der Olefinmetathese verwendete GRUBBS-Katalysator der zweiten Generation **19** genannt (Abbildung 1.3).^[69] Verwandte Verbindungen werden mittlerweile auch in industriellen Prozessen eingesetzt.^[73] Weitere

Anwendung als Liganden fanden Carbene außerdem in der Organokatalyse^[71,74] und in der Hauptgruppenchemie.^[71,75,76] Im letztgenannten Anwendungsbereich eignen sie sich beispielsweise zur Stabilisierung von reaktiven,^[71,75,77] elektronenarmen^[71,75,78] oder niedervalenten^[71,75,78,79] Spezies.

Am häufigsten werden im Allgemeinen die *N*-heterocyclischen Carbene (NHC) verwendet. Diese erlangen ihre ungewöhnliche Stabilität unter anderem durch die freien Elektronenpaare der zum Carbenkohlenstoffatom benachbarten Stickstoffatome. Diese haben eine geeignete Geometrie, um Elektronendichte in das *p*-Orbital des Carbenkohlenstoffatoms zu schieben, dieses in einem Singulettzustand zu stabilisieren und damit zu einem effizienten σ -Donor zu machen (Abbildung 1.4).^[71]

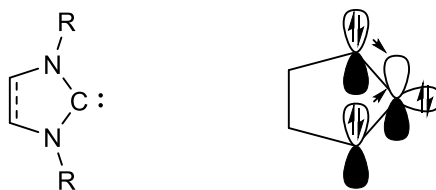


Abbildung 1.4. Schematische Darstellung eines NHCs (links) und der Stabilisierung des Singulettzustands von diesem (rechts).^[71]

Im Laufe der Jahre seit der ersten Entdeckung solcher stabiler NHCs wurde nicht nur die Bandbreite an unterschiedlich substituierten NHCs^[80] immer größer, sondern auch die Substitutionsmuster am Carbenkohlenstoffatom selbst.^[81,82] So gibt es Beispiele für nur einfach^[83] schwefel-,^[84] phosphor-,^[66,67,85,86] silicium-,^[67] sauerstoff-^[87] oder kohlenstoff-substituierte^[66,88] Carbene und ihre Verbindungen.

Als sehr erfolgreich stellten sich hier die von BERTRAND et al. eingeführten^[89] cyclischen amino(alkyl)substituierten Carbene (CAACs) **B** heraus. In diesem ist, im Vergleich zu NHCs **A**, ein dem Carbenkohlenstoffatom benachbartes Stickstoffatom durch ein Kohlenstoffatom ausgetauscht. In der Folge wird aufgrund der im Vergleich zum Stickstoff geringeren Elektronegativität des Kohlenstoffs^[5] weniger Elektronendichte aus dem Elektronenpaar des Carbens gezogen. Durch die damit verbundene relative energetische Anhebung des höchsten besetzten Molekülorbitals (HOMO) können CAACs **B** daher im Allgemeinen als bessere σ -Donoren angesehen werden als NHCs **A** (Abbildung 1.5).^[11,90,91] Gleichzeitig führt das fehlende freie Elektronenpaar am benachbarten Kohlenstoffatom dazu, dass weniger Elektronendichte in das leere *p*-Orbital am Carbenkohlenstoff doniert wird. Das führt zu einer Absenkung des niedrigsten unbesetzten Molekülorbitals (LUMO) und damit zu verbesserten π -Akzeptoreigenschaften eines CAACs **B** relativ zu einem NHC **A** (Abbildung 1.5).^[91,92]

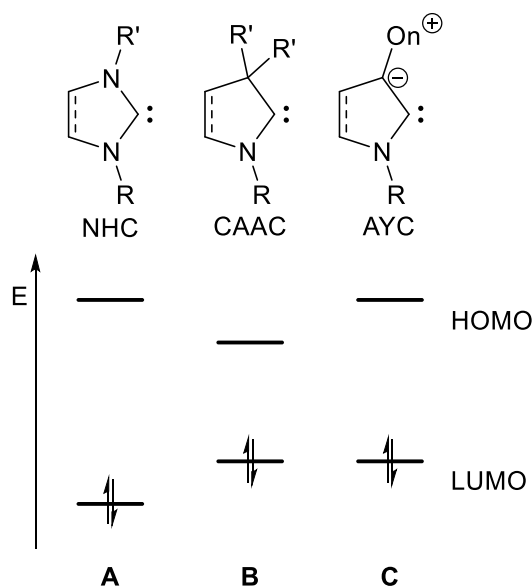
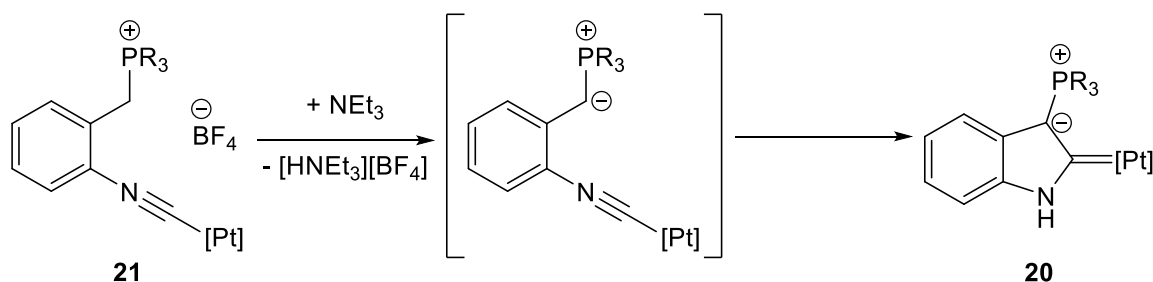


Abbildung 1.5. Darstellung der HOMO- und LUMO-Energien von NHCs **A**, CAACs **B** und AYCs **C**.^[90–92]

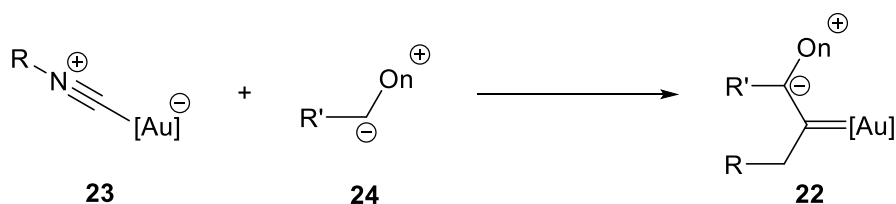
Um die guten Donoreigenschaften eines CAACs mit den Akzeptoreigenschaften eines NHCs zu kombinieren, bietet es sich an, ein ylidisches Kohlenstoffatom neben dem Carbenzentrum einzuführen.^[91–93] Dieses hat zum einen eine niedrigere Elektronegativität als Stickstoff, gleichzeitig aber trotzdem ein freies Elektronenpaar. Dieses Konzept führt zu amino(ylid)-stabilisierten Carbenen (AYC) **C** (Abbildung 1.5).

Die ersten amino(ylid)stabilisierten Carbenkomplexe **20** wurden Mitte der 1980er Jahre von MICHELIN, FACCHIN et al. durch Deprotonierung von platin(II)koordinierten phosphonium-substituierten Isonitrilen **21** erhalten (Schema 1.10).^[53,94,95]



Schema 1.10. Synthese von Platin-AYC-Komplexen **20** nach MICHELIN, FACCHIN et al.^[53,94]

2013 konnten ALCARAZO et al. auf eine analoge Weise die ersten acyclischen AYCs in der Koordinationssphäre von Gold **22** durch Umsetzung von Goldisonitrilkomplexen **23** mit Yliden **24** erhalten (Schema 1.11).^[96]



Schema 1.11. Synthese von mit acyclischen AYC substituierten Goldkomplexen **22** nach ALCARAZO et al.^[96]

Die ersten erfolgreichen Synthesen von nichtkoordinierenden AYCs folgten im Jahr 2008 unabhängig voneinander in den Gruppen um KAWASHIMA (**25**, **26**),^[97,98] FÜRSTNER (**27**, **28**)^[99] und BERTRAND (**29**) (Abbildung 1.6).^[100]

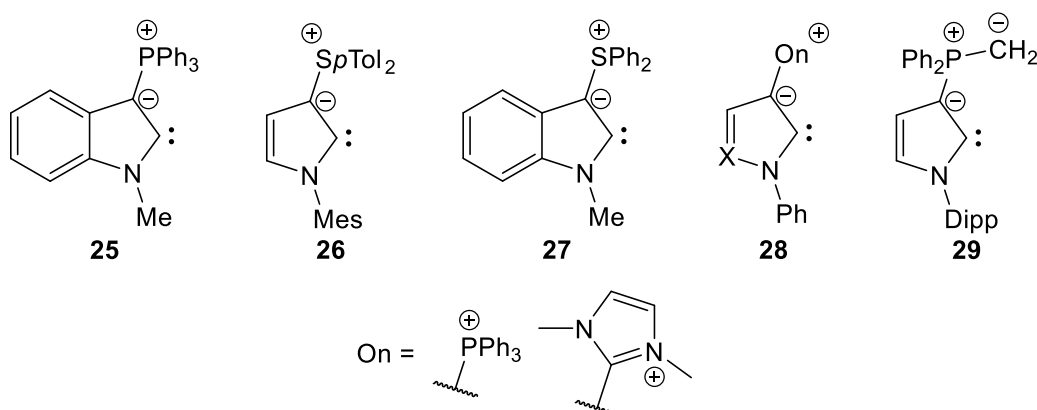
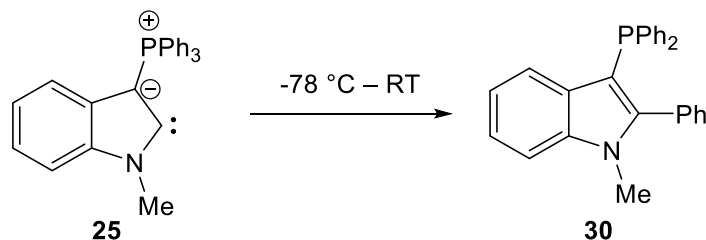


Abbildung 1.6. Bekannte AYCs von KAWASHIMA, FÜRSTNER und BERTRAND (X = CH, N).^[97–100]

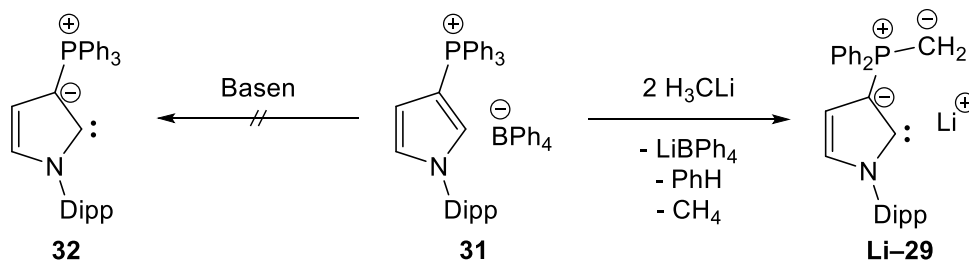
Allerdings erwiesen sich all diese Verbindungen als hochreaktiv und konnten nicht isoliert werden. Die Analytik erfolgte dementsprechend soweit möglich in Lösung oder durch Abfangreaktionen mittels [{RhCl(cod)}₂]^[97–99] [Pd(acac)₂]^[99] [{Pd(allyl)Cl}₂]^[97,100] oder S₈.^[97–99]

Die Instabilität dieser Verbindungen hängt dabei anscheinend häufig mit den aromatischen Substituenten an der Oniumgruppe zusammen. So beobachteten KAWASHIMA et al. beim Erwärmen einer Lösung des AYCs **25** von -78 °C auf Raumtemperatur einen, zumindest formalen, Shift der einer Phenylgruppe auf das Carbenkohlenstoffatom und konnten entsprechend das Produkt **30** erhalten (Schema 1.12).^[97]



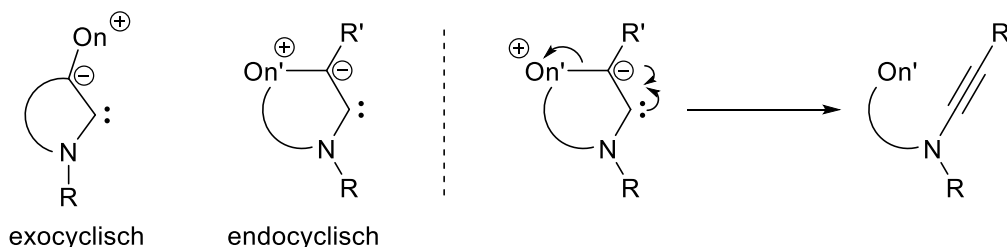
Schema 1.12. Von KAWASHIMA et al. beobachtete Zersetzung des AYC **25**.^[97]

Analog erhielten BERTRAND et al. beim Deprotonieren der Precursorverbindung **31** nicht das erwartete Carben **32**, sondern nichtcarbenhaltige Produkte oder komplexe Produktmischungen. Lediglich eine Deprotonierung mit zwei Äquivalenten Methyllithium führte zum Erhalt des Lithiumsalzes des anionischen AYC **29** (Schema 1.13).^[100] Auch hier scheint damit die Labilität der Phosphor–Aryl-Bindung entscheidend zu sein. Ein Austausch der Arylsubstituenten durch eine Alkylgruppe könnte hier zu einer höheren Stabilität der AYCs führen.



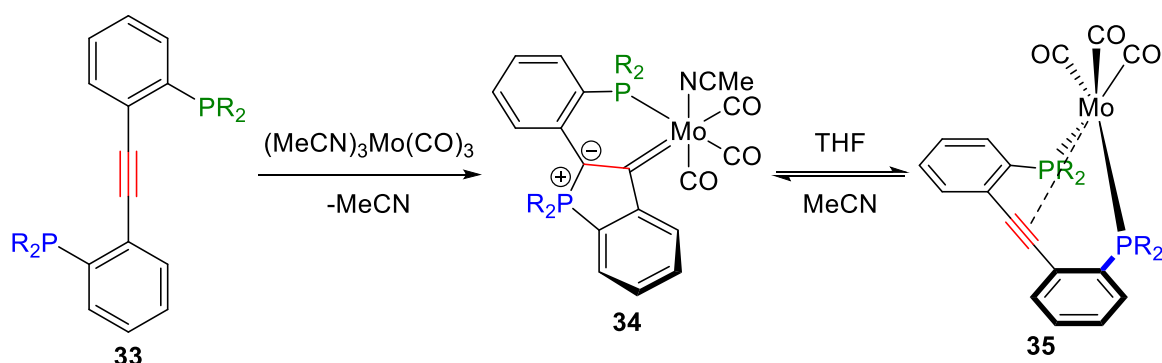
Schema 1.13. Synthese von Li-21 nach BERTRAND et al.^[100]

In den bisher betrachteten AYCs ist die Oniumgruppe der Ylideinheit immer exocyclisch. Allerdings ist auch eine endocyclische Oniumgruppe vorstellbar (Schema 1.14). Diese galten bisher jedoch als synthetisch uninteressant, da angenommen wird, dass es analog zu isoxazol-^[101] und isothiazolbasierten^[102] Carbenen zu einer Ringöffnung zum korrespondierenden Alkin kommt (Schema 1.14).^[81]



Schema 1.14. Grundgerüst eines AYCs mit einer exo- und einer endocyclischen Oniumgruppe ($R, R' = \text{Organyl}$; $\text{On} = \text{PR}_3, \text{SR}_2, \text{SOR}_2 \dots$; $\text{On}' = \text{PR}_2, \text{SR}, \text{SOR} \dots$) (links) und die mögliche Zersetzung von AYCs mit endocyclischen Oniumgruppen zu Alkinen (rechts).^[81]

Einen ersten Zugang fand kürzlich jedoch die Arbeitsgruppe von BALLMANN. Durch die Umsetzung des Alkins **33** mit $(\text{MeCN})_3\text{Mo}(\text{CO})_3$ erhielten sie den zu den AYC-Komplexen sehr ähnlichen cyclischen aryl(ylid)substituierten Carbenkomplex **34**.^[103] Allerdings zeigte dieser Komplex auch die vermutete Labilität der $\text{C}^{\text{Ylid}}\text{--C}^{\text{Carben}}$ -Bindung. So führte ein Wechsel des Lösungsmittels von Acetonitril auf Tetrahydrofuran reversibel zum Alkinkomplex **35** (Schema 1.15).^[103] Das ist ein Anzeichen, dass auch mit endocyclischen Yliden stabilisierte Carbene isolierbar sein könnten. Systematische Studien zu diesem Themenkomplex sind allerdings nicht bekannt.



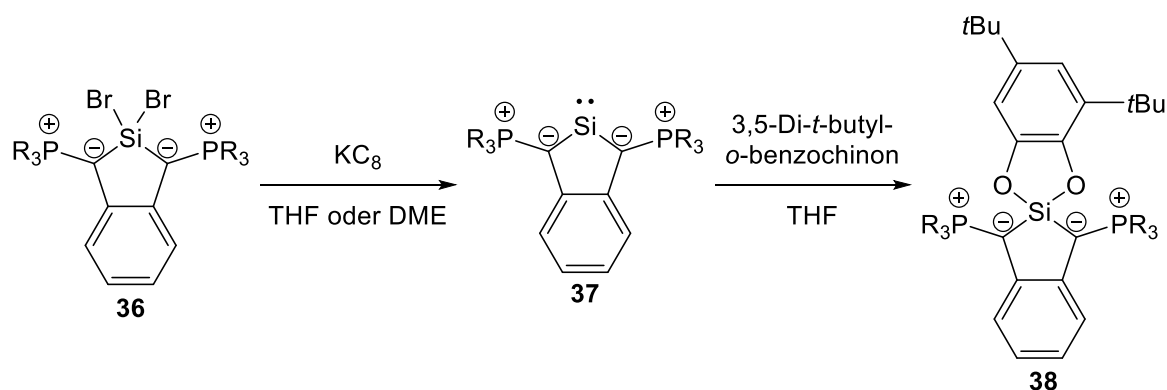
Schema 1.15. Synthese des aryl(ylid)substituierten Carbenkomplexes **34** und dessen Gleichgewicht mit dem Alkinkomplex **35** nach BALLMANN ($R = iPr$).^[103]

1.3 Ylidsubstituierte schwere Tetrylene

Analog zum Kohlenstoff können auch die schwereren Homologen Silicium, Germanium, Zinn und Blei niedervalente Verbindungen in Form von Silylenen, Germylenen, Stannylenen und Plumbylenen bilden. Dabei kommt es zu drastischen Unterschieden in der Reaktivität dieser Spezies. Das wird am Beispiel der Elementdichloride deutlich. Während das Carben Cl_2C bisher nicht isoliert werden konnte,^[104] konnte das entsprechende Silylen Cl_2Si immerhin als NHC-Addukt erhalten werden.^[105] Das Germylen Cl_2Ge wird hingegen klassischerweise durch 1,4-Dioxan stabilisiert vermarktet und kann so unter Inertatmosphäre bei niedrigen Temperaturen gelagert werden.^[106] Das Stannylen Cl_2Sn ist auch ohne weitere Stabilisierung beständig^[107] und das Plumbylen Cl_2Pb zeigt sich selbst gegenüber Wasser als unreaktiv.^[108] Zumindest im Festkörper liegen letztere Verbindungen allerdings auch nicht monomer vor.^[109,110]

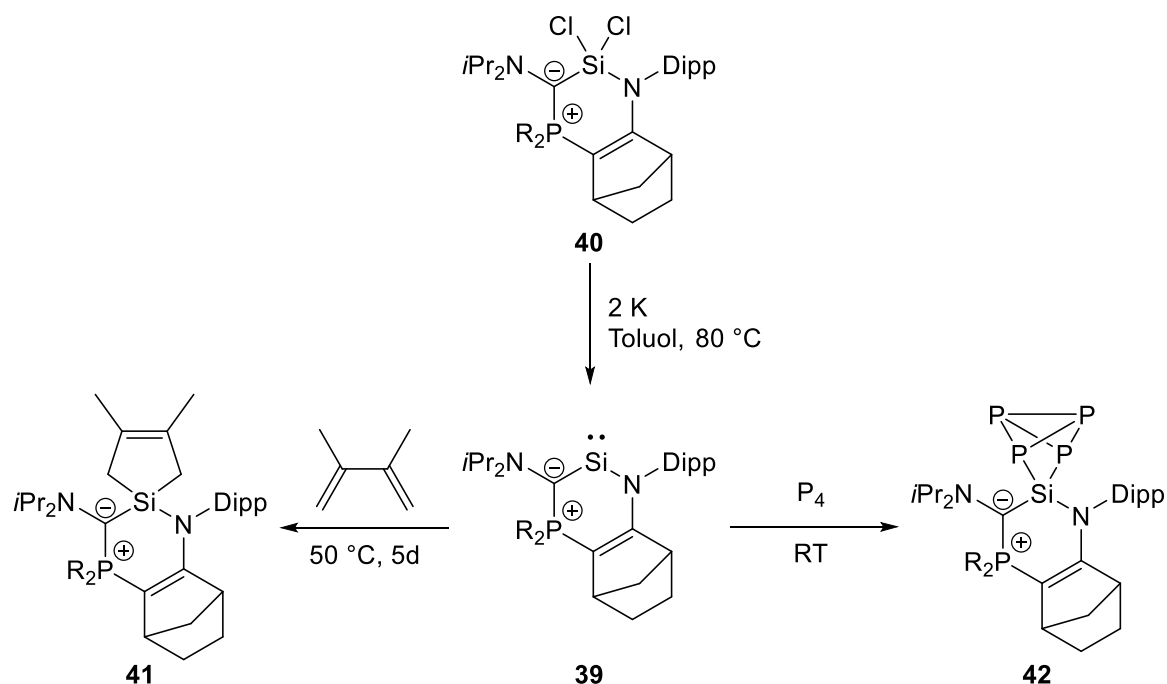
Bezüglich des Donor-/Akzeptor-Verhaltens der schwereren Tetrylene gelten weiterhin die gleichen Überlegungen wie für die bereits besprochenen Carbene. Dabei ist allerdings zu beachten, dass bei steigender Ordnungszahl des Zentralatoms, die σ -Donorstärke sinkt und die π -Akzeptorstärke steigt.^[111–113]

Im Gegensatz zu ihren leichteren Homologen wurden bereits einige Formen an ylidsubstituierten Tetrylenen isoliert. Die erste Synthese von Silylenen erfolgte dabei 2011 von DRIESS und Mitarbeitern. Sie erhielten durch Reduktion des diylidsubstituierten Dihalogensilanprecursors **36** mit KC_8 die Spezies **37** (Schema 1.16).^[114] Weiterhin konnte die Gruppe zeigen, dass das Silylen **37** mit einem geeigneten Benzochinon die für diese Stoffklasse typischen [4+2]-Cycloadditionsreaktionen zum entsprechenden Produkt **38** eingeht (Schema 1.16).^[114]



Schema 1.16. Synthese des ersten zweifach ylidstabilisierten cyclischen Silylens **37** durch DRIESS et al. (R = Ph, *m*-Tol) und dessen Reaktivität mit 3,5-Di-*tert*-butyl-*ortho*-benzoquinon.^[114]

Ein weiteres, in diesem Fall amino(ylid)substituiertes, Silylen **39** konnte die Gruppe um BACEIREDO und KATO einige Jahre später durch eine analoge Reduktion des entsprechenden Halogenprecursors **40** erhalten (Schema 1.17).^[115] Dieses zeigte analog zu den Ergebnissen von DRIESS die erwartete Reaktivität in [4+2]-Cycloadditionsreaktionen zu den entsprechenden Spiroverbindungen **41** und war zusätzlich dazu in der Lage, weißen Phosphor zur Verbindung **42** zu aktivieren (Schema 1.17).^[115]

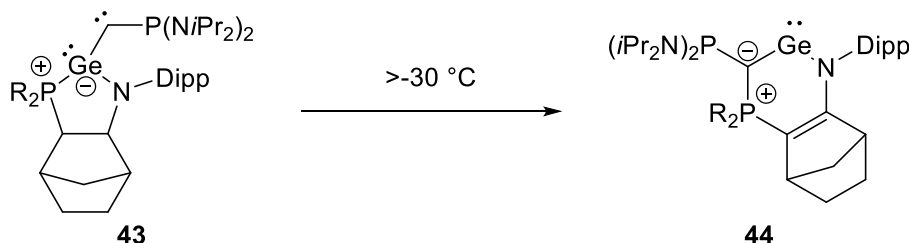


Schema 1.17. Synthese des amino(ylid)stabilisierten Silylens **39** nach KATO et al. und Beispiele für dessen Reaktivität (PR₂ = P(*Nt*Bu)₂SiMe₂).^[115]

Außerdem zeigte die entsprechende Streckschwingung des **39**→Ni(CO)₃-Komplexes, dass dieses Silylen nicht nur gegenüber anderen Silylenen ein deutlich stärkerer σ -Donor ist, sondern auch im Vergleich zu Triphenylphosphan, Tri-*tert*-butylphosphan oder einem mesitylsubstituiertem NHC.^[115] Unterstützt wird dies durch quantenchemische Rechnungen,

die im Vergleich zu einem nicht-ylidsubstituierten Silylen ein höheres HOMO und LUMO ergaben.^[115]

Eine andere Syntheseroute zu amino(ylid)substituierten Tetrylenen fanden BACEIREDO et al. bereits einige Jahre zuvor durch Erwärmen der Germaniumspezies **43** auf Temperaturen über -30 °C. Durch eine Isomerisierung konnten sie das Germyle **44** erhalten (Schema 1.18).^[116]



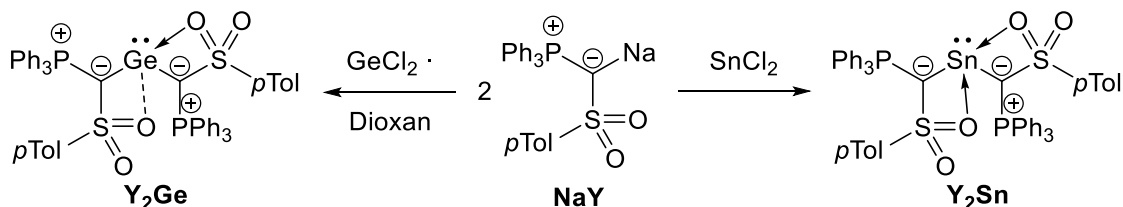
Schema 1.18. Synthese des amino(ylid)stabilisierten Germylens **44** nach BACEIREDO et al. ($\text{PR}_2 = \text{P}(\text{N}t\text{Bu})_2\text{SiMe}_2$, $\text{P}(\text{N}i\text{Pr})_2(\text{CH}_2)_2$).^[116]

Das erste ylidsubstituierte Stannylene **45** wurde bereits 1998 von SCHMIDPETER et al. durch Deprotonierung des Diylids **46** mit Zinnbis-hexamethyldisilazan synthetisiert (Schema 1.19).^[117]



Schema 1.19. Die Synthese des ersten ylidsubstituierten Stannylens **45** nach SCHMIDPETER et al.^[117]

Alle bisher beschriebenen Tetrylene haben gemein, dass sie cyclisch sind. Die ersten erfolgreichen Versuche zur Synthese von acyclischen ylidsubstituierten Tetrylenen führte 2019 die Arbeitsgruppe um GESSNER durch. Durch Umsetzung des Ylids **NaY** mit einem halben Äquivalent der entsprechenden Elementdichloride konnten sie so das Germyle **Y₂Ge** und das Stannylene **Y₂Sn** erhalten (Schema 1.20).^[111]

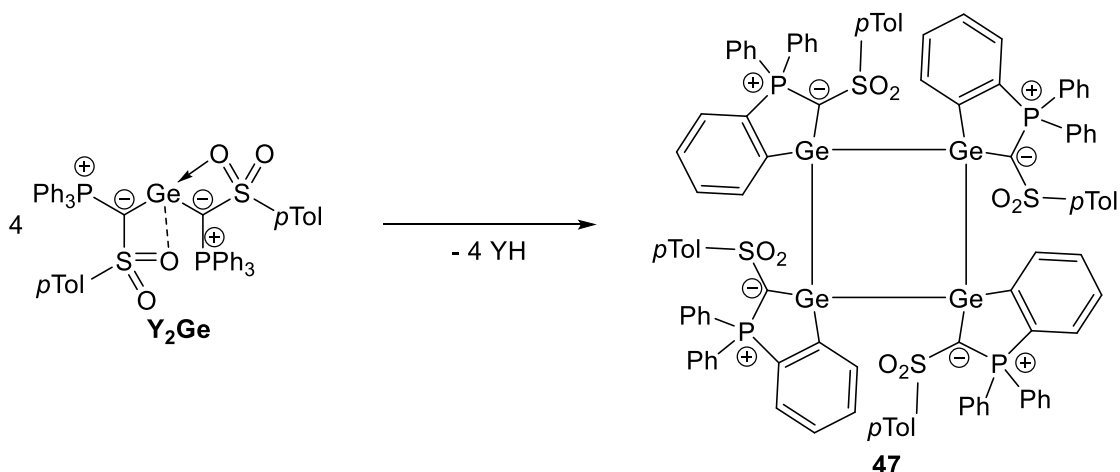


Schema 1.20. Das von GESSNER et al. synthetisierte zweifach ylidsubstituierte Germyle **Y₂Ge** und Stannylene **Y₂Sn**.^[111]

Y₂Ge und **Y₂Sn** wiesen dabei einige interessante strukturelle Eigenschaften auf. So gab es keine π -Donation von Elektronendichte von den freien Elektronenpaaren der ylidischen Kohlenstoffatome zum Zentralatom, was durch eine fehlende Coplanarität in der Röntgenstruktur deutlich wurde und durch NBO-Analysen sowie einer Betrachtung der

entsprechenden Orbitale belegt werden konnte.^[111] Stattdessen koordinieren die Sauerstoffatome der Sulfongruppe zum Zentralatom und stabilisieren das Molekül entsprechend.^[111]

Analog zu ihren oben beschriebenen cyclischen Verwandten zeigte ein Vergleich der Frontorbitale eine höhere Donorstärke des Germylens $\mathbf{Y_2Ge}$ im Vergleich zu diaryl- und diaminosubstituierten Germylenen. Außerdem wiesen das HOMO und das LUMO höhere Orbitalenergien auf als in dem amino(boryl)substituierten Germylen.^[111] Weiterhin lag die Summe der Cl–Ga–Cl-Winkel im berechneten $\mathbf{Y_2Ge} \rightarrow \text{GaCl}_3$ -Addukt in der gleichen Größenordnung wie in cyclischen alkyl(amino)substituierten Carbenen.^[111] Als derart starker Donor zeigte das Germylen auch eine beeindruckende Reaktivität. So kam es in Tetrahydrofuran bereits bei Raumtemperatur zu einer intramolekularen C–H-Aktivierung, die unter Abspaltung des korrespondierenden Ylids $\mathbf{YH}$ und Tetramerisierung zur Germanspezies **47** führte (Schema 1.21).^[111]



Schema 1.21. Intramolekulare CH-Aktivierung des Germylens $\mathbf{Y_2Ge}$.^[111]

Sowohl $\mathbf{Y_2Ge}$ als auch $\mathbf{Y_2Sn}$ gingen weiterhin mit 3,5-Di-*tert*-butyl-*ortho*-Benzophenon analog zu den Studien von DRIESS eine [4+2]-Cycloadditionsreaktion ein.^[111] Weiterhin war das Stannylene $\mathbf{Y_2Sn}$ in der Lage, elementaren Schwefel zu aktivieren.^[111]

Weitere $\mathbf{Y}$ -substituierte Tetrylene wurden bisher nicht hergestellt. Außerdem sind bisher keine weiteren acyclischen ylidsubstituierten Tetrylene und insbesondere keine ylidsubstituierten Plumbylene, bekannt.

1.4 Ylidstabilisierte Phospheniumkationen

Zu Carbenen und anderen Tetrylenen isoelektronische Verbindungen sind Phospheniumkationen, also divalente kationische Phosphorspezies.^[118] Und analog zu *N*-heterocyclischen Carbenen (**NHCs**) gibt es so die strukturell sehr ähnlichen, aber kationischen *N*-heterocyclischen Phospheniumionen (**NHPs**) (Abbildung 1.7).^[119–121]

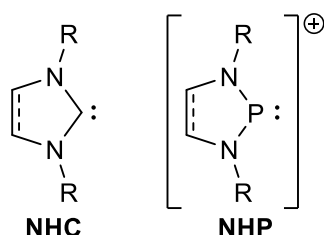
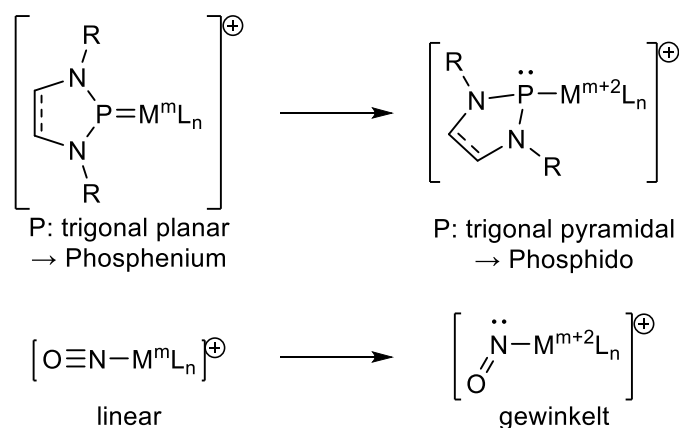


Abbildung 1.7. Struktureller Vergleich von **NHCs** und **NHPs**.^[119–121]

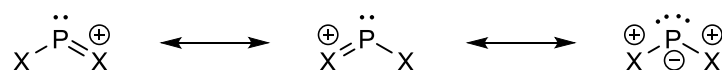
Entsprechend können sie analog zu Carbenen in Metallkomplexen eine σ -Hinbindung und eine π -Rückbindung ausbilden.^[121] Ein großer Unterschied besteht allerdings in der durch ihre Elektronenarmut bedingten Redoxaktivität. So besteht insbesondere bei besonders elektronenreichen Metallen die Möglichkeit der Ausbildung einer $\text{M}-\text{P}-\sigma$ -Bindung unter Oxidation des Metallzentrums und einer damit verbundenen trigonal-planaren Koordinationsumgebung des Phosphors, also als Phosphidoligand (Schema 1.22).^[122] Dieses Verhalten steht in Analogie zu Nitrosylliganden.^[122]



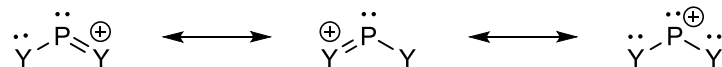
Schema 1.22. Die verschiedenen Bindungsmodi von Phospheniumionen im Vergleich zu Nitrosylliganden.^[122]

Die Bindungssituation in Phospheniumkationen kann dabei auf verschiedene Arten beschrieben werden. So besteht zum einen die Möglichkeit der Lokalisation der positiven Ladung ausschließlich auf die Substituenten (Schema 1.23, Fall A). Wahlweise besteht die Möglichkeit einer Beschreibung, in der die positive Ladung auch auf dem Phosphoratom liegt (Schema 1.23, Fall B). Die jeweilig präferierte Beschreibungsweise hängt dabei von der Art der Liganden ab und führt zu einem eher nukleophilen (Fall A) oder elektrophilen Charakter (Fall B) des Phospheniumions.^[123]

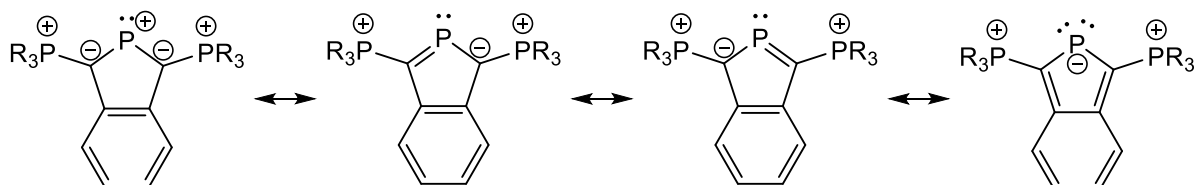
Fall A:



Fall B:



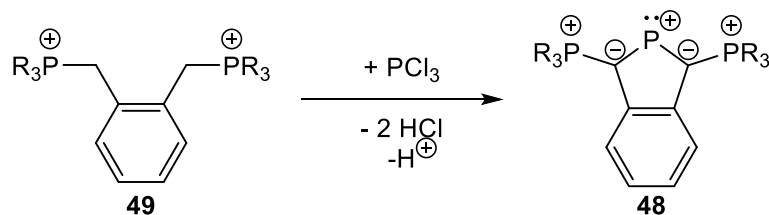
Fall C:



Schema 1.23. Die verschiedenen Möglichkeiten, die Bindungssituation in Phospheniumionen zu beschreiben.^[123]

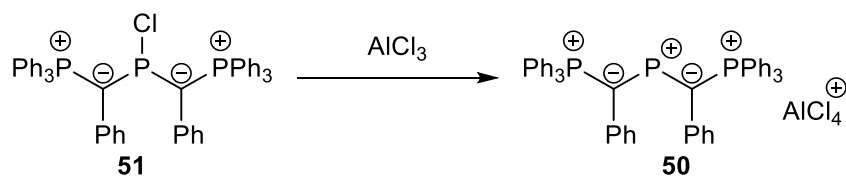
Eine Mischung aus den Fällen A und B bieten ylidsubstituierte Phospheniumionen, die ambiphilen Charakter aufweisen können (Schema 1.23, Fall C).^[123]

Ylidsubstituierte Phospheniumkationen wie **48** können durch Cyclokondensationsreaktionen geeigneter Vorstufen wie **49** synthetisiert werden, wie SCHMIDPETER und THIELE 1991 zeigen konnten (Schema 1.24).^[124]



Schema 1.24. Die erste Synthese von ylidsubstituierten Phospheniumionen **48** nach SCHMIDPETER und THIELE (R = Ph).^[124] Die Synthese wurde mittlerweile auch für eine Vielzahl an weiteren Phosphoniumgruppen durchgeführt.^[125]

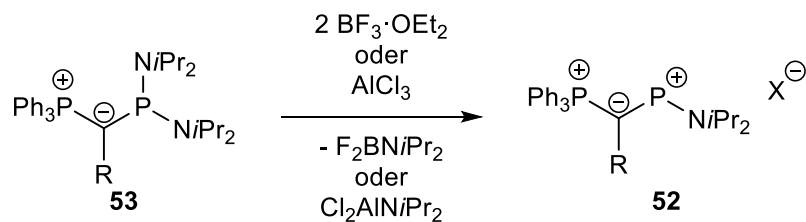
Der letzte Schritt ist dabei eine Halogenidabstraktion vom zentralen Phosphor, analog zu nicht-ylidsubstituierten Phospheniumionen und späteren Arbeiten zu acyclischen ylidsubstituierten Phospheniumionen **50**, die von der entsprechenden Chloridvorstufe **51** ausgingen (Schema 1.25).^[126]



Schema 1.25. Synthese von acyclischen ylidsubstituierten Phospheniumionen **50** durch Halogenidabstraktion.^[126]

Teilweise dissoziiert diese aufgrund einer sehr schwachen Phosphor–Halogenbindung auch spontan ohne Zuhilfenahme eines Abstraktionsreagens.^[127,128]

Ein weiterer Weg der Synthese von ylidsubstituierten Phospheniumionen **52** ist die Abstraktion von Di-*iso*-propylamid, wie GRÜTZMACHER und PRITZKOW 1989 ausgehend von einem geeigneten Precursor **53** beobachteten (Schema 1.26).



Schema 1.26. Synthese des Phospheniums **52** nach GRÜTZMACHER und PRITZKOW (R = H, Me, X = BF₄, AlCl₄).^[129]

1.5 Ylidsubstituierte Phosphanliganden

Eine weitere Stoffklasse, die analog zu Carbenen insbesondere als Liganden in der Katalyse Anwendung findet, sind Phosphane. Sie finden sowohl in Form von einfachen Systemen wie Triphenylphosphan **PPh₃** im WILKINSON-Katalysator ((Ph₃P)₃RhCl)^[130] und Tri-*tert*-butylphosphan **PtBu₃**^[131] über komplexere Systeme wie **SPhos**^[132] und **XPhos**^[133,134] bis hin zu chiralen oder mehrzähligen Liganden wie **SEGPHOS**^[135] Anwendung (Abbildung 1.8).

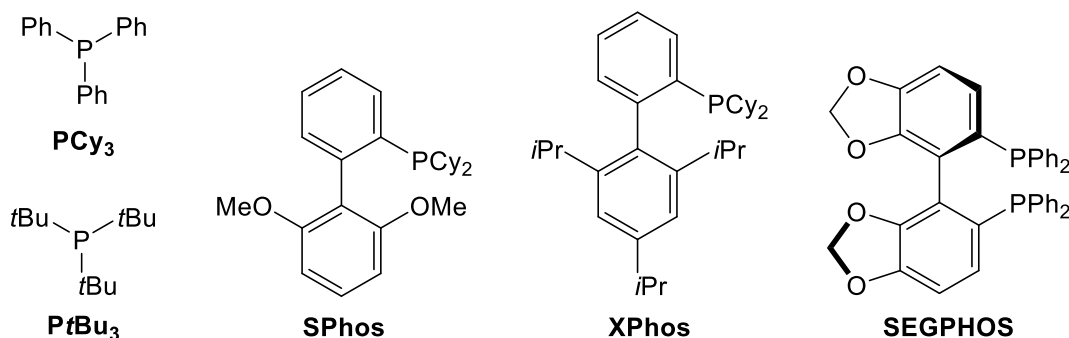
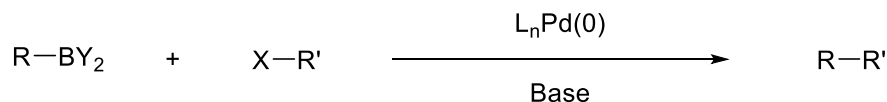


Abbildung 1.8. Eine Auswahl verschiedener als Liganden eingesetzter Phosphane.^[69,130–135]

Anwendungsfelder von Phosphanliganden sind dabei insbesondere palladiumkatalysierte Reaktionen wie die SUZUKI-^[136,137] und SONOGASHIRA-Kupplungen,^[138] die BUCHWALD-HARTWIG-Aminierung,^[139,140] gold(I)katalysierte Hydroaminierungen^[141] (Schema 1.27), Hydroformylierungen^[142] oder Hydrierungen.^[143]

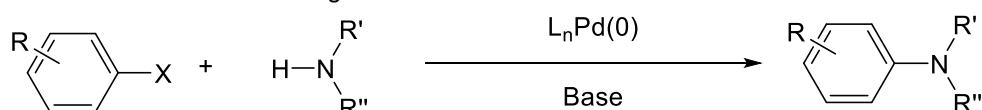
SUZUKI-Kupplung



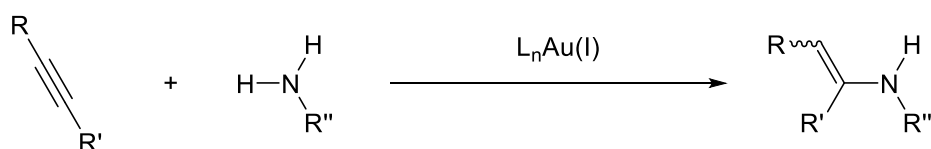
SONOGASHIRA-Kupplung



BUCHWALD-HARTWIG-Aminierung



Gold(I)katalysierte Hydroaminierung



Schema 1.27. Übersicht über einige Reaktionen, in denen Phosphanliganden häufig zum Einsatz kommen (X = Cl, Br, I, OTf; Y = R, OR, OH; R, R', R'' = Organyl).^[136–141]

In vielen Fällen haben sich dabei insbesondere elektronenreiche Phosphane als geeignete Liganden erwiesen. Entsprechend wurden diverse Möglichkeiten zur Bestimmung der Donorstärke von Phosphanen und anderen Systemen entwickelt. Exemplarisch seien hier Methoden über Carbonylstreckschwingungen wie TOLMANS-Electronic-Parameter (TEP)^[10] oder GaCl₃-Bindungswinkel^[144] erwähnt.

Die Arbeitsgruppe von GESSNER hat aus diesem Grund die besonders elektronenreichen ylidsubstituierten Phosphane **YPhos** (Abbildung 1.9) deutlich weiterentwickelt und erstmals in katalytischen Prozessen eingesetzt.^[145]

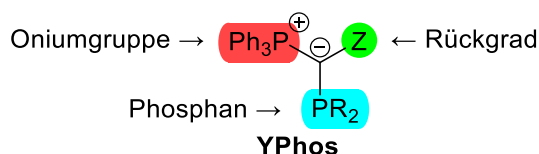
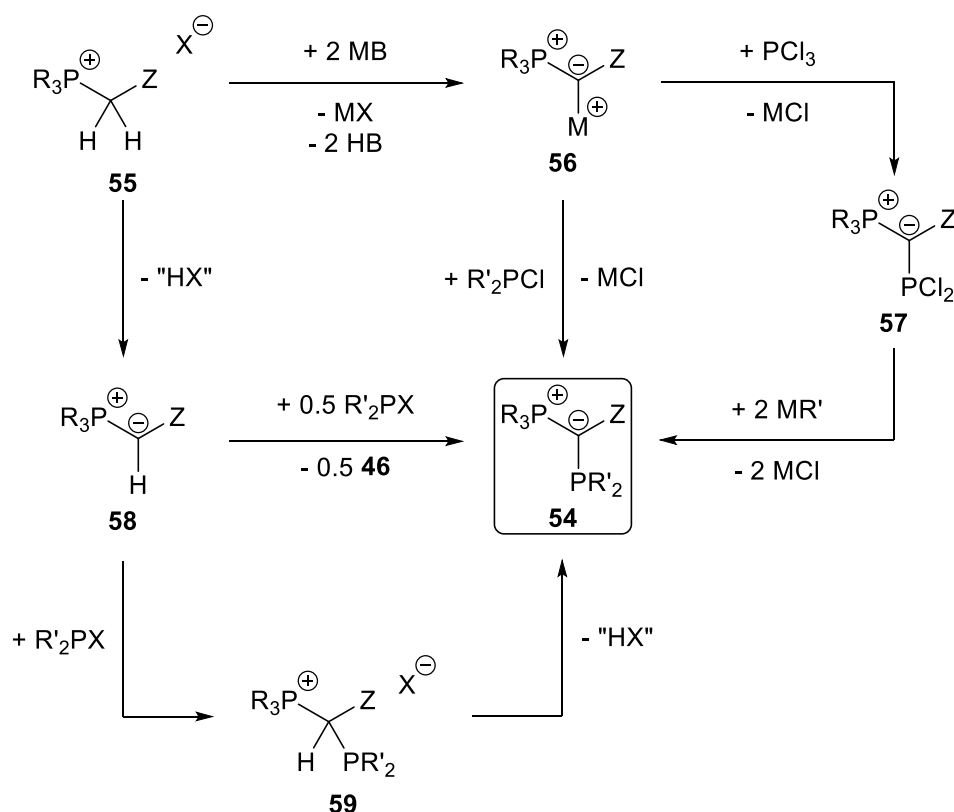


Abbildung 1.9. Grundsätzliches Schema eines **YPhos**-Liganden (für Z, R und R' siehe **Tabelle 1.1**).

Diese lassen sich durch eine geeignete Funktionalisierung der Oniumgruppe (PR₃), des Rückgrats (Z) und des Phosphans (PR'₂) auf viele verschiedene Reaktionen und Umgebungsbedingungen anpassen. Zur Synthese eignen sich, abhängig von der Beschaffenheit des gewünschten **YPhos**-Liganden **54**, verschiedene Synthesewege (Schema 1.28).^[146] Diese gehen alle von den entsprechenden Phosphoniumsalzen **55** aus.



Schema 1.28. Die verschiedenen Synthesewege für YPhos-Liganden **54** (B = Base; M = Na, Li, K; X = Cl, Br, I; für Z, R und R' siehe **Tabelle 1.1**).^[146]

Zunächst einmal besteht die Möglichkeit, diese Phosphoniumsalze mit einer geeigneten Metallbase zu den entsprechenden Yliden **56** umzusetzen.^[55] Diese können dann zum einen direkt mit einem Diorganyldichlorophosphor zum ylidsubstituierten Phosphan **54** umgesetzt werden.^[55] Zum anderen können sie allerdings auch zunächst mit Phosphortrichlorid zum ylidsubstituierten Phosphordichlorid **57** umgesetzt werden, um in der Folge durch Salzmetathese zum **YPhos**-System **54** zu gelangen.^[147]

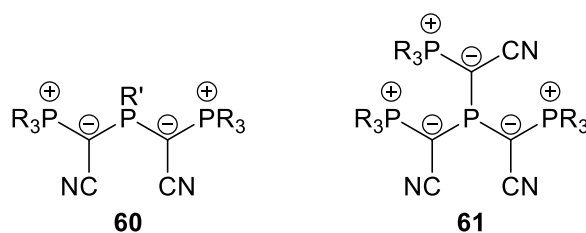
Alternativ kann das Phosphoniumsalz zunächst zum Ylid **58** deprotoniert werden. Dieses kann entweder mit einem halben Äquivalent Diorganyldichlorophosphorhalogenid unter Rückerhalt eines Phosphoniumsalzes **55** direkt zum ylidsubstituierten Phosphan **54**,^[148] oder aber durch Zugabe von einem Äquivalent Diorganyldichlorophosphorhalogenid zunächst zum α-Phosphinophosphoniumsalz **59** umgesetzt werden.^[149] Letzteres kann dann wiederum zum **YPhos**-System **45** deprotoniert werden.^[149]

Auf diesen Wegen konnten in den letzten Jahren geeignete Systeme für eine Vielzahl verschiedener Reaktionen entwickelt werden (Tabelle 1.1).

Tabelle 1.1. Vergleich einiger **YPhos**-Liganden.

Name	R	R'	Z	Untersuchte Anwendung in
keYPhos	Cy	Cy	Me	Palladiumkatalysierte C–N-Kupplung ^[145,149] Palladiumkatalysierte C–C-Kupplung ^[145,148,150]
joYPhos	Cy	Cy	Ph	Palladiumkatalysierte C–N-Kupplung ^[149,151] Palladiumkatalysierte C–C-Kupplung ^[150]
pinkYPhos	Cy	Cy	oTol	Palladiumkatalysierte C–N-Kupplung ^[151] Palladiumkatalysierte C–C-Kupplung ^[150]
mesYPhos	Cy	Cy	Mes	Palladiumkatalysierte C–N-Kupplung ^[151] Palladiumkatalysierte C–C-Kupplung ^[150]
	Cy	Cy	oAnisyl	Palladiumkatalysierte C–C-Kupplung ^[150]
trYPhos	Cy	<i>t</i> Bu	Me	Palladiumkatalysierte C–N-Kupplung ^[145,149,151] Palladiumkatalysierte C–C-Kupplung ^[148,150]
	Ph	Cy	SO ₂ <i>p</i> Tol	Palladiumkatalysierte C–C-Kupplung ^[145] Gold(I)katalysierte Hydroaminierung ^[145,146] Gold(I)katalysierte OH-Addition an Alkine ^[145]
	Ph	Ph	SO ₂ <i>p</i> Tol	Gold(I)katalysierte Hydroaminierung ^[145,146] C–H-Bindungsaktivierung ^[152]
	Ph	Me	SO ₂ <i>p</i> Tol	Gold(I)katalysierte Hydroaminierung ^[145]
	Ph	Cy	SiMe ₃	Gold(I)katalysierte Hydroaminierung ^[145]
	Ph	CN	Cy	Gold(I)katalysierte Hydroaminierung ^[147]
	Ph	CN	Ph	Gold(I)katalysierte Hydroaminierung ^[146,147]
	Ph	CN	<i>t</i> Bu	Gold(I)katalysierte Hydroaminierung ^[147]

Weiterhin sind nicht nur YPhos-Liganden möglich, die einen Ylidsubstituenten tragen. So konnte die Gruppe um GESSNER auch diylid- **60** und triylidsubstituierte Phosphane **61** (Abbildung 1.10) synthetisieren und teilweise ebenfalls in gold(I)katalysierten Hydroaminierungsreaktionen einsetzen.^[147]


Abbildung 1.10. Die mehrfach ylidsubstituierte Phosphane **60** und **61** (R = Ph, Cy, *t*Bu).^[147]

Diese insgesamt sehr große Vielfalt an verschiedenen **YPhos**-Systemen ist aus verschiedenen Gründen relevant. Beispielsweise kann der unterschiedliche sterische

Anspruch der Liganden zu unterschiedlich starken agostischen Wechselwirkungen des Liganden mit dem Metall (Abbildung 1.11) und damit zu veränderten Selektivitäten für einzelne Reaktionen führen.^[148,149,153,154] Ebenso können Aren-Metall-Wechselwirkungen die Reaktion beeinflussen.^[147,153]

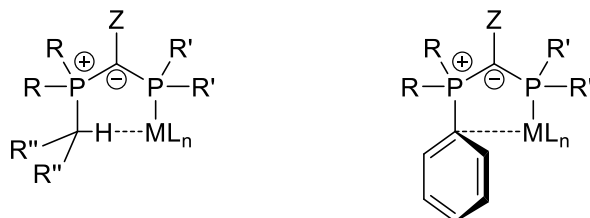


Abbildung 1.11. Agostische (links) und Arenwechselwirkungen (rechts) von YPhos-Liganden mit dem Metallzentrum.^[147,148]

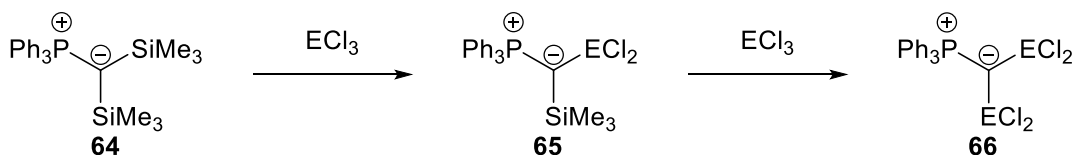
1.6 Schwere ylidsubstituierte Gruppe XV-Verbindungen

Selbstverständlich sind ylidstabilisierte Phospheniumkationen und YPhos-Liganden nicht die einzigen möglichen Verbindungen, in denen ein Gruppe XV-Element einen Ylidsubstituenten trägt. So konnte die Arbeitsgruppen von SCHMIDPETER und NÖTH im Jahr 2000 zeigen, dass das trimethylsilylsubstituierte Ylid **62** mit Arsentrichlorid unter Abspaltung von Trimethylchlorsilan und analog zur Reaktion mit Phosphortrichlorid zum Arsan **63^{As}** reagiert (Schema 1.29).^[155]



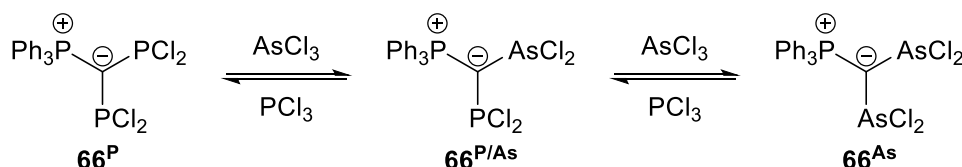
Schema 1.29. Synthese des ylidsubstituierten Phosphans **63^P** (E = P) und Arsans **63^{As}** (E = As) nach SCHMIDPETER und NÖTH.^[155]

Analog läuft die Reaktion auch mit dem bis(trimethylsilyl)substituiertem Ylid **64** zur Spezies **65** ab (Schema 1.30).^[155] Hier führt die Zugabe eines weiteren Äquivalents des jeweiligen Elementtrichlorids zum dipentelsubstituierten Ylid **66**.^[155]



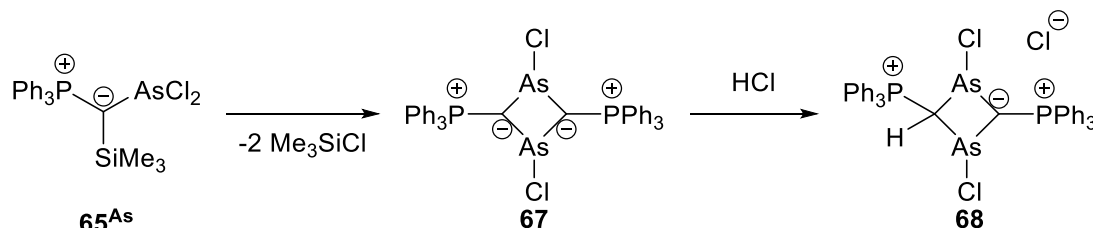
Schema 1.30. Synthese des diphosphor- **66^P** und diarsensubstituierten Ylids **66^{As}** nach SCHMIDPETER und NÖTH (E = P, As).^[155]

Interessanterweise stehen die Verbindungen **66^P** und **66^{As}** im Gleichgewicht miteinander und können durch Zugabe des jeweils entgegengesetzten Elementtrichlorids über die gemischte Form **66^{P/As}** ineinander umgewandelt werden (Schema 1.31).^[155]



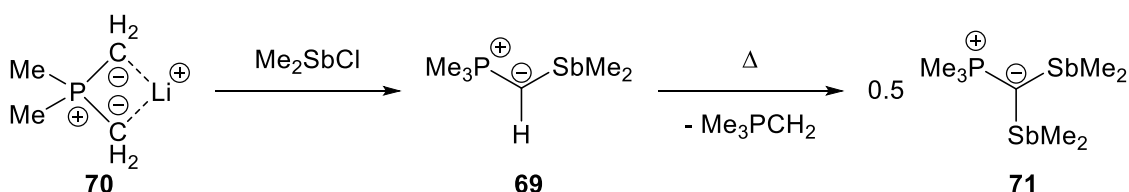
Schema 1.31. Gleichgewicht einer Mischung der Verbindungen **66^P** und **66^{As}** in Lösung.^[155]

Die Spezies **65^{As}** ist in Lösung allerdings nicht stabil und dimerisiert zum Vierring **67** (Schema 1.32).^[155] Diese Verbindung lässt sich mit Chlorwasserstoff zum korrespondierenden Phosphoniumsalz **68** protonieren.^[155]



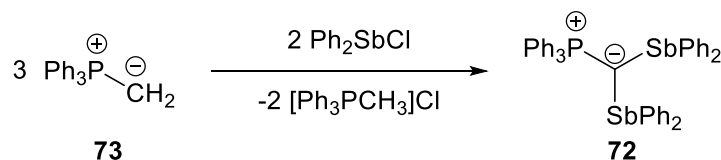
Schema 1.32. Reaktivität der ylidsubstituierten Arsenverbindung **65^{As}**.^[155]

Ein erstes ylidsubstituiertes Stiban **69** konnten SCHMIDBAUR und TRONICH 1968 durch Umsetzung von der lithiierten Spezies **70** mit Dimethylchlorstiban erhalten (Schema 1.33).^[156] Dieses zersetzte sich bei höheren Temperaturen wiederum unter Disproportionierung zum bisstibansubstituierten Ylid **71**.^[156]



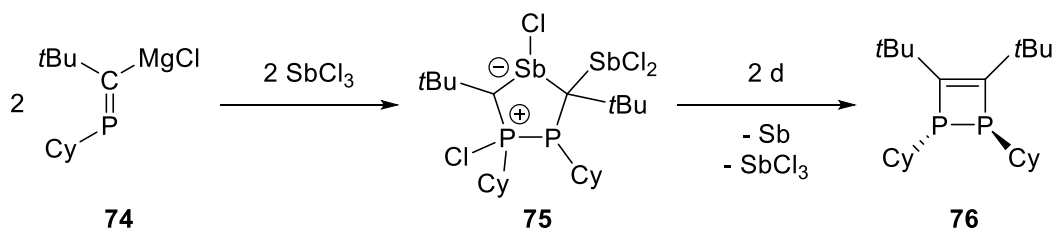
Schema 1.33. Synthese des ersten ylidsubstituierten Stibans **69** und dessen Reaktivität.^[156]

Ein dieser Verbindung sehr ähnliches Ylid **72** konnten KRÜGER et al. aus dem Ylid **73** unter Abspaltung des korrespondierenden Phosphoniumsalzes 1983 synthetisieren (Schema 1.34).^[157]



Schema 1.34. Synthese des diantimonsubstituierten Ylids **72** nach KRÜGER et al.^[157]

Eine gänzlich andere Syntheseroute schlug 2002 die Gruppe von JONES ein. Sie setzten das GRIGNARD-Reagenz **74** mit Antimonttrichlorid um, was zum cyclischen ylidsubstituierten Stiban **75** führte (Schema 1.35).^[158] Dieses zersetzte sich unter Abscheidung von elementarem Antimon innerhalb von 2 Tagen zum Diphosphet **76**.^[158]

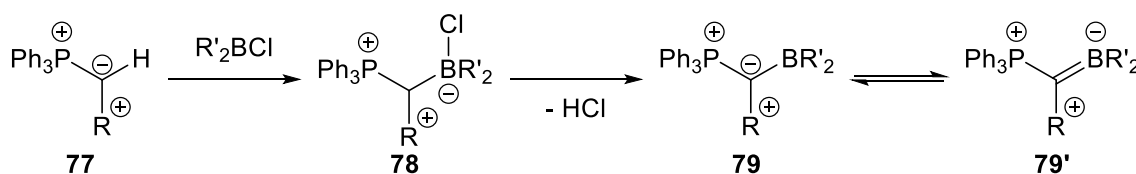


Schema 1.35. Von JONES et al beschriebene Synthese der ylidsubstituierten Antimonverbindung **75** und deren Zersetzung.^[158]

Ylidsubstituierte Bismutverbindungen sind bisher nicht bekannt.

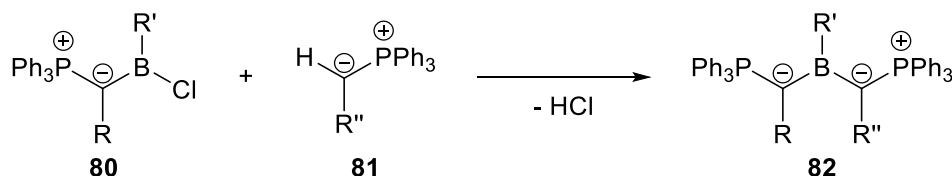
1.7 Ylidsubstituierte Gruppe XIII-Verbindungen

Bisher gibt es noch verhältnismäßig wenig ylidsubstituierte Verbindungen der Gruppe 13. Die erste wurde 1984 von BESTMANN und ARENZ vorgestellt.^[159] Die Umsetzung des Ylids **77** führte dabei zum Phosphoniumborat **78** und eine anschließende Chlorwasserstoffabspaltung ergab das ylidsubstituierten Boran **79** (Schema 1.36).^[159] NMR-spektroskopische Untersuchungen deuten dabei darauf hin, dass sich die Verbindung **79** dabei auch durch die mesomere Struktur eines carbenstabilisierten Bor(I)anions **79'** beschreiben lässt.^[159]



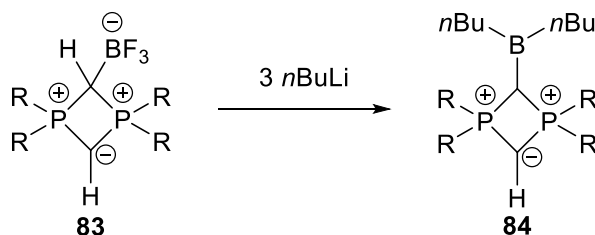
Schema 1.36. Synthese des ylidsubstituierten Borans **79** nach BESTMANN und ARENZ ($R = \text{Me, Et, Ph}$; $R' = n\text{-pentyl, cyclopentyl, cyclohexyl}$) und dessen mesomere Grenzstruktur **79'**.^[159]

Zwei Jahre später konnten BESTMANN und ARENZ durch eine analoge Umsetzung eines ylidsubstituierten Chlorborans **80** mit einem H-substituierten Ylid **81** ein zweifach ylidsubstituiertes Boran **82** synthetisieren (Schema 1.37).^[160]



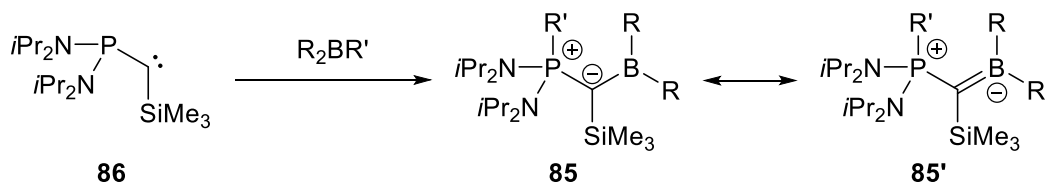
Schema 1.37. Synthese des zweifach ylidsubstituierten Borans **82** nach BESTMANN und ARENZ ($R = \text{H, Me, Et}$; $R' = \text{cyclohexyl, } tert\text{-hexyl, 2,2,6,6-tetramethylpiperidino}$; $R'' = \text{H, Me}$).^[160]

Eine neue Syntheseroute zu ylidsubstituierten Boranen entwickelten 1989 FLUCK et al. Sie konnten durch Umsetzung des Precursors **83** mit *n*-Butyllithium das Diphosphet **84** erhalten (Schema 1.38).^[161]



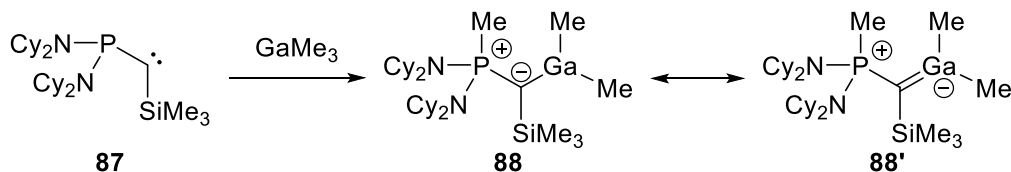
Schema 1.38. Synthese des Diphosphets **84** nach FLUCK et al. (R = NMe₂).^[161]

Eine dritte Syntheseroute wurde 1991 von BERTRAND et al. eingeführt. Er konnte ylidsubstituierte Borane **85** durch Umsetzung von Carbenen **86** mit den entsprechenden Boranen erhalten. Dabei wird ein Substituent des Borans auf die Phosphaneinheit des Carbens übertragen (Schema 1.39).^[162] BERTRAND et al. konnten außerdem erstmals die Struktur eines ylidsubstituierten Borans **85** im Kristall bestimmen. Hier bestätigt eine nahezu coplanare Geometrie eine π -Donation vom ylidischen Kohlenstoff zum Bor, was wiederum die mesomere Struktur des carbensubstituierten Bor(I)anions **77'** unterstreicht.



Schema 1.39. Synthese der ylidsubstituierten Borane **85'** nach BERTRAND et al. (R = Mes, OMe, R' = F, OMe) und deren mesomere Struktur **85'**.^[162]

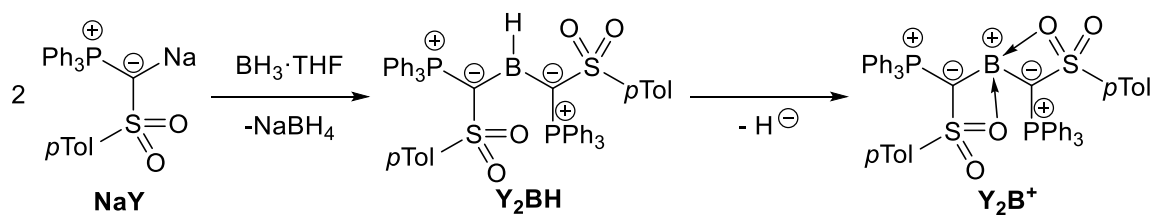
Diese Syntheseroute konnten BERTRAND et al. 1994 auf die Umsetzung eines Carbens **87** mit Trimethylgallium übertragen. Hier bildet sich analog durch einen Methylgruppenshift vom Gallium auf die Phosphangruppe die erste und bisher einzige ylidsubstituierte Galliumverbindung **88** (Schema 1.40).^[61] Weiterhin kommt es ebenso zu einer nahezu coplanaren Koordination des ylidischen Kohlenstoffs mit dem Gallium. Somit lässt sich auch hier die Verbindung durch die mesomere Struktur eines carbenstabilisierten Gallium(I)anions **88'** beschreiben.



Schema 1.40. Synthese der ylidsubstituierten Galliumverbindung **88** und deren mesomere carbenartige Struktur **88'** nach BERTRAND et al.^[61]

Eine vierte Syntheseroute konnten 2015 GESSNER et al. beschreiben. Sie erhielten das ylidsubstituierte Boran **Y₂BH** durch Umsetzung des Ylids **NaY** mit Borantetrahydrofuran (Schema 1.41).^[55] Dieses konnte weiterhin durch Abstraktion des am Bor gebundenen Wasserstoffs zum Boreniumkation **Y₂B⁺** umgesetzt werden.^[163] Sowohl das Boran **Y₂BH** als

auch das Boreniumkation $\mathbf{Y_2B^+}$ zeigen dabei eine coplanare Anordnung der ylidischen Kohlenstoffatome zum Zentralatom, das Kation zeigt zusätzlich noch eine Koordination der Sauerstoffatome der Tosylgruppen.^[163]

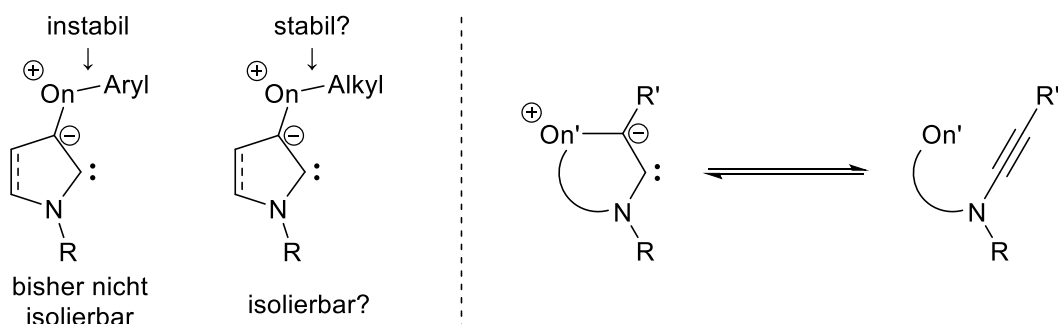


Schema 1.41. Synthese des ylidsubstituierten Borans $\mathbf{Y_2BH}$ und des korrespondierenden Boreniumkations $\mathbf{Y_2B^+}$ nach GESSNER et al.^[55,163]

Bis auf die Galliumverbindung **88** sind keine weiteren ylidsubstituierten Gruppe XIII-Verbindungen mit schwereren Zentralatomen als Bor bekannt.

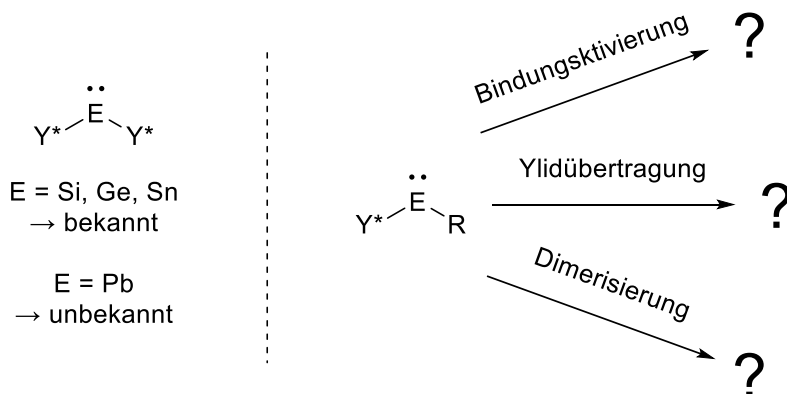
2 Zielsetzung

Wie das erste Kapitel verdeutlicht, ist die Chemie von ylidsubstituierten Hauptgruppenverbindungen äußerst vielfältig. Ziel dieser Doktorarbeit war in diesem Bereich durch systematische Einblicke in die Struktur und Reaktivität dieser Verbindungsklasse weitere Erkenntnisse zu gewinnen. Ein erster Ansatzpunkt sollen dabei die ylidstabilisierten Carbene sein, welche bisher noch nicht isoliert werden konnten. Aufgrund der Instabilität der Bindung zu den Arylsubstituenten der Oniumgruppe ist daher ein möglicher Ansatz, der in dieser Arbeit untersucht werden soll, die Einführung von Alkylgruppen (Schema 2.1, links). Ebenso bot es sich an, die Stabilität von ylidsubstituierten Carbenen mit endocyclischen Oniumgruppen zu analysieren, da deren Instabilität zwar postuliert,^[81] aber bisher nicht untersucht wurde (Schema 2.1, rechts). Systematische quantenchemische Untersuchungen könnten dabei Anhaltspunkte zur Synthese von stabilen Systemen bieten.



Schema 2.1. Vermutete Stabilitäts-Isolierbarkeits-Beziehung in AYCs mit exocyclischen Oniumgruppen (On = SR, SOR, PR₂)(links) und zu untersuchendes Gleichgewicht von AYCs mit endocyclischen Oniumgruppen (On' = SR, PR₂, Im)(rechts).

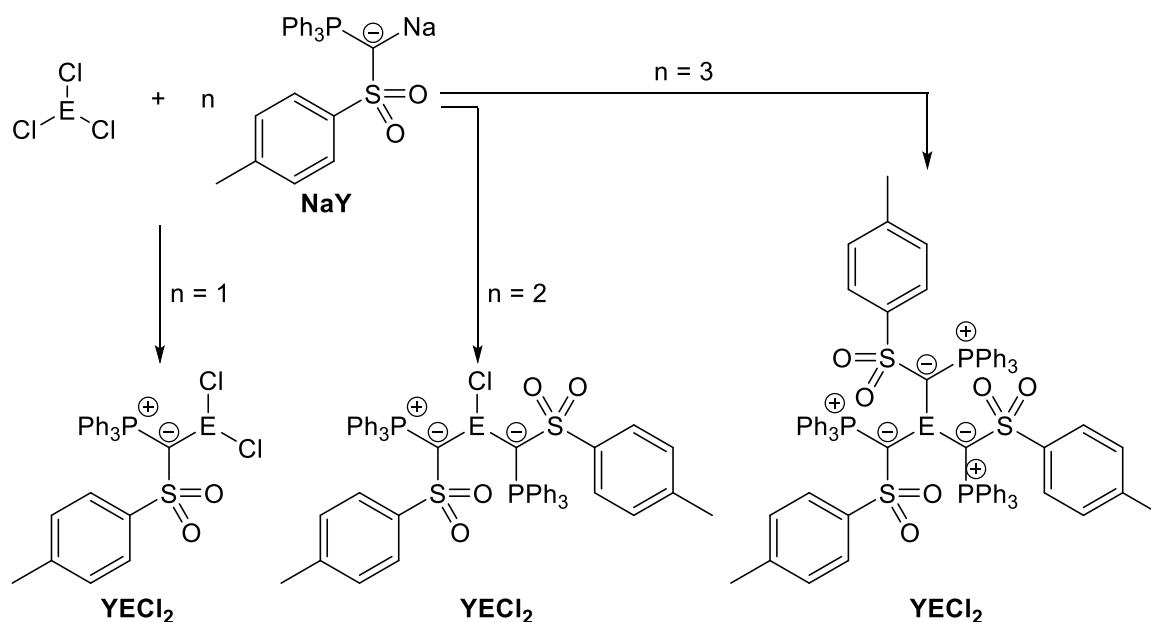
Ferner sind bei den schwereren Homologen der Carbene zwar bereits ylidsubstituierte Silylene, Germylene und Stannylene bekannt, allerdings keine Plumbylene. Hier ist das Ziel die Isolierung und Charakterisierung einer solchen Spezies (Schema 2.2, links).



Schema 2.2. Bekanntheit der Strukturen schwerer ylidsubstituierter Tetrylene (Y* = Ylidligand) (links) und Unbekanntheiten in der Struktur-Reaktivitätsbeziehung von Yliden (rechts).

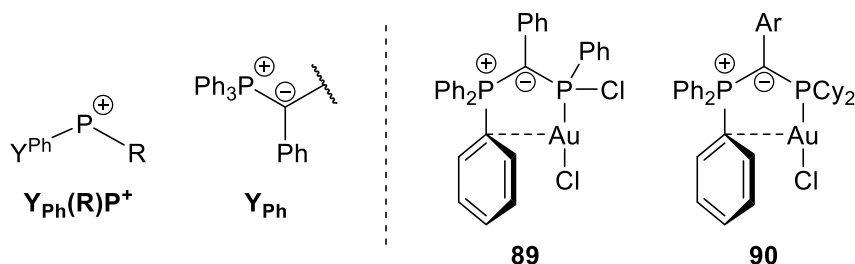
Weiterhin gibt es bisher noch verhältnismäßig wenig^[112] systematische Untersuchungen zu Struktur-Reaktivitäts-Beziehungen von ylidsubstituierten Tetrylenen, wenngleich ihre nicht-ylidsubstituierten Verwandten deutlich mehr untersucht wurden.^[112,113,164–167,168,169] Auch hier können systematische quantenchemische Studien zur Bindungsaktivierung, Ylidübertragung und Dimerisierung weitere Einblicke bringen (Schema 2.2).

Neben der Synthese von ylidsubstituierten Plumbylenen bot es sich auch an, Versuche zur Synthese von weiteren schweren ylidsubstituierten Hauptgruppenelementverbindungen der Gruppen XIII und XV durchzuführen, da diese bisher wenig untersucht wurden. Da sich das Yliid **NaY** bereits in vorherigen Studien als ein geeignetes Mittel zur Einführung von Ylidfunktionalitäten in Hauptgruppenelementverbindungen herausgestellt hat, dürfte es auch hier als geeignetes Reagenz für die Umsetzung mit den entsprechenden Elementtrihalogeniden dienen (Schema 2.3).



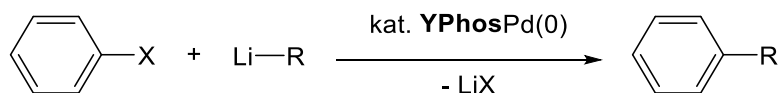
Schema 2.3. Potenzielle Syntheseroute zu ylidsubstituierten schweren Hauptgruppenverbindungen ($\text{E} = \text{Al, Ga, In, As, Sb, Bi}$).

Neben den experimentellen Arbeiten zur Synthese ylidsubstituierter Elemente der Gruppe XV sollte ein weiterer Fokus dieser Arbeit auf dem Einsatz quantenchemischer Studien zur Analyse der Struktur und Reaktivität von ylidsubstituierten Pentelen liegen. So sollten in einem weiteren Teilprojekt die elektronische Struktur von neuartigen, kürzlich isolierten ylidstabilisierten Phospheniumionen^[170] untersucht werden (Schema 2.4). Ein Fokus sollte dabei auf dem Einfluss der Substituenten auf die Donoreigenschaften liegen.



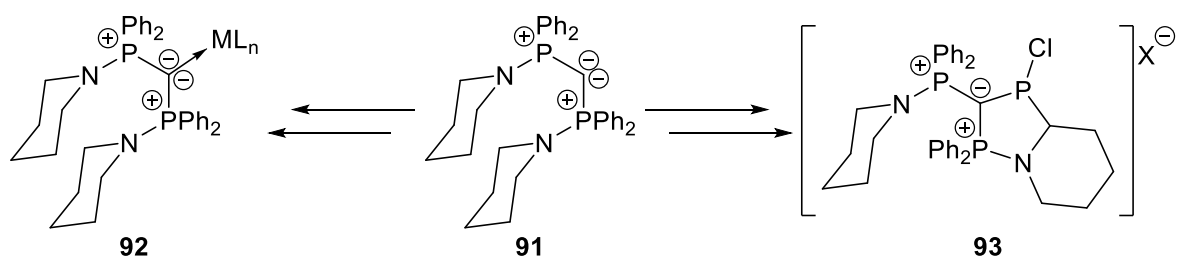
Schema 2.4. Die neuartigen ylidsubstituierten Phospheniumkationen $\text{Y}^{\text{Ph}}(\text{R})\text{P}^+$ ($\text{R} = \text{Ph}, \text{Cy}$) (links) und die aus diesen resultierenden Goldkomplexe **89** ($\text{X} = \text{tht}, \text{Cl}^-$) und **90** (rechts).

Weiterhin wurden kürzlich die YPhos-substituierten Goldkomplexe **89**^[170] und **90**^[171] isoliert und in der gold(I)katalysierten Hydroaminierung eingesetzt. Dabei zeigte sich, dass die Verbindungen **89** kaum katalytisch aktiv waren, während die Komplexe **90** zu höheren Umsätzen führten.^[170,171] Dies könnte unter anderem auf unterschiedlich starke Gold–Aren-Wechselwirkungen zurückzuführen sein. Diese Struktur-Reaktivitäts-Beziehungen sollten im Rahmen dieser Arbeit mittels quantenchemischer Methoden weiter untersucht werden (Schema 2.5). Überdies konnten YPhos-Liganden kürzlich erfolgreich in der MURAHASHI-FERINGA-Kupplung^[172,173] eingesetzt werden. Dabei zeigten Experimente deutlich vom jeweils eingesetzten YPhos-Liganden abhängige Isomerisierungstendenzen für verschiedene eingesetzte Alkylgruppen. Um diese besser zu verstehen, sollten die entsprechenden Kernaspekte des Katalysezyklus und Ihre Abhängigkeit von dem Ligandensystem und dem eingesetzten Alkyl quantenchemisch untersucht werden.



Schema 2.5. Schematische Darstellung eines YPhos–AuCl-Komplexes ($\text{Ar} = \text{Aryl}$) (links) und einer durch einen YPhos–Palladium(0)-Komplex katalysierten MURAHASHI-FERINGA-Kupplung ($\text{R} = \text{Alkyl}$; $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) (rechts).

Zu guter Letzt konnte in der Arbeitsgruppe GESSNER kürzlich ein neues Carbodiphosphoran **91** isoliert werden, das interessante Strukturen in Metallkomplexen **92** zeigte, die auf besonders starke Donoreigenschaften schließen lassen (Schema 2.6).^[174,175] Diese Ergebnisse sollten quantenchemisch validiert werden. Weiterhin konnte das Carbodiphosphoran **91** unter $\text{C}_{\text{sp}^3}\text{--H}$ -Aktivierung zum Bicyclus **93** umgesetzt werden. Das ist ungewöhnlich, da bisher insbesondere $\text{C}_{\text{sp}^2}\text{--H}$ -Aktivierungen bekannt sind, die zumindest theoretisch auch möglich wären. Zur Aufklärung dieses Sachverhalts sollten die möglichen Reaktionsmechanismen quantenchemisch untersucht werden.



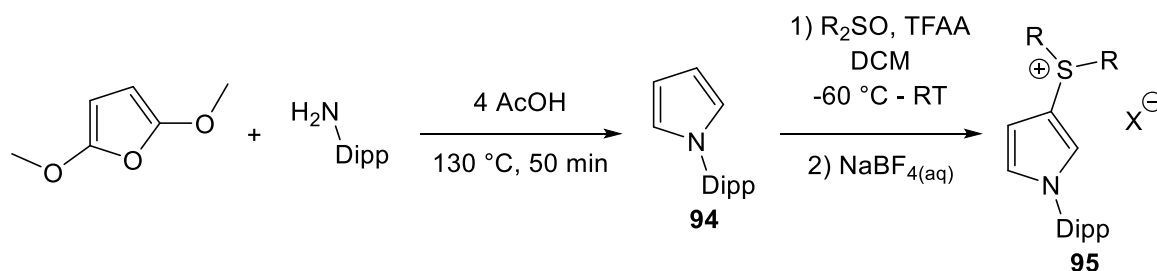
Schema 2.6. Reaktivität des Carbodiphosphorans **81**.

3 Ergebnisse

3.1 Amino(ylid)stabilisierte Carbene

3.1.1 Studien zur Synthese und Stabilität von alkylsubstituierten AYCs^a

Erstes Ziel dieser Arbeit war die Synthese von amino(ylid)stabilisierten Carbenen. Da sich in bisherigen Studien insbesondere die Bindungen zu den Arylsubstituenten der Oniumgruppe als labil erwiesen haben, bietet sich hier der Einsatz von Alkylgruppen an. Da sich weiterhin das Pyrrol **94** in anderen Studien bereits als geeignetes Startmaterial herausgestellt hatte,^[100] sollte es auch hier zum Einsatz kommen und wurde nach einer Literaturvorschrift synthetisiert.^[176] Zusätzlich war es möglich von diesem erstmals zur Röntgenstrukturanalyse geeignete Einkristalle zu erhalten (Abbildung 3.1). Dieses Pyrrol sollte im Anschluss analog zu Synthesen von KAWASHIMA et al.^[98] und FÜRSTNER et al.^[99] mit den entsprechenden Sulfoxiden und Trifluoressigsäureanhydrid (TFAA) gefolgt von einem Ionenaustausch mit Natriumtetrafluoroborat zu den entsprechenden Sulfoniumsalzen **95** umgesetzt werden (Schema 3.1).



Schema 3.1. Synthese der Sulfoniumsalze **95a** (R = *t*Bu, X = BF₄, 0 %), **95b** (R = Cy, X = H₂O•F₃CCOO, 8 %) und **95c** (R = Me, X = BF₄, 58 %).

Zunächst wurde auf diese Weise versucht, das *tert*-butylsubstituierte Sulfoniumsalz **95a** zu synthetisieren (Schema 3.1). Hierbei kam es zunächst zu einer tiefen Blaufärbung der Reaktionslösung, allerdings nicht zu einer Reaktion des Pyrrols **94**. Der Grund hierfür ist wahrscheinlich ein zu hoher sterischer Anspruch des benötigten Di-*tert*-butylsulfoxids.

Daher sollte dieser als nächstes durch Verwendung von Dicyclohexylsulfoxid gesenkt werden (Schema 3.1). Das Produkt der Reaktion konnte in Form eines farblosen Feststoffs isoliert werden. Bei diesem lassen ¹H und ¹³C{¹H} NMR-spektroskopische Experimente den Schluss einer erfolgreichen Einführung einer Sulfoniumgruppe in 3-Position am Pyrrol zu. Allerdings scheint bei dieser cyclohexylsubstituierten Spezies **95b** der Anionenaustausch nicht möglich zu sein. So wurden sowohl im ¹¹B{¹H} als auch im ¹⁹F{¹H} NMR-Spektrum nicht die erwarteten Signale eines Tetrafluoroboratanions erhalten. Stattdessen waren im ¹¹B{¹H} NMR-Spektrum keine Signale, im ¹⁹F{¹H} NMR-hingegen ein Singulett bei $\delta_F = -75.0$ ppm sichtbar, was

^a In Teilen wiedergegeben mit der Erlaubnis von H. Steinert, C. Schwarz, A. Kroll, V. H. Gessner, *Molecules* **2020**, 25, 796. Veröffentlicht durch MDPI. Copyright © 2020 CC-BY 4.0 bei den Autoren.

charakteristisch für eine Trifluoracetatgruppe ist.^[177] Zusätzlich ist im ^1H NMR-Spektrum ein breites Signal von $\delta_{\text{H}} = 2.51\text{--}3.15$ ppm zu erkennen, welches auf eine stöchiometrische Menge Wasser zurückführbar ist. Entsprechend ist im Infrarotspektrum der Verbindung ein breites Signal bei 3400 cm^{-1} zu erkennen. Auch die Elementaranalyse deutet darauf hin, dass das cyclohexylsubstituierte Sulfoniumsalz als H_2O -Addukt mit Trifluoracetat als Gegenion vorliegt. Zur zusätzlichen Bestätigung war es möglich, für eine Röntgenstrukturanalyse geeignete Einkristalle zu erhalten (Abbildung 3.1).

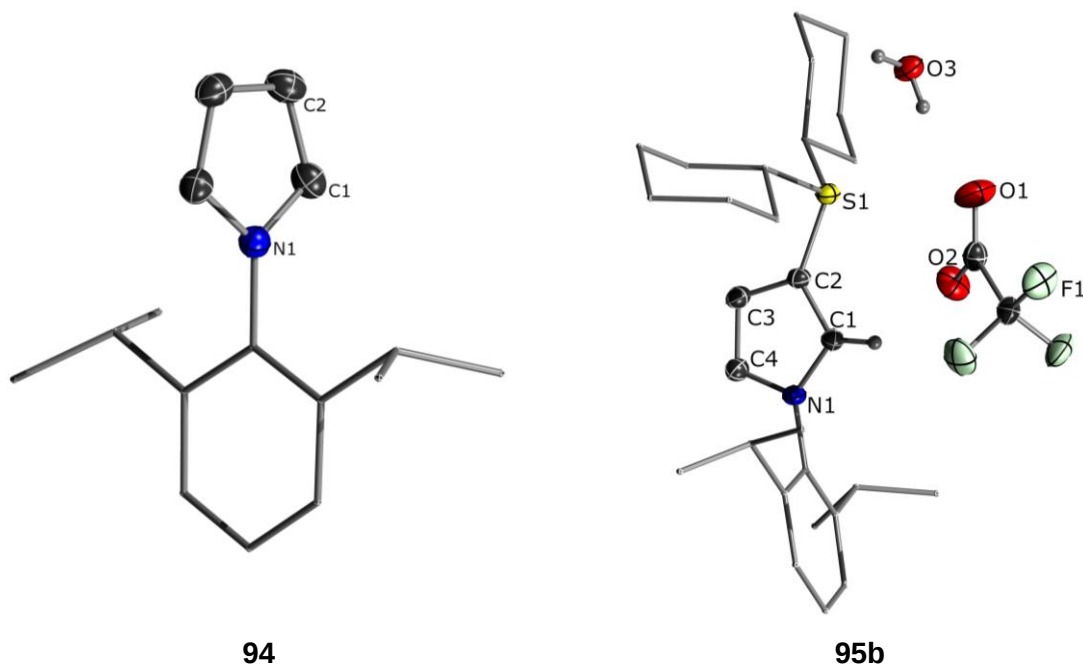
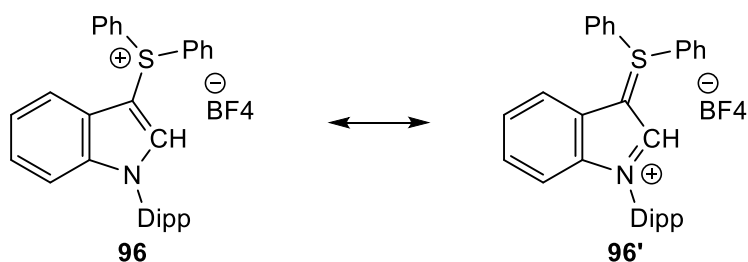


Abbildung 3.1. Molekülstrukturen von **84** und **85b** im Kristall. Darstellung der thermischen Auslenkungsellipsoide mit 50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Ein Großteil der Wasserstoffatome ist zu Gunsten einer besseren Übersichtlichkeit nicht abgebildet. Ausgewählte Bindungslängen [Å]: **95**: N1–C1 1.374(2), C1–C2 1.370(2); **95b**: S1–C2 1.7459(11), N1–C1 1.3622(15), C1–C2 1.3797(16), O1–O3 2.8002(15).

Zunächst wird analog zu den Arbeiten von FÜRSTNER et al.^[99] in der Molekülstruktur im Kristall eine Verkürzung der N1–C1-Bindung auf 1.36 Å im Vergleich zum unsubstituierten Pyrrol **94** (1.37 Å), deutlich. Ebenso kommt es, zu einer Verlängerung der C1–C2-Bindung von 1.37 Å auf 1.38 Å . Die damit einhergehende Ladungsdelokalisation von der Sulfoniumeinheit in den Heterocyclen fällt allerdings nicht so stark aus wie im von FÜRSTNER et al.^[99] untersuchten vergleichbaren diphenylsulfoniumsubstituierten Indol **96** (Schema 3.2). Dies spiegelt sich auch in der mit 1.75 Å im Vergleich zu der S–C-Bindung von 1.73 Å in **96** längeren S1–C2-Bindung in **95b** wider, sodass eine zu **96'** analoge mesomere Struktur wohl weniger vorliegt.



Schema 3.2. Das von FÜRSTNER et al. untersuchte Sulfoniumsalz **96** und die dazugehörige mesomere Form **96'**.^[99]

Da es durch den Einschluss des Wassers und das Trifluoracetatanion zu Schwierigkeiten bei der Synthese eines AYCs aus **95b** kommen könnte, wurde noch ein drittes, methylysubstituiertes Sulfoniumsalz **95c** synthetisiert (Schema 3.1). Dieses konnte ebenfalls in Form eines farblosen Feststoffs isoliert werden und weist zum einen die für Tetrafluoroboratanionen charakteristischen Signale in den $^{11}\text{B}\{^1\text{H}\}$ und $^{19}\text{F}\{^1\text{H}\}$ NMR-spektroskopischen Experimenten auf. Außerdem zeichnet es sich im ^1H NMR-Spektrum durch ein Singulett mit einer chemischen Verschiebung von $\delta_{\text{H}} = 1.13$ ppm aus. Die $^1J_{\text{CH}}$ -Kopplungskonstante des Carbenprecursorkohlenstoffatoms deutet mit 194.0 Hz weiterhin darauf hin, dass das aus **95c** resultierende Carben **97** einen stärkeren Donorcharakter haben sollte als typische NHCs und dieser damit eher mit der Donorstärke von CAACs vergleichbar ist.^[178]

Zusätzlich war es auch hier möglich von der Verbindung **95c** zur Röntgenstrukturanalyse geeignete Einkristalle zu erhalten (Abbildung 3.2).

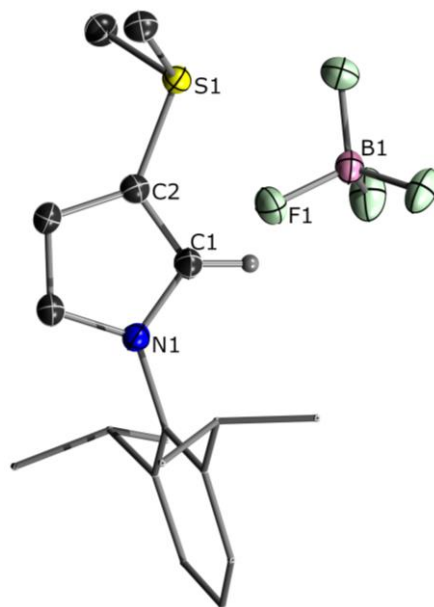
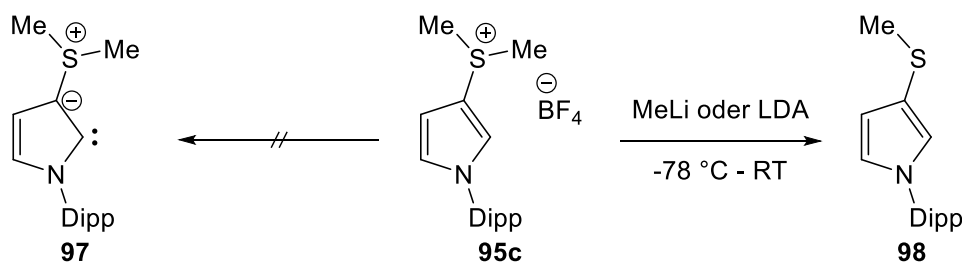


Abbildung 3.2. Molekülstruktur von **95c** im Kristall. Darstellung der thermischen Auslenkungsellipsoide mit 50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Ein Großteil der Wasserstoffatome ist zu Gunsten einer besseren Übersichtlichkeit nicht abgebildet. Ausgewählte Bindungslängen [Å]: S1–C2 1.7475(13), N1–C1 1.3622(16), C1–C2 1.3764(17).

Deutlich wird analog zum cyclohexylsubstituierten Sulfoniumsalz **95b** und relativ zum unsubstituierten Pyrrol **94** eine Verkürzung des N1–C1-Abstands von 1.37 Å in **94** auf 1.36 Å

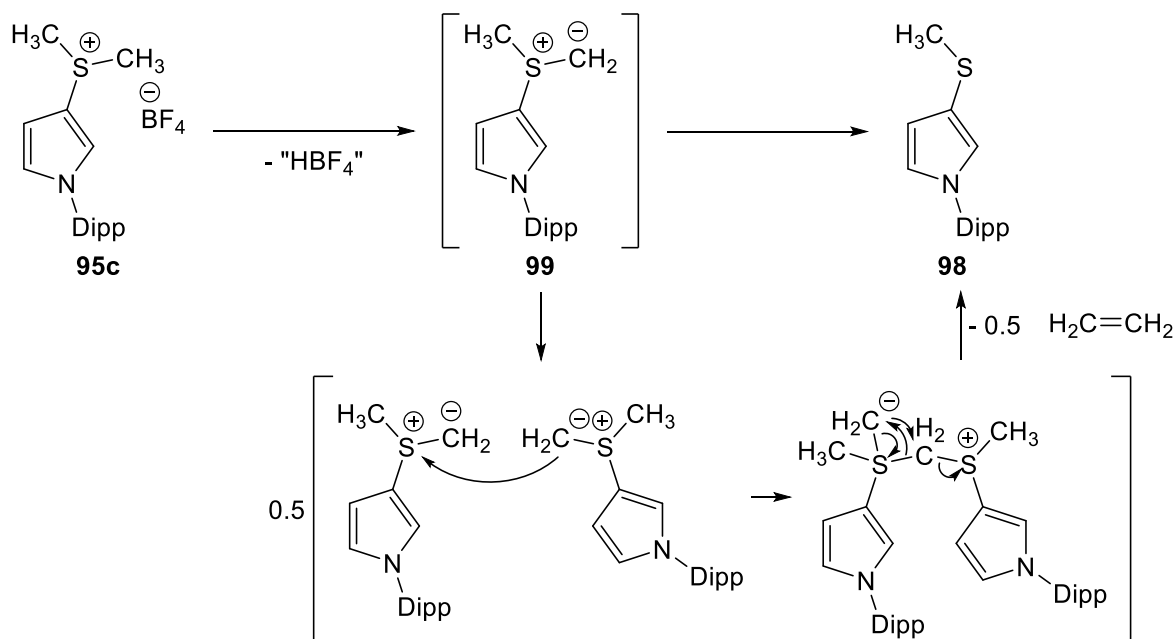
in **95c** und eine Verlängerung der C1–C2-Bindung von 1.37 Å auf 1.38 Å. Weiterhin ist die S1–C2-Bindung in **95c** im Vergleich zur Verbindung **95b** etwas kürzer.

Nach der erfolgreichen Synthese des methylsubstituierten Sulfoniumsalzes **95c** sollte dieses zum korrespondierenden AYC **97** umgesetzt werden (Schema 3.3). Die entsprechende Reaktion mit Methyllithium (MeLi) oder Lithiumdiisopropylamin (LDA) bei tiefen Temperaturen führte zur Bildung einer luftstabilen neuen Spezies **98**, die als farbloses Öl isoliert werden konnte und im ^1H NMR-Spektrum ein charakteristisches Signal bei $\delta_{\text{H}} = 2.22$ ppm einer einzelnen Methylgruppe sowie drei charakteristische Pyrrolsignale zeigt. Das deutet darauf hin, dass nicht das erwartete AYC **97**, sondern das Sulfid **98** entstanden ist.



Schema 3.3. Deprotonierung des Sulfoniumsalzes **95c**.

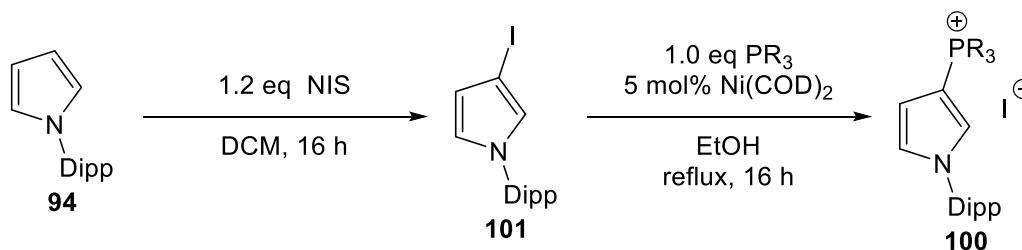
Der Grund für die Bildung dieses Sulfids **98** könnte darin liegen, dass zunächst eine Methylgruppe deprotoniert wird, sodass das Ylid **99** entsteht. Infolgedessen könnte es sich in Art einer COREY-JOHNSON-CHAYKOVSKY-Reaktion selbst angreifen und unter Ethenabspaltung das Sulfid bilden (Schema 3.4).



Schema 3.4. Vorgeschlagener Mechanismus für die Bildung von **98** durch Deprotonierung von **95c**.

In situ NMR-Experimente der Reaktion zeigen im ^1H NMR-Spektrum ein Singulett bei $\delta_{\text{H}} = 5.35$ ppm sowie ein Signal bei $\delta_{\text{C}} = 123.1$ ppm im $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR-Spektrum. Beide Signale sind charakteristisch für Ethen^[179] und bestätigen den angenommenen Mechanismus.

Aufgrund der unvorteilhaften Reaktivität der Sulfoniumverbindungen sollte daher in einem nächsten Schritt das cyclohexylsubstituierte Phosphoniumsalz **100a** synthetisiert werden. Dazu wurde das Pyrrol **94** zunächst mittels *N*-Iodsuccinimid iodiert. Das resultierende 3-Iodopyrrol **101** konnte als 2/3-Regioisomerengemisch in Form eines farbloses Öls isoliert und vollständig charakterisiert werden und wurde anschließend, analog zu Synthesen von BERTRAND et al.,^[100] nickelkatalysiert zum gewünschten Phosphoniumsalz **100a** umgesetzt (Schema 3.5), welches als farbloser Feststoff isoliert und vollständig charakterisiert wurde.



Schema 3.5. Synthese der Phosphoniumsalze **100a** (R = Cy) und **100b** (R = *t*Bu).

Die Verbindung **100a** weist ein charakteristisches Signal bei $\delta_{\text{P}} = 26.1$ ppm im $^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$ NMR-Spektrum sowie für das Carbenprecursorkohlenstoffatom ein Multiplett bei $\delta_{\text{H}} = 7.23$ - 7.26 ppm im ^1H NMR-Spektrum auf. Zur Einschätzung der Donorstärke des resultierenden Carbens **102** wurde außerdem die $^1J_{\text{CH}}$ -Kopplungskonstante bestimmt.^[178] Diese deutet mit 189.2 Hz auf einen stärkeren σ -Donor-Charakter hin als im Carben **97**.

Zusätzlich war es möglich von der Verbindung **100a** für eine Röntgenstrukturanalyse geeignete Einkristalle zu erhalten (Abbildung 3.3).

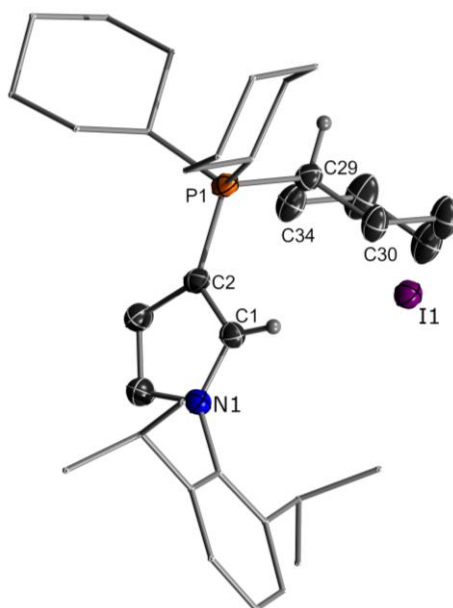
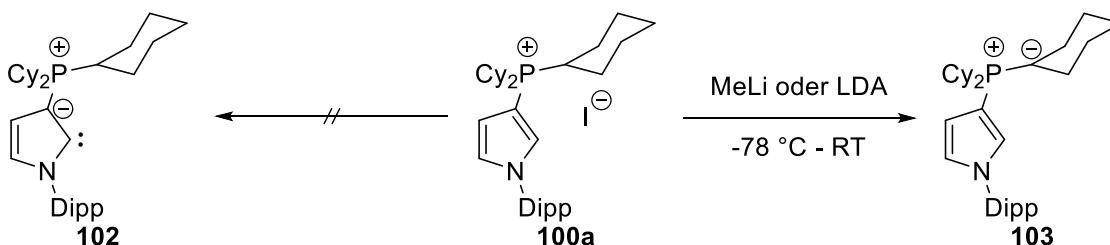


Abbildung 3.3. Molekülstruktur von **100a** im Kristall. Darstellung der thermischen Auslenkungsellipsoide mit 50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Ein Großteil der Wasserstoffatome ist zu Gunsten einer besseren Übersichtlichkeit nicht abgebildet. Ausgewählte Bindungslängen [Å] und -winkel [°]: P1–C2 1.765(3), P1–C29 1.830(3), N1–C1 1.358(4), C1–C2 1.386(4), P1–C29–C30 110.9(2), P1–C29–C34 111.1(2), C30–C29–C34 110.0(2).

Auch in diesem Phosphoniumsalz **100a** kommt es analog zu den Sulfoniumsalzen **95b** und **95c** und im Vergleich zum unsubstituierten Pyrrol **94** zu einer Verkürzung der N1–C1-Bindung auf 1.36 Å. Gleichfalls verlängert sich die C1–C2-Bindung auf 1.39 Å und ist damit etwas länger als die vergleichbare Bindung in den Sulfoniumsalzen **95b** und **95c**.

Eine analoge Umsetzung des 3-Iodopyrrols mit Tri-*tert*-butylphosphan zu einem *tert*-butylsubstituierten Phosphoniumsalz **100b** stellte sich wiederum aufgrund des zu hohen sterischen Anspruchs als nicht möglich heraus.

Nach der erfolgreichen Synthese des Phosphoniumsalzes **100a** sollte dieses zum AYC **102** deprotoniert werden. Dabei zeigte sich allerdings, dass bei tiefen Temperaturen und sowohl mit Methyllithium als auch der sterisch anspruchsvolleren Base Lithiumdiisopropylamin nicht das gewünschte Produkt entsteht (Schema 3.6).



Schema 3.6. Deprotonierung des Phosphoniumsalzes **100a**.

Das neue Produkt, welches als farbloser Feststoff isoliert werden konnte, weist dabei ein charakteristisches, hochfeldverschobenes Signal im $^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$ NMR-Spektrum mit einer

chemischen Verschiebung von $\delta_P = 6.6$ ppm auf. Weiterhin zeigte sich, dass drei Protonen mit für derartig substituierte Pyrrole charakteristischen Verschiebungen vorhanden waren. Im Gegensatz dazu konnte mit einer chemischen Verschiebung von $\delta_C = 12.0$ ppm im $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR-Spektrum ein Duplett mit einer Kopplungskonstante von 125.0 Hz ausgemacht werden. Das spricht für das Entstehen des Ylids **103** (Schema 3.6). Diese Annahme wird zusätzlich durch $^1\text{H}^{13}\text{C}$ NMR-Korrelationsspektren unterstützt.

Zusätzlich war es möglich von der Verbindung **103** zur Röntgenstrukturanalyse geeignete Einkristalle zu erhalten (Abbildung 3.4).

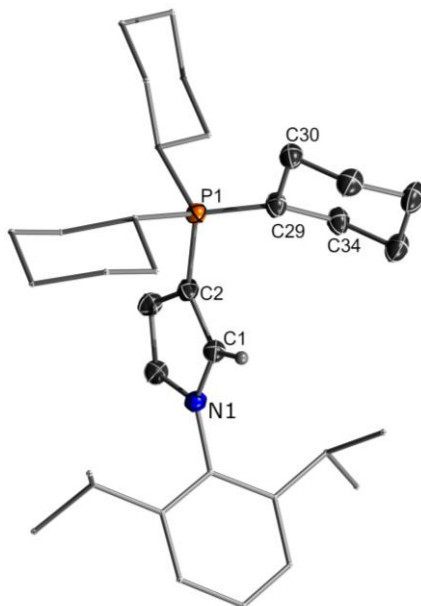


Abbildung 3.4. Molekülstruktur von **103** im Kristall. Darstellung der thermischen Auslenkungsellipsoide mit 50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Ein Großteil der Wasserstoffatome ist zu Gunsten einer besseren Übersichtlichkeit nicht abgebildet. Ausgewählte Bindungslängen [Å] und -winkel [°]: P1–C2 1.7900(13), P1–C29 1.6785(14), N1–C1 1.3645(16), C1–C2 1.3791(18), P1–C–C29–C30 122.20(10), P1–C29–C34 120.68(10), C30–C29–C34 113.02(10).

Die Molekülstruktur im Kristall zeigt, im Vergleich zum Phosphoniumsalz **100a**, eine Verkürzung der C1–C2-Bindung auf 1.38 Å und eine Verlängerung der P1–C2-Bindung auf 1.68 Å. Zusätzlich wird der P1–C29-Abstand mit nun 1.68 Å deutlich kleiner und die Koordinationsumgebung um C29 planar. So beträgt die Winkelsumme in **103** um C29 nun 355.9°, was einer, für Ylide zu erwartenden, sp^2 -Hybridisierung entspricht. Die Summe der entsprechenden Winkel in **100a** betrug im Vergleich dazu lediglich 332.0°.

Da sich herausgestellt hatte, dass das methylsubstituierte Sulfoniumsalz **95c** durch gängige Basen zunächst an den Methylgruppen und auch das cyclohexylsubstituierte Phosphoniumsalz **100** zunächst in α -Position zum Phosphor deprotoniert wurde, wurde als nächstes quantenchemisch auf PBE0/def2svp//PBE0/def2tzvp-Niveau untersucht, ob es möglich ist, stabile AYCs zu synthetisieren, oder ob die Deprotonierung an anderen Stellen im Molekül immer zu stabileren Produkten führt. Außerdem war von Interesse, ob es, im Falle einer

erfolgreichen Deprotonierung des Pyrrols, im resultierenden Molekül zu einem intra-molekularen Protonenshift kommen kann.

Zunächst zeigte sich, was das Experiment bereits erahnen ließ. So ist im Vergleich zu einem cyclohexylsubstituierten Phosphonium-AYC **I** (Oniumgruppe = PCy_3 = **102**) das korrespondierende Ylid **II** (Oniumgruppe = PCy_3 = **103**) thermodynamisch günstiger. Außerdem stellte sich heraus, dass ein Shift des α -Protons eine Barriere $\text{TS}_{\text{I} \rightarrow \text{II}}$ von nur 58 kJ/mol aufweist (Abbildung 3.5). Die Reaktion läuft damit auch problemlos bei Temperaturen weit unter Raumtemperatur ab. Das bestätigt zusätzlich, warum eine Isolation des AYCs **102** nicht möglich war und stattdessen selektiv das Ylid **103** gebildet wird.

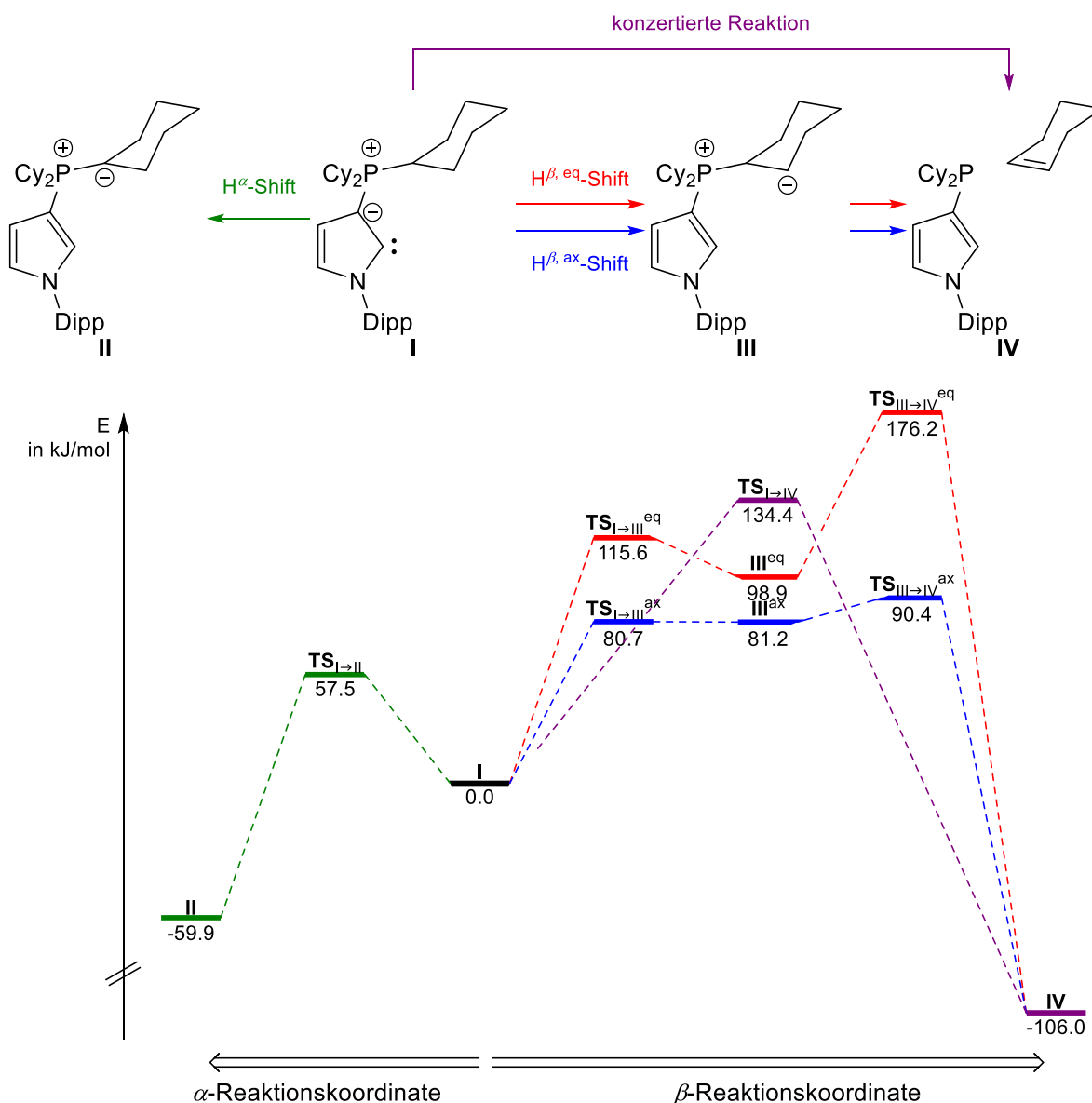


Abbildung 3.5. Verschiedene Zersetzungswege eines PCy_3 substituierten AYCs. Die Energien sind relativ zum AYC **I**.

Weiterhin wurden drei Reaktionspfade der Zersetzung des AYCs, die einen Shift des Protons in β -Position des Cyclohexylsubstituenten beinhalten, untersucht. Dabei könnte sowohl das

axiale als auch das äquatoriale β -Proton zum Carbenkohlenstoff shiften, was zu den Zwitterionen **III^{ax}** und **III^{eq}** führt (Abbildung 3.5). Beide Spezies stellen sich allerdings verglichen mit dem AYC **I** als thermodynamisch ungünstiger heraus. Dennoch ist es möglich, dass aus diesen Produkten Cyclohexen eliminiert wird. Das resultierende Eliminierungsprodukt **IV** stellt sich dabei verglichen mit dem AYC **I** und dem Ylid **II** als thermodynamisch deutlich begünstigt heraus. Nichtsdestotrotz sind sowohl die Barrieren **TS_{I→III^{ax}}** und **TS_{I→III^{eq}}** zu den Spezies **III^{ax}** und **III^{eq}** gegenüber der Deprotonierung in α -Position **TS_{I→II}** kinetisch deutlich benachteiligt. Dasselbe trifft auf die Barrieren **TS_{III→IV^{ax}}** und **TS_{III→IV^{eq}}** zum Eliminierungsprodukt **IV** zu. Der dritte untersuchte Reaktionspfad ist ein Protonenshift des β -Protons mit konzertierter Eliminierung des Cyclohexens. Allerdings ist hier die Barriere **TS_{I→IV}** kinetisch nochmals deutlich ungünstiger (Abbildung 3.5).

Als nächstes wurden die Zersetzungswege weiterer AYCs mit verschiedenen Oniumgruppen untersucht (Tabelle 3.1). Bei cyclohexylsulfonium- und -sulfoxoniumsubstituierten AYCs bot sich dabei das gleiche Bild wie beim oben diskutierten Phosphoniumanalogon.

Auch bei sämtlichen methylsubstituierten AYCs **I** stellte sich heraus, dass die korrespondierenden Ylide **II** thermodynamisch deutlich stabiler sind. Auch hier ist die entsprechende Barriere für den Protonenshift **TS_{I→II}** analog zu den cyclohexylsubstituierten Spezies niedrig genug, dass die Reaktion bei Raumtemperatur ablaufen kann. Diese Daten stimmen damit ebenfalls sehr gut mit den experimentellen Beobachtungen überein.

Tabelle 3.1. Vergleich des Protonenshifts von der α - und β -Position der Oniumgruppe zum Carbenkohlenstoffatom. Die Energien sind relativ zum jeweiligen AYC I.

α -Deprotonierung		Oniumgruppe	β -Deprotonierung			
II [kJ/mol]	TS_{I→II} [kJ/mol]		TS_{I→III} [kJ/mol]	III [kJ/mol]	TS_{III→IV} [kJ/mol]	IV [kJ/mol]
-61.4	44.1	SCy ₂	66.9 (konzertiert)			-239.9
-61.7	50.6	SOCy ₂	102.7 (konzertiert) 100.1 ^{eq}	107.4 ^{eq}	119.1 ^{eq}	-203.5
-59.9	57.5	PCy ₃	134.4 (konzertiert) 115.6 ^{eq} 80.7 ^{ax}	98.9 ^{eq} 81.2 ^{ax}	176.2 ^{eq} 90.4 ^{ax}	-106.0
-52.2	54.8	SMe ₂	–			
-85.0	60.3	SOMe ₂	–			
-53.9	56.5	PMe ₃	–			
–		S ^t Bu ₂	54.0 (konzertiert)			-236.3
–		SO ^t Bu ₂	35.9 (konzertiert)			-248.0
–		P ^t Bu ₃	71.1	40.9	58.5	-185.5
–		SAd ₂	123.7 (konzertiert)			-8.3
–		SOAd ₂	102.4 (konzertiert)			7.4
–		PAd ₃	91.6	91.2	108.4	47.1
–		S(CH ₂) ₂	38.0 ^b	-48.6 ^b	-40.4 ^b	-275.0
-11.9	65.5	S(CH ₂) ₃	105.0	75.4	83.0	-238.8
-33.6	56.7	S(CH ₂) ₄	90.5 (konzertiert)			-180.0

Um eine Deprotonierung in α -Position zu verhindern, wurden als nächste Substituenten ohne α -Protonen untersucht, zunächst mit *tert*-Butylsubstitution. Dabei zeigte sich, dass das Eliminierungsprodukt **IV** in allen Fällen und analog zu den Beobachtungen bei Cyclohexylsubstitution gegenüber den korrespondierenden AYCs **I** thermodynamisch deutlich bevorzugt ist. Allerdings stellte sich ebenfalls heraus, dass die jeweiligen konzertierten Mechanismen im Falle von Sulfonium- und Sulfoxoniumsubstitution sowie der Mechanismus über das Zwitterion **III** im Falle einer Phosphoniumsubstitution kinetisch deutlich günstiger sind als im

^b Es muss beachtet werden, dass die Deprotonierung in diesen Fällen automatisch in α -Position stattfindet. Deshalb sind die jeweiligen Energien hier deutlich niedriger als üblicherweise für eine β -Deprotonierung beobachtet.

cyclohexylsubstituierten Fall. Diese Barrieren sind dabei niedrig genug, dass diese Reaktionen bei Raumtemperatur und bei tiefen Temperaturen stattfinden würden.

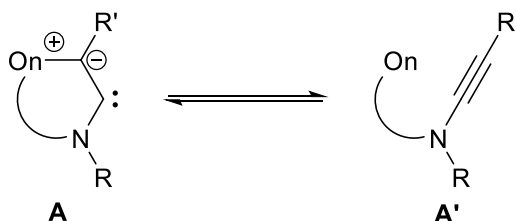
Um das zu verhindern, wurden in einem weiteren Schritt Adamantylgruppen eingeführt. Durch die Käfigstruktur sollte dabei die in β -Position deprotonierte Spezies entsprechend destabilisiert werden. Dabei stellte sich heraus, dass das Eliminierungsprodukt **IV** im Falle von Sulfoxonium- und Phosphoniumsubstitution thermodynamisch ungünstiger ist als das korrespondierende AYC **I**. Damit ergibt sich eine Adamantylsubstitution als möglicher Weg zur Synthese von stabilen AYCs.

Zuletzt wurde noch untersucht, ob die Käfigstruktur relevant ist oder eine einfache cyclische Struktur reicht, indem S-Heterocyclen als Sulfoniumgruppe eingeführt wurden. Hierbei ergab sich allerdings, dass – analog zu anderen oben beschriebenen Spezies – das korrespondierende Ylid **II** sowie das korrespondierende Alken **IV** gegenüber dem AYC **I** thermodynamisch begünstigt sind. Zusammen mit den entsprechenden Barrieren, die bei Raumtemperatur einfach überwunden werden können, werden derartige Carbene also instabil sein.

Abschließend lässt sich somit sagen, dass insbesondere eine Adamantylsubstitution einer Sulfoxonium- oder Phosphoniumgruppe vielversprechend ist, um stabile AYCs zu generieren.

3.1.2 Studien zur Stabilität endocyclischer AYCs

Da die bisher untersuchten Wege zur Synthese von stabilen AYCs nicht erfolgreich waren und sich insbesondere intramolekulare α - oder β -CH-Aktivierungen als Hindernis erwiesen, wurde als nächstes die Stabilität von AYCs mit endocyclischen Oniumgruppen **A** untersucht. Durch eine ungeeignete Geometrie sollten in diesen die Substituenten der Oniumgruppe gegenüber dem Carbenkohlenstoffatom unreaktiv sein. Allerdings könnte es zur Ringöffnung zu den korrespondierenden Alkinen **A'** kommen (Schema 3.7).



Schema 3.7. Die untersuchten Ringöffnungsreaktionen vom AYC **A** zum Alkin **A'**.

Als erstes wurde diese Reaktion für die sulfoniumsubstituierten Systeme **S1**, **S2**, **S3** und **S4** quantenchemisch auf PW6B95D3/def2svp//PW6B95D3/def2tzvp-Niveau untersucht (Abbildung 3.6).

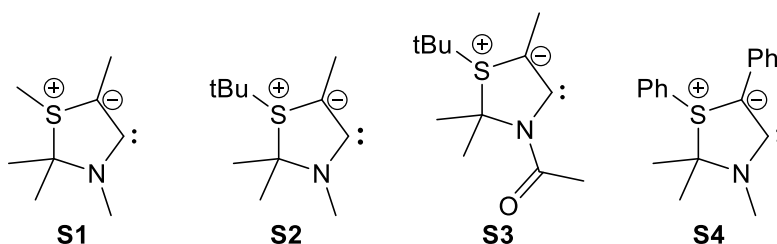


Abbildung 3.6. Die untersuchten sulfoniumsubstituierten endocyclischen Systeme **S1**, **S2**, **S3** und **S4**.

Hier konnte für die Systeme **S1** und **S2** kein lokales Minimum gefunden werden und sämtliche Strukturoptimierungen resultierten in den korrespondierenden Alkinen **S1'** und **S2'**. Im Gegensatz dazu konnten für **S3** und **S4** lokale Minima gefunden werden. Grund für die erhöhte Stabilität ist im Fall von **S3** wahrscheinlich die Acylgruppe. Im Fall von **S4** liegt die ans ylidische Kohlenstoffatom gebundene Phenylgruppe in einer Ebene mit dem 5-Ring. Hier tragen somit wahrscheinlich π -Wechselwirkungen zur Stabilität bei. Allerdings stellten sich in beiden Fällen die korrespondierenden Alkine **S3'** und **S4'** mit einer Energiedifferenz von -90.9 beziehungsweise -105.3 kJ/mol als thermodynamisch deutlich stabiler als die AYCs heraus. Weiterhin liegen die Barrieren für die Ringöffnung bei 2.6 kJ/mol für **S3** beziehungsweise 4.8 kJ/mol für **S4**. Somit ist die Ringöffnung kinetisch sehr leicht zugänglich und dürfte in experimentellen Untersuchungen von AYCs mit endocyclischen Oniumgruppen kaum zu unterdrücken sein.

Eine höhere Stabilität könnten allerdings AYCs mit endocyclischen Phosphoniumgruppen aufweisen, da Phosphane schlechtere Abgangsgruppen als Sulfide sein sollten.^[41] Daher wurden als nächstes die Strukturen **P1** bis **P3** optimiert (Tabelle 3.2). Während das System **P1** lediglich methylsubstituiert ist, wurden bei **P2** Phenylgruppen am ylidischen Kohlenstoffatom und dem Phosphoratom eingeführt, da sich bereits bei den verwandten sulfoniumsubstituierten Verbindungen gezeigt hatte, dass das phenylsubstituierte System **S4** stabiler ist. Weiterhin wurde mit **P3** ein sechsgliedriges System eingeführt. Im Vergleich zu den Fünfringen sollte hier die geringste Ringspannung vorliegen, wodurch die Ringöffnung weniger favorisiert sein könnte.

Im Gegensatz zu den untersuchten sulfoniumsubstituierten Verbindungen konnten hier in allen Fällen lokale Minima für die AYCs gefunden werden. Weiterhin stellten sich die Alkine in diesem Vergleich als thermodynamisch deutlich weniger günstig heraus bei gleichzeitig deutlich höheren Reaktionsbarrieren. Weiterhin wiederholt sich die Beobachtung, dass Phenylgruppen die Stabilität leicht erhöhen. So ist das korrespondierende Alkin **P1'** 29.8 kJ/mol günstiger als **P1**, **P2'** hingegen nur 4.9 kJ/mol im Vergleich zu **P2**. Auch die Reaktionsbarriere liegt mit 62.2 kJ/mol bei **P2** höher als die 53.1 kJ/mol bei **P1**. Zudem bestätigt sich die Annahme, dass eine geringere Ringspannung ein AYC mit endocyclischer

Phosphoniumgruppe stabilisiert. So ist das Alkin **P3'** bei einer Barriere von 56.3 kJ/mol nur 15.2 kJ/mol günstiger als das AYC **P3**.

Tabelle 3.2. Die untersuchten phosphoniumsubstituierten endocyclischen Systeme **P1–P9** und die Energien [kJ/mol] der Barrieren und Produkte für die Ringöffnung relativ zu **P1–P9**.

	AYC	ΔG der Barriere in kJ/mol	ΔG des Produkts in kJ/mol	
	P1	53.1	-29.8	
	P3	62.2	-4.9	
	P5	56.3	-15.2	
	P7	59.2	-37.7	
	P9	52.8	-27.1	
	P11	50.8	-38.1	
	P13	49.4	-53.0	
	P15	56.1	-34.3	
	P17	56.3	-29.7	

Daher wurden als nächstes die phenylsubstituierten Sechsringe **P4–P9** untersucht (Tabelle 3.2). Ziel hierbei war es, Informationen über den Einfluss der Substituenten am ylidischen Kohlenstoffatom zu gewinnen, sowie über den Einfluss der Substitution der Rückgratkohlenstoffatome. Im direkten Vergleich der AYCs **P4** und **P5** ebenso wie **P7** und **P8** sind die korrespondierenden Alkine der dimethylsubstituierten Spezies **P5** mit -27.1 kJ/mol und **P8** mit -34.3 kJ/mol thermodynamisch weniger günstig als in den monomethylsubstituierten Fällen **P4** und **P7** mit -37.7 beziehungsweise -53.0 kJ/mol. Dieser Trend setzt sich beim im Rückgrat dreifach methylsubstituierten AYC **P9** fort. Hier ist das korrespondierende Alkin nur noch um 29.7 kJ/mol günstiger. Während hier also ein recht deutlicher Einfluss vorliegt, ist der Einfluss auf die Reaktionsbarriere weniger deutlich. So sinkt diese zwar im Vergleich von **P4** auf **P5**, im Falle der AYCs **P7**, **P8** und **P9** ist hingegen der gegenteilige Effekt zu beobachten.

Weiterhin zeigt ein Vergleich der Carbene **P4**, **P6**, und **P7**, die sich lediglich durch den Substituenten des ylidischen Kohlenstoffatoms unterscheiden, dass ein Proton dort die Reaktionsbarriere am meisten erhöht. Das kann auf die sterische Abstoßung mit den Substituenten der Phosphoniumgruppe zurückgeführt werden. Gleichzeitig ist das korrespondierende Alkin allerdings thermodynamisch am instabilsten, **P4** selbst somit am stabilsten. Weiterhin scheint die Phenylsubstitution das AYC mehr zu stabilisieren als eine Methylsubstitution. Dies könnte an der coplanaren Anordnung des Arylrings zur N–C^{Carben}–

C^{Ylid} -Ebene (Abbildung 3.7) und einer damit einhergehenden Stabilisierung des π -Systems liegen.

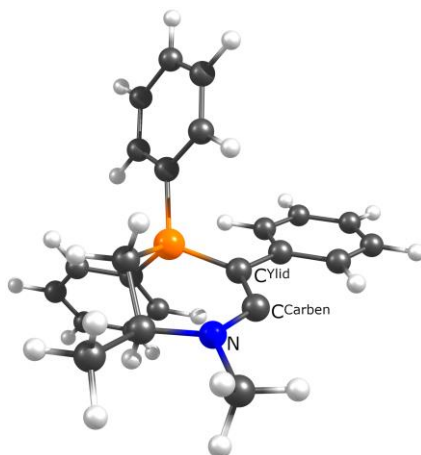


Abbildung 3.7. Optimierte Struktur von **P6**. Gut sichtbar ist die coplanare Anordnung des Phenylsubstituenten am ylidischen Kohlenstoffatom zur der $N-C^{Carben}-C^{Ylid}$ -Ebene.

Mit diesem Wissen wurden in einem nächsten Schritt der Einfluss eines pseudoaromatischen Gesamtsystems auf die Stabilität von AYCs mit endocyclischen Oniumgruppen untersucht. Hierzu wurden zunächst die AYCs **P10-P15** sowie deren korrespondierenden Alkine und die Barrieren zu jenen untersucht (Abbildung 3.8).

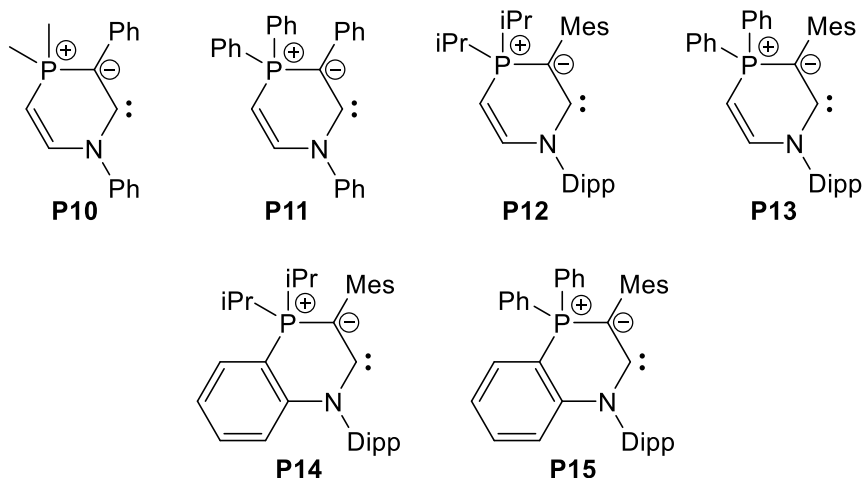


Abbildung 3.8. Die AYCs **P10** bis **P15**.

Um zusätzlich noch den Einfluss der Phosphorsubstitution auf die Stabilität zu untersuchen, wurden hierbei sowohl alkyl- (**P10**, **P12** und **P14**) als auch phenylsubstituierte (**P11**, **P13** und **P15**) Derivate untersucht. In den Spezies **P12-P15** wurden weiterhin größere Arylsubstituenten am ylidischen Kohlenstoff- und dem Stickstoffatom eingeführt. Diese erwiesen sich in bekannten nicht-ylidstabilisierten Carbenen^[68,180] als hilfreich, um eine Dimerisierung zu vermeiden, und sind damit eher synthetisch umsetzbar.

Zunächst stellt sich in diesen Untersuchungen heraus, dass die aus **P10**, **P12** und **P14** resultierenden alkylsubstituierten Alkine **P10'**, **P12'** und **P14'** in allen Fällen thermodynamisch

etwas ungünstiger sind als ihre phenylsubstituierten Analoga **P11'**, **P13'** und **P15'** (Tabelle 3.3). In den meisten Fällen korreliert dies auch mit der dazugehörigen Barriere. Einzige Ausnahme sind hierbei die benzo[*b*][1,4]azaphosphininbasierten Derivate **P14** und **P15**. In diesem Fall liegt die Reaktionsbarriere für **P15** etwa 5 kJ/mol höher als für **P14**. Dies könnte an dem höheren sterischen Anspruch des anellierten Phenylrings im Vergleich zu den Wasserstoffatomen in **P10–P13** liegen.

Tabelle 3.3. Energien der Barrieren und Produkte für die Ringöffnung der AYCs **P10** bis **P15**.

	ΔG der AYC Barriere in kJ/mol	ΔG des Produkts in kJ/mol
P10	58.8	4.5
P11	51.3	-0.5
P12	59.9	5.3
P13	42.8	-19.0
P14	47.2	-16.1
P15	52.7	-31.3

Weiterhin führen die benzanellierten Derivate **P14** und **P15** im Vergleich zu den Derivaten **P10–P13** mit einer einfachen Doppelbindung im Rückgrat zu thermodynamisch günstigeren Produkten. Ein Grund hierfür könnte eine durch die Aromatizität des Phenyls bedingte geringe Pseudoaromatizität des Heterocyclus und damit einhergehende Destabilisierung des jeweiligen AYC sein. Umgekehrt bedeutet das, dass ein hoher pseudoaromatischer Anteil zu verhältnismäßig stabilen AYCs mit endocyclischen Phosphoniumgruppen führt und dementsprechend vielversprechend für synthetische Ansätze zur Isolation derartiger Spezies ist.

Mit **P10'** und **P12'** liegen weiterhin die ersten Alkine vor, die thermodynamisch ungünstiger sind als die genannten zu Grunde liegenden AYCs **P10** und **P12**.

Im Anschluss wurde die Stabilität der cyclischen diylidsubstituierten Carbene **P16** und **P17** mit endocyclischen Phosphoniumgruppen in Bezug auf die Ringöffnung zu den korrespondierenden Alkinen **P16'** und **P17'** untersucht (Abbildung 3.9).

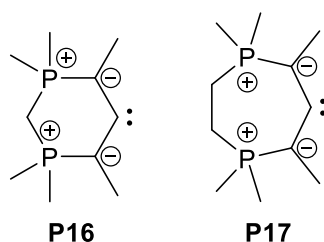
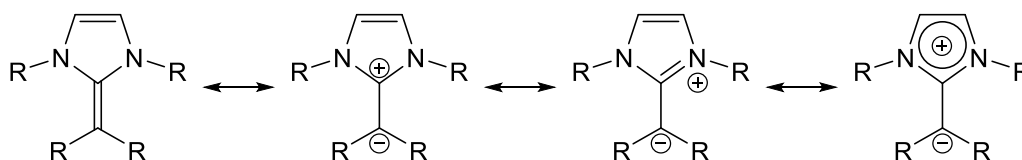


Abbildung 3.9. Die diylidsubstituierten Carbene **P16** und **P17**.

Hierbei stellte sich jedoch heraus, dass die korrespondierenden Alkine **P16'** und **P17'** in beiden Fällen mit einer Energiedifferenz zum Carben von -118.2 beziehungsweise -131.9 kJ/mol deutlich ungünstiger sind. Auch eine kinetische Stabilisierung erscheint aufgrund einer Reaktionsbarriere von 14.3 beziehungsweise 2.5 kJ/mol nicht erreichbar.

In einem letzten Schritt wurden AYCs mit endocyclischen Imidazoliumgruppen untersucht, da diese zumindest formal auch ylidischen Charakter aufweisen können (Schema 3.8)^[63,99] und gleichzeitig C–C-Bindungen deutlich stabiler sind als C–S- oder C–P-Bindungen.^[5]



Schema 3.8. Mesomere Grenzstrukturen von Methylenimidazolen. Der ylidische Charakter wird insbesondere in der zweiten Struktur von links deutlich.^[63,99]

Da sich in den vorherigen Studien sechsgliedrige Carbene als besonders stabil herausgestellt haben, wurde ein Imidazo[1,2-c]pyrimidin-Grundgerüst verwendet. Zum einen in Form der lediglich methylsubstituierten Verbindung **I1** und zum anderen in Form der sterisch deutlich anspruchsvolleren Verbindung **I2** (Abbildung 3.10).

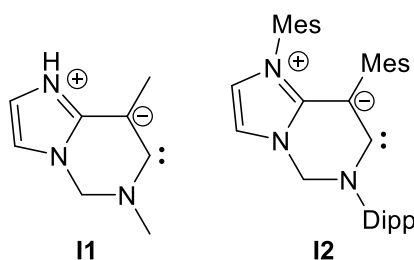
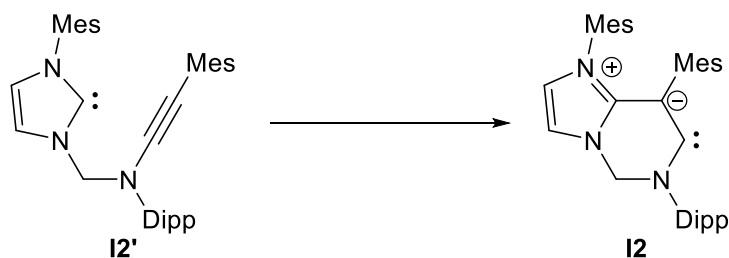


Abbildung 3.10. Die untersuchten imidazoliumsubstituierten AYCs **I1** und **I2**.

Hierbei stellte sich heraus, dass die korrespondierenden Alkine **I1'** und **I2'** mit 66.0 beziehungsweise 59.5 kJ/mol thermodynamisch deutlich ungünstiger sind. Weiterhin liegen die Reaktionsbarrieren für die Ringöffnung mit 160.4 beziehungsweise 143.4 kJ/mol in einer Größenordnung, dass beide AYCs bei Raumtemperatur in Bezug auf den Zersetzungsweg zu Alkinen stabil sein sollten. Umgekehrt könnte sich allerdings durch diese Barrieren ein

interessanter Syntheseweg für derartige AYCs ausgehend von den korrespondierenden Alkinen wie **I2'** ergeben (Schema 3.9).



Schema 3.9. Potenzielle Syntheseroute zur Darstellung von **I2** aus **I2'**.

Diese Reaktion sollte mit einem thermodynamisch günstigeren Produkt und einer Barriere von 83.9 kJ/mol bei Raumtemperatur spontan ablaufen.

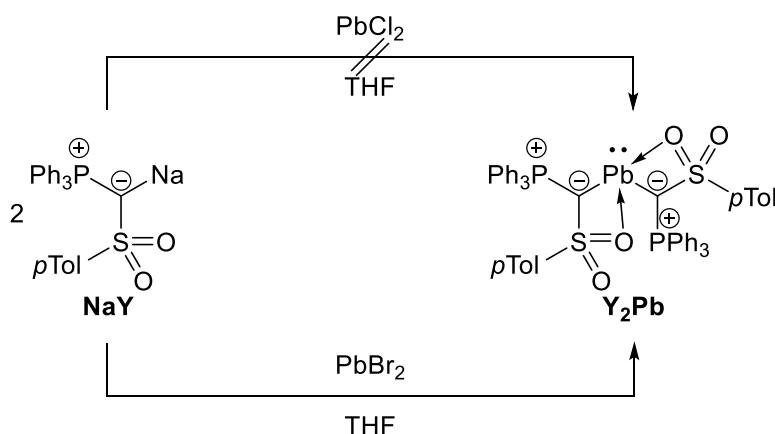
Zusammenfassend erwiesen sich insbesondere die AYCs **P10**, **P12**, **I1** und **I2** als besonders stabil gegenüber Ringöffnungsreaktionen, was sie zu geeigneten Synthesezielen macht. Außerdem stellten sich Sechsringe als geeigneter heraus als Fünfringe, sowie eine Arylsubstitution am ylidischen Kohlenstoffatom.

3.2 Ylidsubstituierte schwere Tetrylene

3.2.1 Synthese und Struktur eines ylidsubstituierten Plumbylens

Nach der ausführlichen Untersuchung von Methoden zur Stabilisierung von amino(ylid)-stabilisierten Carbenen lag ein weiterer Fokus dieser Arbeit auf der Chemie ihrer schwereren Homologen. So sind bereits ylidsubstituierte Silylene, Germylene und Stannylene bekannt, aber noch keine Plumbylene. Für die Synthese von diesen sollte sich eine analoge Vorgehensweise wie für die in der Arbeitsgruppe GESSNER isolierten Verbindungen **Y2Ge** und **Y2Sn** ausgehend vom entsprechenden Tetrel(II)halogenid und dem Yldiid **NaY** eignen.^[111]

Entsprechend wurden zunächst zwei Äquivalente des Yldiids **NaY** mit einem Äquivalent Bleidichlorid in Tetrahydrofuran umgesetzt, wobei allerdings keine Reaktion beobachtet werden konnte (Schema 3.10). Das ist wahrscheinlich auf die schlechte Löslichkeit des Bleidichlorids zurückzuführen.



Schema 3.10. Synthese des ersten ylidsubstituierten Plumbylens Y_2Pb .

Das Verwenden von Bleidibromid führte hingegen in Tetrahydrofuran zunächst zur Bildung einer neuen Spezies, die ein breites Signal bei $\delta_{\text{P}} = -10.3$ ppm im $^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$ -NMR-Spektrum aufweist. Da dieses nicht in der Größenordnung der bereits bekannten acyclischen ylidsubstituierten Tetrylene Y_2Ge und Y_2Sn liegt^[111] und bereits nach kurzer Zeit zu verschwinden begann (Abbildung 3.11), handelte es sich wahrscheinlich um eine präkoordinierende Spezies, die in der Folge weiterreagiert. Eine eindeutige NMR-spektroskopische Zuordnung konnte nicht erfolgen, da es im Verlaufe der folgenden Stunden und Tage zu Folgereaktionen kam. Im Rahmen dieser Untersuchungen konnten aber unter anderem auch Signale mit chemischen Verschiebungen zwischen $\delta_{\text{P}} = 2$ und 10 ppm beobachtet werden, die in derselben Größenordnung wie die der ylidsubstituierten Tetrylene Y_2Ge und Y_2Sn liegen.^[111] Weiterhin zersetzte sich die entstehende Spezies wahrscheinlich, da die Intensität des Signals des Ylids YH , welches aus einer Protolyse resultieren kann, augenscheinlich im zeitlichen Verlauf zunimmt. Aufgrund der schlechten Löslichkeit der Edukte sowie des Produkts war das Durchführen der Reaktion bei niedrigeren Temperaturen und in apolareren Lösungsmitteln nicht möglich.

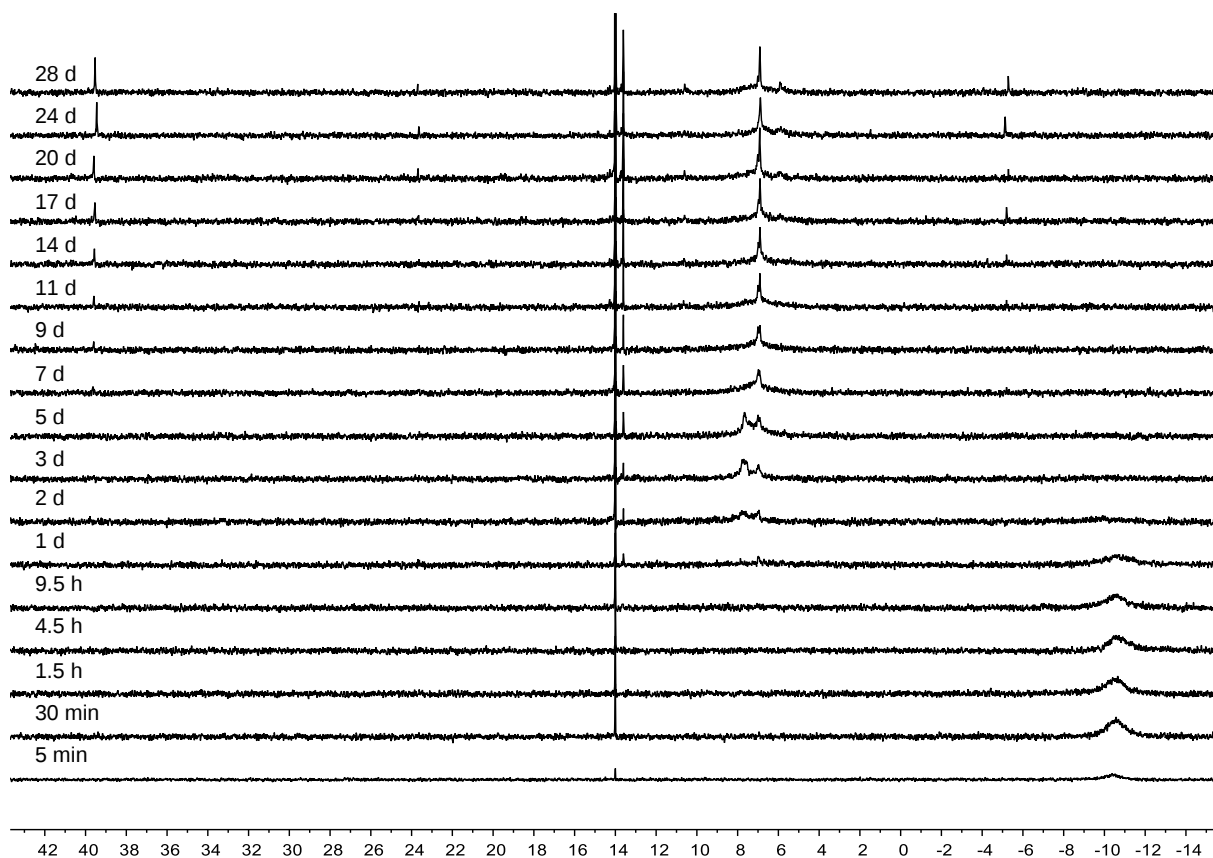


Abbildung 3.11. Synthese und Zersetzung von Y_2Pb im $^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$ NMR-Spektrum (THF-d_8 , RT). Die angegebenen Zeitpunkte beziehen sich auf den Zeitpunkt nach Reaktionsbeginn. Sämtliche Spektren wurden auf das Signal von YH mit $\delta_{\text{P}} = 14.0$ ppm referenziert.

Auch wenn NMR-spektroskopisch keine eindeutige Charakterisierung möglich war, konnten aus der Reaktionslösung für eine Röntgenstrukturanalyse geeignete Einkristalle des gewünschten Plumbylens Y_2Pb als Monomer erhalten werden (Abbildung 3.12). Das Bleiatom ist dabei verzerrt quadratisch pyramidal umgeben, wobei das freie Elektronenpaar die Spitze einnimmt. Die ylidischen Kohlenstoffatome und die koordinierenden Sauerstoffatome der Sulfonylgruppen stehen analog zu den Strukturen von Y_2Ge und $\text{Y}_2\text{Sn}^{[111]}$ trans zueinander.

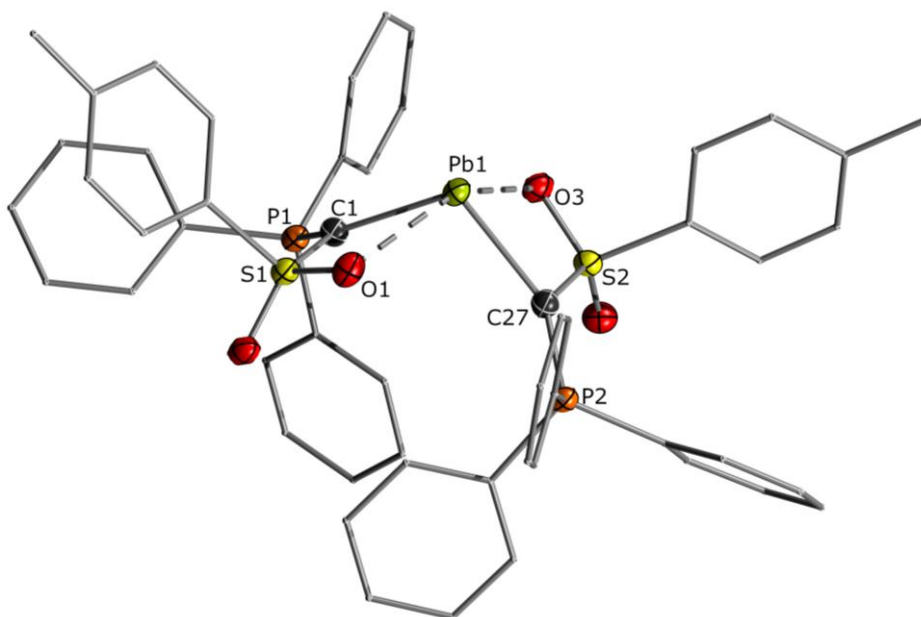
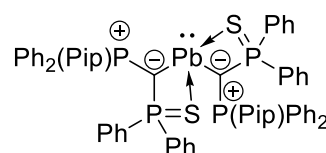


Abbildung 3.12. Molekülstruktur von **Y₂Pb** im Kristall. Ellipsoide mit 50 % Aufenthaltswahrscheinlich. Die Wasserstoffatome sind zu Gunsten einer besseren Übersichtlichkeit nicht abgebildet. Ausgewählte Bindungslängen [Å] und -winkel [°]: Pb1–O1 2.5506(23), Pb1–O3 2.5134(23), Pb1–C1 2.3051(32), Pb1–C27 2.3578(35), P1–C1 1.6975(32), P2–C27 1.6989(34), C1–Pb1–C27 102.22(11).

Zunächst ist auffällig, dass der C1–Pb–C27-Winkel in **Y₂Pb** kleiner als die entsprechenden Winkel in **Y₂Ge** und **Y₂Sn** ist, was für die erwartete geringere Hybridisierung des Bleis im Vergleich zum Germanium und Zinn spricht (Tabelle 3.4).^[23] Dieser ist allerdings auch kleiner als im von MIKE JÖRGES aus unserer Arbeitsgruppe synthetisierten Plumbylen (**PⁱpY_s**)**Pb**.^[181]

Tabelle 3.4. Vergleich ausgewählter Bindungslängen [Å] und -winkel [°] einiger Tetrylene und das von JÖRGES synthetisierte Plumbylen (**PⁱpY_s**)**Pb**.^[181]

	Y₂Ge ^[111]	Y₂Sn ^[111]	Y₂Pb	(PⁱpY_s)₂Pb ^[181]
E1–O1	2.30	2.43	2.55	–
E1–O3	2.43	2.48	2.51	–
E1–C1	2.05	2.22	2.31	2.35
E1–C27	2.04	2.23	2.36	2.38
C1–E1–C27	105.9	103.1	102.2	104.3



Ein Vergleich der E–C Bindungen des Plumbylens mit den leichteren Homologen **Y₂Ge** und **Y₂Sn** zeigt weiterhin, dass die Pb–C-Bindungen, im Gegensatz zu den vergleichbaren Bindungen der leichteren Spezies, leicht asymmetrisch sind, was auf Packungseffekte zurückzuführen sein kann. Die Pb–C-Abstände in **Y₂Pb** sind im Durchschnitt mit 2.34 Å etwas kürzer als in (**PⁱpY_s**)**Pb** (Ø2.37 Å^[181]) und dem von WEIDENBRUCH, KLINKHAMMER et al. synthetisierten Plumbylen **104** (Ø2.37 Å), liegen aber trotzdem noch in der gleichen Größenordnung wie die Pb–C^{Aryl}-Bindung (2.34 Å) in **105** (Abbildung 3.13), was gegen einen Doppelbindungscharakter dieser Bindung in **Y₂Pb** spricht.^[182]

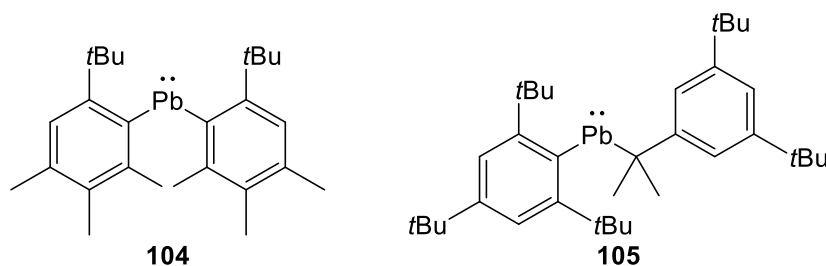


Abbildung 3.13. Die von WEIDENBRUCH, KLINKHAMMER et al. synthetisierten Plumbylene **104** und **105**.^[182]

Gegen einen Doppelbindungscharakter der Pb–C-Bindung spricht außerdem die räumliche Ausrichtung der Ylidsubstituenten. So stehen die Pb1–S1–P1- und die Pb1–S2–P2-Ebene, also die Ebenen, in denen die ylidischen Kohlenstoffatome liegen, mit einem Winkel von 79.4° beziehungsweise 84.3° nahezu senkrecht zur C1–Pb1–C27-Ebene (Abbildung 3.14). Für einen Doppelbindungscharakter müsste hingegen eine Coplanarität vorhanden sein. Auch dieses Verhalten steht in Analogie zu den leichteren Homologen **Y₂Ge** und **Y₂Sn**.

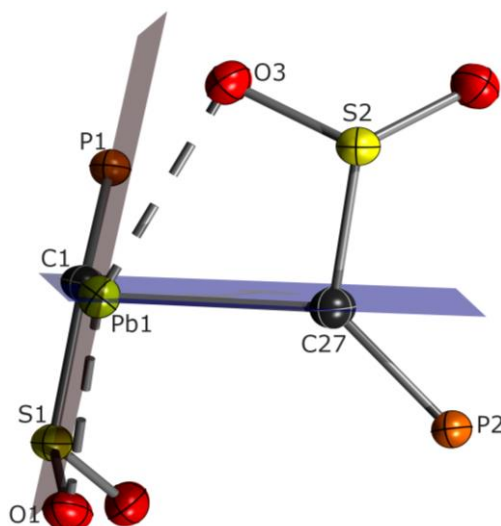


Abbildung 3.14. Die C1–Pb1–C27- (blau) und die Pb1–S1–P1- (rot). Ellipsoide mit 50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Die Pb1–S2–P2-Ebene und ein Großteil der weiteren Atome ist zu Gunsten einer besseren Übersichtlichkeit nicht abgebildet.

Bei den E1–O-Abständen zeigt sich weiterhin, dass die Asymmetrie, die im Germlylen **Y₂Ge** vorliegt, analog zum Stannylen **Y₂Sn** nicht mehr so stark ausgeprägt ist. Auch hier^[111] könnte der größere Radius des Bleis und eine damit verminderte Ringspannung der Grund sein. Die ylidischen P–C-Bindungen liegen bei **Y₂Pb** in der gleichen Größenordnung wie bei den leichteren Homologen.

Um die Natur des erhaltenen Plumbylens **Y₂Pb** weiter zu untersuchen, wurden NBO-Analysen zu diesem und dem von JÖRGES synthetisierten Vergleichsplumbylen (**P^{ip}Y_S**)₂Pb^[181] auf PW6B95D3/def2svp//PW6B95D3/def2tzvp-Niveau durchgeführt. Die WIBERG-Bindungsindizes der Pb–C-Bindungen liegen bei beiden Verbindungen in der gleichen Größenordnung.

Allerdings sind die Pb–O-Bindungen in ersterem mit einem durchschnittlichen WBI von 0.16 deutlich schwächer ausgeprägt als die korrespondierenden Pb–S-Bindungen mit einem WBI von 0.30 (Tabelle 3.5). Dies hängt wahrscheinlich mit der im Vergleich zum Schwefel höheren Elektronegativität des Sauerstoffs zusammen und sollte zu einer daraus resultierenden schwächeren Stabilisierung des Bleis in **Y₂Pb** führen. Ebenso bietet das HSAB-Konzept eine Erklärung. So ist Schwefel deutlich weicher als Sauerstoff und interagiert damit stärker mit dem ebenfalls sehr weichen Blei.^[23,118]

Tabelle 3.5. WIBERG Bindungsindizes und natürliche Ladungen (**Y₂Pb**: Ch = O; (^{Pip}Y_S)₂Pb: Ch = S).

		Y₂Pb	(^{Pip}Y_S)₂Pb
WBI	Pb1–Ch1	0.17	0.30
	Pb1–Ch3	0.15	0.30
	Pb1–C1	0.46	0.41
	Pb1–C27	0.41	0.41
q(NBO)	q _{Pb1}	1.25	1.08
	q _{Chal1}	-1.00	-0.62
	q _{Chal3}	-0.98	-0.62
	q _{C1}	-1.51	-1.63
	q _{C27}	-1.50	-1.63

Ein weiterer Hinweis dafür ist, dass die natürliche Ladung am Chalkogenzentrum in **Y₂Pb** niedriger ist, dementsprechend ist in der Folge die natürliche Ladung des Bleiatoms in **Y₂Pb** höher als in (^{Pip}Y_S)₂Pb. Als Resultat sollte **Y₂Pb** daher ein besserer π -Akzeptor sein. Außerdem sollten die stärker elektronenziehenden Eigenschaften der Sulfoniumgruppe auf das ylidische Kohlenstoffatom, welches in **Y₂Pb** eine geringere negative Ladung aufweist (Tabelle 3.5), zu schwächeren σ -Donoreigenschaften im Vergleich zu (^{Pip}Y_S)₂Pb führen.

3.2.2 Untersuchung der elektronischen Eigenschaften von ylidsubstituierten Tetrylenen und ihrer Reaktivität

Elektronischen Eigenschaften ylidsubstituierter Tetrylene^c

Zum weiteren Vergleich der elektronischen Eigenschaften der beschriebenen Spezies und acyclischer Tetrylene im Allgemeinen wurde eine Serie verschiedener diylidsubstituierter

^c In Teilen wiedergegeben mit Erlaubnis von C. Mohapatra, H. Darmandeh, H. Steinert, B. Mallick, K.-S. Feichtner, V. H. Gessner, *Chem. Eur. J.* **2020**, 26, 15145. Veröffentlicht von der Wiley-VCH GmbH. Copyright © 2020 CC-BY-NC-ND 4.0 bei den Autoren.

Silylene, Germylene, Stannylene und Plumbylene $\mathbf{Y^*}_2\mathbf{E}$ ($\mathbf{Y^*}$ = nicht näher spezifizierter Ylid-substituent) auf dem PW6B95D3/def2svp//PW6B95D3/def2tzvp-Niveau berechnet. Neben dem bereits beschriebenen Ylid $\mathbf{Y}$ wurde zum einen eine cyclohexylsubstituierte Variante $\text{Cy}\mathbf{Y}^{[54]}$ eingeführt, die durch den +I-Effekt der Tricyclohexylphosphoniumeinheit ein besserer σ -Donor sein sollte. Weiterhin wurde eine cyclohexylsubstituierte Variante mit einer perfluorierten *n*-Butylgruppe an der Sulfonyleinheit $\text{Cy}\mathbf{Y}_\text{F}$ verwendet. Deren starker -I-Effekt sollte die O $\rightarrow$ E-Bindung schwächen. Außerdem wurde das bereits beschriebene Phosphansulfid $\text{Pip}\mathbf{Y}_\text{S}$ untersucht, um die bisherigen Resultate zu validieren (Abbildung 3.15).

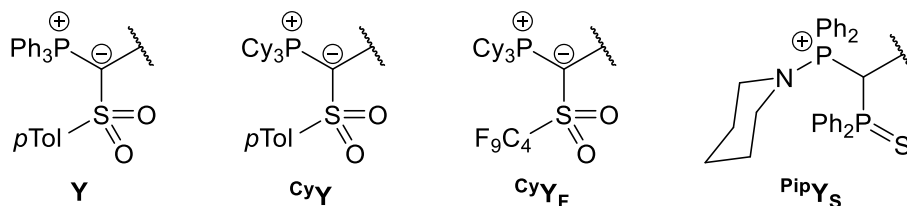


Abbildung 3.15. Die untersuchten Ylidliganden $\mathbf{Y}$, $\text{Cy}\mathbf{Y}$, $\text{Cy}\mathbf{Y}_\text{F}$ und $\text{Pip}\mathbf{Y}_\text{S}$.

Zunächst wurden die Grenzorbitale aller Verbindungen untersucht. Dabei ist dabei auffällig, dass in allen Fällen mit zunehmender Ordnungszahl des zentralen Gruppe-14-Elements das HOMO^d und das LUMO^d sinken (Abbildung 3.16). Das entspricht der abnehmenden Elektronegativität und Hybridisierbarkeit und analogen Untersuchungen durch andere Arbeitsgruppen.^[112,113]

Weiterhin wird deutlich, dass die Tetrylene $\mathbf{Y}_2\mathbf{E}$ und $\text{Cy}\mathbf{Y}_2\mathbf{E}$ nur geringe Unterschiede aufweisen, wobei die $\text{Cy}\mathbf{Y}$ -substituierten Tetrylene am Zentralatom durch niedrigere LUMO-Energien leicht bessere π -Akzeptoren zu sein scheinen.

^d In vielen der folgenden Fälle weisen das HOMO oder das LUMO nicht die erwartete Geometrie am Tetrylenzentrum auf. So ist das HOMO bei besonders elektronenarmen Tetrylenen häufig an den ylidischen Kohlenstoffatome lokalisiert, das LUMO bei einer zusätzlich donierenden Gruppe auf das Rückgrat der Verbindungen.^[111] Zu Gunsten einer besseren Vergleichbarkeit und da die am Tetrylenzentrum lokalisierten Orbitale für die Reaktivität eine entscheidende Rolle spielen, beziehen sich die Angaben von HOMO und LUMO im Fließtext auf diese Orbitale. Die eigentlichen Lagen der Orbitale sowie die Energien der tatsächlichen HOMOs und LUMOs können den entsprechenden Abbildungen Abbildung 3.16, Abbildung 3.19, Abbildung 3.21, Abbildung 3.23, Abbildung 3.24, Abbildung 3.26, Abbildung 3.29, Abbildung 3.31, Abbildung 3.32, Abbildung 3.37, Abbildung 3.38 und Abbildung 3.42 entnommen werden.

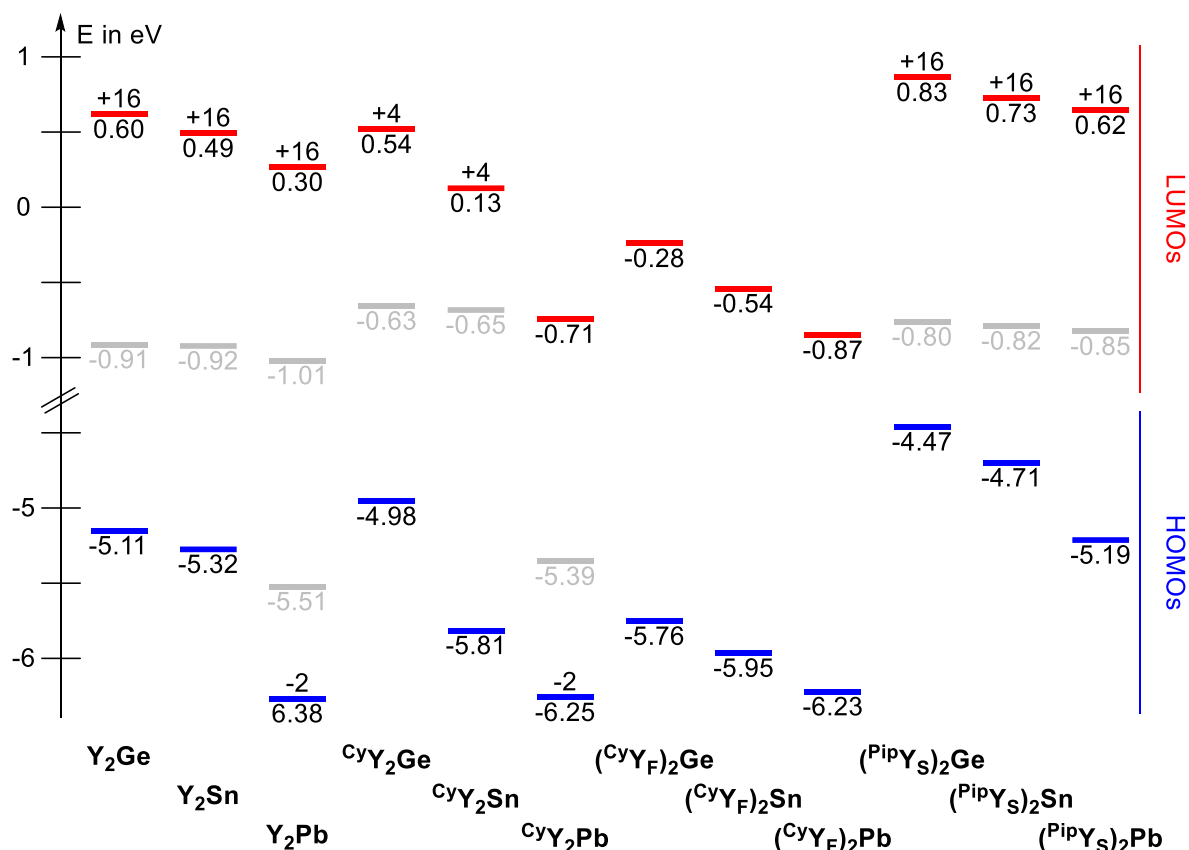


Abbildung 3.16. Die HOMO- und LUMO-Energien der mit Y , CyY , CyY_F und $PipY_S$ substituierten Germyl-, Stannyl- und Plumbylene. In den Fällen, in denen das HOMO oder das LUMO nicht die erwartete Geometrie am Zentralatom aufweisen, sind diese ausgegraut und die entsprechenden Orbitale zusätzlich angegeben.^e

Im Gegensatz dazu haben die CyY_F -substituierten Tetraylene, bedingt durch ihre Elektronenarmut, in diesem Vergleich die niedrigsten HOMO-Energien und damit die schlechtesten σ -Donoreigenschaften. Umgekehrt haben sie allerdings auch die niedrigsten LUMOs und entsprechend die besten π -Akzeptoreigenschaften. Die $PipY_S$ -substituierten Tetraylene haben hingegen die höchsten HOMO-Energien und sind somit die stärksten σ -Donoren. Ebenso weisen sie die höchsten LUMO-Energien auf und sind somit die schwächsten π -Akzeptoren. Das entspricht den Erkenntnissen aus den NBO-Analysen.

Da alle der bisher untersuchten Tetraylene durch die Sulfoxid- oder Sulfidsubstitution eine Stabilisierung durch Donation von Elektronendichte zum Zentralatom erfahren, wurde zum weiteren Vergleich das phenylsubstituierte Ylid Y_{Ph} als Ligand eingeführt. Außerdem wurden in die Untersuchungen die potenziell elektronenärmeren pyridyl- und pentafluorphenyl-substituierten Ylidliganden Y_{Py} und Y_{PhF} sowie die Cyanidospezies Y_{CN} mit einbezogen (Abbildung 3.17).

^e Für Y_2Si : HOMO: -4.57, LUMO: -0.93, LUMO+16: 0.98 eV.

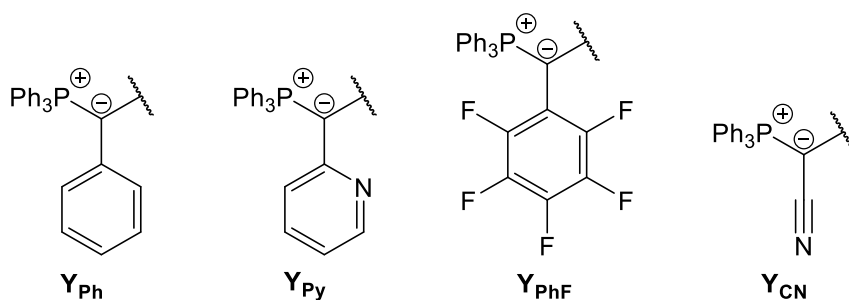


Abbildung 3.17. Die untersuchten Ylidliganden Y_{Ph} , Y_{Py} , Y_{PhF} und Y_{CN} .

Hierbei stellte sich zunächst heraus, dass die Pyridylgruppe von Y_{Py} entgegen den Erwartungen doch zum Zentralatom koordiniert (Abbildung 3.18). Als Resultat weisen diese Verbindungen die höchsten HOMO- und LUMO-Energien auf (Abbildung 3.19), sodass die Donorstärken der Y_{Py} -substituierten Verbindungen mit denen der PipY_5 -substituierten Tetrylene vergleichbar sind.

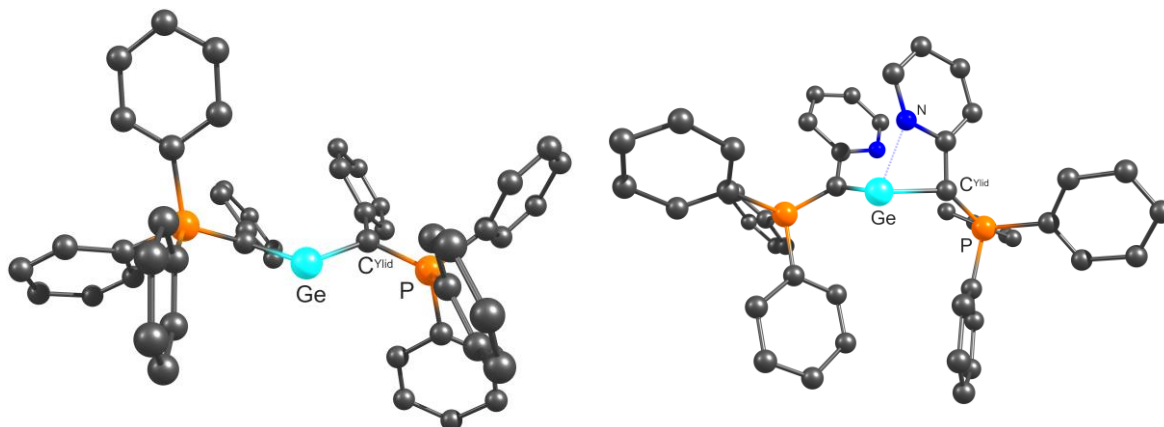


Abbildung 3.18. Die günstigsten gefundenen Konformere von $(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{Ge}$ (links) und $(\text{Y}_{\text{Py}})_2\text{Ge}$ (rechts).

Als Folge eines fehlenden Donoratoms aus dem Rückgrat des Ylidliganden werden die Verbindungen mit Y_{Ph} , Y_{PhF} und Y_{CN} -Substitution durch π -Wechselwirkungen der ylidischen Kohlenstoffatome mit dem Zentralatom stabilisiert, wie anhand der Coplanarität der E–P–C-Ebenen um die ylidischen Kohlenstoffatome mit der $\text{C}^{\text{Ylid}}\text{--E--C}^{\text{Ylid}}$ -Ebene deutlich wird (Abbildung 3.18).^f Interessanterweise zeigte sich in diesen Fällen außerdem, dass bei den phenyl-, perfluorophenyl- und cyanidosubstituierten Yliden Y_{Ph} , Y_{PhF} und Y_{CN} das HOMO des jeweiligen Stannylens energetisch höher liegt als das des vergleichbaren Germylens. Ein Grund hierfür könnten stereoelektronische Wechselwirkungen der Rückgrate der jeweiligen Ylidsubstituenten in Form von π -stacking-Effekten sein. Diese sollten aber zunächst insbesondere bei den größeren Tetrelen zu einem kleineren $\text{C}^{\text{Ylid}}\text{--E--C}^{\text{Ylid}}$ -Winkel, damit einem

^f Dieses Phänomen tritt auch bei den folgenden untersuchten Verbindungen mit Y_{Ph} , Y_{PhF} und Y_{CN} -Substitution auf.

höheren s-Charakter des Zentralatoms und somit einer niedrigeren HOMO-Energie führen.^[92] Eine abschließende Erklärung für dieses Phänomen konnte somit nicht gefunden werden. Abschließend zeigte sich, dass die HOMO- und LUMO-Energien aller perfluorphenyl-substituierten Spezies $(Y_{PhF})_2E$ aufgrund des starken -I-Effekts deutlich höher sind als in den jeweiligen nichtfluorierten Tetrylenen $(Y_{Ph})_2E$. Die am Tetrylenzentrum niedrigsten HOMO-Energien weisen die cyanidosubstituierten Spezies $(Y_{CN})_2E$ auf. Gleichzeitig sollten sie aber aufgrund der höheren LUMO-Energien schlechtere π -Akzeptoren als die perfluorphenyl-substituierten Tetrylene $(Y_{PhF})_2E$ sein.

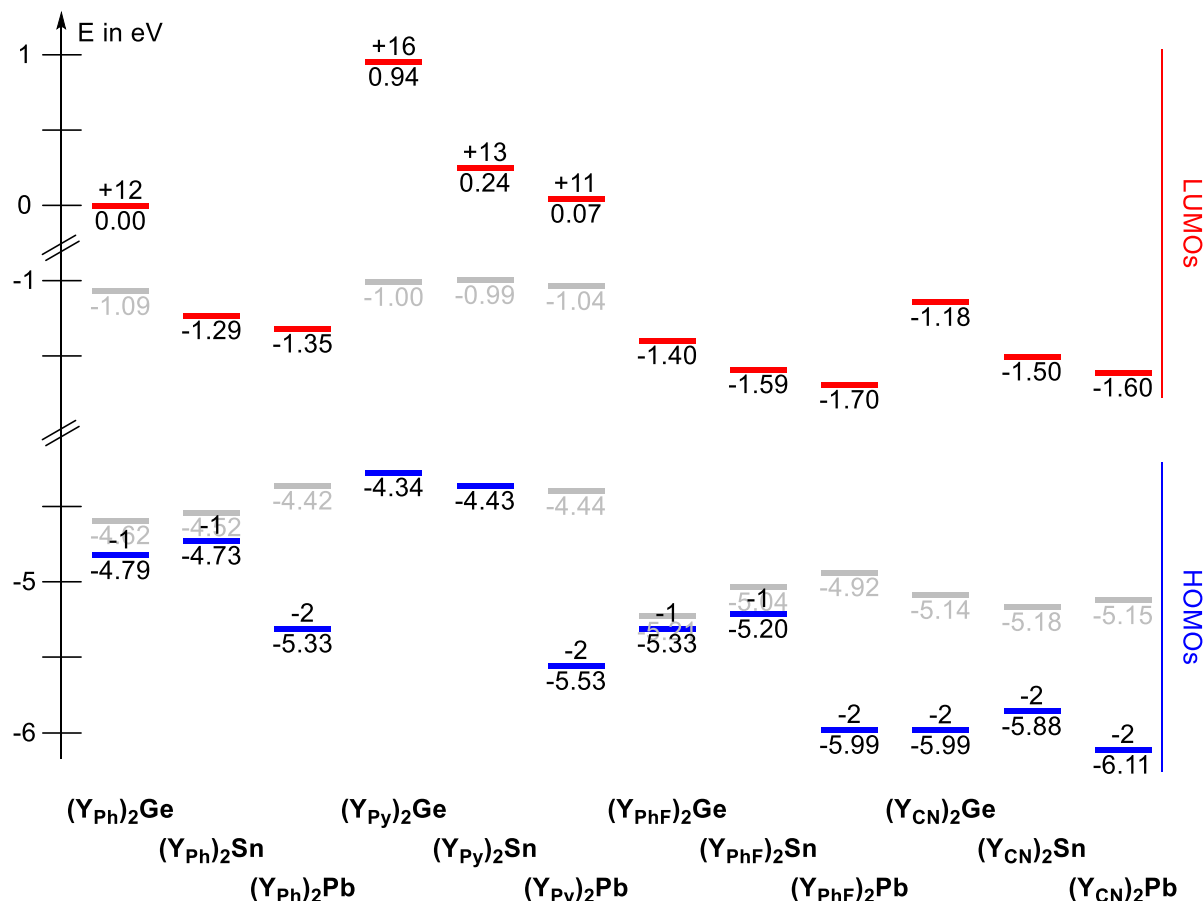


Abbildung 3.19. Die HOMO- und LUMO-Energien der mit Y_{Ph} , Y_{Py} , Y_{PhF} und Y_{CN} substituierten Germyl-, Stannyl- und Plumbylene. In den Fällen, in denen das HOMO oder das LUMO nicht die erwartete Geometrie am Zentralatom aufweisen, sind diese ausgegraut und die entsprechenden Orbitale zusätzlich angegeben.⁹

Für die Singulett-Triplett-Abstände der Tetrylene ergeben sich drei Fälle. Zum können die Energiedifferenzen zum Plumbylen mit zunehmender Masse des Zentralatoms steigen. Das korreliert mit einer formalen Anregung aus dem am Tetrylen lokalisierten freien Elektronenpaar in das ebenfalls dort lokalisierte vakante Orbital. Entsprechend hätte der Triplettzustand diradikalischen Charakter, bei dem beide Elektronen am gleichen Atom lokalisiert sind.^[112]

⁹ Für $(Y_{Ph})_2Si$: HOMO: -4.49, LUMO: -1.05, LUMO+12: 0.12 eV. Für $(Y_{PhF})_2Si$: HOMO: -5.09, LUMO: -1.35, LUMO+17: 0.65 eV.

Alternativ ist allerdings auch eine formale Anregung in ein anderes Orbital im Rückgrat des Ylidliganden möglich. Da diese Orbitalenergien kaum vom Zentralatom beeinflusst werden sollten, würde auch das bei gleicher Substitution mit zunehmender Ordnungszahl des Zentralatoms zu einem steigenden Singulett-Triplett-Abstand führen. Hier wäre der Triplettzustand entsprechend biradikalisch. Diese formale Anregung aus dem freien Elektronenpaar des Tetrylenzentrums ist besonders bei den leichteren, elektronegativeren und damit elektronenreicheren Tetrylenen zu erwarten^[112] sowie bei elektronenreichen Ylidliganden.

Zum zweiten kann die Energiedifferenz zum Plumbylen sinken. Das korreliert damit, dass hier die HOMOs nicht am Tetrylenzentrum lokalisiert sind, sondern an den ylidischen Kohlenstoffatomen. Deren Orbitalenergien steigen mit zunehmender Ordnungszahl des Zentralatoms aufgrund der mit dessen sinkender Elektronegativität steigenden Polarität der E–C-Bindungen in Richtung des ylidischen Kohlenstoffatoms. Erfolgt die formale Anregung eines Elektrons aus diesem Orbital entweder in das vakante Orbital am Zentralatom, dessen Energie wie beschrieben mit zunehmender Ordnungszahl sinkt, oder in das Rückgrat des Liganden, sinkt der Singulett-Triplett-Abstand. Auf alle Fälle weist der Triplettzustand ein biradikalisches Verhalten auf, in dem die ungepaarten Elektronen an verschiedenen Stellen des Moleküls sitzen.^[112] Diese formale Anregung, die nicht aus dem freien Elektronenpaar des Tetrylenzentrums geschieht, ist besonders bei den schweren und damit elektronenarmen Tetrylenen zu erwarten sowie bei elektronenreichen Ylidliganden.

Als drittes kann entweder das Germylen oder das Stannylen den höchsten Singulett-Triplett-Abstand aufweisen. Das entspricht einer Mischung aus den beiden zuvor genannten Fällen. Im Falle der hier untersuchten Tetrylene fällt zunächst auf, dass die Systeme mit **Y**-, ^c**Y**-, ^c**Y**_F-, ^{Pip}**Y**_S-Substitution, in denen die funktionelle Gruppe des Rückgrats zum Zentralatom koordiniert, der ersten Gruppe zuzuordnen sind (Abbildung 3.20).

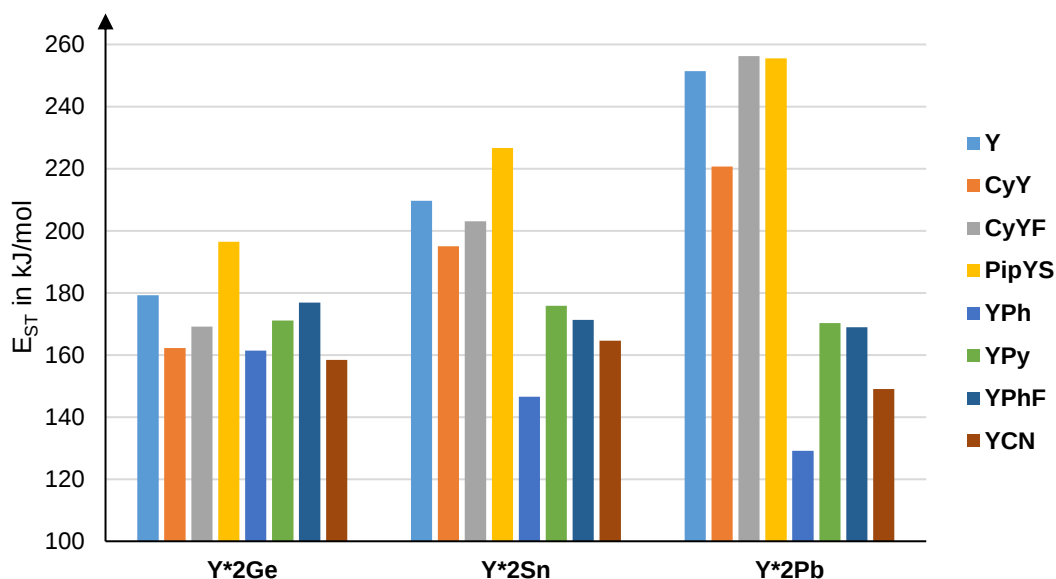


Abbildung 3.20. Die Singulett-Triplett-Abstände der mit zwei Ylidliganden substituierten Tetrylene Y^*_2E ($E = \text{Ge, Sn, Pb}$; $Y^* = Y, \text{CyY}, \text{CyYF}, \text{PipYS}, Y_{\text{Ph}}, Y_{\text{Py}}, Y_{\text{PhF}}, Y_{\text{CN}}$).^h

Im Gegensatz dazu sinkt im Fall von Y_{Ph} -Substitution der Singulett-Triplett-Abstand vom Gemylen übers Stannylen zum Plumbylen, diese Verbindungen sind also dem zweiten Fall zuzuordnen, was für den Elektronenreichtum des Ylidliganden spricht. Die verbleibenden Fälle lassen sich der dritten Kategorie zuordnen.

Dieses komplexe und sehr unterschiedliche Verhalten erschwert einen tiefergehenden Vergleich der Singulett-Triplett-Abstände deutlich und führt dazu, dass, während bei den Gemylenen $Y^*_2\text{Ge}$ die Singulett-Triplett-Abstände aller Verbindungen in der gleichen Größenordnung von $\sim 178 \pm 20$ kJ/mol liegen, diese bei den Plumbylenen im Bereich zwischen 129.2 kJ/mol für $(Y_{\text{Ph}})_2\text{Pb}$ bis 256.2 kJ/mol für $(\text{CyYF})_2\text{Pb}$ liegen.

Als nächstes wurden acyclische Tetrylene untersucht, die mit zwei unterschiedlichen Yliden substituiert sind; namentlich $Y\text{E}^{\text{Pip}}Y_{\text{S}}$ und $Y_{\text{CN}}\text{E}^{\text{Pip}}Y_{\text{S}}$ ($E = \text{Ge, Sn, Pb}$). Hier lag unter anderem ein Fokus auf der Fragestellung nach der Vorhersagbarkeit der elektronischen Eigenschaften auf Basis von bekannten Verbindungen. Dabei liegen die HOMOs und LUMOs, die die für Tetrylene übliche Geometrie aufweisen, in allen Fällen energetisch zwischen den jeweiligen mit den gleichen Yliden substituierten Tetrylenen (Y_2E und $(\text{PipY}_{\text{S}})_2E$ für $Y\text{E}^{\text{Pip}}Y_{\text{S}}$ und $(Y_{\text{CN}})_2E$ und $(\text{PipY}_{\text{S}})_2E$ für $Y_{\text{CN}}\text{E}^{\text{Pip}}Y_{\text{S}}$) (Abbildung 3.21) und lassen sich entsprechend auch relativ gut vorhersagen.

^h Für $Y_2\text{Si}$: 143.7 kJ/mol. Für $(Y_{\text{Ph}})_2\text{Si}$: 150.0 kJ/mol. Für $(Y_{\text{PhF}})_2\text{Si}$: 157.4 kJ/mol.

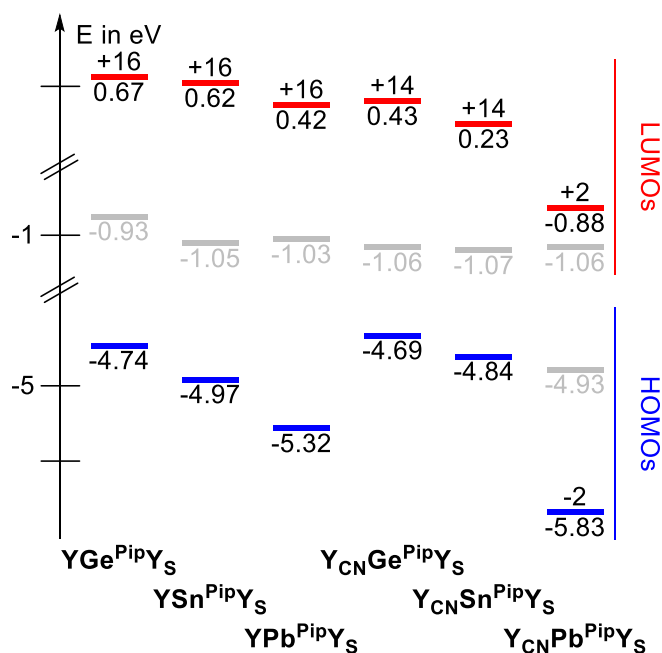


Abbildung 3.21. HOMO- und LUMO-Energien der mit unterschiedlichen Yliden substituierten Tetraylene $\text{YGe}^{\text{Pip}}\text{YS}$ und $\text{YCN}^{\text{E}}\text{PipYS}$ ($\text{E} = \text{Ge}, \text{Sn}, \text{Pb}$). In den Fällen, in denen das HOMO oder das LUMO nicht die erwartete Geometrie am Zentralatom aufweisen, sind diese ausgegraut und die entsprechenden Orbitale zusätzlich angegeben.

Bei der Betrachtung der Singulett-Triplett-Abstände fällt hingegen auf, dass diese Vorhersagbarkeit nicht mehr gegeben ist (Abbildung 3.22).

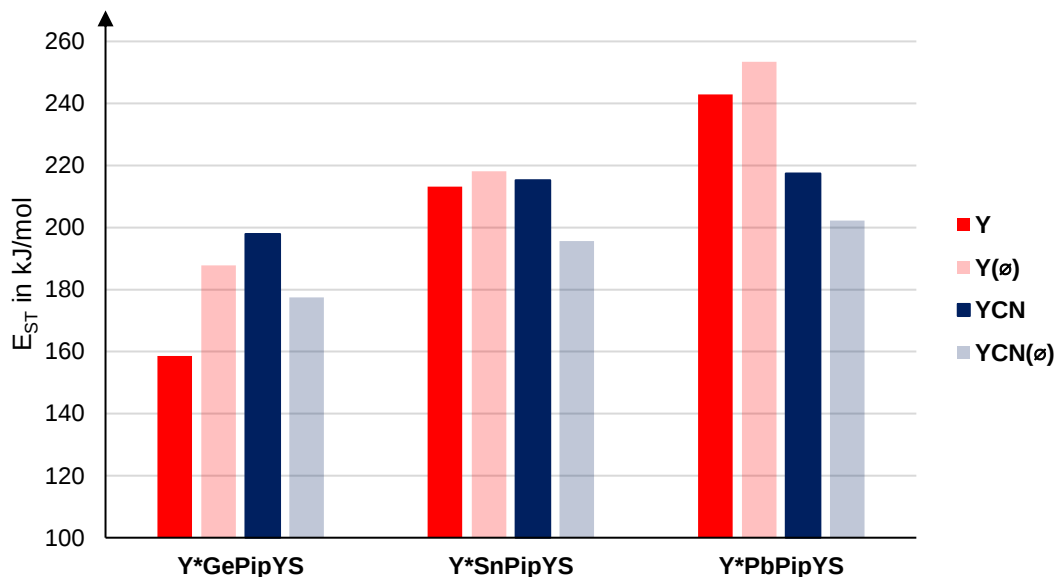


Abbildung 3.22. Singulett-Triplett-Abstände der mit unterschiedlichen Yliden substituierten Tetraylene $\text{YGe}^{\text{Pip}}\text{YS}$ und $\text{YCN}^{\text{E}}\text{PipYS}$ ($\text{E} = \text{Ge}, \text{Sn}, \text{Pb}$) sowie die aus den mit demselben Ylid substituierten Tetraylenen (Y^*ZE) berechneten Mittelwerte.

Zwar steigen in allen Fällen die Singulett-Triplett-Abstände mit zunehmender Masse des Tetraylens, allerdings liegen die Energien nicht wie erwartet in allen Fällen zwischen den mit den gleichen Yliden substituierten Spezies. Beispielsweise beträgt der Singulett-Triplett-Abstand für Y_2Ge 179.2 kJ/mol und der für $(^{\text{Pip}}\text{YS})_2\text{Ge}$ 196.5 kJ/mol. Die entsprechende

Energiedifferenz beträgt jedoch für $\mathbf{YGe^{Pip}Y_S}$ 158.6 kJ/mol und liegt somit unter den Werten der homogen substituierten Derivate. Auffällig ist hier auch, dass die Energien der $\mathbf{Y^{Pip}Y_S}$ -substituierten Verbindungen ausnahmslos unter den Durchschnittswerten der jeweiligen durch dasselbe Ylid stabilisierten Verbindungen liegen. Im Gegensatz dazu sind die Energien für die $\mathbf{Y^{CN/Pip}Y_S}$ -substituierten Verbindungen immer höher als die berechneten Durchschnittswerte.

Ein Grund hierfür könnte in den deutlichen Unterschieden im sterischen Anspruch der jeweiligen Ylide begründet liegen. Ebenso haben die hier untersuchten Verbindungen im Vergleich zu den Ausgangsverbindungen zwei unterschiedliche Donoratome (O/S für $\mathbf{YE^{Pip}Y_S}$ statt zwei Sauerstoff- beziehungsweise Schwefelkoordinationen und eine S-Koordination für $\mathbf{Y_{CN}E^{Pip}Y_S}$, statt keiner Koordinationen beziehungsweise zwei S-Koordinationen). Daraus resultierend lassen sich die Singulett-Triplett-Abstände für diese Tetrylene nicht sinnvoll vorhersagen und müssen entsprechend für jeden Einzelfall berechnet werden.

Alle bisher untersuchten Tetrylene waren durch zwei Ylidsubstituenten stabilisiert. Zum tieferen Verständnis ihrer Chemie wurden als nächstes monoylid(chlorido)substituierte Germylene, Stannylene und Plumbylene $\mathbf{Y^*ECI}$ untersucht, zunächst für die Ylide $\mathbf{Y}$, $\mathbf{CyY}$ und $\mathbf{PipY_S}$ mit einer zum Zentralatom koordinierenden funktionellen Gruppe (Abbildung 3.23). Das Verhalten der resultierenden Tetrylene mit jeweils gleicher Ylidsubstitution entspricht dabei den bisherigen Beobachtungen.

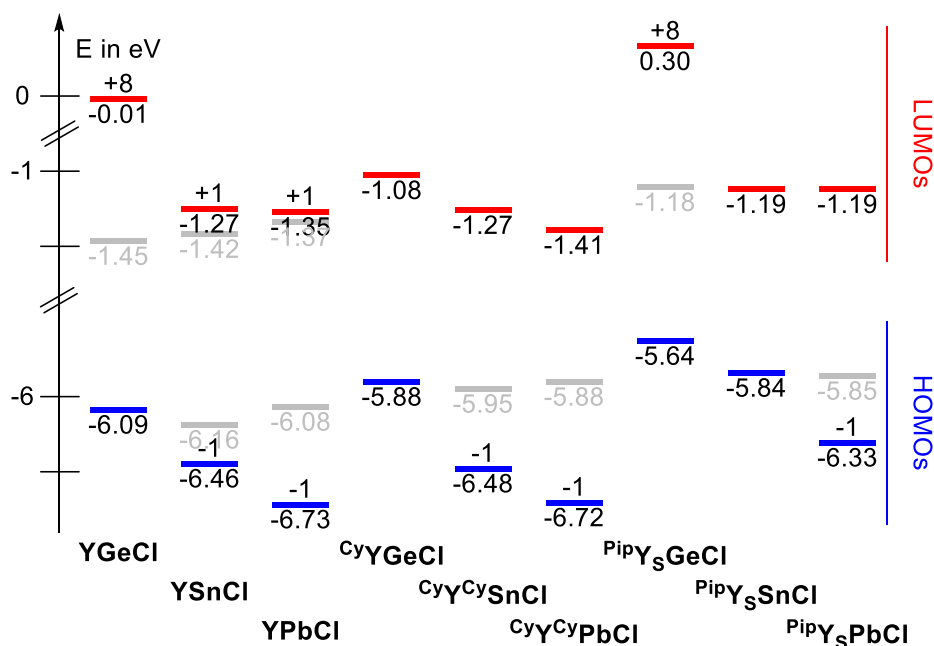


Abbildung 3.23. Die HOMO- und LUMO-Energien der mit Y, CyY und PipYs substituierten Tetraarylenchloride. In den Fällen, in denen das HOMO oder das LUMO nicht die erwartete Geometrie am Zentralatom aufweisen, sind diese ausgegraut und die entsprechenden Orbitale zusätzlich angegeben.ⁱ

Allerdings liegen im Vergleich zu den vergleichbaren zweifach ylidsubstituierten Systemen sämtliche Orbitale am jeweiligen Tetraarylenzentrum deutlich niedriger. Damit sollten die Chloride **Y*ECI** schlechtere σ -Donoren und bessere π -Akzeptoren sein. Der Grund hierfür ist der aus der Elektronegativität des Chloratoms resultierende geringere +M- und stärkere -I Charakter im Vergleich zum ylidischen Kohlenstoffatom.

Ebenso wurden Verbindungen mit den Yliden **Y_{Ph}**, **Y_{PhF}** und **Y_{CN}** ohne zum Zentralatom koordinierende funktionelle Gruppe untersucht (Abbildung 3.24). Auch hier kann aus den gleichen Gründen beobachtet werden, dass die σ -Donorstärke im Vergleich zu den zweifach ylidsubstituierten Spezies deutlich ab- und die π -Akzeptorstärke zunimmt.

ⁱ Für **YSiCl**: HOMO: -5.52, LUMO: -1.47, LUMO+8: 0.41 eV.

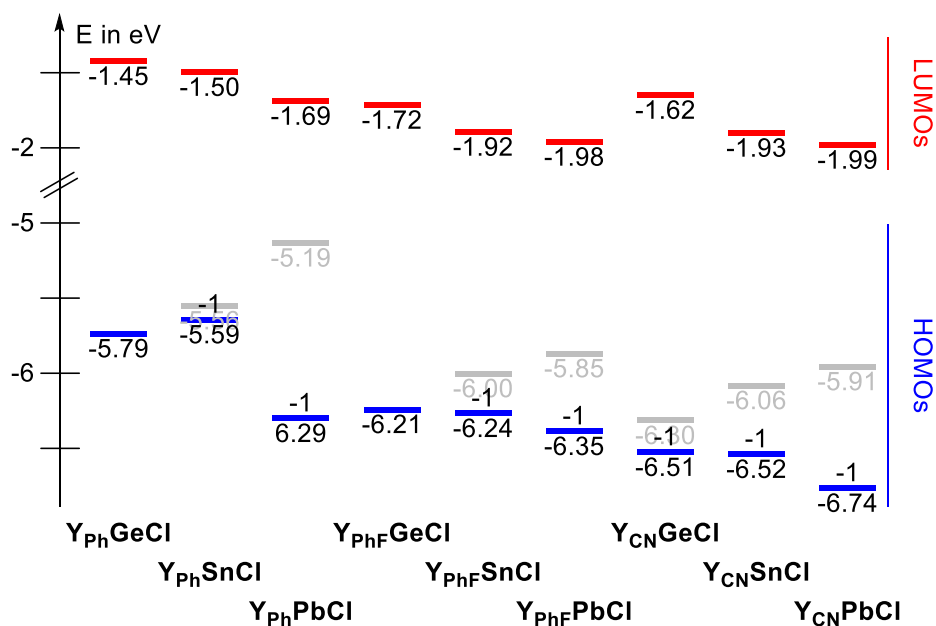


Abbildung 3.24. Die HOMO- und LUMO-Energien der mit Y_{Ph} , Y_{PhF} und Y_{CN} substituierten Chlortetrylene. In den Fällen, in denen das HOMO nicht die erwartete Geometrie am Zentralatom aufweist, ist dieses ausgegraut und das entsprechende Orbital zusätzlich angegeben.^j

Bei den Singulett-Triplett-Abständen der chloro(ylid)substituierten Tetrylene Y^*ECI (Abbildung 3.25) führen insbesondere eine Y -, CyY und $PipY_S$ -Substitution zu sehr hohen Singulett-Triplett-Abständen, die verbleibenden Ylidliganden Y_{Ph} -, Y_{PhF} und Y_{CN} führen hingegen zu eher niedrigen.

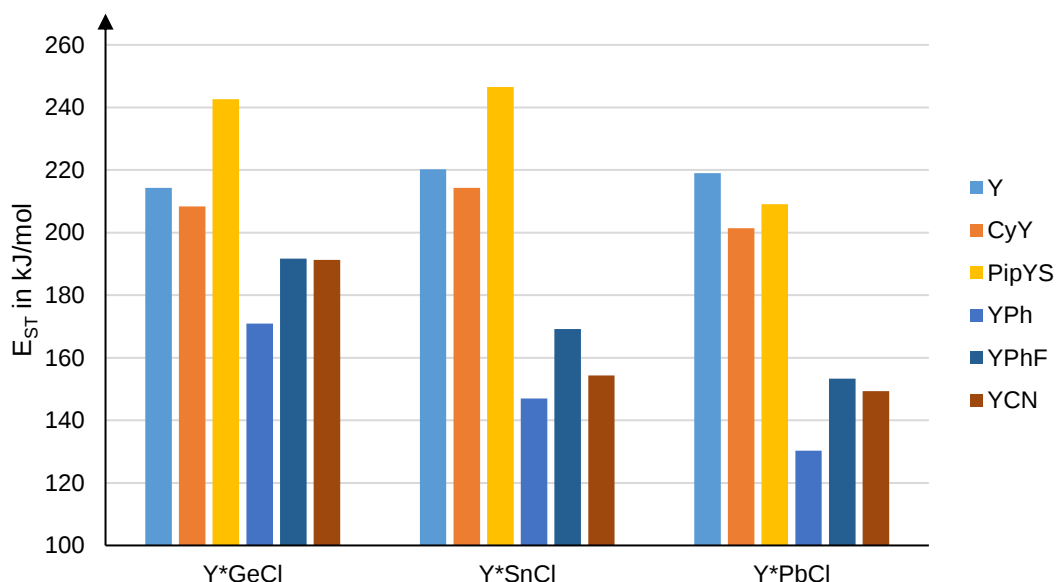


Abbildung 3.25. Singulett-Triplett-Abstände der chloro(ylid)substituierten Tetrylene.^k

^j Für $Y_{Ph}SiCl$: HOMO: -5.61, LUMO: -1.38, LUMO+4: -0.58 eV. Für $Y_{PhF}SiCl$: HOMO: -6.01, LUMO: -1.66 eV.

^k Für $YSiCl$: 192.0 kJ/mol. Für $Y_{Ph}SiCl$: 172.4 kJ/mol. Für $Y_{PhF}SiCl$: 185.2 kJ/mol.

Um einen weiteren Liganden einzuführen, wurden als nächstes hexamethyldisilazan(ylid)-substituierte Systeme **Y*EHMDS** untersucht (Abbildung 3.26). Diese weisen zum einen höhere HOMO-Energien auf als die chloresubstituierten Systeme, was auf die im Vergleich zum Chlor geringere Elektronegativität des Stickstoffs^[5] und damit verbundene schwächere -I-Effekte zurückzuführen ist. Gleichzeitig sind die hexamethyldisilazan-substituierten Tetrylene aufgrund niedrigerer HOMO-Energien schlechtere σ -Donoren als die zweifach ylidsubstituierten Tetrylene. Das steht in Analogie zu den theoretischen Überlegungen und Untersuchungen von AYCs im Vergleich zu NHCs (siehe Kapitel 1.2).^[90,91]

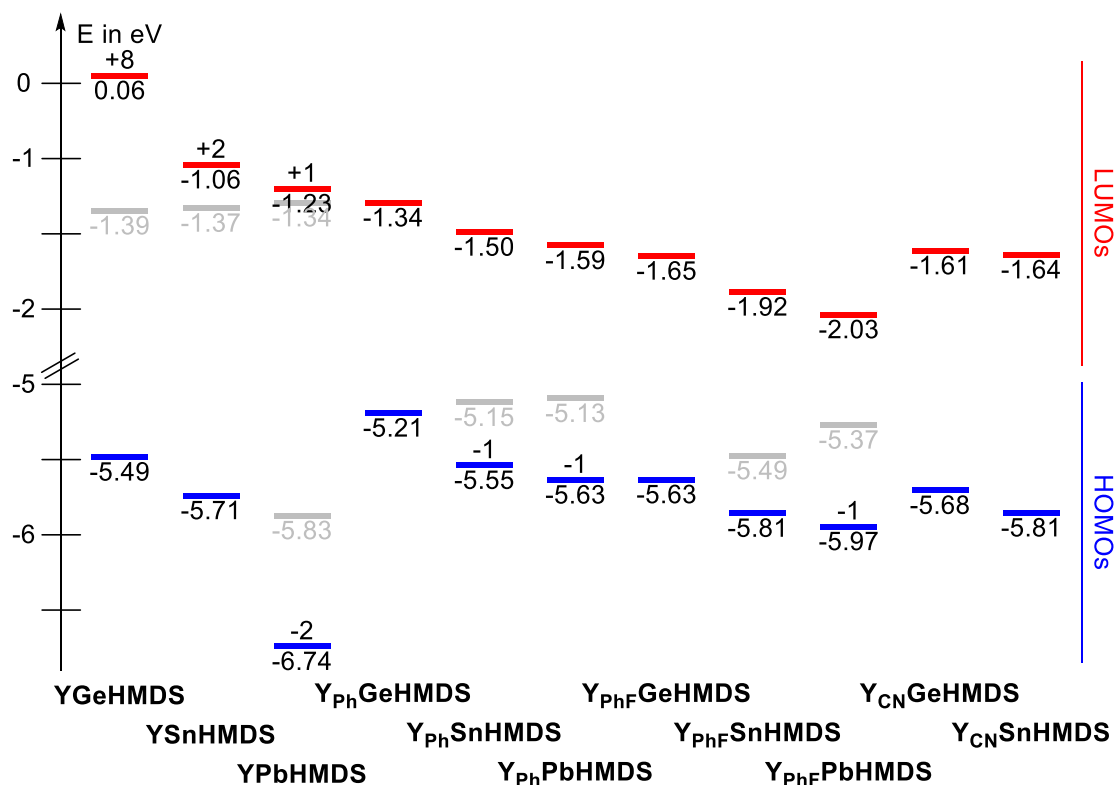


Abbildung 3.26. Die HOMO- und LUMO-Energien der mit Y, Y_{Ph}, Y_{PhF} und Y_{CN} substituierten Hexamethyldisilazantetrylene. In den Fällen, in denen das HOMO oder das LUMO nicht die erwartete Geometrie am Zentralatom aufweisen, sind diese ausgegraut und die entsprechenden Orbitale zusätzlich angegeben.[†]

Im Gegensatz dazu gibt es nur geringe Unterschiede der LUMOs zu denen der chloresubstituierten Verbindungen; sie liegen in etwa in der gleichen Größenordnung. Der Grund hierfür liegt wahrscheinlich in der sterischen Abstoßung des Ylid- mit dem Hexamethyldisilazanliganden und einer damit verbundenen fehlenden Coplanarität des Stickstoffs mit dem Tetrylenzentrum (Abbildung 3.27). In der Folge kann das freie Elektronenpaar des Stickstoffs keine Elektronendichte zum Tetrylenzentrum donieren. Für

[†] Für **YSiHMDS**: HOMO: -4.89, LUMO: -1.40, LUMO+8: 0.62 eV. Für **Y_{Ph}SiHMDS**: HOMO: -4.94, LUMO: -1.30, LUMO+4: -0.63 eV. Für **Y_{PhF}SiHMDS**: HOMO: -5.31, LUMO: -1.50, LUMO+1 -1.46 eV. Für **Y_{CN}PbHMDS** konnte kein lokales Minimum gefunden werden.

das Rotamer, in dem die Si–E–Si-Ebene coplanar zur N–E–C-Ebene liegt, konnten keine lokalen Minima gefunden werden.

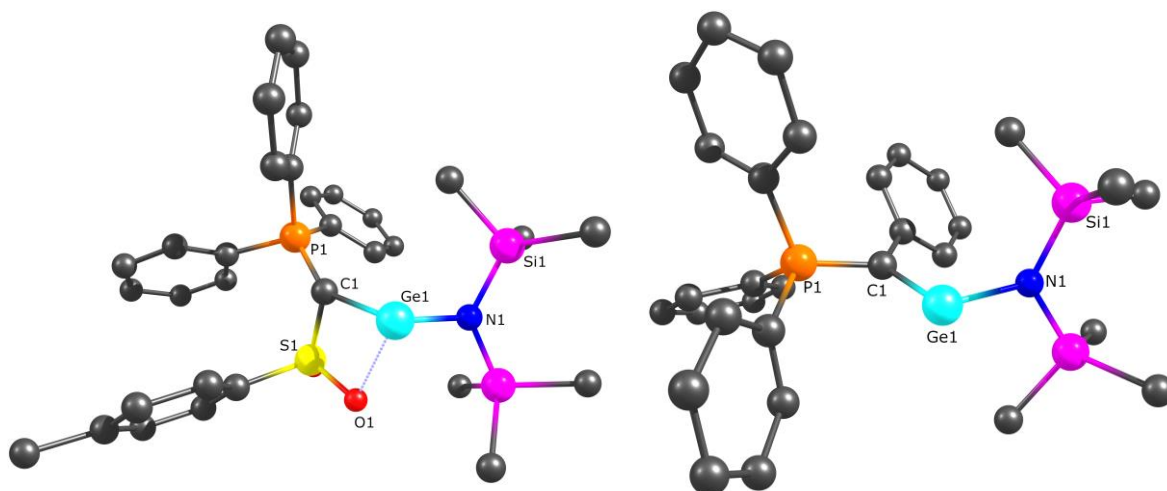


Abbildung 3.27. Die optimierten Strukturen von **YGeHMDS** und **YPhGeHMDS**. Die Wasserstoffatome sind zugunsten einer besseren Übersichtlichkeit nicht abgebildet.

Im Bezug auf die Singulett-Triplett-Abstände (Abbildung 3.28) weist **YPbHMDS** die größte Energiedifferenz auf, **YPhPbHMDS** die geringste. Generell liegen die Singulett-Triplett-Abstände für die **YEHMDS**-Tetrylene in der Größenordnung der **Y₂E**-Verbindungen. Die verbleibenden Verbindungen weisen hingegen tendenziell höhere Singulett-Triplett-Abstände auf als die entsprechenden diylidsubstituierten Derivate **Y*₂E**. Ausnahmen sind hier **Y_{PhF}SnHMDS** und **Y_{PhF}PbHMDS**.

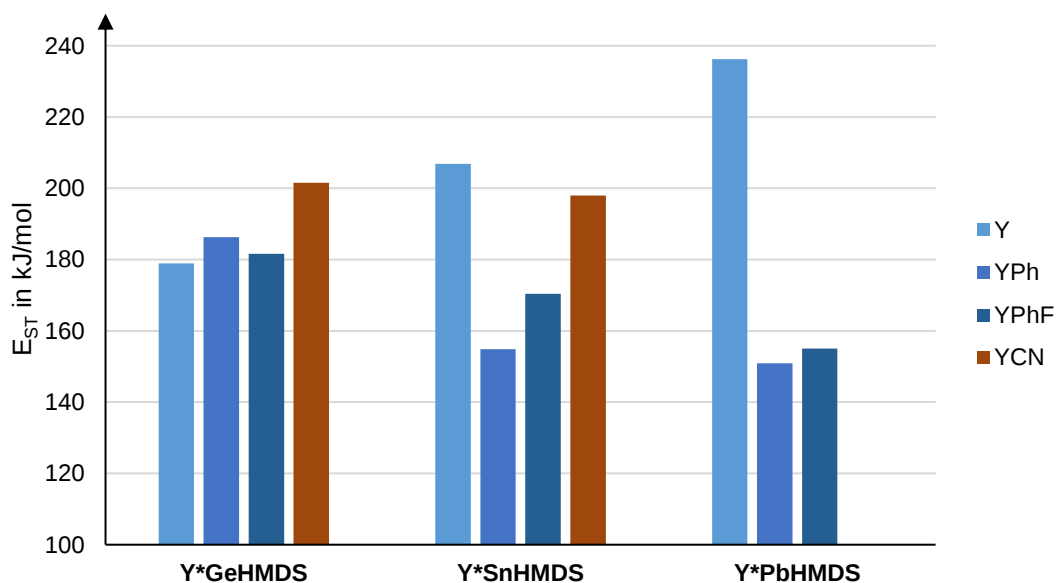


Abbildung 3.28. Singulett-Triplett-Abstände der hexamethyldisilazan(ylid)substituierten Tetrylene.^m

^m Für **YSiHMDS**: 152.0 kJ/mol. Für **YPhSiHMDS**: 158.7 kJ/mol. Für **YPhFSiHMDS**: 155.3 kJ/mol.

Als nächstes wurden ylidsubstituierte Tetrylene mit einer Perfluorphenylgruppe (C_6F_5) als zweiten Liganden am Tetrylenzentrum untersucht. Diese sollten durch einen starken -I- und keinen +M-Effekt sehr schlechte σ -Donoren und sehr gute π -Akzeptoren sein. Bei Betrachtung der HOMO- und LUMO-Energien (Abbildung 3.29) zeigte sich tatsächlich, dass die perfluorphenylsubstituierten Verbindungen meist niedrigere HOMO-Energien als die entsprechenden **Y*EHMDS**-Verbindungen aufweisen, jedoch weiterhin höhere als die entsprechenden **Y*ECI**-Verbindungen. Hingegen liegen die LUMOs der **Y*(C₆F₅)**-substituierten Verbindungen niedriger liegen als die der **Y*(HMDS)**-substituierten Verbindungen.

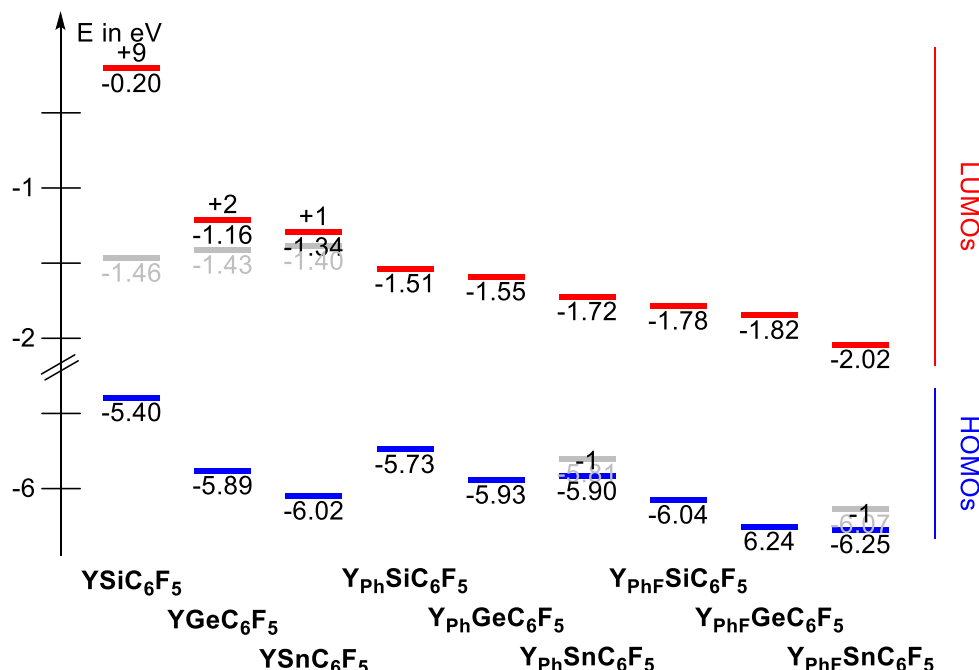


Abbildung 3.29. Die HOMO- und LUMO-Energien der mit **Y**, **Y_{Ph}** und **Y_{PhF}** substituierten Perfluorphenyltetrylene. In den Fällen, in denen das HOMO oder das LUMO nicht die erwartete Geometrie am Zentralatom aufweisen, sind diese ausgegraut und die entsprechenden Orbitale zusätzlich angegeben.

Bei den Singulett-Triplett-Abständen der **Y*EC₆F₅**-Tetrylene (Abbildung 3.30) weisen die Silylene **Y₂Si** und **YSiHMDS** größere Singulett-Triplett-Abstände als **YSiC₆F₅** auf. Die entsprechenden Energiedifferenzen liegen bei den korrespondierenden Germylenen in derselben Größenordnung und bei den Stannylenen weist **YSnC₆F₅** den geringsten Abstand auf. Weiterhin weist insbesondere **Y_{PhF}SiC₆F₅** den kleinsten bisher für ein Silylen beobachteten Singulett-Triplett-Abstand auf.

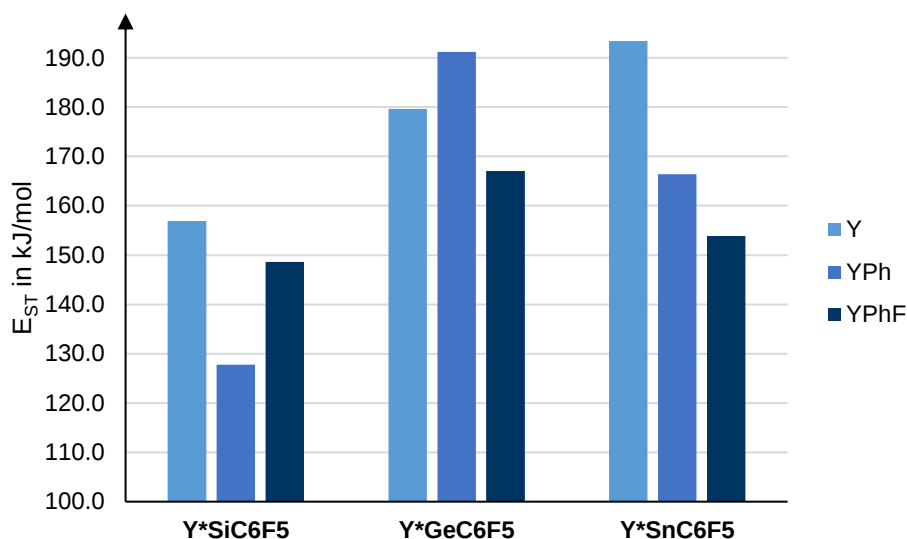


Abbildung 3.30. Singulett-Triplett-Abstände der perfluorophenyl(ylid)substituierten Tetrylene.

Als nächstes wurden ylidsubstituierte Tetrylene mit einem 2-Pyridin- oder einem 2-Pyrimidinliganden untersucht. Bei Betrachtung der entsprechenden HOMO- und LUMO-Energien der Pyridinderivate (Abbildung 3.31) fällt zunächst auf, dass für Y_{Ph} - und Y_{PhF} -Substitution die HOMO-Energien der Stannylene höher sind als die der vergleichbaren Germylene.

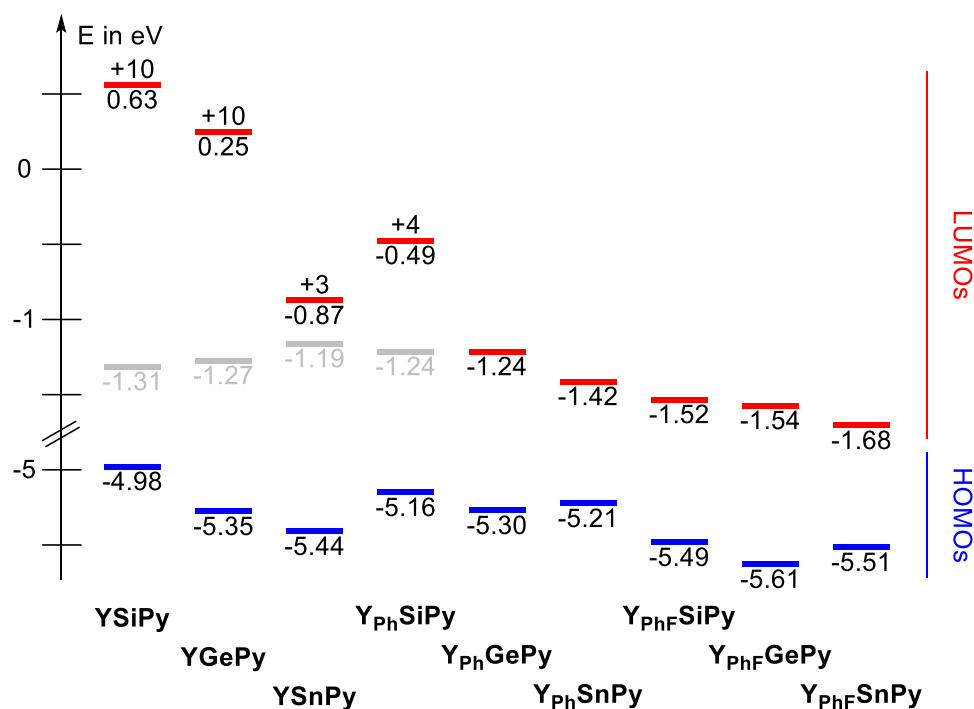


Abbildung 3.31. Die HOMO- und LUMO-Energien der mit Y, Y_{Ph} und Y_{PhF} substituierten Pyridintetrylene. In den Fällen, in denen das LUMO nicht die erwartete Geometrie am Zentralatom hat, ist dieses ausgegraut und das entsprechende Orbital zusätzlich angegeben.

Ein ähnliches Verhalten zeigt sich auch bei Pyrimidinsubstitution (Abbildung 3.32).

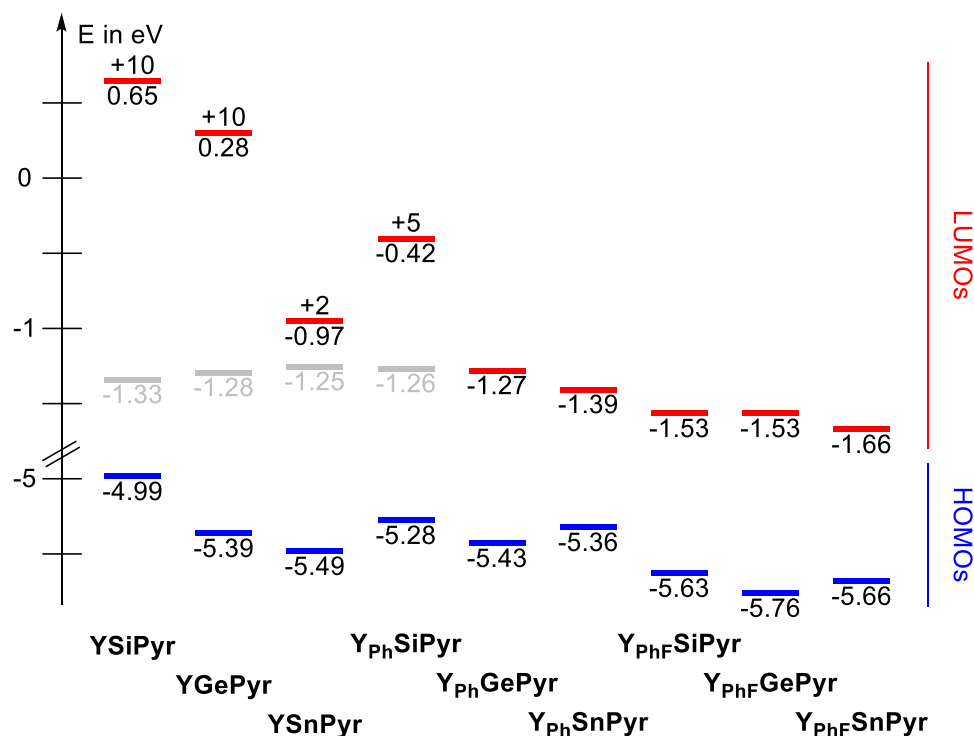


Abbildung 3.32. Die HOMO- und LUMO-Energien der mit Y, Y_{Ph} und Y_{PhF} substituierten Pyrimidintetraylene. In den Fällen, in denen das LUMO nicht die erwartete Geometrie am Zentralatom aufweist, ist dieses ausgegraut und das entsprechende Orbital zusätzlich angegeben.

Der Grund hierfür könnte in einer durch die Größe des Zinns bedingten geringeren Abstoßung des Elektronenpaares am Tetraylenzentrum mit den freien Elektronenpaaren der Stickstoffatome und der damit verbundenen höheren Elektronenlokalisierung am Zinn liegen. Dies ist allerdings unwahrscheinlich, da sowohl der Pyridin- (Abbildung 3.33) als auch der Pyrimidinring nahezu orthogonal zur C–E–C-Ebene stehen und damit eine für eine derartige Abstoßung ungünstige Geometrie aufweisen.

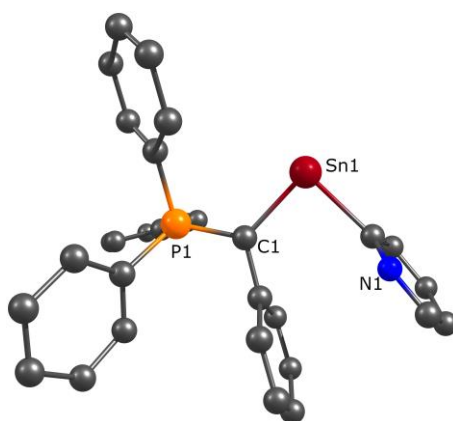


Abbildung 3.33. Optimierte Struktur von Y_{Ph}SnPy.

Ein anderer Grund könnte auch in der Größe des Zinns sowie den durch den – im Vergleich zu den leichteren Homologen – kleineren C–Sn–C-Bindungswinkel^[111,112] (Tabelle 3.6) begünstigte π -stacking-Effekten des Heterocyclus mit dem ebenfalls nahezu orthogonal zur C–E–C-Ebene stehenden Phenyl- oder Perfluorphenylresten von Y_{Ph} oder Y_{PhF} begründet

liegen. Diese sollten aber zunächst zu einem höheren s-Charakter des Zentralatoms und somit einer niedrigeren HOMO-Energie führen.^[92] Allerdings ist in allen pyridin- und pyrimidylsubstituierten Derivaten wider Erwarten das Gegenteil der Fall. So sind die $C^{Ylid}-E-R$ -Winkel zwar verhältnismäßig klein, dennoch weist das freie Elektronenpaar am Zentralatom einen verhältnismäßig geringen s-Charakter auf (Tabelle 3.6). Dieser kann entsprechend der BENT'schen Regel^[183] auf die nur schwach elektronenziehenden Eigenschaften der Pyridyl- oder Pyrimidylreste zurückgeführt werden, deren Einfluss damit den der π -stacking Effekte überwiegt.

Tabelle 3.6. Die C–E–R-Winkel [°] und die prozentualen s- und p-Anteile des freien Elektronenpaares am Zentralatom nach der NBO-Analyse am Beispiel von Y_{Ph} als Ylidligand.

	E	$(Y_{Ph})_2E$	$Y_{Ph}ECI$	$Y_{Ph}EHMDS$	$Y_{Ph}EC_6F_5$	$Y_{Ph}EPy$	$Y_{Ph}EPyr$	$Y_{Ph}EB^1$	$Y_{Ph}EB^2$
Winkel	Si	107.4	98.9	103.6	93.3	95.4	94.6	92.2	89.4
	Ge	105.1	96.8	101.0	91.3	93.5	92.2	90.8	87.3
	Sn	101.7	93.5	97.8	87.2	89.9	88.4	87.3	84.4
Hybridisierung	Si	68% s	78% s	74% s	74% s	73% s	73% s	67% s	70% s
		32% p	22% p	26% p	26% p	27% p	27% p	33% p	30% p
	Ge	76% s	84% s	81% s	80% s	79% s	79% s	73% s	76% s
		24% p	16% p	19% p	20% p	21% p	21% p	27% p	24% p
	Sn	84% s	88% s	86% s	85% s	84% s	84% s	80% s	81% s
		16% p	12% p	14% p	15% p	16% p	16% p	20% p	19% p

Dadurch bedingt sind die HOMO-Energien von beiden Spezies höher als die der Y^*ECI -, Y^*EHMDS - und $Y^*EC_6F_5$ -Tetrylene, da Chlorid, Hexamethyldisilazan und Perfluorphenyl deutlich stärker elektronenziehend sind. Diese erstaunlichen Donorfähigkeiten der pyridyl- und pyrimidylsubstituierten Derivate korrelieren gut mit anderen *push-pull*-Carbenen, wie der von FÜRSTNER et al. untersuchten Verbindung **106** (Abbildung 3.34). Dieses wies in Rhodiumcarbonylkomplexen stärkere Donoreigenschaften auf als gewöhnliche *N*-heterocyclische Carbene.^[86]

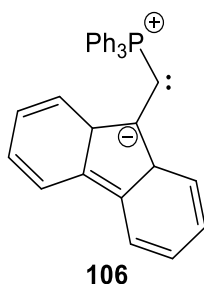


Abbildung 3.34. Das von FÜRSTNER et al. untersuchte *Push-Pull*-Carben **106**.^[86]

Durch den größeren -I-Effekt des Pyrimidins im Vergleich zum Pyridin sind abschließend die HOMO-Energien der **Y*EPyr**-Spezies niedriger als die der korrespondierenden **Y*EPy**-Tetrylene.

Bei den **Y**-substituierten Tetrylenen steigen die Singulett-Triplett-Abstände mit zunehmender Ordnungszahl des Zentralatoms (Abbildung 3.35). Gleiches gilt für die Tetrylene **Y_{Ph}EPy**. Weiterhin sind die Singulett-Triplett-Abstände für die Pyrimidinderivate **YEPyr** geringer als für die Pyridinderivate **YEPy**. Die pyrimidin(ylid)substituierten Tetrylene **YEPyr** weisen außerdem die jeweils niedrigsten bisher gefundenen Singulett-Triplett-Abstände für den **Y**-Liganden auf, wobei diese in allen Fällen eher gering sind. Das korreliert mit bisherigen Untersuchungen zu *push-pull*-Carbenen, die ebenfalls sehr geringe Abstände aufweisen.^[184] Insbesondere mit dem elektronenreichsten Ylidliganden **Y_{Ph}**, der zu der stärksten Ausbildung des *push-pull*-Systems führen sollte, können dabei besonders niedrige Energiedifferenzen beobachtet werden.

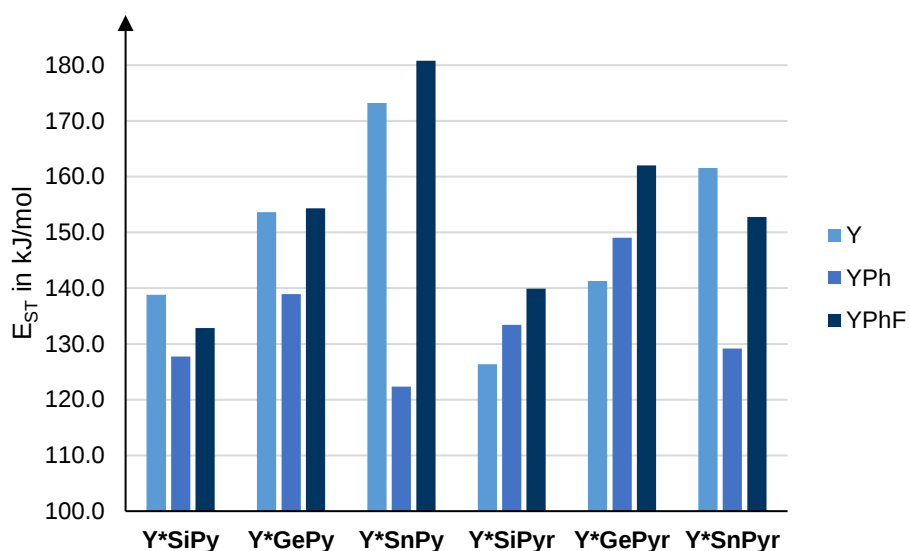


Abbildung 3.35. Singulett-Triplett-Abstände der pyridin- und pyrimidin(ylid)substituierten Tetrylene.

Da ylidsubstituierte *push-pull*-Tetrylene besondere Donorfähigkeiten bei kleinen HOMO-LUMO Abständen zeigten, wurden noch ylidsubstituierte Tetrylene untersucht, die als zweiten Liganden die an die Arbeiten von ALDRIDGE^[166,185] angelehnten Borylreste **B¹** oder **B²** tragen (Abbildung 3.36). Durch die im Vergleich zum Kohlenstoff geringere Elektronegativität des Bors^[5] könnten diese noch bessere Donoren mit gleichzeitig geringen HOMO-LUMO-beziehungsweise Singulett-Triplett-Abständen sein.

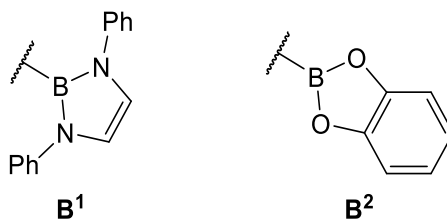


Abbildung 3.36. Die neu eingeführten Boranliganden **B¹** und **B²**.

Die Energien der HOMOs der ylidsubstituierten Tetrylene mit **B¹**-Substitution (Abbildung 3.37) sind dabei höher als die mit **B²**-Substitution (Abbildung 3.38). Gleiches gilt auch für die LUMOs der Verbindungen, solange sie die Ylide **Y_{Ph}** und **Y_{PhF}** tragen.

Weiterhin fällt bei diesen Verbindungen auf, dass, analog zur Pyridin- und Pyrimidin-substitution, die Stannylene höhere HOMO-Energien aufweisen als die Germylene. Da hier die borhaltigen Heterocyclen entsprechend nahezu senkrecht zur C–E–B-Ebene stehen, ist auch hier von *π-stacking*-Effekten mit dem Phenyl- oder Perfluorphenylsystem im Rückgrat des jeweiligen Ylidliganden auszugehen.

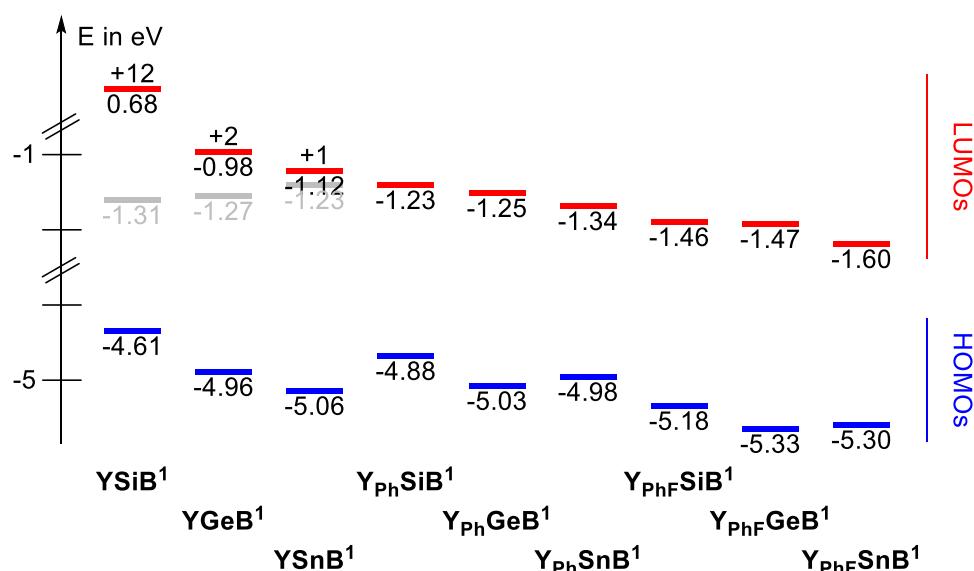


Abbildung 3.37. Die HOMO- und LUMO-Energien der mit **Y**, **Y_{Ph}** und **Y_{PhF}** substituierten **B¹**-Tetrylene. In den Fällen, in denen das LUMO nicht die erwartete Geometrie am Zentralatom aufweist, ist dieses ausgegraut und das entsprechende Orbital zusätzlich angegeben.

Im Vergleich zu den anderen Tetrylenen weisen die borylsubstituierten Tetrylene **Y*EB*** sehr hohe HOMO-Energien auf, was gut mit den Untersuchungen von ALDRIDGE et al. korreliert.^[166] Lediglich für die diyildsubstituierten Systeme **Y*₂E** konnten teilweise noch höhere HOMO-Energien gefunden werden. Das korreliert sehr gut mit den geringen s-Anteilen in den freien Elektronenpaaren am Tetrylenzentrum (Tabelle 3.6).

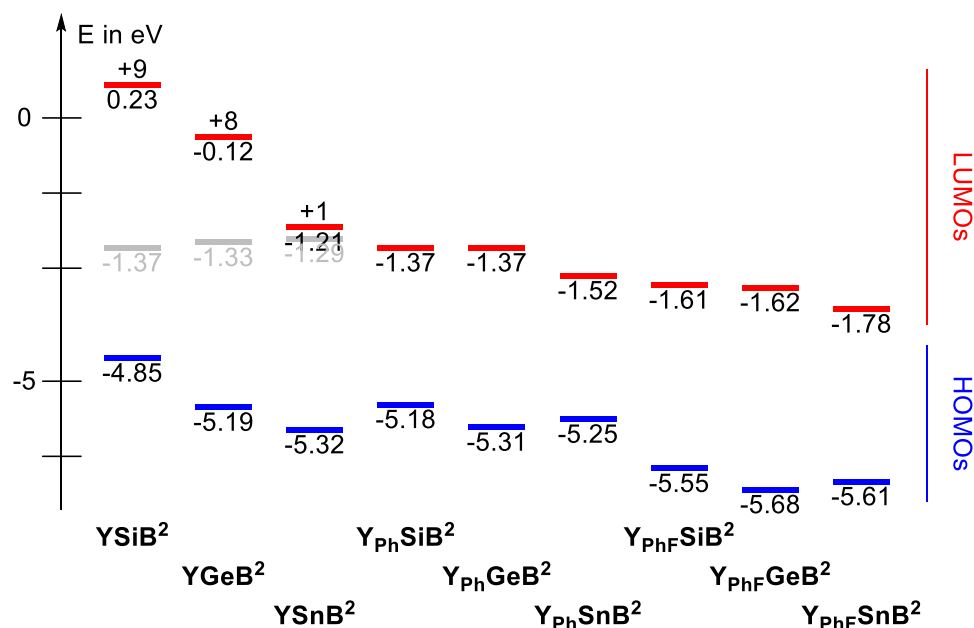


Abbildung 3.38. Die HOMO- und LUMO-Energien der mit Y, Y_{Ph} und Y_{PhF} substituierten B²-Tetrylene. In den Fällen, in denen das LUMO nicht die erwartete Geometrie am Zentralatom aufweist, ist dieses ausgegraut und das entsprechende Orbital zusätzlich angegeben.

Zusammen mit den sehr niedrig liegenden LUMOs führt das zu sehr kleinen Singulett-Triplett-Abständen (Abbildung 3.39). Während diese für keine der bisher untersuchten Tetrylene unter 120 kJ/mol lagen, trifft dies hier für sehr viele Spezies zu. Insbesondere mit dem elektronenreichsten Ylidliganden Y_{Ph}, der zu der stärksten Ausbildung des *push-pull*-Systems führen sollte, können dabei besonders niedrige Energiedifferenzen beobachtet werden. Die kleinsten Differenzen finden sich dabei für die Silylene mit B²-Substitution. So beträgt diese für YSiB² 95.4 kJ/mol, für Y_{Ph}SiB² 102.0 kJ/mol und für Y_{PhF}SiB² 109.3 kJ/mol. Diese sollten also beispielsweise für Bindungsaktivierungsreaktionen besonders günstig sein.^[186]

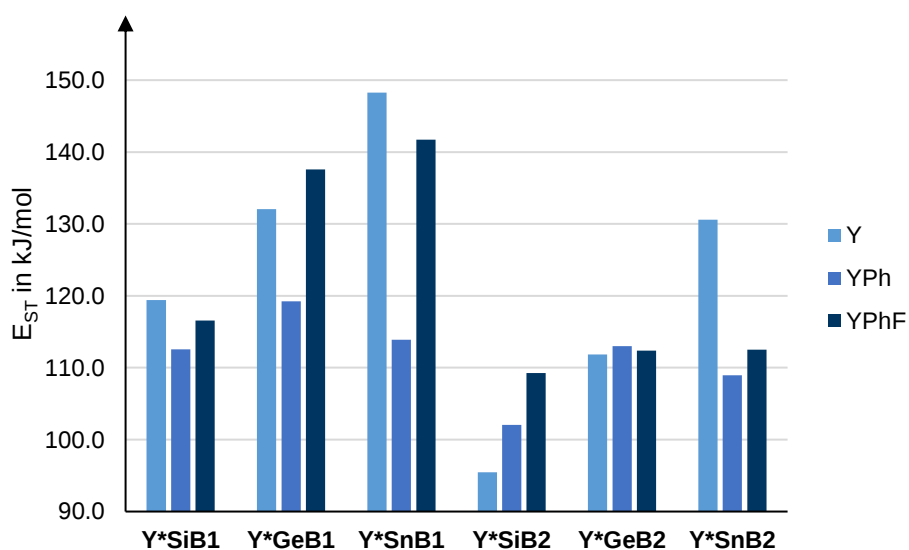


Abbildung 3.39. Singulett-Triplett-Abstände der boransubstituierten Tetrylene.

Zusätzlich zu den bisher untersuchten acyclischen ylidsubstituierten Tetrylenen wurde auch eine Reihe cyclischer Derivate untersucht. Daher wurden zunächst die Strukturen der Tetrylene **I** bis **V** optimiert (Abbildung 3.40). In allen Fällen wurde zur Einsparung von Rechenzeit eine trimethylsubstituierte Phosphoniumgruppe verwendet.

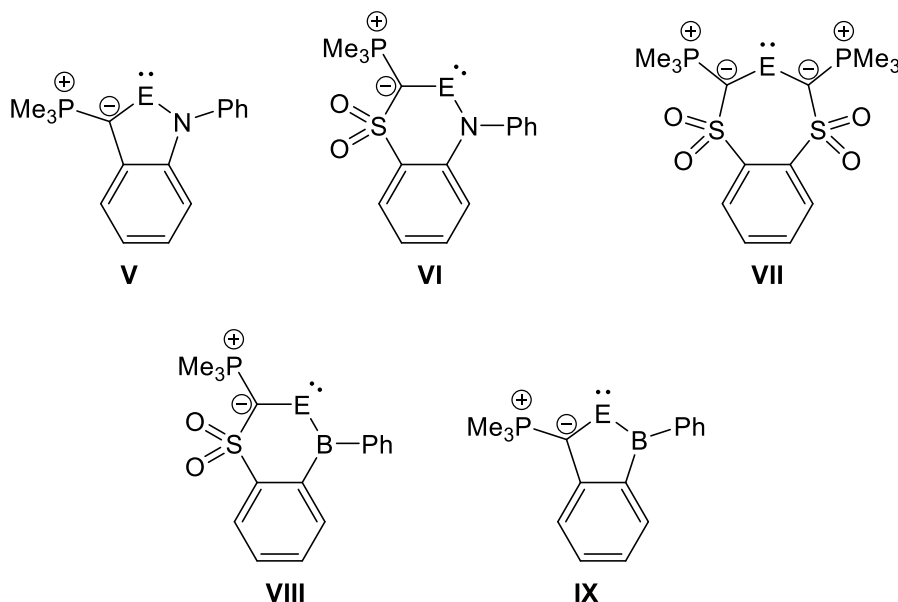


Abbildung 3.40. Die untersuchten cyclischen ylidsubstituierten Tetrylene (E = Si, Ge, Sn).

Dabei sind die Verbindungen **V** und **VI** amino(ylid)substituiert, wobei sich **VI** durch die Sulfongruppe im Backbone von **V** unterscheidet. Diese koordiniert im Fall des Silylens und des Germylens nicht zum Zentralatom, was auf eine sonst zu hohe Ringspannung zurückzuführen ist. Lediglich im Fall von **VI^{Sn}** liegt eine O→Sn-Koordination vor (Abbildung 3.41). In den Verbindungen **VII** ist der Stickstoff durch eine zweite Ylidfunktionalität ersetzt und diese Tetrylene sollten daher sehr starke Donoreigenschaften aufweisen (vergleiche Kapitel 1.2). Auch hier koordiniert nur im Stannylen ein Sauerstoffatom an das Tetrylenzentrum. Bei den Tetrylenen **VIII** kommt es hingegen zu einer Stabilisierung durch eine Koordination des Sauerstoffs an das Bor und damit wieder zu einer Coplanarität des ylidischen Kohlenstoffs mit dem Tetrylenzentrum (Abbildung 3.41). Die Strukturen von **IX** sind analog zu den Strukturen von **V** wieder planar.

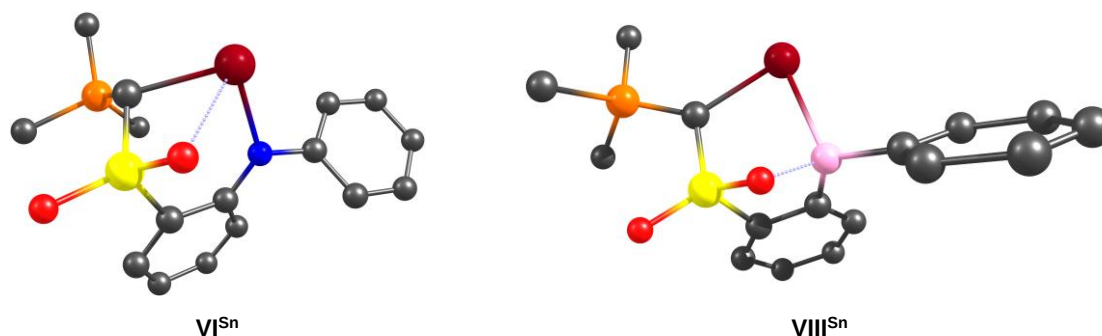


Abbildung 3.41. Die optimierten Strukturen von **VI^{Sn}** und **VIII^{Sn}**.

Bei Betrachtung der LUMO-Energien fällt zunächst auf, dass in der Regel die LUMOs der Silylene energetisch am höchsten und die der Stannylene am niedrigsten liegen (Abbildung 3.42). Die einzigen Ausnahmen sind **VI^{Sn}** und **VII^{Sn}**. Hier liegen die LUMOs höher als bei den korrespondierenden Germylenen **VI^{Ge}** und **VII^{Ge}**, was mit der Stabilisierung durch die O→Sn-Wechselwirkung erklärt werden kann. Durch diese donieren die Sauerstoffatome eine geringe Elektronendichte in das vakante Orbital des Zinns, was zum Anheben des LUMOs führt.

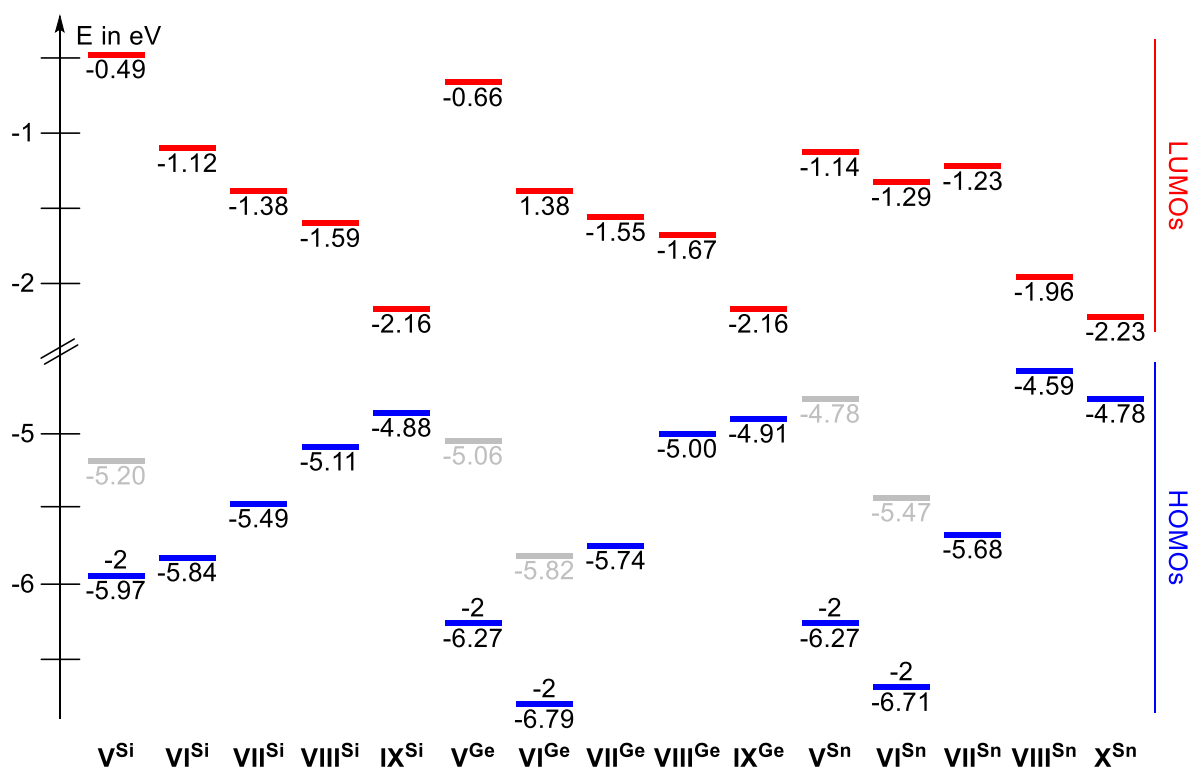


Abbildung 3.42. Die HOMO- und LUMO-Energien der ylidsubstituierten cyclischen Tetrylene. In den Fällen, in denen das HOMO nicht die erwartete Geometrie am Zentralatom aufweist, ist dieses ausgegraut und das entsprechende Orbital zusätzlich angegeben.

Weiterhin wird deutlich, dass das Fehlen der stark elektronenziehenden Sulfonylgruppe bei vergleichbaren Strukturen tendenziell zu höheren HOMO-Energien führt (vergleiche **V^{Ge}**/**VI^{Ge}**,

V^{Sn}/VI^{Sn} , $VIII^{Si}/IX^{Si}$, $VIII^{Ge}/IX^{Ge}$). Das bietet gleichzeitig eine Erklärung, warum trotz steigendem C–E–X-Winkelⁿ (X = N, B)^[91,92] die Donorfähigkeit sinkt.

Die zweifach ylidsubstituierten cyclischen Tetrylene **VII** weisen wie erwartet (siehe oben) höhere HOMO-Energien auf als die einfach ylidsubstituierten Tetrylene **V** und **VI**. Die höchsten HOMO- mit den gleichzeitig niedrigsten LUMO-Energien können jedoch analog zu den Studien über acyclische ylidsubstituierte Tetrylene bei den borylsubstituierten *Push-Pull*-Spezies **VIII** und **IX** beobachtet werden. In der Folge weisen insbesondere die Singulett- und Triplett- von **VIII** und **IX** die geringsten Energiedifferenzen auf (Abbildung 3.43).

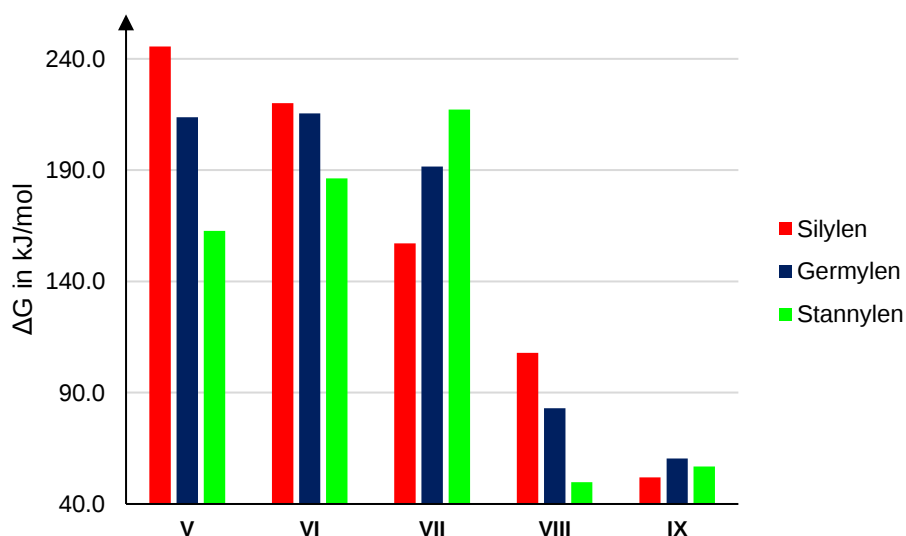


Abbildung 3.43. Singulett-Triplett-Abstände der ylidsubstituierten cyclischen Tetrylene.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass zwei Ylidliganden zwar häufig zu starken σ -Donoren führen, allerdings insbesondere boryl(ylid)substituierte Verbindungen als *Push-Pull*-Tetrylene häufig höhere HOMO-Energien bei gleichzeitig sehr niedrigen LUMO-Energien haben. In Verbindung mit einem sehr kleinen Singulett-Triplett-Abstand sind sie damit besonders interessante Synthesziele. Weiterhin führen bei acyclischen ylidsubstituierten Tetrylenen insbesondere Cyanido- und Perfluorphenylgruppen im Rückgrat des jeweiligen Ylids zu sehr elektronenarmen Spezies und damit zu sehr guten π -Akzeptoren.

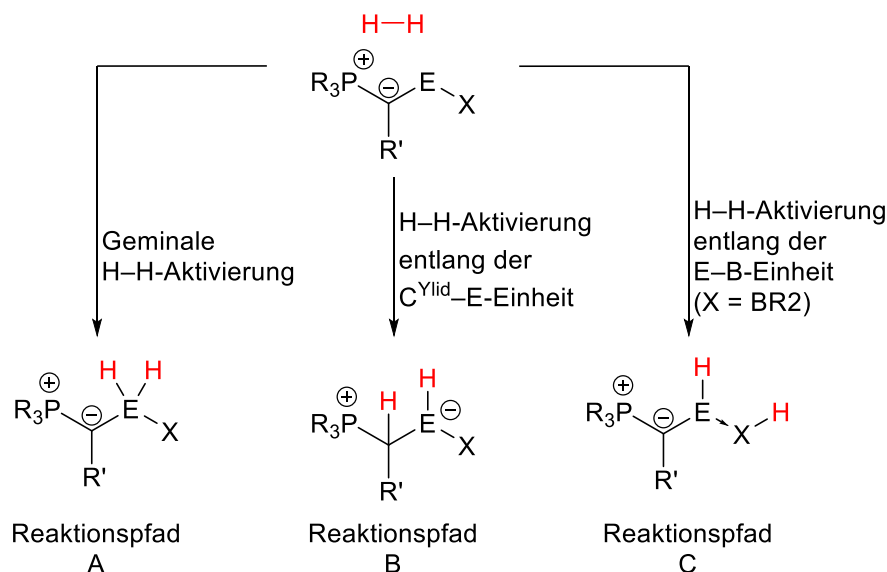
Aktivierung von Wasserstoff an ylidsubstituierten Tetrylenen

Nach der ausführlichen Untersuchung der elektronischen Eigenschaften von diversen ylidsubstituierten Tetrylenen, bietet es sich an, die gewonnenen Erkenntnisse auf die Reaktivitäten der Verbindungen zu übertragen. So wurde als nächstes ihre Eignung zur

ⁿ Ausgewählte C–E–N-Winkel [°]: **V**: E = Si: 87.2, Ge: 84.1, Sn: 77.9. **VI**: E = Si: 99.0, Ge: 96.0, Sn: 88.3. **VIII**: Si: 87.4, Ge: 85.1, Sn: 78.8. **IX**: Si: 84.5, Ge: 82.4, Sn: 77.5.

Bindungsaktivierung untersucht, zunächst am Beispiel des Wasserstoffs. Diese Reaktion wurde schon vor der ersten experimentellen Beobachtung an einem CAAC durch BERTRAND et al.^[186] quantenchemisch ausführlich untersucht^[164,167,187] und spielt seitdem eine entscheidende Rolle zur Einschätzung der elektronischen Eigenschaften von Carbenen.^[112,113,165,166,188]

Für ylidsubstituierte Tetrylene bieten sich dabei drei Möglichkeiten der Bindungsaktivierung an: Zum einen geminal am Tetrylenzentrum selbst (Reaktionspfad A), zum anderen kooperativ entlang der C^{Ylid}-E-Einheit (Reaktionspfad B) und zuletzt bei borylsubstituierten Systemen entlang der E-B-Einheit (Reaktionspfad C) (Schema 3.11). Auf die beiden zuletzt genannten Reaktionspfade wird später genauer eingegangen.



Schema 3.11. Möglichkeiten der H₂-Aktivierung an ylidsubstituierten Tetrylenen.

Der Grund für die Fähigkeit von Tetrylenen eine H-H-Bindung geminal zu spalten, liegt dabei in der besonderen elektronischen Struktur der Verbindungen. So kann das freie Elektronenpaar Elektronendichte in das σ^* -Orbital des Wasserstoffs donieren, während gleichzeitig das bindende σ -Orbital mit dem vakanten p_z -Orbital des Tetrylens überlappt (Abbildung 3.44.).^[113,186]

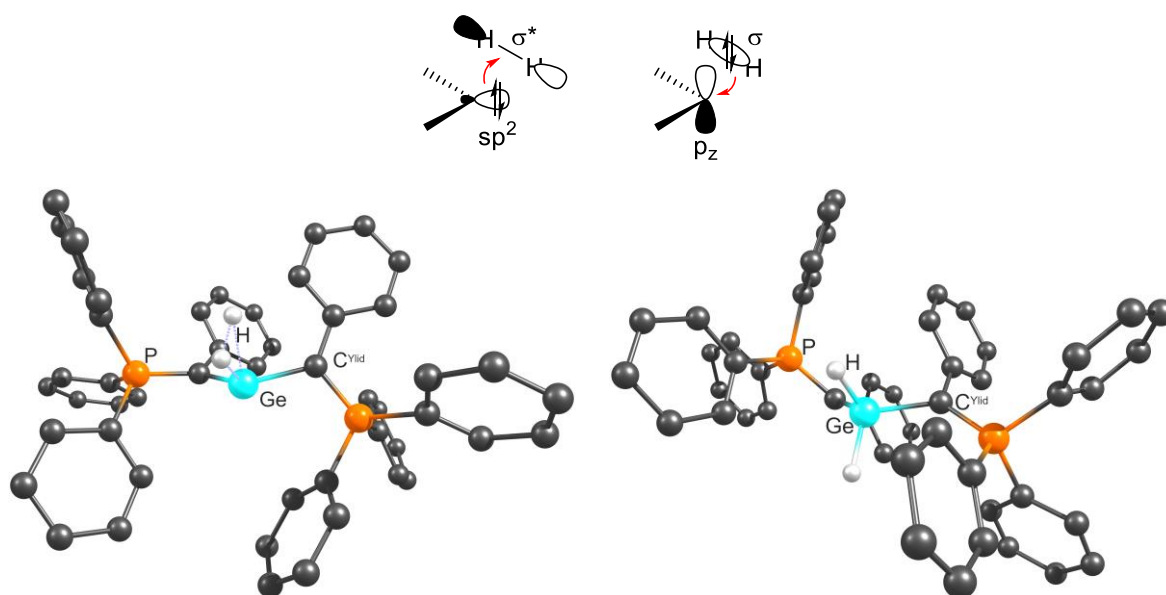


Abbildung 3.44. Reaktionspfad A: Die Interaktion des sp^2 -Orbitals des Tetrylens mit dem σ^* -Orbital des Wasserstoffs und die Interaktion des σ -Orbitals des Wasserstoffs mit dem p_z -Orbital des Tetrylens bei der geminalen H_2 -Aktivierung am Tetrylenzentrum^[113,186] (oben) sowie der Übergangszustand (unten links) und das Produkt (unten rechts) am Beispiel von $(Y_{Ph})_2Ge$. Ein Großteil der Wasserstoffatome ist zu Gunsten einer besseren Übersichtlichkeit nicht abgebildet.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Reaktion zunächst für verschiedene mit den Yliden Y , Y_{Ph} und Y_{PhF} substituierten Silylenen, Germylenen und Stannylenen untersucht. Als zweiter Ligand des Tetrylenzentrums dienten dabei entweder ein weiterer Ylidligand oder eine Chlorido-, Hexamethyldisilazan-, Perfluorphenyl-, 2-Pyridin- oder 2,6-Pyrimidingruppe oder die Boranreste B^1 oder B^2 .

Bei Betrachtung der Thermodynamik der jeweiligen Reaktionen fällt zunächst auf, dass, analog zu bisherigen Studien,^[112,113,167] die Reaktion unabhängig von der Substitution mit Silylenen thermodynamisch am günstigsten und mit Stannylenen am ungünstigsten ist (Tabelle 3.7). Das hängt mit der höheren Stabilität der schwereren Elemente in der Oxidationsstufe +II zusammen und führt dazu, dass in den meisten Fällen die Reaktion zu den Stannanen thermodynamisch ungünstig ist.

Tabelle 3.7. Energien [kJ/mol] der Produkte der geminalen H₂-Aktivierung mit ylidsubstituierten Tetrylenen. Die Farbskala bewegt sich zwischen -151.2 und 56.5.

	Si			Ge			Sn		
	Y	Y _{Ph}	Y _{PhF}	Y	Y _{Ph}	Y _{PhF}	Y	Y _{Ph}	Y _{PhF}
Y*₂E	-122.2	-126.2	-114.3	-36.0	-44.3	-43.7	50.5	-0.8	11.0
Y*ECI	-100.9	-109.2	-100.5	-18.6	-21.3	-8.8	56.5	29.4	45.1
Y*EHMDS	-138.2	-122.3	-129.5	-45.8	-31.5	-43.6	37.6	22.9	17.9
Y*EC₆F₅	-120.5	-114.5	-106.5	-46.5	-29.2	-27.8	27.9	26.6	39.4
Y*EPy	-132.4	-125.9	-125.4	-55.5	-42.9	-46.9	20.4	6.9	6.7
Y*EPyr	-132.4	-123.3	-120.8	-58.4	-47.3	-35.9	17.1	5.2	20.1
Y*EB¹	-125.9	-120.8	-125.9	-60.5	-59.7	-56.4	8.3	-12.6	-7.5
Y*EB²	-151.2	-128.3	-114.9	-83.8	-52.1	-56.6	-10.5	1.8	-2.4

Im Bezug auf die unterschiedlichen Ylidsubstituenten wird weiterhin deutlich, dass bei den Silylenen insbesondere **Y** zu thermodynamisch besonders stabilen Produkten führt. Im Gegensatz dazu führt dieses Ylid bei den Stannylenen meist zu thermodynamisch besonders ungünstigen Produkten.

Im Bezug auf die zweiten Substituenten fällt auf, dass insbesondere die Chloridverbindungen zu thermodynamisch ungünstigen Reaktionen führen. Das hängt damit zusammen, dass Verbindungen in der Oxidationsstufe +II durch elektroneigativere Liganden besser stabilisiert werden.^[189] Umgekehrt führen die Borane **B¹** und **B²** zu thermodynamisch besonders günstigen Produkten.

Bei der Untersuchung der Kinetik bietet sich zunächst ein ähnliches Bild. So sind auch hier die Reaktionen der Silylene besonders günstig und die der Stannylene besonders ungünstig (Tabelle 3.8).

Tabelle 3.8. Reaktionsbarrieren [kJ/mol] für die geminale H₂-Aktivierungen an ylidsubstituierten Tetrylenen. Die Farbskala bewegt sich zwischen 77.6 und 304.7.

	Si			Ge			Sn		
	Y	Y _{Ph}	Y _{PhF}	Y	Y _{Ph}	Y _{PhF}	Y	Y _{Ph}	Y _{PhF}
Y*₂E	n.b.	126.3	174.5	204.8	184.0	232.6	289.7	229.2	269.3
Y*ECI	157.8	161.4	168.6	212.3	217.5	228.4	283.2	269.1	276.5
Y*EHMDS	n.b.	143.4	159.7	220.5	197.0	209.5	304.7	249.6	265.4
Y*EC₆F₅	146.9	125.3	155.9	205.4	185.4	212.9	263.0	247.8	279.8
Y*EPy	106.7	105.5	139.2	163.7	154.8	190.7	232.5	204.8	256.7
Y*EPyr	96.9	109.0	143.1	145.9	162.8	200.5	231.0	215.5	262.7
Y*EB¹	85.6	91.0	86.3	150.2	132.0	133.1	209.5	183.1	192.8
Y*EB²	n.b.	77.6	93.2	n.b.	124.3	134.9	n.b.	182.4	197.7

Weiterhin begünstigt vor allem das besonders elektronenreiche Ylid $\mathbf{Y_{Ph}}$ die Reaktion. Allerdings ist hier der Einfluss der zweiten Substituenten auf die Kinetik deutlich höher als auf die Thermodynamik. So fällt auf, dass die Reaktionsbarriere durch elektronenarme Liganden wie Pyridin und Pyrimidin und besonders durch die Borylsubstituenten $\mathbf{B^1}$ und $\mathbf{B^2}$ gesenkt wird, was mit den Beobachtungen von ALDRIDGE et al. korreliert.^[166] Das resultiert aus dem Zusammenspiel von guter Donorstärke mit einem gleichzeitig sehr geringen HOMO-LUMO-beziehungsweise Singulett-Triplett-Abstand. In der Folge sind die *Push-Pull*-Silylene die wahrscheinlich einzigen, bei denen die Reaktion bei Raumtemperatur abläuft.

Analog zu der Aktivierung von H_2 am Tetrylenzentrum von acyclischen ylidsubstituierten Tetrylenen wurde diese Reaktion auch an den cyclischen Derivaten **V–IX** untersucht. Allerdings konnten hierfür zunächst keine Übergangszustände für die meisten borylsubstituierten Spezies gefunden werden (Tabelle 3.9). Ansonsten zeigt sich, dass die Reaktionsbarrieren wie in den obigen Untersuchungen insbesondere an den Stannylenen sehr hoch sind, während sie für die Silylene am geringsten sind. Außerdem kann für die Energien der Übergangszustände der Trend **V** > **VI** > **VII** > **VIII** beobachtet werden, was in den meisten Fällen gut mit den HOMO-LUMO-beziehungsweise Singulett-Triplett-Abständen korreliert.

Tabelle 3.9. Die Reaktionsbarrieren [kJ/mol] der geminalen H_2 -Aktivierung von cyclischen ylidsubstituierten Tetrylenen und die Energien der Produkte der Reaktion. Die Farbskala bewegt sich zwischen 93.8 und 321.2 für die Übergangszustände und -136.7 und 88.8 für die Produkte.

	ΔG^{Barr}			ΔG^{Prod}		
	Si	Ge	Sn	Si	Ge	Sn
V	224.1	274.0	321.2	-53.8	34.1	88.8
VI	174.9	232.6	285.7	-99.9	-12.7	56.3
VII	124.1	185.6	262.0	-144.4	-53.6	18.9
VIII	93.8	n.b.	n.b.	-136.7	-75.9	-15.6
IX	n.b.	n.b.	n.b.	-147.3	-84.3	-25.0

Im Bezug auf die Thermodynamik der Reaktion kann festgestellt werden, dass die Silylene in allen und die Germylene in fast allen Fällen zu thermodynamisch günstigen Produkten führen. Bei den Stannylenen ist dies nur für die borylsubstituierten Systeme der Fall.

Die Aktivierung am Tetrylenzentrum ist allerdings zumindest theoretisch nicht die einzige Möglichkeit einer H_2 -Aktivierung an ylidsubstituierten Tetrylenen. Auch eine kooperative Aktivierung an der $\text{C}^{\text{Ylid}}\text{--E}$ -Einheit könnte möglich sein (**Abbildung 3.45.**). Hier käme es zu einer Donation von Elektronendichte aus dem freien Elektronenpaar des ylidischen

Kohlenstoffatoms in das antibindende σ^* -Orbital des Wasserstoffmoleküls bei gleichzeitigem Überlapp des bindenden σ -Orbitals des Wasserstoffs mit dem vakanten p_z -Orbital am Tetrylenzentrum.

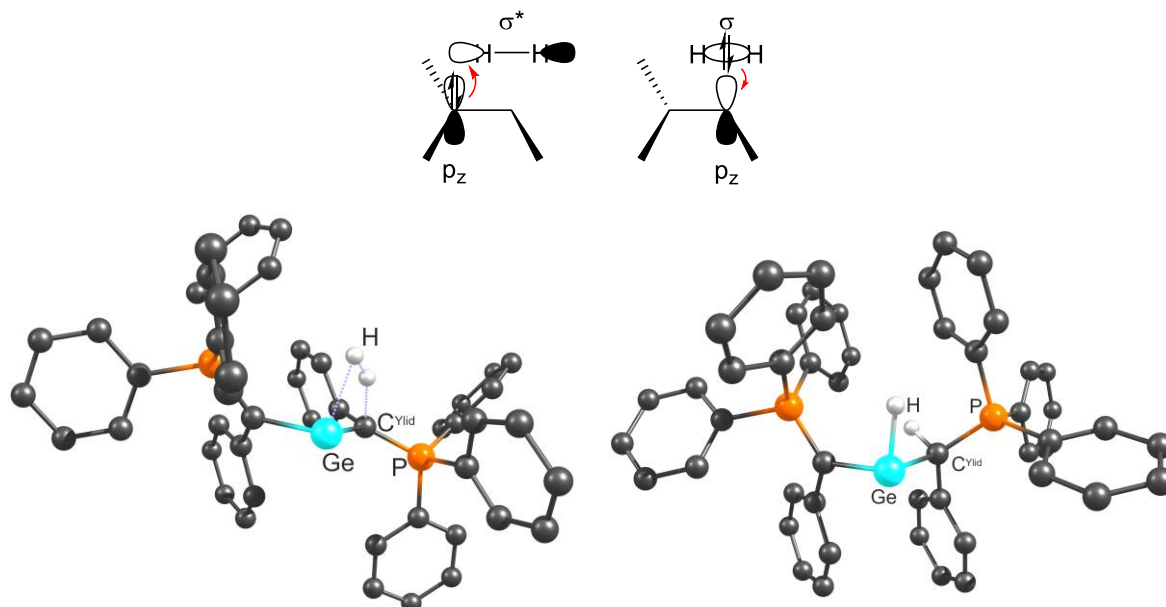


Abbildung 3.45. Reaktionspfad B: Die Interaktion des p_z -Orbitals des ylidischen Kohlenstoffatoms mit dem σ^* -Orbital des Wasserstoffs und die Interaktion des σ -Orbitals des Wasserstoffs mit dem p_z -Orbital des Tetrylens bei der kooperativen H_2 -Aktivierung an ylidsubstituierten Tetrylen entlang der C^{Ylid} -E-Bindung (oben) sowie der Übergangszustand (unten links) und das Produkt (unten rechts) am Beispiel von $(Y_{Ph})_2Ge$. Ein Großteil der Wasserstoffatome ist zu Gunsten einer besseren Übersichtlichkeit nicht abgebildet.

Für die Testsysteme wurden hier die Ylide **Y** und **Y_{Ph}** gewählt. Als zweiter Substituent fungierte entweder ein zweites Ylid oder die Liganden **Cl**, **HMDS** und **B¹**. Bei Betrachtung der Thermodynamik der Reaktion fällt dabei zunächst auf, dass das Ylid **Y_{Ph}** in allen Fällen zu thermodynamisch günstigeren Reaktionen führt als das Ylid **Y** (Tabelle 3.10). Der Grund hierfür liegt wahrscheinlich darin, dass das jeweilige **Y**-substituierte Ausgangstetrylen eine Stabilisierung durch die Sulfongruppe erfährt. Eine solche Stabilisierung liegt bei einer **Y_{Ph}**-Substitution nicht vor und muss entsprechend auch nicht gebrochen werden (Abbildung 3.45). In der Folge sind die Produkte mit **Y**-Substitution thermodynamisch ungünstiger als die entsprechenden Edukte. Bei Verwendung von **Y_{Ph}**-substituierten Tetrylen sind hingegen die Produkte thermodynamisch günstiger als die Edukte, was dazu führt, dass, zumindest für die Stannylene und **Y_{Ph}GeCl**, hier die Reaktion thermodynamisch gegenüber der geminalen H_2 -Aktivierung bevorzugt ist.

Tabelle 3.10. Energien der Produkte [kJ/mol] der kooperativen H₂-Aktivierung entlang der C^{Ylid}–E-Einheit von ylidsubstituierten Tetrylenen. Die Farbskala bewegt sich zwischen -35.7 und 158.5.

	Si		Ge		Sn	
	Y	Y _{Ph}	Y	Y _{Ph}	Y	Y _{Ph}
Y*₂E	134.3 ^o	-12.1	158.5 ^o	-20.4	149.2 ^o	-35.7
Y*ECI	41.9	-10.4	23.6	-16.9	15.3	-23.1
Y*EHMDS	39.7	-5.9	37.9	-12.6	50.4	-22.8
Y*EB¹	18.0	-22.0	19.1	-21.3	40.5	-19.2

Kinetisch ist die Reaktion ebenfalls für die Y-substituierten Tetrylene ungünstiger als für die Tetrylene mit Y_{Ph}-Substitution (Tabelle 3.11). Die niedrigsten Reaktionsbarrieren weisen dabei jeweils die borylsubstituierten Verbindungen auf. Die Barrieren liegen zwar alle in Größenordnungen, dass sie zumindest bei Raumtemperatur nicht überwunden werden können, allerdings sind sie für alle Stannylene sowie die meisten Germylene und Y_{Ph}SiCl niedriger als für die geminale H₂-Aktivierung. Das hängt wahrscheinlich mit der hohen Stabilität von schweren Tetrelen in der Oxidationsstufe +II zusammen, die bei dieser Reaktion erhalten bleibt.

Tabelle 3.11. Die Reaktionsbarrieren [kJ/mol] der kooperativen H₂-Aktivierung entlang der C^{Ylid}–E-Einheit von ylidsubstituierten Tetrylenen. Die Farbskala bewegt sich zwischen -115.3 und 207.9.

	Si		Ge		Sn	
	Y	Y _{Ph}	Y	Y _{Ph}	Y	Y _{Ph}
Y*₂E	207.9	145.6	206.8	134.8	191.5	115.5
Y*ECI	158.5	151.2	n.b.	149.1	136.3	n.b.
Y*EHMDS	179.5	149.4	172.5	151.2	n.b.	141.0
Y*EB¹	115.4	120.6	122.8	126.0	n.b.	115.3

Bei der Aktivierung von Wasserstoff entlang der C^{Ylid}–E-Bindung (Abbildung 3.45.) der acyclischen Tetrylene **V** bis **IX**, nehmen die Barrieren in der Reihe **V** > **VI** > **VII** > **VIII** > **IX** ab und sind wie bei den acyclischen Derivaten gleichzeitig relativ unabhängig vom jeweiligen Zentralatom. Dabei dürften die Barrieren lediglich im Falle von **IX** niedrig genug liegen, als dass die Reaktion auch bei Raumtemperatur freiwillig abläuft, zumindest im Falle von **VIII** sollte sie aber trotzdem synthetisch zugänglich sein (Tabelle 3.12).

^o Zersetzungsprodukt

Tabelle 3.12. Die Reaktionsbarrieren [kJ/mol] der kooperativen H₂-Aktivierung entlang der C^{Ylid}-E-Einheit von cyclischen ylidsubstituierten Tetrylenen und die Energien der Produkte der Reaktion. Die Farbskala bewegt sich zwischen 80.6 und 188.4 für die Reaktionsbarrieren und zwischen -80.6 und 31.7 für die Produkte.

	ΔG^{Barr}			ΔG^{Prod}		
	Si	Ge	Sn	Si	Ge	Sn
V	185.4	188.4	174.3	25.5	15.2	-3.8
VI	161.8	153.0	n.b.	-0.5	-8.1	-4.7
VII	121.6	122.5	135.4	22.7	21.5	29.5
VIII	113.1	109.3	114.9	3.4	5.2	31.7
IX	80.6	89.0	94.7	-80.6	-63.5	-42.1

Auch die Thermodynamik der Reaktion verhält sich relativ unabhängig vom jeweiligen Zentralatom. Außerdem sind in den meisten Fällen die Reaktionsprodukte thermodynamisch ungünstiger als die Edukte. Die einzigen Ausnahmen stellen die Tetrylene V^{Sn}, VI und IX dar.

Bei den borylsubstituierten Tetrylenen bietet sich weiterhin zumindest theoretisch noch ein dritter Reaktionspfad an. So könnte die H₂-Aktivierung auch entlang der E–B-Bindung verlaufen, da hier das freie Elektronenpaar des Tetrylenzentrums Elektronendichte in das antibindende σ^* -Orbital des Wasserstoffs doniert. Gleichzeitig könnte das bindende σ -Orbital des H₂-Moleküls mit dem vakanten Orbital des Bors überlappen. Das Produkt einer solchen Reaktion wäre ein tetrylenstabilisiertes Boran (Abbildung 3.46.).

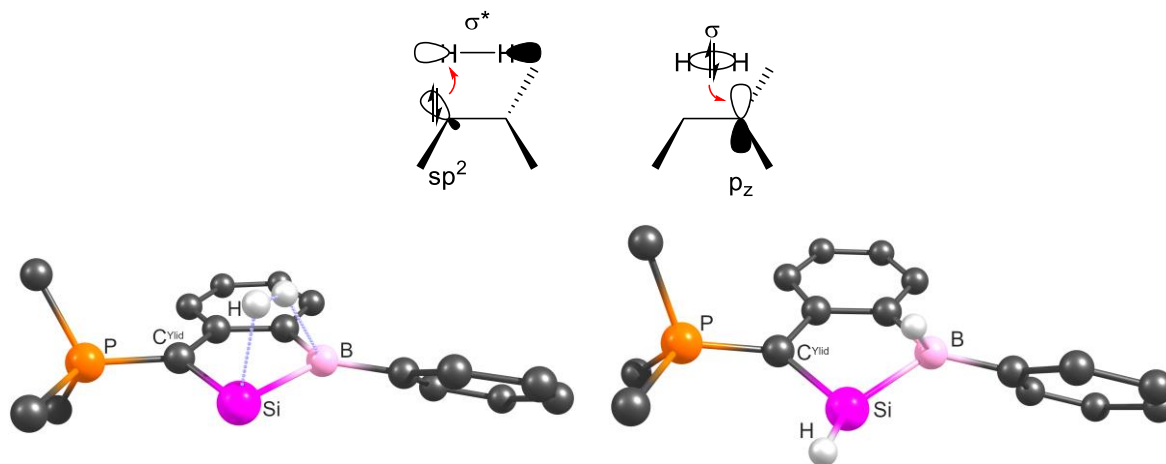


Abbildung 3.46. Reaktionspfad C: Die Interaktion des sp^2 -Orbitals des Tetrylens mit dem σ^* -Orbital des Wasserstoffs sowie die Interaktion des σ -Orbitals des Wasserstoffs mit dem p_z -Orbital des Bors bei der H₂-Aktivierung an borylsubstituierten Tetrylenen entlang der E–B-Bindung (oben) sowie der Übergangszustand (unten links) und das Produkt (unten rechts) am Beispiel von IX^{Si}. Ein Großteil der Wasserstoffatome ist zu Gunsten einer besseren Übersichtlichkeit nicht abgebildet.

Die Reaktionsbarrieren für eine solche Reaktion sind dabei in allen Fällen sehr gering, sodass selbst beim Stannylen IX^{Sn} die Reaktion bei Raumtemperatur ablaufen sollte (Tabelle 3.13).

Tabelle 3.13. Die Reaktionsbarrieren (ΔG^{Barr}) [kJ/mol] der H_2 -Aktivierung entlang der B–E-Achse von bor(ylid)substituierten Tetrylenen und die Energien der Produkte (ΔG^{Prod}) [kJ/mol] der Reaktion. Die Farbskala bewegt sich zwischen 41.2 und 113.5 für die Reaktionsbarrieren und zwischen -115.5 und 31.3 für die Produkte.

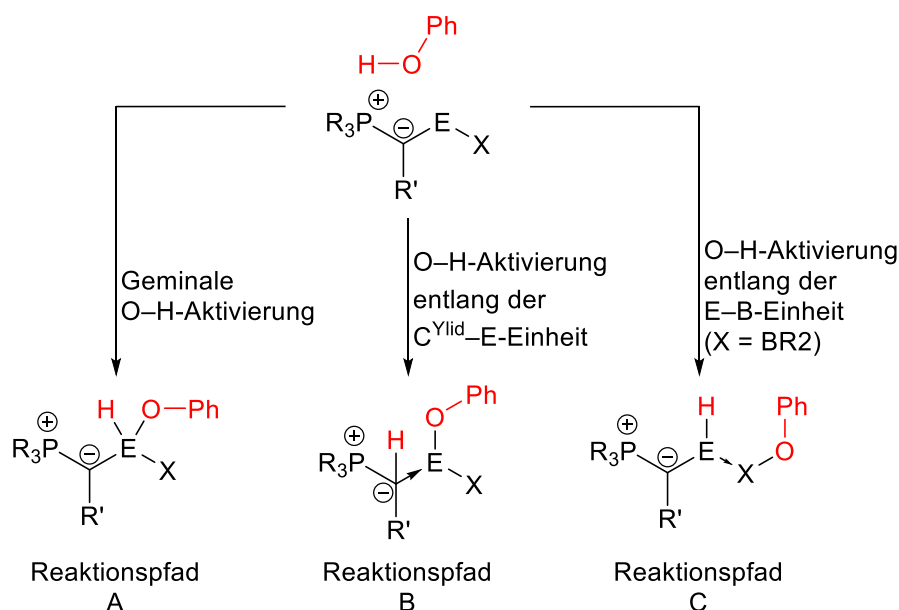
	ΔG^{Barr}			ΔG^{Prod}		
	Si	Ge	Sn	Si	Ge	Sn
VIII	83.0	88.2	113.5	-41.0	-31.3	-30.7
IX	41.2	57.1	55.4	-115.5	-75.9	-57.8

Ebenso zeigt sich, dass die Reaktionsprodukte in allen Fällen thermodynamisch günstiger sind, wenn auch etwas weniger als bei der geminalen H_2 -Aktivierung am Tetrylenzentrum. Außerdem kann festgestellt werden, dass diese Reaktion für die Tetrylene **V** sowohl kinetisch als auch thermodynamisch günstiger ist als für die Tetrylene **IV**. Das kann zum einen mit dem Elektronenreichtum durch das Fehlen der elektronenziehenden Eigenschaften der Sulfonylgruppe erklärt werden, zum anderen allerdings auch durch die fehlende Stabilisierung des Bors in den Tetrylenen **IX** durch die Koordination des Sauerstoffatoms der Sulfonylgruppe.

Zusammenfassend ist insbesondere bei Verbindungen mit nicht-stabilisierten Boranen als Substituent des Tetrylenzentrums die Aktivierung entlang der E–B-Bindung bevorzugt. Ansonsten weisen für die geminale Wasserstoffaktivierung insbesondere aus kinetischer Perspektive *Push-Pull*-Tetrylene besonders niedrige Reaktionsbarrieren auf, gleiches gilt für die kooperative Aktivierung entlang der C^{Ylid} –E-Einheit.

Aktivierung von Phenol an ylidsubstituierten Tetrylenen

Nach der ausführlichen Untersuchung zur Aktivierung der unpolaren H–H-Bindung an ylidsubstituierten Tetrylenen wurde als nächstes die Aktivierung einer polaren O–H-Bindung am Beispiel von Phenol untersucht. Analog bieten sich auch hier drei verschiedene Reaktionspfade an. So besteht auch hier die bereits gut untersuchte Möglichkeit der geminalen O–H-Bindungsaktivierung am Tetrylenzentrum selbst (Schema 3.12, Reaktionspfad A).^[169,190,191] Weiterhin könnte die O–H-Bindung aber auch kooperativ an der C^{Ylid} –E-Einheit gespalten werden, was zu einem ylidstabilisiertem phenolatsubstituierten Tetrylen führt (Schema 3.12, Reaktionspfad B). Für borylsubstituierte Tetrylene ergibt sich als dritte Möglichkeit noch die O–H-Aktivierung entlang der E–B-Bindung (Schema 3.12).



Schema 3.12. Möglichkeiten der Phenolaktivierung an ylidsubstituierten Tetrylenen.

Als erstes wurde im Rahmen dieser Arbeit die geminale O-H-Aktivierung anhand der Modellsysteme **V** bis **IX** betrachtet. Dabei fällt zunächst auf, dass die jeweilige präkoordinierende Spezies, in der das Tetrylenzentrum mit dem Sauerstoff ein Lewis-Säure-Base-Addukt bildet (Abbildung 3.47), sich thermodynamisch ($\Delta G^{\text{Präko}}$) kaum von den Edukten unterscheidet (Tabelle 3.14).

Tabelle 3.14. Energien [kJ/mol] der Phenolaktivierung am Tetrylenzentrum von cyclischen, ylidsubstituierten Tetrylenen. Die Farbskala bewegt sich zwischen -231.2 und 163.0.

	Si			Ge			Sn		
	$\Delta G^{\text{Präko}}$	ΔG^{Barr}	ΔG^{Prod}	$\Delta G^{\text{Präko}}$	ΔG^{Barr}	ΔG^{Prod}	$\Delta G^{\text{Präko}}$	ΔG^{Barr}	ΔG^{Prod}
V	-1.1	114.7	-168.9	1.7	163.0	-23.8	—	—	47.8
VI	—	102.9	-197.3	—	148.0	-51.1	—	—	27.6
VII	-6.2	43.1	-240.6	7.8	108.1	-97.4	6.6	154.3	-7.2
VIII	0.8	69.5	-226.3	-6.2	80.2	-120.5	-5.1	104.9	-60.7
IX	2.9	62.9	-231.2	4.1	59.4	-231.2	0.0	122.2	-58.5

Bei den Reaktionsbarrieren (ΔG^{Barr}) fällt zunächst eine starke Abhängigkeit vom Tetrylenzentrum auf. So sind diese analog zur H-H-Aktivierung bei den Silylenen am niedrigsten und bei den korrespondierenden Stannylene am höchsten. Das korreliert gut mit der höheren Stabilität der schwereren Tetrele in der Oxidationsstufe +II. In der Folge sind die Reaktionen der Stannylene auch thermodynamisch (ΔG^{Prod}) am ungünstigsten.

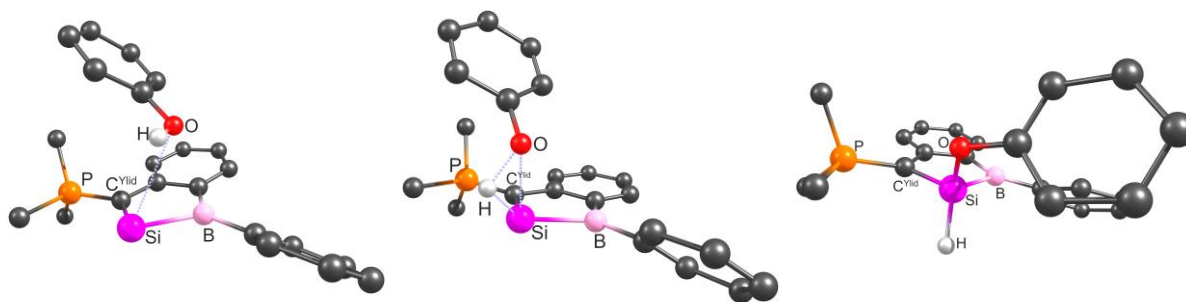


Abbildung 3.47. Die geminale Aktivierung von Phenol an IX^{Si} (Reaktionspfad A): Die Präkoordination (links), der Übergangszustand (mitte) und das Produkt (rechts). Ein Großteil der Wasserstoffatome ist zu Gunsten einer besseren Übersichtlichkeit nicht abgebildet.

Weiterhin ist auffällig, dass die Reaktion auch stark vom jeweiligen System abhängt. So sinken die Reaktionsbarrieren und Produktenergien in etwa in der Reihe $\text{V} > \text{VI} > \text{VII} > \text{VIII} > \text{IX}$, was in etwa den HOMO-LUMO- beziehungsweise Singulett-Triplett-Abständen entspricht. Dies steht in Analogie zu den von PHUKAN et al. untersuchten N–H-Aktivierungen an Tetrylenen^[112] und zeigt wieder einmal die Vorteilhaftigkeit von *Push-Pull*-Tetrylenen.

Interessanterweise wurde die kooperative Aktivierung von O–H-Gruppen entlang der $\text{C}^{\text{Ylid}}\text{--E}$ -Bindung von ylidsubstituierten Tetrylenen bisher nicht untersucht. Hier stellt sich zunächst heraus, dass die präkoordinierenden Spezies in den meisten Fällen und insbesondere für **VII** thermodynamisch ($\Delta G^{\text{Präko}}$) sehr günstig sind. Ebenso ist die gesamte Reaktion (ΔG^{Prod}) in allen Fällen thermodynamisch vorteilhaft, insbesondere im Fall der Tetrylene **IX**. Der Grund hierfür ist die zusätzliche Stabilisierung des Bors im Produkt durch das freie Elektronenpaar des Zentralatoms (Abbildung 3.48).

Tabelle 3.15. Energien [kJ/mol] der Phenolaktivierung entlang der $\text{C}^{\text{Ylid}}\text{--E}$ -Bindung von cyclischen, ylidsubstituierten Tetrylenen. Die Farbskala bewegt sich zwischen **-140.8** und **63.3**.

	Si			Ge			Sn		
	$\Delta G^{\text{Präko}}$	ΔG^{Barr}	ΔG^{Prod}	$\Delta G^{\text{Präko}}$	ΔG^{Barr}	ΔG^{Prod}	$\Delta G^{\text{Präko}}$	ΔG^{Barr}	ΔG^{Prod}
V	-3.0	63.3	-64.7	-4.1	55.5	-39.2	-7.7	27.3	-60.1
VI	2.2	43.8	-88.6	4.4	31.7	-65.7	-7.6	31.7	-80.9
VII	-21.2	45.1	-64.2	-15.9	28.5	-49.0	-36.6	16.4	-44.6
VIII	2.7	23.6	-54.2	-3.6	22.7	-32.7	-6.4	7.9	-44.5
IX	-5.7	18.0	-140.8	-8.4	14.6	-101.8	-12.6	-8.6	-102.0

Auch kinetisch wird die Reaktion wieder in der Reihe $\text{V} > \text{VI} > \text{VII} > \text{VIII} > \text{IX}$ günstiger. Dabei liegt allerdings keine Barriere (ΔG^{Barr}) über 63.3 kJ/mol, und die Reaktionen sollten sowohl bei Raum- als auch bei tieferen Temperaturen sehr gut ablaufen. Weiterhin wird die Reaktion mit zunehmender Ordnungszahl des Zentralatoms günstiger. In der Folge weist die

Phenolaktivierung an IX^{Sn} mit -8.6 kJ/mol (beziehungsweise $+4 \text{ kJ/mol}$ relativ zur präkoordinierenden Spezies) die niedrigste Barriere auf. Dieser Reaktionspfad ist damit auch kinetisch günstiger als die geminale OH-Aktivierung und bietet eine gute Erklärung für die hohe Hydrolyseempfindlichkeit von ylidsubstituierten Tetrylenen.

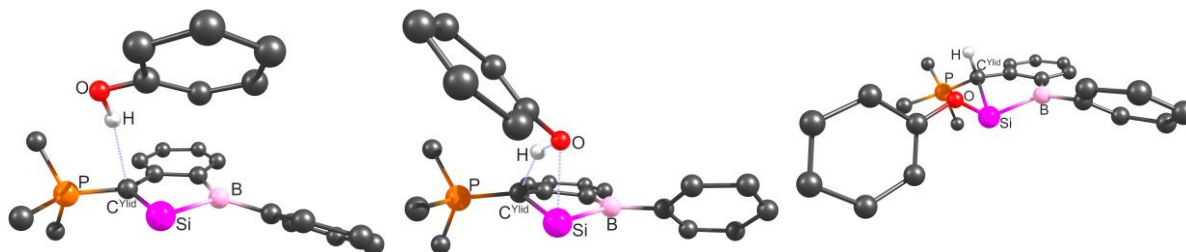


Abbildung 3.48. Die kooperative Aktivierung von Phenol an der $\text{Si-C}^{\text{Ylid}}$ -Einheit von IX^{Si} (Reaktionspfad B): Die Präkoordination (links), der Übergangszustand (mitte) und das Produkt (rechts). Ein Großteil der Wasserstoffatome ist zu Gunsten einer besseren Übersichtlichkeit nicht abgebildet.

Auch die O–H-Aktivierung entlang der E–B-Bindung von borylsubstituierten Tetrylenen wurde bisher nicht untersucht, wenngleich DRIESS et al.^[192] eine vergleichbare Reaktion in einem frustrierten LEWIS-Säure-Base-Paar (FLP) zwischen einem Silylenzentrum und einem Boranzentrum beobachten konnten.

Im Falle der Tetrylene **VIII** und **IX** stellt sich jedoch heraus, dass in den Fällen, in denen eine präkoordinierende Spezies gefunden werden konnte, diese thermodynamisch ungünstiger ($\Delta G^{\text{Präko}}$) ist als die jeweils einzeln betrachteten Spezies (Tabelle 3.16). Insbesondere die präkoordinierenden Spezies zu **VIII** sind thermodynamisch sehr ungünstig, was darauf zurückzuführen ist, dass in **VIII** selbst eine Koordination der Sulfonsauerstoffatome zum Boratom vorliegt und die Verbindung bereits dadurch erheblich stabilisiert wird (Abbildung 3.49).

Tabelle 3.16. Energien [kJ/mol] der Phenolaktivierung entlang der E–B-Bindung von cyclischen, ylidsubstituierten Tetrylenen. Die Farbskala bewegt sich zwischen -158.5 und 204.0 .

	Si			Ge			Sn		
	$\Delta G^{\text{Präko}}$	ΔG^{Barr}	ΔG^{Prod}	$\Delta G^{\text{Präko}}$	ΔG^{Barr}	ΔG^{Prod}	$\Delta G^{\text{Präko}}$	ΔG^{Barr}	ΔG^{Prod}
VIII	51.6	118.5	-89.2	60.5	145.0	-49.3	89.8	204.0	-143.9
IX	2.1	79.4	-158.5	3.9	91.9	-144.8	n.b.	109.3	-149.0

Weiterhin stellt sich heraus, dass die Reaktion thermodynamisch zu sehr günstigen Produkten führt (ΔG^{Prod}). So sind insbesondere im Fall der Stannylene die Produkte auch deutlich günstiger als die Produkte der anderen Reaktionspfade. Allerdings ist die Reaktion kinetisch ungünstiger (ΔG^{Barr}) als die Reaktion nach Reaktionspfad B und wird daher wahrscheinlich nicht beobachtet werden können.

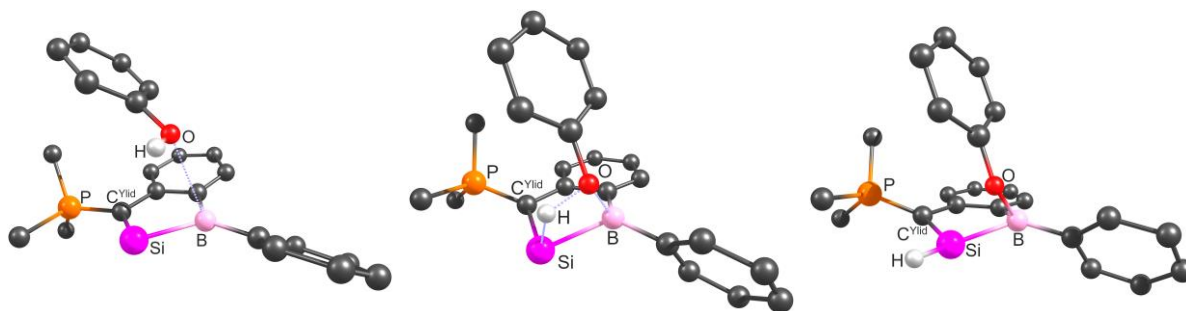
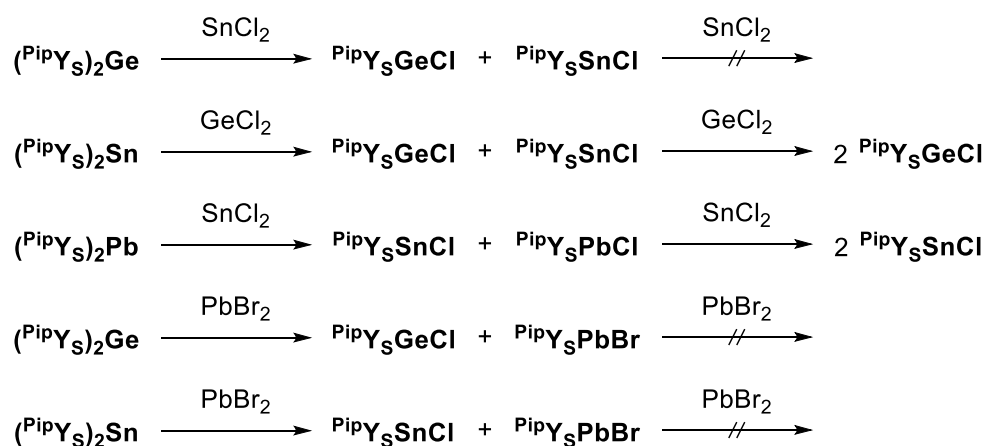


Abbildung 3.49. Die Aktivierung von Phenol an der Si–B-Einheit von IX^{Si} (Reaktionspfad C): Die Präkoordination (links), der Übergangszustand (mitte) und das Produkt (rechts). Ein Großteil der Wasserstoffatome ist zu Gunsten einer besseren Übersichtlichkeit nicht abgebildet.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass der Reaktionspfad B, also die OH-Aktivierung von Phenol entlang der C–E-Bindung, kinetisch besonders günstig und damit eine gute Erklärung für die hohe Hydrolyseempfindlichkeit von ylidstabilisierten Tetrylenen ist.

Studien zur Eignung von ylidsubstituierten Tetrylenen zur Transylidierung

Nachdem nun ausführlich die Reaktivität von ylidsubstituierten Tetrylenen in Bindungsaktivierungsreaktionen untersucht wurde, lag ein weiterer Fokus auf der Stabilität der Verbindungen selbst. So konnte MIKE JÖRGES aus unserer Arbeitsgruppe kürzlich beobachten, dass die Umsetzungen der Tetrylene $(\text{PipY}_\text{S})_2\text{E}$ mit Germanium- und Zinndichlorid sowie Bleidibromid jeweils zu einer Mischung der monoylidsubstituierten Elementchloride führen (Schema 3.13).^[181]



Schema 3.13. Erste Untersuchungen von MIKE JÖRGES zu Ylidübertragung von Tetrylenen.^[181]

Eine weitere Umsetzung zu den rein monoylidsubstituierten Elementchloriden mittels eines zweiten Äquivalents des jeweiligen Tetreldichlorids war dabei nur möglich, wenn das betreffende Gruppe XIV-Element leichter war als das des ursprünglich eingesetzten ylidsubstituierten Tetrylens. Auch weitere Untersuchungen in der Arbeitsgruppe GESSNER deuten auf vielversprechende Möglichkeiten durch Ylidübertragungen hin (→ vergleiche Kapitel 3.2.3 und 3.6). Dies führte zu der Fragestellung, inwieweit die Übertragung von Ylidliganden auf

Elementdichloride der Gruppe XIV aus thermodynamischen Gesichtspunkten generell möglich ist und welchen Einflüssen eine solche unterliegt. Zum Sparen von Rechenzeit wurde zunächst ein neuer Ylidligand $^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}}$ eingeführt (**Abbildung 3.50**).

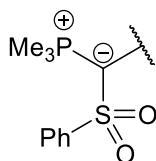


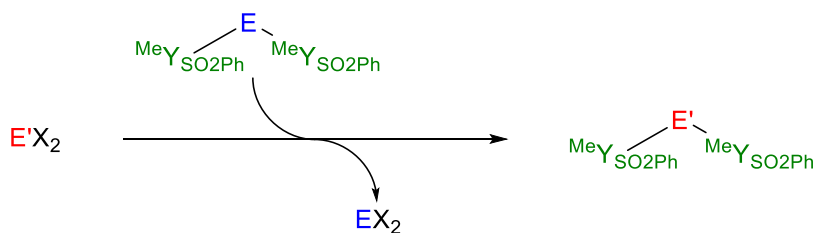
Abbildung 3.50. Der neue Ylidligand $^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}}$.

Im Anschluss wurde die Thermodynamik der Ylidübertragungsreaktion von einem derart substituierten Silylen $(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Si}$, Germylen $(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Ge}$, Stannylen $(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Sn}$ und Plumbylen $(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Pb}$ jeweils mit Silicium-, Germanium-, Zinn- und Bleidichlorid, -bromid und -iodid untersucht (Tabelle 3.17). Dabei ist zunächst selbstverständlich, dass bei einer Umsetzung von $(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{E}$ zu $\text{E}'\text{X}_2$ für $\text{E} = \text{E}'$ die Reaktion thermodynamisch ausgeglichen ist.

Es wird deutlich, dass die Ylidübertragungsreaktion auf die verschiedenen Siliciumdihalogenide bis auf einen Fall thermodynamisch günstig ist. Umgekehrt bedeutet dies, dass die Ylidübertragung vom Silylen $(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Si}$ auf Elementdihalogenide thermodynamisch ungünstig ist. Dementsprechend eignet sich dieses Silylen aus thermodynamischen Gesichtspunkten sehr gut, um durch Ylidübertragungsreaktionen synthetisiert zu werden, jedoch nicht um selbst einen Ylidliganden auf andere Spezies zu übertragen.

Im Fall von Blei kann hingegen das umgekehrte Phänomen beobachtet werden. Hier geht die Reaktion aller Tetrylene $(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Si}$, $(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Ge}$ und $(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Sn}$ mit den Bleihalogenuiden thermodynamisch aufwärts. Umgekehrt ist die Ylidübertragung von $(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Pb}$ auf alle Elementdihalogenide SiX_2 , GeX_2 und SnX_2 exergon. Die Germanium- und Zinnverbindungen ordnen sich ihrem Verhalten nach zwischen den Silicium- und Bleiverbindungen ein. Dieses Verhalten korreliert sehr gut mit den Stabilitäten der Tetreldihalogenide und verdeutlicht nochmals die starke Stabilisierung insbesondere von Silicium(II)- und Germanium(II)-Verbindungen durch den Ylidliganden.^[193] Umgekehrt benötigen die Bleidihalogenide aufgrund der hohen eigenen Stabilität von Blei(II)verbindungen^[193] diese externe Stabilisierung nicht oder zumindest deutlich weniger.

Tabelle 3.17. Energien der Ylidübertragungsreaktion von verschiedenen Tetrylenen $(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{E}$ auf Tetreldihalogenide $\text{E}'\text{X}_2$ in kJ/mol.



Edukte	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Si}$	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Ge}$	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Sn}$	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Pb}$	
SiCl_2	0.0	-5.9	4.0	-26.5	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Si}$
GeCl_2	5.9	0.0	9.9	-20.6	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Ge}$
SnCl_2	-4.0	-9.9	0.0	-30.5	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Sn}$
PbCl_2	26.5	20.6	30.5	0.0	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Pb}$
	SiCl_2	GeCl_2	SnCl_2	PbCl_2	Produkte

Edukte	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Si}$	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Ge}$	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Sn}$	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Pb}$	
SiBr_2	0.0	-25.5	-35.6	-73.1	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Si}$
GeBr_2	25.5	0.0	-10.1	-47.6	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Ge}$
SnBr_2	35.6	10.1	0.0	-37.5	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Sn}$
PbBr_2	73.1	47.6	37.5	0.0	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Pb}$
	SiBr_2	GeBr_2	SnBr_2	PbBr_2	Produkte

Edukte	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Si}$	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Ge}$	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Sn}$	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Pb}$	
SiI_2	0.0	-36.3	-21.0	-101.5	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Si}$
GeI_2	36.3	0.0	15.3	-65.2	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Ge}$
SnI_2	21.0	-15.3	0.0	-80.5	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Sn}$
PbI_2	101.5	65.2	80.5	0.0	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Pb}$
	SiI_2	GeI_2	SnI_2	PbI_2	Produkte

Im Bezug auf den Einfluss der Halogene auf die Thermodynamik der Ylidübertragungsreaktion ist zunächst auffällig, dass die oben getroffenen Aussagen davon nicht beeinflusst werden. Allerdings wird deutlich, dass Reaktionen mit einer zunehmenden Ordnungszahl des jeweiligen Halogenids zunehmend exergoner werden. Umgekehrt werden entsprechend endergone Reaktionen in der Reihe $\text{Cl} < \text{Br} < \text{I}$ endergoner. Das korreliert mit den Bindungsdissoziationsenergien.^[5]

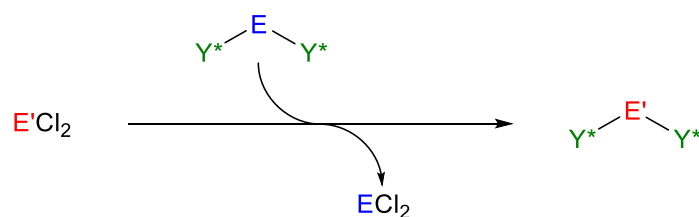
Zusammenfassend ist es aus thermodynamischen Gesichtspunkten entsprechend am sinnvollsten, den Ylidliganden $\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}}$ zur Synthese von neuen Tetrylenen $(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{E}'$

(E' = Si, Ge, Sn) von $(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Pb}$ auf die entsprechenden Elementdiiodide $\text{E}'\text{I}_2$ zu übertragen.

Nachdem auf diese Weise grundsätzliche Trends der Ylidübertragungsreaktion von ylidsubstituierten Tetrylenen auf Tetreldihalogenide geklärt werden konnten, wurde als nächstes der Einfluss des Ylids auf die Thermodynamik dieser Reaktion betrachtet. Dafür wurden zunächst die Reaktionen der mit Y , $^{\text{Cy}}\text{Y}$, Y_{Ph} , und Y_{CN} substituierten Tetrylene Y^*E mit den jeweiligen Elementdichloriden $\text{E}'\text{Cl}_2$ untersucht (Tabelle 3.18). Hierbei wird zunächst deutlich, dass für alle Ylidsubstituenten die gleichen Tendenzen im Bezug auf die Gruppe XIV-Elemente wie für $^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}}$ gelten.

Beim Vergleich der Reaktionsenthalpien mit Y - und $^{\text{Cy}}\text{Y}$ -Liganden am Tetrylen gibt es weiterhin nur geringe Unterschiede, was durch die tendenziell sehr ähnliche Struktur auch zu erwarten war. Allerdings zeigt sich, dass das elektronenreichere Ylid $^{\text{Cy}}\text{Y}$ zu je etwas weniger exergonen beziehungsweise endergonen Reaktionen führt. Die einzigen Ausnahmen sind hierbei die Reaktionen des jeweiligen Germylens Y^*Ge und Stannylens Y^*Sn mit Siliciumdichlorid. Diese Abweichungen sind allerdings gering und könnten in strukturellen Unterschieden und damit verbundenen unterschiedlichen Stabilisierungen begründet liegen. Solche Unterschiede beobachteten GESSNER et al. in Form von asymmetrischen E–O-Bindungen bereits in den Molekülstrukturen von Y_2Ge im Kristall^[111] und diese finden sich entsprechend auch in den optimierten Strukturen für die entsprechenden Silylene und Germylene in $(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{E}$, Y_2E und $^{\text{Cy}}\text{Y}_2\text{E}$ wieder. Entsprechend können derartige Abweichungen im Falle einer Y_{Ph} - oder Y_{CN} -Substitution nicht beobachtet werden.

Tabelle 3.18. Energien der Ylidübertragungsreaktion von verschiedenen Tetrylenen Y^*_2E auf Tetreldichloride $E'Cl_2$ in kJ/mol.



Edukte	Y_2Si	Y_2Ge	Y_2Sn	Y_2Pb	
$SiCl_2$	0.0	-15.6	-12.7	-49.1	Y_2Si
$GeCl_2$	15.6	0.0	2.9	-33.5	Y_2Ge
$SnCl_2$	12.7	-2.9	0.0	-36.4	Y_2Sn
$PbCl_2$	49.1	33.5	36.4	0.0	Y_2Pb
	$SiCl_2$	$GeCl_2$	$SnCl_2$	$PbCl_2$	Produkte

Edukte	cyY_2Si	cyY_2Ge	cyY_2Sn	cyY_2Pb	
$SiCl_2$	0.0	-17.3	-13.0	-43.4	cyY_2Si
$GeCl_2$	17.3	0.0	4.3	-26.1	cyY_2Ge
$SnCl_2$	13.0	-4.3	0.0	-30.4	cyY_2Sn
$PbCl_2$	43.4	26.1	30.4	0.0	cyY_2Pb
	$SiCl_2$	$GeCl_2$	$SnCl_2$	$PbCl_2$	Produkte

Edukte	$(Y_{Ph})_2Si$	$(Y_{Ph})_2Ge$	$(Y_{Ph})_2Sn$	$(Y_{Ph})_2Pb$	
$SiCl_2$	0.0	-27.1	-63.3	-95.7	$(Y_{Ph})_2Si$
$GeCl_2$	27.1	0.0	-36.2	-68.6	$(Y_{Ph})_2Ge$
$SnCl_2$	63.3	36.2	0.0	-32.4	$(Y_{Ph})_2Sn$
$PbCl_2$	95.7	68.6	32.4	0.0	$(Y_{Ph})_2Pb$
	$SiCl_2$	$GeCl_2$	$SnCl_2$	$PbCl_2$	Produkte

Edukte	$(Y_{CN})_2Si$	$(Y_{CN})_2Ge$	$(Y_{CN})_2Sn$	$(Y_{CN})_2Pb$	
$SiCl_2$	0.0	-22.4	-44.5	-71.7	$(Y_{CN})_2Si$
$GeCl_2$	22.4	0.0	-22.2	-49.4	$(Y_{CN})_2Ge$
$SnCl_2$	44.5	22.2	0.0	-27.2	$(Y_{CN})_2Sn$
$PbCl_2$	71.7	49.4	27.2	0.0	$(Y_{CN})_2Pb$
	$SiCl_2$	$GeCl_2$	$SnCl_2$	$PbCl_2$	Produkte

Diese beiden Substituenten führen weiterhin zu noch exer- beziehungsweise endergonischeren Reaktionen als die Ylide mit einer zusätzlichen Donorfunktionalität durch die Tosylgruppe. Das lässt sich dadurch erklären, dass es bei Y_{Ph} - und Y_{CN} -Substituenten,

im Gegensatz zu den tosylbasierten Substituenten,^[111] zu deutlich stärkeren π -Wechselwirkungen zwischen den ylidischen Kohlenstoffatomen und den Tetrylenzentren kommt (Abbildung 3.51).

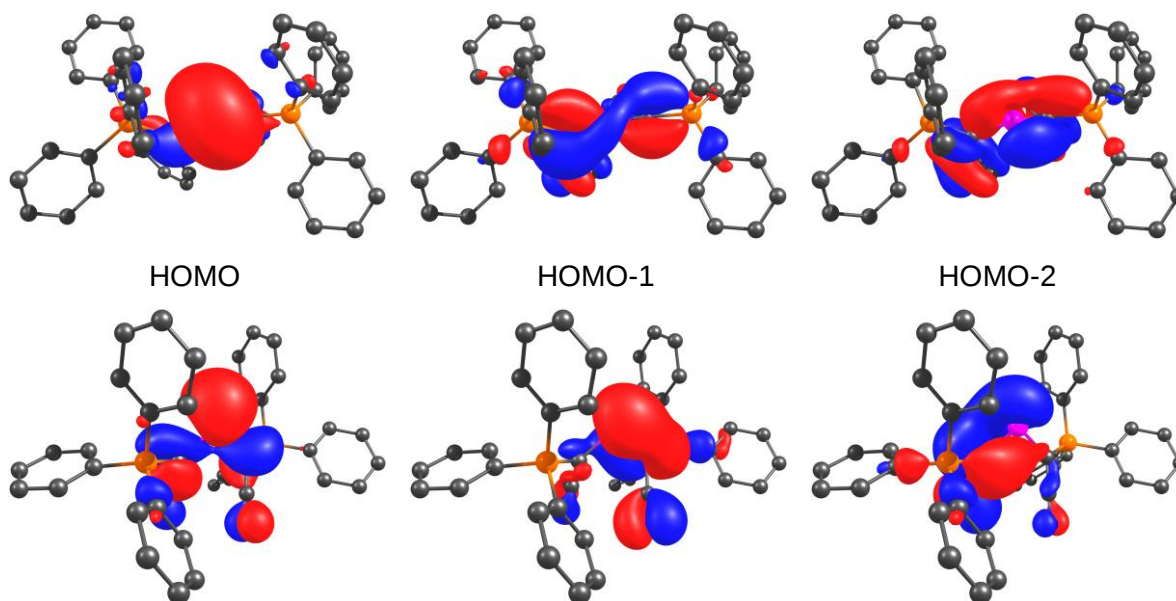


Abbildung 3.51. Das HOMO, HOMO-1 und HOMO-2 von $(Y_{Ph})_2Si$ (oben) und $(Y_{CN})_2Si$ (unten). Insbesondere das HOMO-1 und das HOMO-2 zeigen dabei deutliche C–Si- π -Wechselwirkungen.

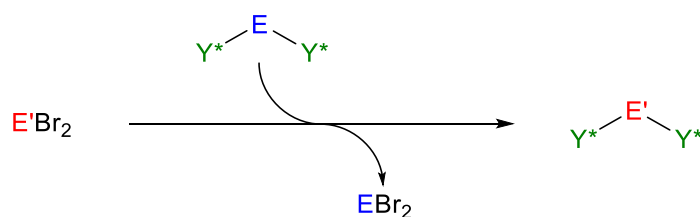
Diese sind dabei allein schon aufgrund des schlechten Orbitalüberlapps durch die stark unterschiedliche Orbitalgröße bei Plumbylenen am geringsten und bei Silylenen am höchsten. Dementsprechend leisten sie bei den jeweiligen Silylenen deutlich höhere Beiträge zur Stabilisierung als in den Plumbylenen, was zu einem höheren Energiegewinn führt.

Weiterhin können bei Y_{Ph} -Substitution etwas höhere Energiegewinne oder Verluste beobachtet werden als bei Y_{CN} -Substitution. Dabei steigt die Differenz im Energiegewinn bei der Reaktion $Y^*Pb \rightarrow Y^*E$ in der Reihe $E = Sn < Ge < Si$. Dieses Verhalten ist wahrscheinlich in den unterschiedlichen Wechselwirkungen der Rückgrate zweier Ylidliganden begründet. So stoßen sich die Nitrile von Y_{CN} gegenseitig ab; ein Effekt, der bei einem kleineren Zentralatom größer ist. Im Gegensatz dazu kommt es bei Y_{Ph} zu π -Stacking der beiden Phenylreste und damit einer zusätzlichen Stabilisierung des Gesamtmoleküls. Dieser Effekt ist bei kleinen Zentralatomen am größten.

Zusammenfassend lässt sich bei diesem Vergleich der Übertragung von verschiedenen Ylidliganden auf Elementdichloride somit sagen, dass Y^{Ph} -substituierte Tetrylene aus thermodynamischen Gesichtspunkten die geeignetsten Ylidübertragungsreagenzien darstellen dürften.

Zur weiteren Validierung der bisherigen Ergebnisse wurde in der Folge die Ylidübertragungsreaktion von verschiedenen Tetrylenen Y^*_2E auf Tetreldibromide untersucht (Tabelle 3.19).

Tabelle 3.19. Energien der Ylidübertragungsreaktion von verschiedenen Tetrylenen Y^*_2E auf Tetreldibromide EBr_2 in kJ/mol.



Edukte	Y_2Si	Y_2Ge	Y_2Sn	Y_2Pb	
$SiBr_2$	0.0	-35.2	-52.4	-95.7	Y_2Si
$GeBr_2$	35.2	0.0	-17.1	-60.5	Y_2Ge
$SnBr_2$	52.4	17.1	0.0	-43.3	Y_2Sn
$PbBr_2$	95.7	60.5	43.3	0.0	Y_2Pb
	$SiBr_2$	$GeBr_2$	$SnBr_2$	$PbBr_2$	Produkte

Edukte	cyY_2Si	cyY_2Ge	cyY_2Sn	cyY_2Pb	
$SiBr_2$	0.0	-36.8	-52.6	-90.0	cyY_2Si
$GeBr_2$	36.8	0.0	-15.7	-53.2	cyY_2Ge
$SnBr_2$	52.6	15.7	0.0	-37.4	cyY_2Sn
$PbBr_2$	90.0	53.2	37.4	0.0	cyY_2Pb
	$SiBr_2$	$GeBr_2$	$SnBr_2$	$PbBr_2$	Produkte

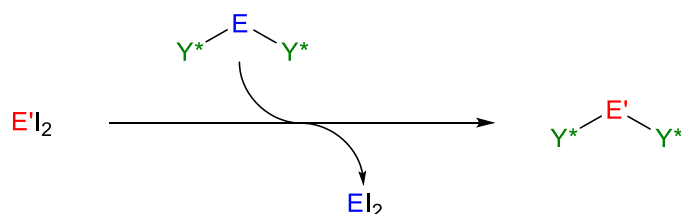
Edukte	$(Y_{Ph})_2Si$	$(Y_{Ph})_2Ge$	$(Y_{Ph})_2Sn$	$(Y_{Ph})_2Pb$	
$SiBr_2$	0.0	-46.7	-102.9	-142.2	$(Y_{Ph})_2Si$
$GeBr_2$	46.7	0.0	-56.2	-95.6	$(Y_{Ph})_2Ge$
$SnBr_2$	102.9	56.2	0.0	-39.3	$(Y_{Ph})_2Sn$
$PbBr_2$	142.2	95.6	39.3	0.0	$(Y_{Ph})_2Pb$
	$SiBr_2$	$GeBr_2$	$SnBr_2$	$PbBr_2$	Produkte

Edukte	$(Y_{CN})_2Si$	$(Y_{CN})_2Ge$	$(Y_{CN})_2Sn$	$(Y_{CN})_2Pb$	
$SiBr_2$	0.0	-42.0	-84.1	-118.3	$(Y_{CN})_2Si$
$GeBr_2$	42.0	0.0	-42.2	-76.3	$(Y_{CN})_2Ge$
$SnBr_2$	84.2	42.2	0.0	-34.2	$(Y_{CN})_2Sn$
$PbBr_2$	118.3	76.4	34.2	0.0	$(Y_{CN})_2Pb$
	$SiBr_2$	$GeBr_2$	$SnBr_2$	$PbBr_2$	Produkte

Analog zu den Beobachtungen mit MeY_{SO_2Ph} -substituierten Tetrylenen sind hier die Energiegewinne der jeweiligen Reaktionen höher/niedriger als im Fall der Übertragung auf Elementdichloride. Das Verhalten der verschiedenen Ylidliganden untereinander bleibt gleich,

was wenig verwundert, da diese in keinem Fall direkten Kontakt zu den Halogeniden haben. Entsprechend können noch höhere Energiedifferenzen für die Reaktion von verschiedenen Tetrylenen Y^*_2E auf Elementdiiodide $E'I_2$ beobachtet werden (Tabelle 3.20).

Tabelle 3.20. Energien der Ylidübertragungsreaktion von verschiedenen Tetrylenen Y^*_2E auf Tetreldiiodide $E'I_2$ in kJ/mol.



Edukte	Y_2Si	Y_2Ge	Y_2Sn	Y_2Pb	
SiI_2	0.0	-46.0	-37.7	-124.1	Y_2Si
GeI_2	46.0	0.0	8.3	-78.1	Y_2Ge
SnI_2	37.7	-8.3	0.0	-86.4	Y_2Sn
PbI_2	124.1	78.1	86.4	0.0	Y_2Pb
	SiI_2	GeI_2	SnI_2	PbI_2	Produkte

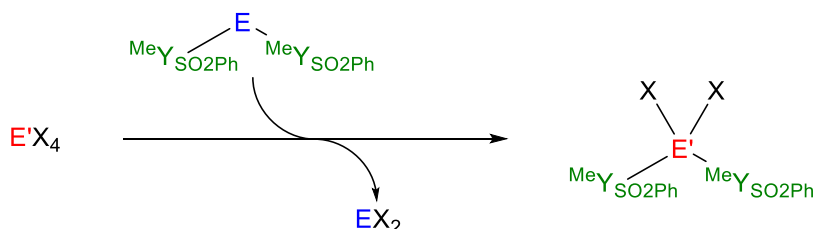
Edukte	cyY_2Si	cyY_2Ge	cyY_2Sn	cyY_2Pb	
SiI_2	0.0	-47.6	-38.0	-118.4	cyY_2Si
GeI_2	47.6	0.0	9.7	-70.7	cyY_2Ge
SnI_2	38.0	-9.7	0.0	-80.4	cyY_2Sn
PbI_2	118.4	70.7	80.4	0.0	cyY_2Pb
	SiI_2	GeI_2	SnI_2	PbI_2	Produkte

Edukte	$(Y_{Ph})_2Si$	$(Y_{Ph})_2Ge$	$(Y_{Ph})_2Sn$	$(Y_{Ph})_2Pb$	
SiI_2	0.0	-57.5	-88.3	-170.6	$(Y_{Ph})_2Si$
GeI_2	57.5	0.0	-30.8	-113.2	$(Y_{Ph})_2Ge$
SnI_2	88.3	30.8	0.0	-82.4	$(Y_{Ph})_2Sn$
PbI_2	170.6	113.2	82.4	0.0	$(Y_{Ph})_2Pb$
	SiI_2	GeI_2	SnI_2	PbI_2	Produkte

Edukte	$(Y_{CN})_2Si$	$(Y_{CN})_2Ge$	$(Y_{CN})_2Sn$	$(Y_{CN})_2Pb$	
SiI_2	0.0	-52.7	-69.5	-146.7	$(Y_{CN})_2Si$
GeI_2	52.7	0.0	-16.8	-94.0	$(Y_{CN})_2Ge$
SnI_2	69.5	16.8	0.0	-77.2	$(Y_{CN})_2Sn$
PbI_2	146.7	94.0	77.2	0.0	$(Y_{CN})_2Pb$
	SiI_2	GeI_2	SnI_2	PbI_2	Produkte

Als nächstes wurde die Thermodynamik von Ylidübertragungsreaktionen von einem $\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}}$ -substituierten Tetrylen $(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{E}$ auf Tetreltetrahalogenide $\text{E}'\text{X}_4$ untersucht. Hier werden als Produkte entsprechend ein Tetreldihalogenid EX_2 und ein bishalogenido(bisylid)substituiertes Tetrel $(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{E}'\text{X}_2$ erhalten (Tabelle 3.21).

Tabelle 3.21. Energien der Ylidübertragungsreaktion von verschiedenen Tetrylenen $(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{E}$ auf Tetreltetrahalogenide $\text{E}'\text{X}_4$ in kJ/mol.



Edukte	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Si}$	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Ge}$	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Sn}$	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Pb}$	
SiCl_4	-50.1	-56.0	-46.0	-76.6	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{SiCl}_2$
GeCl_4	-71.6	-77.5	-67.6	-98.1	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{GeCl}_2$
SnCl_4	-106.4	-112.3	-102.3	-132.9	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{SnCl}_2$
PbCl_4	— ^p	— ^p	— ^p	— ^p	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{PbCl}_2$
	SiCl_2	GeCl_2	SnCl_2	PbCl_2	Produkte

Edukte	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Si}$	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Ge}$	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Sn}$	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Pb}$	
SiBr_4	-59.7	-85.2	-95.3	-132.8	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{SiBr}_2$
GeBr_4	-51.0	-76.5	-86.6	-124.1	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{GeBr}_2$
SnBr_4	-52.3	-77.8	-87.9	-125.4	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{SnBr}_2$
PbBr_4	-41.4	-66.9	-77.0	-114.5	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{PbBr}_2$
	SiBr_2	GeBr_2	SnBr_2	PbBr_2	Produkte

Edukte	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Si}$	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Ge}$	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Sn}$	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Pb}$	
SiI_4	-63.4	-99.7	-84.4	-164.9	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{SiI}_2$
GeI_4	-36.1	-72.4	-57.1	-137.6	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{GeI}_2$
SnI_4	-77.8	-114.1	-98.8	-179.3	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{SnI}_2$
PbI_4	23.4	-12.9	2.5	-78.1	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{PbI}_2$
	SiI_2	GeI_2	SnI_2	PbI_2	Produkte

Hierbei ist zunächst auffällig, dass fast alle Reaktionen exergon sind. Bei zunehmender Ordnungszahl des Tetrylenzentrums steigt dabei tendenziell der Energiegewinn. So sind die

^p Für die Struktur von $(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{PbCl}_2$ konnte kein lokales Minimum gefunden werden. Der Grund hierfür ist wahrscheinlich die geringe Stabilität von Blei(IV)verbindungen.

Umsetzungen von $(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Si}$ thermodynamisch deutlich ungünstiger als von $(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Pb}$. Das korreliert gut mit der Stabilitätsreihe $\text{Pb(II)} > \text{Sn(II)} > \text{Ge(II)} > \text{Si(II)}$.

Gleichzeitig fällt auf, dass – im Gegensatz zu der Umsetzung mit Tetreldihalogeniden – bei der hier untersuchten Umsetzung mit Tetreltetrahalogeniden für Halogenide mit höherer Ordnungszahl die Reaktionen im Verhältnis thermodynamisch weniger begünstigt sind. Der Grund hierfür liegt wahrscheinlich in der Destabilisierung von Verbindungen in hohen Oxidationsstufen durch elektronegative Liganden.^[189] Das bietet auch eine Erklärung, warum die Reaktion des Silylens $(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Si}$ mit den Tetrahalogenidosilanen SiX_4 in allen Fällen thermodynamisch günstig ist, obwohl sie aus rein bindungsenergetischer Perspektive im Bezug auf die Si–R-Bindungen ausgeglichen sein sollte. Allerdings werden auch eine Vielzahl weiterer Effekte eine Rolle spielen, wie an den Energien der Umsetzungen mit Tetreltetraiodiden deutlich wird.

Zusammenfassend lässt sich auch hier feststellen, dass sich insbesondere das ylid-substituierte Plumbylen $(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Pb}$ zur Synthese von Tetrelen des Typs $(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{E}'\text{X}_2$ eignet. Weiterhin sind meist die entsprechenden Tetreltetraiodide geeignete Substrate.

Als nächstes wurde der Einfluss der Ylide auf die Reaktion untersucht. Dazu diente die Reaktion der Germylene Y^*_2Ge mit den Siliciumtetrahalogeniden SiX_4 zu den korrespondierenden Silanen Y^*_2SiX_2 (Tabelle 3.22). Es fällt zunächst auf, dass mit zunehmender Ordnungszahl des jeweiligen Halogenids die Reaktion für alle Ylide thermodynamisch günstiger wird.

Tabelle 3.22. Energien der Ylidübertragungsreaktion von verschiedenen Germylenen Y^*_2Ge auf Siliciumtetrahalogenide SiX_4 in kJ/mol.

Edukte	Y_2Ge	CyY_2Ge	$(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{Ge}$	$(\text{Y}_{\text{CN}})_2\text{Ge}$	
SiCl_4	-22.7	22.8	-78.7	-46.1	$\text{Y}^*_2\text{SiCl}_2$
SiBr_4	-43.6	9.9	-118.7	-98.2	$\text{Y}^*_2\text{SiBr}_2$
SiI_4	-50.1	-38.0	-139.4	-120.7	Y^*_2SiI_2
	GeX_2	GeX_2	GeX_2	GeX_2	Produkte

Gleichzeitig ist auffällig, dass es im Gegensatz zu den Reaktionen mit Elementdichloriden in diesem Fall deutliche Unterschiede zwischen den Yliden Y und Y^{Cy} gibt. Das könnte in dem sterischen Anspruch der Cyclohexylgruppen begründet liegen. Weiterhin zeigt sich auch hier,

dass die Ylide $\mathbf{Y_{Ph}}$ und $\mathbf{Y_{CN}}$ für eine Ylidübertragungsreaktion deutlich geeigneter sind als ihre sulfoniumsubstituierten Verwandten $\mathbf{Y}$ und $\mathbf{Y^{Cy}}$. Der Grund hierfür ist wahrscheinlich die fehlende zusätzliche Stabilisierung im Ausgangsgermylen durch die O→E-Wechselwirkung, die entsprechend auch nicht gebrochen werden muss. Zuletzt stellte sich das elektronenreichere Ylid $\mathbf{Y_{Ph}}$ für Ylidübertragungsreaktionen als geeigneter heraus als $\mathbf{Y_{CN}}$.

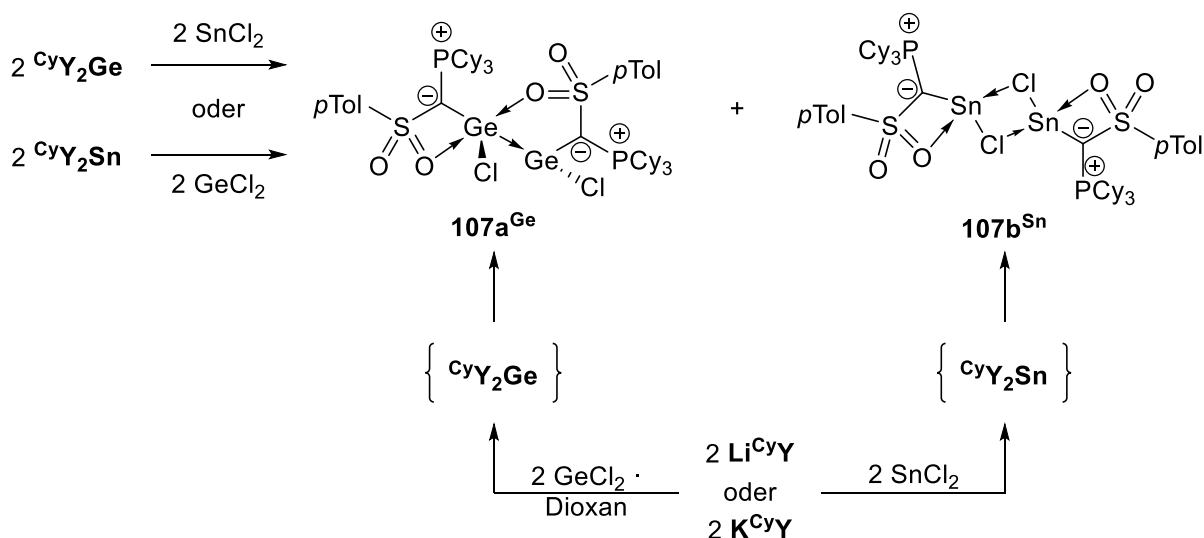
Zusammenfassend lässt sich sagen, dass ylidsubstituierte Tetrylene aus thermodynamischen Gesichtspunkten geeignete Ylidübertragungsreagenzien darstellen. Dabei eignen sich insbesondere Plumbylene als Yliddonoren und Siliciumhalogenide als Ylidakzeptoren. Von den untersuchten Yliden eignet sich insbesondere das Ylid $\mathbf{Y_{Ph}}$ um übertragen zu werden; als zu substituierende Halogenide eignen sich insbesondere Iodide.

Abschließend muss noch darauf hingewiesen werden, dass alle hier untersuchten Reaktionen die Übertragung von zwei Ylidliganden beinhalteten. Eine Übertragung von nur einem Ylidliganden analog zu den Untersuchungen von MIKE JÖRGES (Schema 3.13) müsste noch untersucht werden. Außerdem wurden die Element(II)halogenide als Monomere berechnet. Da sie zumindest im Festkörper häufig in anderen Formen vorliegen,^[109,110,194] können die absoluten Energien deutlich abweichen.

3.2.3 Studien zur thermodynamischen Stabilität und den elektronischen Eigenschaften von ylidsubstituierten Gruppe XIV-Verbindungen^a

Nachdem ausführlich gezeigt werden konnte, dass Tetrylene, zumindest aus thermodynamischen Gesichtspunkten, als Ylidübertragungsreagenzien dienen können, zeigt eine von HEIDAR DARMANDEH aus unserer Arbeitsgruppe beobachtete Reaktion deutliche Abweichungen von dem bisher betrachteten Modellsystemen. So führte die äquimolare Umsetzung des Germylens $\mathbf{CyY_2Ge}$ mit Zinndichlorid nicht zu den erwarteten Spezies $\mathbf{CyYGeCl}$ und $\mathbf{CyYSnCl}$ oder zu keiner Reaktion, sondern zu den Verbindungen **107a^{Ge}** und **107b^{Sn}** (Schema 3.14).^[195] Diese sind formal Dimere der erwarteten Verbindungen, allerdings ist nur die Zinnspezies **107b^{Sn}** wie erwartet Chloridverbrückt. Die Struktur der Germaniumverbindung hingegen zeigt ein ungewöhnliches Strukturmotiv, dass an späterer Stelle ausführlich untersucht werden soll.

^a In Teilen wiedergegeben mit Erlaubnis von C. Mohapatra, H. Darmandeh, H. Steinert, B. Mallick, K.-S. Feichtner, V. H. Gessner, *Chem. Eur. J.* **2020**, 26, 15145. Veröffentlicht von der Wiley-VCH GmbH. Copyright © 2020 CC-BY-NC-ND 4.0 bei den Autoren.



Schema 3.14. Die von DARMANDEH synthetisierten CyYECI -Dimere ($\text{E} = \text{Ge}, \text{Sn}$).^[195]

Beide Verbindungen konnten auch durch eine stöchiometrische Umsetzung des Lithium- oder Kaliumyldiids $\text{Li}^{\text{Cy}}\text{Y}$ oder $\text{K}^{\text{Cy}}\text{Y}$ mit Germanium- oder Zinndichlorid erhalten werden, wobei sich ebenfalls zunächst die zweifach ylidsubstituierte Spezies $\text{Y}^{\text{Cy}}_2\text{E}$ bildet, die in der Folge das Ylid auf ein weiteres Äquivalent des Elementdichlorids überträgt. Unabhängig davon bleibt jedoch die Frage nach den Gründen der unterschiedlichen Strukturen der Dimere bestehen. Zur Klärung wurde die Thermodynamik dieser beiden Struktur motive^[195] sowie vier weiterer (Abbildung 3.52) auf PW6B95D3/def2svp//PW6B95D3/def2tzvp-Niveau verglichen. Diese sind die Ditetrylenspezies **107c**, das tetrelsubstituierte Tetrylen **107d** sowie zwei verschiedene Koordinationen des Tetrylens $\text{Y}^{\text{Cy}}_2\text{E}$ an das jeweilige Elementdichlorid; entweder über das Zentralatom wie in **107e** oder über ein Sauerstoffatom wie in **107f**.

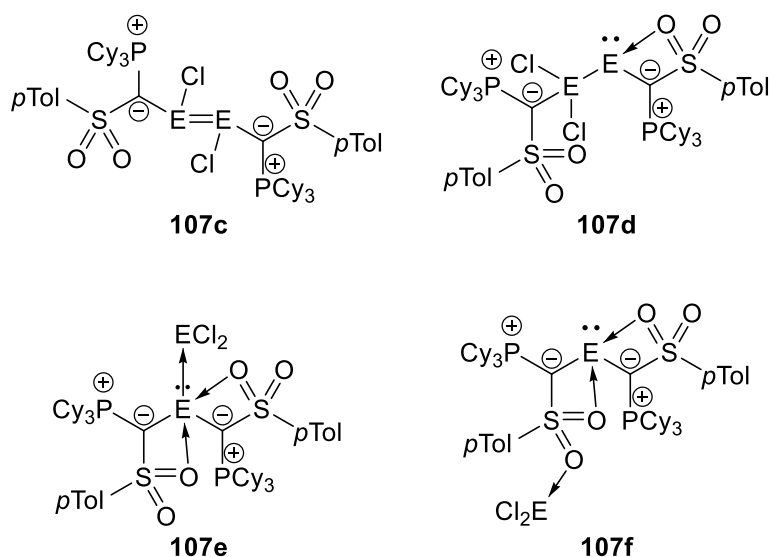


Abbildung 3.52. Die weiteren untersuchten Konstitutionsisomere **107c–f** ($\text{E} = \text{Ge}, \text{Sn}$).

Im Falle der Germaniumspezies fällt dabei auf, dass die von HEIDAR DARMANDEH im Experiment beobachtete Spezies **107a^{Ge}** thermodynamisch tatsächlich deutlich günstiger ist

als die erwartete chloridoverbrückte Spezies **107b^{Ge}** (Abbildung 3.53). Auch alle weiteren untersuchten Spezies sind thermodynamisch ungünstiger als **107a^{Ge}**, das Digermolen **107c^{Ge}** und insbesondere die Spezies **107d^{Ge}** sind thermodynamisch am ungünstigsten.

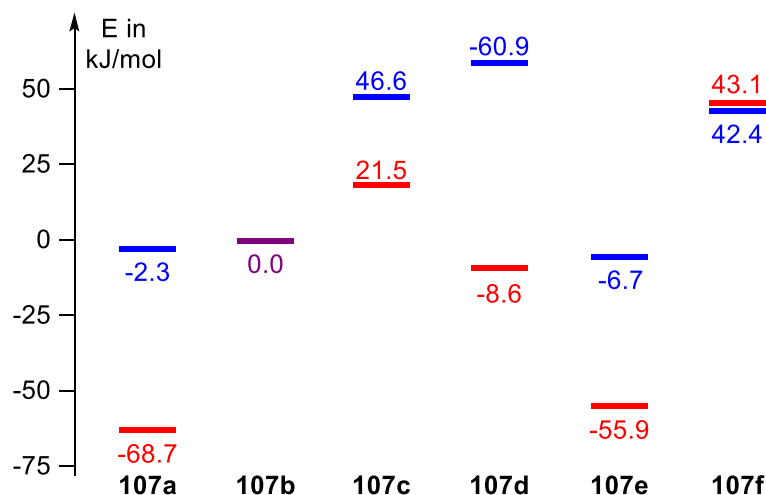
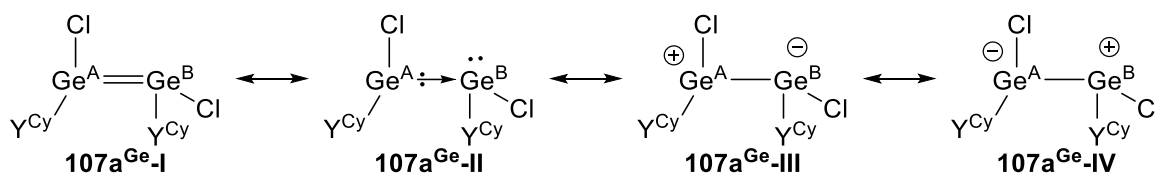


Abbildung 3.53. Vergleich der Energien der Spezies **107a–f** relativ zum Isomer **107b** (E = Ge, Sn).

Im Vergleich dazu ist die beobachtete Zinnspezies **107b^{Sn}** nicht das thermodynamisch günstigste Konstitutionsisomer. Allerdings ist der Unterschied zu den Isomeren **107a^{Sn}** und **107e^{Sn}** nur sehr gering, sodass es sein kann, dass in Lösung ein Gleichgewicht zwischen ihnen vorliegt. Das korreliert damit, dass es HEIDAR DARMANDEH nicht möglich war, von der Spezies **107b^{Sn}** ein sauberes NMR-Spektrum zu erhalten. Die bevorzugte Kristallisation dieser Verbindung kann insofern auf Packungseffekte zurückzuführen sein.

Abschließend sei noch bemerkt, dass die Spezies **107d** sowohl im Falle von Germanium wie auch bei Zinn thermodynamisch günstiger ist als die Spezies **107f**. Das korreliert gut mit der oben erwähnten Beobachtung, dass das HOMO der Tetrylene **Y^{Cy}₂Ge** und **Y^{Cy}₂Sn** am Germanium beziehungsweise Zinn sitzt und die Moleküle entsprechend über dieses Atom koordinieren sollten (Abbildung 3.16).

Nach der Untersuchung ihrer thermodynamischen Stabilität wurde die Struktur der Verbindung **107a^{Ge}** analysiert. Für die Ge–Ge-Bindung bieten sich hier zunächst vier mesomere Grenzstrukturen an (Schema 3.15). Diese sind zum einen ein gemylen-stabilisiertes Gemylen **107a^{Ge}-I** oder ein Digermolen **107a^{Ge}-II** mit einer Ge=Ge-Doppelbindung. Außerdem ist eine Ge–Ge-Einfachbindung denkbar, was in einer zwitterionischen Beschreibung mit einer Germanium–Germylanion-Bindung resultiert, wobei die positive Ladung auf dem fünffach koordinierten Ge^A (**107a^{Ge}-III**) oder alternativ auf dem dreifach koordinierten Germaniumatom Ge^B (**107a^{Ge}-IV**) liegen kann. Die Struktur **107a^{Ge}-IV** kann dabei allerdings direkt ausgeschlossen werden, da eine Sauerstoffkoordination an ein Gemylanion mangels geeigneter unbesetzter Orbitale sehr unwahrscheinlich ist.



Schema 3.15. Mögliche mesomere Grenzstrukturen zum Beschreiben der Ge–Ge-Bindung in **107a^{Ge}**. Die Koordination des Sauerstoffs an die Germaniumatome ist zugunsten einer besseren Übersichtlichkeit nicht abgebildet. Ge^A entspricht dabei dem fünffach koordinierten Germaniumatom, Ge^B dem dreifach koordinierten.

Zur weiteren Analyse wurden NBO-Analysen durchgeführt. Hier wurden zum Vergleich die Verbindungen **108**, **109** und **110**^[196] berechnet, die alle unterschiedliche Formen von Ge–Ge-Bindungen aufweisen (Abbildung 3.54).

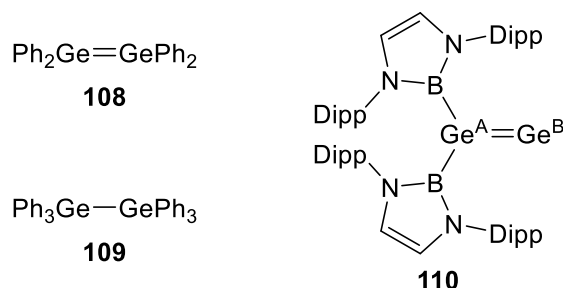


Abbildung 3.54. Die Strukturen von **108**, **109** und **110**.

Hierbei fällt zunächst auf, dass der WIBERG Bindungsindex der Ge–Ge-Bindung von **107a^{Ge}** mit 0.83 deutlich niedriger ist als im Digermanylen **108** und der Spezies **110** und in der Größenordnung der Digermanbindung in **109** liegt (Tabelle 3.23).

Tabelle 3.23. Die natürlichen Ladungen an den Germaniumatomen und die Wiberg Bindungsindizes der Ge–Ge-Bindungen in **95**, **100**, **101** und **102**.

Verbindung	WBI	q(NBO)	
	Ge–Ge	Ge ^A	Ge ^B
107a^{Ge}	0.83	1.26	0.51
108	1.53	0.78/0.85 ^r	
109	0.86	1.24	
110	1.66	0.26	-0.14

Somit beschreibt die mesomere Grenzstruktur **107a^{Ge}** die Verbindung ebenfalls nicht gut. Diese Beobachtung korreliert mit der von HEIDAR DARMANDEH beobachteten Bindungslänge von 2.49 Å, die deutlich länger ist als in der Verbindung **110** (2.31 Å^[196]), wenngleich sie auch kürzer ist als in anderen Verbindungen mit einer Ge(II)–Ge(II)-Einfachbindung (2.56–2.71 Å^[197–199]). Gegen **107a^{Ge}** spricht außerdem, dass das HOMO des Moleküls zu großen

^r Durch eine unterschiedliche Anordnung der Phenylgruppen unterscheidet sich die natürliche Ladung an beiden Germaniumatomen voneinander.

Teilen an Ge^{B} lokalisiert ist (Abbildung 3.55). Das entspricht dem freien Elektronenpaar der mesomeren Grenzstrukturen **107a**^{Ge⁺⁺} und **107a**^{Ge⁺⁺⁺}.

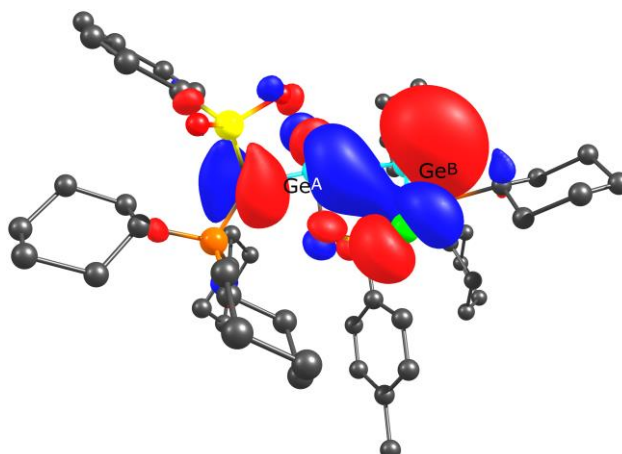
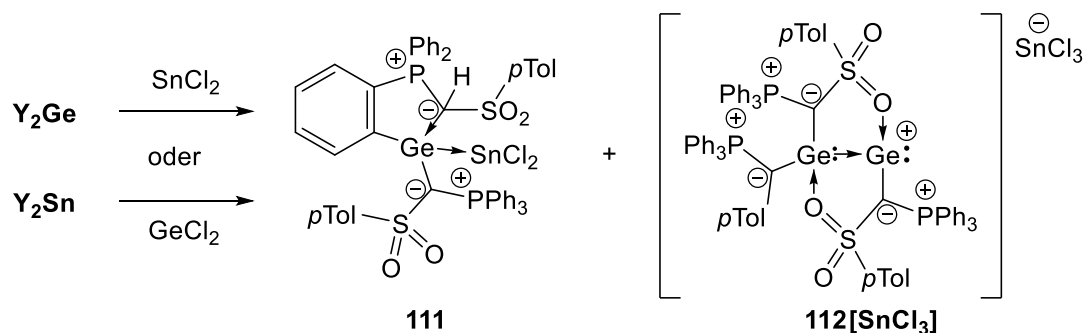


Abbildung 3.55. Das HOMO von **107a**^{Ge}. Die Wasserstoffatome sind zu Gunsten einer besseren Übersichtlichkeit nicht abgebildet.

Die natürlichen Ladungen zeigen weiterhin, dass das fünffach koordinierte Germaniumatom Ge^{A} in **107a**^{Ge} deutlich positiver geladen ist als das dreifach koordinierte Ge^{B} . Dieses Ladungsgefälle spricht tendenziell für die mesomere Grenzstruktur **107a**^{Ge⁺⁺}, allerdings ist die Ladung an Ge^{A} nur unwesentlich höher als in der Verbindung **109** und die Ladung an Ge^{B} nicht niedriger als an beiden Germaniumatomen in **110**. In der Folge wird die Ge–Ge-Bindung in **107** am besten durch eine Mischung der beiden mesomeren Grenzstrukturen **107a**^{Ge⁺⁺} und **107a**^{Ge⁺⁺⁺} beschrieben, wahrscheinlich mit einem größeren Anteil von ersterer.

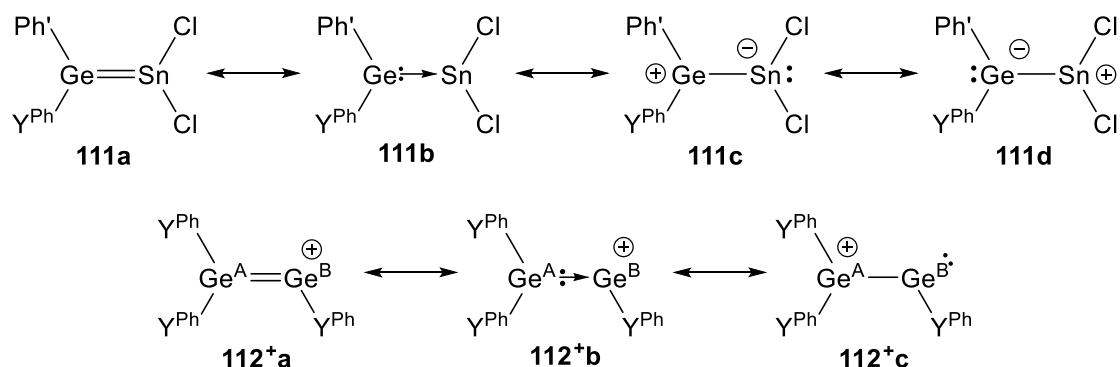
Eine zu der von HEIDAR DARMANDEH untersuchten Ylidübertragungsreaktion (Schema 3.14) sehr ähnliche Reaktion konnte CHANDRAJEET MOHAPATRA aus unserer Arbeitsgruppe bei der Umsetzung von **Y₂Ge** mit Zinndichlorid oder von **Y₂Sn** mit Germaniumdichlorid beobachten. So erhielt er nach Ylidübertragung und C–H-Aktivierung in beiden Fällen ein Stoffgemisch der Verbindungen **111** und **112**[**SnCl₃**] (Schema 3.16).^[195]



Schema 3.16. Die von CHANDRAJEET MOHAPATRA synthetisierten Verbindungen **111** und **112**[**SnCl₃**].^[195]

Hier ist die Bindungssituation in beiden Verbindungen zunächst ebenfalls nicht sehr offensichtlich. Für die neutrale Verbindung **111** bieten sich so zunächst vier, für das Kation

112⁺ drei mesomere Grenzstrukturen zur Beschreibung der zentralen Ge–E-Bindung an (Schema 3.17).



Schema 3.17. Mögliche mesomere Grenzstrukturen zum Beschreiben der Ge–E-Bindung in **111** und **112⁺**. Die Koordination des ylidischen Kohlenstoffatoms des aktivierten Phenyls Ph' (für **111**) sowie der Sauerstoffatome (für **112⁺**) an die Germaniumatome sind zugunsten einer besseren Übersichtlichkeit nicht abgebildet.

Im Falle von **111** spricht der WIBERG Bindungsindex deutlich gegen die Beschreibung mit einer Doppelbindung **111a** (Tabelle 3.24). Dieser ist hier deutlich niedriger als in sämtlichen anderen untersuchten Verbindungen. Das korreliert mit dem von CHANDRAJEET MOHAPATRA beobachteten Ge–Sn-Abstand, der mit 2.75 Å^[195] deutlich länger ist als in der von WEIDENBRUCH et al. untersuchten Ge=Sn-Doppelbindung (2.51 Å).^[200] Und auch, wenn die Bindung etwas kürzer ist als die von SO berichtete Ge(II)–Sn(II)-Einfachbindung (2.85 Å^[201]), liegt sie dennoch in der Größenordnung der von POWER et al. beschriebenen Ge(IV)-Sn(II)- (2.72 Å)^[7] oder der von DRIESS et al untersuchten Ge(I)-Sn(I)-Einfachbindung (2.72 Å).^[202]

Tabelle 3.24. Die natürlichen Ladungen an den Germaniumatomen und die WIBERG Bindungsindizes der Ge–Ge-Bindungen in **111** und **112⁺**.

Verbindung	WBI	q(NBO)	
	Ge–Ge/Sn	Ge ^A	Ge ^B /Sn
111	0.64	0.93	0.88
112⁺	0.86	1.32	0.65

Die mesomere Grenzstruktur **111d** kann ausgeschlossen werden, da das Germanium vierfach koordiniert ist und es somit an einem geeigneten Orbital mangelt. Außerdem ist die natürliche Ladung am Germanium etwas höher als am Zinn. Da dies trotz der geringeren Elektronegativität des Zinns sowie der starken -I-Effekte der Chloride der Fall ist, kann die Verbindung am besten durch die mesomeren Grenzstrukturen **111b** und **111c** beschrieben werden.

Auch im Kation **112⁺** spricht der WIBERG Bindungsindex der Ge–Ge-Bindung von 0.86 gegen eine Beschreibung durch eine Doppelbindung. Auch hier korreliert diese Beobachtung wieder mit der von CHANDRAJEET MOHAPATRA beobachteten Bindungslänge von 2.49 Å,^[195] die

deutlich länger ist als in der Verbindung **110** (2.31 Å^[196]). Wenngleich sie auch kürzer ist als in anderen Verbindungen mit einer Ge(II)–Ge(II)-Einfachbindung (2.56-2.71 Å^[197–199]), zeigt eine Betrachtung der Orbitale in Form des HOMOs des Kations deutlich Elektronendichte an Ge^B (Abbildung 3.56), was für ein freies Elektronenpaar an diesem Atom spricht. Dieses kommt nur in den Beschreibungen **112⁺b** und **112⁺c** vor. Die für **112⁺a** benötigte π -förmige Elektronendichte entlang der Ge–Ge-Bindung wurde hingegen in keinem besetzten Orbital gefunden.

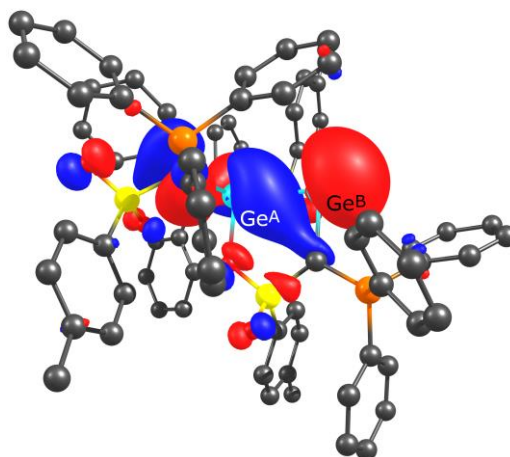


Abbildung 3.56. Das HOMO des Kations **112⁺**. Die Wasserstoffatome sind zu Gunsten einer besseren Übersichtlichkeit nicht abgebildet.

Für dieses Kation ergibt sich weiterhin, analog zur Verbindung **107a**, ein deutliches Gefälle der natürlichen Ladungen. Entsprechend den dort angestellten Überlegungen ergibt sich somit eine Beschreibung in den Grenzstrukturen **112⁺b** und **112⁺c** mit Schwerpunkt auf letzterer Struktur.

3.3 Untersuchung der elektronischen Struktur neuartiger ylid-substituierter Phospheniumkationen

TOBIAS STALDER aus unserer Gruppe war es möglich die zu ylidsubstituierten Tetrylenen isolabalen ylidsubstituierten Phospheniumkationen **Y_{Ph}(Ph)P⁺** und **Y_{Ph}(Cy)P⁺** zu synthetisieren.^[170] Im Rahmen dieser Arbeit wurden deren elektronische Strukturen quantenchemisch auf PW6B95D3/def2svp//PW6B95D3/def2tzvp-Niveau untersucht. Zu Gunsten einer besseren Vergleichbarkeit wurden ebenfalls das zweifach ylidsubstituierte Phospheniumkation (**Y_{Ph})₂P⁺** und das *N*-heterocyclische Phospheniumkation **NHP⁺** optimiert. Der erste Fokus bei der Betrachtung der elektronischen Strukturen lag dabei auf den Donor- und Akzeptoreigenschaften der Verbindungen, weshalb ihre HOMO- und LUMO-Energien bestimmt wurden. Das LUMO war dabei ausnahmslos am zentralen Phosphoratom lokalisiert, das HOMO hingegen nur bei **Y_{Ph}(Cy)P⁺**. In den anderen Fällen lag die Lokalisation auf den benachbarten ylidischen Kohlenstoff- beziehungsweise Stickstoffatomen. Das freie

Elektronenpaar am zentralen Phosphoratom wird in diesen Fällen durch das HOMO-1 beziehungsweise das HOMO-2 repräsentiert. Da für die carbenartige Reaktivität die am Phospheniumzentrum lokalisierten Orbitale relevant sind, werden im Folgenden diese betrachtet und – wenn nicht anders angegeben – verkürzt als HOMO- und LUMO bezeichnet. Dabei zeigte sich, dass die LUMOs in den ylidsubstituierten Fällen energetisch deutlich höher liegen als im *N*-heterocyclischen Phospheniumion **NHP⁺** (Abbildung 3.57). Das entspricht analogen Beobachtungen zu AYCs gegenüber NHCs^[90,92] und hängt wahrscheinlich damit zusammen, dass ein ylidisches Kohlenstoffatom einen stärkeren +M-Effekt ausübt als ein Stickstoffatom. Weiterhin sind die HOMO-Energien der beiden neuen Spezies niedriger als im von SCHMIDPETER und JOCHEM synthetisierten^[127] Phospheniumkation (**(Y_{Ph})₂P⁺**). Das lässt sich auf die doppelte Ylidsubstitution und den geringeren -I-Effekt von anionischen Kohlenstoffatomen im Vergleich zu neutralen zurückführen. Weiterhin liegt das LUMO von **Y_{Ph}(Cy)P⁺** etwas höher als das von **Y_{Ph}(Ph)P⁺**. Das steht in Analogie zu den höheren LUMOs von CAACs gegenüber cyclischen amino(aryl)substituierten Carbenen (CAACs).^[203]

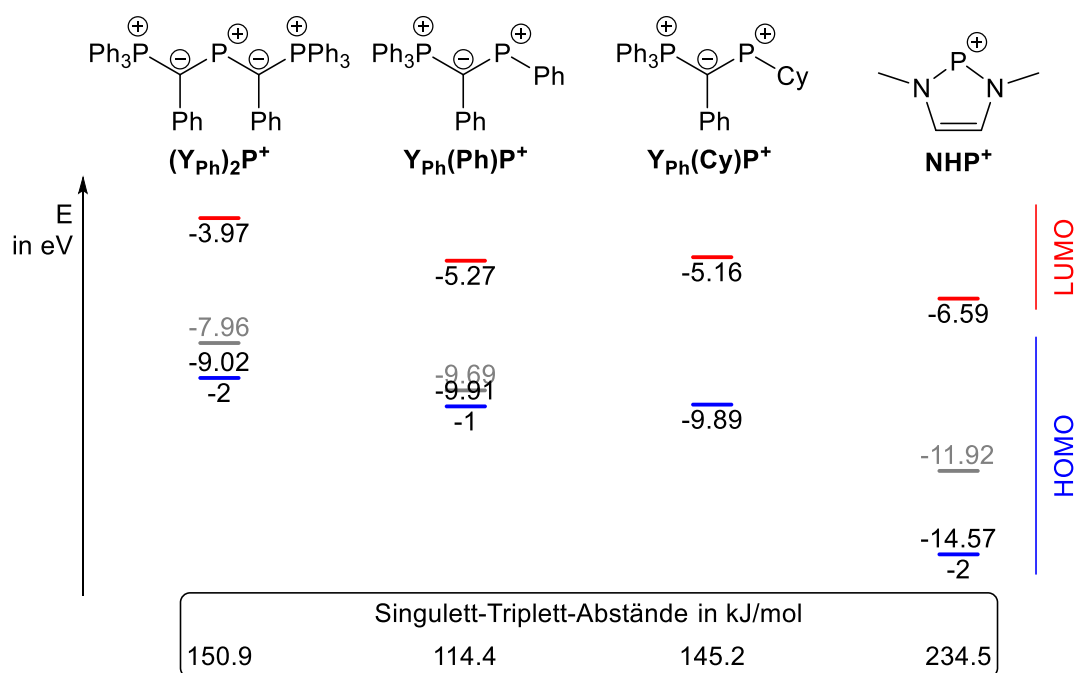


Abbildung 3.57. Die HOMO- und LUMO-Orbitalenergien und die Singulett-Triplett-Energiedifferenzen der ylidsubstituierten Phospheniumkationen (**(Y_{Ph})₂P⁺**, **Y_{Ph}(Ph)P⁺**, **Y_{Ph}(Cy)P⁺** und des *N*-heterocyclischen Phospheniums **NHP⁺**. In den Fällen, in denen das LUMO nicht die erwartete Geometrie am Zentralatom hat, ist dieses ausgegraut und die entsprechenden Orbitale zusätzlich angegeben.

Ebenso sind die Energien der HOMOs der ylidsubstituierten Phospheniumionen höher als in **NHP⁺**. Analog zu den Überlegungen zu AYCs gegenüber NHCs (vergleiche Kapitel 1.2) resultiert das aus der geringeren Elektronegativität von Kohlenstoff gegenüber Stickstoff^[5] und damit verbundenen geringeren -I-Effekten auf das zentrale Phosphoratom. Das höchste HOMO liegt weiterhin bei **(Y_{Ph})₂P⁺** vor und ist vermutlich ein Resultat eines schwächeren -I-Effekts eines carbanionischen Kohlenstoffatoms gegenüber einem neutralen.

Damit sollte diese Spezies in dieser Reihe der beste σ -Donor und schlechteste π -Akzeptor sein. Die HOMO-Energien von $\text{Y}_{\text{Ph}}(\text{Ph})\text{P}^+$ und $\text{Y}_{\text{Ph}}(\text{Cy})\text{P}^+$ selbst unterscheiden sich kaum. Auch dies ist eine Parallele zu CAArCs gegenüber CAACs.^[203]

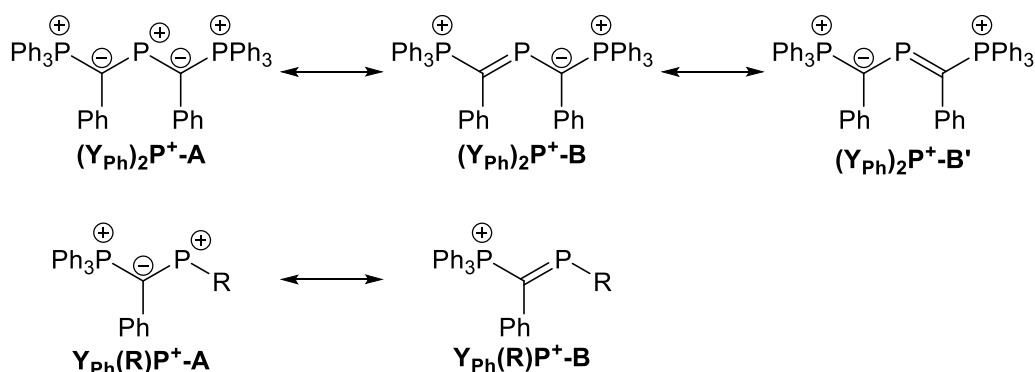
Weiterhin sind die Singulett-Triplett-Abstände in den ylidsubstituierten Phospheniumkationen $(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{P}^+$, $\text{Y}_{\text{Ph}}(\text{Ph})\text{P}^+$ und $\text{Y}_{\text{Ph}}(\text{Cy})\text{P}^+$ deutlich geringer als im *N*-heterocyclischen Phospheniumkation NHP^+ (Abbildung 3.57), was mit den HOMO-LUMO-Abständen korreliert. Ein Grund für die kleinen Abstände könnte sein, dass in diesen Spezies im Gegensatz zu NHP^+ keine Stabilisierung durch Aromatizität vorliegt.

Nach der Analyse der Donor- und Akzeptoreigenschaften lag ein weiteres Interesse auf der Bindungssituation zwischen dem zentralen Phosphoratom und den benachbarten Kohlenstoff- beziehungsweise Stickstoffatomen. Daher wurden als nächstes die WIBERG Bindungsindizes und die natürlichen Ladungen der vier Verbindungen berechnet (Tabelle 3.25).

Tabelle 3.25. Ausgewählte WIBERG Bindungsindizes und natürliche Ladungen der ylidsubstituierten Phospheniumionen $(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{P}^+$, $\text{Y}_{\text{Ph}}(\text{Ph})\text{P}^+$, $\text{Y}_{\text{Ph}}(\text{Cy})\text{P}^+$ und des *N*-heterocyclischen Phospheniums NHP^+ .

		$(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{P}^+$	$\text{Y}_{\text{Ph}}(\text{Ph})\text{P}^+$	$\text{Y}_{\text{Ph}}(\text{Cy})\text{P}^+$	NHP^+
WBI	$\text{C}^{\text{Ylid}}\text{--P}^{\text{III}}$				
	oder	1.31/1.31	1.62	1.68	1.02/1.02
	N–P				
q(NBO)	P^{III}	0.76	0.83	0.84	1.12
	C^{Ylid}	-0.91/-0.92	-0.81	-0.80	–
	P^{IV}	1.60/1.59	1.60	1.60	–

Der WIBERG Bindungsindex für die N–P-Bindung in NHP^+ ist mit 1.02 deutlich geringer als für die vergleichbare $\text{C}^{\text{Ylid}}\text{--P}^{\text{III}}$ -Bindung in den ylidsubstituierten Varianten und weist daher den geringsten Doppelbindungsanteil auf. Dies lässt sich auf den bereits besprochenen geringeren +M-Effekt des Stickstoffatoms im Vergleich zu den ylidschen Kohlenstoffatomen zurückführen. Dadurch bedingt ist die natürliche Ladung am Phospheniumzentrum in NHP^+ am höchsten, was mit den HOMO- und LUMO-Energien korreliert. Das diylidsubstituierte Phospheniumion $(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{P}^+$ weist am Phospheniumzentrum im Gegensatz dazu die geringste natürliche Ladung auf. In Bezug auf die möglichen mesomeren Grenzstrukturen der Phospheniumkationen (Schema 3.18) deutet dies auf eine Beschreibung mit Doppelbindungscharakter (Struktur **B** beziehungsweise **B'**) und steht der Lokalisation der positiven Ladung am Phospheniumzentrum (Struktur **A**) entgegen.



Schema 3.18. Mögliche mesomere Grenzstrukturen der untersuchten Phospheniumkationen ($R = \text{Cy}, \text{Ph}$).

In $(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{P}^+$ führt die zweifache Ylidsubstitution des Phospheniumzentrums zu einem vergleichsweise geringeren Doppelbindungscharakter jeder $\text{C}^{\text{Ylid}}\text{-P}$ -Bindung, gleichzeitig aber zu einer niedrigeren natürlichen Ladung an Selbigem im Vergleich zu den monoylid-substituierten Verbindungen $\text{Y}_{\text{Ph}}(\text{Ph})\text{P}^+$ und $\text{Y}_{\text{Ph}}(\text{Cy})\text{P}^+$. Auch diese Beobachtung korreliert mit den HOMO- und LUMO-Energien. Folglich ist die Ladung am ylidischen Kohlenstoffatom in $(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{P}^+$ niedriger als in $\text{Y}_{\text{Ph}}(\text{Ph})\text{P}^+$ oder $\text{Y}_{\text{Ph}}(\text{Cy})\text{P}^+$. Die Ladungen an den Phosphoniumzentren werden davon hingegen nicht beeinflusst.

Der Doppelbindungscharakter wird auch durch die entsprechenden Orbitale, die aus den freien Elektronenpaaren der Ylide resultieren, deutlich. So sind diese in Form der HOMOs von $(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{P}^+$ und $\text{Y}_{\text{Ph}}(\text{Ph})\text{P}^+$ sowie des HOMO-3 von $\text{Y}_{\text{Ph}}(\text{Cy})\text{P}^+$ deutlich in Richtung des Phospheniumzentrums delokalisiert (Abbildung 3.58).

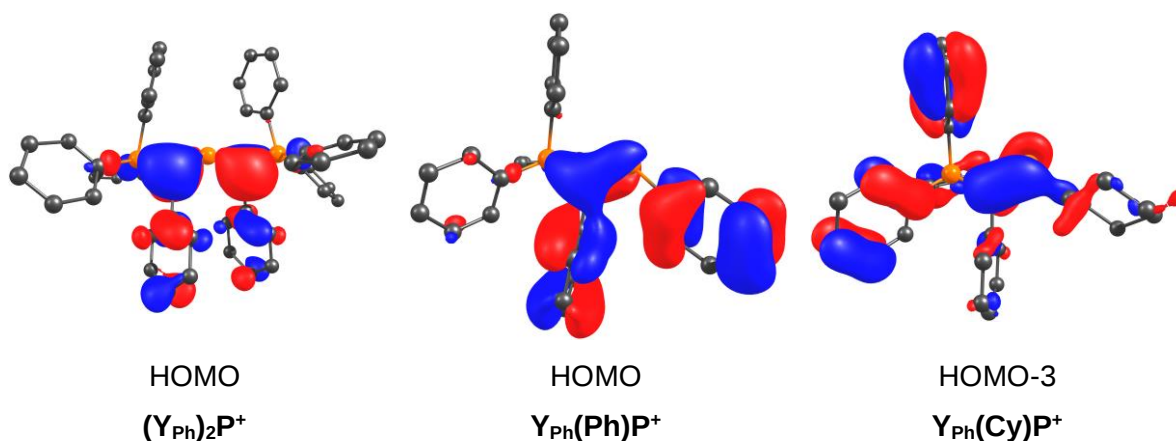


Abbildung 3.58. Die Orbitale von $\text{Y}_{\text{Ph}2}\text{P}^+$, $\text{Y}_{\text{Ph}}(\text{Ph})\text{P}^+$ und $\text{Y}_{\text{Ph}}(\text{Cy})\text{P}^+$, die den $\text{C}^{\text{Ylid}}\text{=P}$ -Doppelbindungscharakter zeigen.

Zusammenfassend weisen sowohl $\text{Y}_{\text{Ph}}(\text{Ph})\text{P}^+$ und $\text{Y}_{\text{Ph}}(\text{Cy})\text{P}^+$ einen deutlichen Doppelbindungscharakter zwischen dem ylidischen Kohlenstoffatom und dem zentralen Phosphoratom auf. In der Folge ist die positive Ladung am Phospheniumzentrum geringer als in NHP^+ und die Verbindungen sind schwächere π -Akzeptoren. Aufgrund der zweifachen Ylidsubstitution ist $(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{P}^+$ jedoch ein noch schwächerer π -Akzeptor und gleichzeitig der beste σ -Donor in diesem Vergleich.

3.4 Ylidsubstituierte Phosphane

3.4.1 Gold–Aren-Wechselwirkungen in YPhos-substituierten Goldkomplexen^s

TOBIAS STALDER aus unserer Arbeitsgruppe konnte das Phospheniumkation $\text{Y}_{\text{Ph}}(\text{Ph})\text{P}^+$ zu den Goldkomplexen **89-Cl** und **89-tht**⁺ umsetzen, wobei röntgenstrukturanalytische Untersuchungen auf Gold–Aren-Wechselwirkungen mit einer Phenylgruppe der Triphenylphosphoniumeinheit hindeuteten (Abbildung 3.59).^[170] Diese Vermutung sollte im Rahmen dieser Arbeit auf PW6B95D3/def2svp//PW6B95D3/def2tzvp-Niveau validiert werden.

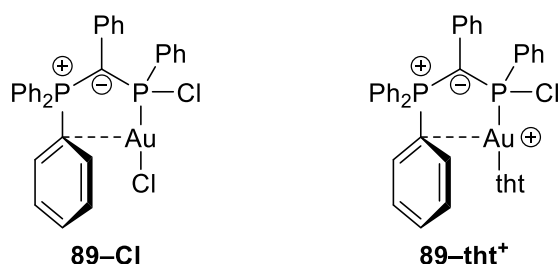


Abbildung 3.59. Die Goldkomplexe **105-AuCl** und **105-(tht)⁺**.

Zur weiteren Analyse wurden die Strukturen daher quantenchemisch optimiert und die entsprechenden Orbitale betrachtet. Dabei deuten für den Chloridkomplex **89-Cl** das HOMO-16 und für den kationischen Tetrahydrothiophenkomplex **89-tht**⁺ das HOMO-12 auf Interaktionen zwischen dem *ipso*-Kohlenstoffatom des Phenylsubstituenten und dem Goldzentrum hin (Abbildung 3.60).

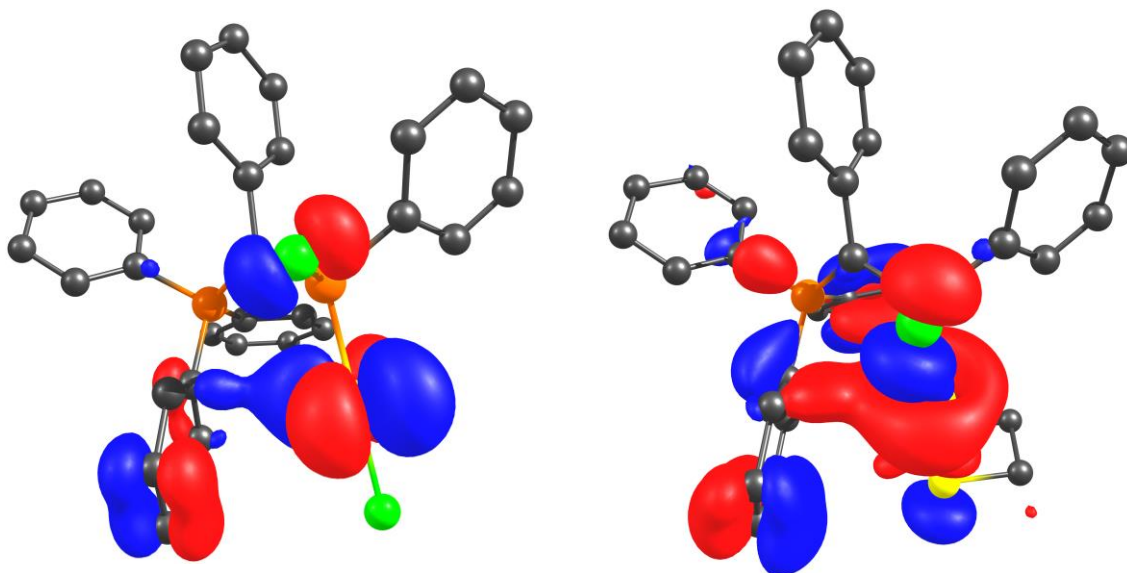


Abbildung 3.60. Das HOMO-16 von **89-Cl** (links) und das HOMO-12 von **89-tht**⁺ (rechts). Für eine bessere Übersichtlichkeit sind die Wasserstoffatome nicht abgebildet.

^s In Teilen wiedergegeben mit Erlaubnis von J. Handelsmann, C. N. Babu, H. Steinert, C. Schwarz, T. Scherpf, A. Kroll, V. H. Gessner, *Chem. Sci.* **2021**, 12, 4329. Veröffentlicht von der *Royal Society of Chemistry*. Copyright © 2021 CC-BY 3.0 bei den Autoren.

Unterstützt wird diese Beobachtung durch eine QTAIM-Analyse, die in beiden Fällen bindungskritische Punkte zwischen dem Goldatom und dem entsprechenden *ipso*-Kohlenstoffatom der Triphenylphosphoniumeinheit zeigt (Abbildung 3.61).

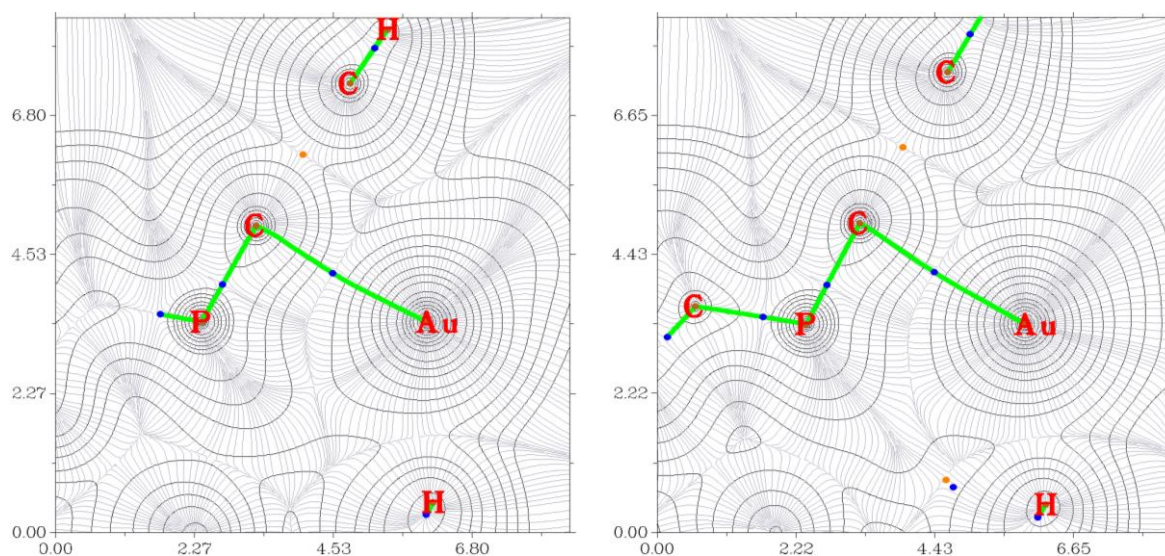


Abbildung 3.61. Bindungskritische Punkte zwischen dem Goldatom und einem *ipso*-Kohlenstoffatom der Triphenylphosphoniumeinheit für **89-Cl** (links) und **89-tht⁺** (rechts). Die Abstände sind in Å angegeben.

Die Elektronendichte an diesem bindungskritischen Punkt beträgt dabei im neutralen Komplex **89-Cl** 0.0137 |e|/Bohr³ und ist damit erwartungsgemäß niedriger als im kationischen Komplex **89-tht⁺**. Hier beträgt die Elektronendichte 0.0163 |e|/Bohr³ und ist damit ein Resultat der Stabilisierung des Goldkations durch den Phenylsubstituenten. In beiden Fällen ist die Elliptizität am bindungskritischen Punkt mit einem Wert von 0.25 beziehungsweise 0.22 sehr niedrig, was auf eine, falls vorhanden, jeweils sehr schwache π -Rückbindung schließen lässt. Eine schwache π -Rückbindung kann wiederum ein Resultat der elektronenziehenden Eigenschaften des Chloratoms der Phosphoniumgruppe sein.

Weiterhin war es JENS HANDELMANN aus unserer Arbeitsgruppe möglich, die Goldkomplexe mit YPhos-Liganden **90a-e** zu synthetisieren (Abbildung 3.62), die im Gegensatz zu den von TOBIAS STALDER untersuchten Goldkomplexen **89-Cl** und **89-tht** eine höhere katalytische Aktivität zeigten, weshalb auch ihre elektronische Struktur im Rahmen dieser Arbeit untersucht werden sollte.^[171]

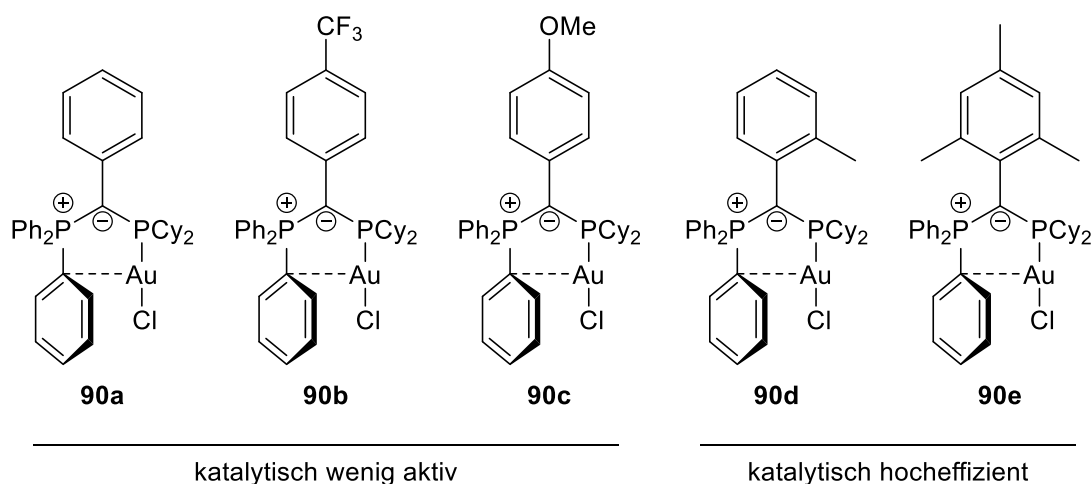


Abbildung 3.62. Die untersuchten YPhosAuCl-Komplexe **90a–e**.

In den Untersuchungen von JENS HANDELMANN sich außerdem heraus, dass in Molekülstrukturen im Kristall aller fünf Strukturen die Arylsysteme im Rückgrat der YPhos-Liganden aus der P–C–P-Ebene herausgedreht waren, was den hohen sterischen Anspruch des Substitutionsmusters unterstreicht.^[171] Weiterhin zeigten die Systeme **90a–c** in gold(I)-katalysierten Hydroaminierungsreaktionen eine deutlich geringere katalytische Aktivität als die Systeme **90d** und **90e**. Das ist zunächst auffallend, da die Systeme **90b** und **90d** eine ähnliche Donorstärke aufweisen. Daher wird vermutet, dass der Einfluss des sterischen Anspruchs des Arylsystems im Rückgrat einen entscheidenden Einfluss spielen muss, zum Beispiel in Form einer Abschirmung des carbanionischen Zentrums durch den *ortho*-Tolyl- oder Mesityl-substituenten. Ein hoher sterischer Anspruch sollte der Substituenten sollte aber auch zu einem kleineren P–C–P-Winkel und dadurch auch zu einer stärkeren Interaktion zwischen einer Phenylgruppe der Triphenylphosphoniumereinheit und dem Goldatom führen. Das wiederum sollte zu einer stärkeren sekundären Ligand–Metall-Wechselwirkung führen und – bei verhältnismäßig gleichen Werten für TEP und Kugelvolumen – die deutlich unterschiedlichen Reaktivitäten erklären.

Daher wurden im Rahmen dieser Arbeit auch hier die Strukturen quantenchemisch untersucht. Dabei deuten das HOMO-11 und insbesondere das HOMO-15 in fast allen Fällen auf starke Gold-Aren-Wechselwirkungen hin (Abbildung 3.63).

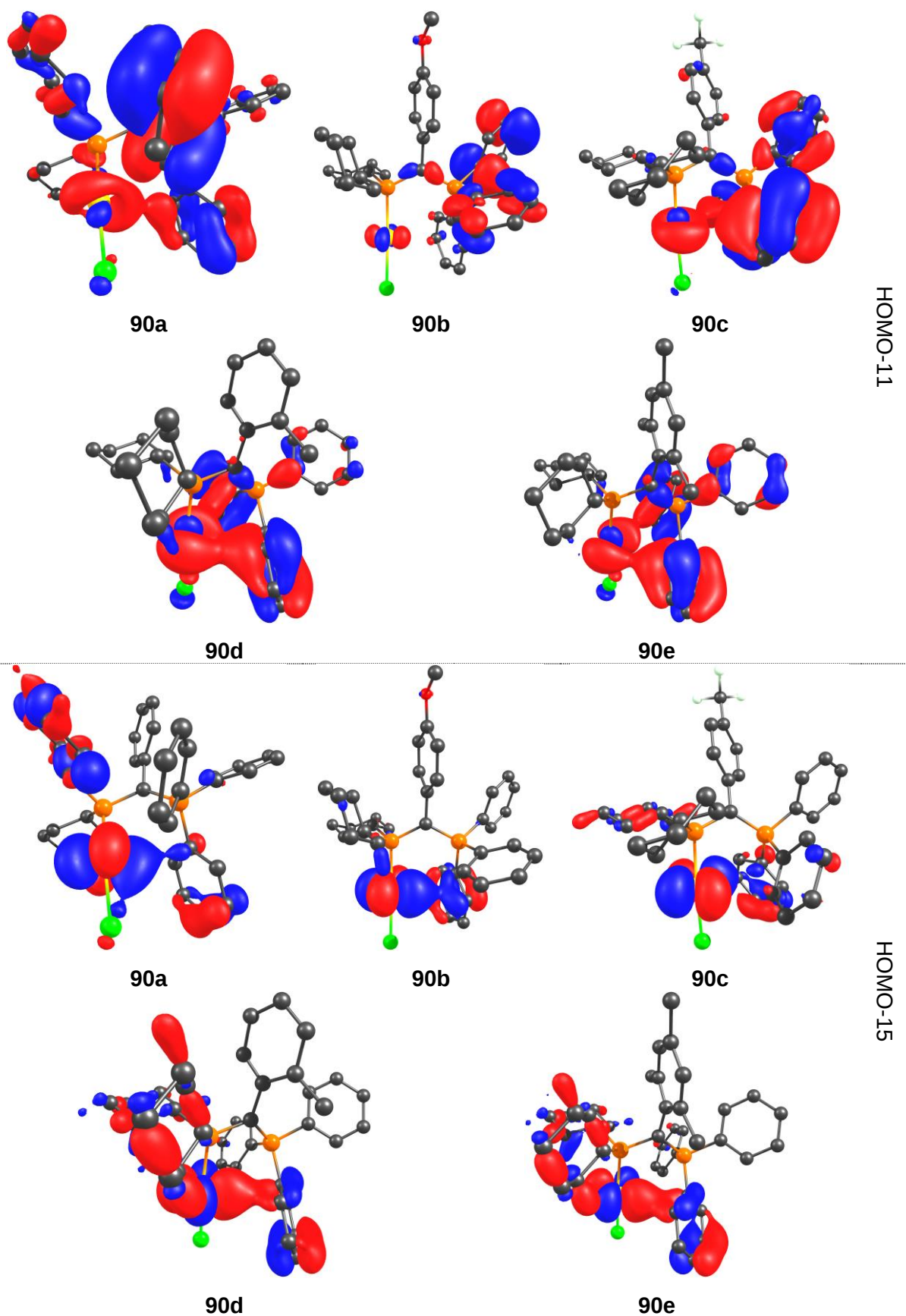


Abbildung 3.63. Die HOMO-11 (oben) und HOMO-15 (unten) der YPhos-substituierten Goldkomplexe **90a**, **90b**, **90c**, **90e** und **90d** (im Uhrzeigersinn, angefangen in der jeweils linken oberen Ecke). Für eine bessere Übersichtlichkeit sind die Wasserstoffatome nicht abgebildet.

An dieser Stelle ist anzumerken, dass es, insbesondere die Au–C^{ipso}- und Au–C^{ortho}-Abstände betreffend, teils erhebliche Abweichungen zwischen den Molekülstrukturen im Kristall und den auf Basis dieser Strukturen optimierten Strukturen gibt (Tabelle 3.26). Dies lässt sich auf intermolekulare Wechselwirkungen bei den röntgenkristallographisch bestimmten Strukturen zurückführen, sodass die optimierten Strukturen wahrscheinlich eine bessere Grundlage für die Diskussion der Reaktivitäten bieten, weshalb im Folgenden ausschließlich diese diskutiert werden.

Tabelle 3.26. Au–C^{ipso}- und Au–C^{ortho}-Abstände in den Molekülstrukturen im Kristall^[171] und den optimierten Strukturen der YPhos-substituierten Goldkomplexe **90a–e** in Å.

	Kristallstruktur			Optimierte Strukturen		
	Au–C ^{ipso}	Au–C ^{ortho}	Σ	Au–C ^{ipso}	Au–C ^{ortho}	Σ
90a	3.215	3.501	6.716	3.234	3.244	6.478
90b	3.226	3.213	6.439	3.195	3.297	6.492
90c	3.177	3.080	6.257	3.361	3.369	6.730
90d	3.236	3.453	6.689	3.207	3.130	6.337
90e	3.218	3.179	6.397	3.241	3.90	6.347

Weiterhin kann für den Au–C^{ipso}-Abstand der optimierten Strukturen keine Korrelation mit den beobachteten katalytischen Aktivitäten festgestellt werden. Demgegenüber stehen die Au–C^{ortho}-Abstände sowie die Summe der Au–C^{ipso}- und Au–C^{ortho}-Abstände. Diese sind für die methoxy- und trifluormethylsubstituierten Verbindungen **90b** und **90c** am höchsten. Im Gegensatz dazu sind sie für die Verbindungen **90d** und **90e**, die in der Katalyse die höchsten Aktivitäten gezeigt haben, am geringsten.

Auffällig ist, dass die bindungskritischen Punkte der Gold–Aren-Wechselwirkung zwischen dem Goldatom und der C^{ipso}–C^{ortho}-Bindung liegen (Abbildung 3.64). Gleichzeitig verläuft der Bindungspfad in den weniger reaktiven Verbindungen **90a–c** vom Goldzentrum zu C^{ipso}, in den reaktiveren Verbindungen **90d** und **90e** hingegen zu C^{ortho}. Die Elliptizitäten der Elektronendichten an den bindungskritischen Punkten sind in allen Fällen größer als Eins. Damit sind sie deutlich höher als in den Goldkomplexen **89–Cl** und **89–tht**⁺ und deuten auf π -Rückbindungen hin. Gleichzeitig steigt die Elektronendichte am bindungskritischen Punkt der Verbindungen zwischen dem Goldzentrum und der C^{ipso}–C^{ortho}-Bindung in der Reihe **90c** < **90b** < **90a** < **90d** < **90e**. Das entspricht wiederum den beobachteten Aktivitäten der Goldkomplexe. Die einzige Ausnahme ist die Verbindung **90c**, die sich in den Katalysen von JENS HANDELMANN als stabiler erwies als **90b** und **90a**.

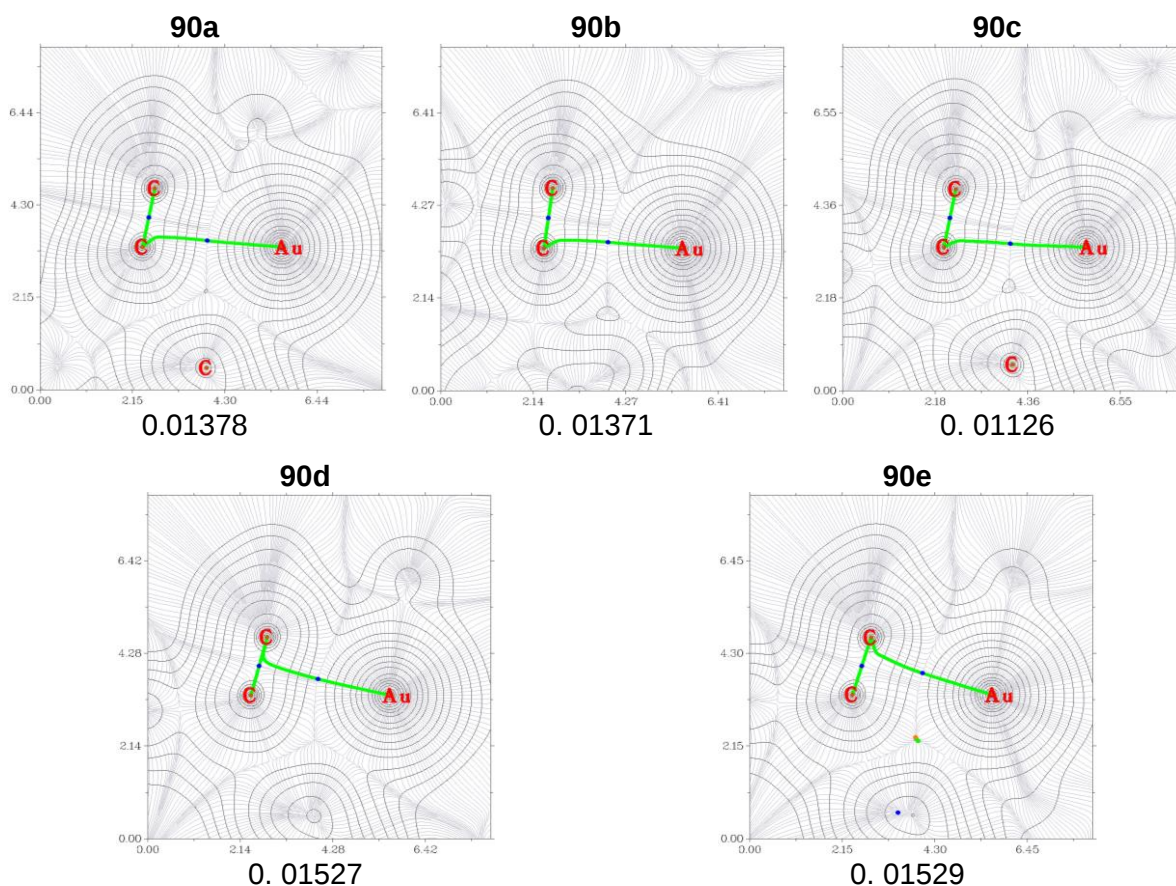
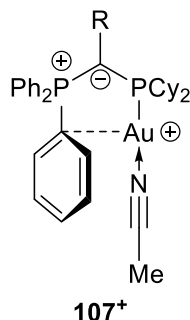


Abbildung 3.64. Die bindungskritischen Punkte zwischen dem Goldatom und der C^{ipso}(unten)–C^{ortho}(ortho)-Bindung bei **90a**, **90b**, **90c**, **90e** und **90d** (im Uhrzeigersinn, angefangen in der linken oberen Ecke, Abstände in Å), sowie die Elektronendichten (in |e|/Bohr³) an diesen.

Da kationische Spezies die Reaktivität in der Katalyse unter Umständen besser beschreiben könnten, wurden die entsprechenden Derivate **114a–e**⁺ der Verbindungen **90a–e** berechnet (Tabelle 3.27). Hier stellte sich zunächst analog zu **89–Cl** und **89–tht** heraus, dass die Elektronendichten an den bindungskritischen Punkten zwischen dem Goldatom und der C^{ipso}–C^{ortho}-Bindung in den kationischen Verbindungen **114a–e**⁺ höher ist als in den neutralen Spezies **90a–e**. Weiterhin ergibt sich die gleiche Korrelation zwischen Elektronendichte und Reaktivität wie in den neutralen Spezies. Einzige Ausnahme dabei ist die Verbindung **114d**⁺. Ein Grund hierfür könnte sein, dass nicht das thermodynamisch günstigste Konformer gefunden wurde.

Tabelle 3.27. Die Elektronendichte an den bindungskritischen Punkten zwischen dem Goldatom und der C^{ipso}–C^{ortho}-Bindung der kationischen Komplexe **114a–e**⁺ (**a**: R = Ph; **b**: R = *p*-CF₃Ph; **c**: R = *p*-Anisyl; **d**: R = *o*-Tol; **e**: R = Mes).

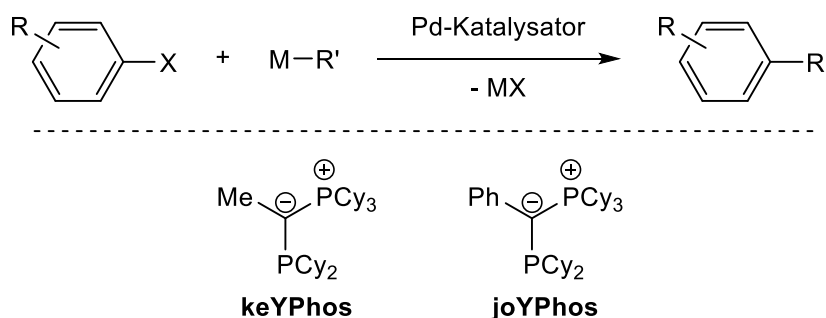
Verbindung	Elektronendichte am BCP [e/Bohr ³]
114a ⁺	0.01618
114b ⁺	0.01483
114c ⁺	0.01176
114d ⁺	0.01475
114e ⁺	0.01695



Zusammenfassend konnte somit ein Indiz gefunden werden, dass eine starke Gold–Aren-Wechselwirkung einen wichtigen Beitrag zu einer hohen katalytischen Aktivität leistet. Diese kann dabei deutlich durch einen hohen sterischen Anspruch des Substituenten im Rückgrat des YPhos-Liganden forciert werden. Weiterhin ist diese Wechselwirkung in den kationischen Verbindungen stärker.

3.4.2 Untersuchungen zur MURAHASHI-FERINGA-Kupplung mit YPhos-Liganden[†]

YPhos-Liganden können allerdings nicht nur in Goldkomplexen zu einer hohen katalytischen Aktivität führen. Auch in vielen palladiumkatalysierten Reaktionen wurden sie erfolgreich eingesetzt.^[145,148–151] Ein kürzlich vorgestelltes Beispiel hierfür ist die MURAHASHI-FERINGA-Kupplung, bei der formal Arylhalogenide mit Alkalimetallalkylen unter C–C-Bindungsknüpfung reagieren (Schema 3.19).^[172,173,204,205,206] Eine direkte Umsetzung ist dabei häufig nicht möglich, da es zu einem Halogen-Metall-Austausch kommen würde.^[207]

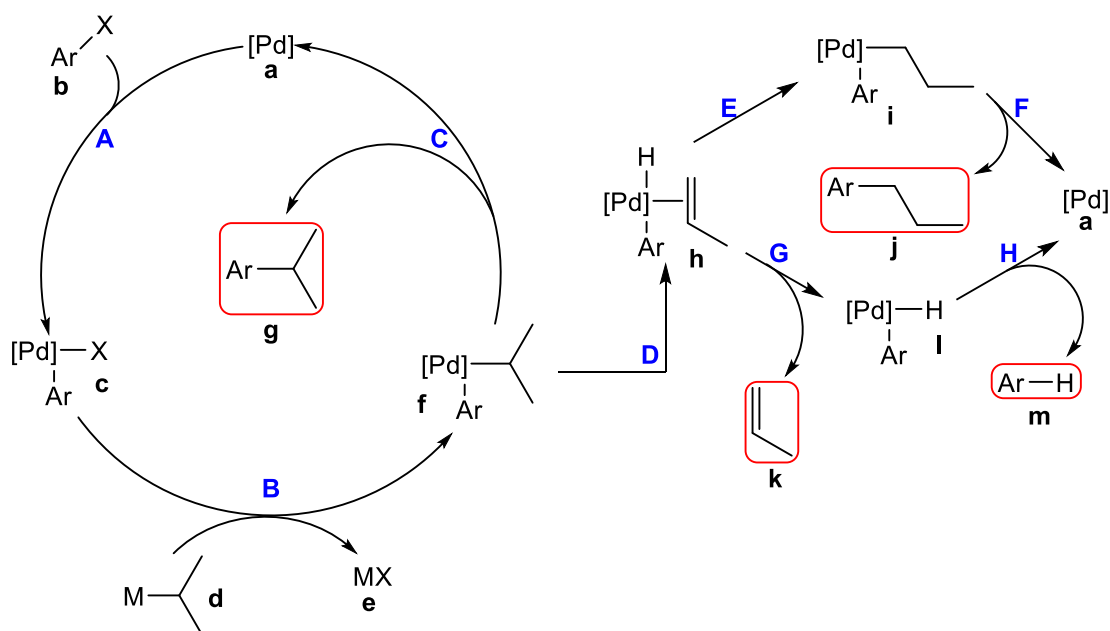


Schema 3.19. Grundsätzliches Reaktionsschema der MURAHASHI-FERINGA-Kupplung (X = Cl, Br, R = Organyl, R' = Alkyl, M = Li, Na) (oben)^[172,206] und die Strukturen von keYPhos und joYPhos (unten).

[†] In Teilen wiedergegeben mit der Erlaubnis von T. Scherpf, H. Steinert, A. Großjohann, K. Dilchert, J. Tappen I. Rodstein, V. H. Gessner, *Angew. Chem.* **2020**, 132, 46; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, 59, 20596. Veröffentlicht durch die Wiley-VCH GmbH. Copyright © 2020 CC-BY-NC-ND 4.0 bei den Autoren.

THORSTEN SCHERPF aus unserer Gruppe stellte bei durch YPhos-Palladiumkomplexe katalysierten Reaktionen fest, dass zum einen auch Lithiumalkyle mit Arylchloriden gekuppelt werden können, was sich zuvor als schwieriger erwies.^[208] Zum anderen beobachtete er, dass bei der Kupplung von *para*-Chloranisol mit *sec*-Butyllithium die Verwendung von joYPhos als Ligand zu deutlich weniger Isomerisierung führt als die Verwendung von keYPhos. quantenchemische Untersuchungen auf PW6B95D3/def2svp//PW6B95D3/def2tzvp-Niveau können hierbei zu weiterer Aufklärung verhelfen. Um einen sinnvollen Ansatzpunkt für diese zu finden, muss zunächst der vermutete Katalysezyklus der MURAHASHI-FERINGA-Kupplung betrachtet werden (Schema 3.20).^[205]

Der erste Schritt ist dabei die oxidative Addition **A** des Arylhalogenids **b** an die katalytisch aktive Spezies **a**. Das resultierende oxidative-Additions-Produkt **c** reagiert danach in einer Transmetallierung **B** mit der entsprechenden Alkalimetallorganylverbindung **d** unter Abspaltung des Metallsalzes **e** zur aryl(alkyl)substituierten Spezies **f**. Diese kann zum einen in einer reduktiven Eliminierung **C** des Produkts in Form der alkylierten Arylspezies **g** zur Rückgewinnung der katalytisch aktiven Spezies **a** führen. Alternativ kann sie auch durch eine β -Hydrid-Eliminierung **D** zum Olefinkomplex **h** reagieren. Durch eine Isomerisierung **E** kann aus dieser die Alkylspezies **i** entstehen, die in der Folge wieder unter reduktiver Eliminierung **F** zum alkylierten Aryl **j** und der katalytisch aktiven Spezies **a** reagiert. Alternativ kann allerdings auch eine Dissoziation **G** des Alkens **k** stattfinden, wodurch sich das Alken **k** und ein Hydridkomplex **l** bilden. Dieser kann wiederum in Form einer reduktiven Eliminierung **H** die protonierte Arylspezies **m** abspalten, sodass wiederum die katalytisch aktive Spezies **a** zurückerhalten wird.



Schema 3.20. Vermuteter Mechanismus der MURAHASHI-FERINGA-Kupplung eines Aryls mit *iso*-Propyl.^[205]

Dabei wird deutlich, dass weder die mechanistisch bereits gut untersuchte^[153] oxidative Addition **A** noch die Salzmetathese **B** einen Einfluss auf die Isomerisierung haben sollten. Daher wurde in den nachfolgenden Rechnungen von der alkyl(aryl)substituierten Spezies **f** ausgegangen. Als Arylsubstituent fungierte eine Phenylgruppe. Berechnet wurden die Kupplungsreaktionen dieser Phenylgruppe mit Ethyl-, *iso*-Propyl-, *sec*-Butyl- und *tert*-Butylgruppen mittels der joY- und keYPhos-Palladiumkomplexe.

keYPhos–Palladiumkomplex-katalysierte Ethyl–Phenyl-Kupplung

Zunächst stellte sich heraus, dass die Reaktionsbarriere der reduktiven Eliminierung $\text{TS}_{\text{X} \rightarrow \text{XI}}$ von Ethylbenzol im Falle von keYPhos als Ligand 38 kJ/mol gegenüber der Ausgangsspezies **X** beträgt. Das entsprechende Produkt **XI** ist wie erwartet thermodynamisch deutlich günstiger (Abbildung 3.65). Für die β -Hydrid-Eliminierung muss zunächst die Palladium–Cyclohexylwechselwirkung gebrochen werden, wodurch das entsprechende β -ständige Wasserstoffatom der Ethylgruppe die freiwerdende Koordinationsstelle besetzen kann. Die resultierende präkoordinierende Spezies **XII** ist thermodynamisch um 3.5 kJ/mol ungünstiger als das Edukt **X**. Die nachfolgende β -Hydrid-Eliminierung ist mit einer Barriere $\text{TS}_{\text{XII} \rightarrow \text{XIII}}$ von 40.4 kJ/mol kinetisch etwas ungünstiger als die reduktive Eliminierung $\text{TS}_{\text{X} \rightarrow \text{XI}}$. Ebenso ist der aus der β -Hydrid-Eliminierung resultierende Olefinkomplex **XIII** thermodynamisch ungünstiger als das Edukt **X**. Kinetisch am ungünstigsten in diesem Vergleich ist die Rotation^u $\text{TS}_{\text{XIII} \rightarrow \text{XIV}}$ des Ethylens.

^u Alle in diesem Kapitel beschriebenen Rotationen können entweder im oder gegen den Uhrzeigersinn verlaufen und weisen teilweise noch Intermediate auf. In allen Fällen wurde für eine bessere Übersichtlichkeit jeweils die niedrigste Barriere gewählt, die mindestens überwunden werden muss. Eine ausführliche Auflistung aller Einzelschritte kann dem Anhang entnommen werden.

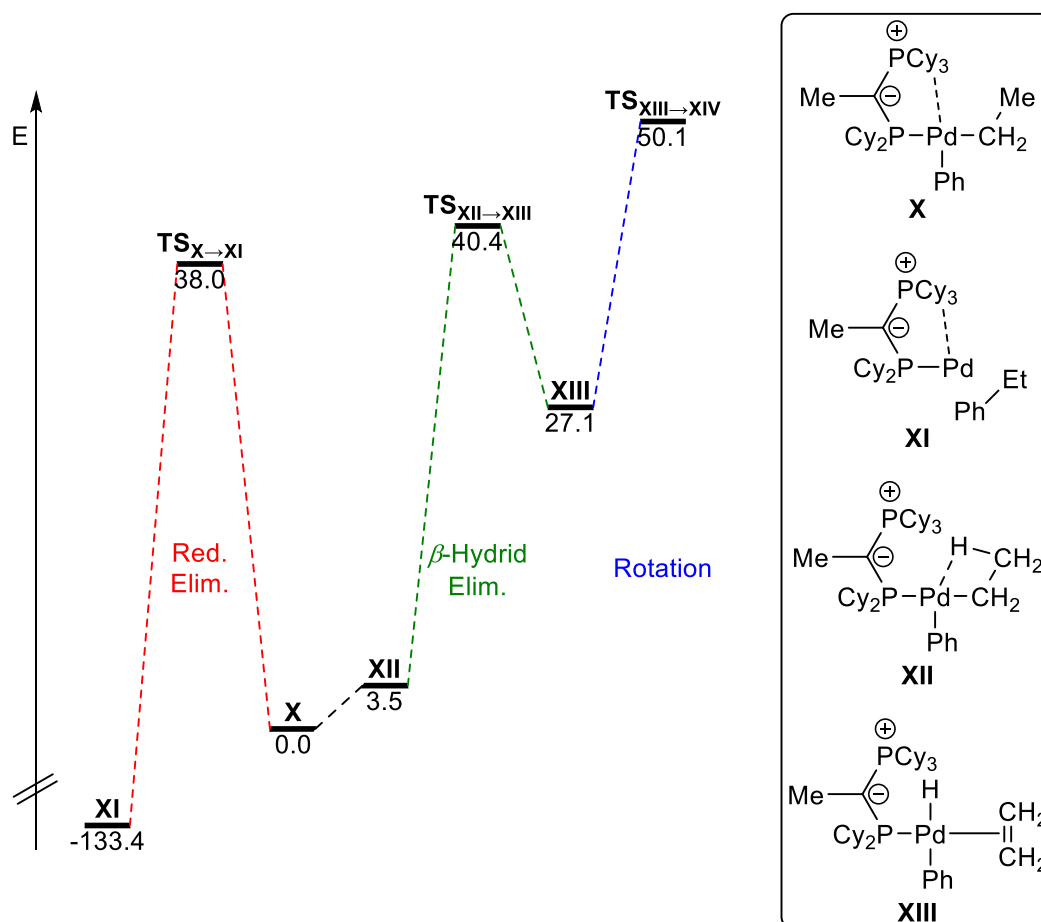


Abbildung 3.65. Energiediagramm der keYPhos–Palladium-katalysierten Ethyl–Phenyl-Kupplung (in kJ/mol) (XIV = XIII).

Sowohl die β -Hydrid-Eliminierung als auch die Rotation sind im Falle einer Kupplung mit einem Ethylliganden irrelevant, da das entsprechende Isomerisierungsprodukt dem nicht-isomerisierten Produkt entsprechen würde.

keYPhos–Palladiumkomplex-katalysierte *iso*-Propyl–Phenyl-Kupplung

Im Fall der Kupplung einer *iso*-Propylgruppe wird die Reaktion komplexer (Abbildung 3.66). So bieten sich für die Startspezies **X** zwei verschiedene Konfigurationen für die *iso*-Propylgruppe an, was in den Rotameren **X^a** und **X^c** resultiert. Von diesen ist eines thermodynamisch etwas ungünstiger. Entsprechend gibt es auch für die reduktive Eliminierung $TS_{X \rightarrow XI}$ zwei Übergangszustände $TS_{X \rightarrow XI}^a$ und $TS_{X \rightarrow XI}^c$, die sich um etwa 10 kJ/mol unterscheiden. Beide sind allerdings höher als im Fall der Ethyl–Phenyl-Kupplung.

Im Gegensatz zu der untersuchten Kupplung einer Ethylgruppe sind im Falle der keYPhos–Palladiumkomplex-katalysierten *iso*-Propyl–Phenyl-Kupplung die β -H-präkoordinierenden Spezies **XII^a** und **XII^c** etwas günstiger als die jeweiligen Startspezies **X**. Die β -Hydrid-Eliminierung $TS_{XII \rightarrow XIII}$ selbst unterscheidet sich je nach Reaktionspfad deutlich um 17 kJ/mol, ist aber in beiden Fällen gegenüber der jeweiligen reduktiven Eliminierung $TS_{X \rightarrow XI}$ kinetisch

bevorzugt. Auch die resultierenden Olefinkomplexe **XIII** unterscheiden sich thermodynamisch um etwa 10 kJ/mol, sind aber im Verhältnis thermodynamisch günstiger als in der entsprechenden Kupplung einer Ethylgruppe.

Die unterschiedlichen Reaktionspfade für die Rotation des Olefins $\text{TS}_{\text{XIII} \rightarrow \text{XIV}}$ unterscheiden sich kinetisch kaum und ihre Barriere ist leicht niedriger als im ethylsubstituierten Fall. Während der Reaktionspfad des Isomers **c** bisher allerdings ungünstiger war, ist er hier kinetisch bevorzugt. Das gilt thermodynamisch auch für die folgenden Produkte **XIV**.

Die nachfolgende Insertion des Olefins in die Pd–H-Bindung $\text{TS}_{\text{XIV} \rightarrow \text{XV}}$ ist kinetisch leicht günstiger als die vorherige Rotation $\text{TS}_{\text{XIII} \rightarrow \text{XIV}}$ und deutlich günstiger als die reduktive Eliminierung $\text{TS}_{\text{X} \rightarrow \text{XI}}$. Die resultierende Spezies **XV** ist thermodynamisch etwas ungünstiger als die vergleichbare Spezies **XIII**. Weiterhin ist hier die Spezies **XIII^a** thermodynamisch etwas günstiger als **XIII^c**.

Die abschließende reduktive Eliminierung $\text{TS}_{\text{XV} \rightarrow \text{XVI}}$ zum Isomerisierungsprodukt **XVI** ist kinetisch der ungünstigste Schritt beider Reaktionspfade der Isomerisierung, allerdings dennoch um etwa 5 kJ/mol günstiger als die jeweilige direkte reduktive Eliminierung $\text{TS}_{\text{X} \rightarrow \text{XI}}$.

Das Isomerisierungsprodukt **XVI** selbst ist thermodynamisch leicht ungünstiger als das der direkten reduktiven Eliminierung **XI**, allerdings gegenüber der Ausgangsspezies **X^a** mit einem Energiegewinn von 131.1 kJ/mol ebenfalls deutlich bevorzugt.

Zusammenfassend ist die direkte reduktive Eliminierung zwar thermodynamisch günstiger, allerdings kinetisch insgesamt 4.5 kJ/mol ungünstiger als die reduktive Eliminierung nach vorheriger Isomerisierung.

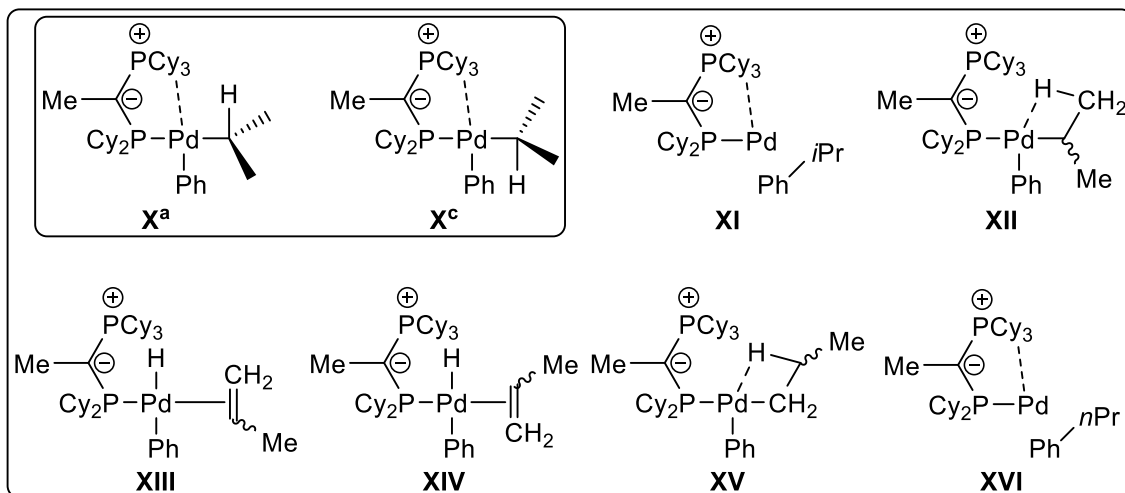
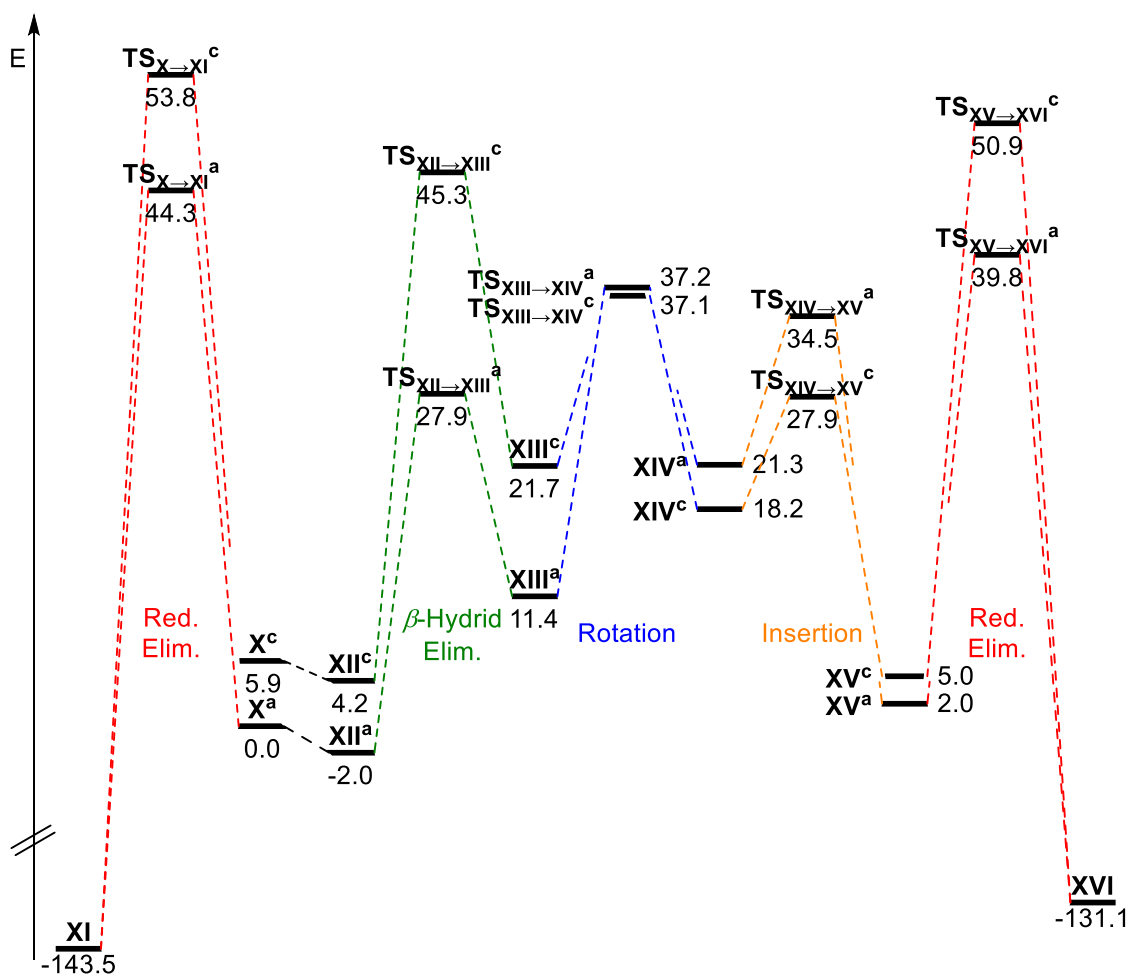


Abbildung 3.66. Energiediagramm der keYPhos–Palladiumkomplex-katalysierten *iso*-Propyl–Phenyl-Kupplung (in kJ/mol).

keYPhos–Palladiumkomplex-katalysierte *sec*-Butyl–Phenyl-Kupplung

Noch komplexer wird der Reaktionsmechanismus für die keYPhos–Palladiumkomplex-katalysierte Kupplung eines Phenyl- mit einem *sec*-Butylrest (Abbildung 3.67). Dies liegt daran, dass mit dem koordinierenden Kohlenstoffatom des *sec*-Butyls und dem Palladium

zwei Stereozentren und somit Diastereomere vorliegen. Zusammen mit den jeweils zwei Rotationskonfigurationen ergeben sich entsprechend vier mögliche Startspezies X^a , X^b , X^c und X^d .

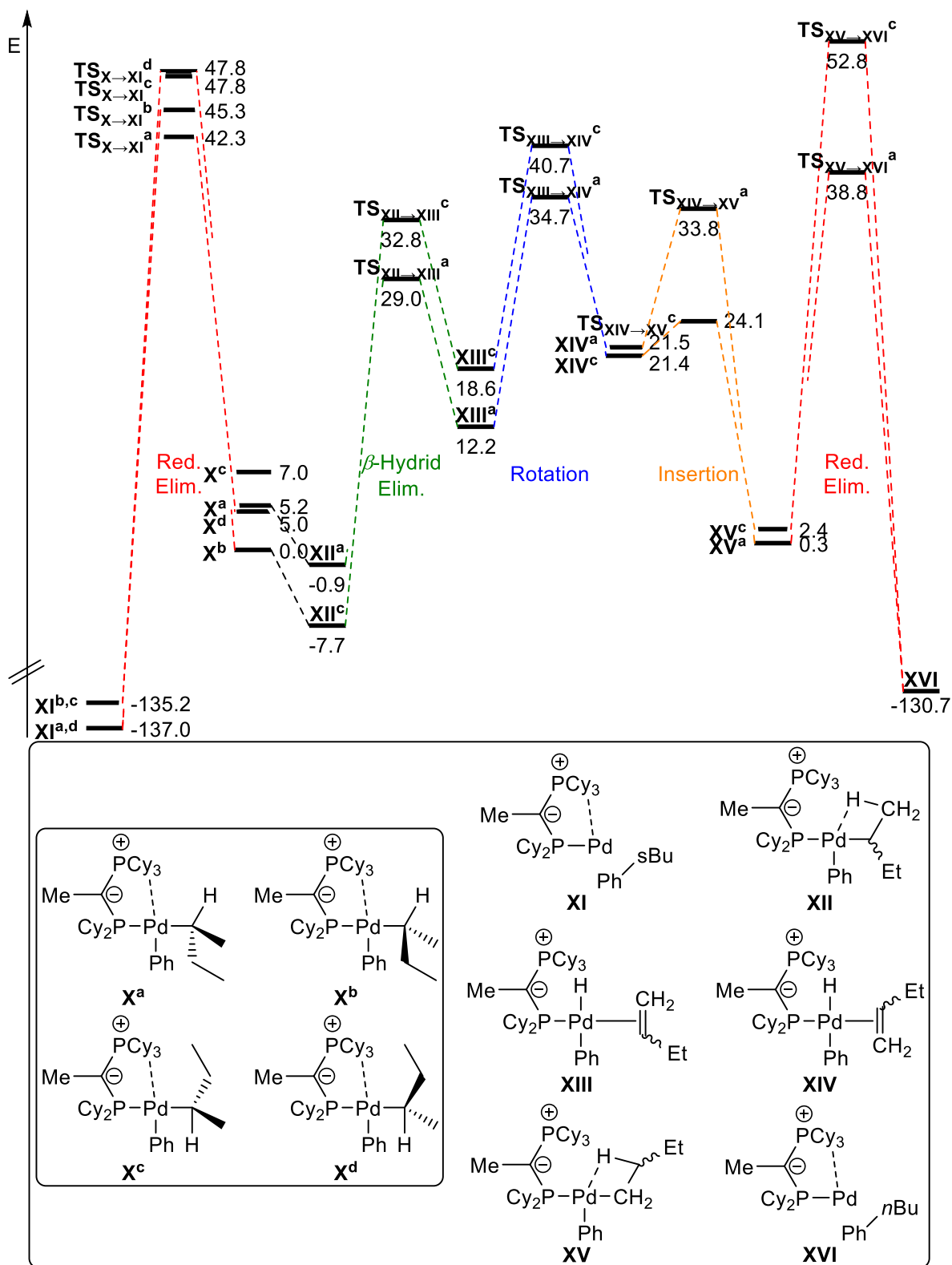


Abbildung 3.67. Energiediagramm der keYPhos-Palladiumkomplex-katalysierte sec-Butyl-Phenyl-Kupplung (in kJ/mol).

Diese unterscheiden sich um bis zu 7 kJ/mol und führen zu vier Barrieren für die anschließende reduktive Eliminierung $\text{TS}_{\text{X} \rightarrow \text{XI}}$, die tendenziell etwas niedriger liegen als in der *iso*-Propyl–Phenyl-Kupplung und etwas höher als in der Ethyl–Phenyl-Kupplung.

Da das resultierende *sec*-Butylbenzol sich nach der reduktiven Eliminierung noch in der Koordinationssphäre des Palladiums befindet, ergeben sich hier zwei mögliche Enantiomere $\text{XI}^{\text{b,c}}$ und $\text{XI}^{\text{a,d}}$, die im Vergleich zu den Ausgangsspezies **X** thermodynamisch deutlich günstiger sind.

Für die Isomerisierung müssen ausgehend von **X** allerdings nicht vier Fälle betrachtet werden, sondern nur zwei, da in den anderen beiden Fällen ebenfalls *sec*-Butylbenzol, also das Produkt der direkten reduktiven Eliminierung, und nicht *n*-Butylbenzol entstehen würden. Die sich daher zunächst ergebenden zwei β -H-präkoordinierenden Spezies **XII** sind thermodynamisch über 5 kJ/mol günstiger als die jeweiligen Vorläuferspezies **X**. Die β -Hydrid-Eliminierungen $\text{TS}_{\text{XII} \rightarrow \text{XIII}}$ sind analog zur *iso*-Propyl-Kupplung wieder etwas günstiger als im Fall der Ethyl-Kupplung, gleiches gilt für die resultierenden Produkte **XIII**, die nachfolgende Rotation des Olefins $\text{TS}_{\text{XIII} \rightarrow \text{XIV}}$ und deren Produkte **XIV**. In der folgenden Insertionsreaktion $\text{TS}_{\text{XIV} \rightarrow \text{XV}}$ gibt es zwischen beiden Pfaden zwar deutliche Unterschiede, dennoch sind beide gegenüber der jeweils analogen Reaktion mit *iso*-Propyl kinetisch bevorzugt. Gleiches gilt für die resultierenden Spezies **XV**.

Die Reaktionsbarrieren der abschließenden reduktiven Eliminierungen $\text{TS}_{\text{XV} \rightarrow \text{XVI}}$ unterscheiden sich wieder je nach Pfad deutlich. So ist die Barriere $\text{TS}_{\text{XV} \rightarrow \text{XVI}}^{\text{a}}$ mit 38.8 kJ/mol relativ zu **X**^b zwar für die Isomerisierung der geschwindigkeitsbestimmende Schritt, dennoch liegt sie niedriger als die direkten reduktiven Eliminierungen $\text{TS}_{\text{X} \rightarrow \text{XI}}$. Die alternative reduktive Eliminierung $\text{TS}_{\text{XV} \rightarrow \text{XVI}}^{\text{c}}$ weist hingegen die höchste Barriere auf. Das Isomerisierungsprodukt **XVI** ist analog zur *iso*-Propyl–Phenyl-Kupplung thermodynamisch zwar etwas ungünstiger als das vergleichbare Produkt **XI**, dennoch ist es im Vergleich zu allen anderen Spezies sehr günstig.

Zusammenfassend ist die direkte reduktive Eliminierung der *sec*-Butyl–Phenyl-Kupplung zwar thermodynamisch günstiger, allerdings kinetisch insgesamt 3.5 kJ/mol ungünstiger als die reduktive Eliminierung nach vorheriger Isomerisierung.

keYPhos–Palladiumkomplex-katalysierte tert-Butyl–Phenyl-Kupplung

Weiterhin wurde die *keYPhos*–Palladiumkomplex-katalysierte *tert*-Butyl–Phenyl-Kupplung untersucht (Abbildung 3.68). Bei dieser konnte zunächst nur ein Rotamer als Ausgangsspezies **X** gefunden werden. Für die direkte reduktive Eliminierung ergaben sich jedoch analog zu den vorherigen Untersuchungen zwei Übergangszustände $\text{TS}_{\text{X} \rightarrow \text{XI}}^{\text{a}}$ und $\text{TS}_{\text{X} \rightarrow \text{XI}}^{\text{c}}$. Diese liegen in derselben Größenordnung wie für die *iso*-Butyl–Phenyl-Kupplung.

Weiterhin ergibt sich für die *tert*-Butyl-Kupplung nur ein Pfad für die Isomerisierung, da sich aus dem quartären Kohlenstoff des *tert*-Butyls kein Stereozentrum ergibt. Zudem ist auffällig, dass die präkoordinierende Spezies **XII** thermodynamisch deutlich günstiger ist als die Startspezies **X**. Das hängt wahrscheinlich mit dem sterischen Anspruch der Gruppe zusammen. So ist dieser bei *tert*-Butyl am höchsten. Umgekehrt ist dieselbe Spezies im Falle des sterisch wenig anspruchsvollen Ethyls die thermodynamisch verhältnismäßig ungünstigste Spezies. Die über sekundäre Kohlenstoffatome koordinierenden *iso*-Propyl- und *sec*-Butylliganden liegen thermodynamisch zwischen der *tert*-Butyl- und der Ethylgruppe.

Auch die nachfolgende β -Hydrid-Eliminierung **TS_{XII→XIII}** ist mit einer Barriere von 12.8 kJ/mol thermodynamisch deutlich günstiger als in den ethyl-, *iso*-propyl und *sec*-butylsubstituierten Fällen, was wahrscheinlich unmittelbar mit der zuvor beschriebenen Präkoordination zusammenhängt.

Diese Beobachtung zieht sich auch durch die nachfolgenden Schritte. So sind sowohl für die nachfolgende Rotation **TS_{XIII→XIV}** als auch die darauffolgende Insertion **TS_{XIV→XV}** die Übergangszustände kinetisch und die resultierenden Intermediate **XIII** und **XIV** thermodynamisch präferierter als in den Reaktionen mit Ethyl-, *iso*-Propyl und *sec*-Butylsubstituenten. In der Serie ist auch die reduktive Eliminierung zum Isomer **TS_{XV→XVI}** kinetisch über 20 kJ/mol günstiger als die vergleichbare direkte reduktive Eliminierung **TS_{X→XI}**. Außerdem ist in diesem Fall das reduktive Eliminierungsprodukt der Isomerisierung **XVI** thermodynamisch günstiger als das direkte reduktive Eliminierungsprodukt **XI**.

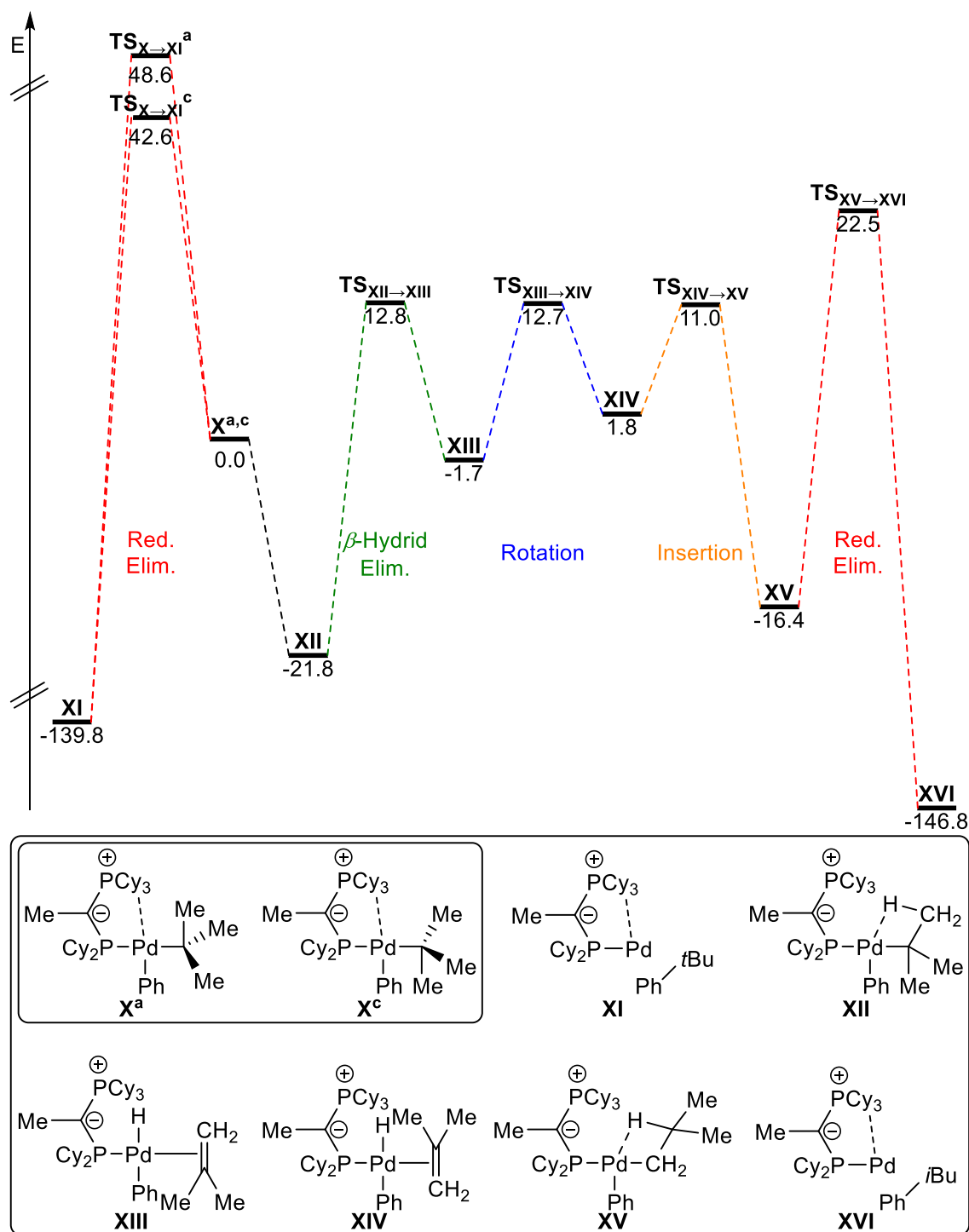


Abbildung 3.68. Energiediagramm der keYPhos–Palladiumkomplex-katalysierten *tert*-Butyl–Phenyl-Kupplung (in kJ/mol).

Zusammenfassend führt bei der keYPhos–Palladiumkomplex-katalysierten *tert*-Butyl-Phenyl-Kupplung die reduktive Eliminierung nach vorheriger Isomerisierung sowohl zu einem thermodynamisch stabileren als auch gegenüber einer direkten reduktiven Eliminierung kinetisch um 20.1 kJ/mol bevorzugtem Produkt. Weiterhin ist die reduktive Eliminierung nach vorheriger Isomerisierung zwar in allen bisher untersuchten Fällen thermodynamisch

günstiger als die direkte reduktive Eliminierung, allerdings wird sie mit steigendem sterischem Anspruch beziehungsweise Substitutionsgrad des zu kuppelnden Alkyls mehr bevorzugt.

joYPhos–Palladiumkomplex-katalysierte Ethyl–Phenyl-Kupplung

Nach der ausführlichen Analyse der keYPhos–Palladiumkomplex-katalysierten Kupplungsreaktion wurden analog die jeweiligen durch joYPhos–Palladiumkomplex-katalysierte Reaktionen untersucht. Ein erster Schritt dabei war auch hier die Ethyl–Phenyl-Kupplung (Abbildung 3.69). Analog zur entsprechenden keYPhos–Palladiumkomplex-katalysierten Kupplung ist auch hier die direkte reduktive Eliminierung $\text{TS}_{\text{X} \rightarrow \text{XI}}$ kinetisch gegenüber der β -Hydrid-Eliminierung $\text{TS}_{\text{XII} \rightarrow \text{XIII}}$ und der Rotation des Olefins $\text{TS}_{\text{XIII} \rightarrow \text{XIV}}$ begünstigt. Dabei liegen die Barrieren für die reduktive Eliminierung $\text{TS}_{\text{X} \rightarrow \text{XI}}$ und die β -Hydrid-Eliminierung $\text{TS}_{\text{XII} \rightarrow \text{XIII}}$ leicht niedriger, als es bei der keYPhos–Palladiumkomplex-katalysierten Reaktion der Fall ist. Die Barriere für die Rotation $\text{TS}_{\text{XIII} \rightarrow \text{XIV}}$ ist hingegen etwas höher.

Thermodynamisch ist auch hier wie zuvor das reduktive Eliminierungsprodukt **XI** am günstigsten. Sowohl die präkoordinierende Spezies **XII** als auch der Olefinkomplex **XIII** sind thermodynamisch etwas ungünstiger als bei der keYPhos–Palladiumkomplex-katalysierten Kupplung.

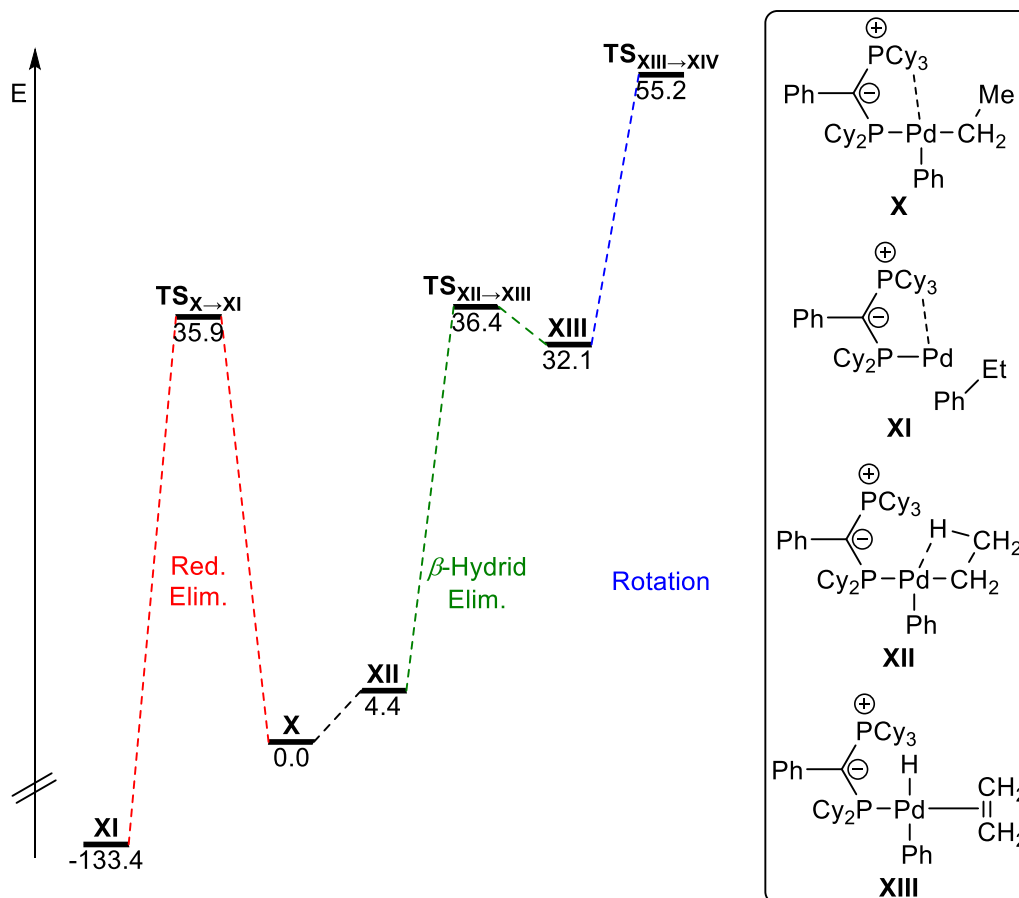


Abbildung 3.69. Energiediagramm der joYPhos–Palladiumkomplex-katalysierten Ethyl–Phenyl-Kupplung (in kJ/mol) (**XIII** = **XIV**).

joYPhos–Palladiumkomplex-katalysierte iso-Propyl–Phenyl-Kupplung

Auch bei der joYPhos–Palladiumkomplex-katalysierten *iso*-Propyl–Phenyl-Kupplung, bei der wieder zwei Isomere betrachtet werden müssen (Abbildung 3.70), ist die direkte reduktive Eliminierung **TS_{X→XI}** thermodynamisch etwas günstiger als bei der keYPhos–Palladiumkomplex-katalysierten Kupplung. Gleiches gilt für die β -Hydrid-Eliminierung **TS_{XII→XIII}**. Ebenso ist die präkoordinierende Spezies **XII** in diesem Vergleich thermodynamisch etwas günstiger. Im Gegensatz dazu sind die Olefinkomplexe **XIII** verglichen mit dem keYPhos–Palladiumkomplex-katalysierten Analogon thermodynamisch jeweils etwas ungünstiger.

Signifikante Unterschiede zur keYPhos–Palladiumkomplex-katalysierten Kupplung gibt es als nächstes bei der Insertion **TS_{XIV→XV}**, die bei der joYPhos–Palladiumkomplex-katalysierten Kupplung kinetisch günstiger ist. Ebenso sind deren Produkte **XV** thermodynamisch günstiger. Die abschließende reduktive Eliminierung **TS_{XV→XVI}** ist im Falle des Reaktionspfades a um 17.0 kJ/mol günstiger als für den alternativen Reaktionspfad c, allerdings sind beide Barrieren etwas niedriger als im keYPhos–Palladiumkomplex-katalysierten Fall.

Zusammenfassend ist die direkte reduktive Eliminierung der joYPhos–Palladiumkomplex-katalysierten *iso*-Propyl–Phenyl-Kupplung kinetisch um 1.8 kJ/mol ungünstiger als die Isomerisierung. Diese Energiedifferenz ist im Vergleich zu der durch keYPhos–Palladiumkomplexe katalysierten Reaktion etwas geringer.

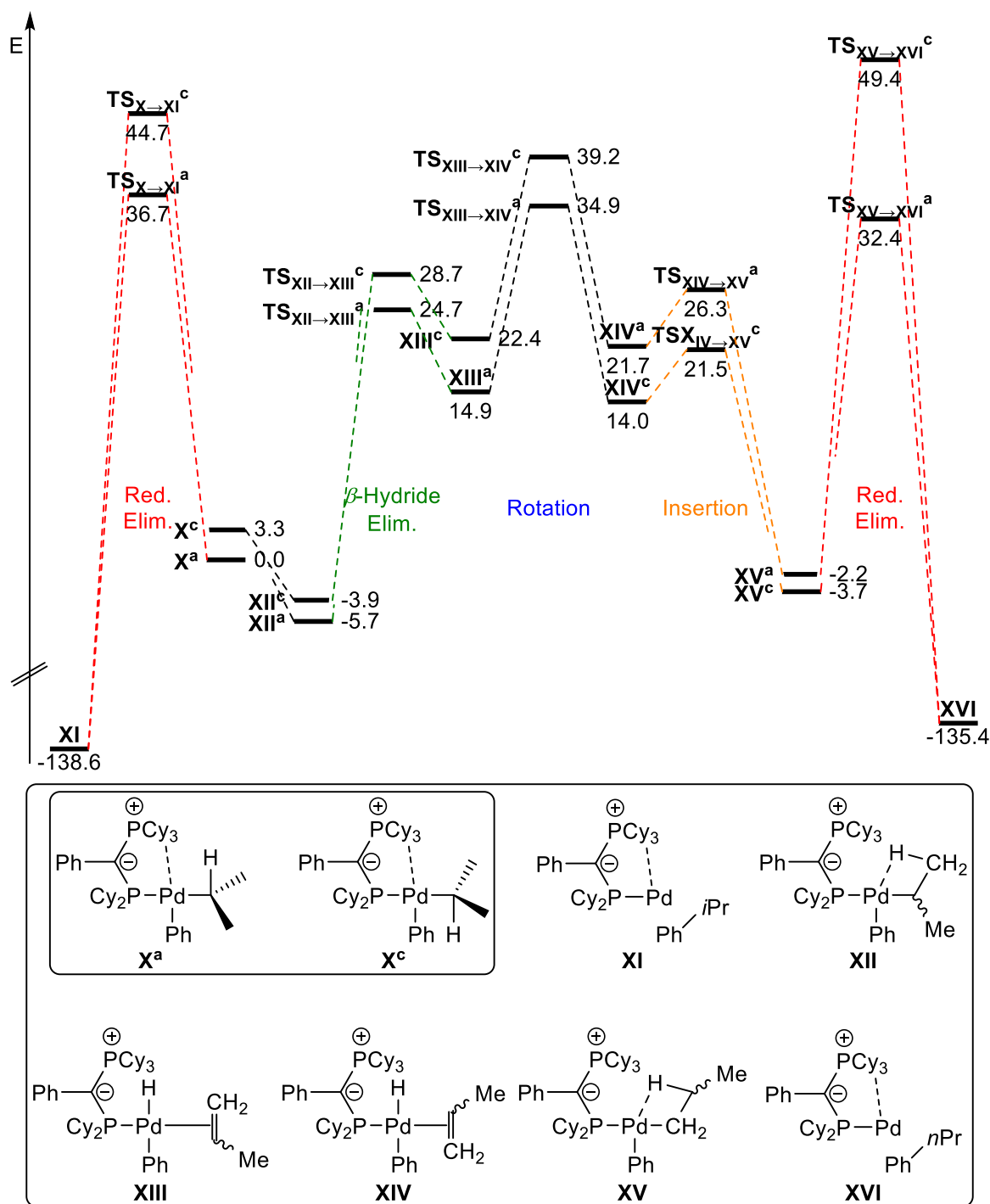


Abbildung 3.70. Energiediagramm der joYPhos-Palladiumkomplex-katalysierten iso-Propyl-Phenyl-Kupplung (in kJ/mol).

joYPhos-Palladiumkomplex-katalysierte sec-Butyl-Phenyl-Kupplung

Auch bei der durch joYPhos-Palladiumkomplex-katalysierten sec-Butyl-Phenyl-Kupplung, bei der wieder von vier Isomeren **X^{a-d}** ausgegangen werden muss, sind die Reaktionsbarrieren für die direkte reduktive Eliminierung **TS_{X→XI}** etwas niedriger als in den analogen, durch keYPhos-Palladiumkomplex-katalysierten Reaktionen (Abbildung 3.71). Gleiches gilt für die

β -Hydrid-Eliminierung **TS_{XII→XIII}** und die Insertion **TS_{XIV→V}^a**. Alle weiteren Reaktionsbarrieren sind hingegen kinetisch etwas ungünstiger.

Ebenso sind aus thermodynamischer Perspektive die Olefinkomplexe **XIII** etwas ungünstiger und die Spezies **XIV** und **XV** etwas günstiger gegenüber der durch keYPhos–Palladiumkomplexe katalysierten Reaktion.

Zusammenfassend führt das dazu, dass die direkte reduktive Eliminierung kinetisch etwa 1.4 kJ/mol ungünstiger ist als die reduktive Eliminierung nach vorheriger Isomerisierung. Auch hier ist diese Energiedifferenz somit im Vergleich zur durch keYPhos–Palladiumkomplexe katalysierten Reaktion etwas geringer.

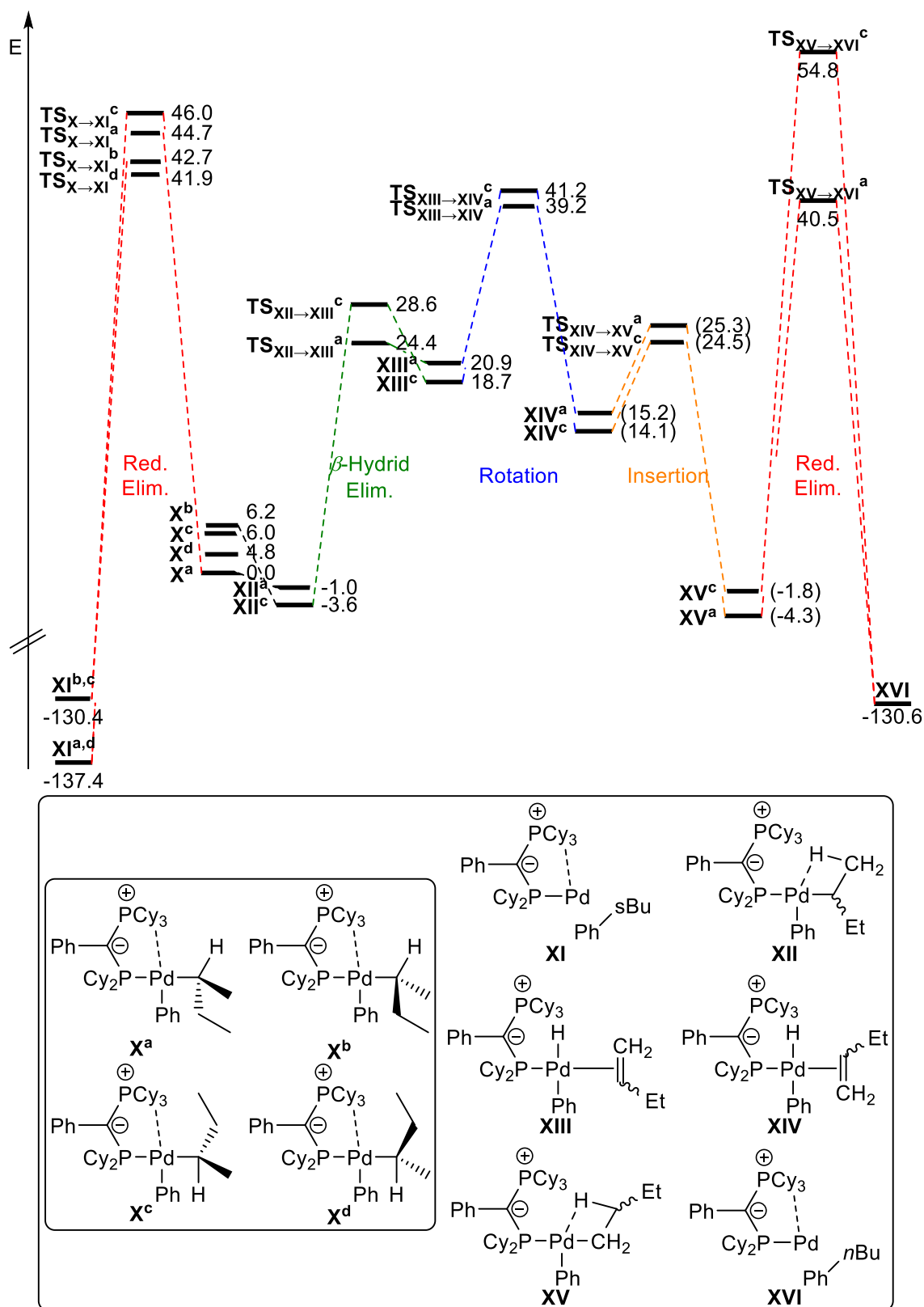


Abbildung 3.71. Energiediagramm der joYPhos–Palladiumkomplex-katalysierten *sec*-Butyl–Phenyl-Kupplung (in kJ/mol).

joYPhos–Palladiumkomplex-katalysierte tert-Butyl–Phenyl-Kupplung

Bei der joYPhos–Palladiumkomplex-katalysierten *tert*-Butyl–Phenyl-Kupplung (Abbildung 3.72) ist nur die direkte reduktive Eliminierung $\text{TS}_{\text{x} \rightarrow \text{xl}}^{\text{c}}$ günstiger als bei der analogen durch keYPhos–Palladiumkomplexe katalysierten Reaktion, die Barriere $\text{TS}_{\text{x} \rightarrow \text{xl}}^{\text{a}}$ liegt hingegen höher.

Weiterhin ist auffällig, dass alle weiteren Intermediate **XII**, **XIII**, **XIV** und **XV** thermodynamisch günstiger sind als in der durch keYPhos–Palladiumkomplexe katalysierten Reaktion. Ebenso sind die Barrieren $\text{TS}_{\text{XII} \rightarrow \text{XIII}}$, $\text{TS}_{\text{XIII} \rightarrow \text{XIV}}$ und $\text{TS}_{\text{XIV} \rightarrow \text{XV}}$ kinetisch günstiger. Lediglich die Isomerisierung abschließende reduktive Eliminierung ist etwas ungünstiger.

Zusammenfassend führt die durch joYPhos-Palladiumkomplexe katalysierte reduktive Eliminierung zwar zu dem thermodynamisch günstigeren Produkt, ist allerdings kinetisch um 11.1 kJ/mol ungünstiger als die reduktive Eliminierung nach vorheriger Isomerisierung. Auch hier ist diese Energiedifferenz deutlich geringer als bei der analogen, durch keYPhos–Palladiumkomplex-katalysierten Kupplung.

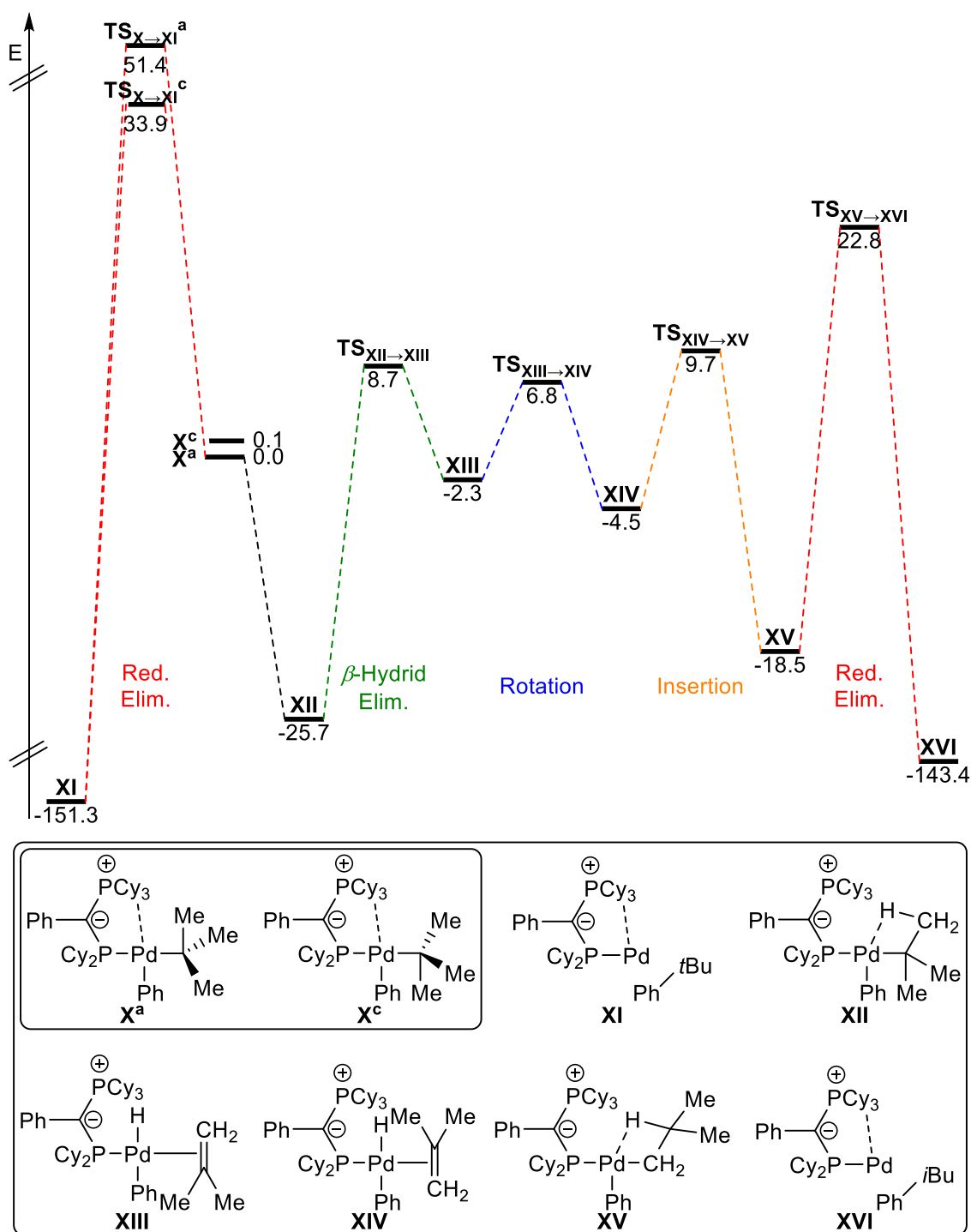


Abbildung 3.72. Energiediagramm der joYPhos-Palladiumkomplex-katalysierten *tert*-Butyl-Phenyl-Kupplung (in kJ/mol).

Die Mechanismen der Kupplung zwischen Phenyl- und Alkylgruppen an keYPhos- und joYPhos-Palladiumkomplexen können folgendermaßen zusammengefasst werden: Zunächst ist in allen untersuchten Kupplungsreaktionen die Isomerisierung mit anschließender reduktiver Eliminierung kinetisch gegenüber der direkten reduktiven Eliminierung bevorzugt. Die einzige Ausnahme gibt es bei der Ethylsubstitution. Hier kann zwar keine Isomerisierung

stattfinden, allerdings sind sowohl die β -Hydrid-Eliminierung als auch die Rotation des Olefins in diesem Fall thermodynamisch ungünstiger als die direkte reduktive Eliminierung. Das widerspricht zunächst einmal den synthetischen Ergebnissen von THORSTEN SCHERPF, der nicht in allen Fällen ein Isomerisierungsprodukt beobachten konnte. Vielmehr beobachtete er bei Verwendung von *sec*-Butyllithium kaum Isomerisierungsprodukt, bei der Verwendung von *tert*-Butyllithium hingegen eine vollständige Isomerisierung.

Allerdings können weiterhin einige Trends erkannt werden. So ist die Ausgangsspezies **X** im Vergleich zu den Übergangszuständen und Intermediaten der Isomerisierung umso ungünstiger, je sterisch anspruchsvoller der Alkyligand ist. Das korreliert mit den beobachteten Ergebnissen, dass beispielsweise *n*-Butyllithium nicht isomerisiert, während *sec*-Butyllithium teilweise und *tert*-Butyllithium vollständig isomerisiert.

Außerdem zeigt ein Vergleich der YPhos-Liganden, dass bei Verwendung des sterisch anspruchsvolleren *jo*YPhos-Liganden die direkte reduktive Eliminierung gegenüber der Isomerisierung mit anschließender reduktiver Eliminierung bevorzugt ist. Das korreliert mit der Beobachtung von THORSTEN SCHERPF, dass die Verwendung von *jo*YPhos im Vergleich zu *ke*YPhos zu deutlich weniger Isomerisierungsprodukt führt.

Die Rechnungen spiegeln insofern zwar die beobachteten Ergebnisse nicht exakt wider – zumal bei diesen auch das verwendete Halogenid einen Einfluss auf den Anteil an isomerisierter Spezies hatte und dieser Einfluss hier nicht untersucht wurde. Allerdings bieten sie einige Anhaltspunkte für die Beschreibung. Gründe für die Abweichung zum Experiment könnten in der Ungenauigkeit der Dichtefunktionaltheorie, einer nicht hinreichend exakten Beschreibung des Systems oder darin liegen, dass sämtliche Barrieren sehr niedrig sind und daher das Gleichgewicht nicht immer erreicht wird.

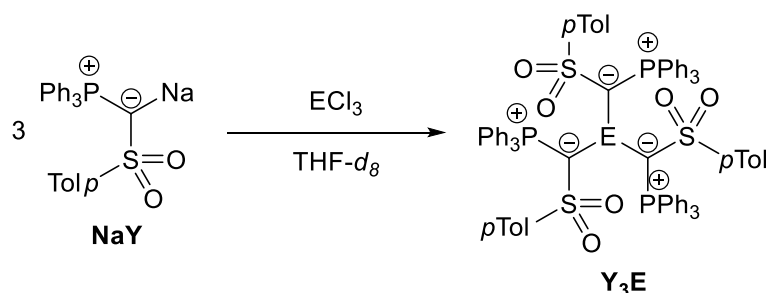
Insgesamt gibt es damit deutliche Unterschiede des Reaktionsprofils im Vergleich zu einer analogen Reaktion mit einem NHC-basierten Katalysator.^[209,210] In dieser waren lediglich die Barrieren für die reduktive Eliminierung sowie für die β -Hydrid-Eliminierung für das Isomerenverhältnis der Reaktion verantwortlich. Im Gegensatz dazu spielen bei der YPhos–Palladiumkomplex-katalysierten Reaktion sämtliche Barrieren, also sowohl für die reduktiven Eliminierungen **TS_{X→XI}** und **TS_{XV→VI}**, die β -Hydrid-Eliminierung **TS_{XII→XIII}** und die Rotation des Olefins **TS_{XIII→XIV}** als auch für die Insertion **TS_{XIV→XV}**, eine entscheidende Rolle.

3.5 Schwere ylidsubstituierte Gruppe XV-Elemente

Nachdem in den vorherigen Kapiteln ausführlich die Chemie von leichten ylidsubstituierten Pentelen in Form von ylidstabilisierten Phospheniumionen und ylidsubstituierten Phosphanen untersucht wurde, lag der Fokus im folgenden Abschnitt auf der Chemie und der Struktur schwerer ylidsubstituierter Pentele. Da über diese Verbindungen bisher wenig bekannt ist, war

ein weiteres Ziel neue Verbindungen zu synthetisieren. Da sich außerdem in den bisherigen Studien das Yldiid **NaY** als geeignetes Reagenz zur Einführung von Ylidfunktionalitäten in Hauptgruppenverbindungen^[55,111] herausgestellt hat, bietet es sich auch in diesem Fall an und wurde dementsprechend zunächst mit Antimon- und Bismuttrichlorid umgesetzt.

Dabei konnte sowohl bei Stöchiometrien von Yldiid **NaY** zum jeweiligen Penteltrichlorid ECl_3 von 1:1, 2:1 und 3:1 jeweils in einer Mischung aus Tetrahydrofuran und Benzol dasselbe charakteristische Produkt beobachtet werden. Dieses konnte auch in reinem Tetrahydrofuran erhalten werden und zeichnet sich im $^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$ NMR-Spektrum durch sehr breite Signale mit einer chemischen Verschiebung von $\delta_{\text{P}} = 16.8$ ppm im Fall der Antimon- und $\delta_{\text{P}} = 16.1$ ppm im Fall der Bismutverbindung aus. Elementaranalysen der als gelber Feststoff in einer Ausbeute von 41 % isolierten Antimonspezies deuten darauf hin, dass es sich um die dreifach ylidsubstituierte Antimonverbindung **Y₃Sb** handelt (Schema 3.21).



Schema 3.21. Umsetzung des Yldiids **NaY** mit Antimon- ($\text{E} = \text{Sb}$) und Bismuttrichlorid ($\text{E} = \text{Bi}$) zu den dreifach ylidsubstituierten Verbindungen **Y₃Sb** und **Y₃Bi**.

Die Bismutverbindung war allerdings stets mit protonierter Spezies verunreinigt. Aufgrund einer hohen Hydrolyseanfälligkeit bei gleichzeitig sehr schlechter Löslichkeit war es nicht möglich, sie weiter aufzureinigen und zu isolieren. Da die chemische Verschiebung im $^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$ NMR-Spektrum allerdings in der gleichen Größenordnung liegt wie bei der Antimonspezies, kann davon ausgegangen werden, dass es sich bei der erhaltenen Verbindung um die dreifach ylidsubstituierte Bismutverbindung **Y₃Bi** handelt (Schema 3.21). Diese Annahmen wurden durch den Erhalt von für Röntgenstrukturanalysen geeigneten Einkristallen von beiden Verbindungen mittels Diffusion von *n*-Hexan in die Reaktionslösungen bestätigt (Abbildung 3.73). In beiden Fällen wirken die Koordinationsumgebungen des Zentralatoms zunächst tetraedrisch verzerrt, wie durch die C–E1–C-Winkelsummen von 317.6° für **Y₃Sb** und 317.8° für **Y₃Bi** deutlich wird. Drei Ecken des Tetraeders werden dabei durch die ylidischen Kohlenstoffatome besetzt, die vierte durch das freie Elektronenpaar des jeweiligen Pentels.

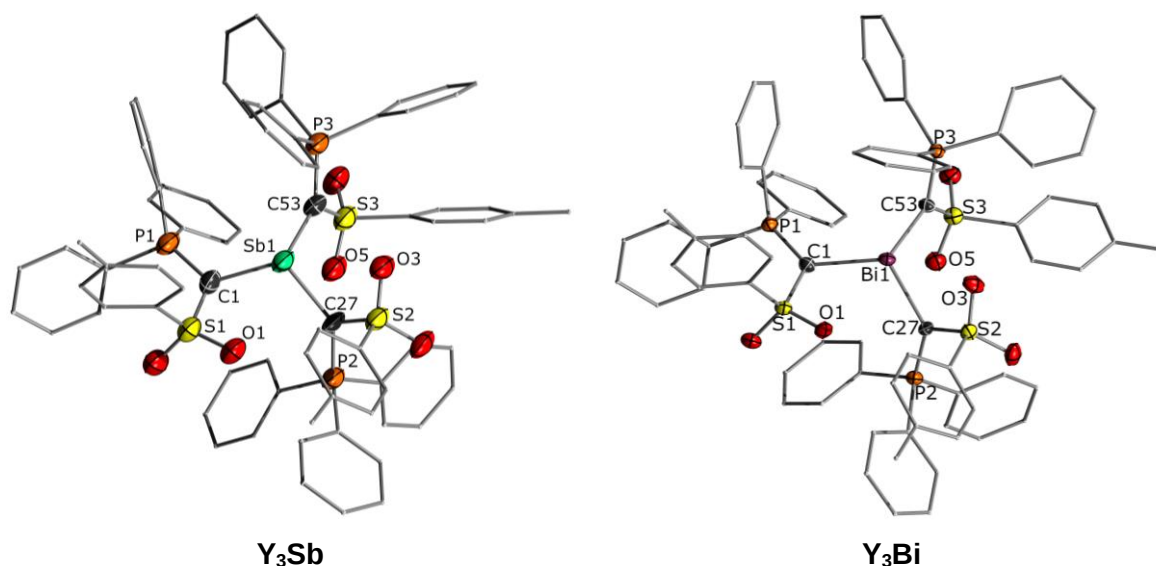


Abbildung 3.73. Molekülstrukturen von **Y₃Sb** (links) und **Y₃Bi** (rechts) im Kristall. Darstellung der thermischen Auslenkungsellipsoide mit 50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Die Wasserstoffatome sind für eine bessere Übersichtlichkeit nicht abgebildet. Ausgewählte Bindungslängen [Å] und -winkel [°]: **Y₃Sb**: Sb1–O1 2.8879(54), Sb1–O3 2.9831(53), Sb1–O5 3.4750(51), Sb1–C1 2.221(6), Sb1–C27 2.173(6), Sb1–C53 2.188(7), C1–Sb1–C27 108.3(2), C1–Sb1–C53 107.9(3), C27–Sb1–C53 101.4(3). **Y₃Bi**: Bi1–O1 2.8176 (66), Bi1–O3 2.8294(65), Bi1–O5 3.6358(71), Bi1–C1 2.383(3), Bi1–C27 2.297(3), Bi1–C53 2.315(3), C1–Bi1–C27 108.94(10), C1–Bi1–C53 107.91(10), C27–Bi1–C53 100.99(10).

Die Sb–C-Bindungen in **Y₃Sb** liegen mit 2.17–2.22 Å weiterhin in der gleichen Größenordnung wie in den ylidsubstituierten Antimonspezies **72** (2.11 und 2.17 Å^[157]; Schema 1.34) und **75** (2.22 Å^[158]; Schema 1.35). Die Bi–C-Bindungen in **Y₃Bi** sind mit 2.30 bis 2.38 Å gegenüber den entsprechenden Bindungen in den Carbodiphosphorankomplexen **108** und **111** (2.18 Å – 2.28 Å^[211,212]) (Abbildung 3.74) als auch in Triphenylbismut (2.24 – 2.27 Å^[213]) deutlich verlängert. Sie liegen damit in der Größenordnung der Bi–C-Bindungen von Penta-aryl-bismut(V)komplexen (2.22 – 2.42 Å).^[214]

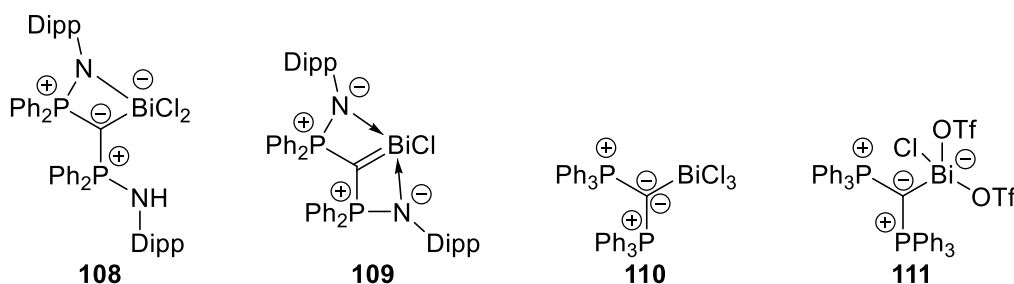


Abbildung 3.74. Die Carbodiphosphoranbismutkomplexe **109** und **110** von WESEMANN et al. (links)^[211] sowie **110** und **111** von NEUMÜLLER et al. (rechts).^[212]

Gleichzeitig sind die E1–O1- und E1–O3-Abstände mit 2.89 und 2.98 Å in **Y₃Sb** und 2.82 und 2.83 Å in **Y₃Bi** in beiden Fällen länger als entsprechende Einfachbindungen.^[215,216] Im Fall von **Y₃Sb** liegen sie damit in der Größenordnung von E–O-Kontakten in hypervalenten Antimonverbindungen, wenn auch im oberen Bereich.^[217] Im Fall von **Y₃Bi** liegen sie hingegen in der Größenordnung von *cis*-ständigen Sauerstoffatomen in hypervalenten und quadratisch pyramidalen Bismutverbindungen.^[217] Auffällig ist dabei aber vor allem, dass trotz des

größeren Atomradius von Bismut gegenüber Antimon die Bi1–O-Abstände kürzer sind als die Sb1–O-Abstände. Sollte nur bei **Y₃Bi** eine E–O-Interaktion vorliegen, könnte diese eine Erklärung für die verhältnismäßig langen und eher an Bi(V)-Komplexe erinnernden Bi–C-Bindungen liefern, da es sich um eine Koordination des Sauerstoffs in das antibindende σ^* -Orbital dieser Bindung handeln sollte.

Aus diesem Grund wurden die natürlichen Ladungen und WIERG Bindungsindizes der beteiligten Atome und Bindungen auf PW6B95D3/def2svp//PW6B95D3/def2tzvp-Niveau untersucht (Tabelle 3.28).

Tabelle 3.28. Ergebnisse der NBO-Analysen von **Y₃Sb** und **Y₃Bi**.

		Y₃Sb	Y₃Bi
q(NBO)	E1	1.47	1.60
	O1	-0.99	-1.00
	O3	-0.99	-0.99
	O5	-0.98	-0.98
	C1	-1.42	-1.44
	C27	-1.44	-1.43
	C53	-1.46	-1.47
WBI	E1–O1	0.06	0.09
	E1–O3	0.05	0.09
	E1–O5	0.01	0.01
	E1–C1	0.72	0.54
	E1–C27	0.63	0.64
	E1–C53	0.68	0.58

Die natürlichen Ladungen der einzelnen Elemente unterscheiden sich dabei untereinander nicht signifikant. Im Gegensatz dazu sind die WIERG Bindungsindizes der E1–C-Bindungen im Durchschnitt für die Antimonspezies etwas höher als für die Bismutspezies. Für die E1–O1-Bindungen sind die WBIs nur unwesentlich größer als null. Dennoch wird deutlich, dass sie für die E1–O1- und E1–O3-Wechselwirkungen etwas größer sind als für die E1–O5-Bindung. Außerdem sind die WBIs für die E1–O1- und E1–O3-Wechselwirkungen in **Y₃Bi** geringfügig höher als in **Y₃Sb**. Das korreliert mit den Beobachtungen in der Kristallstruktur. Zur Unterstützung der bisherigen Aussagen wurden weiterhin QTAIM-Analysen zur Bestimmung etwaiger bindungskritischer Punkte entlang der E1–O-Achsen durchgeführt (Abbildung 3.75).

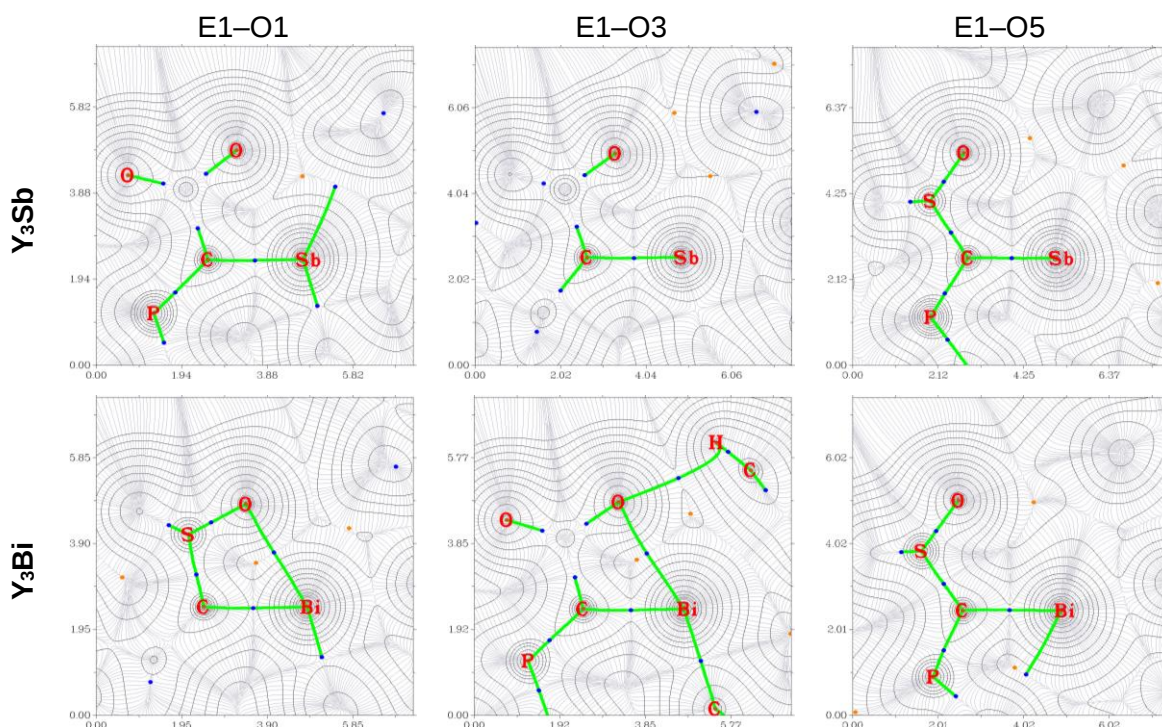


Abbildung 3.75. Die bindungskritischen Punkte in den jeweiligen E1–C–O-Ebenen von Y_3Sb und Y_3Bi .

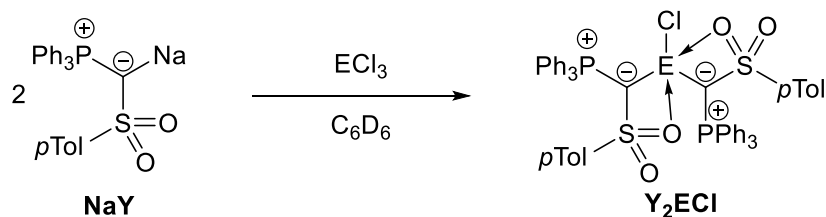
Diese zeigen lediglich auf den Bi1–O1- und Bi1–O3-Achsen bindungskritische Punkte. Die Elektronendichte an diesen ist mit 0.028 und 0.025 $|e|/\text{Bohr}^3$ sogar etwas höher als die Elektronendichte an den bindungskritischen Punkten der zuvor untersuchten Au–Aren-Wechselwirkungen (siehe Kapitel 3.4.1). Das negative Vorzeichen von $\lambda_2(\rho)$ am bindungskritischen Punkt ist eine Bestätigung attraktiver Wechselwirkungen,^[218] welche die bereits vermuteten Bi–O-Wechselwirkungen bestätigen. Diese erklären wiederum die verhältnismäßig langen Bi–C-Bindungen.

Zusammenfassend konnten zwei neuartige ylidsubstituierte schwere Pentele erfolgreich synthetisiert werden. Bei der Antimonspezies Y_3Sb handelt es sich dabei um eine trivalente Verbindung, wohingegen es sich bei Y_3Bi um eine pentavalente Bismutspezies handelt, bei der es durch eine zusätzliche Koordination zweier Sauerstoffatome der Sulfonylgruppen der Ylidliganden in die jeweiligen antibindenden σ^* -Orbitale der Bi–C-Bindung kommt.

3.6 Ylidsubstituierte Gruppe XIII-Elemente

Nach der erfolgreichen Synthese der schweren ylidsubstituierten Pentele Y_3Sb und Y_3Bi und dem damit verbundenen Beweis für die vielseitigen Einsatzmöglichkeiten des Ylidiids NaY zur Synthese von ylidsubstituierten Hauptgruppenverbindungen bot es sich an, diese Erkenntnisse auch auf die Synthese von Verbindungen der schweren Gruppe XIII-Elemente zu übertragen und das Ylidiid wurde dementsprechend zunächst mit Aluminium- und Galliumtrichlorid umgesetzt. Dabei stellte sich heraus, dass, sowohl bei einem Verhältnis von

Ylidid zu Aluminium- oder Galliumtrichlorid von 2:1 als auch 3:1, in Benzol jeweils dieselben charakteristischen Signale im $^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$ NMR-Spektrum mit chemischen Verschiebungen von $\delta_{\text{P}} = 6.0$ ppm für die Aluminium- beziehungsweise $\delta_{\text{P}} = 8.7$ ppm für die Galliumverbindung beobachtet werden können. Die laut NMR intakten Ylidliganden sowie Elementaranalysen deuteten dabei darauf hin, dass sich in diesen Fällen selektiv die zweifach ylidsubstituierten Elementchloride **Y₂AlCl** und **Y₂GaCl** bildeten (Schema 3.22). Beide Verbindungen konnten in Form von farblosen Feststoffen in Ausbeuten von 87 beziehungsweise 32 % isoliert werden.



Schema 3.22. Synthese von **Y₂AlCl** und **Y₂GaCl** (E = Al, Ga).

Die erfolgreiche Synthese von **Y₂AlCl** und **Y₂GaCl** konnte weiterhin durch Einkristallröntgenstrukturanalyse bestätigt werden (Abbildung 3.76).

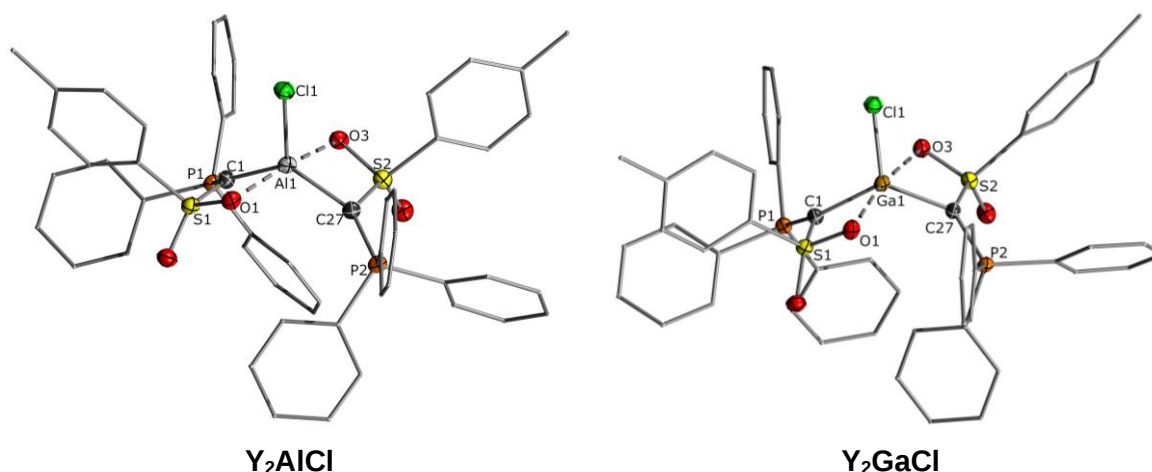


Abbildung 3.76. Molekülstrukturen von **Y₂AlCl** und **Y₂GaCl** im Kristall. Darstellung der thermischen Auslenkungsellipsoide mit 50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Die Wasserstoffatome sind für eine bessere Übersichtlichkeit nicht abgebildet. Ausgewählte Bindungslängen [Å] und -winkel: **Y₂AlCl**: Cl1–Al1 2.1918(7), S1–O1 1.5135(13), S1–O2 1.4427(13), S2–O3 1.5127(13), S2–O4 1.4473(14), Al1–O1 2.0186(12), Al1–O3 1.9806(12), Al1–C1 1.9723(19), Al1–C27 1.9904, Cl1–Al1–C1 116.91(6), Cl1–Al1–C1 116.40(6), C1–Al1–C27 126.68(8), S1–C1–P1 126.73(11), S1–C1–Al1 92.52(8), P1–C1–Al1 139.14(11), S2–C27–P2 123.28(11), S2–C27–Al1 91.39(8), P2–C27–Al1 144.89(10); **Y₂GaCl**: Ga1–Cl1 2.2031(4), Ga1–O1 2.1617(12), Ga1–O3 2.3331(13), Ga1–C1 1.9749(18), Ga1–C27 1.9532(17), S1–O1 1.4913(14), S1–O2 1.4508(12), S2–O3 1.4863(13), S2–O4 1.4509(12), Cl1–Ga1–C1 115.01(5), Cl1–Ga1–C27 117.34(5), C1–Ga1–C27 127.56(7), Ga1–C1–S1 94.63(8), Ga1–C1–P1 136.67(10), S1–C1–P1 127.37(10), Ga1–C27–S2 99.22(8), Ga1–C1–P2 134.18(10), S2–C27–P2 122.53(10).

In beiden Verbindungen ist das Metallzentrum fünffach koordiniert und bildet jeweils eine verzerrte trigonale Bipyramide. Die ylidischen Kohlenstoffatome weisen dabei eine planare Geometrie auf, wie aus den Summen der Bindungswinkel von 358.4 beziehungsweise 359.6° bei **Y₂AlCl** und 358.7 beziehungsweise 355.9° bei **Y₂GaCl** deutlich wird. Das sind, analog zu

dem literaturbekannten Boran $\mathbf{Y_2BH}$ ^[55] und der Galliumspezies von BERTRAND et al. **79**,^[61] weitere Indizien für die erwartete sp^2 -Hybridisierung der ylidischen Kohlenstoffatome.

Das Aluminium- und das Galliumatom liegen ebenfalls sp^2 -hybridisiert in einer durch Cl1, C1 und C27 aufgespannten Ebene, was durch die Summen der Bindungswinkel von 360.0 beziehungsweise 359.9° deutlich wird. Allerdings sind die E–S–P-Ebenen um die ylidischen Kohlenstoffatome deutlich aus der Cl–C1–C27-Ebene um das Trielzentrum herausgedreht (Abbildung 3.77). So beträgt der Winkel der P–E1–S-Ebenen zur Cl–C1–C27-Ebene bei $\mathbf{Y_2AlCl}$ 79.0 beziehungsweise 88.7° und bei $\mathbf{Y_2GaCl}$ 85.3 beziehungsweise 76.6° . Im Vergleich dazu betragen die analogen Winkel in $\mathbf{Y_2BH}$ durchschnittlich 27.5° und der entsprechende Winkel in **88** 36.8° .^[55,61] In der Folge stehen die freien Elektronenpaare an den ylidischen Kohlenstoffatomen in $\mathbf{Y_2AlCl}$ und $\mathbf{Y_2GaCl}$ in keinem geeigneten Winkel zum jeweiligen Zentralatom, sodass hier im Gegensatz zu $\mathbf{Y_2BH}$ und **88** wahrscheinlich keine π -Donation des freien Elektronenpaares des ylidischen Kohlenstoffatoms zum Zentralatom vorliegt.

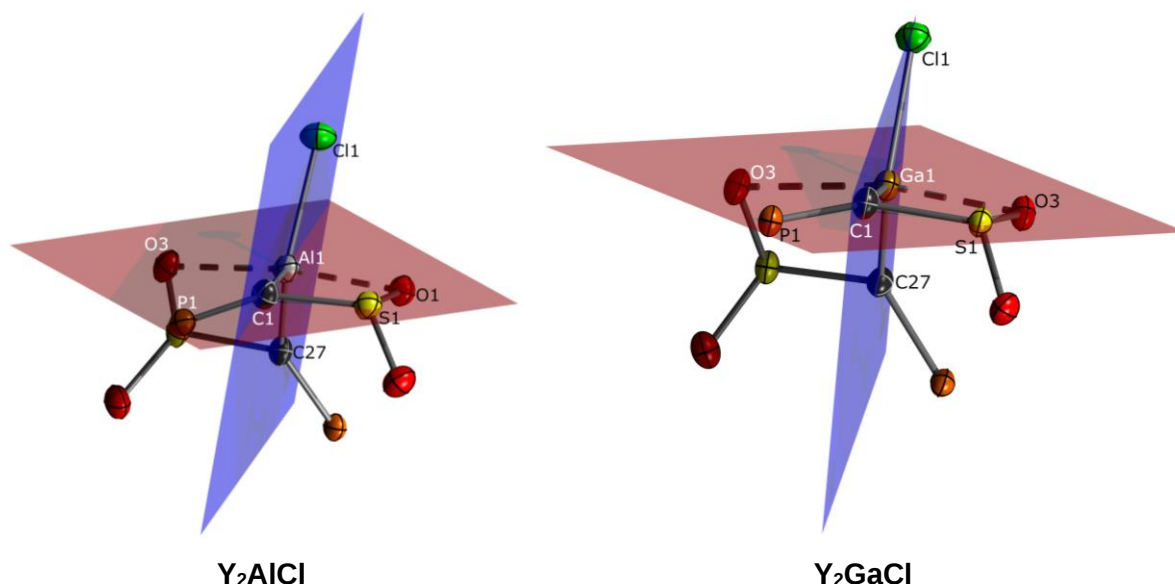


Abbildung 3.77. Die E–S1–P1-Ebene um C1 (rot) und die Cl1–C1–C27-Ebene um das zentrale Atom der Gruppe XIII (blau) in $\mathbf{Y_2AlCl}$ und $\mathbf{Y_2GaCl}$. Darstellung der thermischen Auslenkungsellipsoide mit 50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Die Ebenen um C27 und ein Großteil der weiteren Atome sind aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht abgebildet.

Das entspricht auch den Längen der jeweiligen E–C-Bindungen. So liegen die Al–C-Bindungen mit durchschnittlich $1.98 \text{ \AA}$ deutlich über der Summe der Doppelbindungsradien der Elemente von $1.80 \text{ \AA}$ ^[219] und eher in der Größenordnung der Summe der Einfachbindungsradien von $2.01 \text{ \AA}$.^[215] Da auch die Al–C-Zweizentrenbindungen in Triphenylaluminium bei $1.96 \text{ \AA}$ liegen,^[220] kann somit die Al–C-Bindung in $\mathbf{Y_2AlCl}$ deutlich als Einfachbindung charakterisiert werden.

Die Ga–C-Bindung ist mit durchschnittlich $1.96 \text{ \AA}$ zwar etwas kürzer als die vergleichbaren Al–C-Bindungen in $\mathbf{Y_2AlCl}$, allerdings ebenfalls deutlich länger als die Summe der

Doppelbindungsradien der Elemente von $1.84 \text{ \AA}^{[219]}$ und in der Größenordnung der Summe der Einfachbindungsradien von $1.99 \text{ \AA}^{[215]}$. Da die Bindung ebenfalls länger ist als die Ga–C-Bindung in **88** mit $1.93 \text{ \AA}^{[61]}$ und sie weiterhin liegt in der Größenordnung der Ga–C-Bindungen in **115** ($1.95 \text{ \AA}^{[221]}$) und **116** (je $1.98 \text{ \AA}^{[222]}$) (Abbildung 3.78) liegt, kann entsprechend auch hier von einer Einfachbindung ausgegangen werden.

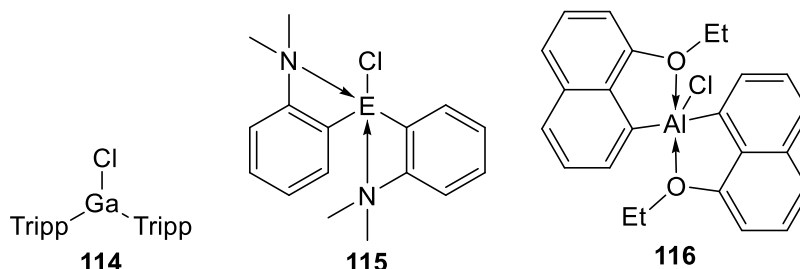
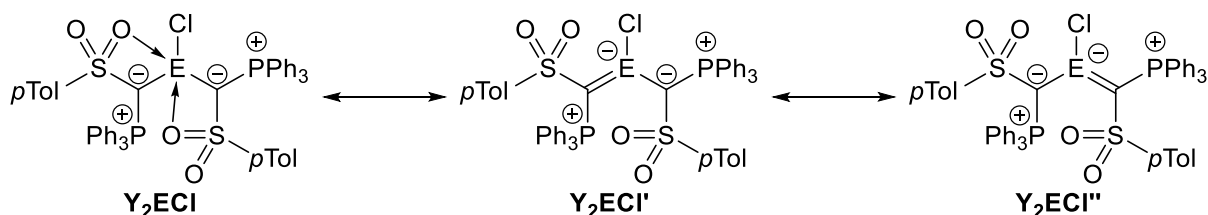


Abbildung 3.78. Die diarylsubstituierten Aluminium und Galliumverbindungen **114**, **115** und **116**.^[221–224]

Durch die vorliegenden C–E-Einfachbindungen in $\mathbf{Y_2AlCl}$ und $\mathbf{Y_2GaCl}$ entsteht formal ein Elektronenmangel am jeweiligen Zentralatom. Dieser wird durch eine Koordination der Sauerstoffatome ausgeglichen. Der Grund für dieses im Vergleich zu $\mathbf{Y_2BH}$ gegensätzliche Verhalten^[55] liegt wahrscheinlich in der Größe des jeweiligen Zentralatoms. Da Bor einen im Vergleich zu Kohlenstoff sehr ähnlichen Atomradius besitzt, kommt es in $\mathbf{Y_2BH}$ zu einem Überlapp der freien Elektronenpaare der ylidischen Kohlenstoffatome mit dem leeren p -Orbital des Zentralatoms. Das entsprechende vakante Orbital am Aluminium beziehungsweise Gallium ist entsprechend größer und eine Stabilisierung durch die Sulfoniumeinheit begünstigt.

Die Al–Cl-Bindung in $\mathbf{Y_2AlCl}$ ist mit $2.19 \text{ \AA}$ nur unwesentlich länger als die Al–Cl-Bindungen in **115**^{Al} und **116** (je $2.17 \text{ \AA}^{[223,224]}$), was auf sterische Effekte zurückzuführen sein kann. Im Gegensatz dazu ist die Ga–Cl-Bindung in $\mathbf{Y_2GaCl}$ mit 2.20 sogar etwas kürzer als die entsprechenden Bindungen in **114** ($2.22 \text{ \AA}^{[221]}$) und **115**^{Ga} ($2.27 \text{ \AA}^{[222]}$) (Abbildung 3.78). Das spricht gegen eine negative Hyperkonjugation des freien Elektronenpaars der ylidischen Kohlenstoffatome in die E–Cl-Bindung. Entsprechende zu **88'** analoge mesomere Grenzstrukturen der Formen $\mathbf{Y_2ECI'}$ und $\mathbf{Y_2ECI''}$, in denen die Verbindungen als carbensubstituierte Trielanionen beschrieben werden können, geben die beobachtete Struktur also nicht wieder (Schema 3.23).



Schema 3.23. Die für $\mathbf{Y_2ECI}$ möglichen mesomeren Grenzstrukturen $\mathbf{Y_2ECI'}$ und $\mathbf{Y_2ECI''}$ (E = Al, Ga).

Zur Unterstützung dieser These wurde eine Strukturoptimierung von Y_2BH , Y_2AlCl und Y_2GaCl auf PW6B95D3/def2svp//PW6B95D3/def2tzvp-Niveau durchgeführt. Dabei wird insbesondere im HOMO-1 von Y_2BH die C–B- π -Wechselwirkung deutlich. Im Gegensatz dazu sind sowohl das HOMO als auch das HOMO-1 von Y_2AlCl und Y_2GaCl klar an den ylidischen Kohlenstoffatomen lokalisiert, nicht am zentralen Trielatom (Abbildung 3.79).

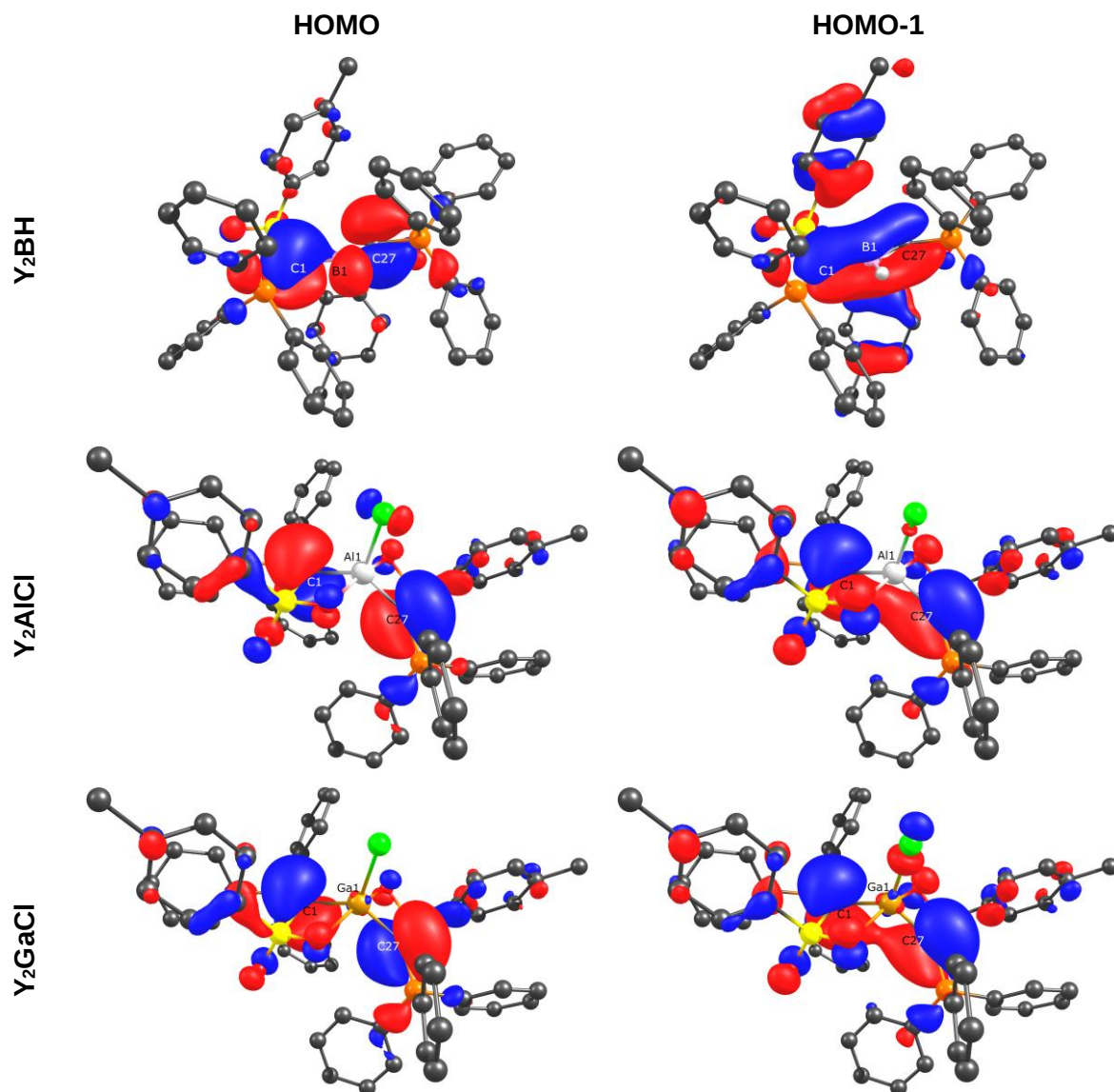


Abbildung 3.79. Das HOMO (links) und das HOMO-1 (rechts) von Y_2BH (oben), Y_2AlCl (mitte) und Y_2GaCl (unten).

Unterstützt wird dies durch die natürlichen Ladungen und WIERG Bindungsindex der Verbindungen (Tabelle 3.29).

Tabelle 3.29. Die WIBERG Bindungsindizes und natürlichen Ladungen von **Y₂BH**, **Y₂AlCl** und **Y₂GaCl**.

	WBI ^v		q(NBO) ^v		
	E–C	E–O	E	C	O
Y₂BH	1.08	0.01	0.47	-1.24	-0.94
Y₂AlCl	0.39	0.24	1.71	-1.58	-1.01
Y₂GaCl	0.49	0.21	1.55	-1.56	-0.97

So ist der WIBERG Bindungsindex für die E–C-Bindungen in **Y₂AlCl** und **Y₂GaCl** weniger als halb so groß wie für die analogen B–C-Bindungen in **Y₂BH**. Gleichzeitig ist durch die Koordination der Sulfongruppen der WIBERG Bindungsindex für die Al–O- und Ga–O-Bindungen deutlich größer als Null. Als Folge der π -Wechselwirkung der ylidischen Kohlenstoffatome ist weiterhin die natürliche Ladung an den ylidischen Kohlenstoffatomen in **Y₂BH** weniger negativ als in den Vergleichsmolekülen. Ebenso ist die natürliche Ladung am Trielzentrum geringer. Das korreliert sehr gut mit den Überlegungen zu den Molekülstrukturen im Kristall und unterstreicht den, wenn überhaupt vorhandenen, sehr geringen Einfluss der Stabilisierung von **Y₂AlCl** und **Y₂GaCl** durch eine Donation von Elektronendichte aus den freien Elektronenpaaren der ylidischen Kohlenstoffatome zum Zentralatom.

Nach der erfolgreichen Synthese und Charakterisierung von **Y₂AlCl** und **Y₂GaCl** bot es sich an, den Einsatz des Ylids zur Synthese von einfach ylidsubstituierten Trielchloriden zu prüfen. Eine 1:1 Umsetzung des Ylids **NaY** mit Aluminium- oder Galliumtrichlorid in Benzol oder THF ergab allerdings lediglich komplexe Produktgemische. Im Gegensatz dazu führte eine äquimolare Menge an **NaY** und Galliumtrichlorid in *ortho*-Difluorbenzol zu einem einzigen Produkt mit einer chemischen Verschiebung im ³¹P{¹H} NMR von $\delta_P = 16.5$ ppm, welches als farbloser Feststoff mit einer Ausbeute von 32 % isoliert werden konnte. Diese Spezies fällt nach unbestimmter Zeit aus *ortho*-Difluorbenzol schlagartig vollständig aus. Ein folgender Lösungsmitteltausch zu THF-*d*₈ führt zu einem Produkt mit einer chemischen Verschiebung im ³¹P{¹H} NMR von $\delta_P = 14.3$ ppm, einem Signal, welches auch in den in Benzol oder THF entstehenden Produktgemischen vorliegt. Weitere NMR-Spektroskopische Experimente deuten weiterhin auf den vollständigen Erhalt des Ylidsubstituenten hin. Eine Elementaranalyse lässt aufgrund von Verunreinigungen mit der protonierten Spezies **YH** keine eindeutigen Schlüsse auf das Reaktionsprodukt zu. Allerdings konnten von diesem Produkt zur Röntgenstrukturanalyse geeignete Einkristalle erhalten werden (Abbildung 3.80). Bei diesem handelt es sich um das Dimer von **YGaCl₂**, welches durch die Koordination der

^v Durchschnittswerte

Sauerstoffatome der Sulfongruppe zum jeweils anderen Galliumatom verbrückt ist. Die Koordinationsumgebung des Galliums ist dabei nicht planar wie in Y_2GaCl , sondern verzerrt tetraedrisch.

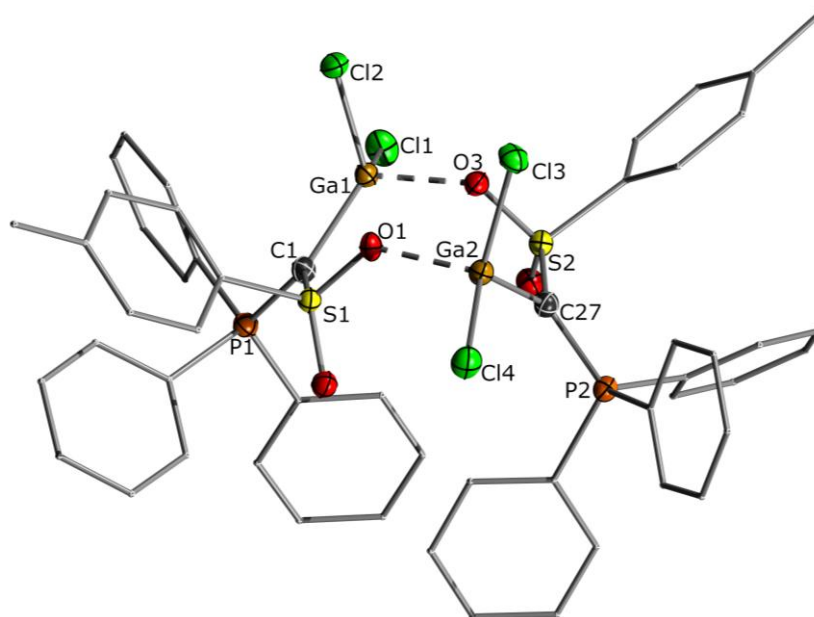
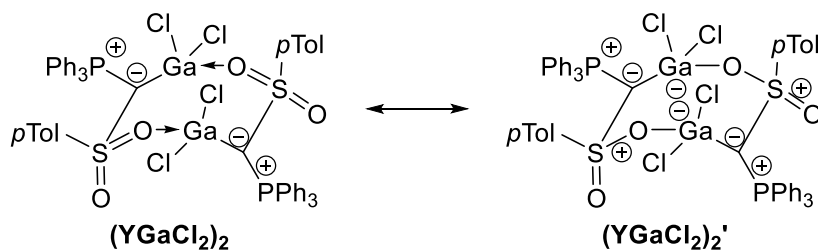


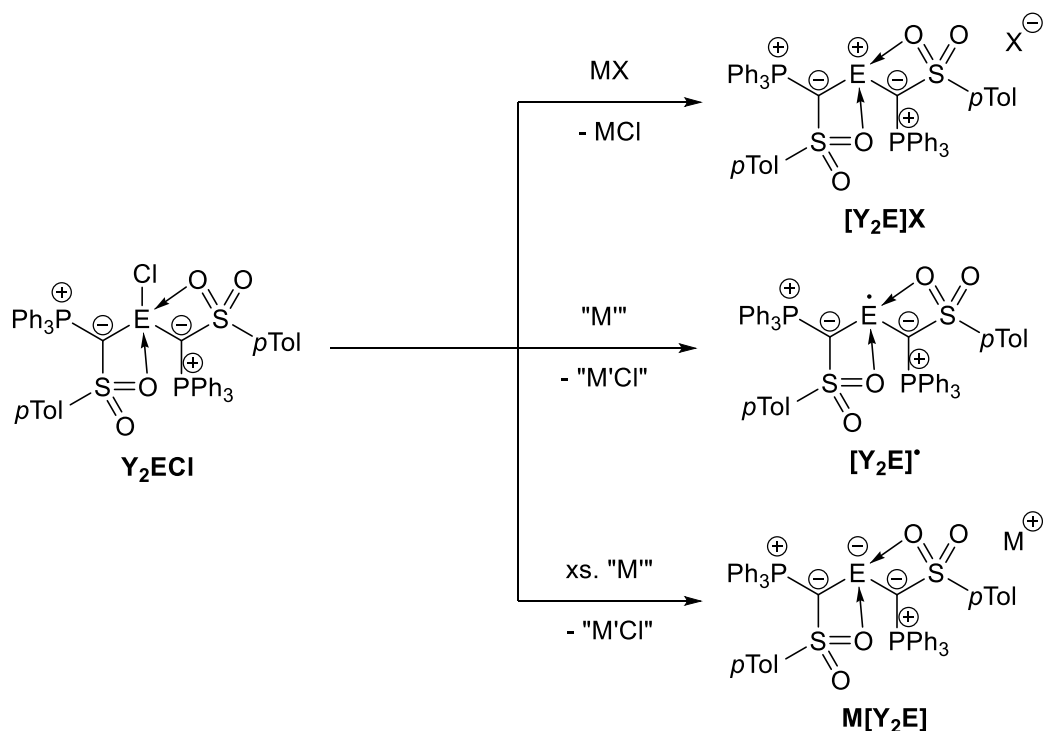
Abbildung 3.80. Molekülstruktur des YGaCl_2 -Dimers im Kristall. Darstellung der thermischen Auslenkungsellipsoide mit 50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Die Wasserstoffatome sind für eine bessere Übersichtlichkeit nicht abgebildet. Ausgewählte Bindungslängen [Å] und -winkel [°]: Ga1–Cl1 2.1726(11), Ga1–Cl2 2.1761(11), Ga1–O3 1.9430(27), Ga1–C1 1.9476(40), Ga2–Cl3 2.1745(10), Ga2–Cl4 2.1771(10), Ga2–O1 1.9473(27), Ga2–C27 1.9504(40), Cl1–Ga1–Cl2 109.05(5), Cl1–Ga1–O3 101.86(9), Cl1–Ga1–C1 115.93(12), Cl2–Ga1–O3 98.32(9), Cl2–Ga1–C1 116.69(13), Cl3–Ga2–Cl4 109.57(5), Cl3–Ga2–O1 97.96(9), Cl3–Ga2–C27 115.32(13), Cl4–Ga2–O1 102.46(9), Cl4–Ga2–C27 102.46(9).

Die Ga–C-Bindungen in der Molekülstruktur sind dabei mit durchschnittlich 1.95 Å etwas kürzer als in Y_2GaCl (Abbildung 3.76), weisen aber ebenfalls deutlich eher Einzel- als Doppelbindungscharakter auf. Die Ga–O-Abstände sind mit ebenfalls durchschnittlich 1.95 Å hingegen deutlich kürzer als in Y_2GaCl und entsprechen damit eher einer kovalenten Bindung als einer einfachen Koordination. In der Folge sind die entsprechenden S–O-Bindungen mit durchschnittlich 1.51 Å deutlich länger als die Bindungen zwischen dem Schwefel und den nicht koordinierenden Sauerstoffatomen mit 1.44 Å. Interessanterweise ist die Ga–Cl-Bindung mit durchschnittlich 2.17 Å ebenfalls kürzer als in Y_2GaCl mit 2.20 Å. Der Grund dafür findet sich wahrscheinlich in der unterschiedlichen Koordinationsgeometrie des Galliums (verzerrt tetraedrisch gegenüber verzerrt trigonal bipyramidal). Eine weitere Erklärung könnte die mesomere Grenzstruktur $(\text{YGaCl}_2)_2'$ mit einer negativen Partialladung am Gallium bieten (Schema 3.24). Allerdings ist die natürliche Ladung des Galliums mit 1.43 zwar etwas niedriger als in Y_2GaCl , aber nicht so niedrig, dass eine Beschreibung in der Struktur $(\text{YGaCl}_2)_2'$ sinnvoll erscheint.



Schema 3.24. Die mesomeren Grenzstrukturen $(\text{YGaCl}_2)_2$ und $(\text{YGaCl}_2)_2'$.

Y_2AlCl und Y_2GaCl sollten aufgrund der Stabilisierung durch die Sulfongruppen und einer damit verbundenen schwachen E–Cl-Bindung einfach in kationische Verbindungen $[\text{Y}_2\text{E}]\text{X}$ überführt werden können. Weiterhin könnte das Chlorid auch eventuell mit einem geeigneten Reduktionsmittel zu den radikalischen Spezies $\text{Y}_2\text{E}^\bullet$ oder den anionischen Spezies $\text{M}'[\text{Y}_2\text{E}]$ überführt werden (Schema 3.25).



Schema 3.25. Geplante Synthesen der Spezies $[\text{Y}_2\text{E}]\text{X}$, Y_2E und $\text{M}[\text{Y}_2\text{E}]$ (E = Al, Ga; M = Li, Na, Ag; M' = Reduktionsmittel (K, Li-Naphthalid, KC_8); X = BF_4 , NTf_2 , PF_6 , SbF_6 , BarF_4 , OH).

Allerdings waren in diesen Fällen entweder komplexe Produktgemische, unlösliche Substanzen oder keine Umsetzungen zu beobachten. Charakterisierbare Produkte wurden in keinem Fall erhalten. Jedoch konnte in einem Fall aus der Reaktionsmischung der Umsetzung von *in situ* generiertem Y_2AlCl mit Galliumtrichlorid die Verbindung $\{\text{Na}[\text{Y} \rightarrow \text{GaCl}_3]\}_2$ immerhin kristallisiert, wenngleich auch nicht charakterisiert, werden. Diese Verbindung ist das Dimer des Galliumtrichloridaddukts des Yldiids NaY (Abbildung 3.81).

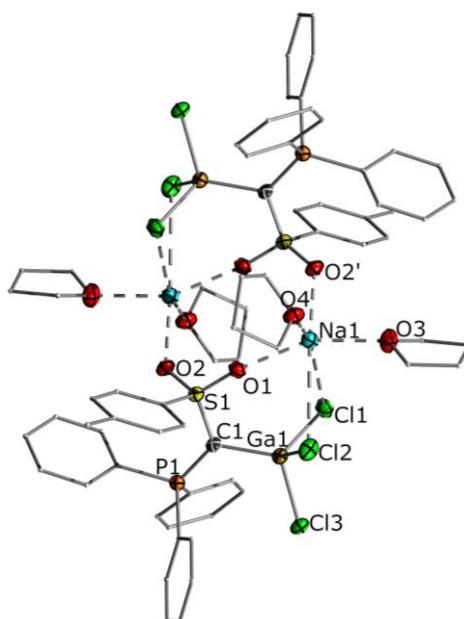
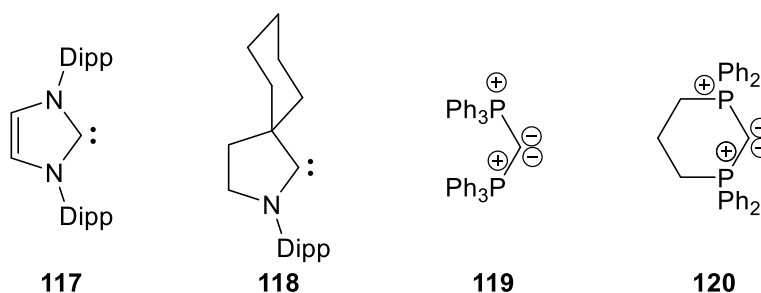


Abbildung 3.81. Molekülstruktur von $\{\text{Na}[\text{Y} \rightarrow \text{GaCl}_3]\}_2$ im Kristall. Darstellung der thermischen Auslenkungsellipsoide mit 50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Die Wasserstoffatome sind für eine bessere Übersichtlichkeit nicht abgebildet. Ausgewählte Bindungslängen [Å] und -winkel [°]: Ga1–Cl1 2.2265(5), Ga1–Cl2 2.2140(5), Ga1–Cl3 2.1987(6), Ga1–C1 1.9463(18), Cl1–Na1 2.9610(8), Cl2–Na1 3.3444(9), Na1–O1 2.2677(14), Na1–O2' 2.2875(15), Na1–O3 2.3547(16), Na1–O4 2.3139(18), Cl1–Ga1–Cl2 102.83(2), Cl1–Ga2–Cl3 105.782(19), Cl2–Ga1–Cl3 104.406(19).

Die Galliumatome weisen dabei eine tetraedrische Geometrie auf, die Natriumatome eine oktaedrische. An das Natrium koordiniert jeweils eine monomere $[\text{Y} \rightarrow \text{GaCl}_3]$ -Einheit über zwei der Chlor- und eines der Sauerstoffatome zum, dessen Koordinationssphäre durch das zweite Sauerstoffatom der Sulfongruppe des anderen Ylids sowie zwei Tetrahydrofuranmoleküle abgesättigt wird. Dabei fällt zunächst auf, dass die Na1–O1- und Na1–O2'-Abstände von Durchschnittlich 2.28 Å geringer sind als die vergleichbaren Na1–O3- und Na1–O4-Abstände von Durchschnittlich 2.34 Å. Das ist vor allem auf die negative Partialladung des sulfonischen Sauerstoffs zurückzuführen.

Da Galliumtrichloridkomplexe zur Bestimmung der Donorstärke geeignet sind – eine kleinere Cl–Ga–Cl-Winkel entspricht einem stärkeren Donor^[144] – ist es weiterhin sinnvoll, die Na1–Cl1- und Na1–Cl2-Interaktion näher zu untersuchen, da diese entsprechende Aussagen verfälschen könnten. Die Atomabstände sind mit 3.00 beziehungsweise 3.34 Å deutlich länger als die Summe der Einfachbindungsradien von Natrium und Chlor von 2.54 Å,^[215] weshalb sie als schwache Bindung beschrieben werden können. Ihre geringe Stärke kann auch aus den entsprechenden Ga1–Cl-Bindungen abgeleitet werden, die mit durchschnittlich 2.22 Å nur unwesentlich länger sind als die Ga1–Cl3-Bindung von 2.20 Å oder die Ga–Cl-Bindung in **Y₂GaCl** mit ebenfalls 2.20 Å (Abbildung 3.76). Demensprechend sollte die Summe der Cl–Ga1–Cl-Winkel zur Bestimmung der Donorstärke geeignet sein. Sie beträgt 313.0°. Das ist deutlich geringer als die vergleichbaren Winkel in den Galliumtrichloridkomplexen von NHCs wie **117** mit 324.2° oder CAACs wie **118** mit 318.9° (Schema 3.26).^[144] Damit ist das Ylid

NaY ein stärkerer Donor als diese und liegt in der Größenordnung von Carbodiphosphoranen wie **119** ($315.4^{\circ[144]}$) und **120** ($312.6^{\circ[144]}$). Die tatsächliche Donorstärke – wie sie in Lösung oder mit nichtkoordinierenden Kationen beobachtet werden sollte – könnte sogar noch etwas höher liegen, da das Yldiid ohne die O→Na-Interaktionen noch etwas elektronenreicher sein dürfte. Ebenso sollte auch die Koordination der Chloratome zum Natrium zu einer Aufweitung des Winkels und damit zu einer Unterschätzung der Donorstärke führen. Das zeigt sich auch in der optimierten Struktur des reinen Anions, in der die Summe der Cl–Ga–C-Winkel mit 324.8^{ow} beziehungsweise 322.2^{ox} deutlich geringer ist als die berechneten Winkelsummen von **117** ($333.4^{\circ[144]}$), **118** ($333.1^{\circ[144]}$), **119** ($326.8^{\circ[144]}$) und **120** ($327.0^{\circ[144]}$).



Schema 3.26. Die Carbene **117** und **118** sowie die Carbodiphosphorane **119** und **120**.

Der Ga1–C1-Abstand in $\{\text{Na}[\text{Y} \rightarrow \text{GaCl}_3]\}_2$ ist mit 2.23 Å weiterhin höher als die vergleichbaren Bindungen in Y_2GaCl (Abbildung 3.76) sowie in den von GANDON et al. synthetisierten Carben- ($1.97\text{--}2.06$ Å) oder Carbodiphosphoran→Galliumtrichlorid-Addukten ($1.95\text{--}1.98$ Å)^[144] und entspricht damit einer sehr schwachen Wechselwirkung.

Außerdem konnte bei der Umsetzung von in THF- d_8 *in situ* generiertem Y_2AlCl mit Natriumhydroxid das dreifach ylidsubstituierte Y_3Al in Form eines für eine Röntgenstrukturanalyse geeigneten Einkristalls erhalten werden, wenngleich die Verbindung auch nicht in reiner Form isoliert werden konnte. Wahrscheinlich lag diese Spezies bereits vorher in geringen Maßen als Nebenprodukt der Y_2AlCl -Synthese vor. Das ist insofern interessant, als dass die Umsetzung von 3 Äquivalenten des Yldiids **NaY** mit einem Äquivalent Aluminiumtrichlorid in Benzol wie erwähnt selektiv zum Erhalt von Y_2AlCl führte. Um diesen Effekt weiter zu untersuchen, wurde als nächstes versucht, Y_3Al direkt zu synthetisieren. Eine gezielte Umsetzung von drei Äquivalenten **NaY** mit Aluminiumtrichlorid in Tetrahydrofuran führte dabei zu einer Grünfärbung der Lösung und es konnte im $^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$ NMR-Spektrum ein breites Signal mit chemischen Verschiebungen von $\delta_{\text{P}} = 6.4$ ppm beobachtet werden. Allerdings wies das NMR-Spektrum weiterhin große Mengen an Y_2AlCl und YH auf, was auf

^w für PW6B95/def2svp//PW6B95def2tzvp

^x für BP86/def2svp//BP86/def2tzvp

die Protolyseempfindlichkeit der Substanz schließen lässt. Eine Aufreinigungsmethode konnte bisher nicht gefunden werden.

Allerdings weist die Molekülstruktur von **Y₃Al** im Kristall einige interessante Eigenschaften auf (Abbildung 3.82). So weist auch hier das Aluminiumatom analog zu **Y₂AlCl** eine trigonal-bipyramidale Geometrie auf, in der die in der die Ylidliganden die äquatorialen Positionen einnehmen und gemeinsam mit dem Aluminiumzentrum in einer Ebene liegen, wie durch die Summe der C–Al1–C-Bindungswinkel von 359.9° deutlich wird. Die axialen Positionen werden durch die Sauerstoffatome von zwei Ylidliganden besetzt und damit das freie *p*-Orbital abgesättigt, wodurch analog zu **Y₂AlCl** keine π -Wechselwirkung der ylidischen Kohlenstoffatome mit dem zentralen Aluminiumatom notwendig ist.

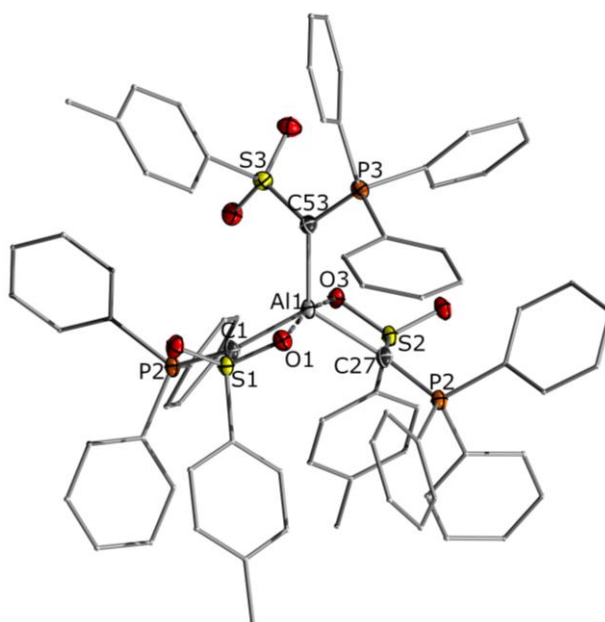


Abbildung 3.82. Molekülstruktur von **Y₃Al** im Kristall. Darstellung der thermischen Auslenkungsellipsoide mit 50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Die Wasserstoffatome sind für eine bessere Übersichtlichkeit nicht abgebildet. Ausgewählte Bindungslängen [Å] und -winkel [°]: Al1–O1 2.0203(11), Al1–O3 1.9982(11), Al1–O5 3.1064(10), Al1–C1 2.0325(12), Al1–C27 2.0711(12), Al1–C53 2.006(12), C1–Al1–C27 117.76(5), C1–Al1–C53 119.56(5), 122.68(5)

Die Al–C-Bindungen liegen zwischen 2.01 und 2.07 Å und sind damit etwas länger als in **Y₂AlCl**. Das lässt sich auf den hohen sterischen Anspruch der Ylidliganden zurückführen und unterstreichen wie in **Y₂AlCl** die fehlende π -Donation von Elektronendichte aus den freien Elektronenpaaren des ylidischen Kohlenstoffatoms zum Aluminiumzentrum. Unterstützt wird das durch die Geometrie der Struktur. So sind die Ebenen um die ylidischen Kohlenstoffatome C1, C27 und C53 mit 89.8, 88.1 beziehungsweise 36.5° deutlich aus der durch diese Atome aufgespannten Ebene um das Aluminiumzentrum rausgedreht.

Die Al–O-Abstände der koordinierenden Sauerstoffatome betragen 2.02 beziehungsweise 1.99 Å. Der Al–O5-Abstand ist mit 3.11 Å hingegen deutlich größer. Wahrscheinlich sind die

Al–O-Bindungen allerdings labil und stehen in einem Gleichgewicht miteinander, was das breite Signal im $^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$ NMR-Spektrum erklären würde.

Auch im Falle der Umsetzung von drei Äquivalenten **NaY** mit einem Äquivalent Indiumtrichlorid konnte eine selektive Reaktion beobachtet werden. Das Produkt zeichnet sich im $^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$ NMR-Experiment durch ein einzelnes breites Signal mit einer chemischen Verschiebung von $\delta_{\text{P}} = 10.8$ ppm aus und konnte in einer Ausbeute von 10 % in Form eines farblosen Feststoffs isoliert werden. Weiterhin deuteten die NMR-spektroskopischen Experimente auf einen intakten Ylidliganden hin. Die Elementaranalyse zeigt außerdem, dass es sich bei dem Produkt wahrscheinlich um das erwartete **Y₃In** handelt. Dieses wurde durch den Erhalt eines für eine Röntgenstrukturanalyse geeigneten Einkristalls bestätigt (Abbildung 3.83).

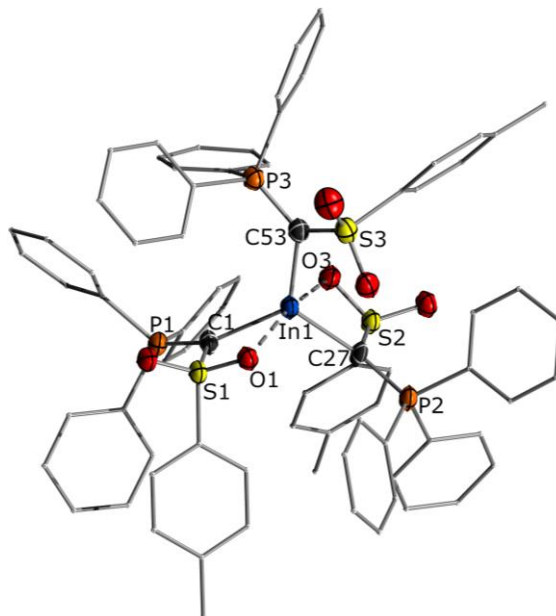


Abbildung 3.83. Molekülstruktur von **Y₃In** im Kristall. Darstellung der thermischen Auslenkungsellipsoide mit 50 % Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Die Wasserstoffatome sind für eine bessere Übersichtlichkeit nicht abgebildet. Ausgewählte Bindungslängen [Å] und -winkel [°]: In1–O1 2.3828(21), In1–O3 5.5034(20), In1–O5 3.0786(26), In1–C1 2.2274(29), In1–C27 2.1749(24), In1–C53 2.1573(31), C1–In1–C27 115.07(11), C1–In1–C53 122.84(10), C27–In1–C53 122.00(11).

Analog zu den Zentralatomen in **Y₂AlCl**, **Y₂GaCl** und **Y₃Al** weist das Indiumatom eine trigonal bipyramidale Geometrie auf. Auch hier werden die äquatorialen Positionen von den ylidischen Kohlenstoffatomen eingenommen, die gemeinsam mit dem Indium in einer Ebene liegen. Die Summe der C–In–C-Bindungswinkel beträgt entsprechend 359.9°. Ebenso werden auch hier die axialen Positionen durch zwei der Sauerstoffatome der Ylidliganden besetzt, was zur Absättigung des freien *p*-Orbitals des Indiums führt. Entsprechend ist keine π -Wechselwirkung der ylidischen Kohlenstoffatome mit dem zentralen Aluminiumatom notwendig. Entsprechend sind die Ebenen, in denen die ylidischen Kohlenstoffatome liegen, ebenfalls deutlich mit 85.6, 88.8 und 37.0° aus der Ebene um das zentrale Indiumatom

herausgedreht. Entsprechend wird auch hier keine Elektronendichte aus den freien Elektronenpaaren in das vakante Orbital am Indium doniert. Das entspricht auch den In–C-Abständen, die mit 2.17–2.22 Å etwas länger sind als die In–C-Bindungen in Triphenylindium von 2.11–2.15 Å.^[225]

Bei den In–O-Abständen fällt weiterhin analog zu **Y₃Al** auf, dass zwei Sauerstoffatome zum Zentralatom koordinieren, während beim dritten mit 3.08 Å keine Interaktion vorliegt. Allerdings ist es auch hier möglich, dass die koordinierenden Sauerstoffatome zumindest in Lösung austauschen, was zu dem breiten Signal im ³¹P{¹H} NMR-Spektrum führt.

Die bisherigen Überlegungen zu **Y₃Al** und **Y₃In** spiegeln sich auch in den WIERG Bindungsindizes wider (Tabelle 3.30). So sind diese für die jeweiligen E–O1- und E–O3-Bindungen deutlich höher als für die jeweilige E–O5-Bindung. Ein gegenläufiger Trend kann für die E–C-Bindungen beobachtet werden, was den Bindungslängen in den Molekülstrukturen im Kristall entspricht.

Tabelle 3.30. WIERG Bindungsindizes von **Y₃Al** und **Y₃In**.

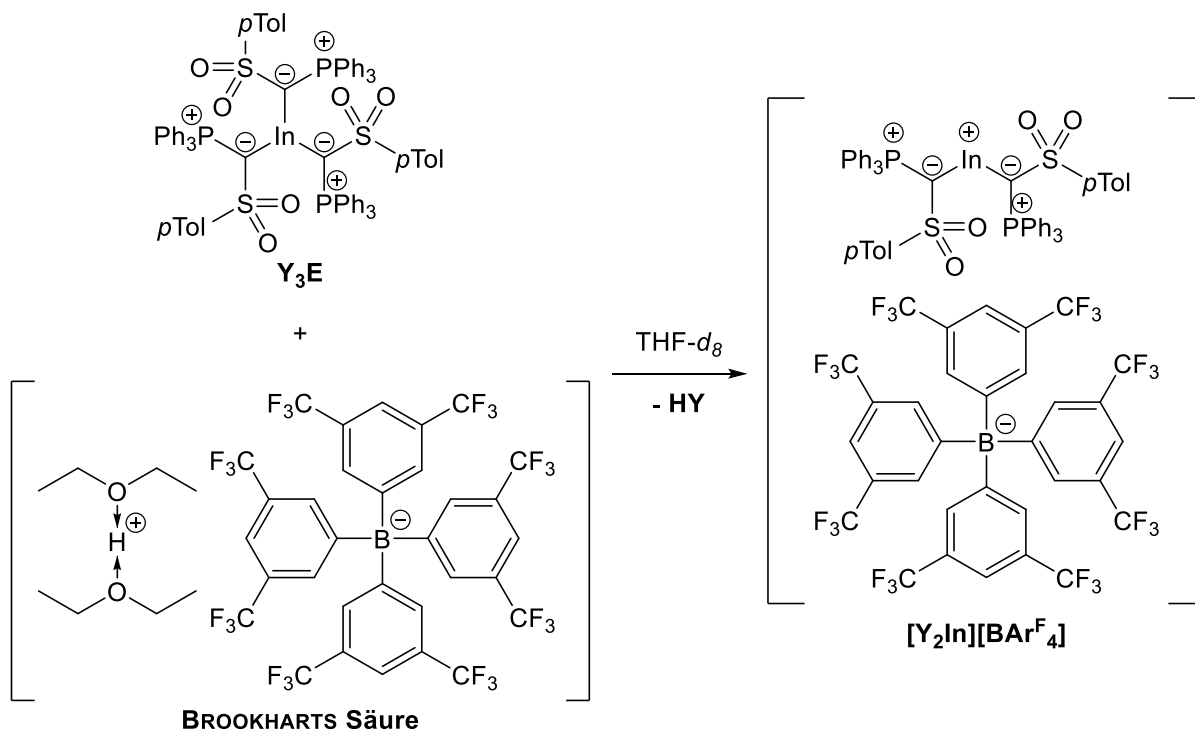
	E–C1	E–C27	E–C53	E–O1	E–O3	E–O5
Y₃Al	0.39	0.38	0.40	0.23	0.24	0.06
Y₃In	0.34	0.31	0.36	0.17	0.13	0.10

In der Folge der Koordination der Sauerstoffatome der jeweiligen Ylidsubstituenten sind die natürlichen Ladungen der entsprechenden ylidischen Kohlenstoffatome C1 und C27 geringfügig niedriger als die von C53 (Tabelle 3.31).

Tabelle 3.31. Natürliche Ladungen (q(NBO)) von **Y₃Al** und **Y₃In**.

	E	C1	C27	C53	O1	O3	O5
Y₃Al	1.85	-1.53	-1.52	-1.61	-1.01	-1.00	-0.96
Y₃In	1.97	-1.56	-1.54	-1.60	-1.03	-1.02	-0.97

Y₃In könnte analog zu **Y₂AlCl** und **Y₂GaCl** ein günstiges Edukt zur Synthese von divalenten ylidsubstituierten Trielkationen dienen. Der entsprechende Reaktionsweg verlief dann entsprechend nicht über eine Chloridabstraktion, sondern über eine gezielte Protonierung und damit Abspaltung eines Äquivalents **YH**. Entsprechend dieser Überlegung wurde **Y₃In** mit einem Äquivalent BROOKHARTS Säure umgesetzt, wodurch die Spezies [**Y₂In**][**Bar^F₄**] entstehen sollte (Schema 3.21).



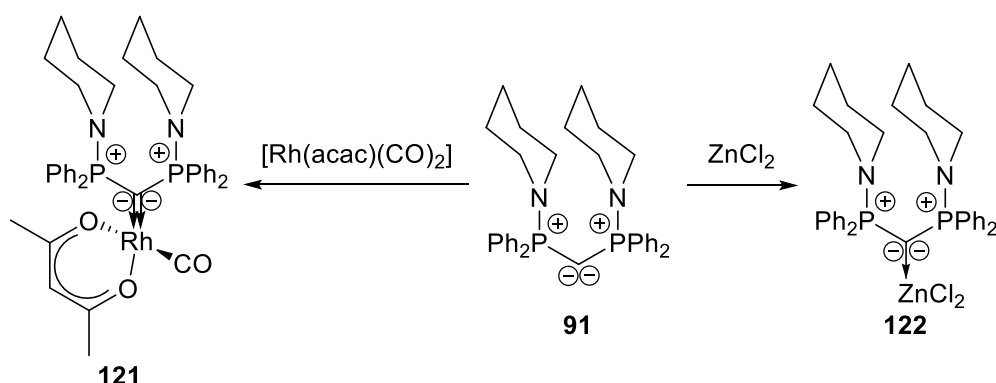
Schema 3.27. Geplante Umsetzung von **Y₃In** mit BROOKHARTS Säure.

Bei der Reaktion fiel ein farbloser Feststoff aus, sodass in Lösung lediglich das Koppelprodukt **YH** verblieb. Der ausgefallene Feststoff erwies sich allerdings in gängigen Lösungsmitteln als unlöslich und konnte daher nicht weiter charakterisiert werden, sodass eine Bestätigung, ob es sich tatsächlich um das gewünschte Produkt handelt, noch aussteht.

Zusammenfassend war es möglich, mit **Y₂AlCl**, **Y₂GaCl**, (**YGaCl₂**)₂ und **Y₃In** vier neue ylidsubstituierte Verbindungen zu isolieren. Dabei sind **Y₂AlCl** und **Y₃In** die ersten bekannten ylidsubstituierten Aluminium- beziehungsweise Indiumverbindungen. In allen Verbindungen sowie in **Y₃Al**, welches zwar nicht isoliert und charakterisiert, aber immerhin kristallisiert werden konnte, kommt es weiterhin im Gegensatz zu sämtlichen bekannten ylidsubstituierten Trielen zu keinem Doppelbindungscharakter des ylidschen Kohlenstoffatoms mit dem jeweiligen Zentralatom. Außerdem war es möglich, mit **{Na[Y→GaCl₃]}₂** eine Molekülstruktur des Galliumtrichloridaddukts des Ylidiids **NaY** im Kristall zu erhalten, wodurch die Donorstärke von letzterem bestimmt werden konnte. Diese ist höher als in Carbenen und wahrscheinlich sogar im Vergleich zu Carbodiphosphoranen.

3.7 Quantenchemische Untersuchungen zur Struktur und Reaktivität von Carbodiphosphoranverbindungen^{yz}

Im Rahmen seiner Untersuchung zu Carbodiphosphoranen war es ALEXANDER KROLL aus unserer Arbeitsgruppe möglich, das diaminosubstituierte Carbodiphosphoran **91** zu synthetisieren.^[174] Dieses konnte er zum einen zum Rhodiumkomplex **121** umsetzen (Schema 3.28), wobei die C–O-Streckschwingung darauf hindeutete, dass das Carbodiphosphoran **91** eine höhere Donorstärke als Carbene oder Phosphane aufweist und in der Größenordnung von anderen Carbodiphosphoranen wie **119** liegt. Außerdem erwies sich die C–Rh-Bindung im Vergleich zum verwandten cyclometallierten Rhodiumkomplex **119–Rh(cod)** als kürzer. Damit liegt sie in der Größenordnung von NHC-substituierten Rhodiumkomplexen.



Schema 3.28. Synthese des Rhodium- **121** und des Zinkkomplexes **122** aus dem Carbodiphosphoran **91**.

Ebenso war es ALEXANDER KROLL möglich den Zinkkomplex **122** zu isolieren. Überraschenderweise weist in diesem allerdings die Ebene um das trigonal-planar-kordinierende Zink keine Coplanarität mit der Ebene um das zentrale Kohlenstoffatom auf.^[174]

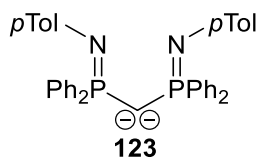
Diese Beobachtungen wurden im Rahmen dieser Arbeit quantenchemisch auf BP86/def2svp//BP86/def2tzvp-Niveau weiter untersucht. Daher wurden zunächst zur Untersuchung der Donoreigenschaften von **91** NBO-Analysen durchgeführt und die Ergebnisse mit denen für die elektronischen Strukturen des Carbodiphosphorans **119** sowie des Methandiids **123** verglichen. Diese NBO-Analysen basierten auf von zuvor durch LENNART SCHARF optimierten Strukturen. Dabei stellte sich heraus, dass die natürliche Ladung am zentralen Kohlenstoffatom in **91** etwas niedriger ist als im Hexaphenylcarbodiphosphoran **119** (Tabelle 3.32). Der Grund hierfür könnte die Schwächung der C–P Bindung durch negative

^y In Teilen wiedergegeben mit der Erlaubnis von A. Kroll, H. Steinert, L. T. Scharf, T. Scherpf, B. Mallick, V. H. Gessner, *Chem. Commun.* **2020**, 56, 8051. Veröffentlicht durch die *Royal Society of Chemistry*. Copyright © 2020 CC-BY-NC 3.0 bei den Autoren.

^z In Teilen wiedergegeben mit der Erlaubnis von A. Kroll, H. Steinert, M. Jörges, T. Steinke, B. Mallick, V. H. Gessner, *Organometallics* **2020**, 39, 4312. Veröffentlicht durch die *American Chemical Society*. Copyright © 2020 CC-BY-NC-ND 4.0 bei der *American Chemical Society*.

Hyperkonjugation des freien Elektronenpaars am Stickstoff in das entsprechende σ^* -Orbital sein. Dem entgegen stehen allerdings die WIERG Bindungsindizes der C–P-Bindung, die in **119** etwas niedriger sind als in **91**.

Tabelle 3.32. Ausgewählte NBO-Ladungen und WIERG Bindungsindizes von **91**, **119** und **123** (links) sowie das Methandiid **123** (rechts).

		91	119	123	
q(NBO) ^{aa}	C1	-1.44	-1.38	-1.28	 123
	N1	-0.83	–	-0.95	
WBI ^{aa}	C–P	1.37	1.32	1.30	
	P–N	0.73	–	0.96	

Interessanterweise stellte sich weiterhin heraus, dass die natürliche Ladung am zentralen Kohlenstoffatom negativer ist als im Methandiid **123** (Tabelle 3.32). Der Grund hierfür ist wahrscheinlich eine in **91** im Vergleich zu **123** schwächere Rückbindung in das σ^* -Orbital der P–N-Bindung. Entsprechend ist die Ladung am Stickstoff in **123** stärker negativ als in **91**. Als Resultat sollte **91** entsprechend ein stärkerer C- und ein schwächerer N-Donor als das Dianion **123** sein.

Zum Verständnis der vergleichsweise kurzen Rh–C-Bindung in **121** wurden als nächstes die Orbitale dieser Verbindung betrachtet. Diese wird durch zwei π -symmetrische Bindungen in Form des HOMO-1 und des HOMO-2 beschrieben. Entsprechend ist kein freies Elektronenpaar am zentralen Kohlenstoffatom des Carbodiphosphoranliganden lokalisiert (Abbildung 3.84). Somit kann die Bindungssituation hier durch das Zusammenspiel zweier π -Hinbindungen beschrieben werden. Dieser Doppelbindungscharakter erklärt auch, warum die Bindung in der Kristallstruktur eine ähnliche Länge wie die analoge Bindung in vergleichbaren Carbenkomplexen aufweist, da es auch hier, in diesem Falle durch eine σ -Hin- und eine π -Rückbindung, Doppelbindungsanteile geben sollte.

^{aa} Durchschnittswerte

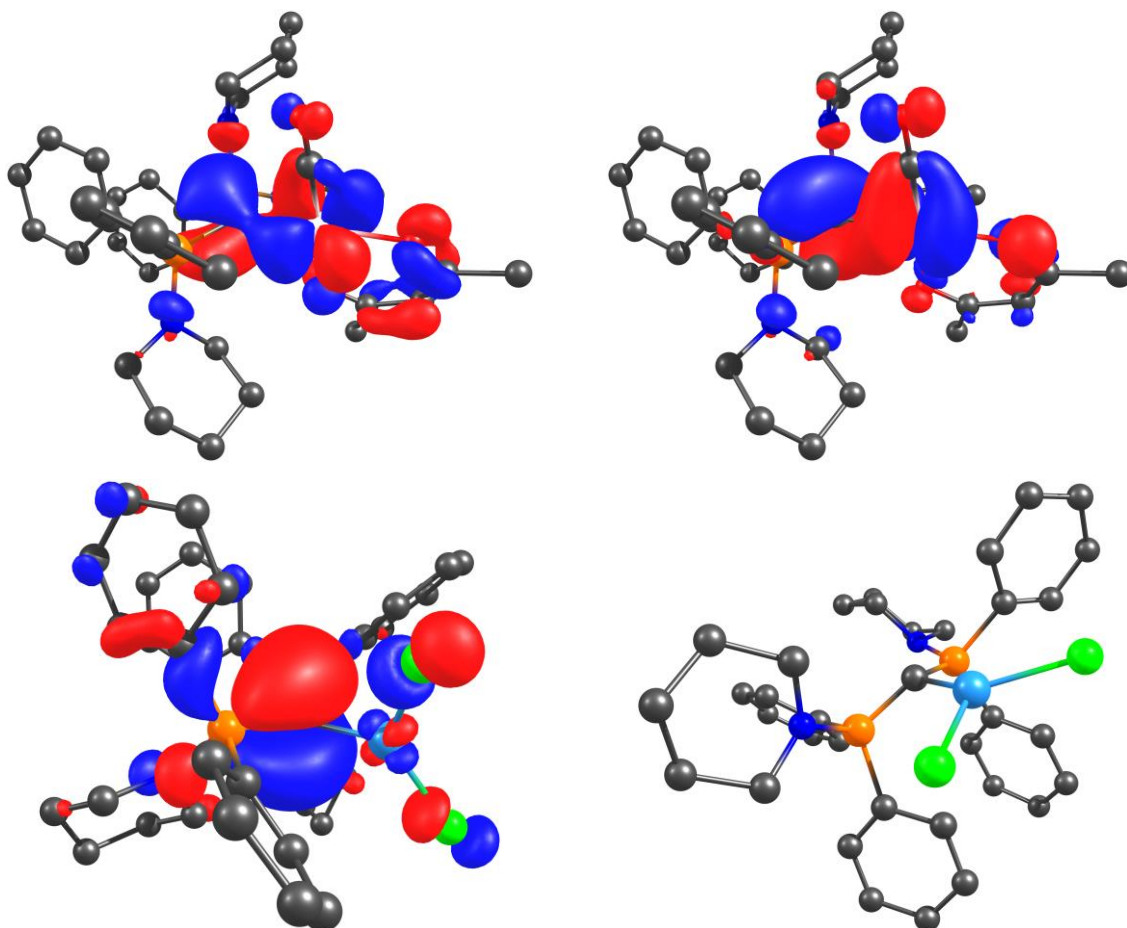


Abbildung 3.84. Das HOMO-1 (oben links) und das HOMO-2 (oben rechts) von **121** und das HOMO von **122** (unten links). Außerdem ist die coplanare Anordnung des Zinks mit dem Carbodiphosphorankohlenstoffatom abgebildet (unten rechts). Für eine bessere Übersichtlichkeit sind die Wasserstoffatome nicht abgebildet.

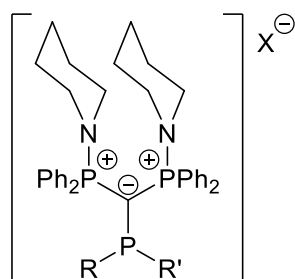
Im Gegensatz dazu ist das freie Elektronenpaar im Zinkkomplex **122** in Form des HOMOs deutlich an diesem lokalisiert (Abbildung 3.84), was für eine Einfachbindung spricht. Unterstützt werden diese Erkenntnisse durch die WIERG Bindungsindizes. Diese sind mit 0.52 für die C–Rh-Bindung in **121** etwas mehr als doppelt so hoch wie für die C–Zn-Bindung in **122** mit 0.21. Entsprechend ist die NBO-Ladung am zentralen Kohlenstoffatom des CDP-Liganden im Rhodiumkomplex **121** mit -1.34 etwas weniger negativ als im Zinkkomplex **122** mit -1.67. Ein Grund hierfür könnte der größere Elektronenreichtum von Zink gegenüber Rhodium sein.

Eine coplanare Anordnung des Zinks in **122** mit dem zentralen Kohlenstoffatom ergab weiterhin eine um 23.4 kJ/mol ungünstigere Struktur, bei der das Carbodiphosphoran aus der Zn–P–P-Ebene herausgedrückt ist (Abbildung 3.84). Der Grund hierfür ist wahrscheinlich eine sterische Abstoßung.

ALEXANDER KROLL konnte im Zuge seiner Untersuchungen zu Carbodiphosphoranen außerdem verschiedene kationische Carbodiphosphoranverbindungen **124a-e** synthetisieren

(Tabelle 3.33).^[175] Dabei beobachtete er, dass sich die chemischen Verschiebungen des Carbodiphosphoranliganden im $^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$ NMR bei einer unterschiedlichen Substitution am Phosphor(III)-Zentrum kaum verändern und immer in derselben Region liegen. Im Gegensatz dazu kann beim Signal des Phosphor(III) ein starker Einfluss der Substituenten beobachtet werden. So in liegt den Chloro- und Bromoverbindungen **124a** und **124b** die größte Tieffeldverschiebung vor, während hingegen das entsprechende Signal der diphenylsubstituierten Verbindung **124e** am weitesten hochfeldverschoben ist (Tabelle 3.33).^[175] Einen weiteren Trend konnte ALEXANDER KROLL bei den $^2J_{\text{PP}}$ -Kopplungskonstanten beobachten. Diese nahmen mit steigender Ordnungszahl der Halogene in **124a-124c** deutlich zu. Die geringste Kopplungskonstante konnte bei **124e** beobachtet werden. Dies wird von der Abnahme der entsprechenden C–P(III)-Bindungslängen begleitet, während die C–P(V)-Bindungslängen sich als verhältnismäßig konstant erweisen.^[175] Die Abnahme der C–P(III)-Abstände steht allerdings zunächst im Kontrast mit den Elektronegativitäten der Halogen. Diese würden vermuten lassen, dass aufgrund der hohen Elektronegativität des Chlors selbiges in **124a** die meiste Elektronendichte vom Phosphor(III)-Zentrum zieht. In der Folge würde daraus ein geringerer C–P(III)-Abstand und eine höhere $^2J_{\text{PP}}$ -Kopplungskonstante erwartet werden.

Tabelle 3.33. Die von ALEXANDER KROLL synthetisierten kationischen Carbodiphosphoranverbindungen **120** sowie Ausgewählte chemische Verschiebungen,^[175] $^2J_{PP}$ -Kopplungskonstanten,^[175] Bindungslängen,^[175] NBO-Ladungen und WIBERG Bindungsindizes der Verbindungen. In den quantenchemischen Untersuchungen wurde jeweils nur das Kation ohne Gegenion betrachtet.



- 124a:** R, R', X = Cl
124b: R, R', X = Br
124c: R, R', X = I
124d: R = Cy, R'; X = Cl
124e: R, R' = Ph; X = Cl

		124a	124b	124c	124d	124e
δ_P [ppm]	P(III)	172.2	161.2	107.6	121.3	-8.2
	P(V)/P(V) ^{bb}	43.9	44.4	43.1	45.3	47.1
$^2J_{PP}$ [Hz]		106.7	112.0	117.8	n.b.	64.6
Bindungslänge [Å]	C–P(III)	1.77	1.74	n.b.	1.80	1.82
	C–P(V) ^{bb}	1.76	1.76	n.b.	1.75	1.75
q(NBO)	C	-1.45	-1.44	-1.42	-1.43	-1.42
	P(III)	0.84	0.67	0.42	0.85	0.87
	P(V) ^{bb}	1.84	1.84	1.84	1.85	1.84
	N1	-0.88	-0.88	-0.88	-0.88	-0.88
WBI	C–P(III)	0.99	1.01	1.04	0.96	0.93
	C–P(V) ^{bb}	1.02	1.01	1.01	1.04	1.06
	P(V)–N ^{bb}	0.84	0.84	0.84	0.83	0.82

Zur Aufklärung dieses Sachverhalts wurden die Kationen der Verbindungen im Rahmen dieser Arbeit daher quantenchemisch auf PW6B95D3/def2svp//PW6B95D3/def2tzvp-Niveau untersucht. Dabei konnten zunächst sowohl für das zentrale Kohlenstoffatom, für die Phosphor(V)-Zentren als auch für die Stickstoffatome sehr konstante Werte für die natürlichen Ladungen beobachtet werden. Im Gegensatz dazu liegt am Phosphor(III) insbesondere für die halogensubstituierten Verbindungen **124a-124c** eine starke Abnahme der Ladung von 0.84 über 0.67 auf 0.42 vor, was sehr gut mit den beobachteten NMR-Verschiebungen und den Elektronegativitäten der jeweiligen Halogene^[5] korreliert. Allerdings stellten sich die höchsten Ladungen mit 0.85 für die cyclohexyl- und 0.87 für die diphenylsubstituierte Verbindung heraus (Tabelle 3.33). Das könnte das Resultat einer Bindungsaufweitung, die durch den hohen sterischen Anspruch der Organylreste in **124d** und **124e** herbeigeführt wird,

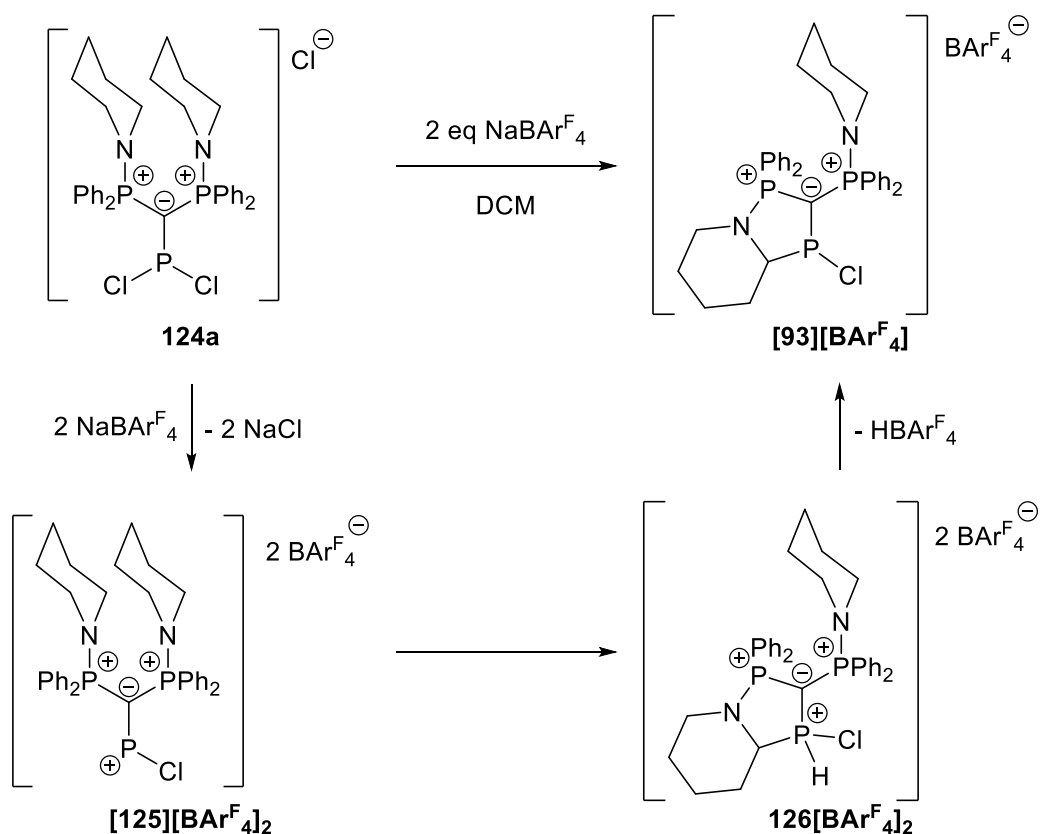
^{bb} Durchschnittswerte

sein. Das korreliert nicht nur mit den großen Bindungslängen der C–P(III)-Bindung, sondern ebenfalls mit den entsprechenden WIBERG Bindungsindizes, die in diesen beiden Verbindungen entsprechend gering sind. Weiterhin steigen die WIBERG Bindungsindizes dieser Bindung in der Reihe **124a** < **124b** < **124c**, also mit steigender Elektronegativität des Halogens und in Übereinstimmung mit der beobachteten $^2J_{PP}$ -Kopplungskonstante.

An dieser Stelle gibt es zwei Erklärungen für diese scheinbare Diskrepanz der steigenden WIBERG Bindungsindizes und der $^2J_{PP}$ -Kopplungskonstante gegenüber der erwarteten Abnahme der C–P(III)-Bindungslänge. Auf der einen Seite weist die iodsubstituierte Verbindung **124c** im Vergleich zu den mit den leichteren und elektronegativeren Halogenen substituierten Verbindungen **124a** und **124b** die geringste Ladung am zentralen Phosphor(III)-Atom auf. Dadurch bedingt sollte das freie Elektronenpaar an diesem Phosphor am größten sein. In der Folge kommt es zu einer stärkeren Abstoßung mit dem freien Elektronenpaar am zentralen Kohlenstoffatom des Carbodiphosphoranliganden und somit zu einer längeren Bindung.

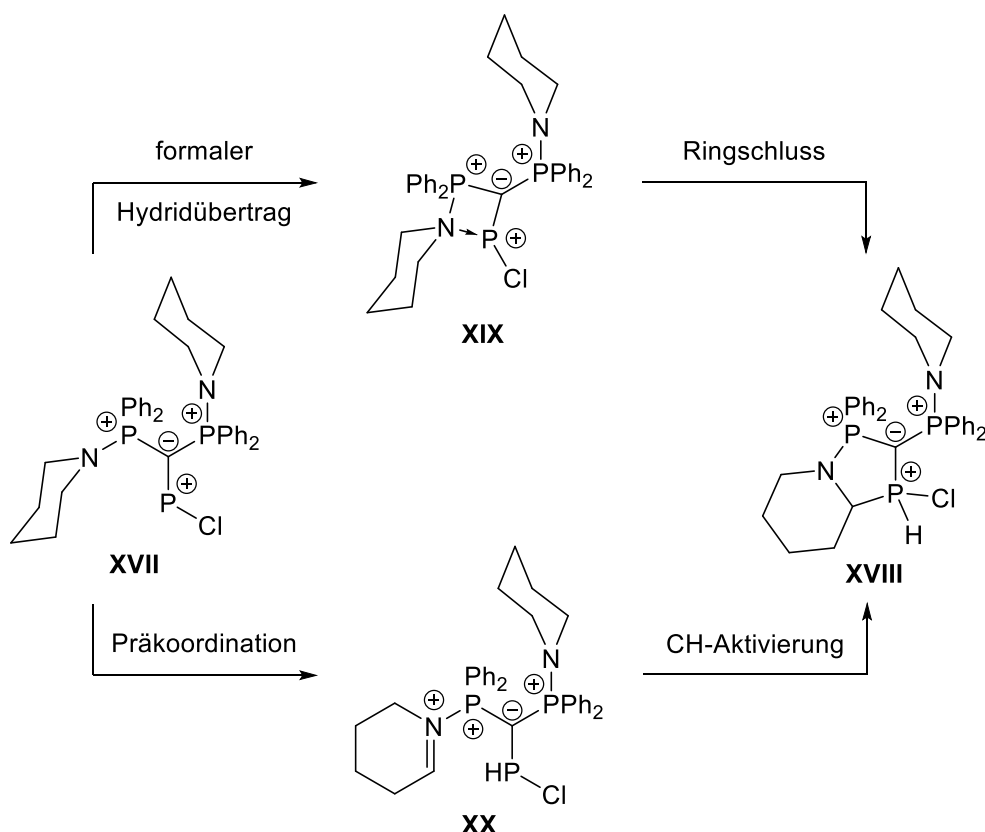
Auf der anderen Seite bilden der BENTSCHE Regel^[183] entsprechend elektronegativere Elemente Bindungen mit höherem *p*-Charakter aus. Das bedeutet, dass die Halogen–P(III)-Bindung im Falle der Chlorsubstitution in **124a** den höchsten *p*-Charakter aufweisen sollte. In der Folge hat die verbleibende C–P(III)-Bindung den höchsten *s*-Charakter und ist somit am kürzesten. Umgekehrt weist dieselbe Bindung in **124c** den geringsten *s*-Anteil auf und ist am längsten.

Beim Versuch, das Kation **124a** mittels NaBarF₄ zu einem Dikation umzusetzen, beobachtete ALEXANDER KROLL nicht die erwartete Spezies **125[BarF₄]₂**, sondern das bicyclische Kation als Tetrafluoroboratsalz **93[BarF₄]** (Schema 3.29). Dieses musste durch eine C(sp³)–H-Aktivierung einer der Piperidinygruppen entstanden sein, was ungewöhnlich ist, zumal ebenfalls Phenylgruppen zur Verfügung stehen. Von diesen ist bei Hexaphenylcarbodiphosphoran bereits bekannt, dass es zur C–H-Aktivierung kommen kann.^[212,226] Nichtsdestotrotz liegt die Annahme nahe, dass sich zunächst die dikationische Spezies **125[BarF₄]₂** bildet. In einem zweiten Schritt könnte diese dann durch Übertragung eines Wasserstoffs den dikationischen Bicyclus **126[BarF₄]₂** bilden, um in der Folge zur Spezies **93[BarF₄]** deprotoniert zu werden (Schema 3.29).



Schema 3.29. Vorgeschlagener Mechanismus zur Bildung des bicyclischen Kations **93**⁺.

Zum Verständnis der CH-Aktivierung der Piperidinygruppe wurde zunächst die Reaktion des Phospheniums **XVII** (= **[125]**²⁺) zum bicyclischen Dikation **XVIII** (= **[126]**²⁺) untersucht. Hierbei gibt es zwei Möglichkeiten. Zum einen kann zunächst eine Präkoordination des Stickstoffatoms an das Phospheniumzentrum zum Vierring **XIX** erfolgen. Diesem Schritt angeschlossen würde dann ein konzertierter Übertrag des Wasserstoffatoms folgen (Schema 3.30).



Schema 3.30. Untersuchte Mechanismen zur C(sp³)-H-Aktivierung ausgehend vom Phosphonium **XVII**.

Alternativ kann auch zunächst ein formaler Hydridshift zum Iminium **XX** erfolgen. Dieses könnte dann in einem zweiten Schritt einen Ringschluss vollziehen (Schema 3.30).

Hierbei stellte sich zunächst heraus, dass sowohl das Iminium **XX** als auch die Spezies **XIX** gegenüber dem Phosphonium um 28.9 beziehungsweise 30.6 kJ/mol thermodynamisch favorisiert sind. Weiterhin ist die Spezies **XIX** auch gegenüber dem Iminium **XX** sowohl thermodynamisch als auch kinetisch favorisiert. So liegt die entsprechende Barriere $TS_{XVII \rightarrow XIX}$ etwa 45 bis 51 kJ/mol niedriger als ihr Pendant $TS_{XVII \rightarrow XX}$, unabhängig davon, ob der formale Hydridübertrag vom axialen oder äquatorialen Wasserstoffatom ausgeht (Abbildung 3.85).

Beim zweiten Schritt fällt zunächst auf, dass die Barriere $TS_{XIX \rightarrow XVIII}$ 101.8 kJ/mol beträgt und der entsprechende Reaktionsschritt daher nur sehr unwahrscheinlich bei Raumtemperatur ablaufen würde. Da die Reaktion von ALEXANDER KROLL auch bei tieferen Temperaturen beobachtet wurde, entfällt dieser Schritt für den Mechanismus. Im Vergleich dazu gibt es für den Ringschluss $TS_{XX \rightarrow XVIII}$ zwei Möglichkeiten. So kann das Phosphoratom entweder axial oder äquatorial an die Piperidiniumeinheit koordinieren. Beide Möglichkeiten sind kinetisch deutlich günstiger (-15.8 beziehungsweise 7.0 kJ/mol) und sollten problemlos bei Raumtemperatur oder auch bei tieferen Temperaturen überwunden werden. Allerdings stellt sich hier heraus, dass das kinetisch favorisierte Produkt **XVIII**^{D1} nicht mit dem durch eine

Kristallstrukturanalyse erhaltenen Isomer übereinstimmt. Dieses stimmt hingegen mit dem thermodynamisch favorisierten Produkt **XVIII**^{D2} überein. Dass dennoch das thermodynamisch favorisierte Produkt **XVIII**^{D2} gebildet wird, lässt sich damit begründen, dass **XVIII**^{D1} und **XIX** im Gleichgewicht miteinander stehen (Abbildung 3.85).

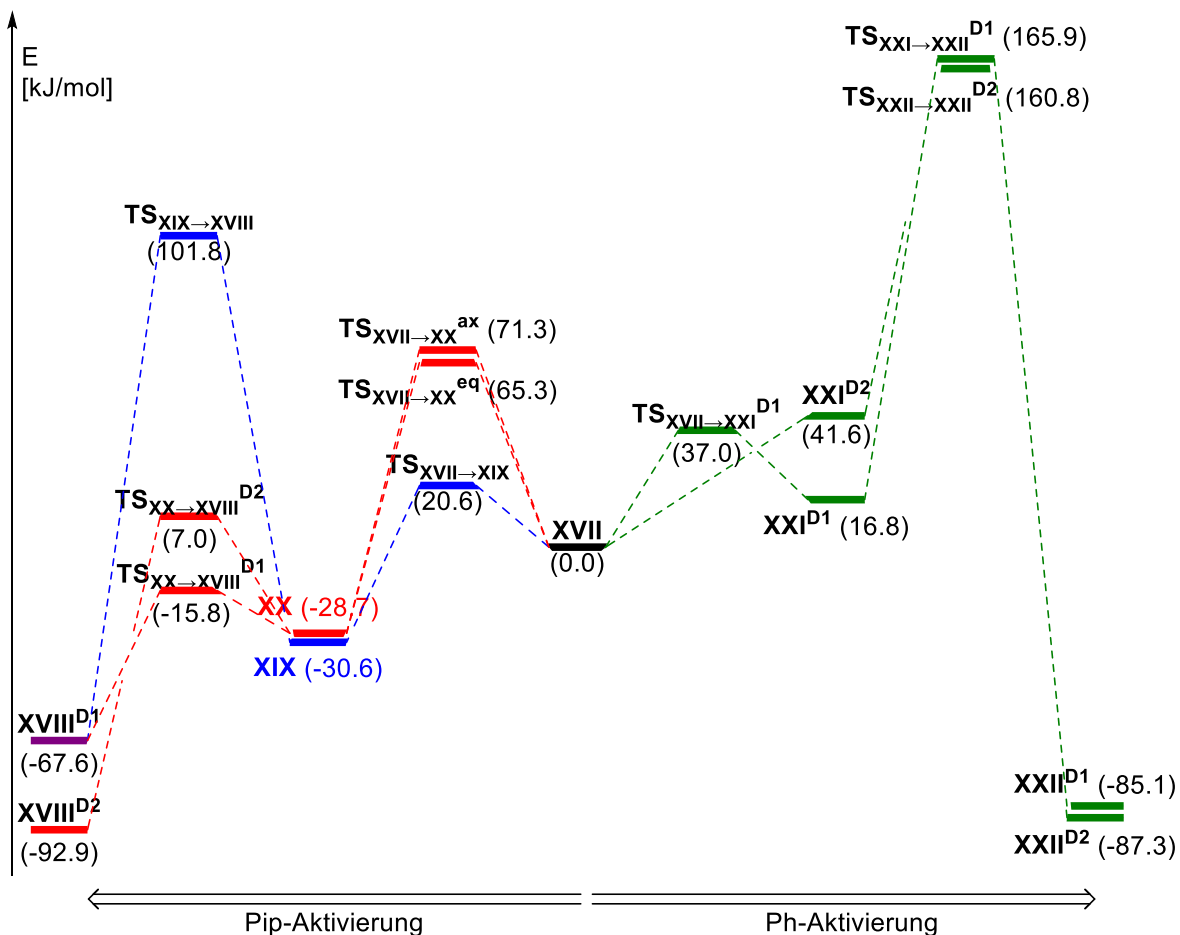
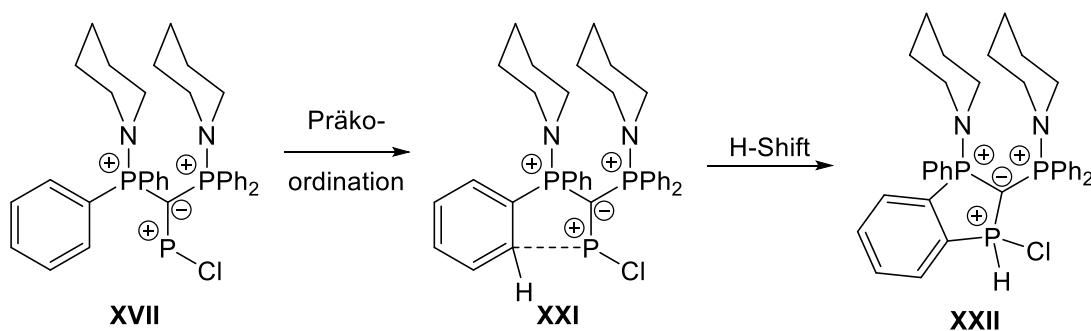


Abbildung 3.85. Untersuchtes Reaktionsprofil zur CH-Aktivierung des Phospheniums **XVII**.

Auch eine CH-Aktivierung an einer Phenylgruppe könnte ausgehend vom Phospheniumion **XVII** möglich sein. Hier würde es zunächst zu einer Präkoordination des Phenylrings **XXI** kommen und in einem zweiten Schritt würde der Bicyclus **XXII** gebildet werden (Schema 3.31).

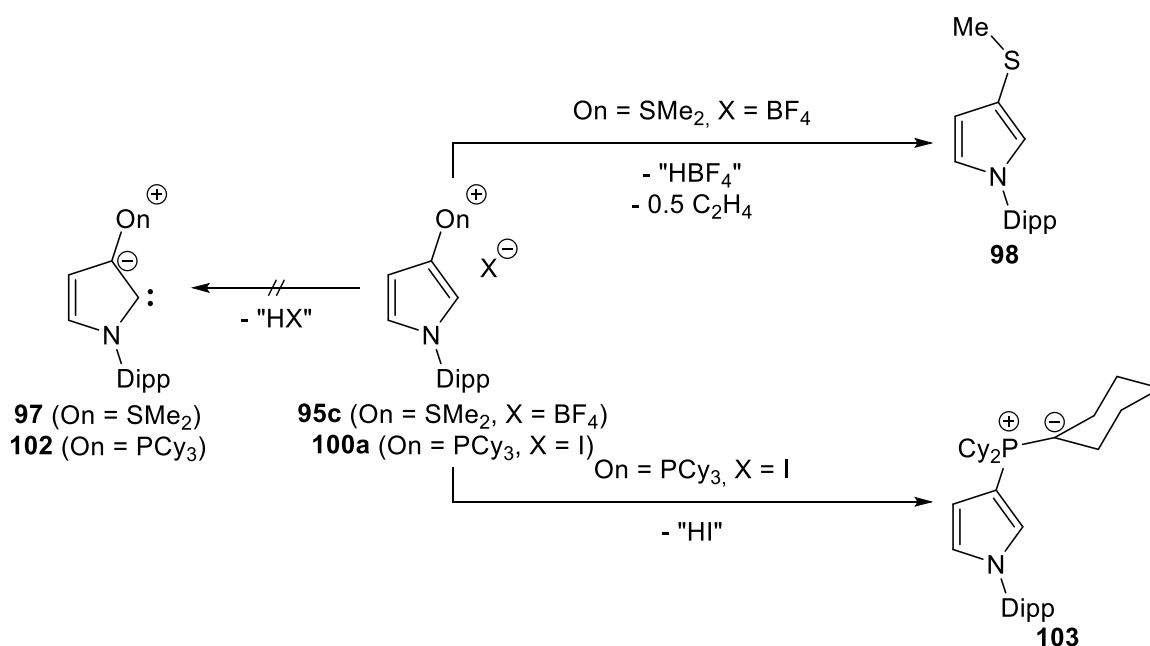


Schema 3.31. Möglicher Mechanismus für die CH-Aktivierung der Phenylgruppe von **XVII**.

Dabei stellt sich zunächst heraus, dass zum einen beide Diastereomere, die sich für **XXI** bilden können, thermodynamisch um 16.8 beziehungsweise 41.6 kJ/mol ungünstiger als das Edukt **XVII** sind. Weiterhin sind zwar die Bicyclen **XXII** deutlich günstiger, allerdings liegt die Reaktionsbarriere mit mindestens 119.2 kJ/mol, ausgehend von den präkoordinierenden Spezies **XXI**, beziehungsweise 160.8 kJ/mol, ausgehend von **XVII**, in einer Größenordnung, dass die Reaktion bei Raumtemperatur nicht mehr ablaufen wird. Außerdem ist sie kinetisch deutlich ungünstiger als die CH-Aktivierung am Piperidiny substituenten (Abbildung 3.85). Zusammenfassend gibt der untersuchte Mechanismus zur CH-Aktivierung durch Chloridabstraktion von **124a** das Entstehen von **93[Bar^F₄]** hinreichend wieder.

4 Zusammenfassung und Ausblick

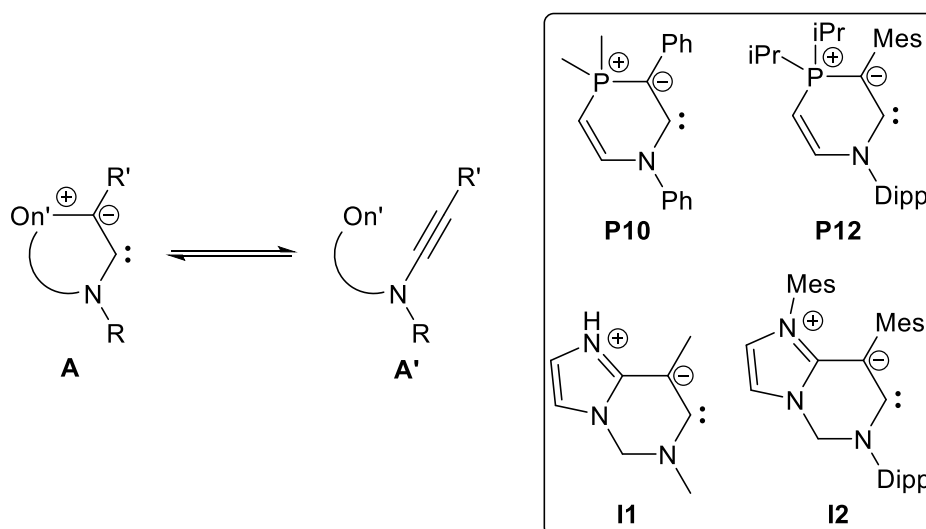
Der erste Teil der vorliegenden Arbeit beschäftigte sich mit der Synthese von amino(ylid)stabilisierten Carbenen (AYCs). Trotz zahlreicher Bemühungen^[97–100] war es bisher nicht möglich derartige Verbindungen in freier Form zu isolieren. Zum Erreichen dieses Ziels wurden zunächst die Pyrrolsalze **95c** und **100a** synthetisiert, isoliert und vollständig charakterisiert (Schema 4.1).



Schema 4.1. Die versuchten Umsetzungen der Pyrrole **95c** und **100a** zu den AYCs **97** und **102** sowie die durch Deprotonierung tatsächlich erhaltenen Produkte **98** und **103**.

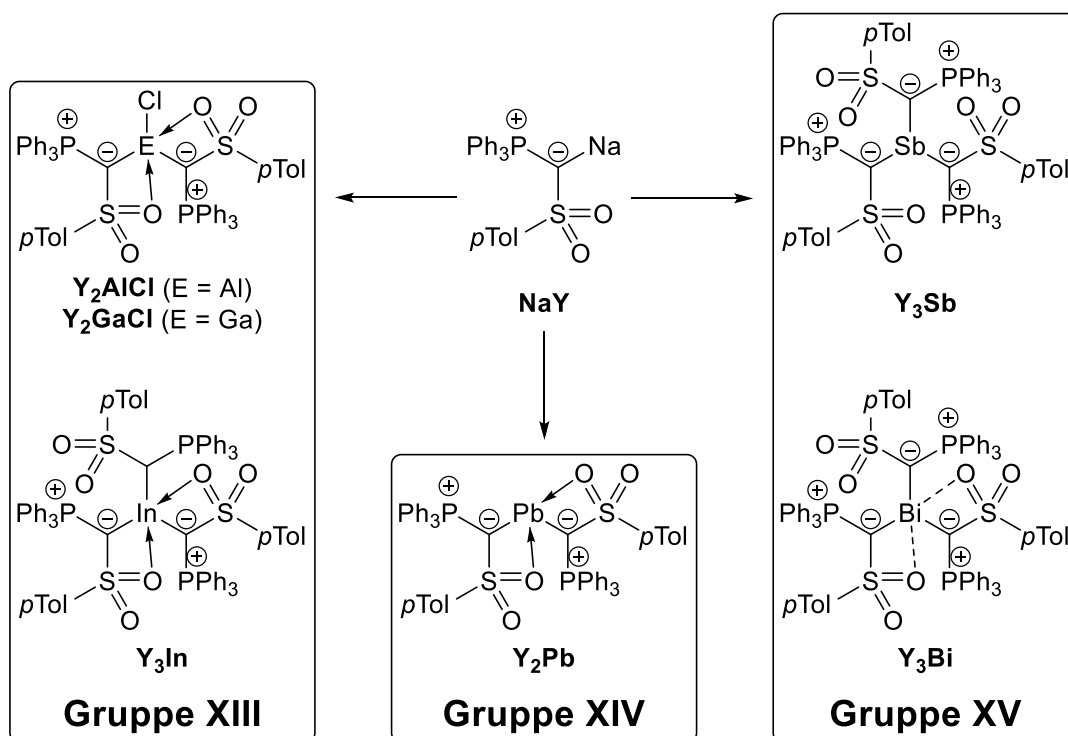
Allerdings führte die nachfolgende Deprotonierung nicht zu den erwarteten AYCs **97** oder **102**, sondern erfolgte in α -Position zum Heteroatom der Oniumgruppe. Das führte im Fall **95c** nach einer anschließenden COREY-JOHNSON-CHAYKOVSKY-Reaktion zum Sulfid **98** und im Fall von **100a** zum Ylid **103**. Um herauszufinden, ob gegenüber einer α - oder β -C–H-Aktivierung stabile Alkylgruppen an der Oniumgruppe möglich sind, wurden quantenchemische Rechnungen durchgeführt. Diese zeigten, dass insbesondere Adamantylgruppen gegenüber einer Deprotonierung stabil sein sollten.

Als nächstes wurde mittels DFT-Methoden die Stabilität von AYCs mit endocyclischen Oniumgruppen **A** gegenüber einer Ringöffnung zum korrespondierenden Alkin **A'** untersucht (Schema 4.2). Derartige Verbindungen **A** erwiesen sich insbesondere mit Sulfoniumgruppen sowohl thermodynamisch als auch kinetisch als sehr instabil. Im Gegensatz dazu führen Phosphoniumgruppen zu einer deutlich höheren Stabilität, wobei die höchste Stabilität imidazoliumsubstituierte Spezies aufwiesen. Von den untersuchten Spezies waren **P10**, **P12**, **I1** und **I2** im Vergleich zu den korrespondierenden Alkinen thermodynamisch stabiler, was sie zu vielversprechenden Synthesezielen macht.



Schema 4.2. Die untersuchte Ringöffnung von AYCs mit endocyclischen Oniumgruppen **A** zu den korrespondierenden Alkinen **A'** (links) und verschiedene AYCs, die sich in dieser Hinsicht als besonders stabil erwiesen (rechts).

Nicht nur amino(ylid)stabilisierte Carbene konnten bisher nicht isoliert werden. Auch für viele schwere Hauptgruppenelementverbindungen existieren bisher keine oder nur wenige Verbindungen mit Ylidsubstitution. Da sich bereits in vorhergehenden Arbeiten^[55,111] das Ylidiid **NaY** als ein geeignetes Reagenz herausgestellt hatte, um derartige Verbindungen zu erhalten, wurde es auch im Rahmen dieser Arbeit eingesetzt. Dabei konnten verschiedene ylidsubstituierte Verbindungen von Elementen der Gruppen XIII bis XV erhalten werden. (Schema 4.3).



Schema 4.3. Die Synthese von neuen ylidsubstituierten Hauptgruppenelementverbindungen.

Dabei sind die Verbindungen Y_2AlCl , Y_3In , und Y_3Bi die ersten Verbindungen der jeweiligen Metalle, die Ylide als Liganden tragen. Von allen Verbindungen war es außerdem möglich, die Molekülstruktur im Kristall zu bestimmen und sie somit strukturell zu charakterisieren. Es stellte sich unter anderem heraus, dass die hier genannten Verbindungen der Gruppe XIII im Gegensatz zu literaturbekannten ylidsubstituierten Bor-^[55,159,162,163] und Galliumverbindungen^[61] keinen Doppelbindungscharakter zwischen dem ylidischen Kohlenstoffatom und dem Zentralatom aufweisen. Gleiches gilt für das erste ylidsubstituierte Plumblyen Y_2Pb . Weiterhin konnten bei Y_3Bi schwache O–Bi-Wechselwirkungen identifiziert werden. Das Bismut ist hier also überraschenderweise hypervalent und steht damit im Kontrast zum leichteren Homologen Y_3Sb .

Ein weiteres Ziel war, die Verbindungen Y_2AlCl , Y_2GaCl , Y_3In , Y_3Sb und Y_3Bi zu Kationen des Typs $[\text{Y}_2\text{E}]^+$ umzusetzen, was nicht gelang. Allerdings konnte aus einer dieser Reaktionen das Galliumtrichloridaddukt des Ylidiids NaY in Form seines Dimers $\{\text{Na}[\text{Y} \rightarrow \text{GaCl}_3]\}_2$ als Nebenprodukt erhalten werden, was die Bestimmung der Donorstärke des Ylidiids NaY ermöglicht. Diese erwies sich als höher als jene gängiger Carbene und wahrscheinlich sogar Carbodiphosphorane.

Ein weiteres Kapitel der vorliegenden Arbeit beschäftigte sich mit der quantenchemischen Untersuchung der Struktur und Reaktivität von ylidsubstituierten Tetrylenen. Mit der Entdeckung von BERTRAND et al, dass Carbene mit geringer HOMO-LUMO- beziehungsweise

Singulett-Triplett-Aufspaltung in der Lage sind, Wasserstoff zu aktivieren,^[186] konnten niedervalente Hauptgruppenverbindungen wiederholt in der Aktivierung kleiner Moleküle eingesetzt werden.^[111,115,166,185,190,227] Um das Potential von ylidsubstituierten Tetrylenen hierbei auszuloten, wurde zunächst eine große Bandbreite dieser Verbindungen (Abbildung 4.1) optimiert und die für ihre Reaktivität bedeutsamen HOMO- und LUMO-Energien, sowie die Singulett-Triplett-Abstände berechnet. Dabei erwiesen sich zum einen die zweifach ylidsubstituierten Systeme $\mathbf{Y}^*_2\mathbf{E}$ als besonders starke σ -Donoren. Aber auch die mit **Py**-, **Pyr**- oder **B¹** und **B²** substituierten *Push-Pull*-Tetrylene wiesen vergleichsweise starke Donoreigenschaften bei kleinen HOMO/LUMO- und Singulett-Triplett-Abständen auf.

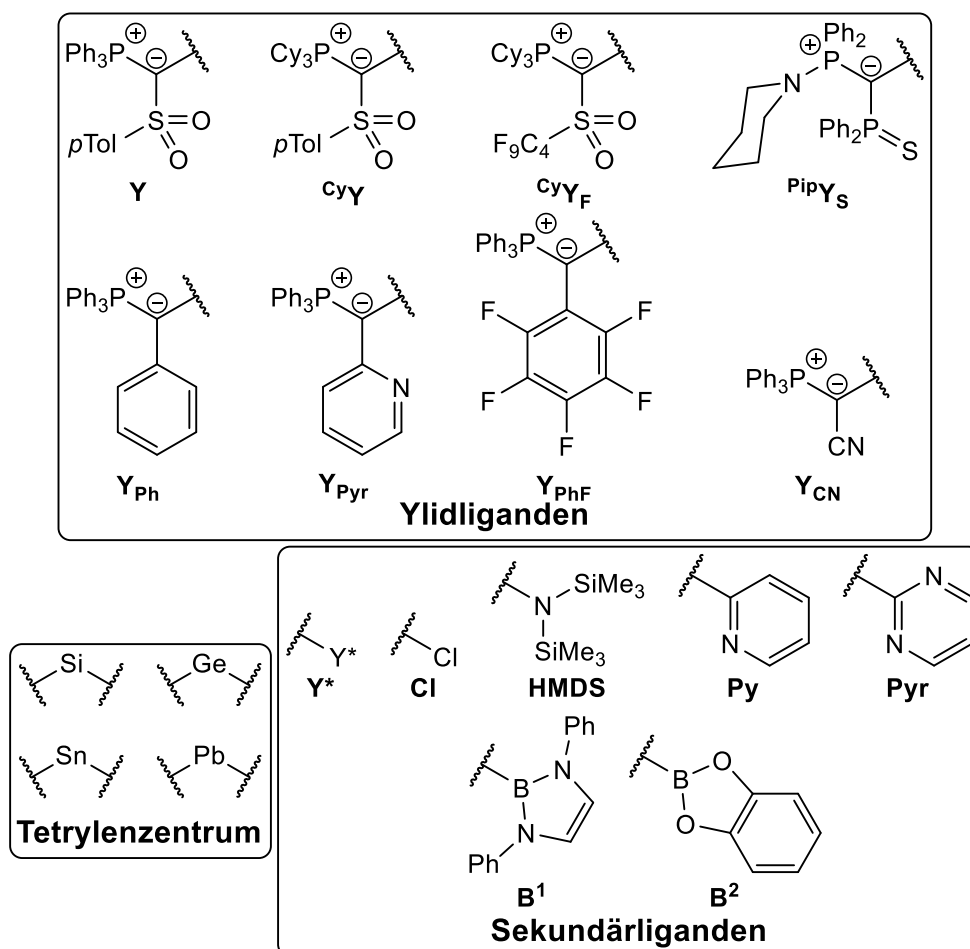


Abbildung 4.1. Die Bausteine, aus denen die acyclischen ylidsubstituierten Tetrylene zusammengesetzt sind, deren elektronischen Eigenschaften im Rahmen dieser Arbeit untersucht wurden.

Gleichermaßen wurden einige cyclische Systeme berechnet, wobei auch hier die boryl(ylid)-substituierten Verbindungen **VIII** und **IX** (Abbildung 4.2) starke Donoreigenschaften bei kleinen HOMO/LUMO- und Singulett-Triplett-Abständen aufwiesen.

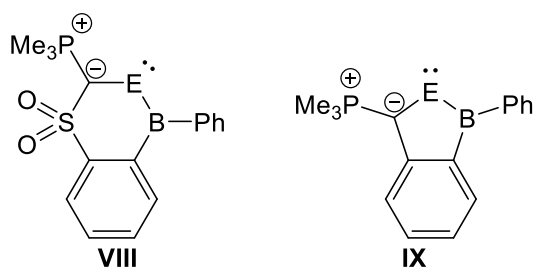
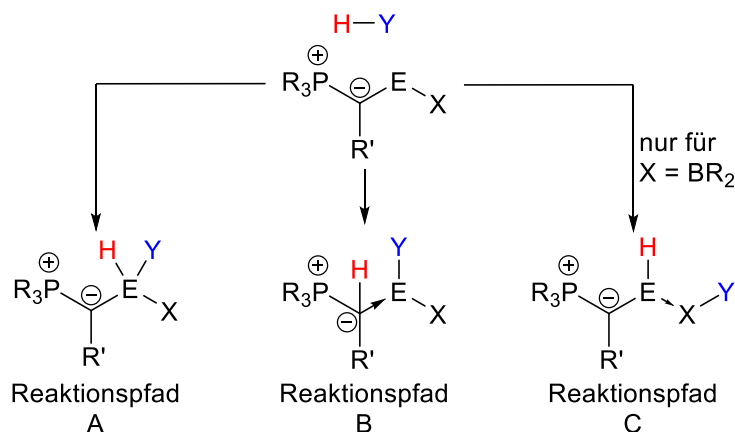


Abbildung 4.2. Die untersuchten und zur Bindungsaktivierung besonders geeigneten Tetrylene **VIII** und **IX** (E = Si, Ge, Sn).

Nach der ausführlichen Analyse der Strukturen und elektronischen Eigenschaften der ylidsubstituierten Tetrylene wurde ihre Eignung in der H–H-Bindungsaktivierung am Wasserstoffmolekül und in der O–H-Bindungsaktivierung am Phenol untersucht, wobei drei unterschiedliche Reaktionspfade betrachtet wurden (Schema 4.4). Zum einen die geminale Aktivierung am Tetrylenzentrum (Reaktionspfad A), des Weiteren die kooperative Aktivierung an der C–E-Einheit (Reaktionspfad B) und zuletzt im Falle der borylsubstituierten Systeme entlang der E–B-Bindung (Reaktionspfad C).

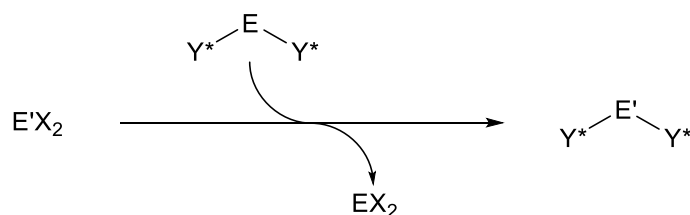


Schema 4.4. Die untersuchten Aktivierungen von H₂ (Y = H) und Phenol (Y = OPh) an ylidsubstituierten Tetrylenen.

Dabei stellte sich heraus, dass bei der Aktivierung über den Reaktionspfad A insbesondere die *Push-Pull*-Systeme wie **YSiB**¹, **YSiB**² oder **VIII**^{Si} die Reaktion begünstigen. Allerdings ist der Reaktionspfad B zumindest bei der Aktivierung von Phenol gegenüber dem Reaktionspfad A kinetisch deutlich bevorzugt, was die hohe Hydrolyseempfindlichkeit vieler ylidsubstituierter Hauptgruppenverbindungen erklärt. Besonders niedrige Reaktionsbarrieren wiesen hier unter anderem **VIII**^{Sn}, **IX**^{Si}, **IX**^{Ge} und **IX**^{Sn} auf.

Neben den Reaktivitäten in Bindungsaktivierungsreaktionen wurde auch die thermodynamische Eignung von ylidsubstituierten Tetrylenen als Ylidübertragungsreagenzien untersucht (Schema 4.5). Experimentelle Arbeiten^[181] hatten hier zuvor gezeigt, dass eine solche Transylidierung eine milde Alternative zur Synthese von ylidfunktionalisierten

Hauptgruppenverbindungen bietet. Im Rahmen dieser Arbeit wurden daher die Tendenzen der Triebkraft dieser Reaktion herausgearbeitet.



Schema 4.5. Die untersuchten Ylidübertragungsreaktionen auf Tetreldihalogenuide (E, E' = Si, Ge, Sn, Pb; X = Cl, Br, I; Y* = ^{Me}Y_{SO₂Ph}, Y, ^{Cy}Y, Y_{Ph}, Y_{CN}).

Dabei stellte sich heraus, dass sich vor allem schwere Tetrylene sehr gut als Edukte beziehungsweise Ylidtransferreagenzien eignen. Im Gegensatz dazu eignen sich insbesondere leichte Tetreldi- oder -tetrahalogenide als Ylidempfänger der Transylidierung. Von den Halogensubstituenten haben sich insbesondere Iodide als besonders zielführend herausgestellt. Thermodynamisch besonders günstige Reaktionen waren die Umsetzungen von (Y_{Ph})₂Pb mit Siliciumdiiodid zu (Y_{Ph})₂Si und Bleidichlorid oder von (^{Me}Y_{SO₂Ph})₂Pb und Zinntetraiodid zu (^{Me}Y_{SO₂Ph})₂SnI₂ und Bleidiiodid.

In der Realität führen Transylidierungen allerdings teilweise zu gänzlich neuen Strukturmotiven, wie die Strukturen der von HEIDAR DARMANDEH aus unserer Arbeitsgruppe synthetisierten ylid(chlorido)substituierten Tetrylendimere **107a**^{Ge} und **107b**^{Sn} zeigen.^[195] Als Grund hierfür konnte im Rahmen dieser Arbeit eine stark vom jeweiligen Zentralatom abhängige thermodynamische Stabilität der unterschiedlichen Konstitutionsisomere gefunden werden (Abbildung 4.3). Im Zuge dieser Untersuchungen wurde auch die elektronische Struktur der Verbindung **107a**^{Ge} analysiert, wobei sich anhand der Geometrie der Orbitale, der WIBERG Bindungsindizes und der natürlichen Ladungen herausstellte, dass diese entweder mit einer dativen (wie abgebildet) oder einer kovalenten E–E-Bindung, bei der die negative Ladung auf dem trivalenten Germanium liegt, beschrieben werden kann.

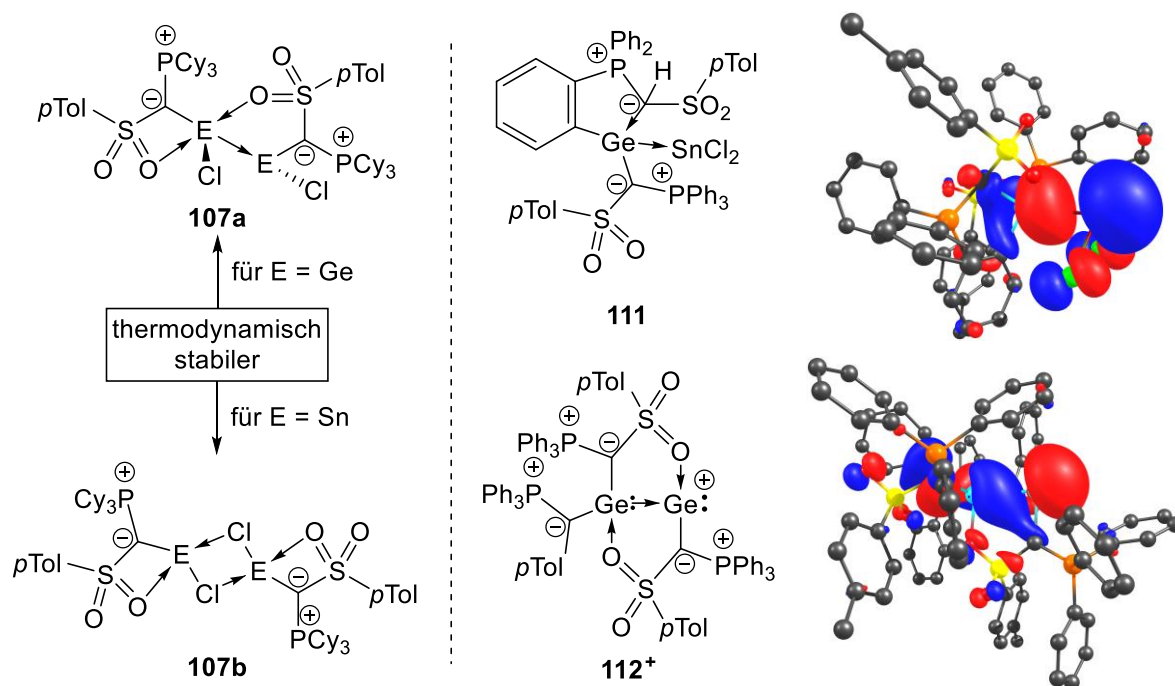


Abbildung 4.3. Die thermodynamische Stabilität der ylid(chlorido)substituierten Tetrylendimere **107a** und **107b** in Abhängigkeit vom Zentralatom (links), die Verbindungen **111** und **112⁺** (mitte) und das HOMO von **111** (oben rechts) und das des Kations **112⁺** (unten rechts).

Analog wurden die elektronischen Strukturen der von CHANDRAJEET MOHAPATRA ebenfalls durch Transylidierung synthetisierten Verbindungen **111** und **112⁺**^[195] untersucht. Dabei lassen sich beide entsprechend einer Analyse der Geometrie der Orbitale, der WIERG Bindungsindizes und der natürlichen Ladungen besser mittels einer dativen Bindung oder einer Einfachbindung zwischen den beiden zentralen Gruppe XIV-Elementen beschreiben. Eine Beschreibung mit einer Doppelbindung fällt hingegen weg, wie die entsprechenden HOMOs, die den freien Elektronenpaaren an einem der beiden Tetrylenzentren entsprechen, verdeutlichen (Abbildung 4.3).

Neben den ausführlichen Untersuchungen zu ylidsubstituierten Tetrylenen lag ein weiterer Fokus in dieser Arbeit auf der Untersuchung der elektronischen Struktur von ylidsubstituierten Phospheniumkationen. Diese sind formal isoelektronisch zu Carbenen und besitzend daher ebenfalls ein entsprechend großes Potential. Zentral in dieser Arbeit war dabei der Vergleich der von TOBIAS STALDER aus unserer Arbeitsgruppe synthetisierten Verbindungen **Y_{Ph}(Ph)P⁺** und **Y_{Ph}(Cy)P⁺**^[170] mit den Strukturen von **(Y_{Ph})₂P⁺** und **NHP⁺** (Abbildung 4.4).

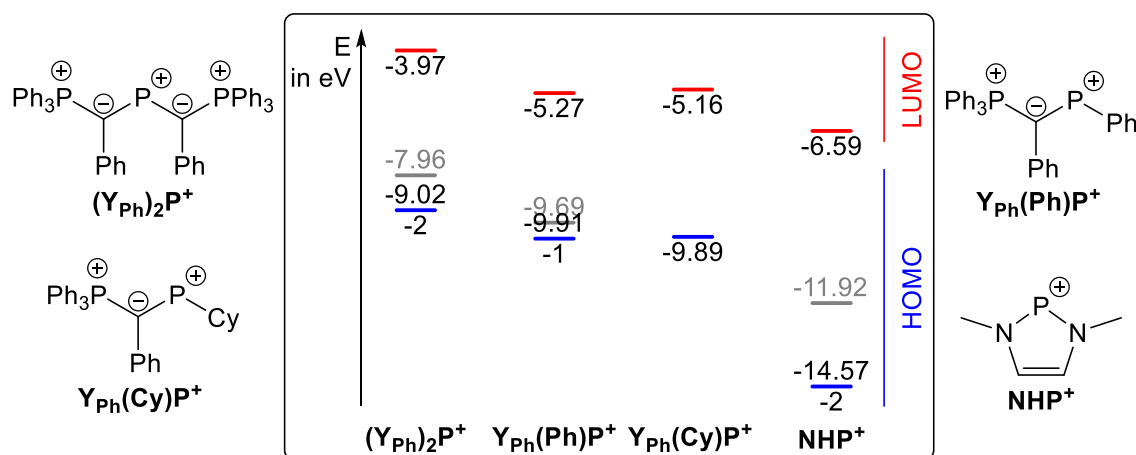
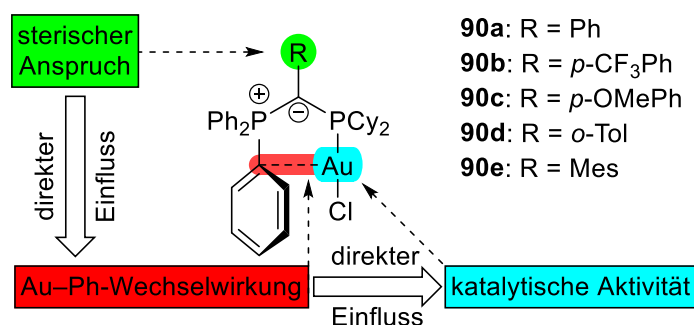


Abbildung 4.4. Die Phospheniumkationen, deren elektronische Strukturen im Rahmen dieser Arbeit untersucht wurden, und ihre HOMO- und LUMO-Orbitalenergien. In den Fällen, in denen das LUMO nicht die erwartete Geometrie am Zentralatom hat, ist dieses ausgegraut und die entsprechenden Orbitale zusätzlich angegeben.

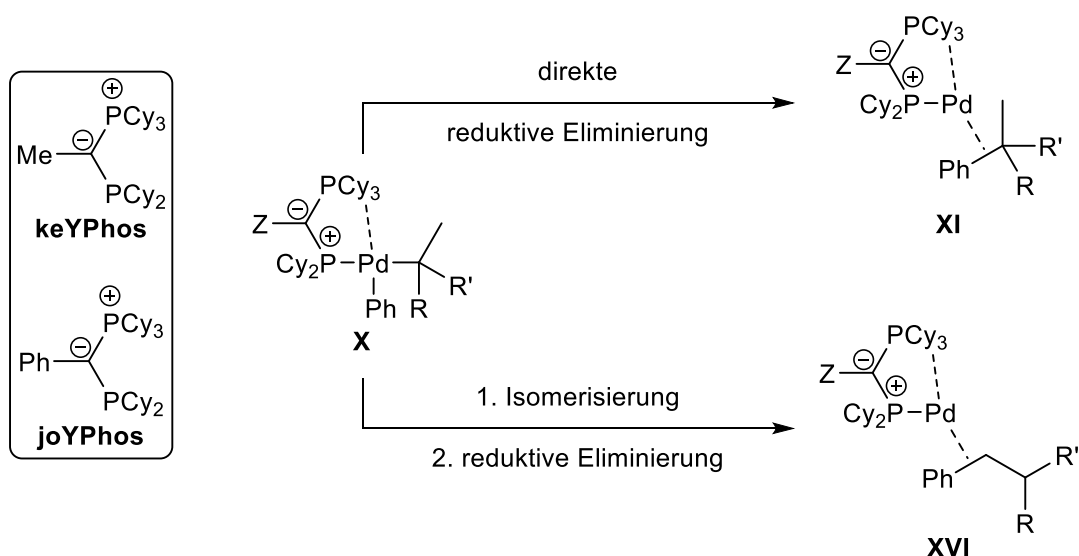
Insbesondere $(Y_{Ph})_2P^+$ erwies sich dabei durch eine hohe Orbitalenergie des HOMOs als guter σ -Donor, wobei alle Phospheniumkationen bessere σ -Donoreigenschaften und schlechtere π -Akzeptoreigenschaften aufwiesen als das *N*-heterocyclische Phospheniumion NHP^+ .

Ein weiteres Teilprojekt dieser Arbeit beschäftigte sich mit der Katalyse mittels ylidsubstituierter Phosphanliganden (YPhos). Diese zeigten in vorherigen Arbeiten durch ihren Elektronenreichtum außerordentliche Reaktivitäten in Gold- und Palladiumkatalysierten Reaktionen. Dennoch gibt es große Unterschiede zwischen den einzelnen Liganden. So hatten Studien von JENS HANDELMANN aus unserer Arbeitsgruppe dabei insbesondere in gold(I)katalysierten Hydroaminierungen gezeigt, dass die Systeme **90a–c** eine deutlich geringere Aktivität aufwiesen als die Komplexe **90d** und **90e** (Schema 4.6).^[171] Bei Analysen im Rahmen dieser Arbeit stellte sich dabei heraus, dass die Elektronendichte am bindungskritischen Punkt der Gold–Phenyl-Wechselwirkung mit zunehmendem sterischem Anspruch des Substituenten im Rückgrat zunimmt, die Bindung wird entsprechend stärker. Das korreliert mit den von JENS HANDELMANN aus unserer Arbeitsgruppe im Experiment beobachteten Aktivitäten.^[171]



Schema 4.6. Die untersuchten YPhos-substituierten Gold-Komplexe **90a–e**.

Gold(I)katalysierte Hydroaminierungen sind allerdings nicht die einzigen Reaktionen, in denen der Einfluss von YPhos-Liganden im Rahmen dieser Arbeit untersucht wurde. Ein anderer Fall war die von THORSTEN SCHERPF aus unserer Gruppe untersuchte palladiumkatalysierte MURAHASHI-FERINGA-Kupplung. Dieser beobachtete im Experiment bei Verwendung von joYPhos deutlich mehr Isomerisierung als bei der Verwendung von keYPhos.^[208] Zum Verständnis dieses Verhaltens wurde im Rahmen dieser Arbeit quantenchemisch die gewünschte direkte reduktive Eliminierung von **X** zu **XI** gegenüber einer reduktiven Eliminierung zu **XVI** nach vorheriger Isomerisierung untersucht (Schema 4.7). Im Fokus stand dabei insbesondere der Einfluss des Liganden (joYPhos oder keYPhos) und des zu koppelnden Alkyls (Ethyl, *iso*-Propyl, *sec*-Butyl oder *tert*-Butyl) auf die Isomerisierungstendenzen von letzterem.



Schema 4.7. Die verwendeten keYPhos- und joYPhos-Liganden und die untersuchten Mechanismen der direkten reduktiven Eliminierung gegenüber der reduktiven Eliminierung nach zuvor erfolgter Isomerisierung bei der MURAHASHI-FERINGA-Kupplung (Z = Me, Ph; R = H, Me; R' = H, Me).

Hierbei konnte gezeigt werden, dass mit steigendem Substitutionsgrad des zu koppelnden Alkyls die Isomerisierung gegenüber der direkten reduktiven Eliminierung bevorzugt wird (Abbildung 4.5), was sehr gut mit den beobachteten Ergebnissen von THORSTEN SCHERPF korreliert.^[208] Am deutlichsten wird dabei die Barriere für die Rotation des beeinflusst. Das steht im Kontrast zu einer analogen durch einen NHC-basierten Katalysator ermöglichten Reaktion,^[209,210] bei der nur die Barrieren der reduktiven Eliminierung und der β -Hydrid-Eliminierung entscheidend sind.

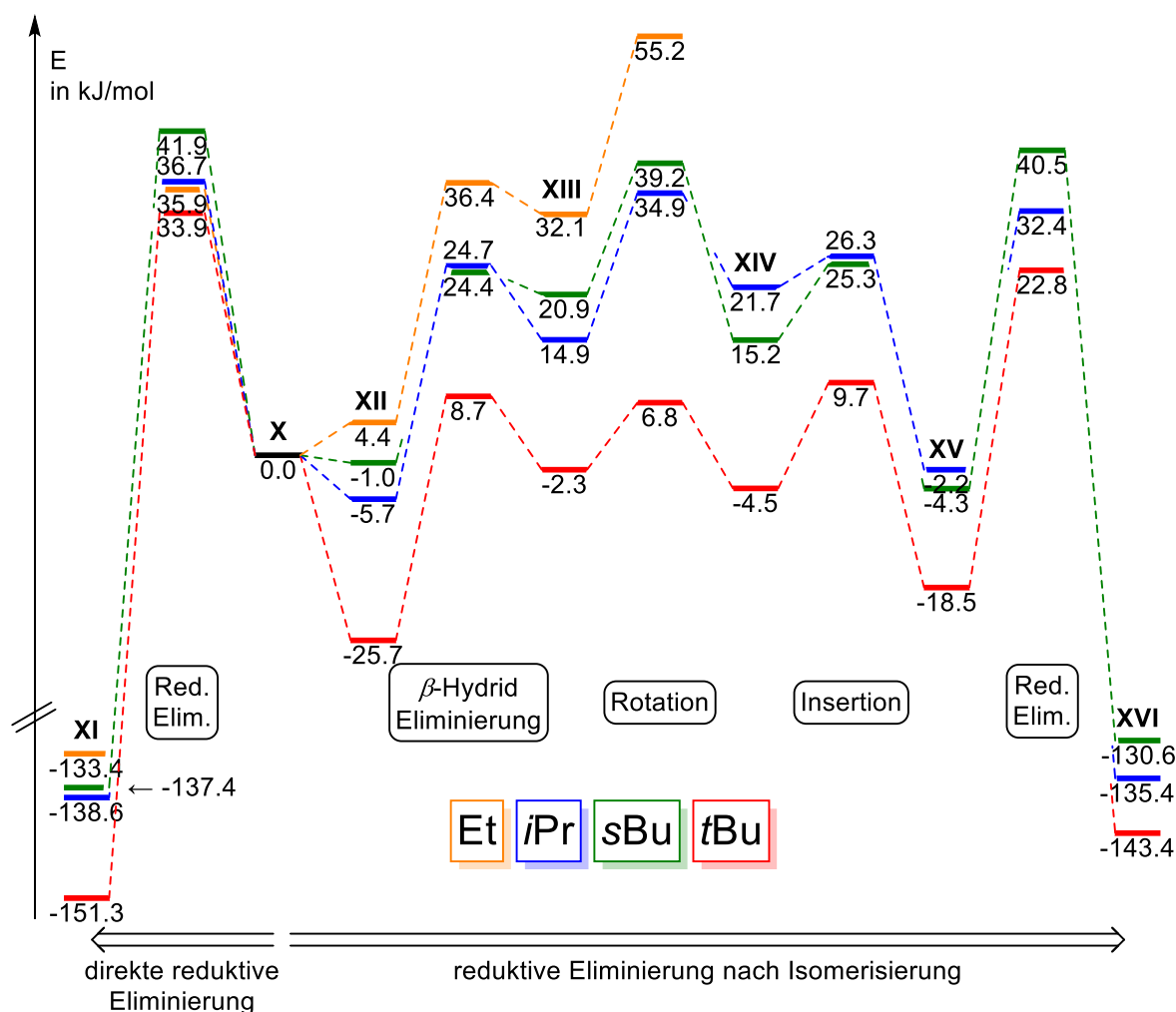


Abbildung 4.5. Energien der direkten Eliminierung der joYPhos–Palladiumkomplex-katalysierten MURAHASHI-FERINGA-Kupplung mit verschiedenen Alkylgruppen gegenüber der reduktiven Eliminierung nach vorheriger Isomerisierung.

Weiterhin konnten die experimentellen Ergebnisse^[208] widerspiegelt werden, wonach keYPhos–Palladiumkomplex-katalysierte Reaktionen eine höhere Tendenz zur Isomerisierung aufweisen als die analogen joYPhos–Palladiumkomplex-katalysierten Reaktionen (Abbildung 4.5), wenngleich auch die Abhängigkeit der Reaktion von anderen Einflüssen wie dem verwendeten Halogenid des jeweiligen Arylhalogenidprecursors nicht mit abgebildet werden konnte.

Der letzte Teil der vorliegenden Arbeit beschäftigte sich mit der Untersuchung der elektronischen Struktur des Carbodiphosphorans **91** sowie einiger aus diesem abgeleiteter Verbindungen (Abbildung 4.6). So ließen Untersuchungen von ALEXANDER KROLL aus unserer Arbeitsgruppe beispielsweise vermuten, dass dieses ein überraschend starker Donor ist und als solcher im Rhodiumkomplex **121** eine Doppelbindung ausbildet.^[174]

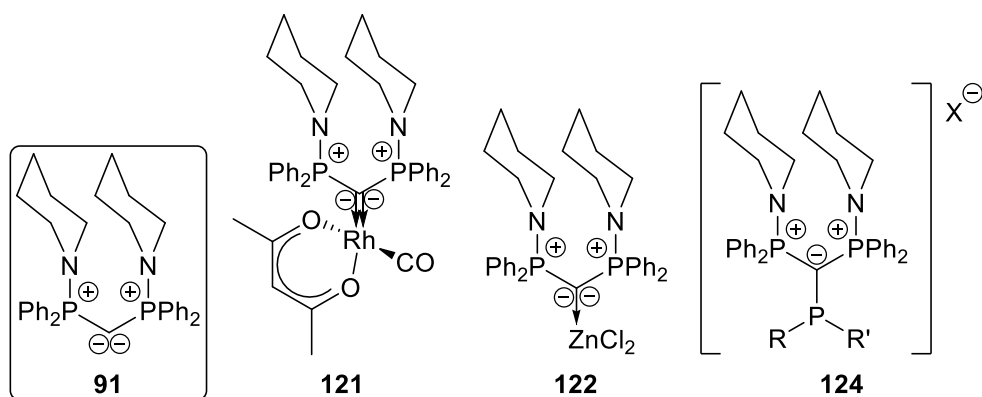
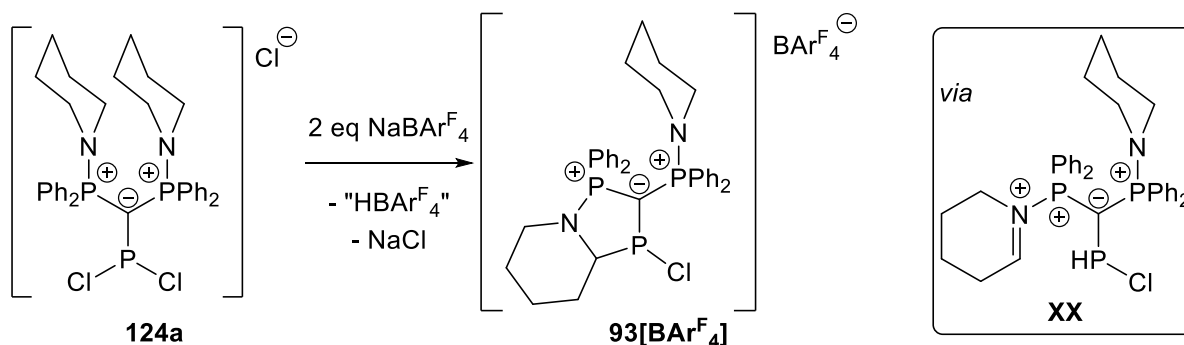


Abbildung 4.6. Das Carbodiphosphoran **91** sowie seine Komplexe **121**, **122** und **124** (R = Cl, Cy, Ph; R' = Cl, Ph; X = Cl, Br, I), die im Rahmen dieser Arbeit quantenchemisch untersucht wurden.

Bei der quantenchemischen Untersuchung des Carbodiphosphorans **91** und seiner Verbindungen im Rahmen dieser Arbeit wies dieses dabei eine unerwartet niedrige natürliche Ladung am zentralen Kohlenstoffatom auf und sollte entsprechend als starker C-Donor fungieren können. Als solcher bildet es im Rhodiumkomplex **121** zwei C–Rh- π -Bindungen, im Zinkkomplex **122** hingegen nur eine C–Einfachbindung aus. Im Zinkkomplex **122** selbst erwies sich weiterhin eine coplanare Anordnung der Cl–Cl–C- und der Zn–P–P-Ebene thermodynamisch deutlich ungünstiger als eine verdrehte. In den Verbindungen **124** stellte sich heraus, dass das Carbodiphosphoran kaum Einflüsse auf die elektronischen Eigenschaften des P(III)-Zentrums hat. Diese werden hauptsächlich durch die weiteren Liganden des Phosphors gesteuert.

ALEXANDER KROLL hat die Kationen **124** nicht nur synthetisiert, sondern auch deren Reaktivität untersucht.^[175] Dabei erhielt er beim Versuch einer Chloridabstraktion allerdings nicht das erwartete Dikation, sondern den Bicyclus **93**[Bar^{F4}] (Schema 4.8).^[175] Das ist insofern ungewöhnlich, als dass es bei der Reaktion zu einer C–H-Aktivierung an einem sp³-hybridisierten Kohlenstoffatom gekommen sein muss. In der Literatur sind hingegen primär C–H-Aktivierungen an sp²-hybridisierten Kohlenstoffatomen bekannt.^[212,226] Im Rahmen dieser Arbeit konnte der entsprechende Reaktionsmechanismus aufgeklärt werden. Dabei stellte sich heraus, dass dieser mit hoher Wahrscheinlichkeit über die Bildung einer Reihe von dikationischen Spezies, die durch Chloridabstraktion von **124a** gebildet werden, abläuft. Im Zentrum der nachfolgenden Cyclisierung des resultierenden Phospheniumions steht ein Hydridübertrag zum Iminiumion **XX** (Schema 4.8). Abschließend konnte außerdem gezeigt werden, dass die Aktivierung der C_{sp3}–H-Bindung kinetisch gegenüber einer potenziellen Aktivierung der C–H-Bindungen der Phenylringe deutlich bevorzugt ist.



Schema 4.8. Die im Rahmen dieser Arbeit quantenchemisch untersuchte Umsetzung der Verbindung **124a** zu **93[BArF₄]** und das dadurch identifizierte Intermediat **XX**.

Ziel dieser Arbeit war es, systematische Einblicke in die Chemie ylidsubstituierter Hauptgruppenelementverbindungen zu geben und Zusammenhänge zwischen ihrer Struktur und Reaktivität auszuarbeiten. Mit der Isolierung und Charakterisierung von über zehn bisher literaturunbekannten Verbindungen, der systematischen Untersuchung von elektronischen Strukturen und Eigenschaften diverser Verbindungsklassen sowie der quantenchemischen Aufklärung von mehreren Reaktionsmechanismen wurde dazu ein großer Beitrag geleistet. Nichtsdestotrotz sind die Möglichkeiten, die die Chemie ylidsubstituierter Hauptgruppenverbindungen bietet, noch lange nicht ausgeschöpft. So sind die Reaktivitäten von Verbindungen wie beispielsweise **Y₂GaCl**, **Y₃In** oder **Y₃Bi** und damit auch ihre potentiellen Einsatzmöglichkeiten bisher nur eingeschränkt untersucht worden. Ebenso bietet das Feld der ylidsubstituierten Tetrylene noch viele Möglichkeiten. So ist beispielsweise ihr Einsatz als Ligand und somit Carbenalternative in der Übergangsmetallchemie noch komplett unerforscht. Ein weiterer Fokus der Untersuchungen in dieser Arbeit lag auf ylidsubstituierten Trielen, Tetrelen (inklusive Tetrylenen) und Pentelen. Nicht untersucht wurden hingegen ylidsubstituierte Chalkogene oder Halogene. Auch hier bieten sich noch viele Ansatzpunkte für weitere Studien.

5 Experimentelles

5.1 Spezielle Arbeitstechniken

Aufgrund der Hydrolyse- und Oxidationsempfindlichkeit vieler Verbindungen wurden sämtliche Synthesen, soweit nicht anders beschrieben, unter Zuhilfenahme von gängigen Schlenk- (Argonatmosphäre: Reinheit 5.0, 200 mbar Überdruck) und Glove-Box-Techniken (Argonatmosphäre: Reinheit 5.0, 200 mbar Überdruck) durchgeführt. Alle verwendeten Glasgeräte wurden vor der Benutzung bei 130 °C im Trockenschrank gelagert und unmittelbar vor Verwendung heiß zusammengebaut, evakuiert und anschließend mit Argon geflutet. Alternativ wurden die Glasgeräte zusammengebaut und drei Mal mittels eines Heißluftgebläses erhitzt, evakuiert und anschließend mit Argon geflutet.

Das Einwiegen, Abfüllen und Überführen von luftempfindlichen Feststoffen erfolgte in der Handschuhbox, luftempfindliche Flüssigkeiten wurden mittels Teflonkanülen oder Einwegspritzen durch ein Septum in die Reaktionsgefäße gefüllt.

NMR-Spektren von sauerstoff- oder oxidationsempfindlichen Substanzen wurden in speziellen J. YOUNG-NMR-Röhrchen aufgenommen.

5.2 Lösungsmittel und Reagenzien

Sämtliche Lösungsmittel und Reagenzien wurden entweder durch die Firmen ABCR, ACROS, ALFA AESAR, EUROISOTOP, MERCK, ROCKWOOD LITHIUM, SIGMA-ALDRICH oder TCI bezogen oder nach bekannten Synthesemethoden dargestellt.

Lösungsmittel für luft- und hydrolyseempfindliche Substanzen wurden vor Gebrauch entweder über ein *Solvent Purification System* (SPS 800) der Firma MBRAUN getrocknet und entgast (Acetonitril, Dichlormethan, *n*-Hexan, *n*-Pentan, Tetrahydrofuran, Toluol). Alternativ wurden die Lösungsmittel (*ortho*-Difluorbenzol, deuterierte Lösungsmittel) über Molsieb getrocknet^[228] und mittels eines Argonstroms entgast.

Trockene Lösungsmittel wurden unter Schutzgasatmosphäre auf 3 Å- oder 4 Å-Molsieb gelagert und der Wassergehalt regelmäßig mittels KARL-FISCHER-Titration^[229] überprüft.

5.3 Verwendete Analysemethoden und -geräte

Elementaranalysen (EA)

Elementaranalysen wurden von LISA FELDHAUS, MANUELA WINTER oder HARISH PARALA mit einem *vario MICRO cube* der Firma ELEMENTAR gemessen.

Infrarotspektroskopie (IR)

Infrarotspektren wurden mit einem *ThermoScientific Nicolet iS5* der Firma THERMOFISCHER mittels abgeschwächter Totalreflexion aufgenommen.

Kernresonanzspektroskopie (NMR)

Sämtliche NMR-Spektren wurden auf einem *Bruker AV III 400* (Messfrequenz: ^1H NMR: 400.3 MHz, $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR: 100.7 MHz, $^{11}\text{B}\{^1\text{H}\}$ NMR: 162.1 MHz, ^{19}F NMR: 376.65 MHz, ^{31}P NMR: 162.1 MHz) aufgenommen. Als interner Standard wurde das Signal der Restprotonen des deuterierten Lösungsmittels (^1H NMR) beziehungsweise das Signal der Kohlenstoffatome des deuterierten Lösungsmittels (^{13}C NMR) verwendet.^[179]

Bereits bekannte Verbindungen wurden durch einen Vergleich mit Literaturwerten ausgewertet, bei unbekannten Verbindungen wurden $^1\text{H}^1\text{H}$ COSY-, $^1\text{H}^{13}\text{C}$ HMQC-, $^1\text{H}^{13}\text{C}$ HMBC-, ^1H DOSY-^[85] sowie $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ DEPT135-Experimente durchgeführt.

Massenspektrometrie (MS)

Hochaufgelöste Massenspektren mittels positiver Elektronenstoßionisation (EI+) wurden von LISA FELDHAUS mittels eines *AccuTOF GCv* der Firma JEOL aufgenommen.

Röntgenstrukturanalyse

Einkristallröntgenstrukturanalysen wurden von HEIDAR DARMANDEH, ALEXANDER KROLL, ILJA RODSTEIN, THORSTEN SCHERPF, CHRISTOPHER M. SCHWARZ oder JANA-ALINA ZUR mit einer *Supernova* der Firma OXFORD unter Verwendung von monochromatischer Cu-K α -Strahlung und eines *CCD plate detectors* bei 100 K unter Stickstoffkühlung durchgeführt. Die Einkristalle wurden mit einem Inertöl an einer Schlaufe befestigt.

Zur Datensammlung wurde das Programm *CrysAlisPro* der Firma AGILENT TECHNOLOGIES verwendet, die Strukturverfeinerung erfolgte mittels der Programme SHELXL14 und SHELXL18.^[230] Die graphische Darstellung erfolgte mittels der Programme *Diamond 4.4.1*^[231] der Firma CRYSTAL IMPACT, *POV-Ray 3.7.0.msvc10.win64*^[232] von PERSISTENCE OF VISION und *GIMP 2.10.12*.^[233]

Schmelzpunkte

Die Schmelzpunkte der Substanzen wurden mittels eines *SMP30* der Firma STUART gemessen. Luftempfindliche Substanzen wurden unter Schutzgasatmosphäre in abgeschmolzenen Glaskapillaren vermessen, ansonsten wurden auf einer Seite geöffneten Kapillaren verwendet. Sämtliche Schmelzpunkte sind unkorrigiert.

5.4 DFT-Rechnungen

Sämtliche Rechnungen wurden ohne Symmetrieeinschränkungen durchgeführt. Wenn es nicht möglich war, Startkoordinaten aus Molekülstrukturen im Kristall zu beziehen, wurden wahlweise *GaussView 3.0*^[234] oder *GaussView 6.0*^[235] genutzt. Die Rechnungen wurden wahlweise mit den Programmpaketen *Gaussian09 Revision E.01*,^[236] *Gaussian16 Revision B.01*^[237] oder *Gaussian16 Revision C.01*^[238] durchgeführt. In sämtlichen Energieoptimierungen des Kapitels 3.1.1 wurde Dichtefunktionaltheorie^[239] mit PBE0^[240]/def2svp,^[241] GRIMMES D3-Dispersionskorrektur und BECKE-JOHNSON-Dämpfung^[242] verwendet. In den Kapiteln 3.1.2, 3.2, 3.3, 3.4, 3.5, 3.6, 3.7^{cc} wurde PW6B95D3^[243] als Funktional und def2svp^[241] als Basissatz verwendet, in den Kapiteln 3.6^{dd} und 3.7^{ee} waren dies BP86^[244,245] und def2svp.^[241] Um die Natur der Strukturen zu untersuchen, wurden Harmonische-Schwingungsfrequenz-Analysen auf jeweils gleichem theoretischen Niveau durchgeführt.^[246] Im Falle von Grundzuständen wurden keine, im Falle von Übergangszuständen eine der Translationsbewegung entsprechende imaginäre Frequenz beobachtet. Zusätzlich wurden *single-point* Energien berechnet. Im Kapitel 3.1.1 erfolgte dies mittels PBE0^[240]/def2tzvp,^[241] in den Kapiteln 3.1.2, 3.2, 3.3, 3.4, 3.5, 3.6, 3.7^{cc} mittels PW6B95D3^[243]/def2tzvp^[241] und in den Kapiteln 3.6^{dd} und 3.7^{ee} mittels BP86^[244,245] und def2svp.^[241]

In allen Fällen wurden für Antimon das MWB46,^[247] für Bismut das MWB78,^[248] für Blei das MWB78,^[248] für Gold das MWB60,^[249] für Indium das MWB46,^[247] für Palladium das MWB28^[249] für Rhodium das MWB28^[249] und für Zinn das MWB46^[247] ECP wie in *Gaussian* implementiert verwendet.

In einigen Fällen wurden zusätzlich *Single-Point* Energien auf demselben theoretischen Niveau mittels dem polarisierbarem Kontinuummodell (PCM) unter Zuhilfenahme des *integral equation formalism variants* (IEFPCM),^[250] wie es in *Gaussian09* oder *Gaussian16* für das jeweilige Lösungsmittel implementiert ist, berechnet.

Die Energien in Kapitel und 3.1.1 und von den Bindungsaktivierungen in Kapitel 3.2.2 wurden um 7.925867 kJ/mol pro Spezies korrigiert, um diese auf eine 1 M Standardlösung umzurechnen.

Die Darstellung der berechneten Strukturen erfolgte mittels der Programme *Chemcraft*^[251] und *GIMP 2.10.12*.^[233]

^{cc} Für die mechanistischen Untersuchungen.

^{dd} Für die Summe der Cl–Ga–Cl-Winkel in $\{\text{Na}[\text{Y} \rightarrow \text{GaCl}_3]\}_2$.

^{ee} Für die Untersuchung der elektronischen Eigenschaften.

NBO-Analysen

NBO^[30,252]-Analysen der optimierten Strukturen wurden mittels des *NBO7*-Programms durchgeführt.^[253] Vorgegebene Parameter wurden dabei nicht verändert.

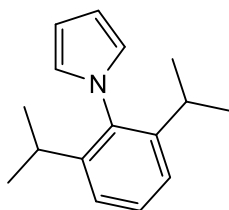
QTAIM

Die Analyse der bindungskritischen Punkte^[254] und die elektronischen Eigenschaften an diesen wurden mittels *Quantumtheory of Atoms in Molecules* (QTAIM)^[254,255] auf Basis der elektronischen Struktur der *Single Point*-Rechnung mittels des Programms *Multiwfn* durchgeführt.^[256] Abbildungen zu den bindungskritischen Punkten wurden ebenfalls mit diesem Programm erstellt.^[256]

5.5 Synthesen der Verbindungen

5.5.1 Synthesen der literaturbekannten Verbindungen

N-(2,6-Diisopropylphenyl)-pyrrol **94**



Die Synthese erfolgte nach einer leicht modifizierten Literaturvorschrift und nicht unter Argon-atmosphäre.^[176]

7.3 mL (7.47 g, 85.3 mmol, 1.1 eq) Tetrahydro-2,5-dimethoxyfuran und 10.0 mL (9.40 g, 53.0 mmol, 1.0 eq) 2,6-Diisopropylaniline wurden in 20 mL Eisessig gelöst und unter Rückfluss für 50 Minuten bei 130 °C gerührt, wobei sich die Lösung dunkelbraun färbte. Im Anschluss erfolgte die Zugabe von 200 mL Wasser und die wässrige Phase wurde dreimal mit je 100 mL Dichlormethan extrahiert. Die vereinten organischen Phasen wurden mit 150 mL konzentrierter Natriumcarbonatlösung extrahiert und das Lösungsmittel im Anschluss im Vakuum entfernt. Der resultierende dunkelbraune Feststoff wurde über Kieselgel 60 (Laufmittel: Cyclohexan/Essigsäureethylester 9:1) filtriert und das Lösungsmittel im Vakuum entfernt. 25.1 g (110.3 mmol) des Produkts konnten nach mehrmaliger Kristallisation aus Methanol in Form eines farblosen, kristallinen Feststoffs erhalten werden.

Auf diese Weise wurden ebenfalls zur Röntgenstrukturanalyse geeignete Einkristalle erhalten.

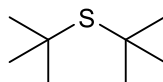
Ausbeute: 83 % (25.07 g, 110.3 mmol).

^1H NMR (400.3 MHz, RT, CDCl_3): δ = 1.14 (d, $^3J_{\text{HH}}$ = 6.9 Hz, 12 H, 4 CH_3), 2.44 (hept, $^3J_{\text{HH}}$ = 6.9 Hz, 2 H, CHMe_2), 6.32 (t, $^3J_{\text{HH}}$ = 2.1 Hz, 2 H, 2 CH_{Pyr}), 6.64 (t, $^3J_{\text{HH}}$ = 2.1 Hz, 2 H, 2 CH_{Pyr}), 2.72-2.74 (m, 2 H, $m\text{-CH}_{\text{Ar}}$), 7.34-7.43 (m, 1 H, $p\text{-CH}_{\text{Ar}}$) ppm.

$^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (100.7 MHz, RT, CDCl_3): δ = 24.7 (4 CH_3), 28.2 (2 CHMe_2), 108.3 (2 CH_{Ar}), 123.2 (2 CH_{Ar}), 123.5 (2 CH_{Ar}), 129.0 ($p\text{-CH}_{\text{Ar}}$), 137.1 ($i\text{-C}_{\text{q, ArN}}$), 147.1 (2 $o\text{-C}_{\text{q, Ar}}$) ppm.

Die Daten entsprechen den Literaturdaten.^[176]

Di-tert-butylsulfid



Die Synthese erfolgte nach einer leicht modifizierten Literaturvorschrift und nicht unter Argon-atmosphäre.^[257]

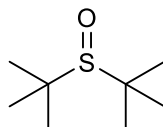
Zu einer Lösung von 225 g konzentrierter Schwefelsäure und 65 g Wasser wurden unter Eisbadkühlung und Rühren 50.4 g (680 mmol, 2.3 eq) *tert*-Butanol gegeben. Im Anschluss erfolgte unter gleichen Bedingungen die Zugabe von 27.0 g (300 mmol, 1.0 eq) *tert*-Butanthiol zu dieser Lösung. Die Lösung wurde unter Erwärmen auf Raumtemperatur über eine Stunde gerührt, anschließend auf 500 g Eis gegeben und mit 300 mL Diethylether extrahiert. Die wässrige Phase wurde im Anschluss noch zweimal mit je 300 mL Diethylether extrahiert und die vereinten organischen Phasen anschließend mit 400 mL einer gesättigten Natriumhydrogencarbonatlösung extrahiert, wobei es zu einer starken Gasentwicklung kam. Die wässrige Phase wurde im Anschluss noch zweimal mit je 150 mL Diethylether extrahiert und die vereinten organischen Phasen über Magnesiumsulfat getrocknet. Nach entfernen des Lösungsmittels wurde das Rohprodukt in einem Bereich zwischen 162 und 171 mbar destilliert, wobei die Kopftemperatur 91 – 94 °C betrug. 27.5 g (188 mmol) des Produkts wurden in Form einer farblosen Flüssigkeit mit unangenehmem Geruch erhalten.

Ausbeute: 63 % (27.5 g, 188 mmol)

^1H NMR (400.3 MHz, RT, CDCl_3): δ = 1.42 (s, 18 H, 6 CH_3) ppm.

$^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (100.7 MHz, RT, CDCl_3): δ = 33.3 (6 CH_3), 45.7 (2 C_{q}) ppm.

Di-tert-butylsulfoxid



Die Synthese erfolgte nach einer modifizierten Literaturvorschrift und nicht unter Argon-atmosphäre.^[258]

Zu einer Lösung von 7.5 g (51.3 mmol, 1.0 eq) Di-*tert*-butylsulfid in 60 mL Eisessig wurden unter Eisbadkühlung und Rühren 1.6 mL (1.7 g, 51.3 mmol, 0.3 eq) einer 30 %igen Wasserstoffperoxidlösung gegeben. Die resultierende Lösung wurde über 20 Stunden bei Raumtemperatur gerührt und flüchtige Substanzen im Vakuum entfernt. Der Rückstand wurde in 50 mL einer 5:1 Mischung von *n*-Hexan und Dichlormethan aufgenommen und dreimal mit je 150 mL einer gesättigten Natriumhydrogencarbonatlösung extrahiert. Die vereinigten wässrigen Phasen wurde ebenfalls dreimal mit je 100 mL einer 5:1 Mischung von *n*-Hexan und Dichlormethan extrahiert. Das Lösungsmittel wurde im Vakuum entfernt und 1.8 g (10.8 mmol) des Produkts in Form eines farblosen Feststoffs erhalten.

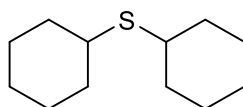
Ausbeute: 21 % (1.8 g, 10.8 mmol)

^1H NMR (400.3 MHz, RT, CDCl_3): δ = 1.33 (s, 18 H, 6 CH_3) ppm.

$^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (100.7 MHz, RT, CDCl_3): δ = 25.7 (6 CH_3), 57.3 (2 C_q) ppm.

Die Daten entsprechen den Literaturdaten.^[259]

Dicyclohexylsulfid



Die Synthese erfolgte nach einer modifizierten Literaturvorschrift.^[258]

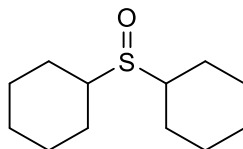
Zu einer Grignardlösung, hergestellt aus 8.50 g (349.7 mmol, 1.00 eq) Magnesium und 41.5 mL (41.5 g, 394.7 mmol, 1.00 eq) Cyclohexylchlorid in 50 mL Diethylether, wurde über 75 Minuten bei 0 °C eine Lösung von 25.7 mL (42.0 g, 353.2 mmol, 1.01 eq) Thionylchlorid in 50 mL Diethylether getropft. Nach weiteren 30 Minuten wurden langsam 100 mL halbkonzentrierte Salzsäure zugegeben und die Phasen getrennt. Die organische Phase wurde anschließend zweimal mit je 100 mL Diethylether extrahiert und die vereinigten organischen Phasen anschließend mit 150 mL Wasser. Nach Extraktion der wässrigen Phase mit zweimal je 100 mL Diethylether wurden die vereinten organischen Phasen mit 100 mL 10 %iger Kaliumhydroxidlösung extrahiert. Die wässrige Phase wurde zweimal mit je 100 mL Diethylether extrahiert und die vereinten organischen Phasen im Vakuum eingeeengt. Die resultierende Lösung wurde für 15 Minuten mit 20 %iger Kaliumhydroxidlösung zum Sieden erhitzt und im Anschluss dreimal mit je 50 mL Diethylether extrahiert. Nach Entfernen des Lösungsmittels im Vakuum wurden 24.0 g (121.0 mmol) des Produkts in Form eines farblosen Feststoffs erhalten.

Ausbeute: 35 % (24.0 g, 121.0 mmol).

^1H NMR (400.3 MHz, RT, CDCl_3): δ = 1.16-1.31 (m, 8 H, 8 CH_2), 1.48-1.73 (m, 8 H, 8 CH_2), 1.82-1.92 (m, 4 H, 4 CH_2), 2.61-2.71 (m, 2 H, 2 CH) ppm.

Die Daten entsprechen den Literaturdaten.^[260]

Dicyclohexylsulfoxid



Die Synthese erfolgte nach einer modifizierten Literaturvorschrift und nicht unter Argonatmosphäre.^[258]

Zu einer Lösung von 24.0 g (121.0 mmol, 1.0 eq) in 150 mL Eisessig wurden unter Eisbadkühlung über 20 Minuten 12.4 mL (4.12 g, 121.0 mmol, 1.0 eq) einer 30 %igen Wasserstoffperoxidlösung gegeben und im Anschluss über 16 Stunden bei Raumtemperatur gerührt. Im Anschluss wurde das Lösungsmittel im Vakuum entfernt, das Produktgemisch in *n*-Hexan/DCM 5:1 aufgenommen und zweimal mit je 100 mL gesättigter Natriumhydrogencarbonatlösung extrahiert. Die organische Phase wurde im Anschluss mit 75 mL Wasser und die resultierende wässrige Phase zweimal mit je 100 mL *n*-Hexan/DCM 5:1 extrahiert. Nach Trocknung der vereinten organischen Phasen über Magnesiumsulfat wurde das Lösungsmittel im Vakuum entfernt und das resultierende Produkt dreimal aus Methanol umkristallisiert. Nach Waschen des resultierenden Feststoffs mit Ether und Hexan wurde ein weiteres Mal aus Methanol umkristallisiert und 5.21 g (24.3 mmol) des Produkts in Form eines farblosen Feststoffs erhalten.

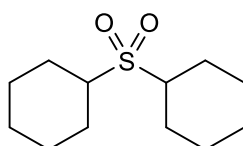
Ausbeute: 20 % (5.21 g, 24.3 mmol)

^1H NMR (400.3 MHz, RT, CDCl_3): δ = 1.22-1.42 (m, 6 H, 6 CH_2), 1.45-1.62 (m, 4 H, 4 CH_2), 1.64-1.74 (m, 2 H, 2 CH_2), 1.74-1.97 (m, 2 H, 6 CH_2), 1.97-2.06 (m, 2 H, 2 CH_2), 2.58 (tt, $^3J_{\text{HH}} = 3.8$ Hz, $^3J_{\text{HH}} = 11.7$ Hz, 2 H, 2 CH) ppm.

$^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (100.7 MHz, RT, CDCl_3): δ = 24.2, 25.4, 25.7, 25.8, 27.4 (10 CH_2), 54.6 (2 CH) ppm.

Die Daten entsprechen den Literaturdaten.^[258]

Dicyclohexylsulfon



Dicyclohexylsulfon wurde als Nebenprodukt der Synthese zum Dicyclohexylsulfoxid erhalten und konnte säulenchromatographisch (Laufmittel: *n*-Hexan/Essigsäureethylester 3:1) aufgereinigt werden.

^1H NMR (400.3 MHz, RT, CDCl_3): δ = 1.22-1.37 (m, 6 H, CH_2), 1.53-1.65 (m, 4 H, CH_2), 1.65-1.68 (m, 2 H, CH_2), 1.87-1.97 (m, 4 H, CH_2), 2.04-2.13 (m, 4 H, CH_2), 2.95 (tt, $^3J_{\text{HH}}$ = 3.5 Hz, $^3J_{\text{HH}}$ = 12.1 Hz, 2 H, 2 CH) ppm.

$^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (100.7 MHz, RT, CDCl_3): δ = 24.7 (4 CH_2), 25.27 (4 CH_2), 25.31 (2 CH_n), 57.4 (2 CH) ppm.

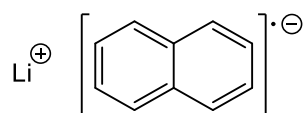
KC_8

Die Synthese erfolgte nach einer leicht modifizierten Literaturvorschrift.^[261]

144.5 mg (3.7 mmol, 1.0 eq) Kalium und 355.1 mg (29.6 mmol, 8.0 eq) Graphit wurden vorgelegt und unter Rühren auf 100°C erhitzt, wobei sich bei etwa 80 °C ein kupferfarbener Feststoff bildete. Im Anschluss wurde die Reaktionsmischung noch für eine Stunde bei 170 °C gerührt. 498.5 mg (3.7 μmol) des Produkts wurden in Form eines kupferfarbenen Feststoffs erhalten und ohne weitere Aufreinigung verwendet.

Ausbeute: >99 % (498.5 mg, 3.7 μmol).

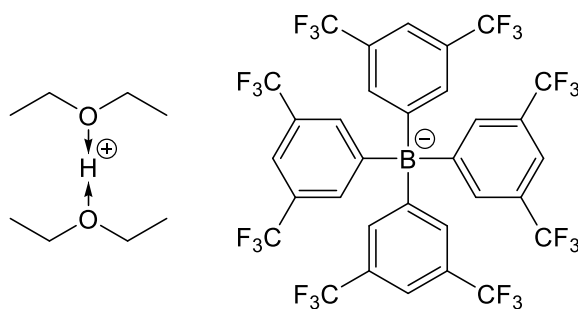
Lithiumnaphthalid



Die Synthese erfolgte nach einer leicht modifizierten Literaturvorschrift.^[262]

Zu einer Mischung von 92.0 mg (13.3 mmol, 3.1 eq) Lithium und 550 mg (4.3 mmol, 1.0 eq) Naphthalin wurden 50 mL THF hinzugefügt und die Reaktionslösung für 30 Minuten mit Ultraschall behandelt, wobei sie sich dunkelgrün verfärbte. Die Lithiumnaphthalidlösung wurde ohne weitere Aufreinigung verwendet.

BROOKHARTS Säure



Die Synthese erfolgte nach einer modifizierten Literaturvorschrift.^[263]

Zu einer Lösung von 500.0 mg (564.2 μmol , 1.0 eq) Natriumtetrakis[3,5-bis(trifluormethyl)phenyl]borat in 5 mL Diethylether wurden unter Rühren bei 0 °C 0.7 mL einer 2.0 M (51.0 mg, 1.4 mmol, 2.48 eq) etherischen HCl-Lösung gegeben, wobei ein farbloser Feststoff ausfiel. Die Lösung wurde bei weiterhin 0 °C filtriert und der Rückstand dreimal mit je 2 mL 0 °C kaltem Diethylether gewaschen. Flüchtige Substanzen wurde im Vakuum entfernt und gerade so viel 0 °C kalter Diethylether (etwa 1.2 mL) zum verbleibenden Feststoff gegeben, bis dieser sich vollständig löste. Die Lösung wurde für 2 Tage bei -30 °C gelagert, wodurch das Produkt in Form eines farblosen Feststoffs ausfiel. Die Lösung wurde dekantiert und Lösungsmittelreste aus dem verbleibenden Feststoff im Vakuum entfernt. 508.3 mg (502.0 μmol) des Produkts wurden in Form eines farblosen Feststoffs erhalten.

Ausbeute: 89 % (508.3 mg, 502.0 μmol)

^1H NMR (400.3 MHz, RT, CD_2Cl_2): δ = 1.36 (t, $^3J_{\text{HH}}$ = 7.1 Hz, 12 H, 4 CH_3), 3.39 (t, $^3J_{\text{HH}}$ = 7.2 Hz, 8 H, 4 CH_2), 7.55-7.59 (m, 4 H, 4 $p\text{-CH}_{\text{Ar}}$), 7.70-7.75 (m, 8 H, 8 $o\text{-CH}_{\text{Ar}}$) ppm.

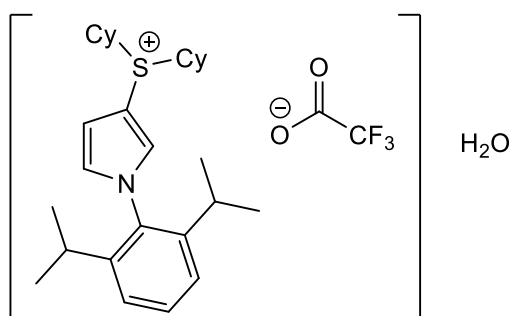
$^{11}\text{B}\{^1\text{H}\}$ NMR (128.4 MHz, RT, CD_2Cl_2): δ = -6.6 ppm.

$^{19}\text{F}\{^1\text{H}\}$ NMR (376.7 MHz, RT, CD_2Cl_2): δ = -62.9 ppm.

Die Daten entsprechen den Literaturdaten.^[263]

5.5.2 Synthesen von neuen Verbindungen

Dicyclohexyl-(N-(2,6-diisopropylphenyl)pyrrol-2-yl)sulfoniumtrifluoroacetat · H_2O **95b**



Die Synthese erfolgte nach modifizierten Literaturvorschriften.^[39,98,99]

942.9 mg (4.4 mmol, 1.00 eq) Dicyclohexylsulfoxid und 1.00 g (4.4 mmol, 1.00 eq) *N*-(2,6-Diisopropylphenyl)pyrrol **94** wurden in 5 mL Dichlormethan gelöst. Nach Zugabe von 0.61 mL (923.8 mg, 4.4 mmol, 1.00 eq) Trifluoressigsäureanhydrid bei -50 °C wurde die Reaktionslösung langsam auf Raumtemperatur erwärmt und anschließend mit 15 mL einer gesättigten Natriumtetrafluoroboratlösung extrahiert. Die wässrige Phase wurde anschließend dreimal mit je 20 mL Dichlormethan extrahiert und die vereinten organischen Phasen über Magnesiumsulfat getrocknet. Nach Entfernen des Lösungsmittels wurde das so erhaltene Rohprodukt mittels eines Gradienten (*n*-Hexan/Ethylacetat/Acetonitril) säulenchromatographisch aufgereinigt. Nach anschließender Kristallisation aus Dichlormethan/Diethylether 50:50 wurden 200 mg (391.0 µmol) des Produkts in Form eines farblosen Feststoffs erhalten.

Ausbeute: 9 % (200.0 mg, 391.0 µmol).

Schmelzpunkt: 104.2 °C (Zers.).

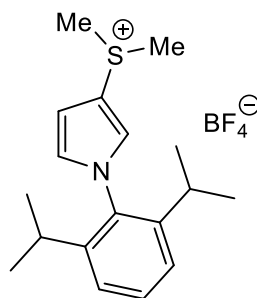
¹H NMR (400.3 MHz, RT, CDCl₃): δ = 1.12 (d, ³J_{HH} = 6.9 Hz, 6 H, 2 CH₃), 1.15 (d, ³J_{HH} = 6.9 Hz, 6 H, 2 CH₃), 1.20-1.33 (m, 3 H, 3 CyH), 1.36-1.76 (m, 11 H, 11 CyH), 1.78-1.95 (m, 4 H, 4 CyH), 1.02-2.12 (m, 2 H, 2 CyH), 2.22-2.34 (m, 4 H, 2 CHMe₂, 2 CyH), 2.51-3.15 (br, 2 H, H₂O), 4.36-4.50 (m, 2 H, 2 SCH), 6.93 (dd, ³J_{HH} = 3.0 Hz, ⁴J_{HH} = 2.0 Hz, 1 H, NCH_{Pyr}CH_{Pyr}C_{q, Pyr}), 7.09 (dd, ³J_{HH} = 3.1 Hz, ⁴J_{HH} = 1.7 Hz, 1 H, NCH_{Pyr}CH_{Pyr}C_{q, Pyr}), 7.25 (d, ³J_{HH} = 7.9 Hz, 2 H, *m*-CH_{Ar}), 7.34 (t, ⁴J_{HH} = 2.0 Hz, 1 H, NCHC_q), 7.46 (t, ³J_{HH} = 7.8 Hz, 1 H, *p*-CH_{Ar}) ppm.

¹³C{¹H} NMR (100.7 MHz, RT, CDCl₃): δ = 24.2 (2 CH₃), 24.6 (2 CH₃), 25.0 (2 CH_{2, Cy}), 25.1 (4 CH_{2, Cy}), 28.4 (2 CH_{2, Cy}), 28.6 (2 CH(CH₃)₂), 30.0 (2 CH_{2, Cy}), 53.7 (2 SCH), 95.1 (C_{q, Pyr}), 112.4 (NCH_{Pyr}CH_{Pyr}C_{q, Pyr}), 124.2 (2 *m*-CH_{Ar}), 128.0 (NCH_{Pyr}CH_{Pyr}C_{q, Pyr}), 130.5 (*p*-CH_{Ar}), 131.6 (NCHC_{q, Pyr}), 134.9 (*i*-C_{q, Ar}), 146 (*o*-C_{q, Ar}) ppm.

¹⁹F{¹H} NMR (235.3 MHz, RT, CDCl₃): δ = -75.0 ppm.

IR (ATR): 3400(br, w), 3109 (w), 2930 (w), 2867 (w), 1688 (s), 1501 (m), 1455 (m), 1388 (w), 1354 (w), 1268 (w), 1195 (s), 1150 (s), 1113 (s), 1057 (m), 1036 (w), 966 (m), 935 (w), 817 (s), 795 (s), 716 (s), 658 (m), 628 (m), 561 (m), 501 (m), 520 (m).

EA für C₃₀H₄₄F₃NOS: berechnet: 57.61 % C, 6.98 % H, 3.73 % N, 8.54 % S
gemessen: 57.26 % C, 6.91 % H, 3.58 % N, 8.25 % S.

Dimethyl-(*N*-(2,6-diisopropylphenyl)pyrrol-2-yl)sulfoniumtetrafluoroborat **95c**

Die Synthese erfolgte nach modifizierten Literaturvorschriften.^[39,98,99]

0.75 mL (825.0 mg, 10.6 mmol, 1.00 eq) Dimethylsulfoxid und 2.40 g (10.6 mmol, 1.00 eq) *N*-(2,6-Diisopropylphenyl)pyrrol **94** wurden in 10 mL Dichlormethan gelöst. Nach Zugabe von 1.47 mL (2.22 g, 10.6 mmol, 1.00 eq) Trifluoressigsäureanhydrid bei -60 °C wurde die Reaktionslösung langsam auf Raumtemperatur erwärmt und mit 10 mL einer gesättigten Natriumtetrafluoroboratlösung extrahiert. Die wässrige Phase wurde anschließend dreimal mit je 10 mL Dichlormethan extrahiert und die vereinten organischen Phasen über Magnesiumsulfat getrocknet. Nach Entfernen des Lösungsmittels wurde das so erhaltene Rohprodukt aus DCM/Et₂O 1:1 umkristallisiert, wodurch für die Röntgenstrukturanalyse geeignete Einkristalle in Form von farblosen Plättchen erhalten werden konnten. 2.32 g (10.6 mmol) des Produkts wurden in Form eines farblosen Feststoffs erhalten.

Ausbeute: 58 % (2.32 g, 10.6 mmol).

Schmelzpunkt: 152.3 °C.

¹H NMR (400.3 MHz, RT, CDCl₃): δ = 1.13 (d, ³J_{HH} = 7.1 Hz, 6 H, 2 CH₃), 1.15 (d, ³J_{HH} = 7.1 Hz, 6 H, 2 CH₃), 2.27 (hept, ³J_{HH} = 6.8 Hz, 2 H, CHMe₂), 3.32 (s, 6 H, 2 SCH₃), 6.89 (dd, ³J_{HH} = 3.1 Hz, ⁴J_{HH} = 2.1 Hz, 1 H, NCH_{Pyr}CH_{Pyr}C_{q, Pyr}), 6.94 (dd, ³J_{HH} = 3.1 Hz, ⁴J_{HH} = 2.1 Hz, 1 H, NCH_{Pyr}CH_{Pyr}C_{q, Pyr}), 7.25 (d, ³J_{HH} = 7.8 Hz, 2 H, *m*-CH_{Ar}), 7.35 (t, ⁴J_{HH} = 2.0 Hz, 1 H, NCHC_q), 7.45 (t, ³J_{HH} = 7.8 Hz, 1 H, *p*-CH_{Ar}) ppm.

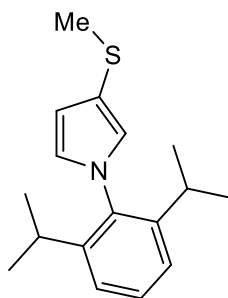
¹³C{¹H} NMR (100.7 MHz, RT, CDCl₃): δ = 24.5, 24.6 (2 CH(CH₃)₂), 28.5 (2 CH(CH₃)₂), 31.4 (S(CH₃)₂), 102.8 (C_{q, Pyr}), 108.2 (NCH_{Pyr}CH_{Pyr}C_{q, Pyr}), 124.2 (*m*-CH_{Ar}), 128.5 (NCH_{Pyr}CH_{Pyr}C_{q, Pyr}), 128.9 (NCHC_q), 130.5 (*p*-CH_{Ar}), 134.7 (*i*-C_{q, Ar}), 146.2 (*o*-C_{q, Ar}) ppm.

¹¹B{¹H} NMR (162.1 MHz, RT, CDCl₃): δ = -0.9 ppm.

¹⁹F{¹H} NMR (235.3 MHz, RT, CDCl₃): δ = -150.5 ppm.

IR (ATR): 3147 (w), 3118 (w), 3041 (w), 2960 (w), 2866 (w), 1508 (m), 1497 (m), 1433 (m), 1352 (m), 1159 (w), 1088 (s), 1054 (vs), 1027 (vs), 966 (s), 933 (m), 802 (s), 758 (s), 716 (m), 651 (m), 623 (m), 520 (m), 479 (w), 459 (w).

EA für C₁₈H₂₆BF₄NS: berechnet: 64.84 % C, 7.98 % H, 2.52 % N, 5.77 % S
gemessen: 65.13 % C, 7.77 % H, 2.59 % N, 5.46 % S.

N-(2,6-Diisopropylphenyl)-3-methylthiopyrrol **98**

A) Eine Lösung von 1.14 g (3.0 mmol, 1.00 eq) Dimethyl-(*N*-(2,6-Diisopropylphenyl)pyrrol-2-yl)sulfoniumtetrafluoroborat **95c** in 10 mL THF wurde auf -78 °C gekühlt. Nach Zugabe von 3.40 mL (68.7 mg, 3.1 mmol, 1.03 eq) einer 0.92 M Methyllithiumlösung in Diethylether färbte sich die Lösung braun, ein farbloser Feststoff fiel aus und es kam zu einer Gasentwicklung. Nach langsamem Erwärmen auf Raumtemperatur wurde die Lösung für weitere 16 Stunden gerührt und im Anschluss leichtflüchtige Substanzen im Vakuum entfernt. Das so erhaltene braune Rohprodukt wurde säulenchromatographisch (*n*-Hexan/Ethylacetat: Gradient) aufgereinigt. 0.39 g (1.4 mmol) des Produkts wurden in Form eines farblosen Öls erhalten.

B) Eine Lösung von 75.1 mg (200 µmol, 1.00 eq) Dimethyl-(*N*-(2,6-Diisopropylphenyl)pyrrol-2-yl)sulfoniumtetrafluoroborat **95c** in 2.5 mL THF wurde auf -78 °C gekühlt. Nach Zugabe von 0.10 mL (21.4 mg, 200.0 µmol, 1.00 eq) einer 2.0 M Lithiumdiisopropylamidlösung in THF/Heptan/Ethylbenzol färbte sich die Lösung braun und ein Feststoff fiel aus. Nach Erwärmen der Mischung auf Raumtemperatur wurde die Lösung für weitere 16 Stunden gerührt und im Anschluss leichtflüchtige Substanzen im Vakuum entfernt. Das so erhaltene braune Rohprodukt wurde in Toluol gelöst und filtriert. Nach Entfernen flüchtiger Bestandteile im Vakuum wurden 51.6 mg (188.7 µmol) des Produkts in Form eines farblosen Öls erhalten.

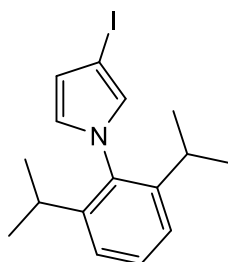
Ausbeute: A) 47 % (0.39 g, 1.4 mmol)

B) 94 % (51.6 mg, 188.7 µmol).

¹H NMR (400.3 MHz, RT, C₆D₆): δ = 0.97-1.07 (m, 12 H, 2 CH(CH₃)₂), 2.21 (s, 3 H, SCH₃), 2.56 (hept, ³J_{HH} = 6.9 Hz, 2 H, CHMe₂), 6.47 (d, ⁴J_{HH} = 1.9 Hz, 2 H, NCHCHC_q), 6.69 (t, ⁴J_{HH} = 1.9 Hz, 1 H, NCHC_q), 7.01 (d, ³J_{HH} = 7.7 Hz, 2 H, 2 *m*-CH_{Ar}), 7.13-7.20 (m, 1 H, *p*-CH_{Ar}) ppm.

¹³C{¹H} NMR (100.7 MHz, RT, C₆D₆): δ = 20.4 (SCH₃), 24.5, 24.7 (2 CH(CH₃)₂), 28.4 (2 CH(CH₃)₂), 112.5 (CH_{Pyr}), 117.1 (C_{q,Pyr}), 123.2 (2 *m*-CH_{Ar}), 124.2 (CH_{Pyr}), 124.5 (NCH_{Pyr}C_{q,Pyr}), 129.5 (*p*-CH_{Ar}), 137.2 (2 *i*-C_{q,Ar}), 147.1 (*o*-C_{q,Ar}) ppm.

IR (ATR): 2963 (vs), 2924 (m), 2868 (m), 1490 (vs), 1475 (m), 1458 (m), 1384 (w), 1364 (m), 1355 (w), 1298 (w), 1254 (w), 1211 (w), 1178 (w), 1155 (w), 1105 (w), 1072 (m), 1058 (m), 1033 (w), 969 (w), 934 (m), 806 (m), 781 (m), 763 (s), 704 (w), 650 (w), 633 (w).

N-(2,6-Diisopropylphenyl)-3-iodopyrrol **101**

Die Synthese erfolgte nach einer modifizierten Literaturvorschrift.^[264]

Bei -70 °C wurden unter Lichtausschluss 2.00 g (8.8 mmol, 1.00 eq) *N*-(2,6-Diisopropylphenyl)pyrrol **94** und 2.38 g (10.6 mmol, 1.20 eq) *N*-Iodsuccinimid in 30 mL Dichlormethan gelöst. Die Reaktionslösung wurde langsam auf Raumtemperatur erwärmt und anschließend weiterhin unter Lichtausschluss über 16 Stunden gerührt. Nach Entfernen des Lösungsmittels im Vakuum wurde das erhaltene Rohprodukt in Hexan aufgenommen und über neutrales Aluminiumoxid filtriert. 2.35 g (6.7 mmol) des Produkts wurden als 2-/3-Iodoregioisomerengemisch im Verhältnis 1:7 in Form eines farblosen Öls erhalten und ohne weitere Aufreinigung weiter umgesetzt.

Ausbeute: 85 % (2.35 g, 6.65 mmol)

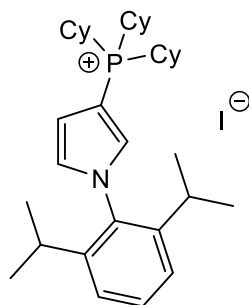
¹H NMR (400.3 MHz, RT, CDCl₃): δ = 1.12 (d, ³J = 6.7 Hz, 6 H, 2 CH₃), 1.14 (d, ³J_{HH} = 6.7 Hz, 6 H, 2 CH₃), 2.44 (hept, ³J_{HH} = 6.9 Hz, 2 H, 2 CHMe₂), 6.39 (dd, J_{HH} = 1.6 Hz, J_{HH} = 2.8 Hz, 1 H, CH_{Pyr}), 6.50-6.52 (m, 1 H, CH_{Pyr}), 6.67 (dd, J_{HH} = 1.6 Hz, J_{HH} = 2.2 Hz, 1 H, CH_{Pyr}), 7.21 (d, ³J_{HH} = 7.7 Hz, 2 H, 2 *m*-CH_{Ar}), 7.39 (t, ³J_{HH} = 7.8 Hz, 1 H, *p*-CH_{Ar}) ppm.

¹³C{¹H} NMR (100.7 MHz, RT, CDCl₃): δ = 24.6 (2 CH₃), 24.8 (2 CH₃), 28.1 (2 CH), 59.8 (C_qI), 116.0 (CH_{Pyr}), 123.7 (2 *m*-CH_{Ar}), 125.1 (CH_{Pyr}), 127.5 (CH_{Pyr}), 129.5 (*p*-CH_{Ar}), 136.3 (*i*-C_q, Ar), 147.0 (2 *o*-C_q, Ar) ppm.

IR (ATR): 2962 (s), 2926 (m), 2867 (m), 1487 (s), 1475 (m), 1458 (m), 1383 (m), 1363 (m), 1342 (s), 1293 (m), 1255 (w), 1179 (w), 1071 (m), 1058 (m), 1032 (w), 936 (m), 903 (s), 805 (m), 762 (s), 701 (m), 649 (m), 606 (w).

EA für C₁₆H₂₀NI: berechnet: 54.40 % C, 5.71 % H, 3.97 % N
 gemessen: 54.25 % C, 5.70 % H, 4.16 % N.

HR-MS (EI): berechnet für C₁₆H₂₀NI⁺ ([M]⁺): 353.06404, gefunden: 353.06250.

Tricyclohexyl-(N-(2,6-diisopropylphenyl)pyrrol-2-yl)phosphoniumiodid 100a

Die Synthese erfolgte nach einer modifizierten Literaturvorschrift.^[100]

2.5 mg (8.8 mmol, 1.00 eq) Tricyclohexylphosphan und 120.9 mg (439.5 μ mol, 0.05 eq) Bis(cycloocta-1,5-dien)nickel(0) wurden in 5 mL Ethanol gelöst. Nach Zugabe von 3.11 g (8.8 mmol, 1.00 eq) *N*-(2,6-Diisopropylphenyl)-3-iodopyrrol **101** wurde unter Rückfluss 16 Stunden gekocht, wobei sich die Lösung rot färbte. Die Lösung wurde mit 100 mL Wasser verdünnt und dreimal mit je 100 mL mit Dichlormethan extrahiert. Die vereinten organischen Phasen wurden über Magnesiumsulfat getrocknet und flüchtige Bestandteile anschließend im Vakuum entfernt. Der resultierende Feststoff wurde säulenchromatographisch aufgereinigt (*n*-Hexan/Ethylacetat: Gradient). Das so erhaltene Rohprodukt wurde erneut in Dichlormethan gelöst und mit Diethylether ausgefällt. 3.40 g (5.4 mmol) des Produkts wurden in Form eines farblosen Feststoffs erhalten. Zur Röntgenstrukturanalyse geeignete Einkristalle wurden durch Diffusion von Diethylether in eine Lösung des Produkts in Dichlormethan erhalten.

Ausbeute: 61 % (3.40 g, 5.4 mmol).

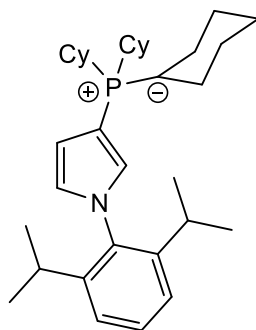
Schmelzpunkt: 133.7 °C.

^1H NMR (400.3 MHz, RT, CDCl_3): δ = 1.14 (d, $^3J_{\text{HH}}$ = 6.9 Hz, 6 H, 2 CH_3), 1.18 (d, $^3J_{\text{HH}}$ = 6.9 Hz, 6 H, 2 CH_3), 1.23-1.33 (m, 3 H, 3 CH_2), 1.44-1.67 (m, 12 H, 12 CH_2), 1.80-1.89 (m, 3 H, 3 CH_2), 1.89-1.98 (m, 6 H, 6 CH_2), 2.07-2.16 (m, 6 H, 6 CH_2), 2.30 (hept, $^3J_{\text{HH}}$ = 6.9 Hz, 2 H, CHMe_2), 2.86-2.99 (m, 3 H, 3 PCH), 6.89-6.93 (m, 1 H, $\text{NCH}_{\text{Pyr}}\text{CH}_{\text{Pyr}}\text{C}_{\text{q, Pyr}}$), 6.95-6.99 (m, 1 H, $\text{NCH}_{\text{Pyr}}\text{CH}_{\text{Pyr}}\text{C}_{\text{q, Pyr}}$), 7.23-7.27 (m, 3 H, 2 *m*- CH_{Ar} , NCHC_{q}), 7.45 (t, $^3J_{\text{HH}}$ = 7.3 Hz, 1 H, *p*- CH_{Ar}) ppm.

$^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (100.7 MHz, RT, CDCl_3): δ = 24.1, 24.9 (4 CH_3), 25.9 (3 CH_2), 26.6 (d, $^2J_{\text{CP}}$ = 12.3 Hz, 6 CH_2), 27.4 (d, $^3J_{\text{CP}}$ = 3.5 Hz, 6 CH_2), 28.7 (CHMe_2), 30.8 (d, $^1J_{\text{CP}}$ = 44.6 Hz, 3 PCH), 92.7 (d, $^1J_{\text{CP}}$ = 96.1 Hz, $\text{C}_{\text{q, Pyr}}$), 114.1 (d, $^3J_{\text{CP}}$ = 7.5 Hz, $\text{NCH}_{\text{Pyr}}\text{CH}_{\text{Pyr}}\text{C}_{\text{q, Pyr}}$), 124.2 (2 *m*- CH_{Ar}), 127.5 (d, $^2J_{\text{CP}}$ = 10.5 Hz, $\text{NCH}_{\text{Pyr}}\text{CH}_{\text{Pyr}}\text{C}_{\text{q, Pyr}}$), 130.5 (*p*- CH_{Ar}), 131.1 (d, $^2J_{\text{CP}}$ = 14.9 Hz, $\text{NCH}_{\text{Pyr}}\text{C}_{\text{q, Pyr}}$), 135.0 (*i*- $\text{CH}_{\text{q, Ar}}$), 146.0 (2 *o*- $\text{C}_{\text{q, Ar}}$) ppm.

$^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$ NMR (162.1 MHz, RT, CDCl_3): δ = 26.1 ppm.

IR (ATR): 3059 (w), 2929 (s), 2853 (m), 1504 (m), 1445 (m), 1363 (w), 1302 (w), 1268 (w), 1170 (s), 1110 (m), 1062 (m), 1006 (m), 922 (w), 898 (w), 851 (m), 805 (m), 758 (m), 728 (s), 697 (m), 660 (m), 636 (w), 565 (m), 555 (s), 534 (s), 523 (m), 496 (w), 461 (m), 441 (w).

103

A) 1.00 g (1.6 mmol, 1.00 eq) Tricyclohexyl-(*N*-(2,6-diisopropylphenyl)pyrrol)phosphoniumiodid **90a** wurden in 30 mL Toluol suspensiert und auf -100 °C gekühlt. Nach Zugabe von 1.72 mL (34.7 mg, 1.6 mmol, 1.0 eq) einer 0.92 M Methyllithiumlösung in Diethylether wurde die Mischung langsam auf Raumtemperatur erwärmt und dort für weitere 16 Stunden gerührt. Nach Filtration wurden leichtflüchtige Substanzen im Vakuum entfernt. 480.5 mg (950.0 µmol) des Produkts wurden in Form eines gelben Feststoffs erhalten. Die Synthese kann auch in THF durchgeführt werden, in diesem Fall muss das Lösungsmittel vor der Filtration durch Toluol ausgetauscht werden.

B) 126.7 mg (200.0 µmol, 1.00 eq) Tricyclohexyl-(*N*-(2,6-diisopropylphenyl)pyrrol)phosphoniumiodid **90a** wurden in 2.5 mL Toluol suspendiert und auf -70 °C gekühlt. Nach Zugabe von 0.1 mL (21.4 mg, 200.0 µmol, 1.0 eq) einer 2.0 M Lithiumdiisopropylamidlösung in THF/Heptan/Ethylbenzol wurde die Lösung langsam auf Raumtemperatur erwärmt und dort für weitere 16 Stunden gerührt. Flüchtige Bestandteile wurden im Vakuum entfernt und der Rückstand in Toluol gelöst. Nach Filtration wurden alle flüchtigen Bestandteile im Vakuum entfernt. 60.0 mg, 118.6 µmol) des Produkts wurden in Form eines orangen Feststoffs erhalten, der 18 % des Phosphoniumsalzes **103** enthielt.

Ausbeute: A) 60 % (480.5 mg, 950.0 µmol)

B) 60 % (60.0 mg, 118.6 µmol).

Schmelzpunkt: 145.9 °C.

¹H NMR (400.3 MHz, RT, C₆D₆): δ = 1.05 (d, ³J_{HH} = 6.9 Hz, 6 H, 2 CH₃), 1.08 (d, ³J_{HH} = 6.9 Hz, 6 H, 2 CH₃), 1.14-1.41 (m, 9 H, 9 CH₂), 1.60-1.88 (m, 12 H, 12 CH₂), 1.89-1.99 (m, 4 H, 2 CH₂), 2.11-2.20 (m, 2 H, 2 CH₂), 2.53-2.64 (m, 5 H, 2 PCH, 3 CH₂), 6.43 (dd, ³J_{HH} = 2.4 Hz,

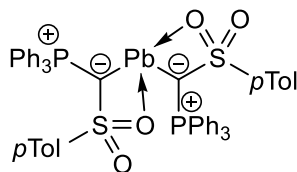
$^4J_{\text{HH}} = 2.4 \text{ Hz}$, 1 H, CH_{Pyr}), 6.57 (dd, $^3J_{\text{HH}} = 2.4 \text{ Hz}$, $^4J_{\text{HH}} = 2.4 \text{ Hz}$, 1 H, CH_{Pyr}), 7.00-7.06 (m, 3 H, CH_{Pyr} , 2 $m\text{-CH}_{\text{Ar}}$), 7.20 (t, $^3J_{\text{HH}} = 7.7 \text{ Hz}$, 1 H, $p\text{-CH}_{\text{Ar}}$) ppm.

$^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (100.7 MHz, RT, C_6D_6): $\delta = 12.0$ (d, $^1J_{\text{CP}} = 125.0 \text{ Hz}$, $\text{PC}_q(\text{CH}_2)_2$), 24.2 (2 CH_3), 24.9 (2 CH_3), 26.2 (d, $^3J_{\text{CP}} = 0.8 \text{ Hz}$, 2 CH_2), 27.0 (d, $^3J_{\text{CP}} = 1.0 \text{ Hz}$, 2 CH_2), 27.2 (d, $^3J_{\text{CP}} = 1.4 \text{ Hz}$, 2 CH), 27.2 (d, $^2J_{\text{CP}} = 23.4 \text{ Hz}$, 2 CH_2), 27.3 (2 CH_2), 28.6 (2 CHMe_2), 29.6 (CH_2) 31.8 (d, $^2J_{\text{CP}} = 8.2 \text{ Hz}$, 2 CH_2), 31.9 (d, $^2J_{\text{CP}} = 10.6 \text{ Hz}$, 2 CH_2), 34.0 (d, $^1J_{\text{CP}} = 20.2 \text{ Hz}$, 2 PCH), 108.3 (d, $^1J_{\text{CP}} = 104.6 \text{ Hz}$, $\text{C}_{q, \text{Pyr}}$), 115.1 (d, $^3J_{\text{CP}} = 7.6 \text{ Hz}$, $\text{NCH}_{\text{Pyr}}\text{CH}_{\text{Pyr}}\text{C}_{q, \text{Pyr}}$), 123.9 (2 $m\text{-CH}_{\text{Ar}}$), 124.2 (d, $^2J_{\text{CP}} = 9.5 \text{ Hz}$, $\text{NCH}_{\text{Pyr}}\text{CH}_{\text{Pyr}}\text{C}_{q, \text{Pyr}}$), 129.6 ($p\text{-CH}_{\text{Ar}}$), 132.3 (d, $^2J_{\text{CP}} = 13.5 \text{ Hz}$, $\text{NCH}_{\text{Pyr}}\text{C}_{q, \text{Pyr}}$), 137.1 ($i\text{-C}_{q, \text{Ar}}$), 146.8 (2 $o\text{-C}_{q, \text{Ar}}$) ppm.

$^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$ NMR (162.1 MHz, RT, C_6D_6): $\delta = 6.6$ ppm.

IR(ATR): 2963 (m), 2926 (s), 2856 (m), 2725 (m), 1503 (m), 1488 (m), 1451 (m), 1383 (w), 1361 (m), 1346 (m), 1324 (m), 1300 (w), 1260 (m), 1188 (m), 1176 (m), 1159 (m), 1102 (m), 1076 (m), 1053 (vs), 1016 (m), 999 (m), 941 (m), 849 (w), 841 (w), 805 (vs), 760 (m), 732 (m), 709 (m), 695 (w), 655 (m), 635 (w), 622 (w), 564 (m), 548 (s), 534 (s), 526 (m), 490 (w), 462 (m), 442 (w), 426 (w).

Y_2Pb



21.0 mg (81.7 μmol , 1.0 eq) Blei(II)bromid und 74.0 mg (163.5 μmol , 2.0 eq) wurden in einem J. YOUNG-NMR-Röhrchen vorgelegt. Nach Zugabe von 0.6 mL $\text{THF-}d_8$ wurde die Mischung direkt intensiv geschüttelt, wobei sich eine gelbe Suspension bildete. Nach Filtration wurde n -Hexan in die Lösung diffundiert, wodurch 12.8 mg (9 μmol) des Produkts in Form eines gelben Feststoffs auskristallisierten. Das Produkt konnte unter anderem aufgrund von Zersetzungsprozessen NMR-spektroskopisch nicht eindeutig identifiziert werden.

Schmelzpunkt: 135.4 $^{\circ}\text{C}$ (Zers.).

EA für $\text{C}_{56}\text{H}_{44}\text{O}_4\text{P}_2\text{PbS}_2$:	berechnet:	58.58 % C, 4.16 % H, 6.01 % S
	gemessen:	58.35 % C, 4.37 % H, 5.87 % S.

Nach Filtration wurde *n*-Hexan in die Lösung diffundiert, wodurch das Produkt in Form von für eine Röntgenstrukturanalyse geeigneten Einkristallen kristallisierte. Aufgrund der Hydrolyseempfindlichkeit und schlechten Löslichkeit der Substanz war es nicht möglich eine passende Elementaranalyse und saubere NMR-Spektren zu erhalten.

Schmelzpunkt: 168.3 °C (Zers.).

^1H NMR (400.3 MHz, RT, THF- d_8): δ = 2.30 (s, 9 H, 3 CH_3), 6.99-7.0 (d, $^3J_{\text{HH}}$ = 7.8 Hz, 6 H, 6 *m*- CH_{Tol}), 6.98-7.07 (m, 18 H, 18 *o*- CH_{Ph}), 7.26 (d, $^3J_{\text{HH}}$ = 7.4 Hz, 6 H, 6 CH_{Tol}), 7.23-7.30 (m, 15 H, 6 *o*- CH_{Tol} , 9 *p*- CH_{Ph}), 7.42-7.50 (m, 18 H, 18 CH_{Ar}) ppm.

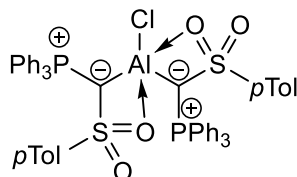
$^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (100.7 MHz, RT, THF- d_8): δ = 2.31 (3 CH), 149.8 (*i*- $\text{C}_{\text{Tol,q}}$) ppm. Aufgrund der starken Verunreinigungen mit **YH** war eine weitere Zuordnung der Signale nicht möglich.

$^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$ NMR (162.1 MHz, RT, THF- d_8): δ = 16.1 (vbr).

IR (ATR): 3056 (w), 2922 (w), 1588 (w), 1483 (w), 1436 (m), 1259 (m), 1221 (m), 1183 (m), 1158 (m), 1100 (s), 1067 (vs), 1040 (s), 1028 (s), 1018 (s), 990 (vs), 850 (m), 811 (m), 790 (m), 743 (m), 715 (m), 691 (m), 657 (m), 650 (m), 583 (m), 544 (m), 515 (s) cm^{-1} .

EA: Nach mehreren Versuchen fehlgeschlagen.

Y₂AlCl



5.0 mg (37.5 μmol , 1.0 eq), Aluminium(III)chlorid und 33.9 mg (75.0 μmol , 2.0 eq) **NaY** wurden in einem J. YOUNG-NMR-Röhrchen vorgelegt. Im Anschluss wurden 0.6 mL THF zugegeben und die resultierende hellgelbe Suspension bis zur vollständigen Entfärbung sofort intensiv geschüttelt. Nach Filtration wurde *n*-Hexan in die Lösung diffundiert, wodurch 30.1 mg des Produkts in Form eines farblosen Feststoffs auskristallisierten.

Die Reaktion kann auch in Benzol durchgeführt werden.

Ausbeute: 87 % (30.1 mg, 32.6 μmol).

Schmelzpunkt: 225 °C (zers.).

^1H NMR (400.3 MHz, RT, THF- d_8): δ = 2.21 (s, 6 H, 2 CH_3), 6.84 (d, $^3J_{\text{HH}}$ = 7.8 Hz, 4 H, 4 *m*- CH_{Tol}), 7.28-7.36 (m, 12 H, 12 *o*- CH_{Ph}), 7.38-7.46 (m, 6 H, 6 *p*- CH_{Ph}), 7.61 (d, $^3J_{\text{HH}}$ = 7.7 Hz, 4 H, 4 *o*- CH_{Tol}), 7.82 (dd, $^3J_{\text{HH}}$ = 7.7 Hz, $^3J_{\text{HH}}$ = 12.9 Hz, 12 H, 12 *m*- CH_{Ph}) ppm.

$^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$ NMR (162.1 MHz, RT, THF- d_8): δ = 6.0 ppm.

^1H NMR (400.3 MHz, RT, C_6D_6): δ = 1.81 (s, 6 H, 2 CH_3), 6.55 (d, $^3J_{\text{HH}}$ = 7.9 Hz, 4 H, 4 $m\text{-CH}_{\text{Tol}}$), 6.94-7.01 (m, 6 H, 6 $p\text{-CH}_{\text{Ph}}$), 7.61 (d, 3J = 7.7 Hz, 4 H, 4 $o\text{-CH}_{\text{Tol}}$), 7.02 (dd, 3J = 7.6 Hz, 3J = 12.8 Hz, 12 H, 12 $m\text{-CH}_{\text{Ph}}$), 8.11 (d, 8.0 Hz, 4 H, 4 $o\text{-CH}_{\text{Tol}}$) ppm.

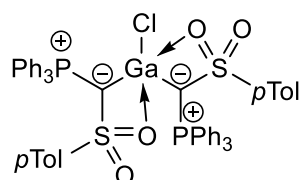
$^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (100.7 MHz, RT, C_6D_6): δ = 21.0 (2 CH_3), 53.2 (SC_{qP}), 128.2 ($^3J_{\text{CP}}$ = 29.0 Hz, 12 $m\text{-CH}_{\text{Ph}}$), 128.4 (4 $o\text{-CH}_{\text{Tol}}$), 128.7 (4 $m\text{-CH}_{\text{Tol}}$), 129.1 ($i\text{-C}_{\text{q,Ph}}$) 131.6 (d, $^4J_{\text{CP}}$ = 2.7 Hz, 6 $p\text{-CH}_{\text{Ph}}$), 134.3 (d, $^2J_{\text{CP}}$ = 10.4 Hz, 12 $o\text{-CH}_{\text{Ph}}$), 139.9 (2 $\text{CH}_3\text{C}_{\text{q,Tol}}$), 145.2 (2 $\text{SC}_{\text{q,Tol}}$) ppm.

$^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$ NMR (162.1 MHz, RT, C_6D_6): δ = 6.5 ppm.

IR (ATR): 3017 (w), 1597 (w), 1482 (w), 1435 (m), 1211 (m), 1180 (w), 1142 (s), 1105 (m), 1022 (w), 994 (m), 825 (m), 813 (m), 792 (m), 752 (m), 713 (m), 691 (m), 657 (m), 552 (vs), 514 (vs), 479 (m), 446 (m) cm^{-1} .

EA für $\text{C}_{56}\text{H}_{44}\text{AlO}_4\text{P}_2\text{S}_2$: berechnet: 67.78 % C, 4.81 % H, 6.96 % S
gemessen: 67.66 % C, 5.02 % H, 6.60 % S.

Y_2GaCl



19.5 mg (110.5 μmol , 1.0 eq) Gallium(III)chlorid und 100.0 mg (221.0 μmol , 2.0 eq) **NaY** wurden vorgelegt. Im Anschluss wurden 1.0 mL THF zugegeben und die resultierende hellgelbe Suspension bis zur vollständigen Entfärbung sofort intensiv gerührt. Nach Filtration wurde *n*-Hexan in die Lösung diffundiert, wodurch 34.5 mg (35.8 μmol) des Produkts in Form eines farblosen Feststoffs auskristallisierten.

Ausbeute: 32 % (34.5 mg, 35.8 μmol).

Schmelzpunkt: 245 $^{\circ}\text{C}$ (Zers.).

^1H NMR (400.3 MHz, RT, $\text{THF-}d_8$): δ = 1.82 (s, 6 H, 2 CH_3), 6.55 (d, $^3J_{\text{HH}}$ = 8.0 Hz, 4 H, 4 $m\text{-CH}_{\text{Tol}}$), 6.98-7.03 (m, 6 H, 6 $p\text{-CH}_{\text{Ph}}$), 7.04-7.10 (m, 12 H, 12 $o\text{-CH}_{\text{Ph}}$), 7.99-8.06 (m, 16 H, 12 $m\text{-CH}_{\text{Ph}}$, 4 $o\text{-CH}_{\text{Tol}}$) ppm.

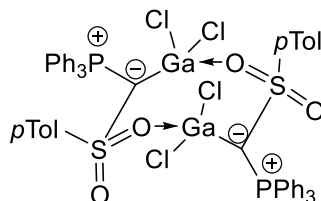
$^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (100.7 MHz, RT, $\text{THF-}d_8$): δ = 21.0 (2 CH_3), 127.4 (2 PC_{qS}), 127.5 (4 $m\text{-CH}_{\text{Tol}}$), 128.6 (d, $^2J_{\text{CP}}$ = 12.4 Hz, 12 $o\text{-CH}_{\text{Ph}}$), 131.8 (d, $^4J_{\text{CP}}$ = 2.9 Hz, 6 $p\text{-CH}_{\text{Ph}}$), 134.6 (d, $^3J_{\text{CP}}$ = 10.3 Hz, 12 $m\text{-CH}_{\text{Ph}}$), 139.5 ($\text{CH}_3\text{C}_{\text{q,Tol}}$), 146.3 ($\text{SC}_{\text{q,Tol}}$) ppm.

$^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$ NMR (162.1 MHz, RT, C_6D_6): δ = 8.3 ppm.

IR (ATR): 3060 (w), 1596 (w), 1482 (w), 1434 (m), 1219 (m), 1181 (w), 1103 (s), 1028 (m), 998 (m), 870 (m), 835 (m), 813 (m), 752 (m), 713 (m), 690 (s), 655 (s), 597 (w), 544 (vs), 535 (s), 512 (vs), 455 (m), 441 (m) cm^{-1} .

EA für $C_{56}H_{44}GaO_4P_2S_2$: berechnet: 64.78 % C, 4.60 % H, 6.65 % S
 gemessen: 64.54 % C, 4.80 % H, 6.35 % S.

(YGaCl₂)₂



13.2 mg (75.0 μ mol, 1.0 eq) Galliumtrichlorid und 33.9 mg (75.0 μ mol, 1.0 eq) **NaY** wurden in einem J. YOUNG-NMR-Röhrchen vorgelegt. Nach Zugabe von 0.6 mL *ortho*-Difluorbenzol wurde die resultierende Suspension sofort intensiv bis zur vollständigen Entfärbung geschüttelt. Nach einiger Zeit fiel das entstandene Rohprodukt schlagartig vollständig in Form eines farblosen Feststoffs aus. Das Lösungsmittel wurde dekantiert und leichtflüchtige Substanzen im Vakuum entfernt. Das Rohprodukt wurde in THF-*d*₈ gelöst und filtriert. Durch Diffusion von *n*-Hexan in die resultierende Lösung konnten 13.3 mg (37.0 μ mol) des Produkts in Form eines farblosen Feststoffs und in für eine Röntgenstrukturanalyse geeigneten Einkristalls erhalten werden.

Ausbeute: 62 % (13.3 mg, 37.0 μ mol).

Schmelzpunkt: 178.3 °C (zers.).

¹H NMR (400.3 MHz, RT, THF-*d*₈): δ = 2.24 (s, 6 H, CH₃), 6.85 (d, ³J_{HH} = 8.0 Hz, 4 H, 4 *m*-CH_{Tol}), 7.31 (td, ³J_{HH} = 7.8 Hz, ⁴J = 2.9 Hz, 12 H, 12 *o*-CH_{Ph}), 7.42-7.48 (m, 10 H, 4 *o*-CH_{Tol}, 6 *p*-CH_{Ph}), 7.60-7.67 (m, 12 H, 12 *m*-CH_{Ph}) ppm.

¹³C{¹H} NMR (100.7 MHz, RT, THF-*d*₈): δ = 21.4 (2 CH₃), 127.1 (4 *o*-CH_{Tol}), 128.6 (4 *m*-CH_{Tol}), 128.7 (³J_{CP} = 12.2 Hz, 12 *m*-CH_{Ph}), 129.1 (d, ¹J_{CP} = 90.6 Hz, 6 *i*-C_{q,Ph}), 132.4 (d, ⁴J_{CP} = 2.9 Hz, 6 *p*-CH_{Ph}), 135.8 (d, ³J_{CP} = 9.7 Hz, 12 *o*-CH_{Ph}), 139.5 (2 CH₃C_q), 149.6 (2 SC_{q,Tol}) ppm.

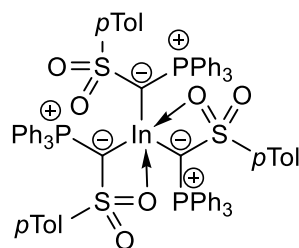
³¹P{¹H} NMR (162.1 MHz, RT, THF-*d*₈): δ = 14.3 ppm.

¹³C{¹H} NMR (100.7 MHz, RT, ODFB): δ = 19.9 (2 CH₃), 126.0 (2 *o*-CH_{Tol}), 128.2 (d, ¹J_{CP} = 82.2 Hz, 2 *i*-CH_{Ph}), 128.2 (d, ²J_{CP} = 12.6 Hz, 12 *m*-CH_{Ph}), 128.2 (4 *m*-CH_{Tol}), 132.2 (d, ⁴J_{CP} = 2.9 Hz, 6 *p*-CH_{Ph}), 134.6 (d, ³J_{CP} = 10.2 Hz, 12 *o*-CH_{Ph}), 141.2 (2 CH₃C_{q,Tol}) 150.3 (d, ³J_{CP} = 40.7 Hz, 2 SC_{q,Tol}) ppm.

³¹P{¹H} NMR (162.1 MHz, RT, ODFB): δ = 16.5 ppm.

IR (ATR): 3067 (w), 19.23 (w), 2235 (w), 2088 (w), 1721 (w), 1589 (w), 1495 (w), 1483 (w), 1439 (m), 1229.8 (m), 1159 (w), 1101 (s), 1081 (s), 1037 (s), 1027 (s), 998 (m), 906 (s), 836 (w), 816 (w), 747 (s), 715 (m), 690 (s), 658 (s), 603 (w), 548 (s), 521 (vs), 510 (vs) cm⁻¹.

EA: Nach mehreren Versuchen fehlgeschlagen.

Y_3In 

5.0 mg (22.6 μmol , 1.0 eq) Indium(III)chlorid und 30.7 mg (67.8 μmol , 3.0 eq) wurden in einem J. YOUNG-NMR-Röhrchen vorgelegt. Nach Zugabe von 0.6 mL THF wurde die Mischung direkt intensiv geschüttelt, wobei sich eine farblose Suspension bildete. Nach Filtration wurde *n*-Hexan in die Lösung diffundiert, wodurch 3.2 mg (2.3 μmol) des Produkts in Form eines farblosen Feststoffs auskristallisierten.

Ausbeute: 10 % (3.2 mg, 2.3 μmol).

Schmelzpunkt: >240 °C.

^1H NMR (400.3 MHz, RT, THF- d_8): δ = 2.20 (s, 9 H, 3 CH_3), 6.58 (d, $^3J_{\text{HH}}$ = 8.1 Hz, 6 H, 6 *o*- CH_{Tol}), 6.89-7.04 (18 H, 18 *o*- CH_{Ph}), 7.18 (t, $^3J_{\text{HH}}$ = 7.5 Hz, 9 H, 9 *p*- CH_{Ph}), 7.46 (d, $^3J_{\text{HH}}$ = 8.3 Hz, 6 H, 6 *m*- CH_{Tol}), 7.52-7.63 (m, 18 H, 18 *m*- CH_{Ph}) ppm.

$^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (100.7 MHz, RT, THF- d_8): δ = 21.4 (3 CH_3), 128.0 (6 *m*- CH_{Tol}), 128.3 (6 *o*- CH_{Tol}), 128.6 (d, $^2J_{\text{CP}}$ = 12.0 Hz, 18 *o*- CH_{Ph}), 129.4 (d, $^1J_{\text{CP}}$ = 76.9 Hz, 9 *i*- CH_{Ph}), 130.3 (d, $^1J_{\text{CP}}$ = 89.6 Hz, 3 InC_q), 131.5 (9 *p*- CH_{Ph}), 135.5 (d, $^3J_{\text{CP}}$ = 10.1 Hz, 18 *m*- CH_{Ph}), 138.7 (C_qCH_3), 148.7 ($\text{SC}_{q,\text{Tol}}$) ppm.

$^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$ NMR (162.1 MHz, RT, THF- d_8): δ = 10.9 ppm.

IR (ATR): 3056 (w), 1494 (m), 1483 (w), 1436 (m), 1244 (w), 1207 (m), 1100 (s), 1081 (m), 1057 (s), 1027 (m), 1014 (m), 999 (w), 877 (w), 850 (m), 827 (m), 814 (m), 793 (m), 748 (m), 711 (m), 691 (s), 651 (s), 586 (w), 545 (vs), 526 (vs), 518 (vs), 509 (vs) cm^{-1} .

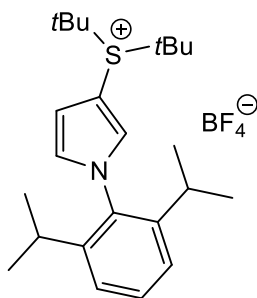
EA für $\text{C}_{78}\text{H}_{66}\text{InO}_6\text{P}_3\text{S}_3$:

berechnet: 66.76 % C, 4.74 % H, 6.86 % S

gemessen: 66.49 % C, 4.70 % H, 7.01 % S.

5.5.3 Weitere versuchte Umsetzungen

Di-tert-butyl-(N-(2,6-diisopropylphenyl)pyrrol-2-yl)sulfoniumtetrafluoroborat **95a**



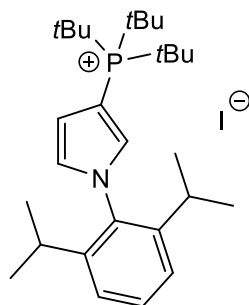
A) Die Synthese erfolgte nach modifizierten Literaturvorschriften.^[39,98,99]

713.8 mg (4.4 mmol, 1.00 eq) *Di-tert*-butylsulfoxid und 1.00 g (4.4 mmol, 1.00 eq) *N*-(2,6-Diisopropylphenyl)pyrrol **94** wurden in 5 mL Dichlormethan gelöst. Nach Zugabe von 0.61 mL (923.8 mg, 4.4 mmol, 1.00 eq) Trifluoressigsäureanhydrid bei -60 °C wurde die Reaktionslösung langsam auf Raumtemperatur erwärmt, wobei sie sich bei etwa -50 °C tiefblau färbte. Nach dreimaliger Extraktion mit 10 mL einer gesättigten Natriumtetrafluoroboratlösung wurden die vereinigten organischen Phasen dreimal mit je 10 mL Dichlormethan extrahiert und die vereinten organischen Phasen über Magnesiumsulfat getrocknet. Es konnte keine Umsetzung des Pyrrols beobachtet werden.

Auch erhöhte Temperaturen führten zu keiner Umsetzung.

B) Zu einer Suspension von 50.0 mg (254.8 µmol, 0.9 eq) Silbertetrafluoroborat in 5 mL Dichlormethan wurde eine Lösung von 100 mg (283.1 µmol, 1.0 eq) *N*-(2,6-Di-*iso*-propylphenyl)-3-iodopyrrol **91** und 37.3 mg (254.8 µmol, 0.9 eq) *Di-tert*-butylsulfid gegeben, wobei ein gelbbrauner Niederschlag ausfiel. Die Lösung wurde dekantiert und der Rückstand so lange mit Dichlormethan gewaschen, bis der Rückstand farblos war. Flüchtige Substanzen der vereinten organischen Phasen wurden im Vakuum entfernt. NMR-spektroskopische Experimente deuteten auf ein komplexes Produktgemisch ohne charakteristische Signale hin.

C) Die Synthese erfolgte nicht unter Argonatmosphäre. 100 mg (283.1 µmol, 1.0 eq) *N*-(2,6-Di-*iso*-propylphenyl)-3-iodopyrrol **91** und 37 mg (254.8 µmol, 0.9 eq) *Di-tert*-butylsulfid wurden in 2 mL *n*-Hexan gelöst und die Lösung für drei Tage bei Raumtemperatur gerührt. Im Anschluss wurde sie in Dichlormethan aufgenommen und mit 5 mL einer gesättigten Natriumtetrafluoroboratlösung extrahiert. Flüchtige Substanzen der organischen Phase wurden im Vakuum entfernt. Es konnte keine Reaktion beobachtet werden.

Tri-tert-butyl-(N-(2,6-diisopropylphenyl)pyrrol)phosphoniumiodid **100b**

Die Synthese erfolgte nach einer modifizierten Literaturvorschrift.^[100]

601.4 mg (2.8 mmol, 1.05 eq) Tri-*tert*-butylphosphan und 38.9 mg (141.5 μ mol, 0.05 eq) Bis(cycloocta-1,5-dien)nickel(0) wurden in 10 mL Ethanol gelöst. Nach Zugabe von in 10 mL Ethanol gelöstem 1.00 g (2.8 mmol, 1.00 eq) *N*-(2,6-Diisopropylphenyl)-3-iodopyrrol **101** wurde die Lösung 16 Stunden refluxiert, wobei sie sich bereits nach etwa 20 Minuten schwarz färbte. Das Lösungsmittel wurde im Vakuum entfernt und der resultierende Feststoff in 35 mL einer gesättigten Natriumtetrafluoroboratlösung in Dichlormethan gerührt. Nach entfernen des Lösungsmittels wurde das resultierende schwarze Öl in 5 mL THF aufgenommen und filtriert. Es konnte keine Reaktion beobachtet werden.

Chloridabstraktion von Y₂AlCl

Zu aus 5.0 mg (37.5 μ mol, 1.0 eq) Aluminiumtrichlorid und 33.9 mg (75.0 μ mol, 2.0 eq) **NaY** in einem J. YOUNG-NMR-Röhrchen in 0.6 mL des jeweils angegebenen Lösungsmittels *in situ* generiertem **Y₂AlCl** wurde ein Äquivalent (37.5 μ mol) des jeweiligen Chloridabstraktionsmittels gegeben. Die Resultate können der folgenden **Tabelle 5.1** entnommen werden.

Tabelle 5.1. Abstraktionsmittel und Beobachtungen der versuchten Chloridabstraktion von *in situ* generiertem **Y₂AlCl**.

Abstraktionsmittel	Masse	Lösungsmittel	Beobachtung
AgBF ₄	7.3 mg	THF- <i>d</i> ₈	Unter Gelbfärbung bildet sich ein komplexes Produktgemisch.
NaBAr ^F ₄	33.2 mg	THF- <i>d</i> ₈	Es kam zu einer Braunfärbung und der Bildung eines komplexen Produktgemischs, das sich im Laufe der Zeit zersetzt hat.
NaBAr ^F ₄	33.2 mg	C ₆ D ₆	Unter Rosa-/Braunfärbung bildete sich ein komplexes, in Teilen unlösliches, Produktgemisch.

NaBAr ^F ₄	33.2 mg	ODFB	Es bildete sich unter Braunfärbung ein komplexes, in Teilen unlösliches, Produktgemisch.
NaBF ₄	7.3 mg	C ₆ D ₆	Es konnte weder bei Raumtemperatur noch nach Erhitzen auf 60 °C für 42 Stunden eine Reaktion beobachtet werden.
NaBF ₄	4.1 mg	ODFB	Es konnte keine Reaktion beobachtet werden.
GaCl ₃	6.6 mg	THF- <i>d</i> ₈	Es entstand ein Produktgemisch, das (YGaCl ₂) ₂ als Hauptprodukt enthält. Durch Diffusion von <i>n</i> -Hexan in die Reaktionslösung konnte {Na[Y→GaCl ₃]} ₂ in Form von für die Röntgenstrukturanalyse geeigneten Einkristallen erhalten werden.
AgSbF ₆	12.9 mg	THF	Es entstand ein unlöslicher, farbloser Feststoff.
LiNTf ₂	10.8 mg	THF	Es konnte keine Reaktion beobachtet werden.
AgPF ₆	9.5 mg	THF	Es konnte keine Reaktion beobachtet werden.
NaN ₃	2.4 mg	THF- <i>d</i> ₈	Es konnte keine Reaktion beobachtet werden.
NaOH	1.5 mg	THF- <i>d</i> ₈	Es konnte keine Reaktion beobachtet werden. ^{ff}

Chloridabstraktion von Y₂GaCl

Zu aus 5.0 mg (28.4 μmol, 1.0 eq) Aluminiumtrichlorid und 25.7 mg (56.8 μmol, 2.0 eq) NaY in einem J. YOUNG-NMR-Röhrchen in 0.6 mL des jeweils angegebenen Lösungsmittels *in situ* generiertem Y₂AlCl wurde ein Äquivalent (28.4 μmol) des jeweiligen Chloridabstraktionsmittels gegeben. Die Resultate können der folgenden Tabelle 5.2 entnommen werden.

^{ff} Durch Diffusion von *n*-Hexan in die Reaktionslösung konnte Y₃Al als Nebenprodukt der Y₂AlCl-Synthese in Form von für die Röntgenstrukturanalyse geeigneten Einkristallen erhalten werden.

Tabelle 5.2. Abstraktionsmittel und Beobachtungen der versuchten Chloridabstraktion von *in situ* generiertem **Y₂GaCl**.

Abstraktionsmittel	Masse	Lösungsmittel	Beobachtung
AgBF ₄	5.5 mg	THF- <i>d</i> ₈	Ein violetter Feststoff fiel aus und es entstand ein komplexes Produktgemisch
AlCl ₃	3.8 mg	THF- <i>d</i> ₈	Es bildete sich eine klare Lösung, die Y₂AlCl und Y₂GaCl im Verhältnis 1:5 enthielt.
AgSbF ₆	9.8 mg	THF	Es bildete sich ein farbloser Niederschlag und ein komplexes Produktgemisch.
LiNTf ₂	8.2 mg	THF	Es konnte keine Reaktion beobachtet werden.
AgPF ₆	7.2 mg	THF	Es bildete sich ein komplexes Produktgemisch.
NaBF ₄	3.1 mg	ODFB	Es konnte keine Reaktion beobachtet werden.
NaN ₃	2.4 mg	THF- <i>d</i> ₈	Es konnte keine Reaktion beobachtet werden.

Reduktion von Y₂AlCl

Zu aus 1.0 eq Aluminiumtrichlorid und 2.0 eq **NaY** in einem J. YOUNG-NMR-Röhrchen in 0.6 mL des jeweils angegebenen Lösungsmittels *in situ* generiertem **Y₂AlCl** wurde die jeweils angegebene Menge des jeweiligen Reduktionsmittels gegeben. Die Resultate können der folgenden Tabelle 5.3 entnommen werden.

Tabelle 5.3. Abstraktionsmittel und Beobachtungen der versuchten Reduktion von *in situ* generiertem **Y₂AlCl**.

Einwaagen		Reduktionsmittel		Lösungsmittel	Beobachtung
AlCl ₃	NaY	Verbindung	Einwaage		
6.5 mg 48.6 µmol	44.0 mg 97.2 µmol	K	1.9 mg 48.6 mmol 1.0 eq	THF- <i>d</i> ₈	Es konnte keine Reaktion beobachtet werden.
5.0 mg 37.5 µmol	33.9 mg 75.0 µmol	K	3.5 mg 89.5 mmol 2.4 eq	THF- <i>d</i> ₈	Es konnte auch nach Behandlung im Ultraschallbad für einige Minuten keine

					Reaktion beobachtet werden.
10.0 mg 75.0 μmol	67.9 mg 150.0 μmol	K-Spiegel	3.5 mg 89.5 mmol 1.5 eq	THF- d_8	Es konnte auch nach Behandlung im Ultraschallbad für einige Minuten keine Reaktion beobachtet werden.
5.5 mg 41.4 μmol	37.5 mg 82.8 μmol	Li-Naphthalid	0.5 mL 5.6 mg 41.4 μmol 1.0 eq	THF	Es kam zu einer Gelbfärbung und es bildete sich YH als Zersetzungsprodukt.
7.0 mg 52.5 μmol	47.5 mg 105.0 μmol	KC ₈	7.1 mg 52.5 μmol 1.0 eq	C ₆ D ₆	Bei Raumtemperatur konnte keine Reaktion beobachtet werden, bei 80 °C bildete sich nach mehreren Tagen ein komplexes Produktgemisch.
7.0 mg 52.5 μmol	47.5 mg 105.0 μmol	KC ₈	7.1 mg 147.9 μmol 2.8 eq	C ₆ D ₆	Bei Raumtemperatur konnte keine Reaktion beobachtet werden, bei 80 °C bildete sich nach mehreren Tagen ein komplexes Produktgemisch.

Reduktion von **Y₂GaCl**

Zu aus 1.0 eq Galliumtrichlorid und 2.0 eq **NaY** in einem J. YOUNG-NMR-Röhrchen in 0.6 mL des jeweils angegebenen Lösungsmittels *in situ* generiertem **Y₂GaCl** wurde die jeweils angegebene Menge des jeweiligen Reduktionsmittels gegeben. Die Resultate können der folgenden Tabelle 5.4 entnommen werden.

Tabelle 5.4. Abstraktionsmittel und Beobachtungen der versuchten Reduktion von *in situ* generiertem Y_2GaCl .

Einwaagen		Reduktionsmittel		Lösungsmittel	Beobachtung
GaCl_3	NaY	Verbindung	Einwaage		
5.0 mg 28.4 μmol	25.7 mg 56.8 μmol	K	3.5 mg 89.5 mmol 2.2 eq	THF- d_8	Zunächst konnte keine Reaktion beobachtet werden, eine Behandlung im Ultraschallbad führte zur Bildung eines braunen, unlöslichen Feststoffs.
7.3 mg 41.4 μmol	37.5 mg 82.8 μmol	Li-Naphthalid	0.5 mL 5.6 mmol 41.4 mmol 1.5 eq	THF	Es bildete sich unter Entfärbung ein komplexes Produktgemisch.
7.0 mg 39.8 μmol	36.0 mg 79.5 μmol	KC_8	5.4 mg 39.8 μmol 1.0 eq	C_6D_6	Es bildete sich ein komplexes Produktgemisch.
7.0 mg 39.8 μmol	36.0 mg 79.5 μmol	KC_8	20.0 mg 148.2 μmol 3.7 eq	C_6D_6	Es bildete sich ein komplexes Produktgemisch.

Versuchte Synthese von $[\text{Y}_2\text{In}][\text{BAR}^{\text{F}}_4]$

Zu aus 7.0 mg (31.7 μmol , 1.0 eq) Indiumtrichlorid und 43.0 mg (95.0 μmol , 3.0 eq) **NaY** in einem J. YOUNG-NMR-Röhrchen in 0.6 mL THF- d_8 oder ODFB *in-situ* generiertem Y_3In wurden 32.0 mg (31.7 μmol , 1.0 eq) BROOKHARTS Säure gegeben. Dabei fiel ein farbloser unlöslicher Feststoff aus, der nicht weiter charakterisiert werden konnte.

Versuchte Synthese von $[\text{Y}_2\text{Sb}][\text{BAR}^{\text{F}}_4]$

Zu aus 5.0 mg (21.9 μmol , 1.0 eq) Antimontrichlorid und 29.7 mg (65.7 μmol , 3.0 eq) **NaY** in einem J. YOUNG-NMR-Röhrchen in 0.6 mL THF- d_8 oder ODFB *in-situ* generiertem Y_3Sb wurden 22.2 mg (21.9 μmol , 1.0 eq) BROOKHARTS Säure gegeben. Dabei entfärbte sich die Lösung und ein unlöslicher, farbloser Feststoff fiel aus, der nicht weiter charakterisiert werden konnte.

Versuchte Synthese von $[Y_2Bi][BAr^F_4]$

Zu aus 4.0 mg (12.7 μmol , 1.0 eq) Bismuttrichlorid und 17.2 mg (38.1 μmol , 3.0 eq) **NaY** in einem J. YOUNG-NMR-Röhrchen in 0.6 mL THF- d_8 *in-situ* generiertem **Y₃Bi** wurden 12.8 mg (12.7 μmol , 1.0 eq) BROOKHARTS Säure gegeben. Dabei entfärbte sich die Lösung und ein unlöslicher, farbloser Feststoff fiel aus, der nicht weiter charakterisiert werden konnte.

6 Abkürzungsverzeichnis

Å	Angström
Ad	Adamantyl
ATR	Attenuated Total Reflection (abgeschwächte Totalreflexion)
AYC	Amino(ylid)stabilisierte Carbene
BAr ^F ₄	Tetrakis[3,5-bis(trifluormethyl)phenyl]borat-Anion
BuLi	Butyllithium
Bn	Benzylgruppe
CDP	Hexaphenylcarbodiphosphoran
cod	Cyclooctadienylligand
COSY	Correlated Spectroscopy (NMR)
Cy	Cyclohexylgruppe
δ	chemische Verschiebung
DCM	Dichlormethan
DEPT	Distortionless Enhancement by Polarization Transfer (NMR)
Dipp	2,6-Diisopropylphenylgruppe
DFT	Dichtefunktionaltheorie
DMSO	Dimethylsulfoxid
DOSY	Diffusion Ordered Spectroscopy
e	Elektronen
eq	Äquivalent
et al.	und andere
EE	Essigsäureethylester
hept	Heptett
HMDS	Hexamethyldisilazan
HMBC	Heteronuclear Multiple Bond Correlation
HMQC	Heteronuclear Multiple Quantum Correlation
HSAB	Hard and Soft Acids and Bases (Harte und Weiche Säuren und Basen)
Hz	Hertz
<i>i</i>	<i>ipso</i> -Position
INEPT	Insensitive Nuclei Enhanced by Polarization Transfer
<i>i</i> Pr	<i>iso</i> -Propylgruppe
IR	Infrarot
IUPAC	International Union of Pure and Applied Chemistry
<i>J</i>	Kopplungskonstante (NMR)
LDA	Lithiumdiisopropylamid

m (NMR)	Multiplett
<i>m</i>	<i>meta</i> -Position
Me	Methylgruppe
MeLi	Methylolithium
Mes	Mesitylgruppe (2,4,6-Trimethylphenylgruppe)
mL	Milliliter
MS	Massenspektrometrie
<i>mTol</i>	<i>meta</i> -Tolylgruppe
m/z	Masse/Ladungs-Verhältnis (MS)
NBO	Natural Bond Orbital
nm	Nanometer
NMR	Nuclear Magnetic Resonance (Kernspinresonanz)
NaHMDS	Natriumhexamethyldisilazan
<i>o</i>	<i>ortho</i> -Position
<i>oAnisyl</i>	<i>ortho</i> -Anisylgruppe
ODFB	<i>ortho</i> -Difluorbenzol
<i>oTol</i>	<i>ortho</i> -Tolylgruppe
<i>p</i>	<i>para</i> -Position
<i>pTol</i>	<i>para</i> -Tolylgruppe
Ph	Phenylgruppe
s	Singulett (NMR)
t	Triplett (NMR)
<i>tBu</i>	<i>tert</i> -Butylgruppe
TEP	TOLMANS Electronic Parameter
TFAA	Trifluoressigsäureanhydrid
THF	Tetrahydrofuran
THT	Tetrahydrothiophen
Tos	Tosylgruppe (<i>para</i> -Toluolsulfonylgruppe)
Tripp	2,4,6-Triisopropylphenylgruppe
v.l.n.r.	von links nach rechts
xs.	Überschuss
Y*	nicht näher spezifizierter Ylidligand

Die vollständigen mit CC-BY, CC-BY-NC und CC-BY-NC-ND angegebenen Lizenzen können unter <https://creativecommons.org/about/cclicenses/> eingesehen werden.

7 Literaturverzeichnis

- [1] J. M. Thomas, *Philos. Trans. R. Soc., A* **2016**, 374.
- [2] Deutsche Rohstoffagentur, *Preismonitor*. Dezember 2019, **2020**.
- [3] K. S. Egorova, V. P. Ananikov, *Organometallics* **2017**, 36, 4071.
- [4] P. T. Anastas, J. C. Warner, *Green chemistry. Theory and practice*, 1. Aufl., Oxford University Press, Oxford, **2000**.
- [5] D. R. Lide, *CRC handbook of chemistry and physics, 2008-2009*, 89. Aufl., CRC; Taylor & Francis, Boca Raton, Fla., London, **2008**.
- [6] C. Allègre, G. Manhès, É. Lewin, *Earth Planet. Sci. Lett.* **2001**, 185, 49.
- [7] P. P. Power, *Nature* **2010**, 463, 171.
- [8] G. Bertrand, *Chem. Rev.* **2010**, 110, 3851.
- [9] a) A. Brück, D. Gallego, W. Wang, E. Irran, M. Driess, J. F. Hartwig, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2012**, 51, 11478; *Angew. Chem.* **2012**, 124, 11645; b) T. Dröge, F. Glorius, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2010**, 49, 6940; *Angew. Chem.* **2010**, 122, 7094; c) A. D. Hunter, V. Mozol, S. D. Tsai, *Organometallics* **1992**, 11, 2251.
- [10] C. A. Tolman, *Chem. Rev.* **1977**, 77, 313.
- [11] H. V. Huynh, *Chem. Rev.* **2018**, 118, 9457.
- [12] A. Sarbajna, V. S. V. S. N. Swamy, V. H. Gessner, *Chem. Sci.* **2021**, 12, 2016.
- [13] H. Schmidbaur, *Acc. Chem. Res.* **1975**, 8, 62.
- [14] A. Michaelis, H. V. Gimborn, *Chem. Ber.* **1894**, 27, 272.
- [15] A. Ramazani, A. Reza Kazemizadeh, *Curr. Org. Chem.* **2011**, 15, 3986.
- [16] F. Ramirez, S. Derschowitz, *J. Org. Chem.* **1957**, 22, 41.
- [17] H. Staudinger, J. Meyer, *Helv. Chim. Acta* **1919**, 2, 635.
- [18] G. Wittig, U. Schöllkopf, *Chem. Ber.* **1954**, 87, 1318.
- [19] a) I. Fechete, *C. R. Chim.* **2016**, 19, 685; b) R. W. Hoffmann, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2001**, 40, 1411; *Angew. Chem.* **2001**, 113, 1457.
- [20] P. A. Byrne, D. G. Gilheany, *Chem. Soc. Rev.* **2013**, 42, 6670.
- [21] P. V. R. Schleyer, T. Clark, A. J. Kos, G. W. Spitznagel, C. Rohde, D. Arad, K. N. Houk, N. G. Rondan, *J. Am. Chem. Soc.* **1984**, 106, 6467.
- [22] S. M. Bachrach, *J. Org. Chem.* **1992**, 57, 4367.
- [23] E. Riedel, C. Janiak, H.-J. Meyer, *Riedel: Moderne anorganische Chemie*, De Gruyter.
- [24] V. H. Gessner, *Modern Ylide Chemistry*, Springer International Publishing, Cham, **2018**.
- [25] H. Lischka, *J. Am. Chem. Soc.* **1977**, 99, 353.
- [26] D. Himmel, I. Krossing, A. Schnepf, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **2014**, 53, 370; *Angew. Chem.* **2014**, 126, 378.

- [27] G. Frenking, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **2014**, 53, 6040; *Angew. Chem.* **2014**, 126, 6152.
- [28] D. Himmel, I. Krossing, A. Schnepf, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **2014**, 53, 6047; *Angew. Chem.* **2014**, 126, 6159.
- [29] A. Nandi, S. Kozuch, *Chem. Eur. J.* **2020**, 26, 759.
- [30] M. Nič, J. Jiráť, B. Košata, A. Jenkins, A. McNaught, *IUPAC Compendium of Chemical Terminology*, IUPAC, Research Triangle Park, NC, **2009**.
- [31] G. P. Moss, P. A. S. Smith, D. Tavernier, *Pure Appl. Chem.* **1995**, 67, 1307.
- [32] K. Jiang, Y.-C. Chen, *Tetrahedron Lett.* **2014**, 55, 2049.
- [33] L. Roiser, K. Zielke, M. Waser, *Asian J. Org. Chem.* **2018**, 7, 852.
- [34] G. Qiu, Y. Kuang, J. Wu, *Adv. Synth. Catal.* **2014**, 356, 3483.
- [35] J. Adrio, J. C. Carretero, *Chem. Commun.* **2014**, 50, 12434.
- [36] a) D. Moderhack, *Heterocycles* **2014**, 89, 2053; b) J. Jacobs, E. van Hende, S. Claessens, N. de Kimpe, *Curr. Org. Chem.* **2011**, 15, 1340; c) T. Ishikawa, *Chem. Pharm. Bull.* **2010**, 58, 1555; d) A. Kakehi, *Heterocycles* **2012**, 85, 1529.
- [37] S. Liddle, J. Seed, H. Sharpe, H. Fitcher, A. Wooles, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2020**, 59, 15870; *Angew. Chem.* **2020**, 132, 16004.
- [38] D. Lloyd, I. Gosney, R. A. Ormiston, *Chem. Soc. Rev.* **1987**, 16, 45.
- [39] K. Hartke, D. Teuber, H.-D. Gerber, *Tetrahedron* **1988**, 44, 3261.
- [40] N. N. Magdesieva, T. A. Sergeeva, *Chem. Heterocycl. Compd.* **1990**, 26, 123.
- [41] V. K. Aggarwal, J. N. Harvey, R. Robiette, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2005**, 44, 5468; *Angew. Chem.* **2005**, 117, 5604.
- [42] G. D. Bisag, S. Ruggieri, M. Fochi, L. Bernardi, *Org. Biomol. Chem.* **2020**, 18, 8793.
- [43] J. Drabowicz, A. Rzewnicka, R. Żurawiński, *Molecules* **2020**, 25.
- [44] a) W. H. Pirkle, G. F. Koser, *J. Am. Chem. Soc.* **1968**, 90, 3598; b) M. Ochiai, N. Tada, T. Okada, A. Sota, K. Miyamoto, *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, 130, 2118.
- [45] a) M. M. Heravi, M. Ghanbarian, V. Zadsirjan, B. Alimadadi Jani, *Monatsh. Chem.* **2019**, 150, 1365; b) S. Eguchi, Y. Matsushita, K. Yamashita, *Org. Prep. Proced.* **1992**, 24, 209.
- [46] J. J. Li, *Name Reactions*, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, **2009**.
- [47] F. Volatron, O. Eisenstein, *J. Am. Chem. Soc.* **1987**, 109, 1.
- [48] a) D. Baidilov, *Synthesis* **2020**, 52, 21; b) J. A. Vanecko, H. Wan, F. G. West, *Tetrahedron* **2006**, 62, 1043.
- [49] T. Oswald, M. Fischer, N. Struckmann, M. Schmidtman, R. Beckhaus, *Organometallics* **2019**, 38, 829.
- [50] a) H. Schmidbaur, *Angew. Chem.* **1983**, 95, 980; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1983**, 22, 907; b) J. Stein, J. P. Fackler, C. Paparizos, H. W. Chen, *J. Am. Chem. Soc.* **1981**, 103,

- 2192; c) W. C. Kaska, D. K. Mitchell, R. F. Reichelderfer, W. D. Korte, *J. Am. Chem. Soc.* **1974**, 96, 2847; d) W. C. Kaska, *Coord. Chem. Rev.* **1983**, 48, 1; e) W. C. Kaska in *Inorganic Reactions and Methods* (Hrsg.: J. J. Zuckerman, A. P. Hagen), John Wiley & Sons, Inc, Hoboken, NJ, USA, **1991**, S. 104–107.
- [51] M. C. Gimeno, A. Johnson, *Chem. Eur. J.* **2020**, 26, 11256.
- [52] a) H. Schumann, F.-W. Reier, *Inorg. Chim. Acta* **1984**, 95, 43; b) K. A. Rufanov, B. H. Müller, A. Spannenberg, U. Rosenthal, *New J. Chem.* **2006**, 30, 29.
- [53] G. Facchin, R. Campostrini, R. A. Michelin, *J. Organomet. Chem.* **1985**, 294, c21-c25.
- [54] H. Darmandeh, T. Scherpf, K.-S. Feichtner, C. Schwarz, V. H. Gessner, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2020**, 646, 835.
- [55] T. Scherpf, R. Wirth, S. Molitor, K.-S. Feichtner, V. H. Gessner, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2015**, 54, 8542; *Angew. Chem.* **2015**, 127, 8662.
- [56] M. Schlosser, T. Kadibelban, G. Steinhoff, *Angew. Chem.* **1966**, 78, 1018; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1966**, 5, 968.
- [57] H. J. Bestmann, M. Schmidt, *Angew. Chem.* **1987**, 99, 64; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1987**, 26, 79.
- [58] T. Baumgartner, B. Schinkels, D. Gudat, M. Nieger, E. Niecke, *J. Am. Chem. Soc.* **1997**, 119, 12410.
- [59] S. Goumri-Magnet, H. Gornitzka, A. Baceiredo, G. Bertrand, *Angew. Chem.* **1999**, 111, 710; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1999**, 38, 678.
- [60] a) L. T. Scharf, D. M. Andrada, G. Frenking, V. H. Gessner, *Chem. Eur. J.* **2017**, 23, 4422; b) L. T. Scharf, V. H. Gessner, *Inorg. Chem.* **2017**, 56, 8599.
- [61] A. H. Cowley, F. P. Gabbaï, C. J. Carrano, L. M. Mokry, M. R. Bond, G. Bertrand, *Angew. Chem., Int. Ed.* **1994**, 33, 578; *Angew. Chem.* **1994**, 106, 584.
- [62] a) N. Dellus, T. Kato, X. Bagán, N. Saffon-Merceron, V. Branchadell, A. Baceiredo, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **2010**, 49, 6798; *Angew. Chem.* **2010**, 122, 6950; b) C. A. Dyker, V. Lavallo, B. Donnadieu, G. Bertrand, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **2008**, 47, 3206; *Angew. Chem.* **2008**, 120, 3250; c) T. Morosaki, T. Suzuki, W.-W. Wang, S. Nagase, T. Fujii, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **2014**, 53, 9569; *Angew. Chem.* **2014**, 126, 9723; d) A. W. Johnson, H. Schubert, *J. Org. Chem.* **1970**, 35, 2678.
- [63] A. Fürstner, M. Alcarazo, R. Goddard, C. W. Lehmann, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **2008**, 47, 3210; *Angew. Chem.* **2008**, 120, 3254.
- [64] a) U. Schubert, C. Kappenstein, B. Milewski-Mahrla, H. Schmidbaur, *Eur. J. Inorg. Chem.* **1981**, 114, 3070; b) A. T. Vincent, P. J. Wheatley, *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* **1972**, 617; c) R. Appel, U. Baumeister, F. Knoch, *Eur. J. Inorg. Chem.* **1983**, 116, 2275.

- [65] a) H. Schmidbaur, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2007**, *46*, 2984-5; author reply 2986-7; *Angew. Chem.* **2007**, *119*, 3042; b) G. Frenking, B. Neumüller, W. Petz, R. Tonner, F. Öxler, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **2007**, *46*, 2986; *Angew. Chem.* **2007**, *119*, 3044; c) R. Tonner, G. Frenking, *Chem. Eur. J.* **2008**, *14*, 3260; d) R. Tonner, G. Frenking, *Chem. Eur. J.* **2008**, *14*, 3273; e) R. Tonner, F. Oxler, B. Neumüller, W. Petz, G. Frenking, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2006**, *45*, 8038; *Angew. Chem.* **2006**, *118*, 8206.
- [66] M. Alcarazo, C. W. Lehmann, A. Anoop, W. Thiel, A. Fürstner, *Nat. Chem.* **2009**, *1*, 295-301.
- [67] A. Igau, H. Grutzmacher, A. Baceiredo, G. Bertrand, *J. Am. Chem. Soc.* **1988**, *110*, 6463.
- [68] A. J. Arduengo, R. L. Harlow, M. Kline, *J. Am. Chem. Soc.* **1991**, *113*, 361.
- [69] M. Scholl, T. M. Trnka, J. P. Morgan, R. H. Grubbs, *Tetrahedron Lett.* **1999**, *40*, 2247.
- [70] A. J. Arduengo, G. Bertrand, *Chem. Rev.* **2009**, *109*, 3209.
- [71] M. N. Hopkinson, C. Richter, M. Schedler, F. Glorius, *Nature* **2014**, *510*, 485.
- [72] a) Q. Zhao, G. Meng, S. P. Nolan, M. Szostak, *Chem. Rev.* **2020**, *120*, 1981; b) D. Janssen-Müller, C. Schlepphorst, F. Glorius, *Chem. Soc. Rev.* **2017**, *46*, 4845; c) S. Díez-González, N. Marion, S. P. Nolan, *Chem. Rev.* **2009**, *109*, 3612; d) Y.-Y. Lee, H.-W. Zseng, Z.-H. Tsai, Y.-S. Su, C.-H. Hu, H. M. Lee, *Organometallics* **2019**, *38*, 805; e) C. S. Cazin (Hrsg.) *Catalysis by Metal Complexes*, Springer Netherlands, Dordrecht, **2011**.
- [73] O. Briel, C. S. J. Cazin in *Catalysis by Metal Complexes* (Hrsg.: C. S. Cazin), Springer Netherlands, Dordrecht, **2011**, S. 315–324.
- [74] a) S. Naumann, A. P. Dove, *Polym. Int.* **2016**, *65*, 16; b) D. Enders, O. Niemeier, A. Henseler, *Chem. Rev.* **2007**, *107*, 5606; c) D. M. Flanigan, F. Romanov-Michailidis, N. A. White, T. Rovis, *Chem. Rev.* **2015**, *115*, 9307; d) N. Marion, S. Díez-González, S. P. Nolan, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2007**, *46*, 2988; *Angew. Chem.* **2007**, *119*, 3046; e) X. Yang, Y. Xie, J. Xu, S. Ren, B. Mondal, L. Zhou, W. Tian, X. Zhang, L. Hao, Z. Jin et al., *Angew. Chem.* **2021**, *133*, 7985; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **2021**, *60*, 7906.
- [75] C. D. Martin, M. Soleilhavoup, G. Bertrand, *Chem. Sci.* **2013**, *4*, 3020.
- [76] V. Nesterov, D. Reiter, P. Bag, P. Frisch, R. Holzner, A. Porzelt, S. Inoue, *Chem. Rev.* **2018**, *118*, 9678.
- [77] a) V. Nesterov, R. Baierl, F. Hanusch, A. E. Ferao, S. Inoue, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 14576; b) D. Nieder, C. B. Yildiz, A. Jana, M. Zimmer, V. Huch, D. Scheschkewitz, *Chem. Commun.* **2016**, *52*, 2799; c) M. Balmer, Y. J. Franzke, F. Weigend, C. von Hänisch, *Chem. Eur. J.* **2020**, *26*, 192.
- [78] H. Tanaka, M. Ichinohe, A. Sekiguchi, *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 5540.

- [79] H. Cui, M. Wu, P. Teng, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2016**, 2016, 4123.
- [80] L. Kristinsdóttir, P. Vasko, H. Niu, E. L. Kolychev, J. Campos, M. Á. Fuentes, J. Hicks, A. L. Thompson, S. Aldridge, *Chem. Eur. J.* **2019**, 25.
- [81] M. Melaimi, M. Soleilhavoup, G. Bertrand, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2010**, 49, 8810; *Angew. Chem.* **2010**, 122, 8992.
- [82] O. Schuster, L. Yang, H. G. Raubenheimer, M. Albrecht, *Chem. Rev.* **2009**, 109, 3445.
- [83] R. Nakano, R. Jazzar, G. Bertrand, *Nat. Chem.* **2018**, 10, 1196.
- [84] A. J. Arduengo, J. R. Goerlich, W. J. Marshall, *Liebigs Ann.* **1997**, 1997, 365.
- [85] D. Martin, A. Baceiredo, H. Gornitzka, W. W. Schoeller, G. Bertrand, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2005**, 44, 1700; *Angew. Chem.* **2005**, 117, 1728.
- [86] M. Alcarazo, R. M. Suárez, R. Goddard, A. Fürstner, *Chem. Eur. J.* **2010**, 16, 9746.
- [87] R. W. Alder, C. P. Butts, A. G. Orpen, *J. Am. Chem. Soc.* **1998**, 120, 11526.
- [88] a) V. Lavallo, J. Mafhouz, Y. Canac, B. Donnadieu, W. W. Schoeller, G. Bertrand, *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, 126, 8670; b) M. Alcarazo, K. Radkowski, R. Goddard, A. Fürstner, *Chem. Commun.* **2011**, 47, 776.
- [89] V. Lavallo, Y. Canac, C. Präsang, B. Donnadieu, G. Bertrand, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2005**, 44, 5705; *Angew. Chem.* **2005**, 117, 5851.
- [90] D. M. Andrada, N. Holzmann, T. Hamadi, G. Frenking, *Beilstein J. Org. Chem.* **2015**, 11, 2727.
- [91] B. Borthakur, A. K. Phukan, *Chem. Eur. J.* **2015**, 21, 11603.
- [92] D. Munz, *Organometallics* **2018**, 37, 275.
- [93] B. N. Haerizade, M. Z. Kassaei, H. Zandi, M. Koohi, A. A. Ahmadi, *J. Phys. Org. Chem.* **2014**, 27, 902.
- [94] R. A. Michelin, G. Facchin, D. Braga, P. Sabatino, *Organometallics* **1986**, 5, 2265.
- [95] R. A. Michelin, M. Mozzon, G. Facchin, D. Braga, P. Sabatino, *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* **1988**, 1803.
- [96] E. González-Fernández, J. Rust, M. Alcarazo, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2013**, 52, 11392; *Angew. Chem.* **2013**, 125, 11603.
- [97] S.-Y. Nakafuji, J. Kobayashi, T. Kawashima, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2008**, 47, 1141; *Angew. Chem.* **2008**, 120, 1157.
- [98] J. Kobayashi, S.-Y. Nakafuji, A. Yatabe, T. Kawashima, *Chem. Commun.* **2008**, 6233.
- [99] A. Fürstner, M. Alcarazo, K. Radkowski, C. W. Lehmann, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2008**, 47, 8302; *Angew. Chem.* **2008**, 120, 8426.
- [100] M. Asay, B. Donnadieu, A. Baceiredo, M. Soleilhavoup, G. Bertrand, *Inorg. Chem.* **2008**, 47, 3949.

- [101] a) R. B. Woodward, D. J. Woodman, *J. Am. Chem. Soc.* **1966**, 88, 3169; b) D. J. Woodman, A. I. Davidson, *J. Org. Chem.* **1973**, 38, 4288.
- [102] A. DeHope, V. Lavallo, B. Donnadieu, W. W. Schoeller, G. Bertrand, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2007**, 46, 6922-5; discussion 6926; *Angew. Chem.* **2007**, 119, 7047.
- [103] H. K. Wagner, H. Wadepohl, J. Ballmann, *Chem. Sci.* **2021**, 12, 3693.
- [104] M. B. Smith in *Organic Synthesis*, Elsevier, **2017**, S. 917–980.
- [105] R. S. Ghadwal, H. W. Roesky, S. Merkel, J. Henn, D. Stalke, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **2009**, 48, 5683; *Angew. Chem.* **2009**, 121, 5793.
- [106] C. A. Roskamp, E. J. Roskamp in *Encyclopedia of Reagents for Organic Synthesis*, John Wiley & Sons, Ltd, Chichester, UK, **2001**.
- [107] M. M. Faul, O. R. Thiel in *Encyclopedia of Reagents for Organic Synthesis*, John Wiley & Sons, Ltd, Chichester, UK, **2001**.
- [108] R. G. Holdich, G. J. Lawson, *Hydrometallurgy* **1987**, 19, 199.
- [109] J. M. Leger, J. Haines, A. Atouf, *J. Phys. Chem. Solids.* **1996**, 57, 7.
- [110] R. L. Sass, E. B. Brackett, T. E. Brackett, *J. Phys. Chem.* **1963**, 67, 2863.
- [111] C. Mohapatra, L. Scharf, T. Scherpf, B. Mallick, K.-S. Feichtner, C. Schwarz, V. H. Gessner, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2019**, 58, 7459; *Angew. Chem.* **2019**, 131, 7537.
- [112] B. Ghosh, P. Bharadwaz, N. Sarkar, A. K. Phukan, *Dalton Trans.* **2020**, 49.
- [113] Y. Wang, J. Ma, *J. Organomet. Chem.* **2009**, 694, 2567.
- [114] M. Asay, S. Inoue, M. Driess, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2011**, 50, 9589; *Angew. Chem.* **2011**, 123, 9763.
- [115] I. Alvarado-Beltran, A. Baceiredo, N. Saffon-Merceron, V. Branchadell, T. Kato, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2016**, 55, 16141; *Angew. Chem.* **2016**, 128, 16375.
- [116] J. Berthe, J. M. Garcia, E. Ocando, T. Kato, N. Saffon-Merceron, A. de Cózar, F. P. Cossío, A. Baceiredo, *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, 133, 15930.
- [117] A. Schmidpeter, H.-P. Schrödel, J. Knizek, *Heteroatom Chem.* **1998**, 9, 103.
- [118] A. F. Holleman, E. Wiberg, N. Wiberg, *Lehrbuch der anorganischen Chemie*, 102. Aufl., W. De Gruyter, Berlin, **2007**.
- [119] S. Fleming, M. K. Lupton, K. Jekot, *Inorg. Chem.* **1972**, 11, 2534.
- [120] G. Reeske, C. R. Hoberg, A. H. Cowley, *Inorg. Chem.* **2007**, 46, 1426.
- [121] S. Burck, J. Daniels, T. Gans-Eichler, D. Gudat, K. Nättinen, M. Nieger, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2005**, 631, 1403.
- [122] B. Pan, Z. Xu, M. W. Bezpalko, B. M. Foxman, C. M. Thomas, *Inorg. Chem.* **2012**, 51, 4170.
- [123] D. Gudat, *Coord. Chem. Rev.* **1997**, 163, 71.

- [124] A. Schmidpeter, M. Thiele, *Angew. Chem.* **1991**, *103*, 333; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1991**, *30*, 308.
- [125] D. Gudat, M. Schrott, V. Bajorat, M. Nieger, *Phosphorus, Sulfur Silicon Relat. Elem.* **1996**, *109*, 125.
- [126] A. Schmidpeter, G. Jochem, M. Thiele, *Phosphorus, Sulfur Silicon Relat. Elem.* **1993**, *76*, 13.
- [127] A. Schmidpeter, G. Jochem, *Tetrahedron Lett.* **1992**, *33*, 471.
- [128] A. H. Cowley, R. A. Kemp, *Chem. Rev.* **1985**, *85*, 367.
- [129] H. Grützmacher, H. Pritzkow, *Angew. Chem.* **1989**, *101*, 768; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1989**, *28*, 740.
- [130] J. A. Osborn, F. H. Jardine, J. F. Young, G. Wilkinson, *J. Chem. Soc., A* **1966**, 1711.
- [131] K. H. Shaughnessy, F. Pinsonneault, A. Gagnon in *Encyclopedia of Reagents for Organic Synthesis*, John Wiley & Sons, Ltd, Chichester, UK, **2001**, S. 1–10.
- [132] T. E. Barder, S. D. Walker, J. R. Martinelli, S. L. Buchwald, *J. Am. Chem. Soc.* **2005**, *127*, 4685.
- [133] Y. Yang, N. J. Oldenhuis, S. L. Buchwald, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2013**, *52*, 615; *Angew. Chem.* **2013**, *125*, 643.
- [134] X. Huang, K. W. Anderson, D. Zim, L. Jiang, A. Klapars, S. L. Buchwald, *J. Am. Chem. Soc.* **2003**, *125*, 6653.
- [135] H. Shimizu, I. Nagasaki, K. Matsumura, N. Sayo, T. Saito, *Acc. Chem. Res.* **2007**, *40*, 1385.
- [136] N. Miyaoura, A. Suzuki, *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* **1979**, 866.
- [137] N. Miyaoura, K. Yamada, A. Suzuki, *Tetrahedron Lett.* **1979**, *20*, 3437.
- [138] K. Sonogashira, Y. Tohda, N. Hagihara, *Tetrahedron Lett.* **1975**, *16*, 4467.
- [139] A. S. Guram, S. L. Buchwald, *J. Am. Chem. Soc.* **1994**, *116*, 7901.
- [140] F. Paul, J. Patt, J. F. Hartwig, *J. Am. Chem. Soc.* **1994**, *116*, 5969.
- [141] L. Huang, M. Arndt, K. Gooßen, H. Heydt, L. J. Gooßen, *Chem. Rev.* **2015**, *115*, 2596.
- [142] R. Franke, D. Selent, A. Börner, *Chem. Rev.* **2012**, *112*, 5675.
- [143] P. G. Jessop, F. Joó, C.-C. Tai, *Coord. Chem. Rev.* **2004**, *248*, 2425.
- [144] A. El-Hellani, J. Monot, S. Tang, R. Guillot, C. Bour, V. Gandon, *Inorg. Chem.* **2013**, *52*, 11493.
- [145] V. H. Gessner, T. Scherpf, WO2019030304, **2018**.
- [146] T. Scherpf, C. Schwarz, L. T. Scharf, J.-A. Zur, A. Helbig, V. H. Gessner, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2018**, *57*, 12859; *Angew. Chem.* **2018**, *130*, 13041.
- [147] C. Schwarz, J. Handelsmann, D. M. Baier, A. Ouissa, V. H. Gessner, *Catal. Sci. Technol.* **2019**, *9*, 6808.

- [148] X.-Q. Hu, D. Lichte, I. Rodstein, P. Weber, A.-K. Seitz, T. Scherpf, V. H. Gessner, L. J. Gooßen, *Org. Lett.* **2019**, *21*, 7558.
- [149] J. Tappen, I. Rodstein, K. McGuire, A. Großjohann, J. Löffler, T. Scherpf, V. H. Gessner, *Chem. Eur. J.* **2020**, *26*, 4281.
- [150] Z. Hu, X.-J. Wei, J. Handelsmann, A.-K. Seitz, I. Rodstein, V. H. Gessner, L. J. Gooßen, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2021**, *60*, 6778; *Angew. Chem.* **2021**, *133*, 6852.
- [151] I. Rodstein, D. S. Prendes, L. Wickert, M. Paaßen, V. H. Gessner, *J. Org. Chem.* **2020**, *85*, 14674.
- [152] T. Scherpf, I. Rodstein, M. Paaßen, V. H. Gessner, *Inorg. Chem.* **2019**, *58*, 8151.
- [153] L. T. Scharf, I. Rodstein, M. Schmidt, T. Scherpf, V. H. Gessner, *ACS catalysis* **2020**, *10*, 999.
- [154] P. Weber, T. Scherpf, I. Rodstein, D. Lichte, L. T. Scharf, L. J. Gooßen, V. H. Gessner, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **2019**, *58*, 3203; *Angew. Chem.* **2019**, *131*, 3235.
- [155] F. Breitsameter, A. Schmidpeter, H. Nöth, *Chem. Eur. J.* **2000**, *6*, 3531.
- [156] H. Schmidbaur, W. Tronich, *Eur. J. Inorg. Chem.* **1968**, *101*, 3545.
- [157] H. Schmidbaur, B. Milewski-Mahrle, G. Mueller, C. Krueger, *Organometallics* **1984**, *3*, 38.
- [158] C. Jones, P. C. Junk, A. F. Richards, M. Waugh, *New J. Chem.* **2002**, *26*, 1209.
- [159] H.-J. Bestmann, T. Arenz, *Angew. Chem., Int. Ed.* **1984**, *23*, 381; *Angew. Chem.* **1984**, *96*, 363.
- [160] H.-J. Bestmann, T. Arenz, *Angew. Chem., Int. Ed.* **1986**, *25*, 559; *Angew. Chem.* **1986**, *98*, 571.
- [161] E. Fluck, B. Neumüller, H. Riffel, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **1989**, *576*, 81.
- [162] K. Horchler von Locquenghien, A. Baceiredo, R. Boese, G. Bertrand, *J. Am. Chem. Soc.* **1991**, *113*, 5062.
- [163] T. Scherpf, K.-S. Feichtner, V. H. Gessner, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2017**, *56*, 3275; *Angew. Chem.* **2017**, *129*, 3323.
- [164] C. Boehme, G. Frenking, *J. Am. Chem. Soc.* **1996**, *118*, 2039.
- [165] S. Fujimori, S. Inoue, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2020**, *2020*, 3131.
- [166] M. Usher, A. V. Protchenko, A. Rit, J. Campos, E. L. Kolychev, R. Tirfoin, S. Aldridge, *Chem. Eur. J.* **2016**, *22*, 11685.
- [167] R. Becerra, S. E. Boganov, M. P. Egorov, V. I. Faustov, O. M. Nefedov, R. Walsh, *Can. J. Chem.* **2000**, *78*, 1428.
- [168] a) M.-D. Su, S.-Y. Chu, *Tetrahedron Lett.* **1999**, *40*, 4371; b) Y. Peng, B. D. Ellis, X. Wang, P. P. Power, *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *130*, 12268.
- [169] M.-D. Su, S.-Y. Chu, *J. Chin. Chem. Soc. (Weinheim, Ger.)* **2000**, *47*, 135.

- [170] Tobias Stalder, *Dissertation*, Ruhr-Universität, Bochum, **2021**.
- [171] J. Handelsmann, C. N. Babu, H. Steinert, C. Schwarz, T. Scherpf, A. Kroll, V. H. Gessner, *Chem. Sci.* **2021**, *12*, 4329.
- [172] M. Giannerini, M. Fañanás-Mastral, B. L. Feringa, *Nat. Chem.* **2013**, *5*, 667.
- [173] H. Helbert, P. Visser, J. G. H. Hermens, J. Buter, B. L. Feringa, *Nat. Catal.* **2020**, *3*, 664.
- [174] A. Kroll, H. Steinert, L. T. Scharf, T. Scherpf, B. Mallick, V. H. Gessner, *Chem. Commun.* **2020**, *56*, 8051.
- [175] A. Kroll, H. Steinert, M. Jörges, T. Steinke, B. Mallick, V. H. Gessner, *Organometallics* **2020**, *39*, 4312.
- [176] A. G. Sergeev, T. Schulz, C. Torborg, A. Spannenberg, H. Neumann, M. Beller, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2009**, *48*, 7595; *Angew. Chem.* **2009**, *121*, 7731.
- [177] D. A. Ellis, J. W. Martin, D. C. Muir, S. A. Mabury, *Anal. Chem.* **2000**, *72*, 726.
- [178] G. Meng, L. Kakalis, S. P. Nolan, M. Szostak, *Tetrahedron Lett.* **2019**, *60*, 378.
- [179] G. R. Fulmer, A. J. M. Miller, N. H. Sherden, H. E. Gottlieb, A. Nudelman, B. M. Stoltz, J. E. Bercaw, K. I. Goldberg, *Organometallics* **2010**, *29*, 2176.
- [180] D. Bourissou, O. Guerret, F. P. Gabbaï, G. Bertrand, *Chem. Rev.* **2000**, *100*, 39.
- [181] M. P. Jörges, *Masterarbeit*, Ruhr-Universität, Bochum, **2020**.
- [182] M. Stürmann, M. Weidenbruch, K. W. Klinkhammer, F. Lissner, H. Marsmann, *Organometallics* **1998**, *17*, 4425.
- [183] H. A. Bent, *Chem. Rev.* **1961**, *61*, 275.
- [184] a) F. Lavigne, A. El Kazzi, Y. Escudié, E. Maerten, T. Kato, N. Saffon-Merceron, V. Branchadell, F. P. Cossío, A. Baceiredo, *Chem. Eur. J.* **2014**, *20*, 12528; b) F. Lavigne, E. Maerten, G. Alcaraz, N. Saffon-Merceron, C. Acosta-Silva, V. Branchadell, A. Baceiredo, *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, *132*, 8864; c) J. Vignolle, X. Cattoën, D. Bourissou, *Chem. Rev.* **2009**, *109*, 3333; d) W. W. Schoeller, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2000**, *2000*, 369.
- [185] A. V. Protchenko, K. H. Birjkumar, D. Dange, A. D. Schwarz, D. Vidovic, C. Jones, N. Kaltsoyannis, P. Mountford, S. Aldridge, *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 6500.
- [186] G. D. Frey, V. Lavallo, B. Donnadieu, W. W. Schoeller, G. Bertrand, *Science* **2007**, *316*, 439.
- [187] M. Denk, R. Lennon, R. Hayashi, R. West, A. V. Belyakov, H. P. Verne, A. Haaland, M. Wagner, N. Metzler, *J. Am. Chem. Soc.* **1994**, *116*, 2691.
- [188] a) R. C. Turnell-Ritson, J. S. Sapsford, R. T. Cooper, S. S. Lee, T. Földes, P. A. Hunt, I. Pápai, A. E. Ashley, *Chem. Sci.* **2018**, *9*, 8716; b) P. Vermeeren, M. T. Doppert, F. M. Bickelhaupt, T. A. Hamlin, *Chem. Sci.* **2021**; c) M. Karni, Y. Apeloig, *Organometallics* **2012**, *31*, 2403.

- [189] M. Kaupp, P. von R. Schleyer, *Angew. Chem.* **1992**, 104, 1240; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1992**, 31, 1224.
- [190] M. Asay, C. Jones, M. Driess, *Chem. Rev.* **2011**, 111, 354.
- [191] a) M. W. Heaven, G. F. Metha, M. A. Buntine, *J. Phys. Chem. A* **2001**, 105, 1185; b) W. J. Leigh, S. S. Kostina, A. Bhattacharya, A. G. Moiseev, *Organometallics* **2010**, 29, 662; c) C. Shan, S. Yao, M. Driess, *Chem. Soc. Rev.* **2020**, 49, 6733.
- [192] Z. Mo, T. Szilvási, Y.-P. Zhou, S. Yao, M. Driess, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **2017**, 56, 3699; *Angew. Chem.* **2017**, 129, 3753.
- [193] C. L. Macdonald, B. D. Ellis, A. Swidan in *Encyclopedia of Inorganic and Bioinorganic Chemistry* (Hrsg.: R. A. Scott), John Wiley & Sons, Ltd, Chichester, UK, **2011**.
- [194] a) R. A. Howie, W. Moser, I. C. Trevena, *Acta Crystallogr B Struct Crystallogr Cryst Chem* **1972**, 28, 2965; b) *Materials Data on PbBr₂ by Materials Project*, LBNL Materials Project; Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL), Berkeley, CA (United States), **2020**; c) *Materials Data on PbI₂ by Materials Project*, LBNL Materials Project; Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL), Berkeley, CA (United States), **2020**; d) K. Shal, *Beitr. Mineral. u. Petrogr.* **1963**, 9, 111; e) I. Abrahams, D. Z. Demetriou, *J. Solid State Chem.* **2000**, 149, 28; f) R. C. Rouse, D. R. Peacor, B. R. Maxim, *Z. Kristallogr. – Cryst. Mater.* **1977**, 145.
- [195] C. Mohapatra, H. Darmandeh, H. Steinert, B. Mallick, K.-S. Feichtner, V. H. Gessner, *Chem. Eur. J.* **2020**, 26, 15145.
- [196] A. Rit, J. Campos, H. Niu, S. Aldridge, *Nat. Chem.* **2016**, 8, 1022.
- [197] Y. Xiong, T. Szilvási, S. Yao, G. Tan, M. Driess, *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, 136, 11300.
- [198] S. M. I. Al-Rafia, M. R. Momeni, R. McDonald, M. J. Ferguson, A. Brown, E. Rivard, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2013**, 52, 6390; *Angew. Chem.* **2013**, 125, 6518.
- [199] J. Li, C. Schenk, C. Goedecke, G. Frenking, C. Jones, *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, 133, 18622.
- [200] A. Schäfer, W. Saak, M. Weidenbruch, *Organometallics* **2003**, 22, 215.
- [201] Y.-L. Shan, B.-X. Leong, H.-W. Xi, R. Ganguly, Y. Li, K. H. Lim, C.-W. So, *Dalton Trans.* **2017**, 46, 3642.
- [202] W. Wang, S. Inoue, S. Yao, M. Driess, *Chem. Commun.* **2009**, 2661.
- [203] B. Rao, H. Tang, X. Zeng, L. L. Liu, M. Melaimi, G. Bertrand, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **2015**, 54, 14915; *Angew. Chem.* **2015**, 127, 15128.
- [204] a) L. M. Castelló, V. Hornillos, C. Vila, M. Giannerini, M. Fañanás-Mastral, B. L. Feringa, *Org. Lett.* **2015**, 17, 62; b) D. Heijnen, V. Hornillos, B. P. Corbet, M. Giannerini, B. L. Feringa, *Org. Lett.* **2015**, 17, 2262; c) V. Hornillos, M. Giannerini, C. Vila, M. Fañanás-Mastral, B. L. Feringa, *Chem. Sci.* **2015**, 6, 1394; d) E. B. Pinxterhuis, M. Giannerini, V.

- Hornillos, B. L. Feringa, *Nat. Commun.* **2016**, 7, 11698; e) N. Sinha, D. Heijnen, B. L. Feringa, M. G. Organ, *Chem. Eur. J.* **2019**, 25, 9180.
- [205] C. Vila, M. Giannerini, V. Hornillos, M. Fañanás-Mastral, B. L. Feringa, *Chem. Sci.* **2014**, 5, 1361.
- [206] V. Hornillos, M. Giannerini, C. Vila, M. Fañanás-Mastral, B. L. Feringa, *Org. Lett.* **2013**, 15, 5114.
- [207] J. Clayden, N. Greeves, S. G. Warren, *Organische Chemie*, 2. Aufl., Springer Spektrum, Berlin, Heidelberg, **2013**.
- [208] T. Scherpf, H. Steinert, A. Großjohann, K. Dilchert, J. Tappen, I. Rodstein, V. H. Gessner, *Angew. Chem.* **2020**, 132, 20777; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **2020**, 59, 20596.
- [209] B. Atwater, N. Chandrasoma, D. Mitchell, M. J. Rodriguez, M. Pompeo, R. D. J. Froese, M. G. Organ, *Angew. Chem.* **2015**, 127, 9638; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **2015**, 54, 9502.
- [210] M. Pompeo, R. D. J. Froese, N. Hadei, M. G. Organ, *Angew. Chem.* **2012**, 124, 11516; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **2012**, 51, 11354.
- [211] C. P. Sindlinger, A. Stasch, L. Wesemann, *Organometallics* **2014**, 33, 322.
- [212] J. E. Münzer, N.-J. H. Kneusels, B. Weinert, B. Neumüller, I. Kuzu, *Dalton Trans.* **2019**, 48, 11076.
- [213] P. G. Jones, A. Blaschette, D. Henschel, A. Weitze, *Z. Kristallogr.* **1995**, 210, 377.
- [214] A. Schmuck, P. Pyykkö, K. Seppelt, *Angew. Chem.* **1990**, 102, 211; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1990**, 29, 213.
- [215] P. Pyykkö, M. Atsumi, *Chem. Eur. J.* **2009**, 15, 186.
- [216] a) I. J. Casely, J. W. Ziller, B. J. Mincher, W. J. Evans, *Inorg. Chem.* **2011**, 50, 1513; b) R. R. Holmes, R. O. Day, V. Chandrasekhar, J. M. Holmes, *Inorg. Chem.* **1987**, 26, 163; c) S. Kojima, R. Takagi, H. Nakata, Y. Yamamoto, K. Akiba, *Chem. Lett.* **1995**, 24, 857.
- [217] C. I. Raț, C. Silvestru, H. J. Breunig, *Coord. Chem. Rev.* **2013**, 257, 818.
- [218] J. Contreras-García, W. Yang, E. R. Johnson, *J. Phys. Chem. A* **2011**, 115, 12983.
- [219] P. Pyykkö, M. Atsumi, *Chem. Eur. J.* **2009**, 15, 12770.
- [220] J. F. Malone, W. S. McDonald, *Chem. Commun. (London)* **1967**, 444.
- [221] M. A. Petrie, P. P. Power, H. V. R. Dias, K. Ruhlandt-Senge, K. M. Waggoner, R. J. Wehmschulte, *Organometallics* **1993**, 12, 1086.
- [222] D. K. Coggin, P. E. Fanwick, M. A. Green, *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* **1993**, 1127.
- [223] H. Schumann, S. Dechert, S. Schutte, J.-Y. Hyeon, M. Hummert, B. C. Wassermann, W. Kaminsky, A. Eisenhardt, K. Köhler, J. Eichhorn, *Organometallics* **2003**, 22, 1391.

- [224] R. Kannan, R. Chamenahalli, S. Kumar, A. Krishna, A. P. Andrews, E. D. Jemmis, A. Venugopal, *Chem. Commun.* **2019**, 55, 14629.
- [225] J. F. Malone, W. S. McDonald, *J. Chem. Soc., A* **1970**, 3362.
- [226] S. Yogendra, F. Hennesdorf, A. Bauzá, A. Frontera, R. Fischer, J. J. Weigand, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2017**, 56, 7907; *Angew. Chem.* **2017**, 129, 8015.
- [227] a) T. Chu, G. I. Nikonov, *Chem. Rev.* **2018**, 118, 3608; b) J. D. Erickson, J. C. Fetting, P. P. Power, *Inorg. Chem.* **2015**, 54, 1940.
- [228] D. B. G. Williams, M. Lawton, *J. Org. Chem.* **2010**, 75, 8351.
- [229] K. Fischer, *Angew. Chem.* **1935**, 48, 394.
- [230] G. M. Sheldrick, *Acta Crystallogr., Sect. A: Found. Crystallogr.* **2008**, 64, 112.
- [231] W. T. Pennington, *J. Appl. Crystallogr.* **1999**, 32, 1028.
- [232] *Persistence of Vision Raytracer*, Persistence of Vision, Williamstown, Victoria, Australia, **2004**.
- [233] The GIMP team, *GIMP 2.10*, **1995-2019**.
- [234] *GaussView, Version 3.0*, Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, **2000**.
- [235] R. Dennington, T. A. Keith, J. M. Millam, *GaussView, Version 6.0*, Semichem Inc., Shawnee Mission, **2016**.
- [236] M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson et al., *Gaussian 09; Revision E.01*, Gaussian, Inc., Wallingford CT, **2009**.
- [237] M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, G. A. Petersson, H. Nakatsuji et al., *Gaussian 16, Revision B.01*, Gaussian, Inc., Wallingford CT, **2016**.
- [238] M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, G. A. Petersson, H. Nakatsuji et al., *Gaussian 16, Revision C.01*, Gaussian, Inc., Wallingford CT, **2016**.
- [239] a) P. Hohenberg, W. Kohn, *Phys. Rev.* **1964**, 136, B864-B871; b) W. Kohn, L. J. Sham, *Phys. Rev.* **1965**, 140, A1133-A1138.
- [240] C. Adamo, V. Barone, *J. Chem. Phys.* **1999**, 110, 6158.
- [241] F. Weigend, R. Ahlrichs, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2005**, 7, 3297.
- [242] a) S. Grimme, J. Antony, S. Ehrlich, H. Krieg, *J. Chem. Phys.* **2010**, 132, 154104; b) S. Grimme, S. Ehrlich, L. Goerigk, *J. Comput. Chem.* **2011**, 32, 1456; c) D. G. A. Smith, L. A. Burns, K. Patkowski, C. D. Sherrill, *J. Phys. Chem. Lett.* **2016**, 7, 2197.
- [243] Y. Zhao, D. G. Truhlar, *J. Phys. Chem. A* **2005**, 109, 5656.
- [244] J. P. Perdew, *Phys. Rev. B* **1986**, 33, 8822.
- [245] A. D. Becke, *Phys. Rev. A* **1988**, 38, 3098.

- [246] P. Deglmann, F. Furche, *J. Am. Chem. Soc.* **2002**, *117*, 9535.
- [247] A. Bergner, M. Dolg, W. Küchle, H. Stoll, H. Preuß, *Mol. Phys.* **1993**, *80*, 1431.
- [248] W. Küchle, M. Dolg, H. Stoll, H. Preuss, *Mol. Phys.* **1991**, *74*, 1245.
- [249] D. Andrae, U. Huermann, M. Dolg, H. Stoll, H. Preu, *Theoret. Chim. Acta* **1990**, *77*, 123.
- [250] J. Tomasi, B. Mennucci, R. Cammi, *Chem. Rev.* **2005**, *105*, 2999.
- [251] *Chemcraft - graphical software for visualization of quantum chemistry computations.*
- [252] P.-O. Löwdin, *Phys. Rev.* **1955**, *97*, 1474.
- [253] E. D. Glendening, J. K. Badenhoop, A. E. Reed, J. E. Carpenter, J. A. Bohmann, C. M. Morales, P. Karafiloglou, C. R. Landis, and F. Weinhold, *NBO7*, Theoretical Chemistry Institute, University of Wisconsin, Madison, **2018**.
- [254] R. F. W. Bader, *Chem. Rev.* **1991**, *91*, 893.
- [255] R. F. W. Bader, *Acc. Chem. Res.* **1985**, *18*, 9.
- [256] T. Lu, F. Chen, *J. Comput. Chem.* **2012**, *33*, 580.
- [257] E. A. Fehnel, M. Carmack, *J. Am. Chem. Soc.* **1949**, *71*, 84.
- [258] A. Maercker, R. Schuhmacher, W. Buchmeier, H. D. Lutz, *Chem. Ber.* **1991**, *124*, 2489.
- [259] I. Saleh Alnaimi, W. P. Weber, *J. Organomet. Chem.* **1983**, *241*, 171.
- [260] P. Veerakumar, Z.-Z. Lu, M. Velayudham, K.-L. Lu, S. Rajagopal, *J. Mol. Catal. A: Chem.* **2010**, *332*, 128.
- [261] a) H. Podall, W. E. Foster, A. P. Giraitis, *J. Org. Chem.* **1958**, *23*, 82; b) D. M. Ottmers, H. F. Rase, *Carbon* **1966**, *4*, 125.
- [262] T. Azuma, S. Yanagida, H. Sakurai, S. Sasa, K. Yoshino, *Synth. Commun.* **1982**, *12*, 137.
- [263] M. Brookhart, B. Grant, A. F. Volpe, *Organometallics* **1992**, *11*, 3920.
- [264] A. Alvarez, A. Guzman, A. Ruiz, E. Velarde, J. M. Muchowski, *J. Org. Chem.* **1992**, *57*, 1653.

Curriculum Vitae

Persönliche Daten

Name Henning Steinert
Geboren am 31.08.1993 in Hannover

Ausbildung und beruflicher Werdegang

- 09/2018-dato** Ruhr-Universität Bochum
- Promotion in der anorganischen Chemie über die „Synthese, Struktur und Reaktivität ylidsubstituierter Hauptgruppen-verbindungen“ im Arbeitskreis von Prof. Dr. V. H. Gessner
 - Schwerpunkte: Anorganische Synthese, Quantenchemische Untersuchungen, Spektroskopie
-
- 10/2015-08/2018** Carl von Ossietzky Universität Oldenburg
- Studium im Fachmasterstudiengang Chemie
 - Abschlussnote: 1.25
 - Thema der Abschlussarbeit: „Zur Si–H-Bindungsaktivierung an Pentafulvenkomplexen des Titans“ im Arbeitskreis von Prof. Dr. R. Beckhaus (Note der Abschlussarbeit: 1.13)
 - Forschungsaufenthalt (01/2017-02/2017) an der University of KwaZulu-Natal, Durban, Südafrika im Arbeitskreis von Prof. Dr. A. Stark; Schwerpunkte: „Synthese von ionischen Flüssigkeiten“ und „Prozesssimulation“
-
- 10/2012-09/2015** Carl von Ossietzky Universität Oldenburg
- Studium im Fachbachelorstudiengang Chemie
 - Abschlussnote: 2.03
 - Thema der Abschlussarbeit: „Studien zur Synthese von 1,1-bis(trimethylsilyl)substituierten Silolen“ im Arbeitskreis von Prof. Dr. T. Müller (Note der Abschlussarbeit: 1.00)
-
- 09/2011-08/2012** Radio ZuSa, Uelzen
- Freiwilliges Soziales Jahr Kultur
-
- 08/2004-06/2011** Gymnasium Ernestinum, Celle
- Abschluss: Abitur (Note: 2.0)
-

Beiträge in Fachzeitschriften

- 2021** → „Towards the Rational Design of Ylide-Substituted Phosphines for Gold(I)-Catalysis: From Inactive to ppm-level Catalysis”
J. Handelsmann, C. N. Babu, H. Steinert, C. Schwarz, T. Scherpf, A. Kroll, V. H. Gessner, *Chem. Sci.* **2021**, 12, 4329.
- 2020** → „Synthesis of Low-Valent Dinuclear Group 14 Compounds with Element-Element Bonds by Transylidation”
C. Mohapatra, H. Darmandeh, H. Steinert, B. Mallick, K.-S. Feichtner, V. H. Gessner, *Chem. Eur. J.* **2020**, 26, 15145.
- „Cationic Phosphorus Compounds Based on a Bis(1-piperidiny)-Substituted Carbodiphosphorane: Syntheses, Structures, and Csp³–H Activation”
A. Kroll, H. Steinert, M. Jörges, T. Steinke, B. Mallick, V. H. Gessner, *Organometallics* **2020**, 39, 4312.
- „Efficient Pd-Catalyzed Direct Coupling of Aryl Chlorides with Alkylolithium Reagents”
T. Scherpf, H. Steinert, A. Großjohann, K. Dilchert, J. Tappen, I. Rodstein, V. H. Gessner, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, 59, 20596-20603; *Angew. Chem.* **2020**, 132, 20777.
- „A diamino-substituted carbodiphosphorane as strong C-donor and weak N-donor: isolation of monomeric trigonal-planar L·ZnCl₂”
A. Kroll, H. Steinert, L. T. Scharf, T. Scherpf, B. Mallick, V. H. Gessner, *Chem. Comm.* **2020**, 56, 8051.
- „Towards the Preparation of Stable Cyclic Amino(ylide)-carbenes”
H. Steinert, C. Schwarz, A. Kroll, V. H. Gessner, *Molecules* **2020**, 25, 796.
- 2019** → „Teaching c-phosphanylimines the titanaaziridine coordination mode”
M. Fischer, H. Steinert, M. Schmidtman, R. Beckhaus, *Dalton Trans.* **2019**, 48, 1936.
- 2018** → „First catalyst-free CO₂ trapping of N-acyliminium ions at ambient conditions: Sustainable multicomponent synthesis of thia- and oxazolidinyl carbamates”
M. Franz, T. Stalling, H. Steinert, J. Martens, *Org. Biomol. Chem.* **2018**, 16, 8292.
- „A One-Step Germole to Silole Transformation and a Stable Isomer of a Disilabenzene”

C.R. W. Reinhold, Z. Dong, J. M. Winkler, H. Steinert, M. Schmidtman, T. Müller, *Chem. Eur. J.*, **2018**, 24, 848.

Tagungsbeiträge

- 2020** → „Synthesis and Electronic Structure of Novel Ylide-Substituted Compounds with Group 13 and 15 Elements”
H. Steinert, S. Hutsch, C. H. Gessner, *Online-Vortragstagung für Anorganische Chemie 2020*. (Poster)
- 2019** → „Theoretical and experimental studies on the design of amino(ylide) stabilized carbenes”
H. Steinert, V. H. Gessner, *Wissenschaftsforum Chemie 2019*, Aachen. (Poster)
-

Erklärung an Eides statt

Hiermit erkläre ich an Eides statt, dass ich die vorliegende Dissertation

Zur Synthese, Struktur und Reaktivität von ylidsubstituierten Hauptgruppenverbindungen

Selbstständig angefertigt und keine anderen als die von mir angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe.

Digitale Bilder enthalten nur die originalen Daten.

Es wurden keine kommerziellen Makler- oder Beratungsdienste engagiert.

Ich erkläre außerdem, dass diese Dissertation weder in gleicher noch in anderer Form bereits in einem anderen Prüfungsverfahren vorgelegen hat.

Ich habe früher außer dem mit dem Zulassungsgesuch urkundlich vorgelegten Graden keine weiter weitere akademischen Grade erworben oder zu erwerben versucht.

Erklärung zum Copyright

Hiermit erkläre ich, dass ich in meiner Dissertation

Zur Synthese, Struktur und Reaktivität von ylidsubstituierten Hauptgruppenverbindungen

Bei Abbildungen aus Journalen das Copyright von den Verlagen bzw. vom Autor eingeholt habe.

Anhang I

Daten der Molekülstrukturen im Kristall

zur

Dissertation

Zur Synthese, Struktur und Reaktivität von
ylidsubstituierten Hauptgruppenverbindungen

vorgelegt von

Henning Steinert

1 Kristalldaten

Tabelle 1.1. Kristalldaten zur Strukturverfeinerung der Verbindungen **84** und **85b**.

Verbindung	<i>N</i> -(2,6-diisopropyl-phenyl)pyrrol 94	95b
CCDC Nummer	1979639	–
Empirische Formel	C ₁₆ H ₂₁ N	C ₆₀ H ₈₆ F ₆ N ₂ O ₅ S ₂
Formelgewicht [g/mol]	227.34	1093.42
Temperatur [K]	100(2)	100(2)
Wellenlänge [Å]	1.54184	1.54184
Kristallsystem	orthorhombisch	monoklin
Raumgruppe	<i>P</i> 2 ₁ 2 ₁ 2 ₁	<i>C</i> 2/ <i>c</i>
Größe der Einheitszelle	<i>a</i> = 8.35296(13) Å <i>b</i> = 11.27608(18) Å <i>c</i> = 14.6485(2) Å α = 90° β = 90° γ = 90°	<i>a</i> = 22.85964(16) Å <i>b</i> = 13.12309(8) Å <i>c</i> = 19.65956(11) Å α = 90° β = 93.6233(6)° γ = 90°
Volumen [Å ³]	1379.73(4)	5885.86(6)
<i>Z</i>	4	4
Dichte (berechnet) [Mg/m ³]	1.094	1.234
Absorptionskoeffizient [mm ⁻¹]	0.471	1.376
<i>F</i> (000)	496	2344
Kristallgröße [mm ³]	0.232 x 0.129 x 0.036	0.401 x 0.246 x 0.142
Messbereich θ [°]	4.949 bis 74.851 -10 ≤ <i>h</i> ≤ 9	3.875 bis 74.992 28 ≤ <i>h</i> ≤ 27
Indexbereich	-14 ≤ <i>k</i> ≤ 13 -18 ≤ <i>l</i> ≤ 18	-15 ≤ <i>k</i> ≤ 16 -24 ≤ <i>l</i> ≤ 23
Gemessene Reflexe	9012	24821
Unabhängige Reflexe	2817 [<i>R</i> _{int} = 0.0308]	6017 [<i>R</i> _{int} = 0.0242]
Daten / Restraints / Parameter	2817 / 0 / 158	6017 / 0 / 346
Goodness-of-fit on <i>F</i> ²	1.061	1.038
Finale <i>R</i> -Werte [<i>I</i> > 2σ(<i>I</i>)]	<i>R</i> 1 = 0.0348, <i>R</i> 2 = 0.0900	<i>R</i> 1 = 0.0355, <i>wR</i> 2 = 0.0938
<i>R</i> -Werte (alle Daten)	<i>R</i> 1 = 0.0357, <i>wR</i> 2 = 0.0906	<i>R</i> 1 = 0.0366, <i>wR</i> 2 = 0.0947
Restelektronendichte	0.203 und -0.187 e·Å ⁻³	0.409 und -0.339 e·Å ⁻³

Kristalldaten

Tabelle 1.2. Kristalldaten zur Strukturverfeinerung der Verbindungen **85c** und **90**.

Verbindung	95c	100
CCDC Nummer	1979642	1979641
Empirische Formel	C ₁₈ H ₂₆ BF ₄ NS	C ₃₅ H ₅₅ Cl ₂ INP
Formelgewicht [g/mol]	375.27	718.57
Temperatur [K]	100(2)	100(2)
Wellenlänge [Å]	1.54184	1.54184
Kristallsystem	monoklin	monoklin
Raumgruppe	<i>P</i> 2 ₁ /c	<i>P</i> 2 ₁ /c
Größe der Einheitszelle	a = 21.2321(3) Å b = 8.17102(9) Å c = 11.51387(15) Å α = 90° β = 104.7271(14)° γ = 90°	a = 11.74361(11) Å b = 19.74256(17) Å c = 19.4546(2) Å α = 90° β = 106.2513(10)° γ = 90°
Volumen [Å ³]	1931.89(4)	4330.30(7)
Z	4	4
Dichte (berechnet) [Mg/m ³]	1.290	1.102
Absorptionskoeffizient [mm ⁻¹]	1.824	7.428
F(000)	792	1496
Kristallgröße [mm ³]	0.350 x 0.167 x 0.027	0.338 x 0.328 x 0.116
Messbereich θ [°]	4.306 bis 74.987 -26 ≤ h ≤ 26	3.257 bis 74.995° -14 ≤ h ≤ 14
Indexbereich	-8 ≤ k ≤ 10 -14 ≤ l ≤ 14	-21 ≤ k ≤ 24 -24 ≤ l ≤ 20
Gemessene Reflexe	28827	36183
Unabhängige Reflexe	3980 [<i>R</i> _{int} = 0.0428]	8849 [<i>R</i> _{int} = 0.0492]
Daten / Restraints / Parameter	3980 / 0 / 232	8849 / 0 / 365
Goodness-of-fit on F ²	1.065	1.02
Finale <i>R</i> -Werte [<i>I</i> > 2σ(<i>I</i>)]	<i>R</i> 1 = 0.0386, <i>wR</i> 2 = 0.1098	<i>R</i> 1 = 0.0441, <i>wR</i> 2 = 0.1187
<i>R</i> -Werte (alle Daten)	<i>R</i> 1 = 0.0403, <i>wR</i> 2 = 0.1116	<i>R</i> 1 = 0.0447, <i>wR</i> 2 = 0.1192
Restelektronendichte	0.594 und -0.240 e·Å ⁻³	1.426 und -1.251 e·Å ⁻³

Kristalldaten

Tabelle 1.3. Kristalldaten zur Strukturverfeinerung der Verbindungen **93** und **Y₂Pb**.

Verbindung	103	Y₂Pb
CCDC Nummer	1979640	–
Empirische Formel	C ₃₄ H ₅₂ NP	C ₅₂ H ₄₄ O ₄ P ₂ PbS ₂
Formelgewicht [g/mol]	2022.93	1066.12
Temperatur [K]	100(2)	100(2)
Wellenlänge [Å]	1.54184	1.54184
Kristallsystem	monoklin	monoklin
Raumgruppe	<i>P</i> 2 ₁ /c	<i>P</i> 2 ₁ /c
Größe der Einheitszelle	a = 9.82504(11) Å b = 15.61527(17) Å c = 20.0819(2) Å α = 90° β = 102.8877(10)° γ = 90°	a = 19.8381(2) Å b = 10.71460(10) Å c = 21.5097(2) Å α = 90° β = 99.8390(10)° γ = 90°
Volumen [Å ³]	3003.36(6)	4504.80(8)
Z	1	4
Dichte (berechnet) [Mg/m ³]	1.118	1.572
Absorptionskoeffizient [mm ⁻¹]	0.951	9.183
F(000)	1112	2128
Kristallgröße [mm ³]	0.226 x 0.138 x 0.054	0.206 x 0.143 x 0.0559
Messbereich θ [°]	3.621 bis 77.464 -12 ≤ h ≤ 9	2.260 bis 77.524 -24 ≤ h ≤ 25
Indexbereich	-19 ≤ k ≤ 19 -25 ≤ l ≤ 25	-13 ≤ k ≤ 12 -27 ≤ l ≤ 25
Gemessene Reflexe	24513	37560
Unabhängige Reflexe	6176 [<i>R</i> _{int} = 0.0409]	9306 [<i>R</i> _{int} = 0.0331]
Daten / Restraints / Parameter	6176 / 0 / 329	9306 / 0 / 552
Goodness-of-fit on F ²	1.06	1.094
Finale <i>R</i> -Werte [<i>I</i> > 2σ(<i>I</i>)]	<i>R</i> 1 = 0.0408, w <i>R</i> 2 = 0.1053	<i>R</i> 1 = 0.0331, w <i>R</i> 2 = 0.0926
<i>R</i> -Werte (alle Daten)	<i>R</i> 1 = 0.0458, w <i>R</i> 2 = 0.1089	<i>R</i> 1 = 0.0342, w <i>R</i> 2 = 0.0935
Restelektronendichte	0.324 und -0.401 e·Å ⁻³	2.375 und -1.504 e·Å ⁻³

Kristalldaten

Tabelle 1.4. Kristalldaten zur Strukturverfeinerung der Verbindungen **Y₃Sb** und **Y₃Bi**.

Verbindung	Y₃Sb	Y₃Bi
CCDC Nummer	–	–
Empirische Formel	C ₇₈ H ₆₆ O ₆ P ₃ S ₃ Sb	C ₇₈ H ₆₆ BiO ₆ P ₃ S ₃
Formelgewicht [g/mol]	1410.14	1497.37
Temperatur [K]	100(2)	100(2)
Wellenlänge [Å]	1.54184	1.54184
Kristallsystem	triklin	triklin
Raumgruppe	P-1	P-1
Größe der Einheitszelle	a = 13.4949(5) Å b = 14.7061(7) Å c = 19.3376(8) Å α = 78.981(4)° β = 82.168(3)° γ = 70.139(4)°	a = 12.5964(2) Å b = 13.5971(2) Å c = 25.4319(3) Å α = 77.0670(10)° β = 85.5600(10)° γ = 65.7540(10)°
Volumen [Å ³]	3532.3(3)	3870.35(10)
Z	2	2
Dichte (berechnet) [Mg/m ³]	1.326	1.285
Absorptionskoeffizient [mm ⁻¹]	4.979	6.187
F(000)	1452	1516
Kristallgröße [mm ³]	0.312 x 0.140 x 0.060	0.129 x 0.120 x 0.072
Messbereich θ [°]	3.235 bis 76.918 -17 ≤ h ≤ 17	3.567 bis 77.600 -15 ≤ h ≤ 15
Indexbereich	-18 ≤ k ≤ 17 -20 ≤ l ≤ 24	-17 ≤ k ≤ 14 -32 ≤ l ≤ 30
Gemessene Reflexe	46846	57479
Unabhängige Reflexe	14300 [<i>R</i> _{int} = 0.0617]	16000 [<i>R</i> _{int} = 0.0429]
Daten / Restraints / Parameter	14300 / 0 / 823	16000 / 0 / 823
Goodness-of-fit on F ²	1.219	1.047
Finale <i>R</i> -Werte [<i>I</i> > 2σ(<i>I</i>)]	<i>R</i> 1 = 0.1055, <i>wR</i> 2 = 0.2817	<i>R</i> 1 = 0.0326, <i>wR</i> 2 = 0.0804
<i>R</i> -Werte (alle Daten)	<i>R</i> 1 = 0.1178, <i>wR</i> 2 = 0.2951	<i>R</i> 1 = 0.0339, <i>wR</i> 2 = 0.0813
Restelektronendichte	5.523 und -1.836 e·Å ⁻³	2.917 und -1.354 e·Å ⁻³

Kristalldaten

Tabelle 1.5. Kristalldaten zur Strukturverfeinerung der Verbindungen **Y₂AlCl** und **Y₂GaCl**.

Verbindung	Y ₂ AlCl	Y ₂ GaCl
CCDC Nummer	—	—
Empirische Formel	C ₅₂ H ₄₄ AlClO ₄ P ₂ S ₂	C ₅₂ H ₄₄ ClGaO ₄ P ₂ S ₂
Formelgewicht [g/mol]	921.36	964.10
Temperatur [K]	99.98(10)	100(2)
Wellenlänge [Å]	1.54184	1.54184
Kristallsystem	monoklin	monoklin
Raumgruppe	P2 _{1/c}	P2 _{1/c}
Größe der Einheitszelle	a = 10.51229(9) Å b = 18.09972(19) Å c = 23.6859(2) Å α = 90° β = 96.7988(8)° γ = 90°	a = 19.85169(17) Å b = 10.73517(9) Å c = 21.44958(18) Å α = 90° β = 99.2492(8)° γ = 90°
Volumen [Å ³]	4475.01(7)	4511.71(7)
Z	4	4
Dichte (berechnet) [Mg/m ³]	1.368	1.419
Absorptionskoeffizient [mm ⁻¹]	2.867	3.285
F(000)	1920	1992
Kristallgröße [mm ³]	0.166 x 0.094 x 0.073	0.338 x 0.221 x 0.128
Messbereich θ [°]	3.081 bis 76.940 -13 ≤ h ≤ 13	2.255 bis 77.055 -24 ≤ h ≤ 25
Indexbereich	-22 ≤ k ≤ 21 -29 ≤ l ≤ 18	-12 ≤ k ≤ 13 -26 ≤ l ≤ 25
Gemessene Reflexe	37710	34774
Unabhängige Reflexe	9075 [<i>R</i> _{int} = 0.0284]	9226 [<i>R</i> _{int} = 0.0347]
Daten / Restraints / Parameter	9075 / 0 / 561	9226 / 0 / 561
Goodness-of-fit on F ²	1.057	1.032
Finale <i>R</i> -Werte [<i>I</i> > 2σ(<i>I</i>)]	<i>R</i> 1 = 0.0380, <i>wR</i> 2 = 0.0997	<i>R</i> 1 = 0.0312, <i>wR</i> 2 = 0.0833
<i>R</i> -Werte (alle Daten)	<i>R</i> 1 = 0.0395, <i>wR</i> 2 = 0.1008	<i>R</i> 1 = 0.0330, <i>wR</i> 2 = 0.0846
Restelektronendichte	0.404 und -0.387 e·Å ⁻³	0.380 und -0.734 e·Å ⁻³

Kristalldaten

Tabelle 1.6. Kristalldaten zur Strukturverfeinerung der Verbindungen $\{\text{Na}[\text{Y} \rightarrow \text{GaCl}_3]\}_2$ und $(\text{YGaCl}_2)_2$.

Verbindung	$\{\text{Na}[\text{Y} \rightarrow \text{GaCl}_3]\}_2$	$(\text{YGaCl}_2)_2$
CCDC Nummer	–	–
Empirische Formel	$\text{C}_{40}\text{H}_{50}\text{Cl}_3\text{GaNaO}_{5.50}\text{PS}$	$\text{C}_{60}\text{H}_{60}\text{Cl}_4\text{Ga}_2\text{O}_6\text{P}_2\text{S}_2$
Formelgewicht [g/mol]	880.89	1284.38
Temperatur [K]	100(2)	100(2)
Wellenlänge [Å]	1.54184	1.54184
Kristallsystem	triklin	orthorhombisch
Raumgruppe	P-1	$P2_12_12_1$
Größe der Einheitszelle	$a = 10.8341(3) \text{ Å}$ $b = 11.5568(3) \text{ Å}$ $c = 16.8830(4) \text{ Å}$ $\alpha = 85.697(2)^\circ$ $\beta = 80.981(2)^\circ$ $\gamma = 86.854(2)^\circ$	$a = 14.5213(1) \text{ Å}$ $b = 18.6414(2) \text{ Å}$ $c = 21.5281(3) \text{ Å}$ $\alpha = 90^\circ$ $\beta = 90^\circ$ $\gamma = 90^\circ$
Volumen [Å ³]	2079.86(9)	5827.60(11)
Z	2	4
Dichte (berechnet) [Mg/m ³]	1.407	1.464
Absorptionskoeffizient [mm ⁻¹]	3.973	4.413
F(000)	916	2640
Kristallgröße [mm ³]	0.343 x 0.275 x 0.106	0.129 x 0.120 x 0.072
Messbereich θ [°]	2.656 bis 76.855	3.136 to 77.714
	$-13 \leq h \leq 13$	$-18 \leq h \leq 18$
Indexbereich	$-13 \leq k \leq 14$ $-21 \leq l \leq 21$	$-12 \leq k \leq 23$ $-26 \leq l \leq 26$
Gemessene Reflexe	25969	39661
Unabhängige Reflexe	8467 [$R_{\text{int}} = 0.0210$]	11689 [$R_{\text{int}} = 0.0510$]
Daten / Restraints / Parameter	8467 / 4 / 497	11689 / 0 / 687
Goodness-of-fit on F ²	1.049	1.089
Finale R-Werte [$I > 2\sigma(I)$]	$R1 = 0.0341$, $wR2 = 0.0915$	$R1 = 0.0380$, $wR2 = 0.1031$
R-Werte (alle Daten)	$R1 = 0.0347$, $wR2 = 0.0920$	$R1 = 0.0427$, $wR2 = 0.1060$
Restelektronendichte	1.423 und $-0.635 \text{ e} \cdot \text{Å}^{-3}$	0.635 und $-0.437 \text{ e} \cdot \text{Å}^{-3}$

Kristalldaten

Tabelle 1.7. Kristalldaten zur Strukturverfeinerung der Verbindungen **Y₃Al** und **Y₃In**.

Verbindung	Y ₃ Al	Y ₃ In
CCDC Nummer	—	—
Empirische Formel	C ₇₈ H ₆₆ AlO ₆ P ₃ S ₃	C ₇₈ H ₆₆ InO ₆ P ₃ S ₃
Formelgewicht [g/mol]	1315.37	1403.21
Temperatur [K]	100(2)	100(2)
Wellenlänge [Å]	1.54184	1.54184
Kristallsystem	monoklin	tetragonal
Raumgruppe	P2 ₁ /n	I4 ₁ /a
Größe der Einheitszelle	a = 12.93340(10) Å b = 19.22300(10) Å c = 30.65510(10) Å α = 90° β = 101.2730(10)° γ = 90°	a = 49.6936(3) Å b = 49.6936(3) Å c = 13.26860(10) Å α = 90° β = 90° γ = 90°
Volumen [Å ³]	7474.39(8)	32766.2(5)
Z	4	16
Dichte (berechnet) [Mg/m ³]	1.169	1.138
Absorptionskoeffizient [mm ⁻¹]	2.015	3.927
F(000)	2752	11584
Kristallgröße [mm ³]	0.500 x 0.111 x 0.069	0.139 x 0.027 x 0.022
Messbereich θ [°]	2.728 bis 77.639 -16 ≤ h ≤ 16	2.515 bis 74.997 -61 ≤ h ≤ 62
Indexbereich	-23 ≤ k ≤ 24 -38 ≤ l ≤ 37	-49 ≤ k ≤ 62 -16 ≤ l ≤ 6
Gemessene Reflexe	62125	59121
Unabhängige Reflexe	15606 [<i>R</i> _{int} = 0.0203]	16594 [<i>R</i> _{int} = 0.0504]
Daten / Restraints / Parameter	15606 / 0 / 823	16594 / 0 / 823
Goodness-of-fit on F ²	1.029	1.079
Finale <i>R</i> -Werte [<i>I</i> > 2σ(<i>I</i>)]	<i>R</i> 1 = 0.0306, <i>wR</i> 2 = 0.0804	<i>R</i> 1 = 0.0421, <i>wR</i> 2 = 0.1085
<i>R</i> -Werte (alle Daten)	<i>R</i> 1 = 0.0314, <i>wR</i> 2 = 0.0809	<i>R</i> 1 = 0.0544, <i>wR</i> 2 = 0.1144
Restelektronendichte	0.374 und -0.417 e·Å ⁻³	0.669 und -0.763 e·Å ⁻³

2 ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

N-(2,6-diisopropylphenyl)pyrrol **94**

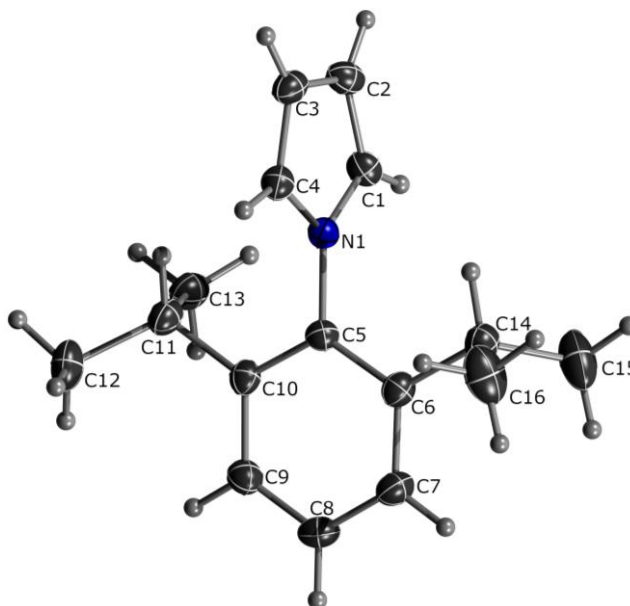


Abbildung 2.1. ORTEP von *N*-(2,6-Diisopropylphenyl)pyrrol **94**.

Tabelle 2.1. Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für *N*-(2,6-diisopropylphenyl)pyrrol **94**. $U(\text{eq})$ ist als ein Drittel der Spur der orthogonalisierten U^{ij} -Tensoren definiert.

	x	y	z	U(eq)
N(1)	4184(2)	3947(1)	5328(1)	21(1)
C(1)	5525(2)	4584(2)	5096(1)	24(1)
C(2)	6128(2)	4125(2)	4302(1)	27(1)
C(3)	5128(2)	3168(2)	4044(1)	26(1)
C(4)	3941(2)	3080(2)	4683(1)	23(1)
C(5)	3251(2)	4105(1)	6144(1)	21(1)
C(6)	1978(2)	4919(2)	6135(1)	24(1)
C(7)	1086(2)	5047(2)	6934(1)	28(1)
C(8)	1442(2)	4390(2)	7707(1)	29(1)
C(9)	2714(2)	3598(2)	7698(1)	26(1)
C(10)	3649(2)	3440(1)	6919(1)	22(1)
C(11)	5073(2)	2601(2)	6925(1)	27(1)
C(12)	4780(3)	1493(2)	7497(1)	38(1)
C(13)	6595(2)	3244(2)	7254(1)	32(1)
C(14)	1565(2)	5641(2)	5289(1)	28(1)
C(15)	1717(4)	6972(2)	5451(2)	49(1)
C(16)	-91(3)	5324(2)	4947(2)	46(1)

Tabelle 2.2. Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für *N*-(2,6-diisopropylphenyl)pyrrol **94**. Der Exponent des Anisotropen Fehlordnungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2}U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$.

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
N(1)	22(1)	20(1)	20(1)	0(1)	0(1)	2(1)
C(1)	21(1)	26(1)	25(1)	3(1)	-2(1)	-2(1)
C(2)	21(1)	36(1)	24(1)	5(1)	1(1)	2(1)
C(3)	28(1)	29(1)	21(1)	-2(1)	-1(1)	8(1)
C(4)	26(1)	22(1)	22(1)	-1(1)	-3(1)	1(1)
C(5)	20(1)	22(1)	19(1)	-1(1)	-1(1)	0(1)
C(6)	22(1)	24(1)	24(1)	-1(1)	-3(1)	2(1)
C(7)	26(1)	31(1)	28(1)	-3(1)	2(1)	6(1)
C(8)	28(1)	34(1)	24(1)	-4(1)	6(1)	1(1)
C(9)	32(1)	26(1)	20(1)	0(1)	-1(1)	0(1)
C(10)	25(1)	20(1)	22(1)	-2(1)	-3(1)	1(1)
C(11)	32(1)	28(1)	23(1)	-1(1)	-2(1)	9(1)
C(12)	45(1)	26(1)	42(1)	4(1)	-11(1)	6(1)
C(13)	28(1)	37(1)	30(1)	1(1)	0(1)	8(1)
C(14)	29(1)	27(1)	26(1)	1(1)	-2(1)	4(1)
C(15)	79(2)	28(1)	38(1)	5(1)	-18(1)	-9(1)
C(16)	43(1)	46(1)	50(1)	14(1)	-21(1)	-8(1)

95b

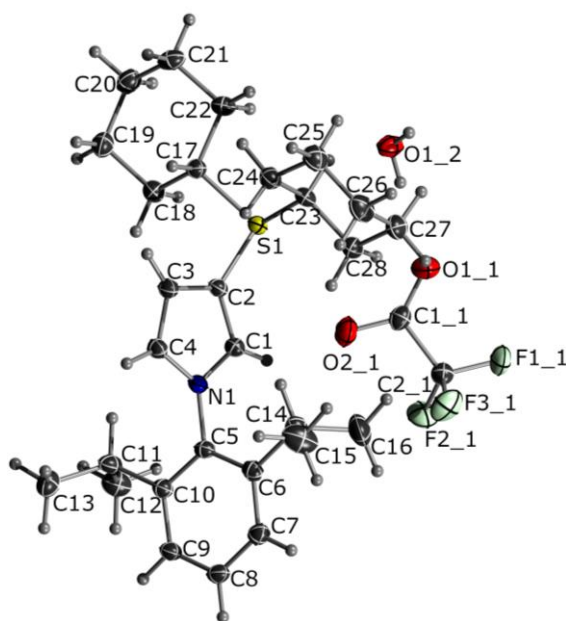


Abbildung 2.2. ORTEP von **95b**.

Tabelle 2.3. Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für **95b**. U(eq) ist als ein Drittel der Spur der orthogonalisierten U^i -Tensoren definiert.

	x	y	z	U(eq)
S(1)	3617(1)	4322(1)	6524(1)	19(1)
N(1)	2070(1)	5535(1)	6302(1)	19(1)
C(1)	2568(1)	5276(1)	6679(1)	18(1)
C(2)	2913(1)	4733(1)	6257(1)	19(1)
C(3)	2610(1)	4654(1)	5603(1)	22(1)
C(4)	2094(1)	5158(1)	5651(1)	22(1)
C(5)	1620(1)	6213(1)	6518(1)	19(1)
C(6)	1743(1)	7259(1)	6542(1)	21(1)
C(7)	1304(1)	7909(1)	6752(1)	24(1)
C(8)	766(1)	7523(1)	6917(1)	24(1)
C(9)	656(1)	6485(1)	6876(1)	24(1)
C(10)	1081(1)	5801(1)	6676(1)	21(1)
C(11)	954(1)	4666(1)	6629(1)	24(1)
C(12)	848(1)	4220(1)	7329(1)	34(1)
C(13)	437(1)	4444(1)	6120(1)	33(1)
C(14)	2329(1)	7683(1)	6353(1)	26(1)
C(15)	2256(1)	8510(1)	5809(1)	44(1)
C(16)	2683(1)	8062(2)	6982(1)	49(1)
C(17)	3675(1)	3137(1)	6044(1)	21(1)
C(18)	3259(1)	2363(1)	6342(1)	26(1)
C(19)	3304(1)	1338(1)	5977(1)	32(1)
C(20)	3935(1)	949(1)	6020(1)	31(1)
C(21)	4346(1)	1733(1)	5732(1)	27(1)
C(22)	4310(1)	2760(1)	6098(1)	24(1)
C(23)	4111(1)	5240(1)	6133(1)	22(1)
C(24)	4039(1)	5294(1)	5359(1)	25(1)
C(25)	4453(1)	6106(1)	5097(1)	32(1)
C(26)	4350(1)	7143(1)	5421(1)	34(1)
C(27)	4422(1)	7073(1)	6197(1)	31(1)
C(28)	4011(1)	6273(1)	6471(1)	27(1)
F11	4053(1)	6964(1)	9258(1)	40(1)
F21	3187(1)	6344(1)	9240(1)	40(1)
F31	3391(1)	7471(1)	8507(1)	44(1)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

O11	4301(1)	5602(1)	8342(1)	47(1)
O21	3349(1)	5444(1)	7998(1)	38(1)
C11	3774(1)	5802(1)	8336(1)	26(1)
C21	3605(1)	6646(1)	8835(1)	24(1)
O12	5000	4468(1)	7500	30(1)

Tabelle 2.4. Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für **95b**. Der Exponent des Anisotropen Fehlordnungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$.

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
S(1)	15(1)	22(1)	20(1)	-2(1)	1(1)	2(1)
N(1)	15(1)	21(1)	20(1)	0(1)	3(1)	1(1)
C(1)	17(1)	20(1)	18(1)	1(1)	1(1)	0(1)
C(2)	14(1)	22(1)	21(1)	0(1)	2(1)	1(1)
C(3)	17(1)	29(1)	20(1)	-4(1)	2(1)	1(1)
C(4)	18(1)	29(1)	19(1)	-2(1)	0(1)	1(1)
C(5)	16(1)	23(1)	18(1)	0(1)	1(1)	4(1)
C(6)	19(1)	24(1)	20(1)	1(1)	-1(1)	1(1)
C(7)	25(1)	22(1)	24(1)	-2(1)	-2(1)	3(1)
C(8)	21(1)	28(1)	24(1)	-5(1)	0(1)	8(1)
C(9)	17(1)	30(1)	25(1)	-3(1)	4(1)	3(1)
C(10)	17(1)	24(1)	22(1)	0(1)	2(1)	2(1)
C(11)	18(1)	23(1)	32(1)	0(1)	8(1)	1(1)
C(12)	32(1)	33(1)	37(1)	8(1)	6(1)	3(1)
C(13)	35(1)	27(1)	38(1)	-4(1)	0(1)	-3(1)
C(14)	21(1)	24(1)	32(1)	2(1)	2(1)	-1(1)
C(15)	39(1)	40(1)	55(1)	21(1)	13(1)	3(1)
C(16)	32(1)	64(1)	49(1)	-15(1)	-1(1)	-17(1)
C(17)	19(1)	23(1)	21(1)	-3(1)	1(1)	3(1)
C(18)	21(1)	27(1)	29(1)	-3(1)	2(1)	-1(1)
C(19)	31(1)	26(1)	37(1)	-6(1)	-3(1)	-1(1)
C(20)	35(1)	24(1)	32(1)	-2(1)	-1(1)	6(1)
C(21)	30(1)	28(1)	24(1)	0(1)	2(1)	11(1)
C(22)	20(1)	26(1)	25(1)	1(1)	4(1)	5(1)
C(23)	15(1)	25(1)	26(1)	-1(1)	2(1)	0(1)
C(24)	21(1)	29(1)	25(1)	0(1)	3(1)	-2(1)
C(25)	28(1)	38(1)	30(1)	1(1)	7(1)	-6(1)

C(26)	30(1)	30(1)	43(1)	6(1)	5(1)	-7(1)
C(27)	26(1)	28(1)	41(1)	-5(1)	5(1)	-5(1)
C(28)	23(1)	26(1)	32(1)	-5(1)	5(1)	-2(1)
F11	38(1)	49(1)	35(1)	-18(1)	-3(1)	-9(1)
F21	36(1)	55(1)	31(1)	1(1)	16(1)	-5(1)
F31	64(1)	25(1)	44(1)	5(1)	0(1)	7(1)
O11	31(1)	59(1)	52(1)	-22(1)	8(1)	4(1)
O21	41(1)	35(1)	35(1)	-9(1)	-12(1)	-1(1)
C11	31(1)	26(1)	21(1)	-2(1)	2(1)	-2(1)
C21	26(1)	25(1)	21(1)	1(1)	3(1)	-3(1)
O12	29(1)	25(1)	35(1)	0	11(1)	0

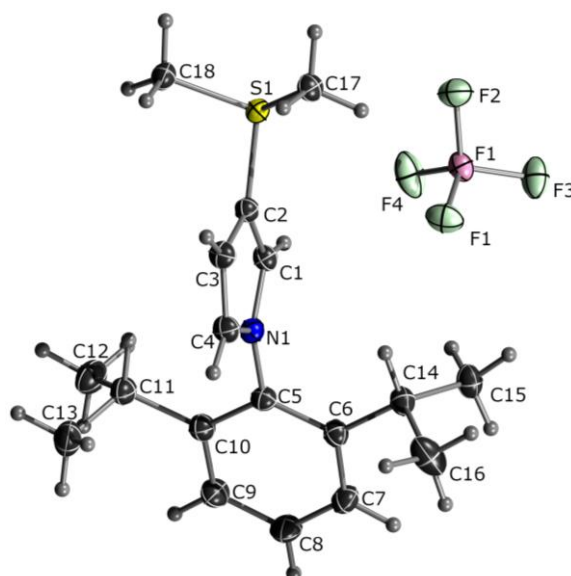
95c

 Abbildung 2.3. ORTEP von **95c**.

Tabelle 2.5. Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für **95c**. U(eq) ist als ein Drittel der Spur der orthogonalisierten U^{ij} -Tensoren definiert.

	x	y	z	U(eq)
S(1)	4054(1)	3063(1)	4361(1)	19(1)
F(1)	6051(1)	3666(1)	7996(1)	33(1)
F(2)	5225(1)	3332(1)	6340(1)	34(1)
F(3)	5740(1)	1097(1)	7300(1)	35(1)
F(4)	6259(1)	2750(1)	6259(1)	41(1)
N(1)	2390(1)	3744(1)	2056(1)	19(1)
B(1)	5825(1)	2714(2)	6986(1)	22(1)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

C(1)	2867(1)	4160(2)	3048(1)	20(1)
C(2)	3341(1)	2974(1)	3199(1)	19(1)
C(3)	3151(1)	1803(2)	2263(1)	22(1)
C(4)	2560(1)	2318(2)	1575(1)	22(1)
C(5)	1800(1)	4660(2)	1581(1)	20(1)
C(6)	1808(1)	5911(2)	752(1)	22(1)
C(7)	1226(1)	6767(2)	301(1)	27(1)
C(8)	673(1)	6408(2)	673(1)	30(1)
C(9)	680(1)	5162(2)	1498(1)	28(1)
C(10)	1243(1)	4255(2)	1967(1)	23(1)
C(11)	1238(1)	2853(2)	2833(1)	26(1)
C(12)	956(1)	3360(2)	3876(1)	35(1)
C(13)	867(1)	1378(2)	2179(1)	37(1)
C(14)	2414(1)	6359(2)	354(1)	23(1)
C(15)	2608(1)	8137(2)	660(1)	28(1)
C(16)	2326(1)	6050(2)	-986(2)	40(1)
C(17)	4682(1)	2763(2)	3592(1)	23(1)
C(18)	4054(1)	1123(2)	5100(1)	24(1)

Tabelle 2.6. Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für **95c**. Der Exponent des Anisotropen Fehlordnungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$.

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
S(1)	19(1)	18(1)	19(1)	0(1)	5(1)	0(1)
F(1)	33(1)	34(1)	29(1)	-11(1)	2(1)	-1(1)
F(2)	32(1)	34(1)	30(1)	-1(1)	-1(1)	2(1)
F(3)	42(1)	20(1)	48(1)	2(1)	22(1)	2(1)
F(4)	44(1)	37(1)	52(1)	-12(1)	32(1)	-11(1)
N(1)	19(1)	17(1)	21(1)	0(1)	5(1)	1(1)
B(1)	23(1)	19(1)	26(1)	-4(1)	9(1)	-1(1)
C(1)	21(1)	19(1)	21(1)	-2(1)	6(1)	-1(1)
C(2)	19(1)	20(1)	20(1)	1(1)	6(1)	0(1)
C(3)	23(1)	18(1)	25(1)	-2(1)	5(1)	2(1)
C(4)	24(1)	19(1)	23(1)	-3(1)	5(1)	0(1)
C(5)	19(1)	19(1)	21(1)	-1(1)	4(1)	1(1)
C(6)	22(1)	19(1)	24(1)	0(1)	7(1)	0(1)
C(7)	27(1)	23(1)	30(1)	7(1)	7(1)	4(1)

C(8)	22(1)	32(1)	35(1)	6(1)	6(1)	7(1)
C(9)	22(1)	34(1)	31(1)	5(1)	10(1)	3(1)
C(10)	23(1)	24(1)	23(1)	1(1)	6(1)	0(1)
C(11)	23(1)	29(1)	26(1)	6(1)	8(1)	1(1)
C(12)	41(1)	40(1)	27(1)	6(1)	14(1)	2(1)
C(13)	48(1)	32(1)	31(1)	4(1)	11(1)	-9(1)
C(14)	23(1)	20(1)	28(1)	1(1)	9(1)	-1(1)
C(15)	33(1)	23(1)	30(1)	-3(1)	12(1)	-6(1)
C(16)	39(1)	49(1)	37(1)	-19(1)	20(1)	-16(1)
C(17)	21(1)	26(1)	24(1)	1(1)	9(1)	0(1)
C(18)	28(1)	22(1)	23(1)	4(1)	7(1)	-1(1)

100

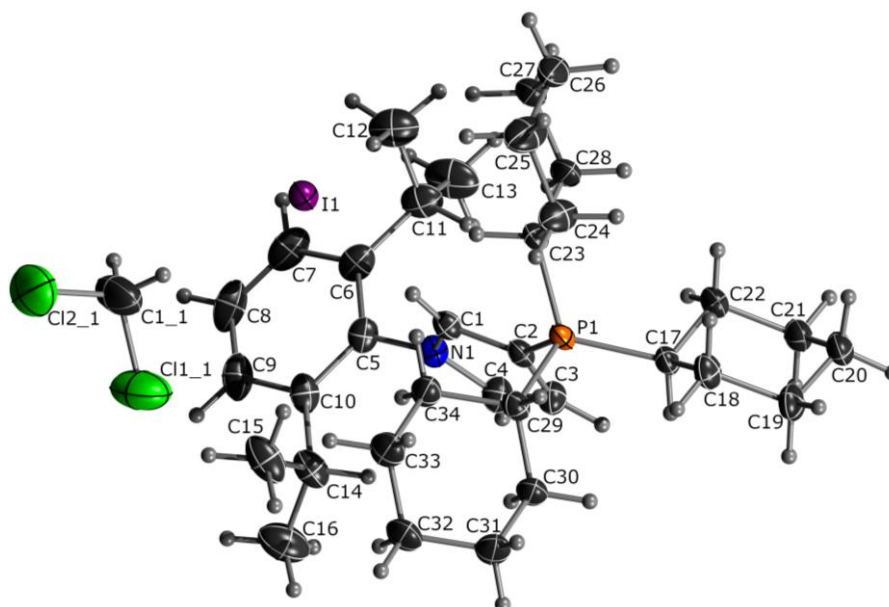


Abbildung 2.4. ORTEP von 100.

Tabelle 2.7. Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für **100**. U(eq) ist als ein Drittel der Spur der orthogonalisierten U^i -Tensoren definiert.

	x	y	z	U(eq)
I(1)	3345(1)	7289(1)	5107(1)	27(1)
P(1)	2412(1)	7927(1)	2524(1)	22(1)
N(1)	3719(2)	6099(1)	2928(1)	25(1)
C(1)	3334(2)	6697(1)	3127(2)	24(1)
C(2)	2943(2)	7091(2)	2517(2)	23(1)
C(3)	3106(3)	6711(2)	1928(2)	30(1)
C(4)	3574(3)	6101(2)	2203(2)	31(1)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

C(5)	4196(3)	5549(1)	3407(2)	26(1)
C(6)	3411(3)	5107(2)	3600(2)	32(1)
C(7)	3899(4)	4574(2)	4057(2)	42(1)
C(8)	5117(4)	4489(2)	4303(2)	45(1)
C(9)	5871(4)	4938(2)	4107(2)	40(1)
C(10)	5430(3)	5485(2)	3655(2)	31(1)
C(11)	2076(3)	5200(2)	3325(2)	38(1)
C(12)	1545(4)	5392(2)	3930(3)	53(1)
C(13)	1484(4)	4565(2)	2931(3)	58(1)
C(14)	6253(3)	6012(2)	3476(2)	37(1)
C(15)	6636(3)	6518(2)	4088(2)	48(1)
C(16)	7331(4)	5701(2)	3302(3)	57(1)
C(17)	1647(2)	8154(2)	1600(2)	25(1)
C(18)	1422(3)	8921(2)	1478(2)	31(1)
C(19)	951(3)	9059(2)	674(2)	35(1)
C(20)	-167(3)	8646(2)	331(2)	35(1)
C(21)	46(3)	7890(2)	480(2)	33(1)
C(22)	497(3)	7751(2)	1285(2)	29(1)
C(23)	1544(2)	7944(2)	3167(2)	25(1)
C(24)	1146(4)	8658(2)	3309(2)	42(1)
C(25)	549(4)	8638(2)	3916(2)	49(1)
C(26)	-476(3)	8134(3)	3753(2)	52(1)
C(27)	-68(3)	7428(2)	3610(2)	41(1)
C(28)	495(3)	7435(2)	2990(2)	37(1)
C(29)	3683(2)	8494(2)	2842(2)	26(1)
C(30)	4489(3)	8469(2)	2344(2)	33(1)
C(31)	5558(3)	8943(2)	2615(2)	44(1)
C(32)	6263(3)	8763(2)	3375(2)	42(1)
C(33)	5470(3)	8783(2)	3872(2)	40(1)
C(34)	4399(3)	8315(2)	3612(2)	32(1)
Cl11	7152(1)	7393(1)	5754(1)	86(1)
Cl21	7119(1)	7680(1)	7188(1)	86(1)
C11	6308(5)	7445(4)	6350(3)	73(2)

Tabelle 2.8. Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für **100**. Der Exponent des Anisotropen Fehlordnungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$.

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
I(1)	24(1)	27(1)	30(1)	1(1)	5(1)	0(1)
P(1)	15(1)	21(1)	28(1)	4(1)	3(1)	1(1)
N(1)	25(1)	19(1)	28(1)	0(1)	4(1)	0(1)
C(1)	22(1)	21(1)	28(1)	-2(1)	5(1)	-1(1)
C(2)	16(1)	21(1)	30(1)	1(1)	3(1)	0(1)
C(3)	31(2)	31(2)	26(1)	2(1)	5(1)	5(1)
C(4)	36(2)	27(2)	29(2)	-1(1)	7(1)	3(1)
C(5)	34(2)	16(1)	27(1)	-2(1)	5(1)	-1(1)
C(6)	46(2)	20(1)	31(2)	-5(1)	12(1)	-6(1)
C(7)	69(3)	20(1)	38(2)	-2(1)	18(2)	-5(2)
C(8)	76(3)	21(2)	32(2)	2(1)	7(2)	13(2)
C(9)	51(2)	28(2)	35(2)	-1(1)	1(2)	14(2)
C(10)	35(2)	20(1)	32(2)	-2(1)	1(1)	5(1)
C(11)	42(2)	30(2)	44(2)	-7(1)	15(2)	-14(1)
C(12)	58(2)	46(2)	62(3)	-11(2)	29(2)	-10(2)
C(13)	53(2)	48(2)	76(3)	-26(2)	24(2)	-24(2)
C(14)	28(2)	30(2)	49(2)	-1(1)	3(1)	1(1)
C(15)	36(2)	32(2)	67(3)	-12(2)	-4(2)	-1(1)
C(16)	43(2)	44(2)	88(3)	-4(2)	25(2)	3(2)
C(17)	18(1)	28(1)	26(1)	4(1)	2(1)	2(1)
C(18)	28(2)	26(2)	34(2)	6(1)	2(1)	4(1)
C(19)	31(2)	35(2)	33(2)	11(1)	1(1)	6(1)
C(20)	25(2)	48(2)	28(2)	3(1)	2(1)	8(1)
C(21)	24(2)	46(2)	26(2)	-1(1)	2(1)	0(1)
C(22)	21(1)	34(2)	28(2)	0(1)	2(1)	-1(1)
C(23)	17(1)	29(2)	28(1)	5(1)	4(1)	3(1)
C(24)	47(2)	35(2)	51(2)	12(2)	26(2)	18(2)
C(25)	57(2)	44(2)	57(2)	12(2)	33(2)	24(2)
C(26)	32(2)	84(3)	43(2)	25(2)	18(2)	26(2)
C(27)	21(2)	67(2)	34(2)	9(2)	5(1)	-5(2)
C(28)	21(1)	58(2)	30(2)	3(2)	4(1)	-12(1)
C(29)	21(1)	24(1)	30(2)	3(1)	4(1)	-2(1)
C(30)	23(1)	44(2)	32(2)	5(1)	6(1)	-9(1)

C(31)	31(2)	58(2)	41(2)	12(2)	7(1)	-19(2)
C(32)	24(2)	55(2)	44(2)	1(2)	4(1)	-15(2)
C(33)	33(2)	45(2)	37(2)	-2(2)	3(1)	-19(2)
C(34)	28(2)	36(2)	28(2)	3(1)	3(1)	-11(1)
Cl11	68(1)	112(1)	91(1)	-25(1)	45(1)	-16(1)
Cl21	69(1)	118(1)	61(1)	-13(1)	0(1)	-36(1)
C11	39(2)	119(5)	58(3)	-22(3)	11(2)	-16(3)

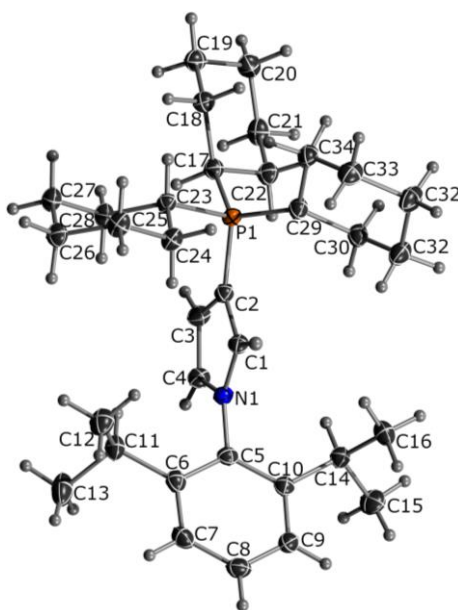
103

Abbildung 2.5. ORTEP von 103.

Tabelle 2.9. Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für **103**. U(eq) ist als ein Drittel der Spur der orthogonalisierten U^{ij} -Tensoren definiert.

	x	y	z	U(eq)
P(1)	4621(1)	3762(1)	1841(1)	17(1)
N(1)	7601(1)	3818(1)	3523(1)	18(1)
C(1)	7075(1)	3653(1)	2847(1)	19(1)
C(2)	5660(1)	3818(1)	2694(1)	19(1)
C(4)	6533(1)	4090(1)	3813(1)	22(1)
C(3)	5325(1)	4100(1)	3316(1)	22(1)
C(27)	4988(1)	6350(1)	1340(1)	24(1)
C(7)	11300(2)	4454(1)	4116(1)	27(1)
C(6)	9865(1)	4525(1)	3868(1)	22(1)
C(5)	9067(1)	3776(1)	3835(1)	19(1)
C(9)	11093(1)	2943(1)	4306(1)	24(1)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

C(8)	11916(2)	3672(1)	4329(1)	28(1)
C(23)	4976(1)	4733(1)	1383(1)	18(1)
C(24)	6444(1)	4722(1)	1234(1)	22(1)
C(28)	4761(1)	5564(1)	1758(1)	22(1)
C(29)	5010(1)	2881(1)	1443(1)	22(1)
C(17)	2815(1)	3940(1)	1967(1)	21(1)
C(22)	2361(1)	3133(1)	2302(1)	23(1)
C(18)	1796(1)	4110(1)	1277(1)	22(1)
C(26)	6436(1)	6342(1)	1184(1)	26(1)
C(25)	6686(2)	5512(1)	827(1)	26(1)
C(21)	852(2)	3204(1)	2377(1)	26(1)
C(19)	291(1)	4173(1)	1356(1)	24(1)
C(20)	-138(1)	3370(1)	1688(1)	26(1)
C(10)	9655(1)	2980(1)	4056(1)	20(1)
C(11)	9204(2)	5384(1)	3627(1)	26(1)
C(12)	9544(2)	5645(1)	2949(1)	34(1)
C(34)	4588(2)	2807(1)	671(1)	25(1)
C(33)	5651(2)	2276(1)	394(1)	29(1)
C(32)	5868(2)	1402(1)	744(1)	33(1)
C(31)	6321(2)	1494(1)	1521(1)	30(1)
C(30)	5256(2)	2020(1)	1798(1)	24(1)
C(13)	9674(2)	6084(1)	4164(1)	43(1)
C(14)	8771(1)	2173(1)	4005(1)	22(1)
C(15)	9074(2)	1662(1)	4670(1)	32(1)
C(16)	8989(2)	1616(1)	3410(1)	28(1)

Tabelle 2.10. Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für 103. Der Exponent des Anisotropen Fehlordnungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$.

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
P(1)	18(1)	17(1)	16(1)	1(1)	3(1)	1(1)
N(1)	19(1)	20(1)	16(1)	1(1)	2(1)	2(1)
C(1)	22(1)	20(1)	15(1)	1(1)	4(1)	1(1)
C(2)	21(1)	18(1)	18(1)	2(1)	4(1)	1(1)
C(4)	24(1)	25(1)	16(1)	-1(1)	6(1)	3(1)
C(3)	21(1)	27(1)	21(1)	0(1)	6(1)	3(1)
C(27)	27(1)	18(1)	28(1)	2(1)	7(1)	1(1)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

C(7)	26(1)	24(1)	29(1)	-4(1)	4(1)	-7(1)
C(6)	28(1)	20(1)	19(1)	-2(1)	6(1)	-1(1)
C(5)	20(1)	22(1)	15(1)	-1(1)	3(1)	0(1)
C(9)	23(1)	23(1)	23(1)	0(1)	2(1)	3(1)
C(8)	21(1)	32(1)	28(1)	-2(1)	0(1)	-1(1)
C(23)	19(1)	18(1)	18(1)	2(1)	4(1)	1(1)
C(24)	22(1)	22(1)	24(1)	3(1)	7(1)	3(1)
C(28)	25(1)	19(1)	24(1)	1(1)	9(1)	1(1)
C(29)	28(1)	18(1)	19(1)	1(1)	4(1)	2(1)
C(17)	21(1)	20(1)	22(1)	1(1)	4(1)	-1(1)
C(22)	24(1)	22(1)	25(1)	4(1)	6(1)	-1(1)
C(18)	21(1)	24(1)	22(1)	2(1)	4(1)	1(1)
C(26)	26(1)	22(1)	29(1)	5(1)	6(1)	-3(1)
C(25)	26(1)	26(1)	28(1)	6(1)	12(1)	2(1)
C(21)	30(1)	24(1)	29(1)	1(1)	13(1)	-1(1)
C(19)	24(1)	24(1)	24(1)	-2(1)	4(1)	3(1)
C(20)	21(1)	27(1)	32(1)	-4(1)	10(1)	0(1)
C(10)	23(1)	21(1)	16(1)	-1(1)	4(1)	0(1)
C(11)	32(1)	19(1)	27(1)	2(1)	9(1)	0(1)
C(12)	48(1)	28(1)	25(1)	4(1)	8(1)	3(1)
C(34)	32(1)	21(1)	19(1)	0(1)	2(1)	3(1)
C(33)	35(1)	32(1)	21(1)	1(1)	7(1)	7(1)
C(32)	42(1)	30(1)	26(1)	-2(1)	7(1)	15(1)
C(31)	35(1)	27(1)	26(1)	2(1)	5(1)	10(1)
C(30)	33(1)	19(1)	22(1)	2(1)	6(1)	1(1)
C(13)	77(1)	23(1)	28(1)	-1(1)	12(1)	6(1)
C(14)	23(1)	20(1)	23(1)	2(1)	4(1)	0(1)
C(15)	36(1)	32(1)	27(1)	8(1)	5(1)	-2(1)
C(16)	32(1)	22(1)	30(1)	-4(1)	8(1)	-6(1)

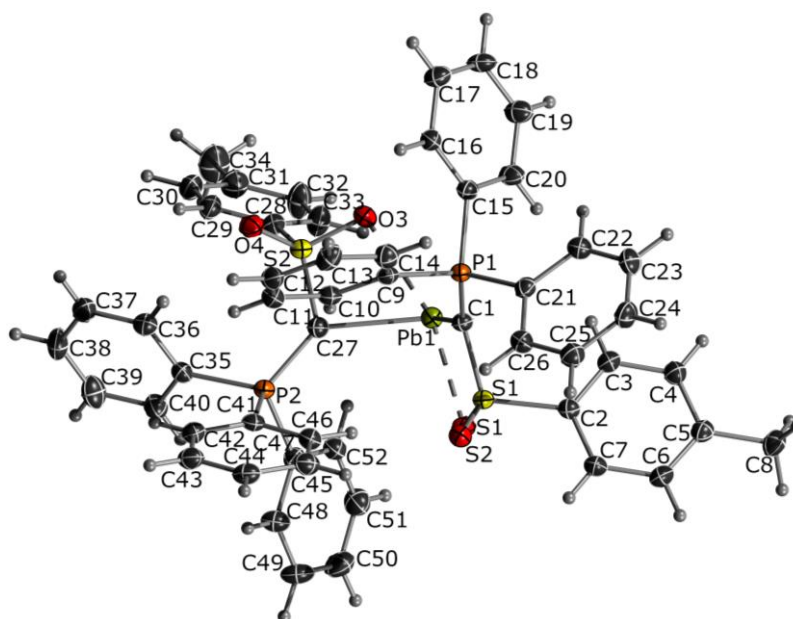
Y_2Pb

Abbildung 2.6. ORTEP von Y_2Pb .

Tabelle 2.11. Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für Y_2Pb . U(eq) ist als ein Drittel der Spur der orthogonalisierten U^{ij} -Tensoren definiert.

	x	y	z	U(eq)
Pb(1)	3273(1)	6449(1)	7205(1)	21(1)
O(1)	2553(1)	4513(2)	7310(1)	26(1)
C(1)	2119(2)	6684(3)	7210(2)	20(1)
P(1)	1522(1)	7826(1)	7049(1)	18(1)
S(1)	1915(1)	5220(1)	7343(1)	20(1)
S(2)	3469(1)	7821(1)	6006(1)	20(1)
C(2)	1793(2)	5019(3)	8141(2)	21(1)
O(2)	1305(1)	4703(2)	6959(1)	26(1)
P(2)	3191(1)	5196(1)	5555(1)	19(1)
O(4)	3101(1)	8411(2)	5439(1)	26(1)
C(4)	2071(2)	5555(3)	9238(2)	26(1)
O(3)	3382(1)	8433(2)	6606(1)	24(1)
C(3)	2104(2)	5814(3)	8612(2)	25(1)
C(9)	1101(2)	7946(3)	6235(2)	21(1)
C(8)	1703(2)	4232(3)	10087(2)	28(1)
C(7)	1426(2)	3992(3)	8293(2)	28(1)
C(6)	1396(2)	3755(3)	8920(2)	30(1)
C(5)	1722(2)	4510(3)	9403(2)	23(1)
C(11)	1135(2)	7591(3)	5138(2)	28(1)

C(10)	1439(2)	7496(3)	5762(2)	24(1)
C(12)	502(2)	8149(3)	4972(2)	29(1)
C(13)	167(2)	8615(3)	5439(2)	30(1)
C(14)	458(2)	8510(3)	6069(2)	26(1)
C(15)	1937(2)	9310(3)	7236(2)	21(1)
C(17)	2104(2)	11492(3)	7011(2)	29(1)
C(16)	1783(2)	10353(3)	6849(2)	23(1)
C(18)	2585(2)	11588(3)	7559(2)	29(1)
C(19)	2742(2)	10557(3)	7947(2)	30(1)
C(26)	317(2)	6794(3)	7324(2)	26(1)
C(27)	3311(2)	6326(3)	6117(2)	22(1)
C(28)	4354(2)	8060(3)	5975(2)	22(1)
C(29)	4572(2)	8372(3)	5416(2)	27(1)
C(30)	5264(2)	8566(3)	5412(2)	32(1)
C(31)	5747(2)	8461(4)	5956(2)	33(1)
C(32)	5518(2)	8160(5)	6517(2)	39(1)
C(33)	4832(2)	7955(4)	6528(2)	32(1)
C(34)	6500(2)	8647(5)	5951(2)	48(1)
C(35)	3601(2)	5457(3)	4869(1)	22(1)
C(36)	3405(2)	6478(3)	4477(2)	26(1)
C(37)	3731(2)	6704(4)	3970(2)	30(1)
C(38)	4240(2)	5912(4)	3839(2)	33(1)
C(39)	4431(2)	4893(4)	4222(2)	35(1)
C(40)	4116(2)	4662(3)	4742(2)	28(1)
C(41)	2303(2)	4823(3)	5221(2)	20(1)
C(42)	2053(2)	4734(3)	4577(2)	24(1)
C(43)	1366(2)	4441(3)	4371(2)	28(1)
C(44)	931(2)	4229(3)	4800(2)	27(1)
C(45)	1183(2)	4304(3)	5443(2)	27(1)
C(46)	1862(2)	4589(3)	5653(2)	24(1)
C(47)	3513(2)	3739(3)	5913(2)	23(1)
C(48)	3256(2)	2595(3)	5656(2)	27(1)
C(49)	3512(2)	1481(3)	5924(2)	33(1)
C(50)	4021(2)	1485(3)	6458(2)	35(1)
C(51)	4277(2)	2612(4)	6704(2)	33(1)
C(52)	4032(2)	3742(3)	6437(2)	25(1)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

C(25)	-202(2)	6647(3)	7676(2)	27(1)
C(24)	-225(2)	7405(3)	8195(2)	29(1)
C(23)	280(2)	8289(4)	8370(2)	29(1)
C(22)	805(2)	8435(3)	8021(2)	26(1)
C(21)	824(2)	7696(3)	7495(1)	21(1)
C(20)	2425(2)	9423(3)	7786(2)	26(1)

Tabelle 2.12. Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für **Y₂Pb**. Der Exponent des Anisotropen Fehlordnungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$.

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Pb(1)	24(1)	19(1)	19(1)	0(1)	4(1)	0(1)
O(1)	35(1)	17(1)	28(1)	2(1)	11(1)	5(1)
C(1)	24(2)	14(1)	22(2)	2(1)	5(1)	0(1)
P(1)	23(1)	14(1)	18(1)	1(1)	5(1)	1(1)
S(1)	28(1)	14(1)	20(1)	0(1)	7(1)	-1(1)
S(2)	24(1)	15(1)	20(1)	0(1)	4(1)	-1(1)
C(2)	23(1)	18(1)	22(2)	1(1)	5(1)	1(1)
O(2)	35(1)	22(1)	22(1)	-3(1)	7(1)	-6(1)
P(2)	24(1)	14(1)	18(1)	-1(1)	5(1)	0(1)
O(4)	29(1)	21(1)	25(1)	2(1)	1(1)	2(1)
C(4)	30(2)	26(2)	21(2)	-1(1)	3(1)	-4(1)
O(3)	31(1)	20(1)	24(1)	-3(1)	8(1)	1(1)
C(3)	32(2)	20(1)	23(2)	1(1)	7(1)	-3(1)
C(9)	27(2)	14(1)	22(1)	1(1)	3(1)	-2(1)
C(8)	30(2)	28(2)	25(2)	7(1)	5(1)	4(1)
C(7)	42(2)	20(2)	25(2)	-4(1)	10(1)	-8(1)
C(6)	42(2)	20(2)	30(2)	2(1)	12(2)	-5(1)
C(5)	24(1)	21(1)	24(2)	3(1)	7(1)	4(1)
C(11)	42(2)	21(2)	22(2)	-2(1)	7(1)	-1(1)
C(10)	32(2)	16(1)	24(2)	0(1)	5(1)	0(1)
C(12)	41(2)	24(2)	19(2)	1(1)	-2(1)	-6(1)
C(13)	29(2)	32(2)	28(2)	7(1)	1(2)	-1(1)
C(14)	27(2)	26(2)	27(2)	1(1)	7(1)	1(1)
C(15)	24(1)	16(1)	22(1)	0(1)	6(1)	2(1)
C(17)	33(2)	19(2)	33(2)	6(1)	5(2)	0(1)
C(16)	31(2)	19(1)	19(1)	0(1)	3(1)	0(1)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

C(18)	33(2)	15(1)	37(2)	-1(1)	1(2)	-5(1)
C(19)	34(2)	23(2)	32(2)	0(1)	-3(1)	-2(1)
C(26)	32(2)	22(2)	25(2)	-3(1)	8(1)	-2(1)
C(27)	25(2)	18(1)	23(2)	-1(1)	7(1)	-1(1)
C(28)	25(2)	20(2)	22(2)	0(1)	6(1)	-2(1)
C(29)	32(2)	28(2)	22(2)	3(1)	4(1)	-5(1)
C(30)	38(2)	32(2)	26(2)	1(1)	10(2)	-9(1)
C(31)	28(2)	38(2)	34(2)	0(1)	6(2)	-7(1)
C(32)	31(2)	59(3)	25(2)	3(2)	1(1)	-6(2)
C(33)	30(2)	44(2)	23(2)	5(2)	5(1)	-4(2)
C(34)	32(2)	69(3)	45(3)	-1(2)	10(2)	-12(2)
C(35)	26(2)	21(1)	18(1)	-3(1)	4(1)	-3(1)
C(36)	29(2)	23(2)	26(2)	-2(1)	5(1)	-3(1)
C(37)	38(2)	30(2)	24(2)	-1(1)	5(1)	-9(2)
C(38)	31(2)	47(2)	22(2)	1(2)	9(1)	-5(2)
C(39)	29(2)	47(2)	31(2)	-4(2)	11(1)	2(2)
C(40)	29(2)	28(2)	25(2)	-2(1)	6(1)	2(1)
C(41)	25(1)	13(1)	23(2)	-2(1)	4(1)	0(1)
C(42)	31(2)	19(1)	23(2)	1(1)	4(1)	-1(1)
C(43)	35(2)	21(2)	27(2)	1(1)	-2(1)	-4(1)
C(44)	28(2)	19(1)	33(2)	1(1)	0(1)	-2(1)
C(45)	28(2)	22(2)	32(2)	-3(1)	8(1)	-3(1)
C(46)	30(2)	19(1)	22(2)	-2(1)	6(1)	-1(1)
C(47)	26(2)	20(1)	23(2)	3(1)	9(1)	1(1)
C(48)	28(2)	19(2)	34(2)	-2(1)	2(1)	0(1)
C(49)	36(2)	16(2)	46(2)	2(1)	4(2)	-3(1)
C(50)	40(2)	26(2)	40(2)	10(1)	7(2)	6(1)
C(51)	36(2)	32(2)	28(2)	1(1)	1(1)	7(2)
C(52)	32(2)	22(2)	23(2)	-1(1)	5(1)	2(1)
C(25)	28(2)	27(2)	26(2)	1(1)	5(1)	-3(1)
C(24)	30(2)	31(2)	28(2)	3(1)	12(1)	-1(1)
C(23)	34(2)	30(2)	26(2)	-4(1)	12(1)	0(2)
C(22)	30(2)	21(2)	26(2)	-2(1)	6(1)	-2(1)
C(21)	25(2)	19(1)	21(1)	4(1)	5(1)	2(1)
C(20)	33(2)	17(1)	26(2)	2(1)	-1(1)	3(1)

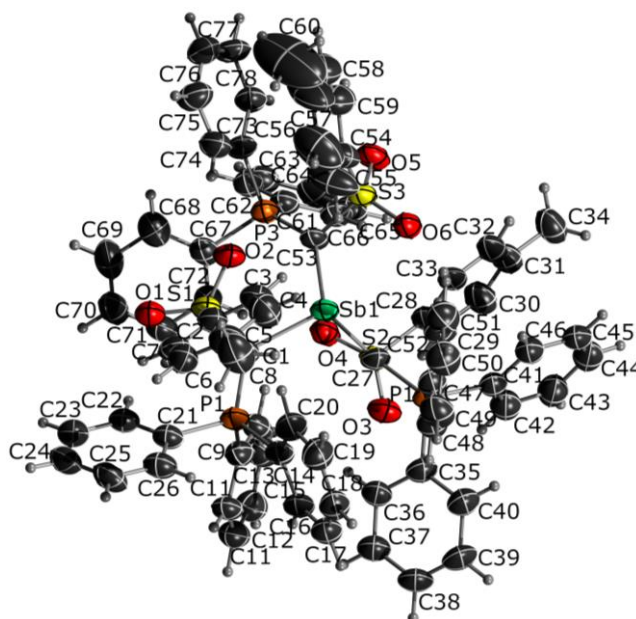
Y_3Sb

Abbildung 2.7. ORTEP von Y_3Sb .

Tabelle 2.13. Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für Y_3Sb . U(eq) ist als ein Drittel der Spur der orthogonalisierten U^{ij} -Tensoren definiert.

	x	y	z	U(eq)
S(1)	1540(1)	8391(1)	6067(1)	57(1)
S(2)	3656(1)	4410(1)	7618(1)	53(1)
S(3)	4260(1)	7233(1)	7949(1)	52(1)
Sb(3)	2326(1)	6898(1)	7437(1)	49(1)
P(1)	711(1)	6730(1)	6205(1)	53(1)
P(2)	1781(1)	4998(1)	8567(1)	54(1)
P(3)	4820(1)	6994(1)	6494(1)	53(1)
O(1)	1570(4)	8598(5)	5308(3)	67(1)
O(2)	2325(4)	8596(4)	6400(3)	61(1)
O(3)	3362(4)	3549(4)	7617(3)	62(1)
O(4)	4169(4)	4761(4)	6963(3)	58(1)
O(5)	5402(4)	6900(5)	7991(3)	64(1)
O(6)	3637(4)	6907(4)	8558(2)	56(1)
C(1)	1623(5)	7203(6)	6410(3)	52(1)
C(2)	318(6)	9238(6)	6371(4)	62(2)
C(3)	238(7)	9455(7)	7052(5)	69(2)
C(4)	-737(8)	10062(8)	7320(5)	78(2)
C(5)	-1602(7)	10470(7)	6905(6)	78(2)
C(6)	-1464(7)	10259(7)	6223(5)	69(2)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

C(7)	-520(6)	9659(6)	5943(5)	64(2)
C(8)	-2641(9)	11123(10)	7198(6)	94(3)
C(9)	1270(6)	5490(6)	6017(4)	57(2)
C(10)	646(6)	5022(6)	5781(4)	59(2)
C(11)	1060(7)	4076(7)	5686(4)	67(2)
C(12)	2143(7)	3556(7)	5784(5)	69(2)
C(13)	2771(7)	4015(7)	5992(4)	68(2)
C(14)	2324(6)	4966(7)	6112(4)	62(2)
C(15)	-354(5)	6734(6)	6892(4)	53(2)
C(16)	-874(6)	6027(6)	7059(4)	61(2)
C(17)	-1759(6)	6151(7)	7517(4)	68(2)
C(18)	-2187(6)	7011(7)	7809(4)	69(2)
C(19)	-1688(7)	7700(7)	7675(4)	71(2)
C(20)	-748(6)	7554(7)	7229(4)	67(2)
C(21)	44(6)	7391(6)	5411(4)	58(2)
C(22)	638(6)	7453(6)	4768(4)	63(2)
C(23)	124(8)	7978(7)	4167(5)	75(2)
C(24)	-929(8)	8438(7)	4193(5)	78(2)
C(25)	-1535(7)	8371(7)	4839(5)	75(2)
C(26)	-1037(6)	7846(6)	5432(5)	66(2)
C(27)	2596(5)	5352(5)	7866(4)	51(1)
C(28)	4634(5)	3995(6)	8240(4)	54(2)
C(29)	5350(6)	3056(7)	8230(4)	64(2)
C(30)	6146(6)	2689(8)	8698(5)	71(2)
C(31)	6230(6)	3253(7)	9176(4)	63(2)
C(32)	5524(6)	4184(7)	9169(4)	64(2)
C(33)	4715(5)	4563(6)	8713(4)	54(2)
C(34)	7089(7)	2850(9)	9689(5)	81(3)
C(35)	981(6)	4286(6)	8393(4)	59(2)
C(36)	981(6)	4092(7)	7719(4)	66(2)
C(37)	381(7)	3548(7)	7605(5)	73(2)
C(38)	-233(8)	3205(8)	8161(5)	81(3)
C(39)	-234(8)	3388(9)	8823(5)	88(3)
C(40)	382(7)	3933(8)	8948(5)	76(2)
C(41)	2463(5)	4229(6)	9329(4)	54(2)
C(42)	2989(7)	3253(7)	9304(4)	68(2)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

C(43)	3644(7)	2654(7)	9834(5)	71(2)
C(44)	3720(6)	3067(8)	10408(5)	72(2)
C(45)	3180(7)	4006(7)	10454(4)	66(2)
C(46)	2546(7)	4616(7)	9921(4)	64(2)
C(47)	862(5)	6092(6)	8890(4)	60(2)
C(48)	-214(6)	6260(7)	8968(4)	66(2)
C(49)	-890(7)	7092(8)	9226(5)	77(2)
C(50)	-482(7)	7763(8)	9420(5)	78(2)
C(51)	609(7)	7594(7)	9330(5)	72(2)
C(52)	1276(6)	6756(6)	9075(4)	60(2)
C(53)	3935(5)	6939(6)	7230(3)	52(2)
C(54)	3871(7)	8514(7)	7931(5)	71(2)
C(55)	2789(10)	9056(8)	7951(8)	108(4)
C(56)	2507(15)	10057(12)	7938(10)	138(6)
C(57)	3298(18)	10509(10)	7875(10)	141(7)
C(58)	4345(14)	9961(10)	7875(7)	107(4)
C(59)	4648(10)	8963(9)	7902(5)	88(3)
C(60)	2910(30)	11631(13)	7803(19)	261(19)
C(61)	6020(5)	5958(6)	6534(4)	54(2)
C(62)	6794(6)	5855(6)	5957(4)	59(2)
C(63)	7682(6)	5036(6)	5981(4)	63(2)
C(64)	7824(6)	4304(7)	6569(5)	67(2)
C(65)	7100(6)	4406(7)	7137(4)	65(2)
C(66)	6185(5)	5243(6)	7122(4)	57(2)
C(67)	4388(5)	6955(6)	5649(4)	59(2)
C(68)	4453(9)	7653(8)	5060(5)	85(3)
C(69)	4236(11)	7525(9)	4404(5)	94(3)
C(70)	3992(7)	6726(8)	4330(4)	74(2)
C(71)	3951(9)	6050(9)	4899(5)	87(3)
C(72)	4155(10)	6168(10)	5566(5)	90(3)
C(73)	5195(6)	8100(6)	6347(4)	62(2)
C(74)	4437(7)	9003(6)	6181(5)	69(2)
C(75)	4705(7)	9860(7)	6040(5)	75(2)
C(76)	5716(8)	9813(8)	6109(5)	79(2)
C(77)	6476(7)	8937(7)	6314(5)	73(2)
C(78)	6235(6)	8056(7)	6425(4)	66(2)

Tabelle 2.14. Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für **Y₃Sb**. Der Exponent des Anisotropen Fehlordnungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$.

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
S(1)	46(1)	76(1)	59(1)	0(1)	-11(1)	-35(1)
S(2)	40(1)	72(1)	54(1)	-11(1)	-5(1)	-28(1)
S(3)	40(1)	76(1)	52(1)	-10(1)	-4(1)	-33(1)
Sb(3)	36(1)	70(1)	50(1)	-8(1)	-3(1)	-29(1)
P(1)	40(1)	77(1)	52(1)	-8(1)	-3(1)	-33(1)
P(2)	39(1)	78(1)	51(1)	-4(1)	-3(1)	-32(1)
P(3)	41(1)	78(1)	49(1)	-5(1)	-3(1)	-33(1)
O(1)	60(3)	96(4)	59(3)	0(3)	-11(2)	-46(3)
O(2)	47(3)	78(3)	68(3)	-3(2)	-10(2)	-35(2)
O(3)	46(3)	75(3)	74(3)	-11(2)	-11(2)	-29(2)
O(4)	44(2)	88(3)	52(2)	-16(2)	-2(2)	-31(2)
O(5)	37(2)	105(4)	62(3)	-20(3)	-4(2)	-34(2)
O(6)	48(2)	84(3)	47(2)	-10(2)	-2(2)	-34(2)
C(1)	38(3)	78(4)	46(3)	-5(3)	-8(2)	-27(3)
C(2)	57(4)	71(4)	66(4)	4(3)	-17(3)	-36(3)
C(3)	61(5)	77(5)	75(5)	-12(4)	-11(4)	-28(4)
C(4)	72(5)	92(6)	72(5)	-12(4)	-13(4)	-26(5)
C(5)	57(5)	83(6)	93(6)	-13(5)	-11(4)	-21(4)
C(6)	63(5)	81(5)	68(5)	6(4)	-16(4)	-34(4)
C(7)	50(4)	72(5)	77(5)	9(4)	-14(3)	-36(3)
C(8)	68(6)	124(9)	83(6)	-24(6)	-5(5)	-15(6)
C(9)	52(4)	77(5)	52(3)	-12(3)	1(3)	-35(3)
C(10)	46(3)	81(5)	61(4)	-12(3)	-7(3)	-35(3)
C(11)	69(5)	87(5)	62(4)	-18(4)	-3(4)	-43(4)
C(12)	71(5)	76(5)	67(5)	-15(4)	-5(4)	-30(4)
C(13)	62(5)	83(5)	63(4)	-15(4)	-7(3)	-26(4)
C(14)	51(4)	92(5)	56(4)	-17(3)	-6(3)	-37(4)
C(15)	37(3)	77(4)	53(3)	-7(3)	-4(3)	-28(3)
C(16)	48(4)	85(5)	61(4)	-9(3)	-6(3)	-38(4)
C(17)	50(4)	104(6)	62(4)	-5(4)	-4(3)	-44(4)
C(18)	45(4)	109(7)	59(4)	-3(4)	-1(3)	-38(4)
C(19)	58(4)	90(6)	63(4)	-10(4)	4(3)	-27(4)
C(20)	49(4)	93(6)	66(4)	-9(4)	4(3)	-36(4)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

C(21)	46(3)	75(4)	60(4)	-8(3)	-10(3)	-30(3)
C(22)	57(4)	89(5)	59(4)	-3(3)	-12(3)	-44(4)
C(23)	86(6)	95(6)	64(5)	1(4)	-16(4)	-57(5)
C(24)	84(6)	83(6)	80(6)	4(4)	-40(5)	-42(5)
C(25)	60(5)	98(6)	78(5)	-16(4)	-27(4)	-29(4)
C(26)	50(4)	84(5)	74(5)	-12(4)	-12(3)	-31(4)
C(27)	38(3)	66(4)	56(3)	1(3)	-7(3)	-31(3)
C(28)	40(3)	78(5)	54(3)	-10(3)	-3(3)	-31(3)
C(29)	50(4)	85(5)	66(4)	-19(4)	-6(3)	-27(4)
C(30)	46(4)	101(6)	68(5)	-13(4)	-11(3)	-21(4)
C(31)	41(3)	93(5)	58(4)	-13(4)	-4(3)	-24(3)
C(32)	49(4)	100(6)	52(4)	-16(4)	-1(3)	-36(4)
C(33)	41(3)	82(5)	51(3)	-10(3)	1(3)	-36(3)
C(34)	57(5)	127(8)	63(5)	-12(5)	-15(4)	-30(5)
C(35)	46(3)	77(5)	63(4)	-1(3)	-3(3)	-36(3)
C(36)	53(4)	92(5)	62(4)	3(4)	-16(3)	-41(4)
C(37)	68(5)	99(6)	71(5)	-3(4)	-14(4)	-51(5)
C(38)	70(5)	116(7)	82(6)	-2(5)	-17(4)	-65(5)
C(39)	79(6)	127(8)	83(6)	8(5)	-4(5)	-78(6)
C(40)	70(5)	104(6)	67(5)	2(4)	-4(4)	-55(5)
C(41)	41(3)	77(5)	50(3)	-1(3)	-3(3)	-33(3)
C(42)	55(4)	87(6)	63(4)	-2(4)	-7(3)	-29(4)
C(43)	58(4)	86(6)	65(5)	6(4)	-9(4)	-27(4)
C(44)	44(4)	105(7)	67(5)	13(4)	-13(3)	-34(4)
C(45)	66(5)	95(6)	55(4)	-3(4)	-7(3)	-53(5)
C(46)	61(4)	89(5)	53(4)	-4(3)	-6(3)	-42(4)
C(47)	36(3)	95(5)	51(4)	-5(3)	2(3)	-30(3)
C(48)	43(4)	101(6)	58(4)	-7(4)	-1(3)	-32(4)
C(49)	43(4)	115(7)	74(5)	-14(5)	-6(3)	-25(4)
C(50)	48(4)	108(7)	72(5)	-15(5)	3(4)	-20(4)
C(51)	64(5)	81(5)	70(5)	-16(4)	-2(4)	-23(4)
C(52)	52(4)	78(5)	52(4)	-5(3)	-3(3)	-28(3)
C(53)	32(3)	90(5)	48(3)	-11(3)	0(2)	-37(3)
C(54)	74(5)	76(5)	80(5)	-14(4)	-22(4)	-39(4)
C(55)	94(8)	74(6)	175(12)	-49(7)	-53(8)	-18(5)
C(56)	127(13)	121(11)	165(15)	-44(10)	-53(11)	-11(9)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

C(57)	210(20)	78(7)	166(14)	-10(8)	-95(14)	-65(10)
C(58)	148(13)	93(8)	110(9)	-11(6)	-34(8)	-69(8)
C(59)	106(8)	98(7)	83(6)	-21(5)	-4(5)	-61(6)
C(60)	330(40)	82(10)	390(40)	-54(17)	-210(40)	-12(15)
C(61)	42(3)	81(5)	51(3)	-13(3)	-3(3)	-32(3)
C(62)	43(3)	86(5)	54(4)	-9(3)	-2(3)	-30(3)
C(63)	46(4)	91(5)	61(4)	-19(4)	-1(3)	-31(4)
C(64)	34(3)	94(6)	78(5)	-23(4)	-7(3)	-19(3)
C(65)	47(4)	85(5)	69(4)	-11(4)	-12(3)	-27(3)
C(66)	37(3)	83(5)	60(4)	-15(3)	4(3)	-31(3)
C(67)	34(3)	94(5)	53(4)	-11(3)	-2(3)	-26(3)
C(68)	98(7)	96(7)	69(5)	-6(4)	-21(5)	-41(6)
C(69)	123(9)	106(8)	57(5)	1(5)	-24(5)	-42(7)
C(70)	58(4)	118(7)	52(4)	-17(4)	-1(3)	-37(5)
C(71)	89(7)	132(8)	70(5)	-12(5)	-17(5)	-72(6)
C(72)	108(8)	139(9)	54(4)	8(5)	-19(5)	-87(7)
C(73)	43(3)	89(5)	63(4)	2(3)	-5(3)	-42(4)
C(74)	64(5)	77(5)	76(5)	1(4)	-21(4)	-37(4)
C(75)	59(5)	76(5)	95(6)	2(4)	-8(4)	-35(4)
C(76)	77(6)	85(6)	86(6)	11(4)	-15(5)	-49(5)
C(77)	51(4)	88(6)	95(6)	0(4)	-10(4)	-47(4)
C(78)	50(4)	94(6)	65(4)	-2(4)	-7(3)	-42(4)

Y₃Bi

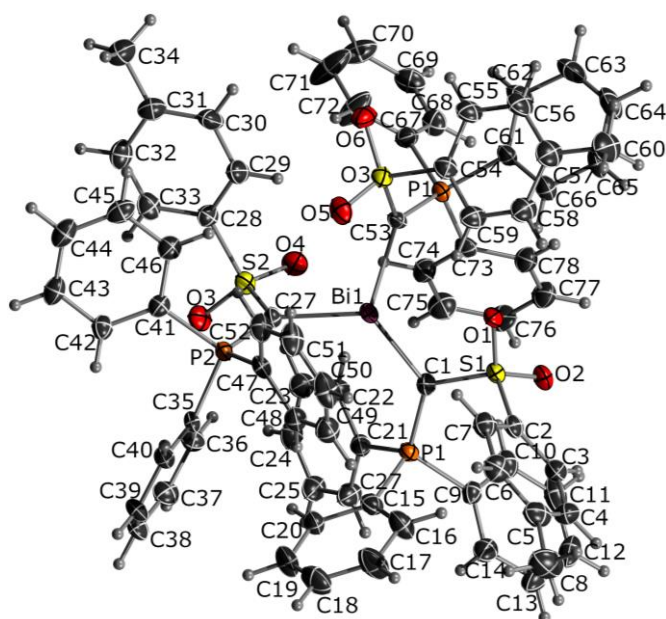


Abbildung 2.8. ORTEP von ***Y₃Bi***.

Tabelle 2.15. Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für ***Y₃Bi***. $U(\text{eq})$ ist als ein Drittel der Spur der orthogonalisierten U^{ij} -Tensoren definiert.

	x	y	z	U(eq)
Bi(1)	9987(1)	7984(1)	2418(1)	20(1)
S(2)	9389(1)	8240(1)	3809(1)	25(1)
S(1)	9663(1)	6362(1)	1757(1)	24(1)
S(3)	8234(1)	10455(1)	2002(1)	25(1)
P(2)	11720(1)	7898(1)	3404(1)	20(1)
P(1)	10826(1)	4920(1)	2780(1)	23(1)
P(3)	6761(1)	9213(1)	2281(1)	23(1)
O(3)	9915(2)	7598(2)	4332(1)	32(1)
O(4)	8348(2)	8149(2)	3660(1)	32(1)
O(1)	9225(2)	7542(2)	1522(1)	29(1)
O(2)	8915(2)	5827(2)	1686(1)	31(1)
O(5)	9424(2)	10271(2)	2112(1)	33(1)
O(6)	7329(2)	11434(2)	2143(1)	36(1)
C(27)	10350(2)	7990(2)	3296(1)	21(1)
C(28)	8897(3)	9640(3)	3881(1)	28(1)
C(29)	8359(3)	10485(3)	3446(1)	37(1)
C(30)	7943(3)	11573(3)	3493(2)	42(1)
C(31)	8063(3)	11838(3)	3977(2)	38(1)
C(32)	8622(3)	10979(3)	4408(1)	36(1)

C(33)	9030(3)	9880(3)	4364(1)	32(1)
C(34)	7636(4)	13027(3)	4023(2)	53(1)
C(35)	12754(3)	6652(2)	3825(1)	23(1)
C(36)	12370(3)	5932(3)	4185(1)	29(1)
C(37)	13174(3)	5020(3)	4526(1)	35(1)
C(38)	14340(3)	4819(3)	4509(1)	36(1)
C(39)	14728(3)	5529(3)	4153(1)	34(1)
C(40)	13939(3)	6448(3)	3808(1)	28(1)
C(41)	11719(3)	9003(2)	3696(1)	24(1)
C(42)	12387(3)	8795(3)	4153(1)	29(1)
C(43)	12338(3)	9669(3)	4365(1)	34(1)
C(44)	11629(3)	10741(3)	4125(2)	35(1)
C(45)	10970(3)	10960(3)	3669(2)	33(1)
C(46)	11007(3)	10093(3)	3455(1)	28(1)
C(47)	12428(3)	7984(3)	2755(1)	23(1)
C(48)	12996(3)	7020(3)	2551(1)	30(1)
C(49)	13475(3)	7082(3)	2043(2)	37(1)
C(50)	13425(3)	8084(4)	1743(1)	41(1)
C(51)	12879(4)	9028(3)	1940(2)	42(1)
C(52)	12375(3)	8985(3)	2445(1)	32(1)
C(1)	10041(3)	6218(3)	2406(1)	24(1)
C(2)	10917(3)	5773(3)	1367(1)	26(1)
C(3)	11128(3)	4808(3)	1196(1)	32(1)
C(4)	12145(3)	4331(3)	921(2)	39(1)
C(5)	12958(3)	4791(3)	819(2)	40(1)
C(6)	12720(3)	5773(3)	977(1)	37(1)
C(7)	11696(3)	6273(3)	1251(1)	33(1)
C(8)	14096(4)	4238(4)	549(2)	57(1)
C(9)	10644(3)	3815(3)	2557(1)	27(1)
C(10)	9519(3)	3880(3)	2533(2)	36(1)
C(11)	9338(4)	3050(4)	2367(2)	46(1)
C(12)	10283(4)	2168(3)	2220(2)	46(1)
C(13)	11388(4)	2103(3)	2253(2)	44(1)
C(14)	11580(3)	2916(3)	2426(1)	34(1)
C(15)	12404(3)	4497(3)	2805(1)	30(1)
C(16)	13029(3)	4395(3)	2332(2)	40(1)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

C(17)	14226(4)	4108(4)	2333(2)	51(1)
C(18)	14797(3)	3934(4)	2808(2)	52(1)
C(19)	14201(4)	4031(4)	3272(2)	48(1)
C(20)	12995(3)	4317(3)	3279(2)	34(1)
C(21)	10383(3)	4751(3)	3479(1)	27(1)
C(22)	9594(3)	5647(3)	3672(1)	32(1)
C(23)	9219(3)	5505(3)	4201(2)	36(1)
C(24)	9620(3)	4475(3)	4536(1)	34(1)
C(25)	10420(4)	3579(3)	4349(1)	40(1)
C(26)	10802(4)	3712(3)	3821(1)	37(1)
C(53)	8095(2)	9266(2)	2294(1)	22(1)
C(54)	8129(3)	10711(3)	1286(1)	28(1)
C(55)	7232(3)	11654(3)	1008(1)	32(1)
C(56)	7133(3)	11824(3)	451(2)	38(1)
C(57)	7898(4)	11066(3)	166(2)	39(1)
C(58)	8800(4)	10141(3)	455(1)	38(1)
C(59)	8925(3)	9963(3)	1006(1)	33(1)
C(60)	7745(5)	11219(4)	-432(2)	54(1)
C(61)	6049(3)	9801(3)	1620(1)	29(1)
C(62)	4948(3)	10684(3)	1539(2)	38(1)
C(63)	4438(4)	11079(4)	1025(2)	49(1)
C(64)	5006(4)	10617(4)	599(2)	50(1)
C(65)	6095(4)	9760(3)	674(2)	43(1)
C(66)	6620(3)	9355(3)	1183(2)	33(1)
C(67)	5684(3)	9909(3)	2741(1)	29(1)
C(68)	4689(3)	9695(3)	2846(2)	33(1)
C(69)	3846(3)	10240(3)	3180(2)	38(1)
C(70)	3979(4)	11004(3)	3415(2)	48(1)
C(71)	4959(5)	11209(4)	3322(3)	70(2)
C(72)	5812(4)	10673(4)	2981(2)	56(1)
C(73)	6805(3)	7826(3)	2477(1)	26(1)
C(74)	7027(3)	7296(3)	3016(2)	34(1)
C(75)	6912(3)	6306(3)	3203(2)	39(1)
C(76)	6559(3)	5845(3)	2853(2)	38(1)
C(77)	6342(3)	6363(3)	2316(2)	40(1)
C(78)	6467(3)	7353(3)	2125(2)	35(1)

Tabelle 2.16. Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für Y_3Bi . Der Exponent des Anisotropen Fehlordnungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$.

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
Bi(1)	19(1)	22(1)	17(1)	-2(1)	-3(1)	-8(1)
S(2)	24(1)	28(1)	20(1)	-4(1)	2(1)	-10(1)
S(1)	24(1)	24(1)	21(1)	-4(1)	-6(1)	-7(1)
S(3)	31(1)	21(1)	22(1)	-1(1)	-4(1)	-10(1)
P(2)	21(1)	21(1)	18(1)	-2(1)	-3(1)	-9(1)
P(1)	25(1)	21(1)	21(1)	-1(1)	-5(1)	-9(1)
P(3)	19(1)	23(1)	27(1)	-6(1)	-4(1)	-7(1)
O(3)	36(1)	35(1)	20(1)	-1(1)	1(1)	-11(1)
O(4)	24(1)	38(1)	36(1)	-10(1)	5(1)	-14(1)
O(1)	33(1)	24(1)	23(1)	-3(1)	-8(1)	-4(1)
O(2)	27(1)	36(1)	32(1)	-7(1)	-8(1)	-13(1)
O(5)	36(1)	35(1)	33(1)	0(1)	-6(1)	-23(1)
O(6)	51(2)	22(1)	29(1)	-3(1)	-3(1)	-8(1)
C(27)	22(1)	24(1)	17(1)	-4(1)	-2(1)	-10(1)
C(28)	26(2)	32(2)	22(2)	-7(1)	3(1)	-8(1)
C(29)	37(2)	37(2)	27(2)	-9(1)	-6(1)	-2(2)
C(30)	38(2)	35(2)	34(2)	-6(2)	-9(2)	4(2)
C(31)	33(2)	37(2)	42(2)	-15(2)	4(2)	-8(2)
C(32)	43(2)	44(2)	27(2)	-13(2)	5(1)	-21(2)
C(33)	33(2)	39(2)	23(2)	-3(1)	1(1)	-15(1)
C(34)	57(3)	37(2)	58(3)	-18(2)	-1(2)	-7(2)
C(35)	24(1)	24(1)	19(1)	-3(1)	-6(1)	-7(1)
C(36)	32(2)	26(2)	28(2)	-2(1)	-3(1)	-10(1)
C(37)	44(2)	29(2)	26(2)	2(1)	-3(1)	-12(2)
C(38)	39(2)	33(2)	27(2)	0(1)	-11(1)	-6(1)
C(39)	28(2)	35(2)	32(2)	-5(1)	-11(1)	-6(1)
C(40)	27(2)	29(2)	26(2)	-5(1)	-5(1)	-10(1)
C(41)	28(2)	24(1)	23(1)	-6(1)	2(1)	-13(1)
C(42)	33(2)	31(2)	24(2)	-4(1)	0(1)	-15(1)
C(43)	41(2)	39(2)	30(2)	-11(1)	3(1)	-24(2)
C(44)	45(2)	35(2)	36(2)	-16(2)	10(2)	-23(2)
C(45)	38(2)	26(2)	38(2)	-8(1)	9(2)	-15(1)
C(46)	31(2)	28(2)	26(2)	-4(1)	3(1)	-14(1)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

C(47)	21(1)	29(2)	20(1)	-2(1)	-4(1)	-11(1)
C(48)	28(2)	34(2)	29(2)	-8(1)	2(1)	-13(1)
C(49)	31(2)	49(2)	31(2)	-13(2)	2(1)	-14(2)
C(50)	39(2)	70(3)	20(2)	-6(2)	2(1)	-31(2)
C(51)	59(2)	48(2)	24(2)	2(2)	-2(2)	-31(2)
C(52)	42(2)	34(2)	24(2)	-2(1)	-2(1)	-22(2)
C(1)	25(1)	28(1)	21(1)	-6(1)	-2(1)	-10(1)
C(2)	28(2)	29(2)	18(1)	-2(1)	-5(1)	-9(1)
C(3)	34(2)	28(2)	31(2)	-7(1)	-9(1)	-6(1)
C(4)	38(2)	34(2)	38(2)	-13(2)	-6(2)	-3(2)
C(5)	37(2)	45(2)	28(2)	-5(2)	-2(1)	-6(2)
C(6)	36(2)	43(2)	28(2)	-4(2)	4(1)	-16(2)
C(7)	38(2)	33(2)	28(2)	-5(1)	1(1)	-16(1)
C(8)	42(2)	69(3)	44(2)	-19(2)	10(2)	-5(2)
C(9)	38(2)	24(1)	20(1)	-2(1)	-5(1)	-14(1)
C(10)	42(2)	37(2)	30(2)	-1(1)	-4(1)	-20(2)
C(11)	61(3)	54(2)	35(2)	4(2)	-12(2)	-40(2)
C(12)	87(3)	35(2)	27(2)	-2(2)	-10(2)	-35(2)
C(13)	74(3)	30(2)	28(2)	-5(1)	-3(2)	-20(2)
C(14)	45(2)	28(2)	26(2)	-2(1)	-4(1)	-13(1)
C(15)	29(2)	25(2)	32(2)	0(1)	-6(1)	-9(1)
C(16)	30(2)	52(2)	33(2)	0(2)	-7(1)	-14(2)
C(17)	29(2)	71(3)	45(2)	-8(2)	-1(2)	-14(2)
C(18)	26(2)	63(3)	63(3)	-10(2)	-11(2)	-12(2)
C(19)	42(2)	55(2)	47(2)	-8(2)	-18(2)	-18(2)
C(20)	34(2)	32(2)	37(2)	-8(1)	-11(1)	-11(1)
C(21)	32(2)	26(2)	24(2)	-2(1)	-5(1)	-14(1)
C(22)	35(2)	28(2)	31(2)	-3(1)	3(1)	-12(1)
C(23)	42(2)	33(2)	31(2)	-5(1)	5(2)	-13(2)
C(24)	46(2)	36(2)	23(2)	-4(1)	1(1)	-22(2)
C(25)	61(2)	29(2)	24(2)	-1(1)	-4(2)	-14(2)
C(26)	53(2)	27(2)	25(2)	-5(1)	-1(2)	-10(2)
C(53)	18(1)	21(1)	22(1)	-2(1)	-3(1)	-5(1)
C(54)	34(2)	25(1)	23(2)	1(1)	-4(1)	-12(1)
C(55)	37(2)	25(2)	27(2)	2(1)	-3(1)	-7(1)
C(56)	44(2)	32(2)	28(2)	4(1)	-8(2)	-8(2)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

C(57)	49(2)	40(2)	26(2)	1(1)	-3(2)	-18(2)
C(58)	50(2)	32(2)	26(2)	-2(1)	4(2)	-14(2)
C(59)	38(2)	27(2)	26(2)	2(1)	-1(1)	-10(1)
C(60)	72(3)	52(2)	28(2)	-2(2)	-5(2)	-16(2)
C(61)	25(2)	27(2)	34(2)	-2(1)	-11(1)	-9(1)
C(62)	23(2)	34(2)	47(2)	-3(2)	-8(1)	-5(1)
C(63)	32(2)	45(2)	55(3)	6(2)	-22(2)	-6(2)
C(64)	48(2)	55(2)	40(2)	2(2)	-25(2)	-17(2)
C(65)	47(2)	51(2)	34(2)	-9(2)	-13(2)	-20(2)
C(66)	30(2)	34(2)	35(2)	-7(1)	-8(1)	-12(1)
C(67)	24(2)	26(2)	38(2)	-9(1)	0(1)	-8(1)
C(68)	28(2)	37(2)	36(2)	-9(2)	2(1)	-16(1)
C(69)	27(2)	39(2)	45(2)	-6(2)	5(2)	-14(1)
C(70)	42(2)	34(2)	67(3)	-21(2)	23(2)	-13(2)
C(71)	64(3)	66(3)	115(5)	-67(3)	49(3)	-45(3)
C(72)	44(2)	63(3)	87(3)	-51(3)	33(2)	-35(2)
C(73)	19(1)	26(1)	34(2)	-7(1)	-1(1)	-9(1)
C(74)	37(2)	31(2)	38(2)	-7(1)	-5(2)	-16(1)
C(75)	44(2)	33(2)	44(2)	-1(2)	-2(2)	-21(2)
C(76)	31(2)	32(2)	55(2)	-10(2)	3(2)	-17(1)
C(77)	37(2)	37(2)	54(2)	-18(2)	-2(2)	-18(2)
C(78)	36(2)	35(2)	39(2)	-10(2)	-3(2)	-18(2)

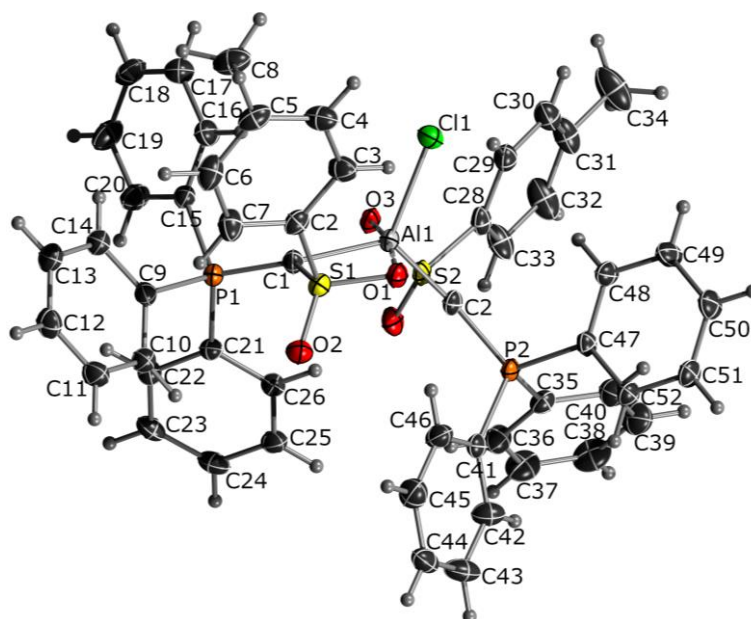
Y_2AlCl

 Abbildung 2.9. ORTEP von Y_2AlCl .

Tabelle 2.17. Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für Y_2AlCl .
 $U(\text{eq})$ ist als ein Drittel der Spur der orthogonalisierten U^i -Tensoren definiert.

	x	y	z	U(eq)
Cl(1)	3572(1)	8702(1)	3124(1)	27(1)
S(1)	3473(1)	7056(1)	4168(1)	20(1)
S(2)	2021(1)	7134(1)	2095(1)	19(1)
P(1)	637(1)	6899(1)	3879(1)	18(1)
P(2)	4485(1)	6328(1)	2230(1)	17(1)
Al(1)	3000(1)	7537(1)	3117(1)	18(1)
O(1)	4388(1)	7272(1)	3748(1)	21(1)
O(2)	3735(1)	6354(1)	4446(1)	26(1)
O(3)	1501(1)	7626(1)	2530(1)	22(1)
O(4)	1177(1)	6539(1)	1883(1)	24(1)
C(1)	2112(2)	7192(1)	3756(1)	20(1)
C(2)	3730(2)	7737(1)	4712(1)	23(1)
C(3)	4409(2)	8378(1)	4628(1)	30(1)
C(4)	4524(2)	8916(1)	5049(1)	34(1)
C(5)	3940(2)	8843(1)	5542(1)	31(1)
C(6)	3288(2)	8187(1)	5619(1)	34(1)
C(7)	3191(2)	7630(1)	5216(1)	31(1)
C(8)	4053(2)	9440(1)	5990(1)	39(1)
C(9)	514(2)	6655(1)	4612(1)	21(1)
C(10)	1048(2)	5986(1)	4820(1)	26(1)
C(11)	1049(2)	5812(1)	5389(1)	29(1)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

C(12)	515(2)	6292(1)	5751(1)	30(1)
C(13)	-28(2)	6949(1)	5545(1)	30(1)
C(14)	-34(2)	7136(1)	4977(1)	26(1)
C(15)	-522(2)	7634(1)	3715(1)	21(1)
C(16)	-84(2)	8356(1)	3803(1)	32(1)
C(17)	-954(2)	8938(1)	3758(1)	38(1)
C(18)	-2253(2)	8803(1)	3618(1)	36(1)
C(19)	-2693(2)	8090(1)	3534(1)	37(1)
C(20)	-1825(2)	7505(1)	3579(1)	31(1)
C(21)	129(2)	6071(1)	3480(1)	20(1)
C(22)	-1020(2)	5705(1)	3541(1)	24(1)
C(23)	-1374(2)	5082(1)	3217(1)	28(1)
C(24)	-567(2)	4808(1)	2841(1)	29(1)
C(25)	586(2)	5151(1)	2794(1)	28(1)
C(26)	938(2)	5782(1)	3109(1)	23(1)
C(27)	3422(2)	6937(1)	2460(1)	19(1)
C(28)	2097(2)	7726(1)	1498(1)	23(1)
C(29)	2563(2)	8444(1)	1578(1)	26(1)
C(30)	2529(2)	8913(1)	1115(1)	32(1)
C(31)	2053(2)	8678(1)	571(1)	37(1)
C(32)	1630(2)	7955(2)	500(1)	40(1)
C(33)	1637(2)	7476(1)	958(1)	33(1)
C(34)	2037(3)	9192(2)	69(1)	53(1)
C(35)	4038(2)	5971(1)	1515(1)	22(1)
C(36)	3013(2)	5474(1)	1413(1)	30(1)
C(37)	2697(2)	5179(1)	876(1)	38(1)
C(38)	3384(2)	5380(1)	435(1)	42(1)
C(39)	4404(3)	5869(1)	530(1)	40(1)
C(40)	4740(2)	6160(1)	1073(1)	30(1)
C(41)	4793(2)	5524(1)	2683(1)	21(1)
C(42)	4877(2)	4815(1)	2464(1)	31(1)
C(43)	5121(2)	4216(1)	2828(1)	37(1)
C(44)	5298(2)	4312(1)	3404(1)	33(1)
C(45)	5224(2)	5017(1)	3629(1)	36(1)
C(46)	4973(2)	5621(1)	3269(1)	29(1)
C(47)	6020(2)	6764(1)	2211(1)	20(1)
C(48)	6079(2)	7523(1)	2124(1)	24(1)
C(49)	7250(2)	7848(1)	2060(1)	30(1)
C(50)	8352(2)	7417(1)	2089(1)	31(1)
C(51)	8294(2)	6665(1)	2186(1)	27(1)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

C(52)	7132(2)	6335(1)	2242(1)	23(1)
-------	---------	---------	---------	-------

Tabelle 2.18. Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für **Y₂AlCl**. Der Exponent des Anisotropen Fehlordnungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$.

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
Cl(1)	32(1)	20(1)	29(1)	2(1)	6(1)	-2(1)
S(1)	18(1)	21(1)	22(1)	0(1)	4(1)	1(1)
S(2)	11(1)	23(1)	22(1)	2(1)	4(1)	0(1)
P(1)	16(1)	18(1)	20(1)	1(1)	5(1)	0(1)
P(2)	12(1)	19(1)	22(1)	-1(1)	4(1)	0(1)
Al(1)	15(1)	19(1)	22(1)	1(1)	6(1)	1(1)
O(1)	17(1)	24(1)	24(1)	-1(1)	5(1)	1(1)
O(2)	28(1)	23(1)	28(1)	4(1)	5(1)	4(1)
O(3)	15(1)	26(1)	24(1)	3(1)	6(1)	4(1)
O(4)	16(1)	29(1)	29(1)	1(1)	3(1)	-4(1)
C(1)	18(1)	22(1)	21(1)	1(1)	5(1)	0(1)
C(2)	20(1)	27(1)	23(1)	-2(1)	1(1)	4(1)
C(3)	38(1)	25(1)	25(1)	3(1)	4(1)	1(1)
C(4)	48(1)	23(1)	30(1)	1(1)	1(1)	1(1)
C(5)	32(1)	31(1)	28(1)	-4(1)	-3(1)	10(1)
C(6)	27(1)	48(1)	27(1)	-8(1)	6(1)	-2(1)
C(7)	26(1)	38(1)	30(1)	-5(1)	6(1)	-8(1)
C(8)	52(1)	32(1)	32(1)	-7(1)	0(1)	9(1)
C(9)	20(1)	21(1)	21(1)	1(1)	5(1)	-2(1)
C(10)	30(1)	22(1)	25(1)	0(1)	8(1)	1(1)
C(11)	36(1)	25(1)	27(1)	5(1)	6(1)	2(1)
C(12)	35(1)	34(1)	22(1)	3(1)	7(1)	-1(1)
C(13)	34(1)	31(1)	27(1)	-2(1)	11(1)	1(1)
C(14)	28(1)	24(1)	26(1)	0(1)	9(1)	2(1)
C(15)	22(1)	22(1)	21(1)	2(1)	7(1)	4(1)
C(16)	25(1)	25(1)	47(1)	4(1)	11(1)	0(1)
C(17)	42(1)	23(1)	53(1)	4(1)	16(1)	4(1)
C(18)	38(1)	33(1)	39(1)	3(1)	9(1)	17(1)
C(19)	24(1)	41(1)	45(1)	-6(1)	2(1)	9(1)
C(20)	23(1)	29(1)	42(1)	-6(1)	2(1)	3(1)
C(21)	21(1)	17(1)	22(1)	1(1)	2(1)	1(1)
C(22)	23(1)	24(1)	26(1)	1(1)	6(1)	-1(1)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

C(23)	28(1)	22(1)	34(1)	4(1)	0(1)	-7(1)
C(24)	42(1)	18(1)	26(1)	-1(1)	0(1)	-4(1)
C(25)	41(1)	20(1)	27(1)	-2(1)	12(1)	2(1)
C(26)	25(1)	19(1)	27(1)	1(1)	7(1)	0(1)
C(27)	13(1)	23(1)	22(1)	0(1)	3(1)	1(1)
C(28)	14(1)	31(1)	24(1)	5(1)	4(1)	1(1)
C(29)	22(1)	29(1)	27(1)	3(1)	6(1)	1(1)
C(30)	27(1)	34(1)	34(1)	7(1)	4(1)	-3(1)
C(31)	26(1)	50(1)	34(1)	14(1)	0(1)	-8(1)
C(32)	35(1)	57(2)	26(1)	8(1)	-7(1)	-18(1)
C(33)	26(1)	43(1)	30(1)	4(1)	-1(1)	-15(1)
C(34)	50(2)	66(2)	39(1)	23(1)	-9(1)	-20(1)
C(35)	20(1)	24(1)	24(1)	-2(1)	2(1)	3(1)
C(36)	23(1)	32(1)	34(1)	-6(1)	3(1)	-2(1)
C(37)	33(1)	39(1)	40(1)	-12(1)	-3(1)	-3(1)
C(38)	50(1)	45(1)	28(1)	-12(1)	-5(1)	3(1)
C(39)	56(1)	39(1)	28(1)	-1(1)	11(1)	2(1)
C(40)	35(1)	29(1)	26(1)	-1(1)	6(1)	-1(1)
C(41)	14(1)	21(1)	29(1)	0(1)	5(1)	0(1)
C(42)	34(1)	22(1)	36(1)	-4(1)	-2(1)	0(1)
C(43)	36(1)	19(1)	54(1)	0(1)	-5(1)	-2(1)
C(44)	24(1)	24(1)	51(1)	10(1)	7(1)	-1(1)
C(45)	39(1)	37(1)	32(1)	8(1)	9(1)	7(1)
C(46)	34(1)	24(1)	29(1)	0(1)	8(1)	8(1)
C(47)	14(1)	23(1)	23(1)	1(1)	3(1)	-2(1)
C(48)	15(1)	22(1)	36(1)	0(1)	4(1)	1(1)
C(49)	19(1)	22(1)	49(1)	5(1)	5(1)	-2(1)
C(50)	16(1)	32(1)	45(1)	6(1)	6(1)	-2(1)
C(51)	14(1)	31(1)	36(1)	4(1)	5(1)	4(1)
C(52)	17(1)	23(1)	29(1)	3(1)	4(1)	2(1)

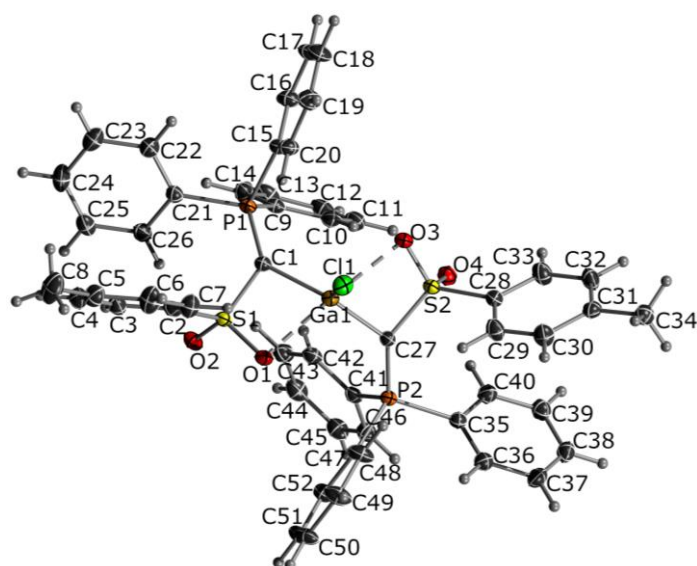
Y_2GaCl

Abbildung 2.10. ORTEP von Y_2GaCl .

Tabelle 2.19. Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für Y_2GaCl .
 $U(\text{eq})$ ist als ein Drittel der Spur der orthogonalisierten U^i -Tensoren definiert

	x	y	z	U(eq)
Ga(1)	3011(1)	3607(1)	6922(1)	16(1)
Cl(53)	3870(1)	3815(1)	7705(1)	22(1)
S(1)	3419(1)	2344(1)	5967(1)	16(1)
S(2)	1888(1)	4766(1)	7277(1)	17(1)
P(1)	3158(1)	4997(1)	5513(1)	16(1)
P(2)	1526(1)	2135(1)	6985(1)	15(1)
O(1)	3286(1)	1814(1)	6578(1)	20(1)
O(2)	3067(1)	1730(1)	5405(1)	22(1)
O(3)	2511(1)	5462(1)	7183(1)	20(1)
O(4)	1257(1)	5232(1)	6918(1)	22(1)
C(1)	3248(1)	3846(2)	6070(1)	17(1)
C(2)	4302(1)	2053(2)	5968(1)	20(1)
C(3)	4534(1)	1705(2)	5415(1)	24(1)
C(4)	5223(1)	1457(2)	5430(1)	28(1)
C(5)	5683(1)	1535(2)	5991(1)	29(1)
C(6)	5438(1)	1877(2)	6540(1)	32(1)
C(7)	4753(1)	2145(2)	6533(1)	27(1)
C(8)	6433(1)	1268(3)	6011(1)	43(1)
C(9)	2279(1)	5364(2)	5167(1)	19(1)
C(10)	1814(1)	5554(2)	5580(1)	22(1)
C(11)	1133(1)	5798(2)	5353(1)	26(1)
C(12)	907(1)	5870(2)	4708(1)	29(1)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

C(13)	1368(1)	5712(2)	4295(1)	30(1)
C(14)	2055(1)	5463(2)	4518(1)	25(1)
C(15)	3494(1)	6432(2)	5878(1)	18(1)
C(16)	3277(1)	7579(2)	5604(1)	24(1)
C(17)	3559(1)	8676(2)	5869(1)	30(1)
C(18)	4059(1)	8641(2)	6401(1)	31(1)
C(19)	4274(1)	7510(2)	6671(1)	29(1)
C(20)	3990(1)	6398(2)	6413(1)	23(1)
C(21)	3588(1)	4672(2)	4849(1)	19(1)
C(22)	4130(1)	5405(2)	4729(1)	24(1)
C(23)	4458(1)	5131(2)	4220(1)	30(1)
C(24)	4250(1)	4118(2)	3835(1)	30(1)
C(25)	3711(1)	3384(2)	3953(1)	26(1)
C(26)	3373(1)	3665(2)	4452(1)	23(1)
C(27)	2109(1)	3301(2)	7142(1)	17(1)
C(28)	1806(1)	4968(2)	8085(1)	18(1)
C(29)	2173(1)	4222(2)	8544(1)	24(1)
C(30)	2139(1)	4448(2)	9176(1)	26(1)
C(31)	1747(1)	5409(2)	9357(1)	21(1)
C(32)	1373(1)	6125(2)	8884(1)	29(1)
C(33)	1395(1)	5908(2)	8250(1)	29(1)
C(34)	1730(1)	5659(2)	10047(1)	25(1)
C(35)	842(1)	2268(2)	7450(1)	18(1)
C(36)	848(1)	1548(2)	7991(1)	22(1)
C(37)	325(1)	1670(2)	8348(1)	26(1)
C(38)	-196(1)	2519(2)	8175(1)	25(1)
C(39)	-195(1)	3261(2)	7645(1)	25(1)
C(40)	316(1)	3132(2)	7280(1)	23(1)
C(41)	1094(1)	2039(2)	6174(1)	18(1)
C(42)	1413(1)	2543(2)	5698(1)	21(1)
C(43)	1102(1)	2461(2)	5071(1)	26(1)
C(44)	474(1)	1878(2)	4919(1)	27(1)
C(45)	155(1)	1371(2)	5392(1)	26(1)
C(46)	461(1)	1450(2)	6021(1)	23(1)
C(47)	1947(1)	656(2)	7161(1)	18(1)
C(48)	2473(1)	573(2)	7675(1)	26(1)
C(49)	2793(1)	-560(2)	7832(1)	31(1)
C(50)	2596(1)	-1614(2)	7472(1)	27(1)
C(51)	2077(1)	-1533(2)	6960(1)	26(1)
C(52)	1752(1)	-402(2)	6802(1)	22(1)

Tabelle 2.20. Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für **Y₂GaCl**. Der Exponent des Anisotropen Fehlordnungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$.

	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ²³	U ¹³	U ¹²
Ga(1)	18(1)	14(1)	18(1)	1(1)	4(1)	-1(1)
Cl(53)	23(1)	25(1)	19(1)	1(1)	1(1)	-2(1)
S(1)	18(1)	11(1)	20(1)	0(1)	3(1)	0(1)
S(2)	21(1)	11(1)	18(1)	0(1)	5(1)	1(1)
P(1)	19(1)	11(1)	17(1)	0(1)	4(1)	0(1)
P(2)	17(1)	12(1)	18(1)	0(1)	3(1)	0(1)
O(1)	22(1)	13(1)	24(1)	3(1)	7(1)	1(1)
O(2)	24(1)	18(1)	24(1)	-4(1)	2(1)	-2(1)
O(3)	25(1)	13(1)	24(1)	0(1)	9(1)	-2(1)
O(4)	25(1)	21(1)	22(1)	2(1)	5(1)	6(1)
C(1)	21(1)	13(1)	18(1)	1(1)	5(1)	1(1)
C(2)	21(1)	13(1)	25(1)	3(1)	5(1)	3(1)
C(3)	26(1)	22(1)	24(1)	-2(1)	6(1)	3(1)
C(4)	30(1)	26(1)	31(1)	0(1)	13(1)	5(1)
C(5)	24(1)	30(1)	34(1)	8(1)	9(1)	7(1)
C(6)	24(1)	44(1)	28(1)	5(1)	3(1)	8(1)
C(7)	24(1)	33(1)	25(1)	1(1)	5(1)	3(1)
C(8)	29(1)	60(2)	42(1)	13(1)	12(1)	15(1)
C(9)	22(1)	12(1)	23(1)	0(1)	3(1)	0(1)
C(10)	24(1)	18(1)	24(1)	3(1)	4(1)	1(1)
C(11)	25(1)	20(1)	34(1)	2(1)	8(1)	4(1)
C(12)	24(1)	20(1)	40(1)	-4(1)	-3(1)	5(1)
C(13)	35(1)	26(1)	26(1)	-3(1)	-5(1)	7(1)
C(14)	29(1)	22(1)	23(1)	-1(1)	3(1)	5(1)
C(15)	22(1)	13(1)	21(1)	0(1)	7(1)	-1(1)
C(16)	26(1)	16(1)	31(1)	1(1)	3(1)	1(1)
C(17)	34(1)	14(1)	42(1)	0(1)	6(1)	0(1)
C(18)	37(1)	18(1)	37(1)	-7(1)	6(1)	-7(1)
C(19)	34(1)	25(1)	26(1)	-3(1)	1(1)	-6(1)
C(20)	27(1)	17(1)	24(1)	1(1)	4(1)	-3(1)
C(21)	23(1)	17(1)	18(1)	2(1)	5(1)	4(1)
C(22)	25(1)	23(1)	23(1)	0(1)	5(1)	0(1)
C(23)	25(1)	37(1)	28(1)	4(1)	9(1)	-2(1)
C(24)	28(1)	41(1)	22(1)	0(1)	8(1)	10(1)
C(25)	33(1)	25(1)	21(1)	-2(1)	3(1)	8(1)
C(26)	28(1)	18(1)	22(1)	0(1)	4(1)	2(1)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

C(27)	17(1)	13(1)	22(1)	-1(1)	6(1)	0(1)
C(28)	20(1)	16(1)	19(1)	-1(1)	5(1)	-1(1)
C(29)	26(1)	24(1)	24(1)	0(1)	3(1)	8(1)
C(30)	26(1)	29(1)	22(1)	1(1)	1(1)	6(1)
C(31)	21(1)	21(1)	21(1)	-2(1)	5(1)	-5(1)
C(32)	37(1)	24(1)	28(1)	-1(1)	12(1)	10(1)
C(33)	38(1)	26(1)	24(1)	4(1)	6(1)	13(1)
C(34)	26(1)	27(1)	23(1)	-4(1)	4(1)	-2(1)
C(35)	19(1)	17(1)	21(1)	-2(1)	5(1)	-2(1)
C(36)	23(1)	21(1)	24(1)	2(1)	6(1)	0(1)
C(37)	28(1)	28(1)	25(1)	4(1)	9(1)	-2(1)
C(38)	22(1)	29(1)	26(1)	-4(1)	9(1)	-3(1)
C(39)	21(1)	24(1)	29(1)	-2(1)	5(1)	2(1)
C(40)	23(1)	22(1)	24(1)	2(1)	5(1)	1(1)
C(41)	21(1)	13(1)	20(1)	0(1)	3(1)	3(1)
C(42)	25(1)	15(1)	24(1)	1(1)	3(1)	1(1)
C(43)	34(1)	20(1)	22(1)	2(1)	4(1)	2(1)
C(44)	33(1)	25(1)	21(1)	-2(1)	-3(1)	5(1)
C(45)	22(1)	26(1)	29(1)	-6(1)	-2(1)	1(1)
C(46)	22(1)	22(1)	25(1)	-1(1)	3(1)	0(1)
C(47)	19(1)	13(1)	22(1)	2(1)	6(1)	-1(1)
C(48)	30(1)	15(1)	30(1)	-2(1)	-4(1)	-1(1)
C(49)	32(1)	19(1)	36(1)	0(1)	-9(1)	2(1)
C(50)	28(1)	13(1)	40(1)	1(1)	1(1)	4(1)
C(51)	30(1)	14(1)	32(1)	-4(1)	3(1)	0(1)
C(52)	23(1)	17(1)	24(1)	-3(1)	2(1)	-1(1)

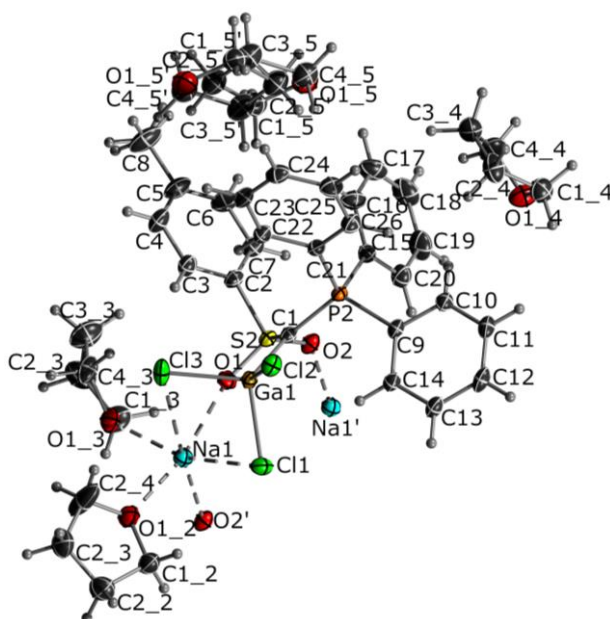
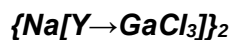

 Abbildung 2.11. ORTEP von $\{\text{Na}[\text{Y} \rightarrow \text{GaCl}_3]\}_2$.

 Tabelle 2.21. Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für $\{\text{Na}[\text{Y} \rightarrow \text{GaCl}_3]\}_2$. U(eq) ist als ein Drittel der Spur der orthogonalisierten U^{ij} -Tensoren definiert.

	x	y	z	U(eq)
Ga(1)	3824(1)	5427(1)	7758(1)	18(1)
Cl(1)	2391(1)	5691(1)	8836(1)	28(1)
Cl(2)	3801(1)	3536(1)	7630(1)	29(1)
Cl(3)	2999(1)	6228(1)	6728(1)	24(1)
S(1)	6187(1)	5354(1)	8533(1)	18(1)
P(1)	6043(1)	7193(1)	7217(1)	16(1)
Na(07)	3601(1)	3651(1)	9620(1)	24(1)
O(1)	5348(1)	4500(1)	8969(1)	24(1)
O(2)	6711(1)	6115(1)	9028(1)	24(1)
C(1)	5432(2)	6052(2)	7830(1)	18(1)
C(2)	7501(2)	4523(2)	8063(1)	21(1)
C(3)	7291(2)	3621(2)	7605(1)	27(1)
C(4)	8292(2)	2933(2)	7265(1)	34(1)
C(5)	9513(2)	3136(2)	7374(1)	36(1)
C(6)	9704(2)	4059(2)	7812(1)	34(1)
C(7)	8706(2)	4752(2)	8163(1)	27(1)
C(8)	10597(3)	2363(3)	7009(2)	54(1)
C(9)	5113(2)	8542(2)	7326(1)	19(1)
C(10)	5617(2)	9593(2)	6991(1)	22(1)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

C(11)	4881(2)	10615(2)	7025(1)	25(1)
C(12)	3647(2)	10601(2)	7401(1)	26(1)
C(13)	3157(2)	9571(2)	7759(1)	25(1)
C(14)	3885(2)	8542(2)	7727(1)	21(1)
C(15)	7591(2)	7550(2)	7364(1)	22(1)
C(16)	8634(2)	7206(2)	6831(1)	31(1)
C(17)	9824(2)	7441(2)	6967(2)	42(1)
C(18)	9977(2)	8018(2)	7624(2)	46(1)
C(19)	8938(2)	8384(2)	8155(2)	43(1)
C(20)	7748(2)	8152(2)	8026(1)	31(1)
C(21)	6181(2)	6875(2)	6170(1)	20(1)
C(22)	6320(2)	5713(2)	5982(1)	25(1)
C(23)	6472(2)	5432(2)	5186(1)	30(1)
C(24)	6493(2)	6294(2)	4575(1)	29(1)
C(25)	6369(2)	7448(2)	4755(1)	29(1)
C(26)	6212(2)	7744(2)	5548(1)	25(1)
O12	1748(1)	2703(1)	9733(1)	34(1)
C12	548(2)	3268(2)	9971(2)	38(1)
C22	-417(2)	2391(2)	9908(2)	44(1)
C32	275(3)	1543(2)	9338(2)	51(1)
C42	1586(3)	1851(3)	9222(3)	78(1)
O13	4782(1)	1882(1)	9666(1)	30(1)
C13	5595(2)	1792(2)	10262(1)	43(1)
C23	6646(3)	920(3)	9983(2)	50(1)
C33	6816(3)	1186(3)	9091(2)	54(1)
C43	5468(2)	1431(2)	8938(1)	36(1)
O14	7589(2)	11279(2)	5757(1)	40(1)
C14	7003(2)	11878(2)	5135(2)	37(1)
C24	6925(2)	10961(2)	4556(2)	41(1)
C34	8170(2)	10274(2)	4566(2)	41(1)
C44	8558(2)	10553(2)	5360(2)	43(1)
O15	10629(3)	6145(3)	5410(2)	41(1)
C15	10280(10)	5026(9)	5768(7)	40(2)
C25	10083(6)	4300(6)	5082(4)	46(1)
C35	10015(11)	5200(10)	4369(7)	46(2)
C45	9982(5)	6373(5)	4739(3)	40(1)

Tabelle 2.22. Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für $\{\text{Na}[\text{Y} \rightarrow \text{GaCl}_3]\}_2$. Der Exponent des Anisotropen Fehlordnungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$.

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
Ga(1)	17(1)	16(1)	20(1)	-2(1)	-3(1)	1(1)
Cl(1)	22(1)	33(1)	26(1)	-1(1)	3(1)	1(1)
Cl(2)	34(1)	16(1)	42(1)	-4(1)	-14(1)	0(1)
Cl(3)	24(1)	24(1)	24(1)	-2(1)	-9(1)	3(1)
S(1)	18(1)	18(1)	17(1)	-2(1)	-3(1)	2(1)
P(1)	16(1)	15(1)	17(1)	-3(1)	-2(1)	2(1)
Na(07)	27(1)	23(1)	22(1)	-1(1)	-2(1)	-3(1)
O(1)	23(1)	23(1)	23(1)	3(1)	-2(1)	0(1)
O(2)	26(1)	25(1)	21(1)	-6(1)	-7(1)	1(1)
C(1)	18(1)	18(1)	19(1)	-1(1)	-4(1)	3(1)
C(2)	22(1)	21(1)	21(1)	-1(1)	-4(1)	5(1)
C(3)	25(1)	24(1)	31(1)	-6(1)	-5(1)	3(1)
C(4)	32(1)	30(1)	39(1)	-13(1)	-7(1)	9(1)
C(5)	29(1)	41(1)	37(1)	-9(1)	-5(1)	15(1)
C(6)	22(1)	44(1)	37(1)	-6(1)	-8(1)	8(1)
C(7)	24(1)	30(1)	28(1)	-4(1)	-8(1)	4(1)
C(8)	37(1)	65(2)	58(2)	-22(1)	-7(1)	25(1)
C(9)	22(1)	16(1)	19(1)	-4(1)	-5(1)	3(1)
C(10)	25(1)	20(1)	22(1)	-3(1)	-3(1)	1(1)
C(11)	35(1)	17(1)	25(1)	-3(1)	-8(1)	1(1)
C(12)	31(1)	19(1)	32(1)	-9(1)	-13(1)	8(1)
C(13)	22(1)	23(1)	32(1)	-11(1)	-7(1)	5(1)
C(14)	22(1)	18(1)	23(1)	-6(1)	-4(1)	1(1)
C(15)	19(1)	20(1)	27(1)	2(1)	-4(1)	1(1)
C(16)	21(1)	37(1)	32(1)	0(1)	-2(1)	4(1)
C(17)	20(1)	51(1)	52(1)	3(1)	-1(1)	2(1)
C(18)	25(1)	49(1)	68(2)	2(1)	-16(1)	-8(1)
C(19)	36(1)	40(1)	58(2)	-9(1)	-19(1)	-9(1)
C(20)	27(1)	29(1)	38(1)	-8(1)	-8(1)	-2(1)
C(21)	18(1)	22(1)	20(1)	-5(1)	-1(1)	1(1)
C(22)	29(1)	21(1)	24(1)	-4(1)	0(1)	2(1)
C(23)	34(1)	27(1)	27(1)	-12(1)	0(1)	-1(1)
C(24)	28(1)	38(1)	21(1)	-9(1)	-2(1)	-1(1)
C(25)	32(1)	34(1)	21(1)	1(1)	-4(1)	0(1)
C(26)	28(1)	22(1)	23(1)	-2(1)	-3(1)	2(1)
O12	29(1)	34(1)	41(1)	-14(1)	-1(1)	-4(1)
C12	32(1)	36(1)	47(1)	-16(1)	2(1)	-2(1)
C22	32(1)	49(1)	53(2)	-12(1)	-4(1)	-8(1)
C32	52(2)	40(1)	63(2)	-18(1)	-4(1)	-14(1)
C42	36(2)	79(2)	128(3)	-78(2)	-11(2)	4(1)
O13	36(1)	25(1)	29(1)	-1(1)	-10(1)	1(1)
C13	46(1)	56(2)	29(1)	-8(1)	-15(1)	4(1)
C23	37(1)	58(2)	57(2)	9(1)	-16(1)	-6(1)

C33	49(2)	64(2)	47(2)	-9(1)	-12(1)	18(1)
C43	52(1)	30(1)	30(1)	-6(1)	-13(1)	5(1)
O14	36(1)	50(1)	35(1)	-5(1)	-5(1)	7(1)
C14	36(1)	34(1)	42(1)	1(1)	-7(1)	1(1)
C24	47(1)	34(1)	44(1)	2(1)	-16(1)	-6(1)
C34	45(1)	36(1)	42(1)	-5(1)	-1(1)	-6(1)
C44	35(1)	46(1)	48(1)	-6(1)	-7(1)	7(1)
O15	41(2)	45(2)	36(2)	-4(1)	-6(1)	-5(2)
C15	39(5)	39(4)	39(4)	0(3)	0(3)	3(3)
C25	53(3)	43(3)	42(3)	-13(3)	-3(2)	-2(3)
C35	48(6)	46(5)	44(5)	-10(3)	-7(3)	7(4)
C45	41(3)	42(3)	38(3)	-5(2)	-5(2)	2(2)

(YGaCl₂)₂

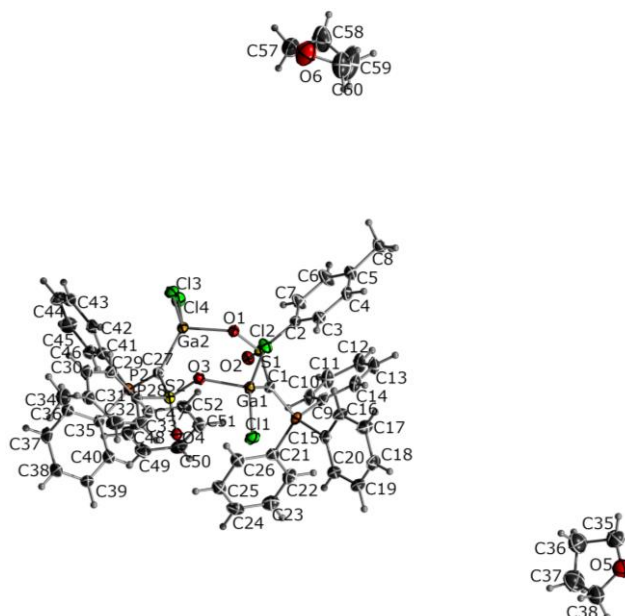


Abbildung 2.12. ORTEP von (YGaCl₂)₂

Tabelle 2.23. Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für (YGaCl₂)₂. U(eq) ist als ein Drittel der Spur der orthogonalisierten Uⁱ-Tensoren definiert.

	x	y	z	U(eq)
Ga(1)	1597(1)	8351(1)	8912(1)	17(1)
Cl(1)	1561(1)	9473(1)	8638(1)	29(1)
O(1)	1935(2)	6819(2)	8990(1)	19(1)
S(1)	1204(1)	6819(1)	8493(1)	17(1)
P(1)	241(1)	7888(1)	7756(1)	19(1)
C(1)	972(3)	7684(2)	8358(2)	19(1)
S(2)	3646(1)	8164(1)	8472(1)	17(1)
Ga(2)	3247(1)	6634(1)	8896(1)	17(1)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

P(2)	4571(1)	7077(1)	7723(1)	18(1)
Cl(2)	1268(1)	8270(1)	9896(1)	25(1)
O(2)	1437(2)	6400(2)	7954(1)	21(1)
C(2)	267(3)	6369(2)	8858(2)	20(1)
O(3)	2912(2)	8172(2)	8966(1)	19(1)
Cl(3)	3633(1)	6725(1)	9869(1)	25(1)
C(3)	-291(3)	6725(2)	9279(2)	21(1)
C(4)	-1017(3)	6354(2)	9562(2)	23(1)
O(4)	3426(2)	8587(2)	7932(1)	21(1)
Cl(4)	3273(1)	5511(1)	8618(1)	28(1)
C(5)	-1156(3)	5631(2)	9445(2)	25(1)
O(5)	-8589(3)	8186(3)	4369(2)	53(1)
C(6)	-586(3)	5288(2)	9014(3)	35(1)
O(6)	617(4)	6277(3)	15492(3)	73(1)
C(7)	124(3)	5652(2)	8722(2)	31(1)
C(8)	-1895(3)	5211(3)	9774(2)	31(1)
C(60)	-624(6)	5847(5)	14887(5)	92(3)
C(59)	-325(5)	6417(5)	15331(4)	71(2)
C(58)	87(5)	5262(5)	14972(4)	70(2)
C(57)	938(5)	5705(4)	15138(5)	69(2)
C(56)	-7932(4)	8450(4)	3923(3)	59(2)
C(55)	-7426(5)	7783(5)	3680(4)	72(2)
C(54)	-7496(5)	7269(5)	4184(4)	63(2)
C(53)	-8454(4)	7415(4)	4433(3)	51(2)
C(9)	-519(3)	7141(2)	7588(2)	23(1)
C(11)	-759(3)	5990(3)	7102(2)	30(1)
C(10)	-233(3)	6609(3)	7179(2)	26(1)
C(13)	-1863(3)	6439(3)	7840(2)	30(1)
C(12)	-1570(3)	5906(3)	7438(3)	33(1)
C(15)	-459(3)	8654(2)	7964(2)	21(1)
C(14)	-1344(3)	7057(2)	7920(2)	26(1)
C(16)	-795(3)	8698(2)	8576(2)	25(1)
C(18)	-1628(3)	9770(3)	8309(2)	32(1)
C(17)	-1387(4)	9250(3)	8745(2)	32(1)
C(19)	-1287(3)	9735(3)	7711(2)	31(1)
C(20)	-705(3)	9179(2)	7540(2)	24(1)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

C(21)	793(3)	8097(2)	7026(2)	22(1)
C(22)	302(3)	8077(3)	6466(2)	29(1)
C(23)	748(3)	8221(3)	5914(2)	32(1)
C(24)	1687(4)	8384(3)	5908(2)	32(1)
C(25)	2165(3)	8410(2)	6454(2)	28(1)
C(26)	1726(3)	8270(2)	7023(2)	25(1)
C(27)	3864(3)	7301(2)	8335(2)	19(1)
C(28)	4563(3)	8615(2)	8854(2)	21(1)
C(29)	5244(3)	8246(2)	9170(2)	25(1)
C(30)	5927(3)	8622(3)	9481(2)	26(1)
C(31)	5917(3)	9369(2)	9499(2)	26(1)
C(32)	5213(4)	9729(3)	9191(3)	37(1)
C(33)	4540(3)	9357(2)	8866(2)	33(1)
C(34)	6630(4)	9774(3)	9863(2)	35(1)
C(35)	5368(3)	7790(2)	7533(2)	22(1)
C(36)	6220(3)	7830(2)	7829(2)	28(1)
C(37)	6800(3)	8411(3)	7709(3)	39(1)
C(38)	6543(3)	8938(3)	7295(3)	39(1)
C(39)	5698(3)	8903(3)	6999(3)	32(1)
C(40)	5111(3)	8329(3)	7115(2)	27(1)
C(41)	5245(3)	6295(2)	7936(2)	21(1)
C(42)	5563(3)	6241(2)	8549(2)	23(1)
C(43)	6121(3)	5673(2)	8720(2)	26(1)
C(44)	6364(3)	5154(2)	8289(2)	30(1)
C(45)	6038(4)	5203(3)	7685(2)	33(1)
C(46)	5483(3)	5772(2)	7506(2)	27(1)
C(47)	3984(3)	6878(2)	6996(2)	22(1)
C(48)	4469(3)	6869(3)	6437(2)	28(1)
C(49)	4014(3)	6733(3)	5886(2)	32(1)
C(50)	3064(3)	6605(2)	5890(2)	28(1)
C(51)	2590(3)	6607(2)	6444(2)	27(1)
C(52)	3044(3)	6740(2)	7009(2)	24(1)

Tabelle 2.24. Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für **(YGaCl₂)₂**. Der Exponent des Anisotropen Fehlordnungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$.

U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
----------	----------	----------	----------	----------	----------

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

Ga(1)	17(1)	16(1)	19(1)	-1(1)	-1(1)	0(1)
Cl(1)	30(1)	18(1)	39(1)	4(1)	-5(1)	2(1)
O(1)	15(1)	20(1)	22(1)	1(1)	-1(1)	1(1)
S(1)	15(1)	17(1)	19(1)	0(1)	1(1)	-1(1)
P(1)	18(1)	19(1)	19(1)	-1(1)	-2(1)	1(1)
C(1)	17(2)	19(2)	20(2)	1(2)	-2(2)	3(1)
S(2)	15(1)	18(1)	18(1)	1(1)	0(1)	0(1)
Ga(2)	16(1)	17(1)	18(1)	1(1)	1(1)	0(1)
P(2)	17(1)	20(1)	18(1)	0(1)	2(1)	1(1)
Cl(2)	25(1)	29(1)	20(1)	-4(1)	4(1)	-3(1)
O(2)	20(1)	21(1)	23(1)	-2(1)	3(1)	-2(1)
C(2)	18(2)	21(2)	20(2)	0(2)	0(2)	1(2)
O(3)	18(1)	22(1)	19(1)	0(1)	2(1)	1(1)
Cl(3)	26(1)	30(1)	19(1)	4(1)	-5(1)	-3(1)
C(3)	24(2)	18(2)	22(2)	-3(2)	-1(2)	1(2)
C(4)	19(2)	27(2)	24(2)	-2(2)	3(2)	2(2)
O(4)	22(1)	21(1)	21(1)	2(1)	-2(1)	-1(1)
Cl(4)	26(1)	18(1)	40(1)	-4(1)	3(1)	1(1)
C(5)	21(2)	27(2)	25(2)	-1(2)	2(2)	-4(2)
O(5)	51(2)	60(3)	48(2)	4(2)	-1(2)	-3(2)
C(6)	37(2)	19(2)	48(3)	-5(2)	18(2)	-7(2)
O(6)	64(3)	79(3)	75(3)	-8(3)	-18(3)	-5(3)
C(7)	31(2)	26(2)	34(3)	-5(2)	13(2)	-2(2)
C(8)	27(2)	28(2)	37(3)	4(2)	9(2)	-4(2)
C(60)	54(4)	103(7)	119(8)	-58(6)	-21(5)	18(4)
C(59)	49(4)	82(5)	81(5)	-12(4)	3(4)	6(4)
C(58)	53(4)	59(5)	98(7)	-16(4)	-2(4)	-8(3)
C(57)	46(4)	58(4)	103(6)	22(4)	3(4)	6(3)
C(56)	42(3)	74(4)	61(4)	15(4)	-5(3)	-11(3)
C(55)	69(5)	96(6)	50(4)	0(4)	12(4)	5(4)
C(54)	57(4)	74(5)	59(4)	3(4)	12(3)	7(3)
C(53)	48(3)	62(4)	42(3)	4(3)	-10(3)	-7(3)
C(9)	19(2)	25(2)	25(2)	-1(2)	-8(2)	1(2)
C(11)	24(2)	30(2)	37(3)	-11(2)	-1(2)	-1(2)
C(10)	17(2)	30(2)	31(2)	-5(2)	-4(2)	-2(2)
C(13)	19(2)	33(2)	39(3)	-2(2)	-1(2)	-5(2)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

C(12)	23(2)	28(2)	47(3)	-9(2)	-6(2)	-8(2)
C(15)	19(2)	21(2)	22(2)	-2(2)	-1(2)	-1(2)
C(14)	20(2)	29(2)	28(2)	-8(2)	-2(2)	3(2)
C(16)	30(2)	23(2)	22(2)	1(2)	-2(2)	6(2)
C(18)	31(2)	26(2)	37(3)	0(2)	3(2)	12(2)
C(17)	41(3)	31(2)	24(2)	0(2)	5(2)	13(2)
C(19)	31(2)	26(2)	35(2)	9(2)	0(2)	5(2)
C(20)	24(2)	24(2)	25(2)	3(2)	-1(2)	1(2)
C(21)	24(2)	22(2)	19(2)	-1(2)	-1(2)	1(2)
C(22)	28(2)	34(2)	24(2)	-4(2)	-6(2)	0(2)
C(23)	41(3)	36(2)	19(2)	-4(2)	-5(2)	-1(2)
C(24)	45(3)	25(2)	26(2)	4(2)	9(2)	1(2)
C(25)	29(2)	26(2)	28(2)	0(2)	5(2)	-2(2)
C(26)	26(2)	26(2)	23(2)	-3(2)	1(2)	-2(2)
C(27)	18(2)	19(2)	21(2)	0(2)	1(2)	1(2)
C(28)	19(2)	25(2)	19(2)	1(2)	-2(2)	-4(2)
C(29)	21(2)	21(2)	32(2)	2(2)	-2(2)	3(2)
C(30)	18(2)	32(2)	27(2)	-1(2)	-3(2)	-1(2)
C(31)	27(2)	29(2)	22(2)	1(2)	-2(2)	-7(2)
C(32)	45(3)	24(2)	42(3)	4(2)	-16(2)	-10(2)
C(33)	40(3)	25(2)	36(3)	3(2)	-19(2)	-3(2)
C(34)	34(2)	36(3)	35(3)	-2(2)	-10(2)	-10(2)
C(35)	18(2)	23(2)	24(2)	1(2)	3(2)	-1(2)
C(36)	22(2)	26(2)	35(2)	10(2)	3(2)	1(2)
C(37)	18(2)	37(3)	60(3)	13(3)	-8(2)	-6(2)
C(38)	23(2)	37(3)	57(3)	19(3)	-4(2)	-9(2)
C(39)	24(2)	31(2)	42(3)	17(2)	1(2)	1(2)
C(40)	21(2)	32(2)	28(2)	7(2)	1(2)	-2(2)
C(41)	18(2)	22(2)	24(2)	3(2)	2(2)	0(2)
C(42)	22(2)	22(2)	24(2)	-3(2)	3(2)	2(2)
C(43)	27(2)	26(2)	26(2)	4(2)	-1(2)	3(2)
C(44)	32(2)	21(2)	38(3)	1(2)	0(2)	7(2)
C(45)	41(3)	27(2)	30(2)	-6(2)	2(2)	7(2)
C(46)	32(2)	23(2)	27(2)	-1(2)	2(2)	4(2)
C(47)	23(2)	23(2)	21(2)	2(2)	2(2)	2(2)
C(48)	25(2)	35(2)	24(2)	1(2)	4(2)	-2(2)

C(49)	36(2)	39(3)	20(2)	2(2)	4(2)	-1(2)
C(50)	37(2)	24(2)	24(2)	-2(2)	-8(2)	1(2)
C(51)	25(2)	28(2)	29(2)	-1(2)	-4(2)	-3(2)
C(52)	26(2)	25(2)	23(2)	0(2)	4(2)	-2(2)

Y₃Al

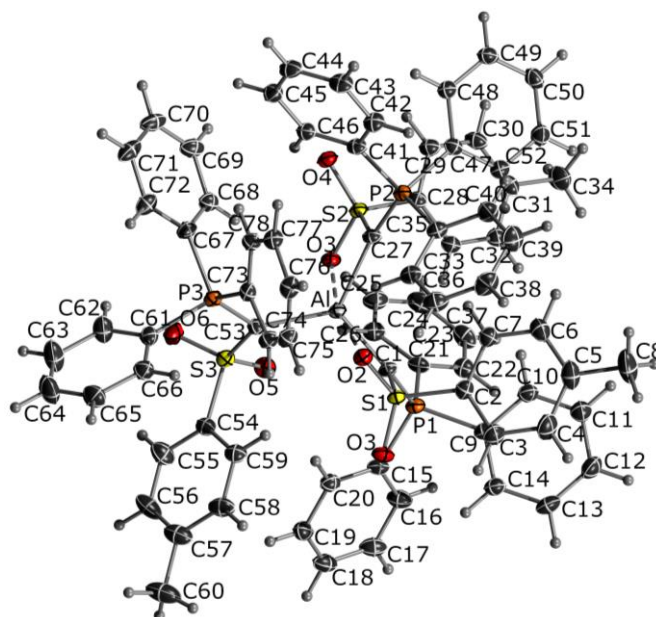


Abbildung 2.13. ORTEP von ***Y₃Al***.

Tabelle 2.25. Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für ***Y₃Al***. $U(\text{eq})$ ist als ein Drittel der Spur der orthogonalisierten U^{ij} -Tensoren definiert.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
S(1)	6119(1)	4920(1)	6396(1)	16(1)
S(2)	2973(1)	4765(1)	7073(1)	16(1)
S(3)	4238(1)	6924(1)	6560(1)	18(1)
P(1)	6878(1)	5306(1)	7303(1)	17(1)
P(2)	2661(1)	3702(1)	6394(1)	16(1)
P(3)	2752(1)	6302(1)	5858(1)	16(1)
Al(1)	4284(1)	5289(1)	6587(1)	15(1)
O(1)	5029(1)	4933(1)	6111(1)	18(1)
O(2)	6907(1)	5300(1)	6214(1)	22(1)
O(3)	3636(1)	5414(1)	7122(1)	18(1)
O(4)	1874(1)	4876(1)	7095(1)	21(1)
O(5)	4910(1)	6751(1)	6985(1)	22(1)
O(6)	3424(1)	7440(1)	6582(1)	26(1)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

C(1)	5828(1)	5173(1)	6876(1)	17(1)
C(2)	6502(1)	4034(1)	6395(1)	20(1)
C(3)	7437(1)	3848(1)	6272(1)	29(1)
C(4)	7712(1)	3148(1)	6271(1)	36(1)
C(5)	7055(1)	2635(1)	6384(1)	32(1)
C(6)	6122(1)	2837(1)	6508(1)	28(1)
C(7)	5848(1)	3530(1)	6521(1)	24(1)
C(8)	7343(2)	1874(1)	6377(1)	48(1)
C(9)	7857(1)	4618(1)	7347(1)	20(1)
C(10)	7615(1)	3954(1)	7484(1)	24(1)
C(11)	8356(1)	3426(1)	7528(1)	29(1)
C(12)	9344(1)	3551(1)	7428(1)	32(1)
C(13)	9575(1)	4194(1)	7270(1)	31(1)
C(14)	8835(1)	4729(1)	7229(1)	25(1)
C(15)	7636(1)	6095(1)	7285(1)	21(1)
C(16)	8519(1)	6221(1)	7620(1)	27(1)
C(17)	9129(1)	6804(1)	7596(1)	30(1)
C(18)	8857(1)	7274(1)	7249(1)	29(1)
C(19)	7971(1)	7157(1)	6922(1)	27(1)
C(20)	7362(1)	6563(1)	6938(1)	22(1)
C(21)	6477(1)	5361(1)	7837(1)	20(1)
C(22)	7074(1)	5059(1)	8220(1)	23(1)
C(23)	6753(1)	5129(1)	8625(1)	29(1)
C(24)	5844(1)	5494(1)	8649(1)	31(1)
C(25)	5262(1)	5805(1)	8271(1)	28(1)
C(26)	5579(1)	5747(1)	7865(1)	22(1)
C(27)	3286(1)	4452(1)	6608(1)	17(1)
C(28)	3488(1)	4276(1)	7559(1)	18(1)
C(29)	2823(1)	3994(1)	7818(1)	22(1)
C(30)	3254(1)	3620(1)	8197(1)	25(1)
C(31)	4343(1)	3541(1)	8326(1)	24(1)
C(32)	4993(1)	3831(1)	8061(1)	21(1)
C(33)	4574(1)	4185(1)	7674(1)	20(1)
C(34)	4816(1)	3137(1)	8738(1)	37(1)
C(35)	3369(1)	3245(1)	6026(1)	20(1)
C(36)	3776(1)	3624(1)	5710(1)	22(1)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

C(37)	4272(1)	3279(1)	5410(1)	28(1)
C(38)	4352(1)	2557(1)	5419(1)	32(1)
C(39)	3938(1)	2178(1)	5729(1)	32(1)
C(40)	3448(1)	2520(1)	6034(1)	26(1)
C(41)	1343(1)	3792(1)	6059(1)	20(1)
C(42)	913(1)	3258(1)	5769(1)	24(1)
C(43)	-126(1)	3302(1)	5541(1)	26(1)
C(44)	-729(1)	3882(1)	5595(1)	26(1)
C(45)	-302(1)	4415(1)	5880(1)	25(1)
C(46)	731(1)	4367(1)	6116(1)	21(1)
C(47)	2477(1)	3072(1)	6815(1)	18(1)
C(48)	1476(1)	2856(1)	6865(1)	22(1)
C(49)	1370(1)	2363(1)	7186(1)	26(1)
C(50)	2249(1)	2086(1)	7460(1)	26(1)
C(51)	3249(1)	2306(1)	7417(1)	25(1)
C(52)	3364(1)	2795(1)	7097(1)	21(1)
C(53)	3787(1)	6192(1)	6290(1)	17(1)
C(54)	5095(1)	7349(1)	6246(1)	22(1)
C(55)	5245(1)	8064(1)	6288(1)	32(1)
C(56)	5943(1)	8392(1)	6063(1)	39(1)
C(57)	6502(1)	8021(1)	5797(1)	34(1)
C(58)	6347(1)	7305(1)	5761(1)	29(1)
C(59)	5644(1)	6969(1)	5980(1)	23(1)
C(60)	7263(2)	8378(1)	5553(1)	50(1)
C(61)	2731(1)	7087(1)	5512(1)	22(1)
C(62)	2339(1)	7705(1)	5656(1)	32(1)
C(63)	2288(2)	8304(1)	5402(1)	44(1)
C(64)	2619(2)	8299(1)	4998(1)	42(1)
C(65)	3005(1)	7691(1)	4851(1)	34(1)
C(66)	3064(1)	7087(1)	5105(1)	25(1)
C(67)	1450(1)	6332(1)	6004(1)	20(1)
C(68)	1362(1)	6174(1)	6438(1)	21(1)
C(69)	368(1)	6146(1)	6552(1)	27(1)
C(70)	-529(1)	6288(1)	6236(1)	30(1)
C(71)	-440(1)	6468(1)	5807(1)	29(1)
C(72)	541(1)	6489(1)	5689(1)	24(1)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

C(73)	2704(1)	5585(1)	5470(1)	18(1)
C(74)	3576(1)	5474(1)	5267(1)	20(1)
C(75)	3503(1)	5006(1)	4917(1)	22(1)
C(76)	2593(1)	4613(1)	4785(1)	22(1)
C(77)	1759(1)	4684(1)	5007(1)	22(1)
C(78)	1805(1)	5179(1)	5340(1)	20(1)

Tabelle 2.26. Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für Y_3Al . Der Exponent des Anisotropen Fehlordnungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$.

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
S(1)	15(1)	19(1)	16(1)	0(1)	6(1)	-1(1)
S(2)	14(1)	20(1)	15(1)	1(1)	5(1)	-1(1)
S(3)	19(1)	18(1)	17(1)	-1(1)	6(1)	0(1)
P(1)	14(1)	21(1)	16(1)	0(1)	4(1)	-2(1)
P(2)	15(1)	19(1)	16(1)	0(1)	4(1)	-1(1)
P(3)	16(1)	20(1)	14(1)	0(1)	5(1)	1(1)
Al(1)	14(1)	18(1)	15(1)	0(1)	4(1)	-1(1)
O(1)	17(1)	22(1)	16(1)	0(1)	3(1)	1(1)
O(2)	21(1)	25(1)	23(1)	-1(1)	11(1)	-4(1)
O(3)	17(1)	20(1)	17(1)	0(1)	6(1)	-2(1)
O(4)	14(1)	29(1)	21(1)	2(1)	6(1)	0(1)
O(5)	24(1)	24(1)	17(1)	-2(1)	3(1)	-2(1)
O(6)	27(1)	25(1)	28(1)	-3(1)	9(1)	6(1)
C(1)	15(1)	21(1)	16(1)	-1(1)	5(1)	0(1)
C(2)	21(1)	22(1)	17(1)	-1(1)	4(1)	3(1)
C(3)	30(1)	30(1)	31(1)	2(1)	15(1)	6(1)
C(4)	40(1)	35(1)	38(1)	5(1)	21(1)	16(1)
C(5)	47(1)	27(1)	24(1)	3(1)	8(1)	11(1)
C(6)	34(1)	24(1)	27(1)	4(1)	2(1)	0(1)
C(7)	21(1)	25(1)	24(1)	2(1)	2(1)	1(1)
C(8)	73(1)	30(1)	44(1)	9(1)	20(1)	20(1)
C(9)	15(1)	27(1)	18(1)	0(1)	3(1)	-1(1)
C(10)	19(1)	28(1)	25(1)	2(1)	8(1)	0(1)
C(11)	29(1)	29(1)	32(1)	4(1)	11(1)	3(1)
C(12)	24(1)	36(1)	38(1)	2(1)	9(1)	10(1)
C(13)	18(1)	41(1)	37(1)	-1(1)	10(1)	1(1)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

C(14)	18(1)	30(1)	27(1)	1(1)	7(1)	-2(1)
C(15)	18(1)	24(1)	21(1)	-3(1)	8(1)	-5(1)
C(16)	26(1)	33(1)	22(1)	-1(1)	4(1)	-8(1)
C(17)	26(1)	34(1)	30(1)	-9(1)	6(1)	-10(1)
C(18)	28(1)	24(1)	39(1)	-7(1)	15(1)	-8(1)
C(19)	27(1)	22(1)	34(1)	1(1)	13(1)	0(1)
C(20)	20(1)	23(1)	25(1)	-2(1)	8(1)	0(1)
C(21)	19(1)	23(1)	17(1)	-2(1)	4(1)	-6(1)
C(22)	24(1)	26(1)	20(1)	1(1)	3(1)	-4(1)
C(23)	37(1)	31(1)	18(1)	2(1)	3(1)	-5(1)
C(24)	40(1)	36(1)	20(1)	-3(1)	14(1)	-6(1)
C(25)	28(1)	34(1)	26(1)	-5(1)	11(1)	-3(1)
C(26)	21(1)	26(1)	21(1)	-2(1)	5(1)	-3(1)
C(27)	16(1)	21(1)	16(1)	1(1)	5(1)	-2(1)
C(28)	19(1)	19(1)	16(1)	1(1)	4(1)	-2(1)
C(29)	20(1)	26(1)	22(1)	1(1)	7(1)	-3(1)
C(30)	27(1)	28(1)	23(1)	5(1)	10(1)	-4(1)
C(31)	29(1)	22(1)	20(1)	3(1)	4(1)	-2(1)
C(32)	20(1)	21(1)	23(1)	0(1)	2(1)	-2(1)
C(33)	19(1)	20(1)	21(1)	0(1)	6(1)	-3(1)
C(34)	36(1)	43(1)	31(1)	16(1)	5(1)	2(1)
C(35)	17(1)	24(1)	19(1)	-2(1)	4(1)	-1(1)
C(36)	20(1)	27(1)	20(1)	-1(1)	4(1)	-2(1)
C(37)	27(1)	36(1)	21(1)	-2(1)	9(1)	-2(1)
C(38)	33(1)	38(1)	27(1)	-7(1)	11(1)	6(1)
C(39)	39(1)	28(1)	32(1)	-5(1)	10(1)	6(1)
C(40)	29(1)	25(1)	26(1)	-1(1)	9(1)	1(1)
C(41)	18(1)	24(1)	17(1)	2(1)	4(1)	-3(1)
C(42)	23(1)	27(1)	21(1)	0(1)	3(1)	-2(1)
C(43)	24(1)	31(1)	21(1)	-1(1)	0(1)	-7(1)
C(44)	18(1)	36(1)	22(1)	6(1)	-1(1)	-4(1)
C(45)	20(1)	28(1)	25(1)	5(1)	4(1)	1(1)
C(46)	18(1)	25(1)	19(1)	2(1)	3(1)	-3(1)
C(47)	20(1)	18(1)	18(1)	0(1)	6(1)	-2(1)
C(48)	19(1)	23(1)	23(1)	0(1)	6(1)	-1(1)
C(49)	23(1)	25(1)	32(1)	1(1)	13(1)	-3(1)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

C(50)	34(1)	22(1)	26(1)	6(1)	14(1)	2(1)
C(51)	26(1)	26(1)	24(1)	4(1)	6(1)	5(1)
C(52)	19(1)	22(1)	23(1)	1(1)	5(1)	0(1)
C(53)	17(1)	18(1)	17(1)	0(1)	4(1)	0(1)
C(54)	22(1)	22(1)	20(1)	1(1)	4(1)	-3(1)
C(55)	41(1)	23(1)	33(1)	-3(1)	10(1)	-5(1)
C(56)	51(1)	27(1)	38(1)	2(1)	8(1)	-16(1)
C(57)	35(1)	41(1)	26(1)	5(1)	3(1)	-16(1)
C(58)	28(1)	39(1)	22(1)	2(1)	7(1)	-7(1)
C(59)	23(1)	26(1)	21(1)	0(1)	5(1)	-3(1)
C(60)	49(1)	61(1)	40(1)	9(1)	11(1)	-28(1)
C(61)	20(1)	24(1)	20(1)	3(1)	3(1)	1(1)
C(62)	42(1)	28(1)	26(1)	2(1)	9(1)	9(1)
C(63)	64(1)	28(1)	40(1)	7(1)	15(1)	14(1)
C(64)	57(1)	31(1)	40(1)	16(1)	12(1)	7(1)
C(65)	37(1)	39(1)	28(1)	11(1)	11(1)	2(1)
C(66)	24(1)	28(1)	24(1)	3(1)	7(1)	1(1)
C(67)	18(1)	21(1)	21(1)	-4(1)	6(1)	1(1)
C(68)	22(1)	21(1)	22(1)	-3(1)	7(1)	0(1)
C(69)	27(1)	28(1)	30(1)	-7(1)	16(1)	-3(1)
C(70)	20(1)	31(1)	43(1)	-16(1)	14(1)	-4(1)
C(71)	18(1)	32(1)	36(1)	-14(1)	2(1)	3(1)
C(72)	21(1)	29(1)	22(1)	-7(1)	3(1)	3(1)
C(73)	19(1)	21(1)	14(1)	1(1)	4(1)	3(1)
C(74)	18(1)	25(1)	18(1)	1(1)	4(1)	1(1)
C(75)	21(1)	28(1)	18(1)	0(1)	7(1)	4(1)
C(76)	26(1)	25(1)	17(1)	-3(1)	3(1)	4(1)
C(77)	22(1)	24(1)	20(1)	-1(1)	3(1)	-1(1)
C(78)	20(1)	23(1)	17(1)	1(1)	5(1)	1(1)

Y₃In

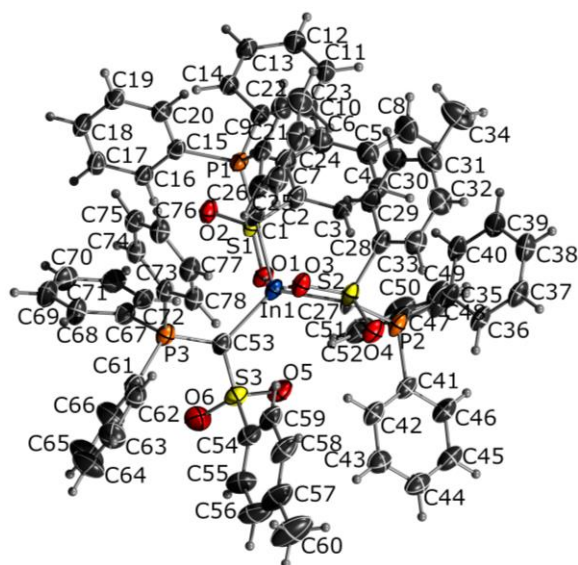


Abbildung 2.14. ORTEP von ***Y₃In***.

Tabelle 2.27. Atomkoordinaten ($\cdot 10^4$) und äquivalente isotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für ***Y₃Al***. $U(\text{eq})$ ist als ein Drittel der Spur der orthogonalisierten U^{ij} -Tensoren definiert.

	x	y	z	U(eq)
S(2)	6697(1)	7518(1)	1878(1)	33(1)
S(1)	6228(1)	7572(1)	5564(1)	31(1)
P(2)	6154(1)	7340(1)	1635(1)	35(1)
P(1)	6645(1)	7981(1)	5472(1)	32(1)
O(3)	6901(1)	7504(1)	2689(1)	36(1)
O(4)	6770(1)	7383(1)	947(1)	38(1)
O(1)	6182(1)	7311(1)	5037(1)	34(1)
O(2)	6234(1)	7557(1)	6654(1)	36(1)
C(27)	6412(1)	7410(1)	2435(2)	33(1)
C(28)	6671(1)	7864(1)	1567(2)	37(1)
C(29)	6574(1)	8047(1)	2281(2)	40(1)
C(30)	6556(1)	8315(1)	2039(2)	45(1)
C(31)	6625(1)	8409(1)	1084(3)	50(1)
C(32)	6720(1)	8223(1)	385(3)	52(1)
C(33)	6745(1)	7955(1)	619(2)	44(1)
C(34)	6588(1)	8702(1)	816(4)	74(1)
C(35)	6114(1)	7601(1)	702(2)	38(1)
C(36)	6185(1)	7562(1)	-308(2)	40(1)
C(37)	6168(1)	7775(1)	-988(2)	46(1)
C(38)	6081(1)	8024(1)	-669(2)	50(1)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

C(39)	6014(1)	8067(1)	339(2)	47(1)
C(40)	6032(1)	7857(1)	1016(2)	42(1)
C(41)	6177(1)	7022(1)	955(2)	36(1)
C(42)	6398(1)	6858(1)	1102(2)	42(1)
C(43)	6416(1)	6612(1)	614(2)	45(1)
C(44)	6213(1)	6532(1)	-30(2)	47(1)
C(45)	5988(1)	6693(1)	-165(2)	48(1)
C(46)	5968(1)	6938(1)	327(2)	45(1)
C(47)	5836(1)	7310(1)	2288(2)	39(1)
C(48)	5823(1)	7143(1)	3140(2)	42(1)
C(49)	5576(1)	7112(1)	3619(3)	51(1)
C(50)	5347(1)	7244(1)	3256(3)	62(1)
C(51)	5364(1)	7405(1)	2409(3)	66(1)
C(52)	5605(1)	7436(1)	1924(2)	53(1)
C(1)	6506(1)	7691(1)	5005(2)	33(1)
C(2)	5938(1)	7765(1)	5282(2)	37(1)
C(3)	5848(1)	7779(1)	4299(2)	38(1)
C(4)	5617(1)	7922(1)	4081(2)	45(1)
C(5)	5479(1)	8063(1)	4828(3)	51(1)
C(6)	5576(1)	8051(1)	5810(3)	55(1)
C(7)	5802(1)	7903(1)	6044(2)	47(1)
C(8)	5229(1)	8220(1)	4584(3)	71(1)
C(9)	6394(1)	8232(1)	5798(2)	38(1)
C(10)	6233(1)	8341(1)	5037(2)	42(1)
C(11)	6042(1)	8533(1)	5260(2)	56(1)
C(12)	6008(1)	8618(1)	6245(3)	60(1)
C(13)	6161(1)	8508(1)	7010(2)	52(1)
C(14)	6354(1)	8316(1)	6791(2)	41(1)
C(15)	6850(1)	7956(1)	6609(2)	34(1)
C(16)	6820(1)	7738(1)	7248(2)	35(1)
C(17)	6961(1)	7730(1)	8154(2)	38(1)
C(18)	7128(1)	7942(1)	8416(2)	40(1)
C(19)	7159(1)	8161(1)	7777(2)	40(1)
C(20)	7022(1)	8167(1)	6870(2)	39(1)
C(21)	6866(1)	8140(1)	4561(2)	38(1)
C(22)	6865(1)	8416(1)	4405(2)	47(1)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

C(23)	7037(1)	8531(1)	3703(3)	57(1)
C(24)	7214(1)	8371(1)	3160(3)	54(1)
C(25)	7219(1)	8095(1)	3332(2)	48(1)
C(26)	7049(1)	7979(1)	4037(2)	39(1)
In(1)	6563(1)	7346(1)	3955(1)	30(1)
S(3)	6626(1)	6701(1)	3981(1)	37(1)
P(3)	7016(1)	6961(1)	5276(1)	33(1)
O(5)	6373(1)	6769(1)	3499(2)	43(1)
O(6)	6615(1)	6491(1)	4740(2)	50(1)
C(53)	6772(1)	6983(1)	4377(2)	34(1)
C(54)	6831(1)	6561(1)	2994(2)	44(1)
C(55)	6832(1)	6286(1)	2851(3)	62(1)
C(56)	6979(1)	6182(1)	2032(4)	76(1)
C(57)	7118(1)	6344(1)	1368(3)	69(1)
C(58)	7113(1)	6618(1)	1536(3)	55(1)
C(59)	6973(1)	6730(1)	2340(2)	44(1)
C(60)	7274(1)	6226(1)	484(4)	103(2)
C(61)	7232(1)	6663(1)	5209(2)	41(1)
C(62)	7469(1)	6660(1)	4656(2)	45(1)
C(63)	7627(1)	6430(1)	4615(3)	59(1)
C(64)	7552(1)	6202(1)	5124(4)	75(1)
C(65)	7316(1)	6204(1)	5690(4)	78(1)
C(66)	7156(1)	6432(1)	5724(3)	59(1)
C(67)	6901(1)	6962(1)	6579(2)	36(1)
C(68)	7075(1)	6906(1)	7377(2)	43(1)
C(69)	6982(1)	6918(1)	8363(2)	48(1)
C(70)	6720(1)	6986(1)	8561(2)	48(1)
C(71)	6544(1)	7039(1)	7774(2)	44(1)
C(72)	6635(1)	7026(1)	6775(2)	36(1)
C(73)	7240(1)	7247(1)	5142(2)	32(1)
C(74)	7310(1)	7412(1)	5946(2)	35(1)
C(75)	7499(1)	7614(1)	5815(2)	37(1)
C(76)	7629(1)	7645(1)	4895(2)	38(1)
C(77)	7555(1)	7486(1)	4085(2)	39(1)
C(78)	7356(1)	7294(1)	4192(2)	36(1)

Tabelle 2.28. Anisotrope Auslenkungsparameter ($\text{\AA}^2 \cdot 10^3$) für **Y₃In**. Der Exponent des Anisotropen Fehlordnungsfaktors hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$.

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
S(2)	28(1)	49(1)	21(1)	-5(1)	2(1)	-1(1)
S(1)	32(1)	41(1)	20(1)	-5(1)	1(1)	3(1)
P(2)	30(1)	53(1)	21(1)	-10(1)	1(1)	-2(1)
P(1)	38(1)	36(1)	23(1)	-4(1)	-2(1)	2(1)
O(3)	29(1)	51(1)	27(1)	-4(1)	0(1)	-2(1)
O(4)	35(1)	53(1)	27(1)	-7(1)	7(1)	-1(1)
O(1)	30(1)	43(1)	28(1)	-8(1)	4(1)	0(1)
O(2)	36(1)	50(1)	23(1)	-4(1)	2(1)	6(1)
C(27)	32(1)	53(2)	15(1)	-2(1)	0(1)	-2(1)
C(28)	32(1)	52(2)	26(1)	-5(1)	0(1)	0(1)
C(29)	36(2)	52(2)	31(1)	-6(1)	0(1)	7(1)
C(30)	39(2)	52(2)	44(2)	-8(1)	0(1)	6(1)
C(31)	44(2)	49(2)	58(2)	9(2)	7(2)	5(2)
C(32)	55(2)	59(2)	42(2)	10(2)	12(2)	0(2)
C(33)	44(2)	55(2)	31(1)	-1(1)	8(1)	0(2)
C(34)	77(3)	61(3)	85(3)	18(2)	23(2)	11(2)
C(35)	33(1)	58(2)	24(1)	-9(1)	-1(1)	-3(1)
C(36)	38(2)	57(2)	25(1)	-11(1)	-1(1)	-4(1)
C(37)	45(2)	67(2)	26(1)	-6(1)	1(1)	-7(2)
C(38)	48(2)	68(2)	34(2)	4(2)	-7(1)	-1(2)
C(39)	43(2)	63(2)	37(2)	-6(1)	-6(1)	9(2)
C(40)	35(2)	63(2)	27(1)	-7(1)	-2(1)	8(1)
C(41)	37(2)	51(2)	22(1)	-8(1)	5(1)	-6(1)
C(42)	43(2)	55(2)	26(1)	-7(1)	2(1)	-4(1)
C(43)	51(2)	49(2)	36(2)	-2(1)	7(1)	-4(2)
C(44)	58(2)	50(2)	33(1)	-6(1)	9(1)	-14(2)
C(45)	49(2)	61(2)	34(2)	-12(1)	2(1)	-17(2)
C(46)	41(2)	58(2)	34(1)	-12(1)	2(1)	-9(2)
C(47)	33(1)	59(2)	26(1)	-14(1)	2(1)	-5(1)
C(48)	36(2)	52(2)	39(2)	-16(1)	4(1)	-11(1)
C(49)	52(2)	57(2)	45(2)	-14(2)	15(2)	-18(2)
C(50)	32(2)	92(3)	62(2)	-28(2)	13(2)	-14(2)
C(51)	32(2)	114(4)	52(2)	-10(2)	2(2)	3(2)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

C(52)	31(2)	89(3)	39(2)	-10(2)	-2(1)	1(2)
C(1)	38(2)	38(1)	23(1)	-7(1)	1(1)	0(1)
C(2)	37(2)	46(2)	28(1)	-6(1)	2(1)	2(1)
C(3)	46(2)	41(2)	28(1)	-5(1)	-6(1)	3(1)
C(4)	54(2)	43(2)	39(2)	-5(1)	-15(1)	7(1)
C(5)	52(2)	52(2)	49(2)	-6(2)	-8(2)	15(2)
C(6)	56(2)	68(2)	41(2)	-7(2)	0(2)	28(2)
C(7)	47(2)	63(2)	30(1)	-7(1)	1(1)	16(2)
C(8)	66(3)	76(3)	71(3)	-9(2)	-22(2)	33(2)
C(9)	46(2)	39(2)	29(1)	-6(1)	-7(1)	4(1)
C(10)	55(2)	42(2)	30(1)	-7(1)	-9(1)	12(1)
C(11)	73(2)	55(2)	38(2)	-7(2)	-19(2)	22(2)
C(12)	75(3)	59(2)	45(2)	-14(2)	-15(2)	30(2)
C(13)	66(2)	55(2)	33(2)	-16(1)	-9(1)	22(2)
C(14)	53(2)	40(2)	30(1)	-5(1)	-6(1)	13(1)
C(15)	34(1)	41(2)	26(1)	-7(1)	-1(1)	4(1)
C(16)	35(1)	42(2)	26(1)	-7(1)	-2(1)	4(1)
C(17)	36(2)	50(2)	27(1)	-1(1)	-1(1)	7(1)
C(18)	35(2)	56(2)	28(1)	-11(1)	-6(1)	4(1)
C(19)	37(2)	47(2)	36(1)	-10(1)	-6(1)	2(1)
C(20)	45(2)	40(2)	32(1)	-4(1)	-2(1)	0(1)
C(21)	42(2)	46(2)	27(1)	0(1)	-5(1)	-2(1)
C(22)	59(2)	42(2)	40(2)	2(1)	-1(1)	-4(2)
C(23)	62(2)	51(2)	57(2)	12(2)	-6(2)	-14(2)
C(24)	48(2)	70(2)	42(2)	12(2)	2(2)	-12(2)
C(25)	42(2)	66(2)	36(2)	1(2)	3(1)	-1(2)
C(26)	36(2)	51(2)	31(1)	-4(1)	-1(1)	-5(1)
ln(1)	29(1)	40(1)	20(1)	-6(1)	2(1)	0(1)
S(3)	35(1)	41(1)	35(1)	-7(1)	6(1)	-3(1)
P(3)	31(1)	42(1)	27(1)	-3(1)	3(1)	0(1)
O(5)	33(1)	52(1)	44(1)	-13(1)	1(1)	-3(1)
O(6)	53(1)	49(1)	50(1)	3(1)	9(1)	-8(1)
C(53)	35(1)	41(2)	27(1)	-4(1)	2(1)	1(1)
C(54)	37(2)	50(2)	44(2)	-16(1)	-2(1)	-2(1)
C(55)	65(2)	49(2)	71(2)	-18(2)	6(2)	1(2)
C(56)	79(3)	62(3)	88(3)	-41(2)	4(2)	10(2)

ORTEPs und Daten zur Strukturverfeinerung

C(57)	52(2)	91(3)	64(2)	-39(2)	7(2)	2(2)
C(58)	43(2)	80(3)	43(2)	-24(2)	6(1)	-6(2)
C(59)	36(2)	60(2)	35(1)	-12(1)	2(1)	-2(1)
C(60)	78(3)	135(5)	97(4)	-73(4)	23(3)	3(3)
C(61)	41(2)	48(2)	34(1)	-2(1)	1(1)	2(1)
C(62)	44(2)	54(2)	38(2)	-5(1)	-1(1)	7(2)
C(63)	49(2)	66(2)	61(2)	-5(2)	8(2)	16(2)
C(64)	75(3)	53(2)	96(3)	7(2)	12(2)	27(2)
C(65)	76(3)	54(2)	104(3)	21(2)	18(3)	17(2)
C(66)	58(2)	51(2)	68(2)	9(2)	10(2)	10(2)
C(67)	38(2)	40(2)	29(1)	0(1)	3(1)	-6(1)
C(68)	39(2)	58(2)	32(1)	4(1)	-2(1)	-6(1)
C(69)	53(2)	59(2)	31(1)	4(1)	-3(1)	-9(2)
C(70)	66(2)	50(2)	27(1)	1(1)	10(1)	-8(2)
C(71)	50(2)	46(2)	36(2)	-2(1)	12(1)	-4(1)
C(72)	39(2)	38(2)	30(1)	-2(1)	1(1)	-4(1)
C(73)	25(1)	46(2)	27(1)	-2(1)	-1(1)	5(1)
C(74)	30(1)	48(2)	26(1)	0(1)	3(1)	3(1)
C(75)	31(1)	46(2)	33(1)	-4(1)	-1(1)	2(1)
C(76)	29(1)	48(2)	37(1)	3(1)	1(1)	-2(1)
C(77)	31(1)	52(2)	32(1)	0(1)	3(1)	-2(1)
C(78)	29(1)	51(2)	27(1)	-2(1)	1(1)	4(1)

Anhang II

Daten der computerchemischen
Berechnungen

zur

Dissertation

Zur Synthese, Struktur und Reaktivität von
ylidsubstituierten Hauptgruppenverbindungen

vorgelegt von

Henning Steinert

Inhaltsverzeichnis des Anhangs

Inhaltsverzeichnis des Anhangs	II
1 Studien zur Stabilität von Alkylsubstituierten AYCs	1
1.1 Cyclohexyl-Substitution	1
1.1.1 Energien mit einer SCy ₂ -substituierten Oniumgruppe	1
1.1.2 Koordinaten mit einer SCy ₂ -substituierten Oniumgruppe	1
1.1.3 Energien mit einer SOCy ₂ -substituierten Oniumgruppe	12
1.1.4 Koordinaten mit einer SOCy ₂ -substituierten Oniumgruppe.....	12
1.1.5 Energien mit einer PCy ₃ -substituierten Oniumgruppe	29
1.1.6 Koordinaten mit einer PCy ₃ -substituierten Oniumgruppe	29
1.2 Methylsubstitution	57
1.2.1 Energien mit einer SMe ₂ -substituierten Oniumgruppe.....	57
1.2.2 Koordinaten mit einer SMe ₂ -substituierten Oniumgruppe.....	57
1.2.3 Energien mit einer SOMe ₂ -substituierten Oniumgruppe	61
1.2.4 Koordinaten mit einer SOMe ₂ -substituierten Oniumgruppe	61
1.2.5 Energien mit einer PMe ₃ -substituierten Oniumgruppe.....	65
1.2.6 Koordinaten mit einer PMe ₃ -substituierten Oniumgruppe.....	66
1.3 <i>tert</i> -Butylsubstitution	70
1.3.1 Energien mit einer <i>St</i> Bu ₂ -substituierten Oniumgruppe	70
1.3.2 Koordinaten mit einer <i>St</i> Bu ₂ -substituierten Oniumgruppe	70
1.3.3 Energien mit einer SO <i>t</i> Bu ₂ -substituierten Oniumgruppe.....	76
1.3.4 Koordinaten mit einer SO <i>t</i> Bu ₂ -substituierten Oniumgruppe.....	76
1.3.5 Energien mit einer PtBu ₃ -substituierten Oniumgruppe	82
1.3.6 Koordinaten mit einer PtBu ₃ -substituierten Oniumgruppe	82
1.4 Adamantylsubstitution.....	93
1.4.1 Energien mit einer SAd ₂ -substituierten Oniumgruppe	93
1.4.2 Koordinaten mit einer SAd ₂ -substituierten Oniumgruppe	93
1.4.3 Energien mit einer SOAd ₂ -substituierten Oniumgruppe	101
1.4.4 Koordinaten mit einer SOAd ₂ -substituierten Oniumgruppe.....	101

1.4.5	Energien mit einer PAd ₃ -substituierten Oniumgruppe	109
1.4.6	Koordinaten mit einer PAd ₃ -substituierten Oniumgruppe	109
1.5	Substitution mit S-Heterocyclen	125
1.5.1	Energien mit einer S(CH ₂) _n -substituierten Oniumgruppe	125
1.5.2	Koordinaten mit einer S(CH ₂) ₂ -substituierten Oniumgruppe	126
1.5.3	Koordinaten mit einer S(CH ₂) ₃ -substituierten Oniumgruppe	132
1.5.4	Koordinaten mit einer S(CH ₂) ₄ -substituierten Oniumgruppe	141
2	Studien zur Stabilität von AYCs mit endocyclischen Oniumgruppen	149
2.1	S-Ylide	149
2.1.1	Energien der Strukturen	149
2.1.2	Koordinaten der Strukturen	149
2.2	P-Ylide	159
2.2.1	Energien der Strukturen	159
2.2.2	Koordinaten der Strukturen	161
2.3	I-Ylide	236
2.3.1	Energien der Strukturen	236
2.3.2	Koordinaten der Strukturen	236
3	Untersuchungen zu schweren ylidsubstituierten Tetrylenen	246
3.1	Energien der Tetrylene	246
3.1.1	Energien der Silylene	246
3.1.2	Energien der Germylene	249
3.1.3	Energien der Stannylene	252
3.1.4	Energien der Plumbylene	256
3.2	Ergebnisse der NBO-Analysen	258
3.3	Koordinaten der Tetrylene	259
3.3.1	Koordinaten der Silylene	259
3.3.2	Koordinaten der Germylene	363
3.3.3	Koordinaten der Stannylene	524
3.3.4	Koordinaten der Plumbylene	685

3.4	Energien der Übergangszustände der H ₂ -Aktivierung	780
3.4.1	Bei Silylenen	780
3.4.2	Bei Germylenen	782
3.4.3	Bei Stannylene	784
3.5	Koordinaten der Übergangszustände der H ₂ -Aktivierung	785
3.5.1	Bei Silylenen	785
3.5.2	Bei Germylenen	857
3.5.3	Bei Stannylene	928
3.6	Energien der H ₂ -Aktivierungsprodukte	997
3.6.1	Bei Silylenen	997
3.6.2	Bei Germylenen	999
3.6.3	Bei Stannylene	1001
3.7	Koordinaten der H ₂ -Aktivierungsprodukte	1002
3.7.1	Bei Silylenen	1002
3.7.2	Bei Germylenen	1080
3.7.3	Bei Stannylene	1160
3.8	Energien der Phenolpräkoordination	1239
3.8.1	Bei Silylenen	1239
3.8.2	Bei Germylenen	1240
3.8.3	Bei Stannylene	1241
3.9	Koordinaten der Phenolpräkoordination	1241
3.9.1	Bei Silylenen	1241
3.9.2	Bei Germylenen	1258
3.9.3	Bei Stannylene	1275
3.10	Energien der Übergangszustände der Phenolaktivierung	1289
3.10.1	Bei Silylenen	1289
3.10.2	Bei Germylenen	1290
3.10.3	Bei Stannylene	1291
3.11	Koordinaten der Übergangszustände der Phenolaktivierung	1291

3.11.1	Bei Silylenen	1291
3.11.2	Bei Germylenen	1310
3.11.3	Bei Stannylenen.....	1328
3.12	Energien der Produkte der Phenolaktivierung.....	1343
3.12.1	Bei Silylenen	1343
3.12.2	Bei Germylenen	1344
3.12.3	Bei Stannylenen.....	1345
3.13	Koordinaten der Produkte der Phenolaktivierung.....	1345
3.13.1	Bei Silylenen	1345
3.13.2	Bei Germylenen	1363
3.13.3	Bei Stannylenen.....	1382
3.14	Untersuchungen zur Thermodynamik von Ylidübertragungsreaktionen	1400
3.14.1	Energien der Verbindungen	1400
3.14.2	Energiedifferenzen.....	1405
3.14.3	Koordinaten der Verbindungen	1423
3.15	Untersuchungen zu weiteren ylidsubstituierten Tetrelverbindungen.....	1536
3.15.1	Energien der Verbindungen	1536
3.15.2	Ergebnisse der NBO-Analysen	1537
3.15.3	Koordinaten der Verbindungen	1537
4	Untersuchungen zu Phospheniumkationen	1600
4.1	Energien der Verbindungen	1600
4.2	Natürliche Ladungen und Wiberg Bond Indices	1600
4.3	Koordinaten der Verbindungen	1600
5	Untersuchungen zu elektronischen Eigenschaften und dem katalytischen Einsatz von YPhos-Liganden	1614
5.1	Untersuchungen zu YPhos–Goldkomplexen.....	1614
5.1.1	Energien der Verbindungen	1614
5.1.2	Natürliche Ladungen und Analyse der Bindungskritischen Punkte.....	1614
5.1.3	Ausgewählte Au–C-Abstände	1615

5.1.4	Koordinaten der Verbindungen	1615
5.2	Untersuchungen zur FERINGA-Kopplung	1644
5.2.1	KeYPhos-medierte Ethyl–Phenyl-Kopplung	1644
5.2.2	KeYPhos-medierte <i>iso</i> -Propyl–Phenyl-Kopplung	1666
5.2.3	KeyPhos-medierte <i>sec</i> -Butyl–Phenyl-Kopplung	1755
5.2.4	KeyPhos-medierte <i>tert</i> -Butyl–Phenyl-Kopplung.....	1865
5.2.5	JoYPhos-medierte Ethyl–Phenyl-Kopplung.....	1927
5.2.6	JoYPhos-medierte <i>iso</i> -Propyl–Phenyl-Kopplung.....	1950
5.2.7	JoYPhos-medierte <i>sec</i> -Butyl–Phenyl-Kopplung	2052
5.2.8	JoYPhos-medierte <i>tert</i> -Butyl–Phenyl-Kopplung.....	2174
6	Untersuchungen zu ylidsubstituierten Verbindungen der Gruppe XV	2240
6.1	Energien der Verbindungen	2240
6.2	Ergebnisse der NBO- und QTAIM-Analysen.....	2240
6.3	Koordinaten der Verbindungen	2241
7	Untersuchungen zu schweren ylidsubstituierten Gruppe XIII-Verbindungen.....	2250
7.1	Energien der Verbindungen	2250
7.2	Ergebnisse der NBO-Analysen	2250
7.3	Koordinaten der Verbindungen	2251
8	Untersuchungen zur Struktur und Reaktivität eines neuen Carbodiphosphorans und seiner Verbindungen.....	2278
8.1	Energien der Verbindungen	2278
8.2	Ergebnisse der NBO-Analyse	2279
8.3	Koordinaten der optimierten Strukturen	2280

1 Studien zur Stabilität von Alkylsubstituierten AYCs

1.1 Cyclohexyl-Substitution

1.1.1 Energien mit einer SCy₂-substituierten Oniumgruppe

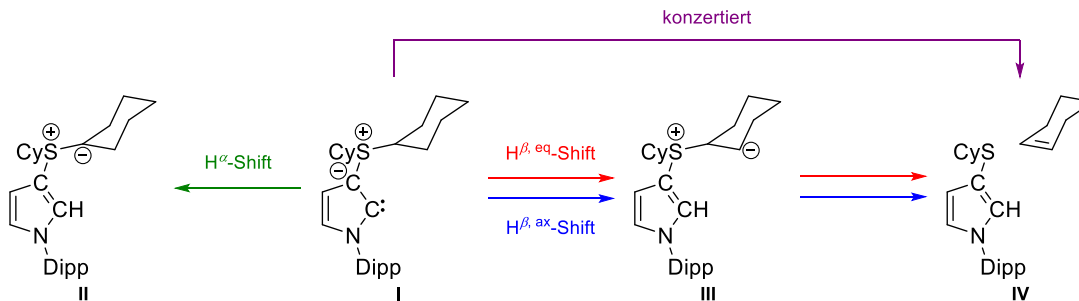


Tabelle 1.1. Energien der Verbindungen.

	Corr(H)	Corr(G)	E(SCF)	E(PCM)	ΔG in hartree	ΔG in kJ/mol
I	0.667489	0.573813	-1543.50584236	-1543.51981401	–	–
TS _{I→II}	0.662041	0.568255	-1543.49198700	-1543.49744263	0.016813	44.143529
II	0.666700	0.570817	-1543.53560927	-1543.54019511	-0.023377	-61.376576
TS _{I→III} ^{ax}	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–
III ^{ax}	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–
TS _{III→IV} ^{ax}	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–
TS _{I→III} ^{eq}	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–
III ^{eq}	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–
TS _{III→IV} ^{eq}	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–
Cyclohexen	0.153142	0.118108	-234.450673317	-234.451720805	-0.094395	-
Sulfid	0.511769	0.428793	-1309.12987765	-1309.13557604		247.833639
TS _{I→IV}	0.661755	0.569421	-1543.48380362	-1543.48995202	0.025470	66.871459

1.1.2 Koordinaten mit einer SCy₂-substituierten Oniumgruppe

I

E = -1543.50584236

C -0.871931 0.405351 -0.653254

C 0.299544 0.768716 0.029869

C 0.084920 1.035756 1.424952

C -1.265919 0.864844 1.585352

N -1.798979 0.483918 0.361992

H 0.783447 1.355357 2.196369

H -1.896561 1.003454 2.462939

C -3.179962 0.173236 0.198374

C -3.607878 -1.146249 0.428111
 C -4.071838 1.191688 -0.179244
 C -4.967116 -1.432942 0.272193
 C -5.422357 0.859953 -0.323938
 C -5.867073 -0.438735 -0.098278
 H -5.328588 -2.449278 0.441860
 H -6.138680 1.629841 -0.617773
 H -6.927083 -0.679134 -0.213452
 C -2.601205 -2.229850 0.760445
 H -1.761325 -1.737048 1.276590
 C -3.556886 2.583459 -0.484873
 H -2.655196 2.732435 0.130649
 C 3.044395 1.491486 0.047982
 C 3.603137 0.827881 1.299997
 C 4.153628 1.933959 -0.904772
 H 2.464240 2.382335 0.347672
 C 4.561680 1.782751 2.009092
 H 4.152217 -0.084625 1.016454
 H 2.791634 0.519183 1.972665
 C 5.122941 2.871464 -0.189533
 H 4.699631 1.048216 -1.271594
 H 3.716599 2.425522 -1.787524
 C 5.681069 2.243019 1.082307
 H 4.975222 1.291781 2.904070
 H 3.997129 2.661054 2.369860
 H 5.937868 3.155206 -0.873878
 H 4.593503 3.806311 0.067182
 H 6.341536 2.954656 1.602396
 H 6.310050 1.374774 0.814265
 C 2.118878 -1.219621 -0.864526
 C 3.463910 -1.561007 -1.487936
 C 1.860717 -1.938046 0.448054
 H 1.317684 -1.515716 -1.566744
 C 3.560086 -3.073031 -1.693163
 H 4.281346 -1.234307 -0.822791
 H 3.593315 -1.030454 -2.445276
 C 1.951560 -3.444602 0.214030

H 2.605040 -1.643942 1.203418
 H 0.869839 -1.651276 0.832141
 C 3.292989 -3.835115 -0.398835
 H 4.550965 -3.331002 -2.099594
 H 2.821046 -3.376987 -2.455194
 H 1.788644 -3.978059 1.163769
 H 1.133918 -3.754036 -0.460201
 H 3.329812 -4.920312 -0.584515
 H 4.100158 -3.617094 0.324305
 C -3.119806 2.660724 -1.950294
 H -2.353195 1.898077 -2.158226
 H -3.978859 2.490280 -2.619903
 H -2.699761 3.653833 -2.178789
 C -4.545865 3.689797 -0.134720
 H -5.431865 3.673829 -0.789580
 H -4.894499 3.611412 0.906688
 H -4.071986 4.675305 -0.262472
 C -2.048409 -2.832241 -0.534008
 H -2.852472 -3.318978 -1.109718
 H -1.600591 -2.041915 -1.157033
 H -1.281454 -3.593319 -0.312983
 C -3.146592 -3.306814 1.691591
 H -3.580299 -2.873025 2.605658
 H -3.924484 -3.917307 1.205810
 H -2.340059 -3.994739 1.989829
 S 1.749704 0.591081 -0.884446

$TS_{I \rightarrow II}$

E = -1543.49198700
 C -0.477536 0.232655 -0.500378
 C 0.534089 -0.111145 -1.373943
 C 0.104844 -1.096557 -2.304479
 C -1.200967 -1.363084 -1.948156
 N -1.530760 -0.562252 -0.871345
 H 0.655389 -1.563054 -3.119904
 H -1.927309 -2.051296 -2.379733
 C -2.806722 -0.567332 -0.237615

C -3.772148 0.368789 -0.646149
 C -3.054457 -1.504960 0.780025
 C -5.013812 0.348788 -0.004019
 C -4.311343 -1.489836 1.391499
 C -5.282487 -0.572544 1.002991
 H -5.784011 1.065240 -0.297410
 H -4.533274 -2.204332 2.187034
 H -6.259979 -0.575030 1.491755
 C -3.447314 1.401906 -1.705763
 H -2.618362 0.996548 -2.306751
 C -1.961371 -2.445848 1.246025
 H -1.245441 -2.546461 0.415566
 C 1.601021 1.573636 0.387083
 C 1.894793 0.805802 1.658928
 C 2.001907 3.036127 0.440408
 H 0.234074 1.210826 0.212971
 C 1.209484 1.508913 2.831940
 H 2.979949 0.726177 1.874146
 H 1.499719 -0.219017 1.576611
 C 1.307508 3.711269 1.621305
 H 3.098273 3.164469 0.562089
 H 1.730019 3.544059 -0.499373
 C 1.602657 2.978114 2.924718
 H 1.446485 0.983456 3.771602
 H 0.116589 1.433679 2.694441
 H 1.620634 4.765921 1.691512
 H 0.217954 3.711778 1.442207
 H 1.079623 3.461644 3.765863
 H 2.683637 3.053602 3.146144
 C 3.350182 -0.427304 -1.134025
 C 4.661697 0.251333 -0.758969
 C 3.083274 -1.677507 -0.311932
 H 3.393665 -0.711640 -2.202564
 C 5.821991 -0.732347 -0.894515
 H 4.595230 0.608961 0.282838
 H 4.826795 1.139617 -1.389854
 C 4.242837 -2.656087 -0.485644

H 2.994449 -1.409307 0.750748
H 2.125555 -2.129997 -0.610415
C 5.572658 -2.012960 -0.103894
H 6.758124 -0.251396 -0.569205
H 5.956674 -0.983638 -1.961925
H 4.061599 -3.557723 0.120656
H 4.285541 -2.993096 -1.537253
H 6.401848 -2.721911 -0.257563
H 5.561656 -1.776544 0.975421
C -1.207456 -1.819833 2.421616
H -0.808140 -0.833487 2.144817
H -1.874219 -1.687662 3.289096
H -0.365258 -2.458692 2.732789
C -2.470209 -3.842297 1.588070
H -3.123318 -3.838868 2.475175
H -3.037672 -4.281387 0.753506
H -1.624781 -4.510244 1.814296
C -2.943475 2.688013 -1.045789
H -2.061339 2.483887 -0.421383
H -2.661949 3.432272 -1.807707
H -3.724838 3.131543 -0.407346
C -4.611803 1.679476 -2.651300
H -4.997752 0.752086 -3.101162
H -5.449172 2.180924 -2.140419
H -4.288163 2.344744 -3.466488
S 2.013111 0.841127 -1.170227

//

E = -1543.53560927
C 0.567675 0.251027 0.464720
C -0.556440 -0.240441 1.095074
C -0.198388 -1.471665 1.716937
C 1.132968 -1.685968 1.428245
N 1.586760 -0.635724 0.671797
H -0.834434 -2.126562 2.307559
H 1.799540 -2.503150 1.695473
C 2.885916 -0.527514 0.095530

C 3.909355 0.090082 0.834825
 C 3.086083 -1.029442 -1.201814
 C 5.166551 0.199846 0.234184
 C 4.360288 -0.893847 -1.760606
 C 5.390119 -0.286313 -1.050279
 H 5.983642 0.677609 0.779062
 H 4.548068 -1.269346 -2.769311
 H 6.379710 -0.189001 -1.503358
 C 3.642720 0.669499 2.209388
 H 2.709694 0.217062 2.578823
 C 1.956722 -1.665710 -1.987477
 H 1.108416 -1.797070 -1.298523
 C -2.138093 1.646381 -0.199498
 C -1.873648 1.209832 -1.613332
 C -2.730248 3.018360 -0.017547
 H 0.695460 1.161015 -0.115180
 C -1.078946 2.280450 -2.366516
 H -2.818640 1.036792 -2.174954
 H -1.325957 0.253378 -1.638267
 C -1.903416 4.059189 -0.774581
 H -3.772654 3.073979 -0.404366
 H -2.788650 3.277865 1.052462
 C -1.724082 3.656445 -2.235122
 H -0.977452 2.005112 -3.430290
 H -0.055314 2.327833 -1.952022
 H -2.379266 5.052870 -0.710628
 H -0.911590 4.141328 -0.295308
 H -1.128173 4.411419 -2.774532
 H -2.715081 3.636605 -2.726425
 C -3.256536 -0.833866 1.101617
 C -4.662251 -0.267451 1.215905
 C -3.102877 -1.711598 -0.127869
 H -3.004731 -1.395868 2.019282
 C -5.712253 -1.375311 1.192866
 H -4.824546 0.421970 0.366858
 H -4.754880 0.339727 2.131359
 C -4.139516 -2.833063 -0.129055

H -3.248876 -1.084472 -1.023266
 H -2.081728 -2.119472 -0.187079
 C -5.555456 -2.275404 -0.028204
 H -6.722816 -0.936354 1.221767
 H -5.613149 -1.985915 2.108558
 H -4.030268 -3.446914 -1.038103
 H -3.949632 -3.507573 0.725748
 H -6.292118 -3.094518 0.002806
 H -5.777237 -1.690984 -0.939469
 C 1.492149 -0.739781 -3.112522
 H 1.178005 0.239059 -2.721918
 H 2.296918 -0.567322 -3.845144
 H 0.635962 -1.178750 -3.648063
 C 2.332826 -3.048333 -2.515832
 H 3.149447 -2.997680 -3.253300
 H 2.656624 -3.713449 -1.701215
 H 1.469517 -3.515214 -3.014525
 C 3.410381 2.178835 2.111045
 H 2.573865 2.410992 1.435661
 H 3.173838 2.601796 3.099813
 H 4.306985 2.691235 1.726648
 C 4.742668 0.338546 3.214207
 H 4.923856 -0.745388 3.270672
 H 5.696184 0.826874 2.958270
 H 4.458759 0.689542 4.218050
 S -2.094390 0.659018 1.124879

Sulfid

E = -1309.12987765
 C -0.107550 -0.879241 0.331627
 C 0.874861 -1.495003 -0.424547
 C 0.436133 -1.467317 -1.781774
 C -0.783827 -0.829120 -1.799889
 N -1.107635 -0.481299 -0.510001
 H 0.968214 -1.879352 -2.636621
 H -1.460218 -0.590748 -2.617901
 C -2.249151 0.276585 -0.120747

C -2.134377 1.676973 -0.064693
 C -3.439009 -0.396908 0.203211
 C -3.255972 2.405413 0.341237
 C -4.534073 0.375128 0.602283
 C -4.444012 1.761524 0.672043
 H -3.198003 3.494908 0.399814
 H -5.472506 -0.118211 0.865700
 H -5.310603 2.347506 0.987819
 C -0.831167 2.375841 -0.398856
 H -0.163989 1.627145 -0.852764
 C -3.520864 -1.909401 0.169148
 H -2.634266 -2.272098 -0.372729
 C 3.524390 -0.769909 -0.155521
 C 3.165496 0.500661 0.601668
 C 4.939305 -1.231013 0.176717
 H 3.458257 -0.576099 -1.240793
 C 4.175181 1.610988 0.325781
 H 3.146688 0.268032 1.681575
 H 2.147918 0.822187 0.330040
 C 5.953554 -0.122013 -0.091244
 H 4.977379 -1.518360 1.243313
 H 5.185365 -2.135072 -0.402930
 C 5.596032 1.161716 0.650835
 H 3.911757 2.512191 0.903524
 H 4.118087 1.898670 -0.739901
 H 6.963747 -0.461831 0.188976
 H 5.985514 0.082784 -1.176644
 H 6.318724 1.957991 0.409203
 H 5.678466 0.985770 1.738739
 H -0.158547 -0.691506 1.401461
 C -3.454849 -2.478807 1.587331
 H -2.535094 -2.161631 2.100762
 H -4.311992 -2.139795 2.191250
 H -3.468543 -3.579647 1.566175
 C -4.753466 -2.410350 -0.579406
 H -5.687750 -2.140682 -0.061977
 H -4.800929 -1.995018 -1.597285

H -4.730964 -3.507928 -0.660117
 C -0.149275 2.886623 0.871310
 H -0.766476 3.646481 1.377158
 H 0.027954 2.068681 1.585204
 H 0.823809 3.344291 0.633192
 C -1.021442 3.494187 -1.420990
 H -1.504976 3.121106 -2.336202
 H -1.640697 4.313796 -1.023339
 H -0.048147 3.925554 -1.701368
 S 2.376235 -2.156208 0.200846

Cyclohexen

E = -234.450673317
 C 0.692381 1.183518 0.318448
 C 1.489993 -0.044822 -0.109326
 C -1.489992 -0.044904 0.109303
 C -0.692443 1.183495 -0.318425
 H 1.880551 0.091545 -1.136077
 H 2.385182 -0.162303 0.525139
 H 0.582060 1.178539 1.417340
 H 1.240795 2.104016 0.063182
 H -2.385150 -0.162432 -0.525197
 H -1.880600 0.091416 1.136042
 H -0.582129 1.178579 -1.417317
 H -1.240905 2.103951 -0.063110
 C 0.666567 -1.298212 -0.057064
 C -0.666497 -1.298245 0.057030
 H 1.198800 -2.254117 -0.114244
 H -1.198662 -2.254174 0.114447

TS_{I→IV}

E = -1543.48380362
 C -0.250415 0.044012 0.458254
 C 0.506105 0.184491 1.634053
 C -0.291333 -0.008291 2.804058
 C -1.548950 -0.278683 2.323602

N -1.506904 -0.232259 0.938735
 H 0.016633 0.026268 3.847576
 H -2.466355 -0.542586 2.847776
 C -2.631943 -0.501608 0.109836
 C -2.772918 -1.783540 -0.453999
 C -3.565430 0.521048 -0.125987
 C -3.884427 -2.023049 -1.265867
 C -4.667922 0.232793 -0.937152
 C -4.827463 -1.026758 -1.502724
 H -4.017701 -3.007717 -1.719373
 H -5.409974 1.011119 -1.133288
 H -5.693044 -1.235237 -2.136497
 C -1.722466 -2.851864 -0.226400
 H -1.171988 -2.570149 0.684919
 C -3.387801 1.904611 0.466122
 H -2.417365 1.912673 0.983847
 C 1.774933 2.613702 0.404257
 C 3.036404 2.965054 -0.343028
 C 0.550842 2.518345 -0.365198
 H 1.693458 3.145781 1.358940
 C 3.206421 2.313876 -1.725733
 H 3.930000 2.816670 0.284556
 H 2.964206 4.060068 -0.480640
 C 0.700174 2.676783 -1.869402
 H 0.119933 1.348387 -0.224817
 H -0.274956 3.095742 0.072132
 C 1.885691 1.860341 -2.362167
 H 3.899232 1.460708 -1.664928
 H 3.703889 3.043962 -2.383542
 H -0.221562 2.335388 -2.367945
 H 0.831051 3.739935 -2.148835
 H 1.965526 1.899952 -3.459426
 H 1.681345 0.805485 -2.109922
 C 2.947093 -0.404095 0.355409
 C 4.458034 -0.233452 0.479303
 C 2.538691 -1.846136 0.621950
 H 2.605409 -0.117129 -0.649421

C 5.180723 -1.167029 -0.488814
 H 4.754655 -0.468925 1.516679
 H 4.756165 0.810391 0.298104
 C 3.254241 -2.779699 -0.349708
 H 2.798090 -2.110338 1.662549
 H 1.448653 -1.939434 0.523807
 C 4.768721 -2.619696 -0.279687
 H 6.270254 -1.050840 -0.373663
 H 4.944210 -0.864548 -1.525198
 H 2.964274 -3.821789 -0.140341
 H 2.906573 -2.563977 -1.376018
 H 5.261786 -3.267837 -1.021896
 H 5.122757 -2.955630 0.711593
 C -3.336443 2.976980 -0.620898
 H -2.551136 2.755201 -1.358849
 H -4.292627 3.055711 -1.162480
 H -3.123883 3.964431 -0.181322
 C -4.465841 2.207401 1.505993
 H -5.471283 2.205583 1.054888
 H -4.460117 1.458799 2.312395
 H -4.303797 3.197738 1.960190
 C -0.717619 -2.854599 -1.380894
 H -1.214459 -3.105000 -2.332442
 H -0.252387 -1.862189 -1.477927
 H 0.076570 -3.598777 -1.206052
 C -2.317387 -4.237951 0.003075
 H -3.060193 -4.229790 0.815168
 H -2.809530 -4.632096 -0.900314
 H -1.523853 -4.951483 0.274136
 S 2.128224 0.747085 1.534076

1.1.3 Energien mit einer SOCy₂-substituierten Oniumgruppe

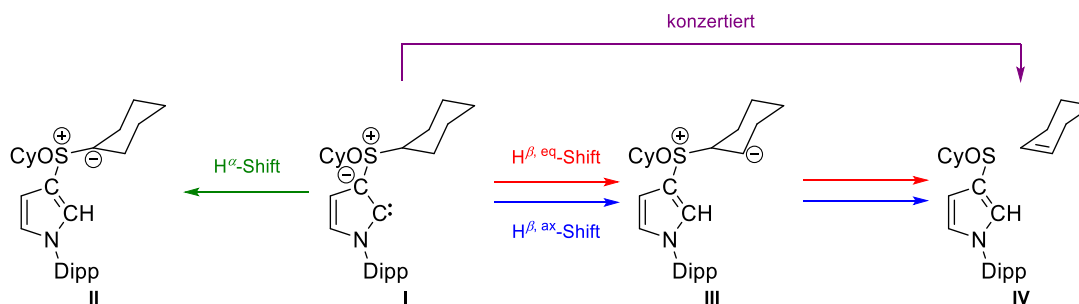


Tabelle 1.2. Energien der Verbindungen.

	Corr(H)	Corr(G)	E(SCF)	E(PCM)	ΔG in hartree	ΔG in kJ/mol
I	0.673163	0.577060	-1618.67944897	-1618.69045880	–	–
TS_{I→II}	0.667950	0.572916	-1618.65878245	-1618.66703332	0.019281	50.623526
II	0.672801	0.575261	-1618.70277293	-1618.71216038	-0.023501	-61.700773
TS_{I→III}^{ax}	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–
III^{ax}	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–
TS_{III→IV}^{ax}	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–
TS_{I→III}^{eq}	0.666732	0.571450	-1618.63949720	-1618.64672324	0.038126	100.098658
III^{eq}	0.671025	0.576933	-1618.64067585	-1618.64943401	0.040898	107.377148
TS_{III→IV}^{eq}	0.669818	0.575899	-1618.63594209	-1618.64392206	0.045376	119.134005
Cyclohexen	0.153142	0.118108	-234.450673317	-234.451720805	-0.080544	-211.469152
Sulfoxid	0.516688	0.431474	-1384.28228984	-1384.29180433		
TS_{I→IV}	0.667031	0.570910	-1618.63627910	-1618.64521030	0.039099	102.653112

1.1.4 Koordinaten mit einer SOCy₂-substituierten Oniumgruppe

I

E = -1618.67944897

C 0.709991 0.393210 -0.259761

C -0.291399 0.112313 -1.214331

C 0.166149 -0.757266 -2.264895

C 1.469182 -1.009244 -1.939962

N 1.760598 -0.325760 -0.763442

H -0.367406 -1.121857 -3.141223

H 2.223048 -1.609607 -2.447733

C 3.035709 -0.414583 -0.129433

C 3.235155 -1.400811 0.851680

C 4.052021 0.477301 -0.512679

C 4.493875 -1.480195 1.454682

C 5.295429 0.359654 0.115355
 C 5.515636 -0.610390 1.088165
 H 4.678625 -2.234327 2.222634
 H 6.105078 1.038454 -0.159665
 H 6.495026 -0.688472 1.566887
 C 2.092274 -2.296103 1.286919
 H 1.383155 -2.343698 0.445145
 C 3.769686 1.573958 -1.519653
 H 2.982484 1.199406 -2.193144
 C -2.992830 -0.697813 -1.119747
 C -2.584290 -1.922751 -0.315721
 C -4.434654 -0.270547 -0.878847
 H -2.876026 -0.922452 -2.197187
 C -3.531196 -3.074366 -0.649327
 H -2.644476 -1.705985 0.760765
 H -1.539363 -2.187340 -0.535879
 C -5.371173 -1.435630 -1.190824
 H -4.558851 0.024906 0.177048
 H -4.669229 0.606958 -1.498808
 C -4.988584 -2.690298 -0.412410
 H -3.260928 -3.957840 -0.050141
 H -3.394114 -3.362771 -1.706914
 H -6.410352 -1.143787 -0.972003
 H -5.329949 -1.648646 -2.273843
 H -5.653424 -3.525124 -0.685062
 H -5.144302 -2.509823 0.666710
 C -1.851002 1.553146 0.564731
 C -2.851457 2.699313 0.576158
 C -1.967830 0.642988 1.776837
 H -0.806265 1.923520 0.540135
 C -2.645475 3.520503 1.846839
 H -3.882024 2.304896 0.553506
 H -2.726591 3.315846 -0.324605
 C -1.758048 1.482411 3.035207
 H -2.966072 0.174813 1.813380
 H -1.209052 -0.149346 1.718573
 C -2.730237 2.655104 3.100147

H -3.387848 4.333314 1.884817
H -1.653837 4.004110 1.802946
H -1.860193 0.841733 3.925298
H -0.719427 1.856417 3.036453
H -2.535883 3.263541 3.997683
H -3.760498 2.268143 3.204930
C 3.200490 2.798943 -0.798586
H 2.297306 2.525002 -0.232564
H 3.941209 3.212598 -0.094816
H 2.935462 3.587694 -1.520782
C 4.975332 1.940242 -2.377787
H 5.767775 2.429459 -1.789090
H 5.413407 1.055248 -2.864364
H 4.677300 2.649412 -3.165098
C 1.355560 -1.651281 2.463654
H 2.015699 -1.575473 3.342981
H 1.024861 -0.638377 2.188385
H 0.474013 -2.248482 2.749968
C 2.524994 -3.722728 1.607472
H 3.081960 -4.174568 0.772546
H 3.164163 -3.769191 2.503462
H 1.643802 -4.351327 1.809542
S -1.861003 0.728044 -1.052652
O -2.357031 1.654271 -2.093457

TS_{I→II}

E = -1618.65878245
C 0.556930 -0.212583 -0.392223
C -0.485729 0.081705 -1.263019
C -0.058521 0.966720 -2.296206
C 1.265407 1.206530 -2.017724
N 1.614309 0.497634 -0.877399
H -0.624011 1.366829 -3.135392
H 1.999969 1.818003 -2.540803
C 2.917439 0.519627 -0.297041
C 3.833728 -0.483665 -0.654928
C 3.235341 1.541839 0.613465

C 5.102767 -0.443367 -0.069744
 C 4.517198 1.542333 1.170601
 C 5.442363 0.560102 0.831679
 H 5.837777 -1.209646 -0.324360
 H 4.795658 2.321238 1.883421
 H 6.440274 0.576372 1.276814
 C 3.431335 -1.602988 -1.593628
 H 2.592300 -1.230594 -2.201969
 C 2.192501 2.559614 1.030897
 H 1.447137 2.612290 0.221951
 C -1.540349 -1.375086 0.693615
 C -1.781764 -0.459502 1.877559
 C -2.011369 -2.801211 0.899316
 H -0.146032 -1.083928 0.438968
 C -1.102297 -1.064164 3.107230
 H -2.859792 -0.319507 2.096809
 H -1.355298 0.538474 1.686225
 C -1.322721 -3.375844 2.134677
 H -3.109450 -2.855139 1.049656
 H -1.787572 -3.407137 0.010234
 C -1.554761 -2.497337 3.359008
 H -1.300233 -0.433361 3.989233
 H -0.010000 -1.050163 2.946558
 H -1.683944 -4.400223 2.321863
 H -0.238637 -3.449985 1.938484
 H -1.033492 -2.912600 4.236821
 H -2.632353 -2.500156 3.607535
 C -3.284990 0.453899 -1.032644
 C -4.599494 -0.208525 -0.640295
 C -3.057254 1.783068 -0.330183
 H -3.273258 0.607853 -2.128426
 C -5.762946 0.740117 -0.915614
 H -4.568748 -0.458543 0.434658
 H -4.713666 -1.153073 -1.191646
 C -4.225283 2.719709 -0.634358
 H -2.997960 1.623919 0.756771
 H -2.099898 2.224597 -0.645869

C -5.559815 2.093362 -0.241572
 H -6.705599 0.278064 -0.582497
 H -5.857128 0.885380 -2.006623
 H -4.077602 3.676924 -0.109926
 H -4.232937 2.954189 -1.714018
 H -6.389731 2.773087 -0.492111
 H -5.587150 1.960689 0.855129
 C 1.466478 2.070486 2.286407
 H 1.024936 1.077398 2.119499
 H 2.163383 1.994300 3.136557
 H 0.658875 2.764889 2.568554
 C 2.759418 3.962151 1.224662
 H 3.444530 4.015509 2.085479
 H 3.309323 4.302824 0.334316
 H 1.945386 4.677748 1.417319
 C 2.913756 -2.799075 -0.790288
 H 2.067130 -2.505640 -0.152618
 H 2.573595 -3.601631 -1.463403
 H 3.707236 -3.207221 -0.143421
 C 4.545815 -2.015148 -2.550274
 H 4.944552 -1.151635 -3.104076
 H 5.385485 -2.496433 -2.024166
 H 4.165434 -2.743598 -3.282444
 S -1.942709 -0.772969 -0.894804
 O -2.304301 -1.846613 -1.845833

//

E = -1618.70277293
 C -0.679137 -0.199119 -0.306250
 C 0.494829 -0.824816 0.071062
 C 0.167372 -1.808583 1.048981
 C -1.192174 -1.724509 1.244860
 N -1.691416 -0.746290 0.417186
 H 0.842492 -2.494536 1.553626
 H -1.855002 -2.277110 1.906808
 C -3.057031 -0.336417 0.350862
 C -3.908726 -0.972746 -0.567861

C -3.488373 0.696924 1.199602
 C -5.235307 -0.536292 -0.626410
 C -4.824036 1.097379 1.102543
 C -5.688284 0.487841 0.199051
 H -5.924532 -1.004633 -1.332447
 H -5.192397 1.901606 1.743566
 H -6.728760 0.815638 0.136712
 C -3.399189 -2.055456 -1.497689
 H -2.428434 -2.396393 -1.106517
 C -2.537035 1.385408 2.157905
 H -1.612121 0.789430 2.190746
 C 2.077185 1.114802 -1.014481
 C 1.632149 2.141877 -0.011001
 C 2.924474 1.611391 -2.154950
 H -0.842551 0.591507 -1.033924
 C 0.939060 3.301097 -0.730322
 H 2.496951 2.561083 0.548151
 H 0.963493 1.708245 0.749169
 C 2.206119 2.767288 -2.852099
 H 3.912572 1.981365 -1.803537
 H 3.118296 0.796349 -2.867373
 C 1.805132 3.853512 -1.858510
 H 0.688561 4.101162 -0.012920
 H -0.015384 2.940065 -1.154403
 H 2.846156 3.194053 -3.642844
 H 1.301522 2.370731 -3.345293
 H 1.281157 4.674718 -2.375125
 H 2.719527 4.297472 -1.422037
 C 3.226624 -1.285852 0.395445
 C 4.572913 -1.313559 -0.315412
 C 3.296917 -0.516301 1.705035
 H 2.866743 -2.318363 0.547636
 C 5.661015 -1.871119 0.597089
 H 4.834053 -0.281051 -0.612249
 H 4.484342 -1.896845 -1.242150
 C 4.384229 -1.080404 2.616598
 H 3.526779 0.538219 1.471224

H 2.321904 -0.518098 2.217172
 C 5.737818 -1.109646 1.915723
 H 6.632711 -1.844650 0.078112
 H 5.449063 -2.935842 0.803318
 H 4.440234 -0.486869 3.543396
 H 4.108339 -2.106419 2.920877
 H 6.501544 -1.554479 2.573921
 H 6.063212 -0.072463 1.716862
 C -2.166240 2.776176 1.640731
 H -1.721834 2.725582 0.636189
 H -3.052464 3.428298 1.583871
 H -1.434011 3.256931 2.307958
 C -3.090648 1.443702 3.579771
 H -3.992411 2.072785 3.643601
 H -3.353436 0.441191 3.949516
 H -2.342975 1.874378 4.263286
 C -3.152146 -1.484492 -2.895502
 H -2.437036 -0.649316 -2.866786
 H -2.739458 -2.256501 -3.562924
 H -4.088480 -1.112102 -3.341276
 C -4.323914 -3.269156 -1.544836
 H -4.511548 -3.671743 -0.538049
 H -5.298145 -3.027698 -1.998338
 H -3.871732 -4.067567 -2.152556
 S 2.009959 -0.503551 -0.770023
 O 2.177755 -1.317610 -1.996814

$TS_{I \rightarrow III}^{eq}$

E = -1618.63949720
 C -0.486521 0.075934 0.281820
 C 0.436141 -0.028665 1.322141
 C -0.193159 -0.456818 2.525877
 C -1.519345 -0.591341 2.191870
 N -1.676952 -0.261902 0.855918
 H 0.268498 -0.619207 3.496605
 H -2.373135 -0.899406 2.792687
 C -2.904551 -0.393231 0.139871

C -3.181784 -1.620064 -0.487937
 C -3.780548 0.702425 0.082457
 C -4.383992 -1.730858 -1.191794
 C -4.971473 0.543268 -0.632374
 C -5.270405 -0.660547 -1.261873
 H -4.631588 -2.668571 -1.693314
 H -5.675037 1.375408 -0.699796
 H -6.206472 -0.766069 -1.815759
 C -2.178801 -2.756739 -0.446525
 H -1.556134 -2.605885 0.449741
 C -3.403514 2.027655 0.712514
 H -2.684695 1.810245 1.518267
 C 2.722418 -0.958256 -0.015668
 C 4.184646 -0.716448 -0.365792
 C 2.509783 -2.282637 0.711618
 H 2.075650 -0.889246 -0.906046
 C 4.745013 -1.891624 -1.164401
 H 4.752680 -0.584067 0.570668
 H 4.287387 0.211076 -0.946047
 C 3.074722 -3.438433 -0.107343
 H 3.018231 -2.230515 1.689755
 H 1.437579 -2.432294 0.909049
 C 4.544143 -3.218932 -0.444879
 H 5.812876 -1.715846 -1.368409
 H 4.242883 -1.929576 -2.147467
 H 2.938013 -4.379874 0.447604
 H 2.492702 -3.539237 -1.041045
 H 4.926049 -4.048869 -1.060277
 H 5.135725 -3.222202 0.488031
 C 1.992389 1.910813 0.100263
 C 3.293912 2.702446 0.063106
 C 1.289727 1.636923 -1.201831
 H 1.298784 2.451397 0.779154
 C 2.956702 4.046441 -0.590772
 H 4.044270 2.177855 -0.548609
 H 3.720141 2.844831 1.070152
 C 1.000261 2.995358 -1.826242

H 1.981504 1.081370 -1.869208
 H -0.006608 0.704472 -0.698779
 C 2.250734 3.880205 -1.936846
 H 3.876273 4.643544 -0.702097
 H 2.301465 4.615631 0.094008
 H 0.544933 2.868811 -2.822898
 H 0.245565 3.534228 -1.219163
 H 2.002389 4.875391 -2.346242
 H 2.951229 3.413773 -2.653619
 C -2.684905 2.904702 -0.316076
 H -1.799861 2.398382 -0.727073
 H -3.355310 3.148156 -1.156017
 H -2.354693 3.851133 0.140710
 C -4.587888 2.757754 1.337120
 H -5.307699 3.101496 0.577512
 H -5.128914 2.117682 2.050487
 H -4.239772 3.651503 1.876947
 C -1.250349 -2.688452 -1.662255
 H -1.817682 -2.830358 -2.596154
 H -0.743412 -1.713817 -1.715667
 H -0.481668 -3.476631 -1.608339
 C -2.831344 -4.129988 -0.323033
 H -3.523199 -4.174256 0.531599
 H -3.395432 -4.402059 -1.229107
 H -2.061924 -4.904013 -0.179321
 S 2.089016 0.364232 1.057330
 O 2.883845 0.429484 2.300085

III^{eq}

E = -1618.64067585
 C -0.295112 -0.032770 1.083618
 C 0.367825 -0.278149 2.319694
 C 1.698754 -0.414162 2.003480
 H -0.097226 -0.336483 3.300241
 H 2.556534 -0.640685 2.631229
 C -2.712118 -1.004026 -0.031941
 C -2.375134 -2.330095 0.638804

C -4.215189 -0.781836 -0.149237
 H -2.204621 -0.887501 -1.003700
 C -3.037943 -3.485387 -0.104788
 H -2.733586 -2.297817 1.682343
 H -1.284294 -2.469461 0.674520
 C -4.868683 -1.951526 -0.881286
 H -4.637022 -0.682134 0.865491
 H -4.416272 0.157488 -0.683925
 C -4.544122 -3.285891 -0.221856
 H -2.808855 -4.431445 0.410801
 H -2.597865 -3.565431 -1.114934
 H -5.957645 -1.792468 -0.923642
 H -4.514608 -1.963976 -1.927321
 H -4.998433 -4.113950 -0.788894
 H -4.993196 -3.312936 0.787072
 C -1.633627 1.521018 -1.398642
 C -3.281539 2.730989 0.187976
 C -1.325890 2.839976 -2.093057
 H -2.507799 1.060348 -1.906008
 C -2.979916 4.041904 -0.554787
 H -4.158388 2.238441 -0.262043
 H -3.505498 2.920758 1.252320
 C -2.506547 3.825650 -1.996146
 H -1.067227 2.684108 -3.154816
 H -0.433748 3.315416 -1.635261
 H -3.868558 4.693691 -0.532566
 H -2.192453 4.580061 0.005041
 H -2.258746 4.805191 -2.444974
 H -3.345787 3.416249 -2.587878
 C 0.638759 -0.033986 0.062177
 H 0.455117 0.212795 -0.985618
 C -2.034336 1.883442 -0.020358
 H -1.197638 2.405831 0.491730
 N 1.847782 -0.265240 0.641314
 C 3.082072 -0.343340 -0.072936
 C 3.912112 0.793748 -0.120089
 C 3.416823 -1.549553 -0.721046

C 5.115447 0.684589 -0.826738
 C 4.632590 -1.594334 -1.412022
 C 5.478438 -0.493829 -1.464836
 H 5.773801 1.555903 -0.877581
 H 4.913450 -2.521057 -1.919372
 H 6.422452 -0.553421 -2.011421
 C 3.630997 2.127567 0.560112
 H 4.277383 2.839477 0.019902
 C 2.208530 2.676910 0.449462
 H 1.803344 2.578695 -0.567987
 H 1.511504 2.185510 1.142970
 H 2.216116 3.747880 0.704489
 C 4.113489 2.126801 2.013226
 H 3.486462 1.476967 2.640735
 H 5.154708 1.779834 2.091707
 H 4.058764 3.143317 2.433167
 C 2.543984 -2.797039 -0.777708
 H 3.238928 -3.592747 -1.094589
 C 1.936198 -3.267941 0.542311
 H 2.678653 -3.273974 1.353966
 H 1.088016 -2.647961 0.863719
 H 1.563156 -4.297044 0.422978
 C 1.479996 -2.695957 -1.874722
 H 0.706815 -1.956697 -1.620556
 H 1.923263 -2.403167 -2.837919
 H 0.981314 -3.668821 -2.009774
 S -1.986666 0.334365 0.959364
 O -2.606662 0.330176 2.305667

TS_{III→IV}

E = -1618.63594209
 C -0.321460 -0.060201 1.148562
 C 0.373782 -0.294720 2.367960
 C 1.699448 -0.423131 2.025443
 H -0.074203 -0.360683 3.356053
 H 2.570634 -0.649033 2.634487
 C -2.688119 -1.008356 -0.013664

C -2.342295 -2.371191 0.568454
 C -4.191904 -0.802547 -0.146910
 H -2.170884 -0.818833 -0.969137
 C -2.976538 -3.485554 -0.258078
 H -2.715047 -2.408800 1.607011
 H -1.250208 -2.496659 0.613410
 C -4.816347 -1.927876 -0.967614
 H -4.631858 -0.779955 0.865050
 H -4.400941 0.170728 -0.615453
 C -4.483261 -3.298202 -0.390462
 H -2.744735 -4.460256 0.200186
 H -2.518220 -3.496732 -1.263479
 H -5.906919 -1.782561 -1.020512
 H -4.442967 -1.867055 -2.005404
 H -4.916142 -4.093675 -1.017907
 H -4.949453 -3.396024 0.606247
 C -1.659847 1.653978 -1.388592
 C -3.294532 2.813768 0.126535
 C -1.156474 2.941598 -2.021113
 H -2.533586 1.282122 -1.959455
 C -2.913727 4.147290 -0.567329
 H -4.145037 2.346862 -0.395849
 H -3.581545 2.988871 1.178871
 C -2.303462 3.979869 -1.967786
 H -0.824753 2.807797 -3.065747
 H -0.283620 3.337077 -1.466737
 H -3.799688 4.801256 -0.616579
 H -2.186161 4.667301 0.081813
 H -1.975462 4.969519 -2.335542
 H -3.095373 3.640997 -2.659761
 C 0.593385 -0.053721 0.109343
 H 0.422341 0.169545 -0.941966
 C -2.041546 2.005303 -0.058360
 H -1.215909 2.495668 0.495280
 N 1.819437 -0.277306 0.661864
 C 3.037060 -0.360414 -0.079184
 C 3.874960 0.770744 -0.139598

C 3.352094 -1.566839 -0.737811
 C 5.060884 0.657758 -0.874498
 C 4.550561 -1.615032 -1.458362
 C 5.401108 -0.519185 -1.527540
 H 5.723843 1.524938 -0.935446
 H 4.815004 -2.541920 -1.974190
 H 6.331468 -0.581853 -2.096737
 C 3.620117 2.102573 0.554506
 H 4.261052 2.812512 0.005193
 C 2.200240 2.662349 0.474300
 H 1.781249 2.577035 -0.538547
 H 1.510174 2.166771 1.171693
 H 2.218370 3.730592 0.740270
 C 4.132094 2.090672 1.997399
 H 3.510871 1.445668 2.635339
 H 5.170811 1.731990 2.053069
 H 4.097555 3.106226 2.421845
 C 2.479046 -2.815395 -0.768977
 H 3.166911 -3.610558 -1.102267
 C 1.909299 -3.282627 0.569023
 H 2.676392 -3.290467 1.357417
 H 1.073967 -2.659085 0.915798
 H 1.528991 -4.310479 0.462383
 C 1.385471 -2.722635 -1.837158
 H 0.613175 -1.991006 -1.560106
 H 1.800042 -2.425960 -2.811950
 H 0.890966 -3.699343 -1.958940
 S -2.028845 0.291271 1.082051
 O -2.619482 0.114828 2.441685

Sulfoxid

E = -1384.28228984
 C 0.185824 -0.687013 -0.236226
 C -0.854773 -1.093154 0.573701
 C -0.476202 -0.864856 1.926057
 C 0.781548 -0.300722 1.886229
 N 1.171679 -0.201053 0.573092

H -1.052787 -1.092440 2.820132
 H 1.441459 0.034175 2.683497
 C 2.413853 0.332373 0.118644
 C 2.496053 1.710345 -0.147219
 C 3.500807 -0.539998 -0.058718
 C 3.715749 2.208766 -0.612954
 C 4.699259 0.006227 -0.527701
 C 4.806053 1.365432 -0.802352
 H 3.813410 3.273946 -0.833799
 H 5.562760 -0.644758 -0.681924
 H 5.751151 1.773271 -1.169045
 C 1.290461 2.614782 0.014997
 H 0.557659 2.075403 0.634728
 C 3.370743 -2.026731 0.203517
 H 2.437289 -2.180596 0.766093
 C -3.372553 -0.355398 -0.194042
 C -4.573264 -0.706358 -1.061772
 C -3.782171 0.154855 1.177798
 H -2.736616 0.382664 -0.714144
 C -5.512319 0.488456 -1.189767
 H -5.115892 -1.551565 -0.598221
 H -4.218426 -1.054308 -2.042838
 C -4.734879 1.342469 1.048142
 H -4.284451 -0.660932 1.729534
 H -2.893765 0.441564 1.761927
 C -5.941987 1.007969 0.178292
 H -6.391614 0.211316 -1.793025
 H -4.998079 1.295405 -1.742129
 H -5.057352 1.673668 2.048461
 H -4.188479 2.192086 0.600590
 H -6.590629 1.892090 0.069264
 H -6.550579 0.236373 0.683947
 H 0.281327 -0.741402 -1.317557
 C 3.242030 -2.792949 -1.114293
 H 2.377867 -2.443224 -1.697880
 H 4.143287 -2.666435 -1.735540
 H 3.107337 -3.869334 -0.926132

C 4.514052 -2.569175 1.057737
 H 5.481595 -2.513506 0.534322
 H 4.609716 -2.012145 2.001923
 H 4.337194 -3.627607 1.302682
 C 0.635080 2.877445 -1.342492
 H 1.325560 3.406690 -2.018680
 H 0.339653 1.937796 -1.831976
 H -0.267568 3.497543 -1.225604
 C 1.625649 3.918354 0.734778
 H 2.109841 3.729224 1.704616
 H 2.298874 4.556254 0.140740
 H 0.708473 4.498488 0.918920
 S -2.307694 -1.860141 -0.099018
 O -1.973869 -2.178348 -1.536797

Cyclohexen

E = -234.450673317
 C 0.692381 1.183518 0.318448
 C 1.489993 -0.044822 -0.109326
 C -1.489992 -0.044904 0.109303
 C -0.692443 1.183495 -0.318425
 H 1.880551 0.091545 -1.136077
 H 2.385182 -0.162303 0.525139
 H 0.582060 1.178539 1.417340
 H 1.240795 2.104016 0.063182
 H -2.385150 -0.162432 -0.525197
 H -1.880600 0.091416 1.136042
 H -0.582129 1.178579 -1.417317
 H -1.240905 2.103951 -0.063110
 C 0.666567 -1.298212 -0.057064
 C -0.666497 -1.298245 0.057030
 H 1.198800 -2.254117 -0.114244
 H -1.198662 -2.254174 0.114447

TS_{I→IV}

E = -1618.63627910

C -0.303517 0.047773 -0.408741
 C 0.507825 -0.040717 -1.554041
 C -0.210856 0.242334 -2.754758
 C -1.475466 0.544558 -2.317198
 N -1.515747 0.414182 -0.935990
 H 0.155845 0.240032 -3.778339
 H -2.353426 0.873698 -2.870597
 C -2.695387 0.613538 -0.163044
 C -2.868916 1.833185 0.515969
 C -3.647693 -0.417943 -0.099598
 C -4.034640 2.003509 1.267276
 C -4.803877 -0.197956 0.655881
 C -4.997035 1.000354 1.333603
 H -4.194597 2.938814 1.808304
 H -5.562674 -0.982002 0.718454
 H -5.904974 1.154332 1.921975
 C -1.799905 2.906059 0.475551
 H -1.165440 2.694095 -0.398928
 C -3.441056 -1.732672 -0.825279
 H -2.415688 -1.726932 -1.223783
 C 3.093023 0.728681 -0.768626
 C 2.597490 1.440116 0.477112
 C 4.557131 0.322984 -0.691359
 H 2.952304 1.386188 -1.646113
 C 3.462709 2.672056 0.732046
 H 2.659720 0.764363 1.346748
 H 1.535533 1.702536 0.367727
 C 5.409381 1.563142 -0.428348
 H 4.703335 -0.400713 0.127345
 H 4.850349 -0.177103 -1.625804
 C 4.943240 2.312408 0.816400
 H 3.129870 3.171155 1.655910
 H 3.307684 3.397816 -0.086350
 H 6.467503 1.272182 -0.333272
 H 5.349457 2.234347 -1.303623
 H 5.550092 3.219722 0.965450
 H 5.110968 1.677521 1.705385

C 1.776512 -2.395243 0.057261
 C 2.865343 -2.281712 1.106802
 C 0.389809 -2.438176 0.470248
 H 2.053246 -2.991393 -0.823415
 C 2.492224 -3.019134 2.389766
 H 3.013085 -1.226031 1.379855
 H 3.822277 -2.635592 0.694115
 C 0.046575 -2.803452 1.913404
 H -0.006640 -1.255710 0.330264
 H -0.236924 -2.976218 -0.253767
 C 1.160279 -2.493221 2.903517
 H 3.291255 -2.880879 3.135559
 H 2.419069 -4.104899 2.201460
 H -0.880219 -2.285689 2.213595
 H -0.176449 -3.884517 1.967279
 H 0.917938 -2.927669 3.886330
 H 1.237989 -1.401437 3.054273
 C -3.558216 -2.928765 0.117610
 H -2.867477 -2.834444 0.968270
 H -4.577403 -3.033886 0.522225
 H -3.318268 -3.862578 -0.414645
 C -4.395400 -1.861652 -2.012483
 H -5.446393 -1.864334 -1.681120
 H -4.269364 -1.026616 -2.717514
 H -4.212293 -2.799157 -2.560668
 C -0.911307 2.805524 1.717272
 H -1.493471 2.998312 2.633115
 H -0.472175 1.799752 1.791296
 H -0.093151 3.542874 1.673845
 C -2.369318 4.311221 0.304092
 H -3.025883 4.375686 -0.576742
 H -2.951373 4.631902 1.182621
 H -1.553474 5.039214 0.174930
 S 2.058160 -0.696699 -1.298809
 O 2.699525 -1.251205 -2.522597

1.1.5 Energien mit einer PCy₃-substituierten Oniumgruppe

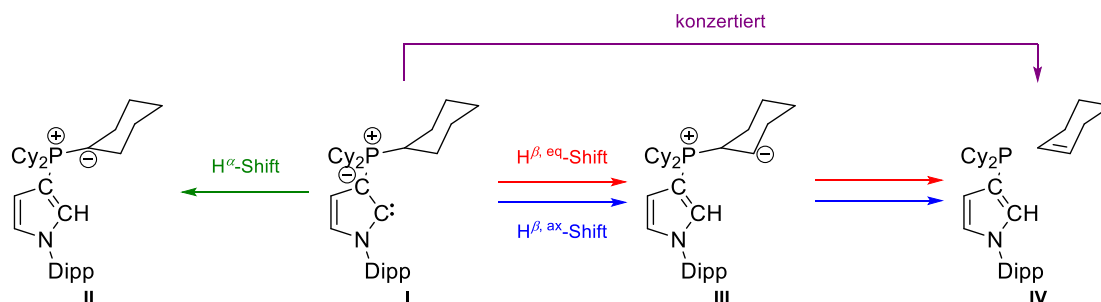


Tabelle 1.3. Energien der Verbindungen.

	Corr(H)	Corr(G)	E(SCF)	E(PCM)	ΔG in hartree	ΔG in kJ/mol
I	0.835657	0.728915	-1721.81892539	-1721.82900730	–	–
TS_{I→II}	0.830404	0.723482	-1721.79616744	-1721.80168165	0.021893	57.479153
II	0.834902	0.726191	-1721.84442875	-1721.84910648	-0.022823	-59.922259
TS_{I→II}^{ax}	0.829046	0.721638	-1721.77887401	-1721.79099225	0.030738	80.702750
III^{ax}	0.833301	0.724805	-1721.78592159	-1721.79396590	0.030931	81.210391
TS_{III→IV}^{ax}	0.832228	0.725315	-1721.78434078	-1721.79099225	0.034415	90.356714
TS_{I→III}^{eq}	0.829523	0.723301	-1721.77206284	-1721.77937445	0.044019	115.571491
III^{eq}	0.833633	0.725718	-1721.77995851	-1721.78816014	0.037650	98.850495
TS_{III→IV}^{eq}	0.832228	0.725315	-1721.78434078	-1721.75911474	0.067127	176.240783
Cyclohexen	0.153142	0.118108	-234.450673317	-234.451720805	-0.043406	-113.963096
Phonphan	0.679533	0.582753	-1487.38698112	-1487.39263874		
TS_{I→IV}	0.829148	0.721273	-1721.76364249	-1721.77015748	0.051208	134.446131

1.1.6 Koordinaten mit einer PCy₃-substituierten Oniumgruppe

I

E = -1721.81892539

C -1.073732 -0.110906 -0.020639

C 0.017230 -0.105214 0.880673

C -0.427333 -0.090379 2.250703

C -1.794768 -0.114160 2.180541

N -2.147059 -0.125932 0.837858

H 0.164132 -0.071415 3.166875

H -2.548989 -0.131488 2.966521

C -3.503718 -0.138689 0.404607

C -4.128528 -1.372799 0.154434

C -4.178144 1.084216 0.243720

C -5.463792 -1.360959 -0.259595

C -5.512826 1.049415 -0.170703
 C -6.151599 -0.161826 -0.417001
 H -5.974871 -2.304521 -0.462187
 H -6.061650 1.983936 -0.305232
 H -7.196468 -0.171238 -0.737694
 C -3.340949 -2.662765 0.263732
 H -2.539122 -2.485087 0.998067
 C -3.440717 2.394063 0.437959
 H -2.626719 2.200153 1.154513
 P 1.633439 0.103377 0.263309
 C 2.864147 -0.878831 1.222823
 C 2.294698 -2.213428 1.719511
 C 4.197916 -1.102242 0.500920
 H 3.054599 -0.244342 2.111157
 C 3.294932 -2.919237 2.629001
 H 2.067191 -2.855203 0.852238
 H 1.338006 -2.052914 2.235654
 C 5.197740 -1.805606 1.414211
 H 4.019726 -1.730951 -0.387618
 H 4.619964 -0.156625 0.131657
 C 4.641246 -3.122224 1.943317
 H 2.880097 -3.885193 2.958227
 H 3.438304 -2.316400 3.544284
 H 6.142550 -1.974148 0.872883
 H 5.440369 -1.141040 2.263342
 H 5.359675 -3.592713 2.633566
 H 4.515223 -3.824865 1.099794
 C 2.070413 1.881671 0.502759
 C 3.532483 2.316056 0.394920
 C 1.145121 2.761836 -0.343670
 H 1.760045 2.009896 1.558905
 C 3.677120 3.796287 0.746232
 H 3.905358 2.145219 -0.629046
 H 4.166831 1.717661 1.066892
 C 1.306469 4.231624 0.023537
 H 1.387878 2.629979 -1.412401
 H 0.102873 2.430308 -0.219156

C 2.759522 4.677564 -0.093698
 H 4.728022 4.105664 0.627147
 H 3.432033 3.934089 1.814850
 H 0.657090 4.848709 -0.617790
 H 0.956303 4.385959 1.060010
 H 2.867155 5.732553 0.205305
 H 3.071706 4.621878 -1.152582
 C 1.552517 -0.336084 -1.507540
 C 2.661583 0.188806 -2.418361
 C 1.309532 -1.835289 -1.712319
 H 0.588103 0.155753 -1.752981
 C 2.326065 -0.110839 -3.877870
 H 3.624822 -0.284085 -2.161947
 H 2.799087 1.272193 -2.286998
 C 0.975834 -2.115504 -3.172803
 H 2.209000 -2.409406 -1.427169
 H 0.481397 -2.158309 -1.064880
 C 2.062184 -1.594840 -4.106683
 H 3.142268 0.242373 -4.528770
 H 1.427335 0.465452 -4.160585
 H 0.823386 -3.196724 -3.320223
 H 0.013745 -1.628952 -3.410605
 H 1.786646 -1.774584 -5.158343
 H 2.996048 -2.159951 -3.929999
 C -2.790097 2.813938 -0.882876
 H -2.133103 2.010888 -1.251270
 H -3.557849 3.015420 -1.647805
 H -2.192233 3.731124 -0.750946
 C -4.309954 3.506060 1.014159
 H -5.091136 3.828489 0.307228
 H -4.806521 3.192296 1.945152
 H -3.695029 4.391733 1.237642
 C -2.665620 -2.966570 -1.076566
 H -3.419636 -3.142542 -1.861300
 H -2.034882 -2.115929 -1.378389
 H -2.034471 -3.867475 -1.001206
 C -4.169619 -3.843965 0.756205

H -4.685175 -3.613236 1.701126
H -4.931997 -4.148950 0.021496
H -3.521423 -4.717650 0.926088

TS_{I→II}

E = -1721.79616744
C 0.999863 -0.076277 -0.159652
C -0.139538 -0.115122 -0.965279
C 0.242607 -0.029156 -2.341071
C 1.615381 0.050618 -2.342020
N 2.051280 0.015723 -1.028490
H -0.388805 -0.018689 -3.228509
H 2.322815 0.138350 -3.166406
C 3.413904 0.142889 -0.633972
C 4.244202 -0.991794 -0.658799
C 3.879361 1.404408 -0.224940
C 5.573612 -0.836373 -0.256624
C 5.214591 1.509978 0.176440
C 6.054408 0.401782 0.158942
H 6.244005 -1.697940 -0.263437
H 5.604516 2.476130 0.504203
H 7.096551 0.503208 0.472037
C 3.681047 -2.347609 -1.037433
H 2.862042 -2.169995 -1.752091
C 2.946747 2.598499 -0.177406
H 2.100571 2.371502 -0.844700
P -1.615667 -0.137408 0.025742
C -2.308952 1.568102 0.058575
C -2.231241 2.296036 -1.286368
C -3.700900 1.704211 0.677517
H -1.581002 2.062452 0.730268
C -2.610496 3.764460 -1.119429
H -2.918271 1.821616 -2.008225
H -1.218580 2.203087 -1.705905
C -4.071253 3.174835 0.847126
H -4.439830 1.225527 0.012037
H -3.756353 1.178698 1.642844

C -3.983231 3.927526 -0.475713
 H -2.579606 4.273027 -2.096451
 H -1.850227 4.259248 -0.488298
 H -5.083311 3.260963 1.274435
 H -3.384164 3.635963 1.579380
 H -4.214304 4.994602 -0.326836
 H -4.754453 3.536792 -1.164514
 C -0.940130 -0.545665 1.611184
 C -1.426227 0.171162 2.857446
 C -0.708348 -2.035312 1.832798
 H 0.366286 -0.181737 1.093716
 C -0.446702 -0.055454 4.008595
 H -2.426929 -0.186623 3.184963
 H -1.529652 1.254814 2.685374
 C 0.264489 -2.244434 2.992340
 H -1.646156 -2.585708 2.057677
 H -0.286722 -2.494629 0.921554
 C -0.214592 -1.541281 4.256164
 H -0.818556 0.432847 4.925000
 H 0.514647 0.425681 3.756049
 H 0.406367 -3.321881 3.179713
 H 1.249747 -1.839341 2.703237
 H 0.509076 -1.686313 5.075146
 H -1.161540 -2.003318 4.593201
 C -2.798251 -1.369061 -0.661543
 C -3.946418 -1.726219 0.286551
 C -3.317065 -1.053507 -2.065466
 H -2.141835 -2.256957 -0.740046
 C -4.747939 -2.901005 -0.266065
 H -4.615869 -0.859220 0.404105
 H -3.556365 -1.958107 1.289147
 C -4.130486 -2.222325 -2.615082
 H -3.957422 -0.155058 -2.024358
 H -2.481905 -0.818152 -2.742111
 C -5.263894 -2.611891 -1.672002
 H -5.585023 -3.137622 0.410278
 H -4.103337 -3.798080 -0.289183

H -4.527588 -1.969398 -3.611457
 H -3.459561 -3.088257 -2.758195
 H -5.809243 -3.483430 -2.068379
 H -5.995319 -1.784422 -1.624637
 C 2.378412 2.772627 1.233006
 H 1.856176 1.859774 1.554654
 H 3.182099 2.985707 1.956534
 H 1.662937 3.610487 1.263691
 C 3.598021 3.883956 -0.679320
 H 4.400959 4.230080 -0.009224
 H 4.029982 3.752500 -1.682996
 H 2.852338 4.692348 -0.732161
 C 3.066371 -3.015708 0.195105
 H 3.836626 -3.206525 0.959776
 H 2.292953 -2.374130 0.641021
 H 2.603198 -3.979076 -0.071764
 C 4.694773 -3.261623 -1.716423
 H 5.171981 -2.771060 -2.578531
 H 5.491087 -3.580553 -1.025143
 H 4.198268 -4.175741 -2.076276

//

E = -1721.84442875
 P 1.865220 -0.007979 0.057081
 N -1.952497 -0.233839 -0.921561
 C -0.914594 -0.224191 -0.039762
 H -1.071657 -0.256649 1.035725
 C 0.269868 -0.165917 -0.754468
 C -1.462936 -0.175117 -2.205159
 H -2.142706 -0.169988 -3.054350
 C -0.087902 -0.132092 -2.138188
 H 0.588597 -0.086402 -2.989151
 C 2.318769 4.089929 -0.759401
 H 3.322162 4.276165 -0.335074
 H 2.284583 4.627884 -1.720849
 C -5.294444 1.015818 0.046011
 H -5.806341 1.963454 0.229775

C -3.948854 1.021634 -0.332943
 C -3.329442 -0.219948 -0.554558
 C -5.349309 -1.397025 -0.027041
 H -5.905280 -2.328351 0.099936
 C -5.987664 -0.180677 0.196046
 H -7.038991 -0.165980 0.493586
 C 5.537417 -0.669260 -1.845861
 H 5.439706 -0.100249 -2.788429
 H 6.552627 -0.467833 -1.466317
 C 2.139550 1.806419 0.313632
 H 3.135988 1.893697 0.783705
 C 1.093725 2.366107 1.280190
 H 0.092540 2.184569 0.852223
 H 1.125690 1.811541 2.228575
 C 3.070116 -0.471813 -1.299363
 H 2.839425 0.109699 -2.211124
 C 2.148397 2.592308 -0.999880
 H 2.948645 2.232748 -1.664805
 H 1.195525 2.412576 -1.529455
 C 1.871168 -0.837531 1.525302
 C 4.498500 -0.163008 -0.849420
 H 4.631933 0.919709 -0.692490
 H 4.662571 -0.642023 0.133769
 C 2.760874 -0.443458 2.677132
 H 3.145276 0.585234 2.573150
 H 3.666056 -1.089818 2.742747
 C 1.258147 -2.209382 1.661330
 H 2.030791 -3.012279 1.640495
 H 0.577277 -2.433412 0.823279
 C 2.909735 -1.963940 -1.600686
 H 3.023989 -2.521598 -0.653968
 H 1.889578 -2.174220 -1.959327
 C 1.264694 4.633316 0.196953
 H 0.267417 4.538793 -0.271359
 H 1.424451 5.709110 0.375511
 C 1.273911 3.861943 1.510770
 H 0.482566 4.232389 2.182904

H 2.232029 4.040628 2.031867
 C 5.361823 -2.154419 -2.138648
 H 5.568939 -2.731383 -1.219207
 H 6.097664 -2.488233 -2.888299
 C 3.943558 -2.457773 -2.606939
 H 3.816843 -3.539462 -2.777272
 H 3.768783 -1.966899 -3.581872
 C 2.009627 -0.574056 4.005055
 H 2.679585 -0.352842 4.854422
 H 1.197887 0.175262 4.028834
 C 0.508600 -2.337467 2.989093
 H 0.117157 -3.361896 3.118703
 H -0.363919 -1.658682 2.974750
 C 1.407593 -1.966817 4.164552
 H 0.853086 -2.040719 5.115235
 H 2.229350 -2.704748 4.228851
 C -4.005237 -1.443237 -0.407397
 C -3.178537 2.321737 -0.455179
 H -2.203753 2.086061 -0.909067
 C -2.906102 2.918177 0.926825
 H -2.373898 2.203791 1.572269
 H -3.844457 3.193763 1.434354
 H -2.287104 3.825463 0.843723
 C -3.876197 3.324028 -1.371656
 H -4.846055 3.648498 -0.962530
 H -4.058520 2.894917 -2.368304
 H -3.255425 4.224695 -1.496645
 C -3.282392 -2.761873 -0.596363
 H -2.373269 -2.553486 -1.181560
 C -4.106290 -3.782281 -1.376520
 H -3.503538 -4.680278 -1.580596
 H -4.447277 -3.374064 -2.339882
 H -4.995243 -4.110620 -0.815137
 C -2.835995 -3.322134 0.756394
 H -2.187118 -2.614877 1.292878
 H -2.271221 -4.257825 0.622397
 H -3.704853 -3.537264 1.398994

$TS_{I \rightarrow III}^{ax}$

E = -1721.77887401

C 0.955671 0.083477 -0.086979

C -0.217586 0.156313 -0.840156

C 0.122158 0.161444 -2.233343

C 1.495018 0.111915 -2.286152

N 1.975294 0.071181 -0.990023

H -0.544907 0.201419 -3.093404

H 2.174627 0.093470 -3.136420

C 3.347418 -0.088337 -0.636858

C 3.821700 -1.385351 -0.378411

C 4.164260 1.050417 -0.538686

C 5.164710 -1.524740 -0.015796

C 5.501379 0.860785 -0.179168

C 5.996557 -0.414000 0.078981

H 5.566471 -2.518009 0.195058

H 6.165317 1.723026 -0.093309

H 7.044561 -0.542466 0.360844

C 2.888993 -2.579277 -0.439707

H 2.044387 -2.295250 -1.087389

C 3.577116 2.433641 -0.737061

H 2.741162 2.331495 -1.447252

P -1.750278 0.046240 0.028956

C -1.545214 0.702584 1.724615

C -0.404280 -0.083357 2.367176

C -1.240479 2.209346 1.698861

H -2.552238 0.580814 2.203879

C -0.099317 0.450084 3.753254

H 0.743306 0.018020 1.158636

H -0.677468 -1.153260 2.441297

C -0.908988 2.720090 3.097038

H -0.381853 2.393380 1.031516

H -2.095428 2.777393 1.295827

C 0.234455 1.937522 3.727716

H 0.743942 -0.112632 4.189744

H -0.948454 0.319879 4.470356

H -0.676521 3.797216 3.047692
 H -1.806446 2.622988 3.736179
 H 0.435341 2.318651 4.743545
 H 1.153458 2.095020 3.136385
 C -2.133062 -1.746744 0.176451
 C -3.211730 -2.139278 1.185733
 C -2.360802 -2.410673 -1.181515
 H -1.164306 -2.108796 0.567264
 C -3.259087 -3.658054 1.333393
 H -4.198441 -1.781989 0.844747
 H -3.012557 -1.667324 2.159659
 C -2.418611 -3.928025 -1.028690
 H -3.314310 -2.055888 -1.613379
 H -1.560571 -2.125108 -1.883168
 C -3.471737 -4.348928 -0.009314
 H -4.052712 -3.941156 2.043195
 H -2.307797 -4.001529 1.777500
 H -2.616390 -4.397525 -2.005696
 H -1.427025 -4.290445 -0.703449
 H -3.465973 -5.443427 0.117460
 H -4.473860 -4.087639 -0.396094
 C -3.070215 0.871062 -0.951321
 C -4.373413 1.041316 -0.162131
 C -2.626020 2.204717 -1.566035
 H -3.260337 0.167742 -1.784387
 C -5.470299 1.639708 -1.037973
 H -4.187511 1.704521 0.700227
 H -4.708464 0.080651 0.255295
 C -3.728936 2.787042 -2.443711
 H -2.386473 2.917263 -0.760744
 H -1.698959 2.073960 -2.141202
 C -5.032422 2.954480 -1.671701
 H -6.385318 1.782748 -0.441265
 H -5.728319 0.918433 -1.834630
 H -3.400058 3.752119 -2.860997
 H -3.898310 2.117636 -3.306916
 H -5.824456 3.344963 -2.330562

H -4.888141 3.709118 -0.877606
 C 2.990257 2.941068 0.583435
 H 2.242812 2.239572 0.981176
 H 3.781295 3.057984 1.341466
 H 2.503139 3.919295 0.444424
 C 4.563007 3.435710 -1.326786
 H 5.376032 3.676433 -0.623578
 H 5.019076 3.059621 -2.255276
 H 4.049116 4.381234 -1.557812
 C 2.317530 -2.883881 0.948196
 H 3.121446 -3.164623 1.647819
 H 1.787575 -2.016160 1.368155
 H 1.607297 -3.725349 0.895893
 C 3.541449 -3.814064 -1.054513
 H 3.978949 -3.593142 -2.039968
 H 4.339696 -4.221498 -0.414057
 H 2.794840 -4.612786 -1.183906

III^{ax}

E = -1721.78592159
 C 1.000343 0.093246 0.019583
 C -0.211748 0.243639 -0.636730
 C 0.076736 0.306634 -2.039675
 C 1.442362 0.207337 -2.172469
 N 1.988981 0.085337 -0.914813
 H -0.629664 0.414526 -2.859975
 H 2.077370 0.205220 -3.055665
 C 3.362465 -0.170181 -0.628486
 C 3.766563 -1.506159 -0.464275
 C 4.246866 0.913953 -0.502435
 C 5.109054 -1.741537 -0.153763
 C 5.580168 0.626710 -0.197523
 C 6.005981 -0.686590 -0.022802
 H 5.458172 -2.766805 -0.013307
 H 6.296466 1.443376 -0.089195
 H 7.051958 -0.890003 0.219269
 C 2.773618 -2.646923 -0.579834

H 1.890361 -2.258205 -1.110613
 C 3.747934 2.339995 -0.624134
 H 2.843116 2.315181 -1.251615
 P -1.792991 0.184487 0.181795
 C -1.801496 1.106449 1.757892
 C -0.836180 0.283924 2.574142
 C -1.294734 2.542436 1.529548
 H -2.878824 1.187284 2.085805
 C -0.377214 0.980984 3.837364
 H 1.124603 0.005148 1.103056
 H -1.279875 -0.688661 2.842903
 C -0.897286 3.202205 2.844625
 H -0.411207 2.517737 0.868929
 H -2.063575 3.151916 1.029328
 C 0.155352 2.383894 3.576860
 H 0.399264 0.378346 4.341504
 H -1.193887 1.097098 4.597586
 H -0.543680 4.228132 2.645068
 H -1.791308 3.297865 3.488597
 H 0.439355 2.884331 4.518574
 H 1.065050 2.324003 2.953064
 C -2.110778 -1.596416 0.519374
 C -3.273557 -1.928758 1.457572
 C -2.159358 -2.437651 -0.755993
 H -1.177213 -1.838477 1.058121
 C -3.240075 -3.414242 1.807558
 H -4.238799 -1.697992 0.978545
 H -3.211654 -1.317642 2.369844
 C -2.143477 -3.923469 -0.406990
 H -3.080307 -2.208792 -1.322849
 H -1.309069 -2.189490 -1.411692
 C -3.267926 -4.286976 0.557027
 H -4.085191 -3.663080 2.469275
 H -2.321160 -3.624051 2.383424
 H -2.212036 -4.527868 -1.325994
 H -1.170506 -4.167594 0.056212
 H -3.207678 -5.352792 0.830471

H -4.238598 -4.153479 0.044977
 C -2.993729 0.736820 -1.118178
 C -4.463728 0.563731 -0.726917
 C -2.735544 2.175944 -1.581049
 H -2.790794 0.062068 -1.971909
 C -5.388459 0.958950 -1.876098
 H -4.679658 1.184393 0.160502
 H -4.669573 -0.475911 -0.437980
 C -3.641623 2.542420 -2.751103
 H -2.942062 2.861935 -0.744210
 H -1.677349 2.321126 -1.843238
 C -5.110336 2.368724 -2.382735
 H -6.439091 0.862528 -1.558103
 H -5.248739 0.241670 -2.705334
 H -3.442742 3.578688 -3.068225
 H -3.399757 1.899859 -3.617582
 H -5.757200 2.600535 -3.244129
 H -5.371098 3.096431 -1.593221
 C 3.332861 2.870551 0.750501
 H 2.560366 2.238024 1.210933
 H 4.195760 2.901017 1.434798
 H 2.926496 3.890766 0.668194
 C 4.749137 3.271712 -1.299250
 H 5.643694 3.435412 -0.677886
 H 5.080361 2.876303 -2.271495
 H 4.292202 4.258323 -1.469587
 C 2.309541 -3.105455 0.804936
 H 3.154758 -3.496836 1.393598
 H 1.853420 -2.282722 1.374673
 H 1.560614 -3.908508 0.713837
 C 3.316291 -3.815672 -1.398341
 H 3.666082 -3.486513 -2.388400
 H 4.156401 -4.318068 -0.893475
 H 2.530290 -4.571809 -1.547859

$TS_{III \rightarrow IV}^{ax}$

E = -1721.78434078

C -0.924055 0.038551 0.056105
 C 0.277075 -0.198363 -0.601631
 C -0.035779 -0.360117 -1.991049
 C -1.399929 -0.238351 -2.115031
 N -1.927152 -0.000014 -0.866930
 H 0.655527 -0.548572 -2.809044
 H -2.045805 -0.288922 -2.988613
 C -3.293335 0.297618 -0.591800
 C -3.702608 1.642666 -0.629988
 C -4.171727 -0.753090 -0.281287
 C -5.044123 1.919757 -0.354610
 C -5.506085 -0.426072 -0.021222
 C -5.938006 0.895357 -0.057510
 H -5.395662 2.953668 -0.371529
 H -6.217029 -1.219633 0.219252
 H -6.984069 1.131189 0.152743
 C -2.710664 2.754759 -0.911080
 H -1.829322 2.294570 -1.384362
 C -3.698521 -2.192170 -0.255441
 H -2.598192 -2.171653 -0.223125
 P 1.852917 -0.274060 0.220457
 C 1.735841 -1.468574 1.690902
 C 0.773908 -0.760696 2.558491
 C 1.249381 -2.822434 1.143457
 H 2.793533 -1.586813 2.035045
 C -0.178970 -1.571205 3.406024
 H -1.075857 0.191778 1.123239
 H 1.251407 0.036783 3.147220
 C 0.515021 -3.632730 2.202331
 H 0.545297 -2.656468 0.309719
 H 2.098027 -3.393604 0.736410
 C -0.672113 -2.838552 2.722729
 H -1.051534 -0.962509 3.714161
 H 0.283462 -1.902387 4.369447
 H 0.197314 -4.596374 1.769115
 H 1.194578 -3.870912 3.041309
 H -1.278370 -3.445772 3.415760

H -1.322453 -2.577380 1.867933
 C 2.139122 1.409849 0.902551
 C 3.298140 1.559887 1.890486
 C 2.157723 2.489379 -0.179172
 H 1.205893 1.516382 1.484826
 C 3.267602 2.952276 2.516039
 H 4.266382 1.414599 1.385324
 H 3.228901 0.790098 2.673553
 C 2.145289 3.876954 0.455846
 H 3.062236 2.387068 -0.805930
 H 1.292143 2.364462 -0.849830
 C 3.285271 4.047276 1.454430
 H 4.117082 3.072581 3.207536
 H 2.352239 3.048887 3.126716
 H 2.198140 4.651321 -0.326770
 H 1.180592 4.021258 0.974603
 H 3.234984 5.041346 1.927467
 H 4.248416 4.010762 0.912671
 C 3.071810 -0.544120 -1.169189
 C 4.524043 -0.226737 -0.806602
 C 2.967747 -1.976437 -1.707534
 H 2.759160 0.157099 -1.966440
 C 5.454605 -0.455524 -1.995724
 H 4.838993 -0.861789 0.040974
 H 4.620302 0.814510 -0.469748
 C 3.876245 -2.182840 -2.914055
 H 3.270613 -2.674983 -0.909574
 H 1.926387 -2.231181 -1.953284
 C 5.325351 -1.861109 -2.569181
 H 6.496365 -0.253585 -1.697953
 H 5.208910 0.280513 -2.782617
 H 3.786381 -3.218745 -3.278850
 H 3.540491 -1.530766 -3.741078
 H 5.970640 -1.974562 -3.455170
 H 5.688326 -2.592341 -1.824412
 C -4.175929 -2.940580 0.986282
 H -3.894347 -2.408880 1.906943

H -5.269073 -3.076361 0.990506
H -3.721056 -3.942023 1.024644
C -4.107990 -2.916275 -1.538930
H -5.204819 -2.955985 -1.637950
H -3.708948 -2.408336 -2.429548
H -3.729662 -3.950464 -1.539808
C -2.242074 3.398575 0.395993
H -3.083590 3.872790 0.926159
H -1.795313 2.654046 1.070762
H -1.485212 4.174008 0.197099
C -3.254880 3.799776 -1.881254
H -3.606947 3.337081 -2.815495
H -4.094001 4.367150 -1.448751
H -2.469441 4.527830 -2.135853

$TS_{I \rightarrow III}^{eq}$

E = -1721.77206284
C 1.070150 0.067945 -0.092482
C -0.087337 -0.009468 -0.871845
C 0.281268 -0.337357 -2.217758
C 1.652234 -0.431002 -2.223307
N 2.108370 -0.175743 -0.943844
H -0.361423 -0.468862 -3.086298
H 2.346476 -0.661269 -3.029741
C 3.471164 -0.286921 -0.540483
C 3.922093 -1.521429 -0.042162
C 4.308396 0.836007 -0.645915
C 5.258512 -1.612676 0.357153
C 5.637864 0.696114 -0.237187
C 6.108474 -0.515757 0.258387
H 5.640965 -2.556454 0.751555
H 6.315368 1.549638 -0.303752
H 7.151032 -0.605839 0.573456
C 2.969763 -2.691609 0.108138
H 2.136332 -2.521477 -0.591875
C 3.755264 2.166390 -1.114796
H 2.895254 1.946505 -1.767000

P -1.649159 0.319488 -0.110233
 C -2.839254 0.427948 -1.518828
 C -3.125789 -0.949974 -2.131339
 C -4.140796 1.194626 -1.271909
 H -2.248567 1.009310 -2.252079
 C -3.931735 -0.822429 -3.419223
 H -3.704550 -1.549373 -1.408986
 H -2.191106 -1.499995 -2.312620
 C -4.961790 1.299170 -2.555188
 H -4.733784 0.688465 -0.491458
 H -3.923744 2.203688 -0.896050
 C -5.230969 -0.062812 -3.182484
 H -4.136150 -1.823513 -3.831428
 H -3.326691 -0.291391 -4.176243
 H -5.907778 1.823950 -2.346697
 H -4.411986 1.928009 -3.278520
 H -5.789278 0.052755 -4.125175
 H -5.877698 -0.653726 -2.508663
 C -1.410073 1.844358 0.900726
 C -2.613399 2.510481 1.579736
 C -0.267589 1.540271 1.862985
 H -1.028535 2.542016 0.124171
 C -2.137148 3.811740 2.230979
 H -3.005671 1.836290 2.360204
 H -3.447918 2.732077 0.894057
 C 0.187888 2.848420 2.487047
 H -0.663099 0.893909 2.675205
 H 0.857680 0.642885 0.987233
 C -0.954883 3.606513 3.174450
 H -2.978651 4.290970 2.758814
 H -1.840517 4.512074 1.427806
 H 1.000916 2.668732 3.212101
 H 0.624402 3.505933 1.708337
 H -0.620314 4.584399 3.566376
 H -1.291698 3.018168 4.047589
 C -2.068784 -1.043537 1.052326
 C -3.526346 -1.069981 1.519479

C -1.594824 -2.429448 0.608106
 H -1.439742 -0.752826 1.913879
 C -3.702591 -2.084691 2.646608
 H -4.181956 -1.349945 0.676679
 H -3.850802 -0.072810 1.853242
 C -1.773395 -3.432504 1.742997
 H -2.171618 -2.767036 -0.268751
 H -0.541353 -2.378055 0.295356
 C -3.215536 -3.470633 2.237873
 H -4.759536 -2.122006 2.956077
 H -3.131516 -1.740762 3.527343
 H -1.452470 -4.433494 1.412128
 H -1.105502 -3.152043 2.577109
 H -3.315819 -4.174001 3.080079
 H -3.864372 -3.858586 1.431247
 C 3.226545 2.959325 0.083378
 H 2.460282 2.394974 0.633522
 H 4.043504 3.194967 0.784397
 H 2.776803 3.909519 -0.246026
 C 4.753164 2.984524 -1.927286
 H 5.595954 3.336666 -1.311477
 H 5.166769 2.404983 -2.766757
 H 4.262185 3.879322 -2.339426
 C 2.379930 -2.715360 1.520809
 H 3.171167 -2.866928 2.272737
 H 1.868590 -1.768228 1.747219
 H 1.650995 -3.535548 1.624486
 C 3.604431 -4.031191 -0.252601
 H 4.054899 -4.008210 -1.256478
 H 4.389376 -4.322806 0.463080
 H 2.844293 -4.827476 -0.237884

III^{eq}

E = -1721.77995851
 C 1.086625 0.059638 -0.082483
 C -0.078383 -0.028862 -0.830877
 C 0.304498 -0.387519 -2.163209

C 1.676248 -0.494775 -2.170087
 N 2.136243 -0.219665 -0.902193
 H -0.341839 -0.532247 -3.025870
 H 2.370848 -0.741490 -2.969991
 C 3.496214 -0.293725 -0.480278
 C 3.971809 -1.514485 0.027923
 C 4.297625 0.856721 -0.569906
 C 5.301803 -1.564007 0.454737
 C 5.621183 0.756640 -0.131677
 C 6.118090 -0.440463 0.374158
 H 5.704476 -2.495395 0.858699
 H 6.272960 1.630992 -0.183424
 H 7.155524 -0.497522 0.712636
 C 3.056688 -2.715954 0.161641
 H 2.189101 -2.540230 -0.493513
 C 3.721803 2.169837 -1.060372
 H 2.847518 1.927948 -1.685064
 P -1.681493 0.318612 -0.135287
 C -2.854038 0.006691 -1.537114
 C -2.915876 -1.464662 -1.965564
 C -4.274958 0.549442 -1.348516
 H -2.386760 0.587691 -2.356007
 C -3.712673 -1.624465 -3.256432
 H -3.414079 -2.041688 -1.168291
 H -1.908733 -1.892623 -2.074864
 C -5.086974 0.388649 -2.631338
 H -4.773235 0.003727 -0.530504
 H -4.256303 1.605142 -1.050287
 C -5.119940 -1.057443 -3.111061
 H -3.751749 -2.687607 -3.543806
 H -3.186365 -1.100383 -4.075009
 H -6.110140 0.765709 -2.473106
 H -4.641402 1.024046 -3.418089
 H -5.668626 -1.134940 -4.063447
 H -5.679539 -1.668577 -2.379809
 C -1.576318 2.038847 0.504275
 C -2.797177 2.951782 0.657915

C -0.717431 1.867464 1.731578
 H -0.949942 2.483678 -0.300507
 C -2.287373 4.314563 1.141442
 H -3.496808 2.524078 1.396887
 H -3.357552 3.100472 -0.283520
 C -0.224452 3.240299 2.153027
 H -1.365002 1.478321 2.546940
 H 1.159574 0.380320 0.960120
 C -1.380164 4.230218 2.368276
 H -3.142550 4.984288 1.333479
 H -1.718763 4.776995 0.312420
 H 0.382363 3.180440 3.074109
 H 0.450361 3.660005 1.378577
 H -1.015788 5.243623 2.621772
 H -1.976225 3.886930 3.233790
 C -1.987660 -0.841725 1.252382
 C -3.416859 -0.829811 1.795528
 C -1.477656 -2.269808 1.048459
 H -1.322022 -0.358230 1.993926
 C -3.479634 -1.599812 3.112207
 H -4.101482 -1.301885 1.068297
 H -3.767733 0.203565 1.943141
 C -1.539136 -3.030732 2.369821
 H -2.090293 -2.799170 0.300306
 H -0.448009 -2.253137 0.661051
 C -2.946618 -3.020257 2.957862
 H -4.514317 -1.615400 3.491119
 H -2.877866 -1.061065 3.865166
 H -1.191098 -4.066422 2.223512
 H -0.838375 -2.563708 3.084577
 H -2.961929 -3.541765 3.928493
 H -3.620233 -3.588517 2.290222
 C 3.220232 3.001170 0.123543
 H 2.451810 2.467384 0.701257
 H 4.049398 3.249074 0.805568
 H 2.775186 3.945346 -0.227356
 C 4.697175 2.963827 -1.923955

H 5.555462 3.334914 -1.341808
H 5.088931 2.358968 -2.755891
H 4.193667 3.844955 -2.349801
C 2.531869 -2.827809 1.595200
H 3.357559 -3.000371 2.304056
H 2.011505 -1.909209 1.903420
H 1.823887 -3.666730 1.687347
C 3.715106 -4.015315 -0.293382
H 4.107133 -3.930580 -1.318074
H 4.549333 -4.307250 0.363799
H 2.984974 -4.838948 -0.274323

TS_{III→IV}^{eq}

E = -1721.75518619
C 0.143467 -0.341876 0.758060
C -0.231511 -0.666022 2.101660
C -1.600603 -0.545952 2.188321
H 0.426651 -0.943488 2.921749
H -2.273238 -0.659263 3.034407
P 1.772657 -0.326387 -0.032295
C 1.941123 1.481982 -0.416543
C 1.906375 2.408104 0.795795
C 3.097414 1.817464 -1.359447
H 1.011191 1.641037 -0.994929
C 1.846557 3.869718 0.360762
H 2.809589 2.251697 1.412749
H 1.043247 2.158910 1.432813
C 3.025942 3.280424 -1.789218
H 4.064905 1.632215 -0.863415
H 3.067343 1.156420 -2.239668
C 2.989872 4.218466 -0.586653
H 1.861224 4.530492 1.243213
H 0.882537 4.050325 -0.148099
H 3.877894 3.526550 -2.443909
H 2.113592 3.429419 -2.394540
H 2.907792 5.265985 -0.919670
H 3.947741 4.141670 -0.039804

C 2.893914 -0.707041 1.416473
 C 2.801161 -2.207839 1.717807
 C 4.347941 -0.313421 1.155665
 H 2.527379 -0.135382 2.289918
 C 3.698920 -2.610311 2.882549
 H 3.107583 -2.761210 0.811315
 H 1.758668 -2.502275 1.913405
 C 5.257889 -0.724170 2.310679
 H 4.691427 -0.796305 0.222018
 H 4.430064 0.771264 0.993579
 C 5.146922 -2.210966 2.625336
 H 3.622252 -3.695452 3.059677
 H 3.341781 -2.118666 3.805871
 H 6.301358 -0.455054 2.078692
 H 4.980159 -0.142344 3.208253
 H 5.780756 -2.469696 3.489037
 H 5.534359 -2.792763 1.769324
 C 0.347598 -0.184158 -2.879825
 C 2.218709 -1.725315 -2.988597
 C -0.629231 -0.897078 -3.782331
 H 0.954994 0.554239 -3.430291
 C 1.416616 -2.482175 -4.097556
 H 2.846738 -0.940963 -3.442079
 H 2.870914 -2.422584 -2.431277
 C 0.297962 -1.664678 -4.774099
 H -1.319552 -0.239717 -4.339325
 H -1.246531 -1.619374 -3.218084
 H 2.112269 -2.856117 -4.867525
 H 0.970683 -3.377013 -3.628482
 H -0.288058 -2.332875 -5.431470
 H 0.762577 -0.913813 -5.437271
 C -1.031862 -0.026332 0.091500
 H -1.176586 0.237130 -0.955153
 C 1.092962 -1.142078 -2.204786
 H 0.481269 -1.941865 -1.751164
 N -2.076453 -0.155065 0.962445
 C -3.440496 0.102742 0.638963

C -4.290851 -0.984232 0.350999
 C -3.893571 1.437897 0.600878
 C -5.625277 -0.699804 0.039023
 C -5.237633 1.657213 0.278314
 C -6.100297 0.604393 0.002953
 H -6.298873 -1.530505 -0.188247
 H -5.607738 2.685541 0.247308
 H -7.145830 0.801572 -0.245240
 C -3.889577 -2.453682 0.376149
 H -4.673325 -2.950998 -0.219961
 C -2.559760 -2.813518 -0.285363
 H -2.446122 -2.322411 -1.262826
 H -1.691619 -2.544924 0.332620
 H -2.521767 -3.901632 -0.450358
 C -3.986107 -3.043437 1.785665
 H -3.193500 -2.648146 2.436776
 H -4.958143 -2.818426 2.249723
 H -3.869716 -4.138052 1.749244
 C -3.034673 2.673923 0.838243
 H -3.768835 3.469479 1.050763
 C -2.092839 2.632833 2.039713
 H -2.603457 2.270286 2.944025
 H -1.214795 1.996192 1.865630
 H -1.725583 3.650265 2.246580
 C -2.295778 3.103944 -0.432755
 H -1.493547 2.398203 -0.690718
 H -2.979698 3.170014 -1.291866
 H -1.834781 4.093576 -0.286032

Phosphan

E = -1487.38698112
 C -0.658249 -0.428077 0.486356
 C 0.337100 -0.179148 1.415786
 C -0.234210 0.709570 2.380361
 C -1.529740 0.973257 1.994067
 N -1.783754 0.267743 0.845926
 H 0.259398 1.104688 3.266928

H -2.299684 1.601043 2.437374
 C -2.960736 0.368400 0.051597
 C -4.040443 -0.493157 0.310847
 C -2.988204 1.323369 -0.980328
 C -5.170811 -0.381374 -0.503868
 C -4.139382 1.396036 -1.769831
 C -5.220105 0.552549 -1.534196
 H -6.026114 -1.038321 -0.331239
 H -4.190132 2.125054 -2.582213
 H -6.112379 0.623458 -2.161057
 C -3.955636 -1.544369 1.398742
 H -3.136303 -1.248895 2.071806
 C -1.799023 2.223699 -1.251752
 H -1.091003 2.093182 -0.419415
 P 2.038916 -0.816975 1.490347
 C 2.126090 -1.818869 -0.088715
 C 2.090801 -1.103242 -1.439403
 C 3.300224 -2.803942 -0.041740
 H 1.204813 -2.429225 -0.005173
 C 2.007879 -2.100814 -2.591889
 H 3.013107 -0.508302 -1.554065
 H 1.255722 -0.388664 -1.484555
 C 3.238292 -3.799077 -1.196872
 H 4.251006 -2.243937 -0.092567
 H 3.306504 -3.331866 0.925075
 C 3.162614 -3.095548 -2.547726
 H 1.995519 -1.566799 -3.556455
 H 1.049983 -2.649618 -2.528817
 H 4.108226 -4.475313 -1.163491
 H 2.344599 -4.437239 -1.070640
 H 3.069708 -3.832957 -3.361708
 H 4.109282 -2.553602 -2.726812
 H -0.664150 -1.038802 -0.412873
 C 2.988763 0.784002 1.225347
 C 4.476162 0.517662 0.985989
 C 2.447440 1.818637 0.238649
 H 2.907800 1.235682 2.234653

C 5.286610 1.809932 1.041576
 H 4.608500 0.054361 -0.008086
 H 4.856308 -0.210609 1.721665
 C 3.255663 3.111706 0.312408
 H 2.499837 1.423476 -0.787609
 H 1.383497 2.013538 0.444911
 C 4.740752 2.856544 0.075806
 H 6.347860 1.602922 0.826347
 H 5.250591 2.211367 2.070568
 H 2.870170 3.842579 -0.417801
 H 3.119255 3.568682 1.309647
 H 5.313565 3.794382 0.162380
 H 4.883990 2.500490 -0.961025
 C -1.078360 1.799929 -2.532159
 H -0.768415 0.745422 -2.484086
 H -1.727044 1.918728 -3.414994
 H -0.175692 2.410850 -2.689791
 C -2.190041 3.699227 -1.290043
 H -2.865475 3.924069 -2.130707
 H -2.696794 4.001713 -0.361433
 H -1.295108 4.329148 -1.410326
 C -3.583684 -2.900583 0.795642
 H -4.357902 -3.244667 0.090927
 H -2.630812 -2.844390 0.249036
 H -3.477349 -3.662157 1.583899
 C -5.229149 -1.636204 2.234417
 H -5.508201 -0.656902 2.651497
 H -6.083219 -2.008044 1.646488
 H -5.084621 -2.334803 3.072640

Cyclohexen

E = -234.450673317
 C 0.692381 1.183518 0.318448
 C 1.489993 -0.044822 -0.109326
 C -1.489992 -0.044904 0.109303
 C -0.692443 1.183495 -0.318425
 H 1.880551 0.091545 -1.136077

H 2.385182 -0.162303 0.525139
H 0.582060 1.178539 1.417340
H 1.240795 2.104016 0.063182
H -2.385150 -0.162432 -0.525197
H -1.880600 0.091416 1.136042
H -0.582129 1.178579 -1.417317
H -1.240905 2.103951 -0.063110
C 0.666567 -1.298212 -0.057064
C -0.666497 -1.298245 0.057030
H 1.198800 -2.254117 -0.114244
H -1.198662 -2.254174 0.114447

TS_{I→IV}

E = -1721.76364249
C -0.944422 -0.278950 -0.008525
C 0.193335 -0.500533 -0.789674
C -0.202484 -0.750472 -2.145309
C -1.575385 -0.702915 -2.146261
N -2.004595 -0.428590 -0.859445
H 0.428449 -0.931748 -3.014242
H -2.290821 -0.830295 -2.956704
C -3.361394 -0.169907 -0.509339
C -3.825985 1.156555 -0.571101
C -4.183399 -1.235797 -0.109473
C -5.153036 1.400315 -0.207750
C -5.504604 -0.943876 0.243723
C -5.984934 0.360319 0.196036
H -5.543184 2.419843 -0.240493
H -6.167133 -1.750524 0.565011
H -7.020189 0.569571 0.476737
C -2.896330 2.286732 -0.968152
H -2.072351 1.838039 -1.545138
C -3.632546 -2.642688 0.000711
H -2.725015 -2.684374 -0.621294
C 1.504541 -0.991271 1.906380
C 2.450287 -0.248415 2.850621
C 0.118656 -1.095064 2.389095

H 1.931540 -1.980751 1.673739
 C 1.913944 1.101444 3.354607
 H 3.460228 -0.128677 2.421223
 H 2.571414 -0.923641 3.713775
 C -0.274008 -0.154625 3.507842
 H -0.744464 -0.539905 1.215729
 H -0.224803 -2.131237 2.498030
 C 0.386973 1.201920 3.291914
 H 2.366373 1.935422 2.793559
 H 2.249019 1.237258 4.395869
 H -1.372214 -0.022071 3.532662
 H -0.001165 -0.521406 4.523135
 H 0.031785 1.948943 4.019766
 H 0.075182 1.573168 2.299330
 C 2.075463 1.561543 -0.074605
 C 3.511793 1.994830 0.225513
 C 1.610570 2.155031 -1.408168
 H 1.416376 1.969179 0.713450
 C 3.626901 3.516899 0.245310
 H 4.179464 1.599405 -0.560099
 H 3.862811 1.578510 1.181346
 C 1.736530 3.675509 -1.403225
 H 2.220749 1.735181 -2.229390
 H 0.571201 1.858206 -1.607560
 C 3.150481 4.131072 -1.065024
 H 4.668520 3.809385 0.454522
 H 3.019344 3.911173 1.079866
 H 1.421865 4.078841 -2.379312
 H 1.032092 4.085466 -0.657001
 H 3.201701 5.230678 -1.016013
 H 3.834635 3.824203 -1.877112
 C -3.209074 -2.925608 1.443594
 H -2.457414 -2.200051 1.785923
 H -4.074754 -2.870260 2.123357
 H -2.771714 -3.932970 1.530977
 C -4.597781 -3.703828 -0.519059
 H -5.498484 -3.786223 0.109815

H -4.923836 -3.485252 -1.547370
 H -4.112811 -4.692140 -0.517596
 C -2.280680 2.929921 0.276527
 H -3.058861 3.387187 0.908743
 H -1.747167 2.178412 0.876707
 H -1.565232 3.719177 -0.006860
 C -3.565686 3.327544 -1.860406
 H -4.032183 2.863768 -2.742740
 H -4.344896 3.892243 -1.324346
 H -2.822604 4.059843 -2.212332
 P 1.722855 -0.259128 0.045699
 C 3.042247 -1.203570 -0.842158
 C 4.355731 -1.311656 -0.056220
 C 2.542972 -2.606716 -1.212757
 H 3.235089 -0.642953 -1.777173
 C 5.411093 -2.077571 -0.848989
 H 4.162309 -1.843063 0.891773
 H 4.740358 -0.320146 0.216351
 C 3.596813 -3.379411 -1.999313
 H 2.301831 -3.157108 -0.285575
 H 1.604617 -2.548667 -1.780027
 C 4.918902 -3.463159 -1.246828
 H 6.338613 -2.150444 -0.258658
 H 5.665861 -1.503517 -1.758435
 H 3.219494 -4.387900 -2.232753
 H 3.760199 -2.877382 -2.970279
 H 5.677544 -3.982707 -1.853982
 H 4.779060 -4.072242 -0.335504

1.2 Methylsubstitution

1.2.1 Energien mit einer SMe₂-substituierten Oniumgruppe

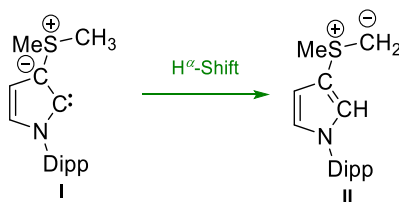


Tabelle 1.4. Energien der Verbindungen.

	Corr(H)	Corr(G)	E(SCF)	E(PCM)	ΔG in hartree	ΔG in kJ/mol
I	0.411066	0.337071	-1153.08981262	-1153.10096465	–	–
TS_{I→II}	0.405890	0.332847	-1153.06941052	-1153.07586626	0.020874	54.805711
II	0.410507	0.334357	-1153.11164091	-1153.11813596	-0.019885	-52.208881

1.2.2 Koordinaten mit einer SMe₂-substituierten Oniumgruppe

I

E = -1153.08981262

C 1.149095 -0.000215 -0.242527

C 2.206456 -0.000984 0.682012

C 1.768988 -0.001558 2.047670

C 0.403518 -0.001190 1.952276

N 0.068702 -0.000418 0.600390

H 2.362139 -0.002269 2.960855

H -0.363614 -0.001383 2.725374

C -1.287500 0.000214 0.158345

C -1.937097 -1.229391 -0.046090

C -1.935916 1.230411 -0.046149

C -3.269363 -1.204962 -0.469039

C -3.268193 1.207226 -0.469165

C -3.930045 0.001448 -0.677195

H -3.799491 -2.144502 -0.638083

H -3.797403 2.147268 -0.638306

H -4.972634 0.001935 -1.005172

C -1.182090 -2.532559 0.121568

H -0.381090 -2.346628 0.854659

C -1.179798 2.532908 0.121694

H -0.378480 2.345941 0.854169

C -0.506272 2.910027 -1.200394

H 0.150218 2.092869 -1.536374
 H -1.261218 3.095935 -1.981818
 H 0.097145 3.825322 -1.084397
 C -2.039846 3.672168 0.657698
 H -2.804167 3.990454 -0.069180
 H -2.555988 3.388878 1.587783
 H -1.413798 4.552588 0.870091
 C -0.508025 -2.909468 -1.200314
 H -1.262656 -3.094477 -1.982257
 H 0.149212 -2.092612 -1.535571
 H 0.094700 -3.825229 -1.084413
 C -2.043313 -3.671488 0.656362
 H -2.559919 -3.388345 1.586235
 H -2.807336 -3.988857 -0.071232
 H -1.418026 -4.552453 0.868726
 S 3.845201 -0.000883 0.151607
 C 3.905369 1.370638 -1.019763
 H 4.838745 1.323352 -1.597492
 H 3.004585 1.281046 -1.645619
 H 3.864009 2.292243 -0.425747
 C 3.904923 -1.371019 -1.021347
 H 3.004312 -1.280290 -1.647301
 H 4.838449 -1.323673 -1.598819
 H 3.862839 -2.293288 -0.428398

TS_{I→II}

E = -1153.06941052
 C 1.137784 -0.267704 -0.237440
 C 2.215054 -0.415419 0.610408
 C 1.820101 -0.361868 1.975247
 C 0.459801 -0.145476 1.928388
 N 0.070627 -0.093107 0.601879
 H 2.425563 -0.454548 2.875507
 H -0.268623 -0.033347 2.731180
 C -1.277657 0.095969 0.178822
 C -2.091967 -1.031969 -0.019884
 C -1.745488 1.405640 -0.025724

C -3.408206 -0.820423 -0.441014
 C -3.068646 1.568577 -0.445792
 C -3.892490 0.466453 -0.651288
 H -4.065343 -1.676556 -0.607212
 H -3.461606 2.573065 -0.615568
 H -4.924838 0.612561 -0.978823
 C -1.533562 -2.429507 0.156617
 H -0.676098 -2.350186 0.843078
 C -0.815919 2.590754 0.143402
 H -0.033239 2.286233 0.856085
 C -0.123556 2.904556 -1.185442
 H 0.423693 2.025802 -1.556963
 H -0.861533 3.197805 -1.949632
 H 0.591386 3.734687 -1.066379
 C -1.506165 3.824387 0.715827
 H -2.235170 4.254709 0.010893
 H -2.037355 3.593996 1.651825
 H -0.764596 4.609558 0.929148
 C -0.999026 -2.950587 -1.179702
 H -1.811420 -3.031254 -1.920168
 H -0.231687 -2.273854 -1.582923
 H -0.549007 -3.948619 -1.056633
 C -2.531488 -3.402989 0.775714
 H -2.944595 -3.014568 1.719057
 H -3.375086 -3.616111 0.100033
 H -2.040294 -4.364750 0.989131
 S 3.761283 -0.707113 -0.208005
 C 4.655806 0.826248 0.126905
 H 5.625909 0.780015 -0.386138
 H 4.051466 1.670201 -0.232215
 H 4.803379 0.900806 1.212736
 C 3.175460 -0.538622 -1.866133
 H 1.818920 -0.393234 -1.461361
 H 3.555310 0.394265 -2.303508
 H 3.490917 -1.419250 -2.439688

//

E = -1153.11164091

C 1.099456 -0.248160 -0.360848

C 2.253762 -0.390658 0.379344

C 1.895990 -0.354325 1.757368

C 0.528979 -0.179541 1.801407

N 0.057561 -0.117415 0.514586

H 2.553812 -0.446599 2.618646

H -0.153555 -0.092628 2.644192

C -1.304271 0.079153 0.141636

C -2.125542 -1.046770 -0.039556

C -1.770236 1.392491 -0.042792

C -3.451184 -0.827587 -0.425326

C -3.103068 1.560251 -0.428748

C -3.935380 0.461903 -0.618679

H -4.114632 -1.681624 -0.579549

H -3.495298 2.567672 -0.585312

H -4.974341 0.612932 -0.921658

C -1.585673 -2.452489 0.129562

H -0.611529 -2.371032 0.635204

C -0.850169 2.585216 0.123735

H 0.052899 2.232401 0.644912

C -0.411862 3.116349 -1.242370

H 0.092445 2.335704 -1.830698

H -1.276853 3.472249 -1.824889

H 0.288349 3.958291 -1.126081

C -1.471242 3.686428 0.979561

H -2.347961 4.141846 0.492588

H -1.792905 3.300765 1.958668

H -0.741213 4.491771 1.153476

C -1.339799 -3.097592 -1.235511

H -2.279496 -3.195450 -1.802671

H -0.642356 -2.498864 -1.839684

H -0.907828 -4.103605 -1.118101

C -2.485427 -3.320289 1.006129

H -2.665034 -2.851322 1.985270

H -3.464616 -3.504238 0.536437

H -2.017754 -4.301689 1.178897
 S 3.841534 -0.671569 -0.381803
 C 4.795111 0.492896 0.687048
 H 5.828631 0.451617 0.318682
 H 4.384218 1.505546 0.573010
 H 4.753857 0.173592 1.738422
 C 3.744178 -0.192483 -1.953845
 H 0.971620 -0.237395 -1.440382
 H 3.490826 0.840292 -2.204252
 H 4.299502 -0.821992 -2.647048

1.2.3 Energien mit einer S_{Me}₂-substituierten Oniumgruppe

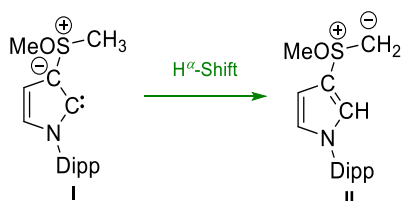


Tabelle 1.5. Energien der Verbindungen.

	Corr(H)	Corr(G)	E(SCF)	E(PCM)	ΔG in hartree	ΔG in kJ/mol
I	0.415098	0.342229	-1228.23803115	-1228.26512964	–	–
TS_{I→II}	0.411353	0.336934	-1228.23673494	-1228.24591841	0.022958	60.276833
II.	0.416453	0.339457	-1228.28527205	-1228.29627208	-0.032366	-84.978088

1.2.4 Koordinaten mit einer S_{Me}₂-substituierten Oniumgruppe

I

E = -1228.23803115
 C 0.817212 -0.000720 -0.482240
 C 1.961326 -0.001014 0.341863
 C 1.657318 -0.001327 1.752807
 C 0.291405 -0.000676 1.781808
 N -0.169727 -0.000385 0.470659
 H 2.319398 -0.001730 2.618621
 H -0.395010 -0.000529 2.627991
 C -1.562963 0.000163 0.157447
 C -2.226026 -1.230316 0.012355
 C -2.225115 1.231154 0.012520
 C -3.591768 -1.205431 -0.285136

C -3.590874 1.207322 -0.284981
 C -4.268507 0.001205 -0.430358
 H -4.135268 -2.144476 -0.406387
 H -4.133679 2.146785 -0.406111
 H -5.336806 0.001616 -0.661119
 C -1.456973 -2.532943 0.105089
 H -0.608583 -2.357472 0.786250
 C -1.455101 2.533200 0.105425
 H -0.606853 2.357016 0.786578
 C -0.869770 2.884879 -1.265227
 H -0.229535 2.066851 -1.630453
 H -1.675961 3.051611 -1.998075
 H -0.267198 3.806051 -1.206290
 C -2.273273 3.685510 0.677917
 H -3.080036 3.996895 -0.004581
 H -2.731233 3.421351 1.643611
 H -1.630280 4.565376 0.834351
 C -0.871920 -2.884889 -1.265612
 H -1.678243 -3.050908 -1.998475
 H -0.231051 -2.067313 -1.630735
 H -0.270050 -3.806526 -1.206796
 C -2.275991 -3.684715 0.677455
 H -2.733746 -3.420333 1.643185
 H -3.082990 -3.995425 -0.005072
 H -1.633645 -4.565073 0.833778
 C 4.400655 1.396067 0.315801
 H 5.442001 1.336876 -0.027752
 H 3.896851 2.274215 -0.109523
 H 4.325688 1.404805 1.410908
 C 4.402350 -1.394723 0.318504
 H 5.443642 -1.334722 -0.025059
 H 4.327331 -1.401552 1.413619
 H 3.899803 -2.274344 -0.105252
 S 3.500609 -0.000531 -0.345616
 O 3.601486 -0.001791 -1.801823

$TS_{I \rightarrow II}$

E = -1228.23673494
 C 0.931301 -0.053039 -0.264947
 C 2.032812 -0.080687 0.587518
 C 1.638843 -0.049528 1.955596
 C 0.266824 -0.005113 1.911319
 N -0.136474 -0.010513 0.583079
 H 2.263368 -0.080421 2.845599
 H -0.467452 0.022546 2.715681
 C -1.503252 0.021483 0.173587
 C -2.178903 -1.194934 -0.020696
 C -2.124024 1.267921 -0.016802
 C -3.515893 -1.138981 -0.425645
 C -3.462108 1.273766 -0.420491
 C -4.151429 0.082323 -0.623023
 H -4.068970 -2.066242 -0.588460
 H -3.973935 2.224973 -0.579365
 H -5.197661 0.106378 -0.937724
 C -1.457693 -2.517565 0.143815
 H -0.606320 -2.341143 0.819700
 C -1.340751 2.554898 0.149370
 H -0.521124 2.345398 0.854867
 C -0.702700 2.953108 -1.184086
 H -0.061588 2.145185 -1.566651
 H -1.477434 3.161839 -1.939463
 H -0.088435 3.860472 -1.067111
 C -2.168016 3.695876 0.732311
 H -2.948590 4.038281 0.034625
 H -2.660156 3.401261 1.671555
 H -1.523272 4.562896 0.942739
 C -0.883957 -2.970610 -1.201044
 H -1.691421 -3.149033 -1.929531
 H -0.211379 -2.206476 -1.617186
 H -0.314585 -3.906543 -1.086132
 C -2.326106 -3.602575 0.772635
 H -2.769192 -3.266968 1.722519
 H -3.147514 -3.912015 0.107100

H -1.722294 -4.499967 0.976576
 C 4.208872 1.482449 -0.289395
 H 5.174671 1.433017 -0.809790
 H 3.492194 2.132299 -0.806585
 H 4.350695 1.801007 0.751255
 C 3.001433 -0.521394 -1.814811
 H 1.668350 -0.228437 -1.485038
 H 3.585364 0.037300 -2.556757
 H 3.078103 -1.608590 -1.953757
 O 4.540527 -1.029409 0.474707
 S 3.554886 -0.180158 -0.211821

//

E = -1228.28527205
 C 0.896016 -0.057006 -0.366408
 C 2.053812 -0.098475 0.386749
 C 1.698814 -0.074869 1.762160
 C 0.324681 -0.018396 1.799654
 N -0.148292 -0.008498 0.505587
 H 2.392919 -0.118814 2.597666
 H -0.370101 0.004524 2.636219
 C -1.525512 0.019884 0.132269
 C -2.198632 -1.200410 -0.048434
 C -2.150375 1.265600 -0.047518
 C -3.540801 -1.147119 -0.435378
 C -3.493659 1.266031 -0.433709
 C -4.181534 0.072495 -0.627101
 H -4.092990 -2.076757 -0.589958
 H -4.009252 2.216612 -0.587396
 H -5.231059 0.093229 -0.930398
 C -1.488337 -2.527901 0.125273
 H -0.540708 -2.328764 0.648690
 C -1.386270 2.563265 0.122962
 H -0.450565 2.325884 0.652004
 C -1.007593 3.142222 -1.241635
 H -0.412637 2.426664 -1.828482
 H -1.906073 3.391463 -1.828657

H -0.414043 4.062261 -1.123597
 C -2.144093 3.581163 0.971541
 H -3.065637 3.925597 0.476487
 H -2.424165 3.160059 1.948700
 H -1.519306 4.469675 1.149783
 C -1.140856 -3.131124 -1.237101
 H -2.051522 -3.342826 -1.820186
 H -0.513270 -2.448886 -1.829351
 H -0.589142 -4.075924 -1.113934
 C -2.285291 -3.507114 0.983739
 H -2.543080 -3.068385 1.959326
 H -3.222545 -3.815803 0.494511
 H -1.697114 -4.419483 1.165338
 C 4.157688 1.513029 -0.573997
 H 5.167153 1.468361 -1.005350
 H 3.446102 1.964357 -1.273598
 H 4.188946 2.038412 0.388174
 C 3.580841 -0.907686 -1.688690
 H 0.762525 -0.070597 -1.444880
 H 4.499037 -0.801031 -2.275766
 H 3.164150 -1.917405 -1.615948
 O 4.539460 -0.573784 0.942317
 S 3.696333 -0.183388 -0.214581

1.2.5 Energien mit einer PMe_3 -substituierten Oniumgruppe

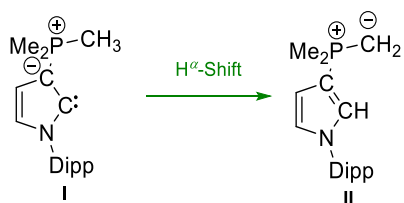


Tabelle 1.6. Energien der Verbindungen.

	Corr(H)	Corr(G)	E(SCF)	E(PCM)	ΔG in hartree	ΔG in kJ/mol
I	0.449097	0.373027	-1136.19022452	-1136.20506972	–	–
$\text{TS}_{\text{I} \rightarrow \text{II}}$	0.444988	0.366319	-1136.17258825	-1136.22135972	-0.021507	-56.466629
II	0.449858	0.369924	-1136.21578461	-1136.22399217	-0.020534	-53.913198

1.2.6 Koordinaten mit einer PMe_3 -substituierten Oniumgruppe

I

```

E = -1136.19146063
C 0.850412 0.100431 -0.339173
C 1.963769 0.193697 0.531098
C 1.571266 0.187232 1.915906
C 0.205518 0.114824 1.885544
N -0.191166 0.062531 0.553355
H 2.191445 0.246067 2.810254
H -0.524610 0.108408 2.694029
C -1.561571 -0.029485 0.171446
C -2.135356 -1.301638 0.001613
C -2.299280 1.152417 -0.015275
C -3.481812 -1.370421 -0.368162
C -3.642881 1.036369 -0.383749
C -4.229828 -0.212874 -0.557629
H -3.954101 -2.344732 -0.509550
H -4.240512 1.937171 -0.537615
H -5.282245 -0.285168 -0.843736
C -1.288819 -2.549738 0.152472
H -0.483817 -2.304905 0.863814
C -1.624518 2.503318 0.112325
H -0.797002 2.381549 0.829374
P 3.519471 0.084699 -0.206446
C -1.003638 2.896827 -1.230651
H -0.298842 2.119311 -1.563349
H -1.784919 3.015001 -1.999366
H -0.461501 3.852832 -1.144564
C -2.543319 3.596269 0.646987
H -3.339845 3.853580 -0.069491
H -3.023008 3.298860 1.592187
H -1.969163 4.517455 0.831301
C -0.623348 -2.887126 -1.184538
H -1.382934 -3.123006 -1.947878
H -0.027072 -2.030079 -1.534742
H 0.038447 -3.763031 -1.080410
C -2.055994 -3.741989 0.713655
    
```

H -2.568212 -3.489917 1.654916
H -2.813830 -4.115534 0.006484
H -1.366376 -4.576676 0.913823
C 4.825019 0.766664 0.847484
H 4.844191 0.216312 1.799355
H 5.808196 0.684137 0.362798
H 4.599800 1.821940 1.055921
C 3.505806 0.962296 -1.780191
H 2.577241 0.640085 -2.277968
H 3.434131 2.041598 -1.588366
H 4.394632 0.733755 -2.384919
C 4.017729 -1.621509 -0.579370
H 4.998870 -1.669780 -1.074961
H 4.040696 -2.196821 0.357204
H 3.241508 -2.050001 -1.230100

TS_{I→II}

E = -1136.17258825
C -0.905665 0.000015 -0.231818
C -2.016871 0.000068 0.615092
C -1.593430 0.000106 1.979586
C -0.219901 0.000082 1.935961
N 0.173049 0.000028 0.606854
H -2.199580 0.000149 2.884967
H 0.518880 0.000096 2.737254
C 1.534549 -0.000014 0.184966
C 2.182785 1.230829 -0.015511
C 2.182718 -1.230896 -0.015488
C 3.516767 1.206411 -0.432787
C 3.516702 -1.206558 -0.432763
C 4.177948 -0.000093 -0.638795
H 4.047477 2.146004 -0.599544
H 4.047362 -2.146182 -0.599500
H 5.221472 -0.000125 -0.963557
C 1.429498 2.534744 0.155038
H 0.608349 2.341622 0.863249
C 1.429362 -2.534767 0.155094

H 0.608250 -2.341592 0.863335
 C 0.793879 -2.947818 -1.174978
 H 0.127930 -2.157133 -1.550458
 H 1.569241 -3.135352 -1.935487
 H 0.203908 -3.870736 -1.054942
 C 2.285151 -3.656026 0.735209
 H 3.070771 -3.981050 0.034640
 H 2.774361 -3.349627 1.672362
 H 1.661334 -4.537608 0.948718
 C 0.794084 2.947817 -1.175059
 H 1.569481 3.135298 -1.935546
 H 0.128103 2.157165 -1.550553
 H 0.204160 3.870770 -1.055054
 C 2.285332 3.655956 0.735177
 H 2.774489 3.349534 1.672349
 H 3.070998 3.980927 0.034634
 H 1.661560 4.537577 0.948657
 C -4.529545 -1.448838 0.129752
 H -5.489852 -1.433810 -0.405380
 H -3.966050 -2.349750 -0.151415
 H -4.707523 -1.470270 1.215222
 C -2.942763 0.000198 -1.958631
 H -1.588039 0.000021 -1.484740
 H -3.217549 -0.908639 -2.510042
 H -3.217156 0.909345 -2.509727
 P -3.524958 0.000049 -0.303883
 C -4.529779 1.448665 0.130127
 H -5.490088 1.433608 -0.404998
 H -4.707751 1.469799 1.215604
 H -3.966442 2.349743 -0.150822

//

E = -1136.21578461
 C 0.871189 0.038377 -0.337903
 C 2.040734 0.066754 0.402616
 C 1.660082 0.047692 1.779547
 C 0.284518 0.010982 1.819045

N -0.182926 0.006800 0.525531
 H 2.319540 0.066468 2.644833
 H -0.410958 -0.007656 2.655341
 C -1.556874 -0.011550 0.144845
 C -2.191844 -1.252439 -0.034558
 C -2.220250 1.212621 -0.046507
 C -3.533005 -1.244003 -0.428239
 C -3.560643 1.169082 -0.440738
 C -4.210553 -0.046040 -0.630372
 H -4.054904 -2.191220 -0.581715
 H -4.104061 2.102532 -0.603537
 H -5.258497 -0.059658 -0.939672
 C -1.437659 -2.554958 0.142587
 H -0.505738 -2.323017 0.680510
 C -1.497940 2.534250 0.121887
 H -0.559808 2.328964 0.659861
 P 3.661241 0.100731 -0.366373
 C -1.124632 3.116785 -1.242685
 H -0.495567 2.420403 -1.816336
 H -2.024879 3.330279 -1.841218
 H -0.564885 4.057532 -1.123685
 C -2.294814 3.532984 0.957474
 H -3.221376 3.847231 0.451583
 H -2.571863 3.108968 1.934380
 H -1.698651 4.440828 1.136502
 C -1.048157 -3.134220 -1.218829
 H -1.942087 -3.375770 -1.816116
 H -0.440295 -2.422236 -1.796319
 H -0.462477 -4.058640 -1.095576
 C -2.210000 -3.569396 0.982076
 H -2.498652 -3.147720 1.956610
 H -3.127950 -3.908983 0.476902
 H -1.591806 -4.461409 1.166163
 C 4.719423 0.809196 0.976900
 H 4.671315 0.231427 1.913760
 H 5.759843 0.832475 0.619644
 H 4.394865 1.842205 1.169337

C 3.557692 0.759583 -1.907713
 H 0.742527 0.047847 -1.417925
 H 3.077847 1.738547 -1.997680
 H 4.392006 0.555888 -2.585287
 C 4.296191 -1.605022 -0.464233
 H 5.308564 -1.588299 -0.895027
 H 4.333779 -2.065795 0.532636
 H 3.635295 -2.183822 -1.122293

1.3 *tert*-Butylsubstitution

1.3.1 Energien mit einer *StBu*₂-substituierten Oniumgruppe

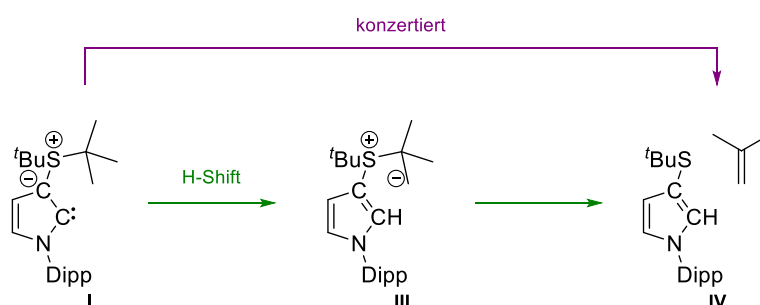


Tabelle 1.7. Energien der Verbindungen.

	Corr(H)	Corr(G)	E(SCF)	E(PCM)	ΔG in hartree	ΔG in kJ/mol
I	0.588029	0.497060	-1388.78198866	-1388.79044796	–	–
TS _{I→III}	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–
III	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–
TS _{III→IV}	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–
Isobuten	0.114127	0.080558	-157.086497623	-157.087805541	-0.093012	-244.202877
Sulfid	0.472246	0.391578	-1231.76514582	-1231.77073037		
TS _{I→IV}	0.582459	0.493496	-1388.76052117	-1388.76629945	0.020585	54.044631

1.3.2 Koordinaten mit einer *StBu*₂-substituierten Oniumgruppe

I

E = -1388.78198866
 C 0.123142 0.011726 -0.049501
 C 1.112555 0.023626 0.957117
 C 0.555545 0.036360 2.281773
 C -0.797532 0.041209 2.081409
 N -1.020897 0.025121 0.708392
 H 1.078542 0.042884 3.237015

H -1.624597 0.054846 2.789698
 C -2.335023 0.011554 0.157259
 C -2.961094 -1.224846 -0.078833
 C -2.970120 1.234040 -0.120459
 C -4.253248 -1.214908 -0.611994
 C -4.262197 1.196983 -0.653059
 C -4.899264 -0.015638 -0.895537
 H -4.763679 -2.160038 -0.808709
 H -4.778737 2.131540 -0.882317
 H -5.910547 -0.026509 -1.309955
 C -2.218345 -2.521066 0.176365
 H -1.475737 -2.313508 0.963456
 C -2.236266 2.543439 0.086413
 H -1.466700 2.360822 0.853042
 C -1.509255 2.932520 -1.202791
 H -0.846134 2.115642 -1.523620
 H -2.230658 3.131950 -2.011994
 H -0.903499 3.841431 -1.053721
 C -3.132204 3.670201 0.589214
 H -3.873710 3.977230 -0.165565
 H -3.678555 3.378043 1.499026
 H -2.527994 4.559880 0.825458
 C -1.445827 -2.928728 -1.080700
 H -2.138494 -3.140956 -1.911416
 H -0.771151 -2.115928 -1.389395
 H -0.847359 -3.836072 -0.896167
 C -3.114913 -3.649497 0.673876
 H -3.698183 -3.345451 1.556465
 H -3.823582 -3.986041 -0.099658
 H -2.505950 -4.523503 0.952400
 S 2.811708 -0.035366 0.679624
 C 3.236318 1.557643 -0.247528
 C 3.126179 -1.583108 -0.350328
 C 2.398199 -2.668566 0.439529
 H 1.311121 -2.518096 0.407069
 H 2.638235 -3.640814 -0.018638
 H 2.718222 -2.696606 1.492538

C 4.628018 -1.842917 -0.328522
 H 4.818039 -2.822797 -0.794167
 H 5.195371 -1.095777 -0.897157
 H 5.019761 -1.874894 0.699321
 C 2.558874 -1.476964 -1.754280
 H 2.543789 -2.484078 -2.201590
 H 1.527462 -1.085680 -1.715829
 H 3.175191 -0.835975 -2.398604
 C 4.735387 1.573513 -0.509733
 H 5.318201 1.336812 0.393655
 H 5.021423 0.880521 -1.312239
 H 5.019186 2.585408 -0.839564
 C 2.413264 1.748057 -1.509543
 H 2.401398 2.820172 -1.762575
 H 2.836417 1.206266 -2.364256
 H 1.374922 1.403938 -1.349191
 C 2.864846 2.612076 0.794489
 H 3.131282 3.602556 0.394121
 H 1.785363 2.597373 1.001833
 H 3.408061 2.465177 1.740694

Sulfid

E = -1231.76514582
 C 0.523738 -0.622400 -0.444312
 C 1.599511 -1.106704 0.282518
 C 1.184223 -1.167742 1.647212
 C -0.112827 -0.709336 1.698301
 N -0.504562 -0.382866 0.421681
 H 1.784559 -1.518005 2.483966
 H -0.800259 -0.582899 2.531838
 C -1.762620 0.182045 0.065585
 C -2.844130 -0.674372 -0.200491
 C -1.872359 1.582061 -0.009181
 C -4.066208 -0.089729 -0.546405
 C -3.111668 2.118935 -0.368086
 C -4.199118 1.292013 -0.631948
 H -4.927458 -0.728874 -0.755708

H -3.228086 3.202946 -0.439973
 H -5.161402 1.730135 -0.907808
 C -2.705169 -2.179959 -0.104410
 H -1.641117 -2.400657 0.068476
 C -0.683635 2.482575 0.262050
 H 0.114022 1.853581 0.686240
 C -0.151114 3.083377 -1.039546
 H 0.120724 2.297655 -1.759947
 H -0.904432 3.730165 -1.517413
 H 0.746056 3.692749 -0.848814
 C -1.004053 3.565703 1.289731
 H -1.764065 4.271657 0.919214
 H -1.379733 3.128454 2.226875
 H -0.100909 4.149914 1.524271
 C -3.110796 -2.871760 -1.404500
 H -4.179445 -2.726763 -1.629196
 H -2.532712 -2.486983 -2.257907
 H -2.932610 -3.955846 -1.334186
 C -3.487258 -2.723954 1.091334
 H -3.155456 -2.255864 2.030196
 H -4.567156 -2.532562 0.984662
 H -3.345868 -3.811842 1.185654
 S 3.148827 -1.582545 -0.388148
 C 4.154128 -0.021021 -0.256977
 H 0.419941 -0.438557 -1.510972
 C 5.510279 -0.414558 -0.835142
 H 5.966115 -1.232913 -0.257039
 H 5.416602 -0.742312 -1.881824
 H 6.194650 0.448471 -0.806014
 C 3.514253 1.086027 -1.082616
 H 4.128259 2.001148 -1.031939
 H 3.420170 0.788553 -2.137642
 H 2.510655 1.331174 -0.703485
 C 4.287846 0.398175 1.200511
 H 4.921788 1.297644 1.279551
 H 3.305419 0.636913 1.634747
 H 4.744297 -0.402565 1.801023

Isobuten

E = -157.086497623

C 0.000001 0.120976 -0.000016

C -1.269883 -0.676973 -0.000006

H -2.160832 -0.033790 -0.000473

H -1.319316 -1.336722 -0.883098

H -1.319690 -1.335905 0.883679

C 1.269839 -0.677040 -0.000002

H 1.319559 -1.336244 -0.883489

H 2.160829 -0.033908 0.000219

H 1.319313 -1.336528 0.883289

C 0.000045 1.458922 0.000010

H -0.933374 2.028927 -0.000046

H 0.933502 2.028860 0.000008

TS_{I→IV}

E = -1388.76052117

C 0.259020 0.167774 0.073363

C 1.204242 0.159441 1.109875

C 0.576494 0.065170 2.392187

C -0.767841 0.015889 2.119240

N -0.934424 0.068675 0.744162

H 1.046973 0.045801 3.373694

H -1.627972 -0.015900 2.786396

C -2.210953 0.073037 0.113979

C -2.814901 -1.153594 -0.206090

C -2.829919 1.305399 -0.165293

C -4.074755 -1.128386 -0.813157

C -4.085038 1.282990 -0.778579

C -4.704786 0.077679 -1.097249

H -4.568676 -2.069208 -1.069085

H -4.588959 2.223762 -1.010165

H -5.688621 0.080507 -1.573097

C -2.131399 -2.469808 0.104155

H -1.109166 -2.229855 0.432674

C -2.122540 2.609725 0.142837

H -1.400142 2.399630 0.947353

C -1.320407 3.070790 -1.076329
 H -0.607260 2.290224 -1.379597
 H -1.988317 3.283309 -1.926946
 H -0.756128 3.989444 -0.847707
 C -3.062579 3.703095 0.640053
 H -3.756023 4.041624 -0.146237
 H -3.664046 3.361852 1.496337
 H -2.484539 4.584033 0.959149
 C -2.019656 -3.359220 -1.132211
 H -3.007876 -3.687312 -1.492051
 H -1.521872 -2.829593 -1.958189
 H -1.436907 -4.265920 -0.904475
 C -2.827426 -3.192203 1.257336
 H -2.848967 -2.565120 2.161100
 H -3.868480 -3.445951 0.999716
 H -2.303902 -4.129137 1.505753
 S 2.887806 0.018721 0.762942
 C 3.310731 1.492963 -0.319250
 C 2.761994 -1.872484 -0.476510
 C 2.571313 -2.778184 0.714401
 H 1.631578 -2.544845 1.238899
 H 2.504506 -3.819517 0.355241
 H 3.404378 -2.714435 1.430019
 C 4.139430 -1.921905 -1.080569
 H 4.291957 -2.929643 -1.505535
 H 4.259381 -1.205435 -1.904194
 H 4.930589 -1.752883 -0.333770
 C 1.612123 -1.754086 -1.345180
 H 0.910923 -2.594661 -1.254752
 H 0.870731 -0.813401 -0.926230
 H 1.841588 -1.520501 -2.392447
 C 4.835939 1.536451 -0.344559
 H 5.252776 1.615539 0.670744
 H 5.266830 0.648860 -0.828293
 H 5.161045 2.419543 -0.917220
 C 2.719895 1.381696 -1.715293
 H 2.922321 2.318006 -2.260783

H 3.165065 0.558250 -2.289474
 H 1.631721 1.229830 -1.656564
 C 2.752055 2.716138 0.398416
 H 3.060284 3.621158 -0.149986
 H 1.654189 2.682033 0.431158
 H 3.130876 2.789444 1.428924

1.3.3 Energien mit einer SO^tBu_2 -substituierten Oniumgruppe

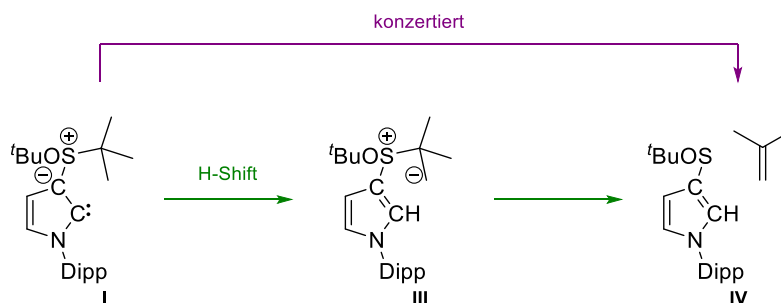


Tabelle 1.8. Energien der Verbindungen.

	Corr(H)	Corr(G)	E(SCF)	E(PCM)	ΔG in hartree	ΔG in kJ/mol
I	0.593734	0.501517	-1463.93064310	-1463.94630531	–	–
TS _{I→III}	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–
III	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–
TS _{III→IV}	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–
Isobuten	0.114127	0.080558	-157.086497623	-157.087805541	-0.097486	-255.950126
Sulfoxid	0.477032	0.393145	-1306.91848182	-1306.92817201		
TS _{I→IV}	0.587307	0.494564	-1463.91754247	-1463.92567426	0.013678	35.911720

1.3.4 Koordinaten mit einer SO^tBu_2 -substituierten Oniumgruppe

I

E = -1463.93064310
 C 0.219979 -0.000988 -0.474575
 C -0.933243 -0.054584 0.336596
 C -0.626531 -0.126598 1.745583
 C 0.740495 -0.116346 1.785186
 N 1.205501 -0.041052 0.480167
 H -1.284331 -0.165807 2.611441
 H 1.420949 -0.153884 2.635406
 C 2.596543 -0.017715 0.164967
 C 3.249058 1.222607 0.064304

C 3.267269 -1.236947 -0.031743
 C 4.613507 1.220832 -0.240056
 C 4.631487 -1.190704 -0.333395
 C 5.298922 0.025906 -0.434505
 H 5.149223 2.168201 -0.327215
 H 5.181402 -2.120209 -0.493318
 H 6.366201 0.042960 -0.669428
 C 2.466889 2.512459 0.211950
 H 1.624153 2.298806 0.889470
 C 2.503986 -2.545792 0.013672
 H 1.668169 -2.404286 0.718144
 C 1.892068 -2.836351 -1.359867
 H 1.247756 -2.001296 -1.677180
 H 2.683835 -2.974393 -2.114180
 H 1.287143 -3.757539 -1.328428
 C 3.336169 -3.720072 0.516466
 H 4.131558 -3.995427 -0.194400
 H 3.810632 -3.499998 1.485292
 H 2.699106 -4.609122 0.642470
 C 1.869908 2.912035 -1.140489
 H 2.669374 3.128953 -1.867562
 H 1.248231 2.094806 -1.539186
 H 1.247781 3.816844 -1.039810
 C 3.275529 3.649587 0.826324
 H 3.738005 3.352630 1.780232
 H 4.078057 3.993912 0.154695
 H 2.625197 4.517164 1.017754
 C -3.248801 1.623398 -0.103927
 C -3.450019 -1.512599 0.216402
 C -2.444437 -2.660398 0.135408
 H -1.644054 -2.557642 0.879793
 H -2.985498 -3.602057 0.316615
 H -1.981908 -2.708703 -0.861214
 C -4.585102 -1.743690 -0.773370
 H -5.045526 -2.716226 -0.540968
 H -5.368440 -0.978944 -0.706847
 H -4.205322 -1.774435 -1.803101

C -3.960113 -1.311251 1.632603
 H -4.427874 -2.253031 1.960665
 H -3.152268 -1.086278 2.340568
 H -4.727061 -0.527175 1.693958
 C -4.679102 1.605711 -0.619266
 H -4.726521 1.195590 -1.637904
 H -5.355603 1.039274 0.036046
 H -5.047519 2.642708 -0.655835
 C -3.151792 2.007752 1.363204
 H -3.541700 3.032218 1.469543
 H -3.746788 1.359675 2.019434
 H -2.108388 2.006106 1.706901
 C -2.377010 2.544538 -0.956721
 H -2.722515 3.578223 -0.802136
 H -1.318074 2.477269 -0.666487
 H -2.455198 2.293614 -2.022177
 S -2.453399 -0.046733 -0.430327
 O -2.406283 -0.202769 -1.894438

Sulfoxid

E = -1306.91848182
 C 0.390751 -0.494762 -0.435754
 C 1.506898 -0.866147 0.291175
 C 1.134451 -0.945152 1.659488
 C -0.194385 -0.590046 1.723466
 N -0.634720 -0.317965 0.450496
 H 1.791868 -1.249182 2.470364
 H -0.876424 -0.510387 2.567121
 C -1.940210 0.139414 0.107167
 C -2.943280 -0.805290 -0.166928
 C -2.169521 1.525346 0.047690
 C -4.208886 -0.324324 -0.515796
 C -3.450391 1.957031 -0.307201
 C -4.460473 1.041786 -0.586236
 H -5.010291 -1.032748 -0.738638
 H -3.660574 3.027616 -0.366293
 H -5.456007 1.397920 -0.862012

C -2.663132 -2.293616 -0.124121
 H -1.658268 -2.427152 0.304000
 C -1.062185 2.522434 0.325644
 H -0.205624 1.959448 0.727086
 C -0.603300 3.194903 -0.968949
 H -0.282434 2.450929 -1.713468
 H -1.414710 3.788570 -1.419698
 H 0.244028 3.871644 -0.777444
 C -1.464885 3.550687 1.380353
 H -2.293343 4.189322 1.035376
 H -1.783209 3.061811 2.313149
 H -0.616397 4.211772 1.614736
 C -2.640242 -2.877777 -1.537187
 H -3.620640 -2.772674 -2.029000
 H -1.893729 -2.369551 -2.165747
 H -2.388503 -3.949288 -1.510761
 C -3.646946 -3.037215 0.776669
 H -3.651936 -2.618913 1.794352
 H -4.676484 -2.988244 0.388043
 H -3.372660 -4.100902 0.847400
 C 3.896568 0.418480 -0.446642
 C 3.154624 1.215982 -1.502735
 H 2.133197 1.464764 -1.179048
 H 3.685787 2.162836 -1.691955
 H 3.099472 0.669389 -2.458526
 C 5.325734 0.100718 -0.873143
 H 5.916888 1.028667 -0.923579
 H 5.797248 -0.578599 -0.148094
 H 5.352675 -0.376620 -1.865578
 C 3.863468 1.060147 0.926258
 H 4.498034 1.961002 0.938836
 H 2.841799 1.351589 1.211697
 H 4.247810 0.349983 1.674758
 H 0.241505 -0.342631 -1.501943
 S 3.118512 -1.294856 -0.316601
 O 3.826227 -1.955315 0.842213

Isobuten

E = -157.086497623

C 0.000001 0.120976 -0.000016

C -1.269883 -0.676973 -0.000006

H -2.160832 -0.033790 -0.000473

H -1.319316 -1.336722 -0.883098

H -1.319690 -1.335905 0.883679

C 1.269839 -0.677040 -0.000002

H 1.319559 -1.336244 -0.883489

H 2.160829 -0.033908 0.000219

H 1.319313 -1.336528 0.883289

C 0.000045 1.458922 0.000010

H -0.933374 2.028927 -0.000046

H 0.933502 2.028860 0.000008

TS_{I→IV}

E = -1463.91754247

C 0.100062 0.156707 -0.049659

C 1.093397 0.180574 0.946963

C 0.538243 0.166615 2.262036

C -0.817841 0.148851 2.054453

N -1.056561 0.133861 0.688525

H 1.068539 0.168300 3.211127

H -1.643531 0.171650 2.763893

C -2.365478 0.092560 0.127647

C -2.966704 -1.156806 -0.095309

C -3.015753 1.301587 -0.178358

C -4.259135 -1.177256 -0.629446

C -4.303601 1.232836 -0.715759

C -4.922276 0.005383 -0.936263

H -4.753118 -2.135455 -0.808735

H -4.833535 2.154307 -0.965756

H -5.931751 -0.028003 -1.353540

C -2.248531 -2.447017 0.245175

H -1.206158 -2.182728 0.478356

C -2.307678 2.627096 0.015731

H -1.539887 2.470116 0.789755

C -1.579851 3.021128 -1.271709
 H -0.882716 2.226522 -1.575736
 H -2.297592 3.184620 -2.091932
 H -1.007529 3.951840 -1.128198
 C -3.230516 3.740648 0.499788
 H -3.969870 4.026731 -0.265110
 H -3.779921 3.446033 1.406803
 H -2.645459 4.643260 0.733995
 C -2.222713 -3.416577 -0.934384
 H -3.230686 -3.781279 -1.188382
 H -1.804372 -2.938908 -1.832998
 H -1.607393 -4.298252 -0.694975
 C -2.848507 -3.095188 1.492823
 H -2.806678 -2.411180 2.353391
 H -3.903797 -3.368641 1.331401
 H -2.299319 -4.011778 1.760516
 C 3.275212 1.559802 -0.306683
 C 2.540860 -1.905638 -0.860842
 C 2.408849 -2.837179 0.312540
 H 1.430122 -2.720517 0.801734
 H 2.482605 -3.873749 -0.058842
 H 3.200744 -2.677057 1.059076
 C 3.902853 -1.876273 -1.493924
 H 4.088175 -2.860822 -1.958396
 H 3.971581 -1.123245 -2.291080
 H 4.697240 -1.705188 -0.751077
 C 1.358256 -1.713899 -1.665055
 H 0.652686 -2.553696 -1.603510
 H 0.647272 -0.803680 -1.137294
 H 1.545196 -1.401897 -2.700841
 C 4.785368 1.446245 -0.456671
 H 5.255004 1.201366 0.506274
 H 5.071415 0.682158 -1.192224
 H 5.179832 2.413407 -0.805282
 C 2.548985 1.720618 -1.628999
 H 2.763834 2.721770 -2.034950
 H 2.878025 0.977140 -2.369702

H 1.459914 1.621642 -1.493405
 C 2.904863 2.645840 0.693174
 H 3.322299 3.605629 0.349010
 H 1.814522 2.748186 0.784608
 H 3.324488 2.420839 1.685032
 O 3.615601 -0.313848 1.652886
 S 2.721922 -0.056851 0.480038

1.3.5 Energien mit einer PtBu_3 -substituierten Oniumgruppe

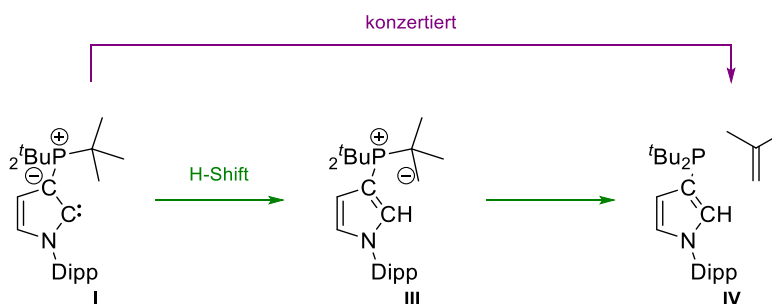


Tabelle 1.9. Energien der Verbindungen.

	Corr(H)	Corr(G)	E(SCF)	E(PCM)	ΔG in hartree	ΔG in kJ/mol
I	0.718515	0.620124	-1489.69360978	-1489.70256786	–	–
TS _{I→III}	0.711756	0.612105	-1489.66083671	-1489.66746849	0.027080	71.099511
III	0.716943	0.615613	-1489.67873242	-1489.68246530	0.015592	40.935641
TS _{III→IV}	0.715518	0.616090	-1489.67071744	-1489.67627127	0.022263	58.450430
Isobuten	0.114127	0.080558	-157.086497623	-157.087805541	-0.073673	-193.427808
Phosphan	0.600704	0.508253	-1332.65188701	-1332.65712207		
TS _{I→IV}	n.b.	n.b.	n.b.	-	-	-

1.3.6 Koordinaten mit einer PtBu_3 -substituierten Oniumgruppe

I

E = -1489.69360978
 C 0.469862 -0.184649 0.243385
 C -0.650181 -0.265777 -0.625937
 C -0.227096 -0.176625 -2.007952
 C 1.136483 -0.083535 -1.967957
 N 1.518925 -0.092425 -0.635953
 H -0.818001 -0.191831 -2.920768
 H 1.868809 -0.028722 -2.772551
 C 2.884227 -0.010406 -0.236670
 C 3.618005 -1.197509 -0.068839

C 3.462270 1.255884 -0.038564
 C 4.958129 -1.093605 0.315682
 C 4.805376 1.313063 0.344742
 C 5.547833 0.149590 0.519863
 H 5.550841 -1.999895 0.457233
 H 5.279316 2.283059 0.509166
 H 6.597518 0.212703 0.817832
 C 2.945151 -2.544827 -0.235209
 H 2.090369 -2.394547 -0.913303
 C 2.623270 2.510966 -0.170306
 H 1.808228 2.277022 -0.873530
 P -2.276008 -0.069096 0.007376
 C -2.813535 1.716273 -0.418308
 C 1.978239 2.841451 1.177344
 H 1.388060 1.982264 1.529955
 H 2.748411 3.068995 1.932163
 H 1.314619 3.717424 1.091149
 C 3.390919 3.702352 -0.732361
 H 4.162757 4.063390 -0.034023
 H 3.886442 3.454012 -1.683405
 H 2.704977 4.544207 -0.914582
 C 2.378837 -3.006009 1.109486
 H 3.188705 -3.163015 1.840588
 H 1.691755 -2.245480 1.508785
 H 1.828535 -3.954561 0.999045
 C 3.850008 -3.603268 -0.856786
 H 4.285446 -3.257714 -1.806938
 H 4.679377 -3.883259 -0.187728
 H 3.277047 -4.521651 -1.058340
 C -2.268857 -0.326037 1.894906
 C -1.437728 -1.565468 2.259904
 H -0.410071 -1.430224 1.888680
 H -1.420594 -1.634577 3.359956
 H -1.850453 -2.503776 1.876962
 C -1.577918 0.860604 2.580886
 H -1.511040 0.626141 3.655434
 H -0.557676 0.973156 2.185773

H -2.133725 1.802287 2.489367
 C -3.684732 -0.477961 2.461501
 H -4.176202 -1.404192 2.136381
 H -3.597407 -0.532053 3.558304
 H -4.344738 0.367735 2.230040
 C -3.462517 -1.315742 -0.812371
 C -4.940175 -0.947876 -0.649647
 H -5.207824 -0.034816 -1.197292
 H -5.548969 -1.765045 -1.069817
 H -5.241364 -0.821441 0.397196
 C -3.142385 -1.450123 -2.307395
 H -3.234578 -0.514030 -2.868134
 H -2.133803 -1.853681 -2.460698
 H -3.860608 -2.165616 -2.739664
 C -1.599346 2.629083 -0.192320
 H -0.760508 2.335875 -0.838016
 H -1.896018 3.659230 -0.449226
 H -1.236493 2.628930 0.839908
 C -4.006311 2.221752 0.396384
 H -4.266504 3.232241 0.041038
 H -4.900532 1.595418 0.279347
 H -3.780320 2.306732 1.466842
 C -3.155004 1.822548 -1.908898
 H -4.075893 1.293096 -2.184615
 H -3.309990 2.887918 -2.144171
 H -2.329296 1.468766 -2.541088
 C -3.211110 -2.704851 -0.214461
 H -2.143756 -2.967336 -0.247602
 H -3.569189 -2.802426 0.817337
 H -3.758303 -3.443095 -0.822564

TS_{I→III}

E = -1489.66083671
 C 0.399153 -0.001049 -0.106753
 C -0.716488 -0.118843 0.733604
 C -0.259428 -0.199966 2.094180
 C 1.111660 -0.179726 2.038336

N 1.488739 -0.076438 0.713765
 H -0.841221 -0.266021 3.010696
 H 1.855290 -0.220348 2.832402
 C 2.841379 0.006120 0.274458
 C 3.404873 1.271941 0.045017
 C 3.564631 -1.184770 0.082917
 C 4.732635 1.327046 -0.390274
 C 4.889887 -1.080242 -0.347531
 C 5.469244 0.163516 -0.581750
 H 5.196824 2.297238 -0.582348
 H 5.478378 -1.985829 -0.507371
 H 6.506693 0.225064 -0.919713
 C 2.584122 2.534590 0.208368
 H 1.681464 2.262709 0.776691
 C 2.893208 -2.531329 0.268332
 H 2.084448 -2.391587 1.002713
 P -2.320044 -0.056134 -0.021502
 C -3.576874 -0.705655 1.255284
 C -2.177216 -1.098891 -1.739437
 C 2.241461 -2.975138 -1.044099
 H 1.520121 -2.228831 -1.406140
 H 3.003316 -3.119705 -1.827143
 H 1.706931 -3.929193 -0.909283
 C 3.828837 -3.604736 0.813935
 H 4.607576 -3.882667 0.085974
 H 4.330794 -3.275770 1.736647
 H 3.262221 -4.520536 1.041818
 C 2.125856 3.041438 -1.160032
 H 2.987151 3.347130 -1.775997
 H 1.582631 2.255220 -1.704060
 H 1.458755 3.911687 -1.052687
 C 3.315397 3.618617 0.995239
 H 3.647700 3.247491 1.976537
 H 4.202391 3.990801 0.458424
 H 2.652568 4.481648 1.163627
 C -3.793373 0.298047 2.393271
 H -4.428598 -0.177451 3.159083

H -2.854495 0.595617 2.878305
 H -4.312728 1.205988 2.060640
 C -3.046253 -2.008418 1.870712
 H -2.931830 -2.807775 1.131004
 H -2.079127 -1.876973 2.369273
 H -3.775689 -2.352218 2.622373
 C -4.928472 -1.002522 0.597724
 H -5.634526 -1.327083 1.379559
 H -5.365684 -0.126786 0.100972
 H -4.859740 -1.815684 -0.137309
 C -3.424940 -0.802843 -2.569499
 H -3.416435 -1.487999 -3.432598
 H -4.372136 -0.952129 -2.026902
 H -3.414915 0.216297 -2.977790
 C -0.891309 -0.763066 -2.406835
 H -0.373895 -1.667897 -2.757398
 H -0.991411 -0.035144 -3.223702
 H 0.093644 -0.241478 -1.339831
 C -2.176958 -2.564563 -1.307802
 H -3.121743 -2.887093 -0.846960
 H -2.025887 -3.172067 -2.214124
 H -1.344550 -2.781582 -0.621691
 C -2.627412 1.785250 -0.394202
 C -4.095232 2.101735 -0.686566
 H -4.739126 1.972575 0.194214
 H -4.172881 3.158449 -0.990413
 H -4.502267 1.493949 -1.505704
 C -1.771048 2.163204 -1.606841
 H -2.123536 1.707187 -2.538811
 H -1.815148 3.258023 -1.727183
 H -0.720244 1.876711 -1.460442
 C -2.128713 2.639272 0.777642
 H -2.225651 3.700538 0.495476
 H -2.698568 2.490844 1.701698
 H -1.069140 2.437653 0.989254

///

E = -1489.67873242

C 1.136090 0.056638 1.924106

C -0.238551 0.083347 1.909063

C -0.663288 0.032479 0.539332

C 0.502862 -0.025246 -0.211968

N 1.575758 -0.014526 0.624579

H 1.845114 0.090350 2.748210

H -0.860883 0.143711 2.794823

P -2.312277 0.067452 -0.225059

C -2.721614 -1.637259 -1.083550

C -3.455709 -0.055326 1.441456

C -2.668937 1.762811 -0.892808

C -1.793151 0.955244 -1.873643

H -2.305640 0.710430 -2.814260

H -0.810778 1.401465 -2.083615

H 0.639046 -0.060851 -1.287807

C -4.037144 2.150882 -1.412379

H -4.674386 2.584412 -0.624380

H -3.916822 2.914345 -2.203194

H -4.579232 1.304678 -1.858193

C -1.935018 2.951495 -0.300697

H -0.977611 2.660971 0.156002

H -1.708323 3.656596 -1.123001

H -2.527353 3.489563 0.454115

C 2.936759 0.000614 0.203612

C 3.607126 -1.221360 0.029870

C 3.549594 1.243008 -0.037060

C 4.934858 -1.176490 -0.405622

C 4.878035 1.236167 -0.471024

C 5.563786 0.039137 -0.653519

H 5.484271 -2.108778 -0.555348

H 5.383893 2.183214 -0.671526

H 6.601932 0.054383 -0.994208

C -3.936793 -1.477206 -2.001442

H -4.143649 -2.442841 -2.493901

H -4.845030 -1.184485 -1.458051

H -3.757403 -0.740448 -2.795997
 C -1.513489 -2.045941 -1.925850
 H -1.230177 -1.269159 -2.646708
 H -0.641760 -2.269553 -1.293603
 H -1.763517 -2.963135 -2.484996
 C -2.974407 -2.779315 -0.102364
 H -3.883375 -2.650723 0.493054
 H -3.096414 -3.711542 -0.679622
 H -2.126767 -2.925500 0.581202
 C -3.095456 -1.148500 2.469123
 H -3.137577 -0.744113 3.495471
 H -3.805320 -1.986801 2.438341
 H -2.094142 -1.577482 2.337305
 C -4.930804 -0.199449 1.054049
 H -5.567580 -0.036359 1.942566
 H -5.236757 0.542777 0.302756
 H -5.180709 -1.196204 0.665392
 C -3.330412 1.324101 2.097914
 H -3.782123 2.106716 1.474613
 H -3.873684 1.326022 3.058950
 H -2.293634 1.626434 2.300857
 C 2.902026 -2.543122 0.257496
 H 1.963965 -2.324957 0.790632
 C 2.780317 2.539979 0.119665
 H 1.882218 2.317995 0.716584
 C 2.306737 3.050613 -1.242736
 H 3.162128 3.286714 -1.895991
 H 1.685728 2.302670 -1.757105
 H 1.702939 3.964102 -1.126718
 C 3.573491 3.606801 0.869595
 H 3.924668 3.235926 1.844243
 H 4.453828 3.943436 0.299592
 H 2.944706 4.492377 1.048165
 C 3.714431 -3.495662 1.130980
 H 4.647755 -3.810849 0.638247
 H 3.981763 -3.029500 2.091150
 H 3.134732 -4.406846 1.344212

C 2.530448 -3.186332 -1.079852
H 1.908856 -2.512733 -1.688133
H 3.431071 -3.431205 -1.665603
H 1.965173 -4.117968 -0.921164

TS_{III→IV}

E = -1489.67071744
C 1.118889 -0.009885 1.969442
C -0.255530 -0.018738 1.972112
C -0.691996 -0.051754 0.603960
C 0.464873 -0.068158 -0.165613
N 1.543791 -0.039752 0.662748
H 1.836047 0.021284 2.786499
H -0.866265 0.015220 2.867955
P -2.341109 0.045681 -0.109226
C -2.694577 -1.525810 -1.147257
C -3.524709 -0.057953 1.457532
C -2.441364 1.676514 -1.032527
C -1.556432 1.125438 -2.110063
H -2.093773 0.881498 -3.037979
H -0.687524 1.764784 -2.325571
H 0.555132 -0.056648 -1.246741
C -3.835481 2.140369 -1.440065
H -4.442741 2.491890 -0.588590
H -3.704758 2.984333 -2.137845
H -4.400295 1.365661 -1.974256
C -1.735375 2.795785 -0.271950
H -0.749493 2.479154 0.095555
H -1.568463 3.605007 -1.002828
H -2.314787 3.202492 0.567918
C 2.902125 -0.014480 0.232390
C 3.571210 -1.233040 0.031539
C 3.513794 1.232015 0.012209
C 4.897419 -1.180312 -0.407427
C 4.840880 1.232904 -0.426066
C 5.526030 0.039672 -0.633291
H 5.445523 -2.109759 -0.578072

H 5.345768 2.183420 -0.611386
 H 6.563004 0.061393 -0.977204
 C -3.844332 -1.278565 -2.126470
 H -4.063586 -2.221028 -2.654718
 H -4.769182 -0.958165 -1.627372
 H -3.571259 -0.530511 -2.880716
 C -1.453559 -1.968337 -1.927896
 H -1.085668 -1.146432 -2.553826
 H -0.651079 -2.288371 -1.247884
 H -1.729379 -2.836232 -2.550450
 C -3.049571 -2.697093 -0.226940
 H -4.020743 -2.589004 0.267392
 H -3.101124 -3.606818 -0.846286
 H -2.277615 -2.866234 0.537054
 C -3.263130 -1.193799 2.462570
 H -3.591788 -0.876128 3.467149
 H -3.831871 -2.098451 2.217690
 H -2.209014 -1.486767 2.540273
 C -4.986404 -0.130969 1.002151
 H -5.644095 0.004573 1.877971
 H -5.238893 0.659584 0.281851
 H -5.248291 -1.097590 0.551437
 C -3.359248 1.292489 2.169824
 H -3.731600 2.119832 1.551743
 H -3.956437 1.285154 3.096904
 H -2.320224 1.523008 2.440732
 C 2.866131 -2.559201 0.232030
 H 1.930250 -2.353372 0.773815
 C 2.743126 2.525274 0.188485
 H 1.859853 2.297848 0.805444
 C 2.236625 3.031564 -1.163809
 H 3.077403 3.262574 -1.837480
 H 1.599117 2.285078 -1.659237
 H 1.639162 3.947641 -1.036329
 C 3.546613 3.596432 0.920618
 H 3.927096 3.226980 1.884886
 H 4.408130 3.943002 0.328259

H 2.914892 4.476051 1.117291
 C 3.681073 -3.532484 1.079896
 H 4.612343 -3.836569 0.576454
 H 3.952439 -3.089297 2.049825
 H 3.101682 -4.448279 1.273590
 C 2.488818 -3.169832 -1.118980
 H 1.867160 -2.480327 -1.708881
 H 3.387355 -3.402678 -1.712768
 H 1.922308 -4.104028 -0.980536

Phosphan

E = -1332.65188701
 C -0.104936 0.010821 0.062856
 C -1.151707 0.021373 0.975250
 C -0.543576 0.063174 2.268607
 C 0.822746 0.077318 2.096465
 N 1.076706 0.041331 0.747297
 H -1.076540 0.075077 3.217700
 H 1.642965 0.106719 2.810238
 C 2.366152 0.015264 0.143892
 C 2.980290 1.232357 -0.195906
 C 2.967576 -1.230861 -0.106159
 C 4.235826 1.177937 -0.808461
 C 4.222719 -1.234159 -0.720773
 C 4.851073 -0.042164 -1.068332
 H 4.738604 2.106605 -1.088816
 H 4.716098 -2.185435 -0.932704
 H 5.832344 -0.065013 -1.548606
 C 2.289777 2.558353 0.051299
 H 1.412233 2.357098 0.684476
 C 2.256925 -2.525733 0.234186
 H 1.430596 -2.274664 0.916911
 P -2.956718 -0.065819 0.751828
 C 1.640454 -3.144438 -1.022017
 H 0.947797 -2.445032 -1.513082
 H 2.418913 -3.415887 -1.753180
 H 1.076608 -4.056266 -0.770502

C 3.162061 -3.518786 0.958371
 H 3.981668 -3.875438 0.314665
 H 3.610625 -3.070490 1.857527
 H 2.585130 -4.402850 1.270196
 C 1.780413 3.151101 -1.263397
 H 2.614074 3.381093 -1.946325
 H 1.107148 2.451947 -1.781418
 H 1.224695 4.084092 -1.080958
 C 3.180967 3.543747 0.803622
 H 3.538365 3.115545 1.752073
 H 4.063513 3.834067 0.211812
 H 2.623913 4.464823 1.034284
 C -3.188056 -1.575759 -0.387212
 C -2.736651 -1.443284 -1.838219
 H -2.875124 -2.406824 -2.359644
 H -3.320568 -0.690734 -2.387317
 H -1.672072 -1.181728 -1.918958
 C -2.406836 -2.709595 0.286130
 H -2.652514 -3.668110 -0.202012
 H -1.320591 -2.554977 0.215991
 H -2.664939 -2.797460 1.353773
 C -4.677935 -1.935987 -0.345397
 H -5.307218 -1.173603 -0.825204
 H -4.847420 -2.887966 -0.877152
 H -5.027384 -2.056772 0.691245
 C -3.326362 1.550313 -0.185989
 C -3.220088 2.620066 0.908366
 H -2.206591 2.651008 1.339054
 H -3.438224 3.615190 0.483857
 H -3.930681 2.431086 1.727316
 C -2.380041 1.930768 -1.321824
 H -1.350842 2.056295 -0.957333
 H -2.371540 1.193222 -2.135239
 H -2.695760 2.895888 -1.755513
 H -0.097205 -0.016544 -1.023303
 C -4.766551 1.505342 -0.697530
 H -4.877538 0.831914 -1.560499

H -5.466691 1.177344 0.087101
 H -5.077458 2.511727 -1.025916

Isobuten

E = -157.086497623
 C 0.000001 0.120976 -0.000016
 C -1.269883 -0.676973 -0.000006
 H -2.160832 -0.033790 -0.000473
 H -1.319316 -1.336722 -0.883098
 H -1.319690 -1.335905 0.883679
 C 1.269839 -0.677040 -0.000002
 H 1.319559 -1.336244 -0.883489
 H 2.160829 -0.033908 0.000219
 H 1.319313 -1.336528 0.883289
 C 0.000045 1.458922 0.000010
 H -0.933374 2.028927 -0.000046
 H 0.933502 2.028860 0.000008

1.4 Adamantylsubstitution

1.4.1 Energien mit einer SAd₂-substituierten Oniumgruppe

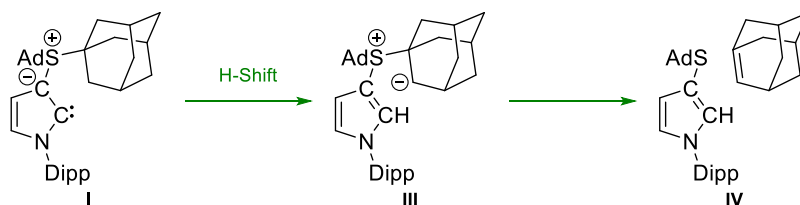


Tabelle 1.10. Energien der Verbindungen.

	Corr(H)	Corr(G)	SCF	E(PCM)	ΔG in hartree	ΔG in kJ/mol
I	0.817034	0.718733	-1852.99438204	-1853.00280207	–	–
TS_{I→IV}	0.811168	0.712757	-1852.94395874	-1852.94972971	0.047096	123.651493
Adamanten	0.586543	0.501268	-1463.87070410	-389.103682182	-0.006197	-16.268916
Sulfid	0.226862	0.188585	-389.101497486	-1463.87643639		

1.4.2 Koordinaten mit einer SAd₂-substituierten Oniumgruppe

I

E = -1852.99438204
 C 0.990972 -0.032723 0.210695

C 0.118526 -0.035319 1.320904
 C 0.800682 -0.268234 2.563948
 C 2.112265 -0.426239 2.208122
 N 2.193668 -0.277065 0.827199
 H 0.382124 -0.316639 3.568274
 H 2.996220 -0.633227 2.809529
 C 3.431003 -0.385380 0.130029
 C 4.260216 0.746391 0.032451
 C 3.791931 -1.622740 -0.428940
 C 5.479136 0.612227 -0.637762
 C 5.018626 -1.710902 -1.094530
 C 5.857437 -0.606186 -1.194195
 H 6.143210 1.474131 -0.729698
 H 5.322743 -2.660064 -1.541716
 H 6.815185 -0.693821 -1.713424
 C 3.789200 2.083399 0.568789
 H 3.115847 1.871148 1.414412
 C 2.841848 -2.801522 -0.372680
 H 2.140421 -2.607783 0.453962
 C 2.020511 -2.856744 -1.662717
 H 1.499465 -1.899849 -1.815900
 H 2.670725 -3.043126 -2.533093
 H 1.272292 -3.665554 -1.618839
 C 3.538895 -4.128093 -0.088770
 H 4.201002 -4.433180 -0.914803
 H 4.145914 -4.076930 0.827926
 H 2.794773 -4.929815 0.039646
 C 2.958956 2.796064 -0.502295
 H 3.581288 3.039853 -1.378769
 H 2.133275 2.147463 -0.833729
 H 2.537758 3.736797 -0.110799
 C 4.915884 2.970330 1.085412
 H 5.536823 2.446750 1.828361
 H 5.577230 3.313231 0.273647
 H 4.500908 3.871427 1.562886
 S -1.582202 0.235067 1.246289
 C -1.849899 1.786752 0.245613

C -1.594047 1.629450 -1.250564
 C -3.278158 2.279147 0.506944
 C -0.857353 2.798425 0.836952
 H -2.310795 0.914776 -1.682641
 H -0.576651 1.228303 -1.396134
 C -1.786389 2.993813 -1.926711
 H -3.449088 2.376556 1.591864
 H -4.017576 1.562414 0.122178
 C -3.469537 3.634955 -0.187849
 H 0.166793 2.432811 0.678304
 H -1.011716 2.884557 1.926238
 C -1.055905 4.156505 0.156681
 H -1.604721 2.876268 -3.007371
 C -3.219859 3.479469 -1.691339
 C -0.798685 4.006120 -1.344363
 H -4.503847 3.974458 -0.013885
 C -2.484157 4.651038 0.392490
 H -0.334719 4.869120 0.589167
 H -3.939816 2.763774 -2.124281
 H -3.383777 4.444172 -2.200035
 H 0.235084 3.668218 -1.517812
 H -0.912620 4.980661 -1.848309
 H -2.631177 5.634852 -0.083687
 H -2.668080 4.785257 1.471857
 C -2.293147 -1.286499 0.417408
 C -2.116000 -2.349492 1.515018
 C -3.780839 -1.106340 0.118938
 C -1.545359 -1.724348 -0.837492
 H -2.630211 -2.024812 2.435342
 H -1.045035 -2.450329 1.753412
 C -2.688424 -3.684527 1.031981
 H -3.924587 -0.350148 -0.667837
 H -4.318549 -0.761640 1.018399
 C -4.350805 -2.449590 -0.364180
 H -0.469138 -1.791199 -0.621330
 H -1.650826 -0.977084 -1.634181
 C -2.120332 -3.063842 -1.314715

H -2.555302 -4.433514 1.829539
 C -4.177682 -3.510603 0.724902
 C -1.942942 -4.125532 -0.228828
 H -5.422042 -2.314022 -0.586198
 C -3.609587 -2.892682 -1.629193
 H -1.577880 -3.367964 -2.224545
 H -4.721535 -3.213143 1.637523
 H -4.612313 -4.467086 0.389997
 H -0.871575 -4.262706 -0.006897
 H -2.328792 -5.098031 -0.578080
 H -4.034936 -3.840203 -2.000199
 H -3.744127 -2.146039 -2.430203

TS_{I→IV}

E = -1852.94395874
 C -0.985110 -0.184775 0.426906
 C 0.000226 -0.399100 1.389245
 C -0.487991 -1.277442 2.404149
 C -1.763918 -1.609763 2.011802
 N -2.049271 -0.934265 0.839327
 H 0.027133 -1.630012 3.295338
 H -2.493279 -2.281861 2.459229
 C -3.262705 -1.067183 0.103734
 C -3.311000 -2.010344 -0.938172
 C -4.355549 -0.247678 0.431149
 C -4.498162 -2.115225 -1.667767
 C -5.522482 -0.390195 -0.326212
 C -5.593698 -1.312799 -1.364543
 H -4.567761 -2.835462 -2.485780
 H -6.388985 0.235170 -0.101624
 H -6.514647 -1.407878 -1.945173
 C -2.094259 -2.845068 -1.287555
 H -1.446235 -2.858896 -0.396883
 C -4.247764 0.799815 1.520988
 H -3.430668 0.489792 2.190947
 C -3.851677 2.149577 0.917042
 H -2.874013 2.093407 0.413207

H -4.605956 2.487072 0.187704
 H -3.774292 2.915485 1.705207
 C -5.514866 0.913038 2.363531
 H -6.359520 1.321403 1.786140
 H -5.823029 -0.063382 2.767848
 H -5.345718 1.595311 3.210548
 C -1.301757 -2.181582 -2.416382
 H -1.905474 -2.120189 -3.336187
 H -1.001919 -1.161995 -2.132598
 H -0.390616 -2.758150 -2.644813
 C -2.439306 -4.292428 -1.625383
 H -3.031698 -4.763329 -0.826394
 H -3.012695 -4.372802 -2.562415
 H -1.518763 -4.881275 -1.760028
 S 1.484111 0.498348 1.342687
 C 2.707607 -0.711224 0.613192
 C 2.186611 -1.438778 -0.622737
 C 4.026702 0.008558 0.324082
 C 2.940128 -1.735500 1.736260
 H 1.985092 -0.732580 -1.436865
 H 1.232163 -1.932075 -0.380710
 C 3.236350 -2.462614 -1.073983
 H 4.379322 0.525635 1.232360
 H 3.894290 0.772287 -0.455074
 C 5.062674 -1.024860 -0.139889
 H 1.991920 -2.242750 1.972527
 H 3.278477 -1.217620 2.649124
 C 3.983491 -2.764595 1.286561
 H 2.862643 -2.972136 -1.977213
 C 4.546717 -1.736299 -1.394670
 C 3.473857 -3.486238 0.037359
 H 6.003783 -0.499221 -0.369697
 C 5.299183 -2.050464 0.970581
 H 4.136949 -3.489596 2.102544
 H 4.386524 -1.006632 -2.206408
 H 5.301125 -2.455234 -1.755363
 H 2.537448 -4.022779 0.264020

H 4.207733 -4.241715 -0.289830
 H 6.062227 -2.781457 0.655208
 H 5.687603 -1.550223 1.873668
 C 1.126539 2.044855 0.138536
 C 2.134091 3.083068 0.633555
 C 1.366918 1.717821 -1.335285
 C -0.298708 2.447024 0.338700
 H 3.184492 2.762189 0.504443
 H 1.970143 3.278477 1.704999
 C 1.879162 4.364879 -0.184438
 H 0.666123 0.934518 -1.658684
 H 2.391506 1.362622 -1.519779
 C 1.139489 3.000246 -2.148137
 H -0.494177 2.636214 1.413238
 H -0.973435 0.926541 -0.050155
 C -0.530292 3.731001 -0.460077
 H 2.581615 5.141810 0.160883
 C 2.119286 4.075344 -1.669303
 C 0.434859 4.837433 0.010056
 H 1.324268 2.776558 -3.212844
 C -0.298706 3.477506 -1.949557
 H -1.570372 4.065979 -0.305316
 H 3.159739 3.742248 -1.830941
 H 1.983825 4.997513 -2.258798
 H 0.250484 5.062283 1.073722
 H 0.276208 5.776557 -0.551812
 H -0.470715 4.396255 -2.537295
 H -1.005375 2.714148 -2.312540

Sulfid

E = -1536.25744791
 C 0.258883 -0.032530 0.242059
 C -0.608591 -0.084362 1.355226
 C 0.093663 -0.088832 2.608492
 C 1.412469 -0.041727 2.252391
 N 1.478678 -0.012319 0.862601
 H -0.313833 -0.121426 3.617529

H 2.314622 -0.025370 2.861729
 C 2.721456 0.046725 0.166180
 C 3.228694 1.299893 -0.215621
 C 3.406477 -1.150974 -0.105873
 C 4.455821 1.334828 -0.885341
 C 4.631451 -1.068037 -0.773510
 C 5.153553 0.163360 -1.158240
 H 4.872115 2.295284 -1.197819
 H 5.185854 -1.981180 -0.999556
 H 6.113615 0.209177 -1.678520
 C 2.433003 2.565559 0.029105
 H 1.694167 2.336096 0.811954
 C 2.783169 -2.487028 0.245849
 H 2.121597 -2.317680 1.109868
 C 1.901047 -2.960081 -0.912634
 H 1.152601 -2.192407 -1.158015
 H 2.509667 -3.150471 -1.811728
 H 1.374139 -3.891558 -0.649968
 C 3.800171 -3.550545 0.644294
 H 4.435428 -3.853400 -0.203382
 H 4.460188 -3.198816 1.451957
 H 3.283040 -4.456153 0.996958
 C 1.654575 2.935067 -1.235488
 H 2.341576 3.194839 -2.057472
 H 1.037433 2.084601 -1.560633
 H 0.996465 3.800231 -1.053050
 C 3.287594 3.727832 0.524844
 H 3.858228 3.452456 1.424748
 H 4.005615 4.068905 -0.237960
 H 2.650016 4.589622 0.776406
 S -2.325635 -0.113701 1.281124
 C -2.823200 -1.445472 0.182396
 C -4.021842 -2.094320 0.473937
 C -2.032072 -1.802232 -0.906789
 C -4.444788 -3.128320 -0.359895
 H -4.614309 -1.801639 1.344274
 C -2.466825 -2.841428 -1.725464

H -1.082417 -1.267789 -1.063415
 C -3.668083 -3.499956 -1.456480
 H -5.379824 -3.650333 -0.144725
 H -1.857355 -3.139903 -2.581673
 H -3.999874 -4.314247 -2.105060
 C -2.873852 1.312294 0.330680
 C -2.056582 1.866697 -0.649650
 C -4.133495 1.830299 0.626875
 C -2.526147 2.971810 -1.355266
 H -1.065736 1.419974 -0.821887
 C -4.590396 2.933525 -0.092151
 H -4.748062 1.383033 1.412102
 C -3.787579 3.502373 -1.080429
 H -1.896259 3.421764 -2.126350
 H -5.573617 3.354977 0.128713
 H -4.147124 4.370343 -1.638205

Adamanten

E = -389.101497486
 C -0.625692 -1.295523 1.026968
 H -0.337875 -2.357386 0.958297
 H -1.318825 -1.197202 1.875282
 C -1.276003 -0.818249 -0.272483
 H -2.166552 -1.419619 -0.522136
 C 0.592120 -0.430138 1.234553
 C 1.710746 -0.711787 0.276841
 H 1.977818 -1.774204 0.137238
 H 2.622500 -0.132925 0.491840
 C -0.226611 -0.953606 -1.383662
 H -0.639957 -0.606823 -2.345398
 H 0.036272 -2.017014 -1.516956
 C 1.025628 -0.135460 -1.036834
 H 1.754107 -0.202138 -1.863002
 C 0.583888 1.334676 -0.872456
 H 1.453654 1.985993 -0.691393
 H 0.123954 1.675475 -1.816373
 C -1.681486 0.645253 -0.053668

H -2.437208 0.708036 0.745780
 H -2.148368 1.053567 -0.965549
 C 0.432530 0.915432 1.381252
 H 1.366808 1.489122 1.475801
 C -0.459862 1.490295 0.300921
 H -0.737874 2.549770 0.427974

1.4.3 Energien mit einer SOAd₂-substituierten Oniumgruppe

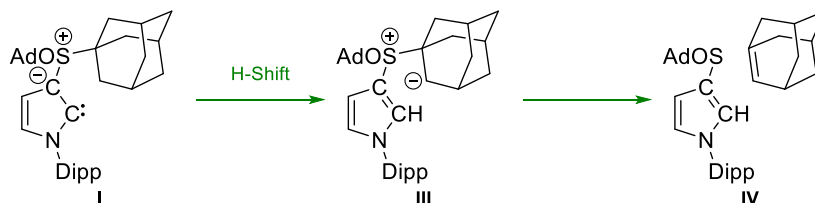


Tabelle 1.11. Energien der Verbindungen.

	Corr(H)	Corr(G)	E(SCF)	E(PCM)	ΔG in hartree	ΔG in kJ/mol
I	0.822907	0.722681	-1928.15704903	-1928.16629837	–	–
TS_{I→IV}	0.816758	0.716140	-1928.11341623	-1928.12073793	0.039019	102.445540
Adamanten	0.226862	0.188585	-389.101497486	-389.103682182	-0.000215	-0.563438
Sulfoxid	0.591509	0.505036	-1539.02371879	-1539.03377079		

1.4.4 Koordinaten mit einer SOAd₂-substituierten Oniumgruppe

I

E = -1928.15704903
 C 1.046504 -0.009396 0.164084
 C 0.159475 -0.030738 1.260050
 C 0.801246 -0.307625 2.513163
 C 2.116922 -0.465225 2.174233
 N 2.231924 -0.283977 0.798375
 H 0.350393 -0.368262 3.501042
 H 2.987410 -0.686807 2.789776
 C 3.484368 -0.385292 0.125808
 C 4.314293 0.747802 0.057997
 C 3.855863 -1.617045 -0.438164
 C 5.546184 0.620577 -0.589514
 C 5.095726 -1.698070 -1.079634
 C 5.935588 -0.591904 -1.151045
 H 6.211914 1.483291 -0.658703

H 5.409349 -2.642341 -1.530441
 H 6.903466 -0.673945 -1.651984
 C 3.834710 2.078757 0.601820
 H 3.135124 1.857698 1.423492
 C 2.904603 -2.796092 -0.414324
 H 2.186332 -2.612415 0.400102
 C 2.110425 -2.837437 -1.721850
 H 1.594101 -1.878747 -1.879393
 H 2.778625 -3.016439 -2.579947
 H 1.360581 -3.645592 -1.701817
 C 3.595391 -4.125990 -0.130822
 H 4.274191 -4.421975 -0.946458
 H 4.183374 -4.085146 0.798627
 H 2.848675 -4.928697 -0.026514
 C 3.041802 2.815326 -0.481331
 H 3.691515 3.069137 -1.334711
 H 2.221691 2.179486 -0.848766
 H 2.615553 3.752297 -0.086625
 C 4.951050 2.949077 1.167201
 H 5.545635 2.408575 1.919434
 H 5.638793 3.301054 0.381762
 H 4.527527 3.844600 1.647470
 C -1.784028 1.779420 0.109334
 C -1.490236 1.623700 -1.380184
 C -3.225595 2.240931 0.344071
 C -0.818348 2.796287 0.736974
 H -2.190591 0.905197 -1.832910
 H -0.464862 1.238767 -1.510121
 C -1.684316 2.992584 -2.048799
 H -3.419931 2.315957 1.423983
 H -3.942544 1.518745 -0.070271
 C -3.415644 3.599439 -0.346150
 H 0.215222 2.450959 0.597555
 H -1.007424 2.863650 1.820394
 C -1.020813 4.154839 0.059341
 H -1.474761 2.884364 -3.125248
 C -3.128932 3.458241 -1.844311

C -0.724538 4.014259 -1.435658
 H -4.458840 3.920914 -0.193609
 C -2.460981 4.626130 0.264772
 H -0.320014 4.874614 0.512735
 H -3.829397 2.737006 -2.299376
 H -3.291487 4.424084 -2.351013
 H 0.318066 3.691730 -1.585086
 H -0.839451 4.988823 -1.938969
 H -2.611859 5.611192 -0.207575
 H -2.671916 4.747546 1.340277
 C -2.228555 -1.313385 0.315483
 C -2.034392 -2.362770 1.423456
 C -3.718698 -1.135527 0.028507
 C -1.481848 -1.751800 -0.942048
 H -2.539896 -2.026740 2.340716
 H -0.960757 -2.461345 1.650327
 C -2.606277 -3.701415 0.949572
 H -3.868921 -0.390423 -0.767591
 H -4.238850 -0.780984 0.932185
 C -4.286933 -2.484554 -0.438179
 H -0.405524 -1.825925 -0.730948
 H -1.591311 -1.010498 -1.744427
 C -2.061797 -3.094594 -1.406147
 H -2.462119 -4.443816 1.751141
 C -4.099041 -3.536144 0.656866
 C -1.871198 -4.148715 -0.315068
 H -5.360460 -2.354325 -0.651412
 C -3.554581 -2.930470 -1.707469
 H -1.526567 -3.401534 -2.319192
 H -4.633375 -3.232353 1.572472
 H -4.533218 -4.496949 0.333954
 H -0.797427 -4.282250 -0.102238
 H -2.257422 -5.123847 -0.656002
 H -3.976844 -3.882301 -2.070314
 H -3.700302 -2.188924 -2.511375
 S -1.513804 0.221159 1.095351
 O -2.201055 0.400387 2.396142

TS_{I→IV}

E = -1928.11341623

C -0.891654 -0.291801 0.221795

C 0.021755 -0.224142 1.278507

C -0.583399 -0.647477 2.498583

C -1.873573 -0.968196 2.156717

N -2.043959 -0.739242 0.801392

H -0.126160 -0.688044 3.483906

H -2.690987 -1.356027 2.761349

C -3.246335 -1.022802 0.088831

C -3.393770 -2.291189 -0.500173

C -4.234786 -0.029612 -0.001298

C -4.584313 -2.557438 -1.181102

C -5.412184 -0.345288 -0.686656

C -5.586807 -1.596058 -1.268372

H -4.730400 -3.531862 -1.651933

H -6.202991 0.403366 -0.770730

H -6.513050 -1.823345 -1.801791

C -2.269989 -3.307215 -0.447825

H -1.627471 -3.036848 0.404848

C -4.042626 1.330646 0.638442

H -2.966843 1.440834 0.845419

C -4.445909 2.472699 -0.290404

H -3.928111 2.401668 -1.258239

H -5.530230 2.483685 -0.484041

H -4.186855 3.441673 0.162944

C -4.782038 1.410994 1.974788

H -5.867979 1.288611 1.832479

H -4.443383 0.626806 2.667707

H -4.610541 2.386098 2.457103

C -1.414175 -3.206857 -1.712920

H -2.002229 -3.471777 -2.606353

H -1.033907 -2.183627 -1.847193

H -0.553008 -3.892443 -1.657370

C -2.760222 -4.733375 -0.217626

H -3.395850 -4.802318 0.678022

H -3.339928 -5.114174 -1.073250

H -1.904296 -5.412148 -0.081272
 C 2.661475 -0.790400 0.334738
 C 2.262380 -1.134928 -1.095889
 C 4.109585 -0.297526 0.395702
 C 2.503792 -2.020129 1.241185
 H 2.370518 -0.254086 -1.744080
 H 1.205099 -1.442117 -1.133258
 C 3.181648 -2.258855 -1.593452
 H 4.362476 -0.024880 1.431191
 H 4.239267 0.600237 -0.224992
 C 5.022913 -1.418466 -0.120130
 H 1.456267 -2.358778 1.228345
 H 2.755044 -1.745872 2.277865
 C 3.424371 -3.133718 0.732975
 H 2.895839 -2.508284 -2.627985
 C 4.634388 -1.774255 -1.558517
 C 3.030068 -3.492828 -0.701629
 H 6.064250 -1.058850 -0.092377
 C 4.876661 -2.653781 0.770062
 H 3.302939 -4.012783 1.386567
 H 4.756350 -0.895658 -2.214207
 H 5.304747 -2.559040 -1.946697
 H 1.988297 -3.854329 -0.729385
 H 3.665724 -4.311978 -1.077115
 H 5.550455 -3.453970 0.421138
 H 5.170291 -2.413169 1.805317
 C 1.227615 2.035801 0.017999
 C 0.413296 2.880694 1.016696
 C 2.545598 2.745280 -0.290618
 C 0.422213 1.696908 -1.202712
 H 0.995496 3.053589 1.935417
 H -0.505861 2.342108 1.292961
 C 0.055722 4.205936 0.343711
 H 3.146640 2.140525 -0.986518
 H 3.147734 2.942457 0.614484
 C 2.162708 4.069645 -0.985999
 H -0.636739 0.460150 -0.707658

H 1.065171 1.161344 -1.925068
 C 0.042705 3.031672 -1.854617
 H -0.527692 4.814345 1.055294
 C 1.345936 4.939152 -0.027670
 C -0.773404 3.911447 -0.906811
 H 3.093656 4.593343 -1.260488
 C 1.326439 3.795008 -2.242771
 H -0.550021 2.834600 -2.764343
 H 1.929995 5.162831 0.881494
 H 1.110972 5.904465 -0.506519
 H -1.703754 3.393690 -0.625721
 H -1.057533 4.856991 -1.400817
 H 1.092104 4.755066 -2.738907
 H 1.908492 3.195457 -2.962952
 S 1.567577 0.497164 1.094826
 O 2.178498 0.845656 2.401153

Sulfoxid

E = -1539.02371879
 C 0.189866 -1.572204 0.186040
 C -0.269816 -1.714724 1.522351
 C -1.467701 -1.039834 1.596496
 N -1.751000 -0.516018 0.357825
 H 0.245233 -2.266015 2.305288
 H -2.151902 -0.881806 2.427232
 C -2.847923 0.342244 0.057018
 C -4.092907 -0.223800 -0.263976
 C -2.636200 1.732366 0.094042
 C -5.149157 0.648395 -0.544261
 C -3.720206 2.562472 -0.203647
 C -4.965615 2.026747 -0.516332
 H -6.131499 0.239721 -0.792941
 H -3.587783 3.647031 -0.186555
 H -5.802770 2.691747 -0.741940
 C -4.297887 -1.724546 -0.293888
 H -3.309560 -2.192707 -0.170904
 C -1.279723 2.321789 0.428410

H -0.620499 1.490192 0.721131
 C -0.657990 2.990823 -0.797895
 H -0.578743 2.287533 -1.640405
 H -1.261342 3.848496 -1.135736
 H 0.353537 3.361033 -0.568782
 C -1.351051 3.280643 1.615188
 H -1.966753 4.165850 1.390023
 H -1.780970 2.787843 2.499846
 H -0.343717 3.637695 1.880243
 C -4.864376 -2.194980 -1.632231
 H -5.877056 -1.799706 -1.810162
 H -4.227048 -1.875303 -2.470219
 H -4.931032 -3.293522 -1.655246
 C -5.170217 -2.178428 0.876891
 H -4.731560 -1.879785 1.840714
 H -6.179042 -1.739242 0.817672
 H -5.278955 -3.274035 0.878580
 C 2.805514 -0.762028 -0.272575
 C 2.834552 -0.262234 1.166601
 C 4.196414 -1.263463 -0.674269
 C 2.360256 0.348499 -1.216329
 H 3.110915 -1.097511 1.829547
 H 1.829896 0.078500 1.465812
 C 3.833817 0.895031 1.270118
 H 4.168595 -1.656986 -1.705481
 H 4.483093 -2.095639 -0.012430
 C 5.194097 -0.105499 -0.574298
 H 1.353523 0.699082 -0.939357
 H 2.310983 -0.025173 -2.254277
 C 3.359307 1.509456 -1.112840
 H 3.853947 1.263642 2.309073
 C 5.228711 0.409058 0.867258
 C 3.392335 2.022487 0.330871
 H 6.194406 -0.465329 -0.866235
 C 4.755548 1.022971 -1.512761
 H 3.038291 2.319975 -1.788356
 H 5.559301 -0.393759 1.546953

H 5.958856 1.231035 0.958851
H 2.393644 2.388753 0.625714
H 4.084042 2.878151 0.410049
H 5.474192 1.858377 -1.464193
H 4.748135 0.666766 -2.556940
C -0.752418 -0.844546 -0.516445
H -0.793565 -0.531178 -1.556676
S 1.709047 -2.263089 -0.417282
O 2.192760 -3.201543 0.663078

Adamanten

E = -389.101497486
C -0.625692 -1.295523 1.026968
H -0.337875 -2.357386 0.958297
H -1.318825 -1.197202 1.875282
C -1.276003 -0.818249 -0.272483
H -2.166552 -1.419619 -0.522136
C 0.592120 -0.430138 1.234553
C 1.710746 -0.711787 0.276841
H 1.977818 -1.774204 0.137238
H 2.622500 -0.132925 0.491840
C -0.226611 -0.953606 -1.383662
H -0.639957 -0.606823 -2.345398
H 0.036272 -2.017014 -1.516956
C 1.025628 -0.135460 -1.036834
H 1.754107 -0.202138 -1.863002
C 0.583888 1.334676 -0.872456
H 1.453654 1.985993 -0.691393
H 0.123954 1.675475 -1.816373
C -1.681486 0.645253 -0.053668
H -2.437208 0.708036 0.745780
H -2.148368 1.053567 -0.965549
C 0.432530 0.915432 1.381252
H 1.366808 1.489122 1.475801
C -0.459862 1.490295 0.300921
H -0.737874 2.549770 0.427974

1.4.5 Energien mit einer PAd₃-substituierten Oniumgruppe

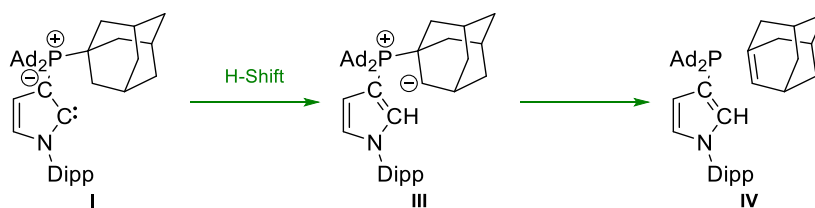


Tabelle 1.12. Energien der Verbindungen.

	Corr(H)	Corr(G)	E(SCF)	E(PCM)	ΔG in hartree	ΔG in kJ/mol
I	1.061852	0.949153	-2186.01017995	-2186.01839999	–	–
TS _{I→III}	1.055792	0.943177	-2185.97060831	-2185.97751669	0.034907	91.649116
III	1.058160	0.944156	-2185.97114682	-2185.97865475	0.034748	91.231504
TS _{III→IV}	1.057335	0.942887	-2185.96511335	-2185.97082832	0.041306	108.448037
Adamanten	0.226862	0.188585	-389.101497486	-389.103682182	0.014903	39.127979
Phosphan	0.829393	0.728528	-1796.86259708	-1796.86777475		

1.4.6 Koordinaten mit einer PAd₃-substituierten Oniumgruppe

I

E = -2186.01017995

C -1.625069 0.399896 -0.177704

C -0.422294 0.245328 -0.917829

C -0.719059 -0.088472 -2.295263

C -2.083816 -0.089191 -2.389084

N -2.589588 0.201926 -1.132271

H -0.044592 -0.290632 -3.123853

H -2.737435 -0.252445 -3.245097

C -3.987384 0.267244 -0.867299

C -4.639906 1.509913 -0.942165

C -4.675786 -0.916199 -0.546739

C -6.014422 1.547256 -0.689222

C -6.049844 -0.833199 -0.303594

C -6.714880 0.386719 -0.376699

H -6.546245 2.499958 -0.737867

H -6.609196 -1.736292 -0.050009

H -7.790033 0.433600 -0.185747

C -3.851473 2.774144 -1.216300

H -2.943420 2.473061 -1.761890

C -3.922822 -2.221873 -0.388420

H -3.019749 -2.148898 -1.014561
 C -3.459010 -2.368740 1.062578
 H -2.845482 -1.501920 1.350391
 H -4.323614 -2.425277 1.743658
 H -2.860858 -3.285317 1.193899
 C -4.708344 -3.442975 -0.853168
 H -5.578678 -3.645444 -0.208733
 H -5.073523 -3.321764 -1.884469
 H -4.070030 -4.339800 -0.820714
 C -3.397732 3.391474 0.108763
 H -4.266152 3.705776 0.710580
 H -2.820364 2.654015 0.685926
 H -2.763762 4.275855 -0.066489
 C -4.601002 3.783199 -2.079629
 H -4.956057 3.329675 -3.017721
 H -5.474282 4.206327 -1.557832
 H -3.941699 4.626721 -2.336840
 C 1.435516 -1.850691 -0.062149
 C 1.925411 -2.311635 -1.451885
 C 2.452347 -2.319008 0.995137
 C 0.081665 -2.561168 0.174993
 H 2.891396 -1.852614 -1.701412
 H 1.199001 -2.000895 -2.218072
 C 2.094296 -3.835021 -1.496320
 H 2.119653 -2.034669 2.002683
 H 3.430902 -1.841711 0.835990
 C 2.611541 -3.843739 0.941985
 H -0.626905 -2.251878 -0.606922
 H -0.365774 -2.257616 1.126891
 C 0.256509 -4.081934 0.152243
 H 2.458679 -4.111452 -2.499729
 C 3.114224 -4.262859 -0.440105
 C 0.753902 -4.515217 -1.225263
 H 3.342517 -4.144195 1.710956
 C 1.262359 -4.507967 1.223011
 H -0.724074 -4.542611 0.357165
 H 4.094043 -3.797940 -0.645268

H 3.264398 -5.354943 -0.476123
 H 0.019998 -4.231127 -1.997548
 H 0.866381 -5.611774 -1.270668
 H 1.374000 -5.605402 1.228533
 H 0.897961 -4.217639 2.223133
 C 2.512431 0.945692 -0.954675
 C 2.419523 2.459527 -0.664459
 C 3.914369 0.449381 -0.548958
 C 2.346602 0.802359 -2.485195
 H 2.539354 2.658524 0.407350
 H 1.421969 2.825494 -0.955912
 C 3.511266 3.233317 -1.412474
 H 4.028607 -0.618253 -0.782094
 H 4.067869 0.554382 0.534094
 C 4.997783 1.233930 -1.298324
 H 1.372679 1.219398 -2.775299
 H 2.354527 -0.249731 -2.793350
 C 3.456090 1.551057 -3.231787
 H 3.410776 4.301183 -1.157538
 C 4.883193 2.722837 -0.968129
 C 3.355642 3.042113 -2.919200
 H 5.983457 0.856698 -0.979187
 C 4.826073 1.023687 -2.803454
 H 3.314114 1.385302 -4.312420
 H 5.016811 2.882523 0.115577
 H 5.683017 3.287668 -1.475744
 H 2.381569 3.435010 -3.254647
 H 4.135678 3.604602 -3.459650
 H 5.624996 1.546682 -3.355462
 H 4.916460 -0.048419 -3.049072
 C 0.913008 0.682384 1.716855
 C 0.190717 2.052164 1.697005
 C 0.016967 -0.270209 2.542947
 C 2.267720 0.832234 2.439382
 H -0.785482 1.896890 1.211444
 H 0.743993 2.791789 1.108600
 C 0.010695 2.584550 3.121293

H 0.467437 -1.269421 2.611277
H -0.950196 -0.349918 2.022014
C -0.178469 0.260818 3.965866
H 2.921169 1.536478 1.906105
H 2.802012 -0.128282 2.483599
C 2.052446 1.361465 3.863958
H -0.481429 3.569030 3.055159
C -0.868136 1.622460 3.917818
C 1.371256 2.730047 3.804709
H -0.810091 -0.458927 4.512594
C 1.179324 0.388399 4.656801
H 3.039342 1.456109 4.347318
H -1.854185 1.528660 3.435588
H -1.033416 2.005143 4.939695
H 2.003045 3.444496 3.248778
H 1.249983 3.135488 4.823700
H 1.053195 0.750232 5.691348
H 1.670169 -0.598407 4.719702
P 1.100142 0.030293 -0.061268

TS_{I→III}

E = -2185.97060831
C -1.619842 0.078010 -0.251765
C -0.400513 0.066227 -0.923137
C -0.673081 0.085692 -2.335811
C -2.040070 0.110189 -2.466519
N -2.592189 0.107649 -1.200344
H 0.031769 0.077048 -3.164056
H -2.670430 0.115921 -3.353791
C -3.986375 0.032620 -0.912752
C -4.732037 1.221106 -0.843681
C -4.551739 -1.232430 -0.682172
C -6.094771 1.115583 -0.552728
C -5.917568 -1.287512 -0.388629
C -6.681695 -0.126677 -0.330251
H -6.706045 2.018026 -0.491716
H -6.390581 -2.253770 -0.201381

H -7.748633 -0.189683 -0.102381
 C -4.046722 2.564625 -0.993564
 H -3.172351 2.411133 -1.645918
 C -3.691140 -2.480629 -0.690410
 H -2.792127 -2.249797 -1.283959
 C -3.227106 -2.816594 0.730217
 H -2.663536 -1.988127 1.186346
 H -4.090140 -3.039773 1.378232
 H -2.574994 -3.705153 0.720987
 C -4.378285 -3.673811 -1.347995
 H -5.238117 -4.030831 -0.759261
 H -4.739274 -3.428105 -2.358330
 H -3.675049 -4.516731 -1.432243
 C -3.521515 3.031406 0.367652
 H -4.354729 3.202009 1.068075
 H -2.853720 2.281553 0.816171
 H -2.961084 3.974562 0.267624
 C -4.925350 3.627996 -1.642694
 H -5.337390 3.283724 -2.603499
 H -5.769416 3.915706 -0.996066
 H -4.339742 4.540961 -1.830074
 C 2.274605 1.282616 -0.824849
 C 1.448494 2.550555 -1.150088
 C 3.456806 1.664838 0.088674
 C 2.854761 0.775576 -2.163332
 H 0.981013 2.957353 -0.246816
 H 0.626538 2.288742 -1.832102
 C 2.335658 3.622200 -1.791607
 H 4.068528 0.779174 0.317588
 H 3.091472 2.051969 1.048540
 C 4.327982 2.735309 -0.577853
 H 2.041722 0.500805 -2.850263
 H 3.465902 -0.122774 -2.005883
 C 3.730961 1.846259 -2.824933
 H 1.715878 4.514051 -1.980511
 C 3.484009 3.982435 -0.846909
 C 2.899453 3.095654 -3.110162

H 5.154507 2.985594 0.107404
 C 4.891066 2.199537 -1.894042
 H 4.122958 1.433266 -3.769247
 H 3.085303 4.381767 0.100977
 H 4.108773 4.775336 -1.291496
 H 2.077095 2.856191 -3.805110
 H 3.521953 3.863922 -3.599092
 H 5.542875 2.953256 -2.366776
 H 5.514569 1.308629 -1.706369
 C 0.739799 0.392167 1.831400
 C 1.946111 0.064225 2.742623
 C 0.455088 1.910969 1.923616
 C -0.536297 -0.336569 2.289026
 H 2.880089 0.573084 2.444871
 H 2.145573 -1.017448 2.721514
 C 1.596565 0.467154 4.185818
 H -0.389746 2.164799 1.265328
 H 1.323062 2.507666 1.607562
 C 0.128027 2.309231 3.364913
 H -0.365218 -1.423526 2.289187
 H -1.586182 -0.028622 0.945308
 C -0.828528 0.058060 3.737193
 H 2.459190 0.218889 4.827914
 C 1.327456 1.971899 4.252413
 C 0.351916 -0.284439 4.664937
 H -0.054062 3.397913 3.386584
 C -1.109371 1.555744 3.843934
 H -1.720731 -0.498838 4.072784
 H 2.217867 2.536574 3.921796
 H 1.126215 2.272517 5.294554
 H 0.535127 -1.372345 4.642063
 H 0.142685 -0.013915 5.717835
 H -1.346733 1.849248 4.882421
 H -1.977191 1.816616 3.216915
 C 1.815222 -1.751468 -0.233524
 C 1.003152 -2.711172 0.659711
 C 1.613174 -2.228165 -1.689306

C 3.303422 -1.870394 0.145321
 H -0.067527 -2.627221 0.414924
 H 1.103559 -2.426459 1.714110
 C 1.482564 -4.155072 0.488999
 H 2.140851 -1.582862 -2.401542
 H 0.543491 -2.177280 -1.941118
 C 2.115467 -3.666265 -1.859387
 H 3.463190 -1.548153 1.184528
 H 3.922655 -1.219694 -0.489064
 C 3.775292 -3.319894 -0.026017
 H 0.881992 -4.796833 1.154308
 C 1.305245 -4.598895 -0.961223
 C 2.958898 -4.243068 0.880131
 H 1.982968 -3.954966 -2.915264
 C 3.597281 -3.744995 -1.484997
 H 4.841362 -3.373810 0.250277
 H 0.239086 -4.562973 -1.241674
 H 1.639189 -5.642649 -1.088672
 H 3.089391 -3.951327 1.935897
 H 3.319209 -5.281433 0.786510
 H 3.971731 -4.772331 -1.629521
 H 4.192445 -3.091899 -2.146540
 P 1.125298 -0.000748 -0.008962

III

E = -2185.97114682
 C 1.634000 -0.130280 -0.241214
 C 0.411570 -0.097247 -0.901543
 C 0.688205 -0.075361 -2.313236
 C 2.054766 -0.108435 -2.447596
 N 2.609662 -0.146600 -1.185002
 H -0.016121 -0.035179 -3.140342
 H 2.683903 -0.097034 -3.335345
 C 4.003581 -0.082514 -0.892984
 C 4.746293 -1.274324 -0.857795
 C 4.569882 1.174462 -0.624327
 C 6.109392 -1.178722 -0.565480

C 5.936134 1.219061 -0.331021
 C 6.698463 0.055915 -0.308355
 H 6.719306 -2.083380 -0.530437
 H 6.410390 2.178708 -0.114743
 H 7.765742 0.110588 -0.080078
 C 4.058044 -2.611783 -1.044034
 H 3.184768 -2.439466 -1.693146
 C 3.711829 2.423973 -0.588608
 H 2.796538 2.206581 -1.161886
 C 3.288064 2.734277 0.850173
 H 2.742975 1.894227 1.307009
 H 4.168238 2.948472 1.477674
 H 2.632698 3.619924 0.876283
 C 4.383859 3.627475 -1.243105
 H 5.263629 3.968654 -0.674911
 H 4.711671 3.399982 -2.268796
 H 3.682296 4.474830 -1.288918
 C 3.530834 -3.115420 0.303555
 H 4.363432 -3.304242 0.999999
 H 2.859634 -2.382703 0.775009
 H 2.973130 -4.056767 0.176150
 C 4.935631 -3.658546 -1.721061
 H 5.349954 -3.288957 -2.671439
 H 5.777844 -3.965871 -1.081113
 H 4.348279 -4.564611 -1.934245
 C -2.360555 -1.085785 -0.969603
 C -1.645822 -2.386131 -1.409933
 C -3.588802 -1.451558 -0.111151
 C -2.871643 -0.397880 -2.254850
 H -1.236425 -2.919850 -0.545246
 H -0.789205 -2.139179 -2.052980
 C -2.612332 -3.304035 -2.165597
 H -4.122996 -0.542545 0.203968
 H -3.275545 -1.966807 0.805843
 C -4.540521 -2.366083 -0.890127
 H -2.028543 -0.125084 -2.904717
 H -3.405474 0.530296 -2.012288

C -3.825530 -1.315650 -3.029621
 H -2.070504 -4.224827 -2.437251
 C -3.806522 -3.651681 -1.274978
 C -3.101365 -2.599926 -3.430154
 H -5.398127 -2.606832 -0.240608
 C -5.029657 -1.653939 -2.150954
 H -4.161360 -0.777845 -3.931824
 H -3.463836 -4.178202 -0.368251
 H -4.490340 -4.336233 -1.804566
 H -2.247689 -2.367137 -4.088806
 H -3.779080 -3.256965 -4.000925
 H -5.736694 -2.295315 -2.703381
 H -5.575111 -0.733569 -1.880729
 C -0.823139 -0.603697 1.805179
 C -2.034548 -0.286281 2.714125
 C -0.652345 -2.139941 1.730672
 C 0.478117 -0.020050 2.368034
 H -2.995777 -0.684840 2.343271
 H -2.150345 0.803925 2.808429
 C -1.759284 -0.871469 4.111203
 H 0.193053 -2.380181 1.067249
 H -1.551892 -2.631148 1.331561
 C -0.399903 -2.717776 3.124996
 H 0.367510 1.066914 2.502028
 H 1.663078 -0.143145 0.907695
 C 0.701998 -0.598069 3.766376
 H -2.621847 -0.632368 4.756965
 C -1.600918 -2.390556 4.014509
 C -0.479083 -0.275211 4.702294
 H -0.297403 -3.813018 3.029981
 C 0.872345 -2.114718 3.712859
 H 1.620483 -0.150197 4.184531
 H -2.518015 -2.847482 3.600466
 H -1.456461 -2.818106 5.021150
 H -0.581836 0.819065 4.799896
 H -0.324460 -0.677781 5.722310
 H 1.055858 -2.536740 4.717557

H 1.737885 -2.368584 3.079901
 C -1.650880 1.818556 -0.064952
 C -0.788903 2.610712 0.937723
 C -1.362998 2.411185 -1.462358
 C -3.133329 2.034258 0.293792
 H 0.277899 2.452188 0.716435
 H -0.952368 2.236571 1.955733
 C -1.131373 4.102190 0.896010
 H -1.921799 1.885669 -2.245793
 H -0.294591 2.287933 -1.694503
 C -1.732015 3.898071 -1.502611
 H -3.348012 1.632265 1.294806
 H -3.790329 1.503748 -0.410360
 C -3.471131 3.530235 0.252070
 H -0.496909 4.620377 1.633711
 C -0.870091 4.662982 -0.500035
 C -2.605493 4.287706 1.260322
 H -1.542904 4.273260 -2.522071
 C -3.212055 4.072991 -1.154773
 H -4.536408 3.653559 0.508485
 H 0.196955 4.555472 -0.758927
 H -1.104773 5.740508 -0.532928
 H -2.793698 3.912095 2.280185
 H -2.870046 5.358629 1.257751
 H -3.491637 5.138634 -1.207595
 H -3.840955 3.540878 -1.889457
 P -1.124793 -0.001431 0.000704

TS_{III→IV}

E = -2185.96511335
 C 1.545474 -0.116869 -0.353176
 C 0.314606 -0.023171 -0.989620
 C 0.585860 0.118677 -2.393042
 C 1.951801 0.089810 -2.545474
 N 2.520752 -0.057818 -1.300445
 H -0.131704 0.235350 -3.201409
 H 2.574674 0.172899 -3.433313

C 3.918336 -0.035020 -1.023364
 C 4.652482 -1.228812 -1.134072
 C 4.503117 1.180392 -0.631527
 C 6.021525 -1.174679 -0.860908
 C 5.875271 1.183143 -0.362095
 C 6.627501 0.020025 -0.482025
 H 6.623531 -2.082031 -0.937887
 H 6.361358 2.110947 -0.051798
 H 7.699459 0.041648 -0.270921
 C 3.952578 -2.534833 -1.453305
 H 3.062597 -2.288674 -2.053660
 C 3.667916 2.431570 -0.445309
 H 2.693706 2.250675 -0.925896
 C 3.407581 2.673278 1.043564
 H 2.921586 1.804971 1.513134
 H 4.350366 2.862325 1.581723
 H 2.755229 3.549144 1.187792
 C 4.283701 3.658089 -1.113116
 H 5.235870 3.949674 -0.642397
 H 4.476596 3.479473 -2.181650
 H 3.602601 4.519231 -1.028747
 C 3.460418 -3.188626 -0.158223
 H 4.310269 -3.455813 0.490196
 H 2.803737 -2.514384 0.410568
 H 2.895625 -4.108764 -0.376461
 C 4.806600 -3.498340 -2.269857
 H 5.196473 -3.022631 -3.182596
 H 5.664502 -3.878934 -1.693230
 H 4.208993 -4.372601 -2.569531
 C -2.552121 -0.728980 -1.159418
 C -1.984874 -2.019140 -1.790386
 C -3.759793 -1.112336 -0.278104
 C -3.055238 0.177752 -2.297798
 H -1.606249 -2.691380 -1.007909
 H -1.125284 -1.779365 -2.432397
 C -3.062012 -2.734385 -2.612079
 H -4.189114 -0.216926 0.196843

H -3.432352 -1.772838 0.538685
 C -4.832692 -1.823185 -1.108873
 H -2.220953 0.475403 -2.950421
 H -3.486665 1.102454 -1.888414
 C -4.126230 -0.541084 -3.128663
 H -2.624082 -3.650893 -3.041001
 C -4.243650 -3.099842 -1.711626
 C -3.538917 -1.814977 -3.737249
 H -5.678658 -2.078250 -0.449271
 C -5.311269 -0.898904 -2.229746
 H -4.460218 0.136827 -3.932006
 H -3.912355 -3.779915 -0.908616
 H -5.013011 -3.637747 -2.291154
 H -2.696688 -1.564373 -4.404413
 H -4.296888 -2.325952 -4.354913
 H -6.101324 -1.392817 -2.820309
 H -5.754952 0.017171 -1.803547
 C -0.712511 -1.022638 1.933583
 C -1.861201 -0.759038 2.883553
 C -0.724427 -2.476020 1.461217
 C 0.554669 -0.606876 2.476180
 H -2.862091 -1.016167 2.485450
 H -1.879681 0.295208 3.200699
 C -1.533460 -1.657202 4.115732
 H 0.039498 -2.621034 0.681561
 H -1.702443 -2.742628 1.032779
 C -0.448531 -3.382169 2.660081
 H 0.481220 0.403650 2.913985
 H 1.707988 -0.261497 0.730747
 C 0.938470 -1.555098 3.616824
 H -2.309380 -1.483015 4.880523
 C -1.543859 -3.132582 3.701124
 C -0.149103 -1.337598 4.701201
 H -0.472269 -4.438002 2.338695
 C 0.928489 -3.027602 3.218494
 H 1.928460 -1.298153 4.033097
 H -2.528489 -3.408218 3.283647

H -1.382333 -3.770037 4.586821
 H -0.114100 -0.291755 5.048406
 H 0.024356 -1.976608 5.588452
 H 1.160597 -3.662666 4.091265
 H 1.702208 -3.221480 2.458216
 C -1.510283 1.875677 0.203674
 C -0.509348 2.334966 1.280970
 C -1.236565 2.703622 -1.066084
 C -2.931200 2.168128 0.714572
 H 0.517763 2.109193 0.955469
 H -0.672698 1.771725 2.209390
 C -0.661958 3.830506 1.566601
 H -1.912086 2.412527 -1.881181
 H -0.211051 2.507179 -1.415592
 C -1.412724 4.198557 -0.776278
 H -3.134330 1.583550 1.626726
 H -3.682825 1.869006 -0.032000
 C -3.086972 3.666835 1.003209
 H 0.070126 4.115362 2.340521
 C -0.408342 4.632977 0.290855
 C -2.081027 4.099109 2.072050
 H -1.233968 4.761087 -1.707932
 C -2.837684 4.460627 -0.281902
 H -4.113309 3.852307 1.361464
 H 0.620913 4.460359 -0.067777
 H -0.503713 5.713798 0.491513
 H -2.260025 3.544208 3.008545
 H -2.210605 5.170177 2.302739
 H -2.984038 5.538042 -0.095508
 H -3.567432 4.168088 -1.056608
 P -1.210042 0.025613 -0.045138

Phosphan

E = -1796.86259708
 C -0.167745 0.483472 0.017620
 C -0.422474 0.712724 1.410020
 C -1.785656 0.796625 1.578670

N -2.381362 0.633872 0.351231
 H 0.313804 0.800089 2.205160
 H -2.392495 0.949092 2.468808
 C -3.778991 0.479025 0.127407
 C -4.314603 -0.820641 0.152862
 C -4.566957 1.616830 -0.116898
 C -5.684454 -0.963953 -0.086552
 C -5.931528 1.422938 -0.348854
 C -6.484848 0.145963 -0.335142
 H -6.131113 -1.961294 -0.077059
 H -6.572398 2.284973 -0.545818
 H -7.553913 0.015347 -0.519904
 C -3.440851 -2.032834 0.411467
 H -2.433602 -1.667277 0.663263
 C -3.942421 2.995961 -0.181860
 H -2.978836 2.939730 0.347724
 C -3.642251 3.373115 -1.634211
 H -2.976506 2.636751 -2.107607
 H -4.569526 3.421868 -2.227574
 H -3.150722 4.357098 -1.687950
 C -4.785972 4.064159 0.507647
 H -5.735377 4.245494 -0.020597
 H -5.025359 3.782270 1.544076
 H -4.242206 5.020840 0.531493
 C -3.312264 -2.894007 -0.845158
 H -4.287102 -3.306595 -1.151007
 H -2.915072 -2.310458 -1.688946
 H -2.629056 -3.739394 -0.667726
 C -3.936337 -2.848772 1.603724
 H -4.007492 -2.228016 2.509357
 H -4.929800 -3.286463 1.416470
 H -3.243739 -3.678878 1.813425
 C 2.628961 1.319099 -0.261556
 C 3.190507 1.063769 1.144119
 C 3.804006 1.334663 -1.262626
 C 1.976849 2.716733 -0.287342
 H 3.682900 0.079537 1.182960

H 2.377426 1.044621 1.885776
 C 4.206743 2.149741 1.521300
 H 3.413450 1.517863 -2.277636
 H 4.297298 0.350421 -1.289119
 C 4.827096 2.410294 -0.884909
 H 1.127268 2.747030 0.412631
 H 1.562399 2.911090 -1.292303
 C 2.995409 3.797453 0.085825
 H 4.589740 1.945137 2.535423
 C 5.364902 2.131821 0.520945
 C 3.528379 3.521397 1.494151
 H 5.656782 2.387588 -1.611305
 C 4.154626 3.784024 -0.912329
 H 2.497166 4.781294 0.064334
 H 5.871475 1.151637 0.546042
 H 6.118374 2.889042 0.797652
 H 2.700939 3.549460 2.223673
 H 4.245555 4.305659 1.791357
 H 4.884885 4.571973 -0.659800
 H 3.782758 4.002947 -1.927598
 C 1.689088 -1.647759 -0.387135
 C 0.644368 -2.490731 -1.149466
 C 3.085932 -2.085863 -0.855533
 C 1.540595 -1.955592 1.110040
 H 0.720782 -2.281425 -2.229980
 H -0.368645 -2.186900 -0.837702
 C 0.846173 -3.984394 -0.886075
 H 3.862753 -1.516103 -0.320490
 H 3.207754 -1.865063 -1.930324
 C 3.293127 -3.582617 -0.593824
 H 0.535329 -1.661560 1.449349
 H 2.261541 -1.371386 1.700520
 C 1.757201 -3.450937 1.374354
 H 0.083184 -4.554152 -1.443496
 C 2.243559 -4.393348 -1.357618
 C 0.707016 -4.261390 0.612143
 H 4.302553 -3.869320 -0.933711

C 3.156824 -3.857722 0.906117
H 1.658524 -3.641362 2.456455
H 2.343110 -4.216296 -2.441998
H 2.403268 -5.472553 -1.191573
H -0.305086 -3.984681 0.955723
H 0.832962 -5.338869 0.815047
H 3.333087 -4.927174 1.113397
H 3.921868 -3.292635 1.465971
P 1.333399 0.129360 -0.948076
C -1.410912 0.450790 -0.593666
H -1.670931 0.291286 -1.638288

Adamanten

E = -389.101497486
C -0.625692 -1.295523 1.026968
H -0.337875 -2.357386 0.958297
H -1.318825 -1.197202 1.875282
C -1.276003 -0.818249 -0.272483
H -2.166552 -1.419619 -0.522136
C 0.592120 -0.430138 1.234553
C 1.710746 -0.711787 0.276841
H 1.977818 -1.774204 0.137238
H 2.622500 -0.132925 0.491840
C -0.226611 -0.953606 -1.383662
H -0.639957 -0.606823 -2.345398
H 0.036272 -2.017014 -1.516956
C 1.025628 -0.135460 -1.036834
H 1.754107 -0.202138 -1.863002
C 0.583888 1.334676 -0.872456
H 1.453654 1.985993 -0.691393
H 0.123954 1.675475 -1.816373
C -1.681486 0.645253 -0.053668
H -2.437208 0.708036 0.745780
H -2.148368 1.053567 -0.965549
C 0.432530 0.915432 1.381252
H 1.366808 1.489122 1.475801
C -0.459862 1.490295 0.300921

H -0.737874 2.549770 0.427974

1.5 Substitution mit S-Heterocyclen

1.5.1 Energien mit einer S(CH₂)_n-substituierten Oniumgruppe

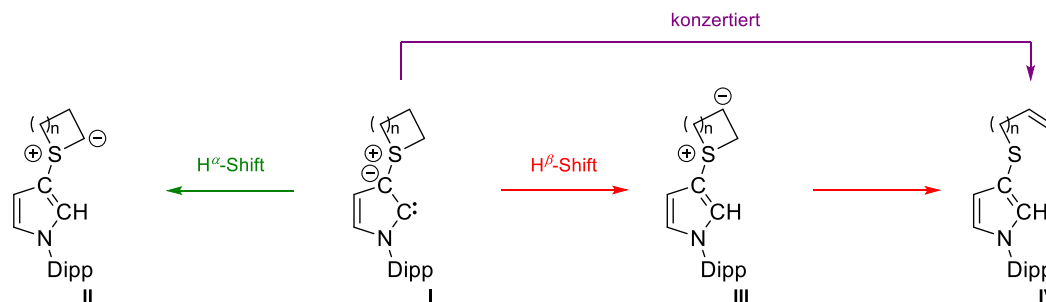


Tabelle 1.13. Energien der Verbindungen.

n		Corr(H)	Corr(G)	E(SCF)	E(PCM)	ΔG in hartree	ΔG in kJ/mol
0	I	0.388206	0.317162	-1151.85936849	-1151.86955030	–	–
	TS _{I→III}	0.383556	0.313313	-1151.84583565	-1151.85122640	0.014475	38.003850
	III	0.388206	0.317166	-1151.85936829	-1151.88430746	-0.018523	-48.632557
	TS _{III→IV}	0.387146	0.312220	-1151.87246797	-1151.88000486	-0.015397	-40.423668
	Sulfide	0.389568	0.312896	-1151.96440571	-1151.97002062	-0.104736	-274.985208
	TS _{conc}	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	–	–
1	I	0.418951	0.344347	-1191.14985066	-1191.15975495	–	–
	TS _{I→II}	0.413822	0.340489	-1191.12601054	-1191.13094039	0.024957	65.523448
	II	0.418435	0.342466	-1191.15558893	-1191.16241539	-0.004541	-11.923551
	TS _{I→III}	0.412483	0.338735	-1191.10898170	-1191.11416939	0.039974	104.950582
	III	0.415742	0.340728	-1191.11992466	-1191.12740644	0.028730	75.429329
	TS _{III→IV}	0.414687	0.340998	-1191.11875762	-1191.12478010	0.031626	83.033669
	Sulfide	0.419318	0.341866	-1191.24247295	-1191.24821195	-0.090938	-238.757719
	TS _{I→IV}	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-	-
2	I	0.449371	0.373620	-1230.45749380	-1230.46755866	-	-
	TS _{I→II}	0.444316	0.369073	-1230.43563018	-1230.44141073	0.021601	56.713242
	II	0.448933	0.368408	-1230.46940683	-1230.47515630	-0.012810	-33.631710
	TS _{I→III}	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-	-
	III	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-	-
	TS _{III→IV}	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-	-
	Sulfide	0.449378	0.367264	-1230.52367161	-1230.52976916	-0.068566	-180.021346
	TS _{I→IV}	0.442867	0.367717	-1230.42223987	-1230.42718359	0.034472	90.506420

1.5.2 Koordinaten mit einer S(CH₂)₂-substituierten Oniumgruppe

I für n = 0

E = -1151.85936849

C -1.189466 0.228249 -0.220418

C -2.228135 0.398267 0.703414

C -1.782424 0.387229 2.064199

C -0.425829 0.219908 1.962699

N -0.105886 0.126559 0.614039

H -2.358588 0.497722 2.981661

H 0.342014 0.163897 2.733192

C 1.232043 -0.070594 0.160380

C 2.040861 1.052218 -0.085680

C 1.702180 -1.383590 -0.015731

C 3.349721 0.832889 -0.525344

C 3.017349 -1.555283 -0.457487

C 3.834449 -0.457974 -0.709250

H 4.000991 1.685715 -0.727443

H 3.409703 -2.563436 -0.606236

H 4.861071 -0.610579 -1.051715

C 1.477754 2.451753 0.057461

H 0.664226 2.396858 0.798027

C 0.781274 -2.566706 0.205950

H 0.014234 -2.244544 0.927927

C 0.059259 -2.911632 -1.099098

H -0.487662 -2.032505 -1.472305

H 0.779506 -3.227979 -1.871239

H -0.656314 -3.735961 -0.943515

C 1.487074 -3.783740 0.794375

H 2.201983 -4.230440 0.085074

H 2.037849 -3.528694 1.712606

H 0.752465 -4.565058 1.043634

C 0.853350 2.894571 -1.268133

H 1.618663 2.947758 -2.059703

H 0.077352 2.179705 -1.580396

H 0.393777 3.891354 -1.169231

C 2.496084 3.467572 0.563958

H 2.975515 3.132284 1.496402

H 3.290991 3.659485 -0.174368
H 2.003153 4.431871 0.761818
C -4.171977 -0.814521 -0.985704
C -3.749787 0.465411 -1.588732
H -3.397799 -1.581661 -0.870597
H -5.210902 -1.149605 -1.070873
H -4.471478 1.087442 -2.124779
H -2.667870 0.544272 -1.824773
S -3.883397 0.552627 0.210463

$TS_{I \rightarrow III}$ für $n = 0$

E = -1151.84583565
C -1.235629 0.285432 -0.127911
C -2.266131 0.475323 0.774963
C -1.800702 0.454772 2.118206
C -0.441939 0.259844 2.003789
N -0.125407 0.158233 0.659750
H -2.360953 0.577443 3.043311
H 0.330437 0.183275 2.768186
C 1.193688 -0.086140 0.176409
C 2.032218 1.008815 -0.094205
C 1.609423 -1.415364 -0.011643
C 3.319166 0.742599 -0.570660
C 2.904358 -1.633035 -0.491175
C 3.751660 -0.564992 -0.767228
H 3.994306 1.571581 -0.792455
H 3.255982 -2.654541 -0.650894
H 4.761631 -0.753743 -1.139603
C 1.524454 2.427755 0.064647
H 0.715282 2.399338 0.811180
C 0.657231 -2.567331 0.239482
H -0.113439 -2.202717 0.936451
C -0.050811 -2.952848 -1.061581
H -0.575780 -2.086353 -1.489587
H 0.673139 -3.317767 -1.808179
H -0.787254 -3.753140 -0.883158
C 1.330188 -3.773499 0.887100

H 2.053127 -4.256540 0.210705
H 1.865008 -3.492139 1.806863
H 0.577885 -4.533303 1.149309
C 0.910832 2.911599 -1.251675
H 1.671330 2.940060 -2.048869
H 0.100326 2.241665 -1.573737
H 0.496083 3.925937 -1.138718
C 2.587151 3.396562 0.572791
H 3.058183 3.032829 1.498657
H 3.384228 3.562334 -0.169356
H 2.135491 4.378136 0.783039
C -4.018369 -0.774703 -1.052919
C -3.352791 0.391022 -1.646644
H -3.371084 -1.579210 -0.674604
H -5.047086 -1.070196 -1.301853
H -3.921123 1.009044 -2.351746
H -1.997501 0.351259 -1.340192
S -3.871522 0.681516 0.072908

III für $n = 0$

E = -1151.85936829
C -1.189422 0.228485 -0.220305
C -2.228140 0.398063 0.703589
C -1.782407 0.386748 2.064353
C -0.425797 0.219489 1.962808
N -0.105835 0.126710 0.614106
H -2.358574 0.496983 2.981846
H 0.342096 0.163596 2.733257
C 1.232067 -0.070627 0.160382
C 2.041010 1.052063 -0.085694
C 1.702003 -1.383706 -0.015741
C 3.349857 0.832541 -0.525351
C 3.017138 -1.555592 -0.457481
C 3.834399 -0.458389 -0.709227
H 4.001272 1.685257 -0.727428
H 3.409363 -2.563803 -0.606192
H 4.861006 -0.611145 -1.051674

C 1.478085 2.451681 0.057573
 H 0.664619 2.396804 0.798212
 C 0.780885 -2.566642 0.205936
 H 0.014215 -2.244531 0.928332
 C 0.058278 -2.910953 -1.098947
 H -0.488554 -2.031557 -1.471661
 H 0.778144 -3.227248 -1.871468
 H -0.657443 -3.735145 -0.943337
 C 1.486621 -3.784042 0.793675
 H 2.201160 -4.230670 0.083951
 H 2.037797 -3.529448 1.711792
 H 0.751916 -4.565267 1.042932
 C 0.853579 2.894573 -1.267948
 H 1.618755 2.947555 -2.059666
 H 0.077421 2.179804 -1.580049
 H 0.394189 3.891443 -1.169054
 C 2.496567 3.467349 0.564019
 H 2.975879 3.132019 1.496511
 H 3.291554 3.659050 -0.174266
 H 2.003807 4.431754 0.761783
 C -4.171856 -0.813885 -0.985949
 C -3.749316 0.466023 -1.588831
 H -3.397961 -1.581329 -0.870975
 H -5.210827 -1.148778 -1.071410
 H -4.470925 1.088266 -2.124730
 H -2.667326 0.544871 -1.824538
 S -3.883252 0.552842 0.210495

TS_{III→IV} für n = 0

E = -1151.87246797
 C 1.122528 -0.418648 -0.435401
 C 2.247728 -0.748033 0.296259
 C 1.867787 -0.789238 1.668014
 C 0.528393 -0.470437 1.719834
 N 0.087250 -0.242600 0.439980
 H 2.511235 -1.022351 2.513963
 H -0.155753 -0.376912 2.560675

C -1.237969 0.138735 0.079212
 C -2.191085 -0.865171 -0.161084
 C -1.539591 1.508128 -0.027171
 C -3.482136 -0.463293 -0.516830
 C -2.841627 1.859514 -0.393368
 C -3.804354 0.884307 -0.634405
 H -4.247003 -1.220089 -0.707340
 H -3.107102 2.914749 -0.490147
 H -4.817877 1.178908 -0.917152
 C -1.847927 -2.335239 -0.031460
 H -0.769372 -2.405047 0.174918
 C -0.484392 2.569583 0.211787
 H 0.376013 2.074719 0.687741
 C -0.000063 3.155847 -1.115411
 H 0.402066 2.372601 -1.774909
 H -0.821900 3.657130 -1.651481
 H 0.795934 3.897691 -0.946164
 C -0.966011 3.662319 1.163370
 H -1.791724 4.249560 0.731603
 H -1.317213 3.238023 2.115884
 H -0.147483 4.364483 1.384114
 C -2.114781 -3.093461 -1.330680
 H -3.185309 -3.094022 -1.590434
 H -1.565423 -2.646929 -2.172943
 H -1.796879 -4.143146 -1.235616
 C -2.582963 -2.966002 1.151274
 H -2.350791 -2.441131 2.090084
 H -3.675153 -2.932448 1.009975
 H -2.292211 -4.021215 1.270727
 C 4.668795 0.578711 0.099783
 C 4.575766 0.223034 -1.268921
 H 4.060838 1.358610 0.597946
 H 5.517768 0.232041 0.701283
 H 3.894759 0.791719 -1.914987
 H 0.982963 -0.295367 -1.507024
 S 3.836267 -1.163581 -0.428712

Sulfid für $n = 0$

E = -1151.96440571

C 1.018878 -0.411881 -0.481678

C 2.175369 -0.699969 0.221746

C 1.850177 -0.656350 1.609042

C 0.514131 -0.336003 1.696328

N 0.018333 -0.195980 0.422518

H 2.531475 -0.843985 2.435964

H -0.137567 -0.198404 2.556384

C -1.328805 0.133512 0.093824

C -2.255026 -0.907669 -0.088286

C -1.678908 1.488111 -0.043046

C -3.565686 -0.559214 -0.427450

C -3.001342 1.786068 -0.383568

C -3.935720 0.773368 -0.574901

H -4.308468 -1.345869 -0.580167

H -3.304162 2.829021 -0.502516

H -4.964781 1.026034 -0.841740

C -1.849619 -2.361562 0.044856

H -0.825475 -2.382464 0.446844

C -0.654701 2.591054 0.133297

H 0.247177 2.134945 0.569071

C -0.261178 3.180568 -1.221965

H 0.133599 2.404421 -1.894304

H -1.126515 3.647523 -1.719251

H 0.515717 3.951462 -1.100593

C -1.131564 3.673322 1.099259

H -2.005541 4.217612 0.707939

H -1.410990 3.245215 2.073598

H -0.334398 4.413442 1.268339

C -1.818175 -3.040803 -1.324791

H -2.817479 -3.050899 -1.788976

H -1.134546 -2.519826 -2.011593

H -1.477583 -4.083885 -1.233645

C -2.741921 -3.117095 1.027503

H -2.751946 -2.629915 2.014059

H -3.782871 -3.178583 0.672513

H -2.378713 -4.147753 1.160415
 C 5.975217 0.429220 -0.318045
 C 4.646418 0.350942 -0.204744
 H 6.484996 1.383188 -0.165930
 H 6.589127 -0.439722 -0.571320
 H 4.038316 1.223224 0.058522
 H 0.840302 -0.347711 -1.552346
 S 3.719170 -1.114307 -0.506448

1.5.3 Koordinaten mit einer S(CH₂)₃-substituierten Oniumgruppe

I für n = 1

E = -1191.14985066
 C -0.968308 0.000131 -0.042637
 C -1.950602 0.000363 0.970174
 C -1.390406 0.000557 2.293770
 C -0.040904 0.000445 2.081035
 N 0.176662 0.000202 0.702121
 H -1.902657 0.000768 3.254526
 H 0.791036 0.000512 2.783946
 C 1.491095 -0.000081 0.146420
 C 2.120066 1.229938 -0.112009
 C 2.119542 -1.230368 -0.111958
 C 3.411318 1.205634 -0.647193
 C 3.410798 -1.206633 -0.647166
 C 4.051996 -0.000644 -0.911053
 H 3.924769 2.145289 -0.860953
 H 3.923833 -2.146520 -0.860914
 H 5.062701 -0.000865 -1.326974
 C 1.382215 2.533246 0.119075
 H 0.643533 2.347621 0.914980
 C 1.381191 -2.533379 0.119208
 H 0.642318 -2.347311 0.914830
 C 0.602327 -2.913460 -1.142820
 H -0.080584 -2.098009 -1.426132
 H 1.291116 -3.099327 -1.983103
 H 0.011599 -3.829090 -0.976487

C 2.283854 -3.670771 0.584525
 H 2.986365 -3.989348 -0.202092
 H 2.874103 -3.385326 1.468721
 H 1.678327 -4.551401 0.848902
 C 0.603074 2.913290 -1.142798
 H 1.291681 3.098828 -1.983304
 H -0.080134 2.097974 -1.425790
 H 0.012638 3.829103 -0.976450
 C 2.285382 3.670483 0.583791
 H 2.875925 3.385070 1.467802
 H 2.987645 3.988696 -0.203195
 H 1.680202 4.551331 0.848232
 C -3.894858 1.131121 -0.837727
 C -3.894866 -1.130816 -0.837436
 C -4.555269 0.000052 -1.630990
 H -2.879327 1.366374 -1.194232
 H -4.471378 2.035111 -0.600951
 H -2.879328 -1.366161 -1.193871
 H -4.471391 -2.034740 -0.600419
 H -4.330092 -0.000089 -2.707054
 H -5.648074 0.000068 -1.504787
 S -3.616084 0.000337 0.600290

TS_{I→II} für n = 1

E = -1191.12601054
 C -1.007934 -0.310549 0.028985
 C -1.983999 -0.526002 0.983424
 C -1.437030 -0.499223 2.296816
 C -0.096113 -0.253019 2.105552
 N 0.142057 -0.147826 0.743968
 H -1.939118 -0.638051 3.252594
 H 0.716517 -0.148385 2.823905
 C 1.426730 0.107546 0.179473
 C 1.819115 1.440655 -0.031100
 C 2.252455 -0.980988 -0.148540
 C 3.078855 1.668523 -0.592266
 C 3.503518 -0.704305 -0.707726

C 3.913277 0.606806 -0.926939
 H 3.413131 2.692544 -0.770885
 H 4.168109 -1.527920 -0.976494
 H 4.895456 0.803852 -1.363738
 C 0.873953 2.583213 0.283220
 H 0.178622 2.222586 1.057566
 C 1.767191 -2.404104 0.040138
 H 0.996226 -2.381268 0.826228
 C 1.094652 -2.901215 -1.242080
 H 0.261311 -2.243533 -1.528841
 H 1.815005 -2.925902 -2.075808
 H 0.697704 -3.919479 -1.103831
 C 2.864637 -3.358870 0.499176
 H 3.626992 -3.517776 -0.279991
 H 3.375272 -2.986230 1.400135
 H 2.435299 -4.344876 0.733969
 C 0.039541 2.927328 -0.953367
 H 0.685019 3.280193 -1.773943
 H -0.514081 2.045753 -1.308471
 H -0.686375 3.724287 -0.724640
 C 1.580685 3.815930 0.837626
 H 2.210403 3.565885 1.704884
 H 2.221362 4.299353 0.083112
 H 0.840982 4.565494 1.158286
 C -4.260645 0.802460 -0.239184
 C -3.144179 -0.786763 -1.434461
 C -4.022876 0.438605 -1.709859
 H -3.612614 1.590381 0.167404
 H -5.299702 0.951885 0.084657
 H -1.734004 -0.481523 -1.109057
 H -3.362690 -1.732158 -1.950280
 H -3.512053 1.230007 -2.285774
 H -4.977016 0.226289 -2.220514
 S -3.591573 -0.832050 0.334902

II für n = 1

E = -1191.15558893

C -0.943745 -0.432380 -0.137306
 C -1.996879 -0.733508 0.699102
 C -1.501518 -0.734373 2.033117
 C -0.162040 -0.413166 1.957394
 N 0.166927 -0.235412 0.636495
 H -2.061291 -0.943404 2.943163
 H 0.594057 -0.297540 2.731692
 C 1.452582 0.135354 0.145159
 C 1.738587 1.501329 -0.025883
 C 2.379008 -0.874906 -0.164211
 C 2.995705 1.843210 -0.531892
 C 3.623555 -0.482987 -0.666102
 C 3.929097 0.861534 -0.849119
 H 3.247896 2.895543 -0.681167
 H 4.364699 -1.244072 -0.920863
 H 4.906731 1.148176 -1.244207
 C 0.705660 2.566280 0.284693
 H -0.090406 2.087619 0.875322
 C 2.029357 -2.340824 -0.006665
 H 1.102088 -2.395124 0.583606
 C 1.740975 -2.969940 -1.370803
 H 0.927505 -2.440780 -1.888976
 H 2.630987 -2.936580 -2.019640
 H 1.442436 -4.023860 -1.258472
 C 3.102418 -3.116591 0.753395
 H 4.051261 -3.160915 0.195730
 H 3.309292 -2.659768 1.732847
 H 2.775443 -4.153840 0.923474
 C 0.068379 3.087284 -1.004755
 H 0.818593 3.571601 -1.650340
 H -0.393613 2.271358 -1.579988
 H -0.715201 3.827749 -0.780388
 C 1.276770 3.705250 1.125795
 H 1.740527 3.328231 2.049663
 H 2.038814 4.280935 0.577104
 H 0.478390 4.408750 1.407635
 C -4.401799 0.545879 0.206745

C -3.944374 -0.682914 -1.552242
 C -4.057113 0.797953 -1.272455
 H -3.910073 1.156195 0.978004
 H -5.476724 0.437323 0.402722
 H -0.912931 -0.346754 -1.221991
 H -3.451404 -1.188972 -2.387095
 H -3.126572 1.404445 -1.340809
 H -4.838042 1.339615 -1.836321
 S -3.676795 -1.143310 0.075627

TS_{I→III} für n = 1

E = -1191.10898170
 C 1.077064 0.000130 0.024605
 C 2.094114 0.000068 0.974823
 C 1.554664 -0.000024 2.293118
 C 0.190766 -0.000110 2.113858
 N -0.073129 -0.000042 0.754735
 H 2.085056 -0.000075 3.243130
 H -0.620680 -0.000217 2.839519
 C -1.386795 0.000013 0.197696
 C -2.007009 -1.232003 -0.069391
 C -2.006831 1.232092 -0.069478
 C -3.292190 -1.206730 -0.618555
 C -3.291995 1.206973 -0.618693
 C -3.929164 0.000160 -0.888636
 H -3.802386 -2.146243 -0.840466
 H -3.802031 2.146551 -0.840714
 H -4.934474 0.000216 -1.317075
 C -1.272616 -2.536395 0.166882
 H -0.502166 -2.341118 0.929237
 C -1.272282 2.536401 0.166748
 H -0.501477 2.340935 0.928687
 C -0.549873 2.967267 -1.112577
 H 0.139926 2.184490 -1.460384
 H -1.272596 3.167156 -1.920123
 H 0.031138 3.887393 -0.940429
 C -2.172771 3.646768 0.698605

H -2.913758 3.971637 -0.048898
H -2.719115 3.328417 1.599374
H -1.571048 4.530814 0.959490
C -0.549653 -2.967048 -1.112208
H -1.272051 -3.166743 -1.920092
H 0.140350 -2.184277 -1.459605
H 0.031217 -3.887248 -0.939974
C -2.173365 -3.646875 0.698054
H -2.720293 -3.328680 1.598525
H -2.913857 -3.971708 -0.049954
H -1.571744 -4.530913 0.959198
C 3.677930 1.133160 -1.010316
C 3.677942 -1.133475 -1.010036
C 3.068797 -0.000285 -1.819595
H 4.714924 1.476116 -1.217684
H 3.050718 2.009651 -0.759974
H 4.714945 -1.476451 -1.217324
H 3.050768 -2.009924 -0.759456
H 3.262793 -0.000436 -2.902695
H 1.613227 -0.000108 -1.156348
S 3.760883 0.000033 0.461341

III für $n = 1$

E = -1191.11992466
C 1.012124 -0.240724 0.001767
C 2.050934 -0.446870 0.894202
C 1.508404 -0.523196 2.209566
C 0.150801 -0.343985 2.070081
N -0.131650 -0.175915 0.731252
H 2.050457 -0.683098 3.138924
H -0.645999 -0.317325 2.809798
C -1.420308 0.099026 0.182133
C -2.270424 -0.976493 -0.125457
C -1.771915 1.439620 -0.049691
C -3.514950 -0.675445 -0.685326
C -3.025144 1.687877 -0.617362
C -3.887443 0.642561 -0.930319

H -4.201488 -1.485303 -0.939921
 H -3.331078 2.716969 -0.816750
 H -4.863342 0.857499 -1.372371
 C -1.820874 -2.409943 0.075608
 H -1.022300 -2.399790 0.833692
 C -0.813761 2.572170 0.264571
 H -0.066137 2.180766 0.972249
 C -0.064894 3.017261 -0.994884
 H 0.529120 2.201810 -1.434200
 H -0.769005 3.378195 -1.761771
 H 0.626700 3.840912 -0.757524
 C -1.506758 3.751524 0.942877
 H -2.207576 4.263389 0.264728
 H -2.070215 3.432490 1.832719
 H -0.761894 4.497393 1.259498
 C -1.212989 -2.955104 -1.219397
 H -1.963718 -2.975577 -2.025565
 H -0.371424 -2.333938 -1.559346
 H -0.841318 -3.981414 -1.073256
 C -2.931327 -3.318693 0.593732
 H -3.393173 -2.913148 1.506559
 H -3.728252 -3.463270 -0.152590
 H -2.526971 -4.314774 0.829567
 C 4.005820 0.944968 -0.647440
 C 3.687662 -1.202590 -1.270377
 C 3.415590 0.186053 -1.802802
 H 5.115410 1.093344 -0.558463
 H 3.519716 1.856720 -0.243374
 H 4.668953 -1.719343 -1.443749
 H 2.898640 -1.982241 -1.297708
 H 3.822890 0.426571 -2.796063
 H 1.113439 -0.079582 -1.077140
 S 3.737302 -0.522121 0.462152

TS_{III→IV} für n = 1

E = -1191.11875762
 C 0.989995 -0.369237 -0.022435

C 2.026017 -0.636326 0.859764
 C 1.489663 -0.676215 2.180748
 C 0.144911 -0.415912 2.055267
 N -0.141800 -0.232526 0.719112
 H 2.030437 -0.867555 3.104946
 H -0.641983 -0.346226 2.802614
 C -1.411458 0.132255 0.180458
 C -2.329756 -0.880666 -0.142621
 C -1.676511 1.496635 -0.029839
 C -3.550833 -0.492164 -0.700557
 C -2.909495 1.833205 -0.596354
 C -3.836261 0.850385 -0.927748
 H -4.287861 -1.252470 -0.967234
 H -3.148448 2.882785 -0.779842
 H -4.794721 1.134509 -1.368964
 C -1.979314 -2.343176 0.044950
 H -1.158623 -2.391825 0.777319
 C -0.652098 2.561831 0.311766
 H 0.062869 2.112180 1.018541
 C 0.137310 2.985255 -0.930440
 H 0.714385 2.152220 -1.360446
 H -0.537008 3.378938 -1.708023
 H 0.854072 3.780667 -0.672026
 C -1.279478 3.768059 1.007030
 H -1.937033 4.337414 0.331307
 H -1.874400 3.467007 1.882635
 H -0.493571 4.458541 1.349010
 C -1.454860 -2.931152 -1.267223
 H -2.228825 -2.894396 -2.050588
 H -0.579757 -2.373770 -1.632377
 H -1.156511 -3.982548 -1.131694
 C -3.137718 -3.166644 0.600158
 H -3.534418 -2.730261 1.529215
 H -3.969366 -3.245324 -0.117609
 H -2.803667 -4.192018 0.820323
 C 4.110127 0.867656 -0.545627
 C 3.595943 -1.151786 -1.389632

C 3.417869 0.310520 -1.724316
H 5.223523 0.773018 -0.427965
H 3.804439 1.828455 -0.085209
H 4.525903 -1.711397 -1.672442
H 2.743632 -1.849841 -1.505211
H 3.685895 0.694106 -2.718366
H 1.057223 -0.189053 -1.095580
S 3.704506 -0.737538 0.428987

Sulfid für $n = 1$

E = -1191.24247295
C 1.057557 -0.286515 0.083467
C 2.064996 -0.534760 0.998416
C 1.456424 -0.609278 2.285481
C 0.105088 -0.401738 2.106240
N -0.129154 -0.214086 0.771216
H 1.960053 -0.802523 3.230317
H -0.714780 -0.378010 2.820586
C -1.389838 0.071942 0.175847
C -2.206553 -0.996253 -0.233636
C -1.762940 1.416314 0.000151
C -3.428414 -0.687047 -0.838285
C -2.992806 1.675578 -0.611442
C -3.817778 0.635096 -1.026389
H -4.084379 -1.494952 -1.170765
H -3.309815 2.709572 -0.765848
H -4.775928 0.857451 -1.502484
C -1.757043 -2.434297 -0.072664
H -0.893911 -2.431745 0.610069
C -0.846624 2.547580 0.421849
H -0.067778 2.113782 1.067318
C -0.145684 3.154401 -0.795147
H 0.437940 2.396888 -1.338796
H -0.875071 3.590054 -1.497063
H 0.546201 3.953409 -0.485606
C -1.575679 3.613641 1.236159
H -2.331975 4.144908 0.636862

H -2.084480 3.174297 2.107288
H -0.862299 4.367577 1.602841
C -1.277693 -2.995071 -1.412740
H -2.094976 -3.011227 -2.151802
H -0.460905 -2.385689 -1.827294
H -0.906864 -4.025215 -1.294017
C -2.834647 -3.317413 0.551205
H -3.180543 -2.908749 1.512524
H -3.712957 -3.422285 -0.105288
H -2.441292 -4.329336 0.733191
C 3.534825 1.511855 -1.514218
C 3.851463 -0.958584 -1.067974
C 3.701057 0.258364 -1.932952
H 3.490187 1.741698 -0.444935
H 3.440382 2.337194 -2.223951
H 4.833165 -1.426371 -1.255859
H 3.099112 -1.720086 -1.339001
H 3.741541 0.050865 -3.010626
H 1.090154 -0.127540 -0.990263
S 3.790565 -0.716141 0.722743

1.5.4 Koordinaten mit einer S(CH₂)₄-substituierten Oniumgruppe

I für n = 2

E = -1230.45749380
C 0.767806 0.322988 -0.014166
C 1.703949 0.614342 0.991001
C 1.127080 0.646290 2.302926
C -0.195358 0.359618 2.091806
N -0.378558 0.179339 0.725547
H 1.606113 0.850140 3.259606
H -1.027072 0.281505 2.790878
C -1.654430 -0.120678 0.163853
C -2.011437 -1.466331 -0.030255
C -2.520047 0.936241 -0.167372
C -3.270197 -1.739957 -0.573407
C -3.769634 0.616109 -0.706284

C -4.142830 -0.709080 -0.906365
 H -3.573964 -2.775944 -0.737674
 H -4.462416 1.416154 -0.975146
 H -5.124702 -0.940893 -1.326786
 C -1.024697 -2.574216 0.278447
 H -0.344304 -2.188521 1.054191
 C -2.069100 2.374452 -0.010817
 H -1.323987 2.391815 0.800169
 C -1.358332 2.831001 -1.287531
 H -0.516122 2.159811 -1.513857
 H -2.052734 2.820786 -2.143614
 H -0.970918 3.856456 -1.173482
 C -3.194720 3.327807 0.375123
 H -3.930757 3.448623 -0.435785
 H -3.732927 2.980106 1.270231
 H -2.787478 4.327904 0.589585
 C -0.177595 -2.867834 -0.962412
 H -0.807152 -3.250379 -1.782375
 H 0.318129 -1.946015 -1.303501
 H 0.591959 -3.625898 -0.741427
 C -1.679770 -3.838785 0.823325
 H -2.317895 -3.622331 1.693689
 H -2.301703 -4.341720 0.065682
 H -0.909856 -4.560976 1.136426
 S 3.385165 0.862663 0.665430
 C 3.364102 1.275927 -1.123462
 H 2.277331 1.255882 -1.338941
 H 3.792994 2.277782 -1.251694
 C 4.092425 0.155645 -1.851856
 H 3.740781 0.103623 -2.893671
 H 5.179809 0.339288 -1.878334
 C 3.787995 -1.125386 -1.082865
 H 2.715941 -1.363230 -1.175905
 H 4.371806 -1.986857 -1.441304
 C 4.100844 -0.811261 0.366455
 H 3.638445 -1.477791 1.106699
 H 5.181615 -0.728656 0.563752

$TS_{I \rightarrow II}$ für $n = 2$

E = -1230.43563018
 C 0.742458 -0.498869 -0.041418
 C 1.700889 -0.848932 0.886922
 C 1.180376 -0.832095 2.208848
 C -0.129933 -0.431277 2.055501
 N -0.373678 -0.238309 0.707948
 H 1.676703 -1.066206 3.149153
 H -0.915995 -0.277847 2.794395
 C -1.637634 0.161160 0.183710
 C -2.573736 -0.829303 -0.161303
 C -1.905644 1.532046 0.031468
 C -3.805565 -0.412514 -0.673833
 C -3.150785 1.901949 -0.485540
 C -4.092548 0.939513 -0.833688
 H -4.553112 -1.157735 -0.953392
 H -3.386876 2.959942 -0.619059
 H -5.061690 1.246247 -1.234979
 C -2.223646 -2.298621 -0.040018
 H -1.438300 -2.381119 0.727603
 C -0.848536 2.568572 0.354109
 H -0.128294 2.092842 1.037575
 C -0.088021 2.946958 -0.918650
 H 0.345502 2.053849 -1.391807
 H -0.759512 3.427233 -1.648754
 H 0.729043 3.651225 -0.693146
 C -1.409227 3.799924 1.058770
 H -2.077639 4.382279 0.404892
 H -1.976426 3.524889 1.960882
 H -0.590794 4.470986 1.362139
 C -1.626505 -2.802515 -1.356401
 H -2.362086 -2.724403 -2.173471
 H -0.740116 -2.213468 -1.633343
 H -1.324901 -3.858396 -1.268107
 C -3.397875 -3.163695 0.406334
 H -3.853228 -2.782429 1.333010
 H -4.186959 -3.217594 -0.360534

H -3.059826 -4.194729 0.591840
 S 3.271693 -1.283583 0.189322
 C 4.350846 0.153458 0.632995
 H 3.731878 0.810930 1.259962
 H 5.207599 -0.215077 1.213853
 C 4.715590 0.779556 -0.705349
 H 5.038766 1.823841 -0.559181
 H 5.561023 0.232674 -1.154368
 C 3.480827 0.655436 -1.599625
 H 2.722843 1.391208 -1.269067
 H 3.714769 0.885140 -2.650277
 C 2.907630 -0.746632 -1.475308
 H 1.512319 -0.611421 -1.202492
 H 3.310180 -1.492097 -2.173252

II für n = 2

E = -1230.46940683
 C -1.746901 -0.715451 0.010740
 C -1.507769 -0.713610 1.407861
 C -0.174259 -0.409255 1.586172
 N 0.397565 -0.238653 0.350577
 H -2.254623 -0.922276 2.173170
 H 0.424682 -0.295970 2.487468
 C 1.754153 0.122790 0.108812
 C 2.080551 1.487439 0.014624
 C 2.713304 -0.893246 -0.039507
 C 3.412324 1.821536 -0.245565
 C 4.032946 -0.509480 -0.296768
 C 4.379660 0.833378 -0.400337
 H 3.697198 2.873024 -0.328937
 H 4.801497 -1.276540 -0.419646
 H 5.416085 1.113796 -0.603425
 C 1.020659 2.561918 0.153951
 H 0.110373 2.076025 0.537063
 C 2.336057 -2.357917 0.049391
 H 1.280386 -2.406886 0.355787
 C 2.448376 -3.031812 -1.318363

H 1.817884 -2.524788 -2.064047
 H 3.485793 -3.016311 -1.689442
 H 2.127019 -4.083386 -1.260830
 C 3.155456 -3.092619 1.108628
 H 4.226859 -3.116270 0.853453
 H 3.055774 -2.612657 2.093716
 H 2.815606 -4.135565 1.202280
 C 0.679745 3.162175 -1.210806
 H 1.555432 3.660365 -1.657142
 H 0.342108 2.385618 -1.913322
 H -0.123716 3.909632 -1.117928
 C 1.419393 3.641470 1.157437
 H 1.661290 3.205539 2.138267
 H 2.296720 4.214773 0.818419
 H 0.594965 4.357531 1.297079
 S -3.383326 -1.152176 -0.727640
 C -5.058511 0.184454 0.836328
 H -6.151180 0.299605 0.699950
 H -4.865886 0.402394 1.905192
 C -4.285690 1.213656 -0.018076
 H -4.898849 2.095682 -0.260338
 H -3.406025 1.573045 0.538702
 C -3.797111 0.536964 -1.294165
 H -4.593819 0.396338 -2.039324
 H -2.924750 1.021427 -1.755919
 C -0.551749 -0.431232 -0.620482
 H -0.290719 -0.347740 -1.673535
 C -4.617943 -1.178332 0.371290
 H -5.005975 -2.137979 0.704499

Sulfid für $n = 2$

E = -1230.52367161
 C -0.438457 -0.660966 -0.701790
 C -1.636820 -1.056202 -0.131326
 C -1.478620 -0.965570 1.283470
 C -0.199099 -0.514627 1.518321
 N 0.423041 -0.331899 0.305854

H -2.237992 -1.203733 2.025077
 H 0.332421 -0.303175 2.443620
 C 1.738758 0.182762 0.123933
 C 1.903561 1.574200 0.003351
 C 2.819033 -0.713302 0.062940
 C 3.198379 2.060342 -0.196496
 C 4.095463 -0.179098 -0.137831
 C 4.283889 1.192698 -0.267733
 H 3.360040 3.135879 -0.299133
 H 4.956025 -0.849881 -0.194882
 H 5.289052 1.591233 -0.425426
 C 0.714614 2.513648 0.047238
 H -0.142702 1.938275 0.429408
 C 2.611193 -2.209877 0.174223
 H 1.568486 -2.373429 0.485701
 C 2.793391 -2.881148 -1.187682
 H 2.103901 -2.459570 -1.934167
 H 3.820210 -2.746825 -1.564396
 H 2.597333 -3.962368 -1.117781
 C 3.510901 -2.838626 1.235940
 H 4.577054 -2.759012 0.970591
 H 3.371499 -2.356231 2.215031
 H 3.280139 -3.909149 1.347931
 C 0.354268 2.990992 -1.360597
 H 1.178734 3.570022 -1.806921
 H 0.141243 2.141693 -2.026485
 H -0.538338 3.635730 -1.336510
 C 0.935468 3.688300 0.997034
 H 1.197110 3.342077 2.008119
 H 1.741998 4.353056 0.649486
 H 0.021071 4.296813 1.071179
 S -3.072842 -1.572108 -0.999795
 C -4.842661 0.626572 0.992574
 H -0.140720 -0.592109 -1.745463
 H -4.896513 1.391047 1.778448
 C -3.881390 0.036611 -1.336594
 H -4.883041 -0.236429 -1.707413

H -3.346523 0.521461 -2.167722
 C -3.975129 1.001235 -0.168966
 H -2.956079 1.212682 0.205202
 H -4.333712 1.969917 -0.565008
 C -5.539721 -0.498827 1.156489
 H -6.153523 -0.651288 2.048254
 H -5.505131 -1.314371 0.429998

TS_{I→IV} für n = 2

E = -1230.42223987
 C -0.922235 -0.230170 0.150035
 C -1.884223 -0.250563 1.165247
 C -1.277567 -0.099455 2.449062
 C 0.064978 0.025218 2.188413
 N 0.257054 -0.034313 0.818373
 H -1.755399 -0.084754 3.426673
 H 0.912015 0.119829 2.866127
 C 1.538202 0.011371 0.195210
 C 2.112319 1.264857 -0.080837
 C 2.181825 -1.196230 -0.125228
 C 3.362743 1.286754 -0.705122
 C 3.428889 -1.124267 -0.753035
 C 4.014392 0.104134 -1.040226
 H 3.833536 2.244404 -0.936454
 H 3.951846 -2.045451 -1.019180
 H 4.990928 0.140795 -1.529427
 C 1.362564 2.546114 0.227510
 H 0.655562 2.320524 1.040900
 C 1.522249 -2.530666 0.158108
 H 0.751461 -2.354165 0.924226
 C 0.808070 -3.042908 -1.094444
 H 0.060367 -2.311872 -1.435866
 H 1.525392 -3.214760 -1.913435
 H 0.293694 -3.995110 -0.887320
 C 2.494187 -3.568363 0.712632
 H 3.248066 -3.869018 -0.032184
 H 3.027499 -3.189654 1.597718

H 1.950361 -4.479408 1.006359
C 0.535942 2.975355 -0.987156
H 1.190297 3.195951 -1.845990
H -0.166824 2.185941 -1.289746
H -0.045969 3.883372 -0.761337
C 2.269628 3.674127 0.708421
H 2.892972 3.357987 1.558598
H 2.941165 4.032752 -0.087742
H 1.665144 4.535835 1.030635
S -3.557744 -0.155812 0.756666
C -2.745683 0.836486 -1.560904
H -1.503632 0.295402 -0.910165
H -2.376323 1.541356 -2.314061
C -3.692828 -1.264094 -0.706136
H -4.716728 -1.663064 -0.690561
H -2.986862 -2.078352 -0.495563
C -3.353851 -0.473340 -1.995819
H -2.656112 -1.059259 -2.617471
H -4.291709 -0.364486 -2.573967
C -3.559984 1.369019 -0.474808
H -3.167898 2.240369 0.072427
H -4.656007 1.467753 -0.603998

2 Studien zur Stabilität von AYCs mit endocyclischen Oniumgruppen

2.1 S-Ylide

2.1.1 Energien der Strukturen

Table 2.1. Energien der AYCs.

AYC	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]
S1	–	–	–	–	–
S2	–	–	–	–	–
S3	-999.33917373	0.329814	0.267442	–	–
S4	-1151.80770776	0.343039	0.276620	–	–

Table 2.2. Energien der Übergangszustände.

AYC	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]
S1	–	–	–	–	–
S2	–	–	–	–	–
S3	-999.33722332	0.328713	0.266465	0.000973	2.555691
S4	-1151.84398988	0.344669	0.272810	0.001817	4.771400

Table 2.3. Energien der Alkine.

AYC	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]
S1	-767.69650324	0.230116	0.175510	–	–
S2	-885.83469865	0.318721	0.255806	–	–
S3	-999.37015603	0.330516	0.263775	-0.03465	-90.971748
S4	-1151.84398988	0.344669	0.272810	-0.04009	-105.261861

2.1.2 Koordinaten der Strukturen

2.1.2.1 Koordinaten der AYCs

S1

–

S2

–

S3

E = -999.339173730

C 0.825705 1.551924 0.247894

C 0.662321 -0.644027 -0.816318

N 1.322956 0.255338 0.162579

C -0.384739 1.691773 -0.308026

S -1.048499 0.040263 -0.883385

C 1.241194 -0.380825 -2.205030

H 2.295857 -0.677403 -2.170904

H 0.727955 -0.970874 -2.972041

H 1.177183 0.683312 -2.455014

C 0.683783 -2.132025 -0.508632

H 0.004625 -2.664172 -1.183351

H 1.700533 -2.496772 -0.660907

H 0.410309 -2.350246 0.525764

C -2.049941 -0.564273 0.600118

C -1.169176 2.905515 -0.669681

H -2.202984 2.910895 -0.300838

H -0.649175 3.762847 -0.230340

H -1.213245 3.065478 -1.756654

C -2.575610 -1.954446 0.272570

H -1.785326 -2.707462 0.240291

H -3.286607 -2.253887 1.053778

H -3.106655 -1.963453 -0.686655

C -3.208876 0.426215 0.659921

H -3.943185 0.059057 1.387964

H -2.866863 1.410510 0.992019

H -3.716503 0.528455 -0.307487

C -1.259739 -0.506379 1.893408

H -1.950493 -0.682067 2.728906

H -0.471810 -1.261682 1.945346

H -0.805583 0.482711 2.022913

C 2.602390 -0.056698 0.595385

C 3.240303 0.941285 1.519806

H 3.420947 1.877805 0.982725

H 2.574309 1.194977 2.349496

H 4.179255 0.514717 1.880932

O 3.172132 -1.070319 0.240209

S4

E = -1151.80770776

C 0.228100 -1.748361 1.018480

C -1.616207 -1.615731 -0.526127

N -1.092378 -1.957782 0.797236

C -1.906895 -2.790485 1.647111

H -1.297950 -3.061656 2.511196

H -2.806680 -2.266181 1.999162

H -2.228870 -3.718241 1.145364

S -0.468110 -0.272763 -1.076174

C 0.801536 -0.925589 0.099515

C -1.090823 1.200809 -0.269994

C -0.906176 1.398110 1.094888

C -1.771398 2.129076 -1.053808

C -1.431330 2.543847 1.680935

H -0.347379 0.660996 1.670283

C -2.285019 3.274365 -0.456580

H -1.894164 1.954652 -2.121492

C -2.117204 3.478275 0.909682

H -1.296649 2.711095 2.747628

H -2.812672 4.010193 -1.059933

H -2.518122 4.376075 1.376095

C -1.378830 -2.753387 -1.516578

H -0.317480 -3.023634 -1.533212

H -1.954709 -3.628925 -1.192268

H -1.702376 -2.483221 -2.527837

C -3.059197 -1.153089 -0.514495

H -3.371708 -0.797696 -1.502215

H -3.701889 -2.000532 -0.249098

H -3.216105 -0.355928 0.219046

C 2.136219 -0.371047 -0.009904

C 3.124992 -0.788289 0.901109

C 2.499628 0.585599 -0.969121

C 4.405698 -0.265489 0.849200

H 2.847743 -1.529965 1.646416

C 3.787920 1.106721 -1.015529
H 1.767492 0.929086 -1.700499
C 4.752532 0.687596 -0.108574
H 5.149422 -0.607352 1.567855
H 4.036002 1.848433 -1.773365
H 5.761215 1.093890 -0.146237

2.1.2.2 Koordinaten der Übergangszustände

S1

—

S2

—

S3

E = -999.337223319
C -0.846302 1.541228 -0.256987
C -0.641943 -0.632434 0.833095
N -1.324599 0.247688 -0.158521
C 0.334701 1.787484 0.253541
S 1.078924 0.008920 0.905196
C -1.217396 -0.345901 2.218805
H -2.273880 -0.637502 2.195390
H -0.703449 -0.925235 2.993306
H -1.146575 0.721773 2.452722
C -0.682515 -2.125835 0.542827
H 0.005581 -2.652452 1.212238
H -1.697723 -2.486364 0.712515
H -0.422804 -2.357130 -0.492623
C 2.045227 -0.569998 -0.596564
C 1.138738 2.966612 0.645068
H 2.182668 2.931807 0.309620
H 0.665698 3.844783 0.192301
H 1.149871 3.119888 1.733287
C 2.580961 -1.965828 -0.304770
H 1.787300 -2.714293 -0.247496

H 3.259698 -2.261575 -1.115861
H 3.145956 -1.985867 0.634315
C 3.203188 0.421438 -0.670174
H 3.922608 0.066782 -1.419012
H 2.852101 1.410167 -0.979710
H 3.730871 0.510272 0.287740
C 1.238723 -0.507929 -1.881722
H 1.914036 -0.719081 -2.721673
H 0.429374 -1.241530 -1.910745
H 0.809374 0.489583 -2.022646
C -2.598854 -0.082630 -0.593450
C -3.237968 0.898916 -1.536348
H -3.449479 1.834746 -1.008879
H -2.563931 1.158303 -2.357937
H -4.163264 0.453878 -1.909987
O -3.165498 -1.093529 -0.228786

S4

E = -1151.80516743
C -0.248272 -1.735171 -1.022878
C 1.566892 -1.642615 0.543519
N 1.065928 -1.959171 -0.799525
C 1.871054 -2.812195 -1.638921
H 1.280937 -3.051575 -2.525151
H 2.798183 -2.317171 -1.958943
H 2.144458 -3.758557 -1.142655
S 0.512925 -0.242677 1.124670
C -0.886560 -0.924511 -0.196469
C 1.163391 1.185247 0.286519
C 1.035855 1.341453 -1.092876
C 1.812198 2.147175 1.060074
C 1.582128 2.468574 -1.695673
H 0.501725 0.589659 -1.669761
C 2.342466 3.275812 0.446728
H 1.898670 2.006691 2.135859
C 2.231302 3.433602 -0.931159
H 1.489800 2.597647 -2.772185

H 2.843458 4.032646 1.046849
H 2.648090 4.316732 -1.411474
C 1.251971 -2.776874 1.517022
H 0.177243 -2.989642 1.512673
H 1.785237 -3.679718 1.194103
H 1.570048 -2.534359 2.536845
C 3.036702 -1.267548 0.556243
H 3.351863 -0.945494 1.553865
H 3.637151 -2.143909 0.286047
H 3.248119 -0.467117 -0.160371
C -2.193785 -0.341987 -0.038004
C -3.199205 -0.695943 -0.960226
C -2.527463 0.576857 0.967506
C -4.466612 -0.146370 -0.874975
H -2.948404 -1.409595 -1.741286
C -3.802419 1.125294 1.044259
H -1.782345 0.863657 1.707901
C -4.783056 0.770818 0.126771
H -5.222517 -0.438393 -1.602651
H -4.028239 1.836933 1.836959
H -5.781290 1.198870 0.190563

2.1.2.3 Koordinaten der Alkine

S1

E = -767.696503238
C -1.175174 -0.755521 0.171402
C 1.129669 -0.151669 -0.130224
N 0.110064 -1.126486 0.290890
C -2.343262 -0.444464 0.064270
S 0.857634 1.441604 0.765668
C 2.507195 -0.611688 0.331036
H 2.801554 -1.544012 -0.164980
H 3.245925 0.155896 0.084703
H 2.518506 -0.771537 1.415778
C 1.098976 0.045424 -1.639503
H 1.807919 0.819254 -1.954041

H 1.371263 -0.894172 -2.138989
H 0.093859 0.324431 -1.974284
C -0.208928 2.403791 -0.324974
H -0.440825 3.315256 0.236315
H 0.294573 2.687692 -1.255100
H -1.142448 1.876132 -0.543740
C -3.738972 -0.043979 -0.003547
H -4.258790 -0.484939 -0.864690
H -4.292087 -0.326614 0.902232
H -3.819425 1.046888 -0.101524
C 0.392000 -2.542811 0.149074
H -0.495815 -3.100628 0.457195
H 0.632765 -2.832897 -0.888146
H 1.221417 -2.845510 0.797163

S2

E = -885.834698652
C -1.884274 -0.306694 0.295263
C -0.210209 1.263468 -0.435037
N -1.144962 0.776524 0.591949
C -2.547308 -1.295512 0.065163
S 0.794918 -0.129264 -1.101356
C -0.974781 1.750595 -1.667381
H -1.647494 2.570038 -1.381495
H -0.289508 2.116299 -2.439394
H -1.577753 0.935679 -2.083766
C 0.654536 2.384359 0.120691
H 1.436238 2.627572 -0.604441
H 0.058279 3.288521 0.298066
H 1.130157 2.099257 1.064357
C 1.917959 -0.784002 0.219844
C -3.313444 -2.494399 -0.229522
H -3.452690 -3.119850 0.662299
H -4.308380 -2.268020 -0.636173
H -2.787536 -3.106552 -0.973896
C -1.731257 1.728436 1.515617
H -2.398632 1.185173 2.189301

H -0.959091 2.212120 2.123873
H -2.321459 2.513438 1.012371
C 3.195341 0.043853 0.310842
H 3.004292 1.056580 0.677900
H 3.901497 -0.434141 1.004887
H 3.677829 0.124070 -0.669697
C 2.254534 -2.178625 -0.307632
H 2.984390 -2.658607 0.357919
H 1.357263 -2.805309 -0.355159
H 2.693900 -2.128994 -1.311902
C 1.235921 -0.903687 1.574359
H 1.906761 -1.433440 2.265540
H 1.008604 0.074675 2.009191
H 0.297271 -1.462714 1.495029

S3

E = -999.370156034
C -1.129093 1.149915 0.164140
C -0.248658 -1.091223 0.666694
N -1.217214 -0.184463 -0.039148
C -1.094853 2.347193 0.334950
S 1.296473 -0.182697 1.054663
C -0.826737 -1.428113 2.038653
H -1.792563 -1.926545 1.897692
H -0.154200 -2.097761 2.584374
H -0.972822 -0.516360 2.629645
C 0.030205 -2.360905 -0.128040
H 0.886023 -2.868485 0.327021
H -0.837367 -3.022219 -0.115359
H 0.269040 -2.140655 -1.172701
C 2.302162 0.063468 -0.488102
C -0.997926 3.779050 0.553842
H -1.090454 4.340613 -0.384692
H -1.770266 4.145186 1.242238
H -0.021749 4.027840 0.990242
C 3.125526 -1.178469 -0.812395
H 2.501919 -2.012925 -1.143722

H 3.833421 -0.950512 -1.621881
H 3.698058 -1.505691 0.062638
C 3.240025 1.196870 -0.072786
H 3.947013 1.406157 -0.886365
H 2.677440 2.111285 0.146554
H 3.820738 0.927272 0.818269
C 1.469427 0.503970 -1.682627
H 2.137801 0.697456 -2.533122
H 0.750860 -0.261306 -1.992192
H 0.914241 1.420609 -1.461145
C -2.401897 -0.691305 -0.583622
C -3.284085 0.314466 -1.272933
H -2.714071 0.952732 -1.955835
H -4.057743 -0.236452 -1.811617
H -3.753459 0.973441 -0.533051
O -2.699938 -1.859850 -0.499276

S4

E = -1151.84398988
C 1.428856 1.062911 0.230117
C 2.516663 0.529428 0.119504
C -0.932003 0.916970 0.696340
N 0.254141 1.685919 0.366446
C 0.086736 2.968181 -0.299900
H 1.062254 3.304823 -0.656206
H -0.592433 2.872942 -1.159530
H -0.312088 3.722071 0.388902
S -1.490636 0.174511 -0.960621
C -0.604104 -0.202936 1.662712
H 0.163795 -0.864146 1.252454
H -0.241724 0.215236 2.610939
H -1.506736 -0.789832 1.860844
C -2.017365 1.814494 1.261313
H -2.365798 2.553456 0.533204
H -2.878381 1.209819 1.560808
H -1.635116 2.337004 2.147978
C 3.784987 -0.098672 -0.007274

C 3.971654 -1.433187 0.390959
C 4.883400 0.601013 -0.534422
C 5.212708 -2.040014 0.265167
H 3.129241 -1.987049 0.799069
C 6.120208 -0.015012 -0.656258
H 4.752244 1.634383 -0.847032
C 6.293989 -1.337211 -0.258087
H 5.336757 -3.075008 0.579118
H 6.958854 0.544233 -1.067443
H 7.265663 -1.817080 -0.355418
C -3.100926 -0.464659 -0.581503
C -4.240452 0.314360 -0.800576
C -3.246194 -1.767669 -0.097331
C -5.502450 -0.194691 -0.517970
H -4.123094 1.321448 -1.195564
C -4.509890 -2.273232 0.186398
H -2.357633 -2.378909 0.047004
C -5.639047 -1.487284 -0.020524
H -6.384182 0.419746 -0.690520
H -4.613119 -3.288504 0.564873
H -6.627937 -1.884985 0.199332

2.2 P-Ylide

2.2.1 Energien der Strukturen

Table 2.4. Energien der AYCs.

AYC	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]
P1	-750.80286566	0.268322	0.213090	–	–
P2	-1327.01903223	0.441352	0.364128	–	–
P3	-868.93742745	0.358002	0.298486	–	–
P4	-1095.55565020	0.355187	0.288193	–	–
P5	-1134.93319498	0.384999	0.315411	–	–
P6	-1327.01706595	0.441957	0.364307	–	–
P7	-1134.93566855	0.384501	0.313635	–	–
P8	-1174.31535567	0.414814	0.342984	–	–
P9	-1213.69164737	0.444256	0.370867	–	–
P10	-1094.36881913	0.330309	0.264218	–	–
P11	-1478.50399891	0.445623	0.364471	–	–
P12	-1606.30487545	0.716704	0.612737	–	–
P13	-1832.92599378	0.711844	0.603587	–	–
P14	-1760.21680022	0.767968	0.660656	–	–
P15	-1986.84069956	0.762197	0.647974	–	–
P16	-1076.96840204	0.289743	0.226736	–	–
P17	-1116.34033961	0.319681	0.255322	–	–

Table 2.5. Energien der Übergangszustände.

AYC	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]
P1	-750.78152406	0.267038	0.211962	0.020214	53.070809
P2	-1326.99224090	0.439689	0.361044	0.023707	62.243595
P3	-868.91299051	0.356121	0.295477	0.021428	56.259046
P4	-1095.53022894	0.353301	0.285331	0.022559	59.229337
P5	-1134.91114430	0.383351	0.313471	0.020111	52.800590
P6	-1326.99425848	0.440408	0.360858	0.019358	50.825663
P7	-1134.91469513	0.383179	0.311490	0.018828	49.434017
P8	-1174.29191338	0.413584	0.340897	0.021355	56.068314
P9	-1213.66668132	0.442728	0.367346	0.021445	56.303979
P10	-1094.34388510	0.328739	0.261689	0.022405	58.824406
P11	-1478.47973414	0.443900	0.359741	0.019535	51.288539
P12	-1606.27897343	0.714936	0.609654	0.022819	59.911337
P13	-1832.90554182	0.710024	0.599448	0.016313	42.829676
P14	-1760.19555688	0.766008	0.657372	0.017959	47.152247
P15	-1986.81771665	0.760702	0.645065	0.020074	52.704051
P16	-1076.96338802	0.288630	0.227168	0.005446	14.298526
P17	-1116.33995490	0.318647	0.255880	0.000943	2.475085

Table 2.6. Energien der Alkine.

AYC	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]
P1	-750.81174511	0.269196	0.210635	-0.011334	-29.758601
P2	-1327.01611036	0.441988	0.359341	-0.001865	-4.896899
P3	-868.94028294	0.358676	0.295536	-0.005805	-15.242317
P4	-1095.56613660	0.354988	0.284313	-0.014366	-37.718983
P5	-1134.94086539	0.385142	0.312742	-0.010339	-27.146121
P6	-1327.02669472	0.442530	0.359417	-0.014519	-38.119031
P7	-1134.95060095	0.385537	0.308399	-0.020168	-52.952134
P8	-1174.32267552	0.415062	0.337239	-0.013065	-34.301764
P9	-1213.69761952	0.444664	0.365539	-0.011300	-29.668544
P10	-1094.36279438	0.330770	0.259896	0.001703	4.470570
P11	-1478.49878034	0.445924	0.359051	-0.000201	-0.528854
P12	-1606.29796226	0.717137	0.607856	0.002032	5.335515
P13	-1832.93018759	0.712515	0.600548	-0.007233	-18.989743
P14	-1760.21277957	0.767503	0.650514	-0.006121	-16.071604
P15	-1986.84820089	0.762398	0.643561	-0.011914	-31.281073
P16	-1077.01113702	0.291580	0.224447	-0.045024	-118.210459
P17	-1116.38937069	0.321647	0.254108	-0.050245	-131.918458

2.2.2 Koordinaten der Strukturen

2.2.2.1 Koordinaten der AYCs

P1

E = -750.802865662

C -0.995091 1.291552 0.094012

C 0.280411 1.843281 -0.047926

N 1.276223 0.918418 -0.123625

C 2.657768 1.302438 -0.233536

H 2.678216 2.393308 -0.283274

H 3.260211 0.982137 0.632742

H 3.137252 0.900592 -1.140192

C 0.964694 -0.502353 0.118081

C 1.327591 -0.882733 1.554684

H 1.058193 -1.920389 1.787970

H 2.410346 -0.781874 1.696636

H 0.827408 -0.213835 2.264437

C 1.628530 -1.439481 -0.880325
 H 1.432457 -1.129301 -1.912305
 H 2.715116 -1.440625 -0.729680
 H 1.280036 -2.472672 -0.752290
 C -2.276247 2.067102 0.152995
 H -2.939587 1.894902 -0.710289
 H -2.869326 1.867620 1.058889
 H -2.017574 3.131816 0.157001
 P -0.878267 -0.423951 -0.059630
 C -1.383811 -1.154363 -1.657572
 H -1.117642 -2.215652 -1.731729
 H -2.469722 -1.048797 -1.764087
 H -0.901350 -0.593004 -2.463838
 C -1.660803 -1.546192 1.145420
 H -2.747871 -1.491451 1.016448
 H -1.340450 -2.585299 0.998133
 H -1.413530 -1.222648 2.160251

P2

E = -1327.01903223
 C 1.098642 0.228240 1.035359
 C 1.004584 1.096411 2.132060
 N -0.254040 1.505880 2.392320
 C -0.552961 2.412633 3.471825
 H 0.394864 2.651866 3.958043
 H -1.014116 3.345820 3.115170
 H -1.229368 1.966495 4.217824
 C -1.387832 0.883319 1.676413
 C -2.457852 1.877095 1.254269
 H -3.214394 1.391948 0.625023
 H -2.971840 2.271579 2.139441
 H -2.035902 2.718447 0.695927
 C -1.980142 -0.233637 2.536512
 H -1.217266 -0.983037 2.775022
 H -2.350926 0.195990 3.475199
 H -2.817644 -0.733297 2.037634
 P -0.454213 0.124358 0.251362

C -0.581562 1.151644 -1.242998
 C -1.096469 0.729097 -2.469486
 C -0.021364 2.430319 -1.131857
 C -1.074955 1.587103 -3.564663
 H -1.495724 -0.275507 -2.583575
 C -0.014405 3.285810 -2.224217
 H 0.427564 2.735131 -0.185441
 C -0.543615 2.865544 -3.441906
 H -1.469283 1.249182 -4.520984
 H 0.420034 4.278910 -2.130103
 H -0.527637 3.532839 -4.301464
 C -1.211352 -1.479168 -0.114813
 C -0.490429 -2.632653 0.199436
 C -2.515067 -1.587028 -0.611085
 C -1.064215 -3.884087 0.000377
 H 0.517885 -2.540178 0.600548
 C -3.084759 -2.839232 -0.802457
 H -3.089170 -0.690584 -0.844316
 C -2.357105 -3.987554 -0.500248
 H -0.497266 -4.781059 0.240458
 H -4.100000 -2.920505 -1.185686
 H -2.804102 -4.967986 -0.653301
 C 2.333700 -0.282483 0.449081
 C 3.553675 -0.131782 1.130677
 C 2.365647 -0.925739 -0.798803
 C 4.737073 -0.607406 0.589470
 H 3.533484 0.375770 2.092405
 C 3.555092 -1.403055 -1.337981
 H 1.443660 -1.050678 -1.369492
 C 4.751562 -1.250371 -0.648206
 H 5.666946 -0.476575 1.141858
 H 3.542805 -1.894984 -2.309689
 H 5.683517 -1.624258 -1.067732

P3

E = -868.937427445
 C -0.358880 1.951175 -0.193760

P 1.333233 -0.165044 0.085480
 C -0.222410 -1.031269 -0.396865
 C -1.403041 -0.278130 0.311950
 N -1.427674 1.115639 -0.190918
 C -2.726303 1.736927 -0.351784
 H -2.532787 2.776036 -0.622560
 H -3.329547 1.263781 -1.139245
 H -3.317609 1.724961 0.579721
 C -2.709551 -1.019186 0.021619
 H -2.663872 -2.033870 0.431994
 H -3.550705 -0.518100 0.508085
 H -2.934608 -1.087823 -1.047004
 C -1.249001 -0.204844 1.838294
 H -1.096935 -1.187508 2.302229
 H -0.427704 0.464999 2.112284
 H -2.167675 0.219119 2.260688
 C -0.134692 -2.509767 -0.026410
 H -0.954050 -3.071848 -0.488629
 H 0.800393 -2.949107 -0.398504
 H -0.174513 -2.679055 1.055258
 C -0.340367 -0.890764 -1.919097
 H 0.434526 -1.476551 -2.426510
 H -1.306406 -1.276800 -2.261170
 H -0.259474 0.156934 -2.227112
 C 2.018364 -0.927871 1.607491
 H 2.304344 -1.973093 1.440377
 H 2.911293 -0.356775 1.887031
 H 1.299948 -0.872313 2.428197
 C 2.621620 -0.627079 -1.121556
 H 2.397153 -0.164405 -2.086619
 H 3.583448 -0.242554 -0.764424
 H 2.698002 -1.715359 -1.235877
 C 0.943133 1.518432 0.046710
 C 2.087417 2.501575 0.091595
 H 2.874350 2.303797 -0.655606
 H 1.665888 3.490446 -0.121370
 H 2.584041 2.556084 1.073873

P4

E = -1095.55565020

C -2.112790 -1.455365 -1.537250

P 0.017698 -0.234805 -0.304661

C -1.000248 -0.735834 1.107487

C -2.470183 -0.521796 0.751775

N -2.839208 -1.350953 -0.403556

C -4.203570 -1.835038 -0.455620

H -4.304910 -2.357192 -1.408516

H -4.440410 -2.527703 0.363929

H -4.936831 -1.012082 -0.426297

C -3.318544 -0.770862 1.989602

H -2.981378 -0.118131 2.803597

H -4.377753 -0.561616 1.814474

H -3.223831 -1.810184 2.327778

C -0.836440 -0.897184 -1.648832

H -0.277388 -0.987869 -2.580889

H -0.721678 -0.156906 1.994923

H -2.591746 0.540854 0.463178

C 0.172375 1.578560 -0.160829

C 0.681424 2.193299 0.987611

C -0.295835 2.361888 -1.214590

C 0.730639 3.578682 1.072298

H 1.046468 1.587243 1.817383

C -0.240381 3.749690 -1.129355

H -0.715583 1.866001 -2.089850

C 0.271948 4.356794 0.011551

H 1.126401 4.054967 1.967369

H -0.604876 4.358174 -1.954680

H 0.310742 5.442406 0.079597

C 1.686522 -0.907535 -0.064808

C 1.800291 -2.303069 -0.046627

C 2.840380 -0.125134 0.014280

C 3.044321 -2.902234 0.088191

H 0.905113 -2.914045 -0.163034

C 4.086646 -0.731275 0.138400

H 2.771528 0.959164 -0.029031
 C 4.190525 -2.116479 0.183645
 H 3.122561 -3.987478 0.106797
 H 4.981388 -0.114472 0.196802
 H 5.166906 -2.586974 0.282221
 H -0.808210 -1.798051 1.307493

P5

E = -1134.93319498
 C -2.084293 -1.280900 -1.687588
 P 0.057635 -0.176134 -0.362361
 C -0.935198 -0.836675 1.023040
 C -2.391933 -0.492738 0.655020
 N -2.798212 -1.245489 -0.539531
 C -4.162907 -1.726347 -0.598991
 H -4.269909 -2.218413 -1.567147
 H -4.392963 -2.444817 0.199858
 H -4.898581 -0.907377 -0.540460
 C -3.300895 -0.678799 1.860300
 H -2.928898 -0.071676 2.694375
 H -4.324553 -0.356987 1.648034
 H -3.337040 -1.722856 2.190241
 C -0.707505 -2.330956 1.206448
 H 0.322684 -2.553551 1.500945
 H -1.369324 -2.724054 1.986689
 H -0.924409 -2.859792 0.272045
 C -0.795704 -0.741184 -1.750482
 H -0.264328 -0.725760 -2.703382
 H -0.667030 -0.277469 1.929575
 H -2.416373 0.582806 0.395638
 C 0.148090 1.640533 -0.144011
 C 1.061168 2.280428 0.698641
 C -0.766777 2.405180 -0.871931
 C 1.044350 3.664414 0.822472
 H 1.798505 1.703641 1.252532
 C -0.782161 3.789658 -0.743864
 H -1.453677 1.894168 -1.547432

C 0.121483 4.419948 0.104498
H 1.759425 4.156809 1.478902
H -1.497519 4.377755 -1.315538
H 0.113780 5.504033 0.201442
C 1.767533 -0.758785 -0.171934
C 2.382901 -0.844510 1.080817
C 2.475979 -1.142850 -1.311220
C 3.693057 -1.294861 1.188946
H 1.831909 -0.572414 1.980995
C 3.788998 -1.586080 -1.201168
H 1.990396 -1.109026 -2.284392
C 4.398449 -1.661033 0.046676
H 4.163279 -1.364578 2.167889
H 4.335450 -1.882464 -2.094209
H 5.424320 -2.014210 0.131507

P6

E = -1327.01706595
C -0.466263 2.559743 -0.092139
P -0.461546 -0.158834 -0.366120
C -1.796861 0.347134 -1.477373
C -2.585136 1.485541 -0.842755
N -1.696518 2.636196 -0.623268
C -2.295094 3.954273 -0.712052
H -1.511383 4.666355 -0.449663
H -2.668382 4.181285 -1.719730
H -3.130872 4.073725 -0.003948
C -3.799097 1.794858 -1.705192
H -4.403775 0.888231 -1.824882
H -4.439263 2.561940 -1.260168
H -3.496322 2.133730 -2.703592
C 0.190536 1.357588 0.193807
H -2.441566 -0.512965 -1.688608
H -2.945447 1.139196 0.144962
C -1.229382 -1.267969 0.856744
C -2.019671 -2.358371 0.480540
C -1.066801 -0.962464 2.209058

C -2.629935 -3.143311 1.450916
 H -2.157923 -2.599603 -0.573573
 C -1.674989 -1.754466 3.177052
 H -0.465671 -0.097750 2.489113
 C -2.454388 -2.842512 2.799162
 H -3.245541 -3.990905 1.155929
 H -1.542862 -1.516303 4.230439
 H -2.932980 -3.458346 3.558273
 C 0.701487 -1.146039 -1.351174
 C 1.484747 -0.437651 -2.268204
 C 0.888898 -2.520234 -1.197532
 C 2.421983 -1.105264 -3.043994
 H 1.370941 0.643773 -2.346336
 C 1.833668 -3.182475 -1.974127
 H 0.311262 -3.075390 -0.462248
 C 2.595701 -2.479042 -2.900065
 H 3.030760 -0.548581 -3.753497
 H 1.978331 -4.253753 -1.848908
 H 3.336836 -3.000032 -3.503066
 H -1.340096 0.677634 -2.419385
 C 1.516247 1.348920 0.844173
 C 2.211111 2.553558 1.045368
 C 2.137306 0.171426 1.289928
 C 3.458450 2.571238 1.647591
 H 1.725263 3.466749 0.710191
 C 3.391414 0.190718 1.892397
 H 1.637506 -0.791285 1.178227
 C 4.065205 1.390568 2.076010
 H 3.970282 3.523236 1.785415
 H 3.839106 -0.745555 2.222994
 H 5.045793 1.409157 2.547891

P7

E = -1134.93566855
 C 2.088121 -1.444285 1.307418
 P -0.009169 -0.164475 0.129995
 C 1.013891 -0.587191 -1.302541

C 2.482580 -0.415437 -0.927653
 N 2.823212 -1.314848 0.179003
 C 4.180125 -1.818519 0.226024
 H 4.258789 -2.400297 1.145985
 H 4.423850 -2.461938 -0.630799
 H 4.925188 -1.005917 0.262191
 C 3.338250 -0.608892 -2.170203
 H 3.019028 0.092619 -2.950068
 H 4.398841 -0.426022 -1.974805
 H 3.230976 -1.626677 -2.565454
 C 0.825171 -0.878233 1.469769
 H 0.742858 0.052167 -2.150067
 H 2.617164 0.627812 -0.577834
 C -0.198025 1.649118 0.077970
 C -0.779773 2.306243 -1.010613
 C 0.331614 2.392091 1.132658
 C -0.840508 3.693672 -1.035053
 H -1.190285 1.730114 -1.840430
 C 0.264222 3.781622 1.107965
 H 0.807097 1.866413 1.960580
 C -0.320989 4.430889 0.026616
 H -1.292153 4.203420 -1.884041
 H 0.675698 4.358603 1.933759
 H -0.369427 5.518044 0.006331
 C -1.661807 -0.864285 -0.148744
 C -1.727065 -2.257234 -0.275189
 C -2.844263 -0.122308 -0.134228
 C -2.952044 -2.890827 -0.425125
 H -0.808323 -2.842744 -0.229997
 C -4.071192 -0.763284 -0.276967
 H -2.812330 0.956709 -0.002679
 C -4.127434 -2.143539 -0.430270
 H -2.992246 -3.973512 -0.526927
 H -4.988485 -0.177735 -0.263917
 H -5.088976 -2.640787 -0.542144
 H 0.811214 -1.631662 -1.572862
 C 0.062070 -1.017738 2.764054

H -0.903493 -1.535638 2.645491
H 0.685003 -1.608427 3.444763
H -0.152606 -0.054667 3.254643

P8

E = -1174.31535567
C 1.975584 -1.433078 1.440949
P -0.060084 -0.108772 0.185839
C 1.005475 -0.565481 -1.230987
C 2.431902 -0.299363 -0.711778
N 2.755104 -1.253848 0.351161
C 4.082904 -1.829082 0.381664
H 4.111438 -2.483619 1.254619
H 4.309290 -2.418021 -0.518064
H 4.869616 -1.065492 0.493651
C 3.425934 -0.267084 -1.861561
H 3.116513 0.492160 -2.589736
H 4.431146 -0.005487 -1.518253
H 3.486921 -1.229705 -2.380934
C 0.711637 -0.849941 1.552802
H 0.791496 0.145428 -2.038996
H 2.422235 0.710310 -0.256165
C -0.169065 1.714458 0.108082
C -0.541853 2.395625 -1.054826
C 0.207901 2.439347 1.238916
C -0.552558 3.784938 -1.078192
H -0.827203 1.840207 -1.948531
C 0.189718 3.829953 1.215467
H 0.532103 1.899895 2.128094
C -0.190710 4.502202 0.059056
H -0.841289 4.310736 -1.986402
H 0.482069 4.390110 2.101424
H -0.198702 5.590386 0.039475
C -1.747814 -0.732594 -0.075314
C -1.941287 -2.105315 0.125394
C -2.843386 0.070568 -0.399741
C -3.200585 -2.666825 -0.033101

H -1.092924 -2.719765 0.426001
 C -4.104812 -0.495845 -0.550677
 H -2.720680 1.143467 -0.522660
 C -4.284642 -1.863144 -0.375311
 H -3.339230 -3.734690 0.123690
 H -4.952573 0.138590 -0.802073
 H -5.273501 -2.302327 -0.492630
 C -0.091119 -0.988328 2.824034
 H -1.083478 -1.441781 2.672545
 H 0.483021 -1.636233 3.495598
 H -0.259547 -0.033139 3.346522
 C 0.791928 -1.992685 -1.705768
 H 0.984482 -2.697210 -0.888453
 H -0.227562 -2.147599 -2.073717
 H 1.480962 -2.227655 -2.525376

P9

E = -1213.69164737
 C 1.823684 -1.423983 1.623836
 P -0.117496 -0.094954 0.224086
 C 0.935964 -0.743314 -1.158729
 C 2.373938 -0.507961 -0.618415
 N 2.628194 -1.375509 0.536752
 C 3.925039 -2.008511 0.656509
 H 3.891518 -2.592919 1.577462
 H 4.149380 -2.676961 -0.186331
 H 4.747467 -1.279340 0.739843
 C 3.418392 -0.629191 -1.718431
 H 3.243560 0.123271 -2.493498
 H 4.423289 -0.455364 -1.324927
 H 3.407827 -1.617536 -2.192638
 C 0.582857 -0.791051 1.652705
 H 2.404095 0.540834 -0.259154
 C -0.093176 1.737414 0.143870
 C -0.629131 2.520766 -0.886178
 C 0.566088 2.370852 1.201249
 C -0.516136 3.905122 -0.848076

H -1.127544 2.055173 -1.732559
 C 0.674393 3.756836 1.238819
 H 1.002387 1.754732 1.987380
 C 0.132324 4.525562 0.215870
 H -0.933433 4.502693 -1.656393
 H 1.187634 4.235499 2.070437
 H 0.218027 5.610243 0.242704
 C -1.839563 -0.635746 -0.010794
 C -2.103015 -1.980014 0.286210
 C -2.900964 0.193864 -0.381347
 C -3.387963 -2.490279 0.167346
 H -1.288435 -2.611766 0.637260
 C -4.188799 -0.320430 -0.493877
 H -2.737653 1.251718 -0.560932
 C -4.433972 -1.662596 -0.230487
 H -3.576007 -3.536308 0.400898
 H -5.005869 0.338014 -0.782357
 H -5.443023 -2.060808 -0.317996
 C 0.664588 -2.231222 -1.363327
 H 0.780763 -2.790094 -0.429816
 H -0.341235 -2.398630 -1.764136
 H 1.381119 -2.630879 -2.092395
 C 0.666591 0.013092 -2.452713
 H 1.024002 1.048030 -2.411978
 H 1.170336 -0.486048 -3.288989
 H -0.407336 0.023375 -2.681854
 C -0.246869 -0.764644 2.913353
 H -1.244313 -1.217046 2.796581
 H 0.301714 -1.335405 3.670711
 H -0.408807 0.250998 3.309773

P10

E = -1094.36881913
 C 1.433343 1.714747 -0.590941
 C 0.375144 -0.416188 -0.044798
 C -0.902717 0.085551 -0.012576
 C 0.314364 2.476643 -0.642269

H 2.379033 2.127059 -0.941890
 H 0.371815 3.488195 -1.036912
 C -1.652721 2.620050 1.499375
 H -1.616302 3.710682 1.389594
 H -2.650642 2.323670 1.838909
 H -0.914575 2.308693 2.245367
 C -2.509262 2.392229 -1.237310
 H -3.504507 2.104733 -0.887066
 H -2.458809 3.483492 -1.335473
 H -2.325436 1.930118 -2.212121
 P -1.215079 1.829432 -0.086383
 C -2.062470 -0.833228 0.063035
 C -3.327859 -0.427865 0.506433
 C -1.915116 -2.174899 -0.319859
 C -4.402419 -1.310906 0.553889
 H -3.486692 0.592222 0.852474
 C -2.982417 -3.057195 -0.269433
 H -0.930307 -2.494506 -0.651259
 C -4.237969 -2.632700 0.163090
 H -5.370366 -0.960971 0.909321
 H -2.836775 -4.091714 -0.577223
 H -5.075406 -3.326864 0.197453
 C 2.769917 -0.182787 -0.040424
 C 2.977553 -1.514633 -0.396093
 C 3.825396 0.564310 0.481759
 C 4.236575 -2.078713 -0.252209
 H 2.126976 -2.078954 -0.766473
 C 5.085811 -0.008359 0.618729
 H 3.657361 1.588004 0.810353
 C 5.298816 -1.330485 0.250418
 H 4.391456 -3.117237 -0.539423
 H 5.900023 0.583071 1.033440
 H 6.283229 -1.780051 0.363117
 N 1.477470 0.407921 -0.197335

P11

E = -1478.50399891

C 1.788029 -0.948903 1.532081
 C 1.603078 0.879068 -0.063951
 C 0.239171 0.826522 -0.169237
 C 0.467839 -1.233794 1.642377
 H 2.495188 -1.387319 2.235853
 H 0.117182 -1.900603 2.425267
 P -0.668392 -0.554932 0.493512
 C -0.516985 1.896505 -0.857529
 C -1.798348 1.690917 -1.383139
 C 0.053342 3.167806 -1.013533
 C -2.489819 2.711989 -2.026940
 H -2.266140 0.710626 -1.315528
 C -0.633168 4.184751 -1.658061
 H 1.053536 3.323363 -0.616592
 C -1.912910 3.967023 -2.166700
 H -3.483884 2.517924 -2.426552
 H -0.167880 5.163977 -1.761867
 H -2.451491 4.768980 -2.668085
 C 3.748387 -0.044912 0.511900
 C 4.414660 1.158708 0.286871
 C 4.475454 -1.231921 0.596751
 C 5.797185 1.170148 0.172935
 H 3.817006 2.060604 0.193738
 C 5.862029 -1.209876 0.486756
 H 3.955618 -2.180045 0.718507
 C 6.529780 -0.010113 0.276948
 H 6.310458 2.115158 0.004132
 H 6.418432 -2.143313 0.548491
 H 7.613828 0.005873 0.184802
 N 2.325581 -0.064803 0.638945
 C -2.201714 -0.214917 1.406207
 C -3.473946 -0.416302 0.864806
 C -2.076974 0.351120 2.677912
 C -4.604214 -0.068663 1.593553
 H -3.583050 -0.847494 -0.128599
 C -3.210042 0.695147 3.404067
 H -1.084571 0.524899 3.091866

C -4.474496 0.485407 2.863242
H -5.591856 -0.229553 1.166132
H -3.104860 1.133932 4.394252
H -5.361843 0.758622 3.430948
C -1.108004 -1.759269 -0.798356
C -1.831500 -2.916863 -0.496072
C -0.638046 -1.552046 -2.095462
C -2.089385 -3.852912 -1.488710
H -2.197223 -3.083412 0.516905
C -0.902125 -2.490981 -3.086804
H -0.066965 -0.651205 -2.318762
C -1.626032 -3.639094 -2.784866
H -2.652870 -4.753382 -1.251971
H -0.539115 -2.323729 -4.098805
H -1.830144 -4.373567 -3.561690

P12

E = -1606.30487545
C 1.421281 -0.874598 1.474922
C 0.494501 0.450453 -0.370394
C -0.787848 0.026201 -0.143754
C 0.267168 -1.414849 1.954320
H 2.345660 -0.991716 2.043123
H 0.284916 -1.949869 2.899751
P -1.190264 -1.290256 0.986864
C -1.959717 0.761100 -0.703742
C -2.607381 0.342942 -1.878453
C -2.444820 1.892973 -0.018398
C -3.770423 0.995258 -2.290862
C -3.615947 2.509257 -0.454386
C -4.310148 2.061821 -1.577209
H -4.262167 0.664941 -3.206513
H -3.988060 3.377570 0.090561
C 2.869324 0.326617 0.020165
C 3.296188 1.584371 0.466012
C 3.701755 -0.515779 -0.733599
C 4.595605 1.983165 0.148430

C 4.994944 -0.079675 -1.017814
 C 5.441311 1.159454 -0.578291
 H 4.947776 2.959495 0.477562
 H 5.661857 -0.713082 -1.597690
 H 6.453466 1.486245 -0.809934
 N 1.542690 -0.125073 0.346670
 C 3.163022 -1.812140 -1.300256
 H 2.452390 -2.215236 -0.568748
 C 4.225905 -2.875621 -1.536470
 H 4.906494 -2.598789 -2.351613
 H 4.830453 -3.052815 -0.638655
 H 3.754148 -3.823564 -1.822200
 C 2.379640 -1.514380 -2.580202
 H 1.911579 -2.425421 -2.975225
 H 1.598274 -0.766024 -2.394844
 H 3.049717 -1.112897 -3.351265
 C 2.381883 2.525058 1.221450
 H 1.479370 1.968210 1.497331
 C 1.941165 3.661345 0.300248
 H 1.415804 3.248532 -0.568449
 H 1.268180 4.351167 0.826002
 H 2.805535 4.239809 -0.052343
 C 3.016140 3.049299 2.506082
 H 3.334302 2.229932 3.162130
 H 3.895561 3.673595 2.302238
 H 2.299491 3.668880 3.059518
 C -1.671670 2.495704 1.119024
 H -1.320725 1.749753 1.841192
 H -0.763201 2.971299 0.729534
 H -2.262757 3.252662 1.645832
 C -5.589473 2.717113 -2.006421
 H -6.437314 2.365192 -1.402087
 H -5.542281 3.806217 -1.889601
 H -5.820966 2.496551 -3.054181
 C -2.029810 -0.754486 -2.723837
 H -0.945942 -0.626224 -2.828777
 H -2.190527 -1.748366 -2.288675

H -2.483241 -0.759294 -3.720719
 C -1.497114 -2.921176 0.163660
 H -2.399715 -2.768669 -0.444871
 C -2.682290 -0.921072 2.021179
 H -2.635513 0.173081 2.085603
 C -2.595797 -1.473268 3.438479
 H -3.458021 -1.125404 4.021535
 H -2.603088 -2.568794 3.464203
 H -1.691258 -1.126712 3.950890
 C -3.982276 -1.275570 1.307812
 H -4.832318 -0.881979 1.878706
 H -4.025928 -0.833516 0.305004
 H -4.122299 -2.359397 1.216992
 C -1.741392 -4.046189 1.161263
 H -2.668966 -3.917395 1.727824
 H -1.808612 -5.006087 0.633384
 H -0.910253 -4.125188 1.874894
 C -0.312036 -3.231031 -0.739481
 H -0.033597 -2.369156 -1.355702
 H 0.560592 -3.508816 -0.134991
 H -0.543821 -4.073148 -1.403236

P13

E = -1832.92599378
 C 1.626616 -0.352933 1.702127
 C 1.002133 0.502741 -0.509260
 C -0.332307 0.261172 -0.338204
 C 0.391310 -0.699121 2.150297
 H 2.480187 -0.407331 2.379408
 H 0.268635 -1.058758 3.168456
 P -0.953334 -0.694235 1.029291
 C -1.373094 0.829719 -1.247177
 C -1.728459 0.171586 -2.443480
 C -2.033692 2.022498 -0.901883
 C -2.746044 0.691912 -3.237374
 C -3.053778 2.506673 -1.725009
 C -3.433463 1.855704 -2.891257

H -3.005272 0.174659 -4.161948
 H -3.561527 3.429585 -1.441845
 C 3.301763 0.396404 0.185724
 C 3.751379 1.718638 0.307676
 C 4.157110 -0.653718 -0.181792
 C 5.096735 1.973885 0.039179
 C 5.496133 -0.351649 -0.426547
 C 5.962536 0.951640 -0.319691
 H 5.472057 2.992536 0.116603
 H 6.183796 -1.143878 -0.712323
 H 7.010024 1.171032 -0.518530
 N 1.919590 0.102668 0.454542
 C -2.440684 -0.018544 1.801260
 C -3.633410 0.018215 1.069937
 C -2.366389 0.624424 3.037753
 C -4.737035 0.690258 1.577560
 H -3.686435 -0.454305 0.089589
 C -3.478322 1.283814 3.547693
 H -1.428225 0.628229 3.589899
 C -4.660947 1.322693 2.816091
 H -5.657117 0.729722 0.998314
 H -3.416744 1.781510 4.513406
 H -5.526352 1.852722 3.209259
 C -1.347467 -2.410588 0.571555
 C -2.499467 -3.096323 0.956967
 C -0.357563 -3.076090 -0.158881
 C -2.664245 -4.430832 0.598022
 H -3.267309 -2.593478 1.540855
 C -0.522566 -4.408198 -0.508895
 H 0.534750 -2.529516 -0.464872
 C -1.679801 -5.086450 -0.133184
 H -3.566672 -4.961498 0.895396
 H 0.250373 -4.917920 -1.081028
 H -1.813150 -6.130281 -0.410824
 C 3.610018 -2.050286 -0.399057
 H 2.808664 -2.210220 0.334865
 C 4.635153 -3.156126 -0.191455

H 5.409456 -3.145264 -0.968902
 H 5.133306 -3.070831 0.781783
 H 4.146763 -4.136844 -0.239047
 C 2.980225 -2.130941 -1.790573
 H 2.507881 -3.108532 -1.955749
 H 2.226578 -1.344829 -1.923782
 H 3.745975 -1.989859 -2.563785
 C 2.815455 2.850907 0.677034
 H 1.905366 2.406141 1.095830
 C 2.400880 3.622550 -0.575268
 H 1.911457 2.944897 -1.283345
 H 1.700948 4.428356 -0.318022
 H 3.276311 4.075117 -1.060446
 C 3.403881 3.774672 1.738877
 H 3.720001 3.218893 2.630128
 H 4.274327 4.327711 1.363598
 H 2.658992 4.518432 2.047621
 C -1.688344 2.815107 0.326941
 H -0.845145 2.383161 0.871436
 H -1.421993 3.844256 0.053667
 H -2.546673 2.871202 1.010788
 C -4.521067 2.395198 -3.772433
 H -5.041234 3.234944 -3.299269
 H -4.115986 2.751246 -4.729227
 H -5.265317 1.624225 -4.008742
 C -1.016969 -1.073121 -2.883811
 H 0.060842 -0.985113 -2.712229
 H -1.364306 -1.951974 -2.327218
 H -1.191633 -1.266251 -3.947698

P14

E = -1760.21680022
 C -1.484542 -1.087933 -0.678651
 C -0.240329 0.830426 0.294699
 C 0.998388 0.247299 0.202292
 C -0.356783 -1.908400 -0.929868
 P 1.220590 -1.449980 -0.231712

C 2.240629 1.063230 0.349917
 C 2.932171 1.147748 1.570621
 C 2.737268 1.768085 -0.765586
 C 4.143443 1.839040 1.629938
 C 3.955389 2.438393 -0.669725
 C 4.689908 2.466712 0.514388
 H 4.668593 1.899080 2.583835
 H 4.333015 2.970470 -1.543672
 C -2.604584 0.863533 0.193107
 C -2.988375 1.809718 -0.765368
 C -3.382229 0.611592 1.334398
 C -4.176665 2.511151 -0.557912
 C -4.565084 1.330756 1.498251
 C -4.963293 2.273165 0.558791
 H -4.488365 3.257623 -1.287452
 H -5.183680 1.155471 2.375358
 H -5.889861 2.826204 0.701869
 N -1.389305 0.118357 -0.001478
 C -2.893495 -0.358937 2.387573
 H -2.334972 -1.145085 1.864671
 C -4.008639 -1.037797 3.169959
 H -4.544307 -0.330704 3.816064
 H -4.741834 -1.508827 2.504062
 H -3.592939 -1.815147 3.822590
 C -1.914890 0.359344 3.317910
 H -1.471692 -0.338520 4.040397
 H -1.111192 0.833168 2.739953
 H -2.431963 1.148364 3.879045
 C -2.143023 2.107137 -1.984456
 H -1.289984 1.420125 -1.978018
 C -1.577474 3.522019 -1.890266
 H -0.991619 3.626449 -0.969736
 H -0.928324 3.742104 -2.747556
 H -2.380542 4.270845 -1.877669
 C -2.912946 1.880689 -3.282233
 H -3.289707 0.852467 -3.346051
 H -3.771957 2.558934 -3.368031

H -2.265401 2.058517 -4.150129
C 1.928377 1.881658 -2.025451
H 1.530519 0.919880 -2.369680
H 1.047271 2.506365 -1.836528
H 2.511685 2.334237 -2.834586
C 6.016618 3.163348 0.582988
H 6.810050 2.550619 0.132578
H 5.999151 4.115183 0.038941
H 6.308923 3.368363 1.618556
C 2.357276 0.559932 2.826062
H 1.290253 0.797178 2.905121
H 2.442940 -0.532945 2.858786
H 2.871797 0.951323 3.710040
C 1.493856 -2.577873 1.212322
H 2.434793 -2.217795 1.651166
C 2.684384 -1.642618 -1.366294
H 2.690851 -0.654342 -1.841024
C 2.603750 -2.678120 -2.478807
H 3.495177 -2.584368 -3.112307
H 2.584704 -3.707010 -2.099534
H 1.728127 -2.528168 -3.118138
C 3.975983 -1.754272 -0.559685
H 4.831932 -1.632312 -1.234675
H 4.049419 -0.972674 0.205566
H 4.076167 -2.732465 -0.074437
C 1.647649 -4.046206 0.838569
H 1.907358 -4.630029 1.730988
H 0.706633 -4.452104 0.449435
H 2.432482 -4.218669 0.093965
C 0.355538 -2.371254 2.201083
H 0.178530 -1.308510 2.398372
H -0.573525 -2.801813 1.805401
H 0.578298 -2.868550 3.153181
C -2.732964 -1.528479 -1.173498
C -0.517677 -3.118991 -1.624849
C -1.748464 -3.530419 -2.096095
H -1.847873 -4.472932 -2.628677

C -2.858666 -2.716898 -1.862479
H -3.841266 -3.018440 -2.221016
H -3.610546 -0.913721 -1.001961
H 0.346122 -3.757295 -1.782904

P15

E = -1986.84069956
C -1.684424 0.632969 1.182133
C -0.814974 -0.731668 -0.703151
C 0.508825 -0.426033 -0.520966
C -0.434040 1.134387 1.598591
P 1.025907 0.783518 0.648220
C 1.615082 -1.145477 -1.223797
C 2.122042 -0.682440 -2.455656
C 2.201501 -2.280415 -0.630458
C 3.205791 -1.331320 -3.042442
C 3.288776 -2.898465 -1.251467
C 3.813742 -2.438256 -2.452942
H 3.581450 -0.963434 -3.998137
H 3.735722 -3.772641 -0.776144
C -3.140475 -0.598881 -0.300412
C -3.598828 -1.839483 0.160850
C -3.936351 0.242504 -1.093123
C -4.880881 -2.242313 -0.215706
C -5.214477 -0.195922 -1.435212
C -5.683146 -1.430300 -1.003624
H -5.256524 -3.208557 0.116148
H -5.853247 0.432504 -2.051356
H -6.682284 -1.759563 -1.283244
N -1.816145 -0.166830 0.056582
C 2.374065 0.222602 1.717272
C 3.635827 0.027463 1.140996
C 2.135397 -0.221119 3.020329
C 4.645161 -0.588811 1.867919
H 3.817357 0.330365 0.110218
C 3.153452 -0.827581 3.746455
H 1.147531 -0.107526 3.461690

C 4.406549 -1.014531 3.171941
 H 5.618554 -0.747772 1.408785
 H 2.962095 -1.167079 4.762413
 H 5.198337 -1.500297 3.738909
 C 1.550831 2.370889 -0.068606
 C 2.698973 3.070051 0.303808
 C 0.673578 2.928083 -1.005020
 C 2.975378 4.306255 -0.272638
 H 3.376534 2.656396 1.047160
 C 0.949812 4.163426 -1.571983
 H -0.220619 2.375060 -1.294263
 C 2.105190 4.852003 -1.209409
 H 3.874624 4.846628 0.016559
 H 0.264539 4.589413 -2.302096
 H 2.325066 5.819156 -1.657361
 C -3.378574 1.551312 -1.612680
 H -2.694376 1.938398 -0.845529
 C -4.435186 2.620756 -1.850844
 H -5.097797 2.361082 -2.686169
 H -5.057833 2.780051 -0.962217
 H -3.956889 3.574171 -2.106009
 C -2.556994 1.286575 -2.875192
 H -2.050927 2.199124 -3.218252
 H -1.806670 0.507689 -2.690761
 H -3.207579 0.935317 -3.686393
 C -2.723673 -2.742624 1.003653
 H -1.896737 -2.134406 1.388739
 C -2.111193 -3.839446 0.133555
 H -1.526580 -3.390087 -0.677333
 H -1.452345 -4.484729 0.729127
 H -2.896408 -4.469317 -0.305788
 C -3.462064 -3.318305 2.207414
 H -3.907538 -2.526525 2.822179
 H -4.265720 -4.002517 1.906637
 H -2.770795 -3.890318 2.838632
 C 1.711699 -2.861935 0.665240
 H 0.823262 -2.346482 1.037315

H 1.459370 -3.922157 0.537324
H 2.491418 -2.803567 1.437299
C 4.966295 -3.130282 -3.118657
H 5.491447 -3.794524 -2.423643
H 4.624112 -3.742811 -3.964218
H 5.691476 -2.410783 -3.517724
C 1.518923 0.493661 -3.166283
H 0.450346 0.581330 -2.952605
H 1.996809 1.434066 -2.863074
H 1.651769 0.398365 -4.249778
C -2.810880 0.972645 1.963949
C -0.338427 1.972491 2.720142
C -2.692290 1.782933 3.074535
H -3.585499 2.025565 3.647555
C -1.452696 2.298958 3.465130
H -1.368334 2.949132 4.332347
H -3.785111 0.589971 1.676572
H 0.638510 2.370221 2.995262

P16

E = -1076.96840204
C -1.466787 1.221860 -0.203081
C -0.225392 1.785118 0.036205
C 1.066971 1.289208 0.217817
C 0.019550 -1.167211 -0.788230
H -0.069430 -0.933771 -1.856621
H 0.084022 -2.254101 -0.660948
P 1.518555 -0.344097 -0.163081
P -1.475065 -0.486077 0.012054
C 2.231700 -1.504277 1.082142
H 2.435030 -2.496538 0.656618
H 3.170160 -1.074757 1.451988
H 1.544054 -1.599766 1.928292
C 2.728727 -0.517633 -1.524995
H 3.680112 -0.073925 -1.210774
H 2.899167 -1.566472 -1.795526
H 2.356874 0.040102 -2.390712

C -2.832152 -1.529997 -0.626497
 H -2.682193 -2.591901 -0.393472
 H -3.772263 -1.193235 -0.174896
 H -2.905144 -1.397104 -1.711203
 C -1.305808 -0.992162 1.759115
 H -2.251600 -0.790132 2.273609
 H -1.043543 -2.050783 1.881578
 H -0.528733 -0.353907 2.196498
 C 2.218466 2.198956 0.594153
 H 3.191513 1.868668 0.190267
 H 2.011691 3.201267 0.199536
 H 2.349488 2.301172 1.683276
 C -2.750469 2.001304 -0.351911
 H -2.471959 3.061578 -0.366430
 H -3.296408 1.784257 -1.283985
 H -3.462026 1.860968 0.480007

P17

E = -1116.34033961
 C -0.173864 1.794101 0.024846
 C -0.682933 -1.655630 0.789352
 C 0.570311 -1.003063 1.355586
 H -0.456525 -2.525632 0.155700
 H -1.309353 -2.012549 1.618364
 H 1.140315 -1.727730 1.951362
 H 0.278973 -0.166601 2.004713
 C 1.085494 1.328054 -0.300018
 C -1.403505 1.231048 0.330489
 P 1.719748 -0.275616 0.130671
 P -1.673326 -0.414260 -0.142830
 C 3.278321 -0.101950 1.070323
 H 4.088580 0.204760 0.401186
 H 3.141539 0.670849 1.833420
 H 3.553414 -1.052040 1.543222
 C 2.149362 -1.758105 -0.923029
 H 2.991264 -1.501069 -1.576319
 H 2.421039 -2.630808 -0.309816

H 1.295818 -2.018396 -1.557717
C -1.227226 -0.674599 -1.893255
H -1.163014 -1.737141 -2.155409
H -1.993130 -0.187813 -2.506197
H -0.269645 -0.175661 -2.076430
C -3.387241 -1.016319 -0.035358
H -4.027872 -0.379964 -0.655198
H -3.463820 -2.053401 -0.384002
H -3.732603 -0.952130 1.001742
C 2.092667 2.207035 -1.006458
H 3.139026 1.902172 -0.838461
H 1.948592 2.237959 -2.097734
H 1.965464 3.233716 -0.639992
C -2.574210 2.042953 0.843869
H -2.292783 3.096835 0.734395
H -3.514158 1.888366 0.288649
H -2.800517 1.873264 1.908826

2.2.2.2 Koordinaten der Übergangszustände

P1

E = -750.781524061
C -1.211058 -1.444186 -0.139223
C -0.010579 -1.813522 0.144877
N 1.083436 -1.021205 0.295875
C 2.399560 -1.588564 0.438035
H 2.283400 -2.614398 0.796191
H 2.962348 -1.624656 -0.511020
H 3.004819 -1.034771 1.168292
C 0.938635 0.339981 -0.248135
C 1.221740 0.360174 -1.752476
H 1.086703 1.361020 -2.179849
H 2.260532 0.060704 -1.943069
H 0.558790 -0.340910 -2.273167
C 1.834848 1.320240 0.490800
H 1.694835 1.249514 1.575033
H 2.890519 1.112551 0.273740

H 1.643321 2.353021 0.174786
 C -2.581891 -1.892124 -0.434202
 H -3.327609 -1.447578 0.240314
 H -2.890617 -1.664204 -1.463315
 H -2.619664 -2.980715 -0.307918
 P -0.891294 0.668957 0.003677
 C -1.021900 0.920466 1.813429
 H -0.578075 1.867660 2.142480
 H -2.075887 0.896281 2.111973
 H -0.505718 0.081589 2.293975
 C -1.091881 2.396879 -0.633586
 H -2.102288 2.737084 -0.379322
 H -0.365493 3.097625 -0.197958
 H -0.999407 2.408198 -1.724569

P2

E = -1326.99224090
 C 1.749893 -0.202846 0.905945
 C 1.489290 -1.107153 1.776492
 N 0.311393 -1.592874 2.193972
 C 0.206974 -2.598074 3.222158
 H 1.215389 -2.950689 3.449791
 H -0.235170 -2.203300 4.151020
 H -0.396991 -3.456734 2.898159
 C -0.884354 -0.811088 1.810594
 C -1.137152 0.280529 2.852636
 H -2.028096 0.871245 2.613903
 H -1.294174 -0.183418 3.835134
 H -0.274044 0.953492 2.925092
 C -2.102645 -1.706173 1.659091
 H -1.934931 -2.502917 0.926634
 H -2.360369 -2.166780 2.621363
 H -2.970288 -1.116266 1.345899
 P -0.380321 0.056397 0.204141
 C 2.746797 0.591608 0.250419
 C 4.101534 0.356847 0.556933
 C 2.452290 1.585861 -0.693296

C 5.105271 1.085250 -0.060088
 H 4.340830 -0.412845 1.286931
 C 3.465288 2.310822 -1.307359
 H 1.411966 1.787856 -0.940307
 C 4.798563 2.069073 -0.998101
 H 6.144093 0.881752 0.195473
 H 3.204893 3.076073 -2.036913
 H 5.590117 2.639738 -1.479374
 C -0.543501 -1.158493 -1.140971
 C -1.073431 -0.801002 -2.385930
 C 0.020306 -2.432226 -0.990895
 C -1.069448 -1.704808 -3.442173
 H -1.485360 0.194279 -2.538083
 C 0.011736 -3.335285 -2.046135
 H 0.474922 -2.711226 -0.043090
 C -0.534978 -2.977178 -3.274359
 H -1.484025 -1.408267 -4.403902
 H 0.446868 -4.323491 -1.909410
 H -0.533963 -3.684248 -4.101625
 C -1.785969 1.212802 -0.047893
 C -1.552557 2.557530 0.255305
 C -3.058424 0.830023 -0.488861
 C -2.571118 3.497797 0.140098
 H -0.560215 2.864728 0.584791
 C -4.073556 1.771205 -0.609871
 H -3.250456 -0.208847 -0.751770
 C -3.832803 3.105203 -0.291862
 H -2.375592 4.540630 0.382118
 H -5.058563 1.461958 -0.954941
 H -4.629832 3.840101 -0.388083

P3

E = -868.912990509
 C -0.648460 1.868475 -0.112882
 P 1.465030 -0.095662 0.197591
 C -0.090150 -0.957280 -0.444607
 C -1.345856 -0.412259 0.340969
 N -1.632245 0.952435 -0.140699

C -2.993670 1.403598 -0.314482
 H -2.948064 2.444697 -0.642086
 H -3.535370 0.823855 -1.073904
 H -3.579434 1.369094 0.619940
 C -2.545638 -1.327003 0.094296
 H -2.362703 -2.310516 0.537093
 H -3.441760 -0.923629 0.574940
 H -2.763674 -1.463979 -0.970626
 C -1.105478 -0.362305 1.854436
 H -0.817307 -1.342252 2.255237
 H -0.331077 0.372011 2.103806
 H -2.029018 -0.054982 2.360018
 C 0.059684 -2.470403 -0.304031
 H -0.731469 -2.991376 -0.856241
 H 1.015559 -2.802015 -0.729487
 H 0.024248 -2.807520 0.738690
 C -0.232314 -0.627555 -1.934787
 H 0.506933 -1.181320 -2.524509
 H -1.223631 -0.928028 -2.294490
 H -0.110662 0.442283 -2.131043
 C 2.223421 -1.281188 1.409959
 H 2.455670 -2.263748 0.979643
 H 3.153750 -0.825715 1.768985
 H 1.560331 -1.412413 2.271009
 C 2.652127 -0.284442 -1.186642
 H 2.370545 0.387505 -2.003229
 H 3.646427 0.004757 -0.827019
 H 2.702898 -1.315230 -1.563198
 C 0.622053 1.912426 0.060321
 C 1.717693 2.883888 0.276873
 H 2.606852 2.661003 -0.330961
 H 1.358665 3.881132 -0.004268
 H 2.042091 2.928556 1.326189

P4

E = -1095.53022894
 C -2.822418 0.406216 1.320470

P -0.042330 0.005722 0.541573
 C -1.182368 -0.267369 -0.886783
 C -2.452337 -1.046400 -0.531737
 N -3.345756 -0.184027 0.238318
 C -4.780390 -0.299784 0.114350
 H -5.228233 0.442168 0.779911
 H -5.123180 -0.102028 -0.908945
 H -5.152120 -1.293929 0.414001
 C -3.099261 -1.580104 -1.798359
 H -2.392273 -2.232403 -2.322880
 H -3.998637 -2.167442 -1.585902
 H -3.372642 -0.761684 -2.476190
 C -1.671537 0.598109 1.850544
 H -0.629389 -0.790951 -1.674197
 H -1.473451 0.714707 -1.280834
 H -2.162285 -1.909504 0.100013
 H -1.224653 0.911476 2.780030
 C 1.259472 -1.274772 0.245401
 C 1.918661 -1.425731 -0.980113
 C 1.559076 -2.152393 1.287001
 C 2.857257 -2.434247 -1.155369
 H 1.705579 -0.737970 -1.798942
 C 2.500231 -3.163927 1.112987
 H 1.042700 -2.041097 2.239964
 C 3.148328 -3.305718 -0.107733
 H 3.367011 -2.541349 -2.111383
 H 2.724786 -3.843592 1.932938
 H 3.883234 -4.096525 -0.246732
 C 0.804066 1.561411 0.100434
 C 0.020861 2.704866 -0.105846
 C 2.196358 1.685812 0.072356
 C 0.616498 3.931252 -0.367048
 H -1.064292 2.629515 -0.038913
 C 2.788963 2.918918 -0.180261
 H 2.825347 0.815872 0.247882
 C 2.003622 4.043073 -0.407200
 H -0.007262 4.808012 -0.531607

H 3.874503 2.998117 -0.200708
H 2.470008 5.005697 -0.607914

P5

E = -1134.91114430
C 2.400775 -0.854754 1.594445
P -0.218662 -0.336962 0.717183
C 0.673431 -1.336120 -0.574055
C 2.102181 -0.830833 -0.823904
N 2.934158 -0.986057 0.374778
C 4.365854 -0.846343 0.220752
H 4.816236 -0.881204 1.215154
H 4.796676 -1.654001 -0.385352
H 4.635989 0.114508 -0.248735
C 2.716276 -1.530634 -2.029479
H 2.024290 -1.479028 -2.878130
H 3.651372 -1.052917 -2.339702
H 2.927314 -2.585208 -1.817430
C 0.613346 -2.816922 -0.210681
H -0.402288 -3.123376 0.064303
H 0.932421 -3.444259 -1.051745
H 1.263796 -3.021420 0.645951
C 1.282269 -0.673962 2.193160
H 0.852392 -0.693261 3.181045
H 0.130802 -1.152207 -1.511599
H 2.033492 0.244013 -1.069150
C 0.041799 1.393428 0.164410
C -0.714229 1.938725 -0.880233
C 1.024180 2.182850 0.770962
C -0.490304 3.241255 -1.309116
H -1.487080 1.340768 -1.360008
C 1.244731 3.486262 0.338532
H 1.615040 1.761790 1.582065
C 0.490084 4.019037 -0.700984
H -1.086284 3.650951 -2.122750
H 2.010851 4.089959 0.821871
H 0.663510 5.040116 -1.035899

C -1.995071 -0.568704 0.271784
 C -2.485475 -1.419031 -0.723529
 C -2.916276 0.128285 1.065568
 C -3.856755 -1.558995 -0.923617
 H -1.805637 -1.977070 -1.363121
 C -4.281325 -0.000614 0.856546
 H -2.550152 0.788288 1.852619
 C -4.757955 -0.850344 -0.139269
 H -4.219646 -2.224327 -1.705253
 H -4.978846 0.559512 1.476731
 H -5.828638 -0.960316 -0.299815

P6

E = -1326.99425848
 C 1.957005 1.338634 -0.890219
 P -0.427621 -0.051593 -0.369573
 C -0.733943 1.291298 -1.599943
 C -0.064664 2.628402 -1.304074
 N 1.394540 2.484880 -1.271145
 C 2.178179 3.701486 -1.236001
 H 3.220700 3.429145 -1.059131
 H 2.118516 4.258056 -2.180417
 H 1.849577 4.369797 -0.422850
 C -0.503932 3.657006 -2.336470
 H -1.597940 3.710954 -2.364054
 H -0.132332 4.659796 -2.102027
 H -0.145717 3.378785 -3.335711
 C 1.733554 0.125822 -0.545450
 H -1.816994 1.452614 -1.659538
 H -0.406056 2.975173 -0.310888
 C -0.819149 0.758571 1.225303
 C -2.132670 1.120499 1.546412
 C 0.205400 1.040574 2.131905
 C -2.413269 1.757967 2.748067
 H -2.941604 0.894244 0.852663
 C -0.080216 1.675235 3.336892
 H 1.227976 0.763102 1.884472

C -1.386296 2.036753 3.646055
 H -3.438185 2.036784 2.986170
 H 0.725246 1.885304 4.038043
 H -1.606983 2.533549 4.589077
 C -1.886814 -1.140324 -0.608103
 C -2.533397 -1.268004 -1.841826
 C -2.257387 -1.999499 0.435833
 C -3.538851 -2.213617 -2.018849
 H -2.255203 -0.629200 -2.678002
 C -3.263626 -2.938047 0.257634
 H -1.756043 -1.920400 1.400573
 C -3.909623 -3.048613 -0.971587
 H -4.035739 -2.295649 -2.983980
 H -3.546441 -3.588816 1.083139
 H -4.696859 -3.786572 -1.112032
 H -0.391465 0.924299 -2.577764
 C 2.449083 -1.078328 -0.180603
 C 3.852641 -1.018817 -0.084866
 C 1.831663 -2.303698 0.100937
 C 4.591774 -2.130856 0.283279
 H 4.341169 -0.072189 -0.304722
 C 2.578514 -3.415930 0.470992
 H 0.750145 -2.388250 0.017503
 C 3.962524 -3.341708 0.566979
 H 5.675910 -2.051727 0.350701
 H 2.066501 -4.353645 0.681502
 H 4.545347 -4.214276 0.855107

P7

E = -1134.91469513
 C 2.769396 -0.051014 1.072177
 P 0.007190 0.104094 0.343947
 C 1.038816 0.662546 -1.077859
 C 2.249159 1.502227 -0.664612
 N 3.215498 0.644356 0.010241
 C 4.633440 0.887428 -0.118208
 H 5.150362 0.122917 0.466938

H 4.971818 0.817253 -1.159616
 H 4.933987 1.874403 0.273362
 C 2.825920 2.203236 -1.882707
 H 2.058360 2.839508 -2.337418
 H 3.676962 2.842283 -1.625496
 H 3.154355 1.476931 -2.636764
 C 1.638511 -0.344844 1.615374
 H 0.402702 1.233285 -1.762814
 H 1.899558 2.275336 0.049368
 C -1.524212 1.128422 0.170269
 C -2.201262 1.285937 -1.044324
 C -2.002518 1.788342 1.301992
 C -3.331428 2.089552 -1.121388
 H -1.850317 0.762673 -1.934081
 C -3.136921 2.592272 1.226901
 H -1.475126 1.671579 2.248305
 C -3.800179 2.744757 0.015466
 H -3.852834 2.203568 -2.070286
 H -3.500283 3.102953 2.116757
 H -4.685448 3.375005 -0.046332
 C -0.566998 -1.555124 -0.152870
 C 0.399556 -2.531731 -0.426939
 C -1.916540 -1.919228 -0.165454
 C 0.020815 -3.832185 -0.731454
 H 1.455829 -2.266510 -0.379688
 C -2.290367 -3.225960 -0.462779
 H -2.682913 -1.180405 0.057948
 C -1.326006 -4.184467 -0.751202
 H 0.783722 -4.577969 -0.947376
 H -3.345469 -3.493837 -0.469007
 H -1.621580 -5.205350 -0.985494
 H 1.395432 -0.226738 -1.613736
 C 1.113529 -0.961713 2.856985
 H 1.946889 -1.423380 3.398634
 H 0.645186 -0.225220 3.524246
 H 0.366219 -1.740891 2.645446

P8

E = -1174.29191338
 C 2.730722 -0.165329 1.230989
 P -0.038365 0.063321 0.392710
 C 1.082015 0.596327 -1.006676
 C 2.177056 1.489215 -0.384115
 N 3.181192 0.674684 0.290369
 C 4.536537 0.577112 -0.194863
 H 5.085057 -0.066851 0.497147
 H 4.596693 0.129259 -1.200051
 H 5.037778 1.553451 -0.229096
 C 2.765893 2.455666 -1.395935
 H 1.967353 3.084006 -1.806131
 H 3.504139 3.117650 -0.930908
 H 3.250556 1.939014 -2.232500
 C 1.581623 -0.525491 1.691769
 H 0.472336 1.238440 -1.651788
 H 1.680817 2.090590 0.400921
 C -1.472170 1.224212 0.210231
 C -2.000513 1.642521 -1.016165
 C -2.033824 1.723679 1.387008
 C -3.062960 2.537306 -1.061051
 H -1.594192 1.253432 -1.949483
 C -3.100929 2.615566 1.344849
 H -1.620356 1.410019 2.345235
 C -3.614694 3.026271 0.120284
 H -3.466294 2.851719 -2.022231
 H -3.527169 2.995920 2.271369
 H -4.444878 3.729225 0.083782
 C -0.767621 -1.541912 -0.095165
 C 0.032642 -2.691775 -0.019977
 C -2.108057 -1.686685 -0.469994
 C -0.487970 -3.939614 -0.336291
 H 1.068670 -2.597389 0.300810
 C -2.626901 -2.939796 -0.778213
 H -2.757337 -0.816461 -0.520329
 C -1.819538 -4.069660 -0.718308

H 0.151433 -4.818479 -0.275668
H -3.672412 -3.029983 -1.067793
H -2.227773 -5.048896 -0.961315
C 1.004154 -1.151203 2.904353
H 0.147305 -1.797241 2.665718
H 1.776232 -1.764016 3.384737
H 0.666776 -0.408087 3.639807
C 1.651349 -0.544519 -1.832965
H 2.221937 -1.238964 -1.205804
H 0.861196 -1.113929 -2.332808
H 2.328366 -0.156375 -2.605435

P9

E = -1213.66668132
C 2.266467 -0.897888 1.556274
P -0.260448 -0.310584 0.442482
C 0.761535 -1.186775 -0.897852
C 2.212687 -0.608280 -0.858251
N 2.909265 -0.983179 0.377320
C 4.354400 -0.888850 0.407052
H 4.675378 -1.096350 1.430144
H 4.831850 -1.617872 -0.259543
H 4.717809 0.116767 0.132351
C 3.025743 -1.016043 -2.081606
H 2.542215 -0.675498 -3.000008
H 4.014157 -0.548795 -2.057681
H 3.167392 -2.102004 -2.139739
C 1.108477 -0.741113 2.067877
H 2.119887 0.492573 -0.899101
C -0.023588 1.468075 0.062817
C -0.726546 2.104423 -0.968292
C 0.897539 2.212006 0.807537
C -0.508717 3.447452 -1.249000
H -1.456784 1.543716 -1.549208
C 1.113213 3.556688 0.524010
H 1.450717 1.721249 1.606517
C 0.413295 4.177397 -0.504063

H -1.062165 3.926452 -2.054731
 H 1.831965 4.121814 1.114572
 H 0.582268 5.229880 -0.724273
 C -2.049386 -0.530496 0.078931
 C -2.615005 -1.690270 -0.466953
 C -2.924713 0.437737 0.599831
 C -3.994459 -1.859921 -0.520443
 H -1.980773 -2.477058 -0.863369
 C -4.300292 0.267605 0.544206
 H -2.518788 1.340874 1.053218
 C -4.845555 -0.882659 -0.019904
 H -4.403515 -2.767874 -0.960180
 H -4.952370 1.040780 0.946851
 H -5.924437 -1.016903 -0.063117
 C 0.796925 -2.686226 -0.595275
 H 1.125325 -2.874722 0.431027
 H -0.179276 -3.158365 -0.737852
 H 1.495164 -3.185965 -1.278272
 C 0.151524 -0.908742 -2.271788
 H 0.357206 0.119178 -2.594912
 H 0.568629 -1.588877 -3.024229
 H -0.933713 -1.046245 -2.274118
 C 0.372537 -0.733659 3.350269
 H -0.377736 -1.533970 3.404837
 H 1.087794 -0.881489 4.167999
 H -0.152825 0.216967 3.522086

P10

E = -1094.34388510
 C 1.371178 1.543104 -0.996565
 C 0.296544 -0.389016 -0.197133
 C -0.955607 -0.218429 -0.089669
 C 0.302447 2.361697 -0.896202
 H 2.220173 1.799336 -1.631152
 H 0.308997 3.270167 -1.496507
 C -0.581078 2.114850 1.834498
 H -0.192645 3.110110 2.079966

H -1.413855 1.868382 2.503690
 H 0.207790 1.370119 1.979733
 C -2.064407 3.625350 -0.073590
 H -2.975106 3.578545 0.534059
 H -1.463337 4.484155 0.251440
 H -2.359184 3.763828 -1.119728
 P -1.144211 2.028042 0.090576
 C -2.208297 -0.943151 -0.075642
 C -3.455575 -0.329826 -0.230970
 C -2.175499 -2.336007 0.111680
 C -4.627097 -1.076047 -0.203187
 H -3.495966 0.746083 -0.385178
 C -3.347116 -3.075402 0.145981
 H -1.208805 -2.818823 0.234878
 C -4.582770 -2.451751 -0.011962
 H -5.584353 -0.574030 -0.332977
 H -3.295468 -4.152335 0.297317
 H -5.501202 -3.034790 0.013490
 C 2.706507 -0.320069 -0.176130
 C 2.811778 -1.710443 -0.120253
 C 3.844522 0.466910 0.009392
 C 4.045397 -2.301759 0.108986
 H 1.913706 -2.306778 -0.262750
 C 5.077710 -0.137579 0.223953
 H 3.760771 1.551039 0.013862
 C 5.186978 -1.522068 0.275511
 H 4.116813 -3.387134 0.148796
 H 5.958086 0.485776 0.368848
 H 6.152677 -1.991188 0.450573
 N 1.448624 0.287816 -0.405599

P11

E = -1478.47973414
 C -1.261327 -1.104461 -1.764301
 C -1.434341 0.916365 -0.590640
 C -0.306345 1.442532 -0.359862
 C 0.080453 -1.219926 -1.656452
 H -1.817911 -1.664888 -2.516104

H 0.597783 -1.873108 -2.355750
P 1.065932 -0.353895 -0.450903
C 0.346121 2.707607 -0.103709
C 1.736014 2.870413 -0.091410
C -0.455787 3.829778 0.168567
C 2.304662 4.109257 0.179422
H 2.371825 2.014616 -0.306928
C 0.117096 5.060785 0.444658
H -1.536390 3.707561 0.163527
C 1.502154 5.210741 0.451002
H 3.388471 4.210664 0.177267
H -0.524791 5.914239 0.656463
H 1.949926 6.178927 0.665943
C -3.409084 -0.443840 -0.820446
C -4.262597 0.633945 -0.583843
C -3.923158 -1.740785 -0.851050
C -5.617983 0.412497 -0.390214
H -3.842617 1.636668 -0.559003
C -5.285664 -1.948878 -0.670797
H -3.253946 -2.587297 -0.984834
C -6.140084 -0.877345 -0.439658
H -6.276096 1.259949 -0.207614
H -5.676902 -2.964227 -0.694348
H -7.204586 -1.045499 -0.291794
N -2.024899 -0.219664 -1.015305
C 2.715391 -1.114276 -0.725852
C 3.498352 -1.614842 0.317894
C 3.253009 -1.076308 -2.017496
C 4.781139 -2.090147 0.066694
H 3.099382 -1.644115 1.329970
C 4.530651 -1.561068 -2.266233
H 2.664513 -0.660113 -2.835688
C 5.299704 -2.069571 -1.223487
H 5.377399 -2.485427 0.887278
H 4.931238 -1.534189 -3.278087
H 6.303125 -2.444147 -1.416126
C 0.582089 -1.002295 1.186732

C 0.144921 -2.316674 1.356100
 C 0.669788 -0.158628 2.295857
 C -0.195354 -2.783164 2.620717
 H 0.065130 -2.970899 0.489244
 C 0.338628 -0.629586 3.561227
 H 0.985961 0.875437 2.160650
 C -0.095218 -1.941597 3.724249
 H -0.542456 -3.807296 2.745461
 H 0.409934 0.033426 4.421300
 H -0.363072 -2.307380 4.713827

P12

E = -1606.27897343
 C 1.394145 0.831015 -1.578848
 C 0.481052 -0.647360 0.043025
 C -0.787853 -0.544079 0.055856
 C 0.247557 1.470613 -1.913257
 H 2.279361 0.904347 -2.212967
 H 0.236193 2.012501 -2.858555
 P -1.226239 1.456961 -0.915710
 C -2.024551 -1.207280 0.415760
 C -2.881452 -1.713417 -0.579065
 C -2.371345 -1.334326 1.775998
 C -4.087288 -2.298269 -0.198707
 C -3.582762 -1.934025 2.108247
 C -4.464193 -2.410256 1.137972
 H -4.746178 -2.693545 -0.972420
 H -3.845607 -2.033984 3.161775
 C 2.876248 -0.381097 -0.091787
 C 3.426794 -1.574351 -0.579263
 C 3.580805 0.470251 0.774094
 C 4.718791 -1.908163 -0.169461
 C 4.872445 0.101532 1.146261
 C 5.436311 -1.078825 0.679324
 H 5.170052 -2.832872 -0.524420
 H 5.444247 0.740268 1.815269
 H 6.444843 -1.354392 0.982425

N 1.550882 -0.003876 -0.489991
 C 2.644291 -2.500966 -1.485664
 H 1.781040 -1.942702 -1.865783
 C 3.456939 -2.965434 -2.690223
 H 3.862607 -2.117269 -3.254636
 H 4.298791 -3.604136 -2.394243
 H 2.827172 -3.554933 -3.367659
 C 2.101422 -3.685069 -0.686286
 H 2.923116 -4.278016 -0.262631
 H 1.466889 -3.335031 0.135164
 H 1.502300 -4.344216 -1.327271
 C 2.905744 1.699638 1.344340
 H 2.216230 2.071587 0.577094
 C 2.064220 1.305651 2.559703
 H 1.498415 2.167733 2.937737
 H 1.353265 0.508685 2.309508
 H 2.706454 0.938130 3.370300
 C 3.863427 2.832774 1.683382
 H 4.506591 2.585470 2.537606
 H 4.510378 3.084140 0.834532
 H 3.298292 3.732070 1.957497
 C -1.435839 -0.858527 2.845797
 H -0.483697 -1.402140 2.801187
 H -1.183082 0.201017 2.713395
 H -1.870951 -0.991714 3.841572
 C -5.781620 -3.013955 1.524763
 H -6.527536 -2.234790 1.735906
 H -6.184968 -3.643626 0.724173
 H -5.692904 -3.627006 2.429295
 C -2.491295 -1.644093 -2.023457
 H -2.564784 -0.619632 -2.414267
 H -1.445061 -1.943900 -2.159851
 H -3.131893 -2.285414 -2.638127
 C -0.831689 2.510845 0.568995
 H -0.151648 1.821567 1.088622
 C -2.464825 2.333347 -2.011430
 H -2.289873 1.807288 -2.963631

C -0.075919 3.810401 0.330858
H -0.734049 4.617571 -0.007283
H 0.393820 4.144538 1.267244
H 0.718651 3.684790 -0.414003
C -2.067180 2.697878 1.440964
H -1.784932 3.052408 2.440992
H -2.745540 3.446634 1.011627
H -2.627123 1.761243 1.558276
C -3.889004 2.021388 -1.562264
H -4.132909 2.530319 -0.622360
H -4.612637 2.360486 -2.315080
H -4.039056 0.947199 -1.399976
C -2.248946 3.822866 -2.234277
H -2.901730 4.187906 -3.039505
H -2.498593 4.394553 -1.332369
H -1.213101 4.057354 -2.506679

P13

E = -1832.90554182
C -1.284173 -0.939451 -1.675560
C -0.949906 0.857784 -0.177709
C 0.299205 1.072006 -0.019214
C 0.019071 -1.292959 -1.796424
H -2.035182 -1.335321 -2.361233
H 0.290443 -1.958074 -2.613521
P 1.314159 -0.765715 -0.694982
C 1.215185 2.070013 0.505381
C 1.055207 2.490810 1.846285
C 2.246750 2.613206 -0.280236
C 1.949384 3.417749 2.370752
C 3.115609 3.541668 0.292719
C 2.995091 3.951339 1.616232
H 1.822140 3.736803 3.405700
H 3.908653 3.964892 -0.324425
C -3.173699 -0.026940 -0.445280
C -4.000529 0.915836 -1.074664
C -3.663846 -0.950923 0.487960

C -5.357478 0.903593 -0.753438
 C -5.030399 -0.931339 0.768429
 C -5.870072 -0.013758 0.153875
 H -6.024011 1.625301 -1.221656
 H -5.439648 -1.641588 1.484818
 H -6.933246 -0.009129 0.387426
 N -1.772773 -0.046327 -0.752404
 C 2.796889 -1.473872 -1.508391
 C 3.817908 -2.099114 -0.786487
 C 2.968906 -1.268368 -2.882594
 C 4.972117 -2.528916 -1.431201
 H 3.705149 -2.261151 0.283725
 C 4.120626 -1.705748 -3.524424
 H 2.192187 -0.757801 -3.452340
 C 5.127008 -2.337853 -2.800389
 H 5.754934 -3.022700 -0.858114
 H 4.235279 -1.546776 -4.595243
 H 6.031391 -2.676963 -3.301701
 C 1.200530 -1.752390 0.837197
 C 0.659683 -3.038944 0.853783
 C 1.685834 -1.196731 2.023804
 C 0.603960 -3.759585 2.041341
 H 0.262363 -3.465198 -0.066688
 C 1.633073 -1.920758 3.210213
 H 2.096096 -0.187210 2.016806
 C 1.091292 -3.202218 3.220312
 H 0.176206 -4.760865 2.047771
 H 2.011084 -1.479488 4.130454
 H 1.045156 -3.767184 4.149526
 C -3.441863 1.946531 -2.032473
 H -2.448801 1.602723 -2.344414
 C -4.290716 2.103095 -3.289840
 H -4.446630 1.142108 -3.794455
 H -5.277350 2.528456 -3.066554
 H -3.799199 2.782961 -3.996242
 C -3.254870 3.283607 -1.315417
 H -4.219153 3.671586 -0.960966

H -2.590014 3.169422 -0.452192
 H -2.815915 4.028480 -1.991036
 C -2.747907 -1.945378 1.168948
 H -1.718751 -1.620710 0.985969
 C -2.937321 -1.976293 2.681702
 H -2.174456 -2.618089 3.139519
 H -2.839803 -0.973492 3.113520
 H -3.919897 -2.374194 2.966971
 C -2.910751 -3.335691 0.558307
 H -3.944148 -3.691993 0.663478
 H -2.664796 -3.330986 -0.510722
 H -2.251833 -4.057820 1.055856
 C 2.422155 2.229689 -1.718797
 H 3.082693 1.358984 -1.827122
 H 1.464421 1.965324 -2.181850
 H 2.873537 3.052000 -2.285532
 C 3.952917 4.934450 2.220778
 H 4.578658 4.459142 2.988375
 H 4.621410 5.359386 1.464531
 H 3.423057 5.762230 2.708520
 C -0.070433 1.972299 2.689030
 H -0.117093 0.876424 2.665265
 H 0.033099 2.302813 3.727920
 H -1.037636 2.319030 2.304356

P14

E = -1760.19555688
 C -1.438115 -0.970914 -0.955539
 C -0.239616 0.847311 0.060892
 C 1.018071 0.666659 0.005785
 C -0.298395 -1.788485 -1.183912
 P 1.229199 -1.548555 -0.239079
 C 2.314667 1.307874 0.068021
 C 3.153063 1.342619 -1.061023
 C 2.738932 1.893066 1.279745
 C 4.416892 1.919949 -0.947104
 C 4.005355 2.464829 1.342640

C 4.868616 2.477413 0.246112
 H 5.062762 1.948008 -1.825172
 H 4.329043 2.917280 2.280509
 C -2.612098 0.838702 0.211718
 C -3.062036 1.875905 -0.617625
 C -3.317836 0.443650 1.358135
 C -4.237735 2.535864 -0.256529
 C -4.494530 1.121321 1.671796
 C -4.950164 2.162283 0.873368
 H -4.601798 3.352988 -0.877254
 H -5.059477 0.838031 2.556790
 H -5.868231 2.685420 1.134713
 N -1.391710 0.151898 -0.115464
 C -2.303132 2.291342 -1.860723
 H -1.532263 1.536069 -2.050294
 C -3.200866 2.339887 -3.093556
 H -3.698007 1.377282 -3.264082
 H -3.977613 3.110101 -3.004339
 H -2.608003 2.575797 -3.985784
 C -1.588241 3.621171 -1.629292
 H -2.309303 4.423760 -1.423701
 H -0.903093 3.543757 -0.777993
 H -1.006312 3.907853 -2.514353
 C -2.754145 -0.627957 2.264054
 H -2.203486 -1.327766 1.624724
 C -1.752238 0.007214 3.230107
 H -1.240503 -0.757740 3.829654
 H -0.995750 0.588539 2.688661
 H -2.264862 0.691468 3.918309
 C -3.810479 -1.429108 3.010905
 H -4.332447 -0.821961 3.761436
 H -4.561532 -1.842046 2.327158
 H -3.341488 -2.264853 3.544546
 C 1.828626 1.923718 2.469768
 H 0.914273 2.487747 2.246812
 H 1.497070 0.914930 2.745830
 H 2.322342 2.378435 3.334675

C 6.239045 3.076845 0.356855
 H 6.203197 4.080278 0.798869
 H 6.888381 2.467202 0.999916
 H 6.722567 3.155384 -0.622664
 C 2.690255 0.786779 -2.373477
 H 2.758014 -0.310261 -2.400236
 H 1.636584 1.031034 -2.552960
 H 3.294886 1.174519 -3.200479
 C 0.728941 -1.988172 1.498645
 H 0.116249 -1.109340 1.732532
 C 2.440976 -2.836651 -0.860194
 H 2.349228 -2.728414 -1.951604
 C -0.141957 -3.222521 1.687854
 H 0.436859 -4.150811 1.647946
 H -0.626000 -3.184097 2.674239
 H -0.934603 -3.283333 0.932855
 C 1.933363 -1.966850 2.432251
 H 1.603383 -1.917162 3.478260
 H 2.540297 -2.875003 2.326043
 H 2.581149 -1.102302 2.239683
 C 3.855502 -2.395623 -0.484146
 H 4.031796 -2.489532 0.593322
 H 4.596261 -3.025916 -0.993309
 H 4.046607 -1.350805 -0.755221
 C 2.192469 -4.289360 -0.475787
 H 2.862763 -4.952048 -1.040753
 H 2.403659 -4.449863 0.587963
 H 1.161633 -4.608729 -0.662519
 C -0.404502 -2.802532 -2.149321
 C -2.634962 -1.263704 -1.633713
 C -2.711453 -2.300625 -2.543635
 H -3.655561 -2.502988 -3.045699
 C -1.582373 -3.065395 -2.826397
 H -1.623183 -3.870831 -3.556032
 H 0.460237 -3.421642 -2.367477
 H -3.511129 -0.652425 -1.439167

P15

E = -1986.81771665
 C -1.223270 -0.199612 -1.337319
 C -0.565255 1.071332 0.576477
 C 0.691642 0.946134 0.789668
 C 0.050199 -0.781998 -1.559562
 P 1.202000 -0.942276 -0.174406
 C 1.888011 1.757509 1.005858
 C 2.649232 1.649599 2.180866
 C 2.315412 2.629047 -0.019565
 C 3.806017 2.415040 2.320365
 C 3.482703 3.365012 0.155015
 C 4.244502 3.276478 1.320077
 H 4.384370 2.329719 3.240457
 H 3.805804 4.033148 -0.643785
 C -2.897624 0.842012 0.116831
 C -3.312060 2.126760 -0.275896
 C -3.779181 -0.062767 0.725759
 C -4.622963 2.508713 0.002651
 C -5.089375 0.358874 0.961427
 C -5.508227 1.634194 0.616813
 H -4.958178 3.505481 -0.278812
 H -5.792626 -0.328472 1.428162
 H -6.531123 1.946125 0.819677
 N -1.537977 0.439986 -0.129634
 C 2.679208 -1.760700 -0.864716
 C 3.125359 -3.029251 -0.483627
 C 3.485505 -0.982226 -1.707285
 C 4.336856 -3.518222 -0.962140
 H 2.525235 -3.639731 0.187287
 C 4.684650 -1.481003 -2.195340
 H 3.167612 0.026463 -1.973612
 C 5.114672 -2.752465 -1.823079
 H 4.672094 -4.509111 -0.660830
 H 5.294502 -0.869318 -2.857488
 H 6.060357 -3.140407 -2.196495
 C 0.360310 -2.232515 0.809860

C -0.136899 -3.374646 0.173210
 C 0.183525 -2.086215 2.184673
 C -0.770976 -4.367578 0.908923
 H -0.030011 -3.479134 -0.905870
 C -0.450012 -3.082164 2.920888
 H 0.523246 -1.177819 2.670250
 C -0.923119 -4.224497 2.285737
 H -1.153688 -5.253517 0.405665
 H -0.585986 -2.956962 3.993285
 H -1.423166 -5.001260 2.861599
 C -2.386941 3.083882 -0.997148
 H -1.507096 2.513869 -1.313836
 C -3.023523 3.655409 -2.260980
 H -3.364003 2.858320 -2.932925
 H -3.884844 4.296215 -2.033648
 H -2.295827 4.268740 -2.806579
 C -1.909885 4.190497 -0.059048
 H -2.759210 4.776099 0.317377
 H -1.375732 3.762714 0.796711
 H -1.232934 4.879071 -0.581280
 C -3.369583 -1.472015 1.099432
 H -2.281484 -1.540480 1.003408
 C -3.727146 -1.802805 2.545316
 H -3.409563 -2.822037 2.791056
 H -3.233856 -1.115736 3.243035
 H -4.808486 -1.744942 2.722629
 C -3.982244 -2.483539 0.131941
 H -5.079591 -2.454594 0.173243
 H -3.678287 -2.278800 -0.901296
 H -3.659213 -3.500964 0.384677
 C 1.518283 2.778607 -1.279258
 H 1.315408 1.811123 -1.755335
 H 0.538517 3.216566 -1.054902
 H 2.030886 3.425398 -1.998672
 C 5.487625 4.098186 1.486904
 H 6.157122 3.988890 0.624686
 H 5.247170 5.166491 1.571878

H 6.042165 3.809488 2.385907
 C 2.244364 0.711012 3.273457
 H 1.173367 0.792014 3.491275
 H 2.440323 -0.329122 2.977103
 H 2.807149 0.904223 4.192507
 C 0.339024 -1.310985 -2.826530
 C -2.164061 -0.212195 -2.383402
 C -1.856166 -0.759882 -3.613844
 H -2.607836 -0.757510 -4.400931
 C -0.592200 -1.301789 -3.849235
 H -0.343277 -1.730429 -4.817265
 H 1.313897 -1.761889 -2.996337
 H -3.145729 0.220963 -2.213478

P16

E = -1076.96338802
 C -1.590034 1.145211 -0.198446
 C -0.353976 1.726804 0.038855
 C 0.936741 1.442216 0.242450
 C 0.083948 -1.095247 -0.798038
 H -0.028020 -0.777952 -1.842409
 H 0.172887 -2.187208 -0.761896
 P 1.588242 -0.299619 -0.105197
 P -1.435380 -0.537262 0.046081
 C 2.395325 -1.749749 0.780126
 H 2.545653 -2.618374 0.121489
 H 3.366273 -1.425203 1.172312
 H 1.766929 -2.042341 1.629221
 C 2.704770 -0.181377 -1.551859
 H 3.674672 0.209375 -1.222982
 H 2.863217 -1.155532 -2.029853
 H 2.270950 0.525403 -2.266124
 C -2.750454 -1.632598 -0.574499
 H -2.528540 -2.686809 -0.370221
 H -3.694779 -1.363228 -0.087947
 H -2.861367 -1.481854 -1.653582
 C -1.170972 -1.049026 1.779459

H -2.092379 -0.880446 2.346699
H -0.869777 -2.100200 1.869225
H -0.383476 -0.400686 2.183608
C 2.012613 2.336019 0.788970
H 3.020933 2.003005 0.489630
H 1.862908 3.355844 0.413361
H 2.013839 2.392432 1.888639
C -2.887150 1.876452 -0.424887
H -2.658294 2.855939 -0.861454
H -3.559211 1.353738 -1.122199
H -3.460221 2.065062 0.498427

P17

E = -1116.33995490
C 0.191827 1.788468 -0.026405
C 0.676110 -1.643183 -0.804141
C -0.578645 -0.980978 -1.356879
H 0.451275 -2.523182 -0.183776
H 1.300832 -1.986837 -1.640155
H -1.148947 -1.698320 -1.961292
H -0.288506 -0.136883 -1.996182
C -1.070801 1.356841 0.290198
C 1.423585 1.227855 -0.321199
P -1.727194 -0.272252 -0.116159
P 1.670709 -0.421375 0.147779
C -3.281426 -0.066483 -1.057400
H -4.098746 0.201886 -0.380186
H -3.146282 0.741142 -1.783725
H -3.546318 -0.995948 -1.575233
C -2.170771 -1.801150 0.877996
H -3.024643 -1.572437 1.526292
H -2.426704 -2.653577 0.229800
H -1.326241 -2.079597 1.517576
C 1.205098 -0.691397 1.890757
H 1.138607 -1.755959 2.143531
H 1.963276 -0.208364 2.516051
H 0.244143 -0.196373 2.066758

C 3.380264 -1.034664 0.046677
H 4.020804 -0.412017 0.680382
H 3.445425 -2.076975 0.381399
H 3.734546 -0.959395 -0.986677
C -2.064028 2.228511 1.020372
H -3.109786 1.908381 0.879584
H -1.892141 2.263564 2.107374
H -1.960518 3.256142 0.649183
C 2.595565 2.029499 -0.846141
H 2.324533 3.086590 -0.742301
H 3.536705 1.870879 -0.294504
H 2.815290 1.851785 -1.911204

2.2.2.3 Koordinaten der Alkine

P1

E = -750.811745113
C -2.611891 -0.407516 0.106070
C -1.641261 0.278220 -0.138131
N -0.557222 1.015895 -0.438085
C -0.807064 2.389638 -0.833235
H -1.794586 2.437172 -1.299393
H -0.798637 3.090664 0.018458
H -0.069568 2.727535 -1.569211
C 0.686774 0.697728 0.293778
C 0.558551 1.073111 1.769829
H 1.448467 0.767128 2.334542
H 0.447874 2.159718 1.890764
H -0.314519 0.578656 2.211372
C 1.856007 1.432989 -0.338886
H 1.978689 1.174212 -1.397636
H 1.726015 2.520325 -0.267132
H 2.784095 1.192887 0.188078
C -3.747165 -1.263264 0.403934
H -3.398977 -2.204258 0.849679
H -4.442270 -0.801586 1.117959
H -4.317048 -1.522499 -0.498321

P 0.860939 -1.207293 0.218567
 C 0.750676 -1.477417 -1.601882
 H 1.411987 -0.819812 -2.180517
 H 1.021560 -2.519120 -1.812823
 H -0.284913 -1.321584 -1.921829
 C 2.687936 -1.400817 0.440075
 H 2.911877 -2.474169 0.461136
 H 3.284974 -0.936288 -0.354635
 H 2.996080 -0.986886 1.408296

P2

E = -1327.01611036
 C -2.513517 -0.502541 0.822537
 C -1.495383 -0.333465 1.469595
 N -0.345976 -0.155188 2.116266
 C -0.396924 0.306164 3.489439
 H -1.364128 0.788474 3.650103
 H -0.298254 -0.518036 4.213969
 H 0.388688 1.042866 3.686965
 C 0.832197 -0.896713 1.617745
 C 0.584941 -2.392529 1.805364
 H 1.429308 -2.999269 1.462862
 H 0.432351 -2.610748 2.871594
 H -0.309953 -2.704341 1.254888
 C 2.077259 -0.452311 2.362335
 H 2.206848 0.633038 2.320202
 H 2.028997 -0.751873 3.417576
 H 2.964602 -0.920839 1.928049
 P 0.876647 -0.516219 -0.283369
 C 0.683283 1.311316 -0.255805
 C -0.526861 1.820433 -0.734584
 C 1.644734 2.208403 0.225315
 C -0.783708 3.187725 -0.708152
 H -1.276832 1.135045 -1.125366
 C 1.389856 3.573747 0.250736
 H 2.613182 1.837485 0.556278
 C 0.171135 4.065524 -0.209962

H -1.733946 3.564790 -1.081275
 H 2.147900 4.258562 0.627055
 H -0.027643 5.135618 -0.189204
 C 2.639194 -0.715608 -0.765289
 C 3.244886 0.200885 -1.635657
 C 3.357280 -1.874916 -0.442378
 C 4.526609 -0.015883 -2.128851
 H 2.707462 1.097009 -1.937092
 C 4.642100 -2.087335 -0.927331
 H 2.910321 -2.634665 0.194122
 C 5.236747 -1.155721 -1.771034
 H 4.971666 0.716737 -2.799924
 H 5.177315 -2.993211 -0.648238
 H 6.241514 -1.322252 -2.154152
 C -3.614171 -0.634787 -0.064259
 C -4.928849 -0.335050 0.327059
 C -3.386285 -1.063412 -1.384967
 C -5.976143 -0.459857 -0.574996
 H -5.117268 -0.002393 1.345189
 C -4.441605 -1.185815 -2.276686
 H -2.367841 -1.295456 -1.692264
 C -5.741649 -0.885458 -1.879120
 H -6.989278 -0.222427 -0.254814
 H -4.246603 -1.518743 -3.294736
 H -6.567030 -0.982552 -2.581441

P3

E = -868.940282936
 C -1.620811 1.146168 -0.071962
 P 1.504498 0.677760 0.299876
 C 0.573176 -0.818075 -0.473452
 C -0.791686 -1.102142 0.281556
 N -1.837834 -0.171141 -0.212938
 C -3.232059 -0.571774 -0.202834
 H -3.827154 0.277410 -0.548200
 H -3.415184 -1.410043 -0.883612
 H -3.595769 -0.851248 0.801059

C -1.257875 -2.529467 -0.007224
 H -0.543100 -3.248178 0.399838
 H -2.217326 -2.730789 0.478386
 H -1.368027 -2.719982 -1.081445
 C -0.651029 -0.949308 1.796651
 H 0.112793 -1.627187 2.196201
 H -0.387957 0.082631 2.059381
 H -1.600706 -1.193221 2.289577
 C 1.474605 -2.051751 -0.449366
 H 1.076869 -2.847410 -1.091322
 H 2.472079 -1.803323 -0.831575
 H 1.601125 -2.462113 0.559942
 C 0.280912 -0.470067 -1.935834
 H 1.192147 -0.544778 -2.539488
 H -0.452060 -1.171716 -2.353508
 H -0.130424 0.539595 -2.047001
 C 2.680146 -0.117620 1.492074
 H 3.343229 -0.866953 1.042567
 H 3.301333 0.684194 1.910064
 H 2.136589 -0.575331 2.325237
 C 2.734250 1.027293 -1.036135
 H 2.251879 1.538138 -1.875645
 H 3.483087 1.710740 -0.617808
 H 3.253817 0.133854 -1.410017
 C -1.415299 2.337625 0.022005
 C -1.044496 3.731475 0.175018
 H -1.204178 4.315751 -0.741096
 H -1.591347 4.226368 0.988681
 H 0.026652 3.781041 0.419227

P4

E = -1095.56613660
 C -2.751642 -2.022437 -0.891996
 P 0.265639 -0.475789 -0.747558
 C -0.487552 -1.292825 0.754081
 C -1.914845 -0.830706 1.012339
 N -2.696890 -0.859157 -0.229251

C -3.853607 0.008606 -0.299647
 H -4.214179 0.048876 -1.332047
 H -4.684943 -0.326802 0.341985
 H -3.559962 1.020084 0.004853
 C -2.570179 -1.626988 2.132722
 H -1.981401 -1.558328 3.054693
 H -3.578350 -1.253627 2.349231
 H -2.648810 -2.684491 1.850747
 C -2.778612 -3.075393 -1.492365
 H -2.785427 -3.986745 -2.049763
 H 0.122218 -1.094332 1.645297
 H -1.878597 0.229248 1.298361
 C -0.050371 1.282476 -0.297209
 C 0.545363 1.917874 0.797366
 C -0.985768 1.986954 -1.058127
 C 0.207283 3.225247 1.124796
 H 1.285202 1.383297 1.392794
 C -1.328891 3.295598 -0.728691
 H -1.449928 1.495022 -1.912422
 C -0.732727 3.915750 0.363497
 H 0.678665 3.709565 1.978322
 H -2.058626 3.833748 -1.331297
 H -0.995967 4.940224 0.620496
 C 2.047977 -0.617235 -0.327036
 C 2.562173 -1.702526 0.389233
 C 2.948087 0.329569 -0.832421
 C 3.931262 -1.830656 0.604664
 H 1.892911 -2.463560 0.786147
 C 4.313121 0.205500 -0.611109
 H 2.570241 1.181604 -1.397063
 C 4.811492 -0.876653 0.109398
 H 4.309496 -2.682393 1.167502
 H 4.993463 0.958794 -1.004735
 H 5.881508 -0.974839 0.281931
 H -0.479255 -2.377328 0.576124

P5

E = -1134.94086539
 C -2.945127 -1.478327 -1.104395
 P 0.250927 -0.428961 -0.728440
 C -0.530832 -1.290081 0.738952
 C -1.949383 -0.739455 0.976350
 N -2.674520 -0.463682 -0.271570
 C -3.657499 0.601490 -0.218190
 H -3.965297 0.861081 -1.235765
 H -4.558123 0.325159 0.354108
 H -3.201722 1.485943 0.240545
 C -2.763975 -1.598080 1.933553
 H -2.209399 -1.785879 2.860808
 H -3.705296 -1.102272 2.198212
 H -3.006089 -2.564214 1.474939
 C -0.426303 -2.801641 0.555473
 H 0.609092 -3.094545 0.344233
 H -0.740606 -3.335180 1.460920
 H -1.045773 -3.146569 -0.278029
 C -3.205118 -2.374450 -1.878539
 H -3.402215 -3.154541 -2.581207
 H 0.033909 -1.005379 1.639022
 H -1.814382 0.253586 1.423103
 C 0.020553 1.329740 -0.219129
 C 0.584685 1.865648 0.942480
 C -0.770697 2.150661 -1.024676
 C 0.349185 3.188421 1.297541
 H 1.223196 1.241569 1.568208
 C -1.004692 3.477113 -0.673254
 H -1.211492 1.735011 -1.930169
 C -0.447323 3.996589 0.489911
 H 0.793657 3.594064 2.204817
 H -1.621733 4.107296 -1.311563
 H -0.627424 5.034055 0.765823
 C 2.048353 -0.601670 -0.349800
 C 2.606028 -1.177840 0.794866
 C 2.918498 -0.108234 -1.330222

C 3.987318 -1.247902 0.957909
H 1.968980 -1.583913 1.577638
C 4.295466 -0.163386 -1.163365
H 2.501596 0.328509 -2.237941
C 4.836019 -0.737422 -0.016176
H 4.399976 -1.704014 1.856250
H 4.950735 0.234770 -1.936087
H 5.915209 -0.791382 0.113995

P6

E = -1327.02669472
C 1.855294 1.415970 -0.270378
P -0.908387 -0.359357 0.406084
C -0.428650 0.036978 -1.355424
C -0.159787 1.520295 -1.568075
N 0.703149 2.048673 -0.504660
C 0.629996 3.468674 -0.234778
H 1.146519 3.685552 0.705071
H 1.087364 4.081091 -1.028827
H -0.421940 3.758856 -0.128042
C 0.401954 1.796137 -2.956308
H -0.276762 1.422843 -3.731755
H 0.543696 2.870768 -3.122530
H 1.372430 1.298600 -3.077743
C 2.884299 0.804014 -0.050727
H -1.215600 -0.287383 -2.048965
H -1.112256 2.054880 -1.451309
C -2.282248 0.852915 0.596895
C -3.466133 0.797223 -0.146336
C -2.091476 1.915170 1.482937
C -4.432128 1.786440 -0.010212
H -3.632162 -0.033217 -0.832387
C -3.057547 2.908803 1.618509
H -1.171399 1.959617 2.064986
C -4.228132 2.845649 0.871243
H -5.349749 1.732365 -0.593548
H -2.897619 3.730472 2.314553

H -4.986438 3.619225 0.978110
 C -1.860299 -1.906434 0.136843
 C -1.541526 -2.815560 -0.876398
 C -2.872817 -2.249764 1.041736
 C -2.222839 -4.024027 -0.990043
 H -0.751874 -2.587019 -1.589840
 C -3.557062 -3.451969 0.923869
 H -3.134773 -1.558170 1.842112
 C -3.234844 -4.345496 -0.094069
 H -1.960324 -4.716120 -1.788383
 H -4.347324 -3.693953 1.632467
 H -3.770111 -5.288540 -0.186047
 H 0.478608 -0.538216 -1.587372
 C 4.070209 0.069344 0.219569
 C 5.199376 0.693441 0.775341
 C 4.138985 -1.305078 -0.064472
 C 6.351086 -0.034628 1.036929
 H 5.159602 1.756948 0.999283
 C 5.297299 -2.022869 0.194525
 H 3.268459 -1.801960 -0.486771
 C 6.409477 -1.394514 0.747094
 H 7.214762 0.466969 1.470179
 H 5.330280 -3.086911 -0.033279
 H 7.315443 -1.961327 0.951766

P7

E = -1134.95060095
 C 3.592296 -0.211693 0.284335
 P -0.181695 -0.249799 0.681762
 C 0.848826 -0.375797 -0.860976
 C 1.842525 0.775164 -1.031807
 N 2.809301 0.853316 0.063984
 C 2.598553 1.782565 1.152787
 H 3.563530 2.060986 1.591918
 H 2.123960 2.690768 0.763742
 H 1.960407 1.371208 1.951705
 C 2.565601 0.667704 -2.365831

H 1.851953 0.644623 -3.197100
 H 3.241310 1.518687 -2.504274
 H 3.163934 -0.251323 -2.397957
 C 4.305722 -1.176368 0.469606
 H 0.193459 -0.443219 -1.740587
 H 1.290740 1.724351 -1.008771
 C -1.102617 1.299674 0.290448
 C -1.870305 1.438479 -0.871323
 C -1.008033 2.381395 1.167232
 C -2.516657 2.634375 -1.153155
 H -1.969574 0.593602 -1.553086
 C -1.656294 3.582200 0.887056
 H -0.421159 2.278458 2.079262
 C -2.408457 3.710101 -0.274057
 H -3.111415 2.729570 -2.059974
 H -1.575248 4.417365 1.580461
 H -2.916711 4.647043 -0.494606
 C -1.487449 -1.486133 0.308533
 C -1.248572 -2.627685 -0.461688
 C -2.751790 -1.327404 0.889709
 C -2.248010 -3.577728 -0.652813
 H -0.275774 -2.785719 -0.922393
 C -3.749189 -2.272712 0.694590
 H -2.958045 -0.443722 1.493052
 C -3.500972 -3.403805 -0.078555
 H -2.042991 -4.458323 -1.259220
 H -4.727652 -2.125789 1.148640
 H -4.282365 -4.145632 -0.231707
 H 1.422583 -1.311532 -0.800493
 C 5.174202 -2.319019 0.699794
 H 5.955391 -2.409973 -0.067180
 H 5.681605 -2.222799 1.668449
 H 4.616095 -3.264734 0.722488

P8

E = -1174.32267552
 C 3.007461 -0.856703 0.764369

P -0.183680 -0.260301 0.581010
 C 0.746675 -0.545000 -1.027678
 C 2.074629 0.243155 -1.133964
 N 3.190093 -0.486747 -0.516462
 C 4.541588 -0.081046 -0.852698
 H 5.238016 -0.694000 -0.274436
 H 4.748292 -0.246417 -1.914963
 H 4.740560 0.978943 -0.615878
 C 2.369521 0.548293 -2.595790
 H 1.514813 1.070989 -3.038748
 H 3.243919 1.195405 -2.717732
 H 2.537849 -0.373237 -3.166841
 C 2.803396 -1.206138 1.906896
 H 0.089544 -0.154283 -1.817691
 H 1.951571 1.210224 -0.611640
 C -0.640457 1.521270 0.457506
 C -0.533926 2.320600 -0.685117
 C -1.137534 2.106389 1.627612
 C -0.921369 3.656909 -0.660629
 H -0.144839 1.906490 -1.613057
 C -1.538248 3.436422 1.651518
 H -1.208187 1.502581 2.532156
 C -1.428659 4.217801 0.505657
 H -0.827412 4.261728 -1.560979
 H -1.928326 3.867814 2.571684
 H -1.732372 5.262787 0.523569
 C -1.787678 -1.029581 0.083059
 C -2.167780 -2.210775 0.724095
 C -2.614433 -0.512086 -0.918205
 C -3.340328 -2.869142 0.365527
 H -1.533070 -2.615654 1.511690
 C -3.787362 -1.165568 -1.275526
 H -2.341119 0.417337 -1.417265
 C -4.151755 -2.347097 -0.635071
 H -3.622412 -3.790246 0.872555
 H -4.423273 -0.749840 -2.055344
 H -5.071749 -2.857533 -0.914321

C 2.461253 -1.603806 3.259528
H 2.703143 -2.655383 3.463396
H 2.966652 -0.989018 4.015896
H 1.378424 -1.476893 3.400077
C 0.919876 -2.039533 -1.271010
H 1.440171 -2.520990 -0.435455
H -0.053482 -2.525676 -1.398335
H 1.508620 -2.219562 -2.178715

P9

E = -1213.69761952
C 2.905728 -0.777553 0.789176
P -0.422747 -0.160370 0.616833
C -0.104444 -1.469138 -0.744915
C 1.433162 -1.486568 -0.973629
N 2.178851 -1.770289 0.257771
C 2.593569 -3.121416 0.573279
H 2.777745 -3.198125 1.649755
H 1.803892 -3.832416 0.316780
H 3.513767 -3.421522 0.045647
C 1.875922 -2.395540 -2.115772
H 1.470313 -2.049078 -3.070779
H 2.968726 -2.383674 -2.195364
H 1.558665 -3.435741 -1.976430
C 3.574941 0.109491 1.276724
H 1.716159 -0.463693 -1.256529
C 0.157681 1.439160 -0.090765
C -0.089604 1.947990 -1.372496
C 0.934042 2.211060 0.781612
C 0.426969 3.177670 -1.766468
H -0.706012 1.392833 -2.072520
C 1.440398 3.447383 0.395354
H 1.148622 1.818646 1.774513
C 1.193233 3.931451 -0.883814
H 0.222796 3.551558 -2.768322
H 2.033952 4.032274 1.096156
H 1.593694 4.895318 -1.192747

C -2.257829 -0.014499 0.569345
 C -2.966351 -0.929574 1.360599
 C -2.988403 0.955915 -0.123586
 C -4.354333 -0.908760 1.418842
 H -2.413511 -1.659599 1.951148
 C -4.377836 0.988353 -0.054036
 H -2.472096 1.708412 -0.713148
 C -5.066584 0.051654 0.707798
 H -4.880576 -1.634548 2.036414
 H -4.924621 1.755776 -0.599410
 H -6.153419 0.078602 0.759600
 C -0.604912 -2.782995 -0.144302
 H -0.225747 -2.932186 0.873760
 H -1.700040 -2.796903 -0.107108
 H -0.296136 -3.636040 -0.764426
 C -0.823960 -1.232063 -2.069839
 H -0.311244 -0.488807 -2.689689
 H -0.863158 -2.162182 -2.653238
 H -1.857839 -0.902743 -1.910655
 C 4.340735 1.197659 1.859733
 H 4.283608 1.197226 2.956635
 H 5.402827 1.163217 1.581236
 H 3.946135 2.162887 1.514780

P10

E = -1094.36279438
 C 1.579962 1.445781 -1.077508
 C 0.137630 -0.307261 -0.390631
 C -1.008756 -0.689869 -0.271893
 C 0.778366 2.509367 -0.930903
 H 2.467731 1.501806 -1.707911
 H 1.050655 3.377175 -1.533994
 C -0.143464 2.220257 1.739632
 H 0.813095 2.694494 1.990927
 H -0.901518 2.526011 2.470851
 H -0.039589 1.132556 1.801511
 C -0.663896 4.546843 0.242743

H -1.469008 4.867919 0.913811
 H 0.295301 4.897327 0.644142
 H -0.837724 5.017581 -0.732049
 P -0.736661 2.708325 0.057578
 C -2.355465 -1.133588 -0.148902
 C -3.415837 -0.234784 -0.346977
 C -2.647183 -2.468471 0.170832
 C -4.728407 -0.669027 -0.234037
 H -3.186485 0.802773 -0.579444
 C -3.964276 -2.889795 0.285908
 H -1.830644 -3.169787 0.327289
 C -5.010327 -1.994900 0.082672
 H -5.541412 0.037453 -0.391602
 H -4.175768 -3.928018 0.535229
 H -6.041877 -2.329465 0.172740
 C 2.496017 -0.650969 -0.213396
 C 2.346383 -2.036716 -0.116626
 C 3.751581 -0.077440 0.003287
 C 3.442928 -2.832516 0.180858
 H 1.367291 -2.479528 -0.280879
 C 4.843619 -0.888149 0.288417
 H 3.868553 1.002767 -0.024223
 C 4.699335 -2.267483 0.379046
 H 3.312768 -3.910772 0.251479
 H 5.815704 -0.428417 0.456568
 H 5.556129 -2.896771 0.608920
 N 1.385351 0.167475 -0.520311

P11

E = -1478.49878034
 C -0.034566 -1.574053 -1.873092
 C -1.484649 0.110531 -1.054979
 C -1.659164 1.298852 -0.877234
 C 1.156849 -0.985853 -1.702163
 H -0.148196 -2.418964 -2.553122
 H 1.970453 -1.357761 -2.325324
 P 1.604061 0.410860 -0.625705

C -1.820038 2.684573 -0.603191
 C -0.767710 3.581735 -0.849729
 C -3.018018 3.177371 -0.063161
 C -0.918685 4.931135 -0.565191
 H 0.166507 3.198103 -1.253967
 C -3.156460 4.528843 0.219251
 H -3.835710 2.488052 0.134273
 C -2.110592 5.412173 -0.030359
 H -0.094607 5.614888 -0.760818
 H -4.091262 4.896033 0.638957
 H -2.223218 6.471223 0.192732
 C -2.164144 -2.169305 -0.827365
 C -3.490955 -1.815762 -0.569740
 C -1.757745 -3.494467 -0.650948
 C -4.396077 -2.780622 -0.153619
 H -3.800796 -0.781964 -0.699768
 C -2.678392 -4.452758 -0.243947
 H -0.718287 -3.771472 -0.807824
 C -4.000514 -4.105460 0.006981
 H -5.426974 -2.492024 0.042672
 H -2.348681 -5.481214 -0.109022
 H -4.715350 -4.858243 0.331449
 N -1.235963 -1.192207 -1.247140
 C 3.369924 -0.037090 -0.351214
 C 4.238983 0.042500 -1.445400
 C 3.894384 -0.372048 0.898387
 C 5.591988 -0.235886 -1.301024
 H 3.851974 0.330330 -2.423748
 C 5.253040 -0.636687 1.044511
 H 3.238161 -0.432539 1.763956
 C 6.104390 -0.575636 -0.052241
 H 6.251385 -0.176925 -2.165216
 H 5.646066 -0.898247 2.025511
 H 7.165554 -0.786884 0.064894
 C 0.827190 -0.033499 0.976913
 C 0.444444 1.016249 1.815160
 C 0.572428 -1.347962 1.374208

C -0.177003 0.757245 3.031483
H 0.613759 2.044529 1.496947
C -0.063258 -1.606588 2.582593
H 0.861769 -2.173345 0.725475
C -0.436784 -0.554565 3.413714
H -0.474368 1.583896 3.673865
H -0.272639 -2.634349 2.873718
H -0.937903 -0.758391 4.358264

P12

E = -1606.29796226
C 1.573429 1.160519 -1.280431
C 0.265334 -0.635029 -0.382795
C -0.826261 -1.131084 -0.180178
C 0.633968 2.099233 -1.495584
H 2.587469 1.314451 -1.651645
H 0.977175 2.919135 -2.126809
P -1.114534 2.170069 -1.001649
C -2.118179 -1.653689 0.104886
C -3.085750 -1.734464 -0.916155
C -2.434345 -2.051916 1.421194
C -4.351855 -2.217059 -0.598055
C -3.708701 -2.537586 1.686031
C -4.683945 -2.630055 0.691156
H -5.103926 -2.272533 -1.385156
H -3.953178 -2.843584 2.703460
C 2.634652 -0.667258 -0.058583
C 3.133768 -1.844819 -0.644576
C 3.248825 -0.065752 1.048351
C 4.287085 -2.401452 -0.095273
C 4.412187 -0.652030 1.550249
C 4.927471 -1.807044 0.985851
H 4.698251 -3.313050 -0.520990
H 4.908331 -0.200944 2.408510
H 5.831059 -2.256480 1.393586
N 1.453525 -0.058724 -0.607955
C 2.668638 1.154264 1.731506

H 1.774843 1.453369 1.179704
 C 3.629049 2.338613 1.695117
 H 3.899339 2.595154 0.663778
 H 3.164950 3.221252 2.153014
 H 4.556246 2.125751 2.243093
 C 2.232185 0.821878 3.156510
 H 1.506074 -0.000023 3.165108
 H 3.085353 0.520214 3.777993
 H 1.766214 1.694759 3.630512
 C 2.458591 -2.451977 -1.858704
 H 1.377539 -2.318043 -1.729343
 C 2.867374 -1.703986 -3.128522
 H 3.947302 -1.797414 -3.301787
 H 2.346082 -2.113368 -4.002725
 H 2.625565 -0.637756 -3.065530
 C 2.709726 -3.946235 -2.009734
 H 3.752410 -4.162680 -2.275811
 H 2.474193 -4.491284 -1.088127
 H 2.082813 -4.351543 -2.812449
 C -1.411986 -1.921008 2.507119
 H -0.503672 -2.491079 2.273989
 H -1.097422 -0.873865 2.617302
 H -1.803329 -2.268032 3.468583
 C -2.747474 -1.282594 -2.301112
 H -2.472708 -0.218954 -2.298744
 H -1.876473 -1.827019 -2.688461
 H -3.587467 -1.431909 -2.987021
 C -6.044839 -3.177067 1.002626
 H -6.024362 -4.274065 1.064916
 H -6.414538 -2.808054 1.966695
 H -6.772925 -2.905659 0.230803
 C -1.512245 3.912720 -1.584691
 H -1.514953 3.743028 -2.673534
 C -2.935123 4.277218 -1.176045
 H -3.638372 3.458038 -1.369574
 H -2.984628 4.518250 -0.105856
 H -3.283090 5.163422 -1.722786

C -0.555272 5.067040 -1.304597
H -0.668564 5.451008 -0.286458
H 0.497441 4.795258 -1.439687
H -0.768816 5.901395 -1.986901
C -0.984114 2.199152 0.875198
H -0.358009 1.313704 1.049005
C -2.338493 1.905904 1.510263
H -2.230802 1.765369 2.594685
H -3.049280 2.727616 1.358318
H -2.783849 0.995521 1.092771
C -0.290926 3.396222 1.504038
H -0.041624 3.185553 2.553911
H 0.639221 3.650286 0.980359
H -0.939185 4.280875 1.499354

P13

E = -1832.93018759
C 1.268345 1.914409 -0.181271
C 1.005099 -0.426245 -0.582125
C 0.280715 -1.363838 -0.851058
C -0.010019 2.327640 -0.258585
H 2.060291 2.645490 -0.015345
H -0.147201 3.404804 -0.167646
P -1.537190 1.383521 -0.576990
C -0.668516 -2.408276 -1.023800
C -1.436389 -2.480799 -2.203421
C -0.891396 -3.313125 0.033625
C -2.421868 -3.457901 -2.296353
C -1.880369 -4.279905 -0.110913
C -2.658119 -4.369023 -1.265711
H -3.024590 -3.510410 -3.203156
H -2.058517 -4.977444 0.707617
C 3.148461 0.376742 0.081564
C 4.134580 0.522436 -0.902388
C 3.449002 -0.009817 1.397071
C 5.460825 0.296108 -0.530685
C 4.786826 -0.231834 1.718707

C 5.785042 -0.076001 0.765417
 H 6.249623 0.409840 -1.273037
 H 5.051736 -0.528409 2.731680
 H 6.824834 -0.250706 1.035749
 N 1.775660 0.624785 -0.267391
 C -2.723651 2.783373 -0.425079
 C -2.616948 3.813862 -1.366931
 C -3.759109 2.837869 0.509992
 C -3.505209 4.881047 -1.360838
 H -1.824901 3.778227 -2.115762
 C -4.656877 3.901948 0.507295
 H -3.862802 2.048099 1.251437
 C -4.532399 4.927442 -0.422634
 H -3.400737 5.676195 -2.097153
 H -5.456491 3.930643 1.245733
 H -5.234235 5.759276 -0.418807
 C -1.840315 0.471560 0.990954
 C -2.747653 -0.591539 0.952029
 C -1.215449 0.783248 2.200514
 C -3.039248 -1.315924 2.103280
 H -3.215178 -0.865241 0.006176
 C -1.494403 0.048283 3.347996
 H -0.505011 1.607370 2.237010
 C -2.410706 -0.999381 3.303167
 H -3.743613 -2.144307 2.054210
 H -0.999133 0.299308 4.285146
 H -2.628528 -1.572827 4.202358
 C 2.360722 -0.136832 2.441122
 H 1.409392 -0.246721 1.909984
 C 2.277477 1.139060 3.278252
 H 2.086289 2.018565 2.652037
 H 1.468880 1.066453 4.016552
 H 3.216441 1.311331 3.820610
 C 2.520949 -1.365534 3.328373
 H 2.657456 -2.275004 2.732738
 H 3.376771 -1.274636 4.009783
 H 1.623500 -1.498193 3.945880

C 3.795154 0.915126 -2.324268
 H 2.704663 0.985217 -2.396941
 C 4.371197 2.287198 -2.666322
 H 5.467625 2.283644 -2.608687
 H 4.090490 2.583362 -3.684515
 H 4.003996 3.056348 -1.976047
 C 4.249499 -0.149435 -3.319569
 H 5.341333 -0.263451 -3.317094
 H 3.808244 -1.124354 -3.082906
 H 3.947236 0.123464 -4.338109
 C -0.096148 -3.191947 1.294610
 H 0.976119 -3.320127 1.099116
 H -0.217866 -2.189564 1.727971
 H -0.406582 -3.933170 2.037750
 C -1.200530 -1.502221 -3.310428
 H -1.391449 -0.478391 -2.962367
 H -0.154328 -1.530186 -3.640606
 H -1.845304 -1.708786 -4.170578
 C -3.703695 -5.433928 -1.410254
 H -3.310564 -6.296929 -1.965810
 H -4.041649 -5.800789 -0.434957
 H -4.577262 -5.067385 -1.961425

P14

E = -1760.21277957
 C 1.736465 -0.929432 0.801669
 C 0.003963 0.712752 0.276548
 C -1.140487 1.106291 0.159798
 C 0.907834 -2.074416 0.946499
 P -0.896567 -2.088969 0.527961
 C -2.517601 1.437261 0.035574
 C -3.362938 1.340240 1.160954
 C -3.040767 1.819545 -1.216297
 C -4.713900 1.631099 1.008444
 C -4.396815 2.111379 -1.316293
 C -5.251511 2.025376 -0.217379
 H -5.368745 1.549226 1.876158

H -4.801525 2.406565 -2.284474
 C 2.231713 1.315793 -0.122371
 C 2.480811 2.457232 0.661035
 C 2.850920 1.112356 -1.363941
 C 3.400191 3.385561 0.173443
 C 3.770816 2.065380 -1.801282
 C 4.048748 3.189023 -1.038671
 H 3.614132 4.280424 0.751841
 H 4.263084 1.928811 -2.763016
 H 4.766307 3.925595 -1.395343
 N 1.286657 0.334278 0.347451
 C 2.505479 -0.068361 -2.244409
 H 1.857181 -0.732836 -1.668851
 C 3.732266 -0.881767 -2.640515
 H 4.278164 -1.224280 -1.753498
 H 3.430230 -1.767140 -3.214165
 H 4.424257 -0.302178 -3.265256
 C 1.709004 0.398792 -3.461149
 H 0.801990 0.933602 -3.154074
 H 2.301301 1.078735 -4.087529
 H 1.410457 -0.454356 -4.083306
 C 1.789529 2.665691 1.995465
 H 0.767981 2.281197 1.891816
 C 2.471886 1.863812 3.103369
 H 3.512217 2.189466 3.234824
 H 1.949403 2.007458 4.057401
 H 2.477670 0.791841 2.883868
 C 1.671705 4.132727 2.388655
 H 2.644604 4.568618 2.650246
 H 1.234943 4.734363 1.582899
 H 1.029166 4.231082 3.271418
 C -2.145811 1.877109 -2.415469
 H -1.283213 2.532518 -2.242085
 H -1.738807 0.881238 -2.637710
 H -2.683722 2.233920 -3.299383
 C -2.800364 0.916661 2.481283
 H -2.344836 -0.078687 2.400597

H -2.000825 1.597722 2.801305
 H -3.572614 0.895559 3.256885
 C -6.704928 2.371980 -0.341876
 H -6.887595 3.413665 -0.042420
 H -7.057414 2.263063 -1.373354
 H -7.325744 1.738360 0.301817
 C -1.464708 -3.818990 0.983715
 H -1.036122 -3.950814 1.988390
 C -2.982230 -3.768201 1.164900
 H -3.277616 -2.970530 1.855451
 H -3.496166 -3.584081 0.213233
 H -3.353948 -4.723456 1.559636
 C -1.067024 -5.003690 0.113874
 H -1.601932 -4.976031 -0.843180
 H 0.004817 -5.032520 -0.107839
 H -1.338287 -5.947709 0.606664
 C -0.774722 -2.013139 -1.349994
 H -0.395149 -0.988996 -1.472569
 C -2.166844 -2.041374 -1.968753
 H -2.119871 -1.780297 -3.034721
 H -2.617555 -3.040432 -1.901408
 H -2.839055 -1.328716 -1.474015
 C 0.198719 -2.947428 -2.058871
 H 0.447244 -2.544409 -3.050649
 H 1.138423 -3.063383 -1.504656
 H -0.224399 -3.943581 -2.218007
 C 3.103546 -1.026637 1.104074
 C 1.516970 -3.231583 1.453759
 C 2.865357 -3.313701 1.769155
 H 3.279983 -4.244376 2.149869
 C 3.667602 -2.199132 1.575752
 H 4.731404 -2.228641 1.802559
 H 3.730133 -0.148282 0.980671
 H 0.914732 -4.121954 1.598224

P15

E = -1986.84819932

C -1.306001 -1.751918 -0.211432
 C -0.797919 0.611826 -0.500765
 C -0.110366 1.583874 -0.747187
 C 0.023377 -2.243389 -0.296434
 P 1.521802 -1.174590 -0.544551
 C 0.831543 2.640120 -0.872077
 C 1.617719 2.756904 -2.035338
 C 1.021104 3.521681 0.213221
 C 2.592451 3.748588 -2.083205
 C 2.001046 4.502370 0.114013
 C 2.799563 4.632145 -1.023596
 H 3.209798 3.835297 -2.977418
 H 2.153337 5.181011 0.953514
 C -2.997519 0.053824 0.012452
 C -3.868578 0.101390 -1.084935
 C -3.382256 0.468250 1.296739
 C -5.169168 0.554145 -0.863061
 C -4.692796 0.912398 1.468764
 C -5.580154 0.950575 0.401313
 H -5.866337 0.605248 -1.697724
 H -5.022133 1.240443 2.452142
 H -6.598516 1.302675 0.555356
 N -1.640250 -0.384061 -0.198267
 C 2.880650 -2.415043 -0.454690
 C 3.390355 -2.881396 -1.670320
 C 3.451584 -2.876432 0.735195
 C 4.429070 -3.805286 -1.699351
 H 2.964986 -2.510744 -2.602742
 C 4.497942 -3.791408 0.706703
 H 3.073638 -2.516783 1.690295
 C 4.986147 -4.260833 -0.508998
 H 4.811826 -4.161928 -2.653951
 H 4.935009 -4.140671 1.640612
 H 5.805819 -4.976821 -0.528383
 C 1.728155 -0.369387 1.094258
 C 2.683146 0.650033 1.179247
 C 1.013065 -0.722794 2.239896

C 2.933110 1.286783 2.388158
 H 3.225848 0.953273 0.284045
 C 1.253160 -0.072381 3.448032
 H 0.267036 -1.514751 2.188479
 C 2.215962 0.928293 3.526520
 H 3.678062 2.078903 2.436100
 H 0.689910 -0.356469 4.335731
 H 2.403827 1.432296 4.472738
 C -2.407673 0.414290 2.452660
 H -1.402786 0.497104 2.024762
 C -2.496637 -0.933939 3.166916
 H -3.489694 -1.069915 3.615222
 H -2.324339 -1.767851 2.477496
 H -1.752427 -0.996769 3.970939
 C -2.570587 1.564864 3.437507
 H -2.589407 2.533947 2.925978
 H -3.490160 1.475429 4.030353
 H -1.729610 1.571801 4.142318
 C -3.415010 -0.282811 -2.477377
 H -2.432371 -0.758342 -2.389267
 C -4.349379 -1.295081 -3.131915
 H -5.352076 -0.879648 -3.294977
 H -3.957271 -1.597771 -4.110405
 H -4.451548 -2.196809 -2.516394
 C -3.241838 0.967788 -3.338561
 H -4.198929 1.490063 -3.469634
 H -2.535404 1.666369 -2.875655
 H -2.862134 0.703762 -4.333547
 C 0.188534 3.367887 1.446772
 H -0.877619 3.499115 1.221073
 H 0.297790 2.355725 1.859527
 H 0.473777 4.091886 2.216574
 C 1.406280 1.816053 -3.180355
 H 1.570319 0.778615 -2.862739
 H 0.371612 1.869988 -3.543006
 H 2.079664 2.043457 -4.012991
 C 3.832594 5.715019 -1.115596

H 3.392225 6.645839 -1.500083
H 4.263967 5.943675 -0.134436
H 4.647499 5.437262 -1.793059
C -2.368780 -2.662959 -0.112671
C 0.191564 -3.634818 -0.288564
C -2.157341 -4.031245 -0.105906
H -3.010225 -4.702701 -0.028281
C -0.866141 -4.528340 -0.198173
H -0.674721 -5.598853 -0.194223
H 1.198518 -4.036128 -0.352262
H -3.381919 -2.280788 -0.033105

P16

E = -1077.01113702
C -1.029506 -0.669276 -0.857790
C -2.057206 0.199538 -0.447709
C -2.933807 0.972135 -0.089711
C 1.753319 -0.609284 0.331213
H 2.388204 -1.322991 -0.211134
H 2.134234 -0.548080 1.362526
P 1.855685 1.020816 -0.565810
P 0.016961 -1.254521 0.341563
C 0.845481 2.082214 0.553685
H 1.099490 1.944971 1.614352
H 1.026145 3.130805 0.287606
H -0.221079 1.878263 0.392184
C 3.545580 1.513075 0.006269
H 3.755477 2.533740 -0.336019
H 3.652356 1.479380 1.099131
H 4.296568 0.852631 -0.443483
C 0.289346 -3.058225 0.307426
H 1.048324 -3.364546 1.037330
H -0.659510 -3.564718 0.511849
H 0.626143 -3.343034 -0.695988
C -0.635763 -0.862930 1.979295
H -1.649351 -1.267769 2.056925
H 0.008640 -1.290215 2.754421

H -0.692702 0.223470 2.092980
 C -4.022721 1.844757 0.318315
 H -3.715234 2.545523 1.107542
 H -4.366433 2.456948 -0.526663
 H -4.898166 1.293497 0.693675
 C -0.744372 -0.930611 -2.316886
 H -0.458417 -0.016743 -2.858702
 H 0.087088 -1.638756 -2.447421
 H -1.613579 -1.365162 -2.832053

P17

E = -1116.38937069
 C 0.726515 1.820880 -0.010109
 C 0.429976 -1.763520 -0.584237
 C -0.796215 -1.025004 -1.107823
 H 0.168250 -2.605730 0.074321
 H 0.993726 -2.185017 -1.428719
 H -1.301799 -1.620183 -1.882381
 H -0.467747 -0.087268 -1.578062
 C -0.211832 2.536181 0.309241
 C 1.783715 0.952613 -0.353804
 P -2.034857 -0.544106 0.194917
 P 1.617857 -0.616683 0.275545
 C -3.118816 0.504310 -0.862542
 H -4.023320 0.783396 -0.309618
 H -2.572448 1.420802 -1.113782
 H -3.412319 -0.004785 -1.790675
 C -3.038168 -2.097866 0.231175
 H -3.913960 -1.958086 0.876156
 H -3.378344 -2.401218 -0.768650
 H -2.441629 -2.911667 0.661934
 C 1.076327 -0.592706 2.004131
 H 0.877554 -1.607902 2.364904
 H 1.856665 -0.116683 2.606534
 H 0.157212 -0.000646 2.062801
 C 3.171994 -1.550204 0.227701
 H 3.931063 -1.023721 0.814656

H 3.016421 -2.553836 0.638407
H 3.520535 -1.642203 -0.806042
C -1.310818 3.379011 0.748738
H -2.100330 2.765047 1.206851
H -1.007546 4.127220 1.496243
H -1.775164 3.922330 -0.086759
C 2.778791 1.312095 -1.428220
H 3.228536 2.293987 -1.224352
H 3.608676 0.594889 -1.476930
H 2.342158 1.368358 -2.439272

2.3 I-Ylide

2.3.1 Energien der Strukturen

Table 2.7. Energien der AYCs

AYC	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]
I1	-476.42191737	0.195923	0.149451	–	–
I2	-1564.58802751	0.750046	0.640972	–	–

Table 2.8. Energien der Übergangszustände

AYC	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]
I1	-476.35836089	0.194147	0.146981	0.061086	160.382545
I2	-1564.53620172	0.748203	0.643782	0.054636	143.446267

Table 2.9. Energien der Akine.

AYC	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]
I1	-476.39133677	0.196492	0.144027	0.025157	66.048656
I2	-1564.55716635	0.749681	0.632756	0.022645	59.454868

2.3.2 Koordinaten der Strukturen

2.3.2.1 Koordinaten der AYCs

I1

E = -476.421917369

C 0.808658 0.336743 0.075614

C -0.089179 1.393354 0.115454
 C -1.448768 1.088743 -0.137897
 C 1.489950 -1.809391 -0.056804
 H 1.393036 -2.886844 -0.044766
 H 2.725650 1.108197 -0.262215
 N 2.158476 0.287520 -0.129460
 N 0.408310 -0.967208 0.122126
 C 2.580438 -1.028449 -0.224587
 H 3.613718 -1.296954 -0.396671
 C -3.148218 -0.629956 -0.318562
 H -3.639992 -0.996863 0.598096
 H -3.693314 0.241004 -0.687166
 H -3.187648 -1.434877 -1.068646
 C 0.419038 2.804508 0.099561
 H 0.916353 3.094701 1.038007
 H 1.134570 2.996549 -0.719604
 H -0.432205 3.475291 -0.051310
 N -1.791846 -0.212179 -0.063587
 C -0.943961 -1.248289 0.505161
 H -1.227226 -2.240473 0.130839
 H -1.035270 -1.260243 1.612258

I2

E = -1564.58802751
 C 0.251102 -0.499798 1.268512
 C 0.124860 0.543095 0.331928
 C -1.146836 0.696655 -0.266306
 C -0.518666 -2.168487 2.577151
 H -1.241696 -2.712165 3.170495
 N 1.283075 -1.362761 1.561246
 N -0.835414 -0.994585 1.918752
 C 0.794385 -2.395585 2.353891
 H 1.440479 -3.192767 2.696322
 N -2.184786 0.164649 0.408919
 C -2.055167 -0.252262 1.803594
 H -2.904597 -0.866764 2.117262
 H -1.991106 0.642694 2.449327

C -3.498617 0.122170 -0.156621
 C -4.244348 1.305572 -0.291518
 C -4.017759 -1.123267 -0.549914
 C -5.544699 1.205510 -0.787822
 C -5.327340 -1.175802 -1.024800
 C -6.090516 -0.021848 -1.134021
 H -6.143488 2.106440 -0.900311
 H -5.752001 -2.128746 -1.332133
 H -7.111719 -0.077866 -1.506724
 C 1.327690 1.277589 -0.133581
 C 2.024190 2.076589 0.792435
 C 1.798553 1.198756 -1.458973
 C 3.212617 2.701206 0.413947
 C 2.991068 1.836017 -1.794965
 C 3.731235 2.570521 -0.870606
 H 3.744238 3.312328 1.145035
 H 3.358202 1.746381 -2.818510
 C -3.660744 2.645275 0.104411
 H -2.576740 2.559690 -0.040734
 C -4.139869 3.792045 -0.776546
 H -5.202244 4.021620 -0.620806
 H -3.576966 4.703863 -0.543341
 H -3.992168 3.566212 -1.838800
 C -3.932823 2.944725 1.577606
 H -5.011136 3.035264 1.765434
 H -3.552597 2.150693 2.230168
 H -3.455523 3.885510 1.880224
 C -3.126808 -2.348813 -0.592216
 H -2.376756 -2.257559 0.203464
 C -3.864065 -3.663062 -0.375314
 H -4.467311 -3.644979 0.540721
 H -4.533638 -3.899134 -1.211878
 H -3.147827 -4.489863 -0.296452
 C -2.366807 -2.346813 -1.920401
 H -3.071103 -2.396123 -2.760536
 H -1.777875 -1.427084 -2.027584
 H -1.691391 -3.208815 -1.990158

C 1.038489 0.458657 -2.516455
 H 0.690572 -0.514162 -2.157035
 H 0.130064 1.007850 -2.789953
 H 1.654008 0.309265 -3.410808
 C 1.483329 2.293167 2.177637
 H 0.444639 2.645355 2.135610
 H 1.470601 1.372960 2.774638
 H 2.081325 3.033591 2.720739
 C 5.051338 3.175559 -1.245969
 H 5.036144 3.580614 -2.264800
 H 5.334040 3.983851 -0.562253
 H 5.853335 2.423130 -1.211155
 C 2.467144 -1.439947 0.762102
 C 3.656897 -0.843077 1.181398
 C 2.357479 -2.084919 -0.478285
 C 4.721175 -0.820817 0.280313
 C 3.447232 -2.037593 -1.339171
 C 4.626955 -1.378966 -0.990121
 H 5.647687 -0.331665 0.580795
 H 3.365905 -2.511397 -2.316962
 C 1.098970 -2.808515 -0.851864
 H 1.120439 -3.113633 -1.902384
 H 0.964187 -3.710320 -0.238989
 H 0.211021 -2.183757 -0.701534
 C 3.822781 -0.242142 2.543263
 H 4.689095 -0.685219 3.049830
 H 4.002535 0.836878 2.471151
 H 2.943284 -0.399692 3.172880
 C 5.747587 -1.235988 -1.974055
 H 5.631839 -0.301479 -2.541632
 H 6.722421 -1.196041 -1.475648
 H 5.761617 -2.058488 -2.697387

2.3.2.2 Koordinaten der Übergangszustände

I1

E = -476.358360892

C 1.116150 0.332770 0.593060
 C -0.372518 1.681292 -0.088211
 C -1.357501 0.940939 -0.363346
 C 1.245796 -1.795479 -0.215671
 H 0.912438 -2.809450 -0.397147
 H 2.971406 0.838896 -0.190388
 N 2.272597 0.121222 -0.081213
 N 0.509857 -0.885382 0.520644
 C 2.379756 -1.159327 -0.587473
 H 3.240302 -1.512836 -1.141031
 C -3.000660 -0.864028 -0.424188
 H -3.709367 -0.662631 0.398679
 H -3.393984 -0.389545 -1.327651
 H -2.970494 -1.949571 -0.589044
 C 0.239625 3.009069 -0.005752
 H 0.448471 3.294491 1.032751
 H 1.186363 3.069801 -0.562398
 H -0.448970 3.748206 -0.432846
 N -1.676701 -0.360680 -0.171299
 C -0.883691 -1.005910 0.853900
 H -1.150689 -2.065786 0.923345
 H -1.027483 -0.523654 1.834891

I2

E = -1564.53620172
 C 0.298915 0.133214 1.549212
 C -0.033786 0.940949 -0.387997
 C -1.286634 0.817874 -0.544502
 C -0.967008 -1.526002 2.463467
 H -1.854135 -1.978650 2.888483
 N 1.029089 -1.008812 1.702144
 N -0.926032 -0.209770 2.033142
 C 0.274142 -2.025329 2.268608
 H 0.691676 -2.993124 2.513056
 N -2.330498 0.549472 0.268506
 C -2.042580 0.630323 1.694591
 H -2.927135 0.334116 2.265102

H -1.754243 1.660350 1.943270
 C -3.542025 -0.050436 -0.183126
 C -4.730838 0.700331 -0.098975
 C -3.536779 -1.360000 -0.687470
 C -5.919855 0.104898 -0.513380
 C -4.749221 -1.906606 -1.114771
 C -5.930034 -1.188838 -1.021165
 H -6.852194 0.660700 -0.454520
 H -4.764716 -2.917380 -1.519532
 H -6.866969 -1.635965 -1.348474
 C 1.270501 1.394237 -0.805567
 C 1.821883 2.552709 -0.218423
 C 2.024945 0.657148 -1.736872
 C 3.138136 2.896249 -0.506847
 C 3.335035 1.046251 -2.005217
 C 3.922151 2.142156 -1.380647
 H 3.565792 3.781128 -0.034197
 H 3.921944 0.456240 -2.710285
 C -4.681735 2.148656 0.348189
 H -3.967209 2.216577 1.178818
 C -4.138461 3.020414 -0.785955
 H -4.825215 3.000621 -1.641851
 H -4.032677 4.062731 -0.459034
 H -3.160418 2.664469 -1.128291
 C -6.012760 2.683946 0.856981
 H -6.749668 2.773739 0.048759
 H -6.442218 2.040355 1.634393
 H -5.878456 3.686225 1.280465
 C -2.265385 -2.175004 -0.805439
 H -1.472873 -1.638321 -0.271481
 C -2.401586 -3.553356 -0.165206
 H -2.748598 -3.482112 0.872180
 H -3.109189 -4.189540 -0.712034
 H -1.433494 -4.070276 -0.161488
 C -1.835932 -2.280361 -2.267265
 H -2.604570 -2.785859 -2.866804
 H -1.667145 -1.284500 -2.691643

H -0.905012 -2.854920 -2.359186
C 1.426669 -0.515578 -2.445140
H 0.708207 -1.032435 -1.803625
H 0.867321 -0.190690 -3.333681
H 2.198685 -1.222751 -2.769495
C 0.994266 3.390362 0.705215
H 0.065628 3.704602 0.210551
H 0.688681 2.807353 1.583435
H 1.539044 4.281741 1.034254
C 5.365872 2.477353 -1.604214
H 5.989600 2.063103 -0.798125
H 5.735542 2.059495 -2.547525
H 5.535122 3.560413 -1.618440
C 2.364297 -1.124426 1.218113
C 3.327194 -0.202356 1.651917
C 2.673388 -2.111308 0.271025
C 4.593365 -0.257590 1.075342
C 3.959657 -2.127572 -0.264158
C 4.927180 -1.196395 0.103809
H 5.341827 0.466375 1.397431
H 4.199595 -2.879258 -1.016323
C 1.664859 -3.119132 -0.198566
H 1.934689 -3.493501 -1.191339
H 1.608182 -3.986121 0.473898
H 0.659716 -2.690535 -0.257944
C 3.031707 0.816580 2.708518
H 3.961347 1.173598 3.163825
H 2.503518 1.676402 2.284266
H 2.387591 0.406672 3.494204
C 6.268118 -1.173896 -0.564735
H 7.011823 -0.645547 0.041868
H 6.641092 -2.185040 -0.764240
H 6.205621 -0.653498 -1.531337

2.3.2.3 Koordinaten der Alkine

I1

E = -476.391336768

C 2.434539 0.586412 0.052361

C -2.720661 -0.465111 -0.043317

C -1.827551 0.346887 0.074235

C 1.095476 -1.264207 0.280814

H 0.205762 -1.810996 0.566839

H 3.914566 -0.510923 -0.893395

N 3.001992 -0.529298 -0.466100

N 1.252729 0.092047 0.514531

C 2.224832 -1.664684 -0.347411

H 2.528978 -2.640567 -0.704480

C -0.530289 2.098287 -0.923044

H -1.457509 2.467161 -1.371417

H 0.066488 2.952289 -0.584529

H 0.050133 1.563343 -1.690236

C -3.808391 -1.419763 -0.180546

H -3.443779 -2.451778 -0.269914

H -4.501460 -1.381810 0.670439

H -4.392410 -1.204938 -1.084674

N -0.850521 1.260963 0.217963

C 0.236468 0.939388 1.104829

H -0.177434 0.449136 1.992068

H 0.750717 1.859841 1.397010

I2

E = -1564.55716635

C -1.153955 -1.491515 -1.187925

C 0.897511 1.740257 -0.574561

C 1.394522 0.632459 -0.643995

C -0.008551 -3.057927 0.030329

H 0.858261 -3.624139 0.350241

N -1.965390 -2.138604 -0.309364

N 0.046057 -2.084618 -0.952478

C -1.296533 -3.095257 0.440689

H -1.792735 -3.716710 1.175659
 N 1.929510 -0.591949 -0.725955
 C 1.261879 -1.581015 -1.543759
 H 1.959182 -2.409019 -1.707702
 H 0.979805 -1.131550 -2.499886
 C 2.954674 -0.995577 0.187090
 C 4.213986 -1.334718 -0.340787
 C 2.701894 -1.046470 1.572174
 C 5.212161 -1.752348 0.538729
 C 3.744121 -1.442878 2.411059
 C 4.984364 -1.803359 1.905264
 H 6.191243 -2.021029 0.144123
 H 3.575153 -1.477276 3.485539
 H 5.777496 -2.119542 2.580171
 C 0.324476 3.037187 -0.456625
 C 1.146360 4.138586 -0.146446
 C -1.064710 3.214851 -0.639198
 C 0.564948 5.397062 -0.020382
 C -1.594410 4.493627 -0.513594
 C -0.801238 5.599761 -0.203323
 H 1.202018 6.247629 0.223016
 H -2.666654 4.629699 -0.657889
 C 4.528976 -1.217012 -1.818449
 H 3.628184 -0.853047 -2.323800
 C 5.622171 -0.177481 -2.059317
 H 6.567357 -0.475944 -1.587713
 H 5.809198 -0.054897 -3.133360
 H 5.335636 0.797424 -1.648802
 C 4.904112 -2.565693 -2.427860
 H 5.820692 -2.965221 -1.974904
 H 4.114079 -3.312542 -2.279697
 H 5.081806 -2.469693 -3.506043
 C 1.367193 -0.658473 2.178160
 H 0.627330 -0.628789 1.369961
 C 0.883538 -1.671095 3.213299
 H 0.872312 -2.690906 2.813869
 H 1.514510 -1.666585 4.110951

H -0.134128 -1.421674 3.536091
 C 1.437730 0.737488 2.798010
 H 2.150334 0.752280 3.633537
 H 1.752462 1.485606 2.064281
 H 0.455354 1.037244 3.184115
 C -1.935635 2.040072 -0.952940
 H -1.606374 1.513306 -1.856490
 H -1.882419 1.284457 -0.158766
 H -2.981520 2.337866 -1.078608
 C 2.619370 3.944889 0.042114
 H 2.829155 3.272367 0.884392
 H 3.068474 3.474335 -0.842344
 H 3.127102 4.896552 0.228969
 C -1.408685 6.965696 -0.081864
 H -2.248596 6.968779 0.624554
 H -0.674886 7.701841 0.263104
 H -1.802100 7.313379 -1.046593
 C -3.345487 -1.812997 -0.154395
 C -4.244038 -2.145144 -1.176211
 C -3.760739 -1.149551 1.003418
 C -5.581812 -1.802985 -1.006370
 C -5.112930 -0.828718 1.127143
 C -6.038090 -1.146007 0.137194
 H -6.289753 -2.057239 -1.795224
 H -5.447059 -0.305136 2.022568
 C -2.784529 -0.782764 2.080876
 H -3.213222 -0.036799 2.757144
 H -2.503403 -1.656066 2.684271
 H -1.856854 -0.377255 1.658984
 C -3.769672 -2.832697 -2.419090
 H -3.189396 -3.732489 -2.179295
 H -4.613015 -3.120646 -3.054335
 H -3.100896 -2.175139 -2.987430
 C -7.487258 -0.787595 0.283149
 H -7.811348 -0.112801 -0.519499
 H -8.124748 -1.679299 0.228811
 H -7.683563 -0.291081 1.238969

3 Untersuchungen zu schweren ylidsubstituierten Tetrylenen

3.1 Energien der Tetrylene

3.1.1 Energien der Silylene

Tabelle 3.1. Energien der diylidsubstituierten Silylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
Y_2Si	-4082.96063973	0.886537	0.734124	–	–
$^3\text{Y}_2\text{Si}$	-4082.90541156	0.886824	0.733616	0.054720	143.667806
$(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{Si}$	-2905.76188502	0.799644	0.668877	–	–
$^3(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{Si}$	-2905.70713866	0.799180	0.671261	0.057130	149.995760
$(\text{Y}_{\text{PhF}})_2\text{Si}$	-3899.58524078	0.727462	0.580705	–	–
$^3(\text{Y}_{\text{PhF}})_2\text{Si}$	-3899.52249077	0.726016	0.577895	0.059940	157.372496

Tabelle 3.2. Energien der chlorido(ylid)substituierten Silylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
YSiCl	-2646.96958766	0.446979	0.353325	–	–
$^3\text{YSiCl}$	-2646.89377311	0.446893	0.350646	0.073136	192.017387
$\text{Y}_{\text{Ph}}\text{SiCl}$	-2058.37585009	0.404100	0.320216	–	–
$^3\text{Y}_{\text{Ph}}\text{SiCl}$	-2058.30841460	0.403431	0.318431	0.065650	172.365361
$\text{Y}_{\text{PhF}}\text{SiCl}$	-2555.28314520	0.367892	0.274602	–	–
$^3\text{Y}_{\text{PhF}}\text{SiCl}$	-2555.21180512	0.367510	0.273801	0.070539	185.200355

Tabelle 3.3. Energien der hexamethyldisilazan(ylid)substituierten Silylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
YSiHMDS	-3060.76630909	0.691976	0.570221	–	–
$^3\text{YSiHMDS}$	-3060.70706357	0.691624	0.568852	0.057877	151.954803
$\text{Y}_{\text{Ph}}\text{SiHMDS}$	-2472.17006049	0.648191	0.533817	–	–
$^3\text{Y}_{\text{Ph}}\text{SiHMDS}$	-2472.11061784	0.647579	0.534816	0.060442	158.689552
$\text{Y}_{\text{PhF}}^{\text{P}}\text{SiHMDS}$	-2969.07661631	0.612123	0.491482	–	–
$^3\text{Y}_{\text{PhF}}^{\text{P}}\text{SiHMDS}$	-2969.01618544	0.611819	0.490210	0.059159	155.321613

Tabelle 3.4. Energien der perfluorphenyl(ylid)substituierten Silylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
YSiC₆F₅	-2915.29857635	0.504315	0.392825	–	–
³YSiC₆F₅	-2915.23607959	0.504296	0.390088	0.059760	156.899250
Y_{Ph}SiC₆F₅	-2326.70822592	0.461736	0.361813	–	–
³Y_{Ph}SiC₆F₅	-2326.65839556	0.460921	0.360648	0.048665	127.770903
Y_{PhF}SiC₆F₅	-2823.61374882	0.425442	0.315421	–	–
³Y_{PhF}SiC₆F₅	-2823.55664926	0.424819	0.314919	0.056598	148.596894

Tabelle 3.5. Energien der pyridin(ylid)substituierten Silylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
YSiPy	-2434.44288792	0.528460	0.426992	–	–
³YSiPy	-2434.38897524	0.528269	0.425945	0.052866	138.798843
Y_{Ph}SiPy	-1845.84660072	0.485408	0.393326	–	–
³Y_{Ph}SiPy	-1845.79625794	0.485086	0.391634	0.048651	127.732623
Y_{PhF}SiPy	-2342.75509713	0.449370	0.349815	–	–
³Y_{PhF}SiPy	-2342.70134890	0.449165	0.346664	0.050597	132.843027

Tabelle 3.6. Energien der pyrimidin(ylid)substituierten Silylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
YSiPyr	-2450.49912647	0.516491	0.415638	–	–
³YSiPyr	-2450.44899349	0.516212	0.413639	0.048134	126.375764
Y_{Ph}SiPyr	-1861.90830830	0.473476	0.381348	–	–
³Y_{Ph}SiPyr	-1861.85620551	0.473056	0.380073	0.050828	133.448363
Y_{PhF}SiPyr	-2358.81572896	0.437384	0.337152	–	–
³Y_{PhF}SiPyr	-2358.76111520	0.436901	0.335832	0.053294	139.922767

Tabelle 3.7. Energien der B¹(ylid)substituierten Silylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
YSiB¹	-2862.63192165	0.693337	0.574820	–	–
³YSiB¹	-2862.58972114	0.694374	0.578104	0.045485	119.419581
Y_{Ph}SiB¹	-2274.04404077	0.650821	0.540947	–	–
³Y_{Ph}SiB¹	-2274.00252995	0.650259	0.542314	0.042878	112.575716
Y_{PhF}SiB¹	-2770.95300182	0.615011	0.499730	–	–
³Y_{PhF}SiB¹	-2770.90102294	0.613949	0.492151	0.044400	116.571885

Tabelle 3.8. Energien der B²(ylid)substituierten Silylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
YSiB²	-2593.44571423	0.546337	0.442165	–	–
³YSiB²	-2593.40539726	0.546533	0.438202	0.036354	95.447348
Y_{Ph}SiB²	-2004.85620145	0.503131	0.407145	–	–
³Y_{Ph}SiB²	-2004.81483694	0.503001	0.404643	0.038863	102.033520
Y_{PhF}SiB²	-2501.76361265	0.467031	0.362673	–	–
³Y_{PhF}SiB²	-2501.72102022	0.467272	0.361705	0.041624	109.284941

Tabelle 3.9. Energien der ylidsubstituierten cyclischen Silylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
V^{Si}	-1307.89084248	0.320586	0.254411	–	–
³V^{Si}	-1307.79348567	0.319136	0.250584	0.093530	245.562516
VI^{Si}	-1857.08091178	0.334564	0.261082	–	–
³VI^{Si}	-1856.99498746	0.333681	0.258977	0.083819	220.067625
VII^{Si}	-2619.14154696	0.374215	0.293142	–	–
³VII^{Si}	-2619.08235191	0.374283	0.293764	0.059817	157.049665
VIII^{Si}	-1827.11222845	0.332335	0.257908	–	–
³VIII^{Si}	-1827.06921715	0.332030	0.255979	0.041082	107.861579
IX^{Si}	-1277.88807407	0.318802	0.250747	–	–
³IX^{Si}	-1277.86649226	0.318281	0.248967	0.019802	51.989652

3.1.2 Energien der Germylene

Tabelle 3.10. Energien der diylidsubstituierten Germylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
Y_2Ge	-5871.21690208	0.885744	0.731721	–	–
$^3\text{Y}_2\text{Ge}$	-5871.14951494	0.886187	0.732584	0.068250	179.190743
$^{\text{Cy}}\text{Y}_2\text{Ge}$	-5892.98407039	1.313253	1.151770	–	–
$^3(^{\text{Cy}}\text{Y})_2\text{Ge}$	-5892.92161406	1.313788	1.151351	0.061801	162.258637
$(^{\text{Cy}}\text{Y}_\text{F})_2\text{Ge}$	-7455.31260359	1.193606	1.011913	–	–
$^3(^{\text{Cy}}\text{Y}_\text{F})_2\text{Ge}$	-7455.24835271	1.194476	1.012315	0.064407	169.099608
$(^{\text{Pip}}\text{Y}_\text{S})_2\text{Ge}$	-6678.03513359	1.128393	0.966765	–	–
$^3(^{\text{Pip}}\text{Y}_\text{S})_2\text{Ge}$	-6677.95739179	1.127970	0.963867	0.074844	196.502397
$(\text{Y}_\text{Ph})_2\text{Ge}$	-4694.01344921	0.799023	0.666141	–	–
$^3(\text{Y}_\text{Ph})_2\text{Ge}$	-4693.95413228	0.798364	0.668315	0.061491	161.444437
$(\text{Y}_\text{Pyr})_2\text{Ge}$	-4726.14540027	0.774973	0.645132	–	–
$^3(\text{Y}_\text{Pyr})_2\text{Ge}$	-4726.07816773	0.771809	0.643063	0.771809	171.086874
$(\text{Y}_\text{PhF})_2\text{Ge}$	-5687.83724891	0.727014	0.579869	–	–
$^3(\text{Y}_\text{PhF})_2\text{Ge}$	-5687.76630803	0.725550	0.576278	0.067350	176.827110
$(\text{Y}_\text{CN})_2\text{Ge}$	-4415.94130453	0.628433	0.506679	–	–
$^3(\text{Y}_\text{CN})_2\text{Ge}$	-4415.88264709	0.628133	0.508352	0.06033044	158.3975702

Tabelle 3.11. Energien der mit zwei unterschiedlichen Yliden substituierten Germylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
$\text{YGe}^{\text{Pip}}\text{Y}_\text{S}$	-6274.63028475	1.007068	0.849490	–	–
$^3\text{YGe}^{\text{Pip}}\text{Y}_\text{S}$	-6274.56714501	1.006438	0.846749	0.060399	158.576892
$\text{Y}_\text{CN}\text{Ge}^{\text{Pip}}\text{Y}_\text{S}$	-5546.99185270	0.878250	0.734302	–	–
$^3\text{Y}_\text{CN}\text{Ge}^{\text{Pip}}\text{Y}_\text{S}$	-5546.91805479	0.878000	0.735873	0.075369	197.881073

Tabelle 3.12. Energien der chlorido(ylid)substituierten Germylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
YGeCl	-4435.22592543	0.446613	0.351955	–	–
³YGeCl	-4435.14078424	0.446310	0.348420	0.081606	214.257052
^{Cy}YGeCl	-4446.10826476	0.660382	0.560094	–	–
³(^{Cy}Y)GeCl	-4446.02671097	0.660052	0.558185	0.079341	208.310948
^{Pip}Y_SGeCl	-4838.64081336	0.567583	0.465482	–	–
³(^{Pip}Y_S)GeCl	-4838.54754223	0.567267	0.464626	0.092415	242.635924
Y_{Ph}GeCl	-3846.63300659	0.403588	0.318293	–	–
³Y_{Ph}GeCl	-3846.56536613	0.402636	0.315744	0.065091	170.897628
Y_{PhF}GeCl	-4343.54097114	0.367370	0.272658	–	–
³Y_{PhF}GeCl	-4343.46281835	0.366517	0.267529	0.073024	183.798
Y_{CN}GeCl	-3707.59188757	0.318001	0.239086	–	–
³Y_{CN}GeCl	-3707.51558275	0.316264	0.235631	0.07284982	191.267202

Tabelle 3.13. Energien der hexamethyldisilazan(ylid)substituierten Germylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
YGeHMDS	-4849.01430566	0.690789	0.567106	–	–
³YGeHMDS	-4848.94431010	0.690641	0.565670	0.068560	180.003125
Y_{Ph}GeHMDS	-4260.41863914	0.647373	0.531173	–	–
³Y_{Ph}GeHMDS	-4260.34931483	0.646999	0.532791	0.070942	178.333
Y_{PhF}GeHMDS	-4757.32516396	0.611587	0.490252	–	–
³Y_{PhF}GeHMDS	-4757.25462418	0.611207	0.488870	0.069158	181.573751
Y_{CN}GeHMDS	-4121.38132354	0.561979	0.450605	–	–
³Y_{CN}GeHMDS	-4121.30457062	0.561645	0.450630	0.07677792	201.580429

Tabelle 3.14. Energien der perfluorphenyl(ylid)substituierten Germylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
YGeC₆F₅	-4703.55333624	0.503780	0.391609	–	–
³YGeC₆F₅	-4703.48190373	0.503699	0.388594	0.068418	179.630173
Y_{Ph}GeC₆F₅	-4114.96476816	0.460908	0.358484	–	–
³Y_{Ph}GeC₆F₅	-4114.89071003	0.460028	0.357246	0.072820	191.189251
Y_{PhF}GeC₆F₅	-4611.87076535	0.424784	0.313116	–	–
³Y_{PhF}GeC₆F₅	-4611.80588829	0.423805	0.311851	0.063612	167.013464

Tabelle 3.15. Energien der pyridin(ylid)substituierten Germylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
YGePy	-4222.69706449	0.527891	0.425257	–	–
³YGePy	-4222.63585067	0.527646	0.422550	0.058507	153.609656
Y_{Ph}GePy	-3634.10198425	0.484882	0.391776	–	–
³Y_{Ph}GePy	-3634.04599361	0.484101	0.388693	0.052908	138.909009
Y_{PhF}GePy	-4131.01086860	0.448649	0.347003	–	–
³Y_{PhF}GePy	-4130.94998112	0.448424	0.344898	0.058782	154.333401

Tabelle 3.16. Energien der pyrimidin(ylid)substituierten Germylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
YGePyr	-4238.75291907	0.515735	0.413854	–	–
³YGePyr	-4238.69569306	0.515493	0.410442	0.053814	141.288683
Y_{Ph}GePyr	-3650.16359034	0.472821	0.379284	–	–
³Y_{Ph}GePyr	-3650.10506049	0.472181	0.377522	0.056768	149.043990
Y_{PhF}GePyr	-4147.07200084	0.436651	0.334702	–	–
³Y_{PhF}GePyr	-4147.00963070	0.436381	0.334044	0.061712	162.025224

Tabelle 3.17. Energien der B¹(ylid)substituierten Germylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
YGeB¹	-4650.89119210	0.692932	0.573252	–	–
³YGeB¹	-4650.84416090	0.693883	0.576523	0.050302	132.068426
Y_{Ph}GeB¹	-4062.30320027	0.650364	0.539978	–	–
³Y_{Ph}GeB¹	-4062.25856791	0.649744	0.540757	0.045411	119.227526
Y_{PhF}GeB¹	-4559.21212423	0.613947	0.495631	–	–
³Y_{PhF}GeB¹	-4559.15481770	0.613446	0.490723	0.052399	137.572341

Tabelle 3.18. Energien der perfluorphenyl(ylid)substituierten Germylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
YGeB²	-4381.70430283	0.545767	0.439486	–	–
³YGeB²	-4381.65898163	0.546078	0.436760	0.042595	111.833698
Y_{Ph}GeB²	-3793.11527300	0.502586	0.404377	–	–
³Y_{Ph}GeB²	-3793.06992151	0.502357	0.402065	0.043039	113.000181
Y_{PhF}GeB²	-4290.02330518	0.466553	0.361207	–	–
³Y_{PhF}GeB²	-4289.97532452	0.466222	0.356028	0.042802	112.375758

Tabelle 3.19. Energien der ylidsubstituierten cyclischen Germylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
V^{Ge}	-3096.13968216	0.319744	0.251882	–	–
³V^{Ge}	-3096.05423687	0.318647	0.247868	0.081431	213.797852
VI^{Ge}	-3645.32890364	0.333824	0.258871	–	–
³VI^{Ge}	-3645.24313744	0.332258	0.255194	0.082089	215.525195
VII^{Ge}	-4407.39598976	0.373682	0.290554	–	–
³VII^{Ge}	-4407.32392771	0.373570	0.291489	0.072997	191.653755
VIII^{Ge}	-3615.37576050	0.332043	0.257519	–	–
³VIII^{Ge}	-3615.34098822	0.331872	0.254382	0.031635	83.058428
IX^{Ge}	-3066.14845830	0.318298	0.248722	–	–
³IX^{Ge}	-3066.12322495	0.317645	0.246516	0.023027	60.458307

3.1.3 Energien der Stannylene

Tabelle 3.20. Energien der diylidsubstituierten Stannylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
Y₂Sn	-3796.60415202	0.885692	0.731914	–	–
³Y₂Sn	-3796.52238437	0.885401	0.730000	0.079854	209.655758
^{Cy}Y₂Sn	-3818.37212370	1.313265	1.152236	–	–
³(^{Cy}Y)₂Sn	-3818.29445342	1.313075	1.149112	0.074262	194.975795
(^{Cy}Y_F)₂Sn	-5380.70473208	1.193718	1.011470	–	–
³(^{Cy}Y_F)₂Sn	-5380.62374787	1.193651	1.008111	0.077330	203.028737
(^{Pip}Y_S)₂Sn	-4603.42688044	1.127597	0.963195	–	–
³(^{Pip}Y_S)₂Sn	-4603.33623443	1.126297	0.958895	0.086346	226.701449
(Y_{Ph})₂Sn	-2619.38479815	0.798397	0.665313	–	–
³(Y_{Ph})₂Sn	-2619.33185705	0.797917	0.668197	0.055825	146.568800
(Y_{Pyr})₂Sn	-2651.52714056	0.774731	0.644006	–	–
³(Y_{Pyr})₂Sn	-2651.45792246	0.774099	0.641763	0.0669751	175.843125
(Y_{PhF})₂Sn	-3613.20987155	0.726604	0.578267	–	–
³(Y_{PhF})₂Sn	-3613.13916598	0.724319	0.572791	0.065230	171.260236
(Y_{CN})₂Sn	-2341.31743766	0.628008	0.505352	–	–
³(Y_{CN})₂Sn	-2341.25604395	0.627678	0.502729	0.058771	154.302499

Tabelle 3.21. Die mit zwei unterschiedlichen Yliden substituierten Stannylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
$\text{YSn}^{\text{Pip}}\text{Y}_{\text{S}}$	-4200.01390476	1.006884	0.850284	–	–
$^3\text{YSn}^{\text{Pip}}\text{Y}_{\text{S}}$	-4199.92730791	1.006360	0.844900	0.081213	213.224338
$\text{Y}_{\text{CN}}\text{Sn}^{\text{Pip}}\text{Y}_{\text{S}}$	-3472.37827448	0.878139	0.733933	–	–
$^3\text{Y}_{\text{CN}}\text{Sn}^{\text{Pip}}\text{Y}_{\text{S}}$	-3472.28972492	0.874088	0.727359	0.081976	215.226833

Tabelle 3.22. Energien der chlorido(ylid)substituierten Stannylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
YSnCl	-2360.61257775	0.446229	0.349777	–	–
$^3\text{YSnCl}$	-2360.52303224	0.445429	0.344105	0.083874	220.209901
$^{\text{Cy}}\text{YSnCl}$	-2371.49531249	0.660056	0.558560	–	–
$^3(^{\text{Cy}}\text{Y})\text{SnCl}$	-2371.41054621	0.659467	0.555708	0.081602	214.246799
$^{\text{Pip}}\text{Y}_{\text{S}}\text{SnCl}$	-2764.02995260	0.567489	0.464855	–	–
$^3(^{\text{Pip}}\text{Y}_{\text{S}})\text{SnCl}$	-2763.93190424	0.564530	0.460697	0.093890	246.509140
$\text{Y}_{\text{Ph}}\text{SnCl}$	-1772.01021413	0.403194	0.315768	–	–
$^3\text{Y}_{\text{Ph}}\text{SnCl}$	-1771.95276395	0.402525	0.314282	0.055964	146.933955
$\text{Y}_{\text{PhF}}\text{SnCl}$	-1772.01021413	0.403194	0.315768	–	–
$^3\text{Y}_{\text{PhF}}\text{SnCl}$	-1771.95276395	0.402525	0.314282	0.055964	146.933955
$\text{Y}_{\text{CN}}\text{SnCl}$	-1632.97164967	0.317658	0.237151	–	–
$^3\text{Y}_{\text{CN}}\text{SnCl}$	-1632.90626208	0.316386	0.235024	0.06326059	166.090679

Tabelle 3.23. Energien der hexamethyldisilazan(ylid)substituierten Stannylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
YSnHMDS	-2774.39859738	0.690303	0.564829	–	–
$^3\text{YSnHMDS}$	-2774.31845241	0.690292	0.563469	0.078785	206.849939
$\text{Y}_{\text{Ph}}\text{SnHMDS}$	-2185.79301904	0.646948	0.530772	–	–
$^3\text{Y}_{\text{Ph}}\text{SnHMDS}$	-2185.73168332	0.645552	0.528427	0.058991	154.880135
$\text{Y}_{\text{PhF}}\text{SnHMDS}$				–	–
$^3\text{Y}_{\text{PhF}}\text{SnHMDS}$					
$\text{Y}_{\text{CN}}\text{SnHMDS}$	-2046.75937815	0.561147	0.449876	–	–
$^3\text{Y}_{\text{CN}}\text{SnHMDS}$	-2046.68081752	0.560601	0.446715	0.07539963	197.961729

Tabelle 3.24. Energien der perfluorphenyl(ylid)substituierten Stannylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
YSnC₆F₅	-2628.93794305	0.503683	0.390764	–	–
³YSnC₆F₅	-2628.85898412	0.503192	0.385474	0.073669	193.417776
Y_{Ph}SnC₆F₅	-2040.33947504	0.460469	0.356804	–	–
³Y_{Ph}SnC₆F₅	-2040.27492747	0.459674	0.355638	0.063382	166.408312
Y_{PhF}SnC₆F₅	-2537.24629212	0.424019	0.309924	–	–
³Y_{PhF}SnC₆F₅	-2537.18658094	0.422925	0.308826	0.058613	153.888904

Tabelle 3.25. Energien der pyridin(ylid)substituierten Stannylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
YSnPy	-2148.07780408	0.527350	0.423199	–	–
³YSnPy	-2148.01079010	0.527169	0.422172	0.065987	173.248816
Y_{Ph}SnPy	-1559.47095129	0.484077	0.389566	–	–
³Y_{Ph}SnPy	-1559.42247741	0.483747	0.387680	0.046588	122.316479
Y_{PhF}SnPy	-2056.38309255	0.447799	0.343656	–	–
³Y_{PhF}SnPy	-2056.31320271	0.447358	0.342624	0.068858	180.786259

Tabelle 3.26. Energien der pyrimidin(ylid)substituierten Stannylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
YSnPyr	-2164.13503634	0.515254	0.411564	–	–
³YSnPyr	-2164.06987180	0.514953	0.407930	0.061531	161.548433
Y_{Ph}SnPyr	-1575.53461591	0.472116	0.378692	–	–
³Y_{Ph}SnPyr	-1575.48047566	0.471051	0.373748	0.049196	129.164754
Y_{PhF}SnPyr	-2072.44424700	0.435840	0.332332	–	–
³Y_{PhF}SnPyr	-2072.38256343	0.435413	0.328827	0.058179	152.747836

Tabelle 3.27. Energien der B¹(ylid)substituierten Stannylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
YSnB¹	-2576.27485486	0.692686	0.571462	–	–
³YSnB¹	-2576.21982219	0.692854	0.572893	0.056464	148.245366
Y_{Ph}SnB¹	-1987.67528184	0.649799	0.538052	–	–
³Y_{Ph}SnB¹	-1987.63310702	0.649230	0.539259	0.043382	113.898968
Y_{PhF}SnB¹	-2484.58534594	0.613571	0.492506	–	–
³Y_{PhF}SnB¹	-2484.52838376	0.613292	0.489525	0.053981	141.727588

Tabelle 3.28. Energien der B²(ylid)substituierten Stannylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
YSnB²	-2307.08730068	0.545554	0.439022	–	–
³YSnB²	-2307.03326626	0.545600	0.434719	0.049731	130.569843
Y_{Ph}SnB²	-1718.48752229	0.502015	0.404004	–	–
³Y_{Ph}SnB²	-1718.44247543	0.501942	0.400454	0.041497	108.950006
Y_{PhF}SnB²	-2215.39676361	0.466091	0.360027	–	–
³Y_{PhF}SnB²	-2215.34854599	0.465840	0.354662	0.042853	112.509554

Tabelle 3.29. Energien der ylidsubstituierten cyclischen Stannylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
V^{Sn}	-1021.50458148	0.319035	0.249992	–	–
³V^{Sn}	-1021.43970102	0.318490	0.247070	0.061958	162.671937
VI^{Sn}	-1570.70479972	0.332775	0.258130	–	–
³VI^{Sn}	-1570.62964588	0.332131	0.253909	0.070933	186.234171
VII^{Sn}	-2332.77588920	0.372956	0.289027	–	–
³VII^{Sn}	-2332.69444789	0.373223	0.290310	0.082724	217.192676
VIII^{Sn}	-1540.75684820	0.331773	0.256570	–	–
³VIII^{Sn}	-1540.73418205	0.331875	0.252849	0.018945	49.740491
IX^{Sn}	-991.51969892	0.317750	0.247187	–	–
³IX^{Sn}	-991.49553744	0.317101	0.244654	0.021628	56.785564

3.1.4 Energien der Plumbylene

Tabelle 3.30. Energien der diylidsubstituierten Plumbylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
Y_2Pb	-3796.65092299	0.885172	0.732189	–	–
$^3\text{Y}_2\text{Pb}$	-3796.55124366	0.881600	0.728263	0.095753	251.400368
$^{\text{Cy}}\text{Y}_2\text{Pb}$	-3818.41797603	1.312842	1.149206	–	–
$^3(^{\text{Cy}}\text{Y})_2\text{Pb}$	-3818.33071680	1.312245	1.146310	0.084042	220.652028
$(^{\text{Cy}}\text{Y}_{\text{F}})_2\text{Pb}$	-5380.75446848	1.192852	1.007224	–	–
$^3(^{\text{Cy}}\text{Y}_{\text{F}})_2\text{Pb}$	-5380.65786999	1.193763	1.008596	0.097597	256.241817
$(^{\text{Pip}}\text{Y}_{\text{S}})_2\text{Pb}$	-4603.47734370	1.128174	0.965618	–	–
$^3(^{\text{Pip}}\text{Y}_{\text{S}})_2\text{Pb}$	-4603.37199715	1.124255	0.957589	0.097318	255.507228
$(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{Pb}$	-2619.43193948	0.798360	0.664439	–	–
$^3(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{Pb}$	-2619.38111885	0.797157	0.662819	0.771809	129.176254
$(\text{Y}_{\text{Pyr}})_2\text{Pb}$	-2651.57211158	0.774316	0.641833	–	–
$^3(\text{Y}_{\text{Pyr}})_2\text{Pb}$	-2651.50288431	0.772502	0.637459	0.06485327	170.27226
$(\text{Y}_{\text{PhF}})_2\text{Pb}$	-3613.25672234	0.726022	0.573845	–	–
$^3(\text{Y}_{\text{PhF}})_2\text{Pb}$	-3613.19127083	0.724462	0.572735	0.06434151	168.928635
$(\text{Y}_{\text{CN}})_2\text{Pb}$	-2341.36638304	0.627750	0.502764	–	–
$^3(\text{Y}_{\text{CN}})_2\text{Pb}$	-2341.30395058	0.626774	0.502919	0.062587	164.323376

Tabelle 3.31. Energien der mit zwei unterschiedlichen Yliden substituierten Plumbylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
$\text{YPb}^{\text{Pip}}\text{Y}_{\text{S}}$	-4200.06324500	1.006787	0.849393	–	–
$^3\text{YPb}^{\text{Pip}}\text{Y}_{\text{S}}$	-4199.96282368	1.005592	0.841500	0.092528	242.933104
$\text{Y}_{\text{CN}}\text{Pb}^{\text{Pip}}\text{Y}_{\text{S}}$	-3472.42849761	0.877758	0.731863	–	–
$^3\text{Y}_{\text{CN}}\text{Pb}^{\text{Pip}}\text{Y}_{\text{S}}$	-3472.34126621	0.874314	0.727457	0.082825	217.458088

Tabelle 3.32. Energien der chlorido(ylid)substituierten Plumbylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
YPbCl	-2360.66356284	0.445946	0.347555	–	–
³YPbCl	-2360.57781988	0.445313	0.345225	0.049625	219.000726
^{Cy}YPbCl	-2371.54685752	0.659589	0.556442	–	–
³(^{Cy}Y)PbCl	-2371.46764186	0.659198	0.554216	0.076696	201.366456
^{Pip}Y_SPbCl	-2764.08357667	0.567310	0.463834	–	–
³(^{Pip}Y_S)PbCl	-2764.00133781	0.566935	0.461235	0.079640	209.094452
Y_{Ph}PbCl	-1772.06141690	0.403059	0.315657	–	–
³Y_{Ph}PbCl	-1772.00882756	0.402183	0.312693	0.049625	130.291330
Y_{PhF}PbCl	-2268.97034856	0.366694	0.269041	–	–
³Y_{PhF}PbCl	-2268.91068733	0.365812	0.267790	0.05841	153.356059
Y_{CN}PbCl	-1633.02336116	0.317512	0.236067	–	–
³Y_{CN}PbCl	-1632.96354057	0.316296	0.233125	0.05687859	149.334738

Tabelle 3.33. Energien der hexamethyldisilazan(ylid)substituierten Germylene.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	$\Delta G(\text{SCF})$ [hartree]	$\Delta G(\text{SCF})$ [kJ/mol]
YPbHMDS	-2774.44361354	0.690114	0.563935	–	–
³YPbHMDS	-2774.35141436	0.689750	0.561711	0.089975	236.229835
Y_{Ph}PbHMDS	-2185.83884387	0.646433	0.526584	–	–
³Y_{Ph}PbHMDS	-2185.78354357	0.645786	0.528759	0.057475	150.901400
Y_{PhF}PbHMDS	-2682.74644667	0.610833	0.486931	–	–
³Y_{PhF}PbHMDS	-2682.68496579	0.609513	0.484491	0.059041	155.011830
Y_{CN}PbHMDS	n.b.	n.b.	n.b.	–	–
³Y_{CN}PbHMDS	-2046.73232717	0.559448	0.445016	–	–

3.2 Ergebnisse der NBO-Analysen

Tabelle 3.34. Ergebnisse der NBO-Analysen.

		Y₂Ge	Y₂Sn	Y₂Pb	(^{Pip}Y_S)₂Pb
WBI	E1–Ch1	0.1981	0.1639	0.1737	0.3002
	E1–Ch3	0.1979	0.1818	0.1462	0.3000
	E1–C1	0.5794	0.4549	0.4636	0.4088
	E1–C27	0.5795	0.4382	0.4139	0.4089
NBO-Ladungen	<i>q</i> _{E1}	0.99340	1.22634	1.24731	1.07836
	<i>q</i> _{Chal1}	-0.96242	-0.98420	-0.99889	-0.62140
	<i>q</i> _{Chal3}	-0.96245	-0.98389	-0.98452	-0.62138
	<i>q</i> _{C1}	-1.48552	-1.53701	-1.50928	-1.62820
	<i>q</i> _{C27}	-1.48551	-1.52996	-1.49585	-1.62826

Tabelle 3.35. Die C–E–R-Winkel [°] und die prozentualen s- und p-Anteile des freien Elektronenpaars am Zentralatom nach der NBO-Analyse mit **Y** als Ylidligand.

	E	Y₂E	YECI	YEHMDS	YEC₆F₅	YEPy	YEPyr	YEB¹	YEB²
Winkel	Si	103.8	100.6	104.3	96.5	94.7	93.0	92.0	89.1
	Ge	102.7	99.5	103.5	94.7	93.1	91.0	90.3	87.6
	Sn	100.3	97.5	99.8	90.9	89.2	88.4	88.1	86.6
Hybridisierung	Si	72% s	78% s	73% s	72% s	72% s	71% s	67% s	69% s
		28% p	22% p	27% p	28% p	28% p	29% p	33% p	31% p
	Ge	81% s	86% s	83% s	81% s	80% s	81% s	76% s	78% s
		19% p	14% p	17% p	19% p	20% p	19% p	24% p	22% p
	Sn	84% s	89% s	86% s	86% s	85% s	85% s	81% s	82% s
		16% p	11% p	14% p	14% p	15% p	15% p	19% p	18% p

Tabelle 3.36. Die C–E–R-Winkel [°] und die prozentualen s- und p-Anteile des freien Elektronenpaars am Zentralatom nach der NBO-Analyse mit **Y_{Ph}** als Ylidligand.

	E	(Y_{Ph})₂E	Y_{Ph}ECI	Y_{Ph}EHMDS	Y_{Ph}EC₆F₅	Y_{Ph}EPy	Y_{Ph}EPyr	Y_{Ph}EB¹	Y_{Ph}EB²
Winkel	Si	107.4	98.9	103.6	93.3	95.4	94.6	92.2	89.4
	Ge	105.1	96.8	101.0	91.3	93.5	92.2	90.8	87.3
	Sn	101.7	93.5	97.8	87.2	89.9	88.4	87.3	84.4
Hybridisierung	Si	68% s	78% s	74% s	74% s	73% s	73% s	67% s	70% s
		32% p	22% p	26% p	26% p	27% p	27% p	33% p	30% p
	Ge	76% s	84% s	81% s	80% s	79% s	79% s	73% s	76% s
		24% p	16% p	19% p	20% p	21% p	21% p	27% p	24% p
	Sn	84% s	88% s	86% s	85% s	84% s	84% s	80% s	81% s
		16% p	12% p	14% p	15% p	16% p	16% p	20% p	19% p

Tabelle 3.37. Die C–E–R-Winkel [°] und die prozentualen s- und p-Anteile des freien Elektronenpaares am Zentralatom nach der NBO-Analyse mit Y_{PhF} als Ylidligand.

	E	(Y _{PhF}) ₂ E	Y _{PhF} ECI	Y _{PhF} EHMDS	Y _{PhF} EC ₆ F ₅	Y _{PhF} EPy	Y _{PhF} EPyr	Y _{PhF} EB ¹	Y _{PhF} EB ²
Winkel	Si	107.7	98.9	102.8	84.2	94.7	94.2	93.4	87.6
	Ge	105.5	96.7	100.1	92.1	93.1	92.2	91.7	85.7
	Sn	101.6	92.8	96.7	88.2	89.6	88.6	89.2	82.8
Hybridisierung	Si	68% s	79% s	74% s	74% s	73% s	73% s	67% s	70% s
		32% p	21% p	26% p	26% p	27% p	27% p	33% p	30% p
	Ge	76% s	85% s	82% s	80% s	79% s	79% s	74% s	77% s
		24% p	15% p	18% p	20% p	21% p	21% p	26% p	23% p
	Sn	84% s	88% s	87% s	86% s	84% s	85% s	80% s	82% s
		16% p	12% p	13% p	14% p	16% p	15% p	20% p	18% p

3.3 Koordinaten der Tetrylene

3.3.1 Koordinaten der Silylene

3.3.1.1 Koordinaten mit Bisylidsubstitution

Y₂Si

E = -4082.96063973

C -4.425165 -2.557985 -0.380552

H -4.395470 -2.848330 0.666705

C -3.331163 -1.913870 -0.932643

C 3.223866 1.929205 -0.890726

O -0.710318 -2.007647 -0.667189

C 3.142770 1.625396 -2.247317

H 2.239652 1.154278 -2.640155

C -2.700327 2.944338 2.861427

H -3.690690 3.234250 2.511102

C -5.538874 -2.798881 -1.180004

H -6.407106 -3.297862 -0.751507

C 1.989447 -5.074160 -1.364776

H 1.852903 -6.110086 -1.061009

C 2.141560 -4.087932 -0.397627

H 2.112651 -4.351279 0.657035

C -2.344844 2.454986 -2.067598

H -2.456582 1.411878 -2.357352

C -2.295711 2.793845 -0.712804

C -5.093393 1.186168 -0.364373

H -4.791033 1.719292 -1.263216
 C -6.387076 0.692691 -0.250498
 H -7.094319 0.841372 -1.064044
 C 1.995416 -4.737621 -2.714388
 H 1.867165 -5.512372 -3.468100
 C 1.482677 -0.137344 -0.121882
 Si -0.058568 -0.193544 -1.280732
 O 2.336417 1.755843 1.544963
 S 1.861980 1.470515 0.177717
 P 2.465423 -1.405791 0.415581
 C 4.216105 1.920344 -3.071490
 H 4.159465 1.680988 -4.133087
 C 4.676688 -0.306530 1.689877
 H 3.996814 -0.142108 2.522592
 C 0.748300 -1.851099 2.503280
 H 0.081799 -1.225278 1.917226
 C -5.867019 -0.186274 1.932735
 H -6.166025 -0.727675 2.828059
 C -4.570244 0.302106 1.825225
 H -3.851849 0.129253 2.624433
 C 2.301912 -2.419669 -2.139625
 H 2.402022 -1.375583 -2.433040
 C -1.909550 2.075242 2.103024
 C -3.322312 -1.518431 -2.267782
 H -2.439151 -1.023268 -2.678511
 C -2.089872 4.118264 -0.330625
 H -2.003502 4.377038 0.721715
 C -4.182816 0.999931 0.677763
 C 2.494247 -3.429520 3.989482
 H 3.177621 -4.039709 4.577202
 C 2.036255 -2.095819 2.036804
 C 2.915575 -2.886759 2.782059
 H 3.927060 -3.070493 2.421540
 C 2.308382 -2.758444 -0.782581
 C 2.150692 -3.410828 -3.101053
 H 2.139947 -3.141793 -4.155190
 C -6.780035 -2.631943 -3.367428

H -6.516921 -3.126987 -4.310239
H -7.263130 -1.680876 -3.629152
H -7.520991 -3.252104 -2.852739
C 1.197892 -3.195716 4.446021
H 0.871230 -3.630054 5.389346
C 5.375490 2.521665 -2.562861
C -6.775958 0.011304 0.898674
H -7.790434 -0.373378 0.985433
C 6.389177 -0.658121 -0.479871
H 7.054754 -0.791292 -1.330376
C -1.552210 0.124084 -0.080043
P -2.433237 1.452218 0.490277
O -2.227050 -2.047896 1.411063
S -1.941986 -1.470195 0.093397
O 0.676717 2.212844 -0.329334
C -5.568323 -2.401570 -2.515524
C -4.438266 -1.765327 -3.048453
H -4.439159 -1.460262 -4.094305
C -2.220914 3.446117 -3.032451
H -2.252657 3.179138 -4.086692
C -2.033529 4.770138 -2.650081
H -1.925395 5.544483 -3.407338
C -1.964523 5.103880 -1.301622
H -1.796107 6.136310 -1.002395
C 5.080466 -1.118070 -0.551479
H 4.728325 -1.610793 -1.454817
C 0.324016 -2.410957 3.702297
H -0.694681 -2.232629 4.039137
C 4.221120 -0.951897 0.536959
C 6.845142 -0.029361 0.674532
H 7.871174 0.330035 0.728780
C 5.418829 2.832748 -1.205079
H 6.311238 3.302813 -0.793090
C 5.988425 0.147552 1.755607
H 6.339255 0.649536 2.655128
C -0.948403 3.056661 4.513819
H -0.571054 3.448729 5.456740

C -2.217307 3.428106 4.070317
H -2.829421 4.100404 4.668564
C 4.349329 2.539368 -0.363513
H 4.379112 2.757217 0.701355
C 6.542587 2.802556 -3.461513
H 7.296371 3.418021 -2.959470
H 6.229439 3.324676 -4.373971
H 7.030531 1.870259 -3.777376
C -0.166718 2.189643 3.759614
H 0.831917 1.904904 4.082191
C -0.653802 1.687154 2.559355
H -0.061715 0.996103 1.967751

³Y₂Si

E = -4082.90541156
C 4.859768 2.174408 0.130888
H 4.835303 2.208169 1.217443
C 3.700360 1.851802 -0.556780
C -3.667937 -1.867943 -0.539401
O 1.240080 2.551265 -0.000834
C -3.652014 -1.824717 -1.929902
H -2.728349 -1.573317 -2.449757
C 2.528648 -3.152101 2.485982
H 3.479370 -3.499821 2.083963
C 6.026333 2.419122 -0.584591
H 6.941719 2.663649 -0.046786
C -1.346920 4.876984 -1.784432
H -0.968806 5.868600 -1.545341
C -1.598893 3.973453 -0.757312
H -1.397696 4.252492 0.273418
C 2.220309 -2.333760 -2.366884
H 2.543751 -1.322384 -2.610381
C 2.032401 -2.693937 -1.026992
C 5.021757 -1.440098 -0.664320
H 4.622829 -1.736473 -1.630823
C 6.386731 -1.223974 -0.524289
H 7.042050 -1.346199 -1.384422

C -1.557192 4.510213 -3.107470
 H -1.355885 5.220304 -3.907449
 C -1.591656 0.013989 -0.251737
 Si 0.002961 0.011868 -1.153480
 O -2.595525 -1.319331 1.773867
 S -2.176909 -1.478840 0.365544
 P -2.378641 1.466946 0.235562
 C -4.819622 -2.089282 -2.628891
 H -4.814108 -2.050709 -3.717717
 C -4.704211 0.898651 1.660794
 H -4.037911 0.756683 2.507744
 C -0.600838 1.779382 2.314778
 H -0.034161 1.012922 1.800179
 C 6.067816 -0.695661 1.803486
 H 6.472972 -0.398764 2.768843
 C 4.700352 -0.901151 1.668139
 H 4.036715 -0.742600 2.514235
 C -2.246499 2.317079 -2.394631
 H -2.557501 1.298983 -2.626096
 C 1.810332 -2.146919 1.829178
 C 3.687087 1.792129 -1.946670
 H 2.761204 1.547630 -2.465813
 C 1.552919 -3.962541 -0.709879
 H 1.347700 -4.226025 0.324069
 C 4.171238 -1.287334 0.433145
 C -2.057422 3.758627 3.613876
 H -2.628485 4.530643 4.126154
 C -1.826362 2.187920 1.801227
 C -2.560136 3.184887 2.453480
 H -3.522088 3.506853 2.056792
 C -2.062856 2.695290 -1.059025
 C -2.006280 3.227633 -3.413155
 H -2.152573 2.930742 -4.449734
 C 7.326475 2.542750 -2.737748
 H 7.142118 2.974031 -3.727986
 H 7.844894 1.585516 -2.891448
 H 8.015439 3.202212 -2.198819

C -0.822622 3.351342 4.117512
 H -0.430066 3.812497 5.022159
 C -6.007226 -2.407003 -1.959254
 C 6.912192 -0.857818 0.710750
 H 7.982615 -0.692986 0.819636
 C -6.396294 1.176310 -0.533536
 H -7.053785 1.281050 -1.394295
 C 1.597249 0.003530 -0.251856
 P 2.365909 -1.454278 0.251884
 O 2.612626 1.348420 1.760268
 S 2.201171 1.496200 0.348432
 O -1.199134 -2.524220 0.032341
 C 6.050474 2.339785 -1.977232
 C 4.859945 2.031464 -2.645968
 H 4.856395 1.979778 -3.734254
 C 1.968826 -3.253227 -3.374640
 H 2.118443 -2.970440 -4.414683
 C 1.504546 -4.526573 -3.053547
 H 1.294711 -5.243786 -3.844958
 C 1.290142 -4.875048 -1.726158
 H 0.900094 -5.859121 -1.475345
 C -5.034379 1.408798 -0.676974
 H -4.640064 1.700133 -1.646899
 C -0.091952 2.365024 3.466942
 H 0.885636 2.052121 3.825415
 C -4.181159 1.278859 0.421369
 C -6.915968 0.816292 0.705718
 H -7.984048 0.638566 0.817263
 C -5.985418 -2.469238 -0.565707
 H -6.898421 -2.720886 -0.027133
 C -6.068771 0.676752 1.799415
 H -6.469311 0.384573 2.768126
 C 0.804842 -3.261106 4.168694
 H 0.411235 -3.703090 5.082409
 C 2.025089 -3.701552 3.657686
 H 2.584006 -4.480350 4.173077
 C -4.824328 -2.198871 0.149440

H -4.802013 -2.219568 1.236352
 C -7.277964 -2.638663 -2.720409
 H -7.959805 -3.298819 -2.173352
 H -7.084625 -3.082864 -3.703206
 H -7.808578 -1.691009 -2.890752
 C 0.089643 -2.266487 3.513753
 H -0.877464 -1.928993 3.878135
 C 0.599432 -1.705589 2.349771
 H 0.043569 -0.934264 1.830507

(Y_{Ph})₂Si

E = -2905.76188502
 P 2.954755 0.325352 -0.009650
 P -2.934264 0.459325 -0.055550
 C 1.487190 -0.465577 -0.423282
 C 1.551602 -1.919561 -0.644785
 C 2.449795 -2.774469 0.019350
 H 3.129582 -2.368268 0.765728
 C 2.478726 -4.140739 -0.233878
 H 3.188128 -4.768149 0.304236
 C 1.603312 -4.708018 -1.151751
 H 1.616685 -5.779402 -1.341877
 C 0.703496 -3.881360 -1.820565
 H 0.001130 -4.306411 -2.535895
 C 0.686600 -2.517036 -1.579410
 H -0.023823 -1.879896 -2.103735
 C 3.526514 -0.006153 1.704858
 C 4.809744 -0.430935 2.050236
 H 5.571445 -0.557044 1.284975
 C 5.115198 -0.721206 3.376794
 H 6.116236 -1.060502 3.636353
 C 4.147231 -0.585790 4.365074
 H 4.389571 -0.815992 5.400858
 C 2.862533 -0.170440 4.024676
 H 2.096493 -0.076263 4.791980
 C 2.550426 0.105005 2.700198
 H 1.537160 0.397813 2.418365

C 2.815655 2.135283 -0.118082
 C 2.986948 2.982094 0.973874
 H 3.185269 2.571755 1.960857
 C 2.887023 4.360593 0.804195
 H 3.009511 5.018395 1.662541
 C 2.631367 4.893194 -0.452288
 H 2.551088 5.971020 -0.581029
 C 2.485145 4.047593 -1.550415
 H 2.288823 4.462056 -2.537117
 C 2.578993 2.675476 -1.386263
 H 2.448297 2.007473 -2.236101
 C 4.377854 -0.027612 -1.095089
 C 4.266451 -0.936847 -2.147553
 H 3.340889 -1.486899 -2.292095
 C 5.338606 -1.130597 -3.012820
 H 5.246601 -1.845695 -3.827805
 C 6.517342 -0.413828 -2.842318
 H 7.352788 -0.568208 -3.522780
 C 6.623988 0.513527 -1.809570
 H 7.537142 1.092355 -1.685036
 C 5.556932 0.710181 -0.942596
 H 5.631597 1.454097 -0.149675
 C -1.449220 -0.389033 0.136096
 C -1.547224 -1.835327 0.403346
 C -0.736667 -2.421323 1.389200
 H -0.053518 -1.780218 1.944827
 C -0.765681 -3.785706 1.633133
 H -0.107640 -4.208943 2.390455
 C -1.624878 -4.615026 0.915633
 H -1.647378 -5.685633 1.109891
 C -2.442512 -4.057610 -0.059700
 H -3.110998 -4.691783 -0.640753
 C -2.394670 -2.692341 -0.316562
 H -2.999111 -2.280872 -1.124825
 C -4.262166 -0.205643 1.010499
 C -4.324597 0.185952 2.349679
 H -3.644654 0.945498 2.727032

C -5.257203 -0.383820 3.207256
 H -5.297835 -0.065337 4.246985
 C -6.133824 -1.356735 2.738937
 H -6.862038 -1.805114 3.412146
 C -6.076046 -1.755311 1.408861
 H -6.754383 -2.520196 1.036275
 C -5.146137 -1.183892 0.548232
 H -5.111520 -1.504223 -0.489748
 C -2.770942 2.226242 0.370860
 C -3.367396 3.232245 -0.386764
 H -3.913062 2.986388 -1.293575
 C -3.245243 4.564532 -0.001195
 H -3.706124 5.342901 -0.606160
 C -2.531783 4.899095 1.141907
 H -2.434269 5.941821 1.438582
 C -1.932499 3.898183 1.902496
 H -1.357724 4.154791 2.790088
 C -2.045148 2.571256 1.516787
 H -1.545632 1.787019 2.081799
 C -3.676098 0.443969 -1.732574
 C -5.013307 0.777216 -1.971789
 H -5.665804 1.038185 -1.139398
 C -5.511844 0.770414 -3.268452
 H -6.553290 1.029224 -3.450280
 C -4.680607 0.429668 -4.333057
 H -5.074475 0.420888 -5.347766
 C -3.351297 0.096492 -4.099782
 H -2.701052 -0.173285 -4.929559
 C -2.850058 0.102580 -2.801960
 H -1.811771 -0.161474 -2.598269
 Si 0.030041 0.667488 -0.217898

$^3(Y_{Ph})_2Si$

E = -2905.70713866
 P 2.606626 0.456204 -0.103103
 P -2.656625 0.321122 -0.154571
 C 1.795072 -0.552514 -1.222852

C 2.113545 -1.974842 -1.385480
 C 3.058181 -2.661300 -0.597059
 H 3.637517 -2.123264 0.147743
 C 3.257718 -4.031661 -0.718050
 H 3.992061 -4.517438 -0.076377
 C 2.523419 -4.781193 -1.627853
 H 2.669928 -5.856124 -1.711206
 C 1.590595 -4.123392 -2.427815
 H 0.998595 -4.685086 -3.149155
 C 1.398305 -2.757723 -2.315202
 H 0.652252 -2.263004 -2.938587
 C 2.128212 0.177544 1.634159
 C 2.824431 -0.739729 2.428530
 H 3.791716 -1.118858 2.105105
 C 2.285002 -1.178563 3.632363
 H 2.833742 -1.898148 4.236864
 C 1.048699 -0.704998 4.058943
 H 0.621859 -1.057538 4.995807
 C 0.353988 0.218209 3.283136
 H -0.615480 0.587825 3.606696
 C 0.886612 0.652673 2.077330
 H 0.316839 1.341732 1.459882
 C 2.307248 2.210770 -0.457098
 C 2.347314 3.164798 0.563406
 H 2.419693 2.850332 1.602581
 C 2.306630 4.522777 0.250414
 H 2.334652 5.259663 1.050926
 C 2.243138 4.933131 -1.074624
 H 2.221223 5.994172 -1.316632
 C 2.207686 3.982317 -2.096206
 H 2.160244 4.298774 -3.136038
 C 2.243258 2.629940 -1.791869
 H 2.233250 1.881552 -2.582065
 C 4.432529 0.367546 -0.132452
 C 5.051884 -0.151461 -1.269944
 H 4.437814 -0.568271 -2.066728
 C 6.438430 -0.143165 -1.368448

H 6.919268 -0.557375 -2.252349
 C 7.208234 0.389245 -0.339240
 H 8.293810 0.394211 -0.418447
 C 6.592465 0.917532 0.791717
 H 7.193711 1.339433 1.594818
 C 5.206726 0.908709 0.895793
 H 4.723993 1.323938 1.779876
 C -1.262327 -0.546922 -0.575624
 C -1.185116 -1.994693 -0.230759
 C -0.239761 -2.455946 0.698565
 H 0.409991 -1.734912 1.183093
 C -0.095080 -3.809051 0.972940
 H 0.669236 -4.132059 1.677647
 C -0.905071 -4.745298 0.339343
 H -0.785767 -5.807027 0.547408
 C -1.857771 -4.310708 -0.576346
 H -2.491904 -5.032480 -1.089208
 C -1.990108 -2.956810 -0.861696
 H -2.713767 -2.635895 -1.606277
 C -2.991009 0.334546 1.638878
 C -3.083911 1.526091 2.364766
 H -3.026806 2.483197 1.850464
 C -3.258900 1.494318 3.744584
 H -3.337361 2.427993 4.298568
 C -3.338819 0.276426 4.413081
 H -3.476475 0.253631 5.492425
 C -3.244608 -0.913629 3.694885
 H -3.306153 -1.869817 4.210953
 C -3.073195 -0.890235 2.316933
 H -3.002286 -1.825756 1.764949
 C -2.575993 2.055077 -0.674012
 C -3.688157 2.683441 -1.237502
 H -4.605749 2.124209 -1.401913
 C -3.627329 4.027245 -1.594289
 H -4.498146 4.506162 -2.037319
 C -2.459490 4.751174 -1.385831
 H -2.412735 5.802054 -1.665997

C -1.350642 4.134301 -0.815083
H -0.434097 4.691943 -0.643560
C -1.405722 2.791770 -0.459452
H -0.532473 2.316759 -0.021591
C -4.217174 -0.297832 -0.888124
C -5.402465 -0.448181 -0.169971
H -5.428597 -0.216970 0.892922
C -6.552976 -0.896494 -0.813882
H -7.474430 -1.022875 -0.248654
C -6.525068 -1.182237 -2.173836
H -7.425860 -1.532616 -2.674422
C -5.343821 -1.025499 -2.896363
H -5.320564 -1.250398 -3.960928
C -4.192344 -0.591321 -2.254505
H -3.253477 -0.486883 -2.800493
Si 0.104709 0.067872 -1.646102

(Y_{PhF})₂Si

E = -3899.58524078
P -2.956785 -0.891816 -0.132779
P 2.837423 -1.241497 -0.021376
C -1.520108 -0.092021 -0.649391
C -1.454189 1.359938 -0.729690
C -2.186622 2.253645 0.063965
C -2.054149 3.632428 -0.002097
C -1.125871 4.189283 -0.870711
C -0.369491 3.345178 -1.673954
C -0.558690 1.974301 -1.620363
C -3.117354 -1.131721 1.676716
C -3.989768 -0.407327 2.488228
H -4.682370 0.304806 2.047654
C -3.957464 -0.573072 3.869440
H -4.637221 0.002211 4.494763
C -3.056470 -1.457902 4.448763
H -3.032307 -1.582063 5.529714
C -2.178965 -2.178781 3.643156
H -1.469607 -2.871434 4.092125

C -2.203952 -2.012514 2.265922
 H -1.506467 -2.567145 1.633285
 C -3.043330 -2.575041 -0.824597
 C -3.676034 -3.607067 -0.132199
 H -4.024573 -3.451721 0.886447
 C -3.854860 -4.846099 -0.740207
 H -4.340101 -5.650419 -0.190852
 C -3.414493 -5.054411 -2.040924
 H -3.552509 -6.024809 -2.514104
 C -2.798926 -4.018899 -2.740554
 H -2.454259 -4.177846 -3.760305
 C -2.616199 -2.783217 -2.138726
 H -2.126185 -1.970764 -2.671854
 C -4.503977 -0.145605 -0.729055
 C -4.465105 0.760921 -1.788978
 H -3.508855 1.055697 -2.213531
 C -5.648716 1.272908 -2.309322
 H -5.611460 1.985906 -3.130383
 C -6.873107 0.872005 -1.787522
 H -7.797788 1.274990 -2.196096
 C -6.916622 -0.055725 -0.750985
 H -7.873740 -0.386390 -0.352688
 C -5.737294 -0.567410 -0.225747
 H -5.776611 -1.305854 0.573459
 C 1.391004 -0.302148 0.014366
 C 1.521270 1.115450 0.342534
 C 0.709986 1.703819 1.320503
 C 0.726009 3.066289 1.572972
 C 1.608118 3.893495 0.887898
 C 2.454876 3.345077 -0.065805
 C 2.381150 1.986361 -0.334067
 C 4.131877 -0.461628 0.998953
 C 4.013968 -0.510998 2.390485
 H 3.208687 -1.078613 2.850385
 C 4.923382 0.162939 3.194598
 H 4.823354 0.116868 4.277045
 C 5.955381 0.896040 2.617252

H 6.665807 1.426945 3.247960
 C 6.073955 0.953664 1.233678
 H 6.873650 1.532904 0.776704
 C 5.167348 0.278566 0.424039
 H 5.252832 0.347904 -0.656883
 C 2.515064 -2.889454 0.697415
 C 3.067097 -4.062349 0.185792
 H 3.680016 -4.036222 -0.710641
 C 2.808153 -5.283517 0.801546
 H 3.233081 -6.194918 0.385817
 C 2.003936 -5.340993 1.932167
 H 1.802224 -6.297546 2.410424
 C 1.445786 -4.172632 2.444657
 H 0.805034 -4.213778 3.323398
 C 1.690308 -2.954805 1.827405
 H 1.215231 -2.045061 2.192978
 C 3.613986 -1.523857 -1.644240
 C 4.883817 -2.098472 -1.763768
 H 5.446286 -2.371837 -0.871404
 C 5.436722 -2.307021 -3.020629
 H 6.424919 -2.753738 -3.111230
 C 4.728295 -1.937184 -4.161264
 H 5.163907 -2.097992 -5.145697
 C 3.473853 -1.349748 -4.043695
 H 2.928234 -1.042824 -4.933544
 C 2.916056 -1.138564 -2.787335
 H 1.950776 -0.645198 -2.678647
 Si -0.084774 -1.274551 -0.503863
 F 3.154036 1.505453 -1.310352
 F 3.288020 4.122489 -0.739461
 F 1.612192 5.196170 1.120624
 F -0.122838 3.593737 2.443945
 F -0.155176 0.959550 2.001802
 F 0.204204 1.224671 -2.414874
 F 0.560038 3.854858 -2.469693
 F -0.932320 5.498277 -0.907391
 F -2.777890 4.412434 0.784829

F -3.054770 1.768871 0.955277

$^3(Y_{PhF})_2Si$

E = -3899.52249077

P -2.770086 -1.091896 -0.094947

P 2.916165 -1.002642 0.041525

C -1.556993 -0.045501 -0.727702

C -1.637642 1.386351 -0.900332

C -2.582361 2.207539 -0.262267

C -2.569337 3.591394 -0.330762

C -1.582036 4.238901 -1.063121

C -0.634783 3.468909 -1.728022

C -0.693197 2.087751 -1.673204

C -3.013171 -1.091032 1.709854

C -4.132829 -0.512757 2.310439

H -4.931509 -0.104907 1.695651

C -4.218414 -0.435776 3.695715

H -5.092716 0.020244 4.155651

C -3.188139 -0.927882 4.489673

H -3.256878 -0.861293 5.573820

C -2.067005 -1.499808 3.896151

H -1.255325 -1.880378 4.513262

C -1.979277 -1.583281 2.513546

H -1.102670 -2.021252 2.037833

C -2.225665 -2.757108 -0.541897

C -2.409512 -3.869728 0.296395

H -2.834782 -3.739934 1.288915

C -2.043893 -5.134846 -0.134966

H -2.184785 -5.987224 0.527499

C -1.501619 -5.322116 -1.408712

H -1.211486 -6.317625 -1.738266

C -1.355607 -4.232646 -2.261350

H -0.959070 -4.374213 -3.264893

C -1.730440 -2.960751 -1.851835

H -1.660724 -2.118849 -2.536321

C -4.417127 -0.896948 -0.837984

C -4.613415 0.003506 -1.884299

H -3.791861 0.634176 -2.216336
 C -5.856883 0.088121 -2.501769
 H -6.008314 0.795582 -3.314480
 C -6.901512 -0.727530 -2.082395
 H -7.873715 -0.658501 -2.566693
 C -6.704552 -1.636848 -1.046140
 H -7.519244 -2.281305 -0.722054
 C -5.465119 -1.724767 -0.426954
 H -5.308692 -2.441600 0.378898
 C 1.488443 -0.066342 0.156795
 C 1.426929 1.346822 0.495745
 C 0.439724 1.835603 1.367074
 C 0.234410 3.189608 1.576587
 C 1.063724 4.122505 0.965694
 C 2.080203 3.682822 0.127665
 C 2.231894 2.324265 -0.104427
 C 4.151332 -0.555801 1.292822
 C 4.215223 -1.222849 2.518612
 H 3.559777 -2.068045 2.714983
 C 5.124762 -0.814154 3.485703
 H 5.173589 -1.341857 4.436039
 C 5.970808 0.263505 3.239980
 H 6.679791 0.583446 4.001133
 C 5.913128 0.927006 2.019784
 H 6.575488 1.767242 1.821619
 C 5.011162 0.518701 1.043682
 H 4.977139 1.031757 0.085730
 C 2.368393 -2.710699 0.319345
 C 2.735825 -3.778469 -0.498817
 H 3.411785 -3.616174 -1.335198
 C 2.217764 -5.046999 -0.258713
 H 2.501249 -5.875612 -0.904023
 C 1.333904 -5.254281 0.798536
 H 0.922480 -6.246480 0.973980
 C 0.959709 -4.196141 1.615905
 H 0.256951 -4.355289 2.431755
 C 1.461600 -2.920314 1.374731

H 1.176062 -2.077730 2.001650
 C 3.821278 -1.017269 -1.536166
 C 5.113591 -1.542148 -1.616219
 H 5.608328 -1.914636 -0.719692
 C 5.768714 -1.581897 -2.841837
 H 6.776499 -1.987634 -2.905745
 C 5.136688 -1.096110 -3.982810
 H 5.652242 -1.124412 -4.941034
 C 3.853790 -0.562830 -3.900193
 H 3.366741 -0.169787 -4.790132
 C 3.193911 -0.519521 -2.677621
 H 2.201222 -0.080034 -2.589789
 Si 0.030156 -0.955700 -0.529548
 F 3.161299 1.952431 -0.987181
 F 2.862011 4.559639 -0.481277
 F 0.856728 5.415731 1.149060
 F -0.759121 3.602604 2.349590
 F -0.381231 0.990910 1.980636
 F 0.249656 1.409454 -2.333558
 F 0.338930 4.062464 -2.404262
 F -1.521913 5.561485 -1.103235
 F -3.483470 4.297180 0.315841
 F -3.531691 1.634908 0.485691

3.3.1.2 Koordinaten der chlorido(ylid)substituierten Silylene

YSiCl

E = -2646.96958766
 C -3.203311 0.720140 -1.296143
 H -2.835752 0.852505 -2.310816
 C -2.415484 1.127445 -0.233191
 O -0.787209 3.127641 0.246068
 C 2.767483 -1.625334 -1.802360
 H 2.273881 -2.573977 -1.592477
 C -4.440905 0.140814 -1.031787
 H -5.065274 -0.187908 -1.861314
 C 0.972031 -0.863245 2.778034

H 0.171193 -0.126233 2.769808
 C 1.602935 -1.209260 1.579237
 C -1.191531 -2.171828 0.189103
 H -1.039054 -2.144782 1.266729
 C -2.280205 -2.849443 -0.342533
 H -2.977847 -3.355960 0.321198
 Si 0.508276 2.616108 1.593509
 C -1.595636 -2.216123 -2.565963
 H -1.758069 -2.224597 -3.641807
 C -0.506623 -1.529243 -2.040950
 H 0.166123 -0.985405 -2.700700
 C 2.346364 -0.454016 -1.162565
 C -2.841907 0.979558 1.083670
 H -2.201835 1.313936 1.901415
 C 2.657712 -2.124347 1.587404
 H 3.172627 -2.377265 0.663912
 C -0.293243 -1.521210 -0.660373
 C -6.219397 -0.668087 0.560947
 H -6.866245 0.007692 1.134517
 H -6.099872 -1.580603 1.159347
 H -6.744043 -0.935551 -0.361716
 C -2.477716 -2.879073 -1.720371
 H -3.330849 -3.412695 -2.134912
 C 0.349333 1.061087 0.421004
 P 0.998449 -0.459195 0.045899
 O -0.632501 1.847648 -1.990301
 S -0.792190 1.791178 -0.540358
 C -4.892514 -0.032617 0.275202
 C -4.074691 0.401213 1.328469
 H -4.416667 0.282495 2.355805
 C 1.388834 -1.440730 3.971678
 H 0.901485 -1.161152 4.903261
 C 2.431935 -2.360191 3.975110
 H 2.759617 -2.807611 4.911497
 C 3.066732 -2.698995 2.784079
 H 3.891861 -3.408126 2.787037
 C 4.412310 -0.353572 -3.016168

H 5.220895 -0.313515 -3.743704
 C 3.802395 -1.572307 -2.726006
 H 4.129549 -2.481026 -3.227368
 C 3.983447 0.810856 -2.390032
 H 4.451694 1.764384 -2.624585
 C 2.945733 0.768476 -1.464304
 H 2.594956 1.679249 -0.979096
 Cl 2.222193 3.608094 0.712871

³YSiCl

E = -2646.89377311
 C -3.156385 0.945617 -1.141665
 H -2.791842 1.015883 -2.163701
 C -2.338495 1.367313 -0.103917
 O -0.712387 3.428191 -0.083565
 C 2.449683 -1.595644 -1.978548
 H 1.957181 -2.535326 -1.730318
 C -4.409150 0.422202 -0.846707
 H -5.051733 0.084787 -1.659147
 C 0.791395 -1.237016 2.635311
 H -0.066304 -0.570608 2.711153
 C 1.472610 -1.348549 1.416414
 C -1.439350 -2.028333 0.172562
 H -1.265752 -2.026360 1.245726
 C -2.546662 -2.690872 -0.339869
 H -3.232120 -3.197262 0.336562
 Si 1.327595 2.059541 1.795983
 C -1.902027 -2.048083 -2.570513
 H -2.085676 -2.046941 -3.642995
 C -0.797697 -1.373700 -2.064020
 H -0.139272 -0.821718 -2.729399
 C 2.098585 -0.418362 -1.308611
 C -2.765024 1.292310 1.217332
 H -2.113425 1.642481 2.016316
 C 2.594409 -2.171268 1.327311
 H 3.150917 -2.243004 0.396792
 C -0.553445 -1.375366 -0.688368

C -6.181021 -0.314806 0.783033
 H -6.587986 0.056007 1.729947
 H -6.088848 -1.406640 0.872141
 H -6.913223 -0.115410 -0.007134
 C -2.774589 -2.708131 -1.712465
 H -3.640458 -3.231741 -2.113356
 C 0.398148 1.160170 0.540494
 P 0.839503 -0.422014 -0.009171
 O -0.444251 1.643375 -1.874667
 S -0.718139 2.022116 -0.475905
 C -4.852877 0.306820 0.471636
 C -4.013776 0.757400 1.496675
 H -4.350044 0.690538 2.530677
 C 1.218375 -1.958508 3.740611
 H 0.684363 -1.866634 4.684010
 C 2.336839 -2.782832 3.645653
 H 2.677257 -3.340325 4.516019
 C 3.024433 -2.883622 2.443071
 H 3.907554 -3.514723 2.369167
 C 4.021379 -0.353385 -3.313241
 H 4.774755 -0.326971 -4.098300
 C 3.414203 -1.561018 -2.976231
 H 3.687753 -2.475864 -3.497992
 C 3.658738 0.818416 -2.659714
 H 4.121815 1.764107 -2.932419
 C 2.693519 0.792150 -1.659100
 H 2.389539 1.707656 -1.157323
 Cl 3.052299 3.132407 1.260876

Y_{Ph}SiCl

E = -2058.37585009
 P 0.535194 -0.035511 -0.022218
 C -0.727790 1.128310 -0.165787
 C -2.093722 0.547478 -0.121032
 C -2.709052 0.219785 1.094066
 H -2.185316 0.432766 2.024045
 C -3.967498 -0.370316 1.124510

H -4.424334 -0.617457 2.081511
 C -4.644777 -0.636914 -0.061192
 H -5.630782 -1.097377 -0.038411
 C -4.056152 -0.297446 -1.275439
 H -4.582042 -0.491335 -2.208897
 C -2.796322 0.287273 -1.304012
 H -2.331172 0.544083 -2.253808
 C 0.760286 -0.680100 1.669795
 C 1.161157 -1.993524 1.923328
 H 1.309529 -2.688155 1.098918
 C 1.367068 -2.414371 3.232692
 H 1.673415 -3.440012 3.428681
 C 1.179754 -1.528015 4.288652
 H 1.338671 -1.861679 5.312358
 C 0.785518 -0.216969 4.038082
 H 0.637360 0.477194 4.862782
 C 0.572907 0.206071 2.732036
 H 0.252489 1.226692 2.521435
 C 2.136568 0.660141 -0.504501
 C 3.275662 0.490218 0.282666
 H 3.211063 -0.041433 1.229245
 C 4.494713 1.010120 -0.139481
 H 5.378778 0.882144 0.481605
 C 4.582134 1.693016 -1.346994
 H 5.537279 2.099972 -1.673378
 C 3.448922 1.860404 -2.137699
 H 3.513552 2.399289 -3.080502
 C 2.228217 1.349163 -1.719654
 H 1.336653 1.486730 -2.328115
 C 0.265495 -1.521033 -1.038419
 C -0.835939 -2.341324 -0.761738
 H -1.493315 -2.113889 0.075860
 C -1.093772 -3.448401 -1.559318
 H -1.955491 -4.075987 -1.341874
 C -0.258889 -3.750203 -2.631370
 H -0.465578 -4.618340 -3.254368
 C 0.840460 -2.944501 -2.902889

H 1.500397 -3.180961 -3.735099
 C 1.103789 -1.832483 -2.110297
 H 1.968960 -1.210955 -2.328078
 Si -0.298153 2.890100 -0.145792
 Cl -2.268018 3.711864 -0.125623

³Y_{Ph}SiCl

E = -2058.30841460
 P -0.335285 -0.309527 0.006673
 C 0.537794 1.078539 -0.554181
 C 2.000798 1.118730 -0.529362
 C 2.814566 -0.020403 -0.651534
 H 2.352239 -0.991041 -0.823049
 C 4.199354 0.073278 -0.596693
 H 4.804105 -0.826986 -0.693461
 C 4.812363 1.311110 -0.437142
 H 5.897376 1.385866 -0.398380
 C 4.023602 2.456877 -0.338309
 H 4.493177 3.431766 -0.218213
 C 2.642265 2.363697 -0.384003
 H 2.023753 3.256398 -0.298946
 C -0.448633 -1.720991 -1.141110
 C -0.899418 -2.977816 -0.722315
 H -1.173314 -3.139930 0.319549
 C -0.989198 -4.022407 -1.633065
 H -1.341366 -4.998399 -1.305046
 C -0.625458 -3.820549 -2.962321
 H -0.693570 -4.641377 -3.673729
 C -0.170799 -2.574995 -3.380034
 H 0.118869 -2.417330 -4.416774
 C -0.081553 -1.525082 -2.471983
 H 0.278397 -0.545429 -2.787125
 C -2.029911 0.187119 0.420199
 C -3.132110 -0.627222 0.152584
 H -3.006463 -1.570274 -0.372196
 C -4.406525 -0.215318 0.527318
 H -5.262362 -0.849081 0.303770

C -4.589153 1.002351 1.171509
 H -5.589194 1.323105 1.456686
 C -3.491825 1.816125 1.442434
 H -3.627691 2.778893 1.930112
 C -2.217978 1.412918 1.072028
 H -1.365915 2.066149 1.247948
 C 0.408346 -1.002137 1.525900
 C 1.257902 -2.111176 1.496908
 H 1.435611 -2.641247 0.563974
 C 1.882380 -2.545882 2.659792
 H 2.541948 -3.410591 2.625075
 C 1.668998 -1.876812 3.859583
 H 2.159537 -2.218242 4.768999
 C 0.828807 -0.768827 3.894409
 H 0.658432 -0.240084 4.829877
 C 0.203247 -0.331342 2.734362
 H -0.451134 0.535913 2.772389
 Si -0.464045 2.153234 -1.667126
 Cl -1.053747 4.007697 -0.795390

$Y_{PhF}SiCl$

E = -2555.28314520
 P -1.194303 0.048498 0.079074
 C 0.036260 -0.662930 -0.902035
 C 1.423857 -0.348313 -0.526071
 C 2.233777 -1.265116 0.147349
 C 3.552104 -0.983822 0.477212
 C 4.101125 0.242533 0.122950
 C 3.327159 1.176321 -0.554536
 C 2.013822 0.867797 -0.878391
 C -1.593244 -0.887091 1.588442
 C -2.229432 -0.268373 2.670093
 H -2.461113 0.795173 2.631708
 C -2.557935 -1.011302 3.796131
 H -3.052233 -0.530015 4.637645
 C -2.247900 -2.368414 3.849756
 H -2.500252 -2.947159 4.736267

C -1.609225 -2.982222 2.778558
 H -1.357654 -4.039672 2.824136
 C -1.280484 -2.244121 1.646133
 H -0.763132 -2.709375 0.809372
 C -2.728612 0.221244 -0.863421
 C -3.965530 -0.163951 -0.346685
 H -4.030398 -0.610764 0.642685
 C -5.116364 0.008976 -1.108244
 H -6.078765 -0.302850 -0.708061
 C -5.036343 0.569518 -2.377761
 H -5.939047 0.700023 -2.971422
 C -3.803187 0.956677 -2.894991
 H -3.738276 1.387950 -3.891583
 C -2.649062 0.779476 -2.144837
 H -1.677323 1.060352 -2.547745
 C -0.715248 1.684338 0.703766
 C 0.269200 1.740769 1.696152
 H 0.660811 0.820505 2.128241
 C 0.750962 2.969158 2.127849
 H 1.522349 3.008064 2.894073
 C 0.247238 4.145458 1.580420
 H 0.626330 5.107743 1.918626
 C -0.740996 4.092156 0.604025
 H -1.139527 5.011172 0.179491
 C -1.220823 2.864947 0.160964
 H -1.988843 2.829733 -0.608148
 Si -0.472040 -1.843082 -2.187969
 Cl 1.458847 -2.486136 -2.826401
 F 1.303129 1.778530 -1.533273
 F 3.849100 2.346497 -0.889429
 F 5.355470 0.522336 0.434798
 F 4.290949 -1.872621 1.122843
 F 1.742804 -2.446204 0.498617

³*Y*_{PhF}**SiCl**

E = -2555.21180512

P 1.052560 0.303420 0.170029

C 0.121269 -0.491460 -1.045135
 C -1.342800 -0.457941 -0.889392
 C -2.136291 0.571856 -1.394363
 C -3.501429 0.639191 -1.151785
 C -4.104779 -0.334684 -0.364949
 C -3.343763 -1.370139 0.164568
 C -1.983656 -1.420685 -0.105585
 C 1.599435 1.999973 -0.190369
 C 2.068440 2.821356 0.840621
 H 2.110475 2.444808 1.862302
 C 2.465163 4.122693 0.563531
 H 2.829345 4.761192 1.365889
 C 2.387342 4.610628 -0.738836
 H 2.693849 5.632549 -0.953842
 C 1.907300 3.800041 -1.761186
 H 1.832954 4.185879 -2.775681
 C 1.509773 2.494984 -1.489517
 H 1.108595 1.859473 -2.277210
 C 2.508694 -0.681065 0.590282
 C 3.760093 -0.117679 0.848536
 H 3.905205 0.957264 0.775631
 C 4.832517 -0.939686 1.172704
 H 5.809709 -0.500265 1.362178
 C 4.661413 -2.318531 1.241460
 H 5.506448 -2.958449 1.488092
 C 3.415549 -2.881768 0.982091
 H 3.282684 -3.960770 1.017832
 C 2.339064 -2.069212 0.654353
 H 1.368652 -2.501677 0.415259
 C -0.017081 0.486407 1.626561
 C -0.946505 1.532609 1.617301
 H -0.890801 2.301283 0.847253
 C -1.953913 1.576306 2.571123
 H -2.679693 2.386774 2.555617
 C -2.036529 0.579444 3.539700
 H -2.830007 0.609208 4.283750
 C -1.106240 -0.454337 3.558939

H -1.169476 -1.231349 4.317749
 C -0.098630 -0.507514 2.601742
 H 0.613250 -1.330185 2.604543
 Si 1.034313 -1.097107 -2.489729
 Cl 1.635606 -3.121650 -2.529672
 F -1.275157 -2.396136 0.450104
 F -3.919021 -2.287350 0.925281
 F -5.402238 -0.275811 -0.120303
 F -4.227432 1.634429 -1.637088
 F -1.575253 1.555512 -2.088388

3.3.1.3 hexamethyldisilazan(ylid)substituierten Germylene

YSiHMDS

E = -3060.76630909
 S 0.600033 -1.597672 0.514769
 P 0.624320 1.314130 0.158564
 Si -3.848885 -0.010115 -1.184397
 Si -3.330896 -2.412094 0.618466
 O -0.295001 -2.571787 -0.294350
 O 0.586283 -1.761831 1.969902
 N -2.760287 -1.255275 -0.586120
 C 0.047948 -0.228543 -0.220436
 C 2.246985 -2.015995 -0.018597
 C 2.531411 -1.982813 -1.381093
 H 1.735499 -1.757059 -2.093795
 C 3.823371 -2.243922 -1.802434
 H 4.054890 -2.223709 -2.866671
 C 4.839484 -2.536944 -0.881448
 C 4.517733 -2.574924 0.474217
 H 5.294744 -2.805406 1.201721
 C 3.223384 -2.315828 0.915659
 H 2.961999 -2.331968 1.970944
 C 6.237506 -2.796418 -1.355505
 H 6.261171 -3.602043 -2.099830
 H 6.896380 -3.079547 -0.528514
 H 6.662894 -1.905092 -1.835402

C 2.326810 1.260919 0.783557
 C 3.406069 1.318012 -0.101074
 H 3.234510 1.513206 -1.158067
 C 4.697736 1.123901 0.371119
 H 5.537429 1.170018 -0.319323
 C 4.915790 0.869726 1.722066
 H 5.929205 0.719277 2.089269
 C 3.840575 0.795937 2.601190
 H 4.008878 0.583945 3.655053
 C 2.544591 0.985103 2.136355
 H 1.700889 0.902491 2.818870
 C -0.333776 2.161408 1.443481
 C 0.133324 3.300799 2.106610
 H 1.105129 3.723768 1.853144
 C -0.633830 3.875832 3.111283
 H -0.271567 4.760374 3.631413
 C -1.858415 3.310971 3.461856
 H -2.452994 3.758437 4.256053
 C -2.314961 2.170127 2.812045
 H -3.262598 1.718402 3.098573
 C -1.553941 1.590464 1.802436
 H -1.882945 0.682606 1.295623
 C 0.600894 2.324145 -1.344633
 C 0.798483 1.671750 -2.565101
 H 0.928117 0.591112 -2.580228
 C 0.786032 2.400877 -3.748091
 H 0.928988 1.888563 -4.697136
 C 0.573225 3.774933 -3.718745
 H 0.555457 4.342583 -4.647150
 C 0.369551 4.423942 -2.504717
 H 0.190830 5.496949 -2.482051
 C 0.380935 3.702290 -1.317635
 H 0.197364 4.211157 -0.374306
 C -4.877319 0.775556 0.187336
 H -5.583063 1.486466 -0.264018
 H -4.233235 1.344243 0.868191
 H -5.458034 0.066857 0.786073

C -2.841308 1.413682 -1.896787
 H -3.521469 2.192665 -2.267520
 H -2.189400 1.113410 -2.726953
 H -2.213328 1.869903 -1.120768
 C -4.979921 -0.663487 -2.533161
 H -5.636885 -1.458812 -2.162763
 H -4.375042 -1.081640 -3.348164
 H -5.610037 0.134114 -2.948739
 C -3.075446 -1.702419 2.339884
 H -3.608989 -0.750787 2.463238
 H -2.004197 -1.524159 2.503558
 H -3.426754 -2.392901 3.118006
 C -2.520989 -4.104752 0.540034
 H -3.203381 -4.834863 0.996408
 H -1.565963 -4.133183 1.071122
 H -2.332502 -4.415126 -0.495054
 C -5.160948 -2.788881 0.336551
 H -5.279089 -3.344897 -0.603116
 H -5.827693 -1.921902 0.296553
 H -5.512706 -3.439720 1.148629
 Si -1.166789 -1.273058 -1.430966

³YSiHMDS

E = -3060.70706357
 S 0.882594 -1.637772 0.793889
 P 0.600688 1.148725 0.073240
 Si -4.086256 0.218016 -0.750271
 Si -3.376036 -2.651229 0.209417
 O 0.153088 -2.906170 0.701512
 O 1.079796 -1.029593 2.124380
 N -2.937333 -1.116162 -0.587545
 C 0.136095 -0.481267 -0.252170
 C 2.521566 -1.945518 0.153171
 C 2.689827 -2.230950 -1.198467
 H 1.821533 -2.261323 -1.855006
 C 3.966062 -2.455210 -1.688840
 H 4.103338 -2.672737 -2.747580

C 5.083452 -2.410482 -0.845539
 C 4.880931 -2.143582 0.508029
 H 5.737999 -2.108049 1.179469
 C 3.606906 -1.907873 1.013895
 H 3.441645 -1.675813 2.063334
 C 6.461042 -2.627421 -1.395952
 H 6.503504 -3.523738 -2.026507
 H 7.199663 -2.739293 -0.595538
 H 6.773480 -1.780009 -2.021417
 C 2.376788 1.350588 0.413801
 C 3.271710 1.350862 -0.659486
 H 2.900900 1.299931 -1.680904
 C 4.638442 1.416349 -0.426874
 H 5.329694 1.413824 -1.267056
 C 5.119332 1.485965 0.877306
 H 6.190973 1.541304 1.059421
 C 4.231932 1.472037 1.947683
 H 4.606335 1.509551 2.968720
 C 2.862583 1.393643 1.722272
 H 2.170194 1.336981 2.557965
 C -0.259063 1.879909 1.494304
 C 0.119443 3.109998 2.041656
 H 0.952706 3.666642 1.614221
 C -0.549584 3.610416 3.151447
 H -0.253685 4.567503 3.576289
 C -1.586027 2.879595 3.726276
 H -2.103112 3.268211 4.601527
 C -1.950680 1.648314 3.193433
 H -2.747021 1.066177 3.653067
 C -1.290224 1.144887 2.078742
 H -1.559874 0.175069 1.663376
 C 0.261279 2.154586 -1.399299
 C 0.434152 1.570962 -2.659122
 H 0.752923 0.532784 -2.728426
 C 0.187991 2.310985 -3.808675
 H 0.320274 1.849482 -4.784955
 C -0.240314 3.631727 -3.709922

H -0.444781 4.206294 -4.611299
 C -0.410926 4.214900 -2.460101
 H -0.752971 5.244398 -2.378439
 C -0.159196 3.480293 -1.305985
 H -0.325785 3.937653 -0.334494
 C -4.948697 0.533912 0.891908
 H -5.685316 1.339881 0.773801
 H -4.217058 0.859714 1.640887
 H -5.472640 -0.340401 1.292128
 C -3.196528 1.805519 -1.195589
 H -3.933574 2.616430 -1.281121
 H -2.645746 1.743257 -2.142884
 H -2.485776 2.086437 -0.409453
 C -5.348939 -0.140211 -2.091889
 H -5.979625 -1.003366 -1.853172
 H -4.838462 -0.347977 -3.041167
 H -6.005715 0.726712 -2.243704
 C -2.950915 -2.476026 2.025823
 H -3.462789 -1.606535 2.459854
 H -1.867753 -2.339416 2.131549
 H -3.237513 -3.365016 2.602294
 C -2.497356 -4.092759 -0.591268
 H -2.856696 -5.028635 -0.141094
 H -1.414078 -4.034729 -0.448721
 H -2.719959 -4.126849 -1.665765
 C -5.216194 -3.002865 0.002814
 H -5.450577 -3.209580 -1.049162
 H -5.886640 -2.210222 0.351033
 H -5.454947 -3.909532 0.575338
 Si -1.316707 -0.968216 -1.249992

Y_{Ph}SiHMDS

E = -2472.17006049
 P 1.667797 0.159234 0.021429
 C 0.000005 -0.137615 -0.306101
 C -0.387880 -1.488114 -0.750696
 C 0.206460 -2.663268 -0.257815

H 1.004167 -2.596378 0.479019
 C -0.228455 -3.919645 -0.659656
 H 0.250696 -4.807471 -0.249881
 C -1.277695 -4.048319 -1.564263
 H -1.625810 -5.032623 -1.871006
 C -1.864882 -2.897053 -2.082274
 H -2.674052 -2.976435 -2.807475
 C -1.419372 -1.641637 -1.691806
 H -1.862285 -0.748465 -2.120264
 C 2.293130 -0.633820 1.547443
 C 3.429171 -1.441584 1.601268
 H 4.023683 -1.614786 0.707661
 C 3.793522 -2.048050 2.799797
 H 4.675805 -2.684148 2.834398
 C 3.032502 -1.848312 3.945625
 H 3.319548 -2.326547 4.880121
 C 1.895510 -1.045813 3.894436
 H 1.290935 -0.894340 4.786353
 C 1.520580 -0.449745 2.698148
 H 0.616760 0.160345 2.643271
 C 1.990862 1.934409 0.227996
 C 2.587878 2.466812 1.367978
 H 2.840669 1.823657 2.207283
 C 2.850587 3.832490 1.438373
 H 3.307261 4.246757 2.334891
 C 2.528383 4.661446 0.372170
 H 2.732657 5.728776 0.431703
 C 1.946369 4.127314 -0.775879
 H 1.694723 4.774513 -1.613462
 C 1.679172 2.769620 -0.850728
 H 1.214171 2.348025 -1.740515
 C 2.813650 -0.316243 -1.310125
 C 2.371972 -1.016359 -2.433109
 H 1.332505 -1.322312 -2.509784
 C 3.266242 -1.316630 -3.456112
 H 2.917053 -1.864662 -4.328761
 C 4.594502 -0.917445 -3.367544

H 5.289332 -1.154679 -4.170992
 C 5.034497 -0.202486 -2.256572
 H 6.069686 0.126558 -2.191609
 C 4.146723 0.102512 -1.233976
 H 4.485149 0.681731 -0.375031
 Si -1.107207 1.184479 0.331862
 N -2.760108 0.495562 0.113402
 Si -3.753644 1.288309 -1.093021
 Si -3.431023 -0.434669 1.442889
 C -2.609145 2.224535 -2.263612
 H -2.072220 3.031027 -1.746717
 H -1.857318 1.561559 -2.713635
 H -3.191284 2.674900 -3.078871
 C -4.758021 0.083667 -2.135249
 H -5.656348 -0.267153 -1.616154
 H -5.084015 0.588592 -3.054939
 H -4.171966 -0.797469 -2.422257
 C -4.932842 2.521297 -0.302274
 H -5.532795 3.051597 -1.053608
 H -5.626170 2.021690 0.386991
 H -4.369223 3.265143 0.275706
 C -5.131122 -1.116192 1.026219
 H -5.508720 -1.672804 1.894383
 H -5.862218 -0.332312 0.793208
 H -5.083778 -1.808415 0.176862
 C -3.587128 0.684120 2.950247
 H -3.988495 0.149414 3.821291
 H -2.607638 1.097938 3.226460
 H -4.248185 1.533652 2.734006
 C -2.337136 -1.888006 1.896107
 H -1.297356 -1.586049 2.078046
 H -2.716753 -2.363741 2.810664
 H -2.326376 -2.637511 1.095070

³Y_{Ph}SiHMDS

E = -2472.11061784

P -1.696551 -0.208925 -0.090899

C -0.230296 0.483146 -0.648177
 C 0.131330 1.887758 -0.481702
 C -0.489085 2.738335 0.454647
 H -1.267139 2.341697 1.103865
 C -0.110377 4.066753 0.593914
 H -0.617756 4.689270 1.329599
 C 0.920819 4.597276 -0.174773
 H 1.225697 5.634654 -0.054471
 C 1.559789 3.770385 -1.096249
 H 2.368865 4.162639 -1.711537
 C 1.171391 2.448654 -1.249355
 H 1.669014 1.819903 -1.986112
 C -1.729239 -0.674913 1.665529
 C -2.190794 0.213222 2.643903
 H -2.758237 1.096511 2.354377
 C -1.918826 -0.017793 3.985888
 H -2.284824 0.678548 4.737612
 C -1.170474 -1.129780 4.367271
 H -0.949332 -1.302600 5.418681
 C -0.708038 -2.018164 3.402817
 H -0.120046 -2.886319 3.694766
 C -0.986762 -1.799581 2.058271
 H -0.612851 -2.489822 1.303796
 C -2.013544 -1.741759 -1.015718
 C -2.744247 -2.791093 -0.451653
 H -3.082015 -2.727296 0.580922
 C -3.033353 -3.921187 -1.206709
 H -3.595664 -4.738983 -0.760340
 C -2.604431 -4.007887 -2.527745
 H -2.828891 -4.896265 -3.115027
 C -1.896056 -2.955811 -3.099334
 H -1.568624 -3.016038 -4.135265
 C -1.606352 -1.820908 -2.351954
 H -1.061677 -0.988667 -2.793475
 C -3.160795 0.820566 -0.399000
 C -3.092464 1.844920 -1.345280
 H -2.145805 2.061747 -1.834649

C -4.231056 2.581471 -1.649643
 H -4.172464 3.384626 -2.381304
 C -5.438937 2.294958 -1.021805
 H -6.328227 2.874398 -1.262708
 C -5.513153 1.264565 -0.089513
 H -6.458985 1.033015 0.396190
 C -4.378042 0.525594 0.220294
 H -4.437089 -0.284745 0.945827
 Si 1.098884 -0.770332 -0.868956
 N 2.705045 -0.401101 -0.260326
 Si 4.053487 -0.301346 -1.401348
 Si 2.919100 -0.435011 1.504411
 C 3.431361 -0.429111 -3.168197
 H 2.927180 -1.384186 -3.359253
 H 2.729695 0.373001 -3.428099
 H 4.292842 -0.356302 -3.847502
 C 4.959951 1.335023 -1.234894
 H 5.592160 1.383513 -0.342491
 H 5.605072 1.491230 -2.109789
 H 4.241327 2.162972 -1.187389
 C 5.224046 -1.743645 -1.113511
 H 6.092444 -1.690608 -1.783210
 H 5.597677 -1.780388 -0.083256
 H 4.702199 -2.689446 -1.309719
 C 4.601566 0.244390 2.000949
 H 4.710724 0.107372 3.085478
 H 5.451130 -0.252724 1.519442
 H 4.668388 1.319435 1.796319
 C 2.810740 -2.220078 2.078164
 H 2.792038 -2.296405 3.173270
 H 1.904832 -2.695372 1.683155
 H 3.674451 -2.788567 1.707789
 C 1.658644 0.655940 2.348761
 H 0.627288 0.409144 2.082264
 H 1.759465 0.565130 3.438875
 H 1.829599 1.703667 2.070457

Y_{PhF}SiHMDS

E = -2969.07661631

P -1.869213 -0.305989 -0.137902

C -0.192410 -0.075901 -0.464557

C 0.455203 1.221912 -0.323319

C 0.088468 2.218367 0.586494

C 0.755827 3.426862 0.709661

C 1.840909 3.698013 -0.113463

C 2.223249 2.751767 -1.056732

C 1.525333 1.559435 -1.165909

C -2.245571 -0.714057 1.603756

C -2.828188 0.175151 2.505573

H -3.174830 1.148906 2.169307

C -2.933578 -0.169181 3.849979

H -3.381004 0.533382 4.550072

C -2.457853 -1.394600 4.299891

H -2.536480 -1.655898 5.353376

C -1.869187 -2.283466 3.403365

H -1.485575 -3.240692 3.750608

C -1.758472 -1.942015 2.063546

H -1.273455 -2.626474 1.363228

C -2.507022 -1.715185 -1.096611

C -3.517868 -2.535011 -0.593896

H -3.868439 -2.411081 0.428439

C -4.074837 -3.524117 -1.398219

H -4.855652 -4.167424 -0.997736

C -3.633055 -3.691192 -2.704944

H -4.067066 -4.468538 -3.330878

C -2.636494 -2.862786 -3.214001

H -2.288950 -2.990135 -4.237042

C -2.076754 -1.875388 -2.416482

H -1.291650 -1.229602 -2.804437

C -2.945814 1.066807 -0.637239

C -2.465420 2.032321 -1.522678

H -1.435471 1.987135 -1.867334

C -3.309532 3.041046 -1.973954

H -2.928340 3.795427 -2.659009

C -4.634809 3.082109 -1.556664
 H -5.292726 3.873383 -1.910597
 C -5.124711 2.103588 -0.696408
 H -6.166359 2.122957 -0.382596
 C -4.285745 1.095272 -0.241051
 H -4.676299 0.321998 0.418808
 Si 0.747739 -1.668529 -0.601980
 N 2.381560 -1.216259 -0.028702
 Si 3.718134 -1.661555 -1.098373
 Si 2.643380 -1.078585 1.712080
 C 3.039832 -2.161431 -2.780657
 H 2.421894 -3.065903 -2.719775
 H 2.440773 -1.367537 -3.242337
 H 3.884168 -2.374921 -3.450898
 C 4.902479 -0.226183 -1.340537
 H 5.469105 0.010065 -0.433753
 H 5.626535 -0.479167 -2.127120
 H 4.367291 0.676636 -1.655222
 C 4.662261 -3.153767 -0.443597
 H 5.477616 -3.420370 -1.129238
 H 5.103419 -2.986058 0.545968
 H 3.990530 -4.018909 -0.368094
 C 4.377516 -0.468189 2.102038
 H 4.492502 -0.426593 3.193449
 H 5.176895 -1.105459 1.708580
 H 4.527175 0.546594 1.712522
 C 2.375539 -2.769252 2.498268
 H 2.560265 -2.745417 3.580383
 H 1.337287 -3.094762 2.342301
 H 3.028127 -3.530892 2.054640
 C 1.484819 0.109855 2.587534
 H 0.427763 -0.033911 2.340422
 H 1.598057 -0.054106 3.668127
 H 1.751769 1.152799 2.383661
 F 1.884065 0.731997 -2.143417
 F -0.934489 1.992375 1.415207
 F 0.370139 4.316923 1.611619

F 2.496373 4.842548 -0.006452

F 3.236596 3.007809 -1.872256

³Y_{PhF}SiHMDS

E = -2969.01618544

P -1.889361 -0.340779 -0.165830

C -0.298292 0.111727 -0.631877

C 0.323969 1.407810 -0.470894

C -0.081085 2.379181 0.459194

C 0.576039 3.583687 0.648514

C 1.703099 3.885810 -0.105835

C 2.143162 2.957896 -1.042287

C 1.450255 1.774255 -1.231923

C -2.125141 -0.869436 1.558791

C -2.598152 0.006626 2.540339

H -3.001695 0.975322 2.256843

C -2.523644 -0.342722 3.882590

H -2.892705 0.346995 4.638788

C -1.964779 -1.561319 4.259888

H -1.897933 -1.826435 5.313341

C -1.496539 -2.440389 3.290027

H -1.060748 -3.394562 3.579613

C -1.580579 -2.103587 1.943618

H -1.209561 -2.790291 1.184453

C -2.342285 -1.782430 -1.177042

C -3.247029 -2.742804 -0.712847

H -3.653274 -2.668655 0.293864

C -3.621288 -3.799185 -1.533097

H -4.319599 -4.547504 -1.163604

C -3.103765 -3.902356 -2.821552

H -3.394987 -4.734650 -3.459406

C -2.221660 -2.937263 -3.295359

H -1.823954 -3.008525 -4.305641

C -1.845621 -1.873994 -2.483359

H -1.166171 -1.108237 -2.851367

C -3.156751 0.902750 -0.537203

C -2.854845 1.962736 -1.392983

H -1.849563 2.063492 -1.795083
 C -3.841982 2.880381 -1.733763
 H -3.601228 3.709524 -2.395855
 C -5.131418 2.738198 -1.233066
 H -5.901840 3.458513 -1.501319
 C -5.439379 1.671737 -0.393597
 H -6.449895 1.553513 -0.007792
 C -4.456421 0.753651 -0.047207
 H -4.699688 -0.082382 0.607080
 Si 0.796343 -1.379202 -0.721461
 N 2.396917 -1.214015 -0.028030
 Si 3.814318 -1.485218 -1.065695
 Si 2.501524 -1.192354 1.748573
 C 3.287574 -1.860399 -2.825219
 H 2.674203 -2.768529 -2.879574
 H 2.721377 -1.039102 -3.276221
 H 4.190418 -2.026569 -3.430163
 C 4.934681 0.017487 -1.066910
 H 5.370927 0.216453 -0.082552
 H 5.761850 -0.139968 -1.772135
 H 4.387193 0.911004 -1.388095
 C 4.744822 -3.001392 -0.451937
 H 5.610191 -3.206491 -1.095951
 H 5.113209 -2.901555 0.575332
 H 4.086196 -3.879340 -0.485493
 C 4.201473 -0.621206 2.314096
 H 4.232044 -0.682827 3.410423
 H 5.036547 -1.213921 1.926169
 H 4.368290 0.427521 2.039300
 C 2.185400 -2.929929 2.384134
 H 2.143367 -2.960859 3.480646
 H 1.233462 -3.309599 1.992821
 H 2.980254 -3.609588 2.050413
 C 1.300570 0.036287 2.493234
 H 0.281531 -0.040204 2.104905
 H 1.256443 -0.115672 3.580395
 H 1.655588 1.058826 2.311585

F 1.901009 0.953572 -2.180597
 F -1.121386 2.116852 1.256659
 F 0.141168 4.442768 1.558925
 F 2.343878 5.033125 0.063554
 F 3.211865 3.223470 -1.781951

3.3.1.4 Koordinaten der perfluorphenyl(ylid)substituierten Silylene

YSiC₆F₅

E = -2915.29857635
 C 3.342128 -2.075227 -1.252367
 H 2.898207 -2.068113 -2.244826
 C 2.524853 -1.932399 -0.144145
 O 0.121398 -2.693450 0.589264
 C -0.590431 3.127643 -1.832081
 H 0.188264 3.814247 -1.501244
 C 4.713524 -2.215444 -1.061176
 H 5.365526 -2.323261 -1.926723
 C 0.938059 1.845512 2.626774
 H 1.445966 0.882583 2.626761
 C 0.338748 2.310280 1.450777
 C 3.259182 1.544112 0.029979
 H 3.157848 1.664832 1.106391
 C 4.521823 1.499858 -0.544261
 H 5.404530 1.588149 0.085723
 C 3.528527 1.215775 -2.721771
 H 3.631989 1.079255 -3.796272
 C 2.259981 1.253709 -2.152737
 H 1.377780 1.128734 -2.777267
 C -0.672201 1.839592 -1.293188
 C 3.045310 -1.935254 1.147685
 H 2.376377 -1.824037 2.002447
 C -0.383565 3.503759 1.466515
 H -0.902088 3.846139 0.575689
 C 2.122171 1.433058 -0.774250
 C 6.745923 -2.353761 0.422871
 H 6.977469 -3.225109 1.048282

H 7.158515 -1.474418 0.934310
 H 7.274806 -2.470432 -0.528294
 C 4.657320 1.342725 -1.921085
 H 5.648664 1.309304 -2.368869
 C 0.259568 -0.336343 0.503774
 P 0.478901 1.260779 -0.017573
 O 0.513285 -1.764740 -1.788989
 S 0.781847 -1.653416 -0.355760
 C 5.268052 -2.214011 0.217457
 C 4.410956 -2.076970 1.318819
 H 4.827205 -2.083837 2.325329
 C 0.848043 2.592715 3.794323
 H 1.311930 2.223721 4.706500
 C 0.147819 3.794253 3.800225
 H 0.070382 4.374331 4.717723
 C -0.472949 4.243279 2.639699
 H -1.043304 5.169682 2.648447
 C -2.482477 2.643789 -3.242861
 H -3.198887 2.963506 -3.997067
 C -1.499462 3.527637 -2.802478
 H -1.441511 4.531396 -3.218619
 C -2.539284 1.351303 -2.735366
 H -3.293281 0.653074 -3.092783
 C -1.625990 0.942703 -1.769564
 H -1.629162 -0.077606 -1.393519
 Si -0.617656 -1.438598 1.861514
 C -2.401934 -1.411632 1.049255
 C -4.334066 -2.477580 0.022577
 C -4.255704 -0.077426 0.190250
 C -4.913495 -1.235142 -0.208253
 C -3.032185 -0.198044 0.831189
 C -3.096906 -2.545248 0.655228
 F -2.578039 -3.752361 0.858460
 F -2.413568 0.937570 1.191961
 F -4.970083 -3.575506 -0.358550
 F -6.086406 -1.153560 -0.817112
 F -4.787307 1.110902 -0.064825

³YSiC₆F₅

E = -2915.23607959

C 3.969844 -1.244850 -1.503473

H 3.980249 -0.477796 -2.273848

C 2.752076 -1.710037 -1.032832

O 0.557996 -2.127119 -2.417763

C 0.475739 3.708479 -0.327328

H 1.058037 3.877616 0.578195

C 5.145913 -1.755470 -0.964563

H 6.104266 -1.386718 -1.327983

C 0.025491 0.073028 2.824260

H 0.629448 -0.792001 2.558346

C -0.139986 1.120418 1.908477

C 3.138134 0.652104 1.578712

H 2.591016 0.100307 2.337741

C 4.517794 0.762378 1.683081

H 5.033375 0.293559 2.518600

C 4.570878 2.054425 -0.347766

H 5.129138 2.595294 -1.109191

C 3.190574 1.939160 -0.463856

H 2.678687 2.358409 -1.325881

C 0.141930 2.407021 -0.716101

C 2.696739 -2.690231 -0.046727

H 1.732882 -3.053240 0.307916

C -0.971020 2.192268 2.233654

H -1.152489 2.983369 1.511607

C 2.463635 1.250743 0.511070

C 6.388668 -3.239296 0.650478

H 6.374053 -4.332371 0.735268

H 6.529392 -2.840132 1.664403

H 7.264237 -2.954614 0.058037

C 5.235534 1.470642 0.724040

H 6.317002 1.558548 0.808717

C 0.272642 -0.551082 -0.368496

P 0.672615 1.000701 0.292575

O 1.653602 0.166557 -2.460341

S 1.241898 -1.040693 -1.720674
 C 5.121030 -2.720427 0.041424
 C 3.876544 -3.183425 0.486597
 H 3.835537 -3.946726 1.262800
 C -0.596693 0.125652 4.064630
 H -0.460137 -0.690526 4.770694
 C -1.407968 1.207670 4.390935
 H -1.903093 1.243407 5.359370
 C -1.600561 2.233369 3.473206
 H -2.252762 3.069530 3.715915
 C -0.649176 4.565440 -2.274293
 H -0.960916 5.410272 -2.885551
 C 0.073528 4.786318 -1.104449
 H 0.329485 5.799344 -0.800960
 C -0.964564 3.270211 -2.668705
 H -1.517319 3.098257 -3.589572
 C -0.569545 2.187242 -1.892520
 H -0.792394 1.168464 -2.198058
 Si -1.012517 -1.690065 0.205461
 C -2.824835 -1.337636 -0.056281
 C -5.113486 -2.179659 -0.191512
 C -4.706698 0.186529 -0.364659
 C -5.594830 -0.884272 -0.355667
 C -3.351052 -0.052864 -0.206994
 C -3.751113 -2.384013 -0.040717
 F -3.322531 -3.632495 0.117282
 F -2.542139 1.007648 -0.180238
 F -5.958317 -3.197666 -0.184024
 F -6.891346 -0.671248 -0.497766
 F -5.165203 1.420951 -0.505009

$Y_{Ph}SiC_6F_5$

E = -2326.70822592
 P -1.787069 -0.072308 -0.078053
 C -0.105242 -0.113258 -0.474474
 C 0.717579 0.926254 0.199115
 C 1.326196 0.687742 1.439016

H 1.164365 -0.271303 1.928841
 C 2.163286 1.633610 2.019914
 H 2.639756 1.417843 2.974789
 C 2.402366 2.844867 1.378333
 H 3.064352 3.582269 1.828179
 C 1.794805 3.102266 0.153115
 H 1.980613 4.044160 -0.360100
 C 0.960458 2.154950 -0.428139
 H 0.501582 2.346663 -1.396159
 C -2.129046 -0.747159 1.579996
 C -3.224876 -0.313303 2.331220
 H -3.870616 0.475278 1.949145
 C -3.487883 -0.886483 3.569479
 H -4.339989 -0.544790 4.153668
 C -2.660654 -1.891656 4.061785
 H -2.865555 -2.335838 5.034028
 C -1.569549 -2.325398 3.315852
 H -0.919142 -3.108062 3.700741
 C -1.300984 -1.755218 2.076628
 H -0.441533 -2.082989 1.491476
 C -2.777332 -1.035117 -1.245419
 C -3.749030 -1.935231 -0.807696
 H -3.905438 -2.095828 0.256520
 C -4.510686 -2.637710 -1.735234
 H -5.261807 -3.345112 -1.390218
 C -4.308388 -2.441476 -3.096313
 H -4.903901 -2.995310 -3.819524
 C -3.340763 -1.542656 -3.536327
 H -3.175119 -1.394352 -4.601216
 C -2.573074 -0.842084 -2.616425
 H -1.802418 -0.151859 -2.954086
 C -2.473479 1.609783 -0.026001
 C -2.021252 2.480416 0.972850
 H -1.313462 2.130559 1.722811
 C -2.471865 3.792864 1.005566
 H -2.111843 4.465805 1.780877
 C -3.375816 4.245378 0.048488

H -3.727176 5.275036 0.076300
 C -3.832384 3.381848 -0.940412
 H -4.544272 3.730889 -1.685601
 C -3.383582 2.065811 -0.980575
 H -3.748768 1.394033 -1.754068
 C 2.389482 -1.106222 -0.997386
 C 4.279367 -1.368076 0.513390
 C 4.364074 0.294399 -1.228128
 C 4.958653 -0.353932 -0.151365
 Si 0.532824 -1.521500 -1.416513
 C 3.096298 -0.100079 -1.632661
 C 3.009344 -1.718214 0.077052
 F 2.336710 -2.636845 0.787381
 F 2.527686 0.567393 -2.640660
 F 5.009250 1.274736 -1.842558
 F 6.169719 0.001560 0.247005
 F 4.837827 -1.961617 1.559289

³Y_{Ph}SiC₆F₅

E = -2326.65839556
 P -1.249429 -0.576874 0.148487
 C -0.861601 0.563189 -1.104196
 C -1.739203 1.700335 -1.367141
 C -3.097898 1.739899 -0.996304
 H -3.553037 0.876045 -0.513436
 C -3.882798 2.859663 -1.236360
 H -4.928259 2.854849 -0.932355
 C -3.345180 3.974919 -1.869258
 H -3.962081 4.850028 -2.063169
 C -2.005511 3.954290 -2.255491
 H -1.568291 4.820493 -2.749452
 C -1.218724 2.842321 -2.007700
 H -0.168128 2.839724 -2.295494
 C -1.894650 0.306466 1.598712
 C -2.923610 -0.191353 2.398162
 H -3.392722 -1.143599 2.162702
 C -3.365782 0.543670 3.492600

H -4.171178 0.155048 4.112507
 C -2.786336 1.772406 3.789548
 H -3.137677 2.346021 4.645071
 C -1.765339 2.274047 2.987929
 H -1.318707 3.240820 3.210160
 C -1.320771 1.549253 1.890180
 H -0.538116 1.945907 1.244937
 C 0.243485 -1.456637 0.681487
 C 1.039919 -0.944938 1.706788
 H 0.712351 -0.077312 2.274902
 C 2.266822 -1.536080 1.991566
 H 2.891217 -1.127027 2.783206
 C 2.697543 -2.636984 1.258725
 H 3.666089 -3.085443 1.471606
 C 1.898678 -3.159648 0.246138
 H 2.237988 -4.015446 -0.332620
 C 0.673858 -2.571970 -0.046409
 H 0.053847 -2.971696 -0.846202
 C -2.431382 -1.885607 -0.292267
 C -3.141967 -1.761003 -1.486149
 H -2.968266 -0.893771 -2.122175
 C -4.047195 -2.748494 -1.859701
 H -4.600185 -2.649951 -2.791400
 C -4.235469 -3.862459 -1.049320
 H -4.940734 -4.636720 -1.345256
 C -3.513156 -3.999026 0.133884
 H -3.649604 -4.879551 0.758521
 C -2.608094 -3.015799 0.512288
 H -2.025277 -3.132155 1.425612
 C 2.190449 0.398634 -1.243864
 C 3.486684 1.596815 0.444946
 C 4.428496 -0.347991 -0.608711
 C 4.536289 0.695220 0.303246
 Si 0.565180 0.031408 -2.131634
 C 3.274585 -0.472007 -1.366348
 C 2.347781 1.444164 -0.330692
 F 1.378433 2.345458 -0.159234

F 3.194139 -1.512934 -2.192126
 F 5.408849 -1.234370 -0.712401
 F 5.627320 0.824020 1.041740
 F 3.590163 2.593979 1.313152

$Y_{PhF}SiC_6F_5$

E = -2823.61374882
 P -2.104130 -0.194936 -0.034501
 C -0.426104 -0.451107 -0.386008
 C 0.506672 0.557616 0.146591
 C 1.288695 0.334535 1.280909
 C 2.252231 1.239666 1.704724
 C 2.436412 2.422925 0.998375
 C 1.661670 2.687219 -0.124970
 C 0.712625 1.760913 -0.531533
 C -2.668458 -1.041841 1.471778
 C -3.858689 -0.660663 2.101702
 H -4.442400 0.170818 1.708104
 C -4.288299 -1.337924 3.234952
 H -5.213930 -1.042058 3.724565
 C -3.530436 -2.388986 3.746926
 H -3.866784 -2.914882 4.638425
 C -2.341795 -2.759229 3.129257
 H -1.742843 -3.571192 3.535879
 C -1.906469 -2.086848 1.992059
 H -0.965132 -2.356763 1.516935
 C -3.138934 -0.752204 -1.407901
 C -4.293927 -1.509117 -1.214233
 H -4.587239 -1.815717 -0.212935
 C -5.060931 -1.889446 -2.310216
 H -5.955471 -2.489959 -2.159435
 C -4.680891 -1.512499 -3.593170
 H -5.282126 -1.815229 -4.448276
 C -3.527740 -0.757081 -3.788213
 H -3.224593 -0.469541 -4.792649
 C -2.751461 -0.380779 -2.701019
 H -1.835701 0.191426 -2.843634

C -2.451350 1.557243 0.279219
 C -2.007062 2.102476 1.488724
 H -1.551660 1.458867 2.240548
 C -2.143347 3.462881 1.728493
 H -1.791623 3.884171 2.667855
 C -2.726968 4.283223 0.767053
 H -2.831827 5.349913 0.954903
 C -3.176730 3.741956 -0.431874
 H -3.635376 4.382282 -1.182274
 C -3.037392 2.381118 -0.680796
 H -3.383215 1.963958 -1.623707
 C 1.950373 -1.669126 -1.056508
 C 4.001625 -2.137421 0.164212
 C 3.984595 -0.418767 -1.527858
 C 4.663582 -1.151378 -0.558754
 Si 0.039801 -1.950778 -1.288755
 C 2.644500 -0.696671 -1.758124
 C 2.659936 -2.379336 -0.103270
 F 2.032374 -3.302346 0.629804
 F 1.997937 0.044025 -2.664000
 F 4.619340 0.526594 -2.203511
 F 5.941639 -0.908421 -0.325111
 F 4.652058 -2.821661 1.091847
 F -0.002178 2.030876 -1.616659
 F 1.835844 3.815606 -0.792780
 F 3.342383 3.297568 1.398334
 F 2.984545 0.992641 2.778733
 F 1.133731 -0.785909 1.978078

$^3Y_{PhF}SiC_6F_5$

E = -2823.55664926
 P -0.491681 1.348149 0.238096
 C -0.605488 -0.026782 -0.797199
 C -1.688648 -1.004068 -0.700740
 C -2.587067 -1.218050 -1.749964
 C -3.595930 -2.168886 -1.680137
 C -3.739657 -2.935025 -0.529786

C -2.867602 -2.747420 0.535703
 C -1.857451 -1.802792 0.434537
 C -0.885735 2.928559 -0.568531
 C -0.824371 4.117306 0.164878
 H -0.506158 4.100520 1.207127
 C -1.172682 5.318945 -0.436817
 H -1.119828 6.245395 0.131428
 C -1.595120 5.335259 -1.764322
 H -1.869849 6.278023 -2.233538
 C -1.674923 4.150697 -2.487449
 H -2.015308 4.162227 -3.520706
 C -1.320997 2.943945 -1.892393
 H -1.392750 2.007010 -2.443340
 C 1.183554 1.474596 0.914543
 C 2.062717 2.502716 0.574044
 H 1.728780 3.321153 -0.059258
 C 3.381429 2.459810 1.015913
 H 4.070150 3.252121 0.731362
 C 3.822265 1.399984 1.800035
 H 4.857751 1.364305 2.132827
 C 2.948261 0.367737 2.134579
 H 3.298185 -0.474513 2.728455
 C 1.636374 0.394218 1.683542
 H 0.964504 -0.438377 1.889259
 C -1.682944 1.261346 1.604235
 C -3.033917 1.183781 1.248790
 H -3.322187 1.215913 0.198517
 C -4.005886 1.070295 2.232583
 H -5.054935 1.005852 1.951583
 C -3.636516 1.040662 3.574582
 H -4.398735 0.949549 4.345820
 C -2.295962 1.131954 3.930400
 H -2.007111 1.115850 4.979219
 C -1.316053 1.239883 2.949125
 H -0.269383 1.309151 3.234877
 C 2.294539 -0.830770 -1.297706
 C 4.655053 -0.725325 -0.711628

C 3.301532 -2.530974 0.127776
 C 4.532401 -1.890331 0.035276
 Si 0.742773 -0.035279 -2.026299
 C 2.208916 -1.998146 -0.539859
 C 3.543464 -0.220246 -1.370836
 F 3.691118 0.918390 -2.040951
 F 1.045692 -2.631135 -0.417102
 F 3.188568 -3.632296 0.854642
 F 5.579427 -2.374612 0.681978
 F 5.815765 -0.088004 -0.748610
 F -1.032217 -1.665694 1.469362
 F -2.998070 -3.479979 1.629877
 F -4.702745 -3.837589 -0.449244
 F -4.432966 -2.337396 -2.691520
 F -2.497690 -0.480549 -2.852425

3.3.1.5 Koordinaten der pyridin(ylid)substituierten Silylene

YSiPy

E = -2434.44288792
 C -3.244091 -1.579776 1.074514
 H -2.812831 -1.767016 2.054936
 C -2.418361 -1.569107 -0.036472
 O -0.309152 -2.899109 -0.853411
 C 1.823974 2.240582 2.105955
 H 1.173553 3.097201 1.930539
 C -4.603977 -1.337673 0.902927
 H -5.260973 -1.337429 1.771555
 C 0.278102 1.832844 -2.558274
 H -0.355296 0.958959 -2.699165
 C 0.843470 2.078494 -1.302758
 C -2.175853 1.966225 0.058579
 H -2.027246 2.132891 -1.006990
 C -3.414000 2.213813 0.634711
 H -4.232606 2.580932 0.019025
 C -2.566126 1.502640 2.776069
 H -2.720222 1.310468 3.835965

C -1.324367 1.246056 2.204207
 H -0.519180 0.834696 2.809160
 C 1.674905 1.075288 1.345010
 C -2.921945 -1.332041 -1.312993
 H -2.245280 -1.330428 -2.168717
 C 1.704176 3.163709 -1.130323
 H 2.180189 3.342381 -0.170185
 C -1.121793 1.494596 0.844982
 C -6.600396 -0.810360 -0.542354
 H -7.054614 -1.523817 -1.241381
 H -6.763034 0.192490 -0.958510
 H -7.143328 -0.873761 0.406035
 C -3.607488 1.989830 1.995435
 H -4.579325 2.184879 2.444861
 C 0.175386 -0.583413 -0.632941
 P 0.415780 0.946237 0.044153
 O -0.426111 -2.047647 1.574447
 S -0.661442 -1.778648 0.154952
 C -5.138795 -1.087311 -0.359407
 C -4.276504 -1.094423 -1.465223
 H -4.680023 -0.909350 -2.459949
 C 0.556435 2.682188 -3.622132
 H 0.121239 2.480537 -4.598565
 C 1.401577 3.771726 -3.442883
 H 1.623370 4.432017 -4.279114
 C 1.977871 4.008211 -2.199214
 H 2.653823 4.849502 -2.060950
 C 3.591928 1.187316 3.356188
 H 4.344505 1.232418 4.141270
 C 2.785397 2.296060 3.105403
 H 2.902026 3.202174 3.696687
 C 3.425057 0.021058 2.619660
 H 4.039371 -0.853686 2.822395
 C 2.462353 -0.041481 1.617217
 H 2.299822 -0.961025 1.061017
 Si 0.794622 -1.798271 -2.056291
 C 2.450523 -2.236467 -1.179101

N 3.391385 -1.325908 -1.482224
 C 3.942844 -3.344898 0.347878
 C 4.574455 -1.400244 -0.886340
 C 4.904628 -2.388195 0.037792
 H 4.160230 -4.135129 1.066138
 H 5.305931 -0.632849 -1.152343
 H 5.891236 -2.405228 0.496692
 C 2.699956 -3.270070 -0.268644
 H 1.906696 -3.976872 -0.031398

³YSiPy

E = -2434.44288792
 C -3.244091 -1.579776 1.074514
 H -2.812831 -1.767016 2.054936
 C -2.418361 -1.569107 -0.036472
 O -0.309152 -2.899109 -0.853411
 C 1.823974 2.240582 2.105955
 H 1.173553 3.097201 1.930539
 C -4.603977 -1.337673 0.902927
 H -5.260973 -1.337429 1.771555
 C 0.278102 1.832844 -2.558274
 H -0.355296 0.958959 -2.699165
 C 0.843470 2.078494 -1.302758
 C -2.175853 1.966225 0.058579
 H -2.027246 2.132891 -1.006990
 C -3.414000 2.213813 0.634711
 H -4.232606 2.580932 0.019025
 C -2.566126 1.502640 2.776069
 H -2.720222 1.310468 3.835965
 C -1.324367 1.246056 2.204207
 H -0.519180 0.834696 2.809160
 C 1.674905 1.075288 1.345010
 C -2.921945 -1.332041 -1.312993
 H -2.245280 -1.330428 -2.168717
 C 1.704176 3.163709 -1.130323
 H 2.180189 3.342381 -0.170185
 C -1.121793 1.494596 0.844982

C -6.600396 -0.810360 -0.542354
 H -7.054614 -1.523817 -1.241381
 H -6.763034 0.192490 -0.958510
 H -7.143328 -0.873761 0.406035
 C -3.607488 1.989830 1.995435
 H -4.579325 2.184879 2.444861
 C 0.175386 -0.583413 -0.632941
 P 0.415780 0.946237 0.044153
 O -0.426111 -2.047647 1.574447
 S -0.661442 -1.778648 0.154952
 C -5.138795 -1.087311 -0.359407
 C -4.276504 -1.094423 -1.465223
 H -4.680023 -0.909350 -2.459949
 C 0.556435 2.682188 -3.622132
 H 0.121239 2.480537 -4.598565
 C 1.401577 3.771726 -3.442883
 H 1.623370 4.432017 -4.279114
 C 1.977871 4.008211 -2.199214
 H 2.653823 4.849502 -2.060950
 C 3.591928 1.187316 3.356188
 H 4.344505 1.232418 4.141270
 C 2.785397 2.296060 3.105403
 H 2.902026 3.202174 3.696687
 C 3.425057 0.021058 2.619660
 H 4.039371 -0.853686 2.822395
 C 2.462353 -0.041481 1.617217
 H 2.299822 -0.961025 1.061017
 Si 0.794622 -1.798271 -2.056291
 C 2.450523 -2.236467 -1.179101
 N 3.391385 -1.325908 -1.482224
 C 3.942844 -3.344898 0.347878
 C 4.574455 -1.400244 -0.886340
 C 4.904628 -2.388195 0.037792
 H 4.160230 -4.135129 1.066138
 H 5.305931 -0.632849 -1.152343
 H 5.891236 -2.405228 0.496692
 C 2.699956 -3.270070 -0.268644

H 1.906696 -3.976872 -0.031398

Y_{Ph}SiPy

E = -1845.84660072

P -1.085754 -0.116716 -0.005344

C 0.596140 -0.451050 0.178718

C 1.491246 0.725072 0.021934

C 1.643993 1.680976 1.036274

C 2.542109 2.734577 0.901996

C 3.313438 2.855775 -0.249145

C 3.169387 1.918706 -1.268443

C 2.263907 0.874092 -1.138162

C -1.839173 0.731852 1.425258

C -2.879199 1.653220 1.287729

H -3.238559 1.926326 0.297449

C -3.454127 2.223435 2.418448

H -4.261119 2.945262 2.308862

C -2.998470 1.873001 3.685400

H -3.449408 2.322384 4.568198

C -1.964715 0.951427 3.825191

H -1.607170 0.676944 4.815616

C -1.383760 0.383693 2.698054

H -0.565940 -0.331686 2.789130

C -2.059032 -1.624814 -0.241897

C -3.221992 -1.860020 0.491229

H -3.547133 -1.146207 1.244281

C -3.963623 -3.015121 0.266957

H -4.865463 -3.197678 0.847551

C -3.551507 -3.933107 -0.691482

H -4.132031 -4.837512 -0.863618

C -2.394128 -3.699897 -1.428885

H -2.065052 -4.420355 -2.174622

C -1.645171 -2.552761 -1.204834

H -0.731546 -2.373710 -1.767807

C -1.442318 0.981719 -1.412920

C -0.942738 2.289897 -1.385312

H -0.395316 2.648052 -0.515820

C -1.144320 3.134792 -2.468390
 H -0.747248 4.147370 -2.440012
 C -1.846989 2.688113 -3.583532
 H -2.002982 3.352599 -4.431270
 C -2.352438 1.393680 -3.611679
 H -2.908650 1.042156 -4.478379
 C -2.151940 0.540745 -2.531297
 H -2.554972 -0.468781 -2.560954
 C 3.039830 -1.698525 0.571324
 C 5.124816 -0.669798 1.191303
 C 4.833934 -1.850973 -0.861680
 C 5.654271 -1.111531 -0.017355
 Si 1.161945 -2.122995 0.622986
 N 3.569024 -2.144075 -0.578179
 H 5.733333 -0.088240 1.882909
 H 6.682457 -0.893838 -0.299026
 H 5.220116 -2.223602 -1.813748
 H 1.060203 1.579452 1.949966
 H 2.648489 3.458384 1.708795
 H 4.024921 3.673306 -0.350021
 H 3.770711 2.000451 -2.172464
 H 2.163765 0.130139 -1.925800
 C 3.804720 -0.971191 1.490406
 H 3.351616 -0.615934 2.415139

³Y_{Ph}SiPy

E = -1845.84660072
 P -1.085754 -0.116716 -0.005344
 C 0.596140 -0.451050 0.178718
 C 1.491246 0.725072 0.021934
 C 1.643993 1.680976 1.036274
 C 2.542109 2.734577 0.901996
 C 3.313438 2.855775 -0.249145
 C 3.169387 1.918706 -1.268443
 C 2.263907 0.874092 -1.138162
 C -1.839173 0.731852 1.425258
 C -2.879199 1.653220 1.287729

H -3.238559 1.926326 0.297449
 C -3.454127 2.223435 2.418448
 H -4.261119 2.945262 2.308862
 C -2.998470 1.873001 3.685400
 H -3.449408 2.322384 4.568198
 C -1.964715 0.951427 3.825191
 H -1.607170 0.676944 4.815616
 C -1.383760 0.383693 2.698054
 H -0.565940 -0.331686 2.789130
 C -2.059032 -1.624814 -0.241897
 C -3.221992 -1.860020 0.491229
 H -3.547133 -1.146207 1.244281
 C -3.963623 -3.015121 0.266957
 H -4.865463 -3.197678 0.847551
 C -3.551507 -3.933107 -0.691482
 H -4.132031 -4.837512 -0.863618
 C -2.394128 -3.699897 -1.428885
 H -2.065052 -4.420355 -2.174622
 C -1.645171 -2.552761 -1.204834
 H -0.731546 -2.373710 -1.767807
 C -1.442318 0.981719 -1.412920
 C -0.942738 2.289897 -1.385312
 H -0.395316 2.648052 -0.515820
 C -1.144320 3.134792 -2.468390
 H -0.747248 4.147370 -2.440012
 C -1.846989 2.688113 -3.583532
 H -2.002982 3.352599 -4.431270
 C -2.352438 1.393680 -3.611679
 H -2.908650 1.042156 -4.478379
 C -2.151940 0.540745 -2.531297
 H -2.554972 -0.468781 -2.560954
 C 3.039830 -1.698525 0.571324
 C 5.124816 -0.669798 1.191303
 C 4.833934 -1.850973 -0.861680
 C 5.654271 -1.111531 -0.017355
 Si 1.161945 -2.122995 0.622986
 N 3.569024 -2.144075 -0.578179

H 5.733333 -0.088240 1.882909
H 6.682457 -0.893838 -0.299026
H 5.220116 -2.223602 -1.813748
H 1.060203 1.579452 1.949966
H 2.648489 3.458384 1.708795
H 4.024921 3.673306 -0.350021
H 3.770711 2.000451 -2.172464
H 2.163765 0.130139 -1.925800
C 3.804720 -0.971191 1.490406
H 3.351616 -0.615934 2.415139

Y_{PhF}SiPy

E = -2342.75509713
P -1.610152 -0.095516 0.018299
C -0.027461 -0.740261 -0.228301
C 1.112733 0.152576 0.036360
C 1.955641 -0.035609 1.132374
C 3.146208 0.661365 1.279480
C 3.500051 1.615976 0.334340
C 2.671442 1.849115 -0.756417
C 1.500246 1.119757 -0.893211
C -2.291213 -0.386405 1.681558
C -3.382184 0.358476 2.142089
H -3.816519 1.134609 1.512818
C -3.903403 0.114054 3.405261
H -4.752505 0.692954 3.763126
C -3.333137 -0.865568 4.215328
H -3.739171 -1.051734 5.207845
C -2.240947 -1.597040 3.763592
H -1.788067 -2.353341 4.401307
C -1.716681 -1.359361 2.496724
H -0.848851 -1.909778 2.137283
C -2.781037 -0.780442 -1.177485
C -4.033906 -1.269153 -0.810558
H -4.334045 -1.278829 0.234613
C -4.893780 -1.764936 -1.785230
H -5.866370 -2.157769 -1.496298

C -4.508368 -1.766992 -3.120592
 H -5.182986 -2.158403 -3.879642
 C -3.257354 -1.278429 -3.488742
 H -2.951100 -1.288256 -4.532594
 C -2.389429 -0.792052 -2.521489
 H -1.399353 -0.428412 -2.793719
 C -1.641970 1.714229 -0.131467
 C -1.013863 2.458307 0.872797
 H -0.590780 1.952929 1.740169
 C -0.928314 3.839601 0.764190
 H -0.433323 4.413544 1.544761
 C -1.474651 4.485587 -0.341111
 H -1.406890 5.568381 -0.425833
 C -2.108132 3.749122 -1.335470
 H -2.538896 4.253214 -2.198042
 C -2.190084 2.364651 -1.236039
 H -2.680385 1.793179 -2.020619
 C 2.085369 -2.457620 -0.735367
 C 4.229171 -2.938553 0.249234
 C 3.981112 -1.564395 -1.685392
 C 4.811790 -2.139183 -0.726961
 F 0.752270 1.332906 -1.969474
 F 3.016423 2.753548 -1.661352
 F 4.625043 2.299947 0.471076
 F 3.936747 0.437281 2.318636
 F 1.647127 -0.942861 2.054999
 Si 0.155268 -2.459498 -0.793828
 N 2.662320 -1.710927 -1.691586
 H 4.841854 -3.414681 1.013667
 H 5.885486 -1.966207 -0.752671
 H 4.406576 -0.946424 -2.480169
 C 2.851402 -3.114782 0.232690
 H 2.363614 -3.732376 0.986132

³*Y_{PhF}SiPy*

E = -2342.75509713

P -1.610152 -0.095516 0.018299

C -0.027461 -0.740261 -0.228301
 C 1.112733 0.152576 0.036360
 C 1.955641 -0.035609 1.132374
 C 3.146208 0.661365 1.279480
 C 3.500051 1.615976 0.334340
 C 2.671442 1.849115 -0.756417
 C 1.500246 1.119757 -0.893211
 C -2.291213 -0.386405 1.681558
 C -3.382184 0.358476 2.142089
 H -3.816519 1.134609 1.512818
 C -3.903403 0.114054 3.405261
 H -4.752505 0.692954 3.763126
 C -3.333137 -0.865568 4.215328
 H -3.739171 -1.051734 5.207845
 C -2.240947 -1.597040 3.763592
 H -1.788067 -2.353341 4.401307
 C -1.716681 -1.359361 2.496724
 H -0.848851 -1.909778 2.137283
 C -2.781037 -0.780442 -1.177485
 C -4.033906 -1.269153 -0.810558
 H -4.334045 -1.278829 0.234613
 C -4.893780 -1.764936 -1.785230
 H -5.866370 -2.157769 -1.496298
 C -4.508368 -1.766992 -3.120592
 H -5.182986 -2.158403 -3.879642
 C -3.257354 -1.278429 -3.488742
 H -2.951100 -1.288256 -4.532594
 C -2.389429 -0.792052 -2.521489
 H -1.399353 -0.428412 -2.793719
 C -1.641970 1.714229 -0.131467
 C -1.013863 2.458307 0.872797
 H -0.590780 1.952929 1.740169
 C -0.928314 3.839601 0.764190
 H -0.433323 4.413544 1.544761
 C -1.474651 4.485587 -0.341111
 H -1.406890 5.568381 -0.425833
 C -2.108132 3.749122 -1.335470

H -2.538896 4.253214 -2.198042
 C -2.190084 2.364651 -1.236039
 H -2.680385 1.793179 -2.020619
 C 2.085369 -2.457620 -0.735367
 C 4.229171 -2.938553 0.249234
 C 3.981112 -1.564395 -1.685392
 C 4.811790 -2.139183 -0.726961
 F 0.752270 1.332906 -1.969474
 F 3.016423 2.753548 -1.661352
 F 4.625043 2.299947 0.471076
 F 3.936747 0.437281 2.318636
 F 1.647127 -0.942861 2.054999
 Si 0.155268 -2.459498 -0.793828
 N 2.662320 -1.710927 -1.691586
 H 4.841854 -3.414681 1.013667
 H 5.885486 -1.966207 -0.752671
 H 4.406576 -0.946424 -2.480169
 C 2.851402 -3.114782 0.232690
 H 2.363614 -3.732376 0.986132

3.3.1.6 Koordinaten der pyrimidin(ylid)substituierten Silylene

YSiPyr

E = -2450.49912647
 C -3.395518 -1.328597 1.114875
 H -2.992534 -1.415620 2.120855
 C -2.552510 -1.505545 0.030952
 O -0.455028 -2.969467 -0.595299
 C 1.916606 2.138277 2.073010
 H 1.398428 3.053907 1.789199
 C -4.735175 -1.030666 0.883020
 H -5.404648 -0.884107 1.729472
 C 0.544333 1.589360 -2.622205
 H -0.173911 0.780481 -2.743025
 C 1.069009 1.861840 -1.354937
 C -2.047809 2.046601 -0.170917
 H -1.841665 2.090996 -1.239064

C -3.292516 2.423075 0.312572
 H -4.057889 2.771174 -0.378014
 C -2.588729 1.887822 2.554740
 H -2.802593 1.813393 3.619078
 C -1.340307 1.502214 2.075929
 H -0.592211 1.106983 2.759504
 C 1.655054 0.942154 1.394784
 C -3.019424 -1.397510 -1.276670
 H -2.330512 -1.537839 -2.110784
 C 2.035966 2.856806 -1.205054
 H 2.481621 3.051585 -0.233787
 C -1.060969 1.598540 0.711698
 C -6.673240 -0.576414 -0.663395
 H -7.166112 -1.367457 -1.242818
 H -6.770932 0.351357 -1.241848
 H -7.225680 -0.450671 0.273242
 C -3.561013 2.351780 1.677523
 H -4.538275 2.646959 2.054756
 C 0.085960 -0.665042 -0.573654
 P 0.458781 0.867689 0.029777
 O -0.630556 -1.874835 1.743527
 S -0.811690 -1.755302 0.295901
 C -5.233164 -0.907844 -0.412680
 C -4.354102 -1.100447 -1.488214
 H -4.728775 -1.014705 -2.507464
 C 0.967917 2.325442 -3.721506
 H 0.561976 2.102471 -4.705880
 C 1.919390 3.327515 -3.566272
 H 2.254616 3.898958 -4.429712
 C 2.455395 3.588218 -2.309662
 H 3.212910 4.359746 -2.187774
 C 3.448983 0.976163 3.521575
 H 4.153484 0.989793 4.351156
 C 2.817313 2.154560 3.129180
 H 3.020926 3.085588 3.654478
 C 3.165618 -0.217913 2.869907
 H 3.639841 -1.144166 3.187387

C 2.263703 -0.240532 1.811142
H 2.008031 -1.178070 1.323206
Si 0.659845 -2.010251 -1.878938
C 2.390778 -2.225107 -1.047314
N 2.796244 -3.259554 -0.304168
N 3.147201 -1.143337 -1.316057
C 4.015177 -3.188567 0.221442
C 4.360102 -1.087028 -0.792366
C 4.859068 -2.104621 0.015909
H 4.335374 -4.034921 0.835333
H 4.958532 -0.198961 -1.012952
H 5.852684 -2.056401 0.454804

³YSiPyr

E = -2450.44899349
C 3.741865 0.114333 -1.334767
H 3.582819 1.069220 -1.830094
C 2.700314 -0.797341 -1.282694
O 0.935310 -1.342394 -3.145081
C -1.372769 3.076864 0.615603
H -0.934517 3.072023 1.613368
C 4.953686 -0.204841 -0.730278
H 5.772160 0.513287 -0.761357
C -0.804507 -1.544282 2.130261
H 0.011620 -2.045852 1.613306
C -1.205852 -0.268590 1.719337
C 1.981143 0.435462 1.922444
H 1.582093 -0.488104 2.334062
C 3.223039 0.890711 2.342696
H 3.785739 0.319361 3.078018
C 3.025769 2.790935 0.876196
H 3.436193 3.707481 0.457239
C 1.784586 2.336644 0.445276
H 1.240997 2.879004 -0.323598
C -1.228403 1.967138 -0.221341
C 2.859320 -2.027139 -0.650668
H 2.030126 -2.732783 -0.621946

C -2.279223 0.355485 2.353963
 H -2.626689 1.326629 2.011993
 C 1.248424 1.163000 0.980773
 C 6.429489 -1.748424 0.609688
 H 6.794437 -2.740963 0.318819
 H 6.307761 -1.758746 1.701397
 H 7.206916 -1.016238 0.368610
 C 3.743677 2.073412 1.825453
 H 4.716774 2.430368 2.157501
 C -0.071326 -0.705910 -0.866707
 P -0.321834 0.502095 0.337516
 O 1.199603 1.054011 -2.331886
 S 1.136125 -0.390293 -2.049692
 C 5.135462 -1.420383 -0.072536
 C 4.069453 -2.328750 -0.047815
 H 4.195052 -3.288082 0.453085
 C -1.455167 -2.172533 3.186211
 H -1.138786 -3.165002 3.499674
 C -2.516864 -1.541005 3.823616
 H -3.031735 -2.037391 4.643917
 C -2.929797 -0.280356 3.404805
 H -3.770808 0.208958 3.891621
 C -2.592904 4.212833 -1.120006
 H -3.128130 5.092084 -1.473993
 C -2.063046 4.196356 0.167215
 H -2.179330 5.059586 0.819390
 C -2.427703 3.115963 -1.959830
 H -2.827352 3.137056 -2.971418
 C -1.745513 1.990620 -1.514224
 H -1.597186 1.128899 -2.159882
 Si -1.161296 -2.132486 -1.153332
 C -2.975585 -1.810457 -0.958167
 N -3.866348 -2.809124 -1.108632
 N -3.289766 -0.547383 -0.617322
 C -5.135584 -2.506776 -0.909861
 C -4.566430 -0.264525 -0.421661
 C -5.563886 -1.224707 -0.556647

H -5.858528 -3.317304 -1.034421
H -4.804941 0.767265 -0.148565
H -6.613538 -0.992495 -0.398328

Y_{Ph}SiPyr

E = -1861.90830830
P -1.071905 -0.123572 -0.047297
C 0.588782 -0.451548 -0.379565
C 1.479949 0.730439 -0.237140
C 2.031285 1.089972 1.000653
C 2.865413 2.196248 1.120554
C 3.168697 2.969893 0.004620
C 2.636795 2.621117 -1.233188
C 1.803072 1.516164 -1.351330
C -1.432097 0.032553 1.735937
C -2.457073 0.851381 2.216975
H -3.044492 1.453208 1.525919
C -2.723642 0.900782 3.580395
H -3.519756 1.542496 3.952859
C -1.971879 0.134465 4.466183
H -2.179973 0.178326 5.533648
C -0.952237 -0.683121 3.989431
H -0.361373 -1.280920 4.680413
C -0.679843 -0.733796 2.627365
H 0.124258 -1.362214 2.243418
C -2.165044 -1.423153 -0.672430
C -3.202707 -1.939916 0.103349
H -3.349362 -1.590025 1.122604
C -4.044072 -2.913942 -0.423637
H -4.847027 -3.320403 0.187793
C -3.855594 -3.370132 -1.722970
H -4.513520 -4.134970 -2.131276
C -2.822580 -2.854734 -2.500721
H -2.667918 -3.216579 -3.514967
C -1.975818 -1.886477 -1.979120
H -1.154823 -1.492239 -2.574435
C -1.644406 1.454409 -0.749654

C -1.107700 2.643913 -0.242055
 H -0.404250 2.615447 0.588729
 C -1.467055 3.862723 -0.800989
 H -1.040083 4.781837 -0.405242
 C -2.364047 3.906950 -1.864353
 H -2.644036 4.863864 -2.300810
 C -2.904316 2.728898 -2.366945
 H -3.610762 2.760095 -3.194028
 C -2.546421 1.503933 -1.813402
 H -2.975705 0.586431 -2.209612
 C 3.003812 -1.766487 -0.425695
 C 4.773472 -1.564374 0.998372
 C 4.974696 -1.022404 -1.287344
 C 5.573881 -1.094183 -0.035256
 Si 1.126644 -2.171836 -0.585903
 N 3.707742 -1.358308 -1.489041
 N 3.504784 -1.902025 0.811206
 H 5.171291 -1.668700 2.011327
 H 6.610638 -0.807766 0.123812
 H 5.539998 -0.678610 -2.157604
 H 1.813038 0.473736 1.870708
 H 3.285530 2.451557 2.092244
 H 3.822657 3.835151 0.097621
 H 2.874647 3.213715 -2.115204
 H 1.388945 1.240741 -2.319202

³Y_{Ph}SiPyr

E = -1861.85620551
 P -0.808352 -0.439517 -0.026802
 C 0.246055 0.592966 -0.898489
 C -0.009674 2.053789 -0.897174
 C 0.893623 2.923353 -0.265947
 C 0.680599 4.296688 -0.261060
 C -0.440628 4.836159 -0.884061
 C -1.341731 3.989511 -1.523344
 C -1.125700 2.617483 -1.534741
 C -0.459786 -0.544429 1.761724

C -1.418209 -1.010185 2.668534
 H -2.406473 -1.303921 2.316791
 C -1.111216 -1.090427 4.020462
 H -1.856980 -1.452735 4.725533
 C 0.147754 -0.700231 4.472085
 H 0.384865 -0.759139 5.532906
 C 1.096038 -0.229350 3.571570
 H 2.077774 0.082193 3.923205
 C 0.797572 -0.147323 2.214354
 H 1.540443 0.230075 1.509454
 C -0.737101 -2.132874 -0.672210
 C -0.651154 -3.242916 0.168068
 H -0.587052 -3.109272 1.245153
 C -0.627133 -4.523929 -0.373968
 H -0.548377 -5.385785 0.285486
 C -0.695512 -4.702200 -1.750593
 H -0.674059 -5.705888 -2.170888
 C -0.783223 -3.597271 -2.593080
 H -0.827697 -3.733025 -3.671623
 C -0.798589 -2.315998 -2.059254
 H -0.845270 -1.445921 -2.711868
 C -2.553220 0.080835 -0.057260
 C -2.918869 1.197067 0.702388
 H -2.180636 1.688427 1.334668
 C -4.215984 1.687164 0.640411
 H -4.491243 2.560744 1.227678
 C -5.158092 1.065106 -0.174001
 H -6.175339 1.449244 -0.220628
 C -4.800761 -0.048925 -0.925364
 H -5.537310 -0.541327 -1.557173
 C -3.500639 -0.540872 -0.870832
 H -3.227760 -1.414154 -1.459230
 C 3.403647 0.011034 -0.800805
 C 5.639078 -0.435495 -0.909672
 C 4.716230 0.703824 0.938411
 C 5.848913 0.184215 0.322944
 Si 1.744383 -0.101542 -1.663800

N 3.511148 0.622794 0.395837
 N 4.447536 -0.524129 -1.468425
 H 6.475235 -0.874792 -1.460619
 H 6.835091 0.255950 0.773763
 H 4.786010 1.204549 1.907771
 H 1.769041 2.492829 0.219303
 H 1.395880 4.950809 0.235264
 H -0.607850 5.911836 -0.879137
 H -2.215182 4.401786 -2.026259
 H -1.823715 1.960597 -2.050784

Y_{PhF}SiPyr

E = -2358.81572896
 P -1.601648 -0.069733 0.009954
 C -0.048862 -0.695501 -0.412465
 C 1.114487 0.132413 -0.049968
 C 1.937520 -0.160432 1.038378
 C 3.124658 0.521718 1.269576
 C 3.495647 1.557953 0.421590
 C 2.683294 1.896518 -0.654191
 C 1.511150 1.189091 -0.871326
 C -2.259820 -0.693776 1.586796
 C -3.331034 -0.050891 2.216992
 H -3.767160 0.843907 1.773693
 C -3.829971 -0.549145 3.412658
 H -4.664120 -0.050488 3.902269
 C -3.256385 -1.681581 3.987327
 H -3.645869 -2.067973 4.927342
 C -2.182000 -2.310846 3.369936
 H -1.725417 -3.187004 3.825438
 C -1.679241 -1.818675 2.169310
 H -0.823938 -2.289505 1.687174
 C -2.822512 -0.427449 -1.276789
 C -4.100512 -0.907038 -0.992999
 H -4.393495 -1.114423 0.033329
 C -4.996204 -1.141842 -2.030888
 H -5.988899 -1.527767 -1.808760

C -4.621407 -0.894466 -3.346356
 H -5.324309 -1.082435 -4.155710
 C -3.344971 -0.417271 -3.631879
 H -3.046797 -0.233286 -4.661847
 C -2.441646 -0.190164 -2.602913
 H -1.431963 0.159834 -2.814565
 C -1.531270 1.727793 0.254365
 C -0.914752 2.198184 1.418892
 H -0.582198 1.492840 2.179717
 C -0.724344 3.560703 1.602898
 H -0.239582 3.921581 2.507599
 C -1.151736 4.459881 0.629974
 H -1.001528 5.528023 0.774020
 C -1.770522 3.995229 -0.524988
 H -2.106638 4.697548 -1.284847
 C -1.957832 2.630890 -0.718095
 H -2.434020 2.272066 -1.627550
 C 1.987404 -2.371211 -1.155950
 C 3.771154 -3.140702 0.036082
 C 4.050099 -1.586068 -1.717400
 C 4.631084 -2.332790 -0.697486
 F 0.763284 1.522458 -1.917664
 F 3.039553 2.885511 -1.460199
 F 4.620004 2.221964 0.638656
 F 3.897034 0.203742 2.298108
 F 1.603031 -1.134140 1.876657
 Si 0.062348 -2.298856 -1.262977
 N 2.744217 -1.597833 -1.947245
 N 2.464786 -3.173787 -0.196648
 H 4.149202 -3.781158 0.836666
 H 5.699052 -2.298426 -0.497020
 H 4.661507 -0.950991 -2.363827

³Y_{PhF}SiPyr

E = -2358.76111520
 P -0.278570 1.188221 0.170947
 C -0.238047 -0.312341 -0.665849

C 1.031134 -1.057301 -0.570022
 C 1.268692 -1.985659 0.445238
 C 2.497284 -2.616062 0.595553
 C 3.533493 -2.317094 -0.279789
 C 3.335716 -1.393806 -1.300099
 C 2.098137 -0.780702 -1.429136
 C -1.104391 1.161625 1.788564
 C -0.935954 2.210867 2.699716
 H -0.307469 3.063402 2.442538
 C -1.559008 2.156061 3.938797
 H -1.427921 2.969834 4.649384
 C -2.343765 1.053638 4.272689
 H -2.828526 1.010103 5.246378
 C -2.497364 0.006776 3.371736
 H -3.099854 -0.859516 3.637843
 C -1.875449 0.050517 2.126740
 H -1.976275 -0.783522 1.429736
 C -1.066926 2.480790 -0.827598
 C -1.971551 3.400254 -0.296459
 H -2.255524 3.347769 0.751613
 C -2.530945 4.374005 -1.117004
 H -3.244601 5.082795 -0.702063
 C -2.188031 4.435449 -2.462836
 H -2.630534 5.197165 -3.101944
 C -1.288835 3.516738 -2.996961
 H -1.028097 3.555615 -4.052488
 C -0.733995 2.535321 -2.186763
 H -0.048486 1.794829 -2.597802
 C 1.429380 1.677353 0.545902
 C 2.060296 1.056794 1.629680
 H 1.478981 0.440019 2.314312
 C 3.428558 1.204713 1.815336
 H 3.917280 0.711174 2.652867
 C 4.171142 1.976065 0.925724
 H 5.244441 2.086403 1.067264
 C 3.543375 2.607818 -0.142541
 H 4.122856 3.214963 -0.834741

C 2.175070 2.457180 -0.337726
 H 1.692088 2.936363 -1.186223
 C -2.899119 -2.035266 -1.156532
 C -4.713336 -3.304596 -1.695683
 C -3.812592 -3.328043 0.485218
 C -4.772563 -3.809482 -0.397719
 F 1.953112 0.131093 -2.385206
 F 4.329623 -1.100187 -2.124124
 F 4.707601 -2.909723 -0.142789
 F 2.697575 -3.481112 1.578604
 F 0.325846 -2.241999 1.340216
 Si -1.588976 -0.834601 -1.759485
 N -2.888859 -2.451767 0.121323
 N -3.796130 -2.434758 -2.078499
 H -5.438197 -3.620650 -2.450515
 H -5.526240 -4.530671 -0.092675
 H -3.791022 -3.661639 1.525963

3.3.1.7 Koordinaten der B¹(ylid)substituierten Silylene

YSiB¹

E = -2862.63192165
 C -4.031388 -0.153484 0.579168
 H -3.823801 -0.606409 1.545580
 C -3.068520 -0.208259 -0.413805
 O -1.316891 -1.950387 -1.259697
 C 1.759870 1.866074 2.767456
 H 1.501708 2.916218 2.644221
 C -5.235228 0.491696 0.311133
 H -5.997655 0.545765 1.087006
 C 0.675885 2.578687 -1.989599
 H -0.022724 1.827049 -2.353891
 C 1.081718 2.547475 -0.650300
 C -1.959866 3.016210 0.392085
 H -1.628176 3.297749 -0.605843
 C -3.151565 3.517236 0.896957
 H -3.750254 4.197096 0.294144

Si 0.251259 -1.110092 -2.101224
C -2.823870 2.263661 2.929839
H -3.165617 1.960665 3.917493
C -1.629218 1.756084 2.429676
H -1.048937 1.046967 3.016126
C 1.300378 0.908941 1.854831
C -3.284298 0.356451 -1.668477
H -2.505337 0.290762 -2.429574
C 2.014414 3.477338 -0.190136
H 2.377372 3.437870 0.831796
C -1.187129 2.144356 1.163567
C -6.768414 1.788155 -1.212326
H -7.264239 1.374255 -2.099220
H -6.595265 2.854099 -1.411092
H -7.462720 1.711922 -0.369460
C -3.580851 3.146319 2.168818
H -4.516123 3.540017 2.562314
C -0.233655 0.038788 -0.541789
P 0.264371 1.335933 0.421944
O -1.555074 -1.500630 1.266423
S -1.486505 -0.954423 -0.091525
C -5.479553 1.076994 -0.929897
C -4.486997 0.993714 -1.917139
H -4.666879 1.437414 -2.895608
C 1.184428 3.547252 -2.846198
H 0.870211 3.559822 -3.887841
C 2.092387 4.490050 -2.375812
H 2.485338 5.251224 -3.047323
C 2.509389 4.450062 -1.050440
H 3.236519 5.171615 -0.683594
C 2.793159 0.124156 4.070995
H 3.383880 -0.181343 4.932727
C 2.515546 1.474164 3.863427
H 2.877648 2.221459 4.566836
C 2.293744 -0.831357 3.195040
H 2.485106 -1.889204 3.359157
C 1.542980 -0.443511 2.089178

H 1.129570 -1.190646 1.415198
 N 2.917606 -1.678195 -0.549172
 C 2.561124 -3.557363 0.605645
 C 3.430784 -2.543569 0.411738
 H 2.674267 -4.437130 1.229111
 H 4.410988 -2.403391 0.851955
 B 1.619980 -2.169319 -0.987083
 C 0.380338 -4.292950 -0.232614
 C -0.200327 -4.671223 -1.442801
 C -0.120219 -4.814285 0.960127
 C -1.273127 -5.550047 -1.457302
 H 0.194705 -4.256745 -2.368646
 C -1.184771 -5.706698 0.938560
 H 0.307818 -4.489261 1.905971
 C -1.766878 -6.078177 -0.268150
 H -1.724078 -5.829001 -2.407717
 H -1.572629 -6.100713 1.876229
 H -2.605468 -6.771452 -0.282107
 C 3.523290 -0.459127 -0.877748
 C 3.374974 0.070038 -2.163865
 C 4.292695 0.244558 0.057035
 C 3.983443 1.270681 -2.505122
 H 2.798866 -0.482284 -2.904425
 C 4.914940 1.433472 -0.299993
 H 4.386747 -0.135416 1.071643
 C 4.767800 1.953239 -1.581765
 H 3.851504 1.667414 -3.509961
 H 5.513131 1.963532 0.439428
 H 5.250984 2.888540 -1.855914
 N 1.457504 -3.386870 -0.225218

³YSiB¹

E = -2862.58972114
 C 4.149488 0.909441 0.529567
 H 3.884320 1.357635 1.484152
 C 3.207209 0.891117 -0.487279
 O 1.459767 2.734056 -1.120493

C -1.217997 -1.922399 2.486224
 H -0.781078 -2.903718 2.308487
 C 5.392957 0.329311 0.311707
 H 6.130974 0.330685 1.113195
 C 0.521108 -2.533305 -1.992442
 H 1.298522 -1.809884 -2.234137
 C -0.215844 -2.376158 -0.809989
 C 2.741880 -2.377952 0.514452
 H 2.548974 -2.775457 -0.478266
 C 3.922605 -2.709742 1.165977
 H 4.644092 -3.359179 0.673900
 Si -0.894043 0.747382 -1.876782
 C 3.259536 -1.375501 3.058084
 H 3.462215 -0.976375 4.049863
 C 2.077812 -1.036140 2.411019
 H 1.371305 -0.359031 2.884362
 C -0.902144 -0.847077 1.648299
 C 3.503834 0.330671 -1.724692
 H 2.755444 0.349587 -2.515567
 C -1.257327 -3.256758 -0.526417
 H -1.888349 -3.109193 0.345265
 C 1.808712 -1.546018 1.137785
 C 7.023967 -0.960493 -1.106069
 H 7.296166 -1.014207 -2.165664
 H 6.986687 -1.991278 -0.724850
 H 7.830120 -0.447499 -0.569771
 C 4.180403 -2.213901 2.439924
 H 5.105185 -2.477703 2.949802
 C 0.461327 0.385619 -0.694839
 P 0.284719 -1.018556 0.284426
 O 1.502540 1.820328 1.248604
 S 1.586995 1.597713 -0.209148
 C 5.706116 -0.274187 -0.907321
 C 4.746109 -0.253468 -1.924846
 H 4.980676 -0.701780 -2.889717
 C 0.242942 -3.583092 -2.853642
 H 0.819217 -3.697140 -3.769520

C -0.780060 -4.479662 -2.551570
 H -0.999948 -5.303310 -3.228125
 C -1.531059 -4.307687 -1.396997
 H -2.354306 -4.982051 -1.172689
 C -2.586172 -0.464790 3.829691
 H -3.247295 -0.316006 4.681600
 C -2.070192 -1.732168 3.565077
 H -2.320945 -2.570749 4.211724
 C -2.240848 0.611806 3.021217
 H -2.624163 1.606975 3.234083
 C -1.397090 0.424435 1.930237
 H -1.083942 1.263474 1.313484
 N -3.658725 0.796501 -0.432696
 C -3.653453 2.819680 0.525534
 C -4.306548 1.635832 0.465116
 H -3.910457 3.711913 1.085631
 H -5.223011 1.339611 0.962048
 B -2.505642 1.495357 -0.953069
 C -1.595784 3.817814 -0.389870
 C -1.288957 4.414522 -1.610381
 C -0.918690 4.203676 0.764721
 C -0.307717 5.393987 -1.671535
 H -1.823080 4.096719 -2.502838
 C 0.062354 5.183831 0.695760
 H -1.142254 3.710232 1.708772
 C 0.367841 5.782465 -0.520176
 H -0.063622 5.851467 -2.628142
 H 0.605369 5.462829 1.596226
 H 1.145689 6.541297 -0.574192
 C -4.009119 -0.554903 -0.584263
 C -3.972089 -1.154469 -1.845646
 C -4.412206 -1.308806 0.520929
 C -4.361271 -2.477993 -1.998152
 H -3.660095 -0.563252 -2.703097
 C -4.809619 -2.631021 0.357765
 H -4.393791 -0.855578 1.509836
 C -4.794781 -3.219209 -0.902428

H -4.333751 -2.931317 -2.987138
H -5.128222 -3.204435 1.226567
H -5.115553 -4.251344 -1.030631
N -2.565681 2.788346 -0.331942

Y_{Ph}SiB¹

E = -2274.04404077
P 1.702728 -0.481255 -0.072151
C -0.000383 -0.260501 -0.282675
C -0.769481 -0.344807 0.989011
C -0.986082 0.784920 1.790981
H -0.575987 1.741202 1.472901
C -1.724805 0.702650 2.965013
H -1.886071 1.597903 3.564177
C -2.259068 -0.516588 3.372338
H -2.840556 -0.582467 4.290251
C -2.045221 -1.648967 2.593258
H -2.463736 -2.607751 2.895451
C -1.306829 -1.564822 1.418571
H -1.154378 -2.449831 0.802225
C 2.527626 0.992336 0.622312
C 3.692442 0.884902 1.387766
H 4.108918 -0.095692 1.611464
C 4.316074 2.029633 1.869136
H 5.220962 1.941866 2.467383
C 3.780145 3.283751 1.590690
H 4.266531 4.178933 1.974053
C 2.622229 3.394163 0.828172
H 2.194362 4.369832 0.610198
C 1.994668 2.251987 0.343326
H 1.083058 2.333371 -0.249116
C 2.549666 -0.867901 -1.622963
C 3.743340 -0.241766 -1.978768
H 4.166375 0.530304 -1.340185
C 4.387871 -0.596706 -3.159501
H 5.315000 -0.099852 -3.437773
C 3.847045 -1.578105 -3.981254

H 4.352597 -1.852916 -4.905130
 C 2.655594 -2.206103 -3.627701
 H 2.226015 -2.967965 -4.274810
 C 2.002985 -1.850525 -2.455806
 H 1.060355 -2.320647 -2.182308
 C 2.116803 -1.803240 1.109832
 C 1.796935 -1.613714 2.459726
 H 1.365687 -0.670098 2.790904
 C 2.021454 -2.630505 3.377637
 H 1.763025 -2.477000 4.423288
 C 2.568048 -3.840678 2.960524
 H 2.742691 -4.636665 3.681991
 C 2.893314 -4.031019 1.622562
 H 3.327068 -4.973261 1.293621
 C 2.668563 -3.016823 0.697346
 H 2.929466 -3.171919 -0.347028
 Si -0.611005 0.297851 -1.900074
 N -3.552558 -0.026536 -0.724922
 C -3.984110 2.009470 0.101121
 C -4.439090 0.742483 0.024623
 H -4.460830 2.870261 0.555823
 H -5.375041 0.346256 0.399397
 B -2.437668 0.806695 -1.124599
 N -2.787536 2.112216 -0.604091
 C -1.964536 3.243300 -0.575082
 C -1.885384 4.053198 0.562771
 C -1.178444 3.563366 -1.687846
 C -1.035162 5.152175 0.584933
 H -2.474455 3.796917 1.440857
 C -0.319884 4.654011 -1.652390
 H -1.258104 2.954518 -2.586192
 C -0.245260 5.458761 -0.518763
 H -0.983815 5.768992 1.480504
 H 0.284637 4.884175 -2.527725
 H 0.417631 6.321582 -0.498526
 C -3.657732 -1.414594 -0.867249
 C -3.027967 -2.053594 -1.940505

C -4.348941 -2.194187 0.065202
 C -3.062311 -3.436110 -2.057664
 H -2.521843 -1.454509 -2.695839
 C -4.393929 -3.575968 -0.068832
 H -4.809090 -1.719537 0.927834
 C -3.745373 -4.209161 -1.123651
 H -2.560928 -3.911291 -2.899087
 H -4.929855 -4.165023 0.673601
 H -3.776384 -5.292342 -1.220013

³Y_{Ph}SiB¹

E = -2274.00252995
 P -0.609489 1.368202 -0.080558
 C 0.720028 0.619063 -0.875276
 C 2.096997 1.008116 -0.556751
 C 2.479277 1.503117 0.705955
 H 1.737842 1.584575 1.499758
 C 3.787101 1.887503 0.972699
 H 4.038452 2.269766 1.961163
 C 4.768703 1.781386 -0.005317
 H 5.793518 2.082882 0.202342
 C 4.418815 1.268453 -1.252657
 H 5.175747 1.161506 -2.028301
 C 3.113800 0.888379 -1.523094
 H 2.849918 0.494522 -2.504059
 C -1.156558 0.524429 1.444846
 C -2.389202 0.787910 2.051494
 H -3.094720 1.469116 1.577703
 C -2.716560 0.177940 3.256032
 H -3.676045 0.386584 3.725440
 C -1.818186 -0.698819 3.859600
 H -2.075149 -1.172715 4.805358
 C -0.601460 -0.981319 3.247849
 H 0.093781 -1.684116 3.701399
 C -0.271059 -0.375974 2.039695
 H 0.674830 -0.601446 1.546742
 C -2.091767 1.485270 -1.128504

C -3.087544 0.506526 -1.089917
 H -3.009069 -0.335904 -0.406503
 C -4.191652 0.610101 -1.929261
 H -4.964747 -0.152540 -1.885330
 C -4.301935 1.673914 -2.816809
 H -5.167329 1.748807 -3.472733
 C -3.306153 2.644252 -2.864950
 H -3.386560 3.479218 -3.558021
 C -2.207282 2.554261 -2.020762
 H -1.437216 3.321167 -2.055703
 C -0.230227 3.088393 0.399747
 C -0.708316 3.674949 1.571532
 H -1.319268 3.100959 2.263410
 C -0.391230 4.996123 1.869403
 H -0.767087 5.446343 2.786088
 C 0.406944 5.735772 1.004407
 H 0.657139 6.767887 1.242551
 C 0.895036 5.151666 -0.160541
 H 1.533322 5.721187 -0.832887
 C 0.583220 3.832681 -0.461643
 H 0.985757 3.362630 -1.357402
 Si 0.267712 -0.875802 -1.857785
 N 1.567183 -2.848512 0.103408
 C -0.139526 -3.794050 1.197151
 C 1.204015 -3.642678 1.183221
 H -0.747598 -4.394704 1.863723
 H 1.945993 -4.097018 1.830345
 B 0.373015 -2.432842 -0.589720
 N -0.690555 -3.102707 0.125150
 C -2.072106 -2.974127 -0.071303
 C -2.934720 -2.808549 1.014097
 C -2.596915 -2.998942 -1.366720
 C -4.301249 -2.664382 0.805605
 H -2.523456 -2.764503 2.018946
 C -3.963480 -2.858962 -1.566313
 H -1.921679 -3.139653 -2.207139
 C -4.823184 -2.690854 -0.483831

H -4.960844 -2.524569 1.660135
H -4.359559 -2.883785 -2.579783
H -5.894348 -2.584578 -0.644239
C 2.907997 -2.515057 -0.177364
C 3.412794 -2.696043 -1.465435
C 3.739357 -2.016532 0.825322
C 4.740162 -2.393439 -1.739840
H 2.755160 -3.086920 -2.238147
C 5.066307 -1.718287 0.544135
H 3.331603 -1.843462 1.819676
C 5.573433 -1.912017 -0.736040
H 5.126894 -2.543080 -2.746193
H 5.702820 -1.313917 1.328452
H 6.612738 -1.674351 -0.953516

$Y_{PhF}SiB^1$

E = -2770.95300182
P 2.035793 0.396953 0.046825
C 0.391122 0.122205 -0.405357
C -0.498131 -0.431862 0.627664
C -1.413257 0.364311 1.318981
C -2.378375 -0.170354 2.158069
C -2.397528 -1.540850 2.388853
C -1.458470 -2.356243 1.770767
C -0.522468 -1.797718 0.912699
C 2.411592 2.132768 0.444840
C 3.607713 2.472168 1.086925
H 4.324840 1.695342 1.351317
C 3.873058 3.798065 1.401537
H 4.804189 4.061475 1.899382
C 2.942262 4.786885 1.089322
H 3.149509 5.824905 1.342921
C 1.745366 4.448543 0.468972
H 1.006748 5.213984 0.239326
C 1.475691 3.122208 0.146691
H 0.528714 2.848122 -0.315872
C 3.169372 -0.161511 -1.249316

C 4.294090 0.557300 -1.649829
 H 4.514136 1.525437 -1.206327
 C 5.122981 0.044473 -2.642603
 H 5.993260 0.612764 -2.964354
 C 4.835205 -1.182771 -3.228621
 H 5.485368 -1.578598 -4.006521
 C 3.710782 -1.900831 -2.829649
 H 3.479462 -2.857671 -3.293667
 C 2.871638 -1.391214 -1.848995
 H 1.972011 -1.928879 -1.550246
 C 2.434004 -0.501262 1.572750
 C 1.919659 0.000749 2.773203
 H 1.392734 0.954528 2.780229
 C 2.074515 -0.718707 3.950068
 H 1.668610 -0.327260 4.880554
 C 2.744970 -1.938760 3.936009
 H 2.865347 -2.502952 4.858780
 C 3.260134 -2.437480 2.745053
 H 3.784566 -3.390632 2.733558
 C 3.102671 -1.724352 1.561475
 H 3.497067 -2.123789 0.629994
 Si -0.086325 0.616039 -2.090225
 N -2.685631 -1.102889 -1.674087
 C -4.237850 0.373083 -1.026658
 C -3.984167 -0.941370 -1.198387
 H -5.167590 0.844646 -0.730694
 H -4.666239 -1.774910 -1.079774
 B -2.065081 0.201454 -1.782190
 N -3.113689 1.113127 -1.384982
 C -3.002749 2.498682 -1.188863
 C -3.670604 3.134267 -0.139081
 C -2.179957 3.255585 -2.027508
 C -3.509304 4.497709 0.067905
 H -4.269618 2.544102 0.550720
 C -2.007784 4.615439 -1.800985
 H -1.685595 2.773130 -2.868707
 C -2.673257 5.246496 -0.754589

H -4.028641 4.975524 0.896667
H -1.360038 5.187475 -2.463094
H -2.545965 6.313550 -0.584145
C -2.044277 -2.342169 -1.800570
C -0.950466 -2.472449 -2.662666
C -2.433557 -3.448171 -1.038891
C -0.236639 -3.661253 -2.721399
H -0.674325 -1.639767 -3.308712
C -1.716287 -4.635483 -1.106136
H -3.268133 -3.362192 -0.347353
C -0.608152 -4.748461 -1.937974
H 0.612697 -3.737532 -3.398599
H -2.018293 -5.472972 -0.480612
H -0.044108 -5.677603 -1.979905
F -1.380696 1.682608 1.161474
F -3.267515 0.614716 2.751723
F -3.316272 -2.069924 3.182513
F -1.495964 -3.666725 1.967709
F 0.333813 -2.612228 0.305259

³Y_{PhF}SiB¹

E = -2770.90102294
P -1.558349 1.435406 0.034983
C -0.304383 0.298951 -0.211624
C -0.515583 -1.023830 -0.791685
C 0.315971 -1.535232 -1.801802
C 0.205824 -2.832031 -2.283169
C -0.780164 -3.675457 -1.789589
C -1.634255 -3.207187 -0.801915
C -1.485246 -1.920268 -0.314074
C -1.410738 2.950401 -0.976532
C -2.443623 3.894071 -0.952636
H -3.313857 3.733176 -0.316373
C -2.368208 5.029120 -1.747513
H -3.173040 5.761264 -1.725792
C -1.267223 5.223063 -2.579157
H -1.209439 6.112239 -3.204197

C -0.251063 4.276347 -2.621812
 H 0.602575 4.418286 -3.281370
 C -0.322437 3.135683 -1.826285
 H 0.459700 2.378305 -1.869180
 C -1.635078 1.990944 1.765638
 C -1.563142 3.324835 2.164892
 H -1.476710 4.116473 1.425246
 C -1.575333 3.644351 3.519501
 H -1.508118 4.685852 3.827407
 C -1.662321 2.639054 4.474786
 H -1.669699 2.893391 5.532966
 C -1.726838 1.304970 4.078898
 H -1.783505 0.515060 4.825563
 C -1.703573 0.978944 2.730366
 H -1.722437 -0.060179 2.406521
 C -3.190763 0.820423 -0.451967
 C -3.333867 0.364368 -1.765583
 H -2.487925 0.406892 -2.450499
 C -4.553665 -0.142596 -2.192305
 H -4.661327 -0.504448 -3.212720
 C -5.634893 -0.185258 -1.316646
 H -6.590674 -0.582263 -1.652962
 C -5.495903 0.280363 -0.013925
 H -6.341517 0.249128 0.670096
 C -4.274172 0.779665 0.423796
 H -4.162978 1.128580 1.448243
 Si 1.387982 0.854300 0.253681
 N 2.632347 -1.850094 1.066884
 C 4.810661 -1.513961 0.654490
 C 3.886724 -2.443930 0.976799
 H 5.883770 -1.636650 0.569012
 H 4.037776 -3.490554 1.213823
 B 2.774771 -0.447854 0.735051
 N 4.198952 -0.275432 0.514149
 C 4.878434 0.878148 0.105798
 C 5.967678 0.805689 -0.767964
 C 4.456589 2.131475 0.560902

C 6.616466 1.963661 -1.175012
 H 6.285831 -0.160960 -1.151384
 C 5.100983 3.285890 0.134956
 H 3.641485 2.187063 1.280144
 C 6.185652 3.210533 -0.731586
 H 7.459766 1.889981 -1.859360
 H 4.758757 4.252686 0.499711
 H 6.693929 4.115493 -1.057626
 C 1.495264 -2.568949 1.470645
 C 0.582387 -1.994784 2.360084
 C 1.281752 -3.873633 1.019063
 C -0.517139 -2.723096 2.791392
 H 0.757550 -0.980088 2.713425
 C 0.176741 -4.593966 1.456384
 H 1.975467 -4.311912 0.304412
 C -0.730284 -4.023135 2.342303
 H -1.220207 -2.268168 3.487400
 H 0.010849 -5.601467 1.079118
 H -1.601945 -4.583392 2.672075
 F 1.262380 -0.767136 -2.332801
 F 1.026649 -3.263478 -3.230221
 F -0.887296 -4.919952 -2.233830
 F -2.544031 -4.017585 -0.280024
 F -2.288915 -1.560621 0.687993

3.3.1.8 Koordinaten der B²(ylid)substituierten Silylene

YSiB²

E = -2593.44571423
 C -3.349642 -2.087111 0.896981
 H -2.821079 -2.380777 1.800549
 C -2.624377 -1.777209 -0.240834
 O -0.441869 -2.621745 -1.422304
 C 1.350537 2.205368 2.256819
 H 0.634103 3.026350 2.260695
 C -4.738330 -2.005030 0.851379
 H -5.317639 -2.241957 1.742674

C -0.687830 2.345891 -2.215417
 H -1.260031 1.445354 -2.432411
 C 0.008206 2.445071 -1.005218
 C -2.843936 1.680100 0.520214
 H -2.820125 2.041228 -0.506250
 C -4.042662 1.654167 1.218498
 H -4.955167 2.001383 0.738246
 Si 0.346444 -1.178739 -2.496594
 C -2.913778 0.721272 3.133451
 H -2.941684 0.336396 4.150829
 C -1.708883 0.740588 2.438318
 H -0.803547 0.354891 2.902389
 C 1.196907 1.136919 1.365517
 C -3.255134 -1.395502 -1.422824
 H -2.656093 -1.160293 -2.304086
 C 0.797096 3.568013 -0.750328
 H 1.376366 3.638105 0.165839
 C -1.669454 1.236769 1.133623
 C -6.895421 -1.519480 -0.358808
 H -7.311805 -2.184303 -1.126217
 H -7.217180 -0.500500 -0.610178
 H -7.346183 -1.788931 0.601626
 C -4.076810 1.181588 2.528218
 H -5.018376 1.162055 3.073683
 C -0.227985 -0.348448 -0.780722
 P -0.150924 1.060153 0.152053
 O -0.469488 -2.248168 1.138684
 S -0.845754 -1.773254 -0.193288
 C -5.400579 -1.617872 -0.312204
 C -4.636520 -1.319092 -1.449492
 H -5.139243 -1.023573 -2.369560
 C -0.614801 3.376035 -3.144617
 H -1.152461 3.289357 -4.086364
 C 0.158233 4.501267 -2.879338
 H 0.220286 5.304015 -3.611573
 C 0.867183 4.592908 -1.686227
 H 1.488292 5.463268 -1.485040

C 3.314290 1.145427 3.168213
 H 4.150566 1.156639 3.864671
 C 2.410869 2.207273 3.153048
 H 2.533634 3.038560 3.844636
 C 3.141054 0.066560 2.310606
 H 3.835295 -0.771422 2.323973
 C 2.072844 0.055680 1.419485
 H 1.891407 -0.805405 0.781537
 C 4.200750 -0.804391 -0.940209
 C 3.928644 -2.094817 -0.490651
 C 5.352725 -0.134038 -0.577720
 C 4.798595 -2.776795 0.338524
 C 6.238429 -0.813787 0.262425
 H 5.547108 0.876122 -0.928006
 C 5.968679 -2.107481 0.709496
 H 4.571324 -3.782209 0.682739
 H 7.158574 -0.323111 0.573082
 H 6.683117 -2.607214 1.360519
 B 2.220726 -1.414747 -1.720121
 O 3.165538 -0.379890 -1.709261
 O 2.720720 -2.484852 -0.975181

³YSiB²

E = -2593.40539726
 C 2.928538 -2.358075 -1.287294
 H 2.628996 -2.100066 -2.300323
 C 2.002430 -2.244789 -0.262590
 O -0.562660 -2.789926 -0.330007
 C 0.222921 3.242622 -1.729188
 H 1.179615 3.642377 -1.393938
 C 4.221787 -2.774307 -0.989359
 H 4.954514 -2.858188 -1.791112
 C 1.128230 1.522039 2.764466
 H 1.406491 0.469388 2.752850
 C 0.692426 2.134513 1.582596
 C 3.442568 0.919931 0.312051
 H 3.277708 0.935363 1.386482

C 4.731978 0.769587 -0.180746
 H 5.564658 0.665342 0.511705
 Si -1.252219 -0.711544 1.757411
 C 3.886535 0.874357 -2.434310
 H 4.056205 0.847056 -3.508743
 C 2.592521 1.017758 -1.948192
 H 1.751789 1.073565 -2.634487
 C -0.264426 2.043389 -1.197852
 C 2.345935 -2.559335 1.048980
 H 1.600805 -2.472487 1.838741
 C 0.293317 3.470854 1.607233
 H -0.078569 3.949612 0.705487
 C 2.367790 1.055333 -0.570141
 C 6.009458 -3.473723 0.643961
 H 6.034699 -4.308858 1.353757
 H 6.558429 -2.641650 1.106568
 H 6.559412 -3.772136 -0.254616
 C 4.955635 0.753208 -1.554129
 H 5.967237 0.637372 -1.938666
 C 0.013999 -0.400990 0.478753
 P 0.664959 1.137670 0.065101
 O 0.406882 -1.130693 -1.996437
 S 0.345471 -1.682451 -0.630821
 C 4.602219 -3.071747 0.318806
 C 3.640781 -2.963433 1.331571
 H 3.915652 -3.204595 2.357896
 C 1.185572 2.247835 3.946204
 H 1.523858 1.764088 4.860030
 C 0.795017 3.583526 3.963254
 H 0.831726 4.149599 4.891941
 C 0.345154 4.190140 2.796676
 H 0.023440 5.229409 2.809877
 C -1.715399 3.386087 -3.148952
 H -2.285150 3.911833 -3.912971
 C -0.506466 3.914076 -2.700560
 H -0.129025 4.846711 -3.115083
 C -2.187897 2.184664 -2.633913

H -3.124433 1.763527 -2.993624
 C -1.462806 1.504447 -1.660737
 H -1.814710 0.551021 -1.273822
 C -5.248546 -1.346196 0.969977
 C -4.782522 -1.049911 -0.309232
 C -6.574291 -1.650148 1.209624
 C -5.617706 -1.045526 -1.408749
 C -7.428274 -1.646558 0.104145
 H -6.924807 -1.880945 2.211923
 C -6.960741 -1.351277 -1.176212
 H -5.237932 -0.820944 -2.402022
 H -8.480876 -1.881919 0.246317
 H -7.655469 -1.362262 -2.013352
 B -3.094471 -0.938968 1.095035
 O -4.211585 -1.277030 1.848032
 O -3.449789 -0.788815 -0.244083

$Y_{Ph}SiB^2$

E = -2004.85620145
 P -1.628311 -0.113231 -0.043984
 C 0.012776 -0.560385 -0.387767
 C 0.988751 0.545799 -0.173925
 C 1.617118 0.742295 1.063867
 C 2.574117 1.738052 1.234452
 C 2.917456 2.568656 0.173843
 C 2.291876 2.397349 -1.058080
 C 1.338238 1.402596 -1.227417
 C -2.001328 -0.082989 1.742583
 C -2.958133 0.781231 2.281727
 H -3.476622 1.490610 1.639450
 C -3.244912 0.737855 3.641086
 H -3.987506 1.414886 4.058727
 C -2.581800 -0.166341 4.465343
 H -2.805266 -0.195372 5.530161
 C -1.631316 -1.030022 3.930476
 H -1.110846 -1.736969 4.573324
 C -1.339273 -0.988510 2.572194

H -0.592710 -1.655650 2.141457
 C -2.828982 -1.238778 -0.794348
 C -3.930914 -1.709109 -0.080570
 H -4.063340 -1.435758 0.963680
 C -4.857013 -2.540107 -0.702373
 H -5.710764 -2.911579 -0.139463
 C -4.688825 -2.898332 -2.034579
 H -5.413532 -3.550981 -2.517683
 C -3.591072 -2.428711 -2.750440
 H -3.452870 -2.715078 -3.790848
 C -2.659525 -1.605021 -2.134033
 H -1.788656 -1.250284 -2.681230
 C -2.038112 1.568473 -0.604140
 C -1.418405 2.651131 0.031657
 H -0.749542 2.479739 0.873694
 C -1.649484 3.944940 -0.414535
 H -1.158690 4.779948 0.080944
 C -2.499451 4.170535 -1.493475
 H -2.678747 5.185888 -1.841962
 C -3.121344 3.099143 -2.123993
 H -3.791444 3.272383 -2.963634
 C -2.892749 1.799722 -1.682836
 H -3.386279 0.966574 -2.178121
 H 1.368445 0.079788 1.891029
 H 3.063289 1.855046 2.199899
 H 3.675619 3.338507 0.303171
 H 2.555997 3.039108 -1.897058
 H 0.858149 1.261558 -2.194015
 Si 0.400383 -2.301393 -0.742074
 C 4.321736 -0.863343 -0.943409
 C 4.300603 -1.326514 0.369657
 C 5.379780 -0.128687 -1.440389
 C 5.336227 -1.076224 1.247721
 C 6.430239 0.135887 -0.558235
 H 5.378693 0.232610 -2.465218
 C 6.409526 -0.328231 0.756596
 H 5.304779 -1.439882 2.271432

H 7.281609 0.718122 -0.904883
H 7.245356 -0.101948 1.415538
B 2.389493 -1.865805 -0.592791
O 3.130165 -1.984478 0.586110
O 3.168821 -1.234074 -1.560558

³Y_{Ph}SiB²

E = -2004.81483694
P 1.270373 -0.493673 0.025065
C 0.415562 0.816715 -0.689930
C 1.025091 2.166817 -0.677297
C 1.475891 2.779418 -1.856462
C 2.021584 4.057626 -1.842409
C 2.142599 4.756807 -0.646110
C 1.699102 4.167053 0.533740
C 1.142453 2.894882 0.517345
C 2.511469 -1.317463 -1.036763
C 3.523039 -2.108029 -0.481786
H 3.589856 -2.228444 0.598756
C 4.448793 -2.732690 -1.307802
H 5.235183 -3.346887 -0.873351
C 4.373657 -2.566547 -2.688428
H 5.102678 -3.052840 -3.333947
C 3.374137 -1.774465 -3.241963
H 3.318179 -1.638338 -4.320041
C 2.444116 -1.147968 -2.418551
H 1.659297 -0.521272 -2.841535
C 0.114138 -1.781064 0.560347
C 0.342198 -3.141687 0.352985
H 1.236656 -3.475003 -0.167915
C -0.592251 -4.072933 0.793604
H -0.418362 -5.133069 0.620885
C -1.749593 -3.651876 1.439483
H -2.481700 -4.384450 1.774032
C -1.977787 -2.294635 1.649837
H -2.888784 -1.959564 2.142128
C -1.049817 -1.359217 1.212226

H -1.236523 -0.295421 1.343188
 C 2.250681 0.013988 1.467268
 C 3.417342 0.751833 1.242287
 H 3.744636 0.953852 0.223358
 C 4.149308 1.238398 2.316222
 H 5.051692 1.818675 2.135564
 C 3.725379 0.989211 3.618593
 H 4.300711 1.370808 4.459937
 C 2.568722 0.251513 3.845668
 H 2.239076 0.051048 4.863099
 C 1.828278 -0.234872 2.773196
 H 0.923362 -0.810921 2.954353
 H 1.391131 2.231423 -2.794139
 H 2.360035 4.507821 -2.774334
 H 2.572977 5.756414 -0.633940
 H 1.775327 4.707289 1.476124
 H 0.777037 2.449291 1.440652
 Si -0.929884 0.363279 -1.854755
 C -4.464100 0.639668 0.271077
 C -4.949962 0.202231 -0.959957
 C -5.297330 0.847244 1.353183
 C -6.293372 -0.045480 -1.165039
 C -6.657906 0.597315 1.155412
 H -4.904877 1.192585 2.306125
 C -7.144536 0.161245 -0.076431
 H -6.659607 -0.385601 -2.129938
 H -7.351330 0.748721 1.980012
 H -8.210501 -0.022022 -0.194018
 B -2.763608 0.434993 -1.120854
 O -3.913241 0.078266 -1.827111
 O -3.117591 0.795722 0.184428

$Y_{PhF}SiB^2$

E = -2501.76361265
 P 2.012065 -0.023599 0.096022
 C 0.473836 0.044399 0.902559
 C -0.686975 0.040914 -0.015404

C -1.358671 -1.126860 -0.376027
 C -2.508145 -1.109168 -1.155823
 C -2.989867 0.099834 -1.636677
 C -2.317617 1.279529 -1.337196
 C -1.177164 1.234969 -0.551262
 C 2.733768 -1.686330 -0.039594
 C 3.760308 -1.941577 -0.955820
 H 4.124654 -1.144209 -1.602887
 C 4.303745 -3.215598 -1.048494
 H 5.101548 -3.414334 -1.761316
 C 3.820673 -4.238489 -0.235092
 H 4.244109 -5.238081 -0.313054
 C 2.792732 -3.988291 0.666206
 H 2.407158 -4.789906 1.292545
 C 2.244898 -2.713319 0.764977
 H 1.424998 -2.509146 1.451153
 C 3.229045 1.046373 0.900634
 C 4.549620 0.654410 1.116933
 H 4.880449 -0.341388 0.832015
 C 5.441225 1.534484 1.720943
 H 6.468025 1.222380 1.899849
 C 5.019971 2.802769 2.103576
 H 5.720243 3.487077 2.578729
 C 3.701308 3.195049 1.890653
 H 3.367335 4.183310 2.199488
 C 2.802554 2.318842 1.298476
 H 1.761934 2.604293 1.150177
 C 1.807237 0.514986 -1.625291
 C 1.248968 -0.393326 -2.531861
 H 1.082491 -1.427202 -2.231408
 C 0.893097 0.026682 -3.806021
 H 0.451542 -0.680898 -4.504630
 C 1.096203 1.351212 -4.183681
 H 0.813533 1.680993 -5.181433
 C 1.659222 2.253102 -3.287986
 H 1.820142 3.287760 -3.583099
 C 2.010990 1.840090 -2.007586

H 2.436177 2.553613 -1.305755
 Si 0.435023 0.094556 2.722989
 C -3.568233 0.661969 1.810847
 C -3.553711 -0.725160 1.928042
 C -4.620013 1.334252 1.219423
 C -4.587628 -1.509231 1.455720
 C -5.666451 0.550129 0.728150
 H -4.608086 2.415952 1.115028
 C -5.649315 -0.840356 0.842090
 H -4.550604 -2.592553 1.529939
 H -6.506806 1.034131 0.235462
 H -6.477237 -1.417990 0.436986
 B -1.601001 0.049875 2.594960
 O -2.364595 -1.110094 2.468030
 O -2.389830 1.156771 2.279487
 F -0.555767 2.377723 -0.278986
 F -0.916646 -2.301157 0.058590
 F -3.153582 -2.233072 -1.428211
 F -2.787716 2.433973 -1.785716
 F -4.100307 0.135405 -2.353163

${}^3Y_{PhF}SiB^2$

E = -2501.72102022
 P -0.845216 1.263072 0.189689
 C -0.271333 -0.003960 -0.820460
 C -1.018244 -1.272302 -0.750630
 C -2.116734 -1.550594 -1.564448
 C -2.872364 -2.706139 -1.418508
 C -2.541895 -3.617934 -0.423544
 C -1.458128 -3.371967 0.410957
 C -0.711459 -2.215713 0.233979
 C -1.896500 2.521836 -0.599601
 C -2.630806 3.424363 0.177177
 H -2.574298 3.380618 1.264675
 C -3.441964 4.367485 -0.439278
 H -4.014131 5.069166 0.164439
 C -3.527812 4.408149 -1.829336

H -4.166658 5.145992 -2.311056
 C -2.810153 3.501817 -2.601098
 H -2.887990 3.525437 -3.686026
 C -1.996164 2.553604 -1.989001
 H -1.448187 1.821331 -2.580237
 C 0.539713 2.128936 0.972112
 C 0.632032 3.518328 1.061367
 H -0.153186 4.149575 0.652685
 C 1.749604 4.097779 1.651890
 H 1.826163 5.181512 1.711604
 C 2.772662 3.297501 2.149608
 H 3.649433 3.757083 2.601935
 C 2.684189 1.911340 2.057543
 H 3.490751 1.282604 2.429687
 C 1.572830 1.324660 1.467234
 H 1.508395 0.243413 1.357710
 C -1.908622 0.520542 1.457577
 C -3.217835 0.189464 1.091069
 H -3.615789 0.528413 0.135105
 C -3.998357 -0.591754 1.932783
 H -5.012300 -0.856080 1.639673
 C -3.479319 -1.039777 3.144209
 H -4.088768 -1.657169 3.801120
 C -2.183644 -0.698400 3.517536
 H -1.779566 -1.045332 4.466138
 C -1.394078 0.076454 2.675268
 H -0.373565 0.321027 2.960236
 Si 1.099137 0.316027 -1.982243
 C 4.551106 -0.982748 -0.127308
 C 5.095627 -0.434154 -1.286813
 C 5.340781 -1.549312 0.854288
 C 6.457220 -0.428353 -1.519187
 C 6.719560 -1.546600 0.628597
 H 4.901005 -1.978269 1.750903
 C 7.264915 -0.998785 -0.532268
 H 6.869492 0.001456 -2.428068
 H 7.380687 -1.983918 1.373781

H 8.343406 -1.016335 -0.674201
 B 2.908634 -0.195036 -1.366860
 O 4.090589 0.050817 -2.061993
 O 3.199501 -0.847410 -0.167094
 F 0.293969 -1.991815 1.071368
 F -2.502029 -0.663356 -2.474970
 F -3.918425 -2.934349 -2.198224
 F -1.154097 -4.236413 1.366273
 F -3.259131 -4.718028 -0.269707

3.3.1.9 Koordinaten der cyclischen Silylene

V^{Si}

E = -1307.89084248
 C -1.631093 2.185146 0.105973
 C 0.493361 1.018306 0.103009
 C 1.158918 2.239807 0.233555
 C 0.430365 3.421237 0.285614
 C -0.962027 3.397023 0.214501
 H -2.720649 2.187350 0.066654
 H 2.243336 2.263135 0.303823
 H 0.954369 4.369709 0.387260
 H -1.527484 4.326220 0.252194
 N 1.076829 -0.241792 0.060797
 Si -0.073639 -1.621699 -0.029334
 C 2.476466 -0.415537 0.008615
 C 3.249039 0.203913 -0.979761
 C 3.105121 -1.262929 0.923559
 C 4.618847 -0.013468 -1.039471
 H 2.758771 0.848756 -1.706178
 C 4.474577 -1.490028 0.849595
 H 2.502120 -1.738778 1.694180
 C 5.239183 -0.862621 -0.126931
 H 5.205880 0.475462 -1.815131
 H 4.947372 -2.156317 1.568988
 H 6.312369 -1.034534 -0.179543
 C -0.926758 0.973185 0.055542

C -1.421022 -0.385420 -0.019640
P -3.076553 -0.797234 -0.082923
C -4.045878 -0.269126 1.362358
H -3.947694 0.813732 1.489781
H -5.104372 -0.532075 1.254881
H -3.628292 -0.756194 2.249748
C -3.970989 -0.129434 -1.518322
H -5.031920 -0.403035 -1.492958
H -3.873891 0.960863 -1.533223
H -3.504557 -0.526193 -2.426091
C -3.285917 -2.589994 -0.175453
H -4.351412 -2.841100 -0.204803
H -2.788777 -2.967512 -1.074846
H -2.816879 -3.055017 0.697751

^3VSi

E = -1307.79348567
C 1.679103 2.157942 -0.085798
C -0.498359 1.022336 -0.209483
C -1.109048 2.278548 -0.402812
C -0.349505 3.430780 -0.388525
C 1.046809 3.373396 -0.214831
H 2.764159 2.129993 0.007495
H -2.181119 2.330915 -0.569449
H -0.834188 4.394554 -0.532272
H 1.628748 4.292955 -0.208411
N -1.126706 -0.179328 -0.186852
Si 0.050762 -1.613376 -0.630468
C -2.495107 -0.356545 -0.022333
C -3.251766 0.435157 0.857688
C -3.134027 -1.419116 -0.680259
C -4.600726 0.180176 1.051214
H -2.761996 1.229727 1.415426
C -4.484591 -1.668158 -0.474999
H -2.555598 -2.030407 -1.371138
C -5.230267 -0.869190 0.384455
H -5.164882 0.800005 1.746318

H -4.959563 -2.494437 -1.001294
H -6.289047 -1.064628 0.540762
C 0.944319 0.941599 -0.074564
C 1.422232 -0.378174 0.041247
P 3.067280 -0.813016 0.213301
C 4.193799 -0.332741 -1.138524
H 4.205611 0.757292 -1.240052
H 5.212665 -0.695972 -0.959706
H 3.805207 -0.760561 -2.069153
C 3.828514 -0.159991 1.728281
H 4.883914 -0.448361 1.792920
H 3.745732 0.931388 1.739151
H 3.279961 -0.556232 2.588734
C 3.178372 -2.611116 0.309808
H 4.206206 -2.929001 0.513729
H 2.504147 -2.960594 1.099401
H 2.838618 -3.038248 -0.640848

V^{Si}

E = -1857.08091178
C 0.300288 3.093763 -0.240201
C 0.109878 1.736831 -0.005270
C -1.085220 1.077133 -0.332088
C -2.108112 1.863767 -0.888643
C -1.927237 3.219612 -1.108632
C -0.721663 3.846231 -0.796056
H 1.257970 3.531368 0.033709
H -3.048180 1.390500 -1.159395
H -2.740836 3.795991 -1.545527
H -0.586243 4.909914 -0.977262
N -1.234272 -0.306415 -0.184838
S 1.359599 0.851185 0.862051
O 2.625917 1.614048 0.764257
O 0.855598 0.571601 2.205828
C 1.493507 -0.603860 -0.052532
Si 0.003629 -1.595020 -0.370804
C -2.570715 -0.775801 -0.013056

C -3.276558 -0.412489 1.136385
 C -3.174052 -1.605901 -0.956429
 C -4.571712 -0.870322 1.332246
 H -2.785939 0.224430 1.869930
 C -4.467720 -2.074458 -0.747471
 H -2.620764 -1.878957 -1.852649
 C -5.171400 -1.705881 0.392661
 H -5.113492 -0.583169 2.231539
 H -4.929198 -2.724841 -1.488210
 H -6.184741 -2.069125 0.551454
 P 3.115184 -1.129596 -0.291066
 C 4.046366 -0.086141 -1.436108
 H 5.089847 -0.411383 -1.513179
 H 3.564745 -0.125513 -2.418553
 H 3.988117 0.934275 -1.043482
 C 3.110219 -2.799493 -0.979451
 H 2.567061 -2.804535 -1.930193
 H 4.140978 -3.132222 -1.141921
 H 2.604471 -3.480182 -0.286711
 C 4.068564 -1.186952 1.244241
 H 4.059643 -0.175684 1.665032
 H 3.567452 -1.866349 1.941327
 H 5.098137 -1.515759 1.064112

$^3V^{Si}$

E = -1856.99498746
 C 0.860224 2.788917 -0.037937
 C 0.392366 1.509123 0.230635
 C -0.797876 1.025093 -0.348876
 C -1.471131 1.881080 -1.235296
 C -1.006499 3.161718 -1.492975
 C 0.161961 3.627655 -0.896691
 H 1.784490 3.104629 0.441897
 H -2.375190 1.520957 -1.720461
 H -1.558191 3.797254 -2.183380
 H 0.528699 4.630589 -1.102671
 N -1.282256 -0.260543 -0.093912

S 1.347355 0.491796 1.358532
 O 2.689428 1.110755 1.407611
 O 0.574890 0.342550 2.583435
 C 1.461658 -0.990324 0.481023
 Si -0.195025 -1.666049 0.196929
 C -2.662684 -0.513979 -0.066243
 C -3.571066 0.399352 0.487100
 C -3.142252 -1.749192 -0.516081
 C -4.914874 0.074790 0.581706
 H -3.206206 1.351909 0.863633
 C -4.489059 -2.075188 -0.396871
 H -2.447311 -2.441221 -0.995325
 C -5.384712 -1.163841 0.145612
 H -5.604479 0.792784 1.022107
 H -4.838319 -3.043892 -0.749512
 H -6.440345 -1.412145 0.230548
 P 2.858093 -1.139181 -0.516240
 C 3.122173 0.234444 -1.672361
 H 4.010030 0.070111 -2.293224
 H 2.232383 0.337346 -2.303343
 H 3.241825 1.145567 -1.076610
 C 2.698927 -2.630709 -1.519509
 H 1.787886 -2.557817 -2.123769
 H 3.575962 -2.740235 -2.167006
 H 2.613136 -3.501018 -0.860861
 C 4.383007 -1.300761 0.436339
 H 4.452311 -0.417441 1.078725
 H 4.309210 -2.195094 1.063433
 H 5.255660 -1.370314 -0.222540

VII^{Si}

E = -2619.14154696
 C -0.435060 1.646577 -0.544084
 C 0.435033 1.646570 0.544309
 C 0.865249 2.856458 1.085850
 C 0.434439 4.059716 0.543305
 C -0.433929 4.059749 -0.543255

C -0.865003 2.856539 -1.085693
 H 1.546809 2.826123 1.932725
 H 0.775956 4.999030 0.973823
 H -0.775246 4.999092 -0.973875
 H -1.546576 2.826365 -1.932568
 S -0.996757 0.163857 -1.419169
 S 0.996193 0.163689 1.419077
 O -2.263314 0.602243 -2.043798
 O 0.119382 -0.196082 -2.309179
 O -0.120155 -0.196468 2.308702
 O 2.262725 0.601437 2.044191
 C -1.336032 -1.092412 -0.332423
 C 1.335589 -1.092147 0.331740
 Si 0.000304 -2.342628 -0.001447
 P 2.881851 -1.019158 -0.416437
 P -2.881640 -1.019373 0.416859
 C 2.865964 -2.176439 -1.798980
 H 3.839989 -2.194021 -2.299634
 H 2.618972 -3.179234 -1.432145
 H 2.082316 -1.842158 -2.489651
 C 3.205369 0.615477 -1.114990
 H 3.255613 1.336191 -0.291881
 H 4.143584 0.622444 -1.680866
 H 2.356373 0.853938 -1.766774
 C 4.285408 -1.424152 0.650552
 H 4.177095 -2.456633 0.999163
 H 5.241030 -1.301481 0.128204
 H 4.223362 -0.750089 1.511328
 C -2.864670 -2.177470 1.798730
 H -3.838309 -2.195907 2.300114
 H -2.617373 -3.179869 1.431013
 H -2.080806 -1.843217 2.489150
 C -3.205080 0.614961 1.116156
 H -3.255346 1.335817 0.293135
 H -4.143416 0.621741 1.681801
 H -2.356140 0.853453 1.767995
 C -4.285929 -1.423567 -0.649503

H -5.241258 -1.300124 -0.126812
H -4.223651 -0.749525 -1.510284
H -4.178571 -2.456122 -0.998188

³VII^{Si}

E = -2619.08235191
C -0.409926 1.526299 -0.568104
C 0.410013 1.526450 0.568026
C 0.793784 2.745029 1.129484
C 0.396921 3.951206 0.569265
C -0.397185 3.951055 -0.569733
C -0.793879 2.744732 -1.129751
H 1.430356 2.720205 2.010410
H 0.712436 4.887827 1.024629
H -0.712834 4.887556 -1.025252
H -1.430460 2.719682 -2.010668
S -1.004479 0.086778 -1.527225
S 1.004689 0.087129 1.527349
O -2.232326 0.607082 -2.161383
O 0.132227 -0.283529 -2.384045
O -0.131948 -0.283042 2.384314
O 2.232615 0.607457 2.161335
C -1.402534 -1.169494 -0.457734
C 1.402578 -1.169309 0.457977
Si 0.000007 -2.247694 0.000401
P 2.861476 -0.958617 -0.436634
P -2.861563 -0.958553 0.436596
C 2.865072 -2.096330 -1.831049
H 3.791011 -1.975283 -2.404314
H 2.777833 -3.126394 -1.471837
H 1.990718 -1.849931 -2.445362
C 3.069800 0.698018 -1.137480
H 3.086021 1.424694 -0.318399
H 4.006746 0.755053 -1.703076
H 2.211143 0.887138 -1.792244
C 4.336717 -1.260752 0.564998
H 4.322953 -2.300188 0.908881

H 5.257825 -1.058707 0.006877
H 4.258467 -0.600345 1.435758
C -2.865435 -2.095900 1.831311
H -3.791553 -1.974817 2.404284
H -2.777980 -3.126042 1.472376
H -1.991278 -1.849261 2.445804
C -3.070024 0.698267 1.136950
H -3.086134 1.424712 0.317662
H -4.007060 0.755416 1.702383
H -2.211490 0.887613 1.791791
C -4.336649 -1.260934 -0.565203
H -5.257855 -1.058655 -0.007324
H -4.258195 -0.600804 -1.436151
H -4.322891 -2.300483 -0.908749

VIII^{Si}

E = -1827.11222845
C 0.880574 2.966537 0.296341
C 0.292593 1.715634 0.320202
C -0.872961 1.341589 -0.354410
C -1.469263 2.333490 -1.136655
C -0.914262 3.611152 -1.186072
C 0.243051 3.935819 -0.474125
H 1.785201 3.181788 0.862353
H -2.381101 2.112703 -1.690633
H -1.398537 4.381097 -1.784897
H 0.644228 4.946174 -0.518859
B -1.210469 -0.204426 -0.078125
S 0.902463 0.236492 1.058350
O 1.818496 0.426913 2.186424
O -0.479970 -0.389863 1.345218
C 1.487639 -0.741937 -0.228237
Si 0.138110 -1.286461 -1.341904
C -2.725303 -0.666445 0.008717
C -3.692544 0.189655 0.554704
C -3.162981 -1.920456 -0.433184
C -5.027377 -0.185619 0.657992

H -3.387215 1.174683 0.908566
 C -4.495577 -2.308634 -0.335931
 H -2.441665 -2.611984 -0.871431
 C -5.433392 -1.439495 0.211126
 H -5.755385 0.500984 1.088182
 H -4.804259 -3.291230 -0.690101
 H -6.478083 -1.737350 0.287524
 P 3.183721 -1.030789 -0.249361
 C 4.169305 0.487594 -0.184045
 H 5.242476 0.268527 -0.208812
 H 3.896695 1.126251 -1.030946
 H 3.920222 1.002349 0.750889
 C 3.608495 -1.901397 -1.766838
 H 3.347301 -1.273404 -2.624508
 H 4.677842 -2.138704 -1.778515
 H 3.013062 -2.818551 -1.824018
 C 3.748075 -2.036094 1.144332
 H 3.436558 -1.517650 2.058070
 H 3.246238 -3.008317 1.100277
 H 4.835369 -2.171584 1.134316

³VIII^{Si}

E = -1827.06921715
 C 0.819469 3.290608 0.459940
 C 0.295292 2.011392 0.458815
 C -0.949146 1.639081 -0.072263
 C -1.721686 2.678054 -0.614956
 C -1.239954 3.979129 -0.602478
 C 0.017168 4.294470 -0.070596
 H 1.806066 3.497086 0.869224
 H -2.706953 2.469361 -1.026423
 H -1.856172 4.778895 -1.009819
 H 0.364314 5.325312 -0.070556
 B -1.201762 0.099817 0.197097
 S 1.142444 0.526237 0.856452
 O 2.031186 0.528292 2.018682
 O -0.212944 -0.300967 1.196390

C 1.693035 -0.104379 -0.573055
 Si 0.170254 -0.361822 -1.763871
 C -2.530242 -0.699722 0.155002
 C -3.505279 -0.468234 -0.827947
 C -2.797782 -1.683035 1.118909
 C -4.698159 -1.177799 -0.842111
 H -3.311292 0.263249 -1.612210
 C -3.990432 -2.395885 1.109803
 H -2.053201 -1.878885 1.889237
 C -4.946430 -2.144108 0.130118
 H -5.437736 -0.983351 -1.617289
 H -4.178604 -3.151277 1.871413
 H -5.881340 -2.701966 0.120621
 P 2.899793 -1.311033 -0.369429
 C 4.449675 -0.655901 0.292167
 H 5.188542 -1.454035 0.424973
 H 4.833634 0.100303 -0.400041
 H 4.226473 -0.181129 1.253011
 C 3.269536 -2.030062 -1.980506
 H 3.600475 -1.235422 -2.657006
 H 4.051137 -2.791492 -1.883820
 H 2.353771 -2.478377 -2.382497
 C 2.408012 -2.668479 0.726232
 H 2.210965 -2.237941 1.715198
 H 1.475693 -3.094206 0.338248
 H 3.179094 -3.443371 0.801639

IX^{Si}

E = -1277.88807407
 C -1.780886 2.097975 0.011807
 C 0.433554 1.138249 0.250994
 C 0.951483 2.425968 0.385548
 C 0.129073 3.552762 0.336217
 C -1.232404 3.376278 0.136065
 H -2.857098 2.014457 -0.132361
 H 2.021356 2.552864 0.549233
 H 0.545551 4.551352 0.450894

H -1.890069 4.243392 0.084115
 B 1.205114 -0.207696 0.263928
 Si -0.189364 -1.763245 0.359134
 C 2.728728 -0.383366 0.047806
 C 3.512780 0.519421 -0.696022
 C 3.380255 -1.507670 0.588347
 C 4.874559 0.317727 -0.876532
 H 3.035432 1.381002 -1.160065
 C 4.748429 -1.696347 0.442793
 H 2.789087 -2.242513 1.134575
 C 5.497518 -0.784116 -0.294917
 H 5.457315 1.021787 -1.468399
 H 5.231217 -2.565344 0.886709
 H 6.567352 -0.937922 -0.427761
 C -0.971249 0.959806 0.088535
 C -1.415681 -0.448295 0.053138
 P -3.078190 -0.856753 -0.154965
 C -4.198385 -0.247950 1.148441
 H -4.113685 0.838629 1.242528
 H -5.239389 -0.517708 0.936874
 H -3.885213 -0.698500 2.096345
 C -3.807855 -0.274001 -1.718291
 H -4.868113 -0.542476 -1.787206
 H -3.698977 0.811511 -1.802282
 H -3.254196 -0.737753 -2.541565
 C -3.335127 -2.643834 -0.167239
 H -4.403689 -2.854122 -0.290438
 H -2.761128 -3.089280 -0.985211
 H -2.966131 -3.069812 0.770828

³¹P

E = -1277.86649226
 C 1.811710 2.084161 -0.115823
 C -0.408332 1.061400 -0.121699
 C -0.947210 2.355471 -0.251984
 C -0.146729 3.486996 -0.287763
 C 1.239187 3.344980 -0.209774

H 2.898802 2.011123 -0.082647
 H -2.027135 2.466934 -0.335717
 H -0.593712 4.474882 -0.380709
 H 1.880808 4.224714 -0.235762
 B -1.285468 -0.207943 -0.092137
 Si 0.137927 -1.592689 -0.127917
 C -2.816790 -0.403194 -0.008769
 C -3.634300 0.475903 0.726161
 C -3.454004 -1.485137 -0.642904
 C -5.009165 0.292912 0.809707
 H -3.176485 1.307161 1.260007
 C -4.828007 -1.667167 -0.572239
 H -2.847903 -2.193639 -1.207678
 C -5.613418 -0.776060 0.155023
 H -5.613954 0.986701 1.391858
 H -5.291564 -2.510555 -1.081876
 H -6.691001 -0.918895 0.216636
 C 1.022654 0.922882 -0.076752
 C 1.536251 -0.440247 -0.019990
 P 3.182483 -0.855859 0.111181
 C 4.238714 -0.347660 -1.282688
 H 4.177729 0.737124 -1.414077
 H 5.282924 -0.639036 -1.120866
 H 3.855052 -0.823116 -2.191519
 C 4.013763 -0.203382 1.591761
 H 5.076195 -0.471771 1.606573
 H 3.910120 0.885926 1.617404
 H 3.511539 -0.614185 2.473790
 C 3.365945 -2.651573 0.206601
 H 4.424393 -2.919113 0.292855
 H 2.817898 -3.024442 1.078105
 H 2.943797 -3.106258 -0.695775

3.3.2 Koordinaten der Germylene

3.3.2.1 Koordinaten mit Bisylidsubstitution

Y₂Ge

E = -5871.21690208
 C -4.486172 -2.520371 -0.330534
 H -4.449402 -2.795148 0.720669
 C -3.387505 -1.897602 -0.898207
 C -5.612082 -2.757126 -1.114234
 C -3.391272 -1.524964 -2.239982
 S -1.966515 -1.491598 0.111090
 C 3.388469 1.896754 -0.899724
 C 3.392338 1.523221 -2.241215
 S 1.967133 1.491960 0.109527
 C 4.487244 2.519584 -0.332256
 O -0.789549 -2.147138 -0.565288
 Ge 0.000121 -0.000163 -1.362613
 H 2.511660 1.043659 -2.671105
 C 4.520364 1.762151 -3.007981
 C -2.762468 2.867144 2.908679
 H -3.786523 3.086676 2.608271
 C -1.951039 2.058357 2.107129
 C -2.255614 3.381071 4.095352
 H -6.482420 -3.237880 -0.669041
 C -5.652231 -2.377416 -2.454376
 C 2.023943 -5.085909 -1.252315
 H 1.836143 -6.112419 -0.944262
 C 2.142571 -4.089989 -0.290191
 C 2.126222 -4.770471 -2.602721
 H 2.036635 -4.335781 0.763685
 C 2.371271 -2.772112 -0.682084
 C -2.457791 2.452117 -2.042607
 H -2.601400 1.414305 -2.339799
 C -2.371920 2.771626 -0.684306
 C -2.342657 3.451863 -2.999462
 C -2.144329 4.089951 -0.293244
 P -2.489688 1.409782 0.505745

C -5.168323 1.183816 -0.302893
 H -4.875527 1.717754 -1.204206
 C -6.469663 0.717448 -0.165534
 C -4.239793 0.971132 0.718275
 H -7.190267 0.887305 -0.963045
 C -6.848800 0.036162 0.986834
 H 2.024072 -5.552656 -3.352671
 C 2.342530 -3.453956 -2.996783
 C 1.583451 -0.115324 -0.093229
 P 2.489287 -1.409378 0.506924
 C -1.583067 0.115612 -0.093027
 O 2.322383 1.947541 1.463127
 O 0.790402 2.147068 -0.567768
 C 1.950141 -2.056314 2.108775
 C 4.239463 -0.970990 0.719476
 H 4.528030 1.469448 -4.057468
 C 5.653712 2.374526 -2.455727
 C 4.617819 -0.272400 1.869540
 H 3.886053 -0.076018 2.650277
 C 5.922380 0.188236 2.000760
 C 0.646967 -1.762371 2.497769
 H 0.037003 -1.119709 1.870086
 C 0.136813 -2.294214 3.675787
 C -5.922743 -0.187416 2.000128
 H -6.214110 -0.729488 2.897591
 C -4.618244 0.273355 1.868807
 H -3.886573 0.077653 2.649803
 C 2.457915 -2.453617 -2.040579
 H 2.602245 -1.416087 -2.338417
 C -0.647276 1.766445 2.495711
 H -2.510751 -1.045232 -2.670005
 C -4.519028 -1.764835 -3.006790
 H -2.039092 4.336563 0.760513
 C -2.025988 5.085279 -1.256010
 C 2.253947 -3.378057 4.097763
 H 2.882069 -4.002288 4.730642
 C 2.760894 -2.865614 2.910506

C 0.941277 -3.097232 4.475758
 H 3.784518 -3.086725 2.609778
 H 2.406945 -3.201654 -4.053209
 C -6.877655 -2.600068 -3.289012
 H -6.632994 -3.101740 -4.233356
 H -7.356842 -1.646094 -3.547825
 H -7.616836 -3.211401 -2.761141
 H 0.547122 -3.510638 5.402584
 C 5.613376 2.755352 -1.115869
 C 6.880154 2.594595 -3.289550
 H -7.869194 -0.327706 1.092423
 C 6.469579 -0.718483 -0.164053
 H 7.190350 -0.889212 -0.961228
 C 5.168169 -1.184683 -0.301325
 C 6.848608 -0.036339 0.987848
 O -2.322108 -1.945852 1.465041
 H -4.526653 -1.472671 -4.056432
 H -2.406445 3.198769 -4.055737
 C -2.127432 4.768803 -2.606241
 H -2.025494 5.550523 -3.356704
 H -1.839076 6.112145 -0.948608
 H 4.875463 -1.719316 -1.202253
 H -0.895025 -2.082094 3.945490
 H 7.869058 0.327397 1.093368
 H 6.483717 3.236297 -0.670882
 H 6.213670 0.730955 2.897857
 C -0.942388 3.102285 4.472901
 H -0.548340 3.516868 5.399247
 C -0.137231 2.299789 3.673086
 H -2.884271 4.004888 4.728108
 H 4.450304 2.795226 0.718717
 H 7.612089 3.220740 -2.768965
 H 6.634781 3.078329 -4.242932
 H 7.368814 1.640684 -3.530590
 H 0.895024 2.089193 3.942402
 H -0.036741 1.124162 1.868224

3Y_2Ge

E = -5871.14951494

C 4.878183 2.192421 0.227521

H 4.833606 2.216572 1.313651

C 3.733805 1.868182 -0.484151

C 6.056164 2.451964 -0.463941

C 3.747559 1.820494 -1.874649

S 2.221178 1.491464 0.390649

C -3.733826 -1.868018 -0.484804

C -3.747655 -1.819690 -1.875210

S -2.221126 -1.491891 0.390134

C -4.878327 -2.192202 0.226823

O 1.259550 2.543734 0.037378

Ge 0.000070 0.000013 -1.215513

H -2.834160 -1.573107 -2.414838

C -4.931679 -2.072847 -2.550478

C 2.545723 -3.177645 2.494244

H 3.507091 -3.511862 2.106351

C 1.829543 -2.173028 1.833992

C 2.026567 -3.743085 3.651241

H 6.959512 2.698206 0.093085

C 6.106931 2.385850 -1.856408

C -1.376311 4.861686 -1.751520

H -0.974640 5.844939 -1.516352

C -1.616698 3.955939 -0.723370

C -1.628554 4.507689 -3.070553

H -1.383859 4.225156 0.303271

C -2.109987 2.687620 -1.020488

C 2.336579 -2.321670 -2.353896

H 2.670592 -1.310438 -2.583624

C 2.110135 -2.687616 -1.021315

C 2.108539 -3.234438 -3.372983

C 1.616746 -3.955980 -0.724558

P 2.412283 -1.458764 0.276124

C 5.086540 -1.420628 -0.586763

H 4.709931 -1.713526 -1.563116

C 6.446493 -1.193187 -0.418723

C 4.213243 -1.283898 0.494832
 H 7.119371 -1.303289 -1.266839
 C 6.944558 -0.831291 0.828782
 H -1.436690 5.219584 -3.871236
 C -2.108437 3.235106 -3.372000
 C -1.644396 0.001383 -0.220936
 P -2.412126 1.458382 0.276586
 C 1.644567 -0.001622 -0.220986
 O -2.612082 -1.332080 1.806903
 O -1.259601 -2.544126 0.036488
 C -1.829414 2.172168 1.834685
 C -4.213112 1.283533 0.495206
 H -4.948664 -2.030385 -3.639043
 C -6.107304 -2.383903 -1.857120
 C -4.714850 0.901394 1.742864
 H -4.033721 0.754799 2.577139
 C -6.077570 0.684583 1.906164
 C -0.604218 1.747724 2.336027
 H -0.049820 0.977605 1.812867
 C -0.079928 2.323636 3.486490
 C 6.077627 -0.685160 1.905972
 H 6.461144 -0.391772 2.881193
 C 4.714930 -0.902084 1.742608
 H 4.033783 -0.755798 2.576924
 C -2.336407 2.322035 -2.353172
 H -2.670366 1.310849 -2.583183
 C 0.604318 -1.748764 2.335417
 H 2.834109 1.573780 -2.414296
 C 4.931348 2.074497 -2.549862
 H 1.383874 -4.225466 0.302004
 C 1.376291 -4.861419 -1.752964
 C -2.026476 3.741668 3.652413
 H -2.583535 4.519788 4.170840
 C -2.545594 3.176601 2.495217
 C -0.793296 3.316913 4.145424
 H -3.506934 3.510971 2.107389
 H -2.288010 2.947883 -4.406065

C 7.394671 2.606472 -2.591831
 H 7.226319 3.069371 -3.570668
 H 7.911281 1.652268 -2.768503
 H 8.078268 3.245812 -2.022788
 H -0.387977 3.770222 5.048412
 C -6.056427 -2.450844 -0.464621
 C -7.395577 -2.602957 -2.592077
 H 8.011049 -0.657261 0.959641
 C -6.446374 1.193334 -0.418384
 H -7.119231 1.303711 -1.266487
 C -5.086391 1.420681 -0.586351
 C -6.944486 0.831133 0.829015
 O 2.612127 1.331175 1.807364
 H 4.948226 2.032573 -3.638456
 H 2.288131 -2.946934 -4.406967
 C 1.628561 -4.507069 -3.071897
 H 1.436636 -5.218720 -3.872782
 H 0.974536 -5.844704 -1.518075
 H -4.709749 1.713829 -1.562616
 H 0.896320 1.998424 3.837209
 H -8.010998 0.657196 0.959828
 H -6.959818 -2.696944 0.092414
 H -6.461123 0.390953 2.881297
 C 0.793351 -3.318518 4.144325
 H 0.388001 -3.772122 5.047152
 C 0.079989 -2.325050 3.485673
 H 2.583624 -4.521351 4.169452
 H -4.833641 -2.216902 1.312936
 H -8.072681 -3.256134 -2.030958
 H -7.226823 -3.049315 -3.578439
 H -7.920012 -1.650051 -2.752042
 H -0.896281 -1.999971 3.836455
 H 0.049937 -0.978482 1.812478

^{cy}Y₂Ge

E = -5892.98407039

Ge -0.065984 -0.842581 1.073563

O -0.683347 1.277189 1.951242
 O 0.474179 -2.098312 -0.825761
 C 1.563353 -0.098325 0.071336
 C -1.696070 -0.036155 0.136548
 S -1.972701 1.240736 1.155528
 O -2.457867 2.505534 0.571072
 C -3.205022 0.841082 2.394976
 P 2.684080 1.148818 0.414656
 C 3.946649 1.213035 -0.921498
 C 3.605681 0.887721 1.993323
 C 1.820236 2.746178 0.645814
 S 1.786927 -1.359574 -0.991512
 O 2.227054 -1.052734 -2.363137
 C 2.994109 -2.549142 -0.411623
 P -2.622644 -0.387225 -1.258612
 C -4.386591 0.098518 -1.029991
 C -2.039587 0.496193 -2.766981
 C -2.442517 -2.170513 -1.646950
 C -4.264651 1.702637 2.629023
 C -5.235947 1.348524 3.563005
 C 3.375961 1.796302 -2.215798
 C 5.301575 1.841880 -0.600678
 C -3.094304 -0.357822 3.095513
 C 2.674664 0.969665 3.204975
 C 4.316264 -0.463102 1.954121
 C -5.111043 -0.808765 -0.032851
 C -5.217815 0.240879 -2.307537
 C 3.414326 0.649639 4.498814
 C 0.770892 3.037789 -0.420444
 C 2.763944 3.930703 0.849511
 C -5.158009 0.148643 4.267301
 C -4.066062 -0.695741 4.021311
 C -6.207325 -0.238456 5.265611
 C 4.323532 1.515801 -3.370346
 C -2.216912 2.008632 -2.626099
 C -0.569110 0.175796 -3.024942
 C -0.009507 4.290159 -0.049720

C -6.485147 -0.245327 0.302355
 C 0.916020 5.482865 0.138251
 C -2.498602 -3.095663 -0.431478
 C -3.337105 -2.689593 -2.771127
 C 6.262109 1.589001 -1.760391
 C 5.065876 -0.755661 3.244988
 C 4.253116 -2.600799 -0.992552
 C 2.689724 -3.343133 0.691621
 C 3.671226 -4.155482 1.235400
 C 4.964717 -4.191128 0.697851
 C 4.122613 -0.695632 4.436943
 C 1.974418 5.188987 1.192318
 C 5.232248 -3.413739 -0.428977
 C -1.696578 2.741970 -3.856480
 C -2.050152 -4.493227 -0.838516
 C 5.706568 2.087591 -3.088835
 C 6.026443 -5.041967 1.327100
 C -2.895747 -4.092055 -3.176095
 C -6.600130 0.795834 -1.979211
 C -2.892307 -5.039653 -1.983867
 C -7.325450 -0.064298 -0.953576
 C -0.042564 0.896056 -4.256436
 C -0.241515 2.399247 -4.145790
 H 4.125756 0.141999 -1.102458
 H 4.352838 1.693940 2.062904
 H 1.254390 2.573670 1.572355
 H -4.288834 1.098957 -0.574310
 H -2.651781 0.130344 -3.607499
 H -1.402106 -2.208048 -1.995235
 H -4.318260 2.635334 2.072478
 H -6.074368 2.020082 3.744533
 H 2.384919 1.375019 -2.414512
 H 3.263469 2.883936 -2.095608
 H 5.187794 2.923101 -0.440934
 H 5.724552 1.428373 0.322282
 H -2.256683 -1.026775 2.894159
 H 2.221721 1.964574 3.281655

H 1.841482 0.262737 3.066588
 H 3.551821 -1.234960 1.808996
 H 4.990472 -0.532898 1.090147
 H -5.235836 -1.803478 -0.485314
 H -4.512461 -0.946043 0.873956
 H -4.722698 0.892039 -3.035257
 H -5.327427 -0.740672 -2.787926
 H 4.158380 1.438459 4.690724
 H 2.709704 0.677078 5.339631
 H 0.110166 2.168719 -0.516139
 H 1.252176 3.187530 -1.394020
 H 3.502028 3.721303 1.635594
 H 3.329735 4.107078 -0.077352
 H -3.983537 -1.636059 4.565391
 H -6.994815 0.518964 5.334190
 H -6.678478 -1.192501 4.996337
 H -5.774306 -0.366702 6.266024
 H 4.379578 0.426567 -3.514111
 H 3.916864 1.932671 -4.300819
 H -1.674044 2.337146 -1.731667
 H -3.264354 2.276689 -2.441614
 H -0.391890 -0.899014 -3.127789
 H 0.003249 0.490575 -2.139588
 H -0.768381 4.494424 -0.815985
 H -0.565631 4.095441 0.875790
 H -6.358754 0.724365 0.804077
 H -6.993749 -0.901673 1.020416
 H 1.413985 5.718534 -0.815845
 H 0.341707 6.375724 0.417474
 H -3.519115 -3.134124 -0.026007
 H -1.854070 -2.710737 0.366082
 H -4.381011 -2.728445 -2.426534
 H -3.314942 -2.020040 -3.640936
 H 6.445548 0.505581 -1.829418
 H 7.233386 2.055660 -1.550627
 H 5.542432 -1.742826 3.175503
 H 5.877488 -0.023751 3.379809

H 4.451141 -2.011517 -1.885452
 H 1.690516 -3.301953 1.124170
 H 3.434552 -4.774223 2.100405
 H 3.372520 -1.494949 4.339124
 H 4.665291 -0.886148 5.371990
 H 1.483077 5.045706 2.166212
 H 2.659247 6.039560 1.307018
 H 6.223550 -3.449985 -0.879251
 H -2.312719 2.471404 -4.728569
 H -1.815981 3.824554 -3.716369
 H -2.096598 -5.168424 0.025824
 H -0.994437 -4.437279 -1.141009
 H 5.639969 3.186222 -3.058321
 H 6.400727 1.843027 -3.903314
 H 5.674319 -6.068490 1.485754
 H 6.928446 -5.082850 0.708039
 H 6.314258 -4.646169 2.310616
 H -3.547454 -4.476116 -3.971858
 H -1.881768 -4.035535 -3.598984
 H -6.486132 1.815899 -1.582138
 H -7.193996 0.883468 -2.898298
 H -2.531431 -6.030696 -2.288542
 H -3.927803 -5.179888 -1.635656
 H -7.533927 -1.051427 -1.394748
 H -8.299698 0.376894 -0.706200
 H 1.018236 0.646013 -4.385721
 H -0.565655 0.522161 -5.150710
 H 0.384995 2.778176 -3.326076
 H 0.097854 2.905677 -5.059113

$^3(\text{Cy})_2\text{Ge}$

E = -5892.92161406
 Ge 0.055331 0.687166 0.575754
 O 1.141808 -1.737981 2.212335
 O -0.991616 1.919952 -2.036870
 C -1.613266 0.165333 -0.240295
 C 1.702896 -0.240785 0.159005

S 2.255493 -1.356103 1.325601
 O 3.044348 -2.439313 0.701628
 C 3.419371 -0.503241 2.387996
 P -2.589659 -0.993025 0.610892
 C -4.181130 -1.272965 -0.280805
 C -3.060674 -0.426696 2.307904
 C -1.642686 -2.532133 0.880711
 S -2.132032 1.103602 -1.581439
 O -2.835082 0.280652 -2.580736
 C -3.340659 2.294390 -1.013556
 P 2.646351 0.134165 -1.257436
 C 4.462333 -0.114596 -1.041396
 C 2.145827 -0.903165 -2.694814
 C 2.213358 1.848457 -1.721379
 C 4.663224 -1.066060 2.624811
 C 5.578653 -0.385629 3.423850
 C -4.028231 -2.238986 -1.457950
 C -5.392663 -1.648274 0.572790
 C 3.071733 0.717545 2.961442
 C -1.956687 -0.547580 3.359074
 C -3.583480 1.005389 2.226485
 C 5.115893 1.027387 -0.260404
 C 5.225400 -0.354646 -2.347694
 C -2.436102 -0.024274 4.708215
 C -0.929178 -3.054552 -0.362486
 C -2.424116 -3.630849 1.599267
 C 5.266126 0.848408 3.990678
 C 3.993339 1.384872 3.750729
 C 6.254870 1.589290 4.839764
 C -5.279202 -2.209455 -2.321744
 C 2.329675 -2.383355 -2.362424
 C 0.705739 -0.607164 -3.111473
 C -0.020348 -4.224616 -0.007364
 C 6.573092 0.707708 0.041939
 C -0.780414 -5.321312 0.724973
 C 2.435998 2.927627 -0.659775
 C 2.721445 2.329020 -3.078676

C -6.650633 -1.653328 -0.291718
 C -4.063200 1.512928 3.577330
 C -4.674685 2.163925 -1.370431
 C -2.930142 3.323699 -0.170210
 C -3.874644 4.189346 0.355425
 C -5.235160 4.052266 0.047993
 C -2.957959 1.402610 4.617302
 C -1.483214 -4.775397 1.960668
 C -5.614660 3.037516 -0.830317
 C 1.887686 -3.270674 -3.517705
 C 1.617879 4.153914 -1.044577
 C -6.516609 -2.558293 -1.507716
 C -6.245788 4.984942 0.644632
 C 1.939106 3.577789 -3.478997
 C 6.697804 -0.637231 -2.066551
 C 2.032371 4.667682 -2.418300
 C 7.349625 0.463329 -1.242827
 C 0.243047 -1.518475 -4.240048
 C 0.444459 -2.989673 -3.910416
 H -4.384183 -0.280206 -0.701979
 H -3.879288 -1.097369 2.608991
 H -0.841257 -2.181506 1.550400
 H 4.516973 -1.033280 -0.437711
 H 2.818410 -0.630941 -3.522908
 H 1.118820 1.738020 -1.805946
 H 4.903906 -2.023580 2.168198
 H 6.560735 -0.821592 3.603510
 H -3.152603 -1.966223 -2.052557
 H -3.876923 -3.257083 -1.070865
 H -5.242448 -2.638519 1.028482
 H -5.533584 -0.935877 1.393300
 H 2.089909 1.147779 2.765153
 H -1.622987 -1.585983 3.462718
 H -1.070609 0.014406 3.026329
 H -2.757474 1.638026 1.875639
 H -4.376446 1.099152 1.469469
 H 5.082611 1.935847 -0.878288

H 4.561403 1.245658 0.659595
 H 4.800349 -1.198019 -2.901155
 H 5.134520 0.530479 -2.995574
 H -3.240058 -0.676946 5.083990
 H -1.618208 -0.090591 5.436719
 H -0.347180 -2.235910 -0.800793
 H -1.655338 -3.375801 -1.118896
 H -2.914227 -3.242520 2.502514
 H -3.223650 -4.011135 0.945716
 H 3.726437 2.345610 4.189743
 H 7.206767 1.052880 4.907336
 H 6.457484 2.588363 4.433321
 H 5.874061 1.729683 5.859647
 H -5.375820 -1.201800 -2.753647
 H -5.166392 -2.899774 -3.167305
 H 1.741737 -2.612159 -1.466180
 H 3.367375 -2.600134 -2.078899
 H 0.586704 0.436749 -3.418395
 H 0.048795 -0.732265 -2.239578
 H 0.435333 -4.623633 -0.923988
 H 0.804700 -3.861269 0.617771
 H 6.620754 -0.187176 0.677856
 H 7.021446 1.525334 0.621116
 H -1.531820 -5.761605 0.050049
 H -0.099210 -6.134941 1.005117
 H 3.496082 3.204211 -0.608179
 H 2.150687 2.559390 0.333664
 H 3.796748 2.560037 -3.015010
 H 2.605735 1.555365 -3.847831
 H -6.840753 -0.622407 -0.628635
 H -7.516936 -1.946365 0.315536
 H -4.404456 2.552098 3.478574
 H -4.935975 0.926543 3.904381
 H -4.961067 1.382696 -2.071482
 H -1.875027 3.419672 0.084902
 H -3.555855 4.989179 1.023039
 H -2.131264 2.070900 4.332316

H -3.313767 1.744349 5.597973
 H -0.729455 -4.401623 2.669017
 H -2.039768 -5.570920 2.473364
 H -6.664019 2.931494 -1.102841
 H 2.542857 -3.097456 -4.386097
 H 2.013962 -4.325096 -3.238340
 H 1.737159 4.942005 -0.289434
 H 0.554987 3.871367 -1.061406
 H -6.442135 -3.604157 -1.171656
 H -7.420590 -2.496186 -2.127411
 H -6.246154 4.919041 1.740380
 H -6.023785 6.028229 0.386578
 H -7.257632 4.758484 0.293645
 H 2.296017 3.953145 -4.447001
 H 0.884831 3.293226 -3.609679
 H 6.771732 -1.588744 -1.518870
 H 7.233183 -0.781025 -3.013980
 H 1.414083 5.527108 -2.708281
 H 3.069975 5.034381 -2.366280
 H 7.374935 1.392426 -1.833116
 H 8.393818 0.206524 -1.022440
 H -0.812165 -1.304863 -4.451688
 H 0.805544 -1.274344 -5.155102
 H -0.213359 -3.266200 -3.074703
 H 0.147790 -3.617325 -4.760948

(^{Cy}Y_F)₂Ge

E = -7455.31260359
 Ge 0.063731 0.221176 -1.213357
 C -1.272756 1.264648 -0.009936
 C 1.087649 -0.960898 0.141253
 O -1.846659 -1.026385 -0.691662
 S 2.328884 0.054906 0.452607
 P 0.958694 -2.622205 0.595598
 C 1.043691 -3.717960 -0.877324
 C -0.151962 -3.527263 -1.813068
 C 2.348891 -3.494098 -1.638700

C -0.046570 -4.446939 -3.023251
 C 1.265617 -4.253878 -3.768980
 C 2.455902 -4.427677 -2.836781
 C 2.363181 -3.078299 1.695903
 C 2.777243 -4.551116 1.715883
 C 2.191657 -2.557905 3.126326
 C 3.510391 -2.678836 3.874165
 C 4.000575 -4.120291 3.888510
 C 4.089784 -4.696063 2.481388
 C -0.664026 -2.983134 1.367211
 C -1.069438 -1.963055 2.424945
 C -0.795929 -4.418769 1.874210
 C -2.477291 -2.244035 2.931516
 C -2.611793 -3.671006 3.442194
 C -2.216667 -4.672214 2.365794
 C 3.758220 -0.182562 -0.745131
 F 4.430379 -1.296887 -0.398672
 F 3.252271 -0.352866 -1.972166
 C 4.736788 1.011900 -0.809262
 F 4.924263 1.539003 0.399295
 F 4.221866 1.945044 -1.619950
 C 6.119960 0.601562 -1.369459
 S -2.505813 0.205962 -0.115516
 P -1.268261 2.732223 0.895998
 C 6.958646 1.798778 -1.872471
 F 6.911827 2.793998 -0.999432
 F 6.508161 2.222249 -3.039794
 F 8.217454 1.413785 -2.014810
 F 5.954618 -0.237911 -2.399050
 F 6.812123 -0.010206 -0.407301
 C -4.630161 5.107862 1.752190
 C -3.189202 4.621133 1.867916
 C -4.931900 5.648928 0.361639
 C -4.605775 4.621834 -0.713528
 C -3.165879 4.141276 -0.593018
 C -2.907126 3.561189 0.800076
 C 0.088109 3.789456 0.268389

C 0.139860 5.198735 0.858362
 C 0.223151 3.830610 -1.254181
 C 1.462026 5.860117 0.482459
 C 1.667762 5.878514 -1.026533
 C 1.547943 4.483568 -1.625011
 C -0.908917 2.460563 2.679048
 C 0.418261 1.723847 2.860134
 C -2.034046 1.680922 3.362000
 C -1.730682 1.458429 4.838014
 C -0.399848 0.747003 5.033931
 C 0.729255 1.484623 4.330533
 C -3.658275 0.576105 -1.550546
 F -2.930722 1.115065 -2.539079
 F -4.573351 1.472228 -1.158318
 C -4.397783 -0.634953 -2.165945
 F -5.284743 -0.128903 -3.048157
 C -5.195700 -1.524721 -1.185487
 F -3.530420 -1.391159 -2.833570
 O -3.478271 0.052062 0.973041
 O 3.018122 0.031131 1.745251
 O 1.846073 1.374766 -0.091436
 F -5.886150 -0.759654 -0.338996
 F -4.356389 -2.309774 -0.504885
 C -6.214700 -2.448769 -1.898916
 F -7.280719 -1.764877 -2.273644
 F -6.592699 -3.394764 -1.052157
 F -5.670359 -3.022376 -2.961696
 H 1.025048 -4.746605 -0.483734
 H -1.100783 -3.702386 -1.294555
 H -0.178594 -2.480045 -2.149060
 H -0.899826 -4.270867 -3.690104
 H -0.123389 -5.492818 -2.687391
 H 1.332537 -4.951084 -4.613914
 H 1.290770 -3.240181 -4.195838
 H 3.395492 -4.236713 -3.370352
 H 2.500645 -5.470825 -2.487079
 H 2.360609 -2.455907 -1.990152

H 3.219872 -3.606253 -0.980799
 H 3.193404 -2.513202 1.247712
 H 1.852876 -1.517424 3.116370
 H 1.426046 -3.158832 3.638214
 H 4.246022 -2.027208 3.380564
 H 3.395358 -2.301962 4.898436
 H 4.975102 -4.192158 4.388098
 H 3.302064 -4.730557 4.481859
 H 4.385307 -5.752549 2.515855
 H 4.878205 -4.168849 1.923489
 H -1.360735 -2.842728 0.530859
 H 2.900830 -4.946709 0.701557
 H 1.996760 -5.155133 2.198960
 H -0.997376 -0.958787 1.990924
 H -0.369229 -1.995878 3.267056
 H -2.733416 -1.522544 3.719556
 H -3.190740 -2.070384 2.117042
 H -0.096976 -4.584602 2.706434
 H -0.531804 -5.139856 1.089143
 H -2.910388 -4.582319 1.516425
 H -2.304099 -5.700960 2.738378
 H -1.963951 -3.813531 4.321639
 H -3.638961 -3.860772 3.778550
 H -4.825741 5.872684 2.514639
 H -5.305784 4.267359 1.970830
 H -5.983013 5.956610 0.292686
 H -4.330725 6.555390 0.190594
 H -4.774270 5.043192 -1.712658
 H -5.279907 3.759526 -0.619453
 H -2.925440 3.408881 -1.371972
 H -2.492927 4.997343 -0.745977
 H 0.967984 3.240750 0.627549
 H 0.022142 5.181937 1.949921
 H -0.689605 5.799719 0.457777
 H 1.499052 6.878923 0.889395
 H 2.283629 5.302083 0.955442
 H 0.909721 6.534246 -1.482851

H 2.643664 6.318063 -1.269234
H 2.362033 3.843051 -1.258353
H 1.649126 4.525352 -2.716812
H 0.174654 2.819377 -1.671367
H -0.607621 4.395810 -1.697065
H -0.835893 3.464154 3.129031
H -3.000882 2.184852 3.246832
H -2.148410 0.716752 2.853470
H -1.706120 2.430135 5.355656
H -2.545682 0.882800 5.296392
H -0.476694 -0.268150 4.620757
H -0.178904 0.632595 6.103025
H 1.670865 0.926188 4.407368
H 0.897628 2.452684 4.827475
H 1.250761 2.259286 2.392849
H 0.344118 0.760716 2.335388
H -3.009157 4.232741 2.875834
H -2.507947 5.471632 1.731996
H -3.601999 2.718656 0.957850

$^3(\text{CyY}_F)_2\text{Ge}$

E = -7455.24835271

Ge 0.085017 0.175052 -0.648773
C -1.499215 0.905229 0.206923
C 1.449555 -0.786892 0.342145
O -2.541262 -1.478728 -0.030673
S 2.810962 0.112204 0.749256
P 1.303454 -2.527912 0.469503
C 1.059120 -3.322757 -1.182018
C -0.352089 -3.193810 -1.759757
C 2.116669 -2.821626 -2.164265
C -0.453142 -3.864968 -3.123091
C 0.596772 -3.343131 -4.092043
C 1.994873 -3.510999 -3.516350
C 2.812292 -3.287691 1.205416
C 3.114512 -4.721854 0.767760
C 2.811931 -3.177721 2.733449

C 4.166443 -3.595369 3.284470
 C 4.513594 -5.014604 2.859897
 C 4.454704 -5.167005 1.346989
 C -0.215800 -2.923805 1.399662
 C -0.442322 -2.117451 2.676122
 C -0.452965 -4.419534 1.605269
 C -1.847030 -2.377243 3.211784
 C -2.106105 -3.863569 3.414701
 C -1.866959 -4.644400 2.129758
 C 3.945775 0.132139 -0.742162
 F 4.515014 -1.080863 -0.864264
 F 3.222883 0.377371 -1.840825
 C 5.051458 1.205364 -0.642069
 F 5.516944 1.275166 0.603362
 F 4.536786 2.391685 -0.990273
 C 6.245207 0.904127 -1.580843
 S -2.871547 -0.055149 0.116130
 P -1.506960 2.481996 0.974887
 C 7.125838 2.142758 -1.862628
 F 7.354879 2.806926 -0.739888
 F 6.532627 2.944052 -2.729710
 F 8.282139 1.745555 -2.369703
 F 5.789464 0.451607 -2.755351
 F 7.013462 -0.028934 -1.017621
 C -4.808284 4.961139 1.712336
 C -3.410661 4.380578 1.909468
 C -4.991536 5.580355 0.333932
 C -4.627392 4.595842 -0.768329
 C -3.215930 4.065175 -0.565244
 C -3.102526 3.377216 0.796023
 C -0.087497 3.378350 0.257153
 C 0.298050 4.689948 0.939341
 C -0.063595 3.551627 -1.263824
 C 1.725147 5.042347 0.522994
 C 1.874719 5.119511 -0.992135
 C 1.367049 3.860308 -1.685330
 C -1.153438 2.336491 2.774470

C 0.278784 1.872092 3.032995
 C -2.161106 1.401215 3.443058
 C -1.884214 1.260762 4.933467
 C -0.461539 0.785081 5.190336
 C 0.549937 1.702486 4.521902
 C -3.672016 0.273017 -1.546041
 F -2.704878 0.378212 -2.468419
 F -4.331602 1.437471 -1.495051
 C -4.644641 -0.813666 -2.059284
 F -5.208164 -0.315377 -3.178777
 C -5.793687 -1.209444 -1.104402
 F -3.955869 -1.904619 -2.388822
 O -3.920452 0.331061 1.069046
 O 3.644704 -0.499364 1.785330
 O 2.498286 1.544360 0.846895
 F -6.303043 -0.116088 -0.530853
 F -5.331471 -2.035900 -0.169689
 C -6.955927 -1.928248 -1.834195
 F -7.703635 -1.058071 -2.489536
 F -7.708216 -2.544169 -0.936044
 F -6.487185 -2.827635 -2.687314
 H 1.237120 -4.390933 -0.986445
 H -1.098473 -3.623316 -1.082866
 H -0.616505 -2.129875 -1.852177
 H -1.463785 -3.709473 -3.521138
 H -0.326516 -4.952736 -3.004428
 H 0.514835 -3.854307 -5.059687
 H 0.412450 -2.275420 -4.283968
 H 2.749905 -3.108075 -4.203048
 H 2.216766 -4.583458 -3.402064
 H 1.984176 -1.738657 -2.295239
 H 3.125133 -2.956517 -1.751923
 H 3.621728 -2.647202 0.831832
 H 2.580386 -2.152962 3.035196
 H 2.032620 -3.836646 3.142332
 H 4.922004 -2.888429 2.911756
 H 4.167090 -3.508504 4.378348

H 5.507445 -5.298017 3.229197
 H 3.799366 -5.713821 3.321876
 H 4.655678 -6.205485 1.053998
 H 5.248220 -4.555031 0.892698
 H -0.978492 -2.558165 0.697944
 H 3.159376 -4.799491 -0.324431
 H 2.315120 -5.397869 1.105929
 H -0.312774 -1.052501 2.448642
 H 0.299260 -2.375107 3.443625
 H -1.989593 -1.831888 4.154167
 H -2.580370 -1.974302 2.501049
 H 0.272042 -4.822171 2.327706
 H -0.304453 -4.973610 0.668362
 H -2.585431 -4.312111 1.365847
 H -2.041267 -5.716251 2.289434
 H -1.437521 -4.248601 4.200856
 H -3.131272 -4.024807 3.771129
 H -5.015792 5.699686 2.497208
 H -5.540313 4.150686 1.844358
 H -6.023440 5.933242 0.212006
 H -4.346985 6.468755 0.247793
 H -4.710451 5.072220 -1.753366
 H -5.329912 3.749991 -0.766411
 H -2.929964 3.385712 -1.374765
 H -2.513486 4.910490 -0.590186
 H 0.710926 2.653240 0.486749
 H 0.235532 4.613028 2.032051
 H -0.397670 5.487996 0.636036
 H 2.029416 5.990150 0.985489
 H 2.397139 4.262929 0.910716
 H 1.308038 5.986774 -1.366374
 H 2.925457 5.298363 -1.253540
 H 2.005032 3.004112 -1.425051
 H 1.420289 3.979690 -2.775095
 H -0.434716 2.651507 -1.769600
 H -0.716079 4.380345 -1.563185
 H -1.275841 3.351735 3.182908

H -3.190955 1.733997 3.264529
H -2.090910 0.416812 2.963599
H -2.040883 2.231193 5.429609
H -2.610182 0.565363 5.374646
H -0.343826 -0.231898 4.789987
H -0.266582 0.719727 6.268471
H 1.570550 1.323542 4.658571
H 0.516669 2.691114 5.005790
H 1.007354 2.570361 2.611217
H 0.447501 0.922444 2.505126
H -3.356420 3.906114 2.894871
H -2.661826 5.187987 1.898967
H -3.848856 2.572175 0.848397

(^{Pip}Ys)₂Ge

E = -6678.03513359
Ge 0.000007 0.000352 -1.659037
S -0.591059 2.663133 -1.111812
C -1.645045 -0.027816 -0.381558
S 0.591315 -2.662806 -1.113005
C 1.645413 0.027869 -0.382031
P -2.043216 1.621580 -0.188171
P -2.654140 -1.364502 -0.225476
P 2.043360 -1.621637 -0.188902
P 2.654281 1.364555 -0.224655
C -2.237917 2.151491 1.550151
C -3.641123 2.097231 -0.947632
N -2.363426 -2.314797 1.143898
C -2.570506 -2.372770 -1.741438
C -4.429232 -0.972489 -0.026614
C 3.641391 -2.096921 -0.948251
C 2.237751 -2.152197 1.549282
N 2.363269 2.313857 1.145329
C 2.570726 2.373829 -1.739960
C 4.429388 0.972569 -0.025827
C -2.282619 1.194270 2.558253
C -2.336040 3.505832 1.876420

C -3.700443 2.053861 -2.343918
 C -4.775224 2.457884 -0.223472
 C -3.211824 -3.438235 1.508078
 C -1.070715 -2.302555 1.813077
 C -2.447433 -3.762801 -1.726786
 C -2.599824 -1.701737 -2.967685
 C -5.297935 -0.915953 -1.118949
 C -4.916383 -0.661098 1.245547
 C 4.775342 -2.457947 -0.224056
 C 3.701026 -2.052630 -2.344503
 C 2.282035 -1.195430 2.557839
 C 2.335711 -3.506700 1.875021
 C 1.070413 2.301176 1.814173
 C 3.211355 3.437270 1.510269
 C 2.448434 3.763918 -1.724485
 C 2.599671 1.703490 -2.966594
 C 4.916418 0.660086 1.246112
 C 5.298184 0.917009 -1.118142
 C -2.468766 1.577112 3.883899
 C -2.512475 3.889171 3.200073
 C -4.882413 2.356914 -3.004233
 C -5.955944 2.776146 -0.889804
 C -3.435034 -3.493881 3.011640
 C -1.232595 -2.355776 3.322809
 C -2.373112 -4.471187 -2.919280
 C -2.529518 -2.413479 -4.159487
 C -6.629894 -0.565098 -0.936592
 C -6.248972 -0.309679 1.424824
 C 5.956256 -2.775634 -0.890314
 C 4.883199 -2.355134 -3.004734
 C 2.467607 -1.578854 3.883398
 C 2.511569 -3.890602 3.198572
 C 1.231814 2.353674 3.323995
 C 3.434192 3.492195 3.013918
 C 2.374370 4.473015 -2.916573
 C 2.529741 2.415970 -4.157990
 C 6.249011 0.308561 1.425195

C 6.630147 0.566079 -0.935963
 C -2.590110 2.924480 4.204285
 C -6.013521 2.722554 -2.276461
 C -2.100343 -3.533252 3.740925
 C -2.417915 -3.798659 -4.136610
 C -7.109580 -0.264730 0.333846
 C 6.014180 -2.721095 -2.276923
 C 2.588777 -2.926349 4.203259
 C 2.099333 3.531045 3.742908
 C 2.418795 3.801185 -4.134305
 C 7.109725 0.264641 0.334264
 H -2.738609 -4.388757 1.203358
 H -4.164024 -3.366009 0.969349
 H -4.043161 -4.375203 3.253936
 H -4.008524 -2.611378 3.327771
 H -1.580159 -4.469974 3.487109
 H -2.250290 -3.543773 4.828255
 H -1.687583 -1.422296 3.684256
 H -0.237114 -2.423244 3.776960
 H -0.530335 -1.402302 1.491796
 H -0.470638 -3.161451 1.477915
 H -2.371852 -4.292650 -0.783033
 H -2.265003 -5.553739 -2.897215
 H -2.352006 -4.356051 -5.069187
 H -2.545768 -1.879917 -5.107651
 H -2.664930 -0.615514 -2.978361
 H -4.938690 -1.154544 -2.116377
 H -7.295474 -0.522823 -1.796286
 H -8.154407 0.007033 0.472622
 H -6.614984 -0.074448 2.422527
 H -4.247671 -0.711053 2.100402
 H -2.158759 0.147654 2.287677
 H -2.507087 0.821278 4.666969
 H -2.732532 3.228821 5.239692
 H -2.590889 4.944952 3.453363
 H -2.264257 4.252179 1.085195
 H -2.795540 1.808684 -2.901518

H -4.920131 2.323196 -4.091674
 H -6.938749 2.969333 -2.794325
 H -6.837997 3.055883 -0.316460
 H -4.744011 2.485189 0.863590
 H 0.530088 1.401100 1.492275
 H 0.470426 3.160239 1.479365
 H 1.686734 1.420095 3.685274
 H 0.236160 2.420896 3.777816
 H 1.579095 4.467827 3.489402
 H 2.249036 3.541081 4.830278
 H 4.042097 4.373514 3.256774
 H 4.007765 2.609644 3.329740
 H 2.738002 4.387858 1.205927
 H 4.163709 3.365467 0.971758
 H 2.373399 4.293350 -0.780456
 H 2.266744 5.555602 -2.893864
 H 2.353104 4.359160 -5.066549
 H 2.545866 1.882964 -5.106469
 H 2.664282 0.617249 -2.977869
 H 4.247582 0.709189 2.100933
 H 6.614936 0.072413 2.422712
 H 8.154564 -0.007141 0.472918
 H 7.295828 0.524572 -1.795618
 H 4.938974 1.156375 -2.115400
 H 4.743804 -2.486062 0.862974
 H 6.838189 -3.055693 -0.316943
 H 6.939599 -2.967341 -2.794701
 H 4.921175 -2.320690 -4.092141
 H 2.796227 -1.807209 -2.902168
 H 2.158524 -0.148673 2.287628
 H 2.505659 -0.823372 4.666819
 H 2.730736 -3.231137 5.238602
 H 2.589854 -4.946488 3.451452
 H 2.264414 -4.252731 1.083451

$^3(^{Pip}Y_S)_2Ge$

E = -6677.95739179

Ge 0.000048 0.000029 -1.362223
 S -1.154238 3.063538 -1.101608
 C -1.718925 0.100857 -0.441275
 S 1.153864 -3.063744 -1.100663
 C 1.718935 -0.100960 -0.441124
 P -2.324383 1.735844 -0.216450
 P -2.548569 -1.382601 -0.296497
 P 2.324269 -1.735959 -0.216011
 P 2.548713 1.382466 -0.296869
 C -2.524700 2.102794 1.565399
 C -4.017156 1.920046 -0.879395
 N -2.110782 -2.290899 1.059594
 C -2.329458 -2.327286 -1.833994
 C -4.358430 -1.244051 -0.070181
 C 4.016947 -1.920427 -0.879120
 C 2.524758 -2.102342 1.565934
 N 2.110990 2.291280 1.058888
 C 2.329544 2.326755 -1.834582
 C 4.358566 1.243839 -0.070491
 C -2.528180 1.080010 2.509707
 C -2.673872 3.427309 1.983919
 C -4.150213 1.899992 -2.271897
 C -5.149321 2.094873 -0.085203
 C -2.795812 -3.526759 1.416627
 C -0.799679 -2.157706 1.687911
 C -2.036912 -3.690459 -1.838818
 C -2.478367 -1.652924 -3.052411
 C -5.227637 -1.266059 -1.163661
 C -4.885897 -1.082406 1.213681
 C 5.149219 -2.095076 -0.085036
 C 4.149821 -1.900702 -2.271642
 C 2.528050 -1.079283 2.509943
 C 2.674132 -3.426712 1.984848
 C 0.799812 2.158510 1.687133
 C 2.796276 3.527076 1.415638
 C 2.036639 3.689851 -1.839657
 C 2.478668 1.652198 -3.052875

C 4.885940 1.082371 1.213436
 C 5.227846 1.265594 -1.163914
 C -2.725229 1.367429 3.857973
 C -2.858135 3.715055 3.330619
 C -5.399632 2.042042 -2.857948
 C -6.398859 2.253551 -0.677552
 C -2.964251 -3.644528 2.923574
 C -0.903702 -2.260607 3.199763
 C -1.898182 -4.370520 -3.044341
 C -2.350070 -2.336625 -4.252105
 C -6.597202 -1.135778 -0.971940
 C -6.256267 -0.951321 1.402205
 C 6.398675 -2.253892 -0.677512
 C 5.399167 -2.042879 -2.857829
 C 2.725135 -1.366270 3.858295
 C 2.858420 -3.714031 3.331636
 C 0.903704 2.261834 3.198964
 C 2.964593 3.645220 2.922570
 C 1.897739 4.369646 -3.045307
 C 2.350200 2.335640 -4.252692
 C 6.256285 0.951216 1.402076
 C 6.597391 1.135238 -0.972076
 C -2.896319 2.684493 4.268795
 C -6.528248 2.224037 -2.060645
 C -1.613592 -3.539221 3.615470
 C -2.058729 -3.699503 -4.249638
 C -7.114911 -0.980558 0.309524
 C 6.527885 -2.224683 -2.060633
 C 2.896428 -2.683185 4.269507
 C 1.613846 3.540406 3.614373
 C 2.058486 3.698446 -4.250477
 C 7.115004 0.980193 0.309444
 H -2.207673 -4.395853 1.074455
 H -3.764113 -3.570480 0.905501
 H -3.454118 -4.598968 3.156396
 H -3.631073 -2.846896 3.280323
 H -0.993149 -4.401524 3.326507

H -1.728793 -3.587752 4.705935
 H -1.445512 -1.390751 3.598098
 H 0.108236 -2.226729 3.618845
 H -0.358685 -1.199050 1.386170
 H -0.132351 -2.943384 1.306785
 H -1.866319 -4.215336 -0.905270
 H -1.646418 -5.429058 -3.037548
 H -1.945301 -4.234348 -5.190709
 H -2.461985 -1.801742 -5.193151
 H -2.677960 -0.582215 -3.045850
 H -4.838123 -1.395653 -2.169644
 H -7.262554 -1.152504 -1.832494
 H -8.188932 -0.881428 0.455674
 H -6.652530 -0.831065 2.408687
 H -4.219330 -1.080659 2.070799
 H -2.353074 0.057605 2.183186
 H -2.729269 0.560314 4.589096
 H -3.044937 2.912906 5.322676
 H -2.973103 4.748486 3.652817
 H -2.626617 4.222071 1.240141
 H -3.253103 1.810546 -2.884754
 H -5.493929 2.028739 -3.942471
 H -7.507209 2.347347 -2.520497
 H -7.277163 2.392789 -0.049680
 H -5.059136 2.107167 0.998948
 H 0.358715 1.199827 1.385648
 H 0.132608 2.944151 1.305691
 H 1.445286 1.391972 3.597604
 H -0.108282 2.228291 3.617960
 H 0.993630 4.402772 3.325108
 H 1.728961 3.589225 4.704834
 H 3.454643 4.599617 3.155181
 H 3.631208 2.847535 3.279591
 H 2.208397 4.396225 1.073143
 H 3.764643 3.570440 0.904608
 H 1.865889 4.214825 -0.906187
 H 1.645675 5.428113 -3.038718

H 1.944931 4.233087 -5.191649
H 2.462272 1.800620 -5.193640
H 2.678509 0.581533 -3.046112
H 4.219320 1.080828 2.070515
H 6.652473 0.831102 2.408604
H 8.189005 0.880998 0.455688
H 7.262801 1.151776 -1.832589
H 4.838420 1.395063 -2.169945
H 5.059168 -2.107154 0.999126
H 7.277061 -2.392987 -0.049725
H 7.506791 -2.348081 -2.520576
H 5.493312 -2.029828 -3.942367
H 3.252625 -1.811401 -2.884398
H 2.352730 -0.057009 2.183113
H 2.729023 -0.558935 4.589178
H 3.045067 -2.911265 5.323457
H 2.973548 -4.747348 3.654145
H 2.627003 -4.221709 1.241314

(Y_{Ph})₂Ge

E = -4694.01344921
P -3.018557 -0.290493 -0.000586
P 3.006926 -0.417890 -0.041197
C -1.542092 0.449278 -0.453584
C -1.563161 1.898297 -0.689589
C -2.462765 2.780525 -0.060504
H -3.169292 2.397894 0.673387
C -2.462205 4.142956 -0.332415
H -3.174948 4.788886 0.178748
C -1.553747 4.683354 -1.234146
H -1.543788 5.751954 -1.439340
C -0.649834 3.832016 -1.865849
H 0.079110 4.235240 -2.567111
C -0.662082 2.471211 -1.606509
H 0.051934 1.816128 -2.103292
C -3.565622 0.083053 1.715207
C -4.832112 0.552946 2.064652

H -5.597584 0.686451 1.304430
 C -5.115634 0.879090 3.387695
 H -6.103679 1.253023 3.649499
 C -4.142322 0.735454 4.369509
 H -4.367256 0.993891 5.402541
 C -2.873760 0.276075 4.025344
 H -2.102571 0.175920 4.786701
 C -2.583583 -0.035216 2.703776
 H -1.581001 -0.360827 2.420072
 C -2.922258 -2.105224 -0.076903
 C -3.107200 -2.930507 1.029559
 H -3.293050 -2.499449 2.010217
 C -3.042160 -4.313520 0.881639
 H -3.177700 -4.954536 1.750625
 C -2.804169 -4.872097 -0.367310
 H -2.751620 -5.953530 -0.479076
 C -2.639151 -4.048308 -1.478763
 H -2.456180 -4.483235 -2.459196
 C -2.700773 -2.671300 -1.336358
 H -2.561191 -2.020061 -2.197846
 C -4.449322 0.069311 -1.075651
 C -4.325181 0.944741 -2.154886
 H -3.385773 1.463919 -2.323756
 C -5.401499 1.143261 -3.013819
 H -5.299950 1.832389 -3.849787
 C -6.597037 0.463649 -2.810243
 H -7.435766 0.621316 -3.485908
 C -6.716793 -0.430960 -1.750434
 H -7.643743 -0.980979 -1.599843
 C -5.645533 -0.631750 -0.889436
 H -5.731409 -1.350077 -0.074284
 C 1.499744 0.375255 0.162147
 C 1.540542 1.819877 0.433717
 C 0.683795 2.379849 1.396566
 H -0.000621 1.718559 1.926264
 C 0.671855 3.742152 1.651758
 H -0.020665 4.142257 2.390691

C 1.533089 4.598933 0.969535
 H 1.523044 5.667966 1.173114
 C 2.394159 4.069571 0.016360
 H 3.064866 4.724368 -0.538713
 C 2.387918 2.706099 -0.252618
 H 3.027245 2.318453 -1.045400
 C 4.317631 0.260656 1.039006
 C 4.375080 -0.137504 2.376533
 H 3.703644 -0.909157 2.744267
 C 5.291550 0.441251 3.245333
 H 5.328446 0.117148 4.283475
 C 6.156621 1.430725 2.790314
 H 6.871994 1.886436 3.472312
 C 6.103261 1.836662 1.462298
 H 6.772247 2.614689 1.100107
 C 5.189727 1.255861 0.590423
 H 5.158666 1.582349 -0.445806
 C 2.882976 -2.196037 0.354387
 C 3.490322 -3.179566 -0.424997
 H 4.024404 -2.908809 -1.331594
 C 3.395435 -4.519541 -0.060963
 H 3.865160 -5.279402 -0.682437
 C 2.697347 -4.886240 1.082354
 H 2.622071 -5.935259 1.362803
 C 2.084581 -3.909689 1.862493
 H 1.521067 -4.191346 2.749721
 C 2.171119 -2.574071 1.498429
 H 1.662421 -1.808825 2.081371
 C 3.760792 -0.362907 -1.714146
 C 5.102272 -0.679948 -1.951644
 H 5.751344 -0.954032 -1.120683
 C 5.609441 -0.640357 -3.244328
 H 6.653970 -0.887470 -3.424878
 C 4.782942 -0.281458 -4.306804
 H 5.183626 -0.246967 -5.318286
 C 3.450015 0.037830 -4.075194
 H 2.803779 0.323301 -4.902858

C 2.940365 -0.001821 -2.781121
H 1.899734 0.253456 -2.577769
Ge -0.028500 -0.772743 -0.233458

$^3(Y_{Ph})_2Ge$

E = -4693.95413228

P 2.625459 0.463153 -0.028416
P -2.691899 0.309372 -0.066120
C 1.844742 -0.559260 -1.155134
C 2.167832 -1.975250 -1.307012
C 3.109465 -2.650664 -0.501516
H 3.679544 -2.102035 0.242300
C 3.316479 -4.020767 -0.604568
H 4.044803 -4.495501 0.052094
C 2.600650 -4.783777 -1.518352
H 2.756480 -5.858158 -1.590944
C 1.676939 -4.138389 -2.338950
H 1.101781 -4.709650 -3.066389
C 1.471076 -2.773838 -2.239976
H 0.732784 -2.291580 -2.881049
C 2.115764 0.180480 1.700313
C 2.796685 -0.741050 2.503429
H 3.769384 -1.119785 2.196454
C 2.235462 -1.182849 3.696121
H 2.772360 -1.905171 4.307927
C 0.992370 -0.708692 4.102465
H 0.548432 -1.064382 5.030167
C 0.313715 0.219708 3.319108
H -0.660294 0.590652 3.628115
C 0.868331 0.657109 2.123991
H 0.313897 1.351918 1.500618
C 2.323873 2.217200 -0.385683
C 2.344732 3.167645 0.637914
H 2.405405 2.850427 1.676939
C 2.297788 4.526776 0.329215
H 2.309088 5.261002 1.132500
C 2.248158 4.940519 -0.995085

H 2.220275 6.002131 -1.234092
 C 2.236270 3.993255 -2.020200
 H 2.202018 4.312849 -3.059548
 C 2.276992 2.639763 -1.719494
 H 2.286080 1.894938 -2.512592
 C 4.453247 0.387273 -0.018530
 C 5.098970 -0.125762 -1.143893
 H 4.503125 -0.544084 -1.953758
 C 6.487158 -0.109621 -1.213878
 H 6.988553 -0.519012 -2.088561
 C 7.232403 0.424501 -0.167643
 H 8.319341 0.435841 -0.224302
 C 6.590334 0.946255 0.951718
 H 7.172518 1.369356 1.768130
 C 5.202757 0.929522 1.027144
 H 4.699501 1.339826 1.902036
 C -1.260228 -0.530749 -0.414443
 C -1.172430 -1.983010 -0.130212
 C -0.203375 -2.468695 0.764229
 H 0.457531 -1.759612 1.250002
 C -0.060332 -3.827005 1.009740
 H 0.716279 -4.166879 1.692617
 C -0.885364 -4.747641 0.372139
 H -0.765241 -5.813783 0.555535
 C -1.855087 -4.291438 -0.515738
 H -2.500836 -5.000896 -1.031210
 C -1.993226 -2.931926 -0.765679
 H -2.734915 -2.593430 -1.484526
 C -3.055561 0.281101 1.720455
 C -3.196401 1.461696 2.455642
 H -3.162167 2.425001 1.951040
 C -3.382416 1.410515 3.833503
 H -3.494514 2.335556 4.396028
 C -3.427653 0.184167 4.488950
 H -3.572588 0.146010 5.566924
 C -3.290591 -0.995050 3.760011
 H -3.326346 -1.957826 4.266107

C -3.107268 -0.952507 2.384065
 H -2.998782 -1.879634 1.824549
 C -2.610445 2.052479 -0.551433
 C -3.741104 2.703994 -1.047622
 H -4.670132 2.156202 -1.185395
 C -3.683609 4.056274 -1.372067
 H -4.568785 4.554471 -1.762170
 C -2.499355 4.763376 -1.200436
 H -2.454456 5.820329 -1.457221
 C -1.371323 4.122151 -0.698018
 H -0.440980 4.665957 -0.558768
 C -1.424059 2.771872 -0.372218
 H -0.537658 2.273724 0.008950
 C -4.236953 -0.293410 -0.850541
 C -5.425446 -0.504476 -0.153253
 H -5.470266 -0.314539 0.917264
 C -6.555823 -0.959756 -0.827654
 H -7.480038 -1.131411 -0.279058
 C -6.504293 -1.194534 -2.196369
 H -7.389012 -1.550713 -2.720892
 C -5.318759 -0.980342 -2.897449
 H -5.276265 -1.166900 -3.968795
 C -4.187455 -0.538650 -2.226072
 H -3.246223 -0.392510 -2.758916
 Ge 0.082034 0.079758 -1.700508

(Y_{Pyr})₂Ge

E = -4726.14540027
 P 2.974038 0.148594 -0.004525
 P -2.815078 0.523911 -0.020878
 C 1.687371 -0.518588 -0.850503
 C 1.496266 -1.860791 -1.233405
 C 2.223822 -3.054467 -0.993504
 H 3.158549 -3.013347 -0.437116
 C 1.696071 -4.253987 -1.416547
 H 2.233109 -5.179049 -1.209526
 C 0.462979 -4.303855 -2.088407

H 0.026762 -5.244452 -2.410506
 C -0.194119 -3.108497 -2.314067
 H -1.164817 -3.071467 -2.810301
 C 3.218247 -0.531437 1.673088
 C 4.428391 -0.506074 2.372970
 H 5.322527 -0.085727 1.918786
 C 4.498948 -1.039177 3.654708
 H 5.442649 -1.019359 4.196809
 C 3.368944 -1.606411 4.238270
 H 3.430090 -2.027607 5.240414
 C 2.170462 -1.648867 3.534423
 H 1.287739 -2.109738 3.974600
 C 2.088215 -1.115759 2.251651
 H 1.157079 -1.197914 1.682279
 C 2.760859 1.944890 0.167626
 C 3.105068 2.620926 1.338985
 H 3.383551 2.059494 2.229114
 C 3.110961 4.013293 1.361813
 H 3.392294 4.536814 2.273668
 C 2.760744 4.730929 0.222970
 H 2.771941 5.819299 0.240722
 C 2.383040 4.057374 -0.935361
 H 2.088284 4.615911 -1.821294
 C 2.386950 2.668811 -0.969040
 H 2.109121 2.136889 -1.877362
 C 4.611426 0.044120 -0.827039
 C 4.773528 -0.842055 -1.892603
 H 3.931263 -1.446898 -2.220066
 C 5.996504 -0.930215 -2.549031
 H 6.114192 -1.626893 -3.376744
 C 7.058937 -0.121996 -2.159823
 H 8.013377 -0.187786 -2.678858
 C 6.894122 0.786526 -1.118711
 H 7.715114 1.438941 -0.827279
 C 5.674732 0.873384 -0.457653
 H 5.543690 1.609323 0.334647
 C -1.472011 -0.501342 -0.151238

C -1.588082 -1.872223 0.318342
 C -0.563555 -3.690552 1.317647
 H 0.350188 -4.078591 1.778552
 C -1.675214 -4.514245 1.181138
 H -1.657263 -5.542133 1.535111
 C -2.793648 -3.967779 0.558451
 H -3.690190 -4.566710 0.400719
 C -2.746222 -2.659114 0.112144
 H -3.588229 -2.237261 -0.434297
 C -3.739298 0.234765 1.528853
 C -3.199251 0.699653 2.730337
 H -2.289940 1.296112 2.719654
 C -3.815905 0.404330 3.939026
 H -3.388691 0.777666 4.867669
 C -4.973021 -0.368403 3.962390
 H -5.453922 -0.602416 4.910369
 C -5.510589 -0.843838 2.772364
 H -6.410296 -1.455990 2.784294
 C -4.898050 -0.544198 1.560271
 H -5.326578 -0.921741 0.634628
 C -2.226033 2.249033 0.043339
 C -2.917733 3.322180 -0.519114
 H -3.825479 3.150071 -1.091178
 C -2.435817 4.618186 -0.369920
 H -2.975685 5.448064 -0.822098
 C -1.269209 4.852989 0.349485
 H -0.896896 5.869027 0.468857
 C -0.572708 3.786073 0.907179
 H 0.346181 3.957589 1.461211
 C -1.038784 2.488823 0.744296
 H -0.482664 1.643248 1.148312
 C -4.131522 0.515293 -1.309494
 C -5.379446 1.124335 -1.139278
 H -5.615150 1.627836 -0.202038
 C -6.324508 1.078230 -2.156824
 H -7.294646 1.552168 -2.018430
 C -6.032115 0.421896 -3.350213

H -6.774673 0.384620 -4.145272
 C -4.795925 -0.190142 -3.523102
 H -4.566533 -0.706310 -4.453291
 C -3.850057 -0.145891 -2.503801
 H -2.877190 -0.624953 -2.620215
 Ge -0.150324 0.087092 -1.563301
 N -0.519619 -2.427271 0.924793
 N 0.320266 -1.948167 -1.927133

$^3(Y_{Pyr})_2Ge$

E = -4726.07816773
 P 2.653639 0.381169 0.152324
 P -2.606036 0.361750 -0.145346
 C 1.949267 -0.366665 -1.232601
 C 2.075142 -1.660211 -1.786151
 C 3.084739 -2.648302 -1.706130
 H 4.006548 -2.439581 -1.171484
 C 2.854017 -3.875220 -2.292949
 H 3.620099 -4.647124 -2.227063
 C 1.655700 -4.150845 -2.969981
 H 1.470797 -5.113970 -3.435610
 C 0.702281 -3.148284 -3.017632
 H -0.262587 -3.287905 -3.505626
 C 2.020921 -0.340469 1.692090
 C 2.656575 -1.426935 2.303192
 H 3.633338 -1.752914 1.950989
 C 2.036469 -2.098631 3.348834
 H 2.539713 -2.940907 3.820362
 C 0.768476 -1.715316 3.778821
 H 0.276830 -2.260656 4.582018
 C 0.123549 -0.645737 3.165705
 H -0.875080 -0.348031 3.480514
 C 0.747760 0.034494 2.129270
 H 0.232020 0.845890 1.625361
 C 2.199392 2.102855 0.093848
 C 2.005991 2.896017 1.257143
 H 1.894107 2.417386 2.227862

C 1.957114 4.275366 1.169418
 H 1.780196 4.856526 2.073945
 C 2.151408 4.933439 -0.051963
 H 2.134498 6.019346 -0.105649
 C 2.401419 4.161461 -1.197424
 H 2.573416 4.652443 -2.154905
 C 2.419026 2.783427 -1.137634
 H 2.606012 2.198632 -2.037342
 C 4.440133 0.173210 0.158105
 C 5.122463 0.077037 -1.069880
 H 4.551139 -0.059641 -1.987264
 C 6.507144 0.153022 -1.111158
 H 7.020156 0.065277 -2.067673
 C 7.242083 0.337854 0.058516
 H 8.327788 0.397112 0.021585
 C 6.570911 0.459661 1.278496
 H 7.135775 0.614317 2.196417
 C 5.189520 0.390706 1.330872
 H 4.676983 0.507151 2.284849
 C -1.272010 -0.688560 -0.400837
 C -1.126077 -1.939145 0.324726
 C 0.287537 -3.681519 0.880293
 H 1.285732 -4.111617 0.762580
 C -0.663548 -4.320144 1.669991
 H -0.431853 -5.249029 2.184909
 C -1.915979 -3.722488 1.757271
 H -2.711226 -4.182405 2.342613
 C -2.159104 -2.541893 1.075988
 H -3.151617 -2.105534 1.100815
 C -2.825583 0.880775 1.594719
 C -2.091163 1.962901 2.097964
 H -1.450237 2.549457 1.445599
 C -2.165832 2.304310 3.440950
 H -1.583161 3.145778 3.809854
 C -2.976206 1.575624 4.307766
 H -3.027590 1.840036 5.361943
 C -3.724040 0.511429 3.815762

H -4.369598 -0.058047 4.481458
 C -3.654065 0.167348 2.470821
 H -4.263879 -0.654125 2.103846
 C -2.393155 1.856524 -1.139032
 C -3.388153 2.282216 -2.021196
 H -4.306874 1.711772 -2.128096
 C -3.202427 3.433404 -2.778453
 H -3.979921 3.753563 -3.468947
 C -2.027521 4.169150 -2.652967
 H -1.888362 5.075580 -3.239241
 C -1.030083 3.749465 -1.782024
 H -0.110636 4.315954 -1.671461
 C -1.201573 2.589999 -1.029639
 H -0.398488 2.267366 -0.366410
 C -4.226201 -0.331067 -0.616340
 C -5.428586 0.258188 -0.214724
 H -5.415281 1.132553 0.434698
 C -6.637783 -0.272613 -0.646371
 H -7.573689 0.187652 -0.335846
 C -6.650781 -1.393293 -1.473483
 H -7.599593 -1.809770 -1.806568
 C -5.455818 -1.983005 -1.871379
 H -5.467127 -2.861067 -2.513850
 C -4.243027 -1.451963 -1.445155
 H -3.295315 -1.902190 -1.739857
 Ge 0.077301 -0.219151 -1.697184
 N 0.073641 -2.543599 0.244892
 N 0.918840 -1.971499 -2.453011

(Y_{PhF})₂Ge

E = -5687.83724891
 P 3.001263 0.843266 -0.110541
 P -2.903494 1.162916 0.012181
 C 1.583016 0.062899 -0.681368
 C 1.485996 -1.382658 -0.756970
 C 2.216450 -2.293596 0.022019
 C 2.074225 -3.670250 -0.059637

C 1.133661 -4.211576 -0.924771
 C 0.373771 -3.352241 -1.708644
 C 0.572159 -1.983878 -1.640349
 C 3.120551 1.048643 1.707502
 C 3.991237 0.324525 2.520794
 H 4.710103 -0.360118 2.078243
 C 3.922337 0.453083 3.904760
 H 4.601044 -0.122066 4.531367
 C 2.985880 1.299522 4.485248
 H 2.932504 1.393284 5.568179
 C 2.108964 2.019320 3.677762
 H 1.369344 2.679929 4.126618
 C 2.171851 1.889452 2.298135
 H 1.475404 2.445470 1.665729
 C 3.088533 2.542574 -0.765126
 C 3.652260 3.582927 -0.026858
 H 3.954240 3.421843 1.005591
 C 3.821535 4.836417 -0.606962
 H 4.253243 5.646394 -0.022353
 C 3.439164 5.052659 -1.924894
 H 3.569327 6.034665 -2.375815
 C 2.893009 4.010391 -2.669829
 H 2.595282 4.175003 -3.703371
 C 2.722200 2.759275 -2.096244
 H 2.290502 1.939475 -2.667444
 C 4.571037 0.124304 -0.682131
 C 4.564118 -0.793100 -1.732930
 H 3.619026 -1.110164 -2.166834
 C 5.764637 -1.287972 -2.230552
 H 5.753228 -2.009546 -3.044876
 C 6.973397 -0.859624 -1.694026
 H 7.911415 -1.248929 -2.085123
 C 6.984465 0.076727 -0.664305
 H 7.929370 0.426952 -0.253689
 C 5.788023 0.571386 -0.161808
 H 5.800500 1.315009 0.633767
 C -1.439970 0.261932 0.022688

C -1.522880 -1.157655 0.341133
 C -0.681767 -1.733845 1.302093
 C -0.670757 -3.095716 1.556714
 C -1.550230 -3.939301 0.888231
 C -2.422575 -3.406183 -0.050801
 C -2.377319 -2.046835 -0.320939
 C -4.163188 0.369930 1.064285
 C -4.026646 0.440427 2.453165
 H -3.230439 1.035465 2.893885
 C -4.906271 -0.247026 3.278802
 H -4.792494 -0.184130 4.359058
 C -5.925961 -1.015273 2.725761
 H -6.612485 -1.557143 3.373389
 C -6.062985 -1.093665 1.344872
 H -6.853388 -1.699803 0.906994
 C -5.186891 -0.404590 0.513757
 H -5.287313 -0.487585 -0.564977
 C -2.585458 2.821742 0.711507
 C -3.157211 3.986795 0.202730
 H -3.796207 3.947272 -0.674892
 C -2.885536 5.215984 0.796108
 H -3.326097 6.120846 0.382360
 C -2.047418 5.290476 1.901319
 H -1.834770 6.253808 2.360877
 C -1.470067 4.130938 2.411440
 H -0.802686 4.184983 3.269584
 C -1.729746 2.904310 1.817144
 H -1.243968 1.999729 2.181674
 C -3.728149 1.434690 -1.591159
 C -5.010551 1.986504 -1.679548
 H -5.556656 2.248091 -0.773541
 C -5.596120 2.188101 -2.922771
 H -6.594116 2.617006 -2.989138
 C -4.908013 1.834384 -4.080943
 H -5.369461 1.989898 -5.054384
 C -3.640806 1.269515 -3.994445
 H -3.110536 0.974576 -4.897532

C -3.051111 1.065205 -2.751633
H -2.075902 0.586927 -2.666125
Ge 0.072503 1.321029 -0.571416
F -3.177482 -1.580929 -1.282895
F -3.254258 -4.198292 -0.709338
F -1.530718 -5.241249 1.125263
F 0.201346 -3.607091 2.414500
F 0.180265 -0.974153 1.970474
F -0.195859 -1.219792 -2.417285
F -0.568723 -3.845847 -2.499634
F 0.934214 -5.519462 -0.977956
F 2.801347 -4.463990 0.710597
F 3.099451 -1.827317 0.909999

$^3(Y_{PhF})_2Ge$

E = -5687.76630803
P -2.793499 -1.083380 -0.053935
P 2.992093 -0.919022 0.078701
C -1.627156 -0.034705 -0.755664
C -1.703123 1.393558 -0.921991
C -2.652169 2.213016 -0.283880
C -2.654492 3.596341 -0.360137
C -1.676270 4.252965 -1.095891
C -0.715567 3.488665 -1.747905
C -0.756403 2.107627 -1.684013
C -2.919869 -1.086385 1.762906
C -3.971575 -0.460419 2.434707
H -4.794244 -0.024055 1.873747
C -3.958043 -0.373387 3.821910
H -4.779802 0.119327 4.337504
C -2.895434 -0.902165 4.546691
H -2.885938 -0.826705 5.632405
C -1.841894 -1.522182 3.881940
H -1.005075 -1.931513 4.444732
C -1.853470 -1.616624 2.497317
H -1.027856 -2.088053 1.965925
C -2.303356 -2.760427 -0.536062

C -2.461064 -3.867940 0.312514
 H -2.829204 -3.731401 1.326449
 C -2.138925 -5.140415 -0.136446
 H -2.253781 -5.989501 0.535262
 C -1.673500 -5.337257 -1.436161
 H -1.416534 -6.337268 -1.779393
 C -1.564479 -4.250823 -2.300375
 H -1.230366 -4.399574 -3.325279
 C -1.894337 -2.974364 -1.870155
 H -1.838093 -2.130993 -2.554609
 C -4.485901 -0.894365 -0.693650
 C -4.731623 -0.035199 -1.764001
 H -3.921467 0.567998 -2.168573
 C -6.007859 0.044185 -2.310508
 H -6.197710 0.720349 -3.141610
 C -7.037031 -0.736698 -1.796568
 H -8.035243 -0.671892 -2.225354
 C -6.791333 -1.604950 -0.736228
 H -7.594217 -2.221876 -0.337578
 C -5.518562 -1.687058 -0.187065
 H -5.325419 -2.372001 0.638158
 C 1.535409 -0.047020 0.226521
 C 1.397836 1.365967 0.515877
 C 0.368696 1.826888 1.356949
 C 0.114683 3.173489 1.558251
 C 0.926435 4.131710 0.963346
 C 1.975675 3.724511 0.149004
 C 2.179871 2.371773 -0.072629
 C 4.186480 -0.471091 1.369381
 C 4.244678 -1.171598 2.576306
 H 3.616639 -2.046151 2.730225
 C 5.113039 -0.757634 3.578570
 H 5.159192 -1.311500 4.514061
 C 5.921088 0.359479 3.386964
 H 6.597503 0.683357 4.175606
 C 5.866887 1.058114 2.186283
 H 6.499018 1.930126 2.031316

C 5.007154 0.644338 1.175080
 H 4.975309 1.185052 0.232141
 C 2.509877 -2.660951 0.272498
 C 2.946291 -3.674793 -0.579068
 H 3.646187 -3.450863 -1.380549
 C 2.463069 -4.970288 -0.420351
 H 2.798690 -5.756212 -1.093559
 C 1.546550 -5.257511 0.587324
 H 1.162204 -6.269768 0.698470
 C 1.108562 -4.252812 1.441915
 H 0.381241 -4.473550 2.221021
 C 1.576179 -2.952445 1.280669
 H 1.236231 -2.147202 1.929211
 C 3.941255 -0.850939 -1.476297
 C 5.257774 -1.314799 -1.536030
 H 5.746690 -1.687837 -0.636544
 C 5.944924 -1.294256 -2.744478
 H 6.971438 -1.652707 -2.791351
 C 5.320531 -0.809126 -3.889961
 H 5.860696 -0.790447 -4.834770
 C 4.013148 -0.336400 -3.828021
 H 3.530836 0.056621 -4.720556
 C 3.321813 -0.353467 -2.622236
 H 2.307706 0.038145 -2.552206
 Ge 0.060715 -0.979332 -0.652863
 F 3.151908 2.029641 -0.919744
 F 2.742278 4.626259 -0.442442
 F 0.675685 5.417353 1.141035
 F -0.907332 3.555506 2.309542
 F -0.435909 0.959150 1.955741
 F 0.210288 1.440952 -2.324021
 F 0.259210 4.088065 -2.417813
 F -1.640407 5.576147 -1.154830
 F -3.577216 4.293485 0.283885
 F -3.589977 1.639211 0.478974

(Y_{CN})₂Ge

E = -4415.94130453

C 3.563492 -0.910513 -1.570476

C 4.701857 -0.502260 -2.273478

C 5.052335 -1.142168 -3.455293

H 5.935560 -0.821656 -4.004581

C 4.265328 -2.184026 -3.940538

H 4.538680 -2.681076 -4.869621

C 3.124221 -2.578315 -3.251094

H 2.493529 -3.376658 -3.636065

C 2.764759 -1.942458 -2.067047

H 1.850162 -2.235139 -1.551877

H 5.303015 0.329390 -1.906233

P 3.050507 -0.101497 -0.025688

C -1.366014 -0.312821 -0.439851

P -3.013328 -0.103503 -0.023775

C 1.409767 -0.363981 0.373234

C -1.022406 -1.503550 -1.098198

C 1.093932 -1.617190 0.921908

C 3.824964 2.468621 0.743934

H 4.112461 2.019390 1.692584

N -0.718762 -2.462621 -1.690091

C 3.079126 3.616835 -1.683601

H 2.783544 4.064892 -2.629927

N 0.803182 -2.622470 1.437962

C 3.335587 1.666427 -0.287068

C 3.943897 3.840367 0.556309

H 4.329639 4.463909 1.360205

C 3.570708 4.413700 -0.655177

H 3.664439 5.488514 -0.798655

C 2.960695 2.244009 -1.503462

H 2.583951 1.616030 -2.309379

C 4.187253 -0.659898 1.277551

C 3.713066 -0.655301 2.592064

H 2.683270 -0.360872 2.786443

C 4.548256 -1.044213 3.632527

H 4.172325 -1.046670 4.653527

C 5.853703 -1.442892 3.366681
 H 6.504684 -1.752907 4.182004
 C 6.324616 -1.459824 2.057380
 H 7.341600 -1.784367 1.846533
 C -3.210524 1.516683 0.753818
 C 5.494377 -1.073109 1.012588
 H 5.862290 -1.108756 -0.009892
 C -3.409661 1.649395 2.127195
 H -3.504677 0.762532 2.750496
 C -3.481310 2.917448 2.694936
 H -3.635023 3.020448 3.767112
 C -3.353523 4.047654 1.895752
 H -3.409013 5.038066 2.343623
 C -3.152227 3.916575 0.524332
 H -3.045713 4.801137 -0.099979
 C -3.078624 2.654756 -0.048065
 H -2.913607 2.545551 -1.119010
 H -4.712034 -1.740462 -4.351236
 H -3.087035 -1.627821 -2.498228
 C -4.209860 -0.142781 -1.397370
 C -5.358557 0.653605 -1.380930
 H -5.539706 1.335278 -0.551615
 C -6.269257 0.586654 -2.429401
 H -7.159786 1.212008 -2.412087
 C -6.039084 -0.274018 -3.496948
 H -6.751585 -0.324962 -4.318159
 C -4.896221 -1.067533 -3.516270
 C -3.980061 -1.006217 -2.473152
 C -3.606025 -1.353845 1.153492
 C -2.673268 -2.205255 1.747358
 H -1.616136 -2.138535 1.492860
 C -3.103558 -3.160511 2.663696
 H -2.371362 -3.827001 3.114435
 C -4.450504 -3.261784 2.989532
 H -4.782599 -4.010950 3.706170
 C -5.381649 -2.412558 2.393985
 H -6.437486 -2.497072 2.643962

C -4.963515 -1.463576 1.471651
H -5.693950 -0.812180 0.993719
Ge 0.016106 0.981493 0.073273

$^3(Y_{CN})_2Ge$

E = -4415.88264709

C -2.853364 -0.996987 -1.374995
C -2.878361 -2.393356 -1.344822
C -3.010409 -3.111143 -2.529557
H -3.036435 -4.198526 -2.498866
C -3.113786 -2.442327 -3.744866
H -3.219582 -3.006776 -4.669378
C -3.080600 -1.050693 -3.777885
H -3.154730 -0.523581 -4.726758
C -2.953046 -0.325795 -2.600329
H -2.923936 0.761623 -2.635203
H -2.805603 -2.921989 -0.397036
P -2.653167 -0.000387 0.134821
C 1.623900 -0.282274 1.421546
P 2.749827 0.068048 0.169546
C -1.176312 0.886501 0.144484
C 1.680462 -1.498469 2.100299
C -0.920178 1.661760 -0.991331
C -3.811159 -1.141359 2.411934
H -4.667199 -0.493911 2.235901
N 1.697421 -2.528910 2.652449
C -1.597372 -2.779264 2.891139
H -0.713329 -3.384201 3.078413
N -0.698014 2.278433 -1.959143
C -2.715410 -1.109151 1.549780
C -3.796635 -1.995522 3.509779
H -4.648816 -2.017189 4.185962
C -2.693477 -2.808809 3.748197
H -2.683684 -3.467296 4.614832
C -1.607018 -1.929717 1.791752
H -0.747615 -1.908753 1.123359
C -4.142925 1.039702 0.173966

C -4.033298 2.332721 0.684122
 H -3.057951 2.695482 1.006410
 C -5.160129 3.143771 0.760416
 H -5.073349 4.154652 1.153307
 C -6.392322 2.665564 0.327937
 H -7.272629 3.303105 0.384768
 C -6.502693 1.376142 -0.186633
 H -7.466373 1.006324 -0.531211
 C 2.821677 1.855021 -0.075406
 C -5.379977 0.562306 -0.267766
 H -5.461313 -0.442486 -0.680109
 C 2.438428 2.448552 -1.275663
 H 2.078378 1.842261 -2.102211
 C 2.456433 3.835361 -1.393156
 H 2.118366 4.295175 -2.318702
 C 2.875953 4.620419 -0.328309
 H 2.887601 5.704570 -0.424471
 C 3.269510 4.026391 0.871006
 H 3.588291 4.643370 1.708632
 C 3.232698 2.648100 1.004507
 H 3.504922 2.176319 1.947776
 H 6.035751 -3.422602 1.257002
 H 3.769320 -2.551344 0.849226
 C 4.440998 -0.528407 0.468170
 C 5.549101 0.317399 0.380560
 H 5.417982 1.367770 0.130759
 C 6.826333 -0.184147 0.608612
 H 7.685650 0.479730 0.537165
 C 7.003571 -1.525938 0.925181
 H 8.003698 -1.915113 1.106355
 C 5.901581 -2.371859 1.008638
 C 4.623478 -1.881395 0.777122
 C 2.303314 -0.665677 -1.433127
 C 1.009204 -1.147509 -1.621058
 H 0.298002 -1.098452 -0.799357
 C 0.634590 -1.664673 -2.856161
 H -0.378346 -2.031999 -2.999988

C 1.552489 -1.704885 -3.898820
H 1.257737 -2.108477 -4.865793
C 2.850225 -1.233765 -3.710669
H 3.569430 -1.272842 -4.526467
C 3.228864 -0.715749 -2.479568
H 4.244802 -0.352889 -2.327894
Ge 0.105600 0.932545 1.617212

3.3.2.2 Koordinaten der mit zwei unterschiedlichen Yliden substituierten Germylene

$YGe^{Pip}Y_S$

E = -6274.63028475
Ge 0.233118 -0.572220 -1.378235
C 1.686471 0.012428 -0.079502
C -1.497498 -0.302524 -0.280690
S -0.486055 1.883484 -1.951943
P -2.051583 1.190573 -0.870552
S 1.993398 -1.284432 0.931250
O 2.217408 -0.959595 2.352528
O 0.907781 -2.252980 0.599976
C 3.507079 -2.081643 0.396786
P -2.330132 -1.541416 0.493177
N -2.126676 -1.559442 2.170605
C -1.822874 -3.124528 -0.237831
C -4.148099 -1.448508 0.310512
C -2.589751 2.418401 0.362827
C -3.513669 1.016199 -1.953854
P 2.644559 1.402386 -0.105856
C 2.795005 1.981155 -1.822808
C 2.032690 2.795117 0.881744
C 4.333137 1.119188 0.510094
C -0.891688 -1.044152 2.758494
C -2.873731 -2.452019 3.043329
C -3.207121 -1.764106 4.358552
C -1.938599 -1.255944 5.028902
C -1.164011 -0.351756 4.081514
C -4.789919 -2.023117 -0.790008

C -4.904741 -0.704454 1.219730
 C -6.272493 -0.538794 1.034303
 C -6.902100 -1.115850 -0.062197
 C -6.156689 -1.857445 -0.972634
 C -1.372197 -4.184211 0.547226
 C -1.805458 -3.246779 -1.630699
 C -0.953060 -5.366585 -0.048555
 C -0.971943 -5.495990 -1.433101
 C -1.392713 -4.433103 -2.224708
 C -3.326674 0.279902 -3.127820
 C -4.782094 1.494266 -1.633348
 C -4.398975 0.025592 -3.970094
 C -5.666886 0.509142 -3.649720
 C -5.855270 1.241318 -2.484934
 C -2.850141 2.007381 1.666227
 C -2.767782 3.756026 0.005651
 C -3.337150 2.915472 2.602693
 C -3.542744 4.242039 2.238189
 C -3.243994 4.663816 0.943255
 C 4.537984 -2.297379 1.295826
 C 3.638846 -2.443665 -0.940845
 C 5.729037 -2.855242 0.841547
 C 5.900873 -3.200335 -0.498117
 C 4.831251 -2.996212 -1.379811
 C 7.205105 -3.749079 -0.994361
 C 0.731840 2.724018 1.373977
 C 2.832622 3.907001 1.159692
 C 0.223608 3.778224 2.125286
 C 1.013771 4.891426 2.389560
 C 2.320555 4.955975 1.912166
 C 5.368687 0.766542 -0.358076
 C 4.557936 1.136259 1.889171
 C 5.816393 0.823770 2.388951
 C 6.849729 0.486664 1.521294
 C 6.623496 0.453456 0.148998
 C 2.706347 3.325780 -2.183488
 C 2.959022 1.006933 -2.812238

C 3.046029 1.378929 -4.147989
 C 2.962516 2.720870 -4.503439
 C 2.792067 3.691111 -3.521448
 H -2.281677 -3.355543 3.272396
 H -3.782738 -2.788504 2.531545
 H -3.742951 -2.467391 5.009257
 H -3.888877 -0.922599 4.165839
 H -1.308965 -2.116988 5.300711
 H -2.176231 -0.734414 5.965058
 H -1.734928 0.572158 3.909237
 H -0.201724 -0.054002 4.515384
 H -0.431446 -0.357458 2.039632
 H -0.170353 -1.860300 2.905468
 H -4.421578 -0.268536 2.089174
 H -6.846960 0.039811 1.755265
 H -7.973148 -0.988268 -0.207947
 H -6.640077 -2.308369 -1.836812
 H -4.224773 -2.611163 -1.507214
 H -1.308329 -4.070499 1.624712
 H -0.593200 -6.184982 0.571627
 H -0.638466 -6.422156 -1.897785
 H -1.381524 -4.518775 -3.309405
 H -2.098475 -2.397922 -2.246761
 H -2.324720 -0.074707 -3.376617
 H -4.247008 -0.543901 -4.885269
 H -6.507922 0.312904 -4.312443
 H -6.845440 1.612644 -2.227005
 H -4.940210 2.054112 -0.713696
 H -2.650688 0.973999 1.942029
 H -3.542951 2.586934 3.620382
 H -3.921428 4.955535 2.967851
 H -3.383451 5.706889 0.665476
 H -2.524250 4.078970 -1.006143
 H 4.397213 -2.008621 2.334531
 H 6.547141 -3.014254 1.543429
 H 4.939680 -3.278574 -2.426654
 H 2.803146 -2.287641 -1.624810

H 7.802349 -4.166677 -0.176752
H 7.805983 -2.961414 -1.470854
H 7.053080 -4.534682 -1.743626
H 0.138699 1.833218 1.164079
H -0.793628 3.728882 2.503216
H 0.611143 5.713045 2.979454
H 2.941918 5.822309 2.131185
H 3.859317 3.944688 0.796220
H 3.742834 1.376708 2.567885
H 5.987252 0.838672 3.463572
H 7.834026 0.241754 1.916381
H 7.427147 0.180568 -0.532201
H 5.196569 0.738662 -1.431596
H 3.000280 -0.042527 -2.525382
H 3.165263 0.615155 -4.913609
H 3.018447 3.011178 -5.550900
H 2.710051 4.740022 -3.799115
H 2.539671 4.085916 -1.424653

³YGe^{Pip}Y_S

E = -6274.56714501
Ge 0.151311 -0.166256 -1.235211
C 1.737800 0.023104 -0.108612
C -1.550928 -0.129329 -0.264182
S -0.193682 1.766079 -2.281498
P -2.320889 1.342556 -0.784147
S 1.975521 -1.265773 0.958210
O 2.190455 -0.847884 2.355150
O 0.879821 -2.220252 0.674391
C 3.480305 -2.107542 0.483011
P -2.301234 -1.500101 0.401177
N -2.080436 -1.727858 2.056164
C -1.785563 -2.980740 -0.517535
C -4.118856 -1.410446 0.275473
C -2.917286 2.356464 0.584479
C -3.736715 1.052601 -1.880567
P 2.742257 1.401171 -0.120070

C 3.087462 1.885749 -1.837039
 C 2.085912 2.863015 0.726277
 C 4.356887 1.083030 0.650773
 C -0.942043 -1.184409 2.787381
 C -2.809637 -2.766878 2.769278
 C -3.288471 -2.269067 4.123578
 C -2.115988 -1.737930 4.935352
 C -1.374005 -0.667239 4.149444
 C -4.839685 -2.030490 -0.746433
 C -4.796257 -0.623356 1.211149
 C -6.174007 -0.464461 1.129548
 C -6.887791 -1.091071 0.113689
 C -6.218322 -1.870630 -0.823073
 C -1.253365 -4.097203 0.123080
 C -1.863814 -2.958981 -1.913290
 C -0.841589 -5.196723 -0.620142
 C -0.952487 -5.184627 -2.006175
 C -1.459455 -4.062349 -2.654033
 C -3.460796 0.388562 -3.083563
 C -5.053525 1.422358 -1.595718
 C -4.485572 0.079340 -3.967118
 C -5.796754 0.448263 -3.675507
 C -6.073161 1.125845 -2.493062
 C -2.637288 1.994225 1.907255
 C -3.520087 3.601206 0.341932
 C -2.986682 2.827594 2.962085
 C -3.609056 4.048001 2.713799
 C -3.869656 4.431136 1.398383
 C 4.491942 -2.293132 1.409583
 C 3.617480 -2.557382 -0.827581
 C 5.670824 -2.915535 1.009795
 C 5.848133 -3.353134 -0.301453
 C 4.798234 -3.170476 -1.212220
 C 7.129108 -3.997715 -0.739549
 C 0.716074 2.941644 0.975985
 C 2.926141 3.923840 1.078265
 C 0.184151 4.095139 1.542512

C 1.019319 5.154969 1.878794
 C 2.391282 5.067210 1.657855
 C 5.454300 0.697949 -0.122379
 C 4.470028 1.139395 2.042573
 C 5.679999 0.827428 2.649607
 C 6.774629 0.452474 1.876972
 C 6.659713 0.384126 0.492566
 C 3.191768 3.218857 -2.230619
 C 3.243377 0.866611 -2.780158
 C 3.512466 1.182582 -4.105392
 C 3.617113 2.513310 -4.496183
 C 3.455467 3.528115 -3.559052
 H -2.159141 -3.643805 2.933434
 H -3.652656 -3.106042 2.155506
 H -3.795139 -3.087854 4.650851
 H -4.031756 -1.473574 3.972726
 H -1.426822 -2.567446 5.156643
 H -2.457636 -1.347920 5.902728
 H -2.032590 0.203986 4.026805
 H -0.482868 -0.325512 4.690280
 H -0.487272 -0.391698 2.182984
 H -0.166918 -1.952862 2.911266
 H -4.237266 -0.142721 2.010183
 H -6.689603 0.150561 1.864712
 H -7.967614 -0.969691 0.049954
 H -6.770536 -2.357702 -1.624045
 H -4.331134 -2.648861 -1.480730
 H -1.112571 -4.085185 1.198983
 H -0.414812 -6.060165 -0.113900
 H -0.625911 -6.046278 -2.585799
 H -1.525176 -4.038363 -3.740004
 H -2.231887 -2.064811 -2.414393
 H -2.425116 0.143808 -3.322234
 H -4.258088 -0.439159 -4.897021
 H -6.599524 0.211949 -4.371587
 H -7.096715 1.408833 -2.252748
 H -5.290000 1.918285 -0.656992

H -2.140967 1.044604 2.087832
 H -2.766151 2.523122 3.984155
 H -3.881855 4.703269 3.538638
 H -4.343101 5.390153 1.194986
 H -3.710499 3.917268 -0.683092
 H 4.349272 -1.928726 2.424073
 H 6.475119 -3.051892 1.731843
 H 4.913189 -3.519681 -2.237948
 H 2.796526 -2.419290 -1.531082
 H 7.810336 -4.149638 0.103999
 H 7.649053 -3.379345 -1.483444
 H 6.945782 -4.973206 -1.207170
 H 0.076823 2.096221 0.726755
 H -0.886598 4.164177 1.717861
 H 0.598362 6.054697 2.324011
 H 3.045455 5.891330 1.935875
 H 3.999039 3.851343 0.903381
 H 3.605812 1.406839 2.645768
 H 5.764895 0.872264 3.733506
 H 7.720612 0.208136 2.356927
 H 7.511429 0.083363 -0.114018
 H 5.368493 0.644268 -1.205168
 H 3.132575 -0.170166 -2.467329
 H 3.625364 0.386004 -4.837926
 H 3.814152 2.761002 -5.537499
 H 3.520837 4.569950 -3.866077
 H 3.035822 4.017357 -1.510017

$Y_{CN}Ge^{Pip}Y_S$

E = -5546.99185270
 Ge -0.427319 -1.079650 0.828685
 S -0.308517 1.259427 2.065838
 P 1.015610 1.437842 0.535609
 C -1.893592 -0.607942 -0.479529
 C 1.131756 -0.118448 -0.165946
 N -1.378324 -0.478473 -2.985492
 C -1.639755 -0.513292 -1.843245

N 3.689723 -1.242690 0.702847
 P 2.518675 -1.006065 -0.509910
 C 4.905452 -0.451446 0.843996
 C 3.115744 -1.639971 1.987327
 C 0.436875 2.730699 -0.610410
 C 2.582932 2.146907 1.152788
 P -3.473464 -0.269461 0.045649
 C -4.040343 1.413647 -0.355010
 C -4.786812 -1.369982 -0.578722
 C -3.537843 -0.457135 1.846228
 C 1.985396 -2.696003 -0.907722
 C 3.494187 -0.464563 -1.940183
 C -0.062598 2.384872 -1.862984
 C 0.433399 4.068129 -0.201012
 H -0.076761 1.342408 -2.174572
 C -0.559253 3.373361 -2.708936
 H -0.962339 3.087421 -3.678276
 C -0.544962 4.704043 -2.310719
 H -0.927919 5.476893 -2.975069
 C -0.046841 5.051651 -1.054870
 H -0.036980 6.094148 -0.740893
 H 0.811689 4.335021 0.785525
 C 2.877509 2.127607 2.515697
 C 3.503358 2.691034 0.252289
 H 2.138130 1.722296 3.205795
 C 4.089314 2.635646 2.974030
 H 4.312738 2.623731 4.039282
 C 5.010141 3.162661 2.073679
 H 5.957325 3.560607 2.433223
 C 4.715675 3.190900 0.712759
 H 5.429603 3.612007 0.007497
 H 3.265599 2.738066 -0.808981
 H 5.266398 -0.150421 -0.142544
 H 4.703424 0.470435 1.408057
 C 5.960163 -1.250389 1.589981
 H 6.869972 -0.644495 1.691059
 H 6.224187 -2.141719 1.001891

C 5.432366 -1.665815 2.955531
 H 5.258871 -0.760956 3.558387
 H 6.172239 -2.268617 3.497412
 C 4.122770 -2.426382 2.808896
 H 4.311746 -3.390151 2.313961
 H 3.687833 -2.652644 3.790608
 H 2.779781 -0.746333 2.544401
 H 2.213574 -2.239838 1.807865
 C 0.839891 -2.871196 -1.689520
 C 2.714881 -3.807466 -0.482904
 H 0.286418 -2.009048 -2.057636
 C 0.419653 -4.154639 -2.019225
 H -0.474149 -4.281178 -2.626663
 C 1.137379 -5.262102 -1.579855
 H 0.803026 -6.265735 -1.836712
 C 2.287330 -5.087453 -0.816212
 H 2.853535 -5.952253 -0.475238
 H 3.612620 -3.660199 0.113685
 C -3.150622 2.458092 -0.082878
 C -5.272275 1.686085 -0.951388
 H -2.185520 2.235961 0.372748
 C -3.506365 3.766336 -0.382289
 H -2.812278 4.573161 -0.159435
 C -4.735547 4.036338 -0.977563
 H -5.007645 5.061298 -1.223660
 C -5.614150 2.997583 -1.265088
 H -6.571381 3.206427 -1.739042
 H -5.961687 0.876846 -1.181128
 C -4.589166 -2.067372 -1.771592
 C -5.981970 -1.524295 0.129179
 H -3.656538 -1.950258 -2.320976
 C -5.588907 -2.905646 -2.254151
 H -5.434156 -3.446212 -3.185849
 C -6.778443 -3.056719 -1.548772
 H -7.555347 -3.718302 -1.927709
 C -6.974557 -2.366988 -0.355875
 H -7.901850 -2.489433 0.200637

H -6.131178 -0.989551 1.066549
 C -3.350138 -1.742268 2.366198
 C -3.716682 0.622517 2.709884
 H -3.211461 -2.583958 1.688955
 C -3.338380 -1.940076 3.740385
 H -3.185200 -2.939927 4.140878
 C -3.513825 -0.859757 4.599785
 H -3.500921 -1.015260 5.676990
 C -3.704285 0.417463 4.085311
 H -3.838758 1.263253 4.756288
 H -3.856571 1.624113 2.311280
 C 3.065714 0.632176 -2.682550
 C 4.617583 -1.188029 -2.352918
 H 2.164887 1.159718 -2.377614
 C 3.773102 1.028572 -3.813289
 H 3.431837 1.886587 -4.388834
 C 4.900454 0.320009 -4.210496
 H 5.451042 0.625679 -5.098280
 C 5.319672 -0.792427 -3.482714
 H 6.193987 -1.355815 -3.802870
 H 4.934211 -2.063562 -1.786272

³Y_{CN}Ge^{Pip}Y_S

E = -5546.91805479
 Ge -0.376563 -1.448223 0.596034
 S -0.506118 1.349838 2.159863
 P 0.875218 1.344553 0.738830
 C -2.032396 -1.143217 -0.367353
 C 1.117714 -0.293913 0.119775
 N -2.105152 -1.536467 -2.903033
 C -2.077339 -1.381635 -1.743430
 N 3.501897 -1.827500 0.747300
 P 2.537868 -1.055491 -0.426164
 C 3.944176 -0.935451 1.822223
 C 2.973263 -3.071367 1.309690
 C 0.369176 2.376137 -0.681212
 C 2.415648 2.107530 1.367267

P -3.427618 -0.303523 0.210136
 C -3.642950 1.343241 -0.527818
 C -4.955722 -1.191144 -0.242489
 C -3.482380 -0.200583 2.008129
 C 2.231840 -2.323397 -1.676795
 C 3.676143 0.070064 -1.281739
 C -0.275333 1.770637 -1.763362
 C 0.533584 3.762280 -0.670047
 H -0.422993 0.693096 -1.765784
 C -0.721023 2.535381 -2.833790
 H -1.229336 2.045495 -3.662049
 C -0.518854 3.912129 -2.835929
 H -0.857932 4.512099 -3.678740
 C 0.102573 4.524265 -1.751266
 H 0.252117 5.602688 -1.745245
 H 1.011483 4.243886 0.181849
 C 2.673179 2.008049 2.737954
 C 3.373658 2.694469 0.536594
 H 1.901753 1.586339 3.381461
 C 3.887127 2.435940 3.258205
 H 4.078597 2.347709 4.326249
 C 4.854988 2.982090 2.417758
 H 5.808371 3.314063 2.825016
 C 4.589173 3.123242 1.059946
 H 5.329494 3.568429 0.397642
 H 3.177143 2.815434 -0.524800
 H 4.255324 0.029180 1.406147
 H 3.095153 -0.722137 2.495958
 C 5.078274 -1.574008 2.601415
 H 5.389883 -0.892811 3.403417
 H 5.941381 -1.702644 1.931610
 C 4.652403 -2.922521 3.163203
 H 3.883760 -2.760002 3.933668
 H 5.493273 -3.423292 3.659490
 C 4.071284 -3.800907 2.064133
 H 4.860663 -4.080171 1.351539
 H 3.667840 -4.731976 2.481812

H 2.133349 -2.848163 1.994582
 H 2.568851 -3.695981 0.507790
 C 1.095071 -2.205334 -2.473177
 C 3.181749 -3.309102 -1.956559
 H 0.374245 -1.417694 -2.275970
 C 0.877089 -3.091488 -3.519716
 H -0.031958 -2.988609 -4.108363
 C 1.807567 -4.093411 -3.779006
 H 1.638993 -4.795453 -4.593738
 C 2.959647 -4.197252 -3.003604
 H 3.692011 -4.973937 -3.215786
 H 4.086100 -3.377722 -1.353895
 C -3.082668 2.492137 0.041992
 C -4.260055 1.423842 -1.781642
 H -2.522880 2.425079 0.973167
 C -3.203304 3.713583 -0.607000
 H -2.770243 4.602833 -0.153932
 C -3.847080 3.796541 -1.837251
 H -3.931441 4.756069 -2.344347
 C -4.359081 2.648370 -2.431231
 H -4.841551 2.702285 -3.405137
 H -4.660373 0.527600 -2.251921
 C -4.887717 -2.513115 -0.677314
 C -6.198909 -0.573003 -0.081110
 H -3.916635 -2.988850 -0.797624
 C -6.058834 -3.209569 -0.959918
 H -6.002478 -4.238969 -1.307921
 C -7.293931 -2.592660 -0.801682
 H -8.208183 -3.140003 -1.023692
 C -7.364150 -1.273462 -0.359572
 H -8.330758 -0.789899 -0.232813
 H -6.252605 0.460648 0.259533
 C -2.998309 -1.282796 2.747988
 C -4.065272 0.885067 2.663034
 H -2.590493 -2.151875 2.238161
 C -3.046919 -1.246490 4.136007
 H -2.654340 -2.083593 4.709356

C -3.592526 -0.146738 4.788036
H -3.621489 -0.118165 5.875648
C -4.114128 0.911578 4.051182
H -4.556320 1.766662 4.558009
H -4.472223 1.716944 2.093867
C 3.121660 0.891568 -2.266223
C 5.053576 0.078611 -1.065176
H 2.051320 0.858391 -2.458232
C 3.932197 1.758230 -2.987475
H 3.490652 2.402409 -3.745070
C 5.300115 1.803647 -2.732863
H 5.935144 2.490150 -3.289773
C 5.859589 0.955791 -1.781701
H 6.932225 0.973778 -1.598727
H 5.492280 -0.600069 -0.337713

3.3.2.3 Koordinaten der chlorido(ylid)substituierten Germylene

YGeCl

E = -4435.22592543
C -3.244339 0.178646 -1.455131
H -2.874687 -0.111165 -2.435652
C -2.427007 0.921184 -0.619906
O -0.690527 2.853404 -0.993212
C 2.494016 -2.536720 -1.176097
H 2.027631 -3.300609 -0.554164
C -4.511151 -0.187312 -1.009485
H -5.156595 -0.776830 -1.659116
C 1.011583 -0.129061 2.887741
H 0.175224 0.533836 2.673054
C 1.598421 -0.850775 1.843140
C -1.379042 -2.034179 1.038034
H -1.175946 -1.599545 2.015142
C -2.527873 -2.787528 0.839974
H -3.219963 -2.943948 1.664849
Ge 0.759715 2.852789 0.558060
C -1.915724 -3.123845 -1.466906

H -2.129489 -3.539760 -2.449400
 C -0.767156 -2.363177 -1.278253
 H -0.100191 -2.164885 -2.114150
 C 2.133180 -1.191812 -1.031153
 C -2.857115 1.313180 0.644918
 H -2.196841 1.896832 1.286029
 C 2.693021 -1.677115 2.103281
 H 3.176919 -2.218160 1.294303
 C -0.486388 -1.831294 -0.017582
 C -6.322525 -0.228956 0.743617
 H -6.919778 0.645049 1.032226
 H -6.246560 -0.871467 1.630659
 H -6.876669 -0.778694 -0.023778
 C -2.792203 -3.340540 -0.410237
 H -3.692720 -3.932434 -0.562520
 C 0.331635 0.924750 0.039614
 P 0.895347 -0.666856 0.182185
 O -0.615818 0.764903 -2.482576
 S -0.771995 1.329935 -1.142179
 C -4.965425 0.179345 0.255771
 C -4.118792 0.940596 1.073787
 H -4.460579 1.243961 2.062608
 C 1.507724 -0.247261 4.180236
 H 1.050530 0.320992 4.987557
 C 2.591875 -1.079855 4.436810
 H 2.983530 -1.167424 5.448363
 C 3.184386 -1.790581 3.398264
 H 4.041897 -2.430943 3.594104
 C 4.001143 -1.926272 -2.951151
 H 4.732567 -2.213698 -3.704289
 C 3.430908 -2.900173 -2.133255
 H 3.711634 -3.945167 -2.249057
 C 3.629933 -0.594088 -2.816613
 H 4.066248 0.165479 -3.461666
 C 2.690959 -0.220048 -1.860069
 H 2.388198 0.820906 -1.755817
 Cl 2.579587 3.197248 -0.752053

³YGeCl

E = -4435.14078424

C -3.203866 0.373978 -1.511249

H -2.888999 -0.095613 -2.440064

C -2.306957 1.182499 -0.827551

O -0.538691 2.837628 -1.839210

C 2.108911 -2.791229 -0.838439

H 1.521326 -3.410329 -0.161216

C -4.467750 0.163125 -0.976772

H -5.171075 -0.477953 -1.507167

C 0.530806 0.043325 2.854697

H -0.252440 0.729800 2.535857

C 1.200038 -0.733372 1.900110

C -1.767715 -1.682034 1.042598

H -1.579073 -1.165981 1.980378

C -2.945476 -2.399446 0.882398

H -3.669343 -2.433871 1.694012

Ge 1.565731 2.421951 0.494959

C -2.271254 -3.014625 -1.347333

H -2.469466 -3.528481 -2.285720

C -1.094789 -2.290395 -1.198246

H -0.390794 -2.211986 -2.022518

C 1.900242 -1.408184 -0.888860

C -2.665670 1.796906 0.366237

H -1.952829 2.439873 0.880517

C 2.228332 -1.584534 2.301373

H 2.775417 -2.169787 1.567192

C -0.831771 -1.632464 0.006273

C -6.198601 0.467392 0.822679

H -6.440338 1.170443 1.626439

H -6.241556 -0.546429 1.244606

H -6.986714 0.531965 0.063306

C -3.194926 -3.072381 -0.309598

H -4.116503 -3.638398 -0.432095

C 0.435800 1.061198 -0.202753

P 0.668402 -0.614588 0.170401

O -0.487740 0.386458 -2.517862

S -0.665944 1.427846 -1.489071
 C -4.847594 0.744296 0.235096
 C -3.929355 1.568487 0.892852
 H -4.214122 2.042172 1.831455
 C 0.877071 -0.049739 4.194498
 H 0.353452 0.556662 4.930506
 C 1.903776 -0.903263 4.591746
 H 2.182108 -0.967324 5.641778
 C 2.579403 -1.663317 3.645910
 H 3.391921 -2.319480 3.950685
 C 3.783252 -2.586753 -2.555962
 H 4.521989 -3.047691 -3.208955
 C 3.054182 -3.376416 -1.669320
 H 3.218051 -4.451451 -1.631447
 C 3.561738 -1.216192 -2.617445
 H 4.121533 -0.600606 -3.317971
 C 2.616985 -0.621188 -1.788210
 H 2.426573 0.448004 -1.842143
 Cl 3.427597 2.821798 -0.637577

^cYGeCl

E = -4446.10826476
 Ge -0.719514 -2.915066 -0.169368
 O 0.823347 -2.690899 -1.587511
 Cl 0.606697 -3.430741 1.642255
 S 0.854157 -1.154627 -1.549415
 C -0.268125 -0.932315 -0.349055
 C 2.509683 -0.736604 -1.033679
 O 0.674741 -0.463676 -2.832392
 P -1.014439 0.545142 0.064660
 C 3.266481 0.118733 -1.820504
 C 2.991556 -1.218617 0.180724
 C 0.043724 1.984607 -0.387334
 C -1.420419 0.445362 1.849167
 C -2.614203 0.790984 -0.819985
 C 4.521637 0.517398 -1.370032
 C 4.243450 -0.811711 0.610549

C 1.242917 2.157906 0.548152
 C -0.695979 3.314061 -0.554434
 C -0.245783 0.030683 2.737563
 C -2.155758 1.655412 2.419796
 C -2.356018 0.741672 -2.327852
 C -3.646330 -0.259874 -0.407727
 C 5.026499 0.066887 -0.150866
 C 2.192270 3.218123 0.007772
 C 0.253829 4.393095 -1.064203
 C -0.751327 -0.280947 4.139711
 C -2.642013 1.356454 3.834146
 C -3.645625 0.872239 -3.125280
 C -4.926301 -0.140437 -1.226839
 C 6.378386 0.493317 0.335496
 C 1.476602 4.548586 -0.171696
 C -1.502269 0.902206 4.736845
 C -4.648672 -0.197358 -2.721119
 H 2.862382 0.465892 -2.768343
 H 2.383029 -1.897505 0.778402
 H 0.423521 1.679772 -1.377606
 H -2.119802 -0.408496 1.851338
 H -2.993902 1.786425 -0.542630
 H 5.119356 1.194155 -1.979216
 H 4.625353 -1.182928 1.560805
 H 1.762953 1.205291 0.699594
 H 0.876793 2.484469 1.532268
 H -1.120905 3.623078 0.411871
 H -1.534691 3.213792 -1.251300
 H 0.261946 -0.838833 2.305834
 H 0.486741 0.845021 2.795341
 H -1.468038 2.514268 2.445378
 H -3.001112 1.945542 1.781066
 H -1.864478 -0.210751 -2.566530
 H -1.639485 1.517680 -2.626789
 H -3.887082 -0.167609 0.658998
 H -3.210338 -1.261144 -0.552668
 H 2.593903 2.880588 -0.958140

H 3.052306 3.323934 0.681087
H 0.579544 4.121331 -2.079539
H -0.283880 5.345538 -1.154580
H 0.090834 -0.566795 4.781927
H -1.412937 -1.158989 4.093420
H -3.404091 0.563813 3.784488
H -3.139479 2.240111 4.254009
H -3.421463 0.807178 -4.197210
H -4.085750 1.867485 -2.956731
H -5.625986 -0.932402 -0.931253
H -5.417390 0.815071 -0.986006
H 6.322646 0.911046 1.348368
H 7.066391 -0.361052 0.379596
H 6.822817 1.248289 -0.320856
H 1.160898 4.925787 0.813331
H 2.157852 5.301332 -0.588269
H -1.887093 0.652761 5.733913
H -0.800542 1.739281 4.876181
H -5.582236 -0.086314 -3.287180
H -4.241882 -1.187060 -2.976875

$^3(\text{Cy})\text{GeCl}$

E = -4446.02671097
Ge -0.945881 -2.557506 -0.832495
O 0.839759 -1.535280 -3.100384
Cl 0.225611 -4.003171 0.418671
S 0.837036 -0.398131 -2.185134
C -0.204955 -0.785418 -0.837160
C 2.445946 -0.301781 -1.416987
O 0.569907 0.948656 -2.722259
P -0.891189 0.466079 0.171695
C 3.237348 0.813634 -1.644230
C 2.878997 -1.334434 -0.586454
C 0.191627 1.961820 0.265308
C -1.193119 -0.284294 1.815469
C -2.530047 1.050327 -0.441163
C 4.473945 0.907006 -1.013057

C 4.109382 -1.220175 0.039731
 C 1.376249 1.779749 1.218054
 C -0.562085 3.255326 0.591573
 C 0.007029 -1.000441 2.437875
 C -1.878608 0.625157 2.832746
 C -2.400452 1.514837 -1.892895
 C -3.638722 0.010070 -0.293838
 C 4.925512 -0.098149 -0.157961
 C 2.315091 2.975925 1.138375
 C 0.382763 4.452074 0.555098
 C -0.477316 -1.854468 3.601329
 C -2.342161 -0.204590 4.026475
 C -3.725783 2.039173 -2.426149
 C -4.959088 0.535403 -0.846858
 C 6.256853 0.001588 0.523001
 C 1.582972 4.266664 1.470203
 C -1.199940 -1.005056 4.640032
 C -4.824683 0.996272 -2.290240
 H 2.868579 1.600150 -2.299340
 H 2.246814 -2.204466 -0.414724
 H 0.576950 2.042605 -0.761576
 H -1.903616 -1.081253 1.534440
 H -2.786065 1.911179 0.194824
 H 5.097805 1.783643 -1.183008
 H 4.446390 -2.018233 0.700052
 H 1.914488 0.848376 1.004890
 H 0.997107 1.706161 2.247055
 H -1.023762 3.178395 1.587565
 H -1.372414 3.425629 -0.124633
 H 0.516222 -1.616321 1.689240
 H 0.733496 -0.269295 2.810254
 H -1.168582 1.395025 3.171036
 H -2.731451 1.154971 2.387471
 H -2.060580 0.665834 -2.501424
 H -1.610026 2.267953 -1.996008
 H -3.768169 -0.274503 0.757943
 H -3.349686 -0.904728 -0.832752

H 2.730384 3.039416 0.123152
 H 3.166326 2.821871 1.813608
 H 0.734594 4.587575 -0.478391
 H -0.170403 5.362824 0.817853
 H 0.371410 -2.378611 4.057897
 H -1.147983 -2.634856 3.211853
 H -3.128876 -0.895317 3.687096
 H -2.803517 0.446969 4.779610
 H -3.604973 2.340735 -3.473899
 H -4.012372 2.946053 -1.870810
 H -5.727801 -0.242498 -0.757415
 H -5.297292 1.380013 -0.226611
 H 6.170380 -0.195463 1.598450
 H 6.960058 -0.737938 0.117531
 H 6.702772 0.992699 0.391502
 H 1.242725 4.233803 2.516844
 H 2.259343 5.127077 1.390184
 H -1.577801 -1.632847 5.457028
 H -0.478975 -0.307537 5.094102
 H -5.781032 1.391945 -2.655101
 H -4.580249 0.131646 -2.925118

PipY₅GeCl

E = -4838.64081336
 S -1.698604 -1.264720 -2.719507
 P -1.600391 -0.571534 -0.815439
 Ge 0.806876 -1.047663 -2.377302
 C 0.080975 -0.311224 -0.611851
 C -2.595383 0.923050 -0.550968
 C -2.338474 -1.830966 0.276708
 Cl 1.307122 -3.201789 -1.624390
 P 0.981982 0.649125 0.436612
 C -3.132012 1.624288 -1.627842
 C -2.711665 1.437890 0.744467
 C -3.596488 -1.695763 0.864712
 C -1.609227 -3.011146 0.455370
 N 1.162838 0.091043 2.013955

C 0.378016 2.358683 0.580833
 C 2.660820 0.777381 -0.236328
 C -3.787210 2.832365 -1.409655
 C -3.363529 2.644441 0.957515
 C -4.108690 -2.724197 1.651251
 C -2.127431 -4.032278 1.238647
 C 0.304444 -0.956513 2.538571
 C 2.352874 0.336737 2.812680
 C 0.287293 2.997874 1.815956
 C -0.024758 3.027082 -0.579184
 C 3.322579 -0.417005 -0.545398
 C 3.288603 2.000392 -0.476307
 C -3.903219 3.341391 -0.121044
 C -3.374458 -3.888431 1.843180
 C 1.060666 -2.267756 2.652343
 C 3.166561 -0.937067 3.001583
 C -0.194930 4.301246 1.891181
 C -0.504878 4.326479 -0.500898
 C 4.598028 -0.381236 -1.096159
 C 4.568937 2.027558 -1.018715
 C 2.299791 -2.079647 3.518206
 C -0.588501 4.964817 0.734838
 C 5.222485 0.839582 -1.329739
 H -3.025878 1.213986 -2.631206
 H -2.280353 0.895914 1.587590
 H -4.183100 -0.793180 0.709199
 H -0.638303 -3.122785 -0.030186
 H -4.210183 3.377127 -2.251622
 H -3.443739 3.046965 1.965208
 H -5.088597 -2.613427 2.111843
 H -1.555435 -4.948438 1.373282
 H -0.566483 -1.066008 1.888979
 H -0.067731 -0.643653 3.529075
 H 2.043349 0.730376 3.796892
 H 2.957429 1.117664 2.336985
 H 0.581149 2.465731 2.718500
 H 0.017174 2.507440 -1.536039

H 2.834208 -1.376504 -0.370273
H 2.778147 2.932040 -0.241799
H -4.413976 4.287890 0.046296
H -3.777882 -4.690299 2.459011
H 1.338789 -2.589842 1.636664
H 0.404818 -3.043249 3.068551
H 3.604497 -1.217351 2.034730
H 4.002003 -0.740510 3.686393
H -0.267568 4.797552 2.857092
H -0.829414 4.839162 -1.404054
H 5.097712 -1.313850 -1.349134
H 5.056136 2.983014 -1.202708
H 1.983413 -1.855567 4.549296
H 2.884906 -3.006329 3.568033
H -0.971133 5.982004 0.795435
H 6.221556 0.865934 -1.760623

3(*Pi*^PY_S)GeCl

E = -4838.54754223
S -1.723668 -0.991243 -2.934998
P -1.570008 -0.551944 -0.955273
Ge 0.724789 -1.725292 -1.897695
C 0.116939 -0.343493 -0.632439
C -2.651065 0.853174 -0.543481
C -2.294822 -1.908153 0.030049
Cl 2.319069 -3.017233 -0.858967
P 1.055077 0.719596 0.299634
C -3.228342 1.632185 -1.543239
C -2.905229 1.140689 0.800886
C -3.683174 -2.010290 0.146671
C -1.481958 -2.877993 0.619083
N 1.612310 0.039074 1.728570
C 0.150970 2.233721 0.721405
C 2.553009 1.263276 -0.558122
C -4.058691 2.695123 -1.199738
C -3.725668 2.207128 1.138790
C -4.249278 -3.060466 0.859556

C -2.052158 -3.926427 1.332377
 C 0.748817 -0.839342 2.499367
 C 2.894922 0.310552 2.354006
 C 0.039907 2.635062 2.051418
 C -0.411234 3.017851 -0.291175
 C 3.444221 0.293394 -1.035199
 C 2.817565 2.615635 -0.794041
 C -4.306541 2.982484 0.137328
 C -3.434829 -4.017978 1.456042
 C 1.432749 -2.169708 2.763203
 C 3.639482 -0.992476 2.599931
 C -0.632376 3.811516 2.369946
 C -1.069412 4.195940 0.028846
 C 4.569541 0.679650 -1.754779
 C 3.947440 2.991860 -1.510236
 C 2.788645 -1.952373 3.422167
 C -1.181491 4.592110 1.360196
 C 4.821770 2.024761 -1.997153
 H -3.026952 1.389854 -2.585675
 H -2.460613 0.524896 1.582762
 H -4.324979 -1.267301 -0.324075
 H -0.400561 -2.816603 0.511095
 H -4.517460 3.296500 -1.982281
 H -3.915506 2.433677 2.185904
 H -5.331714 -3.132129 0.947131
 H -1.409032 -4.676831 1.788087
 H -0.186916 -0.984238 1.947914
 H 0.490857 -0.351508 3.457589
 H 2.733633 0.835424 3.313677
 H 3.477656 0.982630 1.717267
 H 0.482452 2.023962 2.835739
 H -0.335723 2.690544 -1.327375
 H 3.278444 -0.760915 -0.827877
 H 2.147249 3.382060 -0.414567
 H -4.957342 3.813323 0.403862
 H -3.879451 -4.839783 2.014336
 H 1.572725 -2.682169 1.802120

H 0.785578 -2.799453 3.387961
H 3.867907 -1.446789 1.625641
H 4.593369 -0.785384 3.102235
H -0.721657 4.120194 3.409634
H -1.509863 4.801196 -0.760575
H 5.252040 -0.082788 -2.124666
H 4.145333 4.047349 -1.685900
H 2.643178 -1.532698 4.430450
H 3.308942 -2.909033 3.554689
H -1.704756 5.513435 1.609237
H 5.703952 2.322019 -2.561080

Y_{Ph}GeCl

E = -3846.63300659
P -0.587884 0.232860 -0.036359
C 0.757387 -0.833345 -0.103267
C 2.078833 -0.161947 -0.060770
C 2.659569 0.243475 1.148322
H 2.147365 0.016179 2.081227
C 3.868823 0.928889 1.169759
H 4.297890 1.235630 2.122368
C 4.532883 1.216093 -0.018617
H 5.480080 1.752120 -0.002672
C 3.981237 0.800262 -1.226384
H 4.497330 1.009372 -2.162046
C 2.770395 0.119927 -1.245925
H 2.333402 -0.195938 -2.191292
C -0.914092 0.942470 1.615025
C -1.467854 2.214203 1.780279
H -1.679847 2.834099 0.911274
C -1.744915 2.689470 3.057090
H -2.171891 3.682431 3.183410
C -1.474204 1.899245 4.169973
H -1.688182 2.275782 5.168468
C -0.925973 0.630460 4.008187
H -0.711172 0.012275 4.877492
C -0.644222 0.153372 2.733757

H -0.204150 -0.833919 2.592299
 C -2.114151 -0.619285 -0.514142
 C -3.269087 -0.546874 0.265926
 H -3.266653 0.021736 1.192934
 C -4.421649 -1.212808 -0.136153
 H -5.316470 -1.160978 0.480548
 C -4.428712 -1.946388 -1.316867
 H -5.331388 -2.469417 -1.626714
 C -3.281303 -2.016508 -2.101529
 H -3.282895 -2.593780 -3.023621
 C -2.125688 -1.357683 -1.703444
 H -1.221851 -1.418200 -2.306903
 C -0.403120 1.693660 -1.105033
 C 0.622354 2.600748 -0.809588
 H 1.253155 2.449349 0.065016
 C 0.840706 3.694901 -1.635321
 H 1.644352 4.390462 -1.403054
 C 0.039279 3.897313 -2.755133
 H 0.212925 4.755932 -3.400977
 C -0.985364 3.004332 -3.046783
 H -1.618693 3.163515 -3.917222
 C -1.207753 1.903175 -2.226045
 H -2.013830 1.210908 -2.458911
 Ge 0.456741 -2.712822 -0.022918
 Cl 2.610753 -3.320184 0.084543

³Y_{Ph}GeCl

E = -3846.56536613
 P 0.521185 -0.338704 -0.041654
 C -0.970528 0.552946 0.215589
 C -2.270839 -0.052224 0.123840
 C -2.523388 -1.433483 0.283654
 H -1.699444 -2.103925 0.514882
 C -3.809648 -1.940754 0.201941
 H -3.979686 -3.006558 0.343360
 C -4.883759 -1.090090 -0.052186
 H -5.893026 -1.491476 -0.121641

C -4.660831 0.279130 -0.207665
 H -5.497148 0.947143 -0.404795
 C -3.381630 0.795400 -0.109626
 H -3.193264 1.860624 -0.234347
 C 1.110291 -1.174505 1.457030
 C 2.183165 -2.072659 1.409057
 H 2.666764 -2.296576 0.459243
 C 2.622036 -2.692671 2.571736
 H 3.457068 -3.389085 2.530654
 C 1.991887 -2.425741 3.784118
 H 2.336033 -2.914443 4.693518
 C 0.920998 -1.540203 3.833606
 H 0.424171 -1.333179 4.778854
 C 0.477938 -0.914003 2.674129
 H -0.363078 -0.222624 2.713517
 C 1.770735 0.833001 -0.616693
 C 3.118258 0.714995 -0.267849
 H 3.444355 -0.046956 0.434789
 C 4.046603 1.608745 -0.789892
 H 5.092540 1.524477 -0.501755
 C 3.641636 2.611454 -1.663156
 H 4.371684 3.312779 -2.062335
 C 2.299087 2.723983 -2.018621
 H 1.968645 3.518907 -2.683330
 C 1.365099 1.838977 -1.503415
 H 0.310830 1.962144 -1.743202
 C 0.421207 -1.638054 -1.325336
 C 0.255817 -2.989332 -1.006928
 H 0.251850 -3.311267 0.032492
 C 0.096640 -3.932039 -2.014709
 H -0.026332 -4.981668 -1.755525
 C 0.093060 -3.535801 -3.347768
 H -0.032889 -4.275291 -4.136059
 C 0.251054 -2.192358 -3.671209
 H 0.249365 -1.875971 -4.712146
 C 0.415904 -1.246802 -2.666986
 H 0.547954 -0.199859 -2.930401

Ge -0.631306 2.276821 1.267744
 Cl -1.149244 3.765742 -0.406748

$Y_{PhF}GeCl$

E = -4343.54097114
 P 1.160230 -0.311473 0.088067
 C -0.053593 0.849973 -0.281289
 C -1.450208 0.410549 -0.159416
 C -2.255714 0.784430 0.919316
 C -3.584224 0.397375 1.020914
 C -4.151558 -0.379704 0.018659
 C -3.384377 -0.763280 -1.073995
 C -2.060210 -0.357290 -1.155374
 C 1.527462 -0.505552 1.861452
 C 2.153295 -1.659790 2.344083
 H 2.392441 -2.476101 1.663870
 C 2.463423 -1.765437 3.693380
 H 2.950517 -2.663163 4.068839
 C 2.144639 -0.726243 4.564675
 H 2.382888 -0.814193 5.622993
 C 1.515074 0.417641 4.087410
 H 1.256050 1.224886 4.769249
 C 1.205486 0.531013 2.735877
 H 0.695622 1.413264 2.353609
 C 2.713124 0.152323 -0.718866
 C 3.926100 0.187859 -0.030519
 H 3.960465 -0.052226 1.029585
 C 5.091183 0.546565 -0.699685
 H 6.033742 0.583807 -0.157655
 C 5.050845 0.863646 -2.052593
 H 5.964592 1.146319 -2.571703
 C 3.842901 0.826804 -2.743422
 H 3.808566 1.080218 -3.800809
 C 2.674364 0.476619 -2.080681
 H 1.722171 0.459251 -2.608832
 C 0.714261 -1.991044 -0.439411
 C -0.304652 -2.645985 0.261066

H -0.739011 -2.186283 1.148240
 C -0.766427 -3.879932 -0.177059
 H -1.565387 -4.381251 0.365208
 C -0.207422 -4.471887 -1.305852
 H -0.570960 -5.438604 -1.648456
 C 0.816816 -3.830961 -1.993326
 H 1.259717 -4.296199 -2.871452
 C 1.275840 -2.590257 -1.566214
 H 2.072897 -2.091737 -2.112748
 Ge 0.480288 2.644467 -0.666487
 Cl -1.582049 3.505970 -0.808847
 F -1.359299 -0.732798 -2.218851
 F -3.922327 -1.507470 -2.028742
 F -5.415859 -0.757837 0.107689
 F -4.315963 0.764373 2.061588
 F -1.751076 1.530961 1.893008

³Y_{PhF}GeCl

E = -4343.46281835
 P 0.970423 0.509261 0.173070
 C -0.017041 -0.759326 -0.491087
 C -1.474730 -0.648821 -0.392620
 C -2.281089 -0.195283 -1.438312
 C -3.661128 -0.106415 -1.318641
 C -4.270494 -0.456358 -0.119549
 C -3.496791 -0.903262 0.945103
 C -2.121047 -0.998998 0.796686
 C 1.377458 1.880255 -0.948467
 C 1.830724 3.093290 -0.418296
 H 1.925871 3.216427 0.659862
 C 2.147706 4.144755 -1.268347
 H 2.501881 5.086924 -0.855040
 C 2.004060 3.993756 -2.645036
 H 2.247433 4.820588 -3.309491
 C 1.540496 2.793206 -3.171379
 H 1.416226 2.678118 -4.245937
 C 1.226100 1.734500 -2.326374

H 0.848782 0.799017 -2.734523
 C 2.496607 -0.199330 0.814964
 C 3.730060 0.447066 0.708103
 H 3.810196 1.396409 0.183653
 C 4.863288 -0.144056 1.252579
 H 5.827089 0.352180 1.159638
 C 4.769021 -1.371247 1.901772
 H 5.661694 -1.834073 2.317997
 C 3.538774 -2.013142 2.010990
 H 3.464854 -2.980160 2.503200
 C 2.400141 -1.431293 1.472445
 H 1.438861 -1.939237 1.527519
 C 0.074392 1.307191 1.535641
 C -0.988528 2.157301 1.210770
 H -1.189348 2.403101 0.168338
 C -1.786479 2.684696 2.216318
 H -2.614092 3.343264 1.961234
 C -1.526624 2.368869 3.547533
 H -2.154144 2.780994 4.335238
 C -0.467990 1.528093 3.872096
 H -0.264811 1.282429 4.912231
 C 0.331932 0.991485 2.869293
 H 1.152299 0.323957 3.123726
 Ge 0.913556 -1.913577 -1.765100
 Cl 1.493289 -3.815639 -0.742242
 F -1.404644 -1.424903 1.829961
 F -4.077060 -1.235039 2.086543
 F -5.583069 -0.366577 0.006989
 F -4.397498 0.329421 -2.327837
 F -1.724590 0.180418 -2.584486

$Y_{CN}GeCl$

E = -3707.59188757
 N -0.871975 -3.145324 1.503390
 C -0.994837 -2.075912 1.059833
 C -1.093857 -0.780202 0.518774
 Ge -2.752095 0.143438 0.170111

P 0.397203 -0.054693 0.040608
 Cl -4.105097 -1.431728 0.954922
 C 1.293965 -1.044520 -1.187561
 C 0.039698 1.549388 -0.709606
 C 1.575598 0.257043 1.387292
 C 0.609093 -2.049725 -1.871964
 C 2.639444 -0.794923 -1.471387
 C 0.015374 1.698943 -2.096261
 C -0.316134 2.619478 0.118017
 C 2.465397 1.334533 1.334356
 C 1.606116 -0.619367 2.475831
 H -0.433655 -2.249481 -1.632757
 C 1.269035 -2.796604 -2.841829
 C 3.289552 -1.539605 -2.445838
 H 3.182455 -0.025660 -0.925582
 H 0.287605 0.863836 -2.738702
 C -0.361989 2.916088 -2.652230
 C -0.690701 3.832132 -0.444575
 H -0.299187 2.499571 1.200381
 H 2.437243 2.028456 0.495619
 C 3.381578 1.529815 2.361256
 C 2.526199 -0.416171 3.497282
 H 0.917504 -1.460364 2.525591
 H 0.736748 -3.586418 -3.367474
 C 2.604400 -2.540068 -3.130863
 H 4.336962 -1.344793 -2.666703
 H -0.382852 3.031998 -3.733684
 C -0.714768 3.979287 -1.828480
 H -0.970887 4.663124 0.199016
 H 4.069820 2.371556 2.318183
 C 3.412729 0.654342 3.441788
 H 2.546481 -1.100224 4.342922
 H 3.118642 -3.127923 -3.888751
 H -1.011926 4.929771 -2.267193
 H 4.129181 0.809871 4.246067

$^3Y_{CN}GeCl$

E = -3707.51558275

N 0.780652 1.203784 -3.435689

C 0.203414 0.664060 -2.567071

C -0.466197 0.012672 -1.551631

Ge -2.476599 -0.497824 -1.771327

P 0.405884 -0.073795 0.004177

Cl -2.815087 1.355994 -0.411715

C 1.077886 1.526745 0.488326

C -0.714536 -0.696333 1.241125

C 1.810462 -1.200363 -0.161026

C 0.377940 2.691980 0.164503

C 2.277584 1.594205 1.203601

C -1.022750 0.037529 2.386716

C -1.373712 -1.902657 0.963575

C 1.963071 -2.316320 0.664629

C 2.769780 -0.914865 -1.140950

H -0.561432 2.628875 -0.382981

C 0.886531 3.923039 0.561238

C 2.773427 2.830247 1.596134

H 2.824163 0.684834 1.445996

H -0.532111 0.990901 2.571197

C -1.967272 -0.450676 3.277887

C -2.314674 -2.385975 1.871435

H -1.121867 -2.479547 0.076088

H 1.223463 -2.533792 1.431971

C 3.068465 -3.144958 0.505155

C 3.869791 -1.747421 -1.289425

H 2.656799 -0.046327 -1.787899

H 0.346602 4.832331 0.306551

C 2.079040 3.992874 1.273502

H 3.707461 2.886114 2.151155

H -2.211357 0.117335 4.172527

C -2.610110 -1.661637 3.017370

H -2.824326 -3.325346 1.669526

H 3.185970 -4.013851 1.149315

C 4.019394 -2.862848 -0.469373

H 4.612647 -1.525036 -2.052344
H 2.474048 4.960668 1.576524
H -3.352678 -2.039365 3.717675
H 4.882237 -3.514676 -0.590851

3.3.2.4 Koordinaten der hexamethyldisilazan(ylid)substituierten Germylene

YGeHMDS

E = -4849.01430566
S -0.636572 -1.450046 -0.644015
P -0.762268 1.379030 -0.081978
Si 3.853576 0.328480 0.748062
Si 3.441339 -2.377907 -0.633878
O 0.313882 -2.509585 -0.073542
O -0.686999 -1.327720 -2.105938
N 2.870914 -1.067561 0.389725
C -0.151548 -0.156713 0.271020
C -2.255706 -2.012281 -0.147119
C -2.527159 -2.166398 1.209585
H -1.742649 -1.977631 1.943268
C -3.797870 -2.548127 1.604024
H -4.016422 -2.671009 2.664122
C -4.809190 -2.777902 0.661002
C -4.502449 -2.628496 -0.690339
H -5.275432 -2.806775 -1.436674
C -3.229591 -2.245985 -1.103178
H -2.982218 -2.113349 -2.153584
C -6.189078 -3.157668 1.106439
H -6.163734 -3.992801 1.816876
H -6.818370 -3.449761 0.259647
H -6.682267 -2.318542 1.615620
C -2.510804 1.311932 -0.579895
C -3.507784 1.229222 0.395149
H -3.249901 1.324003 1.448246
C -4.829087 1.024364 0.021520
H -5.602360 0.961840 0.784484
C -5.162046 0.901079 -1.324414

H -6.198919 0.743606 -1.615283
 C -4.169471 0.964112 -2.295659
 H -4.424808 0.850329 -3.347278
 C -2.842889 1.159891 -1.928611
 H -2.062419 1.172492 -2.686209
 C 0.061257 2.219118 -1.463183
 C -0.438193 3.406008 -2.009957
 H -1.325218 3.874845 -1.584686
 C 0.177105 3.969096 -3.119098
 H -0.209846 4.892642 -3.545088
 C 1.279059 3.340102 -3.695324
 H 1.754916 3.776751 -4.571378
 C 1.761956 2.149519 -3.165268
 H 2.611547 1.649224 -3.625918
 C 1.155358 1.582719 -2.048185
 H 1.512309 0.639997 -1.630372
 C -0.642286 2.393849 1.415252
 C -0.814575 1.746391 2.642374
 H -0.997481 0.673075 2.656756
 C -0.720469 2.466393 3.826930
 H -0.848791 1.956804 4.779611
 C -0.447299 3.829921 3.793600
 H -0.364877 4.391556 4.722104
 C -0.266342 4.473854 2.573937
 H -0.038315 5.537369 2.546439
 C -0.362279 3.760223 1.385329
 H -0.191382 4.266439 0.438752
 C 4.660152 1.080902 -0.779172
 H 5.266959 1.947711 -0.483378
 H 3.900745 1.434762 -1.485155
 H 5.315947 0.385090 -1.313296
 C 2.741678 1.670511 1.461888
 H 3.344518 2.513981 1.823086
 H 2.124967 1.329297 2.305994
 H 2.068550 2.054222 0.686297
 C 5.192729 -0.045915 2.015079
 H 5.913109 -0.781072 1.637791

H 4.745796 -0.456660 2.929828
H 5.747761 0.862476 2.285668
C 2.885247 -2.056127 -2.397288
H 3.319616 -1.111346 -2.754699
H 1.792969 -1.961937 -2.436227
H 3.190147 -2.852298 -3.088965
C 2.875675 -4.063776 -0.025171
H 3.411080 -4.842934 -0.584885
H 1.801608 -4.225470 -0.150316
H 3.128426 -4.190820 1.036400
C 5.326592 -2.504392 -0.593545
H 5.663479 -2.838594 0.396318
H 5.862678 -1.580998 -0.837071
H 5.638876 -3.266848 -1.320372
Ge 1.244192 -1.259799 1.387821

³YGeHMDS

E = -4848.94431010
S -0.966115 -1.619245 -0.823660
P -0.705279 1.180582 -0.101376
Si 4.074698 0.341419 0.636715
Si 3.400152 -2.521843 -0.403623
O -0.229720 -2.881577 -0.715732
O -1.153910 -1.018194 -2.159106
N 2.971926 -1.021005 0.447188
C -0.242878 -0.448423 0.213113
C -2.610675 -1.933071 -0.200036
C -2.791496 -2.222675 1.149161
H -1.929848 -2.256043 1.814129
C -4.071943 -2.448109 1.627647
H -4.218570 -2.669057 2.684414
C -5.181883 -2.400225 0.774692
C -4.967123 -2.129020 -0.576016
H -5.818105 -2.090675 -1.254988
C -3.688515 -1.892301 -1.069934
H -3.514100 -1.657287 -2.117179
C -6.564315 -2.618905 1.312056

H -6.614584 -3.522751 1.931242
 H -7.297149 -2.718637 0.504765
 H -6.878591 -1.778178 1.945506
 C -2.481086 1.377234 -0.447806
 C -3.382133 1.372641 0.620266
 H -3.017032 1.325608 1.643952
 C -4.747809 1.429393 0.379339
 H -5.444103 1.424004 1.215337
 C -5.221459 1.494262 -0.927808
 H -6.292337 1.542836 -1.116201
 C -4.327866 1.483862 -1.992965
 H -4.696470 1.517102 -3.016256
 C -2.959380 1.414477 -1.759227
 H -2.261612 1.360684 -2.590738
 C 0.150691 1.918935 -1.520801
 C -0.231468 3.151868 -2.059368
 H -1.061204 3.707070 -1.623241
 C 0.428932 3.656370 -3.172312
 H 0.130890 4.615769 -3.590373
 C 1.458687 2.925996 -3.760090
 H 1.967907 3.317409 -4.638705
 C 1.826204 1.691930 -3.235933
 H 2.616349 1.108508 -3.704672
 C 1.176363 1.185613 -2.116201
 H 1.448699 0.214416 -1.707143
 C -0.365277 2.179939 1.375282
 C -0.549999 1.597356 2.633939
 H -0.877593 0.561816 2.701262
 C -0.305164 2.334597 3.785290
 H -0.446755 1.873673 4.760523
 C 0.134088 3.652070 3.689789
 H 0.337730 4.224504 4.592688
 C 0.316790 4.234322 2.441431
 H 0.667879 5.260948 2.362254
 C 0.065922 3.502490 1.285316
 H 0.242158 3.958965 0.315174
 C 4.894805 0.726222 -1.013876

H 5.617877 1.543037 -0.886461
 H 4.139642 1.059684 -1.735341
 H 5.426625 -0.124688 -1.452243
 C 3.141936 1.889804 1.132564
 H 3.849346 2.725554 1.227812
 H 2.600317 1.789363 2.082045
 H 2.413643 2.158681 0.357843
 C 5.380100 -0.018447 1.936994
 H 6.007848 -0.872762 1.659197
 H 4.902002 -0.250927 2.897358
 H 6.035478 0.849949 2.086020
 C 2.881735 -2.301764 -2.192548
 H 3.345327 -1.401422 -2.618837
 H 1.790675 -2.193945 -2.241867
 H 3.165239 -3.160604 -2.814396
 C 2.577282 -4.004898 0.380562
 H 2.928579 -4.919618 -0.116799
 H 1.488253 -3.956102 0.283634
 H 2.842977 -4.073944 1.443530
 C 5.254221 -2.844289 -0.288407
 H 5.534103 -3.078232 0.746824
 H 5.891839 -2.023664 -0.633672
 H 5.492222 -3.725690 -0.899308
 Ge 1.286107 -0.948079 1.261954

Y_{Ph}GeHMDS

E = -4260.41863914
 P -1.775855 -0.113140 -0.001379
 C -0.113399 0.207922 -0.309305
 C 0.274916 1.572399 -0.700136
 C -0.326861 2.727664 -0.168305
 H -1.123285 2.631268 0.566568
 C 0.097496 3.999502 -0.530451
 H -0.387548 4.869921 -0.091313
 C 1.142954 4.164966 -1.433358
 H 1.482406 5.161127 -1.710066
 C 1.738255 3.035174 -1.988266

H 2.545147 3.144432 -2.711970
 C 1.304809 1.764431 -1.636556
 H 1.756246 0.889022 -2.091811
 C -2.439031 0.645651 1.527795
 C -3.626404 1.375744 1.586501
 H -4.235363 1.507376 0.695541
 C -4.025252 1.957581 2.786151
 H -4.948168 2.532935 2.824167
 C -3.247329 1.811282 3.928910
 H -3.561460 2.270944 4.863995
 C -2.059319 1.087221 3.873220
 H -1.440838 0.979150 4.761881
 C -1.651413 0.516033 2.675526
 H -0.707606 -0.028545 2.617725
 C -2.055812 -1.898195 0.182882
 C -2.565231 -2.473078 1.344888
 H -2.800946 -1.852931 2.206277
 C -2.763115 -3.849750 1.406654
 H -3.152214 -4.296973 2.319031
 C -2.461496 -4.648675 0.311217
 H -2.614552 -5.724859 0.364579
 C -1.966340 -4.073754 -0.857033
 H -1.732067 -4.697406 -1.717184
 C -1.765310 -2.703614 -0.924013
 H -1.371555 -2.248893 -1.831837
 C -2.921080 0.354666 -1.337313
 C -2.497467 1.137863 -2.411575
 H -1.475587 1.504820 -2.447880
 C -3.386381 1.441524 -3.438063
 H -3.051555 2.053954 -4.272696
 C -4.691058 0.963550 -3.401740
 H -5.381620 1.203270 -4.208122
 C -5.111986 0.167128 -2.340021
 H -6.127807 -0.222378 -2.316537
 C -4.229365 -0.141140 -1.313644
 H -4.552107 -0.782011 -0.493380
 Ge 1.058832 -1.200545 0.302058

N 2.784195 -0.368451 0.073604
 Si 3.778675 -1.079621 -1.169691
 Si 3.415948 0.538685 1.425988
 C 2.649753 -2.029546 -2.348668
 H 2.166231 -2.882992 -1.854003
 H 1.855988 -1.388262 -2.756753
 H 3.229582 -2.422330 -3.194576
 C 4.712964 0.189178 -2.201488
 H 5.564853 0.617343 -1.662286
 H 5.103931 -0.295148 -3.106877
 H 4.064798 1.016861 -2.513205
 C 5.029178 -2.291301 -0.453539
 H 5.645212 -2.756850 -1.234325
 H 5.705586 -1.789822 0.251298
 H 4.512323 -3.088650 0.096376
 C 5.089183 1.302934 1.037203
 H 5.454694 1.834102 1.926211
 H 5.846034 0.557651 0.762576
 H 5.008886 2.030031 0.219885
 C 3.621740 -0.612414 2.906117
 H 4.008885 -0.086697 3.789101
 H 2.661284 -1.070095 3.181465
 H 4.312813 -1.430648 2.663588
 C 2.271141 1.936741 1.932165
 H 1.242476 1.594165 2.105443
 H 2.634957 2.397410 2.860720
 H 2.230637 2.710395 1.155301

³Y_{Ph}GeHMDS

E = -4260.34931483
 P 1.796607 0.171820 -0.063323
 C 0.348219 -0.479295 -0.698533
 C -0.050798 -1.876545 -0.614021
 C 0.572676 -2.796948 0.253726
 H 1.367243 -2.456224 0.913914
 C 0.178114 -4.126360 0.311255
 H 0.689639 -4.802557 0.994808

C -0.874491 -4.590452 -0.470715
 H -1.192925 -5.629130 -0.413856
 C -1.518144 -3.694725 -1.322273
 H -2.345090 -4.033913 -1.945147
 C -1.113688 -2.371219 -1.396425
 H -1.619070 -1.688184 -2.077022
 C 1.820783 0.483194 1.730506
 C 2.277653 -0.486514 2.629576
 H 2.842654 -1.343702 2.266456
 C 2.005358 -0.369337 3.986751
 H 2.366460 -1.129545 4.676396
 C 1.264124 0.710424 4.461095
 H 1.043428 0.794395 5.523409
 C 0.807228 1.680295 3.575639
 H 0.223930 2.523831 3.939901
 C 1.083744 1.573390 2.217580
 H 0.710991 2.325990 1.524785
 C 2.116138 1.780464 -0.845786
 C 2.850424 2.770519 -0.186904
 H 3.187713 2.610121 0.835227
 C 3.142979 3.964765 -0.833268
 H 3.708388 4.735478 -0.313179
 C 2.712420 4.176110 -2.139843
 H 2.938656 5.114970 -2.641663
 C 2.000834 3.184077 -2.806579
 H 1.672958 3.341842 -3.832041
 C 1.709757 1.984194 -2.168979
 H 1.166463 1.196252 -2.686895
 C 3.264482 -0.829843 -0.443398
 C 3.198932 -1.783640 -1.460671
 H 2.253248 -1.963979 -1.966651
 C 4.338558 -2.496553 -1.813649
 H 4.282264 -3.245422 -2.600957
 C 5.544636 -2.255255 -1.163738
 H 6.434871 -2.815614 -1.443191
 C 5.615848 -1.294466 -0.159620
 H 6.560221 -1.098282 0.344143

C 4.479449 -0.580209 0.199586
 H 4.536263 0.174949 0.982567
 Ge -1.046094 0.869528 -0.787934
 N -2.726982 0.346774 -0.147606
 Si -4.084624 0.306638 -1.273587
 Si -2.871646 0.242243 1.615118
 C -3.496579 0.575864 -3.036617
 H -3.026795 1.558346 -3.167783
 H -2.773863 -0.182533 -3.361648
 H -4.365447 0.522753 -3.707993
 C -4.949850 -1.359870 -1.210630
 H -5.542390 -1.495029 -0.299892
 H -5.628207 -1.458965 -2.068578
 H -4.212945 -2.171286 -1.260001
 C -5.297543 1.688096 -0.876114
 H -6.149406 1.677529 -1.568921
 H -5.696126 1.615414 0.142865
 H -4.798614 2.661717 -0.968449
 C -4.536812 -0.481394 2.111316
 H -4.619353 -0.423376 3.205209
 H -5.399085 0.045416 1.687152
 H -4.605729 -1.539076 1.830948
 C -2.737854 1.967953 2.347069
 H -2.696754 1.940464 3.444013
 H -1.834373 2.470264 1.980533
 H -3.602471 2.576417 2.050053
 C -1.577831 -0.908487 2.320482
 H -0.557398 -0.623320 2.048837
 H -1.645202 -0.921096 3.416929
 H -1.744166 -1.928263 1.950366

Y_{PhF}GeHMDS

E = -4757.32516396
 P -1.932029 -0.261788 -0.115510
 C -0.279189 0.010663 -0.490930
 C 0.358229 1.311196 -0.369836
 C -0.032050 2.329847 0.506579

C 0.614041 3.552327 0.599202
 C 1.701517 3.817568 -0.222258
 C 2.108965 2.849084 -1.132294
 C 1.435815 1.640680 -1.208264
 C -2.261790 -0.642835 1.643368
 C -2.854758 0.251275 2.533639
 H -3.247122 1.200288 2.177273
 C -2.911849 -0.054227 3.890302
 H -3.366998 0.653146 4.580504
 C -2.378239 -1.246093 4.364739
 H -2.418488 -1.476209 5.427575
 C -1.780345 -2.140585 3.480101
 H -1.350507 -3.070981 3.845575
 C -1.717851 -1.836334 2.128448
 H -1.226131 -2.527370 1.439516
 C -2.525070 -1.723360 -1.026133
 C -3.477110 -2.587251 -0.482751
 H -3.812908 -2.458265 0.543877
 C -3.994045 -3.624721 -1.251447
 H -4.729098 -4.300601 -0.819260
 C -3.570467 -3.799228 -2.563655
 H -3.972937 -4.614756 -3.161420
 C -2.633757 -2.929018 -3.113764
 H -2.302025 -3.060696 -4.141505
 C -2.115986 -1.891145 -2.351942
 H -1.382074 -1.207532 -2.774259
 C -3.084255 1.048638 -0.616065
 C -2.662205 2.039017 -1.503357
 H -1.632853 2.049654 -1.853357
 C -3.562849 3.001242 -1.946944
 H -3.228246 3.776117 -2.633489
 C -4.885229 2.970606 -1.519296
 H -5.587347 3.725485 -1.867786
 C -5.315149 1.968158 -0.654261
 H -6.353419 1.933169 -0.330720
 C -4.419486 1.006680 -0.206194
 H -4.760604 0.216118 0.460904

Ge 0.754584 -1.642074 -0.625197
 N 2.436293 -1.039560 0.052984
 Si 3.818725 -1.452293 -0.955442
 Si 2.614956 -0.850554 1.790747
 C 3.222636 -2.037074 -2.644693
 H 2.670382 -2.983312 -2.581526
 H 2.585309 -1.298780 -3.146236
 H 4.097856 -2.207585 -3.286750
 C 4.946624 0.025831 -1.211808
 H 5.450493 0.330782 -0.288268
 H 5.723349 -0.222192 -1.948000
 H 4.384432 0.885729 -1.592768
 C 4.814694 -2.882906 -0.237094
 H 5.659100 -3.132453 -0.893465
 H 5.221524 -2.668114 0.758119
 H 4.180878 -3.775538 -0.151607
 C 4.306715 -0.162088 2.241196
 H 4.378540 -0.095037 3.335042
 H 5.147229 -0.770590 1.889858
 H 4.428246 0.850915 1.837054
 C 2.383478 -2.530914 2.616174
 H 2.512115 -2.472967 3.705137
 H 1.370889 -2.912312 2.420241
 H 3.093208 -3.270360 2.224857
 C 1.381232 0.314914 2.593705
 H 0.340373 0.129667 2.310149
 H 1.456684 0.182221 3.681868
 H 1.620048 1.361322 2.372665
 F 1.825690 0.783972 -2.148668
 F -1.059284 2.113359 1.333392
 F 0.204719 4.462011 1.470899
 F 2.335605 4.976710 -0.146136
 F 3.124898 3.099649 -1.946462

³Y_{PhF}GeHMDS

E = -4757.25462418

P -1.951735 -0.296532 -0.147018

C -0.388479 0.179429 -0.667237
 C 0.248855 1.464416 -0.511283
 C -0.163511 2.453707 0.398005
 C 0.486914 3.664553 0.566476
 C 1.618348 3.954131 -0.185761
 C 2.067514 3.008728 -1.100407
 C 1.382130 1.817864 -1.269958
 C -2.175784 -0.753100 1.603958
 C -2.681427 0.153912 2.539480
 H -3.106344 1.097839 2.207735
 C -2.615614 -0.132678 3.897298
 H -3.009473 0.581874 4.617066
 C -2.035660 -1.319888 4.335629
 H -1.976238 -1.536026 5.400658
 C -1.536595 -2.231085 3.411455
 H -1.084154 -3.161757 3.748142
 C -1.609858 -1.955534 2.050928
 H -1.212252 -2.666546 1.328518
 C -2.384547 -1.790450 -1.088477
 C -3.264427 -2.746904 -0.571679
 H -3.659393 -2.637562 0.436188
 C -3.629432 -3.843852 -1.341129
 H -4.308854 -4.588205 -0.930742
 C -3.126259 -3.992776 -2.630811
 H -3.409880 -4.856672 -3.228815
 C -2.268892 -3.032840 -3.157082
 H -1.883236 -3.139661 -4.168906
 C -1.903777 -1.927945 -2.396751
 H -1.247482 -1.163235 -2.806715
 C -3.251570 0.903773 -0.551906
 C -2.973976 1.967558 -1.410529
 H -1.967355 2.098448 -1.800623
 C -3.986940 2.849558 -1.769589
 H -3.765705 3.682262 -2.434026
 C -5.277235 2.667176 -1.284381
 H -6.067898 3.359257 -1.567659
 C -5.560062 1.596868 -0.440742

H -6.570787 1.447618 -0.066427
 C -4.551144 0.715210 -0.075602
 H -4.773501 -0.122946 0.583675
 Ge 0.772708 -1.396536 -0.674073
 N 2.459631 -1.082872 0.067884
 Si 3.889125 -1.346031 -0.946837
 Si 2.502670 -1.007605 1.840051
 C 3.397236 -1.773381 -2.704916
 H 2.825034 -2.708656 -2.749263
 H 2.799510 -0.984563 -3.173350
 H 4.311121 -1.910347 -3.300231
 C 4.956639 0.195283 -0.969750
 H 5.362971 0.438561 0.017599
 H 5.804093 0.049702 -1.653031
 H 4.381577 1.056880 -1.328028
 C 4.868289 -2.814237 -0.291884
 H 5.759525 -2.989910 -0.908820
 H 5.201823 -2.684670 0.744048
 H 4.250007 -3.720871 -0.330950
 C 4.176744 -0.389469 2.435875
 H 4.176055 -0.409625 3.534199
 H 5.029287 -0.986290 2.094597
 H 4.339155 0.650115 2.126230
 C 2.191152 -2.721185 2.543073
 H 2.125522 -2.701932 3.638848
 H 1.251291 -3.128284 2.149806
 H 2.999026 -3.408220 2.259410
 C 1.257612 0.226172 2.501966
 H 0.251740 0.111240 2.088404
 H 1.182635 0.119690 3.592815
 H 1.596531 1.247657 2.286531
 F 1.847079 0.977313 -2.192278
 F -1.209986 2.206062 1.191411
 F 0.042141 4.540786 1.455350
 F 2.252856 5.107482 -0.038302
 F 3.139576 3.265569 -1.838078

Y_{CN}GeHMDS

E = -4121.38132354
 N -2.873152 -0.029412 0.012812
 C 0.015701 -0.163818 -0.364607
 Si -3.845364 1.335406 -0.493522
 C -2.675212 2.639221 -1.188939
 C -4.769283 2.083546 0.964908
 C -5.079719 0.859742 -1.822415
 Si -3.455777 -1.681305 0.068739
 C -3.872817 -2.427735 -1.598401
 C -2.128304 -2.752939 0.869133
 C -4.999876 -1.750118 1.148742
 H -3.222383 3.509060 -1.575545
 H -2.074209 2.214781 -2.003752
 H -1.981820 3.007468 -0.417657
 H -5.351607 2.967863 0.673664
 H -4.063618 2.385916 1.750141
 H -5.458322 1.351160 1.404755
 H -5.622079 1.754534 -2.155682
 H -5.822459 0.139137 -1.457784
 H -4.575168 0.419764 -2.690901
 H -5.377053 -2.776786 1.246968
 H -5.808035 -1.142564 0.719204
 H -4.793678 -1.361561 2.154589
 H -4.099037 -3.495450 -1.469071
 H -3.020370 -2.333453 -2.280048
 H -4.747824 -1.958082 -2.060893
 H -2.533108 -3.751077 1.082024
 H -1.771061 -2.334230 1.821765
 H -1.273735 -2.874243 0.192245
 P 1.704669 0.000116 -0.075900
 C -0.359819 -0.889584 -1.503632
 C 2.507301 -1.495621 0.573591
 C 1.962210 1.305668 1.149038
 C 2.679457 0.433295 -1.545640
 C 1.729645 -2.421212 1.269156
 C 3.880191 -1.708163 0.420938

C 2.698512 1.088501 2.312396
 C 1.399479 2.563774 0.902506
 C 2.630671 -0.423268 -2.651984
 C 3.473158 1.581322 -1.590216
 H 0.657738 -2.256450 1.362667
 C 2.324157 -3.552406 1.816630
 C 4.468841 -2.839210 0.972397
 H 4.485393 -0.993002 -0.133968
 H 3.131508 0.110484 2.509941
 C 2.869107 2.123367 3.226784
 C 1.580134 3.593371 1.815263
 H 0.817402 2.727492 -0.003607
 H 2.012799 -1.318518 -2.630843
 C 3.363112 -0.119542 -3.791793
 H 3.524009 2.247245 -0.731852
 C 4.206751 1.874496 -2.734945
 C 3.691591 -3.759971 1.670367
 H 1.713898 -4.276690 2.352068
 H 5.537269 -3.006634 0.851985
 H 3.436668 1.948856 4.138366
 C 2.312841 3.372349 2.978602
 H 1.139385 4.569156 1.622772
 H 3.315073 -0.783726 -4.652075
 C 4.150691 1.027303 -3.835298
 H 4.824174 2.770016 -2.764078
 H 4.154898 -4.648273 2.095577
 H 2.446861 4.179058 3.696668
 H 4.722987 1.260346 -4.731165
 N -0.679052 -1.504731 -2.441055
 Ge -1.286382 0.496064 0.918474

³Y_{CN}GeHMDS

E = -4121.30457062
 N -2.944962 -0.076204 0.039661
 C 0.147187 -0.278670 -0.447770
 Si -3.678180 1.467870 -0.396412
 C -2.350490 2.677496 -0.945914

C -4.588870 2.183014 1.081657
 C -4.882843 1.250431 -1.822212
 Si -3.778776 -1.639643 -0.056016
 C -3.968859 -2.165128 -1.845375
 C -2.790603 -2.969779 0.819197
 C -5.464447 -1.499467 0.769499
 H -2.800079 3.507867 -1.506885
 H -1.618835 2.175063 -1.592618
 H -1.818879 3.098083 -0.083924
 H -5.041829 3.155423 0.847213
 H -3.892328 2.324602 1.918462
 H -5.384972 1.507740 1.419094
 H -5.341494 2.221712 -2.051076
 H -5.693057 0.546646 -1.598707
 H -4.365893 0.900181 -2.723884
 H -5.990330 -2.462932 0.745039
 H -6.108622 -0.759396 0.278470
 H -5.353325 -1.200420 1.819994
 H -4.426920 -3.163007 -1.883896
 H -2.980329 -2.227452 -2.317345
 H -4.596680 -1.485169 -2.430243
 H -3.340315 -3.919370 0.751870
 H -2.624211 -2.741577 1.878802
 H -1.816178 -3.112040 0.334418
 P 1.790245 0.027637 -0.055611
 C -0.101141 -1.346601 -1.314371
 C 2.630884 -1.297186 0.864462
 C 1.884983 1.528209 0.937168
 C 2.790477 0.247261 -1.548381
 C 1.856543 -2.215083 1.575230
 C 4.024639 -1.409364 0.861277
 C 2.738455 1.643711 2.033694
 C 1.071001 2.601958 0.560209
 C 2.978215 -0.858539 -2.385491
 C 3.328430 1.487555 -1.896453
 H 0.769061 -2.133105 1.554188
 C 2.476845 -3.231317 2.293446

C 4.637727 -2.425395 1.583507
 H 4.627350 -0.707980 0.285558
 H 3.358076 0.802457 2.336376
 C 2.784430 2.837111 2.747522
 C 1.127119 3.791867 1.275346
 H 0.403322 2.491938 -0.291337
 H 2.555181 -1.826338 -2.120979
 C 3.694472 -0.714086 -3.566051
 H 3.185853 2.348046 -1.246052
 C 4.050630 1.619870 -3.076993
 C 3.863782 -3.334334 2.300364
 H 1.871766 -3.949417 2.842813
 H 5.722293 -2.514158 1.580661
 H 3.447204 2.927621 3.605454
 C 1.982067 3.907937 2.367695
 H 0.493550 4.626748 0.982818
 H 3.831774 -1.572920 -4.219585
 C 4.231988 0.522370 -3.911852
 H 4.472835 2.586373 -3.344531
 H 4.346261 -4.133635 2.859741
 H 2.020131 4.839241 2.929746
 H 4.795122 0.630460 -4.836796
 N -0.345227 -2.231376 -2.038178
 Ge -1.282694 0.001219 0.893077

3.3.2.5 Koordinaten der perfluorphenyl(ylid)substituierten Germylene

$YGeC_6F_5$

E = -4703.55333624
 C 3.362493 -1.934842 -1.486112
 H 2.911050 -1.848022 -2.471402
 C 2.552119 -1.874234 -0.365112
 O 0.138718 -2.711667 0.248884
 C -0.489126 3.319976 -1.658603
 H 0.285993 3.970814 -1.254856
 C 4.734963 -2.094051 -1.317672
 H 5.379410 -2.137039 -2.194567

C 1.058128 1.736476 2.667513
 H 1.595455 0.792549 2.591147
 C 0.418327 2.257211 1.536998
 C 3.337158 1.576328 0.051418
 H 3.246789 1.622158 1.134246
 C 4.595277 1.571865 -0.534508
 H 5.482878 1.615965 0.093299
 C 3.584623 1.440348 -2.717778
 H 3.678833 1.377863 -3.799978
 C 2.320860 1.440870 -2.137307
 H 1.434052 1.360216 -2.762279
 C -0.588165 1.991896 -1.231621
 C 3.085618 -1.979814 0.916982
 H 2.426805 -1.930193 1.784244
 C -0.338381 3.423997 1.648470
 H -0.889817 3.805617 0.793986
 C 2.192988 1.523732 -0.748515
 C 6.781075 -2.337642 0.133773
 H 7.020763 -3.204653 0.761554
 H 7.206291 -1.455319 0.630470
 H 7.293136 -2.461293 -0.825753
 C 4.720156 1.509945 -1.919726
 H 5.707891 1.506395 -2.376660
 C 0.318082 -0.317869 0.424610
 P 0.549851 1.303599 0.001417
 O 0.547351 -1.513275 -1.984224
 S 0.804947 -1.576768 -0.543818
 C 5.300641 -2.190697 -0.047790
 C 4.452169 -2.137230 1.067057
 H 4.875985 -2.221782 2.066933
 C 0.976618 2.402593 3.883369
 H 1.475750 1.991483 4.758277
 C 0.242356 3.579833 3.983951
 H 0.171881 4.097559 4.938551
 C -0.420398 4.082564 2.869866
 H -1.018072 4.987918 2.952309
 C -2.351855 2.968074 -3.144411

H -3.049968 3.353776 -3.884809
 C -1.375029 3.806233 -2.610179
 H -1.303940 4.840987 -2.939300
 C -2.426502 1.638497 -2.747177
 H -3.177019 0.978191 -3.176872
 C -1.537089 1.144328 -1.798862
 H -1.553041 0.096633 -1.507339
 Ge -0.652136 -1.501682 1.786500
 C -2.486761 -1.344533 0.870205
 C -4.376897 -2.294256 -0.325256
 C -4.244445 0.091096 -0.012275
 C -4.906602 -1.022814 -0.515397
 C -3.061646 -0.100969 0.686360
 C -3.182681 -2.433815 0.374442
 F -2.708357 -3.665327 0.542581
 F -2.434346 0.993622 1.147330
 F -5.020488 -3.348036 -0.804921
 F -6.038791 -0.871257 -1.184468
 F -4.735425 1.305363 -0.222400

³YGeC₆F₅

E = -4703.48190373
 C 3.720587 -1.566008 -1.605013
 H 3.486027 -1.105672 -2.561655
 C 2.687979 -1.873017 -0.732770
 O 0.296750 -2.775417 -1.340523
 C 0.041947 3.429856 -1.236989
 H 0.828416 3.912241 -0.657201
 C 5.031074 -1.834264 -1.225107
 H 5.845551 -1.588724 -1.905402
 C 0.837048 0.953796 2.885770
 H 1.360185 0.014658 2.714539
 C 0.374638 1.700725 1.795321
 C 3.446220 1.263406 0.737794
 H 3.168732 0.993686 1.753202
 C 4.785993 1.448091 0.424399
 H 5.542218 1.316219 1.195416

C 4.186818 1.957945 -1.851933
 H 4.473808 2.221217 -2.867936
 C 2.844519 1.766185 -1.547340
 H 2.089737 1.848683 -2.324700
 C -0.215318 2.065527 -1.075600
 C 2.946583 -2.460410 0.502088
 H 2.122366 -2.705722 1.170407
 C -0.347031 2.872199 2.018924
 H -0.757597 3.431468 1.182891
 C 2.466519 1.431889 -0.244394
 C 6.738858 -2.645332 0.442213
 H 6.853270 -3.636537 0.896628
 H 7.057458 -1.908818 1.192773
 H 7.430286 -2.575607 -0.403797
 C 5.157430 1.802095 -0.869203
 H 6.208015 1.949462 -1.112302
 C 0.312268 -0.602551 0.097014
 P 0.718060 1.082908 0.126626
 O 1.111283 -0.601432 -2.370823
 S 1.005736 -1.505770 -1.209368
 C 5.322984 -2.397982 0.016489
 C 4.258431 -2.712163 0.870542
 H 4.465396 -3.166352 1.838910
 C 0.612406 1.399242 4.181128
 H 0.976214 0.814451 5.023212
 C -0.094384 2.578098 4.398882
 H -0.279187 2.921589 5.414825
 C -0.579142 3.306901 3.319745
 H -1.151726 4.216670 3.486985
 C -1.691677 3.546719 -2.903870
 H -2.274341 4.127572 -3.616262
 C -0.701529 4.169010 -2.148460
 H -0.505194 5.232022 -2.272309
 C -1.929051 2.183924 -2.760898
 H -2.690633 1.694489 -3.364067
 C -1.187037 1.439408 -1.852890
 H -1.342658 0.367857 -1.748261

Ge -0.954828 -1.484679 1.216319
 C -2.807980 -1.218546 0.591089
 C -4.932183 -2.051989 -0.236889
 C -4.520534 0.322167 -0.191900
 C -5.356640 -0.750552 -0.482490
 C -3.277785 0.070634 0.369009
 C -3.670796 -2.269805 0.304510
 F -3.295339 -3.523262 0.513408
 F -2.519867 1.121257 0.685135
 F -5.733903 -3.065004 -0.521058
 F -6.552593 -0.533192 -1.000065
 F -4.925637 1.560998 -0.427630

$Y_{Ph}GeC_6F_5$

E = -4114.96476816
 P -1.833246 0.014934 -0.002859
 C -0.161237 -0.135795 -0.389356
 C 0.670086 1.046183 -0.048668
 C 1.283483 1.184272 1.204566
 H 1.132616 0.407223 1.952393
 C 2.105596 2.270113 1.485062
 H 2.583844 2.345703 2.460268
 C 2.327715 3.248493 0.520872
 H 2.977977 4.093883 0.737231
 C 1.717729 3.132216 -0.724325
 H 1.889139 3.888827 -1.488029
 C 0.897124 2.046295 -1.003701
 H 0.431833 1.947514 -1.982559
 C -2.175746 -0.191232 1.777482
 C -3.281682 0.411652 2.383553
 H -3.939205 1.055296 1.801731
 C -3.539213 0.192603 3.731408
 H -4.399658 0.664742 4.201423
 C -2.695673 -0.624733 4.478534
 H -2.896607 -0.790529 5.535265
 C -1.593560 -1.224329 3.878235
 H -0.929693 -1.859126 4.461384

C -1.331380 -1.008628 2.530021
 H -0.462723 -1.465503 2.055689
 C -2.828522 -1.225351 -0.866671
 C -3.797408 -1.978581 -0.203123
 H -3.952223 -1.849758 0.865633
 C -4.558202 -2.904870 -0.908110
 H -5.307042 -3.496293 -0.385505
 C -4.358247 -3.078983 -2.272734
 H -4.953480 -3.806836 -2.820745
 C -3.393762 -2.328091 -2.938423
 H -3.230696 -2.468018 -4.004893
 C -2.627557 -1.404743 -2.240031
 H -1.861113 -0.825111 -2.751131
 C -2.521213 1.651069 -0.395981
 C -2.059654 2.753958 0.332534
 H -1.347557 2.612846 1.144312
 C -2.505023 4.030088 0.016833
 H -2.137319 4.883322 0.582861
 C -3.413348 4.216072 -1.021487
 H -3.760794 5.217757 -1.267140
 C -3.878741 3.122746 -1.742840
 H -4.593669 3.264672 -2.550743
 C -3.434586 1.841198 -1.433711
 H -3.805940 0.989676 -1.999524
 C 2.429346 -1.237414 -0.588091
 C 4.254421 -0.975263 0.996181
 C 4.380496 0.089982 -1.161833
 C 4.941354 -0.187207 0.080267
 Ge 0.504646 -1.833875 -0.926544
 C 3.138877 -0.448403 -1.473068
 C 3.012305 -1.481577 0.639802
 F 2.329753 -2.171082 1.569220
 F 2.604214 -0.137948 -2.658409
 F 5.034721 0.858243 -2.020543
 F 6.127132 0.309862 0.395154
 F 4.780810 -1.210266 2.190709

$^3Y_{Ph}GeC_6F_5$

E = -4114.89071003

P -1.563640 -0.018080 0.183063

C -0.348741 0.577337 -0.952867

C 0.391680 1.801468 -0.635203

C 1.181381 1.915224 0.524315

H 1.208255 1.098509 1.241342

C 2.018677 3.008996 0.709272

H 2.654058 3.049343 1.592199

C 2.059853 4.034105 -0.227185

H 2.716899 4.888303 -0.077693

C 1.266983 3.948408 -1.370360

H 1.298525 4.740010 -2.116678

C 0.460957 2.841518 -1.582813

H -0.119781 2.751654 -2.498834

C -0.979232 -0.097253 1.892865

C -1.288994 0.925984 2.793035

H -2.011330 1.693001 2.523129

C -0.657466 0.973590 4.029954

H -0.900874 1.772969 4.726694

C 0.290768 0.014318 4.371221

H 0.794828 0.066113 5.334187

C 0.595245 -1.012188 3.480742

H 1.339431 -1.764931 3.731481

C -0.038372 -1.073056 2.247448

H 0.203678 -1.875758 1.558119

C -2.155134 -1.635575 -0.325343

C -2.331901 -2.688715 0.573262

H -2.100989 -2.557390 1.627258

C -2.809029 -3.912441 0.118715

H -2.939813 -4.733828 0.819657

C -3.117400 -4.083430 -1.228290

H -3.488666 -5.043632 -1.581399

C -2.960900 -3.031113 -2.121707

H -3.209848 -3.161336 -3.172433

C -2.477391 -1.804646 -1.678006

H -2.381381 -0.975345 -2.374051

C -3.014818 1.076289 0.194935
 C -2.871849 2.444175 -0.050220
 H -1.895508 2.859206 -0.287480
 C -3.985370 3.274950 0.006629
 H -3.871045 4.339698 -0.185430
 C -5.237843 2.747461 0.301697
 H -6.107430 3.400598 0.341413
 C -5.381984 1.383949 0.540069
 H -6.362150 0.968552 0.764947
 C -4.274705 0.546770 0.487098
 H -4.388617 -0.520906 0.666030
 C 1.986855 -0.766967 -1.346183
 C 2.823061 -1.881410 0.653217
 C 3.999743 0.020026 -0.219220
 C 3.877531 -0.980888 0.735670
 Ge 0.401441 -0.375265 -2.618433
 C 3.058150 0.108575 -1.238802
 C 1.916328 -1.765217 -0.390913
 F 0.884249 -2.623862 -0.390936
 F 3.178052 1.138425 -2.073345
 F 4.985136 0.901395 -0.120364
 F 4.749933 -1.068567 1.728600
 F 2.668603 -2.811456 1.595297

$Y_{PhF}GeC_6F_5$

E = -4611.87076535
 P -2.135118 -0.034456 0.058734
 C -0.475656 -0.388440 -0.259337
 C 0.506855 0.630819 0.142373
 C 1.322570 0.475914 1.266111
 C 2.365065 1.345121 1.553625
 C 2.594470 2.436220 0.723923
 C 1.788532 2.637414 -0.390597
 C 0.761452 1.745014 -0.663138
 C -2.692462 -0.505121 1.725599
 C -3.852636 0.051330 2.274938
 H -4.415191 0.800275 1.718915

C -4.281046 -0.347368 3.533925
 H -5.183451 0.084998 3.961482
 C -3.551372 -1.293590 4.250383
 H -3.885552 -1.599516 5.239950
 C -2.393254 -1.839476 3.709338
 H -1.816549 -2.569516 4.273242
 C -1.960683 -1.447364 2.446576
 H -1.043989 -1.852686 2.022335
 C -3.195996 -0.893483 -1.126902
 C -4.315187 -1.625281 -0.730604
 H -4.567630 -1.711791 0.323676
 C -5.099008 -2.260840 -1.687678
 H -5.964770 -2.841203 -1.375869
 C -4.772386 -2.162799 -3.035288
 H -5.386619 -2.664485 -3.780500
 C -3.656698 -1.431336 -3.433532
 H -3.396192 -1.360165 -4.487345
 C -2.864188 -0.801276 -2.484057
 H -1.978368 -0.242470 -2.782900
 C -2.485631 1.743886 -0.030226
 C -1.985187 2.555681 0.993404
 H -1.480969 2.105965 1.847935
 C -2.129963 3.934403 0.920511
 H -1.733751 4.562322 1.715730
 C -2.780455 4.508883 -0.167547
 H -2.892946 5.589709 -0.224426
 C -3.288891 3.703328 -1.180244
 H -3.802242 4.151103 -2.028524
 C -3.139836 2.322531 -1.117139
 H -3.534874 1.698385 -1.915258
 C 1.980729 -1.717650 -0.809045
 C 4.035763 -1.908758 0.473666
 C 3.924985 -0.375482 -1.384410
 C 4.638264 -0.955311 -0.339607
 Ge -0.019708 -2.089978 -0.992463
 C 2.616665 -0.781850 -1.605448
 C 2.721154 -2.279032 0.214297

F 2.149579 -3.165356 1.034116
 F 1.937818 -0.187186 -2.593222
 F 4.497399 0.549508 -2.140207
 F 5.889566 -0.592974 -0.115982
 F 4.718652 -2.447506 1.471550
 F 0.029663 1.946656 -1.750332
 F 2.006240 3.676646 -1.179619
 F 3.574514 3.279970 0.994266
 F 3.136107 1.145693 2.610439
 F 1.140985 -0.562265 2.076338

³**Y_{PhF}GeC₆F₅**

E = -4611.80588829
 P -0.475539 -1.350057 -0.353411
 C -0.628899 0.019615 0.716534
 C -1.715846 0.979660 0.599881
 C -2.635990 1.191208 1.631708
 C -3.649373 2.134405 1.534403
 C -3.767864 2.903299 0.382779
 C -2.869631 2.720858 -0.662525
 C -1.865004 1.774813 -0.541454
 C -0.867724 -2.920647 0.461888
 C -0.718913 -4.108986 -0.259734
 H -0.324174 -4.086781 -1.275140
 C -1.074461 -5.318689 0.321894
 H -0.949628 -6.244719 -0.235479
 C -1.594732 -5.342909 1.613108
 H -1.874851 -6.291638 2.066664
 C -1.763779 -4.158093 2.321589
 H -2.178357 -4.175746 3.327129
 C -1.400102 -2.943569 1.750520
 H -1.533382 -2.013038 2.299256
 C 1.205341 -1.437367 -1.008662
 C 2.109979 -2.418688 -0.602392
 H 1.797712 -3.199296 0.087102
 C 3.424673 -2.374557 -1.054379
 H 4.132899 -3.129813 -0.721822

C 3.837875 -1.355904 -1.905236
 H 4.871482 -1.315943 -2.242689
 C 2.940862 -0.364229 -2.295438
 H 3.271437 0.450252 -2.936917
 C 1.629579 -0.394197 -1.842092
 H 0.937928 0.402725 -2.108848
 C -1.649032 -1.282952 -1.738125
 C -3.001903 -1.176319 -1.396596
 H -3.299033 -1.164076 -0.348402
 C -3.966067 -1.094519 -2.390912
 H -5.016205 -1.008316 -2.120143
 C -3.587306 -1.124685 -3.730175
 H -4.343147 -1.057539 -4.510052
 C -2.245547 -1.246694 -4.072082
 H -1.949648 -1.279757 -5.118518
 C -1.273150 -1.324904 -3.080491
 H -0.226359 -1.423438 -3.356445
 C 2.216911 0.845206 1.217124
 C 4.524838 0.807685 0.446515
 C 3.080984 2.611776 -0.218223
 C 4.326073 1.993327 -0.247497
 Ge 0.701758 -0.063795 2.169085
 C 2.052290 2.031273 0.511293
 C 3.474180 0.257900 1.168421
 F 3.699998 -0.902936 1.782145
 F 0.876166 2.658127 0.508974
 F 2.892861 3.738586 -0.890464
 F 5.310700 2.518495 -0.960254
 F 5.692266 0.183745 0.361422
 F -1.006351 1.639364 -1.549237
 F -2.973748 3.456213 -1.756483
 F -4.730916 3.802654 0.281311
 F -4.512476 2.294688 2.523688
 F -2.573990 0.447811 2.731664

3.3.2.6 Koordinaten der pyridin(ylid)substituierten Germylene

YGePy

E = -4222.69706449

C 3.230097 -1.386089 -1.386150

H 2.786700 -1.387234 -2.378889

C 2.408036 -1.531536 -0.281642

O 0.254607 -2.932165 0.250903

C -1.598260 2.777809 -1.781426

H -0.938296 3.567650 -1.423258

C 4.599584 -1.230541 -1.192506

H 5.251570 -1.109269 -2.056531

C -0.125690 1.560097 2.739077

H 0.517054 0.681604 2.731968

C -0.702592 1.994784 1.540989

C 2.349340 1.963090 0.221478

H 2.194387 1.946868 1.298711

C 3.603602 2.260131 -0.293344

H 4.426497 2.481329 0.383387

C 2.759518 1.969644 -2.531588

H 2.920625 1.960098 -3.607718

C 1.501573 1.665128 -2.022221

H 0.690508 1.397768 -2.695935

C -1.502511 1.485830 -1.251158

C 2.930009 -1.534895 1.009450

H 2.261558 -1.650283 1.862434

C -1.571440 3.086965 1.550152

H -2.058525 3.410565 0.634626

C 1.288474 1.679335 -0.642010

C 6.622018 -1.021722 0.297089

H 7.039504 -1.799444 0.948188

H 6.824927 -0.056501 0.780452

H 7.169203 -1.041865 -0.650852

C 3.807565 2.271867 -1.670688

H 4.791914 2.505447 -2.071960

C -0.140591 -0.550822 0.473411

P -0.288295 1.072613 0.035014

O 0.404606 -1.624889 -1.942973

S 0.642138 -1.652210 -0.495832
 C 5.150888 -1.218088 0.087321
 C 4.294099 -1.379523 1.184930
 H 4.709273 -1.382203 2.192075
 C -0.397248 2.228802 3.925929
 H 0.050408 1.881226 4.854607
 C -1.251121 3.326655 3.927747
 H -1.468783 3.845897 4.859103
 C -1.840465 3.750296 2.741574
 H -2.523903 4.596925 2.742961
 C -3.334966 2.028061 -3.271174
 H -4.054334 2.241042 -4.059831
 C -2.518565 3.047757 -2.784503
 H -2.594750 4.052535 -3.195538
 C -3.219315 0.739224 -2.765604
 H -3.839855 -0.064789 -3.155304
 C -2.299621 0.462553 -1.758669
 H -2.172962 -0.549655 -1.383372
 Ge -0.975940 -1.962225 1.733528
 C -2.612370 -2.180876 0.584109
 N -3.559862 -1.322724 0.988343
 C -3.965148 -2.897631 -1.265843
 C -4.684202 -1.230048 0.286468
 C -4.938872 -1.995383 -0.847378
 H -4.125915 -3.514024 -2.150006
 H -5.425605 -0.509982 0.641201
 H -5.878240 -1.884732 -1.385581
 C -2.783300 -2.992529 -0.541998
 H -1.978504 -3.656185 -0.852482

³YGePy

E = -4222.63585067
 C 3.809465 -0.057159 -1.356938
 H 3.637176 0.798087 -2.005906
 C 2.766569 -0.936262 -1.114634
 O 0.965924 -1.769959 -2.826300
 C -1.223686 3.256468 0.200912

H -0.780547 3.393937 1.186993
 C 5.039507 -0.276047 -0.744672
 H 5.858253 0.419326 -0.925656
 C -0.691817 -1.013703 2.470830
 H 0.126190 -1.605128 2.063659
 C -1.088840 0.160283 1.820902
 C 2.133198 0.841756 1.851094
 H 1.736794 0.010160 2.428303
 C 3.390022 1.347312 2.154108
 H 3.967407 0.905511 2.963636
 C 3.171739 2.962774 0.381548
 H 3.579247 3.785580 -0.202419
 C 1.916275 2.455651 0.067654
 H 1.358462 2.859186 -0.773034
 C -1.098047 2.032296 -0.461157
 C 2.942158 -2.036556 -0.280630
 H 2.111593 -2.717395 -0.099674
 C -2.169556 0.889460 2.315159
 H -2.517295 1.774481 1.789906
 C 1.382832 1.401570 0.813753
 C 6.557457 -1.583719 0.786632
 H 6.963472 -2.575225 0.549374
 H 6.455398 -1.532558 1.878674
 H 7.296577 -0.835301 0.483078
 C 3.907811 2.413768 1.424476
 H 4.892777 2.809622 1.664835
 C 0.002878 -0.742859 -0.661116
 P -0.205594 0.658372 0.317804
 O 1.252053 0.723643 -2.424055
 S 1.183900 -0.654424 -1.903514
 C 5.239121 -1.359632 0.108726
 C 4.170201 -2.238265 0.327787
 H 4.307980 -3.094609 0.987230
 C -1.350275 -1.427924 3.623577
 H -1.035542 -2.340935 4.124496
 C -2.418732 -0.689184 4.119054
 H -2.939894 -1.020816 5.015123

C -2.830328 0.465277 3.461795
 H -3.677927 1.035345 3.836228
 C -2.439737 4.137755 -1.678966
 H -2.967042 4.961022 -2.157603
 C -1.902106 4.306284 -0.406140
 H -2.003496 5.258333 0.111004
 C -2.291874 2.925932 -2.346862
 H -2.697023 2.801499 -3.348801
 C -1.619896 1.870750 -1.741786
 H -1.482808 0.921325 -2.252762
 Ge -1.180027 -2.242223 -0.651393
 C -3.058483 -1.712974 -0.581618
 N -3.218872 -0.398877 -0.454285
 C -5.423830 -2.066030 -0.505895
 C -4.441681 0.106847 -0.358990
 C -5.584882 -0.683364 -0.378143
 H -6.293460 -2.721403 -0.527714
 H -4.510079 1.194318 -0.267864
 H -6.571081 -0.232333 -0.299218
 C -4.150908 -2.596382 -0.609208
 H -3.991817 -3.667764 -0.712821

Y_{Ph}GePy

E = -3634.10198425
 P -1.186685 -0.020647 -0.029322
 C 0.509679 -0.275283 0.085726
 C 1.350633 0.944103 0.005879
 C 1.462705 1.839444 1.079827
 C 2.301298 2.946828 1.011098
 C 3.054485 3.186370 -0.133561
 C 2.952624 2.310938 -1.210932
 C 2.107368 1.210879 -1.144818
 C -1.954930 0.697628 1.466006
 C -3.039880 1.574161 1.402905
 H -3.438261 1.880106 0.437500
 C -3.607523 2.061203 2.575492
 H -4.448478 2.749969 2.523282

C -3.099851 1.672299 3.810971
 H -3.543549 2.058723 4.726642
 C -2.022051 0.793900 3.877106
 H -1.622694 0.490310 4.842788
 C -1.448714 0.309952 2.707819
 H -0.593351 -0.365398 2.741735
 C -2.069288 -1.571284 -0.337585
 C -3.176270 -1.956000 0.418736
 H -3.522586 -1.329571 1.237691
 C -3.832380 -3.148713 0.131258
 H -4.689999 -3.449169 0.729662
 C -3.391566 -3.954378 -0.912108
 H -3.905808 -4.888039 -1.132085
 C -2.291410 -3.570408 -1.673439
 H -1.941019 -4.201751 -2.487108
 C -1.628787 -2.385055 -1.387733
 H -0.761359 -2.085267 -1.972199
 C -1.658285 1.132955 -1.358979
 C -1.190811 2.452140 -1.300429
 H -0.595761 2.785291 -0.452642
 C -1.485635 3.340988 -2.325692
 H -1.112339 4.361693 -2.274215
 C -2.250973 2.928700 -3.412466
 H -2.479854 3.627867 -4.214537
 C -2.725897 1.623821 -3.469897
 H -3.331333 1.298256 -4.313500
 C -2.431537 0.726745 -2.448258
 H -2.811561 -0.290681 -2.501105
 C 3.125132 -1.405830 0.363606
 C 5.114855 -0.243453 1.053482
 C 4.919040 -1.312307 -1.071126
 C 5.676662 -0.562316 -0.179158
 Ge 1.207701 -2.025278 0.417729
 N 3.683450 -1.728777 -0.810191
 H 5.673874 0.342610 1.782125
 H 6.682046 -0.241502 -0.444152
 H 5.332098 -1.589219 -2.044319

H 0.893307 1.648616 1.988009
H 2.375132 3.620611 1.863569
H 3.719040 4.046859 -0.184766
H 3.540658 2.483528 -2.110971
H 2.041539 0.516391 -1.979861
C 3.825368 -0.673709 1.328063
H 3.345562 -0.416089 2.271558

³Y_{Ph}GePy

E = -3634.04599361
P -0.978723 -0.388302 0.059771
C 0.222944 0.734562 -0.460859
C 0.045777 2.184607 -0.475368
C 1.150786 2.992411 -0.138944
C 1.057556 4.376113 -0.148016
C -0.138724 5.000837 -0.493039
C -1.240356 4.221911 -0.836521
C -1.149249 2.837322 -0.834007
C -0.403697 -1.422394 1.438766
C -1.291323 -2.298497 2.072852
H -2.320177 -2.383187 1.723521
C -0.863192 -3.051308 3.158132
H -1.552586 -3.735193 3.649404
C 0.443940 -2.920433 3.621982
H 0.777335 -3.509373 4.474599
C 1.315486 -2.027976 3.008525
H 2.331650 -1.909306 3.379476
C 0.895887 -1.271464 1.918231
H 1.568585 -0.547427 1.458684
C -1.547156 -1.492117 -1.269132
C -1.563485 -2.883129 -1.171016
H -1.213414 -3.373389 -0.266424
C -2.001129 -3.648527 -2.247193
H -2.000440 -4.733948 -2.170074
C -2.427290 -3.032783 -3.418129
H -2.767040 -3.635808 -4.257932
C -2.404926 -1.644058 -3.522140

H -2.722590 -1.158807 -4.442724
 C -1.958283 -0.876100 -2.456688
 H -1.902578 0.208523 -2.547910
 C -2.470054 0.393602 0.749218
 C -2.285582 1.294618 1.803167
 H -1.281279 1.495116 2.174530
 C -3.378022 1.941887 2.360781
 H -3.229701 2.647780 3.175282
 C -4.659577 1.692152 1.875166
 H -5.515514 2.202083 2.313130
 C -4.846222 0.791964 0.833286
 H -5.847180 0.592576 0.455743
 C -3.753466 0.141499 0.266485
 H -3.903439 -0.559811 -0.551529
 C 3.381082 -0.118564 -0.492052
 C 5.724012 -0.682280 -0.453940
 C 4.648924 0.467905 1.337244
 C 5.807481 -0.082821 0.803239
 Ge 1.656846 -0.111930 -1.469036
 N 3.473637 0.452124 0.716373
 H 6.604391 -1.129091 -0.914328
 H 6.744132 -0.042616 1.354476
 H 4.670085 0.947488 2.318837
 H 2.073981 2.495001 0.155188
 H 1.925922 4.974559 0.123010
 H -0.210959 6.086847 -0.499800
 H -2.177508 4.697690 -1.121123
 H -2.015473 2.247245 -1.127868
 C 4.505289 -0.699052 -1.107750
 H 4.405521 -1.154832 -2.091856

Y_{PhF}GePy

E = -4131.01086860
 P -1.631522 0.052139 0.057453
 C -0.050274 -0.607538 -0.092446
 C 1.086559 0.313312 0.041402
 C 1.931982 0.293316 1.152522

C 3.113313 1.019182 1.199680
 C 3.457755 1.835278 0.129512
 C 2.628581 1.899915 -0.983621
 C 1.466869 1.144251 -1.015640
 C -2.319554 0.000222 1.744936
 C -3.427436 0.781984 2.089436
 H -3.877538 1.444508 1.350776
 C -3.945505 0.719838 3.375921
 H -4.808107 1.326975 3.643388
 C -3.354697 -0.112375 4.324519
 H -3.758309 -0.154882 5.334428
 C -2.245142 -0.878538 3.987244
 H -1.775759 -1.518193 4.731806
 C -1.724887 -0.823728 2.697839
 H -0.842527 -1.399922 2.424359
 C -2.797628 -0.810094 -1.025342
 C -4.045364 -1.254623 -0.590055
 H -4.345967 -1.115868 0.445703
 C -4.899890 -1.895685 -1.481013
 H -5.868215 -2.252776 -1.136614
 C -4.514718 -2.087444 -2.802641
 H -5.185194 -2.591721 -3.495930
 C -3.269135 -1.644010 -3.239575
 H -2.963151 -1.800979 -4.271724
 C -2.406858 -1.012288 -2.354324
 H -1.421593 -0.678931 -2.678223
 C -1.684550 1.822052 -0.349613
 C -1.068071 2.708230 0.539905
 H -0.645336 2.335908 1.472344
 C -0.992869 4.060406 0.234613
 H -0.506793 4.744682 0.926905
 C -1.537908 4.536297 -0.954403
 H -1.478338 5.596266 -1.193446
 C -2.159371 3.658989 -1.835788
 H -2.588925 4.030320 -2.763874
 C -2.230655 2.302490 -1.539038
 H -2.711512 1.620126 -2.236064

C 2.185157 -2.368462 -0.346501
 C 4.331238 -2.591584 0.717926
 C 4.051051 -1.546936 -1.408816
 C 4.892251 -1.929508 -0.367804
 F 0.720657 1.193344 -2.113241
 F 2.964382 2.670243 -2.008456
 F 4.574933 2.544608 0.168149
 F 3.906187 0.950574 2.259070
 F 1.635123 -0.479861 2.193982
 Ge 0.168929 -2.475662 -0.435262
 N 2.739118 -1.753545 -1.401008
 H 4.953272 -2.914071 1.551982
 H 5.957725 -1.714539 -0.412708
 H 4.459388 -1.039250 -2.286220
 C 2.962561 -2.828684 0.719854
 H 2.491796 -3.339545 1.559088

³Y_{PhF}GePy

E = -4130.94998112
 P 0.039907 -1.310290 0.210482
 C 0.155529 0.234378 -0.529132
 C -1.018597 1.112169 -0.427569
 C -1.210895 1.957646 0.668063
 C -2.339282 2.756803 0.795003
 C -3.324326 2.713265 -0.183914
 C -3.175255 1.872105 -1.280314
 C -2.040463 1.080914 -1.380280
 C 0.896192 -1.469141 1.803204
 C 0.639566 -2.553446 2.650001
 H -0.078888 -3.318916 2.357036
 C 1.291714 -2.644421 3.871892
 H 1.092670 -3.485858 4.532738
 C 2.193775 -1.652460 4.252321
 H 2.702651 -1.723695 5.211997
 C 2.433446 -0.568149 3.416773
 H 3.127119 0.213814 3.719651
 C 1.782721 -0.464922 2.189996

H 1.948536 0.403809 1.549080
 C 0.655719 -2.622581 -0.882257
 C 1.453048 -3.674038 -0.429673
 H 1.763570 -3.718536 0.611174
 C 1.873165 -4.657061 -1.319595
 H 2.504200 -5.469557 -0.965202
 C 1.496977 -4.597552 -2.656488
 H 1.829494 -5.368131 -3.349417
 C 0.704857 -3.547109 -3.112122
 H 0.418157 -3.491872 -4.160214
 C 0.291073 -2.556362 -2.232526
 H -0.307400 -1.716540 -2.583192
 C -1.702543 -1.643656 0.597166
 C -2.247066 -1.031683 1.731074
 H -1.596290 -0.497910 2.423208
 C -3.616009 -1.086010 1.959865
 H -4.036596 -0.601990 2.838913
 C -4.445547 -1.751578 1.062032
 H -5.518358 -1.790965 1.240246
 C -3.905378 -2.366110 -0.062702
 H -4.553208 -2.888484 -0.763536
 C -2.536733 -2.309784 -0.300777
 H -2.120998 -2.780156 -1.188919
 C 3.012722 1.845920 -0.850860
 C 4.991617 3.192331 -1.068543
 C 3.811826 2.955586 0.991601
 C 4.872015 3.510205 0.283962
 F -1.950828 0.248750 -2.413403
 F -4.125294 1.817048 -2.201408
 F -4.403950 3.469010 -0.071478
 F -2.497399 3.540568 1.851310
 F -0.324023 1.968756 1.653935
 Ge 1.627661 0.690624 -1.657683
 N 2.911918 2.145774 0.444967
 H 5.807910 3.599822 -1.663519
 H 5.582214 4.168755 0.778562
 H 3.683623 3.175276 2.054184

C 4.054045 2.354158 -1.645949

H 4.110390 2.091380 -2.701060

3.3.2.7 Koordinaten der pyrimidin(ylid)substituierten Germylene

YGePyr

E = -4238.75291907

C 3.506688 -0.704396 -1.522915

H 3.125818 -0.396151 -2.493446

C 2.639200 -1.286344 -0.613778

O 0.539805 -2.878553 -0.749845

C -1.800725 2.890511 -1.197973

H -1.324808 3.617369 -0.540048

C 4.837649 -0.516619 -1.161604

H 5.523922 -0.054532 -1.870058

C -0.472325 0.654776 2.944835

H 0.328392 -0.064584 2.782345

C -1.035905 1.312305 1.847018

C 2.130906 1.938534 0.902294

H 1.909002 1.574092 1.903456

C 3.380058 2.473999 0.623277

H 4.129934 2.533493 1.409532

C 2.720198 2.831860 -1.666149

H 2.952586 3.168764 -2.674413

C 1.467691 2.290308 -1.394483

H 0.736276 2.183657 -2.192154

C -1.524872 1.525897 -1.054842

C 3.079534 -1.691817 0.643591

H 2.377058 -2.144518 1.343320

C -2.106363 2.185409 2.041544

H -2.582980 2.669747 1.193970

C 1.162810 1.857400 -0.102762

C 6.731814 -0.669789 0.494177

H 7.184462 -1.582322 0.900773

H 6.801731 0.098459 1.276187

H 7.338635 -0.337816 -0.354393

C 3.673354 2.928587 -0.660119

H 4.654366 3.346846 -0.877364
 C -0.003501 -0.728433 0.206931
 P -0.366458 0.919479 0.208351
 O 0.764167 -0.900043 -2.369293
 S 0.905843 -1.417391 -1.004099
 C 5.305745 -0.899801 0.093657
 C 4.405697 -1.496495 0.987729
 H 4.756812 -1.811647 1.969646
 C -0.958345 0.891881 4.224161
 H -0.518127 0.372072 5.072530
 C -2.015629 1.774803 4.415834
 H -2.401354 1.953893 5.417601
 C -2.590698 2.415619 3.323973
 H -3.429983 3.093060 3.468159
 C -3.242899 2.397987 -3.062189
 H -3.917620 2.738622 -3.845462
 C -2.664397 3.322942 -2.195195
 H -2.880330 4.384029 -2.303796
 C -2.944821 1.046283 -2.940608
 H -3.378029 0.323696 -3.629023
 C -2.080905 0.607173 -1.942480
 H -1.813444 -0.444171 -1.864670
 Ge -0.744752 -2.485200 0.952014
 C -2.529245 -2.158594 0.044612
 N -3.058111 -2.776449 -1.012806
 N -3.127577 -1.160772 0.718188
 C -4.243844 -2.345198 -1.433720
 C -4.313475 -0.747357 0.300005
 C -4.933227 -1.313462 -0.808910
 H -4.666358 -2.846757 -2.308503
 H -4.782394 0.068319 0.857024
 H -5.901105 -0.969631 -1.165407

³YGePyr

E = -4238.69569306
 C 3.803092 -0.123450 -1.363362
 H 3.653702 0.734162 -2.014876

C 2.737937 -0.975451 -1.120279
 O 0.908163 -1.760531 -2.826725
 C -1.132285 3.322933 0.188959
 H -0.672715 3.459655 1.167630
 C 5.026692 -0.373012 -0.750320
 H 5.863568 0.299914 -0.933198
 C -0.709489 -0.953128 2.476836
 H 0.105488 -1.556645 2.081433
 C -1.085784 0.222668 1.817028
 C 2.159527 0.822234 1.852273
 H 1.741042 0.002691 2.430916
 C 3.430506 1.291963 2.153365
 H 3.995994 0.834670 2.962659
 C 3.255682 2.912368 0.380202
 H 3.685757 3.722990 -0.204572
 C 1.986046 2.440791 0.067684
 H 1.438763 2.858979 -0.772862
 C -1.045742 2.088933 -0.461927
 C 2.884988 -2.079538 -0.285825
 H 2.038302 -2.740684 -0.106398
 C -2.165060 0.965274 2.294400
 H -2.494983 1.853288 1.762541
 C 1.424404 1.402567 0.815291
 C 6.505844 -1.708018 0.794582
 H 6.833733 -2.746897 0.667162
 H 6.422934 -1.528133 1.875083
 H 7.293438 -1.053268 0.407758
 C 3.977257 2.342837 1.422358
 H 4.973400 2.710695 1.661029
 C -0.017379 -0.706011 -0.659642
 P -0.181750 0.700694 0.319799
 O 1.263155 0.725281 -2.425196
 S 1.162437 -0.651167 -1.906281
 C 5.197602 -1.459505 0.105857
 C 4.107188 -2.311430 0.323910
 H 4.223275 -3.171336 0.982806
 C -1.385233 -1.355763 3.622766

H -1.086842 -2.270310 4.130617
 C -2.452170 -0.603577 4.102051
 H -2.987685 -0.926013 4.992939
 C -2.843951 0.551833 3.435077
 H -3.689690 1.132367 3.797566
 C -2.355071 4.211687 -1.683021
 H -2.868317 5.042668 -2.163605
 C -1.793825 4.381623 -0.420171
 H -1.864104 5.341912 0.086752
 C -2.249200 2.989010 -2.338213
 H -2.673110 2.863251 -3.332207
 C -1.593910 1.924181 -1.730955
 H -1.488867 0.965710 -2.232353
 Ge -1.217174 -2.191389 -0.628735
 C -3.096278 -1.700788 -0.570467
 N -4.035401 -2.656529 -0.550725
 N -3.327574 -0.384525 -0.502853
 C -5.289613 -2.248717 -0.465932
 C -4.588731 0.008747 -0.419030
 C -5.642048 -0.899548 -0.396856
 H -6.058306 -3.025485 -0.451948
 H -4.765444 1.086595 -0.370483
 H -6.678186 -0.578971 -0.330749

Y_{Ph}GePyr

E = -3650.16359034
 P -1.170117 -0.017954 -0.011662
 C 0.497093 -0.305435 -0.310186
 C 1.361785 0.899739 -0.246019
 C 1.990327 1.295358 0.943477
 C 2.829294 2.403996 0.979053
 C 3.053725 3.151463 -0.172721
 C 2.434567 2.775497 -1.361156
 C 1.601495 1.664847 -1.395890
 C -1.575584 0.222675 1.754815
 C -2.662272 1.000307 2.164476
 H -3.275059 1.513376 1.425320

C -2.958026 1.122689 3.516914
 H -3.803201 1.731071 3.833053
 C -2.172248 0.472367 4.464220
 H -2.402932 0.573921 5.523080
 C -1.090267 -0.302332 4.059344
 H -0.472819 -0.809060 4.798258
 C -0.790234 -0.426542 2.707490
 H 0.059925 -1.023971 2.377811
 C -2.208705 -1.386257 -0.584490
 C -3.240791 -1.902425 0.199473
 H -3.418982 -1.507095 1.196851
 C -4.035648 -2.933161 -0.290327
 H -4.833948 -3.338275 0.328093
 C -3.806807 -3.447800 -1.561191
 H -4.428578 -4.256673 -1.940240
 C -2.779562 -2.933830 -2.347215
 H -2.593634 -3.340096 -3.339195
 C -1.979621 -1.908064 -1.862337
 H -1.164271 -1.511684 -2.464152
 C -1.789187 1.503021 -0.796641
 C -1.305169 2.731036 -0.330254
 H -0.618677 2.760797 0.514742
 C -1.692584 3.911540 -0.949174
 H -1.306431 4.861410 -0.585349
 C -2.565720 3.878271 -2.032738
 H -2.868226 4.805141 -2.516459
 C -3.052974 2.661399 -2.495641
 H -3.740342 2.632498 -3.338761
 C -2.666155 1.474461 -1.881593
 H -3.053573 0.525821 -2.246770
 C 3.058647 -1.506488 -0.253229
 C 4.808317 -1.151047 1.163296
 C 4.917431 -0.505820 -1.101726
 C 5.533631 -0.548247 0.143972
 Ge 1.138465 -2.099446 -0.416352
 N 3.697245 -0.983249 -1.305708
 N 3.584854 -1.629512 0.972017

H 5.227660 -1.247160 2.168311
H 6.529276 -0.142930 0.307280
H 5.427919 -0.067088 -1.963010
H 1.834523 0.700234 1.841532
H 3.314037 2.682571 1.913585
H 3.711502 4.018395 -0.145510
H 2.607282 3.348428 -2.270933
H 1.126154 1.363982 -2.327532

³Y_{Ph}GePyr

E = -3650.10506049
P -0.974307 -0.399161 0.056900
C 0.167716 0.645525 -0.689797
C -0.024500 2.103222 -0.726837
C 0.976419 2.940812 -0.201828
C 0.842943 4.322450 -0.231047
C -0.290540 4.908503 -0.787515
C -1.285911 4.096919 -1.324883
C -1.153120 2.715312 -1.300293
C -0.600927 -0.741529 1.808659
C -1.572671 -1.273916 2.663179
H -2.575593 -1.479016 2.290246
C -1.259450 -1.531790 3.991230
H -2.015070 -1.945933 4.656069
C 0.018299 -1.252178 4.471379
H 0.260464 -1.450974 5.513895
C 0.978274 -0.711411 3.624163
H 1.974131 -0.482771 3.998988
C 0.673900 -0.451335 2.290926
H 1.422493 -0.009217 1.632314
C -1.063225 -2.001991 -0.789171
C -1.074286 -3.211239 -0.093980
H -0.980931 -3.220866 0.989074
C -1.180679 -4.410907 -0.790261
H -1.174375 -5.352020 -0.244220
C -1.286080 -4.408595 -2.175930
H -1.366626 -5.349375 -2.717114

C -1.278965 -3.203279 -2.873366
 H -1.350603 -3.198331 -3.958957
 C -1.161524 -2.003700 -2.185803
 H -1.125646 -1.059451 -2.726559
 C -2.672560 0.252488 0.139367
 C -2.917567 1.322968 1.005864
 H -2.119252 1.696607 1.645811
 C -4.171251 1.916818 1.040855
 H -4.353547 2.753977 1.711454
 C -5.189475 1.444967 0.216636
 H -6.172467 1.911201 0.245402
 C -4.952118 0.376193 -0.640120
 H -5.748616 0.000812 -1.279512
 C -3.695656 -0.220123 -0.682561
 H -3.515900 -1.056872 -1.354051
 C 3.379703 -0.073325 -0.490921
 C 5.602232 -0.575690 -0.443804
 C 4.587568 0.612064 1.322217
 C 5.744644 0.054847 0.792557
 Ge 1.711724 -0.163773 -1.530246
 N 3.419832 0.553045 0.697914
 N 4.447581 -0.641953 -1.080025
 H 6.461224 -1.042914 -0.932979
 H 6.699637 0.107584 1.308475
 H 4.602884 1.126111 2.286923
 H 1.855887 2.473835 0.239765
 H 1.630502 4.947927 0.186378
 H -0.394319 5.991844 -0.810871
 H -2.168974 4.544450 -1.778341
 H -1.924912 2.091397 -1.746514

Y_{PhF}GePyr

E = -4147.07200084
 P -1.617050 0.080707 0.064995
 C -0.060677 -0.605892 -0.185981
 C 1.096487 0.286981 -0.024895
 C 1.919950 0.252858 1.103034

C 3.102379 0.976332 1.178521
 C 3.472899 1.796166 0.120102
 C 2.664189 1.875968 -1.007332
 C 1.496128 1.131076 -1.064294
 C -2.244618 -0.050295 1.770375
 C -3.294931 0.759969 2.214717
 H -3.735795 1.497398 1.544705
 C -3.767332 0.629520 3.513761
 H -4.584413 1.259614 3.859626
 C -3.189195 -0.301473 4.374350
 H -3.557026 -0.397679 5.394202
 C -2.138041 -1.098681 3.937079
 H -1.678428 -1.817338 4.612348
 C -1.662425 -0.974709 2.635460
 H -0.825790 -1.577949 2.287017
 C -2.845262 -0.689508 -1.018715
 C -4.094534 -1.108435 -0.562450
 H -4.357526 -1.003847 0.487551
 C -4.998768 -1.680088 -1.451456
 H -5.968344 -2.017580 -1.091201
 C -4.661599 -1.828425 -2.791836
 H -5.370886 -2.279116 -3.483400
 C -3.415099 -1.410121 -3.249840
 H -3.147010 -1.533175 -4.297027
 C -2.503785 -0.847363 -2.367075
 H -1.517677 -0.534488 -2.708179
 C -1.617422 1.869497 -0.250713
 C -0.968962 2.690408 0.678171
 H -0.563940 2.260031 1.593396
 C -0.839694 4.050818 0.433612
 H -0.329234 4.683958 1.156331
 C -1.361722 4.600049 -0.733946
 H -1.259907 5.666411 -0.925609
 C -2.013940 3.787884 -1.654759
 H -2.425230 4.216679 -2.566189
 C -2.139413 2.423297 -1.418863
 H -2.643942 1.791741 -2.146401

C 2.115195 -2.390920 -0.507877
 C 3.948963 -2.759032 0.792415
 C 4.124967 -1.654187 -1.284924
 C 4.756293 -2.107650 -0.131618
 F 0.756920 1.210600 -2.164338
 F 3.020846 2.656764 -2.016739
 F 4.593867 2.497731 0.184500
 F 3.874234 0.897757 2.252841
 F 1.594726 -0.513991 2.136798
 Ge 0.101742 -2.459411 -0.627293
 N 2.818691 -1.787509 -1.474360
 N 2.643464 -2.913690 0.603697
 H 4.369055 -3.168923 1.714075
 H 5.822683 -1.972001 0.030929
 H 4.692841 -1.158820 -2.076777

³Y_{PhF}GePyr

E = -4147.00963070
 P 0.039286 -1.271449 0.238527
 C 0.178078 0.266213 -0.519362
 C -1.017378 1.120628 -0.460497
 C -1.192837 2.070792 0.548884
 C -2.361288 2.812458 0.667767
 C -3.399345 2.609780 -0.232997
 C -3.262603 1.670862 -1.248836
 C -2.085192 0.945219 -1.346004
 C 0.845110 -1.389571 1.861784
 C 0.546181 -2.444054 2.732033
 H -0.173876 -3.207887 2.438860
 C 1.158125 -2.507312 3.976310
 H 0.925641 -3.325560 4.655080
 C 2.062433 -1.517181 4.355851
 H 2.539372 -1.566170 5.333132
 C 2.345287 -0.462880 3.495760
 H 3.041540 0.317305 3.797274
 C 1.735455 -0.387799 2.246194
 H 1.939639 0.455682 1.583852

C 0.693495 -2.607694 -0.799071
 C 1.480302 -3.640905 -0.289401
 H 1.754771 -3.653745 0.762405
 C 1.935389 -4.646536 -1.135566
 H 2.557849 -5.444858 -0.736682
 C 1.605159 -4.626911 -2.485743
 H 1.965608 -5.414434 -3.144791
 C 0.823973 -3.594858 -2.998190
 H 0.573974 -3.570873 -4.056745
 C 0.374414 -2.581932 -2.162166
 H -0.216787 -1.757255 -2.557818
 C -1.714590 -1.592702 0.582474
 C -2.294806 -0.924371 1.666543
 H -1.663757 -0.378169 2.367056
 C -3.673230 -0.936203 1.833632
 H -4.121153 -0.405870 2.671496
 C -4.477511 -1.619575 0.925633
 H -5.558224 -1.623448 1.052969
 C -3.901915 -2.299445 -0.142301
 H -4.529962 -2.838111 -0.848674
 C -2.522870 -2.284237 -0.319377
 H -2.079278 -2.798487 -1.168848
 C 3.087941 1.797078 -0.865352
 C 5.004811 2.968021 -1.215898
 C 3.994736 2.888321 0.914543
 C 5.029346 3.367040 0.119128
 F -2.000368 0.025004 -2.302029
 F -4.257631 1.470074 -2.098791
 F -4.515807 3.309852 -0.124980
 F -2.504596 3.694151 1.645861
 F -0.253040 2.241074 1.466694
 Ge 1.659724 0.697828 -1.653455
 N 3.035485 2.109454 0.435909
 N 4.051365 2.196555 -1.709433
 H 5.787384 3.287538 -1.908880
 H 5.812441 4.007871 0.515627
 H 3.939392 3.140772 1.976559

3.3.2.8 Koordinaten der B¹(ylid)substituierten Germylene

YGeB¹

E = -4650.89119210
 C -4.024855 -0.400020 0.679637
 H -3.776583 -0.790097 1.663604
 C -3.065953 -0.433204 -0.319037
 O -1.200506 -2.121592 -1.030228
 C 1.497270 2.209860 2.770136
 H 1.159318 3.226270 2.576565
 C -5.274231 0.142874 0.396635
 H -6.031642 0.178448 1.178666
 C 0.434009 2.580955 -2.021785
 H -0.224698 1.777472 -2.346311
 C 0.832964 2.638112 -0.681258
 C -2.258021 2.914730 0.296614
 H -1.941297 3.157180 -0.716270
 C -3.488920 3.353848 0.763753
 H -4.132659 3.945907 0.116203
 Ge 0.421363 -1.140012 -2.042278
 C -3.083917 2.261030 2.873398
 H -3.410111 1.995250 3.876928
 C -1.850357 1.815010 2.410600
 H -1.224278 1.188987 3.042546
 C 1.133331 1.164960 1.912606
 C -3.336890 0.050507 -1.596111
 H -2.564306 0.006751 -2.364024
 C 1.703670 3.646129 -0.266494
 H 2.062565 3.680305 0.756963
 C -1.427083 2.155441 1.124378
 C -6.900883 1.280091 -1.154509
 H -7.278161 0.988781 -2.141614
 H -6.823379 2.376474 -1.149975
 H -7.648510 0.999937 -0.405165
 C -3.899644 3.033088 2.055134
 H -4.865531 3.378143 2.419305
 C -0.272962 0.043871 -0.466352
 P 0.092004 1.419123 0.441422

O -1.450154 -1.472084 1.434613
 S -1.428541 -1.044952 0.030135
 C -5.570780 0.651632 -0.866886
 C -4.585091 0.587603 -1.861157
 H -4.805418 0.967484 -2.858069
 C 0.888568 3.532686 -2.925659
 H 0.578076 3.475703 -3.966959
 C 1.735998 4.550737 -2.500922
 H 2.086976 5.299641 -3.208484
 C 2.144104 4.602859 -1.173407
 H 2.823456 5.384969 -0.840524
 C 2.634181 0.639690 4.199245
 H 3.227129 0.435575 5.089012
 C 2.258420 1.948348 3.900738
 H 2.546674 2.764247 4.560755
 C 2.228827 -0.404670 3.377954
 H 2.496633 -1.431946 3.613902
 C 1.475816 -0.146647 2.235846
 H 1.134267 -0.963560 1.603645
 N 3.073170 -1.402937 -0.267572
 C 2.806128 -3.243040 0.971727
 C 3.596053 -2.166482 0.772344
 H 2.949857 -4.072514 1.655092
 H 4.527979 -1.913235 1.263834
 B 1.858748 -2.035390 -0.751482
 C 0.748283 -4.206875 0.042846
 C 0.315711 -4.725629 -1.176690
 C 0.169103 -4.659466 1.227192
 C -0.693895 -5.676306 -1.210528
 H 0.775920 -4.366084 -2.095292
 C -0.829509 -5.624249 1.188207
 H 0.477338 -4.220595 2.173669
 C -1.266814 -6.135490 -0.028651
 H -1.032003 -6.066006 -2.168804
 H -1.283150 -5.963678 2.117600
 H -2.056055 -6.884048 -0.056722
 C 3.586914 -0.154535 -0.636380

C 3.459487 0.290236 -1.956794
 C 4.242200 0.665648 0.290168
 C 3.980513 1.518776 -2.341100
 H 2.985699 -0.356577 -2.693677
 C 4.778945 1.882761 -0.108145
 H 4.311725 0.354416 1.329956
 C 4.656236 2.316184 -1.424144
 H 3.869394 1.845433 -3.373334
 H 5.289814 2.503574 0.626074
 H 5.072968 3.273122 -1.730473
 N 1.750393 -3.217479 0.065317

³YGeB¹

E = -4650.84416090
 C 4.197993 0.917186 0.583422
 H 3.932020 1.341490 1.548669
 C 3.248932 0.903940 -0.427272
 O 1.467815 2.728789 -1.014772
 C -1.101337 -2.039670 2.534907
 H -0.658860 -3.011851 2.323223
 C 5.448698 0.360628 0.346227
 H 6.192066 0.358070 1.142772
 C 0.614908 -2.565019 -1.949105
 H 1.405481 -1.850962 -2.175657
 C -0.131219 -2.410906 -0.772171
 C 2.849019 -2.389303 0.531315
 H 2.657092 -2.777000 -0.465245
 C 4.040549 -2.708242 1.169497
 H 4.770219 -3.336845 0.662629
 Ge -0.917859 0.730637 -1.849062
 C 3.367372 -1.413600 3.084933
 H 3.569920 -1.024679 4.080787
 C 2.174552 -1.087651 2.451400
 H 1.459040 -0.431017 2.939791
 C -0.810577 -0.940327 1.719322
 C 3.545202 0.370267 -1.676628
 H 2.790938 0.390256 -2.461876

C -1.192859 -3.275038 -0.512488
 H -1.831007 -3.127070 0.354180
 C 1.904746 -1.584159 1.172958
 C 7.089855 -0.875880 -1.107019
 H 7.355075 -0.905196 -2.169348
 H 7.072065 -1.914129 -0.745132
 H 7.891616 -0.359999 -0.566903
 C 4.299068 -2.225713 2.448328
 H 5.232583 -2.479150 2.947432
 C 0.510233 0.357549 -0.613303
 P 0.365351 -1.066337 0.339764
 O 1.545779 1.777098 1.338009
 S 1.619390 1.578766 -0.124515
 C 5.762687 -0.214719 -0.886077
 C 4.794889 -0.190631 -1.896162
 H 5.029297 -0.617521 -2.870753
 C 0.326381 -3.597199 -2.828017
 H 0.909648 -3.708831 -3.739767
 C -0.716718 -4.478128 -2.549724
 H -0.944871 -5.287615 -3.240475
 C -1.477108 -4.307956 -1.400923
 H -2.315040 -4.969853 -1.194787
 C -2.460202 -0.630754 3.938237
 H -3.106662 -0.510020 4.805707
 C -1.936981 -1.885777 3.632315
 H -2.168603 -2.743137 4.261256
 C -2.141764 0.468836 3.149877
 H -2.532054 1.454013 3.394127
 C -1.316814 0.317713 2.039023
 H -1.027073 1.175362 1.436454
 N -3.666321 0.738962 -0.248341
 C -3.627916 2.734083 0.769372
 C -4.282014 1.552036 0.697021
 H -3.864327 3.608749 1.365021
 H -5.179429 1.239336 1.217892
 B -2.539231 1.460159 -0.786670
 C -1.601535 3.763123 -0.182855

C -1.333597 4.400570 -1.391782
 C -0.893630 4.115405 0.963736
 C -0.359640 5.387425 -1.448994
 H -1.892231 4.109623 -2.278316
 C 0.078546 5.104782 0.899039
 H -1.084884 3.589006 1.896994
 C 0.345379 5.744235 -0.304936
 H -0.145538 5.876931 -2.396863
 H 0.645502 5.357838 1.792322
 H 1.116559 6.509988 -0.356485
 C -4.012454 -0.611986 -0.418636
 C -4.005232 -1.185710 -1.692289
 C -4.374918 -1.392182 0.682096
 C -4.379259 -2.511938 -1.859676
 H -3.727412 -0.574183 -2.547016
 C -4.757380 -2.716978 0.504456
 H -4.337138 -0.958224 1.678719
 C -4.768744 -3.281047 -0.766755
 H -4.374328 -2.945172 -2.857975
 H -5.043119 -3.311336 1.370551
 H -5.077103 -4.315545 -0.905899
 N -2.569924 2.731267 -0.127204

$Y_{Ph}GeB^I$

E = -4062.30320027
 P 1.800368 -0.376400 0.006635
 C 0.088923 -0.244272 -0.136585
 C -0.637643 -0.215639 1.158732
 C -0.829413 0.978116 1.870275
 H -0.422793 1.901878 1.463593
 C -1.538830 0.999165 3.065066
 H -1.681949 1.943373 3.589438
 C -2.066640 -0.178032 3.587654
 H -2.626556 -0.162925 4.521032
 C -1.871338 -1.373883 2.903972
 H -2.279464 -2.302829 3.299781
 C -1.161622 -1.392993 1.709154

H -1.023571 -2.328489 1.169144
 C 2.630774 1.195069 0.432995
 C 3.856796 1.217591 1.104097
 H 4.328809 0.284569 1.407912
 C 4.468808 2.431531 1.392157
 H 5.421844 2.446046 1.917519
 C 3.859396 3.625600 1.016361
 H 4.336922 4.575396 1.250347
 C 2.638924 3.606424 0.349689
 H 2.152981 4.535671 0.060711
 C 2.023779 2.394154 0.057392
 H 1.061438 2.372305 -0.454565
 C 2.562414 -0.974662 -1.522530
 C 3.712740 -0.396472 -2.057292
 H 4.161715 0.470086 -1.576820
 C 4.278158 -0.921705 -3.215277
 H 5.170511 -0.462123 -3.635335
 C 3.702752 -2.024554 -3.835249
 H 4.147121 -2.431496 -4.741661
 C 2.555423 -2.605336 -3.301656
 H 2.099066 -3.463845 -3.790032
 C 1.981868 -2.081113 -2.152177
 H 1.073649 -2.515848 -1.738863
 C 2.321476 -1.505822 1.337670
 C 2.047808 -1.142084 2.661684
 H 1.586942 -0.179745 2.878789
 C 2.355146 -2.010424 3.700144
 H 2.131316 -1.722634 4.725262
 C 2.941327 -3.243600 3.429985
 H 3.181649 -3.922781 4.245823
 C 3.221699 -3.606036 2.117730
 H 3.685898 -4.566517 1.902706
 C 2.912044 -2.742055 1.072191
 H 3.136573 -3.032390 0.048372
 Ge -0.654244 0.127805 -1.855549
 N -3.560222 -0.348839 -0.511435
 C -4.127103 1.668062 0.278340

C -4.476678 0.366284 0.256476
 H -4.657605 2.499066 0.728490
 H -5.359123 -0.095899 0.682422
 B -2.538428 0.561415 -0.980382
 N -2.972324 1.848557 -0.479694
 C -2.245290 3.042659 -0.510127
 C -2.232571 3.912058 0.585857
 C -1.485604 3.370292 -1.638882
 C -1.469104 5.072212 0.553579
 H -2.795251 3.650385 1.479283
 C -0.713280 4.524297 -1.657845
 H -1.523123 2.720690 -2.511248
 C -0.700609 5.384637 -0.563588
 H -1.466302 5.732861 1.418830
 H -0.128593 4.758805 -2.545583
 H -0.104573 6.294842 -0.584521
 C -3.550268 -1.745334 -0.603698
 C -2.950112 -2.368084 -1.703207
 C -4.099597 -2.545117 0.403204
 C -2.874328 -3.752303 -1.775791
 H -2.559922 -1.756186 -2.514535
 C -4.036036 -3.929915 0.314362
 H -4.537107 -2.076991 1.281252
 C -3.416728 -4.544648 -0.768645
 H -2.399687 -4.214605 -2.639618
 H -4.463041 -4.534488 1.112795
 H -3.362308 -5.629434 -0.830146

³Y_{ph}GeB¹

E = -4062.25856791
 P 0.624510 -1.417829 -0.012810
 C -0.713761 -0.633534 -0.773589
 C -2.082528 -1.039635 -0.470878
 C -2.459769 -1.584446 0.774878
 H -1.714477 -1.699847 1.560555
 C -3.767935 -1.968917 1.035550
 H -4.016249 -2.384736 2.011074

C -4.753814 -1.824459 0.066323
 H -5.778661 -2.129501 0.268432
 C -4.408631 -1.269394 -1.164388
 H -5.169321 -1.132452 -1.931440
 C -3.105265 -0.880641 -1.427188
 H -2.845150 -0.447071 -2.392138
 C 1.165255 -0.615444 1.533240
 C 2.400863 -0.893367 2.127820
 H 3.109953 -1.551925 1.628259
 C 2.725516 -0.325072 3.353164
 H 3.687291 -0.543670 3.813159
 C 1.821679 0.522353 3.989554
 H 2.076635 0.963018 4.951740
 C 0.602407 0.819057 3.389795
 H -0.096306 1.501076 3.868765
 C 0.274379 0.256801 2.160522
 H -0.671667 0.497472 1.675704
 C 2.099057 -1.501194 -1.071282
 C 3.084722 -0.513256 -1.008943
 H 2.999008 0.308979 -0.302576
 C 4.187201 -0.583056 -1.853078
 H 4.952736 0.185666 -1.790470
 C 4.303851 -1.620315 -2.771022
 H 5.166781 -1.667560 -3.432720
 C 3.318772 -2.599754 -2.841810
 H 3.405131 -3.414337 -3.557981
 C 2.222597 -2.545960 -1.990408
 H 1.462179 -3.321320 -2.042580
 C 0.251477 -3.153875 0.417694
 C 0.726557 -3.772849 1.574009
 H 1.335942 -3.218411 2.283118
 C 0.408463 -5.101686 1.834114
 H 0.781770 -5.577247 2.738961
 C -0.387265 -5.817115 0.946660
 H -0.638163 -6.855372 1.155453
 C -0.872508 -5.200828 -0.202766
 H -1.509184 -5.751216 -0.892331

C -0.560576 -3.873734 -0.465497
 H -0.963446 -3.379627 -1.348194
 Ge -0.246139 0.906838 -1.873354
 N -1.547855 2.765242 0.309500
 C 0.160429 3.664619 1.440899
 C -1.181788 3.510273 1.424867
 H 0.769555 4.235557 2.132055
 H -1.922702 3.932322 2.094626
 B -0.355591 2.392245 -0.408430
 N 0.709950 3.026052 0.333984
 C 2.092174 2.917750 0.127690
 C 2.958730 2.710468 1.202684
 C 2.614479 3.005587 -1.166193
 C 4.326079 2.585914 0.985854
 H 2.551070 2.618389 2.205746
 C 3.981571 2.883918 -1.374020
 H 1.937394 3.179684 -1.998455
 C 4.845025 2.672984 -0.301938
 H 4.988363 2.413533 1.832343
 H 4.375211 2.957568 -2.386091
 H 5.916492 2.581029 -0.469137
 C -2.891314 2.446336 0.024097
 C -3.405582 2.679979 -1.251649
 C -3.718312 1.915716 1.014039
 C -4.737670 2.398016 -1.525616
 H -2.751976 3.095848 -2.014525
 C -5.050438 1.639686 0.733906
 H -3.304113 1.702603 1.997947
 C -5.566837 1.886038 -0.533444
 H -5.131677 2.589462 -2.522026
 H -5.683812 1.212123 1.508462
 H -6.610273 1.666519 -0.750390

$Y_{PhF}GeB^1$

E = -4559.21212423
 P 2.050357 0.478837 0.148483
 C 0.422511 0.142900 -0.292676

C -0.437133 -0.477674 0.722236
 C -1.400216 0.254064 1.421836
 C -2.340246 -0.347120 2.243891
 C -2.286246 -1.720318 2.451410
 C -1.298842 -2.471379 1.827316
 C -0.390165 -1.848525 0.984263
 C 2.366524 2.217067 0.595884
 C 3.558486 2.586419 1.228857
 H 4.312551 1.832720 1.454762
 C 3.773168 3.911485 1.583396
 H 4.700873 4.198053 2.074877
 C 2.796394 4.869651 1.319389
 H 2.964106 5.906665 1.604371
 C 1.604428 4.501020 0.707114
 H 0.831256 5.242270 0.514906
 C 1.385444 3.175228 0.346227
 H 0.442266 2.874074 -0.107360
 C 3.192852 0.017376 -1.179772
 C 4.261134 0.812024 -1.592104
 H 4.433990 1.781581 -1.131059
 C 5.092404 0.372823 -2.617742
 H 5.917315 1.000486 -2.948633
 C 4.864286 -0.856950 -3.224461
 H 5.516269 -1.195154 -4.027631
 C 3.796557 -1.651046 -2.813843
 H 3.612024 -2.610334 -3.293589
 C 2.954271 -1.214472 -1.801074
 H 2.096491 -1.811694 -1.492276
 C 2.511958 -0.443767 1.642054
 C 1.984193 -0.003105 2.860555
 H 1.410238 0.922297 2.899271
 C 2.185116 -0.747110 4.014890
 H 1.768120 -0.403555 4.959289
 C 2.915675 -1.930975 3.960563
 H 3.072014 -2.514928 4.865477
 C 3.445163 -2.368336 2.751857
 H 4.016862 -3.293009 2.708772

C 3.241638 -1.630534 1.590752
 H 3.647470 -1.982961 0.645319
 Ge -0.144152 0.677989 -2.041246
 N -2.641873 -1.279278 -1.541579
 C -4.286385 0.052492 -0.812546
 C -3.931251 -1.233207 -1.016339
 H -5.239381 0.441221 -0.473231
 H -4.538236 -2.121434 -0.888658
 B -2.138197 0.074109 -1.650429
 N -3.241602 0.888702 -1.198700
 C -3.243427 2.276169 -0.983942
 C -3.910750 2.833549 0.109478
 C -2.537935 3.115369 -1.850251
 C -3.864947 4.203402 0.331011
 H -4.415542 2.181176 0.818398
 C -2.480194 4.482583 -1.609818
 H -2.049961 2.690281 -2.725216
 C -3.145678 5.036156 -0.520680
 H -4.381681 4.620937 1.193285
 H -1.923744 5.120863 -2.293915
 H -3.108062 6.108218 -0.338885
 C -1.910707 -2.462540 -1.711335
 C -0.828634 -2.494043 -2.597115
 C -2.201320 -3.610731 -0.968399
 C -0.029608 -3.624849 -2.694602
 H -0.631843 -1.633626 -3.235244
 C -1.399890 -4.739366 -1.074203
 H -3.023741 -3.600538 -0.257541
 C -0.302840 -4.752331 -1.928042
 H 0.808392 -3.623842 -3.389928
 H -1.626452 -5.609205 -0.461112
 H 0.328103 -5.635401 -2.000673
 F -1.443465 1.574357 1.281947
 F -3.279304 0.376780 2.839927
 F -3.181118 -2.313518 3.227280
 F -1.266243 -3.785584 2.002209
 F 0.507727 -2.606287 0.362944

³Y_{PhF}GeB¹

E = -4559.15481770

P 1.668853 1.398962 -0.023348

C 0.411927 0.273170 0.228850

C 0.604208 -1.052514 0.800159

C -0.218823 -1.560381 1.819973

C -0.116928 -2.860238 2.294451

C 0.854764 -3.712036 1.787064

C 1.701507 -3.248143 0.791114

C 1.559245 -1.958636 0.308433

C 1.557327 2.906851 1.004796

C 2.596987 3.842638 0.968602

H 3.450947 3.682952 0.310349

C 2.549317 4.967955 1.779283

H 3.359296 5.694075 1.747878

C 1.469826 5.159858 2.639220

H 1.434243 6.041214 3.276868

C 0.447281 4.220779 2.693661

H -0.389229 4.360783 3.375234

C 0.490848 3.090086 1.882030

H -0.294898 2.337360 1.935030

C 1.726850 1.970274 -1.749998

C 1.663637 3.307816 -2.138171

H 1.596096 4.094686 -1.391461

C 1.659976 3.637561 -3.490478

H 1.599214 4.682016 -3.789621

C 1.722920 2.638786 -4.454380

H 1.718070 2.901161 -5.510622

C 1.779088 1.301058 -4.069444

H 1.817186 0.516408 -4.822830

C 1.771150 0.965161 -2.723211

H 1.783149 -0.076503 -2.407016

C 3.302644 0.761669 0.431901

C 3.460906 0.293137 1.739408

H 2.626790 0.341502 2.438299

C 4.680330 -0.233573 2.142561

H 4.799347 -0.605035 3.158262

C 5.746707 -0.283823 1.249330
 H 6.702293 -0.696381 1.566979
 C 5.593058 0.194105 -0.047283
 H 6.427107 0.157081 -0.745106
 C 4.371273 0.713193 -0.461414
 H 4.248471 1.071695 -1.481199
 Ge -1.369066 0.873338 -0.224189
 N -2.602682 -1.890447 -1.054493
 C -4.784421 -1.594830 -0.623910
 C -3.846455 -2.507035 -0.954649
 H -5.854342 -1.736486 -0.528751
 H -3.979507 -3.556116 -1.191219
 B -2.774039 -0.494605 -0.722731
 N -4.194900 -0.343925 -0.488120
 C -4.896554 0.794758 -0.071203
 C -5.964572 0.694621 0.825327
 C -4.520895 2.056614 -0.541536
 C -6.639721 1.835025 1.239136
 H -6.245365 -0.279013 1.220107
 C -5.191529 3.193680 -0.109331
 H -3.720353 2.132644 -1.274762
 C -6.255811 3.091126 0.779459
 H -7.466136 1.740435 1.941235
 H -4.885808 4.168096 -0.485902
 H -6.784163 3.982566 1.110736
 C -1.455869 -2.592794 -1.462860
 C -0.555574 -2.008190 -2.357964
 C -1.224492 -3.894077 -1.011061
 C 0.547804 -2.725459 -2.797926
 H -0.743780 -0.995644 -2.710688
 C -0.115479 -4.602967 -1.456719
 H -1.907733 -4.339350 -0.290718
 C 0.777765 -4.023182 -2.350598
 H 1.240436 -2.263529 -3.499648
 H 0.064865 -5.607865 -1.079224
 H 1.652751 -4.574229 -2.686941
 F -1.150081 -0.784247 2.367218

F -0.930824 -3.286233 3.250104
 F 0.953897 -4.959796 2.224806
 F 2.596336 -4.066049 0.254717
 F 2.355150 -1.604165 -0.701820

3.3.2.9 Koordinaten der B²(ylid)substituierten Germylene

YGeB²

E = -4381.70430283
 C 3.270516 -1.936643 -1.324865
 H 2.715659 -2.084713 -2.248036
 C 2.574411 -1.768631 -0.139924
 O 0.380656 -2.758150 0.898862
 C -1.228492 2.667890 -1.998037
 H -0.480435 3.450614 -1.874830
 C 4.661751 -1.900300 -1.300766
 H 5.216221 -2.026151 -2.229774
 C 0.871271 2.109193 2.392923
 H 1.439013 1.182335 2.457303
 C 0.132266 2.381069 1.235678
 C 2.933919 1.740982 -0.430118
 H 2.939298 1.957871 0.636185
 C 4.119450 1.781881 -1.150191
 H 5.049422 2.035048 -0.645188
 Ge -0.423396 -1.385902 2.321476
 C 2.932152 1.155223 -3.151688
 H 2.931257 0.915245 -4.213015
 C 1.740338 1.110563 -2.435943
 H 0.816586 0.820746 -2.931907
 C -1.124580 1.472178 -1.278105
 C 3.241467 -1.573606 1.067398
 H 2.668492 -1.446034 1.986375
 C -0.644726 3.538662 1.169689
 H -1.256475 3.741792 0.295307
 C 1.736320 1.419857 -1.074049
 C 6.855774 -1.635786 -0.087985
 H 7.272073 -2.357966 0.625330

H 7.205748 -0.642117 0.221951
 H 7.281652 -1.849128 -1.073612
 C 4.118380 1.495395 -2.512964
 H 5.049707 1.527140 -3.075207
 C 0.242846 -0.360576 0.635123
 P 0.222316 1.158062 -0.101370
 O 0.391269 -1.949158 -1.540230
 S 0.792231 -1.720657 -0.149474
 C 5.358230 -1.696341 -0.111062
 C 4.625050 -1.538832 1.073546
 H 5.153702 -1.387879 2.014027
 C 0.853755 3.001894 3.456816
 H 1.427744 2.781546 4.354364
 C 0.091303 4.162779 3.379688
 H 0.072316 4.858563 4.216301
 C -0.660729 4.425745 2.239905
 H -1.273504 5.323147 2.184805
 C -3.220558 1.834956 -3.068401
 H -4.047249 1.982457 -3.760824
 C -2.278807 2.847191 -2.887754
 H -2.363191 3.777429 -3.446312
 C -3.097914 0.633330 -2.382020
 H -3.821705 -0.166348 -2.527483
 C -2.041437 0.447210 -1.495914
 H -1.896523 -0.506109 -0.994094
 C -4.277104 -0.813850 0.605325
 C -3.936810 -2.006619 -0.028510
 C -5.433232 -0.126105 0.292089
 C -4.736879 -2.569045 -1.004462
 C -6.250451 -0.686431 -0.693174
 H -5.682711 0.807854 0.788416
 C -5.910674 -1.882133 -1.327062
 H -4.454555 -3.498050 -1.492385
 H -7.171772 -0.178592 -0.970906
 H -6.572547 -2.289415 -2.088603
 B -2.325729 -1.495436 1.392297
 O -3.297142 -0.494063 1.492195

O -2.743806 -2.439911 0.457190

³YGeB²

E = -4381.65898163

C 2.992475 -2.312002 -1.428531

H 2.699651 -2.020546 -2.434360

C 2.065350 -2.215529 -0.403372

O -0.505711 -2.723782 -0.501598

C 0.349708 3.338145 -1.717601

H 1.307965 3.722189 -1.368653

C 4.279396 -2.754937 -1.139955

H 5.013469 -2.824174 -1.941839

C 1.232509 1.484660 2.729096

H 1.506417 0.431564 2.690681

C 0.801652 2.129575 1.562820

C 3.545515 0.922191 0.264132

H 3.378982 0.911256 1.338365

C 4.833612 0.766671 -0.230391

H 5.663299 0.631686 0.460328

Ge -1.238471 -0.709605 1.707734

C 3.994119 0.943396 -2.481634

H 4.165569 0.942285 -3.556139

C 2.701158 1.091415 -1.993993

H 1.862358 1.175440 -2.679868

C -0.146700 2.127665 -1.221666

C 2.401983 -2.571819 0.899704

H 1.657319 -2.495375 1.690914

C 0.407343 3.466141 1.622319

H 0.039278 3.970227 0.732951

C 2.474279 1.095905 -0.615753

C 6.047492 -3.544445 0.475255

H 6.048001 -4.503134 1.008597

H 6.558615 -2.818259 1.121544

H 6.646323 -3.662318 -0.433649

C 5.059706 0.783785 -1.603331

H 6.070331 0.663776 -1.989159

C 0.098823 -0.365280 0.381007

P 0.770432 1.176002 0.017659
 O 0.493123 -1.024604 -2.106901
 S 0.417699 -1.617922 -0.758640
 C 4.651917 -3.097026 0.159091
 C 3.689816 -3.002510 1.173080
 H 3.959050 -3.275318 2.193007
 C 1.288947 2.178593 3.930014
 H 1.623101 1.669374 4.831466
 C 0.902249 3.514440 3.981957
 H 0.937784 4.055125 4.925698
 C 0.457747 4.153288 2.830727
 H 0.138960 5.192772 2.870753
 C -1.584487 3.534745 -3.137266
 H -2.148936 4.086087 -3.887045
 C -0.373163 4.041602 -2.671270
 H 0.011366 4.983236 -3.058044
 C -2.065758 2.322163 -2.657982
 H -3.003966 1.917529 -3.031859
 C -1.347055 1.610054 -1.703280
 H -1.704021 0.647071 -1.346119
 C -5.256819 -1.273930 0.727339
 C -4.741575 -0.958700 -0.528056
 C -6.593609 -1.563730 0.914956
 C -5.537008 -0.920881 -1.655966
 C -7.407951 -1.525610 -0.219467
 H -6.982076 -1.809539 1.899487
 C -6.891489 -1.211726 -1.476319
 H -5.119504 -0.683193 -2.630780
 H -8.468054 -1.748429 -0.119189
 H -7.556259 -1.196084 -2.337352
 B -3.107759 -0.899836 0.935627
 O -4.250132 -1.237277 1.643901
 O -3.406769 -0.717818 -0.409898

$Y_{Ph}GeB^2$

E = -3793.11527300

P 1.647415 -0.044963 -0.009421

C 0.022739 0.489261 -0.252381
 C -0.984074 -0.606109 -0.206287
 C -1.564381 -1.023781 1.000491
 C -2.536754 -2.018704 1.026811
 C -2.948165 -2.628402 -0.152930
 C -2.373011 -2.236795 -1.358787
 C -1.402813 -1.243786 -1.383896
 C 2.047864 -0.407464 1.736501
 C 2.989051 -1.376202 2.094698
 H 3.480480 -1.969877 1.326134
 C 3.295186 -1.584756 3.434584
 H 4.025624 -2.342804 3.710514
 C 2.667009 -0.828748 4.419763
 H 2.905637 -0.997017 5.468272
 C 1.731596 0.138344 4.065842
 H 1.237777 0.729304 4.834542
 C 1.420506 0.347853 2.727534
 H 0.683015 1.096014 2.436790
 C 2.866114 1.175432 -0.557934
 C 3.973149 1.504029 0.224357
 H 4.101281 1.053779 1.205946
 C 4.909659 2.418149 -0.246779
 H 5.767036 2.677777 0.370703
 C 4.747733 3.000653 -1.498130
 H 5.481004 3.717148 -1.863484
 C 3.645272 2.673278 -2.282707
 H 3.512419 3.134070 -3.259259
 C 2.703396 1.767226 -1.815267
 H 1.830416 1.519225 -2.415542
 C 2.020310 -1.605322 -0.870000
 C 1.369522 -2.770889 -0.447148
 H 0.700652 -2.742083 0.411646
 C 1.570709 -3.965164 -1.125483
 H 1.055407 -4.864306 -0.794297
 C 2.422311 -4.009481 -2.225514
 H 2.578225 -4.947032 -2.755832
 C 3.075917 -2.856482 -2.644558

H 3.747894 -2.888647 -3.499853
 C 2.876590 -1.655772 -1.970908
 H 3.394926 -0.758940 -2.302471
 H -1.263519 -0.534132 1.924847
 H -2.985625 -2.307675 1.975585
 H -3.719610 -3.395636 -0.134624
 H -2.689888 -2.703507 -2.290098
 H -0.962193 -0.930854 -2.328560
 Ge -0.347801 2.363350 -0.301422
 C -4.286148 0.851167 -0.757610
 C -4.269360 1.044739 0.620869
 C -5.306425 0.165319 -1.385536
 C -5.273487 0.563149 1.437000
 C -6.323452 -0.333698 -0.568297
 H -5.300241 0.012873 -2.461426
 C -6.307871 -0.138346 0.812514
 H -5.244597 0.715522 2.512697
 H -7.143806 -0.888459 -1.019113
 H -7.116686 -0.542890 1.417651
 B -2.400671 1.857579 -0.222056
 O -3.129165 1.706451 0.958784
 O -3.161585 1.396713 -1.293602

$^3Y_{Ph}GeB^2$

E = -3793.06992151
 P -1.352431 -0.515601 -0.112458
 C -0.467189 0.819881 0.522915
 C -1.064594 2.169264 0.466214
 C -1.494232 2.835587 1.624935
 C -2.027191 4.117515 1.563790
 C -2.154710 4.769020 0.341520
 C -1.731331 4.126428 -0.818023
 C -1.189727 2.849437 -0.756639
 C -2.600626 -1.256385 1.000303
 C -3.637051 -2.045880 0.491163
 H -3.718236 -2.213660 -0.581959
 C -4.569023 -2.609589 1.353329

H -5.374170 -3.223429 0.954190
 C -4.475698 -2.383457 2.724199
 H -5.209452 -2.822170 3.397815
 C -3.451509 -1.592212 3.231769
 H -3.380621 -1.408992 4.301934
 C -2.515035 -1.026676 2.372553
 H -1.711017 -0.403018 2.762013
 C -0.221772 -1.847245 -0.587497
 C -0.486446 -3.193056 -0.332726
 H -1.391657 -3.484317 0.194826
 C 0.425713 -4.163216 -0.734166
 H 0.223814 -5.211619 -0.524318
 C 1.596439 -3.795478 -1.388534
 H 2.310731 -4.558248 -1.692744
 C 1.860344 -2.453050 -1.646744
 H 2.781418 -2.159568 -2.146843
 C 0.955115 -1.478752 -1.248055
 H 1.169076 -0.425745 -1.417919
 C -2.329164 -0.064722 -1.575611
 C -3.482918 0.702806 -1.385968
 H -3.804991 0.959889 -0.377846
 C -4.208494 1.147959 -2.481982
 H -5.101135 1.750901 -2.329335
 C -3.790246 0.828856 -3.770902
 H -4.360471 1.178356 -4.629485
 C -2.645719 0.062746 -3.962539
 H -2.320410 -0.191766 -4.969212
 C -1.911918 -0.383075 -2.868054
 H -1.016354 -0.981561 -3.021062
 H -1.403158 2.326764 2.583651
 H -2.349677 4.608868 2.480440
 H -2.574137 5.772136 0.293378
 H -1.811945 4.628658 -1.780834
 H -0.839031 2.364079 -1.665355
 Ge 0.916289 0.385005 1.806765
 C 4.422786 0.555283 -0.497662
 C 4.950598 0.196723 0.741347

C 5.220182 0.703692 -1.615750
 C 6.301623 -0.028119 0.919287
 C 6.588601 0.476616 -1.445678
 H 4.795698 0.988212 -2.575037
 C 7.117019 0.119231 -0.205817
 H 6.700336 -0.306466 1.891063
 H 7.254867 0.583642 -2.299111
 H 8.187811 -0.048279 -0.110837
 B 2.770467 0.425295 0.957375
 O 3.942008 0.118467 1.647279
 O 3.077070 0.707022 -0.377246

$Y_{PhF}GeB^2$

E = -4290.02330518
 P -1.990285 0.107439 0.018105
 C -0.489174 -0.753228 0.022711
 C 0.700570 0.117713 -0.058345
 C 1.367664 0.593267 1.070796
 C 2.517951 1.366510 0.982760
 C 3.008404 1.723713 -0.264911
 C 2.344848 1.305493 -1.412825
 C 1.206631 0.524064 -1.297163
 C -2.722902 0.411425 1.655282
 C -3.723034 1.376696 1.816742
 H -4.062979 1.958014 0.960059
 C -4.271085 1.602191 3.072061
 H -5.048535 2.353137 3.197758
 C -3.818440 0.872766 4.169465
 H -4.245540 1.054284 5.153951
 C -2.814960 -0.075994 4.012298
 H -2.451804 -0.635455 4.871803
 C -2.262333 -0.306633 2.756451
 H -1.456922 -1.026988 2.623186
 C -3.236515 -0.732399 -0.992594
 C -4.568378 -0.861011 -0.598953
 H -4.895301 -0.479570 0.365253
 C -5.477620 -1.500814 -1.434416

H -6.513355 -1.610252 -1.119662
 C -5.063297 -2.007583 -2.660914
 H -5.777686 -2.510110 -3.310185
 C -3.733959 -1.883490 -3.054611
 H -3.405477 -2.288701 -4.009366
 C -2.818212 -1.255209 -2.221758
 H -1.770174 -1.173773 -2.507058
 C -1.700254 1.768545 -0.653829
 C -1.106333 2.714475 0.189565
 H -0.994580 2.499793 1.251768
 C -0.635147 3.911621 -0.331428
 H -0.162568 4.638575 0.325788
 C -0.761271 4.174451 -1.692814
 H -0.386040 5.110194 -2.102364
 C -1.366786 3.243838 -2.529785
 H -1.469207 3.450846 -3.592876
 C -1.831929 2.038664 -2.015201
 H -2.283282 1.304028 -2.678050
 Ge -0.500754 -2.663118 0.144305
 C 3.574463 -1.772304 -0.473563
 C 3.544213 -1.749295 0.917802
 C 4.630860 -1.245184 -1.190504
 C 4.566314 -1.194028 1.662040
 C 5.665507 -0.671089 -0.448231
 H 4.631309 -1.250591 -2.277278
 C 5.632428 -0.644214 0.946463
 H 4.517151 -1.159074 2.746843
 H 6.508926 -0.224269 -0.969924
 H 6.451356 -0.177618 1.489467
 B 1.608729 -2.514367 0.191979
 O 2.353645 -2.258033 1.341322
 O 2.404884 -2.299232 -0.931589
 F 0.594421 0.140440 -2.412876
 F 0.910048 0.290084 2.280392
 F 3.156032 1.750752 2.078227
 F 2.823424 1.635024 -2.603514
 F 4.119617 2.433473 -0.364644

$^3Y_{PhF}GeB^2$

E = -4289.97532452

P -0.824888 1.268738 0.231724

C -0.403969 -0.135428 -0.668595

C -1.224216 -1.341583 -0.540738

C -2.082901 -1.784026 -1.551579

C -2.849448 -2.934375 -1.422134

C -2.786922 -3.673693 -0.247254

C -1.948118 -3.263169 0.781776

C -1.179945 -2.119611 0.621589

C -1.753512 2.540627 -0.684261

C -2.320608 3.622667 -0.002482

H -2.199970 3.711579 1.076977

C -3.047173 4.577101 -0.701207

H -3.486906 5.419607 -0.171097

C -3.219424 4.449344 -2.077893

H -3.792414 5.196574 -2.623699

C -2.672891 3.364153 -2.752719

H -2.819699 3.256374 -3.825332

C -1.941071 2.405444 -2.058360

H -1.528987 1.538753 -2.573046

C 0.666124 2.048200 0.899596

C 0.952550 3.408393 0.783034

H 0.258268 4.075805 0.278391

C 2.149800 3.904814 1.287518

H 2.379530 4.963350 1.184739

C 3.057711 3.050522 1.904002

H 3.998193 3.442704 2.286273

C 2.772959 1.692496 2.020787

H 3.489920 1.018452 2.485589

C 1.580788 1.188653 1.519102

H 1.365563 0.122481 1.566864

C -1.935011 0.847407 1.603267

C -3.238035 0.457754 1.275562

H -3.570370 0.492838 0.238401

C -4.104032 0.024658 2.270049

H -5.114721 -0.283738 2.010951

C -3.677317 -0.013353 3.594752
 H -4.356290 -0.353505 4.374166
 C -2.386069 0.383779 3.923456
 H -2.053650 0.356885 4.959037
 C -1.510813 0.809844 2.930593
 H -0.497400 1.107524 3.189695
 Ge 0.984160 0.060588 -1.988722
 C 4.339648 -1.222748 0.165916
 C 4.970393 -0.674097 -0.948771
 C 5.053450 -1.760882 1.218971
 C 6.346232 -0.639834 -1.063546
 C 6.446350 -1.729035 1.112726
 H 4.547422 -2.190506 2.079644
 C 7.077870 -1.181222 -0.003552
 H 6.825999 -0.209728 -1.938511
 H 7.049960 -2.143406 1.917438
 H 8.164707 -1.175451 -0.051658
 B 2.797050 -0.472051 -1.211671
 O 4.024875 -0.215978 -1.812141
 O 2.993117 -1.115599 0.009252
 F -0.378063 -1.765115 1.621563
 F -2.195722 -1.081125 -2.673444
 F -3.657242 -3.319212 -2.398228
 F -1.882145 -3.970742 1.898836
 F -3.520439 -4.766072 -0.110701

3.3.2.10 Koordinaten der cyclischen Germylene

V^{Ge}

E = -3096.13968216
 C -1.607267 2.354117 0.098326
 C 0.515167 1.178893 0.115539
 C 1.175522 2.406808 0.247703
 C 0.450499 3.588846 0.289578
 C -0.941833 3.566490 0.206854
 H -2.696369 2.357326 0.049834
 H 2.259187 2.429982 0.328298

H 0.975908 4.536449 0.392824
 H -1.508022 4.495494 0.235832
 N 1.118386 -0.064682 0.085288
 C 2.514753 -0.224868 0.020020
 C 3.276900 0.402756 -0.973208
 C 3.160060 -1.073222 0.924203
 C 4.646755 0.192328 -1.048038
 H 2.776603 1.048561 -1.691911
 C 4.529730 -1.293040 0.835112
 H 2.568831 -1.553808 1.701217
 C 5.281674 -0.657763 -0.146217
 H 5.222970 0.687833 -1.827741
 H 5.013137 -1.959610 1.547271
 H 6.355111 -0.823857 -0.210615
 C -0.907656 1.136928 0.058359
 C -1.436691 -0.206418 -0.015790
 P -3.102103 -0.571733 -0.082389
 C -4.067801 -0.021561 1.358637
 H -3.946351 1.058627 1.487629
 H -5.131288 -0.260994 1.245256
 H -3.666060 -0.518285 2.247991
 C -3.981976 0.106833 -1.523367
 H -5.048089 -0.146007 -1.497893
 H -3.863702 1.194803 -1.544778
 H -3.522310 -0.304246 -2.428223
 C -3.360175 -2.359554 -0.170298
 H -4.431949 -2.582289 -0.197118
 H -2.878783 -2.753642 -1.071158
 H -2.905808 -2.835788 0.704653
 Ge -0.073629 -1.550850 -0.015532

$^3\sqrt{\text{Ge}}$

E = -3096.05423687
 C 1.649788 2.336083 -0.103603
 C -0.521167 1.172002 -0.192788
 C -1.133065 2.427474 -0.427205
 C -0.382738 3.582086 -0.463277

C 1.015242 3.541301 -0.282972
 H 2.733575 2.319894 0.003437
 H -2.205218 2.468869 -0.595604
 H -0.873793 4.535343 -0.649826
 H 1.592523 4.463371 -0.308886
 N -1.164608 -0.005996 -0.121780
 C -2.537936 -0.151737 0.026073
 C -3.293756 0.663547 0.885757
 C -3.188241 -1.209595 -0.628295
 C -4.651894 0.441096 1.055830
 H -2.796578 1.454175 1.442742
 C -4.548069 -1.424395 -0.450719
 H -2.608318 -1.848074 -1.292883
 C -5.292029 -0.599056 0.385789
 H -5.215417 1.080135 1.733897
 H -5.031236 -2.246593 -0.975942
 H -6.357598 -0.769715 0.524066
 C 0.930052 1.106027 -0.063295
 C 1.456187 -0.183693 0.086311
 P 3.122866 -0.540964 0.236597
 C 4.186949 -0.049065 -1.160389
 H 4.145499 1.036273 -1.295645
 H 5.225508 -0.359781 -0.997217
 H 3.796731 -0.524012 -2.067036
 C 3.917824 0.156746 1.717158
 H 4.975638 -0.126544 1.764529
 H 3.830923 1.247661 1.705684
 H 3.391894 -0.222044 2.599577
 C 3.310108 -2.331247 0.367788
 H 4.358782 -2.607782 0.518251
 H 2.699117 -2.688620 1.204426
 H 2.932982 -2.793624 -0.552340
 Ge 0.037835 -1.660248 -0.311584

Vl^{Ge}

E = -3645.32890364

C 0.340344 3.199252 -0.281145

C 0.115188 1.854711 -0.006467
 C -1.091549 1.211218 -0.332496
 C -2.086109 2.008338 -0.929407
 C -1.869417 3.351082 -1.188640
 C -0.653459 3.958648 -0.876746
 H 1.302340 3.623355 -0.001391
 H -3.033170 1.549174 -1.200534
 H -2.662236 3.932617 -1.656102
 H -0.489447 5.012841 -1.087408
 N -1.282723 -0.155216 -0.143072
 S 1.333427 0.972665 0.908955
 O 2.596359 1.748136 0.865855
 O 0.772727 0.685615 2.228706
 C 1.535167 -0.478106 0.004753
 C -2.623372 -0.592621 0.029045
 C -3.349342 -0.158701 1.142774
 C -3.221474 -1.472101 -0.874068
 C -4.650766 -0.595793 1.342226
 H -2.866711 0.515614 1.847575
 C -4.521466 -1.920437 -0.660226
 H -2.660124 -1.796074 -1.748307
 C -5.241716 -1.482066 0.444049
 H -5.205140 -0.252562 2.213870
 H -4.975510 -2.608715 -1.370813
 H -6.260245 -1.828631 0.606702
 P 3.172571 -0.935295 -0.239815
 C 4.068900 0.151780 -1.373629
 H 5.120148 -0.144242 -1.462540
 H 3.581977 0.116982 -2.353599
 H 3.986749 1.163430 -0.963181
 C 3.221807 -2.594619 -0.955680
 H 2.684766 -2.601139 -1.910028
 H 4.261622 -2.895956 -1.120869
 H 2.738721 -3.303120 -0.274456
 C 4.144211 -0.991239 1.285163
 H 4.097845 0.009383 1.728095
 H 3.678884 -1.706306 1.971328

H 5.184367 -1.273877 1.087795
 Ge -0.002611 -1.566424 -0.300757

$^3V_{\text{Ge}}$

E = -3645.24313744
 C 0.589456 2.948431 0.099962
 C 0.150026 1.636913 0.186042
 C -0.914343 1.182728 -0.608203
 C -1.532988 2.068474 -1.497762
 C -1.079408 3.376240 -1.593872
 C -0.021650 3.817948 -0.798096
 H 1.399880 3.266185 0.753215
 H -2.353005 1.709574 -2.116244
 H -1.553673 4.059067 -2.295722
 H 0.319550 4.848600 -0.871890
 N -1.307164 -0.151348 -0.480857
 S 0.865559 0.465446 1.334325
 O 2.038458 1.160921 1.917530
 O -0.230733 0.076446 2.217554
 C 1.388962 -0.785369 0.315458
 C -2.574305 -0.455568 -0.102500
 C -3.396084 0.492869 0.558708
 C -3.077841 -1.763649 -0.308954
 C -4.656350 0.136022 0.991778
 H -2.994862 1.478547 0.775607
 C -4.343189 -2.100105 0.130116
 H -2.453357 -2.481847 -0.835487
 C -5.141865 -1.157002 0.777960
 H -5.266144 0.863904 1.522897
 H -4.721199 -3.105518 -0.043370
 H -6.138999 -1.427791 1.118703
 P 3.070634 -0.737881 -0.024616
 C 3.711045 0.794473 -0.763703
 H 4.777796 0.715386 -1.002354
 H 3.136516 1.003403 -1.673236
 H 3.545921 1.598037 -0.038973
 C 3.449112 -2.044949 -1.215884

H 2.900471 -1.855926 -2.145867
H 4.525322 -2.067115 -1.418407
H 3.131139 -3.009744 -0.806725
C 4.104566 -1.056375 1.424691
H 3.861119 -0.288523 2.165375
H 3.843582 -2.040553 1.826831
H 5.168882 -1.022479 1.164904
Ge 0.116253 -1.562754 -1.010886

VII^{Ge}

E = -4407.39598976
C -0.416075 1.796437 -0.559635
C 0.415729 1.796533 0.559395
C 0.822205 3.008174 1.116574
C 0.411607 4.211866 0.559942
C -0.412120 4.211770 -0.560472
C -0.822636 3.007982 -1.116957
H 1.473530 2.978276 1.986722
H 0.735418 5.150783 1.004833
H -0.735995 5.150611 -1.005476
H -1.473963 2.977930 -1.987098
S -0.981555 0.316412 -1.443750
S 0.981293 0.316685 1.443748
O -2.214475 0.786358 -2.110986
O 0.152952 -0.080180 -2.297510
O -0.153158 -0.079823 2.297592
O 2.214186 0.786810 2.110926
C -1.376691 -0.917258 -0.362325
C 1.376687 -0.917121 0.362493
P 2.902346 -0.777109 -0.407430
P -2.902175 -0.777418 0.407882
C 2.930450 -1.952905 -1.774856
H 3.900770 -1.933120 -2.282389
H 2.735908 -2.961644 -1.393038
H 2.129447 -1.663285 -2.465706
C 3.159749 0.858747 -1.133337
H 3.172997 1.595194 -0.322460

H 4.103006 0.897092 -1.689656
H 2.307652 1.050988 -1.796738
C 4.333206 -1.103304 0.651812
H 4.278050 -2.136157 1.011549
H 5.278864 -0.938126 0.123086
H 4.242182 -0.426087 1.507745
C -2.929666 -1.952887 1.775591
H -3.899884 -1.933317 2.283329
H -2.734870 -2.961641 1.393941
H -2.128593 -1.662828 2.466176
C -3.159936 0.858597 1.133294
H -3.173341 1.594766 0.322164
H -4.103225 0.896909 1.689559
H -2.307904 1.051275 1.796637
C -4.333115 -1.104222 -0.651076
H -5.278760 -0.939065 -0.122320
H -4.242302 -0.427243 -1.507224
H -4.277798 -2.137166 -1.010524
Ge 0.000251 -2.254861 -0.000397

³VII_{Ge}

E = -4407.32392771
C -0.406397 1.698335 -0.570550
C 0.407133 1.698167 0.570661
C 0.785593 2.917238 1.135138
C 0.393030 4.123839 0.572851
C -0.391169 4.124017 -0.572709
C -0.784293 2.917598 -1.135008
H 1.416215 2.892558 2.020182
H 0.705022 5.060088 1.031412
H -0.702721 5.060413 -1.031268
H -1.414926 2.893228 -2.020049
S -1.006697 0.260622 -1.531362
S 1.006801 0.260226 1.531450
O -2.222004 0.795241 -2.178337
O 0.132718 -0.125303 -2.377198
O -0.132810 -0.125331 2.377200

O 2.222267 0.794421 2.178484
 C -1.436143 -0.982168 -0.464418
 C 1.435787 -0.982576 0.464359
 P 2.887315 -0.758006 -0.432141
 P -2.887682 -0.757275 0.432018
 C 2.902062 -1.891381 -1.830025
 H 3.822849 -1.752714 -2.407615
 H 2.834963 -2.924358 -1.474919
 H 2.020201 -1.657221 -2.438778
 C 3.067867 0.902641 -1.131526
 H 3.076371 1.628831 -0.311941
 H 4.001927 0.973264 -1.700321
 H 2.203910 1.079487 -1.782740
 C 4.372666 -1.037784 0.562211
 H 4.377225 -2.077304 0.906165
 H 5.288734 -0.820767 0.001359
 H 4.286586 -0.379221 1.433797
 C -2.902778 -1.890811 1.829768
 H -3.823623 -1.752040 2.407243
 H -2.835820 -2.923756 1.474545
 H -2.020968 -1.656878 2.438692
 C -3.068049 0.903322 1.131566
 H -3.076554 1.629577 0.312040
 H -4.002077 0.973977 1.700409
 H -2.204047 1.080036 1.782728
 C -4.373016 -1.036670 -0.562466
 H -5.289076 -0.819477 -0.001665
 H -4.286744 -0.378116 -1.434034
 H -4.377773 -2.076186 -0.906433
 Ge -0.000344 -2.161018 0.000042

VIII^{Ge}

E = -3615.37576050
 C 0.899993 3.090074 0.257686
 C 0.285822 1.855281 0.356072
 C -0.892376 1.469679 -0.292192
 C -1.465338 2.429197 -1.132724

C -0.883421 3.689109 -1.255905
 C 0.281504 4.029257 -0.563437
 H 1.813061 3.316100 0.805758
 H -2.380244 2.197204 -1.676976
 H -1.351493 4.432906 -1.899015
 H 0.704542 5.026417 -0.665402
 B -1.256983 -0.045553 0.068300
 S 0.893150 0.403829 1.150487
 O 1.791302 0.641101 2.284473
 O -0.497066 -0.206955 1.458178
 C 1.500864 -0.618158 -0.076309
 C -2.765191 -0.516648 0.182469
 C -3.787103 0.402227 0.458724
 C -3.141779 -1.857543 0.032586
 C -5.115866 0.007022 0.574304
 H -3.533184 1.453705 0.592529
 C -4.464935 -2.267477 0.152332
 H -2.376069 -2.603291 -0.188353
 C -5.459320 -1.332203 0.421237
 H -5.887129 0.745678 0.788764
 H -4.723447 -3.318411 0.030407
 H -6.498132 -1.646414 0.510378
 P 3.191696 -0.909288 -0.048038
 C 4.190799 0.602847 -0.014679
 H 5.262232 0.373751 -0.011341
 H 3.940612 1.214913 -0.887713
 H 3.928603 1.150696 0.897471
 C 3.652439 -1.832334 -1.524725
 H 3.415961 -1.233052 -2.409652
 H 4.721252 -2.071291 -1.502268
 H 3.058535 -2.751212 -1.566128
 C 3.730523 -1.870003 1.388232
 H 3.404435 -1.320633 2.278455
 H 3.227085 -2.842172 1.368148
 H 4.817526 -2.008095 1.402035
 Ge 0.088168 -1.245816 -1.238096

³VIII^{Ge}

E = -3615.34098822

C 0.822298 3.358010 0.511379

C 0.286155 2.086062 0.563048

C -0.990949 1.718847 0.111745

C -1.779823 2.757344 -0.407586

C -1.281719 4.052385 -0.452858

C 0.005232 4.362098 0.001407

H 1.831684 3.560156 0.863022

H -2.790131 2.556390 -0.757009

H -1.910065 4.850702 -0.844153

H 0.365449 5.387522 -0.041257

B -1.241534 0.195413 0.428086

S 1.150956 0.613843 0.985711

O 2.009432 0.651001 2.170984

O -0.210121 -0.216923 1.353725

C 1.733830 -0.032320 -0.412269

C -2.531175 -0.657904 0.366855

C -3.556261 -0.412079 -0.561321

C -2.709368 -1.721979 1.265537

C -4.707324 -1.187352 -0.587001

H -3.436434 0.384682 -1.294562

C -3.860056 -2.499027 1.245395

H -1.926018 -1.929215 1.993150

C -4.864826 -2.233684 0.319113

H -5.485758 -0.980484 -1.319683

H -3.977771 -3.315973 1.955830

H -5.767402 -2.842179 0.300105

P 2.845331 -1.315521 -0.138883

C 4.402062 -0.761219 0.597298

H 5.079267 -1.605861 0.766578

H 4.868282 -0.035504 -0.076894

H 4.164620 -0.266292 1.544317

C 3.258554 -2.078179 -1.719414

H 3.664714 -1.311641 -2.387364

H 3.995086 -2.875602 -1.571640

H 2.343948 -2.487404 -2.163198

C 2.207452 -2.624201 0.941196
H 1.984537 -2.167771 1.913067
H 1.270724 -2.992631 0.507517
H 2.920799 -3.446408 1.066460
Ge 0.153685 -0.305676 -1.724239

IX^{Ge}

E = -3066.14845830
C -1.725874 2.303321 0.051779
C 0.470460 1.296584 0.252375
C 1.010075 2.572508 0.423356
C 0.209630 3.714765 0.413119
C -1.155842 3.566480 0.213335
H -2.803903 2.244411 -0.090165
H 2.083134 2.674267 0.584353
H 0.644201 4.701775 0.556598
H -1.799552 4.445344 0.190890
B 1.246611 -0.041750 0.233156
C 2.769726 -0.205158 0.008567
C 3.531756 0.700904 -0.754042
C 3.443578 -1.315573 0.550231
C 4.893249 0.514038 -0.953378
H 3.036747 1.553543 -1.216335
C 4.811764 -1.487724 0.387178
H 2.870992 -2.053009 1.112343
C 5.538695 -0.573946 -0.370801
H 5.458054 1.219980 -1.560231
H 5.311910 -2.345881 0.832970
H 6.608227 -0.715986 -0.518106
C -0.939508 1.143902 0.089725
C -1.428794 -0.241463 0.006831
P -3.095534 -0.594546 -0.222691
C -4.217375 -0.009326 1.092702
H -4.110584 1.070965 1.227894
H -5.261881 -0.247813 0.861360
H -3.924381 -0.500824 2.026598
C -3.807994 0.058869 -1.767787

H -4.874880 -0.179015 -1.847107
H -3.670708 1.143405 -1.815101
H -3.265010 -0.390879 -2.605777
C -3.401861 -2.373067 -0.301129
H -4.474615 -2.549891 -0.437969
H -2.836918 -2.805244 -1.132380
H -3.053902 -2.843664 0.623513
Ge -0.179596 -1.665164 0.291527

³¹X_{Ge}

E = -3066.12322495
C 1.794585 2.265960 -0.145396
C -0.420822 1.236773 -0.145869
C -0.963162 2.528305 -0.306190
C -0.166913 3.660504 -0.349712
C 1.220322 3.522252 -0.258586
H 2.881709 2.196135 -0.110814
H -2.043145 2.634614 -0.397829
H -0.615863 4.646039 -0.456369
H 1.859814 4.403278 -0.292100
B -1.317464 -0.006738 -0.104221
C -2.839751 -0.216282 0.016799
C -3.632245 0.659808 0.783788
C -3.497534 -1.292076 -0.607584
C -5.004119 0.479026 0.906439
H -3.155690 1.487699 1.306467
C -4.868463 -1.472027 -0.494739
H -2.910764 -1.996490 -1.196941
C -5.629518 -0.584921 0.263247
H -5.589897 1.170400 1.510395
H -5.349327 -2.310346 -0.996455
H -6.704906 -0.726595 0.356723
C 1.011307 1.097592 -0.092894
C 1.535490 -0.252008 -0.019779
P 3.179387 -0.644617 0.186538
C 4.303716 -0.161192 -1.165297
H 4.255790 0.921610 -1.316904

H 5.337798 -0.454819 -0.950372
H 3.961107 -0.649626 -2.083675
C 3.935856 0.048131 1.689593
H 5.000853 -0.201807 1.755029
H 3.813445 1.135828 1.690219
H 3.402758 -0.355223 2.556768
C 3.382919 -2.435668 0.328493
H 4.439372 -2.685310 0.473109
H 2.797231 -2.799041 1.179237
H 3.014550 -2.915979 -0.584100
Ge 0.110365 -1.509452 -0.222914

3.3.3 Koordinaten der Stannylene

3.3.3.1 Koordinaten mit Bisylidsubstitution

Y_2Sn

E = -3796.60415202
Sn -0.052882 -0.019635 -1.748421
O -1.084867 -2.157203 -0.831607
C -1.728924 0.160684 -0.273968
C 1.725332 -0.244079 -0.353312
O 0.901374 2.051574 -0.795756
S -2.163284 -1.431650 -0.066590
C -3.680449 -1.747378 -0.963375
O -2.435555 -1.888388 1.309064
P -2.471894 1.416004 0.576551
C -4.247410 1.107735 0.822567
C -2.257085 2.927323 -0.401691
C -1.799590 1.751340 2.222986
C 4.003726 1.143970 -2.007469
H 3.437605 0.282635 -2.357230
C 3.537752 1.865744 -0.915893
C 5.202265 1.505171 -2.604942
S 2.035116 1.367320 -0.071217
C 4.253220 2.952339 -0.429303
C -5.948274 -2.516377 -1.018214
H -6.797914 -2.975985 -0.514502

C -4.754103 -2.343788 -0.323748
 C -6.082058 -2.099860 -2.341103
 H -4.644347 -2.648793 0.713925
 C -3.780456 -1.337400 -2.290025
 O 2.263637 1.793714 1.323269
 C -4.974286 -1.514236 -2.968469
 C -7.380129 -2.250805 -3.076007
 H 5.573346 0.929283 -3.451915
 C 5.949389 2.585490 -2.126919
 C 7.268521 2.935082 -2.747474
 C 5.449498 3.306726 -1.040186
 P 2.542590 -1.466941 0.487376
 C 2.224011 -3.038023 -0.353742
 C 1.994772 -1.731494 2.197477
 C 4.344423 -1.221252 0.517544
 H -2.924278 -0.871375 -2.778165
 H -5.054888 -1.191883 -4.006139
 H -7.865124 -1.275903 -3.222472
 H -8.079751 -2.889899 -2.527411
 H -7.229129 -2.686000 -4.071329
 C -4.666964 0.383062 1.941219
 C -5.165114 1.423082 -0.182376
 H -3.946360 0.099075 2.704793
 C -6.000067 0.007409 2.063049
 C -6.913640 0.336251 1.068058
 H -7.955601 0.036720 1.164694
 C -6.493359 1.037823 -0.058063
 H -6.322686 -0.553712 2.937907
 H -7.203444 1.287714 -0.843885
 H -4.840767 1.972311 -1.063775
 C -1.895223 4.140596 0.181367
 C -2.399380 2.839292 -1.789906
 H -1.747413 4.206728 1.256552
 C -1.694159 5.260183 -0.617337
 H -1.401050 6.202456 -0.158924
 C -1.847076 5.173213 -1.996301
 H -1.679046 6.050124 -2.618693

C -2.199574 3.961807 -2.582602
 H -2.306445 3.886769 -3.662838
 C -1.870148 2.735226 4.418810
 H -2.395303 3.306296 5.182302
 C -0.587342 2.246061 4.670450
 C -2.478830 2.494772 3.194683
 H -0.114925 2.441847 5.631600
 C 0.086484 1.513813 3.701960
 H 1.091754 1.135345 3.875289
 C -0.525403 1.258904 2.480117
 H -0.016266 0.678803 1.716090
 H -2.650970 1.880366 -2.241368
 H -3.481046 2.873604 2.996786
 H 8.047860 2.228526 -2.429741
 H 7.595805 3.939362 -2.458692
 H 7.221732 2.891185 -3.841903
 H 6.015603 4.155448 -0.657759
 H 3.877361 3.488956 0.438681
 C 2.196936 -4.236187 0.361152
 C 2.022423 -3.048479 -1.734974
 H 2.341314 -4.229861 1.439661
 C 1.965122 -5.434236 -0.303209
 H 1.936224 -6.365726 0.258378
 C 1.756183 -5.440681 -1.678367
 C 1.784991 -4.248084 -2.393176
 H 1.613298 -4.249022 -3.467453
 H 1.562849 -6.379336 -2.194217
 H 2.042920 -2.111849 -2.288265
 C 2.826062 -1.764549 3.316771
 C 0.618517 -1.916846 2.342443
 H 3.901409 -1.641049 3.210755
 C 2.268115 -1.962632 4.577339
 H 2.913006 -1.980913 5.454022
 C 0.894839 -2.140125 4.718254
 C 4.870983 -0.135252 1.227351
 C 5.184689 -1.990806 -0.289780
 H -0.026323 -1.896317 1.467866

C 0.068034 -2.124295 3.597559
H -1.008698 -2.257929 3.677194
H 0.468124 -2.292095 5.708204
H 4.213774 0.491178 1.828333
C 6.221196 0.173290 1.121533
H 6.620243 1.027865 1.664112
C 7.053638 -0.592164 0.310959
H 8.109633 -0.342553 0.224825
C 6.534766 -1.674783 -0.390945
H 7.183107 -2.277321 -1.024212
H 4.781379 -2.833014 -0.848386

³Y₂Sn

E = -3796.52238437
Sn -0.042900 -0.200585 -1.510317
O -1.447040 -2.515438 0.293138
C -1.799740 -0.016442 -0.294597
C 1.801247 -0.124285 -0.405107
O 1.250978 2.404098 -0.226209
S -2.343885 -1.386096 0.569780
C -3.939377 -1.834436 -0.100718
O -2.595984 -1.011718 1.979342
P -2.471036 1.511554 0.116857
C -4.265862 1.442220 0.443760
C -2.174455 2.616272 -1.289349
C -1.791094 2.315734 1.588491
C 4.328958 1.320412 -1.590581
H 3.717102 0.618906 -2.154759
C 3.827129 1.868015 -0.417725
C 5.619259 1.635352 -1.992979
S 2.222631 1.401884 0.230681
C 4.592978 2.750912 0.334537
C -6.261533 -2.330890 0.209812
H -7.115059 -2.460451 0.874407
C -5.020358 -2.011152 0.748619
C -6.437778 -2.472180 -1.166696
H -4.877053 -1.877741 1.818037

C -4.079171 -1.995660 -1.475382
 O 2.462542 1.294182 1.689994
 C -5.324071 -2.308117 -1.998854
 C -7.791645 -2.755757 -1.745040
 H 6.021408 1.185830 -2.900193
 C 6.418132 2.503365 -1.244126
 C 7.833780 2.779188 -1.651919
 C 5.877186 3.067773 -0.086376
 P 2.539645 -1.525675 0.272180
 C 2.045603 -2.927015 -0.759344
 C 2.052669 -1.916592 1.971056
 C 4.359682 -1.445108 0.296889
 H -3.213438 -1.861393 -2.122309
 H -5.439055 -2.429089 -3.075564
 H -8.309148 -1.820644 -2.002753
 H -8.428102 -3.293852 -1.034153
 H -7.722219 -3.350923 -2.662450
 C -4.709975 1.252093 1.755467
 C -5.194233 1.459907 -0.599860
 H -3.987723 1.193283 2.565403
 C -6.067778 1.112162 2.016861
 C -6.988551 1.142415 0.975931
 H -8.051050 1.029081 1.183445
 C -6.548900 1.309334 -0.333493
 H -6.404752 0.969337 3.041716
 H -7.263773 1.327051 -1.153800
 H -4.866144 1.601770 -1.625634
 C -1.532771 3.842487 -1.127912
 C -2.541424 2.187070 -2.571387
 H -1.182888 4.150321 -0.146435
 C -1.286676 4.644736 -2.237710
 H -0.767501 5.591938 -2.108545
 C -1.681357 4.231991 -3.503479
 H -1.485105 4.863509 -4.367972
 C -2.308934 2.999400 -3.670840
 H -2.598776 2.662393 -4.664068
 C -1.819518 4.051638 3.258158

H -2.285190 4.932180 3.696811
 C -0.649366 3.529617 3.809497
 C -2.392391 3.449681 2.146608
 H -0.202318 4.009233 4.678657
 C -0.050714 2.408096 3.251049
 H 0.878366 2.004570 3.644751
 C -0.627622 1.799427 2.143014
 H -0.159945 0.932223 1.691850
 H -2.982330 1.199677 -2.702363
 H -3.308310 3.853900 1.716801
 H 8.485601 1.938577 -1.374057
 H 8.227200 3.676962 -1.163628
 H 7.923096 2.910735 -2.736503
 H 6.482109 3.753167 0.506392
 H 4.187214 3.152649 1.260234
 C 1.390395 -4.026550 -0.210651
 C 2.273048 -2.866786 -2.140740
 H 1.169600 -4.056343 0.853019
 C 0.970599 -5.063147 -1.038475
 H 0.437032 -5.908065 -0.609053
 C 1.214269 -5.011416 -2.404163
 C 1.870407 -3.912892 -2.956668
 H 2.051450 -3.864779 -4.028519
 H 0.882800 -5.824844 -3.046890
 H 2.754376 -1.989002 -2.570059
 C 2.886654 -2.612287 2.848887
 C 0.768405 -1.552767 2.367655
 H 3.890341 -2.901304 2.542873
 C 2.427421 -2.928675 4.122013
 H 3.076980 -3.463640 4.812275
 C 1.140702 -2.565096 4.513331
 C 4.965706 -0.585797 1.221636
 C 5.146991 -2.100221 -0.652086
 H 0.123361 -1.029537 1.671553
 C 0.306622 -1.881828 3.634207
 H -0.709483 -1.606491 3.907628
 H 0.787063 -2.820736 5.510741

H 4.352408 -0.064064 1.954122
 C 6.335487 -0.364438 1.169000
 H 6.794353 0.321664 1.877897
 C 7.113397 -1.003215 0.208768
 H 8.186356 -0.823033 0.167794
 C 6.519100 -1.878014 -0.693768
 H 7.124957 -2.393971 -1.436117
 H 4.694955 -2.790776 -1.359088

^{cy}Y₂Sn

E = -2371.49531249
 Sn -0.941752 -2.860154 -0.201223
 O 0.702018 -2.478388 -1.788157
 Cl 0.599129 -3.446442 1.686378
 S 0.793845 -0.960150 -1.634724
 C -0.297122 -0.715609 -0.401769
 C 2.471080 -0.656987 -1.106608
 O 0.640808 -0.171936 -2.866190
 P -0.901199 0.803157 0.078289
 C 3.270686 0.195256 -1.852948
 C 2.936825 -1.242610 0.067799
 C 0.282807 2.170904 -0.281854
 C -1.337831 0.656931 1.854654
 C -2.469033 1.247215 -0.790994
 C 4.554263 0.486380 -1.400147
 C 4.216672 -0.940134 0.501818
 C 1.458444 2.198222 0.697802
 C -0.338817 3.563997 -0.406970
 C -0.235875 0.060813 2.731900
 C -1.935083 1.915312 2.479934
 C -2.217028 1.236926 -2.300013
 C -3.605160 0.291550 -0.425531
 C 5.044493 -0.067435 -0.218102
 C 2.507768 3.206280 0.250484
 C 0.713932 4.586836 -0.822667
 C -0.793748 -0.251931 4.113912
 C -2.471733 1.610349 3.874530

C -3.483261 1.546112 -3.085306
 C -4.865099 0.579144 -1.234145
 C 6.426406 0.244188 0.271376
 C 1.906995 4.597698 0.121431
 C -1.404881 0.983245 4.762455
 C -4.594829 0.570230 -2.730881
 H 2.877306 0.621888 -2.772587
 H 2.296326 -1.918299 0.635497
 H 0.669106 1.879013 -1.273552
 H -2.134644 -0.105349 1.807446
 H -2.746884 2.262682 -0.469695
 H 5.186434 1.159761 -1.977625
 H 4.585037 -1.391652 1.422230
 H 1.897065 1.200266 0.808557
 H 1.083771 2.497640 1.687555
 H -0.778518 3.859438 0.557066
 H -1.152284 3.567457 -1.140251
 H 0.172291 -0.842875 2.266259
 H 0.590698 0.774313 2.833726
 H -1.152049 2.685005 2.552126
 H -2.732051 2.332837 1.849461
 H -1.836335 0.246465 -2.581750
 H -1.413887 1.935508 -2.567828
 H -3.839220 0.358592 0.644609
 H -3.271604 -0.741090 -0.617409
 H 2.917962 2.888767 -0.718334
 H 3.347130 3.205803 0.957456
 H 1.059388 4.340788 -1.838028
 H 0.256767 5.582828 -0.882423
 H -0.000889 -0.669812 4.746231
 H -1.557702 -1.039067 4.022295
 H -3.321192 0.916311 3.781814
 H -2.867479 2.526122 4.332127
 H -3.266353 1.510860 -4.160128
 H -3.814967 2.573011 -2.865908
 H -5.642698 -0.150753 -0.975184
 H -5.256098 1.566336 -0.943472

H 6.409078 0.605672 1.307059
H 7.059521 -0.652599 0.256583
H 6.910271 1.006541 -0.347587
H 1.581695 4.946439 1.113888
H 2.661389 5.314369 -0.227317
H -1.828052 0.735747 5.744388
H -0.610336 1.723350 4.945059
H -5.511764 0.807820 -3.285069
H -4.295193 -0.442552 -3.039478

$^3(\text{CyY})_2\text{Sn}$

E = -2371.41054621
Sn -1.811460 -2.516443 -0.438237
O 0.306514 -1.818519 -2.965991
Cl -0.051142 -3.710116 0.946643
S 0.613212 -0.616184 -2.205669
C -0.392834 -0.627385 -0.755215
C 2.241707 -0.752563 -1.515805
O 0.541892 0.692955 -2.883042
P -0.569825 0.867717 0.179959
C 3.215710 0.162591 -1.894312
C 2.508201 -1.761238 -0.591495
C 0.784271 2.115506 -0.005871
C -0.806183 0.318326 1.904775
C -2.131436 1.696664 -0.346120
C 4.476360 0.077084 -1.317723
C 3.765739 -1.810811 -0.008961
C 1.998154 1.804615 0.875426
C 0.319889 3.559509 0.215772
C 0.303489 -0.581639 2.450074
C -1.180571 1.412974 2.899965
C -2.108503 1.958973 -1.853237
C -3.400893 0.956191 0.069507
C 4.767504 -0.897318 -0.358820
C 3.130302 2.782994 0.594192
C 1.464022 4.540432 -0.018141
C -0.188748 -1.242979 3.729195

C -1.645389 0.766535 4.202401
 C -3.352990 2.715516 -2.294007
 C -4.640749 1.713719 -0.392096
 C 6.128333 -0.985668 0.261756
 C 2.683486 4.216631 0.830313
 C -0.607835 -0.201718 4.759133
 C -4.619154 1.975341 -1.890484
 H 2.968777 0.933395 -2.621788
 H 1.739790 -2.484003 -0.312309
 H 1.073543 2.005778 -1.061682
 H -1.681837 -0.341563 1.764012
 H -2.115092 2.658725 0.188367
 H 5.248432 0.788999 -1.606664
 H 3.973634 -2.581840 0.731570
 H 2.335980 0.770924 0.736142
 H 1.707597 1.907072 1.930194
 H -0.061945 3.673446 1.242042
 H -0.501906 3.811341 -0.462501
 H 0.571919 -1.347820 1.713883
 H 1.200518 0.008465 2.669593
 H -0.304268 2.049418 3.094908
 H -1.965592 2.069972 2.500736
 H -2.052270 0.995308 -2.378295
 H -1.197093 2.492937 -2.147267
 H -3.435455 0.819016 1.157068
 H -3.397849 -0.053048 -0.365550
 H 3.454997 2.667820 -0.449195
 H 3.996357 2.531390 1.219331
 H 1.744134 4.503155 -1.081358
 H 1.113461 5.562071 0.175771
 H 0.595149 -1.894862 4.133140
 H -1.031795 -1.902775 3.477028
 H -2.581491 0.222439 4.005951
 H -1.884250 1.542981 4.940389
 H -3.321330 2.869132 -3.379584
 H -3.352956 3.717273 -1.836369
 H -5.537157 1.148019 -0.109261

H -4.696443 2.674115 0.143749
H 6.064864 -1.194253 1.335817
H 6.707940 -1.801965 -0.190347
H 6.696525 -0.060301 0.121670
H 2.435512 4.351262 1.894440
H 3.497997 4.917860 0.609487
H -0.997655 -0.687359 5.662711
H 0.279772 0.369336 5.073653
H -5.509659 2.540900 -2.192205
H -4.661021 1.015336 -2.426138

(^{Cy}Y_F)₂Sn

E = -5380.70473208
Sn -0.014194 0.117361 -1.461782
C -1.429621 1.189014 -0.016792
C 1.254751 -1.096900 0.027881
O -2.069885 -1.113190 -0.713284
S 2.371141 0.044865 0.360869
P 1.256657 -2.725433 0.580572
C 1.626217 -3.902960 -0.785843
C 0.521450 -3.920425 -1.843326
C 2.975526 -3.574208 -1.420555
C 0.867035 -4.864450 -2.989035
C 2.219762 -4.541868 -3.605564
C 3.313138 -4.540299 -2.547713
C 2.549406 -2.981169 1.863137
C 3.083842 -4.402192 2.042764
C 2.142271 -2.390718 3.214647
C 3.348140 -2.339022 4.138919
C 3.947526 -3.726781 4.324955
C 4.281741 -4.376698 2.988608
C -0.423585 -3.179034 1.149732
C -1.045749 -2.195544 2.136250
C -0.522152 -4.620262 1.649587
C -2.493195 -2.580638 2.408622
C -2.597906 -4.005980 2.928850
C -1.971124 -4.986487 1.948270

C 3.867190 -0.066066 -0.768138
 F 4.646613 -1.077401 -0.344919
 F 3.448115 -0.340485 -2.011421
 C 4.695932 1.237193 -0.838056
 F 4.753562 1.830498 0.352714
 F 4.113807 2.067069 -1.714182
 C 6.146778 0.982206 -1.313354
 S -2.665908 0.128876 -0.092721
 P -1.387894 2.589973 0.981791
 C 6.861392 2.255083 -1.822039
 F 6.652220 3.265002 -0.990706
 F 6.423966 2.583418 -3.024527
 F 8.162576 2.020264 -1.890582
 F 6.138136 0.094647 -2.315743
 F 6.856275 0.492773 -0.295655
 C -4.693442 4.895629 2.186403
 C -3.254197 4.389824 2.202371
 C -5.051178 5.550859 0.859637
 C -4.778141 4.615813 -0.310196
 C -3.336284 4.128385 -0.290750
 C -3.023772 3.428728 1.034152
 C -0.057361 3.678658 0.350458
 C 0.078659 5.021839 1.067016
 C -0.022794 3.867575 -1.166410
 C 1.391226 5.685999 0.663610
 C 1.495149 5.846294 -0.847207
 C 1.295107 4.518504 -1.565825
 C -0.929792 2.222817 2.724652
 C 0.435287 1.544109 2.806996
 C -1.979055 1.347422 3.410518
 C -1.599527 1.079064 4.861302
 C -0.223869 0.435458 4.968448
 C 0.829956 1.263356 4.249517
 C -3.857243 0.581348 -1.474709
 F -3.142348 1.118425 -2.476627
 F -4.713154 1.508292 -1.023666
 C -4.677496 -0.568827 -2.100327

F -5.564673 0.006948 -2.938711
 C -5.484396 -1.447048 -1.119109
 F -3.870494 -1.347466 -2.816736
 O -3.598294 -0.020324 1.032108
 O 3.018984 0.106806 1.675965
 O 1.796720 1.317886 -0.213721
 F -6.090252 -0.679088 -0.212358
 F -4.662899 -2.305725 -0.512338
 C -6.586786 -2.280704 -1.819671
 F -7.626121 -1.522013 -2.118790
 F -6.983246 -3.237912 -0.994426
 F -6.123629 -2.839708 -2.928004
 H 1.680641 -4.898271 -0.318566
 H -0.437313 -4.217100 -1.402590
 H 0.386230 -2.899683 -2.234309
 H 0.075601 -4.824988 -3.747890
 H 0.880758 -5.896917 -2.607105
 H 2.455533 -5.256685 -4.404150
 H 2.175378 -3.548790 -4.077384
 H 4.279191 -4.266755 -2.990161
 H 3.431463 -5.556122 -2.139902
 H 2.922071 -2.556858 -1.824521
 H 3.773737 -3.564738 -0.667674
 H 3.373525 -2.362924 1.475169
 H 1.714694 -1.392294 3.077437
 H 1.369015 -3.031695 3.663242
 H 4.090215 -1.655781 3.701025
 H 3.059257 -1.911332 5.107704
 H 4.844324 -3.679363 4.955741
 H 3.224193 -4.360447 4.861262
 H 4.657300 -5.396804 3.140383
 H 5.094090 -3.813156 2.505679
 H -1.016281 -3.077590 0.227958
 H 3.385852 -4.840016 1.084509
 H 2.297947 -5.050705 2.454983
 H -0.974159 -1.183257 1.721478
 H -0.489895 -2.200054 3.080234

H -2.939421 -1.868502 3.113971
 H -3.067796 -2.482087 1.480284
 H 0.070877 -4.723916 2.570599
 H -0.098973 -5.322594 0.919033
 H -2.542973 -4.970960 1.008529
 H -2.023264 -6.013484 2.332358
 H -2.083059 -4.086428 3.899453
 H -3.647310 -4.270549 3.110299
 H -4.850152 5.595838 3.016941
 H -5.366936 4.043797 2.363748
 H -6.102320 5.866203 0.862860
 H -4.452343 6.466746 0.737237
 H -4.989643 5.118107 -1.262692
 H -5.449008 3.747268 -0.257153
 H -3.129338 3.465664 -1.139102
 H -2.668209 4.995791 -0.393794
 H 0.828481 3.075414 0.588414
 H 0.037928 4.899800 2.157199
 H -0.760157 5.677038 0.788619
 H 1.486888 6.659302 1.162033
 H 2.225493 5.064809 1.021775
 H 0.727493 6.559865 -1.185451
 H 2.464971 6.284635 -1.115035
 H 2.114596 3.829573 -1.317953
 H 1.323579 4.664662 -2.653106
 H -0.139467 2.904882 -1.675889
 H -0.860157 4.496405 -1.495937
 H -0.883616 3.199355 3.233201
 H -2.979664 1.792429 3.350579
 H -2.050297 0.401166 2.861927
 H -1.603263 2.027782 5.420537
 H -2.360558 0.440388 5.328092
 H -0.262179 -0.564141 4.512443
 H 0.051187 0.287800 6.020911
 H 1.804613 0.758985 4.259164
 H 0.967363 2.219153 4.778634
 H 1.221080 2.132755 2.323762

H 0.373871 0.598740 2.247776
H -3.045777 3.906837 3.163051
H -2.565510 5.242427 2.121048
H -3.715024 2.576748 1.147817

$^3(\text{CyY}_F)_2\text{Sn}$

E = -5380.62374787
Sn 0.032936 0.126606 -1.034741
C -1.680796 0.923541 0.027191
C 1.572078 -0.847813 0.142529
O -2.625251 -1.489090 -0.236168
S 2.804869 0.171329 0.641916
P 1.500104 -2.573987 0.376709
C 1.589606 -3.511109 -1.212945
C 0.309354 -3.516485 -2.047193
C 2.784979 -3.034763 -2.035591
C 0.494631 -4.343868 -3.313288
C 1.683576 -3.864942 -4.133157
C 2.956355 -3.865475 -3.299705
C 2.930189 -3.170394 1.382990
C 3.393141 -4.604455 1.117356
C 2.725528 -2.939498 2.882977
C 4.024471 -3.195794 3.631347
C 4.527765 -4.609698 3.382644
C 4.677278 -4.885069 1.893847
C -0.123865 -3.033874 1.097175
C -0.542700 -2.186384 2.297341
C -0.245016 -4.534630 1.366012
C -1.922545 -2.585965 2.811239
C -2.025130 -4.081345 3.071952
C -1.655998 -4.876313 1.828534
C 4.126067 0.186097 -0.686798
F 4.828528 -0.958602 -0.613079
F 3.541969 0.251709 -1.888675
C 5.087171 1.386726 -0.551862
F 5.355958 1.620399 0.731535
F 4.508228 2.467778 -1.089433

C 6.430545 1.148159 -1.283261
 S -3.008420 -0.093667 0.015901
 P -1.665134 2.430558 0.910009
 C 7.210232 2.452960 -1.563282
 F 7.197146 3.232513 -0.492681
 F 6.674718 3.102284 -2.581735
 F 8.464862 2.152994 -1.860159
 F 6.200499 0.548998 -2.458322
 F 7.199909 0.360916 -0.530795
 C -4.956703 4.823210 1.932917
 C -3.544165 4.254290 2.033263
 C -5.213152 5.506331 0.597020
 C -4.895008 4.580174 -0.568413
 C -3.469606 4.058105 -0.462147
 C -3.277578 3.311200 0.858487
 C -0.280198 3.403651 0.216315
 C 0.100635 4.663296 0.993417
 C -0.302295 3.707348 -1.283609
 C 1.505361 5.086712 0.569128
 C 1.604215 5.299111 -0.936498
 C 1.109587 4.085998 -1.715086
 C -1.229966 2.182481 2.683576
 C 0.210610 1.699452 2.841063
 C -2.205362 1.221421 3.361170
 C -1.848330 1.016066 4.826575
 C -0.422606 0.506909 4.979510
 C 0.567180 1.438684 4.298480
 C -3.984501 0.288746 -1.535533
 F -3.126198 0.442255 -2.554232
 F -4.642308 1.443757 -1.365244
 C -4.999899 -0.789242 -1.973286
 F -5.703970 -0.262231 -2.995861
 C -6.014449 -1.237582 -0.898073
 F -4.339777 -1.853368 -2.422531
 O -3.985464 0.198924 1.075447
 O 3.539717 -0.287864 1.823629
 O 2.380868 1.578489 0.582233

F -6.497156 -0.167508 -0.260519
 F -5.411796 -2.048514 -0.031131
 C -7.227178 -1.998607 -1.489096
 F -8.068509 -1.158090 -2.065707
 F -7.857173 -2.623134 -0.506252
 F -6.832353 -2.896063 -2.380346
 H 1.770962 -4.548077 -0.893129
 H -0.536012 -3.907365 -1.469704
 H 0.039934 -2.484384 -2.317387
 H -0.425914 -4.310479 -3.909128
 H 0.647499 -5.398491 -3.035331
 H 1.808790 -4.488549 -5.027401
 H 1.487671 -2.842487 -4.489925
 H 3.802527 -3.480319 -3.882360
 H 3.212125 -4.900322 -3.023968
 H 2.621384 -1.982566 -2.304823
 H 3.703214 -3.053498 -1.434857
 H 3.736931 -2.498143 1.061362
 H 2.383730 -1.916533 3.060289
 H 1.950693 -3.626706 3.252401
 H 4.767745 -2.459577 3.292415
 H 3.875836 -3.021649 4.704525
 H 5.483394 -4.777341 3.895559
 H 3.813431 -5.328286 3.813704
 H 4.991674 -5.922337 1.720847
 H 5.474680 -4.244877 1.487797
 H -0.823439 -2.768289 0.289811
 H 3.586140 -4.767490 0.051461
 H 2.611930 -5.318795 1.415072
 H -0.547151 -1.132966 1.992429
 H 0.187520 -2.281814 3.109088
 H -2.141550 -2.025154 3.729644
 H -2.679318 -2.289929 2.075698
 H 0.468285 -4.831809 2.148417
 H 0.011949 -5.113841 0.468801
 H -2.365534 -4.639626 1.022229
 H -1.733936 -5.954716 2.017341

H -1.347663 -4.363511 3.893596
 H -3.039309 -4.338707 3.402183
 H -5.134783 5.519630 2.762302
 H -5.672029 3.997088 2.059300
 H -6.252983 5.852833 0.542591
 H -4.581670 6.405246 0.523222
 H -5.032794 5.101825 -1.523984
 H -5.588817 3.727304 -0.571395
 H -3.218849 3.417481 -1.314804
 H -2.778859 4.913165 -0.484373
 H 0.537219 2.678465 0.363136
 H 0.074740 4.496353 2.076938
 H -0.622921 5.465019 0.777031
 H 1.802292 5.997411 1.105013
 H 2.206265 4.292817 0.866265
 H 1.001374 6.176825 -1.218388
 H 2.640417 5.531143 -1.213606
 H 1.776877 3.230705 -1.533184
 H 1.132167 4.289671 -2.793357
 H -0.671581 2.846887 -1.855420
 H -0.980879 4.542630 -1.493578
 H -1.325127 3.175751 3.149406
 H -3.241251 1.564670 3.252974
 H -2.169063 0.259497 2.836139
 H -1.958807 1.967772 5.369520
 H -2.560305 0.314668 5.280903
 H -0.349654 -0.490712 4.524804
 H -0.167406 0.385319 6.040088
 H 1.585357 1.031126 4.343687
 H 0.589402 2.398291 4.838054
 H 0.921388 2.418445 2.424253
 H 0.343121 0.781438 2.250577
 H -3.434312 3.733793 2.990443
 H -2.808112 5.073096 2.026586
 H -4.006291 2.488863 0.907394

(^{Pip}Y_S)₂Sn

E = -4603.42688044

Sn 0.000117 0.000268 -1.882186

C -1.772411 0.031850 -0.412011

S -0.752513 -2.717972 -1.120954

S 0.752419 2.718360 -1.119729

C 1.772331 -0.031749 -0.411571

P -2.737677 1.377153 -0.147946

P -2.159411 -1.615429 -0.190699

P 2.159405 1.615475 -0.189980

P 2.737856 -1.377023 -0.148261

N -2.380859 2.248194 1.262551

C -4.524773 1.045895 0.061098

C -2.609615 2.476834 -1.595346

C -2.329757 -2.143542 1.551050

C -3.783794 -2.051253 -0.917621

C 3.783630 2.051529 -0.917133

C 2.329953 2.142951 1.551927

N 2.381294 -2.248476 1.262085

C 4.524941 -1.045752 0.060770

C 2.609648 -2.476254 -1.595949

C -3.195419 3.357174 1.733784

C -1.032877 2.226243 1.818782

C -5.391260 1.018876 -1.034341

C -5.024445 0.726712 1.326681

C -2.340999 3.840083 -1.471910

C -2.723027 1.916145 -2.871851

C -2.425907 -1.185076 2.554578

C -2.379004 -3.499397 1.882880

C -4.900852 -2.422881 -0.173458

C -3.885650 -1.951424 -2.308729

C 3.885267 1.951684 -2.308253

C 4.900747 2.423383 -0.173168

C 2.379256 3.498694 1.884230

C 2.425890 1.184126 2.555130

C 1.033044 -2.227289 1.817742

C 3.195959 -3.357460 1.733116

C 5.024592 -0.726815 1.326436
 C 5.391436 -1.018440 -1.034650
 C 2.341009 -3.839539 -1.472847
 C 2.722950 -1.915216 -2.872302
 H -4.187268 3.305998 1.270961
 H -2.749290 4.321334 1.430703
 C -3.295854 3.351491 3.251347
 C -1.062588 2.234020 3.337387
 H -0.466549 3.097892 1.456276
 H -0.517375 1.337682 1.429570
 C -6.729521 0.687640 -0.863057
 H -5.025924 1.265486 -2.027340
 C -6.363735 0.396470 1.495670
 H -4.361998 0.755532 2.186913
 H -2.192299 4.275800 -0.489187
 C -2.207001 4.634105 -2.604087
 C -2.595908 2.713430 -4.003374
 H -2.896178 0.844958 -2.969588
 H -2.333730 -0.134847 2.286625
 C -2.621164 -1.569694 3.878582
 C -2.562191 -3.883879 3.205486
 H -2.264475 -4.244605 1.095826
 H -4.838187 -2.489677 0.910681
 C -6.106033 -2.699048 -0.815252
 C -5.089286 -2.218350 -2.944360
 H -2.998074 -1.685470 -2.884910
 H 2.997657 1.685536 -2.884290
 C 5.088749 2.218809 -2.944098
 C 6.105765 2.699751 -0.815174
 H 4.838226 2.490253 0.910973
 H 2.264859 4.244187 1.097425
 C 2.562281 3.882700 3.206994
 C 2.620964 1.568271 3.879298
 H 2.333635 0.134001 2.286792
 H 0.467157 -3.099023 1.454642
 H 0.517383 -1.338762 1.428686
 C 1.062212 -2.235573 3.336341

C 3.295838 -3.352306 3.250710
 H 4.187966 -3.305803 1.270703
 H 2.750226 -4.321632 1.429464
 H 4.362148 -0.755834 2.186665
 C 6.363860 -0.396542 1.495501
 C 6.729673 -0.687137 -0.863291
 H 5.026126 -1.264890 -2.027698
 H 2.192369 -4.275501 -0.490220
 C 2.206905 -4.633243 -2.605225
 C 2.595713 -2.712189 -4.004035
 H 2.896082 -0.844001 -2.969782
 H -3.829759 2.447214 3.577234
 H -3.893281 4.212600 3.578175
 C -1.906034 3.382449 3.869592
 H -1.465969 1.280834 3.707530
 H -0.032326 2.306541 3.703127
 H -7.391234 0.667548 -1.726525
 C -7.220233 0.378442 0.400929
 H -6.737808 0.156251 2.489162
 C -2.339169 4.073486 -3.869983
 H -1.980110 5.692779 -2.496423
 H -2.680498 2.265843 -4.991561
 H -2.700875 -0.812592 4.657397
 C -2.696731 -2.919260 4.203590
 H -2.602132 -4.940990 3.462273
 H -6.975187 -2.986162 -0.226024
 C -6.203356 -2.597053 -2.196729
 H -5.158824 -2.143394 -4.028221
 H 5.158110 2.143820 -4.027968
 C 6.202875 2.597729 -2.196668
 H 6.974966 2.987066 -0.226112
 H 2.602261 4.939716 3.464161
 C 2.696572 2.917717 4.204787
 H 2.700480 0.810883 4.657858
 H 0.031860 -2.308436 3.701731
 H 1.465286 -1.282404 3.706862
 C 1.905818 -3.383925 3.868476

H 3.829320 -2.447958 3.577099
 H 3.893445 -4.213334 3.577430
 H 6.737920 -0.156539 2.489049
 C 7.220362 -0.378201 0.400764
 H 7.391386 -0.666795 -1.726754
 H 1.980011 -5.691944 -2.497842
 C 2.338978 -4.072273 -3.870985
 H 2.680193 -2.264327 -4.992107
 H -1.419770 4.335671 3.609870
 H -1.964890 3.350461 4.965236
 H -8.269778 0.121344 0.531543
 H -2.226230 4.695847 -4.755724
 H -2.845469 -3.224570 5.237809
 H -7.146713 -2.813283 -2.695165
 H 7.146112 2.814118 -2.695261
 H 2.845159 3.222653 5.239138
 H 1.964301 -3.352262 4.964150
 H 1.419953 -4.337222 3.608285
 H 8.269892 -0.121067 0.531433
 H 2.225954 -4.694394 -4.756884

$^3(^{Pip}Y_S)_2Sn$

E = -4603.33623443
 Sn -0.001308 0.004321 -1.502982
 C 1.866122 0.094309 -0.418691
 S 1.206010 3.000099 -1.128873
 S -1.200034 -2.998729 -1.125154
 C -1.867293 -0.094548 -0.417955
 P 2.671544 -1.386893 -0.257861
 P 2.407807 1.734939 -0.179964
 P -2.406027 -1.736041 -0.178685
 P -2.673777 1.386297 -0.258940
 N 2.191464 -2.304094 1.078886
 C 4.475453 -1.251007 0.024364
 C 2.452545 -2.324830 -1.795389
 C 2.520110 2.129951 1.601621
 C 4.114037 1.964899 -0.781561

C -4.111218 -1.969159 -0.781657
 C -2.519591 -2.128667 1.603393
 N -2.195185 2.304671 1.077696
 C -4.477659 1.248209 0.022751
 C -2.452950 2.323372 -1.796233
 C 2.867346 -3.541920 1.444755
 C 0.860949 -2.174334 1.664866
 C 5.379689 -1.268492 -1.039904
 C 4.959848 -1.076917 1.323828
 C 2.030028 -3.656178 -1.803644
 C 2.722880 -1.683566 -3.015362
 C 2.531463 1.111131 2.550882
 C 2.611696 3.460608 2.016612
 C 5.216944 2.136760 0.054383
 C 4.299361 1.940495 -2.168422
 C -4.295482 -1.945660 -2.168702
 C -5.214720 -2.141238 0.053515
 C -2.610996 -3.458773 2.020188
 C -2.531616 -1.108550 2.551267
 C -0.863272 2.178575 1.661342
 C -2.873151 3.541531 1.442953
 C -4.962510 1.073943 1.322037
 C -5.381383 1.264110 -1.041967
 C -2.027134 3.653929 -1.804271
 C -2.725164 1.683165 -3.016690
 H 3.852807 -3.575610 0.966595
 H 2.298081 -4.410711 1.071078
 C 2.986760 -3.674692 2.955080
 C 0.921431 -2.286198 3.178163
 H 0.200337 -2.954959 1.259170
 H 0.429311 -1.212384 1.357791
 C 6.741252 -1.122241 -0.805170
 H 5.025907 -1.409561 -2.057174
 C 6.322069 -0.930363 1.555526
 H 4.265453 -1.076346 2.159091
 H 1.770442 -4.149870 -0.872932
 C 1.866432 -4.328394 -3.009823

C 2.572349 -2.363169 -4.212669
 H 3.024372 -0.636201 -3.009548
 H 2.401361 0.082088 2.223170
 C 2.681193 1.411094 3.902430
 C 2.749314 3.760098 3.366527
 H 2.561408 4.250676 1.268100
 H 5.086909 2.148917 1.134560
 C 6.487867 2.290319 -0.491690
 C 5.569691 2.081283 -2.707718
 H 3.426346 1.844216 -2.814134
 H -3.422039 -1.848902 -2.813767
 C -5.565313 -2.087582 -2.708881
 C -6.485095 -2.295962 -0.493461
 H -5.085573 -2.152615 1.133802
 H -2.560101 -4.249888 1.272812
 C -2.749061 -3.756467 3.370452
 C -2.681865 -1.406714 3.903159
 H -2.401647 -0.079872 2.222285
 H -0.204522 2.959647 1.253180
 H -0.430476 1.216838 1.355266
 C -0.921326 2.292427 3.174598
 C -2.990427 3.675713 2.953302
 H -3.859455 3.572384 0.966394
 H -2.306652 4.411213 1.067127
 H -4.268569 1.074585 2.157679
 C -6.324659 0.925714 1.553085
 C -6.742886 1.116154 -0.807881
 H -5.027284 1.405313 -2.059101
 H -1.766467 4.146734 -0.873351
 C -1.861148 4.325694 -3.010221
 C -2.571927 2.362528 -4.213690
 H -3.029379 0.636582 -3.011389
 H 3.644542 -2.882432 3.339527
 H 3.465803 -4.632832 3.195115
 C 1.615571 -3.569763 3.605675
 H 1.456577 -1.419890 3.593779
 H -0.100384 -2.250299 3.571063

H 7.434051 -1.136188 -1.643887
 C 7.215910 -0.955194 0.491057
 H 6.684558 -0.800456 2.573515
 C 2.138903 -3.690070 -4.213417
 H 1.506236 -5.355208 -3.005994
 H 2.776910 -1.853783 -5.152421
 H 2.691827 0.607535 4.637419
 C 2.797575 2.735193 4.310409
 H 2.820435 4.798111 3.686555
 H 7.342869 2.425729 0.168342
 C 6.668537 2.261100 -1.869348
 H 5.704063 2.066366 -3.787998
 H -5.698863 -2.073314 -3.789275
 C -6.664716 -2.267655 -1.871281
 H -7.340531 -2.431509 0.165983
 H -2.820009 -4.794064 3.691873
 C -2.798005 -2.730281 4.312921
 H -2.693079 -0.602114 4.637012
 H 0.101231 2.259554 3.565804
 H -1.453558 1.425217 3.592136
 C -1.617941 3.574768 3.601784
 H -3.645647 2.882212 3.339600
 H -3.471387 4.632935 3.193166
 H -6.687503 0.795713 2.570937
 C -7.217996 0.948967 0.488143
 H -7.435262 1.128871 -1.646969
 H -1.498154 5.351531 -3.006071
 C -2.134641 3.688248 -4.214190
 H -2.777612 1.853881 -5.153613
 H 1.001429 -4.428131 3.292195
 H 1.697144 -3.626311 4.698802
 H 8.283485 -0.843168 0.671161
 H 2.006809 -4.220098 -5.154586
 H 2.910364 2.973104 5.366614
 H 7.664220 2.381391 -2.292503
 H -7.659988 -2.388801 -2.295157
 H -2.911190 -2.966786 5.369401

H -1.697863 3.632301 4.694983
H -1.006432 4.434314 3.286388
H -8.285514 0.835573 0.667736
H -2.000608 4.218004 -5.155223

(Y_{Ph})₂Sn

E = -2619.38479815
P 3.163701 0.240127 0.002554
P -3.163835 0.344390 -0.014992
C 1.718834 -0.360411 -0.669916
C 1.629782 -1.791833 -0.949426
C 2.514771 -2.758517 -0.425251
H 3.304113 -2.453200 0.259196
C 2.402114 -4.106702 -0.737060
H 3.110999 -4.813139 -0.306823
C 1.386217 -4.558727 -1.570763
H 1.287005 -5.616807 -1.804089
C 0.490034 -3.628927 -2.093066
H -0.323453 -3.959122 -2.737353
C 0.618234 -2.282013 -1.800297
H -0.089992 -1.569093 -2.222122
C 3.459141 -0.219035 1.759736
C 4.525967 -1.001813 2.202178
H 5.305421 -1.307404 1.507469
C 4.588203 -1.415324 3.530043
H 5.419964 -2.033617 3.862341
C 3.591751 -1.047851 4.426036
H 3.641817 -1.375183 5.462740
C 2.520098 -0.272107 3.990212
H 1.729107 0.008376 4.683005
C 2.449399 0.126595 2.663080
H 1.592522 0.704269 2.309472
C 3.197016 2.060594 -0.021918
C 3.507697 2.838862 1.091978
H 3.691659 2.369115 2.055169
C 3.576727 4.224598 0.974958
H 3.810667 4.827437 1.850314

C 3.348625 4.834717 -0.251922
 H 3.402033 5.918315 -0.339581
 C 3.058646 4.058624 -1.371471
 H 2.884469 4.532558 -2.335251
 C 2.987394 2.678413 -1.259689
 H 2.756211 2.062722 -2.127734
 C 4.707877 -0.177419 -0.881185
 C 4.650888 -0.886109 -2.081057
 H 3.691658 -1.248629 -2.443007
 C 5.816551 -1.118141 -2.803920
 H 5.769070 -1.678742 -3.735381
 C 7.035680 -0.634567 -2.341691
 H 7.945137 -0.816822 -2.911371
 C 7.092738 0.093304 -1.156210
 H 8.042866 0.487922 -0.801217
 C 5.931687 0.324969 -0.429934
 H 5.972291 0.910552 0.488599
 C -1.591292 -0.298165 0.166520
 C -1.481968 -1.729183 0.469802
 C -0.472392 -2.192513 1.332892
 H 0.219128 -1.466790 1.758119
 C -0.322792 -3.539085 1.621944
 H 0.486436 -3.856549 2.277759
 C -1.193304 -4.482784 1.081221
 H -1.075263 -5.539692 1.312018
 C -2.203089 -4.053171 0.229062
 H -2.885140 -4.775132 -0.218587
 C -2.335034 -2.704917 -0.078841
 H -3.096173 -2.400996 -0.796360
 C -4.372373 -0.338777 1.180114
 C -4.361457 0.127224 2.496868
 H -3.705059 0.945991 2.779488
 C -5.189320 -0.443630 3.454736
 H -5.173668 -0.065504 4.475020
 C -6.032917 -1.494912 3.111270
 H -6.678888 -1.944902 3.862777
 C -6.045676 -1.970400 1.805537

H -6.697140 -2.797458 1.530400
 C -5.220970 -1.396989 0.844523
 H -5.241339 -1.779025 -0.173001
 C -3.146360 2.153631 0.241922
 C -3.825788 3.040748 -0.593087
 H -4.368406 2.671679 -1.458937
 C -3.793994 4.408289 -0.338333
 H -4.319061 5.090682 -1.003829
 C -3.089172 4.901615 0.752556
 H -3.065296 5.972044 0.948142
 C -2.404412 4.024180 1.587524
 H -1.837220 4.404379 2.434720
 C -2.427103 2.660645 1.330742
 H -1.863251 1.972359 1.957630
 C -4.003883 0.120835 -1.635348
 C -5.368494 0.362500 -1.825203
 H -5.986440 0.678702 -0.985341
 C -5.937667 0.195605 -3.081433
 H -6.999615 0.386106 -3.225381
 C -5.151029 -0.218564 -4.154164
 H -5.600301 -0.352869 -5.136465
 C -3.795883 -0.466885 -3.969003
 H -3.180792 -0.798258 -4.803309
 C -3.224848 -0.297893 -2.711713
 H -2.166728 -0.499331 -2.541936
 Sn 0.028071 1.046915 -0.444041

$^3(Y_{Ph})_2Sn$

E = -2619.33185705
 P 2.521727 0.467528 0.277930
 P -2.776943 0.141102 -0.135174
 C 2.129170 -0.321599 -1.179890
 C 2.910601 -1.427567 -1.717743
 C 3.656521 -2.306366 -0.904042
 H 3.640482 -2.171969 0.175240
 C 4.383625 -3.361021 -1.441000
 H 4.941459 -4.016161 -0.773063

C 4.389831 -3.594128 -2.811745
 H 4.956210 -4.422934 -3.231342
 C 3.650514 -2.749076 -3.636112
 H 3.639593 -2.911873 -4.713014
 C 2.931383 -1.689607 -3.103948
 H 2.375392 -1.026759 -3.765966
 C 1.858060 -0.271676 1.810667
 C 2.566748 -1.259279 2.504854
 H 3.604963 -1.468081 2.251559
 C 1.950818 -1.977121 3.521103
 H 2.507876 -2.748056 4.049823
 C 0.623185 -1.721877 3.853927
 H 0.136367 -2.301715 4.635412
 C -0.083033 -0.732521 3.181036
 H -1.122383 -0.528500 3.430089
 C 0.531592 -0.014160 2.163347
 H -0.036357 0.727271 1.611729
 C 1.917961 2.187173 0.251864
 C 1.574272 2.871419 1.419190
 H 1.571530 2.353911 2.375592
 C 1.227620 4.219682 1.362786
 H 0.943615 4.741783 2.274560
 C 1.263181 4.898673 0.151346
 H 1.001933 5.954602 0.110969
 C 1.648307 4.228928 -1.009165
 H 1.696538 4.760944 -1.957352
 C 1.963711 2.877736 -0.963470
 H 2.253279 2.339637 -1.863947
 C 4.313797 0.661320 0.577333
 C 5.191050 0.593397 -0.506161
 H 4.806370 0.346778 -1.493260
 C 6.546693 0.834983 -0.316933
 H 7.228243 0.769873 -1.162672
 C 7.030283 1.156226 0.947076
 H 8.092520 1.344445 1.092059
 C 6.155908 1.241403 2.026237
 H 6.530306 1.501339 3.014515

C 4.800409 0.995556 1.843230
 H 4.116405 1.064131 2.687982
 C -1.311300 -0.737560 -0.343599
 C -1.134971 -2.030689 0.301400
 C 0.088525 -2.734639 0.192764
 H 0.882478 -2.322826 -0.422252
 C 0.313304 -3.927891 0.857333
 H 1.277553 -4.419803 0.736453
 C -0.667518 -4.490340 1.671447
 H -0.487104 -5.425538 2.197743
 C -1.889869 -3.836990 1.781490
 H -2.684574 -4.261929 2.393541
 C -2.122672 -2.649256 1.101990
 H -3.104627 -2.198908 1.193247
 C -3.067049 0.681008 1.597212
 C -2.393396 1.806726 2.086461
 H -1.787492 2.416214 1.422060
 C -2.482122 2.161487 3.425437
 H -1.946855 3.038686 3.783481
 C -3.248895 1.400734 4.303437
 H -3.313061 1.675165 5.354412
 C -3.937224 0.291443 3.826348
 H -4.548431 -0.305182 4.500671
 C -3.849782 -0.066058 2.485195
 H -4.407746 -0.929713 2.132720
 C -2.787847 1.643686 -1.150247
 C -3.845677 1.898451 -2.024082
 H -4.670006 1.195991 -2.103618
 C -3.851505 3.044507 -2.813247
 H -4.680276 3.224778 -3.494403
 C -2.802635 3.952810 -2.723521
 H -2.810751 4.857048 -3.329557
 C -1.741719 3.706704 -1.862034
 H -0.919345 4.411736 -1.790220
 C -1.711954 2.545597 -1.091535
 H -0.866769 2.364415 -0.430044
 C -4.305067 -0.746300 -0.601684

C -5.576698 -0.317560 -0.210708
H -5.683729 0.557460 0.429073
C -6.704178 -1.003134 -0.646040
H -7.693966 -0.667067 -0.342982
C -6.566045 -2.117399 -1.470075
H -7.450359 -2.654993 -1.807307
C -5.301859 -2.545139 -1.861025
H -5.193492 -3.417233 -2.502487
C -4.170608 -1.861374 -1.428908
H -3.172252 -2.187237 -1.720226
Sn 0.076480 -0.096902 -1.953123

(Y_{Pyr})₂Sn

E = -2651.52714056
P -3.108487 0.166672 -0.050949
P 2.958999 0.448748 -0.089644
C -1.859035 -0.439795 0.887940
C -1.650652 -1.783120 1.275221
C -2.401049 -2.953783 0.983216
H -3.318217 -2.872516 0.402082
C -1.932683 -4.180736 1.396335
H -2.495774 -5.080922 1.151599
C -0.728451 -4.284441 2.108932
H -0.331984 -5.243706 2.427744
C -0.049230 -3.111189 2.383631
H 0.900171 -3.120560 2.922023
C -3.340772 -0.630381 -1.677954
C -4.552725 -0.664047 -2.373137
H -5.449177 -0.224097 -1.942435
C -4.619981 -1.277846 -3.618712
H -5.565190 -1.304193 -4.157937
C -3.483786 -1.864488 -4.169747
H -3.541357 -2.347682 -5.143759
C -2.282006 -1.845287 -3.469815
H -1.393734 -2.316885 -3.887129
C -2.203431 -1.233040 -2.222546
H -1.267231 -1.258501 -1.655102

C -2.829233 1.934332 -0.373434
 C -2.942730 2.488150 -1.648324
 H -3.119843 1.843243 -2.506965
 C -2.845949 3.867195 -1.818281
 H -2.945031 4.295863 -2.813808
 C -2.631173 4.692982 -0.720245
 H -2.565308 5.771259 -0.854558
 C -2.488644 4.139619 0.549703
 H -2.304699 4.781494 1.408784
 C -2.590159 2.765926 0.725847
 H -2.499169 2.328127 1.718861
 C -4.771181 0.174467 0.723853
 C -5.007311 -0.671778 1.807759
 H -4.204241 -1.308705 2.173753
 C -6.251480 -0.678779 2.429220
 H -6.429698 -1.343716 3.272140
 C -7.259450 0.170653 1.984945
 H -8.230089 0.168928 2.477495
 C -7.020888 1.035789 0.921378
 H -7.800877 1.716361 0.585003
 C -5.780501 1.040739 0.294255
 H -5.590257 1.736203 -0.522701
 C 1.556180 -0.471998 0.112049
 C 1.565802 -1.867559 -0.292765
 C 0.407563 -3.644824 -1.219150
 H -0.538671 -3.984301 -1.652328
 C 1.464531 -4.536629 -1.073751
 H 1.372715 -5.571210 -1.395177
 C 2.625772 -4.047023 -0.483529
 H 3.483737 -4.698668 -0.319927
 C 2.672783 -2.724328 -0.080078
 H 3.551316 -2.342723 0.437586
 C 3.800422 0.114737 -1.678008
 C 3.296871 0.684977 -2.849539
 H 2.474725 1.395001 -2.796280
 C 3.840895 0.353086 -4.083476
 H 3.445130 0.810574 -4.988147

C 4.885691 -0.562805 -4.162599
 H 5.308809 -0.825755 -5.130335
 C 5.385905 -1.142506 -3.002776
 H 6.198337 -1.864470 -3.058428
 C 4.848474 -0.805169 -1.765261
 H 5.250515 -1.260082 -0.862800
 C 2.486157 2.212272 -0.096953
 C 3.251808 3.214110 0.500217
 H 4.165320 2.961375 1.031902
 C 2.837172 4.540453 0.440520
 H 3.434558 5.312631 0.921542
 C 1.662961 4.878086 -0.222746
 H 1.342284 5.917377 -0.268837
 C 0.894483 3.884618 -0.820865
 H -0.028307 4.137116 -1.335943
 C 1.296964 2.557329 -0.751350
 H 0.688313 1.768174 -1.192645
 C 4.339337 0.350843 1.131825
 C 5.622350 0.849151 0.883574
 H 5.849143 1.309561 -0.077708
 C 6.610463 0.751360 1.855814
 H 7.607688 1.140116 1.657298
 C 6.326225 0.152576 3.081055
 H 7.102482 0.074053 3.840095
 C 5.054575 -0.350269 3.331451
 H 4.831644 -0.823100 4.286006
 C 4.065825 -0.253393 2.357357
 H 3.065767 -0.652904 2.532049
 Sn 0.129510 0.336573 1.649372
 N 0.452628 -2.371111 -0.863523
 N -0.502234 -1.922049 2.007945

$^3(Y_{Pyr})_2Sn$

E = -2651.45792246

P 3.234017 0.224228 0.000641

P -3.224889 0.356829 -0.021124

C 1.779104 -0.358400 -0.653767

C 1.538120 -1.722895 -1.030785
 C 2.493909 -2.763199 -0.892572
 H 3.488835 -2.546038 -0.506585
 C 2.152245 -4.059974 -1.221282
 H 2.884350 -4.858035 -1.102494
 C 0.867510 -4.340243 -1.686178
 H 0.552899 -5.349216 -1.938710
 C -0.009738 -3.268488 -1.795585
 H -1.035880 -3.435376 -2.137436
 C 3.779748 -0.607616 1.531752
 C 5.111147 -0.825337 1.891822
 H 5.919378 -0.515513 1.234014
 C 5.408709 -1.459987 3.093384
 H 6.447167 -1.633574 3.369248
 C 4.382698 -1.876023 3.935863
 H 4.619460 -2.372276 4.875432
 C 3.055580 -1.672505 3.569936
 H 2.248643 -2.012180 4.216777
 C 2.746979 -1.048323 2.366289
 H 1.704758 -0.929293 2.056134
 C 3.023953 1.979064 0.408002
 C 3.200135 2.478480 1.699271
 H 3.474360 1.805965 2.509339
 C 2.993434 3.829670 1.950487
 H 3.119620 4.215014 2.960334
 C 2.613263 4.684116 0.919417
 H 2.443476 5.739769 1.122817
 C 2.461998 4.192331 -0.374609
 H 2.174140 4.860803 -1.183517
 C 2.676990 2.846383 -0.637228
 H 2.559532 2.453215 -1.646208
 C 4.655392 0.219541 -1.143283
 C 4.568280 -0.481874 -2.346231
 H 3.660042 -1.033105 -2.580320
 C 5.630368 -0.453910 -3.243830
 H 5.559711 -1.005871 -4.178966
 C 6.771937 0.285717 -2.954161

H 7.598847 0.310069 -3.661520
 C 6.850808 1.010616 -1.768372
 H 7.733500 1.608833 -1.550679
 C 5.794310 0.981957 -0.866705
 H 5.844648 1.572328 0.047878
 C -1.782982 -0.278943 0.607465
 C -1.551406 -1.635713 1.017631
 C -0.031009 -3.160616 1.869187
 H 0.984618 -3.320817 2.242626
 C -0.904612 -4.235063 1.757307
 H -0.598131 -5.237193 2.045195
 C -2.169444 -3.969010 1.234358
 H -2.894173 -4.771476 1.100538
 C -2.492031 -2.682528 0.851585
 H -3.454718 -2.479230 0.391497
 C -4.697413 0.025030 1.015925
 C -4.861984 0.750111 2.198889
 H -4.154312 1.534577 2.456217
 C -5.926534 0.478423 3.048113
 H -6.045609 1.053198 3.964402
 C -6.836054 -0.525448 2.729082
 H -7.669167 -0.739006 3.396073
 C -6.675915 -1.256359 1.558097
 H -7.380052 -2.046715 1.305497
 C -5.612384 -0.983517 0.704362
 H -5.496555 -1.562862 -0.209364
 C -3.023085 2.164068 -0.083685
 C -3.495937 2.938534 -1.147459
 H -3.995728 2.463263 -1.987703
 C -3.301428 4.312854 -1.151350
 H -3.665176 4.904531 -1.989127
 C -2.631383 4.931750 -0.097263
 H -2.475711 6.008893 -0.108018
 C -2.161549 4.169777 0.965825
 H -1.631229 4.644767 1.788979
 C -2.357460 2.793107 0.981614
 H -1.977196 2.188380 1.803326

C -3.704738 -0.183860 -1.697679
 C -4.958558 0.069150 -2.263956
 H -5.716948 0.608593 -1.697023
 C -5.241217 -0.376377 -3.550225
 H -6.216926 -0.179395 -3.990685
 C -4.276887 -1.076703 -4.270763
 H -4.501512 -1.426826 -5.276857
 C -3.031028 -1.331232 -3.706626
 H -2.274714 -1.877299 -4.267505
 C -2.739209 -0.887222 -2.420448
 H -1.759542 -1.078205 -1.974443
 Sn -0.009596 0.750784 -0.126103
 N -0.333376 -1.915364 1.535910
 N 0.300860 -2.018017 -1.492551

(Y_{PhF})₂Sn

E = -3613.20987155
 P -3.111259 -0.785516 -0.060094
 P 3.032551 -1.041451 0.086804
 C -1.776655 -0.039292 -0.814077
 C -1.612328 1.393655 -0.883284
 C -2.317631 2.351372 -0.132600
 C -2.130194 3.719953 -0.247772
 C -1.151958 4.212163 -1.100218
 C -0.401478 3.309372 -1.844372
 C -0.644413 1.952173 -1.740659
 C -3.044416 -0.897672 1.768667
 C -3.866443 -0.163756 2.622456
 H -4.665475 0.450997 2.215308
 C -3.648214 -0.193829 3.996559
 H -4.289019 0.389476 4.654749
 C -2.611617 -0.952135 4.526530
 H -2.440313 -0.966640 5.601105
 C -1.783966 -1.683278 3.677858
 H -0.963499 -2.271387 4.085815
 C -1.997284 -1.649806 2.308326
 H -1.335269 -2.210588 1.643782

C -3.208909 -2.520804 -0.619094
 C -3.572246 -3.566582 0.229552
 H -3.724082 -3.383546 1.290829
 C -3.733703 -4.852347 -0.278420
 H -4.007060 -5.665205 0.391494
 C -3.546079 -5.097351 -1.633045
 H -3.670675 -6.104310 -2.026858
 C -3.204695 -4.052073 -2.487184
 H -3.063167 -4.238253 -3.549824
 C -3.041870 -2.769172 -1.985226
 H -2.771343 -1.944361 -2.642780
 C -4.762696 -0.154420 -0.494750
 C -4.888979 0.784910 -1.516997
 H -3.996897 1.167105 -2.008679
 C -6.150582 1.220222 -1.906852
 H -6.245073 1.958970 -2.700146
 C -7.286911 0.712325 -1.286821
 H -8.273380 1.054826 -1.593486
 C -7.164273 -0.240191 -0.279240
 H -8.052800 -0.647704 0.198960
 C -5.905661 -0.676533 0.114351
 H -5.811315 -1.430788 0.895093
 C 1.536635 -0.223961 -0.010871
 C 1.523190 1.198882 0.292204
 C 0.605504 1.743822 1.202130
 C 0.532809 3.101685 1.466301
 C 1.411622 3.983250 0.847594
 C 2.351629 3.487618 -0.044796
 C 2.377563 2.128079 -0.316366
 C 4.163480 -0.236022 1.268045
 C 3.950852 -0.395580 2.639548
 H 3.180300 -1.074504 2.996835
 C 4.722871 0.308862 3.554105
 H 4.552218 0.174823 4.620352
 C 5.707584 1.184638 3.107825
 H 6.308609 1.740112 3.825175
 C 5.919344 1.352103 1.744240

H 6.683146 2.041206 1.389692
 C 5.153133 0.644969 0.824597
 H 5.314574 0.791033 -0.240209
 C 2.703282 -2.735603 0.697807
 C 3.328773 -3.873104 0.188695
 H 4.049402 -3.787023 -0.619935
 C 3.008473 -5.131342 0.689679
 H 3.490475 -6.013629 0.273362
 C 2.068604 -5.263968 1.704311
 H 1.817108 -6.250331 2.089352
 C 1.441403 -4.133009 2.219157
 H 0.697279 -4.232848 3.007383
 C 1.750991 -2.876713 1.716192
 H 1.235858 -1.989357 2.083547
 C 4.039668 -1.266168 -1.423150
 C 5.350682 -1.749705 -1.366670
 H 5.807652 -1.975277 -0.403333
 C 6.076150 -1.932335 -2.537161
 H 7.096451 -2.308170 -2.490155
 C 5.498907 -1.627894 -3.767613
 H 6.069357 -1.768163 -4.683903
 C 4.201527 -1.131842 -3.825456
 H 3.756098 -0.875799 -4.784581
 C 3.473241 -0.947311 -2.655030
 H 2.469574 -0.523444 -2.682418
 Sn -0.047384 -1.432470 -0.905216
 F 3.263476 1.699126 -1.219944
 F 3.190814 4.312696 -0.652414
 F 1.335274 5.281583 1.094659
 F -0.395098 3.572321 2.288897
 F -0.259734 0.949404 1.824515
 F 0.129177 1.136612 -2.468129
 F 0.579057 3.750941 -2.619915
 F -0.911089 5.512418 -1.180619
 F -2.846038 4.554193 0.489926
 F -3.234417 1.939957 0.750757

$^3(Y_{PhF})_2Sn$

E = -3613.13916598

P -3.038406 -0.926759 0.037592

P 3.060407 -0.891292 0.106741

C -1.780254 -0.013695 -0.774658

C -1.739242 1.386088 -0.972769

C -2.527603 2.342460 -0.279351

C -2.382430 3.707420 -0.424649

C -1.380249 4.209694 -1.250694

C -0.556113 3.321836 -1.939426

C -0.733563 1.961293 -1.798832

C -2.712369 -1.052003 1.811392

C -3.297889 -0.160421 2.712065

H -4.068099 0.529034 2.377893

C -2.878069 -0.141082 4.036405

H -3.329215 0.561694 4.733389

C -1.873681 -1.003740 4.463031

H -1.538265 -0.976349 5.498082

C -1.300606 -1.903870 3.571325

H -0.520833 -2.584373 3.908390

C -1.716980 -1.935983 2.245885

H -1.258820 -2.626760 1.537942

C -3.044800 -2.584450 -0.658909

C -3.430473 -3.686866 0.120433

H -3.612056 -3.567692 1.186608

C -3.559135 -4.937129 -0.466321

H -3.835720 -5.791745 0.148268

C -3.341230 -5.102133 -1.832690

H -3.443271 -6.085264 -2.287123

C -3.012057 -3.998223 -2.619585

H -2.858641 -4.117200 -3.690206

C -2.876356 -2.744964 -2.046713

H -2.616293 -1.886484 -2.664302

C -4.761096 -0.384051 -0.192591

C -5.089947 0.411829 -1.291032

H -4.304369 0.794476 -1.940756

C -6.419328 0.720021 -1.551274

H -6.671063 1.346539 -2.404513
 C -7.424282 0.232567 -0.721871
 H -8.464621 0.478220 -0.925419
 C -7.099575 -0.570611 0.367038
 H -7.884250 -0.955640 1.015206
 C -5.772041 -0.884200 0.630804
 H -5.520828 -1.517180 1.480789
 C 1.517468 -0.183962 0.115780
 C 1.371903 1.225768 0.377306
 C 0.344898 1.714306 1.208458
 C 0.143746 3.060595 1.457769
 C 0.990092 4.011515 0.900958
 C 2.034947 3.585373 0.090650
 C 2.186826 2.233502 -0.174842
 C 4.148962 -0.172262 1.382390
 C 3.998975 -0.563780 2.715124
 H 3.301494 -1.357563 2.972389
 C 4.741049 0.052635 3.713959
 H 4.622132 -0.264232 4.748243
 C 5.632256 1.072533 3.393088
 H 6.210234 1.558127 4.177134
 C 5.781161 1.470634 2.069861
 H 6.472993 2.270675 1.813812
 C 5.045814 0.851049 1.064782
 H 5.163939 1.168920 0.032132
 C 2.826959 -2.658891 0.508706
 C 3.531229 -3.692645 -0.108786
 H 4.263347 -3.470765 -0.880699
 C 3.282412 -5.015779 0.242434
 H 3.830624 -5.815622 -0.251217
 C 2.330595 -5.316521 1.211365
 H 2.136489 -6.353230 1.480330
 C 1.619276 -4.292288 1.826788
 H 0.863266 -4.526179 2.574752
 C 1.857145 -2.969181 1.472671
 H 1.292595 -2.153508 1.922512
 C 4.093178 -0.901268 -1.408445

C 5.443226 -1.262622 -1.385015
 H 5.921878 -1.520259 -0.440428
 C 6.178991 -1.284908 -2.564282
 H 7.230932 -1.563624 -2.542606
 C 5.570497 -0.945083 -3.769502
 H 6.147845 -0.961041 -4.692179
 C 4.230485 -0.572961 -3.793771
 H 3.757752 -0.292630 -4.732923
 C 3.493346 -0.546452 -2.615358
 H 2.451218 -0.226974 -2.614721
 Sn 0.046389 -1.510529 -0.997687
 F 3.162236 1.888184 -1.019471
 F 2.847097 4.474373 -0.462251
 F 0.787968 5.302269 1.125904
 F -0.881203 3.452745 2.207671
 F -0.503866 0.859696 1.770246
 F 0.095756 1.167402 -2.460803
 F 0.425421 3.791717 -2.689623
 F -1.205492 5.509758 -1.375022
 F -3.143827 4.538780 0.263516
 F -3.418121 1.922768 0.613613

(Y_{CN})₂Sn

E = -2341.31743766
 C -3.525988 -1.213362 1.443189
 C -4.620688 -0.959296 2.276616
 C -4.852838 -1.769640 3.380640
 H -5.701673 -1.569155 4.031778
 C -3.990529 -2.827760 3.659740
 H -4.170065 -3.456411 4.530188
 C -2.893580 -3.070350 2.840909
 H -2.199932 -3.877773 3.064973
 C -2.654968 -2.264869 1.732101
 H -1.771922 -2.441224 1.119108
 H -5.279585 -0.114940 2.074155
 P -3.145388 -0.177887 -0.003574
 C 1.457197 -0.310441 0.419792

P 3.105151 -0.163847 0.008968
 C -1.531863 -0.256909 -0.531719
 C 1.034586 -1.548110 0.919079
 C -1.139808 -1.391377 -1.252999
 C -4.050700 2.439128 -0.373543
 H -4.363370 2.110882 -1.363153
 N 0.670051 -2.561734 1.371966
 C -3.238866 3.276999 2.157569
 H -2.919538 3.603519 3.145102
 N -0.777697 -2.295524 -1.898095
 C -3.495957 1.521989 0.519518
 C -4.202028 3.768296 0.002464
 H -4.639013 4.480465 -0.694527
 C -3.795603 4.187214 1.265893
 H -3.914924 5.229107 1.556941
 C -3.088271 1.944726 1.788368
 H -2.666834 1.226125 2.490314
 C -4.352577 -0.613839 -1.293901
 C -3.965084 -0.445272 -2.625571
 H -2.957063 -0.098846 -2.846368
 C -4.856186 -0.739834 -3.651023
 H -4.546807 -0.615338 -4.686721
 C -6.132176 -1.205562 -3.353519
 H -6.826993 -1.440906 -4.157596
 C -6.517153 -1.385053 -2.028254
 H -7.510752 -1.761982 -1.794066
 C 3.396793 1.532951 -0.550320
 C -5.630204 -1.094672 -0.999173
 H -5.930484 -1.257967 0.032959
 C 3.568074 1.838709 -1.900047
 H 3.601730 1.038741 -2.637156
 C 3.690692 3.166344 -2.298162
 H 3.821446 3.403584 -3.351951
 C 3.643309 4.185293 -1.353589
 H 3.738899 5.222595 -1.668832
 C 3.471726 3.882498 -0.005515
 H 3.430455 4.680239 0.733127

C 3.345909 2.560054 0.397760
 H 3.204938 2.316802 1.450139
 H 4.700897 -2.515132 4.024980
 H 3.094412 -2.028481 2.217581
 C 4.306239 -0.462496 1.348306
 C 5.499071 0.259220 1.447398
 H 5.724291 1.045553 0.728650
 C 6.399086 -0.018191 2.471011
 H 7.324609 0.549705 2.544727
 C 6.114566 -1.015368 3.397272
 H 6.819311 -1.230724 4.198287
 C 4.927710 -1.735293 3.300853
 C 4.022223 -1.463353 2.282783
 C 3.626302 -1.272695 -1.333964
 C 2.646738 -1.997990 -2.013050
 H 1.597022 -1.920340 -1.731852
 C 3.018064 -2.842704 -3.055284
 H 2.247157 -3.410155 -3.572275
 C 4.353666 -2.958501 -3.420420
 H 4.640113 -3.620345 -4.235966
 C 5.332141 -2.235952 -2.739093
 H 6.378944 -2.332683 -3.020857
 C 4.972434 -1.398826 -1.692240
 H 5.739249 -0.847706 -1.149211
 Sn -0.021124 1.247307 -0.018194

$^3(Y_{CN})_2Sn$

E = -2341.25604395
 C 3.650118 -1.484759 0.886174
 C 3.695223 -2.763536 0.328616
 C 4.145927 -3.834798 1.091895
 H 4.183498 -4.829870 0.653298
 C 4.546287 -3.634964 2.408514
 H 4.896651 -4.476194 3.003596
 C 4.499159 -2.360674 2.966357
 H 4.807921 -2.202456 3.997540
 C 4.054624 -1.284085 2.210869

H 4.012665 -0.290727 2.653888
 H 3.381181 -2.922344 -0.700784
 P 3.003167 -0.068721 -0.046480
 C -1.746018 0.071699 -1.110614
 P -3.054517 -0.039738 -0.008840
 C 1.482040 0.444285 0.583929
 C -1.673359 -0.784141 -2.202719
 C 1.468549 0.671033 1.960036
 C 3.847650 -0.257584 -2.700519
 H 4.725520 0.308659 -2.398184
 N -1.593565 -1.517719 -3.111235
 C 1.577246 -1.675509 -3.494703
 H 0.667945 -2.190666 -3.794351
 N 1.438189 0.838510 3.117793
 C 2.847655 -0.556762 -1.773507
 C 3.709053 -0.670972 -4.020588
 H 4.485455 -0.430806 -4.744183
 C 2.577185 -1.376360 -4.415220
 H 2.467004 -1.688129 -5.452254
 C 1.710741 -1.268329 -2.172603
 H 0.924754 -1.497092 -1.453542
 C 4.326049 1.179262 0.045430
 C 3.968962 2.527510 0.039625
 H 2.914701 2.801299 0.014982
 C 4.954401 3.506722 0.080019
 H 4.672366 4.557528 0.080122
 C 6.295923 3.142688 0.129994
 H 7.066328 3.910539 0.167662
 C 6.655632 1.797970 0.141572
 H 7.704968 1.513524 0.188084
 C -3.553288 1.611371 0.551628
 C 5.674246 0.815124 0.101299
 H 5.954818 -0.236875 0.120714
 C -4.017507 1.833720 1.848618
 H -4.027033 1.020814 2.571434
 C -4.453200 3.101812 2.219485
 H -4.802153 3.276381 3.235163

C -4.436549 4.142474 1.297896
 H -4.774745 5.134135 1.592612
 C -3.985639 3.919203 -0.000830
 H -3.973039 4.733166 -0.722778
 C -3.542973 2.657947 -0.374991
 H -3.178271 2.470339 -1.383917
 H -5.421533 -3.641767 -2.398481
 H -3.441077 -2.569181 -1.405993
 C -4.525394 -0.821230 -0.729820
 C -5.770208 -0.189001 -0.682650
 H -5.871909 0.782613 -0.204517
 C -6.883003 -0.799683 -1.249364
 H -7.849080 -0.300441 -1.210406
 C -6.761020 -2.040626 -1.864117
 H -7.632961 -2.515443 -2.309999
 C -5.523134 -2.673748 -1.912462
 C -4.405832 -2.070785 -1.349140
 C -2.686847 -0.965389 1.515056
 C -1.642347 -0.486673 2.311700
 H -1.135296 0.442586 2.053492
 C -1.244094 -1.182451 3.443836
 H -0.415884 -0.792659 4.032144
 C -1.896710 -2.362223 3.792517
 H -1.585689 -2.914023 4.677798
 C -2.947183 -2.835781 3.013900
 H -3.462309 -3.753693 3.290880
 C -3.345723 -2.142100 1.874987
 H -4.168787 -2.518785 1.272243
 Sn -0.062960 1.395940 -0.667660

3.3.3.2 Koordinaten der mit zwei unterschiedlichen Yliden substituierten Stannylene

$Y\text{Sn}^{\text{Pip}}Y_{\text{S}}$

E = -4200.01390476
 Sn 0.141542 0.912363 1.591342
 C 1.709484 -0.048709 0.160661
 C -1.798556 0.502986 0.509167

S -0.945569 -1.467243 2.573876
 P -2.288629 -1.007687 1.126887
 S 2.014779 1.207803 -0.905505
 O 2.363647 0.823026 -2.289810
 O 0.848904 2.125161 -0.714865
 C 3.439488 2.146218 -0.343115
 P -2.400893 1.497032 -0.698113
 N -1.938099 1.112496 -2.260321
 C -1.932277 3.210305 -0.325015
 C -4.223071 1.485228 -0.800311
 C -2.280381 -2.386332 -0.082511
 C -3.962292 -1.036899 1.851669
 P 2.726219 -1.397934 0.195225
 C 2.415306 -2.217657 1.782755
 C 2.544057 -2.634307 -1.136126
 C 4.508608 -1.002101 0.034701
 C -0.899339 0.136557 -2.541640
 C -2.529350 1.736037 -3.429568
 C -3.084493 0.692453 -4.388398
 C -2.029126 -0.355406 -4.717852
 C -1.447028 -0.954869 -3.445145
 C -5.039600 2.519225 -0.342500
 C -4.807001 0.292559 -1.235340
 C -6.182627 0.117491 -1.175937
 C -6.991371 1.143682 -0.695879
 C -6.419567 2.345543 -0.292472
 C -1.298315 4.011563 -1.272326
 C -2.169219 3.712902 0.957885
 C -0.935158 5.313464 -0.951081
 C -1.194804 5.818692 0.318303
 C -1.807171 5.016293 1.276062
 C -4.578501 -2.244298 2.190911
 C -4.596089 0.164719 2.162678
 C -5.833182 -2.244547 2.787495
 C -6.477858 -1.040823 3.059029
 C -5.853570 0.163742 2.753762
 C -1.029103 -2.913818 -0.413969

C -3.422677 -2.902144 -0.698484
 C -0.922742 -3.951386 -1.329862
 C -2.065773 -4.462839 -1.939802
 C -3.312831 -3.934101 -1.627105
 C 4.507542 2.357439 -1.201167
 C 3.470360 2.638402 0.957984
 C 5.624140 3.049081 -0.743440
 C 5.689521 3.534469 0.561900
 C 4.589261 3.325384 1.401475
 C 6.917826 4.229476 1.067751
 C 1.852841 -2.266119 -2.287917
 C 3.224168 -3.856067 -1.092377
 C 1.837102 -3.118968 -3.388678
 C 2.486186 -4.346060 -3.332358
 C 3.176777 -4.718050 -2.180079
 C 5.242337 -0.501243 1.113375
 C 5.101582 -1.044713 -1.230496
 C 6.414483 -0.621322 -1.404039
 C 7.143499 -0.140923 -0.323558
 C 6.552190 -0.076638 0.934361
 C 1.952861 -3.529127 1.888376
 C 2.504336 -1.427795 2.935961
 C 2.168195 -1.954748 4.174548
 C 1.722693 -3.269229 4.273813
 C 1.609848 -4.049916 3.131182
 H -1.764820 2.336531 -3.953722
 H -3.316548 2.431590 -3.111625
 H -3.442980 1.188160 -5.300283
 H -3.954421 0.209101 -3.922852
 H -1.218796 0.118570 -5.293558
 H -2.454190 -1.137163 -5.360748
 H -2.224155 -1.511706 -2.902041
 H -0.655373 -1.677189 -3.677827
 H -0.541545 -0.265689 -1.586482
 H -0.039880 0.637106 -3.013202
 H -4.164416 -0.501793 -1.612079
 H -6.625503 -0.821766 -1.502419

H -8.069915 1.008311 -0.643275
 H -7.051650 3.155767 0.066490
 H -4.599428 3.459291 -0.017206
 H -1.046501 3.596892 -2.243875
 H -0.428371 5.930247 -1.690453
 H -0.902832 6.837026 0.568677
 H -1.990604 5.400780 2.277409
 H -2.623236 3.068166 1.710268
 H -4.072149 -3.186805 1.988542
 H -6.309782 -3.188964 3.043997
 H -7.464328 -1.043435 3.519309
 H -6.346529 1.108738 2.974316
 H -4.092005 1.099758 1.931782
 H -0.144402 -2.505514 0.073763
 H 0.055724 -4.367033 -1.562589
 H -1.982848 -5.278337 -2.655966
 H -4.209335 -4.332538 -2.098939
 H -4.404980 -2.508753 -0.445593
 H 4.451004 1.966138 -2.213722
 H 6.467644 3.205830 -1.415094
 H 4.612380 3.709313 2.420948
 H 2.621744 2.477193 1.622652
 H 7.501272 4.662923 0.248303
 H 7.573900 3.525473 1.599540
 H 6.666948 5.030846 1.772065
 H 1.366808 -1.294539 -2.322077
 H 1.313580 -2.819600 -4.294329
 H 2.465600 -5.013941 -4.191668
 H 3.696000 -5.673594 -2.138124
 H 3.807119 -4.126228 -0.212685
 H 4.535297 -1.399689 -2.087870
 H 6.865029 -0.662714 -2.393800
 H 8.170471 0.192346 -0.461063
 H 7.113192 0.307727 1.784086
 H 4.796760 -0.444841 2.102473
 H 2.790084 -0.380306 2.852390
 H 2.229364 -1.328184 5.061753

H 1.439730 -3.676294 5.242389
H 1.229113 -5.066663 3.199579
H 1.814422 -4.138316 0.999539

³Y_{Sn}^{Pip}Y_S

E = -4199.92730791

Sn 0.193916 0.440248 1.352076
C 1.924234 0.168085 0.107750
C -1.743136 0.160999 0.396816
S -1.127672 -2.630779 1.557616
P -2.481246 -1.367537 0.856992
S 2.417292 1.442994 -0.920969
O 2.637020 0.951515 -2.297556
O 1.506658 2.580395 -0.721905
C 4.019145 1.992639 -0.343766
P -2.396297 1.481255 -0.459185
N -1.948089 1.533501 -2.087024
C -1.882270 3.007811 0.377843
C -4.220324 1.523324 -0.565887
C -3.357614 -2.091916 -0.568187
C -3.778629 -1.068280 2.115774
P 2.734662 -1.340657 0.040428
C 2.716029 -2.061042 1.705998
C 2.034127 -2.593086 -1.069619
C 4.477782 -1.212831 -0.483840
C -0.608694 1.115501 -2.499501
C -2.580890 2.424881 -3.049502
C -2.683896 1.745185 -4.406693
C -1.308229 1.310661 -4.894025
C -0.626540 0.433339 -3.854691
C -4.993558 2.249176 0.341949
C -4.863244 0.740621 -1.530979
C -6.248387 0.650293 -1.559726
C -7.011526 1.357839 -0.634803
C -6.381299 2.166241 0.304551
C -1.206490 4.010909 -0.313863
C -2.131902 3.158657 1.749801

C -0.783847 5.154031 0.356851
 C -1.050097 5.309100 1.710475
 C -1.729616 4.309785 2.407643
 C -3.391838 -1.096256 3.458789
 C -5.092022 -0.719845 1.792975
 C -4.298793 -0.769122 4.458416
 C -5.607456 -0.423492 4.130852
 C -6.001072 -0.404497 2.797732
 C -2.882375 -1.825805 -1.851064
 C -4.429928 -2.972376 -0.406446
 C -3.486880 -2.400847 -2.963411
 C -4.574555 -3.252508 -2.799555
 C -5.040244 -3.539825 -1.518428
 C 5.075408 2.101931 -1.235075
 C 4.188294 2.300324 1.002041
 C 6.323681 2.488959 -0.763159
 C 6.532873 2.764694 0.588829
 C 5.441951 2.676770 1.460522
 C 7.900650 3.106855 1.098119
 C 0.709029 -2.477382 -1.484488
 C 2.798571 -3.695940 -1.466045
 C 0.156830 -3.457722 -2.302225
 C 0.919670 -4.548050 -2.702262
 C 2.241409 -4.670332 -2.282639
 C 5.497497 -1.022806 0.451399
 C 4.782949 -1.215137 -1.848334
 C 6.098917 -1.057131 -2.264505
 C 7.113215 -0.880334 -1.329462
 C 6.809865 -0.855983 0.027712
 C 2.360303 -3.389486 1.932428
 C 3.050296 -1.236747 2.787766
 C 3.044958 -1.745021 4.077857
 C 2.683224 -3.072445 4.301144
 C 2.338193 -3.887950 3.231565
 H -1.985961 3.348933 -3.162444
 H -3.567822 2.726131 -2.684532
 H -3.155852 2.431519 -5.121776

H -3.342603 0.868406 -4.316715
 H -0.692413 2.206539 -5.066023
 H -1.382996 0.792686 -5.858753
 H -1.147954 -0.532256 -3.788134
 H 0.412706 0.217195 -4.130237
 H -0.194937 0.453508 -1.733228
 H 0.057926 1.987907 -2.543334
 H -4.271858 0.201814 -2.263829
 H -6.729610 0.025106 -2.309397
 H -8.097570 1.288582 -0.655124
 H -6.971251 2.735351 1.020155
 H -4.518053 2.885389 1.082458
 H -0.954011 3.874851 -1.361073
 H -0.226883 5.916932 -0.182655
 H -0.716965 6.204567 2.231853
 H -1.924771 4.421487 3.472469
 H -2.614766 2.350549 2.299971
 H -2.372934 -1.396650 3.701373
 H -3.985668 -0.794609 5.500771
 H -6.320361 -0.174998 4.915156
 H -7.021675 -0.136875 2.529050
 H -5.415049 -0.690226 0.754851
 H -2.050239 -1.136171 -1.968441
 H -3.110861 -2.174238 -3.960604
 H -5.056087 -3.698846 -3.667687
 H -5.882676 -4.215983 -1.384650
 H -4.789196 -3.209940 0.593004
 H 4.907433 1.858529 -2.281311
 H 7.158747 2.561073 -1.459319
 H 5.581307 2.908805 2.515881
 H 3.337842 2.231073 1.679052
 H 8.465903 3.698382 0.369103
 H 8.481541 2.193838 1.293728
 H 7.853847 3.671001 2.035864
 H 0.113073 -1.631591 -1.145289
 H -0.879761 -3.376484 -2.616207
 H 0.480058 -5.311019 -3.342114

H 2.839327 -5.525173 -2.592505
H 3.833032 -3.788535 -1.139163
H 3.986933 -1.323819 -2.580690
H 6.330305 -1.065035 -3.327825
H 8.142785 -0.754582 -1.659722
H 7.598167 -0.707908 0.763417
H 5.272034 -1.012612 1.514566
H 3.297970 -0.191412 2.605582
H 3.306699 -1.100440 4.914531
H 2.661530 -3.466713 5.315320
H 2.035440 -4.918363 3.405096
H 2.064370 -4.025747 1.102243

$Y_{CN}Sn^{Pip}Y_S$

E = -3472.37827448

Sn -0.449659 -1.244058 0.918940
S -0.241217 1.284452 2.123138
P 1.080289 1.457139 0.580448
C -2.026503 -0.632587 -0.551552
C 1.238744 -0.082087 -0.141925
N -1.401287 -0.476322 -3.029373
C -1.716875 -0.525004 -1.900499
N 3.833164 -1.207608 0.617592
P 2.630342 -0.918274 -0.557128
C 5.011190 -0.366812 0.795352
C 3.305512 -1.700617 1.886806
C 0.472340 2.734651 -0.567612
C 2.634876 2.190499 1.202781
P -3.578589 -0.205265 -0.032671
C -4.043383 1.538471 -0.294848
C -4.961975 -1.164518 -0.738256
C -3.672192 -0.531113 1.750665
C 2.112133 -2.594333 -1.036501
C 3.589304 -0.317320 -1.977107
C -0.078774 2.353981 -1.788629
C 0.493122 4.083945 -0.200955
H -0.102728 1.303688 -2.072061

C -0.605963 3.317735 -2.643772
 H -1.048650 3.001736 -3.586154
 C -0.569175 4.660213 -2.287946
 H -0.975898 5.414566 -2.959361
 C -0.015880 5.043397 -1.066378
 H 0.013324 6.095254 -0.786550
 H 0.913910 4.380020 0.759591
 C 2.943852 2.149564 2.562032
 C 3.542922 2.756344 0.303002
 H 2.215438 1.725922 3.252658
 C 4.156163 2.659245 3.016935
 H 4.390527 2.630225 4.079511
 C 5.063865 3.209722 2.117157
 H 6.011281 3.609217 2.474372
 C 4.755506 3.258793 0.760037
 H 5.458962 3.697346 0.054835
 H 3.295736 2.816288 -0.755489
 H 5.336393 0.023791 -0.172100
 H 4.773579 0.500247 1.429357
 C 6.119057 -1.163735 1.462232
 H 7.001812 -0.523613 1.588791
 H 6.410560 -1.997286 0.806348
 C 5.642623 -1.698712 2.804805
 H 5.449418 -0.847956 3.476254
 H 6.418828 -2.308393 3.284582
 C 4.360189 -2.499432 2.633670
 H 4.573772 -3.419198 2.069732
 H 3.957737 -2.808320 3.606753
 H 2.955049 -0.854160 2.506567
 H 2.421907 -2.322877 1.692829
 C 0.956449 -2.736621 -1.811554
 C 2.854545 -3.721941 -0.683284
 H 0.390668 -1.860502 -2.127261
 C 0.538415 -4.003401 -2.203306
 H -0.362028 -4.100745 -2.806292
 C 1.268194 -5.127946 -1.831645
 H 0.936077 -6.119011 -2.135749

C 2.428120 -4.985608 -1.076438
 H 3.003889 -5.863527 -0.789158
 H 3.761889 -3.601005 -0.095145
 C -3.093324 2.504662 0.051174
 C -5.261173 1.931592 -0.853109
 H -2.136566 2.194662 0.471690
 C -3.376563 3.852103 -0.129771
 H -2.635890 4.595874 0.153873
 C -4.592031 4.241659 -0.684745
 H -4.807270 5.297746 -0.838133
 C -5.529514 3.282002 -1.050912
 H -6.476321 3.583810 -1.494892
 H -5.998157 1.186505 -1.143433
 C -4.792127 -1.807915 -1.965028
 C -6.178969 -1.270809 -0.058892
 H -3.841871 -1.731696 -2.490980
 C -5.840356 -2.542449 -2.510264
 H -5.706680 -3.040325 -3.468637
 C -7.051104 -2.645395 -1.833125
 H -7.866203 -3.226322 -2.260929
 C -7.219982 -2.010884 -0.605749
 H -8.164255 -2.096200 -0.071235
 H -6.308215 -0.778784 0.904604
 C -3.675092 -1.872256 2.151419
 C -3.664721 0.478777 2.711775
 H -3.680708 -2.659031 1.397838
 C -3.667736 -2.196386 3.501387
 H -3.665811 -3.240469 3.807272
 C -3.654784 -1.185197 4.457756
 H -3.643935 -1.438602 5.516198
 C -3.653430 0.147532 4.063260
 H -3.638217 0.938885 4.809661
 H -3.654521 1.522536 2.408179
 C 3.133823 0.778902 -2.704088
 C 4.728350 -1.009311 -2.400694
 H 2.222494 1.283722 -2.390190
 C 3.830520 1.204086 -3.831706

H 3.469313 2.061290 -4.396220
 C 4.972925 0.526158 -4.239726
 H 5.514236 0.855669 -5.124696
 C 5.419510 -0.584834 -3.526188
 H 6.306326 -1.123640 -3.854241
 H 5.065729 -1.882966 -1.843297

$^3Y_{CN}Sn^{Pip}Y_S$

E = -3472.28972492
 Sn -0.371555 -1.533667 0.876862
 S -0.553835 1.040540 1.975311
 P 0.877260 1.356880 0.561702
 C -2.073646 -0.805090 -0.490206
 C 1.205405 -0.163355 -0.151729
 N -1.658751 -0.835849 -3.006303
 C -1.871164 -0.826753 -1.846114
 N 3.867389 -1.122432 0.624435
 P 2.689267 -0.830052 -0.574537
 C 4.909511 -0.161951 0.970649
 C 3.353627 -1.822347 1.797729
 C 0.269624 2.588707 -0.639091
 C 2.310712 2.187486 1.329455
 P -3.682187 -0.191094 0.134024
 C -4.085082 1.432635 -0.502000
 C -4.907443 -1.388279 -0.461582
 C -3.625832 -0.205755 1.881285
 C 2.364488 -2.494028 -1.230191
 C 3.652120 -0.010720 -1.880373
 C -0.218845 2.154904 -1.871397
 C 0.233182 3.949430 -0.321115
 H -0.179993 1.095924 -2.116777
 C -0.731411 3.071083 -2.783376
 H -1.119295 2.716187 -3.735984
 C -0.746477 4.426182 -2.473398
 H -1.141464 5.145252 -3.188796
 C -0.261516 4.864024 -1.242562
 H -0.273848 5.924854 -0.997723

H 0.602684 4.292216 0.644576
 C 2.522332 2.080475 2.705287
 C 3.242937 2.867383 0.538792
 H 1.777168 1.567478 3.312341
 C 3.658654 2.637593 3.282090
 H 3.814366 2.556104 4.356303
 C 4.590864 3.302181 2.490217
 H 5.479429 3.738221 2.942971
 C 4.379693 3.417871 1.118491
 H 5.100962 3.945105 0.496869
 H 3.074736 2.976198 -0.531062
 H 5.221431 0.384971 0.077212
 H 4.526086 0.582445 1.684478
 C 6.084885 -0.884656 1.605709
 H 6.865690 -0.156102 1.859493
 H 6.515896 -1.584727 0.874811
 C 5.628064 -1.640516 2.845061
 H 5.297711 -0.912806 3.601979
 H 6.457542 -2.203386 3.291601
 C 4.470289 -2.568522 2.508122
 H 4.824880 -3.378375 1.854061
 H 4.070703 -3.041656 3.414020
 H 2.873279 -1.102982 2.488076
 H 2.568425 -2.523219 1.484634
 C 1.227681 -2.691732 -2.019966
 C 3.247427 -3.551377 -1.009095
 H 0.552566 -1.862187 -2.220682
 C 0.975153 -3.943224 -2.570757
 H 0.089047 -4.084383 -3.186176
 C 1.848528 -4.999968 -2.333965
 H 1.645489 -5.980490 -2.760951
 C 2.984670 -4.803312 -1.555523
 H 3.670867 -5.627953 -1.372145
 H 4.134980 -3.387481 -0.401300
 C -3.298091 2.518597 -0.084383
 C -5.131345 1.641000 -1.410404
 H -2.459368 2.351232 0.592229

C -3.595920 3.796480 -0.535088
 H -2.992338 4.634390 -0.194796
 C -4.641870 4.003201 -1.430714
 H -4.862896 5.006518 -1.789755
 C -5.401025 2.921334 -1.871928
 H -6.218806 3.077143 -2.572952
 H -5.742665 0.805335 -1.742423
 C -4.974512 -1.738996 -1.816879
 C -5.844054 -1.911137 0.435449
 H -4.248246 -1.348390 -2.526304
 C -5.978452 -2.592528 -2.261445
 H -6.031195 -2.854074 -3.316539
 C -6.903413 -3.115879 -1.364828
 H -7.683216 -3.788430 -1.717125
 C -6.830972 -2.777978 -0.014811
 H -7.551385 -3.186731 0.690916
 H -5.793814 -1.630369 1.485722
 C -3.180042 -1.418794 2.479035
 C -3.872716 0.914161 2.703730
 H -3.069442 -2.320006 1.876716
 C -3.018432 -1.483601 3.864047
 H -2.697480 -2.420888 4.316138
 C -3.254231 -0.374961 4.658790
 H -3.109867 -0.431756 5.735397
 C -3.686897 0.830446 4.065163
 H -3.882889 1.702135 4.686161
 H -4.213527 1.846181 2.259617
 C 3.108785 1.078374 -2.554769
 C 4.892725 -0.522315 -2.274955
 H 2.129541 1.449107 -2.264603
 C 3.809231 1.676097 -3.598199
 H 3.376419 2.528254 -4.118360
 C 5.049640 1.177214 -3.976429
 H 5.597486 1.641257 -4.794501
 C 5.589183 0.074182 -3.316737
 H 6.555416 -0.323892 -3.620515
 H 5.306307 -1.389180 -1.760247

3.3.3.3 Koordinaten der chlorido(ylid)substituierten Stannylene

YSnCl

E = -2360.61257775

C 3.305917 -0.260172 -1.489673

H 2.974507 0.146956 -2.441718

C 2.404025 -0.962571 -0.708286

O 0.478749 -2.642912 -1.286312

C -2.021413 3.081591 -1.058605

H -1.439113 3.747936 -0.422460

C 4.606716 -0.082798 -1.027742

H 5.318093 0.474482 -1.635758

C -0.891830 0.285309 2.873827

H -0.140203 -0.461267 2.623212

C -1.374683 1.128866 1.868038

C 1.723061 1.979479 1.148436

H 1.457439 1.508485 2.093079

C 2.955087 2.603484 1.009068

H 3.649432 2.621424 1.846637

Sn -1.142599 -2.749971 0.393117

C 2.418384 3.161767 -1.273040

H 2.693138 3.613278 -2.224204

C 1.186819 2.528604 -1.144152

H 0.515008 2.460076 -1.996760

C -1.849040 1.695023 -0.972523

C 2.786112 -1.502097 0.516532

H 2.061275 -2.052329 1.115233

C -2.359721 2.069974 2.171796

H -2.763400 2.711926 1.392951

C 0.827453 1.952681 0.076640

C 6.405570 -0.378516 0.713183

H 6.862460 -1.319694 1.042266

H 6.404833 0.297591 1.578892

H 7.050176 0.062807 -0.053687

C 3.299231 3.204168 -0.198922

H 4.264444 3.695604 -0.305556

C -0.332340 -0.692690 -0.026153

P -0.684761 0.949975 0.198239

O 0.624476 -0.410604 -2.523981
 S 0.713196 -1.137483 -1.255098
 C 5.013611 -0.596932 0.201892
 C 4.082439 -1.315786 0.963960
 H 4.384891 -1.734818 1.922956
 C -1.380901 0.393130 4.169884
 H -1.002901 -0.268353 4.946755
 C -2.356655 1.338104 4.469407
 H -2.743597 1.418879 5.483347
 C -2.846059 2.172388 3.469940
 H -3.619129 2.903074 3.698515
 C -3.644481 2.757084 -2.807034
 H -4.347583 3.172907 -3.526487
 C -2.921607 3.609192 -1.973946
 H -3.055464 4.686878 -2.044401
 C -3.462582 1.381785 -2.728848
 H -4.019936 0.714223 -3.382417
 C -2.560693 0.844085 -1.815980
 H -2.413352 -0.233216 -1.755383
 Cl -3.117714 -2.627118 -1.093336

³YSnCl

E = -2360.52303224
 C 3.200800 -0.475580 -1.636355
 H 2.978208 0.150979 -2.496485
 C 2.194415 -1.265354 -1.096606
 O 0.220595 -2.583468 -2.179228
 C -1.505228 3.355049 -0.158645
 H -0.652477 3.743772 0.396467
 C 4.458419 -0.495243 -1.051520
 H 5.249692 0.127019 -1.467890
 C 0.183244 -0.387630 2.606361
 H 0.812117 -1.048939 2.011820
 C -0.536421 0.639872 1.981469
 C 2.241578 1.703275 0.903176
 H 2.084993 1.196839 1.852276
 C 3.451512 2.339731 0.654309

H 4.233900 2.322352 1.410320
 Sn -2.080281 -2.148373 0.338002
 C 2.656401 3.014523 -1.519499
 H 2.818544 3.524142 -2.467017
 C 1.444792 2.379695 -1.281272
 H 0.669332 2.372717 -2.043735
 C -1.611186 1.984366 -0.423236
 C 2.439449 -2.098305 -0.009834
 H 1.647222 -2.745868 0.365790
 C -1.343732 1.486876 2.742284
 H -1.912124 2.279712 2.261666
 C 1.232996 1.725777 -0.062758
 C 6.075557 -1.256509 0.717497
 H 6.176964 -2.039423 1.475761
 H 6.254125 -0.290173 1.208693
 H 6.873767 -1.391918 -0.022070
 C 3.658663 2.996732 -0.553648
 H 4.605757 3.497959 -0.744550
 C -0.523339 -0.719208 -0.530981
 P -0.344677 0.860945 0.196710
 O 0.536891 -0.126718 -2.779153
 S 0.559632 -1.221998 -1.795515
 C 4.723623 -1.284934 0.071303
 C 3.698020 -2.089922 0.576429
 H 3.895769 -2.731196 1.434235
 C 0.077522 -0.571967 3.976550
 H 0.630066 -1.376993 4.456336
 C -0.742178 0.263718 4.732257
 H -0.831322 0.111597 5.805902
 C -1.447234 1.290686 4.114436
 H -2.091367 1.941163 4.702327
 C -3.565669 3.722322 -1.349120
 H -4.332623 4.403482 -1.713033
 C -2.487942 4.220012 -0.619866
 H -2.409741 5.285863 -0.415633
 C -3.660618 2.361855 -1.618701
 H -4.497699 1.967511 -2.190413

C -2.685223 1.483848 -1.158729
H -2.771584 0.419421 -1.371758
Cl -3.825332 -1.877893 -1.408014

^cyY_{Sn}Cl

E = -3818.37212370
Sn 0.074030 0.711870 1.416159
O 0.960641 -1.578327 1.864308
C 1.842314 0.028909 0.194377
O -0.576970 2.184960 -0.484527
C -1.708782 0.075543 0.148982
S 2.185269 -1.382863 0.991458
P 2.674452 0.560330 -1.199660
S -1.865560 1.446354 -0.779211
P -2.804604 -1.231378 0.217705
O 2.635920 -2.539801 0.193503
C 3.510710 -1.157538 2.182179
C 4.463051 0.118679 -1.130415
C 2.037627 -0.150195 -2.775859
C 2.401721 2.367220 -1.355823
O -2.235672 1.290135 -2.197903
C -3.123016 2.541782 -0.123903
C -1.850624 -2.779679 0.458214
C -3.880996 -1.257639 -1.273418
C -3.960989 -1.159012 1.660072
C 4.566269 -2.055531 2.214364
C 3.477261 -0.074248 3.056432
C 5.211833 0.945759 -0.084036
H 4.422202 -0.925927 -0.776193
C 5.224913 0.135016 -2.457017
C 0.559105 0.183148 -2.951791
H 2.619640 0.315808 -3.587477
C 2.228222 -1.666582 -2.823979
C 2.555266 3.168831 -0.063377
H 1.327052 2.392310 -1.582662
C 3.151817 3.041936 -2.502334
C -4.346390 2.654961 -0.767697

C -2.911918 3.156228 1.107900
 C -2.728648 -4.026894 0.556712
 H -1.362861 -2.605370 1.430912
 C -0.709772 -2.975209 -0.538591
 C -3.098355 -1.652846 -2.523828
 H -4.124963 -0.187844 -1.374846
 C -5.202774 -2.020471 -1.211416
 C -4.796425 0.117465 1.589895
 H -4.624738 -2.034039 1.581371
 C -3.198229 -1.229521 2.983294
 H 4.559827 -2.898407 1.527633
 C 5.607775 -1.853334 3.116939
 H 2.645693 0.629574 3.018096
 C 4.519133 0.115408 3.948235
 C 6.617222 0.400178 0.124843
 H 5.283127 1.983690 -0.441894
 H 4.655201 0.970274 0.859370
 C 6.640998 -0.396415 -2.257442
 H 4.711961 -0.463170 -3.217533
 H 5.272687 1.162691 -2.843385
 C 0.005451 -0.391292 -4.246969
 H 0.015177 -0.238242 -2.092169
 H 0.369757 1.260445 -2.925524
 C 1.693158 -2.244745 -4.127929
 H 3.279612 -1.946849 -2.684079
 H 1.697216 -2.106602 -1.971256
 C 2.003757 4.573635 -0.272048
 H 2.026228 2.671360 0.756570
 H 3.611553 3.224985 0.232993
 C 2.619862 4.455904 -2.710340
 H 4.224555 3.090852 -2.261318
 H 3.061413 2.465777 -3.432107
 C -5.384896 3.340419 -0.143627
 H -4.472032 2.202638 -1.749159
 H -1.940267 3.071987 1.593334
 C -3.951414 3.842396 1.714058
 H -3.220826 -4.194470 -0.413443

H -3.527187 -3.891961 1.298127
 C -1.895297 -5.253926 0.907260
 H -0.089122 -2.071473 -0.561481
 H -1.110160 -3.120500 -1.548675
 C 0.112101 -4.197683 -0.153634
 H -2.128957 -1.146701 -2.527406
 H -2.916126 -2.737546 -2.499423
 C -3.898335 -1.309111 -3.768128
 H -5.010657 -3.101147 -1.157903
 H -5.779987 -1.757342 -0.317450
 C -6.021010 -1.704513 -2.461616
 H -4.106446 0.967855 1.578203
 H -5.364106 0.168209 0.652343
 C -5.727189 0.268174 2.783608
 C -4.124572 -1.054021 4.180822
 H -2.661309 -2.181960 3.070613
 H -2.434687 -0.435420 2.989669
 H 6.440829 -2.555072 3.138926
 C 5.606641 -0.767903 3.990728
 H 4.494692 0.967555 4.626675
 C 7.393566 0.378444 -1.184297
 H 6.545829 -0.618936 0.530504
 H 7.144022 0.998597 0.879557
 H 6.580988 -1.455549 -1.964475
 H 7.187783 -0.366855 -3.208905
 H -1.060248 -0.139099 -4.317319
 H 0.500606 0.096963 -5.101063
 C 0.225759 -1.893883 -4.330845
 H 1.832735 -3.333737 -4.132461
 H 2.281887 -1.851260 -4.971745
 H 2.110754 5.159508 0.650200
 H 0.926231 4.492451 -0.475532
 C 2.700284 5.276396 -1.429903
 H 3.172421 4.950346 -3.520051
 H 1.571236 4.393177 -3.036544
 H -6.349954 3.421267 -0.642576
 C -5.213102 3.927915 1.109725

H -3.787703 4.318013 2.680538
 H -1.480811 -5.124208 1.918150
 H -2.539130 -6.142717 0.942380
 C -0.752352 -5.446402 -0.078379
 H 0.937114 -4.324379 -0.864401
 H 0.586004 -4.009903 0.817993
 H -4.023222 -0.216900 -3.806807
 H -3.335324 -1.592987 -4.667136
 C -5.254633 -2.002793 -3.745047
 H -6.966223 -2.262559 -2.441694
 H -6.289148 -0.636960 -2.440411
 H -6.476794 -0.538353 2.779409
 H -6.279994 1.213239 2.694280
 C -4.941432 0.226181 4.085229
 H -4.809346 -1.914488 4.234353
 H -3.535055 -1.068977 5.106387
 C 6.733729 -0.539635 4.952517
 H 7.548573 1.412682 -1.529157
 H 8.392519 -0.051265 -1.034323
 H -0.137006 -2.287636 -5.289813
 H -0.367190 -2.384252 -3.545276
 H 2.268853 6.272971 -1.590625
 H 3.759287 5.434392 -1.171473
 C -6.345157 4.621882 1.805433
 H -1.168355 -5.670325 -1.073783
 H -0.147233 -6.316336 0.208018
 H -5.854295 -1.712955 -4.617620
 H -5.100270 -3.090166 -3.822968
 H -4.263703 1.093002 4.120105
 H -5.613244 0.317264 4.948569
 H 6.371450 -0.504384 5.987809
 H 7.234620 0.417222 4.755820
 H 7.485581 -1.332481 4.884646
 H -6.722850 4.013309 2.638907
 H -7.182602 4.806830 1.124856
 H -6.028131 5.582722 2.227821

$^3(\text{CyY})\text{SnCl}$

E = -3818.29445342

Sn 0.109228 0.351898 1.204868

O 1.428127 -2.514606 1.275044

C 1.917178 -0.227744 0.165292

O -1.021230 2.623620 -0.641506

C -1.703713 0.232660 0.046604

S 2.492808 -1.774537 0.574965

P 2.703195 0.751098 -1.032407

S -2.137341 1.668088 -0.781607

P -2.661464 -1.206472 0.138903

O 3.157403 -2.429770 -0.572252

C 3.790938 -1.572619 1.794052

C 4.527266 0.487884 -1.110991

C 2.064464 0.447861 -2.735962

C 2.233384 2.482343 -0.661293

O -2.637568 1.393600 -2.141527

C -3.503743 2.451080 0.064128

C -1.633428 -2.714653 -0.090178

C -4.050625 -1.107484 -1.077175

C -3.479790 -1.447270 1.783156

C 5.032188 -2.149400 1.579598

C 3.543984 -0.831735 2.947314

C 5.257881 1.114540 0.077965

H 4.613512 -0.607847 -1.037033

C 5.180102 0.932357 -2.423038

C 0.584859 0.813738 -2.841516

H 2.642755 1.115193 -3.394174

C 2.292371 -0.998954 -3.171552

C 2.594204 3.009122 0.728789

H 1.135600 2.372871 -0.664868

C 2.575229 3.525597 -1.723397

C -4.772913 2.450049 -0.496053

C -3.281667 3.019508 1.315594

C -2.485412 -3.986071 -0.093540

H -0.986749 -2.717780 0.802477

C -0.683884 -2.645905 -1.285220

C -3.602344 -1.417764 -2.507213
 H -4.288007 -0.036324 -1.045226
 C -5.342685 -1.850364 -0.735325
 C -4.154404 -0.145438 2.206397
 H -4.246444 -2.216202 1.606522
 C -2.558881 -1.959282 2.888949
 H 5.192628 -2.732269 0.675233
 C 6.045076 -1.956493 2.516455
 H 2.561841 -0.387329 3.103855
 C 4.560627 -0.643657 3.867713
 C 6.729840 0.726957 0.069503
 H 5.190024 2.208023 -0.004972
 H 4.781769 0.833776 1.025039
 C 6.665903 0.586730 -2.430182
 H 4.697453 0.455482 -3.282306
 H 5.052938 2.018207 -2.548621
 C 0.040746 0.554094 -4.238698
 H 0.020905 0.216675 -2.110724
 H 0.405179 1.859938 -2.574815
 C 1.759652 -1.240040 -4.577830
 H 3.352841 -1.272965 -3.104211
 H 1.785531 -1.659790 -2.459479
 C 1.750898 4.245737 1.011678
 H 2.430969 2.236524 1.490480
 H 3.656120 3.281182 0.770812
 C 1.763477 4.789420 -1.449588
 H 3.652384 3.753284 -1.690139
 H 2.356344 3.158313 -2.733088
 C -5.840475 2.966769 0.233110
 H -4.909930 2.050943 -1.498985
 H -2.272012 3.031729 1.724582
 C -4.351524 3.534826 2.027861
 H -3.171116 -3.965937 -0.953186
 H -3.112461 -4.039434 0.806888
 C -1.608793 -5.227468 -0.199256
 H -0.025238 -1.778870 -1.155263
 H -1.247382 -2.488679 -2.211123

C 0.145287 -3.919024 -1.410691
 H -2.675255 -0.881856 -2.731276
 H -3.404668 -2.495547 -2.599052
 C -4.690171 -1.020099 -3.492351
 H -5.175669 -2.936914 -0.748201
 H -5.691612 -1.592883 0.270922
 C -6.430145 -1.479425 -1.740525
 H -3.365252 0.606738 2.332400
 H -4.812488 0.241613 1.415415
 C -4.916123 -0.299159 3.513711
 C -3.317270 -2.104580 4.203642
 H -2.113130 -2.921874 2.613035
 H -1.718685 -1.259497 3.016532
 H 7.024682 -2.401477 2.345315
 C 5.832670 -1.197123 3.665154
 H 4.370366 -0.053710 4.763719
 C 7.396509 1.163074 -1.226509
 H 6.815833 -0.362868 0.178577
 H 7.236514 1.167538 0.937932
 H 6.769865 -0.508736 -2.423908
 H 7.122096 0.937269 -3.365067
 H -1.028607 0.796317 -4.246544
 H 0.528010 1.239964 -4.949901
 C 0.284471 -0.879623 -4.682013
 H 1.922716 -2.289515 -4.856340
 H 2.333457 -0.633887 -5.296777
 H 1.972146 4.633983 2.014635
 H 0.690084 3.954122 0.999673
 C 1.999275 5.319284 -0.040852
 H 2.002983 5.559599 -2.194418
 H 0.698382 4.542999 -1.567465
 H -6.839530 2.959742 -0.201043
 C -5.652466 3.501745 1.507446
 H -4.180644 3.971763 3.011217
 H -0.972876 -5.295883 0.695429
 H -2.239829 -6.125895 -0.211303
 C -0.726704 -5.164708 -1.437191

H 0.762884 -3.858483 -2.316512
 H 0.841032 -3.975013 -0.566218
 H -4.823463 0.070754 -3.437161
 H -4.365817 -1.242947 -4.516794
 C -5.999486 -1.728918 -3.178646
 H -7.350930 -2.031084 -1.510408
 H -6.667338 -0.411445 -1.615623
 H -5.750887 -1.003536 3.374170
 H -5.364127 0.663831 3.793083
 C -3.999609 -0.808355 4.616399
 H -4.078276 -2.892937 4.093312
 H -2.630039 -2.445760 4.988213
 C 6.926252 -0.973578 4.666041
 H 7.386355 2.262440 -1.287547
 H 8.451661 0.860793 -1.240687
 H -0.079200 -1.035429 -5.706267
 H -0.293978 -1.557720 -4.037828
 H 1.359633 6.192010 0.144166
 H 3.039468 5.672259 0.044530
 C -6.803263 4.038459 2.304247
 H -1.365994 -5.157619 -2.334775
 H -0.102715 -6.064941 -1.506293
 H -6.789635 -1.410779 -3.871066
 H -5.869028 -2.811312 -3.332887
 H -3.232135 -0.047068 4.823273
 H -4.558536 -0.950243 5.550426
 H 6.646550 -1.364086 5.652954
 H 7.135603 0.096388 4.792762
 H 7.855749 -1.464810 4.360766
 H -6.947717 3.461281 3.227076
 H -7.737840 4.000246 1.735522
 H -6.629557 5.080107 2.601889

*Pip***Y_sSnCl**

E = -2764.02995260
 S -1.417914 -1.766489 -2.557271
 P -1.487391 -0.884308 -0.728228

Sn 1.231751 -1.100284 -2.230854
 C 0.089710 -0.259536 -0.470951
 C -2.777364 0.390665 -0.629915
 C -2.004298 -2.167317 0.459991
 Cl 2.133265 -3.073585 -0.910722
 P 0.684982 0.952762 0.527488
 C -3.415490 0.858541 -1.775707
 C -3.044557 0.984780 0.607792
 C -3.291697 -2.239539 0.992418
 C -1.060804 -3.148620 0.782270
 N 0.828213 0.607782 2.168831
 C -0.224138 2.527899 0.432698
 C 2.371379 1.335304 -0.032732
 C -4.318612 1.913305 -1.684106
 C -3.945719 2.036649 0.695340
 C -3.624680 -3.270694 1.866449
 C -1.401195 -4.174153 1.652635
 C 0.171921 -0.544099 2.760499
 C 1.838643 1.218457 3.017692
 C -0.521550 3.269946 1.574572
 C -0.654899 2.979134 -0.818270
 C 3.278229 0.270134 -0.103366
 C 2.776291 2.614059 -0.416729
 C -4.584305 2.500785 -0.452279
 C -2.680654 -4.233790 2.201612
 C 1.181530 -1.615838 3.129799
 C 2.888867 0.203404 3.449750
 C -1.235243 4.459675 1.466410
 C -1.364819 4.167018 -0.923727
 C 4.571223 0.485891 -0.565883
 C 4.074934 2.824038 -0.870088
 C 2.243821 -1.037362 4.055997
 C -1.654401 4.908811 0.219353
 C 4.971096 1.763119 -0.946278
 H -3.194633 0.387826 -2.732774
 H -2.536193 0.627749 1.505148
 H -4.040129 -1.496568 0.726463

H -0.060882 -3.104975 0.346547
H -4.819145 2.275137 -2.580299
H -4.144239 2.501916 1.658736
H -4.628887 -3.320687 2.283315
H -0.662043 -4.934087 1.899292
H -0.565366 -0.934716 2.056837
H -0.378454 -0.214427 3.658629
H 1.344830 1.643410 3.909699
H 2.303626 2.057279 2.486116
H -0.209208 2.904854 2.550575
H -0.452234 2.373023 -1.700707
H 2.967280 -0.735978 0.183276
H 2.078013 3.446693 -0.364230
H -5.290287 3.326359 -0.383507
H -2.943551 -5.038308 2.886194
H 1.636114 -1.994176 2.201245
H 0.667714 -2.463123 3.601970
H 3.481170 -0.082653 2.570794
H 3.579847 0.672250 4.162716
H -1.469111 5.034380 2.360629
H -1.707544 4.508637 -1.898286
H 5.261726 -0.352248 -0.632042
H 4.385982 3.823238 -1.168536
H 1.772617 -0.767375 5.014444
H 3.009578 -1.788063 4.287587
H -2.217520 5.836572 0.136529
H 5.983846 1.931750 -1.307258

$^3(\text{PipY}_s)\text{SnCl}$

E = -2763.93190424
S -0.888863 -1.859597 -2.660884
P -1.304370 -1.133054 -0.819200
Sn 1.635195 -0.727726 -1.739309
C 0.093589 -0.251640 -0.334172
C -2.806410 -0.117595 -0.774811
C -1.640012 -2.545653 0.284116
Cl 2.854859 -2.697417 -0.932103

P 0.435476 1.087441 0.652754
 C -3.431690 0.284950 -1.952168
 C -3.276812 0.342946 0.459223
 C -2.922439 -2.907779 0.694817
 C -0.541380 -3.320854 0.669762
 N 0.614316 0.731298 2.291894
 C -0.798828 2.414097 0.587449
 C 1.961223 1.752279 -0.019776
 C -4.525862 1.142664 -1.895592
 C -4.368079 1.198762 0.510503
 C -3.101786 -4.023215 1.508512
 C -0.727575 -4.433143 1.477736
 C 0.392948 -0.619138 2.785416
 C 1.518001 1.517810 3.120025
 C -1.333175 2.975141 1.745319
 C -1.241595 2.847977 -0.665816
 C 2.948995 0.752839 -0.482049
 C 2.138928 3.095645 -0.276060
 C -4.994224 1.597389 -0.668116
 C -2.007390 -4.782898 1.903579
 C 1.699611 -1.383569 2.904138
 C 2.861360 0.822274 3.291513
 C -2.296300 3.975930 1.651357
 C -2.207033 3.839427 -0.755533
 C 4.093603 1.300285 -1.207137
 C 3.256830 3.561743 -0.985115
 C 2.682132 -0.612132 3.778173
 C -2.732210 4.406827 0.404194
 C 4.218988 2.636249 -1.460585
 H -3.050381 -0.081400 -2.904339
 H -2.779207 0.037839 1.380996
 H -3.784808 -2.324040 0.380098
 H 0.459794 -3.051551 0.331627
 H -5.016426 1.453472 -2.816055
 H -4.724939 1.564587 1.471067
 H -4.104004 -4.299553 1.830657
 H 0.131956 -5.032010 1.772718

H -0.305170 -1.133159 2.119881
H -0.093951 -0.543912 3.771632
H 1.041962 1.668534 4.103690
H 1.647811 2.511014 2.672787
H -1.002911 2.613511 2.716737
H -0.837542 2.383850 -1.564894
H 3.228653 -0.015455 0.257636
H 1.379857 3.809064 0.044592
H -5.849793 2.268956 -0.626762
H -2.150814 -5.654382 2.539731
H 2.109624 -1.532694 1.892743
H 1.512534 -2.383505 3.317452
H 3.377792 0.826715 2.322231
H 3.488723 1.393767 3.988064
H -2.710994 4.415095 2.556715
H -2.560538 4.164690 -1.731724
H 4.866639 0.606098 -1.536128
H 3.369569 4.624698 -1.182083
H 2.300086 -0.594669 4.811224
H 3.651780 -1.123874 3.815425
H -3.490860 5.184007 0.332245
H 5.077780 2.999641 -2.022604

Y_{Ph}SnCl

E = -1772.01021413
P -0.796094 0.005927 -0.037313
C 0.912514 -0.001044 -0.064913
C 1.553586 1.333131 -0.001147
C 1.600496 2.076944 1.187311
H 1.198355 1.639305 2.099186
C 2.143001 3.356312 1.216891
H 2.162011 3.911832 2.153302
C 2.667559 3.922503 0.059297
H 3.095101 4.923192 0.081285
C 2.654110 3.189121 -1.122851
H 3.073855 3.614842 -2.032896
C 2.106324 1.913040 -1.151493

H 2.088857 1.344832 -2.079362
 C -1.568606 0.385249 1.578097
 C -2.773608 1.081272 1.689499
 H -3.274311 1.451075 0.796829
 C -3.331090 1.306745 2.943769
 H -4.266934 1.855738 3.028255
 C -2.693270 0.835638 4.086778
 H -3.130020 1.017882 5.066882
 C -1.493949 0.137167 3.978769
 H -0.991558 -0.228838 4.871978
 C -0.931662 -0.083913 2.728040
 H 0.016304 -0.613085 2.627065
 C -1.419852 -1.637639 -0.489023
 C -2.324576 -2.339004 0.308549
 H -2.687134 -1.900549 1.235547
 C -2.754641 -3.604841 -0.076394
 H -3.451814 -4.151597 0.555127
 C -2.293407 -4.170832 -1.259453
 H -2.631277 -5.161985 -1.555798
 C -1.399733 -3.471275 -2.064920
 H -1.038189 -3.911219 -2.991952
 C -0.962100 -2.209921 -1.682739
 H -0.259590 -1.658202 -2.305381
 C -1.555989 1.210286 -1.174006
 C -1.258168 2.568869 -1.004266
 H -0.624494 2.894781 -0.181761
 C -1.772117 3.507968 -1.888612
 H -1.529092 4.559805 -1.753149
 C -2.589155 3.107189 -2.941538
 H -2.989019 3.846426 -3.633007
 C -2.897183 1.761826 -3.106445
 H -3.542667 1.444170 -3.922973
 C -2.382785 0.814256 -2.227471
 H -2.633039 -0.235420 -2.363399
 Sn 1.979670 -1.841795 0.046783
 Cl 4.174022 -0.739790 0.082024

³Y_{Ph}SnCl

E = -1771.95276395

P -0.753674 -0.367719 -0.054429

C 0.606514 0.717553 0.154401

C 0.435260 2.144325 0.131865

C -0.756474 2.806067 0.509939

H -1.603021 2.221104 0.862387

C -0.844857 4.188098 0.499868

H -1.766867 4.672496 0.816426

C 0.242655 4.956411 0.089051

H 0.168204 6.042117 0.071858

C 1.428244 4.327748 -0.293101

H 2.279838 4.922965 -0.617101

C 1.534240 2.948835 -0.258794

H 2.451624 2.448685 -0.566623

C -1.576592 -0.743243 1.518693

C -2.810744 -1.401584 1.561153

H -3.318097 -1.672986 0.636602

C -3.398224 -1.696190 2.784787

H -4.358189 -2.207534 2.814093

C -2.761352 -1.334775 3.968694

H -3.224467 -1.565500 4.926037

C -1.538309 -0.674618 3.929958

H -1.041277 -0.386598 4.853671

C -0.944475 -0.376670 2.708814

H 0.009870 0.147872 2.678938

C -0.142017 -1.908319 -0.779361

C -0.747617 -3.138083 -0.520341

H -1.565951 -3.215439 0.190719

C -0.277779 -4.284666 -1.152467

H -0.741825 -5.245177 -0.938124

C 0.785288 -4.205175 -2.045055

H 1.153141 -5.106354 -2.532040

C 1.387182 -2.977432 -2.305893

H 2.237112 -2.906211 -2.980820

C 0.930119 -1.828515 -1.674752

H 1.441906 -0.881811 -1.848554

C -2.043442 0.227146 -1.196620
 C -3.221624 0.832448 -0.750261
 H -3.436147 0.899044 0.314478
 C -4.128995 1.352516 -1.664810
 H -5.045595 1.817921 -1.308235
 C -3.865302 1.281671 -3.028443
 H -4.576531 1.691667 -3.742675
 C -2.690969 0.686785 -3.477866
 H -2.478928 0.629632 -4.543357
 C -1.783347 0.159807 -2.568504
 H -0.870059 -0.309929 -2.927918
 Sn 2.593519 -0.234191 0.986151
 Cl 3.706476 0.168736 -1.264507

Y_{PhF}SnCl

E = -2268.91939508
 P -1.131545 0.565904 0.054602
 C 0.050453 -0.654955 -0.130549
 C 1.458224 -0.244575 -0.073969
 C 2.270751 -0.506796 1.033556
 C 3.610332 -0.149168 1.075796
 C 4.187809 0.479625 -0.019833
 C 3.417999 0.746413 -1.144805
 C 2.082374 0.372898 -1.163720
 C -1.528899 1.032757 1.774338
 C -2.204873 2.223792 2.059460
 H -2.478959 2.901982 1.252146
 C -2.517978 2.544001 3.373647
 H -3.044749 3.470034 3.595579
 C -2.149369 1.684645 4.406697
 H -2.388443 1.941952 5.436854
 C -1.467688 0.506320 4.125558
 H -1.167328 -0.158206 4.933066
 C -1.157425 0.177732 2.809436
 H -0.604054 -0.729475 2.574074
 C -2.683307 0.000161 -0.692873
 C -3.898394 0.016677 -0.007582

H -3.944358 0.388888 1.013272
 C -5.049327 -0.460963 -0.625808
 H -5.992276 -0.459198 -0.083085
 C -4.994300 -0.946380 -1.927412
 H -5.896944 -1.321262 -2.405935
 C -3.785409 -0.959568 -2.617412
 H -3.739978 -1.341717 -3.635031
 C -2.630631 -0.493382 -2.002994
 H -1.675782 -0.514998 -2.526889
 C -0.656488 2.154581 -0.688406
 C 0.364026 2.870720 -0.053851
 H 0.766788 2.518932 0.895424
 C 0.868191 4.026313 -0.634505
 H 1.668447 4.574506 -0.141782
 C 0.349224 4.480388 -1.843304
 H 0.744565 5.386227 -2.298537
 C -0.675756 3.779038 -2.468575
 H -1.086769 4.137141 -3.410230
 C -1.176177 2.613986 -1.898064
 H -1.972427 2.065914 -2.396854
 Sn -0.544040 -2.702565 -0.267391
 Cl 1.778483 -3.500719 -0.260770
 F 1.384855 0.623924 -2.266377
 F 3.965988 1.346043 -2.191745
 F 5.463460 0.829553 0.010259
 F 4.343404 -0.405846 2.148272
 F 1.759303 -1.113047 2.098769

³Y_{PhF}SnCl

E = -2268.85323125
 P -1.096665 0.651189 0.103077
 C 0.123552 -0.585548 0.370066
 C 1.519378 -0.237768 0.282941
 C 2.448468 -0.707882 1.226984
 C 3.803582 -0.440542 1.121699
 C 4.281419 0.303690 0.047353
 C 3.396417 0.777086 -0.915464

C 2.045816 0.511421 -0.783336
 C -2.335536 0.489681 1.419872
 C -2.461243 1.430490 2.442410
 H -1.832098 2.316577 2.457930
 C -3.407174 1.240749 3.444392
 H -3.502535 1.976620 4.239990
 C -4.227192 0.118353 3.427705
 H -4.965172 -0.027570 4.214096
 C -4.111670 -0.814663 2.401257
 H -4.758115 -1.689532 2.379766
 C -3.173455 -0.630716 1.394341
 H -3.081910 -1.361868 0.589845
 C -2.013827 0.477297 -1.438448
 C -3.258103 1.108068 -1.552288
 H -3.678293 1.651650 -0.707015
 C -3.960542 1.027290 -2.747138
 H -4.927234 1.517637 -2.841086
 C -3.430862 0.308898 -3.816347
 H -3.987252 0.239744 -4.749279
 C -2.201129 -0.328266 -3.692902
 H -1.793372 -0.904635 -4.520365
 C -1.481810 -0.246730 -2.505582
 H -0.528549 -0.765450 -2.407504
 C -0.411861 2.323013 0.213271
 C 0.453133 2.606366 1.277289
 H 0.660544 1.845584 2.028888
 C 1.053854 3.854735 1.369896
 H 1.724912 4.071316 2.198357
 C 0.804692 4.819549 0.398409
 H 1.281127 5.795363 0.467738
 C -0.044547 4.535357 -0.665968
 H -0.231042 5.286329 -1.430679
 C -0.651657 3.289001 -0.764356
 H -1.301069 3.062797 -1.607112
 Sn -0.416311 -2.898071 0.264651
 Cl 0.926095 -2.686344 -1.888272
 F 1.224217 0.949884 -1.731866

F 3.851969 1.470962 -1.944060
 F 5.571346 0.562297 -0.055607
 F 4.646566 -0.874255 2.043228
 F 2.026316 -1.396065 2.274082

Y_{CN}SnCl

E = -1632.97164967
 N -0.569629 3.200097 -1.428413
 C -0.693938 2.123632 -0.999366
 C -0.796756 0.823023 -0.477659
 Sn -2.668412 -0.164261 -0.070758
 P 0.686543 0.075443 -0.044773
 Cl -4.002152 1.691848 -0.910536
 C 1.630241 1.002204 1.201195
 C 0.298293 -1.540658 0.669428
 C 1.846480 -0.234838 -1.409757
 C 0.996271 2.042847 1.880701
 C 2.956415 0.676852 1.499532
 C 0.245515 -1.717999 2.052196
 C -0.084488 -2.580387 -0.184851
 C 2.711164 -1.333530 -1.394293
 C 1.880432 0.663651 -2.480185
 H -0.030458 2.300995 1.628629
 C 1.686142 2.750127 2.859745
 C 3.636201 1.381062 2.484065
 H 3.461850 -0.120499 0.957739
 H 0.538882 -0.906378 2.715483
 C -0.186334 -2.931308 2.577093
 C -0.512581 -3.790331 0.346510
 H -0.043575 -2.439071 -1.264215
 H 2.679606 -2.045060 -0.570375
 C 3.605923 -1.528911 -2.439948
 C 2.779809 0.461063 -3.520185
 H 1.208872 1.519867 -2.500743
 H 1.193624 3.568312 3.380810
 C 3.001100 2.417597 3.163791
 H 4.668107 1.126259 2.716835

H -0.228973 -3.068345 3.655478
 C -0.564935 -3.964288 1.726423
 H -0.811088 -4.597959 -0.318362
 H 4.274081 -2.387698 -2.426266
 C 3.641136 -0.631317 -3.501940
 H 2.803230 1.162441 -4.351489
 H 3.539203 2.973508 3.929224
 H -0.904022 -4.911582 2.140897
 H 4.340595 -0.786428 -4.321139

³Y_{CN}SnCl

E = -1632.90626208
 N 0.409403 1.208704 -3.496180
 C 0.002270 0.685736 -2.525473
 C -0.485723 0.052736 -1.404370
 Sn -2.819880 -0.304506 -1.176879
 P 0.628026 -0.056015 -0.036728
 Cl -2.387204 1.636593 0.423721
 C 1.431270 1.509370 0.366851
 C -0.225031 -0.712239 1.393585
 C 1.969722 -1.207843 -0.448218
 C 0.800892 2.721096 0.077616
 C 2.684118 1.491931 0.989359
 C -0.274360 -0.009001 2.595833
 C -0.890810 -1.935964 1.255890
 C 2.290099 -2.279304 0.388080
 C 2.714200 -0.982872 -1.612579
 H -0.182983 2.727140 -0.386516
 C 1.430497 3.913141 0.417339
 C 3.299015 2.688851 1.329808
 H 3.179537 0.545768 1.200266
 H 0.211965 0.960159 2.679991
 C -0.963252 -0.545982 3.675149
 C -1.570752 -2.469866 2.347068
 H -0.849458 -2.482620 0.315229
 H 1.722366 -2.452720 1.298884
 C 3.342841 -3.125435 0.056664

C 3.762879 -1.833686 -1.934165
H 2.475794 -0.147241 -2.268278
H 0.942330 4.858426 0.190896
C 2.672354 3.898520 1.042057
H 4.272734 2.677583 1.814942
H -1.006672 0.001039 4.614057
C -1.605766 -1.776098 3.549939
H -2.082808 -3.424430 2.248704
H 3.588775 -3.959315 0.710770
C 4.076927 -2.905614 -1.102810
H 4.336601 -1.657848 -2.841572
H 3.159138 4.835997 1.304228
H -2.144102 -2.193680 4.398649
H 4.898687 -3.570580 -1.361102

3.3.3.4 Koordinaten der hexamethyldisilazan(ylid)substituierten Stannylene

YSnHMDS

E = -2774.39859738
Sn 1.287895 -1.304780 1.453944
S -0.764879 -1.396181 -0.698378
P -0.899995 1.411927 -0.068243
Si 3.910767 0.476226 0.538542
Si 3.505650 -2.193411 -0.915657
O 0.167832 -2.500207 -0.207704
O -0.814194 -1.178046 -2.150609
N 2.991500 -0.956266 0.204467
C -0.304549 -0.131035 0.279734
C -2.394481 -1.971224 -0.243080
C -2.687191 -2.193692 1.099425
H -1.916757 -2.040218 1.854693
C -3.963762 -2.591915 1.457841
H -4.196576 -2.766644 2.507610
C -4.962531 -2.771430 0.491602
C -4.635723 -2.556550 -0.846118
H -5.397724 -2.697216 -1.611606
C -3.356588 -2.157445 -1.221658

H -3.093471 -1.979267 -2.261292
 C -6.351041 -3.163448 0.897965
 H -6.339213 -3.987860 1.620787
 H -6.949403 -3.473974 0.035351
 H -6.870984 -2.322856 1.377842
 C -2.662313 1.373906 -0.523094
 C -3.630915 1.243516 0.475255
 H -3.343027 1.291022 1.523945
 C -4.961846 1.049196 0.131710
 H -5.712071 0.948955 0.913502
 C -5.334011 0.983923 -1.208204
 H -6.378404 0.834100 -1.475251
 C -4.370337 1.094299 -2.203493
 H -4.655426 1.025215 -3.251365
 C -3.034105 1.278819 -1.866388
 H -2.277246 1.327613 -2.645658
 C -0.103226 2.260106 -1.461558
 C -0.617080 3.448110 -1.993352
 H -1.497113 3.912034 -1.548425
 C -0.025673 4.018916 -3.111510
 H -0.424353 4.943115 -3.525135
 C 1.066227 3.395925 -3.712715
 H 1.521855 3.836808 -4.597364
 C 1.565571 2.206882 -3.195283
 H 2.407455 1.712357 -3.675304
 C 0.985448 1.634566 -2.066991
 H 1.360633 0.696811 -1.655140
 C -0.710957 2.421360 1.427787
 C -0.861385 1.783192 2.662692
 H -1.087923 0.718585 2.685445
 C -0.696385 2.499130 3.842012
 H -0.809726 1.995479 4.799837
 C -0.374493 3.851643 3.796405
 H -0.236224 4.410146 4.720138
 C -0.218007 4.487618 2.569449
 H 0.047078 5.542159 2.530928
 C -0.384376 3.777175 1.386521

H -0.230770 4.276824 0.433561
 C 4.607007 1.307146 -1.001622
 H 5.191978 2.192349 -0.716936
 H 3.798647 1.641198 -1.661191
 H 5.263587 0.649166 -1.581846
 C 2.766683 1.746078 1.342203
 H 3.336190 2.629181 1.661324
 H 2.234994 1.378687 2.234047
 H 2.013491 2.083298 0.619935
 C 5.333706 0.147116 1.726866
 H 6.058114 -0.550995 1.289345
 H 4.961759 -0.303119 2.656882
 H 5.868604 1.070637 1.986474
 C 2.831917 -1.821421 -2.628560
 H 3.210187 -0.848830 -2.974344
 H 1.735943 -1.767810 -2.601200
 H 3.121639 -2.578995 -3.368644
 C 2.948622 -3.900330 -0.351271
 H 3.385169 -4.660337 -1.013772
 H 1.860510 -4.020066 -0.379083
 H 3.306968 -4.112275 0.665935
 C 5.389152 -2.311718 -1.002230
 H 5.793522 -2.648182 -0.038563
 H 5.888125 -1.371731 -1.263965
 H 5.673615 -3.056371 -1.758164

³YSnHMDS

E = -2774.31845241
 Sn 1.334664 -0.901706 1.405200
 S -1.026583 -1.615064 -0.809840
 P -0.866343 1.202170 -0.096193
 Si 4.172724 0.497210 0.383373
 Si 3.509639 -2.380099 -0.605604
 O -0.260402 -2.852741 -0.637703
 O -1.172378 -1.052320 -2.167697
 N 3.126218 -0.908174 0.295394
 C -0.390582 -0.411976 0.233304

C -2.690192 -1.959588 -0.254147
 C -2.920487 -2.243904 1.088437
 H -2.084625 -2.263300 1.785912
 C -4.215628 -2.482091 1.519045
 H -4.400258 -2.699680 2.570548
 C -5.292349 -2.451669 0.623968
 C -5.028073 -2.188489 -0.719638
 H -5.852089 -2.166020 -1.431824
 C -3.734160 -1.939910 -1.165382
 H -3.521546 -1.711985 -2.207046
 C -6.693687 -2.671928 1.109129
 H -6.745273 -3.499908 1.825829
 H -7.374828 -2.893743 0.280979
 H -7.076614 -1.778275 1.621490
 C -2.633414 1.364205 -0.515746
 C -3.596249 1.362189 0.496689
 H -3.294708 1.343822 1.541200
 C -4.946534 1.389674 0.173889
 H -5.690433 1.389656 0.967909
 C -5.344011 1.419312 -1.159390
 H -6.402698 1.444320 -1.410752
 C -4.388883 1.404809 -2.169298
 H -4.696025 1.411008 -3.213174
 C -3.036004 1.367917 -1.853312
 H -2.291455 1.314752 -2.643028
 C -0.005238 1.981930 -1.490778
 C -0.399560 3.233076 -1.976515
 H -1.218615 3.771484 -1.500605
 C 0.233700 3.777204 -3.085647
 H -0.072236 4.751341 -3.461800
 C 1.245644 3.065153 -3.725273
 H 1.732109 3.485074 -4.603644
 C 1.625227 1.813930 -3.253326
 H 2.400025 1.246892 -3.765280
 C 1.006301 1.269727 -2.132939
 H 1.291691 0.287673 -1.760364
 C -0.578399 2.195427 1.396982

C -0.923792 1.642394 2.636736
 H -1.321675 0.629445 2.677031
 C -0.742369 2.372708 3.802532
 H -1.013230 1.935325 4.761199
 C -0.197781 3.653383 3.745222
 H -0.043559 4.220828 4.660920
 C 0.156665 4.201506 2.519330
 H 0.595699 5.195742 2.470902
 C -0.037017 3.479093 1.345705
 H 0.267386 3.909670 0.395746
 C 4.881349 0.879520 -1.319972
 H 5.590268 1.715064 -1.245908
 H 4.075335 1.184988 -1.996966
 H 5.405641 0.035144 -1.779386
 C 3.215321 2.031105 0.896442
 H 3.885756 2.902006 0.867997
 H 2.789174 1.964533 1.905557
 H 2.391394 2.222904 0.197354
 C 5.572230 0.233075 1.608393
 H 6.207953 -0.611060 1.315776
 H 5.166807 0.015521 2.605284
 H 6.207570 1.125128 1.688477
 C 2.854109 -2.152763 -2.350183
 H 3.257472 -1.236984 -2.802735
 H 1.759141 -2.074649 -2.318528
 H 3.111930 -2.998622 -3.000692
 C 2.740006 -3.893634 0.181566
 H 3.071870 -4.787981 -0.364545
 H 1.645831 -3.856890 0.140334
 H 3.058941 -4.000072 1.226860
 C 5.368954 -2.694020 -0.623803
 H 5.723711 -2.902509 0.394049
 H 5.968423 -1.870086 -1.025828
 H 5.578072 -3.582819 -1.234351

$Y_{Ph}SnHMDS$

E = -2185.79301904

P 1.945694 0.047339 -0.040414
 C 0.283740 -0.249504 -0.324274
 C -0.142801 -1.616460 -0.652910
 C 0.453366 -2.769515 -0.105503
 H 1.283768 -2.668280 0.590042
 C -0.017881 -4.042146 -0.400220
 H 0.465512 -4.907776 0.050294
 C -1.108195 -4.214517 -1.247409
 H -1.485778 -5.210904 -1.468120
 C -1.698461 -3.090493 -1.819764
 H -2.541479 -3.204280 -2.500157
 C -1.215873 -1.820320 -1.538968
 H -1.666538 -0.950903 -2.006514
 C 2.656844 -0.695966 1.479816
 C 3.867409 -1.388420 1.520953
 H 4.467650 -1.499142 0.621222
 C 4.302313 -1.958256 2.713944
 H 5.243679 -2.503799 2.737488
 C 3.537472 -1.838039 3.868697
 H 3.879995 -2.288575 4.798236
 C 2.326107 -1.152932 3.831149
 H 1.716578 -1.066717 4.728394
 C 1.883759 -0.594741 2.639835
 H 0.920172 -0.085137 2.595456
 C 2.218751 1.835693 0.135128
 C 2.689634 2.428592 1.304985
 H 2.933238 1.816163 2.169817
 C 2.838549 3.811204 1.369715
 H 3.196863 4.271504 2.288161
 C 2.527046 4.600180 0.269279
 H 2.641762 5.680960 0.325358
 C 2.071980 4.009380 -0.906831
 H 1.832908 4.624944 -1.771509
 C 1.919107 2.632168 -0.976489
 H 1.560070 2.163304 -1.891687
 C 3.071825 -0.424328 -1.393400
 C 2.636546 -1.250450 -2.430403

H 1.623093 -1.642661 -2.422849
 C 3.501363 -1.561824 -3.474744
 H 3.158399 -2.208141 -4.280058
 C 4.792686 -1.047046 -3.494457
 H 5.463883 -1.291546 -4.315634
 C 5.224320 -0.208369 -2.470346
 H 6.229203 0.208815 -2.491037
 C 4.366095 0.105651 -1.424868
 H 4.697233 0.777097 -0.632850
 Sn -1.038580 1.306995 0.388386
 N -2.911908 0.277371 0.057081
 Si -3.889715 0.890925 -1.236423
 Si -3.515067 -0.699806 1.361500
 C -2.806679 2.001279 -2.321821
 H -2.470451 2.908456 -1.799822
 H -1.915917 1.465232 -2.683055
 H -3.368461 2.329180 -3.206902
 C -4.593650 -0.426201 -2.385923
 H -5.276714 -1.110385 -1.871190
 H -5.158007 0.061952 -3.192713
 H -3.803358 -1.027796 -2.850533
 C -5.334610 1.921410 -0.602893
 H -5.920787 2.359024 -1.421890
 H -6.015737 1.309784 0.004105
 H -4.972041 2.738383 0.034842
 C -4.990751 -1.750878 0.856359
 H -5.335267 -2.339965 1.716782
 H -5.839525 -1.151512 0.503386
 H -4.707125 -2.450359 0.059602
 C -4.036988 0.409729 2.797972
 H -4.416821 -0.164558 3.653653
 H -3.187507 1.011914 3.151096
 H -4.820852 1.110624 2.481726
 C -2.197377 -1.878172 2.003236
 H -1.222310 -1.393836 2.155561
 H -2.510099 -2.308407 2.964313
 H -2.039201 -2.699974 1.294190

³Y_{Ph}SnHMDS

E = -2185.73168332

P -2.000190 -0.070876 0.016350

C -0.485267 0.346525 -0.746637

C -0.093187 1.677973 -1.053029

C -0.769698 2.843536 -0.596401

H -1.665077 2.738790 0.011166

C -0.294541 4.110244 -0.873813

H -0.825049 4.980003 -0.490639

C 0.861781 4.278613 -1.638804

H 1.232122 5.277957 -1.858423

C 1.541682 3.156364 -2.112439

H 2.443647 3.278263 -2.709089

C 1.089686 1.884920 -1.813124

H 1.635562 1.012310 -2.158361

C -1.864530 0.083099 1.808568

C -2.248596 1.265780 2.449026

H -2.805977 2.027617 1.906810

C -1.910378 1.475105 3.778790

H -2.208535 2.397154 4.272871

C -1.176676 0.513500 4.471022

H -0.900053 0.686613 5.509140

C -0.797720 -0.665010 3.840410

H -0.219674 -1.413039 4.378360

C -1.140204 -0.890038 2.510833

H -0.825307 -1.803860 2.008869

C -2.366568 -1.789775 -0.391999

C -3.074041 -2.612770 0.489401

H -3.354094 -2.246502 1.475644

C -3.403758 -3.906856 0.108945

H -3.942985 -4.551425 0.800068

C -3.042728 -4.379458 -1.150194

H -3.298945 -5.395867 -1.442280

C -2.357164 -3.553817 -2.036138

H -2.074466 -3.921655 -3.020058

C -2.022249 -2.258628 -1.665013

H -1.475496 -1.612129 -2.350441
 C -3.493820 0.826085 -0.511172
 C -3.502068 1.479339 -1.744965
 H -2.592828 1.523724 -2.341266
 C -4.669830 2.079561 -2.201685
 H -4.672382 2.592119 -3.161335
 C -5.828180 2.027573 -1.433685
 H -6.739889 2.501016 -1.792754
 C -5.824533 1.369086 -0.207376
 H -6.731668 1.324103 0.391794
 C -4.661948 0.764698 0.253421
 H -4.660884 0.244505 1.210469
 Sn 1.105966 -1.540811 -0.532246
 N 2.815897 -0.239582 -0.019512
 Si 4.211646 -0.325466 -1.050479
 Si 2.878869 0.406833 1.592844
 C 3.766417 -0.981859 -2.765756
 H 3.389383 -2.011895 -2.737080
 H 3.011697 -0.371370 -3.279450
 H 4.673394 -0.975906 -3.387050
 C 5.029185 1.353617 -1.342040
 H 5.697572 1.643722 -0.524046
 H 5.627158 1.325040 -2.263116
 H 4.271619 2.140046 -1.450745
 C 5.516896 -1.509038 -0.372506
 H 6.406098 -1.551988 -1.016064
 H 5.844632 -1.217398 0.633539
 H 5.102039 -2.523472 -0.300041
 C 4.479469 1.331232 1.980865
 H 4.484837 1.582904 3.050408
 H 5.384588 0.747306 1.774148
 H 4.545023 2.270694 1.419003
 C 2.743104 -0.981213 2.868245
 H 2.665006 -0.590365 3.892225
 H 1.864631 -1.610138 2.673403
 H 3.628471 -1.629328 2.814719
 C 1.515747 1.659539 1.926043

H 0.514029 1.243363 1.784654
H 1.582334 2.022916 2.961033
H 1.617844 2.520257 1.251678

Y_{PhF}SnHMDS

E = -2682.70057505
P -2.039850 -0.228740 -0.074030
C -0.435341 0.096468 -0.555822
C 0.191269 1.397756 -0.442697
C -0.218783 2.437407 0.403693
C 0.403774 3.673584 0.464347
C 1.499162 3.933777 -0.348179
C 1.936118 2.943534 -1.220527
C 1.292130 1.719291 -1.256366
C -2.273120 -0.587755 1.706999
C -2.863124 0.301710 2.603870
H -3.325654 1.216586 2.242038
C -2.827079 0.037991 3.970033
H -3.279684 0.743051 4.664295
C -2.204571 -1.108355 4.448586
H -2.171475 -1.304648 5.518392
C -1.611555 -1.999994 3.557845
H -1.111261 -2.893998 3.924567
C -1.642127 -1.734874 2.197313
H -1.153484 -2.423441 1.503505
C -2.604304 -1.742103 -0.921919
C -3.442146 -2.673709 -0.306165
H -3.714789 -2.558362 0.740443
C -3.926104 -3.759936 -1.027640
H -4.570217 -4.487430 -0.537923
C -3.586323 -3.917292 -2.366296
H -3.963180 -4.770567 -2.926892
C -2.768480 -2.979982 -2.990329
H -2.506366 -3.095050 -4.039984
C -2.284431 -1.893483 -2.274822
H -1.647179 -1.152996 -2.755483
C -3.289491 1.005122 -0.542975

C -2.946048 2.009982 -1.446892
 H -1.927555 2.071407 -1.823260
 C -3.908337 2.919706 -1.871047
 H -3.635163 3.706595 -2.571036
 C -5.214665 2.821717 -1.405470
 H -5.966087 3.534891 -1.738734
 C -5.565212 1.806211 -0.520218
 H -6.590218 1.720100 -0.165272
 C -4.607039 0.896781 -0.091448
 H -4.885718 0.096221 0.592904
 Sn 0.824112 -1.683509 -0.782004
 N 2.577280 -0.868477 0.148398
 Si 4.055014 -1.114458 -0.753783
 Si 2.599165 -0.650017 1.881397
 C 3.662960 -1.704375 -2.506989
 H 3.208792 -2.704117 -2.527923
 H 3.014917 -1.012872 -3.060641
 H 4.607931 -1.771906 -3.064132
 C 5.050121 0.468779 -0.914256
 H 5.417982 0.828859 0.052735
 H 5.920615 0.309104 -1.564860
 H 4.436795 1.260461 -1.360145
 C 5.130522 -2.474522 -0.009113
 H 6.047525 -2.617776 -0.596277
 H 5.427623 -2.267830 1.025816
 H 4.580503 -3.425385 -0.009786
 C 4.215093 0.095236 2.499398
 H 4.192613 0.123320 3.597228
 H 5.112364 -0.457146 2.199740
 H 4.319221 1.128608 2.145217
 C 2.353481 -2.330246 2.712499
 H 2.333884 -2.253434 3.807859
 H 1.404029 -2.787263 2.396469
 H 3.155780 -3.025125 2.431512
 C 1.269743 0.498015 2.547628
 H 0.262125 0.284661 2.178647
 H 1.249328 0.406963 3.642568

H 1.507852 1.540873 2.306818
 F 1.733043 0.821442 -2.142025
 F -1.248146 2.229227 1.231403
 F -0.032391 4.600939 1.304065
 F 2.109862 5.107643 -0.302242
 F 2.962553 3.183806 -2.024688

³Y_{PhF}SnHMDS

E = -2682.63265904
 P -2.122507 -0.233396 -0.066856
 C -0.507892 0.183775 -0.599400
 C 0.091408 1.466057 -0.542596
 C -0.299718 2.512421 0.327663
 C 0.360014 3.720892 0.409678
 C 1.454768 3.961001 -0.418531
 C 1.866254 2.979438 -1.316771
 C 1.215370 1.760781 -1.358839
 C -2.199777 -0.712098 1.673758
 C -2.624450 0.187985 2.655438
 H -3.042740 1.150224 2.372568
 C -2.492251 -0.142116 3.997307
 H -2.821276 0.561011 4.759214
 C -1.923447 -1.359864 4.365069
 H -1.807397 -1.607598 5.418440
 C -1.509209 -2.260729 3.391796
 H -1.066941 -3.212829 3.677070
 C -1.652255 -1.948486 2.044075
 H -1.319669 -2.649870 1.280777
 C -2.604568 -1.676222 -1.040871
 C -3.514910 -2.609484 -0.533948
 H -3.887115 -2.514579 0.484640
 C -3.929344 -3.670968 -1.326600
 H -4.628757 -4.402071 -0.926461
 C -3.447314 -3.803039 -2.626538
 H -3.770074 -4.639524 -3.243082
 C -2.553803 -2.867124 -3.137822
 H -2.174436 -2.969492 -4.152187

C -2.134472 -1.800409 -2.353541
 H -1.428786 -1.070623 -2.748065
 C -3.433249 0.985433 -0.379868
 C -3.205527 2.051319 -1.250861
 H -2.224277 2.190298 -1.699350
 C -4.236115 2.936036 -1.546821
 H -4.054004 3.768666 -2.222982
 C -5.493439 2.757865 -0.980723
 H -6.297388 3.453736 -1.211989
 C -5.725955 1.688392 -0.120636
 H -6.710430 1.544983 0.319834
 C -4.701041 0.800385 0.177537
 H -4.885252 -0.036572 0.849785
 Sn 0.886634 -1.880382 -0.742391
 N 2.598731 -0.843344 0.162885
 Si 4.103463 -0.925093 -0.717976
 Si 2.590863 -0.633674 1.890871
 C 3.859700 -1.500562 -2.497204
 H 3.475018 -2.526616 -2.561145
 H 3.180037 -0.849934 -3.059457
 H 4.837164 -1.482348 -3.000263
 C 4.961034 0.747103 -0.822830
 H 5.222443 1.150965 0.161096
 H 5.886705 0.666305 -1.408755
 H 4.311462 1.472045 -1.327183
 C 5.288534 -2.184482 0.045934
 H 6.230225 -2.236777 -0.517034
 H 5.536764 -1.962861 1.090787
 H 4.829283 -3.182419 0.023961
 C 4.110139 0.274017 2.549922
 H 4.057133 0.296762 3.647080
 H 5.066030 -0.184579 2.273404
 H 4.122079 1.313944 2.199320
 C 2.484869 -2.303323 2.765284
 H 2.464284 -2.196498 3.858277
 H 1.574656 -2.836805 2.457828
 H 3.342969 -2.934396 2.498233

C 1.150139 0.417167 2.498807
H 0.190341 0.135121 2.057052
H 1.052119 0.317607 3.588590
H 1.328588 1.477224 2.277804
F 1.621547 0.880951 -2.253404
F -1.314513 2.308420 1.160924
F -0.029897 4.647540 1.268530
F 2.078752 5.120295 -0.370697
F 2.875720 3.231321 -2.132391

Y_{CN}SnHMDS

E = -2046.75937815
Sn -1.213281 0.546787 1.282752
N -2.927699 0.124473 0.096856
C 0.143601 0.285464 -0.397294
Si -3.725170 1.444161 -0.710477
C -2.538660 2.913017 -0.729095
C -5.266437 1.974344 0.235128
C -4.205589 1.023185 -2.473886
Si -3.357753 -1.547440 -0.079979
C -2.862834 -2.301795 -1.727534
C -2.459213 -2.533107 1.266863
C -5.208581 -1.799084 0.148349
H -3.021754 3.793123 -1.174254
H -1.642759 2.686545 -1.321414
H -2.225019 3.211300 0.284287
H -5.762718 2.830621 -0.241327
H -5.010471 2.259786 1.264214
H -5.992877 1.153783 0.292770
H -4.679888 1.884217 -2.963582
H -4.918589 0.188751 -2.510020
H -3.311223 0.740062 -3.043111
H -5.476336 -2.863227 0.108022
H -5.774404 -1.286736 -0.641220
H -5.542817 -1.394810 1.112335
H -3.199721 -3.345722 -1.793481
H -1.777020 -2.273406 -1.876782

H -3.301383 -1.743907 -2.563154
 H -2.729951 -3.595420 1.196425
 H -2.720689 -2.194865 2.279063
 H -1.364057 -2.483920 1.161221
 P 1.814345 0.016052 -0.172253
 C -0.355345 0.226319 -1.703184
 C 2.341358 -1.654174 -0.668047
 C 2.164326 0.179244 1.595204
 C 2.950213 1.157881 -1.017958
 C 1.355205 -2.617313 -0.884158
 C 3.689477 -1.991728 -0.813019
 C 2.267322 -0.943128 2.416711
 C 2.194501 1.460723 2.153838
 C 2.565880 1.707099 -2.244494
 C 4.196047 1.480017 -0.470843
 H 0.307541 -2.338313 -0.785561
 C 1.715921 -3.913560 -1.235887
 C 4.044216 -3.289187 -1.158476
 H 4.462956 -1.240244 -0.665853
 H 2.239007 -1.940295 1.981140
 C 2.401725 -0.782580 3.792076
 C 2.331837 1.613952 3.527018
 H 2.108323 2.334932 1.509798
 H 1.595325 1.465678 -2.674030
 C 3.429159 2.565277 -2.915587
 H 4.494350 1.068004 0.492106
 C 5.052469 2.340025 -1.148209
 C 3.058160 -4.249918 -1.369426
 H 0.942724 -4.658425 -1.412041
 H 5.094390 -3.550823 -1.271356
 H 2.479241 -1.658463 4.432684
 C 2.433370 0.492430 4.345449
 H 2.353518 2.611305 3.960982
 H 3.126242 2.991291 -3.869756
 C 4.669692 2.881738 -2.370790
 H 6.019405 2.591121 -0.716704
 H 3.339799 -5.263872 -1.647100

H 2.536550 0.614236 5.421894
H 5.339603 3.557225 -2.899366
N -0.790075 0.213442 -2.786959

³Y_{CN}SnHMDS

E = -2046.68081752
Sn -1.273418 -0.051953 1.158739
N -3.036320 -0.077807 -0.022054
C 0.304994 -0.323872 -0.445370
Si -3.652880 1.479963 -0.530675
C -2.232673 2.647340 -0.940141
C -4.688001 2.257691 0.834009
C -4.708141 1.335505 -2.082128
Si -3.914584 -1.586997 -0.234460
C -3.936417 -2.107307 -2.038778
C -3.099407 -2.988750 0.712616
C -5.680226 -1.405162 0.400767
H -2.600545 3.507652 -1.515874
H -1.472030 2.128544 -1.539653
H -1.754355 3.031551 -0.030153
H -5.070834 3.246091 0.546823
H -4.083881 2.378771 1.743363
H -5.544182 1.619133 1.085981
H -5.097886 2.328505 -2.343614
H -5.566311 0.664796 -1.957406
H -4.113164 0.971949 -2.928814
H -6.235493 -2.347022 0.299303
H -6.238532 -0.632521 -0.143092
H -5.677815 -1.125904 1.462807
H -4.433967 -3.082312 -2.133492
H -2.906746 -2.214658 -2.401688
H -4.462501 -1.397611 -2.685464
H -3.688679 -3.904118 0.559587
H -3.038966 -2.799859 1.791654
H -2.085682 -3.179722 0.336583
P 1.966656 0.003676 -0.120130
C 0.043780 -1.423743 -1.254622

C 2.883980 -1.320742 0.718709
 C 2.080694 1.481395 0.902398
 C 2.869284 0.297590 -1.662187
 C 2.179144 -2.238045 1.499361
 C 4.273314 -1.423027 0.598952
 C 3.004833 1.592898 1.940912
 C 1.208824 2.537873 0.616106
 C 3.013981 -0.768593 -2.557427
 C 3.381281 1.556139 -1.981599
 H 1.093500 -2.165677 1.573296
 C 2.864809 -3.244874 2.168991
 C 4.951927 -2.430375 1.273322
 H 4.821282 -0.720743 -0.027676
 H 3.670419 0.764383 2.173407
 C 3.063586 2.765096 2.687276
 C 1.279629 3.708094 1.362763
 H 0.485960 2.434412 -0.190508
 H 2.607821 -1.749592 -2.315543
 C 3.666485 -0.566675 -3.765836
 H 3.270171 2.385211 -1.286020
 C 4.037266 1.746309 -3.192660
 C 4.248066 -3.339082 2.058918
 H 2.313056 -3.962255 2.772682
 H 6.033023 -2.511257 1.179905
 H 3.780861 2.851964 3.500527
 C 2.204229 3.820145 2.396439
 H 0.601355 4.529306 1.140616
 H 3.772752 -1.394327 -4.463817
 C 4.178845 0.688244 -4.083735
 H 4.438505 2.727055 -3.439565
 H 4.781653 -4.131013 2.581022
 H 2.252501 4.735389 2.983477
 H 4.690493 0.841378 -5.031909
 N -0.219502 -2.338040 -1.938260

3.3.3.5 Koordinaten der perfluorphenyl(ylid)substituierten Stannylene

***Y*SnC₆F₅**

E = -2628.93794305

C 3.427937 -1.639666 -1.783116

H 2.953577 -1.413948 -2.734892

C 2.641006 -1.752955 -0.649235

O 0.246979 -2.708550 -0.153877

C -0.413664 3.486694 -1.409918

H 0.348140 4.105718 -0.936566

C 4.805033 -1.806842 -1.670457

H 5.428828 -1.712359 -2.558266

C 1.087486 1.560266 2.783817

H 1.658902 0.645027 2.637864

C 0.447434 2.151676 1.688549

C 3.409128 1.617134 0.198039

H 3.302252 1.515286 1.275452

C 4.676749 1.695235 -0.361034

H 5.553467 1.656651 0.282306

C 3.702905 1.854678 -2.558172

H 3.814738 1.938098 -3.637329

C 2.429585 1.772509 -2.004316

H 1.554697 1.774260 -2.650453

C -0.503313 2.123964 -1.106257

C 3.207375 -2.041560 0.589674

H 2.572299 -2.127287 1.470823

C -0.347062 3.281438 1.885363

H -0.899666 3.715040 1.056783

C 2.277180 1.668770 -0.619655

C 6.886948 -2.241266 -0.317067

H 7.148018 -3.187128 0.173383

H 7.318353 -1.435174 0.291390

H 7.376495 -2.220282 -1.295937

C 4.825114 1.820627 -1.739711

H 5.820196 1.881497 -2.176228

C 0.417462 -0.315797 0.361426

P 0.626490 1.337318 0.075829

O 0.614895 -1.188515 -2.174214

S 0.883616 -1.460856 -0.757994
 C 5.401550 -2.084743 -0.442188
 C 4.578217 -2.205060 0.685883
 H 5.025073 -2.431884 1.653154
 C 0.966119 2.118293 4.049958
 H 1.467863 1.652418 4.895601
 C 0.191985 3.259108 4.236282
 H 0.090723 3.692554 5.229333
 C -0.469449 3.832086 3.156108
 H -1.098055 4.707910 3.302777
 C -2.248666 3.252496 -2.952219
 H -2.939586 3.696489 -3.666241
 C -1.290518 4.048675 -2.327670
 H -1.226421 5.109894 -2.559756
 C -2.313996 1.892353 -2.677430
 H -3.051610 1.266750 -3.176086
 C -1.434825 1.323160 -1.761759
 H -1.445807 0.253891 -1.565299
 Sn -0.679624 -1.721686 1.745673
 C -2.640282 -1.325072 0.651871
 C -4.469809 -1.991126 -0.801330
 C -4.199497 0.331528 -0.213750
 C -4.884231 -0.667056 -0.896438
 C -3.094165 -0.025826 0.544671
 C -3.353896 -2.294122 -0.027869
 F -2.980306 -3.572304 0.037785
 F -2.422207 0.963908 1.157801
 F -5.136474 -2.932698 -1.452477
 F -5.933681 -0.355094 -1.640854
 F -4.584722 1.595490 -0.330320

³YSnC₆F₅

E = -2628.85898412
 C 3.936047 -1.273018 -1.798297
 H 3.679869 -0.780946 -2.733518
 C 2.916838 -1.679266 -0.949060
 O 0.605812 -2.693365 -1.669219

C 0.040466 3.502958 -0.894676
 H 0.810161 3.937016 -0.257075
 C 5.256485 -1.478209 -1.419060
 H 6.058280 -1.151151 -2.080105
 C 1.029171 0.605574 2.879351
 H 1.587823 -0.282092 2.585947
 C 0.492581 1.443734 1.893896
 C 3.548708 1.297731 0.754171
 H 3.305685 0.921027 1.743781
 C 4.870556 1.586571 0.442707
 H 5.646056 1.427545 1.189203
 C 4.204243 2.269068 -1.768338
 H 4.457721 2.641807 -2.758659
 C 2.880303 1.974454 -1.465972
 H 2.108384 2.089861 -2.221838
 C -0.165849 2.120533 -0.906477
 C 3.203814 -2.307371 0.257347
 H 2.391784 -2.630418 0.907077
 C -0.271945 2.546794 2.269558
 H -0.742838 3.168857 1.513428
 C 2.543824 1.499065 -0.195616
 C 7.003557 -2.240651 0.224650
 H 7.113643 -3.024874 0.981081
 H 7.388783 -1.307636 0.660022
 H 7.649130 -2.490051 -0.624936
 C 5.199358 2.078651 -0.816666
 H 6.235603 2.308075 -1.057862
 C 0.457434 -0.644563 -0.064338
 P 0.816916 1.031983 0.158254
 O 1.274011 -0.391309 -2.507209
 S 1.215833 -1.391131 -1.421995
 C 5.574929 -2.079259 -0.199755
 C 4.527338 -2.497649 0.627037
 H 4.755858 -2.983123 1.575036
 C 0.835331 0.895307 4.222648
 H 1.258328 0.241832 4.982634
 C 0.083457 2.006698 4.592719

H -0.077789 2.227870 5.645985
 C -0.475715 2.823377 3.617602
 H -1.084187 3.678678 3.903459
 C -1.698093 3.764023 -2.539520
 H -2.303124 4.407672 -3.175129
 C -0.731629 4.322826 -1.707208
 H -0.576226 5.399667 -1.694958
 C -1.883545 2.386240 -2.570352
 H -2.626272 1.948736 -3.234060
 C -1.114141 1.560734 -1.759606
 H -1.233214 0.479461 -1.785868
 Sn -0.994966 -1.760524 1.033693
 C -3.010901 -1.146003 0.380195
 C -5.189482 -1.599848 -0.587770
 C -4.529543 0.676863 -0.152871
 C -5.464713 -0.237236 -0.624786
 C -3.330587 0.203108 0.360362
 C -3.969276 -2.035192 -0.083160
 F -3.738564 -3.342405 -0.075466
 F -2.470981 1.104078 0.842219
 F -6.088066 -2.460543 -1.037436
 F -6.618689 0.189315 -1.106829
 F -4.796472 1.973762 -0.185939

$Y_{Ph}SnC_6F_5$

E = -2040.33947504
 P -1.884877 0.175653 0.044675
 C -0.262070 -0.091506 -0.421988
 C 0.640181 1.078580 -0.288583
 C 1.270149 1.404321 0.922763
 H 1.081871 0.783257 1.797036
 C 2.152019 2.475057 1.012644
 H 2.638836 2.693056 1.961974
 C 2.428334 3.252345 -0.108399
 H 3.129904 4.081585 -0.042687
 C 1.805894 2.951520 -1.315698
 H 2.018235 3.547666 -2.201487

C 0.919597 1.884616 -1.401859
 H 0.443649 1.642995 -2.350063
 C -2.146573 0.261472 1.854108
 C -3.185799 1.009184 2.414093
 H -3.844234 1.592836 1.773174
 C -3.376442 1.011541 3.791059
 H -4.184782 1.597605 4.223995
 C -2.533009 0.270591 4.613682
 H -2.680858 0.278916 5.691933
 C -1.497244 -0.474686 4.059555
 H -0.832176 -1.049991 4.700415
 C -1.302870 -0.478585 2.683285
 H -0.483313 -1.046243 2.242379
 C -2.950309 -1.167850 -0.543309
 C -3.844908 -1.826098 0.301319
 H -3.912417 -1.544493 1.349706
 C -4.643069 -2.851090 -0.195315
 H -5.332371 -3.367339 0.469597
 C -4.556819 -3.218447 -1.533346
 H -5.181448 -4.022453 -1.917779
 C -3.669895 -2.561430 -2.381210
 H -3.598591 -2.849111 -3.428031
 C -2.867071 -1.540357 -1.890247
 H -2.163734 -1.027944 -2.544635
 C -2.584545 1.742943 -0.561476
 C -2.020725 2.938286 -0.098522
 H -1.225586 2.915727 0.645079
 C -2.473549 4.155529 -0.588921
 H -2.026014 5.079695 -0.229275
 C -3.491893 4.192406 -1.537144
 H -3.845072 5.148164 -1.919569
 C -4.060092 3.008378 -1.992908
 H -4.861620 3.034011 -2.728475
 C -3.608466 1.784847 -1.509042
 H -4.060883 0.863022 -1.867788
 C 2.543670 -1.279483 -0.425462
 C 4.225729 -0.673484 1.222389

C 4.356246 0.228600 -1.009026
 C 4.868670 0.118775 0.278961
 Sn 0.435890 -2.074665 -0.782821
 C 3.210501 -0.484413 -1.335916
 C 3.072216 -1.348852 0.846577
 F 2.419470 -2.038328 1.800469
 F 2.721698 -0.336161 -2.573206
 F 4.958204 1.014608 -1.889972
 F 5.962763 0.785775 0.612563
 F 4.703654 -0.746864 2.458261

³Y_{Ph}SnC₆F₅

E = -2040.27492747
 P -1.589135 0.170764 0.289056
 C -0.386057 0.325011 -0.979148
 C 0.448414 1.517244 -1.063722
 C 1.194432 2.017547 0.022761
 H 1.125850 1.532224 0.992419
 C 2.110325 3.046808 -0.153684
 H 2.714739 3.371875 0.691229
 C 2.269184 3.647428 -1.396870
 H 2.986848 4.454434 -1.528728
 C 1.515320 3.192615 -2.477332
 H 1.635881 3.649014 -3.457962
 C 0.641420 2.129888 -2.321213
 H 0.095790 1.739800 -3.178548
 C -1.067058 0.676608 1.948449
 C -1.408831 1.940777 2.436027
 H -2.108911 2.567791 1.888660
 C -0.839911 2.405332 3.615957
 H -1.108577 3.390857 3.990530
 C 0.077019 1.620875 4.307710
 H 0.530803 1.994177 5.223597
 C 0.416779 0.358654 3.827994
 H 1.139618 -0.259658 4.355132
 C -0.152468 -0.116047 2.654013
 H 0.122466 -1.100024 2.285037

C -2.223743 -1.511521 0.358064
 C -2.408866 -2.204158 1.555353
 H -2.149356 -1.743416 2.504582
 C -2.934207 -3.490942 1.537263
 H -3.068887 -4.030368 2.472139
 C -3.288291 -4.083502 0.328072
 H -3.699836 -5.090942 0.317605
 C -3.125340 -3.389707 -0.864218
 H -3.409373 -3.847274 -1.809208
 C -2.589988 -2.106027 -0.856523
 H -2.495278 -1.551485 -1.787194
 C -3.018333 1.220595 -0.118102
 C -2.860048 2.352914 -0.918888
 H -1.885220 2.596983 -1.333839
 C -3.956018 3.166463 -1.186286
 H -3.830937 4.048114 -1.811350
 C -5.204792 2.852204 -0.661690
 H -6.060647 3.489271 -0.876256
 C -5.363930 1.720006 0.132532
 H -6.341961 1.469703 0.538353
 C -4.274677 0.902399 0.404599
 H -4.399684 0.011362 1.017837
 C 2.093401 -1.175876 -0.793014
 C 2.711565 -1.390718 1.555156
 C 3.973851 0.071465 0.130359
 C 3.750351 -0.485378 1.383072
 Sn 0.437670 -1.386992 -2.411763
 C 3.144398 -0.284426 -0.927572
 C 1.905979 -1.705031 0.468524
 F 0.862756 -2.517694 0.716583
 F 3.358690 0.343267 -2.084647
 F 4.934084 0.974125 -0.022089
 F 4.514911 -0.148309 2.411646
 F 2.469663 -1.899533 2.764330

$Y_{PhF}SnC_6F_5$

E = -2537.24629212

P -2.168401 0.122425 0.137789
 C -0.538978 -0.329214 -0.135002
 C 0.490247 0.688703 0.105257
 C 1.360309 0.640963 1.198906
 C 2.435137 1.507673 1.334149
 C 2.643929 2.497598 0.381479
 C 1.789223 2.591504 -0.710717
 C 0.733053 1.700356 -0.831109
 C -2.793514 -0.199230 1.821033
 C -3.995469 0.368386 2.257501
 H -4.561416 1.022636 1.594871
 C -4.459684 0.104861 3.538895
 H -5.395558 0.544478 3.878162
 C -3.721870 -0.713806 4.391895
 H -4.084148 -0.913303 5.398621
 C -2.519587 -1.264986 3.964809
 H -1.935693 -1.891383 4.636020
 C -2.052835 -1.009005 2.678972
 H -1.100135 -1.411743 2.339041
 C -3.252849 -0.768568 -1.008778
 C -4.382001 -1.475266 -0.596371
 H -4.647834 -1.515718 0.457368
 C -5.159232 -2.146130 -1.535447
 H -6.031986 -2.708114 -1.209614
 C -4.818154 -2.106230 -2.882349
 H -5.428452 -2.633627 -3.612911
 C -3.693143 -1.398743 -3.298210
 H -3.422969 -1.369753 -4.351716
 C -2.906396 -0.736473 -2.365842
 H -2.013411 -0.193760 -2.675328
 C -2.453506 1.905425 -0.064642
 C -1.903779 2.754495 0.901827
 H -1.400684 2.334394 1.772107
 C -1.996908 4.131478 0.752192
 H -1.561565 4.787538 1.503035
 C -2.645998 4.668107 -0.355864
 H -2.718498 5.747520 -0.473018

C -3.203653 3.826402 -1.311667
 H -3.715738 4.244984 -2.175542
 C -3.105326 2.446488 -1.172012
 H -3.538136 1.794471 -1.927109
 C 2.135479 -1.775800 -0.613588
 C 4.137444 -1.631248 0.757889
 C 3.931479 -0.248135 -1.206476
 C 4.658189 -0.665505 -0.095894
 Sn -0.072718 -2.314723 -0.787036
 C 2.692275 -0.824275 -1.446895
 C 2.886359 -2.169223 0.476284
 F 2.387308 -3.058443 1.342200
 F 1.990368 -0.370705 -2.495014
 F 4.411832 0.711084 -1.985228
 F 5.840490 -0.130849 0.154840
 F 4.831508 -2.013631 1.818457
 F -0.036587 1.791670 -1.909261
 F 1.991836 3.525367 -1.625636
 F 3.661236 3.332082 0.504210
 F 3.270976 1.386662 2.354168

³Y_{PhF}SnC₆F₅

E = -2537.18658094
 P -0.521141 1.362731 0.523718
 C -0.749870 0.099237 -0.665573
 C -1.728355 -0.943264 -0.510228
 C -2.614972 -1.255321 -1.553995
 C -3.547488 -2.275090 -1.450137
 C -3.602520 -3.043891 -0.291932
 C -2.732125 -2.775464 0.760163
 C -1.823228 -1.739676 0.642255
 C -0.916146 2.940115 -0.272353
 C -0.659577 4.130033 0.414441
 H -0.165195 4.107147 1.384959
 C -1.034424 5.344747 -0.145880
 H -0.823814 6.271803 0.383108
 C -1.682842 5.372933 -1.376716

H -1.977639 6.325359 -1.812734
 C -1.961442 4.186273 -2.048125
 H -2.475099 4.206634 -3.006711
 C -1.577988 2.967790 -1.501392
 H -1.795334 2.038101 -2.025234
 C 1.174369 1.412208 1.135113
 C 2.090241 2.339094 0.634263
 H 1.781314 3.066484 -0.112868
 C 3.408255 2.311712 1.077514
 H 4.124458 3.024528 0.676215
 C 3.814485 1.358196 2.003176
 H 4.851436 1.326261 2.330012
 C 2.907483 0.415488 2.480933
 H 3.234816 -0.352455 3.178735
 C 1.589757 0.431642 2.044431
 H 0.888158 -0.319860 2.399267
 C -1.651553 1.308189 1.946569
 C -3.007124 1.107740 1.663774
 H -3.340035 1.000248 0.632299
 C -3.933246 1.057246 2.696254
 H -4.985377 0.896578 2.470949
 C -3.515385 1.215506 4.014411
 H -4.241571 1.173418 4.823622
 C -2.172269 1.435599 4.296669
 H -1.845584 1.571842 5.325490
 C -1.237749 1.482591 3.267698
 H -0.190307 1.660464 3.497694
 C 2.177278 -0.889608 -1.127932
 C 4.358534 -1.015563 -0.044506
 C 2.701988 -2.686387 0.438412
 C 3.972000 -2.159918 0.638891
 Sn 0.741901 0.288110 -2.495883
 C 1.838920 -2.044110 -0.441214
 C 3.455769 -0.406409 -0.905944
 F 3.869423 0.714227 -1.510147
 F 0.635360 -2.607924 -0.607798
 F 2.334408 -3.781943 1.090988

F 4.802938 -2.733800 1.497957
 F 5.552398 -0.481727 0.190811
 F -0.975723 -1.528052 1.644042
 F -2.775817 -3.514319 1.854434
 F -4.482525 -4.021463 -0.188455
 F -4.389514 -2.518441 -2.438988
 F -2.611264 -0.519095 -2.657359

3.3.3.6 Koordinaten der pyridin(ylid)substituierten Stannylene

YSnPy

E = -2148.07780408
 C 3.598572 -0.347981 -1.640540
 H 3.235682 0.165625 -2.527297
 C 2.706855 -1.085284 -0.879901
 O 0.607125 -2.575012 -1.418975
 C -1.527236 3.280963 -0.647654
 H -1.010748 3.834853 0.136135
 C 4.929429 -0.270952 -1.239558
 H 5.632560 0.315044 -1.830127
 C -0.369341 0.213042 2.968477
 H 0.419447 -0.480645 2.682348
 C -0.897128 1.080637 2.007112
 C 2.299900 1.775835 1.253773
 H 2.049181 1.225867 2.158646
 C 3.566103 2.325054 1.109489
 H 4.299505 2.207494 1.904730
 C 2.964265 3.149625 -1.072185
 H 3.225402 3.675507 -1.988434
 C 1.695298 2.595704 -0.936163
 H 0.979327 2.668223 -1.751551
 C -1.326640 1.902451 -0.782897
 C 3.127225 -1.754884 0.266425
 H 2.408888 -2.326650 0.852937
 C -1.946522 1.931920 2.353267
 H -2.394672 2.582829 1.607824
 C 1.351769 1.921672 0.237493

C 6.805352 -0.822299 0.352085
 H 7.264068 -1.815579 0.437099
 H 6.882680 -0.348764 1.339669
 H 7.403577 -0.233496 -0.350745
 C 3.897053 3.020321 -0.050884
 H 4.890822 3.449917 -0.162427
 C 0.065206 -0.639105 0.001045
 P -0.212540 0.991404 0.327120
 O 0.867420 -0.294864 -2.535884
 S 0.975309 -1.106890 -1.315690
 C 5.376360 -0.919752 -0.090538
 C 4.453149 -1.667741 0.653294
 H 4.785671 -2.188479 1.550684
 C -0.870909 0.215856 4.263737
 H -0.456345 -0.465236 5.004163
 C -1.910056 1.074482 4.606929
 H -2.308565 1.070746 5.619641
 C -2.448413 1.927092 3.649880
 H -3.272522 2.588563 3.909713
 C -3.002952 3.245360 -2.549768
 H -3.662657 3.770028 -3.238562
 C -2.369904 3.948118 -1.525941
 H -2.528256 5.019497 -1.418727
 C -2.780315 1.882464 -2.702251
 H -3.260838 1.333441 -3.509414
 C -1.936943 1.209117 -1.824570
 H -1.730881 0.149143 -1.950455
 Sn -0.920523 -2.615614 0.448971
 C -2.801214 -1.857667 -0.512082
 N -3.177937 -0.985352 0.439349
 C -4.701910 -1.256341 -1.854830
 C -4.277408 -0.257872 0.271603
 C -5.074691 -0.353946 -0.863792
 H -5.302292 -1.359110 -2.758724
 H -4.532871 0.438402 1.074232
 H -5.961832 0.267130 -0.967876
 C -3.554627 -2.021755 -1.675532

H -3.237786 -2.732783 -2.437513

³YSnPy

E = -2148.01079010

C 3.938511 -0.454982 -1.122464

H 3.920592 0.162177 -2.017480

C 2.791279 -1.138967 -0.757915

O 0.999249 -2.361776 -2.222844

C -1.063000 3.492552 -0.420208

H -0.403762 3.817413 0.384093

C 5.071569 -0.558398 -0.321661

H 5.973523 -0.013943 -0.598802

C -0.477667 -0.547981 2.388592

H 0.064380 -1.321741 1.848686

C -0.739826 0.667116 1.753562

C 2.289635 1.451356 1.387991

H 1.895132 0.848884 2.203471

C 3.562625 1.997688 1.482306

H 4.160371 1.821078 2.374263

C 3.310041 2.977259 -0.705583

H 3.710949 3.565743 -1.528328

C 2.036046 2.431829 -0.808851

H 1.450413 2.575807 -1.713521

C -1.119145 2.143279 -0.780778

C 2.767687 -1.943453 0.377415

H 1.858087 -2.486436 0.631511

C -1.442316 1.664492 2.430194

H -1.665064 2.609077 1.940383

C 1.517562 1.675344 0.245121

C 6.276543 -1.404404 1.723481

H 6.464812 -2.428978 2.065206

H 6.140214 -0.785895 2.621707

H 7.174092 -1.045218 1.209314

C 4.070887 2.765354 0.438810

H 5.068504 3.193951 0.515552

C 0.020436 -0.621196 -0.716536

P -0.110220 0.885134 0.062370

O 1.621049 0.042093 -2.759873
 S 1.313548 -0.981572 -1.754088
 C 5.069816 -1.333878 0.836590
 C 3.901337 -2.032149 1.168275
 H 3.886370 -2.656629 2.060957
 C -0.924644 -0.764480 3.687414
 H -0.725288 -1.717322 4.173656
 C -1.631346 0.227793 4.357074
 H -1.986506 0.054781 5.371176
 C -1.886835 1.442534 3.727966
 H -2.441321 2.221015 4.248318
 C -2.635316 4.021179 -2.165724
 H -3.228874 4.754943 -2.708010
 C -1.826982 4.427926 -1.108220
 H -1.781968 5.477951 -0.825890
 C -2.671668 2.682232 -2.542265
 H -3.289039 2.366712 -3.380772
 C -1.912543 1.743198 -1.854707
 H -1.917811 0.693606 -2.143770
 Sn -1.330935 -2.300381 -0.937951
 C -3.214595 -1.540420 -0.029123
 N -3.108029 -0.246556 0.188597
 C -5.455270 -1.552751 0.784465
 C -4.131571 0.434733 0.694040
 C -5.335837 -0.178908 1.010550
 H -6.384571 -2.068900 1.022653
 H -3.979081 1.505700 0.845152
 H -6.159700 0.400348 1.420469
 C -4.385420 -2.255324 0.254144
 H -4.447301 -3.325050 0.065242

Y_{Ph}SnPy

E = -1559.47095129
 P -1.303940 0.074371 -0.013070
 C 0.376834 -0.150413 -0.197882
 C 1.188718 1.089060 -0.145129
 C 1.791300 1.534126 1.040634

C 2.595524 2.668019 1.062173
 C 2.809508 3.397996 -0.102622
 C 2.210552 2.980023 -1.287363
 C 1.415972 1.841700 -1.307274
 C -1.855197 0.376612 1.711133
 C -3.003895 1.114964 2.008134
 H -3.586696 1.562646 1.205078
 C -3.402084 1.280905 3.329583
 H -4.296029 1.858663 3.556697
 C -2.657883 0.712852 4.359655
 H -2.969399 0.848125 5.393748
 C -1.514076 -0.022956 4.067903
 H -0.928984 -0.465663 4.871701
 C -1.113189 -0.188316 2.747209
 H -0.215434 -0.755105 2.500562
 C -2.244861 -1.374958 -0.566085
 C -3.274266 -1.921446 0.200978
 H -3.515824 -1.495495 1.171933
 C -3.986745 -3.019039 -0.269982
 H -4.782581 -3.445682 0.337102
 C -3.680413 -3.571740 -1.508155
 H -4.238689 -4.431573 -1.873624
 C -2.657122 -3.028444 -2.279241
 H -2.411829 -3.461455 -3.246794
 C -1.938773 -1.935835 -1.811336
 H -1.129928 -1.511441 -2.403506
 C -1.964065 1.522151 -0.901568
 C -1.566634 2.794024 -0.472313
 H -0.926657 2.897934 0.402814
 C -1.981118 3.923488 -1.164857
 H -1.662031 4.907866 -0.828665
 C -2.795848 3.795540 -2.286160
 H -3.120106 4.682405 -2.827399
 C -3.196941 2.534793 -2.713280
 H -3.838926 2.431713 -3.585924
 C -2.781958 1.398999 -2.025309
 H -3.102875 0.415988 -2.363116

C 3.296479 -1.194767 -0.034108
 C 5.293448 -0.465238 1.103476
 C 4.805624 0.134959 -1.152008
 C 5.649670 0.223154 -0.049492
 Sn 1.244553 -2.108933 -0.201246
 N 3.667970 -0.550804 -1.150655
 H 5.929494 -0.432401 1.987930
 H 6.562211 0.813830 -0.099256
 H 5.060621 0.654229 -2.079315
 H 1.636612 0.960568 1.953495
 H 3.062248 2.979550 1.995415
 H 3.442205 4.283638 -0.087761
 H 2.373509 3.539309 -2.207478
 H 0.963663 1.504759 -2.238135
 C 4.106615 -1.187406 1.106192
 H 3.800010 -1.732526 2.000004

³Y_{Ph}SnPy

E = -1559.42247741
 P -1.167920 -0.401333 -0.171307
 C 0.034292 0.682442 0.435855
 C -0.249073 2.103847 0.543447
 C -1.516321 2.640702 0.846078
 C -1.721759 4.011285 0.915480
 C -0.667269 4.890612 0.687435
 C 0.597911 4.382862 0.392508
 C 0.806593 3.015425 0.325867
 C -2.482132 -0.948790 0.970942
 C -3.654675 -1.561814 0.516375
 H -3.819047 -1.700762 -0.551476
 C -4.614656 -1.985239 1.426861
 H -5.526041 -2.461493 1.070683
 C -4.411357 -1.797359 2.791698
 H -5.166238 -2.127534 3.502823
 C -3.249047 -1.184763 3.246263
 H -3.090311 -1.033823 4.311985
 C -2.284994 -0.759256 2.338608

H -1.371057 -0.275561 2.684323
 C -0.340654 -1.897428 -0.779038
 C -0.922633 -3.162469 -0.703446
 H -1.886447 -3.299169 -0.219823
 C -0.251528 -4.265014 -1.222945
 H -0.702591 -5.252637 -1.150719
 C 0.992731 -4.107219 -1.822650
 H 1.515272 -4.973324 -2.224754
 C 1.573459 -2.844550 -1.900987
 H 2.553445 -2.714787 -2.355865
 C 0.915620 -1.739117 -1.377385
 H 1.387112 -0.754553 -1.414302
 C -2.036716 0.330839 -1.596832
 C -3.277214 0.959689 -1.463443
 H -3.797440 0.949472 -0.508377
 C -3.855072 1.602314 -2.551877
 H -4.821633 2.088957 -2.438234
 C -3.198923 1.627989 -3.777403
 H -3.652769 2.133166 -4.627789
 C -1.960369 1.009684 -3.913624
 H -1.440956 1.029091 -4.869427
 C -1.379201 0.365684 -2.829182
 H -0.408913 -0.112332 -2.941930
 C 3.462571 0.013692 0.330668
 C 5.845609 -0.158911 0.006901
 C 4.374639 0.643584 -1.688014
 C 5.667842 0.339203 -1.283269
 Sn 1.665643 -0.211936 1.635321
 N 3.305827 0.484256 -0.910886
 H 6.840671 -0.414196 0.370130
 H 6.508289 0.487689 -1.957711
 H 4.189985 1.035721 -2.691179
 H -2.340958 1.963427 1.064675
 H -2.710545 4.397021 1.158804
 H -0.828361 5.965584 0.742891
 H 1.427384 5.063545 0.208094
 H 1.785258 2.610121 0.071461

C 4.736403 -0.320396 0.820181
H 4.847312 -0.701786 1.835064

Y_{PhF}SnPy

E = -2056.38309255
P -1.685734 0.194083 0.072856
C -0.103213 -0.432838 -0.029140
C 1.025213 0.496908 0.058464
C 1.900807 0.506412 1.149133
C 3.087833 1.222852 1.147305
C 3.404011 2.022656 0.056817
C 2.544965 2.066768 -1.033945
C 1.383690 1.309754 -1.022922
C -2.415698 0.208268 1.749082
C -3.573681 0.943361 2.022889
H -4.046212 1.528041 1.233993
C -4.113932 0.934646 3.301789
H -5.016104 1.505142 3.513964
C -3.495131 0.203304 4.313772
H -3.916527 0.202845 5.317317
C -2.334925 -0.514143 4.047144
H -1.843080 -1.072504 4.841159
C -1.793125 -0.512111 2.765234
H -0.870078 -1.045856 2.543075
C -2.818139 -0.760821 -0.973873
C -4.032305 -1.273202 -0.518790
H -4.339148 -1.119271 0.513014
C -4.844583 -2.000640 -1.383218
H -5.785257 -2.410728 -1.021505
C -4.452765 -2.209989 -2.700104
H -5.090465 -2.780598 -3.372591
C -3.241729 -1.697598 -3.158671
H -2.931091 -1.865024 -4.187894
C -2.421157 -0.981035 -2.298557
H -1.462184 -0.590497 -2.638217
C -1.803768 1.941971 -0.415353
C -1.184548 2.881371 0.415790

H -0.722813 2.560410 1.348898
 C -1.156117 4.220955 0.052407
 H -0.667041 4.946343 0.699307
 C -1.752305 4.632170 -1.136097
 H -1.729989 5.682354 -1.420471
 C -2.377725 3.702260 -1.958889
 H -2.848069 4.022931 -2.886184
 C -2.400831 2.357789 -1.604608
 H -2.885400 1.634686 -2.256574
 C 2.460953 -2.178389 -0.169339
 C 4.625898 -2.029042 0.878611
 C 4.186896 -1.150372 -1.295588
 C 5.080119 -1.353451 -0.248022
 F 0.620820 1.330721 -2.111313
 F 2.855672 2.813661 -2.084555
 F 4.529829 2.720671 0.047730
 F 3.920729 1.148828 2.175615
 F 1.636833 -0.250875 2.212478
 Sn 0.239615 -2.539076 -0.303473
 N 2.917930 -1.545231 -1.261088
 H 5.291545 -2.210337 1.721711
 H 6.102210 -0.986948 -0.316311
 H 4.511493 -0.630825 -2.200725
 C 3.304318 -2.457774 0.910333
 H 2.918871 -2.978295 1.786900

³Y_{PhF}SnPy

E = -2056.31320271
 P -1.770954 0.181082 0.032291
 C -0.162560 -0.290717 -0.147779
 C 0.971374 0.599218 0.075039
 C 1.862887 0.436502 1.147382
 C 3.068411 1.115660 1.238260
 C 3.391385 2.069262 0.283843
 C 2.521478 2.292194 -0.777306
 C 1.346233 1.563143 -0.876258
 C -2.438891 0.235141 1.737023

C -3.611399 0.931588 2.045624
 H -4.148429 1.466690 1.262745
 C -4.083478 0.950816 3.352108
 H -4.995382 1.494282 3.592338
 C -3.383707 0.282700 4.354318
 H -3.751963 0.303491 5.378429
 C -2.210103 -0.398976 4.051517
 H -1.656456 -0.909608 4.836990
 C -1.734267 -0.422357 2.744200
 H -0.804200 -0.932513 2.494815
 C -2.825651 -0.970352 -0.886455
 C -4.019137 -1.482237 -0.375367
 H -4.351074 -1.202291 0.621706
 C -4.778511 -2.362755 -1.137932
 H -5.706170 -2.763826 -0.734857
 C -4.350338 -2.734192 -2.408939
 H -4.947052 -3.424785 -3.002057
 C -3.158644 -2.231045 -2.920030
 H -2.818622 -2.527430 -3.910129
 C -2.390305 -1.354781 -2.161403
 H -1.448975 -0.959016 -2.540673
 C -2.060533 1.868415 -0.568589
 C -1.578261 2.926369 0.207575
 H -1.157049 2.730018 1.193055
 C -1.632307 4.226000 -0.279787
 H -1.247854 5.046327 0.322990
 C -2.177889 4.476399 -1.534831
 H -2.221122 5.495013 -1.915397
 C -2.669321 3.425801 -2.303223
 H -3.099831 3.621455 -3.283244
 C -2.605202 2.122110 -1.827204
 H -2.975750 1.301089 -2.437434
 C 2.629020 -2.137385 -0.449545
 C 4.796459 -2.043150 0.553922
 C 4.237214 -0.838259 -1.430839
 C 5.173701 -1.162825 -0.456302
 F 0.591773 1.762391 -1.947564

F 2.840008 3.183269 -1.706414
 F 4.529929 2.741238 0.367099
 F 3.906115 0.867099 2.235300
 F 1.606319 -0.469466 2.090064
 Sn 0.410687 -2.395855 -0.252025
 N 2.998980 -1.326428 -1.421324
 H 5.499688 -2.319170 1.338250
 H 6.172157 -0.732620 -0.487862
 H 4.489909 -0.155799 -2.244613
 C 3.502103 -2.546766 0.563463
 H 3.159397 -3.203704 1.359799

3.3.3.7 Koordinaten der pyrimidin(ylid)substituierten Stannylene

YSnPyr

E = -2164.13503634
 C 3.628531 -0.310313 -1.593425
 H 3.275469 0.223307 -2.472214
 C 2.729631 -1.068311 -0.861903
 O 0.631269 -2.536479 -1.477001
 C -1.592608 3.222913 -0.712168
 H -1.099912 3.804094 0.067009
 C 4.953412 -0.237107 -1.172659
 H 5.661690 0.365533 -1.739831
 C -0.390545 0.222728 2.961261
 H 0.387230 -0.483560 2.675760
 C -0.909845 1.090907 1.996381
 C 2.256452 1.828896 1.249955
 H 2.006142 1.290400 2.161908
 C 3.512503 2.401980 1.109850
 H 4.238688 2.315153 1.915514
 C 2.917681 3.176530 -1.092387
 H 3.178252 3.691916 -2.014725
 C 1.659485 2.597440 -0.961378
 H 0.952524 2.635310 -1.786846
 C -1.356327 1.847711 -0.819011
 C 3.137849 -1.764412 0.273044

H 2.414837 -2.352686 0.837015
 C -1.942211 1.963047 2.341915
 H -2.383620 2.615932 1.594234
 C 1.317764 1.936738 0.220232
 C 6.810582 -0.819969 0.429905
 H 7.275298 -1.812675 0.484019
 H 6.872751 -0.382599 1.434994
 H 7.412920 -0.202091 -0.243822
 C 3.841340 3.084423 -0.058693
 H 4.826750 3.533766 -0.166614
 C 0.077247 -0.649995 0.006243
 P -0.229869 0.980824 0.315988
 O 0.908389 -0.214426 -2.504341
 S 1.003504 -1.074960 -1.316712
 C 5.387812 -0.911267 -0.033507
 C 4.458194 -1.681323 0.679263
 H 4.781002 -2.222318 1.568149
 C -0.884934 0.243843 4.259322
 H -0.477053 -0.437702 5.003062
 C -1.907567 1.122163 4.601715
 H -2.299985 1.133256 5.616737
 C -2.436584 1.977001 3.641171
 H -3.246883 2.655379 3.900982
 C -3.033931 3.120330 -2.638331
 H -3.692800 3.617354 -3.348074
 C -2.436753 3.854544 -1.615619
 H -2.621797 4.923541 -1.529593
 C -2.773295 1.761342 -2.765287
 H -3.219881 1.189098 -3.575812
 C -1.929978 1.123398 -1.861525
 H -1.692193 0.068486 -1.974235
 Sn -0.889308 -2.654011 0.388090
 C -2.820725 -1.803320 -0.420634
 N -3.520173 -2.034534 -1.534967
 N -3.184960 -0.917621 0.524628
 C -4.627576 -1.320943 -1.716527
 C -4.294982 -0.216170 0.339375

C -5.073671 -0.376601 -0.799677
H -5.188574 -1.509833 -2.635980
H -4.567931 0.500579 1.118709
H -5.978593 0.203011 -0.965566

³YSnPyr

E = -2164.06987180
C 3.999874 -0.470021 -1.116844
H 3.966254 0.179189 -1.988414
C 2.847562 -1.134017 -0.730766
O 1.033234 -2.269050 -2.235650
C -0.896996 3.527963 -0.565236
H -0.291957 3.871798 0.273141
C 5.160746 -0.636418 -0.367790
H 6.067615 -0.109776 -0.662605
C -0.802838 -0.449055 2.407310
H -0.222271 -1.259238 1.969938
C -0.915978 0.759563 1.717512
C 2.221107 1.326864 1.622565
H 1.743681 0.691969 2.366355
C 3.503955 1.809359 1.843452
H 4.027436 1.551086 2.761669
C 3.451400 2.933760 -0.288158
H 3.935238 3.553129 -1.040668
C 2.169308 2.448693 -0.519607
H 1.661027 2.665373 -1.455822
C -0.966068 2.164904 -0.868829
C 2.843400 -1.974729 0.378320
H 1.925579 -2.489669 0.658432
C -1.667761 1.800761 2.262275
H -1.777213 2.739106 1.724688
C 1.544399 1.655641 0.445474
C 6.423174 -1.604732 1.587191
H 6.635032 -2.658482 1.804908
H 6.316220 -1.092613 2.553313
H 7.295987 -1.179393 1.081197
C 4.116385 2.619477 0.891529

H 5.121423 2.998757 1.066854
 C 0.076861 -0.623753 -0.598043
 P -0.081435 0.915825 0.112097
 O 1.621967 0.176872 -2.617870
 S 1.348578 -0.924180 -1.683624
 C 5.181837 -1.455511 0.759833
 C 4.005065 -2.126864 1.116893
 H 4.005234 -2.779734 1.989150
 C -1.452441 -0.616465 3.625370
 H -1.372967 -1.565493 4.151643
 C -2.208571 0.419404 4.162070
 H -2.721731 0.283963 5.112208
 C -2.309582 1.629822 3.482400
 H -2.899796 2.443161 3.900083
 C -2.319789 4.014511 -2.445664
 H -2.848886 4.737463 -3.063860
 C -1.578680 4.449536 -1.350333
 H -1.522747 5.510251 -1.113622
 C -2.371241 2.660857 -2.761192
 H -2.935963 2.322311 -3.627322
 C -1.692932 1.735220 -1.977357
 H -1.710330 0.674519 -2.220542
 Sn -1.320608 -2.246196 -0.895071
 C -3.249777 -1.546721 -0.102411
 N -4.273301 -2.366929 0.124787
 N -3.243677 -0.231605 0.096492
 C -5.373254 -1.810209 0.612619
 C -4.342388 0.318064 0.594411
 C -5.468519 -0.445632 0.882059
 H -6.218842 -2.476140 0.801210
 H -4.321056 1.396795 0.765456
 H -6.374617 -0.003496 1.287606

Y_{Ph}SnPyr

E = -1575.53461591
 P -1.295841 0.090842 0.002146
 C 0.363394 -0.156425 -0.302858

C 1.204406 1.064932 -0.282793
 C 1.861960 1.494686 0.880582
 C 2.688604 2.612319 0.872964
 C 2.872856 3.341475 -0.297899
 C 2.224196 2.935706 -1.460432
 C 1.404979 1.814158 -1.451828
 C -1.724099 0.398973 1.758631
 C -2.835027 1.158882 2.134503
 H -3.465225 1.615971 1.373556
 C -3.133308 1.335868 3.480695
 H -3.997516 1.931045 3.769582
 C -2.326497 0.757333 4.456401
 H -2.559356 0.902029 5.509759
 C -1.220378 -0.000335 4.085910
 H -0.585833 -0.450864 4.846591
 C -0.918634 -0.176925 2.740547
 H -0.049359 -0.759431 2.435323
 C -2.279814 -1.350694 -0.491401
 C -3.267985 -1.891385 0.332105
 H -3.455041 -1.461236 1.313409
 C -4.006665 -2.989196 -0.096394
 H -4.769456 -3.412235 0.554092
 C -3.767747 -3.547476 -1.346985
 H -4.346052 -4.408033 -1.677950
 C -2.786793 -3.008886 -2.174314
 H -2.594918 -3.446025 -3.152016
 C -2.042994 -1.915955 -1.749596
 H -1.266241 -1.494892 -2.385349
 C -1.993764 1.544396 -0.846442
 C -1.549438 2.812341 -0.453190
 H -0.854986 2.911644 0.379954
 C -1.988349 3.943755 -1.127476
 H -1.632742 4.925056 -0.820142
 C -2.874662 3.821691 -2.193801
 H -3.217826 4.710013 -2.720799
 C -3.323367 2.564947 -2.583889
 H -4.021538 2.466629 -3.412863

C -2.883940 1.427256 -1.914657
 H -3.241429 0.447274 -2.223378
 C 3.241625 -1.195286 -0.156900
 C 4.903980 -0.563082 1.275340
 C 4.902312 0.135072 -0.975314
 C 5.513988 0.177278 0.272599
 Sn 1.203196 -2.128610 -0.333657
 N 3.786307 -0.546829 -1.194963
 N 3.780871 -1.243230 1.069786
 H 5.331771 -0.604021 2.280778
 H 6.420783 0.750825 0.450011
 H 5.327479 0.676202 -1.824817
 H 1.739263 0.915881 1.794586
 H 3.196496 2.911928 1.788573
 H 3.521690 4.215511 -0.305526
 H 2.364293 3.492818 -2.385640
 H 0.910262 1.489681 -2.365483

³Y_{Ph}SnPyr

E = -1575.48047566
 P -1.191639 -0.331502 0.169242
 C 0.086851 0.741941 -0.311696
 C -0.028121 2.173970 -0.389524
 C 1.154443 2.940788 -0.247499
 C 1.129300 4.321890 -0.328994
 C -0.068043 4.993323 -0.575814
 C -1.243944 4.262816 -0.734301
 C -1.229756 2.880740 -0.636887
 C -0.622382 -1.404690 1.511743
 C -1.519620 -2.292068 2.115244
 H -2.550755 -2.350600 1.767718
 C -1.096241 -3.090443 3.170127
 H -1.790787 -3.787332 3.634892
 C 0.211503 -2.986973 3.637479
 H 0.540592 -3.610507 4.466802
 C 1.090427 -2.078034 3.058567
 H 2.106855 -1.979661 3.434389

C 0.680359 -1.282183 1.993680
 H 1.362663 -0.549987 1.561634
 C -1.735345 -1.334501 -1.238342
 C -1.854356 -2.724071 -1.199545
 H -1.595193 -3.272157 -0.297314
 C -2.271742 -3.412405 -2.332443
 H -2.350615 -4.497175 -2.303421
 C -2.572763 -2.721696 -3.502089
 H -2.892856 -3.266307 -4.388114
 C -2.452029 -1.335661 -3.543751
 H -2.672768 -0.793981 -4.461060
 C -2.030642 -0.641152 -2.418476
 H -1.904303 0.440776 -2.458756
 C -2.692199 0.427138 0.870932
 C -2.524234 1.252328 1.987868
 H -1.531122 1.392547 2.413994
 C -3.618874 1.897912 2.543517
 H -3.484357 2.542637 3.409561
 C -4.885903 1.723099 1.991199
 H -5.743586 2.231040 2.427927
 C -5.055962 0.900320 0.884174
 H -6.045918 0.759930 0.454681
 C -3.960967 0.252160 0.319212
 H -4.095934 -0.387866 -0.550304
 C 3.422430 -0.111354 -0.105570
 C 5.664274 -0.488026 0.182455
 C 4.410948 0.645986 1.821030
 C 5.645089 0.154855 1.418277
 Sn 1.717900 -0.403585 -1.537609
 N 3.316780 0.518099 1.080223
 N 4.582178 -0.620060 -0.566454
 H 6.593127 -0.910012 -0.212020
 H 6.538385 0.263942 2.028386
 H 4.299204 1.163128 2.778311
 H 2.079254 2.409414 -0.033059
 H 2.052308 4.884575 -0.200754
 H -0.084063 6.079122 -0.648841

H -2.181164 4.776758 -0.940948
H -2.157080 2.331179 -0.781700

Y_{PhF}SnPyr

E = -2072.44424700
P -1.668883 0.215815 0.090886
C -0.105741 -0.440655 -0.092786
C 1.036637 0.474942 -0.015232
C 1.901087 0.509386 1.084671
C 3.081414 1.238223 1.081155
C 3.405596 2.014934 -0.023586
C 2.557048 2.032858 -1.123656
C 1.397906 1.272357 -1.106899
C -2.319263 0.244652 1.797782
C -3.441260 1.011104 2.129806
H -3.933837 1.614001 1.367307
C -3.919426 1.010193 3.433219
H -4.793266 1.605284 3.691439
C -3.274230 0.254888 4.410605
H -3.646768 0.260606 5.433292
C -2.149960 -0.494751 4.085136
H -1.637280 -1.072658 4.851433
C -1.669854 -0.500876 2.778894
H -0.775022 -1.061153 2.511890
C -2.863522 -0.718092 -0.904113
C -4.068970 -1.200544 -0.396216
H -4.330431 -1.031658 0.645752
C -4.930333 -1.917742 -1.220758
H -5.863955 -2.304784 -0.817770
C -4.596355 -2.146737 -2.550406
H -5.272413 -2.709596 -3.191185
C -3.394821 -1.663656 -3.062050
H -3.129828 -1.845786 -4.101493
C -2.525649 -0.957328 -2.241988
H -1.573658 -0.588815 -2.623362
C -1.761856 1.964605 -0.399590
C -1.114257 2.895176 0.419936

H -0.653716 2.569920 1.352193
 C -1.056360 4.231120 0.046460
 H -0.545442 4.949203 0.684576
 C -1.651159 4.647846 -1.140784
 H -1.605933 5.695107 -1.433097
 C -2.304637 3.727173 -1.952168
 H -2.774217 4.052322 -2.878276
 C -2.357333 2.386350 -1.587670
 H -2.864577 1.670776 -2.230595
 C 2.411892 -2.199316 -0.287217
 C 4.241226 -2.245316 1.079047
 C 4.332613 -1.229930 -1.046749
 C 4.983355 -1.537550 0.142918
 F 0.633789 1.281701 -2.193787
 F 2.872036 2.764217 -2.183278
 F 4.527226 2.719917 -0.035491
 F 3.905202 1.190278 2.118823
 F 1.627059 -0.217025 2.163379
 Sn 0.189604 -2.544809 -0.424161
 N 3.061923 -1.548293 -1.262619
 N 2.974425 -2.586454 0.864988
 H 4.681426 -2.545822 2.033013
 H 6.014575 -1.245838 0.326715
 H 4.852422 -0.696346 -1.847063

³Y_{PhF}SnPyr

E = -2072.38256343
 P 0.353327 1.307976 0.311843
 C -0.053129 -0.164798 -0.464157
 C 0.974330 -1.209506 -0.448689
 C 0.950856 -2.239677 0.498189
 C 1.971201 -3.176366 0.598065
 C 3.059220 -3.103554 -0.262761
 C 3.117600 -2.098074 -1.221092
 C 2.085616 -1.175822 -1.299911
 C -0.424279 1.533682 1.941157
 C 0.049748 2.504290 2.830916

H 0.886771 3.142573 2.548253
 C -0.537499 2.641686 4.081334
 H -0.168122 3.394400 4.775131
 C -1.592520 1.808130 4.448048
 H -2.049374 1.914081 5.430407
 C -2.051612 0.835486 3.568021
 H -2.867014 0.175410 3.857585
 C -1.467996 0.687907 2.312671
 H -1.814270 -0.096972 1.639109
 C -0.061583 2.762705 -0.691688
 C -0.673475 3.899559 -0.163205
 H -0.947426 3.936682 0.888176
 C -0.957948 4.980726 -0.990723
 H -1.447131 5.860506 -0.577638
 C -0.628615 4.934403 -2.340491
 H -0.855671 5.781749 -2.984637
 C -0.018584 3.800962 -2.871203
 H 0.231646 3.758396 -3.929191
 C 0.257730 2.713672 -2.053764
 H 0.710254 1.811209 -2.462028
 C 2.134193 1.325793 0.671435
 C 2.583342 0.518540 1.723185
 H 1.861862 0.048144 2.390662
 C 3.942668 0.299475 1.900650
 H 4.286841 -0.337491 2.712889
 C 4.860027 0.889299 1.035109
 H 5.925318 0.712555 1.169653
 C 4.417379 1.706062 0.000255
 H 5.134618 2.171321 -0.672621
 C 3.056565 1.922906 -0.186792
 H 2.713825 2.543501 -1.011773
 C -3.486504 -1.352540 -0.574640
 C -5.550808 -2.293238 -0.692552
 C -4.344840 -2.245167 1.333450
 C -5.496990 -2.627047 0.657953
 F 2.186918 -0.209371 -2.208477
 F 4.157538 -2.025946 -2.037727

F 4.036057 -3.990508 -0.173346
 F 1.927721 -4.126246 1.520491
 F -0.038828 -2.307002 1.375581
 Sn -1.833798 -0.358102 -1.659268
 N -3.349605 -1.609847 0.727251
 N -4.559877 -1.665279 -1.308154
 H -6.426157 -2.544218 -1.296903
 H -6.309878 -3.149909 1.155317
 H -4.218961 -2.455895 2.398340

3.3.3.8 Koordinaten der B¹(ylid)substituierten Stannylene

YSnB¹

E = -2576.27485486
 C 4.037392 0.657534 0.763716
 H 3.756605 0.936675 1.776201
 C 3.075520 0.690858 -0.232279
 O 1.075909 2.293112 -0.754259
 C -1.049223 -2.504475 2.797215
 H -0.585587 -3.459562 2.555429
 C 5.329760 0.253319 0.443650
 H 6.087731 0.217053 1.225233
 C -0.266485 -2.562255 -2.063214
 H 0.309142 -1.698464 -2.390196
 C -0.569458 -2.704613 -0.704667
 C 2.590712 -2.764540 0.121032
 H 2.262059 -2.948306 -0.900602
 C 3.868299 -3.135043 0.517194
 H 4.536669 -3.615644 -0.194602
 Sn -0.614002 1.255645 -2.063476
 C 3.445317 -2.255179 2.720041
 H 3.781766 -2.044050 3.733194
 C 2.165547 -1.876659 2.327722
 H 1.514092 -1.355071 3.025016
 C -0.867319 -1.398039 1.958997
 C 3.389929 0.344805 -1.543660
 H 2.618188 0.379907 -2.312065

C -1.317474 -3.804137 -0.282824
 H -1.597902 -3.913598 0.759855
 C 1.727214 -2.147911 1.030330
 C 7.049359 -0.600214 -1.188014
 H 7.399008 -0.193988 -2.144291
 H 7.068552 -1.695602 -1.277123
 H 7.770453 -0.320701 -0.412792
 C 4.293919 -2.887755 1.819854
 H 5.296188 -3.179115 2.128451
 C 0.350056 -0.043746 -0.412627
 P 0.136058 -1.481851 0.441011
 O 1.385633 1.395263 1.612690
 S 1.389483 1.126518 0.166188
 C 5.669613 -0.116960 -0.856375
 C 4.680428 -0.055089 -1.846717
 H 4.931102 -0.327982 -2.871219
 C -0.698900 -3.512486 -2.979919
 H -0.462569 -3.388148 -4.034844
 C -1.424419 -4.618396 -2.549497
 H -1.755834 -5.367027 -3.266733
 C -1.732693 -4.760630 -1.201871
 H -2.315087 -5.614472 -0.861390
 C -2.316757 -1.140991 4.323598
 H -2.886011 -1.040631 5.246045
 C -1.784972 -2.378939 3.967256
 H -1.929460 -3.243191 4.612740
 C -2.097797 -0.031550 3.516754
 H -2.489486 0.942920 3.798403
 C -1.373541 -0.155544 2.334184
 H -1.177958 0.713373 1.709138
 N -3.328637 1.096608 0.009269
 C -3.141185 2.848872 1.386817
 C -3.837245 1.715168 1.147943
 H -3.300856 3.595210 2.157430
 H -4.695837 1.326777 1.683003
 B -2.230694 1.895022 -0.504972
 C -1.195500 4.023350 0.418650

C -0.921029 4.725604 -0.753773
 C -0.454151 4.280748 1.569686
 C 0.107248 5.657806 -0.780844
 H -1.519889 4.525970 -1.640799
 C 0.562883 5.225243 1.539720
 H -0.640754 3.696094 2.467732
 C 0.852128 5.912003 0.365483
 H 0.325244 6.192025 -1.703691
 H 1.152872 5.405052 2.436366
 H 1.660708 6.639749 0.342457
 C -3.702310 -0.187507 -0.404169
 C -3.588439 -0.551009 -1.750807
 C -4.184355 -1.134252 0.507154
 C -3.943525 -1.825485 -2.172340
 H -3.262628 0.191058 -2.477923
 C -4.564352 -2.396949 0.072469
 H -4.241699 -0.883711 1.563399
 C -4.448434 -2.751885 -1.267055
 H -3.841886 -2.087359 -3.223870
 H -4.942204 -3.116016 0.797419
 H -4.737081 -3.745708 -1.601495
 N -2.170452 3.005839 0.405057

³YSnB¹

E = -2576.21982219
 C 4.258038 0.973620 0.640759
 H 3.982758 1.367708 1.616104
 C 3.303854 0.949703 -0.365096
 O 1.443938 2.726928 -0.882285
 C -0.913529 -2.232969 2.532236
 H -0.478595 -3.190544 2.249150
 C 5.524660 0.461026 0.388149
 H 6.270720 0.465387 1.182241
 C 0.753448 -2.606673 -1.948113
 H 1.580198 -1.923484 -2.140319
 C -0.007113 -2.452591 -0.780509
 C 3.020418 -2.398622 0.499091

H 2.834332 -2.769516 -0.504546
 C 4.226290 -2.696417 1.120699
 H 4.970654 -3.289451 0.592749
 Sn -1.005774 0.724823 -1.937360
 C 3.528456 -1.472967 3.072634
 H 3.725915 -1.102962 4.076699
 C 2.321315 -1.168676 2.455636
 H 1.590130 -0.547626 2.966565
 C -0.659409 -1.090776 1.765000
 C 3.612123 0.447827 -1.624840
 H 2.851653 0.450210 -2.404258
 C -1.120299 -3.265555 -0.572899
 H -1.765736 -3.114010 0.288008
 C 2.056073 -1.639605 1.166379
 C 7.198678 -0.692575 -1.095436
 H 7.459300 -0.694452 -2.159343
 H 7.216712 -1.737122 -0.752010
 H 7.986270 -0.160628 -0.550001
 C 4.480425 -2.238529 2.409282
 H 5.425481 -2.474819 2.894884
 C 0.594892 0.309067 -0.557776
 P 0.496052 -1.133253 0.360233
 O 1.585856 1.704606 1.435419
 S 1.648704 1.552279 -0.034835
 C 5.852001 -0.078638 -0.856525
 C 4.878635 -0.066500 -1.861417
 H 5.121439 -0.467658 -2.844926
 C 0.426106 -3.588943 -2.870093
 H 1.021040 -3.700993 -3.774268
 C -0.672667 -4.415830 -2.646475
 H -0.933360 -5.183164 -3.372893
 C -1.446225 -4.244938 -1.506066
 H -2.325286 -4.863562 -1.341248
 C -2.210055 -0.905459 4.067433
 H -2.813484 -0.832254 4.970537
 C -1.701056 -2.141305 3.671263
 H -1.903466 -3.031540 4.263624

C -1.935569 0.233944 3.320453
 H -2.318485 1.202696 3.632382
 C -1.163751 0.144360 2.164799
 H -0.904454 1.031690 1.591164
 N -3.736052 0.697625 0.046904
 C -3.564637 2.622262 1.180735
 C -4.232515 1.448420 1.107678
 H -3.723639 3.455822 1.855761
 H -5.065415 1.102176 1.708467
 B -2.681432 1.458177 -0.572433
 C -1.642239 3.706621 0.092016
 C -1.436146 4.383018 -1.108029
 C -0.874868 4.022631 1.210568
 C -0.465179 5.371581 -1.183563
 H -2.044448 4.126742 -1.972270
 C 0.091954 5.015826 1.128399
 H -1.017315 3.466039 2.134894
 C 0.297823 5.693083 -0.066626
 H -0.300924 5.891784 -2.125001
 H 0.704270 5.239737 1.999142
 H 1.065688 6.460890 -0.133541
 C -4.084360 -0.649399 -0.153066
 C -4.207739 -1.162463 -1.446401
 C -4.301609 -1.490684 0.940558
 C -4.555851 -2.493167 -1.637242
 H -4.050672 -0.502678 -2.295895
 C -4.661028 -2.818559 0.741178
 H -4.161216 -1.104318 1.947248
 C -4.793816 -3.325498 -0.547381
 H -4.652231 -2.878963 -2.650276
 H -4.828991 -3.461407 1.603429
 H -5.081390 -4.363702 -0.702434
 N -2.614400 2.679245 0.170922

$Y_{Ph}SnB^1$

E = -1987.67528184

P 1.831286 -0.667456 0.059668

C 0.159088 -0.327411 -0.040595
 C -0.522561 -0.194398 1.270527
 C -0.346716 0.924905 2.101672
 H 0.292688 1.736164 1.761861
 C -0.976069 1.018554 3.337460
 H -0.817958 1.902200 3.955211
 C -1.802739 -0.007097 3.785958
 H -2.295930 0.064515 4.753613
 C -1.994300 -1.122281 2.976522
 H -2.639471 -1.934771 3.308315
 C -1.361847 -1.215057 1.742308
 H -1.516955 -2.090443 1.113780
 C 2.893082 0.742190 0.554765
 C 4.101737 0.554415 1.229660
 H 4.417673 -0.448766 1.510561
 C 4.899202 1.648168 1.546641
 H 5.838235 1.498233 2.076125
 C 4.494485 2.931353 1.190971
 H 5.117978 3.787082 1.443824
 C 3.291263 3.122054 0.518957
 H 2.965770 4.122585 0.244433
 C 2.489766 2.031154 0.202334
 H 1.535616 2.172195 -0.307664
 C 2.493332 -1.228285 -1.532628
 C 3.635308 -0.664649 -2.100631
 H 4.149876 0.149849 -1.596080
 C 4.111372 -1.136617 -3.319890
 H 4.997382 -0.686321 -3.762851
 C 3.456779 -2.175600 -3.970537
 H 3.831747 -2.542385 -4.924218
 C 2.319073 -2.744702 -3.405220
 H 1.801124 -3.554391 -3.915039
 C 1.834468 -2.271060 -2.193946
 H 0.937393 -2.700779 -1.751670
 C 2.251715 -1.952161 1.288238
 C 1.991047 -1.690239 2.639255
 H 1.605110 -0.719336 2.943385

C 2.222596 -2.668006 3.597379
 H 2.009248 -2.455263 4.642955
 C 2.722303 -3.911672 3.222765
 H 2.903619 -4.676267 3.975869
 C 2.993987 -4.173367 1.885025
 H 3.393728 -5.140768 1.587015
 C 2.759291 -3.199568 0.919534
 H 2.980501 -3.414065 -0.123284
 Sn -0.758157 0.140002 -1.927165
 N -3.714430 0.308297 -0.104901
 C -3.583181 2.303926 0.902098
 C -4.260754 1.138288 0.871142
 H -3.788285 3.185449 1.498476
 H -5.143107 0.863584 1.436707
 B -2.582249 0.978583 -0.704510
 N -2.573841 2.272845 -0.056141
 C -1.601078 3.267257 -0.193606
 C -1.147212 3.999255 0.908729
 C -1.053015 3.538946 -1.453311
 C -0.163687 4.967478 0.752313
 H -1.549634 3.778245 1.894544
 C -0.058034 4.497253 -1.599504
 H -1.441799 3.012797 -2.323251
 C 0.389580 5.221880 -0.499351
 H 0.180592 5.522783 1.623079
 H 0.353017 4.692819 -2.588143
 H 1.156236 5.985105 -0.617689
 C -4.107154 -1.021942 -0.294327
 C -3.931918 -1.631053 -1.541631
 C -4.657405 -1.773264 0.748697
 C -4.271913 -2.963834 -1.729594
 H -3.544300 -1.040860 -2.369431
 C -5.011627 -3.101575 0.547350
 H -4.771566 -1.321491 1.730757
 C -4.815632 -3.709253 -0.688005
 H -4.125054 -3.418196 -2.707873
 H -5.433139 -3.671189 1.373905

H -5.088429 -4.751429 -0.839278

³Y_{Ph}SnB¹

E = -1987.63310702

P -0.653296 1.486838 0.037329

C 0.694614 0.694012 -0.709340

C 2.046369 1.125784 -0.397408

C 2.402591 1.740479 0.825989

H 1.644999 1.897187 1.592122

C 3.704102 2.141002 1.090394

H 3.933772 2.605817 2.048143

C 4.707099 1.957453 0.144768

H 5.726194 2.280104 0.348583

C 4.386102 1.342323 -1.064166

H 5.159530 1.175741 -1.812172

C 3.091945 0.927580 -1.326258

H 2.853908 0.442156 -2.272239

C -1.162973 0.743869 1.619988

C -2.403542 1.028421 2.201550

H -3.131423 1.633740 1.663126

C -2.706501 0.536273 3.464774

H -3.671215 0.760660 3.915696

C -1.776771 -0.241563 4.150938

H -2.013637 -0.620290 5.143580

C -0.555784 -0.551692 3.561356

H 0.161159 -1.184779 4.078682

C -0.249397 -0.067657 2.293802

H 0.696287 -0.323809 1.816320

C -2.130328 1.486966 -1.016824

C -3.058944 0.444303 -0.946588

H -2.939549 -0.357564 -0.221213

C -4.154008 0.438349 -1.803509

H -4.875714 -0.371093 -1.735489

C -4.315146 1.449988 -2.743672

H -5.169534 1.434620 -3.417857

C -3.388448 2.483911 -2.819689

H -3.512055 3.279441 -3.551543

C -2.303090 2.508874 -1.952470
 H -1.588753 3.326464 -2.008807
 C -0.325170 3.251650 0.389627
 C -0.815180 3.914028 1.515302
 H -1.414238 3.381148 2.249298
 C -0.525540 5.260009 1.712944
 H -0.910336 5.769390 2.594272
 C 0.255770 5.950222 0.793135
 H 0.483633 7.002374 0.952916
 C 0.755927 5.291187 -0.325626
 H 1.381029 5.822299 -1.040449
 C 0.473646 3.946455 -0.525193
 H 0.888454 3.420997 -1.384011
 Sn 0.219530 -1.029305 -2.033561
 N 1.578132 -2.692996 0.590081
 C -0.116614 -3.490003 1.814729
 C 1.222425 -3.316911 1.781194
 H -0.717696 -3.991018 2.564853
 H 1.968757 -3.652587 2.492604
 B 0.382386 -2.431055 -0.173215
 N -0.674036 -2.985206 0.644642
 C -2.059446 -2.907762 0.441052
 C -2.913433 -2.569520 1.492694
 C -2.597802 -3.151001 -0.826069
 C -4.283143 -2.466626 1.278623
 H -2.492403 -2.353738 2.471028
 C -3.966976 -3.045788 -1.032339
 H -1.932673 -3.434339 -1.637376
 C -4.817120 -2.702902 0.015990
 H -4.934476 -2.190379 2.105890
 H -4.372781 -3.240272 -2.023416
 H -5.889919 -2.624941 -0.149652
 C 2.915484 -2.359197 0.294869
 C 3.455164 -2.667069 -0.954505
 C 3.715315 -1.737379 1.254562
 C 4.782282 -2.364421 -1.231850
 H 2.827451 -3.158701 -1.693324

C 5.043768 -1.445403 0.973170
H 3.283314 -1.468403 2.216898
C 5.583933 -1.761974 -0.268387
H 5.194772 -2.613992 -2.207717
H 5.654387 -0.949372 1.724857
H 6.623989 -1.529114 -0.487834

$Y_{PhF}SnB^1$

E = -2484.58534594
P 2.105885 0.685751 0.223883
C 0.482353 0.279366 -0.100063
C -0.259127 -0.519579 0.870856
C -1.358718 0.002996 1.565151
C -2.193707 -0.781052 2.343986
C -1.907251 -2.130127 2.513758
C -0.796931 -2.675478 1.884339
C 0.004536 -1.877065 1.082386
C 2.379125 2.396115 0.809990
C 3.628814 2.799819 1.292040
H 4.458227 2.093050 1.314923
C 3.808836 4.097183 1.752459
H 4.782150 4.410701 2.125051
C 2.740975 4.992547 1.746176
H 2.883010 6.007842 2.111854
C 1.493225 4.586704 1.288392
H 0.653764 5.278996 1.299674
C 1.309600 3.287985 0.822779
H 0.329987 2.944746 0.492179
C 3.135298 0.459057 -1.254377
C 4.023575 1.415165 -1.742961
H 4.131108 2.372887 -1.239782
C 4.756053 1.153297 -2.897028
H 5.437003 1.907735 -3.285741
C 4.611650 -0.061638 -3.556335
H 5.186338 -0.261799 -4.458707
C 3.724638 -1.018951 -3.069276
H 3.605805 -1.969306 -3.586334

C 2.978812 -0.758983 -1.928111
 H 2.258579 -1.486254 -1.553496
 C 2.827017 -0.309319 1.562823
 C 2.306346 -0.119953 2.847127
 H 1.549688 0.645235 3.017882
 C 2.750761 -0.906161 3.901232
 H 2.338398 -0.758907 4.897303
 C 3.721197 -1.879713 3.681518
 H 4.069596 -2.495992 4.508062
 C 4.245898 -2.064648 2.407476
 H 5.005959 -2.823940 2.235048
 C 3.798384 -1.285342 1.346102
 H 4.204117 -1.441498 0.349161
 Sn -0.424421 0.968506 -1.935783
 N -2.531434 -1.643634 -1.284919
 C -4.366650 -0.775409 -0.344570
 C -3.735461 -1.929783 -0.645760
 H -5.342386 -0.638119 0.106990
 H -4.091795 -2.943002 -0.503568
 B -2.380581 -0.203702 -1.371439
 N -3.598534 0.298945 -0.783803
 C -3.942589 1.639705 -0.543316
 C -4.567068 2.017267 0.647507
 C -3.640071 2.616876 -1.494883
 C -4.878665 3.350529 0.878097
 H -4.760796 1.267066 1.410360
 C -3.937534 3.951427 -1.247583
 H -3.189381 2.316880 -2.438846
 C -4.562156 4.325702 -0.062674
 H -5.357985 3.631693 1.814078
 H -3.694158 4.701001 -1.998429
 H -4.802792 5.369856 0.125883
 C -1.584776 -2.616761 -1.631747
 C -0.666865 -2.365428 -2.657273
 C -1.508337 -3.837294 -0.953322
 C 0.332851 -3.282339 -2.954536
 H -0.766250 -1.460516 -3.254826

C -0.506902 -4.749696 -1.255526
H -2.204040 -4.052684 -0.146522
C 0.426796 -4.476908 -2.249594
H 1.033195 -3.061684 -3.758573
H -0.448900 -5.677308 -0.689778
H 1.212218 -5.193623 -2.479014
F -1.652527 1.294594 1.442329
F -3.265722 -0.256550 2.926978
F -2.704452 -2.897347 3.243418
F -0.549949 -3.974649 2.000433
F 1.008338 -2.462045 0.433818

³Y_{PhF}SnB¹

E = -2484.52838376
P 1.951344 -1.262957 -0.007097
C 0.602534 -0.253727 -0.186874
C 0.644174 1.077132 -0.764609
C -0.223078 1.487493 -1.792412
C -0.249600 2.782532 -2.288839
C 0.633436 3.732960 -1.795754
C 1.517841 3.371163 -0.789470
C 1.498947 2.084048 -0.280049
C 2.014661 -2.687141 -1.156732
C 3.122422 -3.541485 -1.172747
H 3.946257 -3.378591 -0.477873
C 3.181912 -4.586240 -2.084812
H 4.044288 -5.250085 -2.094412
C 2.143551 -4.775527 -2.994784
H 2.193407 -5.592762 -3.711968
C 1.054482 -3.912680 -2.998545
H 0.251540 -4.047258 -3.720520
C 0.989930 -2.864903 -2.083959
H 0.155579 -2.163799 -2.095782
C 2.009840 -1.951099 1.677000
C 2.139809 -3.303676 1.987692
H 2.225772 -4.044162 1.196504
C 2.131531 -3.712000 3.318807

H 2.220391 -4.769819 3.558085
 C 2.001705 -2.775459 4.337275
 H 1.995141 -3.100115 5.376114
 C 1.866695 -1.423375 4.029437
 H 1.753251 -0.690030 4.825554
 C 1.858651 -1.012153 2.704690
 H 1.719593 0.035882 2.440252
 C 3.536572 -0.448429 -0.342536
 C 3.717020 0.097048 -1.616928
 H 2.937822 -0.013941 -2.370208
 C 4.886354 0.782294 -1.917635
 H 5.020855 1.213896 -2.907337
 C 5.882871 0.915011 -0.954925
 H 6.799150 1.452115 -1.192084
 C 5.709593 0.360575 0.308257
 H 6.489606 0.461423 1.060246
 C 4.535933 -0.316940 0.619928
 H 4.395956 -0.734835 1.614519
 Sn -1.318544 -1.100829 0.361478
 N -2.755729 1.838720 1.008336
 C -4.910662 1.520718 0.469994
 C -3.994403 2.447221 0.819189
 H -5.973831 1.652111 0.307040
 H -4.143314 3.503401 1.009177
 B -2.910381 0.433720 0.724541
 N -4.310173 0.267605 0.415635
 C -4.989506 -0.889927 0.008169
 C -5.963184 -0.834569 -0.992521
 C -4.686536 -2.121340 0.595527
 C -6.616231 -1.991292 -1.396573
 H -6.184888 0.116077 -1.472197
 C -5.332772 -3.276687 0.173606
 H -3.965819 -2.157822 1.410610
 C -6.302110 -3.218831 -0.821238
 H -7.368406 -1.933414 -2.181174
 H -5.084997 -4.227897 0.640930
 H -6.811812 -4.123602 -1.145400

C -1.629764 2.566166 1.438144
 C -0.741329 2.010987 2.363344
 C -1.412422 3.867386 0.979972
 C 0.336104 2.754161 2.823754
 H -0.915036 1.000065 2.727313
 C -0.332597 4.604920 1.450478
 H -2.080933 4.292651 0.234426
 C 0.549153 4.053056 2.372221
 H 1.019264 2.312461 3.547146
 H -0.163542 5.609401 1.066982
 H 1.402811 4.625873 2.726411
 F -1.066557 0.610068 -2.332419
 F -1.099419 3.111072 -3.252327
 F 0.610600 4.978324 -2.252725
 F 2.322366 4.285471 -0.264021
 F 2.311123 1.828552 0.745543

3.3.3.9 Koordinaten der B²(ylid)substituierten Stannylene

YSnB²

E = -2307.08730068
 C 3.299142 -1.378198 -1.943517
 H 2.728869 -1.210480 -2.853857
 C 2.619742 -1.579731 -0.753841
 O 0.403428 -2.821044 -0.110595
 C -1.054055 3.240999 -1.261301
 H -0.284432 3.936491 -0.927067
 C 4.691047 -1.382344 -1.937560
 H 5.230198 -1.217040 -2.869483
 C 0.949204 1.468965 2.835605
 H 1.529838 0.566856 2.649461
 C 0.225507 2.043486 1.784118
 C 3.059633 1.841003 0.040375
 H 3.055247 1.716185 1.121342
 C 4.256172 2.074944 -0.622441
 H 5.183625 2.137099 -0.056754
 Sn -0.518138 -1.997401 1.895426

C 3.085328 2.125604 -2.727585
 H 3.094434 2.225015 -3.811160
 C 1.883045 1.887902 -2.069629
 H 0.962045 1.783623 -2.638540
 C -0.992521 1.892055 -0.892918
 C 3.308706 -1.796452 0.437019
 H 2.755153 -1.953611 1.362361
 C -0.562595 3.169058 2.027913
 H -1.161277 3.603529 1.232406
 C 1.864438 1.761796 -0.679021
 C 6.906683 -1.565657 -0.748860
 H 7.312910 -2.485710 -0.310403
 H 7.287379 -0.729441 -0.147352
 H 7.314098 -1.463960 -1.759869
 C 4.269072 2.224340 -2.006890
 H 5.208750 2.406569 -2.524899
 C 0.337556 -0.424529 0.453429
 P 0.336495 1.236552 0.159460
 O 0.432246 -1.227857 -2.109402
 S 0.835572 -1.497466 -0.723812
 C 5.407756 -1.583653 -0.759734
 C 4.692835 -1.796250 0.427060
 H 5.236115 -1.964693 1.356267
 C 0.902898 2.030663 4.105266
 H 1.467101 1.575843 4.916881
 C 0.126343 3.160965 4.339208
 H 0.084424 3.596729 5.335586
 C -0.608535 3.724140 3.302028
 H -1.231706 4.597041 3.485427
 C -3.055077 2.793406 -2.526061
 H -3.867471 3.147869 -3.157768
 C -2.088114 3.689005 -2.072040
 H -2.138682 4.738391 -2.356194
 C -2.976645 1.447803 -2.189533
 H -3.721201 0.742400 -2.553036
 C -1.939359 0.994742 -1.379841
 H -1.832327 -0.062161 -1.147805

C -4.423670 -0.722157 0.111251
 C -4.079586 -1.699999 -0.818204
 C -5.532152 0.085301 -0.055915
 C -4.827918 -1.919617 -1.958998
 C -6.296042 -0.127755 -1.205858
 H -5.784904 0.850434 0.673144
 C -5.952310 -1.109274 -2.136820
 H -4.543389 -2.684212 -2.676782
 H -7.178145 0.485319 -1.378706
 H -6.572190 -1.246891 -3.020361
 B -2.558163 -1.704311 0.783547
 O -3.499046 -0.722507 1.108961
 O -2.940692 -2.317562 -0.406841

³YSnB²

E = -2307.03326626
 C 2.858100 -2.497691 -1.432310
 H 2.529133 -2.231710 -2.433923
 C 1.997203 -2.292120 -0.366026
 O -0.603885 -2.607714 -0.274019
 C 0.585902 3.287103 -1.950277
 H 1.583069 3.627822 -1.672390
 C 4.127133 -3.013955 -1.190967
 H 4.808933 -3.169257 -2.026377
 C 1.603552 1.654322 2.544142
 H 1.811583 0.585372 2.555916
 C 1.146819 2.253210 1.363020
 C 3.726495 0.780638 0.007724
 H 3.618055 0.845449 1.087398
 C 4.974108 0.512544 -0.539154
 H 5.830156 0.367194 0.116477
 Sn -1.292113 -0.411569 1.913381
 C 4.026078 0.603384 -2.751832
 H 4.138489 0.523996 -3.831239
 C 2.772662 0.864497 -2.210708
 H 1.904485 0.958533 -2.857977
 C 0.044882 2.140027 -1.360076

C 2.380499 -2.616696 0.931949
 H 1.684525 -2.458892 1.754574
 C 0.839787 3.613942 1.359502
 H 0.454153 4.087050 0.460567
 C 2.621730 0.970043 -0.826056
 C 5.933141 -3.833332 0.364634
 H 5.925653 -4.664081 1.080112
 H 6.568436 -3.045575 0.793078
 H 6.414030 -4.180042 -0.556006
 C 5.126405 0.430900 -1.919888
 H 6.105417 0.223038 -2.347659
 C 0.221516 -0.254803 0.403389
 P 0.963715 1.200751 -0.108773
 O 0.413929 -1.100935 -2.052658
 S 0.377374 -1.590806 -0.660146
 C 4.548402 -3.322015 0.101873
 C 3.650795 -3.121264 1.158328
 H 3.956452 -3.370095 2.174157
 C 1.768953 2.412897 3.694895
 H 2.124102 1.938491 4.607364
 C 1.466405 3.771356 3.683361
 H 1.587159 4.364180 4.587932
 C 0.998503 4.367050 2.518304
 H 0.745876 5.425335 2.509173
 C -1.405615 3.528523 -3.281328
 H -1.975022 4.072955 -4.032451
 C -0.142860 3.982160 -2.906030
 H 0.276682 4.875096 -3.365226
 C -1.932349 2.375823 -2.710442
 H -2.911170 2.009888 -3.013592
 C -1.207898 1.673880 -1.752632
 H -1.599982 0.752973 -1.327385
 C -5.388765 -1.108408 0.493660
 C -4.737752 -0.877682 -0.715389
 C -6.738770 -1.391600 0.553209
 C -5.402324 -0.922946 -1.924469
 C -7.422149 -1.436235 -0.664194

H -7.234352 -1.571091 1.503376
 C -6.768910 -1.207888 -1.875182
 H -4.878203 -0.753076 -2.861128
 H -8.487309 -1.657370 -0.666459
 H -7.334451 -1.256492 -2.803230
 B -3.275565 -0.713412 0.908283
 O -4.485762 -1.003642 1.511450
 O -3.422557 -0.621028 -0.467000

$Y_{Ph}SnB^2$

E = -1718.48752229
 P -1.697235 0.217833 -0.011987
 C -0.105360 -0.367396 -0.250181
 C 0.930469 0.698713 -0.248909
 C 1.507422 1.174495 0.939473
 C 2.475117 2.173978 0.926094
 C 2.892253 2.731571 -0.277459
 C 2.330679 2.275947 -1.467108
 C 1.364910 1.278086 -1.452031
 C -2.092148 0.693295 1.714037
 C -3.013014 1.698887 2.018602
 H -3.497671 2.254933 1.218205
 C -3.308529 1.992474 3.345089
 H -4.023417 2.779242 3.578313
 C -2.689738 1.285045 4.371496
 H -2.919662 1.520181 5.409046
 C -1.774179 0.281250 4.071862
 H -1.286940 -0.271814 4.872468
 C -1.474817 -0.011918 2.746802
 H -0.751487 -0.787792 2.495549
 C -2.948206 -1.012229 -0.467817
 C -4.034098 -1.297932 0.360054
 H -4.136742 -0.794484 1.318503
 C -4.981479 -2.236984 -0.033838
 H -5.820849 -2.462530 0.620738
 C -4.853690 -2.888249 -1.255088
 H -5.595403 -3.624254 -1.559536

C -3.775249 -2.602756 -2.087278
 H -3.670035 -3.114366 -3.041709
 C -2.822985 -1.671040 -1.696078
 H -1.969707 -1.451382 -2.335057
 C -2.060206 1.736554 -0.951948
 C -1.372101 2.907116 -0.609321
 H -0.687385 2.910342 0.237538
 C -1.555957 4.065536 -1.351852
 H -1.011190 4.968056 -1.082643
 C -2.427716 4.069710 -2.436825
 H -2.570284 4.979150 -3.017504
 C -3.118507 2.912108 -2.776530
 H -3.806515 2.913258 -3.619697
 C -2.935934 1.746984 -2.038678
 H -3.482911 0.846415 -2.308942
 H 1.199230 0.731175 1.884682
 H 2.915229 2.509196 1.863794
 H 3.658937 3.503675 -0.289626
 H 2.652983 2.697895 -2.417819
 H 0.930617 0.921184 -2.384061
 Sn 0.324974 -2.469516 -0.193441
 C 4.383100 -0.659975 -0.685095
 C 4.346765 -0.761258 0.702169
 C 5.368224 0.053148 -1.338956
 C 5.293037 -0.153534 1.503338
 C 6.325982 0.678911 -0.538180
 H 5.377926 0.132169 -2.422710
 C 6.289312 0.577883 0.852698
 H 5.248081 -0.234269 2.586233
 H 7.116133 1.259669 -1.009755
 H 7.051832 1.080706 1.444120
 B 2.564893 -1.774074 -0.118681
 O 3.249303 -1.481031 1.062200
 O 3.311254 -1.318746 -1.202964

³Y_{Ph}SnB²

E = -1718.44247543

P 1.457546 -0.567780 0.143769
 C 0.629378 0.883917 -0.265483
 C 1.339125 2.159990 -0.047905
 C 1.895676 2.897681 -1.105646
 C 2.544746 4.105903 -0.881306
 C 2.664849 4.611510 0.408836
 C 2.117524 3.897624 1.470746
 C 1.461571 2.694655 1.246350
 C 2.725057 -1.154915 -1.039645
 C 3.732741 -2.039027 -0.640200
 H 3.781429 -2.379111 0.393348
 C 4.677567 -2.477381 -1.559474
 H 5.459874 -3.165650 -1.245320
 C 4.626711 -2.031496 -2.877669
 H 5.371181 -2.371941 -3.594941
 C 3.630811 -1.146915 -3.275767
 H 3.592585 -0.792318 -4.303743
 C 2.681650 -0.707547 -2.359047
 H 1.899969 -0.012011 -2.662700
 C 0.271926 -1.920122 0.349470
 C 0.503803 -3.209889 -0.129334
 H 1.420771 -3.438692 -0.667483
 C -0.455462 -4.198679 0.060326
 H -0.279191 -5.200873 -0.325046
 C -1.641073 -3.905943 0.726500
 H -2.392432 -4.681455 0.863106
 C -1.871530 -2.621316 1.210687
 H -2.803393 -2.381592 1.719570
 C -0.917781 -1.629320 1.025444
 H -1.104502 -0.615960 1.374652
 C 2.395940 -0.408525 1.692119
 C 3.573512 0.346293 1.673723
 H 3.932210 0.770610 0.736926
 C 4.275490 0.566426 2.850535
 H 5.187289 1.159683 2.831734
 C 3.809188 0.035595 4.050053
 H 4.361081 0.208644 4.971996

C 2.639441 -0.715924 4.071485
 H 2.275746 -1.134804 5.007598
 C 1.929540 -0.937290 2.895789
 H 1.014761 -1.525889 2.915590
 H 1.810852 2.505611 -2.118485
 H 2.962897 4.654493 -1.723864
 H 3.174294 5.556998 0.584734
 H 2.192654 4.285609 2.485469
 H 1.020853 2.150759 2.079799
 Sn -0.949464 0.726574 -1.762809
 C -4.530843 0.381657 0.805632
 C -5.124010 0.361411 -0.454421
 C -5.271398 0.250134 1.964204
 C -6.487317 0.210386 -0.615271
 C -6.651842 0.094914 1.811703
 H -4.796009 0.272635 2.941394
 C -7.245919 0.076086 0.550350
 H -6.937641 0.197099 -1.604126
 H -7.275386 -0.010836 2.696949
 H -8.324151 -0.045184 0.470703
 B -2.949588 0.605301 -0.716087
 O -4.158147 0.503143 -1.400457
 O -3.187130 0.538899 0.657932

$Y_{PhF}SnB^2$

E = -2215.39676361
 P -1.972875 0.323784 -0.006786
 C -0.522788 -0.590203 0.020630
 C 0.701105 0.226101 -0.046924
 C 1.362425 0.701501 1.087765
 C 2.514638 1.472337 1.011694
 C 3.027367 1.817824 -0.230407
 C 2.383847 1.387079 -1.384517
 C 1.239149 0.612955 -1.280430
 C -2.734488 0.692243 1.609980
 C -3.713908 1.683753 1.732571
 H -4.028199 2.250506 0.856425

C -4.275459 1.953356 2.973388
 H -5.037006 2.724943 3.068343
 C -3.857097 1.241619 4.095870
 H -4.294754 1.457843 5.068656
 C -2.873622 0.266625 3.977914
 H -2.536087 -0.278650 4.856908
 C -2.308284 -0.006684 2.736331
 H -1.515421 -0.745543 2.630929
 C -3.246565 -0.494949 -1.008051
 C -4.579670 -0.601528 -0.611536
 H -4.900245 -0.202606 0.347664
 C -5.499098 -1.241562 -1.435999
 H -6.535194 -1.334205 -1.116900
 C -5.095149 -1.769721 -2.656856
 H -5.817618 -2.271734 -3.297547
 C -3.765648 -1.666075 -3.055884
 H -3.445406 -2.085023 -4.007617
 C -2.840447 -1.038397 -2.232697
 H -1.792047 -0.970179 -2.521214
 C -1.623699 1.965654 -0.701946
 C -1.015680 2.907367 0.136136
 H -0.935770 2.711008 1.204686
 C -0.490379 4.076882 -0.396531
 H -0.006974 4.799576 0.257573
 C -0.575466 4.316575 -1.765179
 H -0.157520 5.229884 -2.183927
 C -1.194472 3.390808 -2.597923
 H -1.264810 3.579630 -3.667036
 C -1.713456 2.213378 -2.071094
 H -2.174125 1.481716 -2.730822
 Sn -0.558227 -2.734773 0.174385
 C 3.691672 -1.639594 -0.476042
 C 3.668124 -1.586204 0.913730
 C 4.721602 -1.086428 -1.212228
 C 4.670895 -0.972512 1.638906
 C 5.735975 -0.454830 -0.489989
 H 4.716370 -1.116828 -2.298532

C 5.709126 -0.396343 0.904227
H 4.626398 -0.914234 2.722916
H 6.557229 0.014648 -1.026874
H 6.510846 0.116505 1.430915
B 1.771292 -2.476235 0.219762
O 2.505571 -2.142556 1.356246
O 2.545011 -2.231231 -0.913445
F 0.644481 0.226461 -2.405435
F 0.887818 0.408557 2.294227
F 3.137010 1.864015 2.114390
F 2.886224 1.698780 -2.570649
F 4.141180 2.526623 -0.317273

${}^3Y_{PhF}SnB^2$

E = -2215.34854599
P -1.005171 1.236960 0.327628
C -0.498929 -0.141397 -0.554658
C -1.304777 -1.359720 -0.461510
C -2.179525 -1.781490 -1.468087
C -2.932336 -2.943104 -1.360786
C -2.841463 -3.717463 -0.210738
C -1.987708 -3.329450 0.814699
C -1.233755 -2.173566 0.676164
C -2.031142 2.455806 -0.563367
C -2.701214 3.464423 0.137287
H -2.611597 3.526795 1.221576
C -3.490245 4.378134 -0.548495
H -4.010414 5.162932 -0.002776
C -3.621659 4.283020 -1.932229
H -4.244057 4.997405 -2.467828
C -2.970881 3.270531 -2.627372
H -3.085168 3.186602 -3.706116
C -2.176984 2.353703 -1.945050
H -1.684052 1.541332 -2.476776
C 0.439576 2.119416 0.972890
C 0.594594 3.504575 0.914131
H -0.173168 4.125263 0.458624

C 1.752806 4.089832 1.414141
 H 1.879484 5.168927 1.355612
 C 2.752058 3.299326 1.972227
 H 3.660368 3.762071 2.353525
 C 2.598292 1.917006 2.033006
 H 3.384946 1.294072 2.454595
 C 1.446036 1.324845 1.533564
 H 1.330337 0.242054 1.542176
 C -2.062207 0.750224 1.721600
 C -3.362815 0.326456 1.429238
 H -3.736005 0.385069 0.407186
 C -4.174594 -0.171554 2.439262
 H -5.183381 -0.506506 2.206995
 C -3.695914 -0.241487 3.744724
 H -4.332292 -0.632804 4.535997
 C -2.406746 0.188291 4.038837
 H -2.033315 0.135778 5.059359
 C -1.585891 0.679388 3.029913
 H -0.572973 1.001166 3.260908
 Sn 1.081492 0.087514 -2.007532
 C 4.557708 -1.055565 0.445385
 C 5.217648 -0.653437 -0.712967
 C 5.241274 -1.488680 1.564619
 C 6.595238 -0.666730 -0.808591
 C 6.635642 -1.504225 1.478415
 H 4.712164 -1.805263 2.459703
 C 7.297005 -1.102770 0.317926
 H 7.098609 -0.351358 -1.718456
 H 7.216843 -1.839743 2.334667
 H 8.384125 -1.130206 0.287697
 B 3.053638 -0.438973 -1.036841
 O 4.294105 -0.274842 -1.639308
 O 3.215099 -0.934443 0.253237
 F -0.420061 -1.840729 1.673080
 F -2.318720 -1.048366 -2.568649
 F -3.753239 -3.306490 -2.334699
 F -1.896192 -4.068954 1.909366

F -3.562216 -4.821084 -0.094297

3.3.3.10 Koordinaten der cyclischen Stannylene

V^{Sn}

E = -1021.50458148

C -1.573170 2.503066 0.091050

C 0.544081 1.314450 0.147114

C 1.190967 2.553772 0.296699

C 0.473396 3.737509 0.324677

C -0.916999 3.716797 0.210456

H -2.660529 2.509061 0.019293

H 2.272028 2.577169 0.405205

H 1.000380 4.682633 0.442554

H -1.486359 4.644205 0.225121

N 1.194069 0.100676 0.129289

C 2.588679 -0.005139 0.032741

C 3.316040 0.664772 -0.962673

C 3.283599 -0.857301 0.899157

C 4.687414 0.489382 -1.076937

H 2.783579 1.316035 -1.652812

C 4.655505 -1.041148 0.770898

H 2.727748 -1.369224 1.683125

C 5.367729 -0.365564 -0.213076

H 5.230473 1.017420 -1.859298

H 5.172258 -1.711035 1.456216

H 6.442833 -0.503260 -0.308228

C -0.885205 1.273940 0.067288

C -1.487273 -0.039307 -0.013390

P -3.172681 -0.279700 -0.098572

C -4.131979 0.329966 1.326553

H -3.946498 1.399830 1.462401

H -5.205875 0.156550 1.192366

H -3.779091 -0.192669 2.221796

C -3.999498 0.432947 -1.558362

H -5.079959 0.249789 -1.537480

H -3.810470 1.510057 -1.598057

H -3.561423 -0.022660 -2.452588
 C -3.565209 -2.046554 -0.180109
 H -4.649685 -2.188619 -0.234226
 H -3.096666 -2.485825 -1.067109
 H -3.177716 -2.549714 0.712084
 Sn -0.064635 -1.630370 0.009814

$^3V_{Sn}$

E = -1021.43970102
 C 1.613774 2.514697 -0.142016
 C -0.542553 1.327291 -0.209549
 C -1.155427 2.587753 -0.447048
 C -0.420514 3.747462 -0.502305
 C 0.978537 3.716372 -0.330205
 H 2.697791 2.510586 -0.037904
 H -2.228991 2.619842 -0.609402
 H -0.921755 4.693851 -0.696978
 H 1.554155 4.639102 -0.367468
 N -1.220316 0.172863 -0.137265
 C -2.596996 0.083330 0.021952
 C -3.309254 0.888012 0.928520
 C -3.302368 -0.913703 -0.670107
 C -4.672915 0.712164 1.109987
 H -2.771750 1.635679 1.507390
 C -4.667326 -1.082700 -0.482935
 H -2.760258 -1.545341 -1.373392
 C -5.364729 -0.268888 0.403525
 H -5.200859 1.342013 1.824409
 H -5.190845 -1.858779 -1.038767
 H -6.434141 -0.403343 0.551539
 C 0.914702 1.270296 -0.088476
 C 1.514149 0.009718 0.072876
 P 3.199043 -0.228256 0.231316
 C 4.236671 0.296900 -1.175396
 H 4.129576 1.373823 -1.337208
 H 5.291553 0.054096 -1.002350
 H 3.880549 -0.221851 -2.071970

C 3.965140 0.529183 1.701477
H 5.034635 0.294777 1.753258
H 3.828293 1.614549 1.675343
H 3.456773 0.139719 2.589730
C 3.517597 -2.000153 0.395807
H 4.586283 -2.199482 0.527261
H 2.958736 -2.382684 1.257884
H 3.158306 -2.510572 -0.506184
Sn 0.024752 -1.761772 -0.173414

V^{Sn}

E = -1570.70479972
C -1.446694 2.755422 -0.675121
C -0.748009 1.552188 -0.712410
C 0.515411 1.384460 -0.081051
C 0.997393 2.521058 0.608846
C 0.294300 3.712518 0.648584
C -0.934041 3.851522 0.002191
H -2.400257 2.801784 -1.197860
H 1.944895 2.442128 1.135470
H 0.714168 4.551272 1.202049
H -1.474978 4.794363 0.021473
N 1.186934 0.189614 -0.077196
S -1.595209 0.148276 -1.380712
O -2.838625 0.616992 -1.985944
O -0.596826 -0.538467 -2.306948
C -1.697764 -0.983212 -0.140697
C 2.557298 0.154010 0.210881
C 3.475928 0.982083 -0.454980
C 3.059112 -0.781793 1.124692
C 4.835837 0.872662 -0.210227
H 3.101371 1.705088 -1.177084
C 4.426432 -0.901183 1.352902
H 2.358211 -1.412805 1.670915
C 5.323043 -0.072110 0.691832
H 5.528262 1.522956 -0.742450
H 4.788254 -1.640737 2.065219

H 6.391923 -0.158674 0.874833
P -2.543125 -0.561420 1.270800
C -1.685681 0.534463 2.447850
H -2.234977 0.619032 3.392919
H -0.683396 0.131514 2.633595
H -1.571195 1.528395 1.999115
C -2.913838 -2.062673 2.208677
H -1.973727 -2.571345 2.448950
H -3.443906 -1.825583 3.137325
H -3.520618 -2.725430 1.584216
C -4.107636 0.272476 0.908597
H -3.879954 1.249511 0.467997
H -4.655781 -0.312800 0.164294
H -4.701904 0.404721 1.819371
Sn 0.337047 -1.795227 -0.623416

$^3V^{Sn}$

E = -1570.62964588
C -0.668280 3.080533 0.069676
C -0.209929 1.788358 -0.139719
C 0.967087 1.336120 0.493587
C 1.633950 2.217513 1.368930
C 1.147007 3.493007 1.599443
C -0.002057 3.932376 0.944096
H -1.546385 3.402481 -0.486417
H 2.523961 1.861055 1.883269
H 1.668269 4.150349 2.292355
H -0.371853 4.942885 1.105963
N 1.431417 0.052109 0.309291
S -1.061056 0.723141 -1.311235
O -2.211811 1.537870 -1.771539
O -0.036088 0.335531 -2.277495
C -1.590701 -0.566442 -0.357940
C 2.750680 -0.149559 0.068554
C 3.562394 0.836987 -0.550716
C 3.335749 -1.402924 0.378457
C 4.889923 0.578427 -0.826420

H 3.104411 1.773322 -0.857614
 C 4.670746 -1.638491 0.111902
 H 2.727141 -2.160443 0.865953
 C 5.455194 -0.654128 -0.490438
 H 5.492210 1.334408 -1.325962
 H 5.109274 -2.599014 0.373971
 H 6.502590 -0.850816 -0.709724
 P -3.195587 -0.407048 0.202457
 C -3.599467 1.121030 1.103759
 H -4.633796 1.110398 1.466065
 H -2.907497 1.231003 1.945857
 H -3.457304 1.955530 0.409969
 C -3.558305 -1.751521 1.357582
 H -2.843619 -1.718553 2.187319
 H -4.581101 -1.653899 1.738095
 H -3.452044 -2.713190 0.844271
 C -4.447633 -0.515767 -1.103660
 H -4.214788 0.275509 -1.823615
 H -4.350757 -1.487805 -1.598178
 H -5.460974 -0.392932 -0.704058
 Sn -0.049038 -1.990198 0.328001

VII^{Sn}

E = -2332.77588920
 C -0.536913 1.751137 -0.807932
 C 0.218395 1.917818 0.359715
 C 0.534599 3.211167 0.775645
 C 0.137811 4.320980 0.040845
 C -0.583814 4.149692 -1.132992
 C -0.921484 2.868610 -1.548321
 H 1.120911 3.321027 1.684506
 H 0.398361 5.318847 0.388632
 H -0.891903 5.009298 -1.724933
 H -1.511880 2.705144 -2.445938
 S -1.160066 0.167617 -1.455190
 S 0.878257 0.609073 1.468846
 O -2.257823 0.582802 -2.341095

O 0.019866 -0.515843 -2.111553
 O -0.247539 0.209524 2.329045
 O 1.998361 1.319263 2.132135
 C -1.564373 -0.851556 -0.220975
 C 1.489221 -0.657306 0.553584
 P 3.047086 -0.337180 -0.076402
 P -2.936087 -0.550290 0.731775
 C 3.418862 -1.576117 -1.342470
 H 4.425287 -1.414722 -1.743459
 H 3.356898 -2.582759 -0.914596
 H 2.681837 -1.476834 -2.148995
 C 3.199729 1.252715 -0.936319
 H 3.040483 2.054198 -0.207764
 H 4.185797 1.359080 -1.402413
 H 2.409241 1.291593 -1.695312
 C 4.406232 -0.389886 1.120179
 H 4.446774 -1.392173 1.559487
 H 5.367524 -0.141625 0.655830
 H 4.153873 0.330938 1.904467
 C -2.861124 -1.600825 2.193023
 H -3.745920 -1.458931 2.822282
 H -2.798921 -2.648280 1.878248
 H -1.951276 -1.316215 2.733273
 C -3.103800 1.158752 1.307192
 H -3.155671 1.816669 0.431859
 H -4.011507 1.277177 1.909597
 H -2.211067 1.395716 1.895261
 C -4.483039 -0.898810 -0.149358
 H -5.370127 -0.618604 0.430206
 H -4.438433 -0.327838 -1.084524
 H -4.516524 -1.964110 -0.400392
 Sn 0.193109 -2.207136 -0.318271

$^3V_{II}Sn$

E = -2332.69444789
 C -0.406135 1.858060 -0.571661
 C 0.405537 1.858234 0.571310

C 0.776214 3.078550 1.138970
 C 0.386028 4.285571 0.575912
 C -0.387590 4.285392 -0.576355
 C -0.777303 3.078206 -1.139369
 H 1.401479 3.053790 2.027523
 H 0.693096 5.221492 1.038538
 H -0.695037 5.221165 -1.039032
 H -1.402554 3.053198 -2.027928
 S -1.017458 0.419778 -1.530548
 S 1.017153 0.420181 1.530342
 O -2.194892 0.985738 -2.221340
 O 0.134070 -0.008755 -2.339254
 O -0.134356 -0.008363 2.338986
 O 2.194423 0.986495 2.221121
 C -1.514785 -0.794823 -0.467903
 C 1.514915 -0.794448 0.468059
 P 2.953150 -0.502499 -0.417751
 P -2.952787 -0.503150 0.418347
 C 3.022674 -1.607890 -1.838510
 H 3.928428 -1.405682 -2.421170
 H 3.020100 -2.651337 -1.507920
 H 2.123059 -1.409687 -2.435432
 C 3.060160 1.169608 -1.104765
 H 3.046507 1.891328 -0.281580
 H 3.985559 1.279690 -1.681238
 H 2.183662 1.314903 -1.747047
 C 4.457057 -0.723209 0.566381
 H 4.513601 -1.764881 0.899299
 H 5.361101 -0.455317 0.007880
 H 4.339867 -0.080233 1.446207
 C -3.021615 -1.608521 1.839148
 H -3.926896 -1.406187 2.422502
 H -3.019629 -2.651920 1.508379
 H -2.121497 -1.410683 2.435409
 C -3.060224 1.169057 1.105028
 H -3.046341 1.890587 0.281687
 H -3.985965 1.279052 1.680975

H -2.184111 1.314708 1.747765
 C -4.456828 -0.724548 -0.565445
 H -5.360977 -0.457214 -0.006846
 H -4.340139 -0.081463 -1.445272
 H -4.512785 -1.766235 -0.898413
 Sn 0.000326 -2.223001 -0.000217

VIII^{Sn}

E = -1540.75684820
 C -0.924384 3.204579 -0.135643
 C -0.291340 1.987854 -0.319570
 C 0.931748 1.608066 0.247058
 C 1.538107 2.557789 1.078400
 C 0.935089 3.794121 1.285535
 C -0.283267 4.127184 0.684601
 H -1.871096 3.430523 -0.623551
 H 2.498450 2.339651 1.543591
 H 1.429407 4.528910 1.919368
 H -0.724270 5.107481 0.852070
 B 1.320918 0.139252 -0.221432
 S -0.923304 0.578590 -1.166932
 O -1.786967 0.892810 -2.310291
 O 0.472361 -0.024401 -1.516348
 C -1.580651 -0.494660 -0.037127
 C 2.806252 -0.330901 -0.419099
 C 3.277186 -0.776752 -1.661450
 C 3.723852 -0.309707 0.642693
 C 4.598599 -1.175061 -1.837100
 H 2.588217 -0.805417 -2.504634
 C 5.046813 -0.698001 0.473158
 H 3.388771 0.003591 1.633199
 C 5.492119 -1.135002 -0.771779
 H 4.935174 -1.516478 -2.815412
 H 5.734222 -0.667841 1.317678
 H 6.526549 -1.446002 -0.907876
 P -3.259878 -0.777396 -0.187672
 C -4.278246 0.724576 -0.190531

H -5.345412 0.483449 -0.251224
H -4.074134 1.294209 0.722316
H -3.984620 1.320695 -1.061378
C -3.813989 -1.779922 1.206173
H -3.632842 -1.232472 2.136677
H -4.880497 -2.009909 1.107077
H -3.230606 -2.706097 1.233257
C -3.730127 -1.665698 -1.695733
H -3.364628 -1.071338 -2.540288
H -3.225713 -2.637576 -1.701911
H -4.814943 -1.803952 -1.767593
Sn -0.021106 -1.313645 1.272348

³VIII^{Sn}

E = -1540.73418205
C 0.781800 3.350629 0.551331
C 0.223656 2.091462 0.659050
C -1.076341 1.742585 0.266429
C -1.865044 2.785483 -0.244191
C -1.342213 4.067120 -0.348784
C -0.030770 4.358497 0.041728
H 1.807293 3.541401 0.860300
H -2.893530 2.599162 -0.544940
H -1.968986 4.867940 -0.737380
H 0.351520 5.372889 -0.047563
B -1.344125 0.237966 0.626774
S 1.092768 0.634495 1.138457
O 1.876139 0.727811 2.374840
O -0.280127 -0.202662 1.477937
C 1.778524 -0.029106 -0.186971
C -2.633583 -0.614223 0.587748
C -2.770475 -1.706730 1.460025
C -3.702503 -0.339850 -0.281844
C -3.919892 -2.485345 1.467866
H -1.953183 -1.936033 2.142064
C -4.852334 -1.116942 -0.279871
H -3.619576 0.481486 -0.992513

C -4.966467 -2.193158 0.597530
 H -4.003629 -3.325244 2.155937
 H -5.664292 -0.887723 -0.968143
 H -5.868022 -2.803404 0.599839
 P 2.997812 -1.172939 0.183962
 C 4.473757 -0.436862 0.930929
 H 5.226023 -1.200774 1.157490
 H 4.885639 0.300949 0.234753
 H 4.159223 0.073215 1.846998
 C 3.536699 -1.969376 -1.342434
 H 3.886792 -1.200419 -2.038900
 H 4.343319 -2.681251 -1.135652
 H 2.683193 -2.490746 -1.790892
 C 2.472736 -2.492630 1.311870
 H 2.168329 -2.016907 2.251587
 H 1.600484 -2.990155 0.873338
 H 3.270175 -3.219973 1.501209
 Sn 0.128900 -0.410052 -1.828816

IX^{Sn}

E = -991.519698916
 C -1.613869 2.500597 0.149186
 C 0.532996 1.381816 0.252317
 C 1.128740 2.631850 0.466375
 C 0.389402 3.808171 0.525821
 C -0.987251 3.726099 0.351396
 H -2.696314 2.502189 0.034712
 H 2.208435 2.675035 0.606402
 H 0.872555 4.766588 0.702754
 H -1.593934 4.630921 0.382794
 B 1.335894 0.068873 0.195637
 C 2.864789 -0.035808 -0.029212
 C 3.567285 0.862565 -0.856011
 C 3.607021 -1.073386 0.564586
 C 4.934104 0.736003 -1.068862
 H 3.020782 1.662278 -1.353934
 C 4.980254 -1.179823 0.390838

H 3.085305 -1.808027 1.178061
 C 5.646976 -0.277099 -0.433566
 H 5.450008 1.434173 -1.726261
 H 5.532133 -1.980639 0.880258
 H 6.720414 -0.370573 -0.590342
 C -0.892379 1.291225 0.113888
 C -1.498597 -0.033549 -0.030126
 P -3.181568 -0.219652 -0.270763
 C -4.275120 0.358535 1.077108
 H -4.090765 1.415826 1.288347
 H -5.332332 0.215081 0.825184
 H -4.029351 -0.215857 1.976745
 C -3.850537 0.573873 -1.773177
 H -4.934451 0.431779 -1.852352
 H -3.621469 1.643655 -1.766953
 H -3.354094 0.124491 -2.639729
 C -3.647122 -1.958367 -0.460594
 H -4.730240 -2.031299 -0.609747
 H -3.122520 -2.389132 -1.318888
 H -3.355697 -2.518103 0.433777
 Sn -0.206091 -1.742284 0.223853

$^3IX^{Sn}$

E = -991.495537440
 C 1.738035 2.446534 -0.211971
 C -0.447358 1.362096 -0.203448
 C -1.016061 2.636999 -0.436538
 C -0.251397 3.783470 -0.516620
 C 1.139684 3.678530 -0.391582
 H 2.825496 2.409520 -0.159429
 H -2.097277 2.709149 -0.546212
 H -0.720644 4.752482 -0.673766
 H 1.760849 4.571228 -0.453788
 B -1.378707 0.163836 -0.112419
 C -2.895913 -0.013478 0.066544
 C -3.619262 0.875296 0.887449
 C -3.620695 -1.050822 -0.549567

C -4.989410 0.740853 1.069800
 H -3.087654 1.677779 1.396756
 C -4.990245 -1.183129 -0.376137
 H -3.088455 -1.762918 -1.180050
 C -5.682040 -0.286403 0.435423
 H -5.521443 1.440615 1.712500
 H -5.524526 -1.991429 -0.872804
 H -6.756384 -0.391573 0.576302
 C 0.990979 1.246971 -0.122898
 C 1.576272 -0.061059 0.012088
 P 3.232367 -0.326347 0.300044
 C 4.401185 0.143036 -1.024217
 H 4.316186 1.213312 -1.235544
 H 5.435643 -0.093544 -0.748560
 H 4.123970 -0.405982 -1.930472
 C 3.887064 0.478743 1.798010
 H 4.961900 0.299133 1.914221
 H 3.698051 1.555439 1.746197
 H 3.346120 0.079395 2.662182
 C 3.555987 -2.090599 0.549025
 H 4.618510 -2.255147 0.757660
 H 2.955649 -2.453180 1.390061
 H 3.273791 -2.644628 -0.352815
 Sn 0.104546 -1.617517 -0.277063

3.3.4 Koordinaten der Plumbylene

3.3.4.1 Koordinaten mit Bisylidsubstitution

Y₂Pb

E = -3796.65092299
 Pb 0.218018 -0.062671 -1.988873
 C 1.945017 0.145799 -0.412388
 C -1.619722 -0.252676 -0.425649
 O -0.865304 2.039796 -1.081456
 O 1.662294 -2.197408 -1.283421
 S -1.793585 1.374644 -0.096704
 S 2.514034 -1.418109 -0.319888

P 2.388358 1.278346 0.776314
 C 1.719990 2.872938 0.266134
 C 1.787955 0.927103 2.449754
 C 4.196437 1.417115 0.955638
 O 2.623352 -2.003643 1.035106
 C 4.195449 -1.503826 -0.942633
 O -1.653548 1.818528 1.301892
 C -3.426650 1.929801 -0.587331
 C 4.702899 -0.511159 -1.771226
 C 5.007562 -2.543542 -0.507635
 P -2.585058 -1.417067 0.329155
 C -3.206897 -2.620142 -0.888792
 C -4.051974 -0.709299 1.133948
 C -1.790855 -2.450250 1.601074
 C 6.036675 -0.552658 -2.149760
 C 6.878370 -1.581304 -1.717089
 C 0.677162 0.097103 2.569067
 C 2.403539 1.449112 3.589848
 C 8.329607 -1.586349 -2.092901
 C 6.338666 -2.579127 -0.902604
 C 0.186352 -0.226494 3.827746
 C 0.797061 0.292412 4.963936
 C 1.901804 1.133552 4.846312
 C 0.877785 3.598130 1.104126
 C 0.243103 4.737183 0.622210
 C 0.456529 5.157228 -0.683387
 C 1.308979 4.440782 -1.519178
 C 4.870910 0.354855 1.569295
 C 6.259021 0.315419 1.556929
 C -4.188556 2.687231 0.287881
 C -3.921059 1.582855 -1.839987
 C -5.471502 3.072568 -0.086300
 C -6.002906 2.713830 -1.324591
 C -5.201336 1.971679 -2.200383
 C -7.406753 3.083470 -1.699105
 C -5.298374 -0.730618 0.505480
 C -3.894258 -0.035256 2.349181

C -4.987431 0.585119 2.940232
 C -6.232036 0.550540 2.319157
 C -6.384916 -0.099805 1.099213
 C -2.468072 -2.919295 2.731655
 C -0.451692 -2.786284 1.406069
 C -1.795565 -3.701248 3.664429
 C -0.451763 -4.014115 3.475070
 C 0.220021 -3.557601 2.346240
 C -3.239839 -2.268661 -2.237374
 C -3.692851 -3.865795 -0.484995
 C -4.214235 -4.745453 -1.424858
 C -4.246929 -4.390562 -2.770825
 C -3.757438 -3.154130 -3.176762
 C 6.983011 1.335740 0.947544
 C 6.315974 2.402412 0.354911
 C 4.925651 2.444335 0.355672
 H -3.300601 1.001603 -2.519405
 H -2.846910 -1.298585 -2.534211
 H 4.055507 0.310435 -2.072134
 H 4.595961 -3.295173 0.161537
 H 6.438382 0.238711 -2.781615
 H 0.209482 -0.289819 1.668179
 H 3.279815 2.088994 3.494705
 H 8.876642 -0.806216 -1.545474
 H 8.468250 -1.385084 -3.161889
 H 8.802183 -2.546716 -1.862054
 H 6.978733 -3.390795 -0.558300
 H -0.664045 -0.901036 3.914664
 H 0.416718 0.034794 5.951021
 H 2.380341 1.534753 5.737734
 H 0.671899 3.244599 2.110772
 H -0.440229 5.283730 1.268519
 H -0.053852 6.041826 -1.059904
 H 1.468249 4.764495 -2.545804
 H 4.301456 -0.457875 2.019019
 H 6.776792 -0.523509 2.017603
 H -3.770998 2.945285 1.257910

H -6.077232 3.656210 0.606180
 H -5.591387 1.695965 -3.179594
 H -8.098327 2.254871 -1.490155
 H -7.492220 3.312591 -2.767411
 H -7.758317 3.952423 -1.132634
 H -5.417297 -1.237588 -0.449992
 H -2.913441 0.021728 2.817067
 H -4.862387 1.106429 3.887150
 H -7.085254 1.041089 2.784176
 H -7.354546 -0.116781 0.605418
 H -3.514656 -2.666717 2.890552
 H 0.085162 -2.424754 0.531752
 H -2.321706 -4.059430 4.547497
 H 0.075025 -4.611536 4.217121
 H 1.275400 -3.763226 2.187774
 H -3.653724 -4.151561 0.564538
 H -4.589374 -5.716281 -1.107183
 H -4.649670 -5.084738 -3.506080
 H -3.774270 -2.878160 -4.229300
 H 8.071043 1.300197 0.937089
 H 6.879311 3.208061 -0.112253
 H 4.408799 3.279561 -0.111925
 C 1.932181 3.294682 -1.050568
 H 2.562193 2.700265 -1.711181

³Y₂Pb

E = -3796.55124366
 Pb 0.468476 -0.557401 -2.103750
 C 1.947364 -0.028632 -0.389618
 C -1.587224 -0.498209 -0.517960
 O -0.849567 1.668335 -1.648478
 O 1.869065 -2.463988 -0.989753
 S -1.658104 1.232383 -0.470859
 S 2.597503 -1.535097 -0.053098
 P 2.288637 1.309789 0.612998
 C 1.676500 2.786857 -0.224635
 C 1.613718 1.219757 2.290375

C 4.078986 1.529279 0.878752
 O 2.618588 -1.947261 1.363096
 C 4.322898 -1.595029 -0.536688
 O -1.256235 1.732398 0.849771
 C -3.308778 1.794922 -0.781128
 C 4.834988 -0.714518 -1.481024
 C 5.154909 -2.498531 0.112397
 P -2.873485 -1.328866 0.447206
 C -3.695209 -2.377036 -0.755577
 C -4.151907 -0.470218 1.365023
 C -1.944894 -2.261880 1.691058
 C 6.194142 -0.724214 -1.756679
 C 7.056808 -1.609319 -1.104012
 C 0.668655 0.236234 2.562747
 C 2.054078 2.074162 3.304545
 C 8.532645 -1.561046 -1.359819
 C 6.512398 -2.503971 -0.180250
 C 0.164070 0.093427 3.848733
 C 0.591745 0.950921 4.856599
 C 1.532181 1.943364 4.585182
 C 0.864142 3.713966 0.423052
 C 0.342924 4.788465 -0.288495
 C 0.632379 4.940886 -1.638817
 C 1.451544 4.020645 -2.285863
 C 4.725189 0.612691 1.715995
 C 6.110269 0.622613 1.815750
 C -3.869366 2.723059 0.084191
 C -4.004619 1.313518 -1.884469
 C -5.153772 3.183988 -0.170636
 C -5.890614 2.703514 -1.254680
 C -5.298003 1.763545 -2.104682
 C -7.306493 3.143581 -1.467010
 C -5.461724 -0.291769 0.863661
 C -3.756290 0.300952 2.484249
 C -4.659771 1.137020 3.117249
 C -5.970550 1.258664 2.650993
 C -6.354112 0.540055 1.513731

C -2.600469 -2.701335 2.853115
 C -0.634912 -2.691848 1.444723
 C -1.935821 -3.504914 3.766838
 C -0.618147 -3.898737 3.531490
 C 0.025798 -3.492945 2.367203
 C -3.283185 -2.460548 -2.095306
 C -4.711580 -3.239345 -0.305021
 C -5.328135 -4.115987 -1.182349
 C -4.929083 -4.175852 -2.518272
 C -3.900398 -3.349284 -2.964419
 C 6.857412 1.553249 1.100006
 C 6.216037 2.479610 0.284895
 C 4.830132 2.467590 0.169723
 H -3.546699 0.588971 -2.555431
 H -2.475144 -1.824958 -2.450357
 H 4.170499 0.004331 -1.956707
 H 4.735338 -3.162939 0.863702
 H 6.598420 -0.016434 -2.479298
 H 0.346942 -0.419856 1.761776
 H 2.811871 2.829024 3.096166
 H 8.985188 -0.703600 -0.841844
 H 8.753083 -1.445016 -2.427336
 H 9.034429 -2.465981 -1.001818
 H 7.168123 -3.205964 0.333541
 H -0.554756 -0.697778 4.056042
 H 0.198252 0.841857 5.865785
 H 1.869643 2.607384 5.378651
 H 0.599861 3.569422 1.467174
 H -0.308808 5.500100 0.214155
 H 0.210806 5.776695 -2.194019
 H 1.673328 4.134558 -3.344932
 H 4.140615 -0.130268 2.257709
 H 6.608109 -0.106427 2.451769
 H -3.300854 3.054023 0.949561
 H -5.603515 3.909871 0.504737
 H -5.859801 1.381062 -2.955399
 H -7.986512 2.552546 -0.837022

H -7.621837 3.009102 -2.507011
 H -7.446692 4.195621 -1.195142
 H -5.772788 -0.819532 -0.035153
 H -2.730394 0.237513 2.843985
 H -4.336401 1.705381 3.988154
 H -6.677069 1.915728 3.153398
 H -7.367186 0.638622 1.124948
 H -3.628282 -2.396981 3.040806
 H -0.110741 -2.382957 0.544479
 H -2.449181 -3.826201 4.671577
 H -0.097906 -4.524532 4.254081
 H 1.058135 -3.768168 2.168791
 H -5.013997 -3.211859 0.741341
 H -6.120318 -4.769132 -0.820744
 H -5.408682 -4.872329 -3.202742
 H -3.573907 -3.397126 -4.001784
 H 7.943150 1.557698 1.180518
 H 6.796159 3.217110 -0.266545
 H 4.335002 3.192200 -0.472674
 C 1.969829 2.943268 -1.582720
 H 2.586878 2.201992 -2.089118

^{cy}Y₂Pb

E = -3818.41797603
 Pb 0.082659 1.009423 1.225757
 O 1.116063 -1.187563 2.210764
 C 1.910644 -0.003244 0.151563
 O -0.673161 2.012120 -1.070500
 C -1.775466 0.077676 0.070577
 S 2.289929 -1.175627 1.256399
 P 2.700153 0.187667 -1.348063
 S -1.932113 1.180731 -1.160416
 P -2.842977 -1.198449 0.434789
 O 2.738907 -2.483159 0.737017
 C 3.658957 -0.648690 2.296897
 C 4.496769 -0.222425 -1.249947
 C 2.028657 -0.862688 -2.703996

C 2.385802 1.911328 -1.888811
 O -2.285411 0.669592 -2.498748
 C -3.228393 2.368853 -0.802428
 C -1.862687 -2.618988 1.064798
 C -3.895501 -1.620776 -1.014318
 C -4.035158 -0.814652 1.799675
 C 4.737036 -1.496874 2.496347
 C 3.643157 0.617177 2.877531
 C 5.283889 0.825811 -0.462257
 H 4.481957 -1.155019 -0.659671
 C 5.197631 -0.512783 -2.578692
 C 0.552788 -0.560985 -2.946316
 H 2.605113 -0.611415 -3.608688
 C 2.206387 -2.349199 -2.393497
 C 2.659522 2.989868 -0.840019
 H 1.291545 1.882869 -1.996781
 C 2.986169 2.307512 -3.235663
 C -4.442077 2.287276 -1.469031
 C -3.059423 3.273233 0.243357
 C -2.723616 -3.820299 1.455121
 H -1.399410 -2.201083 1.973815
 C -0.698565 -3.033550 0.165205
 C -3.081117 -2.286649 -2.120557
 H -4.161028 -0.614723 -1.377027
 C -5.200225 -2.379724 -0.782416
 C -4.896131 0.385624 1.412696
 H -4.678543 -1.700136 1.917663
 C -3.309626 -0.551095 3.118671
 H 4.718605 -2.483348 2.039226
 C 5.815018 -1.064860 3.265793
 H 2.797889 1.282910 2.706156
 C 4.720265 1.035223 3.640211
 C 6.703402 0.344061 -0.198096
 H 5.330628 1.749927 -1.057377
 H 4.771101 1.072915 0.473865
 C 6.631157 -0.973667 -2.333754
 H 4.662511 -1.277863 -3.150650

H 5.204534 0.396457 -3.197371
 C -0.009697 -1.417836 -4.070935
 H 0.007207 -0.761442 -2.011155
 H 0.375825 0.495387 -3.173464
 C 1.663539 -3.210770 -3.526342
 H 3.256170 -2.596538 -2.191725
 H 1.675196 -2.572472 -1.459982
 C 2.036069 4.304299 -1.293123
 H 2.260741 2.682385 0.133615
 H 3.740104 3.128066 -0.702159
 C 2.393754 3.636328 -3.694389
 H 4.078244 2.408008 -3.138094
 H 2.804294 1.536030 -3.994582
 C -5.510293 3.072666 -1.044551
 H -4.536760 1.606276 -2.312131
 H -2.095198 3.345953 0.744287
 C -4.127785 4.054552 0.651914
 H -3.192735 -4.231199 0.548157
 H -3.539602 -3.522765 2.126560
 C -1.880845 -4.906614 2.111140
 H -0.085112 -2.154287 -0.065006
 H -1.078089 -3.421431 -0.787431
 C 0.130552 -4.115792 0.844027
 H -2.126702 -1.765695 -2.236001
 H -2.869625 -3.326224 -1.829243
 C -3.865705 -2.282773 -3.420862
 H -4.985270 -3.408243 -0.460532
 H -5.800808 -1.919270 0.010724
 C -6.001695 -2.404550 -2.082427
 H -4.225245 1.228584 1.214979
 H -5.437938 0.198128 0.477244
 C -5.864170 0.785020 2.516177
 C -4.273555 -0.128102 4.220939
 H -2.752224 -1.439733 3.439168
 H -2.567453 0.246151 2.954511
 H 6.665281 -1.729188 3.416543
 C 5.829973 0.203268 3.842935

H 4.707926 2.029191 4.086319
 C 7.420561 0.028396 -1.502964
 H 6.662806 -0.556846 0.430524
 H 7.255329 1.099192 0.376818
 H 6.603043 -1.938549 -1.805202
 H 7.131850 -1.158758 -3.293043
 H -1.073415 -1.180921 -4.198163
 H 0.487337 -1.145563 -5.015394
 C 0.199214 -2.901118 -3.805063
 H 1.791738 -4.272367 -3.277385
 H 2.254860 -3.030369 -4.438084
 H 2.221281 5.086971 -0.545641
 H 0.946582 4.170594 -1.357126
 C 2.584252 4.727916 -2.649794
 H 2.840653 3.937458 -4.650944
 H 1.318669 3.494778 -3.878335
 H -6.466920 3.000582 -1.560846
 C -5.379408 3.952620 0.029465
 H -3.995147 4.757182 1.474067
 H -1.483940 -4.522478 3.062759
 H -2.513548 -5.769211 2.358858
 C -0.721098 -5.319103 1.216997
 H 0.961598 -4.404148 0.190140
 H 0.596517 -3.690936 1.742001
 H -4.016849 -1.237596 -3.729052
 H -3.278752 -2.763054 -4.215157
 C -5.204152 -2.988119 -3.243083
 H -6.933575 -2.966598 -1.937474
 H -6.295451 -1.372551 -2.328812
 H -6.595060 -0.021273 2.683651
 H -6.435050 1.666970 2.195660
 C -5.116582 1.070051 3.809738
 H -4.939375 -0.972203 4.457868
 H -3.711714 0.089831 5.138282
 C 6.996693 0.676913 4.656617
 H 7.544203 0.957751 -2.080540
 H 8.431572 -0.351885 -1.307171

H -0.169969 -3.502079 -4.647125
H -0.394678 -3.193432 -2.927370
H 2.107344 5.658555 -2.983788
H 3.659116 4.947444 -2.550997
C -6.541008 4.765186 0.516997
H -1.120705 -5.788302 0.303608
H -0.109674 -6.082159 1.715854
H -5.794764 -2.940245 -4.167170
H -5.020960 -4.056157 -3.047970
H -4.460599 1.941012 3.657175
H -5.815399 1.340073 4.612059
H 6.684088 0.970426 5.666792
H 7.468024 1.556491 4.198944
H 7.760707 -0.101293 4.752413
H -6.898651 4.395015 1.487758
H -7.381628 4.724578 -0.183226
H -6.263855 5.816823 0.657736

$^3(\text{CyY})_2\text{Pb}$

E = -3818.33071680
Pb 0.077333 0.724993 1.220374
O 1.559186 -2.044365 2.071917
C 1.923293 -0.285304 0.197970
O -0.981615 2.276053 -1.382207
C -1.743493 0.193872 -0.062640
S 2.561569 -1.583041 1.101317
P 2.718056 0.303672 -1.236771
S -2.108330 1.326473 -1.282780
P -2.730337 -1.139381 0.411760
O 3.166159 -2.582911 0.194008
C 3.917543 -0.955237 2.085297
C 4.543409 0.015454 -1.311308
C 2.022280 -0.508824 -2.737829
C 2.261275 2.068678 -1.382572
O -2.550487 0.667588 -2.528752
C -3.495384 2.338149 -0.784335
C -1.716533 -2.641334 0.742308

C -4.025771 -1.439511 -0.874142
 C -3.678700 -0.872592 1.982950
 C 5.159338 -1.565647 2.009045
 C 3.716023 0.144301 2.916880
 C 5.329918 1.006560 -0.451100
 H 4.646468 -0.991424 -0.876310
 C 5.121884 -0.014655 -2.730074
 C 0.543716 -0.182941 -2.931540
 H 2.589912 -0.086191 -3.581635
 C 2.236491 -2.020799 -2.700362
 C 2.670492 2.984044 -0.226637
 H 1.163426 1.977651 -1.323961
 C 2.585170 2.731820 -2.719865
 C -4.739267 2.164732 -1.374896
 C -3.323556 3.258179 0.246752
 C -2.590552 -3.855858 1.063727
 H -1.143609 -2.362763 1.642028
 C -0.678240 -2.944131 -0.336144
 C -3.469882 -2.157675 -2.105268
 H -4.252017 -0.411715 -1.186529
 C -5.349918 -2.060073 -0.429220
 C -4.370761 0.485788 1.926329
 H -4.437516 -1.669190 1.990534
 C -2.856717 -1.006249 3.262697
 H 5.283778 -2.428838 1.358570
 C 6.217358 -1.051497 2.754121
 H 2.733021 0.610278 2.972249
 C 4.779695 0.650650 3.644287
 C 6.805971 0.635686 -0.409984
 H 5.237846 2.005516 -0.900028
 H 4.912971 1.070653 0.560966
 C 6.610218 -0.346839 -2.702144
 H 4.604796 -0.753827 -3.349539
 H 4.970824 0.964367 -3.209400
 C -0.002361 -0.845015 -4.188900
 H -0.015924 -0.534405 -2.053252
 H 0.368070 0.895982 -2.985677

C 1.700144 -2.676058 -3.966171
 H 3.292497 -2.274321 -2.544464
 H 1.719699 -2.419860 -1.820591
 C 1.850816 4.265010 -0.314590
 H 2.517427 2.484534 0.738257
 H 3.736181 3.234523 -0.293598
 C 1.799944 4.036786 -2.824096
 H 3.666529 2.933198 -2.783925
 H 2.329266 2.079389 -3.563471
 C -5.833533 2.868804 -0.880580
 H -4.835316 1.484242 -2.218412
 H -2.332301 3.400765 0.675653
 C -4.420429 3.954388 0.726918
 H -3.204750 -4.104337 0.186130
 H -3.288182 -3.631553 1.882050
 C -1.736562 -5.067152 1.416851
 H -0.019421 -2.073676 -0.439574
 H -1.169093 -3.095585 -1.303803
 C 0.135785 -4.184479 0.014915
 H -2.516835 -1.707383 -2.399584
 H -3.285850 -3.213490 -1.857913
 C -4.468564 -2.074414 -3.248604
 H -5.198852 -3.100244 -0.107276
 H -5.772408 -1.519283 0.425139
 C -6.349336 -2.011760 -1.582761
 H -3.586960 1.251334 1.869147
 H -4.963016 0.593822 1.007029
 C -5.232223 0.740919 3.153226
 C -3.717932 -0.741987 4.493049
 H -2.408543 -2.004024 3.335963
 H -2.016624 -0.295747 3.233591
 H 7.196425 -1.525078 2.691465
 C 6.051431 0.065603 3.571080
 H 4.625958 1.518745 4.284286
 C 7.395581 0.603627 -1.811454
 H 6.915847 -0.352689 0.057071
 H 7.349797 1.343922 0.228525

H 6.732010 -1.374590 -2.328168
 H 7.008446 -0.338814 -3.725014
 H -1.068951 -0.605741 -4.270798
 H 0.490980 -0.407595 -5.071575
 C 0.229218 -2.347797 -4.181260
 H 1.850868 -3.762038 -3.909508
 H 2.281509 -2.325511 -4.833814
 H 2.104639 4.934032 0.518187
 H 0.786740 4.004660 -0.213127
 C 2.084425 4.963370 -1.648716
 H 2.029220 4.538547 -3.773283
 H 0.728795 3.789866 -2.836499
 H -6.812573 2.727884 -1.337086
 C -5.698254 3.756896 0.186779
 H -4.289224 4.666329 1.541243
 H -1.177965 -4.856813 2.340712
 H -2.385121 -5.927888 1.626848
 C -0.754198 -5.384078 0.299384
 H 0.835889 -4.402924 -0.801733
 H 0.752334 -3.967197 0.894407
 H -4.585276 -1.015666 -3.524540
 H -4.069302 -2.586553 -4.133424
 C -5.810532 -2.668603 -2.845541
 H -7.293566 -2.480075 -1.275583
 H -6.579954 -0.956489 -1.796308
 H -6.064086 0.019878 3.177515
 H -5.685762 1.738740 3.080665
 C -4.409930 0.611906 4.426718
 H -4.480578 -1.532346 4.573779
 H -3.099538 -0.815480 5.396689
 C 7.194149 0.631361 4.359232
 H 7.363576 1.616265 -2.242510
 H 8.453289 0.311850 -1.780798
 H -0.133628 -2.800150 -5.113682
 H -0.358629 -2.796306 -3.367278
 H 1.462391 5.864792 -1.722426
 H 3.131478 5.302788 -1.698988

C -6.882559 4.482594 0.750675
H -1.316527 -5.658891 -0.607592
H -0.144561 -6.257380 0.564594
H -6.538708 -2.573108 -3.661466
H -5.686568 -3.747748 -2.665238
H -3.648990 1.406968 4.443120
H -5.039882 0.763978 5.312725
H 6.985351 0.601150 5.436368
H 7.375087 1.681687 4.097482
H 8.119485 0.074613 4.180066
H -7.131760 4.105906 1.752237
H -7.768283 4.358213 0.119341
H -6.683352 5.556262 0.852147

(^{Cy}Y_F)₂Pb

E = -5380.75446848
Pb -0.029248 0.099166 -1.485723
C -1.519975 1.133700 0.052630
C 1.356766 -1.111838 0.053766
O -2.171125 -1.180687 -0.680693
S 2.420271 0.068217 0.412830
P 1.396856 -2.733418 0.612606
C 1.830354 -3.908467 -0.739563
C 0.749640 -3.977490 -1.818741
C 3.179629 -3.538626 -1.351649
C 1.151142 -4.922508 -2.945280
C 2.503121 -4.558162 -3.539827
C 3.574613 -4.503324 -2.461353
C 2.668551 -2.960118 1.923243
C 3.240000 -4.365744 2.109411
C 2.216689 -2.385929 3.267123
C 3.399589 -2.305085 4.218463
C 4.031112 -3.677081 4.414068
C 4.414143 -4.311617 3.083628
C -0.285464 -3.232391 1.143995
C -0.953070 -2.265459 2.118226
C -0.351945 -4.676319 1.642236

C -2.389438 -2.696493 2.383311
 C -2.454615 -4.124429 2.902576
 C -1.792224 -5.084976 1.926123
 C 3.931258 0.014159 -0.700338
 F 4.740025 -0.974042 -0.278115
 F 3.535520 -0.265044 -1.952932
 C 4.716349 1.344833 -0.752246
 F 4.740408 1.930969 0.443007
 F 4.117220 2.161851 -1.630498
 C 6.179932 1.143440 -1.212848
 S -2.738248 0.056199 -0.030007
 P -1.482547 2.514083 1.074564
 C 6.856643 2.443962 -1.703377
 F 6.602336 3.440468 -0.868595
 F 6.423351 2.765556 -2.909484
 F 8.165976 2.254824 -1.757030
 F 6.212213 0.265023 -2.223095
 F 6.894934 0.669455 -0.191859
 C -4.781398 4.775744 2.380991
 C -3.342872 4.267550 2.369814
 C -5.151964 5.470327 1.078067
 C -4.887044 4.572172 -0.122225
 C -3.444020 4.088565 -0.127760
 C -3.121564 3.344453 1.169955
 C -0.166575 3.613718 0.433345
 C 0.034329 4.917278 1.204223
 C -0.187345 3.878254 -1.072759
 C 1.350471 5.561653 0.779545
 C 1.406762 5.785774 -0.725760
 C 1.138968 4.498384 -1.494956
 C -0.992072 2.131104 2.805177
 C 0.397093 1.500839 2.867897
 C -2.007653 1.209915 3.481492
 C -1.612097 0.932582 4.926058
 C -0.214038 0.336389 5.016592
 C 0.807422 1.209894 4.304255
 C -3.947026 0.547669 -1.382094

F -3.240410 1.085551 -2.393195
 F -4.774783 1.487106 -0.904281
 C -4.804742 -0.573958 -2.006561
 F -5.697083 0.030016 -2.819494
 C -5.607418 -1.446844 -1.017978
 F -4.029382 -1.360076 -2.750739
 O -3.655225 -0.116350 1.105203
 O 3.052643 0.124486 1.736798
 O 1.836590 1.345937 -0.135592
 F -6.187714 -0.675108 -0.097403
 F -4.788148 -2.319578 -0.431053
 C -6.734172 -2.259636 -1.704079
 F -7.765999 -1.483073 -1.983567
 F -7.132841 -3.213991 -0.876720
 F -6.298661 -2.821291 -2.822487
 H 1.910247 -4.897657 -0.263367
 H -0.207853 -4.301003 -1.394372
 H 0.589456 -2.966941 -2.226383
 H 0.373853 -4.922672 -3.719764
 H 1.194932 -5.948604 -2.548989
 H 2.780409 -5.273173 -4.324774
 H 2.431932 -3.573071 -4.025271
 H 4.538290 -4.198975 -2.888610
 H 3.722706 -5.509474 -2.039635
 H 3.099347 -2.526850 -1.765837
 H 3.961231 -3.493595 -0.582951
 H 3.481172 -2.315377 1.554255
 H 1.767499 -1.398499 3.122015
 H 1.450293 -3.047659 3.697142
 H 4.132636 -1.601035 3.798652
 H 3.077538 -1.888014 5.181443
 H 4.911120 -3.608698 5.066271
 H 3.312312 -4.331970 4.930657
 H 4.813931 -5.321794 3.240116
 H 5.221793 -3.723744 2.622308
 H -0.861848 -3.148586 0.209505
 H 3.578594 -4.789698 1.157270

H 2.464057 -5.039426 2.499543
 H -0.913750 -1.253776 1.697411
 H -0.404855 -2.243576 3.066526
 H -2.859773 -1.999875 3.088088
 H -2.964441 -2.614605 1.453511
 H 0.233503 -4.763722 2.569628
 H 0.099771 -5.366189 0.916850
 H -2.355934 -5.084366 0.981358
 H -1.817772 -6.113822 2.308030
 H -1.943823 -4.190087 3.876472
 H -3.496881 -4.419949 3.077218
 H -4.930332 5.450752 3.233572
 H -5.453690 3.919184 2.538945
 H -6.203622 5.783273 1.100244
 H -4.555896 6.390747 0.978125
 H -5.107232 5.103336 -1.056989
 H -5.555234 3.700513 -0.090851
 H -3.239512 3.456105 -0.999732
 H -2.779686 4.961937 -0.201593
 H 0.714472 2.980763 0.603734
 H 0.034814 4.744289 2.288084
 H -0.797686 5.605726 0.991211
 H 1.494454 6.508938 1.315080
 H 2.177156 4.900484 1.078784
 H 0.651241 6.536730 -1.005386
 H 2.380518 6.205370 -1.008839
 H 1.945478 3.775728 -1.307275
 H 1.132496 4.694906 -2.574844
 H -0.376949 2.950235 -1.624276
 H -1.006404 4.560910 -1.332750
 H -0.976373 3.098567 3.332044
 H -3.023190 1.621612 3.431270
 H -2.050504 0.271196 2.917287
 H -1.646435 1.871973 5.499860
 H -2.347580 0.260296 5.386578
 H -0.221027 -0.658092 4.548203
 H 0.072230 0.184191 6.065476

H 1.798684 0.739014 4.302566
H 0.914644 2.161682 4.847475
H 1.158185 2.128465 2.393232
H 0.369484 0.564838 2.290468
H -3.130266 3.752674 3.312679
H -2.651102 5.120477 2.312131
H -3.810301 2.487624 1.258936

$^3(\text{CyY}_F)_2\text{Pb}$

E = -5380.65786999
Pb -0.015299 0.082953 -1.181272
C -1.770133 0.904298 0.044003
C 1.613749 -0.862337 0.127724
O -2.689605 -1.514843 -0.253026
S 2.781602 0.229223 0.618282
P 1.587178 -2.579583 0.402268
C 1.855937 -3.570491 -1.131208
C 0.669462 -3.630052 -2.090657
C 3.121549 -3.100044 -1.843004
C 0.997875 -4.498449 -3.300004
C 2.256635 -4.024392 -4.011009
C 3.436329 -3.970133 -3.051958
C 2.963486 -3.070315 1.540052
C 3.508092 -4.492684 1.388267
C 2.655670 -2.769842 3.009684
C 3.918126 -2.911933 3.845449
C 4.507950 -4.307517 3.709223
C 4.757919 -4.657827 2.249757
C -0.068266 -3.088081 1.021050
C -0.570825 -2.229668 2.181862
C -0.128415 -4.586041 1.327210
C -1.930328 -2.692639 2.695368
C -1.949828 -4.182359 3.001047
C -1.526080 -4.987117 1.782112
C 4.189844 0.220049 -0.616275
F 4.922873 -0.891996 -0.429048
F 3.687702 0.197252 -1.856013

C 5.099397 1.460997 -0.488097
 F 5.273915 1.774461 0.794808
 F 4.522655 2.487785 -1.123670
 C 6.495545 1.228737 -1.115102
 S -3.080252 -0.130442 0.040321
 P -1.730266 2.396046 0.944780
 C 7.251433 2.541776 -1.420234
 F 7.144136 3.379178 -0.399748
 F 6.764351 3.113938 -2.506844
 F 8.531497 2.268879 -1.618332
 F 6.363715 0.556091 -2.265307
 F 7.236830 0.512700 -0.269026
 C -5.005661 4.732922 2.145398
 C -3.580948 4.186504 2.178687
 C -5.327871 5.432992 0.832642
 C -5.041682 4.532660 -0.361107
 C -3.605188 4.032443 -0.319958
 C -3.349467 3.266429 0.978400
 C -0.377031 3.396728 0.228591
 C 0.009801 4.640603 1.028415
 C -0.456926 3.741116 -1.260224
 C 1.387832 5.108431 0.565550
 C 1.423653 5.367921 -0.935260
 C 0.930369 4.164357 -1.728959
 C -1.235409 2.107449 2.697660
 C 0.208347 1.620740 2.806424
 C -2.191130 1.135381 3.387126
 C -1.795390 0.910360 4.839498
 C -0.364637 0.403972 4.946475
 C 0.603482 1.348884 4.252036
 C -4.112667 0.275820 -1.467056
 F -3.289407 0.461715 -2.509402
 F -4.776642 1.419304 -1.249469
 C -5.131283 -0.803236 -1.893615
 F -5.872865 -0.263000 -2.882288
 C -6.105353 -1.282322 -0.794194
 F -4.477387 -1.852436 -2.384032

O -4.021147 0.124975 1.142803
 O 3.446267 -0.135095 1.874201
 O 2.319509 1.615077 0.451040
 F -6.574047 -0.230702 -0.116673
 F -5.466192 -2.106548 0.033212
 C -7.331730 -2.041018 -1.359091
 F -8.198632 -1.195612 -1.888904
 F -7.922974 -2.690711 -0.368472
 F -6.961005 -2.916624 -2.281755
 H 2.021257 -4.590079 -0.751165
 H -0.223373 -4.016596 -1.585316
 H 0.414397 -2.613680 -2.424367
 H 0.143217 -4.505121 -3.987880
 H 1.138887 -5.539176 -2.968928
 H 2.483433 -4.676490 -4.863973
 H 2.081789 -3.019361 -4.423802
 H 4.331609 -3.587955 -3.558100
 H 3.679363 -4.989484 -2.713956
 H 2.971490 -2.061609 -2.165343
 H 3.972659 -3.082713 -1.151272
 H 3.760108 -2.378653 1.232932
 H 2.250111 -1.759620 3.110236
 H 1.897619 -3.478827 3.373239
 H 4.641848 -2.156052 3.507941
 H 3.695147 -2.687413 4.896188
 H 5.439522 -4.393123 4.283013
 H 3.807958 -5.039158 4.141775
 H 5.134566 -5.684581 2.156678
 H 5.543726 -3.999220 1.850563
 H -0.733868 -2.873557 0.169346
 H 3.768528 -4.711085 0.347022
 H 2.747147 -5.226974 1.688962
 H -0.633004 -1.189560 1.840312
 H 0.148498 -2.253713 3.006613
 H -2.186226 -2.115711 3.594435
 H -2.696318 -2.462616 1.946786
 H 0.586152 -4.829744 2.126805

H 0.167847 -5.174382 0.448392
 H -2.237413 -4.807653 0.962892
 H -1.549830 -6.063451 1.995685
 H -1.263955 -4.403260 3.834553
 H -2.950445 -4.487841 3.331613
 H -5.161047 5.413007 2.992739
 H -5.701532 3.892777 2.287132
 H -6.374797 5.761933 0.826325
 H -4.715412 6.344134 0.748998
 H -5.225281 5.069088 -1.300670
 H -5.721531 3.668610 -0.353044
 H -3.377623 3.411079 -1.193111
 H -2.929078 4.898782 -0.353418
 H 0.452010 2.677580 0.328092
 H 0.029707 4.440879 2.106448
 H -0.736874 5.433418 0.863979
 H 1.683762 6.009494 1.118082
 H 2.117248 4.323209 0.812394
 H 0.788027 6.237042 -1.167560
 H 2.442018 5.635925 -1.244256
 H 1.623160 3.320907 -1.592328
 H 0.910548 4.396112 -2.801621
 H -0.826139 2.888238 -1.842447
 H -1.159189 4.567198 -1.423609
 H -1.315499 3.091959 3.184553
 H -3.230501 1.476573 3.310835
 H -2.166029 0.181167 2.848125
 H -1.894191 1.853695 5.399080
 H -2.492890 0.199817 5.302089
 H -0.302689 -0.586524 4.474290
 H -0.080271 0.266901 5.997711
 H 1.625269 0.948882 4.268516
 H 0.632120 2.303193 4.800745
 H 0.908030 2.341594 2.374064
 H 0.319180 0.704897 2.208532
 H -3.423395 3.653680 3.122289
 H -2.859403 5.017548 2.154749

H -4.065247 2.433710 1.043632

(^{Pip}Ys)₂Pb

E = -4603.47734370

Pb 0.000148 0.000330 -1.863689

C -1.851988 -0.015785 -0.326825

C 1.852287 0.015896 -0.327171

P -2.784635 -1.375884 -0.059217

P -2.231281 1.628065 -0.098859

P 2.784905 1.375898 -0.058916

P 2.231303 -1.628022 -0.098955

N -2.383830 -2.256351 1.334195

C -2.639011 -2.463726 -1.517200

C -4.577097 -1.097478 0.180552

S -0.879593 2.769967 -1.066735

C -3.891329 2.052021 -0.753407

C -2.351474 2.146989 1.651792

N 2.383944 2.255934 1.334727

C 2.639389 2.464215 -1.516557

C 4.577298 1.097252 0.181008

S 0.879584 -2.769795 -1.066899

C 3.891327 -2.052033 -0.753555

C 2.351343 -2.146905 1.651690

C -3.158867 -3.394464 1.802233

C -1.025636 -2.207669 1.863882

C -2.806712 -1.904332 -2.788937

C -2.288408 -3.808769 -1.408620

C -5.065114 -0.811936 1.458855

C -5.460285 -1.069081 -0.901254

C -4.986034 2.364501 0.049824

C -4.051814 2.000702 -2.141401

C -2.370359 3.499989 1.997718

C -2.461667 1.180701 2.646797

C 3.159096 3.393765 1.803292

C 1.025490 2.207470 1.863779

C 2.807574 1.905295 -2.788448

C 2.288340 3.809112 -1.407630

C 5.065097 0.811293 1.459300
 C 5.460602 1.068914 -0.900702
 C 4.985970 -2.365222 0.049466
 C 4.051742 -2.000175 -2.141544
 C 2.461177 -1.180694 2.646800
 C 2.370267 -3.499941 1.997512
 C -3.229490 -3.416666 3.321491
 C -1.028554 -2.235186 3.382278
 C -2.656153 -2.685668 -3.928067
 C -2.127156 -4.587171 -2.549135
 C -6.409234 -0.517284 1.653456
 C -6.803217 -0.772350 -0.704705
 C -6.225190 2.627052 -0.529363
 C -5.289152 2.254065 -2.715445
 C -2.534734 3.875034 3.325633
 C -2.638291 1.556128 3.976185
 C 3.229052 3.415579 3.322584
 C 1.027753 2.234705 3.382172
 C 2.657014 2.686944 -3.927359
 C 2.127103 4.587832 -2.547929
 C 6.409107 0.516199 1.653971
 C 6.803420 0.771718 -0.704083
 C 6.225009 -2.627938 -0.529920
 C 5.288951 -2.253704 -2.715778
 C 2.637516 -1.556217 3.976201
 C 2.534349 -3.875077 3.325433
 C -1.827716 -3.415491 3.912788
 C -2.316963 -4.029680 -3.808282
 C -7.282383 -0.499424 0.571888
 C -6.380210 2.571496 -1.908294
 C -2.682366 2.903710 4.315281
 C 1.827006 3.414691 3.913245
 C 2.317372 4.030814 -3.807211
 C 7.282362 0.498302 0.572490
 C 6.379958 -2.571853 -1.908832
 C 2.681644 -2.903821 4.315197
 H -2.694233 -4.341550 1.473925

H -4.160925 -3.362373 1.360106
 H -0.540510 -1.299773 1.480108
 H -0.443454 -3.059040 1.477895
 H -3.036889 -0.842465 -2.875421
 H -2.093625 -4.239954 -0.432001
 H -4.388293 -0.838122 2.308196
 H -5.105254 -1.289382 -1.904030
 H -4.878634 2.396725 1.132012
 H -3.182861 1.786787 -2.764444
 H -2.248190 4.249901 1.216417
 H -2.395049 0.130936 2.369007
 H 2.694884 4.341043 1.474970
 H 4.161334 3.361466 1.361590
 H 0.540374 1.299728 1.479625
 H 0.443595 3.059001 1.477662
 H 3.038139 0.843542 -2.875222
 H 2.093180 4.239921 -0.430919
 H 4.388216 0.837507 2.308584
 H 5.105747 1.289572 -1.903462
 H 4.878627 -2.397829 1.131648
 H 3.182828 -1.785693 -2.764453
 H 2.394489 -0.130907 2.369118
 H 2.248296 -4.249800 1.216128
 H -3.794751 -4.300478 3.645031
 H -3.783569 -2.534217 3.672768
 H -1.455451 -1.298880 3.769313
 H 0.008601 -2.280481 3.731372
 H -2.787516 -2.239380 -4.911881
 H -1.832951 -5.630167 -2.452271
 H -6.773958 -0.304028 2.656542
 H -7.477909 -0.751261 -1.558066
 H -7.075317 2.867315 0.106713
 H -5.403068 2.217423 -3.797577
 H -2.550370 4.930162 3.593094
 H -2.728391 0.792950 4.747946
 H 3.794485 4.299096 3.646618
 H 3.782651 2.532823 3.673856

H 1.454236 1.298210 3.769213
 H -0.009533 2.280203 3.730826
 H 2.788706 2.241011 -4.911291
 H 1.832516 5.630695 -2.450793
 H 6.773655 0.302596 2.657047
 H 7.478196 0.750648 -1.557378
 H 7.075100 -2.868772 0.105989
 H 5.402802 -2.216625 -3.797902
 H 2.727325 -0.793075 4.748034
 H 2.550005 -4.930225 3.592811
 H -1.318007 -4.349678 3.629592
 H -1.866501 -3.401309 5.009734
 H -2.184157 -4.639550 -4.699909
 H -8.335609 -0.269881 0.722596
 H -7.350124 2.777025 -2.357874
 H -2.816475 3.201653 5.353636
 H 1.317684 4.349068 3.629977
 H 1.865273 3.400309 5.010205
 H 2.184598 4.640943 -4.698667
 H 8.335495 0.268367 0.723246
 H 7.349773 -2.777541 -2.358552
 H 2.815535 -3.201834 5.353560

$^3(\text{PipY}_s)_2\text{Pb}$

E = -4603.37199715
 Pb 0.049132 -0.130604 -1.806903
 C -1.817707 -0.019504 -0.226891
 C 1.916009 -0.012453 -0.332813
 P -3.021240 -1.362510 -0.042890
 P -2.229431 1.694955 -0.119194
 P 2.828872 1.371767 -0.095764
 P 2.318975 -1.647760 -0.064258
 N -2.443135 -2.189102 1.308311
 C -2.788578 -2.266584 -1.584772
 C -4.716143 -1.090313 0.218223
 S -0.885256 2.757468 -1.152262
 C -3.905044 2.004007 -0.760323

C -2.319663 2.179037 1.631345
N 2.413238 2.269990 1.279234
C 2.652587 2.416525 -1.579795
C 4.620458 1.115763 0.145590
S 0.985348 -2.806606 -1.048750
C 3.989586 -2.070619 -0.680455
C 2.391197 -2.134387 1.693461
C -3.184814 -3.350442 1.788733
C -1.065845 -2.133236 1.791347
C -3.115586 -1.671295 -2.814526
C -2.220724 -3.545393 -1.575473
C -5.187536 -0.769944 1.537244
C -5.698031 -1.126336 -0.824852
C -5.002028 2.208448 0.078284
C -4.074774 2.023153 -2.146899
C -2.271156 3.532292 1.972352
C -2.493921 1.215833 2.621602
C 3.170665 3.427209 1.732497
C 1.052653 2.216072 1.802252
C 2.793038 1.820641 -2.838366
C 2.299585 3.762939 -1.501031
C 5.117420 0.877398 1.430244
C 5.496938 1.062744 -0.940911
C 5.070447 -2.349159 0.153478
C 4.174009 -2.061090 -2.066306
C 2.511203 -1.152181 2.672258
C 2.366400 -3.481219 2.062150
C -3.188208 -3.406034 3.307009
C -1.018337 -2.174937 3.309186
C -2.927936 -2.370809 -4.000609
C -2.020442 -4.230815 -2.765330
C -6.525626 -0.529552 1.774305
C -7.023461 -0.883811 -0.556047
C -6.258340 2.432958 -0.471887
C -5.336406 2.230823 -2.688950
C -2.427344 3.914825 3.298966
C -2.654090 1.603054 3.948830

C 3.230332 3.476542 3.251595
 C 1.047797 2.262809 3.319786
 C 2.605349 2.566330 -3.995501
 C 2.102031 4.505691 -2.659685
 C 6.466450 0.607878 1.626251
 C 6.844335 0.789614 -0.742185
 C 6.321995 -2.618641 -0.394515
 C 5.423800 -2.322656 -2.608832
 C 2.649700 -1.508732 4.011118
 C 2.492979 -3.835958 3.399614
 C -1.767775 -3.382650 3.848889
 C -2.384266 -3.651188 -3.980459
 C -7.472663 -0.574494 0.743621
 C -6.427697 2.442723 -1.851366
 C -2.629420 2.951864 4.286376
 C 1.825520 3.463443 3.835800
 C 2.258764 3.910985 -3.906249
 C 7.333720 0.566753 0.540514
 C 6.501446 -2.605435 -1.771714
 C 2.647067 -2.850920 4.374269
 H -2.723386 -4.276653 1.400477
 H -4.205392 -3.303177 1.395715
 H -0.581412 -1.226640 1.405407
 H -0.492692 -2.980944 1.382950
 H -3.507994 -0.655336 -2.839591
 H -1.914251 -3.993796 -0.633623
 H -4.487888 -0.748820 2.368680
 H -5.405638 -1.378849 -1.839793
 H -4.883846 2.179450 1.158381
 H -3.205122 1.903156 -2.792897
 H -2.105842 4.273807 1.191212
 H -2.505716 0.162227 2.354089
 H 2.694439 4.361034 1.384112
 H 4.175852 3.400863 1.297446
 H 0.577555 1.299081 1.429426
 H 0.466349 3.057912 1.401506
 H 3.031903 0.758807 -2.899981

H 2.131917 4.223855 -0.532948
 H 4.444431 0.920708 2.282126
 H 5.132597 1.244471 -1.948321
 H 4.941126 -2.351907 1.233793
 H 3.315536 -1.875363 -2.712106
 H 2.479221 -0.105967 2.375455
 H 2.238721 -4.242442 1.292987
 H -3.722034 -4.308108 3.632632
 H -3.751408 -2.543826 3.691003
 H -1.459169 -1.254691 3.718941
 H 0.029548 -2.194412 3.626131
 H -3.193947 -1.904832 -4.947787
 H -1.569297 -5.220685 -2.745073
 H -6.843995 -0.305559 2.792622
 H -7.739117 -0.934089 -1.376142
 H -7.111950 2.578329 0.185871
 H -5.465696 2.242252 -3.769639
 H -2.394764 4.969570 3.565393
 H -2.795657 0.845611 4.717821
 H 3.779792 4.374483 3.562653
 H 3.796169 2.609509 3.621897
 H 1.489100 1.338713 3.718906
 H 0.009261 2.293239 3.665951
 H 2.714339 2.092197 -4.968886
 H 1.805101 5.549746 -2.586218
 H 6.839834 0.432660 2.633418
 H 7.515036 0.749072 -1.597886
 H 7.161853 -2.833273 0.263783
 H 5.557537 -2.320469 -3.689181
 H 2.745656 -0.735172 4.771585
 H 2.471730 -4.885759 3.686266
 H -1.243852 -4.298408 3.533036
 H -1.766091 -3.384460 4.946645
 H -2.228625 -4.192778 -4.911343
 H -8.524398 -0.382596 0.940777
 H -7.415569 2.609262 -2.276578
 H -2.756884 3.256348 5.323486

H 1.302735 4.385158 3.536064
H 1.859167 3.466599 4.932784
H 2.095913 4.492552 -4.811569
H 8.390806 0.357145 0.692643
H 7.480793 -2.818206 -2.196611
H 2.749436 -3.133277 5.420437

(Y_{Ph})₂Pb

E = -2619.43193948
P 3.227549 0.151298 0.037441
P -3.225781 0.246896 0.033355
C 1.779363 -0.416413 -0.646747
C 1.664849 -1.836274 -0.961567
C 2.555043 -2.827427 -0.491658
H 3.370869 -2.549263 0.173282
C 2.416219 -4.165656 -0.833930
H 3.129433 -4.890738 -0.443588
C 1.371926 -4.584751 -1.649726
H 1.253908 -5.635128 -1.907758
C 0.472484 -3.631261 -2.121949
H -0.362616 -3.934890 -2.751474
C 0.623068 -2.294706 -1.794998
H -0.089404 -1.563785 -2.176775
C 3.582995 -0.417215 1.753468
C 4.713506 -1.147726 2.122757
H 5.499119 -1.344732 1.396779
C 4.833217 -1.648919 3.415794
H 5.715592 -2.224225 3.689781
C 3.830119 -1.424301 4.351065
H 3.925402 -1.820876 5.360065
C 2.695259 -0.703568 3.988499
H 1.898482 -0.535768 4.710525
C 2.569058 -0.215982 2.695121
H 1.664644 0.318589 2.399548
C 3.228079 1.970232 0.128386
C 3.395374 2.688360 1.311336

H 3.524626 2.165886 2.255889
 C 3.392695 4.080408 1.286735
 H 3.515182 4.635159 2.214969
 C 3.234419 4.758439 0.084438
 H 3.231017 5.846753 0.069139
 C 3.089207 4.044744 -1.102485
 H 2.973774 4.572383 -2.047083
 C 3.090939 2.657605 -1.082995
 H 2.975192 2.090695 -2.005846
 C 4.760555 -0.179467 -0.904373
 C 4.694543 -0.875353 -2.111144
 H 3.739488 -1.272425 -2.447353
 C 5.844836 -1.049121 -2.874284
 H 5.790744 -1.599914 -3.811261
 C 7.056746 -0.519020 -2.445309
 H 7.953856 -0.654815 -3.046694
 C 7.121833 0.196155 -1.252370
 H 8.065724 0.626533 -0.923095
 C 5.976480 0.368589 -0.485741
 H 6.022252 0.941348 0.440664
 C -1.654746 -0.381467 0.228217
 C -1.516461 -1.815765 0.487481
 C -0.476663 -2.288762 1.310294
 H 0.217366 -1.565293 1.733526
 C -0.302941 -3.638582 1.566943
 H 0.528038 -3.958701 2.193668
 C -1.174987 -4.581928 1.027669
 H -1.037792 -5.642136 1.231000
 C -2.211369 -4.145750 0.211466
 H -2.895700 -4.866162 -0.235328
 C -2.370692 -2.792668 -0.060506
 H -3.156530 -2.485641 -0.749049
 C -4.457930 -0.443070 1.203514
 C -4.470021 0.010284 2.524826
 H -3.819724 0.827109 2.826432
 C -5.313150 -0.569877 3.463684
 H -5.315344 -0.200502 4.487326

C -6.149008 -1.619574 3.097118
 H -6.806497 -2.077357 3.833795
 C -6.139207 -2.083032 1.787054
 H -6.784841 -2.908408 1.493602
 C -5.300058 -1.499096 0.844959
 H -5.305007 -1.870601 -0.176741
 C -3.209634 2.055573 0.302649
 C -3.853757 2.954392 -0.548194
 H -4.377659 2.594339 -1.429246
 C -3.809882 4.320995 -0.289844
 H -4.306956 5.011710 -0.968183
 C -3.128251 4.803235 0.820780
 H -3.095258 5.872894 1.019163
 C -2.479140 3.914794 1.672343
 H -1.931884 4.285530 2.536773
 C -2.514939 2.551616 1.412725
 H -1.978847 1.854019 2.053880
 C -4.053728 0.037814 -1.597634
 C -5.411817 0.302237 -1.802490
 H -6.032718 0.632233 -0.969992
 C -5.971376 0.139616 -3.063615
 H -7.028123 0.348937 -3.219494
 C -5.181823 -0.295396 -4.126034
 H -5.623663 -0.426854 -5.112104
 C -3.833828 -0.569174 -3.925478
 H -3.217256 -0.918862 -4.751219
 C -3.272176 -0.402911 -2.663358
 H -2.220369 -0.625752 -2.480744
 Pb 0.023824 1.051592 -0.379342

$^3(Y_{Ph})_2Pb$

E = -2619.38111885
 P 3.152183 0.034919 -0.006312
 P -3.267796 0.132064 0.028858
 C 1.654872 -0.186723 -0.774088
 C 1.252383 -1.463097 -1.312014
 C 1.749308 -2.714612 -0.871952

H 2.470191 -2.739185 -0.055473
C 1.297568 -3.908522 -1.407100
H 1.691563 -4.847090 -1.019044
C 0.326790 -3.923743 -2.408785
H -0.032589 -4.865565 -2.818479
C -0.165908 -2.709024 -2.877792
H -0.910903 -2.695377 -3.673867
C 0.290656 -1.511356 -2.348113
H -0.055371 -0.559126 -2.749640
C 3.344318 -0.485360 1.745353
C 3.975509 -1.680785 2.099586
H 4.460455 -2.286104 1.335666
C 3.998850 -2.099577 3.425814
H 4.502988 -3.027660 3.688726
C 3.378213 -1.337930 4.410808
H 3.397658 -1.665372 5.448548
C 2.722949 -0.159365 4.062274
H 2.224338 0.434360 4.826180
C 2.705417 0.265343 2.739826
H 2.181143 1.182287 2.464761
C 3.578688 1.809297 -0.004092
C 4.343138 2.398209 1.005842
H 4.645409 1.815922 1.873546
C 4.715200 3.734727 0.911162
H 5.301500 4.188182 1.708209
C 4.340062 4.489397 -0.194909
H 4.630133 5.536179 -0.264375
C 3.603489 3.899593 -1.217968
H 3.318503 4.481160 -2.092497
C 3.231938 2.564537 -1.129250
H 2.666406 2.089435 -1.929682
C 4.597062 -0.712497 -0.849871
C 4.452128 -1.245419 -2.130779
H 3.467423 -1.277548 -2.590124
C 5.564944 -1.729102 -2.811615
H 5.443849 -2.152615 -3.806726
C 6.824829 -1.670508 -2.226572

H 7.693280 -2.048424 -2.763157
 C 6.977063 -1.119929 -0.956963
 H 7.963531 -1.059948 -0.500995
 C 5.867887 -0.640857 -0.272245
 H 5.988778 -0.203543 0.718475
 C -1.594629 -0.269432 0.215342
 C -1.167085 -1.506840 0.807575
 C -0.095258 -1.488504 1.725966
 H 0.339834 -0.526172 1.978626
 C 0.377829 -2.651691 2.307792
 H 1.197764 -2.595185 3.020876
 C -0.182041 -3.881648 1.968941
 H 0.201232 -4.799995 2.410018
 C -1.230821 -3.929963 1.051049
 H -1.656881 -4.888834 0.760540
 C -1.725821 -2.765295 0.489375
 H -2.510823 -2.819775 -0.263180
 C -4.386807 -0.691556 1.210356
 C -4.608778 -0.142094 2.475448
 H -4.187076 0.826619 2.731477
 C -5.379701 -0.822486 3.409682
 H -5.548543 -0.382498 4.390428
 C -5.935491 -2.057247 3.092020
 H -6.538795 -2.589079 3.825166
 C -5.721287 -2.609226 1.833871
 H -6.155737 -3.573514 1.578076
 C -4.950290 -1.932655 0.896553
 H -4.796936 -2.368407 -0.088465
 C -3.433465 1.913492 0.318767
 C -4.229387 2.740773 -0.478438
 H -4.762301 2.329054 -1.332079
 C -4.325791 4.096139 -0.195068
 H -4.940903 4.735157 -0.825287
 C -3.630216 4.638697 0.884574
 H -3.706929 5.702208 1.102203
 C -2.831582 3.822910 1.676604
 H -2.274432 4.244661 2.510646

C -2.725230 2.464862 1.397577
 H -2.078138 1.828880 2.000430
 C -3.989665 -0.219566 -1.600481
 C -5.373560 -0.180039 -1.799831
 H -6.039278 0.052860 -0.969771
 C -5.896652 -0.451436 -3.058503
 H -6.973232 -0.422759 -3.214705
 C -5.044932 -0.765845 -4.114492
 H -5.458565 -0.981195 -5.097988
 C -3.669526 -0.811955 -3.913445
 H -3.002307 -1.063489 -4.735658
 C -3.139844 -0.539178 -2.656555
 H -2.069782 -0.583030 -2.474996
 Pb 0.039314 1.513808 -0.399415

(Y_{Pyr})₂Pb

E = -2651.57211158
 P 3.221998 0.154294 0.163553
 P -3.046355 0.332408 0.236236
 C 1.967410 -0.389361 -0.803706
 C 1.739774 -1.704617 -1.275475
 C 2.509336 -2.880025 -1.061668
 H 3.443448 -2.816796 -0.505564
 C 2.043498 -4.093508 -1.517763
 H 2.623143 -4.997142 -1.330962
 C 0.822514 -4.175023 -2.200199
 H 0.423164 -5.121516 -2.552446
 C 0.132799 -2.992029 -2.408385
 H -0.826002 -2.987934 -2.931250
 C 3.567054 -0.802727 1.681349
 C 4.826749 -0.910524 2.275531
 H 5.692073 -0.430810 1.823807
 C 4.979548 -1.646710 3.445193
 H 5.962163 -1.731933 3.905770
 C 3.880416 -2.277523 4.021290
 H 4.004470 -2.854982 4.935967
 C 2.628659 -2.180061 3.421788

H 1.768193 -2.682701 3.860568
 C 2.465065 -1.449043 2.249195
 H 1.487645 -1.402252 1.756083
 C 2.839495 1.845651 0.712213
 C 2.703981 2.185798 2.057205
 H 2.821445 1.422891 2.824134
 C 2.424542 3.502041 2.416257
 H 2.325637 3.764137 3.467972
 C 2.280066 4.478269 1.436814
 H 2.071576 5.508290 1.721248
 C 2.398599 4.138534 0.091304
 H 2.278039 4.899012 -0.677625
 C 2.680528 2.828113 -0.271313
 H 2.789149 2.557539 -1.321128
 C 4.850698 0.341105 -0.657087
 C 5.093419 -0.406272 -1.809843
 H 4.313542 -1.062084 -2.193954
 C 6.311347 -0.292789 -2.471053
 H 6.496977 -0.881693 -3.367261
 C 7.283982 0.581496 -1.996410
 H 8.233659 0.676017 -2.519877
 C 7.037721 1.347115 -0.860612
 H 7.791056 2.044216 -0.498134
 C 5.824371 1.228697 -0.191741
 H 5.627253 1.839012 0.689365
 C -1.554036 -0.449174 0.113442
 C -1.461395 -1.862118 0.429963
 C -0.161537 -3.610607 1.215789
 H 0.818113 -3.910001 1.601871
 C -1.157566 -4.564537 1.039042
 H -0.985031 -5.608257 1.289657
 C -2.364925 -4.120391 0.509549
 H -3.181616 -4.817772 0.324513
 C -2.513450 -2.782042 0.193076
 H -3.432246 -2.438993 -0.277890
 C -3.950178 -0.060399 1.778111
 C -3.544185 0.545538 2.969771

H -2.770101 1.309549 2.951614
 C -4.122627 0.180580 4.178236
 H -3.803003 0.666230 5.098220
 C -5.104558 -0.805100 4.212699
 H -5.554412 -1.094535 5.160607
 C -5.506982 -1.420799 3.033611
 H -6.269259 -2.197279 3.054548
 C -4.935111 -1.050371 1.821094
 H -5.262238 -1.534883 0.903936
 C -2.746440 2.135709 0.243664
 C -3.575464 3.048384 -0.410173
 H -4.432739 2.698567 -0.978784
 C -3.297273 4.410321 -0.360474
 H -3.944845 5.110593 -0.884642
 C -2.194302 4.874498 0.346686
 H -1.979802 5.941038 0.384248
 C -1.361849 3.971752 1.000250
 H -0.492729 4.323551 1.549934
 C -1.630769 2.609606 0.946321
 H -0.971825 1.893474 1.437149
 C -4.336517 0.095692 -1.066067
 C -5.672374 0.481114 -0.914807
 H -6.004315 0.933346 0.019478
 C -6.579274 0.282824 -1.949118
 H -7.617509 0.586122 -1.826214
 C -6.161321 -0.307261 -3.139694
 H -6.873992 -0.464696 -3.947262
 C -4.837401 -0.703148 -3.292458
 H -4.510468 -1.173493 -4.217874
 C -3.930055 -0.504433 -2.256668
 H -2.891836 -0.827318 -2.351878
 Pb -0.089086 0.567104 -1.421572
 N -0.301798 -2.323627 0.943293
 N 0.580611 -1.815381 -1.993897

$^3(Y_{Pyr})_2Pb$

E = -2651.50288431

P 3.219320 0.043238 -0.099272
 P -3.256959 0.220726 -0.118454
 C 1.662637 -0.356022 -0.634351
 C 1.320159 -1.702414 -0.983745
 C 2.164730 -2.830462 -0.757558
 H 3.156193 -2.690258 -0.330150
 C 1.727407 -4.105358 -1.045674
 H 2.379111 -4.957198 -0.852330
 C 0.445854 -4.295184 -1.569121
 H 0.054617 -5.282393 -1.800590
 C -0.309000 -3.151559 -1.791651
 H -1.315696 -3.238643 -2.214692
 C 3.792357 -0.782604 1.439466
 C 5.117041 -1.116489 1.727301
 H 5.905855 -0.909241 1.008449
 C 5.434677 -1.732603 2.934107
 H 6.469094 -1.993158 3.150964
 C 4.434573 -2.017009 3.857819
 H 4.686420 -2.496697 4.802104
 C 3.111040 -1.700430 3.566082
 H 2.322362 -1.934792 4.279284
 C 2.784572 -1.095216 2.357435
 H 1.742978 -0.886004 2.103556
 C 3.295988 1.822747 0.265536
 C 3.651748 2.326647 1.516825
 H 3.892511 1.643804 2.328810
 C 3.681822 3.700767 1.728472
 H 3.952543 4.089689 2.708121
 C 3.356435 4.574646 0.695688
 H 3.375039 5.649456 0.866441
 C 3.009652 4.075554 -0.556281
 H 2.756208 4.757573 -1.365475
 C 2.984047 2.704252 -0.776748
 H 2.712091 2.303415 -1.752326
 C 4.575837 -0.166948 -1.312692
 C 4.350623 -0.916659 -2.467568
 H 3.379899 -1.381896 -2.622195

C 5.355297 -1.047200 -3.420553
 H 5.174093 -1.637676 -4.316621
 C 6.581160 -0.416556 -3.236296
 H 7.363634 -0.515742 -3.986518
 C 6.800716 0.357821 -2.100973
 H 7.750210 0.872335 -1.965008
 C 5.800398 0.486577 -1.144608
 H 5.963640 1.116530 -0.270472
 C -1.792143 -0.523666 0.446942
 C -1.592415 -1.806022 1.029938
 C -0.060807 -3.208115 2.038458
 H 0.938974 -3.317526 2.466096
 C -0.908904 -4.316564 1.964634
 H -0.577875 -5.288875 2.321203
 C -2.173473 -4.127681 1.418975
 H -2.878936 -4.953684 1.345251
 C -2.524298 -2.871501 0.958824
 H -3.501432 -2.708687 0.517582
 C -4.865430 -0.553662 0.296429
 C -5.476659 -0.278245 1.521125
 H -5.035732 0.453539 2.195124
 C -6.653205 -0.928233 1.877014
 H -7.123070 -0.707174 2.833288
 C -7.230153 -1.852267 1.012375
 H -8.153344 -2.356798 1.290970
 C -6.628187 -2.127909 -0.211800
 H -7.079454 -2.846425 -0.893348
 C -5.449521 -1.484945 -0.569414
 H -4.979068 -1.706699 -1.525979
 C -3.284852 1.843883 0.671202
 C -3.795304 2.990551 0.048990
 H -4.156647 2.942451 -0.975081
 C -3.809939 4.199419 0.725211
 H -4.196789 5.087182 0.228898
 C -3.322284 4.283931 2.032412
 H -3.335609 5.236103 2.558793
 C -2.815145 3.150324 2.654628

H -2.424087 3.211497 3.668399
 C -2.792022 1.931027 1.985946
 H -2.379407 1.047423 2.470778
 C -3.295612 0.382510 -1.918033
 C -4.447547 0.878261 -2.540107
 H -5.323409 1.140415 -1.948093
 C -4.479532 1.017562 -3.924128
 H -5.370409 1.414385 -4.407004
 C -3.378892 0.637943 -4.684672
 H -3.407495 0.742263 -5.767974
 C -2.248595 0.111086 -4.064493
 H -1.393863 -0.207531 -4.657662
 C -2.194321 -0.013454 -2.680140
 H -1.311786 -0.451615 -2.200880
 Pb 0.037027 1.153427 0.160420
 N -0.379194 -2.006052 1.607276
 N 0.098313 -1.920094 -1.531222

(Y_{PhF})₂Pb

E = -3613.25672234
 P -3.128435 -0.702709 0.034177
 P 3.062876 -0.914411 0.182002
 C -1.862072 0.034262 -0.826250
 C -1.668963 1.458467 -0.924986
 C -2.357080 2.451759 -0.202241
 C -2.152210 3.813464 -0.360097
 C -1.165251 4.268158 -1.222784
 C -0.424157 3.331966 -1.934628
 C -0.684314 1.982550 -1.788091
 C -2.922231 -0.799437 1.855134
 C -3.592850 0.041694 2.742161
 H -4.381361 0.696923 2.380764
 C -3.237056 0.065572 4.087376
 H -3.760109 0.733604 4.768712
 C -2.212185 -0.745649 4.557723
 H -1.930592 -0.716146 5.608439
 C -1.540219 -1.590833 3.677911

H -0.732696 -2.226649 4.037860
 C -1.891989 -1.612827 2.337081
 H -1.351953 -2.270262 1.651880
 C -3.261415 -2.447091 -0.495887
 C -3.643491 -3.465205 0.379276
 H -3.783421 -3.253244 1.437045
 C -3.841389 -4.757595 -0.096102
 H -4.130656 -5.547158 0.594711
 C -3.670574 -5.039458 -1.446387
 H -3.824176 -6.051767 -1.815451
 C -3.310837 -4.023163 -2.327012
 H -3.185540 -4.237072 -3.386568
 C -3.113922 -2.732027 -1.856819
 H -2.837072 -1.926187 -2.535183
 C -4.816192 -0.089368 -0.273463
 C -5.027562 0.791768 -1.332937
 H -4.177184 1.139090 -1.917223
 C -6.315893 1.217190 -1.634755
 H -6.476997 1.910981 -2.457407
 C -7.395094 0.758422 -0.886809
 H -8.403115 1.093452 -1.123787
 C -7.187934 -0.132503 0.162200
 H -8.032228 -0.498195 0.743363
 C -5.901409 -0.559399 0.467641
 H -5.741274 -1.262600 1.284416
 C 1.566630 -0.119176 0.040925
 C 1.509250 1.306681 0.311865
 C 0.551275 1.849065 1.182544
 C 0.448536 3.208155 1.428414
 C 1.327697 4.098768 0.823330
 C 2.303666 3.608320 -0.032411
 C 2.362062 2.246083 -0.284830
 C 4.157155 -0.134930 1.414752
 C 3.957891 -0.383292 2.774829
 H 3.222719 -1.118507 3.093314
 C 4.700121 0.302421 3.727756
 H 4.541667 0.097845 4.784693

C 5.640035 1.248703 3.331862
 H 6.217363 1.789271 4.079450
 C 5.838331 1.504724 1.979850
 H 6.567859 2.248176 1.665021
 C 5.103124 0.816003 1.021759
 H 5.256572 1.026541 -0.033669
 C 2.718674 -2.622032 0.749667
 C 3.361755 -3.750988 0.243019
 H 4.118041 -3.649450 -0.530796
 C 3.015424 -5.018654 0.702039
 H 3.512015 -5.893842 0.287822
 C 2.031170 -5.170003 1.671337
 H 1.759241 -6.163743 2.021951
 C 1.387701 -4.047783 2.185478
 H 0.610108 -4.160394 2.939382
 C 1.725816 -2.781564 1.726295
 H 1.203914 -1.898647 2.094914
 C 4.131713 -1.118053 -1.291602
 C 5.448107 -1.577481 -1.187534
 H 5.873204 -1.795583 -0.207999
 C 6.219009 -1.746251 -2.331003
 H 7.243614 -2.103595 -2.247017
 C 5.681986 -1.451000 -3.581679
 H 6.288168 -1.579644 -4.476489
 C 4.378950 -0.977609 -3.686773
 H 3.965250 -0.726862 -4.661458
 C 3.605486 -0.807538 -2.543465
 H 2.597520 -0.396713 -2.606306
 Pb -0.037787 -1.407940 -0.939553
 F 3.284873 1.823082 -1.154743
 F 3.147019 4.440271 -0.625612
 F 1.221593 5.398423 1.052255
 F -0.509159 3.671261 2.220998
 F -0.316381 1.048608 1.793505
 F 0.090344 1.138117 -2.485577
 F 0.565101 3.735532 -2.720142
 F -0.908622 5.562554 -1.344028

F -2.856165 4.678022 0.354197

F -3.274009 2.085076 0.700727

$^3(Y_{PhF})_2Pb$

E = -3613.19127083

P -3.117109 -0.820745 0.108261

P 3.121715 -0.764075 0.193195

C -1.891739 0.069607 -0.767119

C -1.811337 1.463551 -0.970525

C -2.589544 2.457075 -0.316308

C -2.396902 3.813837 -0.480113

C -1.362995 4.268943 -1.294736

C -0.557572 3.344990 -1.958004

C -0.781311 1.993723 -1.801272

C -2.720302 -0.907920 1.870464

C -3.211482 0.061601 2.747100

H -3.954482 0.778652 2.409566

C -2.728246 0.125769 4.048194

H -3.101810 0.892153 4.723592

C -1.757282 -0.773676 4.476637

H -1.370268 -0.711292 5.491970

C -1.284874 -1.755796 3.613458

H -0.534243 -2.467447 3.952565

C -1.761900 -1.829727 2.309688

H -1.379675 -2.587356 1.626865

C -3.148456 -2.489818 -0.563660

C -3.560074 -3.573384 0.227963

H -3.756374 -3.432594 1.289232

C -3.696211 -4.831316 -0.340000

H -3.994498 -5.672245 0.283197

C -3.456902 -5.021485 -1.699986

H -3.565099 -6.010584 -2.139836

C -3.097866 -3.936377 -2.498853

H -2.927556 -4.075805 -3.564502

C -2.955154 -2.674811 -1.943704

H -2.672042 -1.828275 -2.567965

C -4.851822 -0.292399 -0.057255

C -5.231886 0.456394 -1.172197
 H -4.475306 0.811373 -1.870992
 C -6.571408 0.756954 -1.382417
 H -6.863305 1.346762 -2.248919
 C -7.535939 0.309776 -0.484483
 H -8.584590 0.549444 -0.648764
 C -7.160071 -0.442679 0.623615
 H -7.912927 -0.793361 1.326690
 C -5.821432 -0.748570 0.837542
 H -5.530178 -1.339320 1.704860
 C 1.582601 -0.072715 0.152322
 C 1.400429 1.337943 0.369291
 C 0.364998 1.816002 1.196398
 C 0.123272 3.160771 1.409873
 C 0.932326 4.121736 0.814489
 C 1.984185 3.706967 0.008219
 C 2.181134 2.352905 -0.216685
 C 4.206211 -0.000334 1.447098
 C 4.092781 -0.376959 2.787566
 H 3.431772 -1.194225 3.067488
 C 4.824991 0.284129 3.765195
 H 4.735780 -0.021707 4.805838
 C 5.668473 1.334606 3.415278
 H 6.238206 1.855122 4.182816
 C 5.780560 1.718317 2.084018
 H 6.435291 2.541760 1.805384
 C 5.055832 1.053695 1.100350
 H 5.146071 1.358183 0.060573
 C 2.894403 -2.518087 0.662562
 C 3.615467 -3.573865 0.103686
 H 4.359905 -3.380599 -0.664352
 C 3.371090 -4.881777 0.510907
 H 3.933027 -5.698864 0.062945
 C 2.407887 -5.146013 1.479979
 H 2.219240 -6.170833 1.794581
 C 1.679855 -4.100716 2.037282
 H 0.916673 -4.304929 2.786995

C 1.911989 -2.792517 1.625849
 H 1.336800 -1.961168 2.032331
 C 4.177161 -0.829513 -1.308473
 C 5.529712 -1.177144 -1.253858
 H 5.997424 -1.393906 -0.293594
 C 6.281920 -1.237047 -2.421483
 H 7.335813 -1.505450 -2.375390
 C 5.687667 -0.947047 -3.646754
 H 6.277962 -0.991829 -4.560270
 C 4.345471 -0.586296 -3.702677
 H 3.884363 -0.342666 -4.657815
 C 3.592314 -0.522759 -2.535619
 H 2.549054 -0.206991 -2.558021
 Pb 0.048871 -1.538559 -0.906903
 F 3.163404 2.012742 -1.056412
 F 2.754881 4.606362 -0.586238
 F 0.671427 5.411786 0.981866
 F -0.908941 3.544047 2.156305
 F -0.445426 0.946740 1.793758
 F 0.028158 1.167187 -2.443698
 F 0.452901 3.773786 -2.694048
 F -1.129547 5.558468 -1.418378
 F -3.145481 4.681565 0.176210
 F -3.524893 2.084078 0.549977

(Y_{CN})₂Pb

E = -2341.36638304
 C 3.540512 -1.351532 -1.428158
 C 4.642343 -1.114522 -2.257335
 C 4.871889 -1.932704 -3.355932
 H 5.726984 -1.745432 -4.002828
 C 3.998272 -2.981353 -3.635439
 H 4.175224 -3.616606 -4.501632
 C 2.892439 -3.205218 -2.823263
 H 2.188032 -4.002689 -3.049308
 C 2.657175 -2.392204 -1.719045
 H 1.766308 -2.553913 -1.113734

H 5.309222 -0.276082 -2.056548
 P 3.163880 -0.299319 0.008955
 C -1.507061 -0.407625 -0.486609
 P -3.136811 -0.286917 -0.023660
 C 1.556292 -0.353823 0.544731
 C -1.059854 -1.627178 -1.002978
 C 1.135024 -1.489795 1.242507
 C 4.097879 2.315339 0.339275
 H 4.411722 1.997004 1.331871
 N -0.672815 -2.625505 -1.472203
 C 3.284692 3.126573 -2.200279
 H 2.966981 3.442041 -3.191999
 N 0.748910 -2.399206 1.866885
 C 3.529102 1.391550 -0.537630
 C 4.261752 3.637776 -0.056039
 H 4.709860 4.354821 0.628824
 C 3.854167 4.043690 -1.323245
 H 3.983765 5.079958 -1.629618
 C 3.122743 1.800955 -1.811799
 H 2.693872 1.075795 -2.502526
 C 4.380338 -0.719801 1.299256
 C 3.990590 -0.552164 2.630197
 H 2.977960 -0.217835 2.848631
 C 4.885249 -0.829972 3.657591
 H 4.573566 -0.705622 4.692669
 C 6.168035 -1.277721 3.362641
 H 6.866163 -1.499209 4.167815
 C 6.555857 -1.456653 2.038009
 H 7.555186 -1.819420 1.805728
 C -3.417202 1.386696 0.612821
 C 5.665129 -1.183377 1.007528
 H 5.968979 -1.346652 -0.023412
 C -3.494019 1.633731 1.983341
 H -3.469756 0.802158 2.685172
 C -3.597253 2.941476 2.447236
 H -3.655119 3.131725 3.516968
 C -3.623808 4.000745 1.547185

H -3.704277 5.022626 1.912974
 C -3.547922 3.757250 0.178352
 H -3.567645 4.586279 -0.526110
 C -3.443617 2.453919 -0.290743
 H -3.381136 2.257331 -1.360349
 H -4.803287 -2.366996 -4.160570
 H -3.145478 -1.967129 -2.372112
 C -4.379195 -0.525786 -1.338396
 C -5.597612 0.158943 -1.338227
 H -5.821188 0.877865 -0.551321
 C -6.525058 -0.066495 -2.349540
 H -7.470717 0.472273 -2.345966
 C -6.241655 -0.975276 -3.363367
 H -6.967687 -1.150762 -4.155055
 C -5.028553 -1.656992 -3.367355
 C -4.095147 -1.434670 -2.361980
 C -3.627108 -1.440687 1.295052
 C -2.625482 -2.171495 1.935038
 H -1.582558 -2.075796 1.635416
 C -2.963120 -3.043810 2.965953
 H -2.172784 -3.611979 3.451954
 C -4.288491 -3.182620 3.358945
 H -4.549430 -3.865182 4.165971
 C -5.289496 -2.455174 2.716648
 H -6.328506 -2.569125 3.020144
 C -4.962976 -1.589849 1.681881
 H -5.748901 -1.034760 1.172007
 Pb 0.011059 1.218426 -0.009954

$^3(Y_{CN})_2Pb$

E = -2341.30395058
 C 2.803793 -1.941742 0.484880
 C 2.441236 -2.987357 -0.365735
 C 2.455895 -4.299637 0.095171
 H 2.182950 -5.109758 -0.578560
 C 2.827215 -4.576093 1.406585
 H 2.845674 -5.604778 1.762767

C 3.175435 -3.535331 2.263160
 H 3.462024 -3.745655 3.291894
 C 3.167587 -2.222928 1.807391
 H 3.438246 -1.411467 2.481219
 H 2.159698 -2.780566 -1.395940
 P 2.737953 -0.186932 -0.023223
 C -1.841628 0.556423 -1.082249
 P -2.944605 -0.241676 0.020710
 C 1.466117 0.694071 0.677361
 C -1.926178 0.285990 -2.420232
 C 1.416684 0.556743 2.063874
 C 3.758817 0.166376 -2.616077
 H 4.710064 0.412857 -2.150799
 N -1.955491 0.066297 -3.577958
 C 1.316577 -0.435326 -3.822347
 H 0.355064 -0.647169 -4.283380
 N 1.354032 0.405852 3.225175
 C 2.653656 -0.154729 -1.827582
 C 3.639593 0.187106 -4.001873
 H 4.502438 0.446443 -4.612215
 C 2.422922 -0.114863 -4.603048
 H 2.332099 -0.093590 -5.687527
 C 1.429345 -0.449842 -2.437270
 H 0.569067 -0.694265 -1.816516
 C 4.411560 0.398452 0.429617
 C 4.543087 1.688319 0.939381
 H 3.646747 2.292611 1.074077
 C 5.799447 2.176155 1.283857
 H 5.897650 3.181480 1.688759
 C 6.925231 1.377157 1.118963
 H 7.907757 1.758204 1.391682
 C 6.797440 0.085092 0.614407
 H 7.678031 -0.542900 0.492505
 C -3.406682 0.921331 1.314506
 C 5.543635 -0.406725 0.274567
 H 5.440930 -1.421953 -0.106920
 C -3.704206 0.475606 2.602948

H -3.596630 -0.577081 2.857271
 C -4.120579 1.387760 3.566291
 H -4.340036 1.045011 4.574961
 C -4.246872 2.734419 3.240887
 H -4.568441 3.446193 3.998705
 C -3.954887 3.177434 1.954757
 H -4.044432 4.232193 1.704933
 C -3.526865 2.274638 0.989631
 H -3.282699 2.615486 -0.014960
 H -5.537381 -2.661307 -3.401240
 H -3.463975 -1.827910 -2.374453
 C -4.478540 -0.853411 -0.725601
 C -5.719697 -0.557956 -0.154100
 H -5.775301 0.040219 0.752451
 C -6.885947 -1.025981 -0.746837
 H -7.848749 -0.792209 -0.297300
 C -6.822938 -1.785843 -1.909803
 H -7.738442 -2.148200 -2.373217
 C -5.590375 -2.076401 -2.485582
 C -4.418967 -1.611708 -1.901752
 C -2.081049 -1.620409 0.794089
 C -1.100406 -1.306572 1.738569
 H -0.918508 -0.277264 2.040015
 C -0.351637 -2.321408 2.319392
 H 0.406063 -2.049964 3.050654
 C -0.577544 -3.643569 1.951756
 H 0.011426 -4.437611 2.405091
 C -1.554147 -3.956504 1.009525
 H -1.732632 -4.992717 0.729623
 C -2.311075 -2.948664 0.425863
 H -3.081040 -3.198161 -0.300062
 Pb 0.041976 2.229360 -0.341468

3.3.4.2 Koordinaten der mit zwei unterschiedlichen Yliden substituierten Plumbylene

YPb^{Pip}Y_S

E = -4200.06324500

Pb -0.136958 0.970745 -1.539492
 C -1.744988 -0.083329 -0.058240
 C 1.879106 0.485333 -0.427687
 S 1.039165 -1.418748 -2.600129
 P 2.349375 -1.002184 -1.105381
 S -2.065434 1.122089 1.057630
 O -2.435052 0.665998 2.416335
 O -0.917890 2.071747 0.946888
 C -3.501304 2.062488 0.514829
 P 2.436166 1.418355 0.841745
 N 1.925549 0.976514 2.373968
 C 1.967007 3.146581 0.535393
 C 4.255185 1.407235 1.002126
 C 2.311405 -2.430778 0.044486
 C 4.036721 -1.020961 -1.800836
 P -2.738606 -1.444705 -0.138627
 C -2.409510 -2.209705 -1.751354
 C -2.534443 -2.729028 1.144332
 C -4.528259 -1.091246 0.040618
 C 0.898391 -0.025900 2.594214
 C 2.484945 1.558040 3.579666
 C 3.043349 0.483764 4.501850
 C 2.002162 -0.596569 4.765694
 C 1.449029 -1.147939 3.458505
 C 5.084707 2.464119 0.627715
 C 4.826776 0.190401 1.384626
 C 6.203521 0.017597 1.357357
 C 7.025959 1.068250 0.960374
 C 6.465874 2.291555 0.608336
 C 1.281546 3.890644 1.493205
 C 2.254905 3.719514 -0.707860
 C 0.912971 5.202947 1.222521
 C 1.221027 5.776740 -0.005769
 C 1.888502 5.032892 -0.974847
 C 4.626203 -2.218855 -2.213743
 C 4.711564 0.180270 -2.008675
 C 5.893377 -2.213752 -2.782746

C 6.577651 -1.012970 -2.953247
 C 5.981677 0.184406 -2.573042
 C 1.050707 -2.952968 0.348834
 C 3.443434 -2.990116 0.640661
 C 0.925914 -4.030375 1.214909
 C 2.059160 -4.585892 1.804705
 C 3.314772 -4.061038 1.521761
 C -4.567253 2.247501 1.381965
 C -3.552104 2.577080 -0.777122
 C -5.695740 2.933091 0.944908
 C -5.777989 3.440412 -0.350894
 C -4.681326 3.259440 -1.201287
 C -7.019711 4.125975 -0.836324
 C -1.836321 -2.399691 2.303159
 C -3.197705 -3.957635 1.055566
 C -1.797522 -3.297113 3.367191
 C -2.429868 -4.529998 3.265679
 C -3.127030 -4.863564 2.105428
 C -5.296404 -0.611485 -1.023034
 C -5.090625 -1.138629 1.319997
 C -6.407787 -0.743127 1.521788
 C -7.170867 -0.281738 0.456361
 C -6.609750 -0.210144 -0.814741
 C -1.903123 -3.501667 -1.891023
 C -2.527956 -1.396376 -2.885114
 C -2.175794 -1.880294 -4.136848
 C -1.685156 -3.175903 -4.269317
 C -1.544357 -3.979912 -3.146522
 H 1.699985 2.121525 4.114489
 H 3.264589 2.280812 3.306570
 H 3.376617 0.944762 5.441136
 H 3.930139 0.037684 4.030926
 H 1.174682 -0.163615 5.349317
 H 2.431253 -1.399551 5.379115
 H 2.241766 -1.670227 2.903548
 H 0.665998 -1.891066 3.648470
 H 0.559024 -0.389577 1.617270

H 0.025069 0.442477 3.074121
 H 4.173679 -0.624684 1.693696
 H 6.636750 -0.939383 1.642657
 H 8.105674 0.934784 0.932516
 H 7.108065 3.119957 0.314656
 H 4.654546 3.422284 0.344305
 H 0.991499 3.422523 2.428940
 H 0.363933 5.773403 1.968831
 H 0.925680 6.803049 -0.216492
 H 2.113748 5.472827 -1.944461
 H 2.754484 3.120800 -1.469588
 H 4.087859 -3.157365 -2.089295
 H 6.349088 -3.150972 -3.097142
 H 7.573534 -1.011913 -3.392862
 H 6.506054 1.127614 -2.714595
 H 4.229620 1.110737 -1.719496
 H 0.173568 -2.507310 -0.119776
 H -0.059062 -4.442317 1.426206
 H 1.961304 -5.431966 2.482488
 H 4.203388 -4.493069 1.978779
 H 4.432056 -2.599675 0.408319
 H -4.500470 1.836780 2.386186
 H -6.536392 3.065956 1.625291
 H -4.717095 3.658897 -2.214412
 H -2.712794 2.434752 -1.456176
 H -7.598496 4.545329 -0.006283
 H -7.673882 3.418959 -1.366495
 H -6.786365 4.936531 -1.536143
 H -1.363761 -1.423639 2.371607
 H -1.269371 -3.028616 4.279813
 H -2.390934 -5.232950 4.095902
 H -3.632544 -5.824287 2.028364
 H -3.783234 -4.199552 0.169224
 H -4.491805 -1.468180 2.165592
 H -6.834379 -0.788295 2.521971
 H -8.200982 0.031391 0.616039
 H -7.198209 0.158959 -1.652657

H -4.876390 -0.555580 -2.023487
H -2.857086 -0.364125 -2.774416
H -2.263493 -1.236229 -5.009328
H -1.390274 -3.548912 -5.247974
H -1.128887 -4.980921 -3.239816
H -1.744152 -4.128375 -1.017696

³YPb^{Pip}Y_S

E = -4199.96282368
Pb -0.218015 0.504138 -1.313860
C -1.943265 0.131793 0.122994
C 1.799207 0.079618 -0.250093
S 1.283749 -2.575445 -1.775146
P 2.568136 -1.358609 -0.895065
S -2.430829 1.365554 1.194875
O -2.614372 0.810675 2.551977
O -1.521391 2.508479 1.021545
C -4.042749 1.940598 0.683067
P 2.445858 1.359108 0.670136
N 1.937638 1.336112 2.275348
C 1.980210 2.917843 -0.132039
C 4.263290 1.396436 0.870259
C 3.423474 -2.210884 0.472725
C 3.886985 -0.869791 -2.072588
P -2.797694 -1.340530 -0.070048
C -2.855314 -1.737369 -1.836305
C -2.052579 -2.767662 0.761404
C -4.505517 -1.311412 0.572284
C 0.615276 0.844881 2.657083
C 2.524892 2.211407 3.280920
C 2.651567 1.480401 4.608729
C 1.298122 0.948852 5.060753
C 0.668116 0.091312 3.972847
C 5.087013 2.225761 0.107275
C 4.849033 0.502566 1.773799
C 6.229836 0.400757 1.872762
C 7.045236 1.210323 1.086032

C 6.470495 2.132314 0.218375
 C 1.220860 3.870944 0.544231
 C 2.342721 3.134448 -1.469795
 C 0.818597 5.028554 -0.113417
 C 1.186824 5.246248 -1.434820
 C 1.955750 4.299300 -2.112238
 C 3.529715 -0.750858 -3.419012
 C 5.179229 -0.513416 -1.678428
 C 4.441242 -0.269783 -4.349903
 C 5.728176 0.082803 -3.951434
 C 6.094258 -0.046200 -2.616700
 C 2.885901 -2.116757 1.756515
 C 4.540461 -3.020457 0.257147
 C 3.470498 -2.796430 2.818994
 C 4.602424 -3.576905 2.605112
 C 5.132165 -3.689887 1.321808
 C -5.107084 1.909436 1.571618
 C -4.216039 2.395988 -0.620283
 C -6.365913 2.303660 1.135708
 C -6.578518 2.726215 -0.177710
 C -5.480962 2.776013 -1.044259
 C -7.953232 3.088563 -0.653453
 C -0.709737 -2.734464 1.131780
 C -2.812480 -3.923622 0.972133
 C -0.131367 -3.857985 1.713716
 C -0.887196 -5.004274 1.926687
 C -2.229038 -5.039205 1.556187
 C -5.610995 -1.112737 -0.256661
 C -4.685799 -1.421404 1.954996
 C -5.962871 -1.347046 2.495432
 C -7.063575 -1.155057 1.666184
 C -6.885814 -1.035070 0.292364
 C -2.378191 -2.951959 -2.334556
 C -3.358110 -0.770306 -2.720506
 C -3.370522 -1.017404 -4.083862
 C -2.875093 -2.222998 -4.580034
 C -2.382789 -3.184419 -3.704467

H 1.887495 3.102187 3.423801
 H 3.500314 2.570188 2.936698
 H 3.076856 2.160491 5.358263
 H 3.360515 0.648065 4.488725
 H 0.633615 1.800191 5.272765
 H 1.395466 0.386952 5.998557
 H 1.246383 -0.836232 3.853244
 H -0.357471 -0.194914 4.235465
 H 0.223208 0.213485 1.854055
 H -0.077340 1.691306 2.755444
 H 4.214859 -0.113178 2.403122
 H 6.667247 -0.311951 2.569395
 H 8.128285 1.132751 1.161321
 H 7.101327 2.783349 -0.383627
 H 4.655191 2.950616 -0.576372
 H 0.886053 3.680431 1.559642
 H 0.195506 5.751717 0.408170
 H 0.867062 6.152059 -1.946638
 H 2.234294 4.462873 -3.151526
 H 2.897194 2.366639 -2.011003
 H 2.529429 -1.059805 -3.721193
 H 4.149386 -0.180681 -5.394916
 H 6.445791 0.451528 -4.682284
 H 7.098228 0.223711 -2.293330
 H 5.483810 -0.593058 -0.637159
 H 2.017763 -1.480839 1.917112
 H 3.043891 -2.708174 3.817331
 H 5.068527 -4.103827 3.435677
 H 6.009947 -4.309662 1.148044
 H 4.949088 -3.123451 -0.746275
 H -4.935617 1.557022 2.585612
 H -7.205424 2.268968 1.829312
 H -5.622781 3.125648 -2.066353
 H -3.360076 2.441111 -1.292716
 H -8.534894 3.580100 0.134552
 H -8.511459 2.190598 -0.954732
 H -7.917437 3.756512 -1.520811

H -0.120278 -1.839248 0.938676
H 0.920182 -3.841833 1.985683
H -0.426429 -5.879812 2.380497
H -2.821203 -5.937162 1.721383
H -3.861535 -3.947558 0.681203
H -3.823050 -1.550636 2.604428
H -6.097345 -1.436424 3.571614
H -8.063353 -1.097807 2.092870
H -7.743801 -0.884255 -0.359980
H -5.484056 -1.032283 -1.332924
H -3.708514 0.184492 -2.330262
H -3.755903 -0.262181 -4.766174
H -2.871191 -2.409393 -5.652137
H -1.981324 -4.119464 -4.089355
H -1.958703 -3.693390 -1.659146

$Y_{CN}Pb^{Pip}Y_S$

E = -3472.42849761
Pb 0.468912 -1.216471 -0.873415
S 0.144130 1.358867 -2.150634
P -1.179469 1.527272 -0.609186
C 2.085868 -0.523584 0.658952
C -1.307792 0.024452 0.185917
N 1.391589 -0.166269 3.096388
C 1.739699 -0.304409 1.984256
N -3.874976 -1.224191 -0.492547
P -2.668207 -0.827278 0.650829
C -5.061521 -0.407360 -0.720228
C -3.356290 -1.793893 -1.731244
C -0.602223 2.865406 0.486518
C -2.756708 2.192385 -1.253875
P 3.629612 -0.103447 0.119816
C 4.049847 1.667705 0.253412
C 5.031657 -0.970360 0.903408
C 3.731334 -0.542409 -1.639531
C -2.104049 -2.460200 1.225349
C -3.647352 -0.187303 2.042587

C -0.031895 2.547823 1.717133
 C -0.663068 4.198500 0.068553
 H 0.029032 1.510038 2.040142
 C 0.472627 3.558649 2.530625
 H 0.931149 3.291308 3.480490
 C 0.394345 4.885122 2.124277
 H 0.782896 5.676087 2.763586
 C -0.176354 5.204939 0.892446
 H -0.237001 6.243845 0.572234
 H -1.096704 4.444761 -0.900243
 C -3.072484 2.082996 -2.607875
 C -3.679115 2.763614 -0.372312
 H -2.333918 1.655398 -3.285195
 C -4.304157 2.531573 -3.075047
 H -4.543727 2.449470 -4.133730
 C -5.225182 3.088449 -2.192796
 H -6.187764 3.440053 -2.559711
 C -4.910776 3.205004 -0.841185
 H -5.624904 3.648489 -0.149877
 H -3.428342 2.874571 0.681291
 H -5.377412 0.056984 0.217212
 H -4.837894 0.408971 -1.423046
 C -6.170413 -1.261845 -1.309049
 H -7.061682 -0.641864 -1.471094
 H -6.444091 -2.046469 -0.588265
 C -5.706117 -1.890849 -2.614772
 H -5.536735 -1.091009 -3.351867
 H -6.479720 -2.546413 -3.034528
 C -4.408741 -2.658263 -2.406007
 H -4.599868 -3.538453 -1.774911
 H -4.015559 -3.029650 -3.361009
 H -3.027050 -0.986511 -2.412365
 H -2.463750 -2.392177 -1.506198
 C -0.930380 -2.526058 1.983893
 C -2.830341 -3.624454 0.969869
 H -0.379284 -1.618189 2.227669
 C -0.477379 -3.753695 2.454143

H 0.436155 -3.789527 3.044137
 C -1.191134 -4.915621 2.178584
 H -0.833043 -5.876129 2.544921
 C -2.369526 -4.848883 1.441412
 H -2.933610 -5.755644 1.230615
 H -3.753507 -3.562728 0.397148
 C 3.032661 2.574809 -0.056920
 C 5.295864 2.139097 0.671528
 H 2.058120 2.203856 -0.371888
 C 3.269828 3.941029 0.024067
 H 2.472351 4.636160 -0.228050
 C 4.512999 4.408243 0.439087
 H 4.695322 5.478891 0.514372
 C 5.522168 3.507979 0.766018
 H 6.491902 3.872119 1.100307
 H 6.087537 1.441237 0.934489
 C 4.870781 -1.474302 2.195477
 C 6.248970 -1.139410 0.237742
 H 3.920115 -1.349754 2.711773
 C 5.926884 -2.131503 2.817670
 H 5.799786 -2.519224 3.826506
 C 7.137736 -2.297912 2.153216
 H 7.959582 -2.818441 2.641556
 C 7.298177 -1.803896 0.861966
 H 8.242771 -1.938803 0.338301
 H 6.373072 -0.756194 -0.774534
 C 3.869997 -1.893908 -1.976128
 C 3.550334 0.406423 -2.645514
 H 4.008151 -2.633744 -1.188676
 C 3.827028 -2.287716 -3.307283
 H 3.934198 -3.339633 -3.564313
 C 3.639936 -1.337743 -4.307905
 H 3.600024 -1.647806 -5.350445
 C 3.501709 0.005030 -3.976785
 H 3.347943 0.748317 -4.756102
 H 3.427031 1.456193 -2.391037
 C -3.216420 0.945409 2.727491

C -4.774855 -0.883625 2.489369
H -2.314605 1.456452 2.395935
C -3.925702 1.400341 3.835708
H -3.583761 2.286181 4.367076
C -5.056326 0.716700 4.266547
H -5.607399 1.070161 5.136130
C -5.478658 -0.429461 3.595175
H -6.356665 -0.971845 3.940644
H -5.094294 -1.783637 1.964345

$^3Y_{CN}Pb^{Pip}Y_S$

E = -3472.34126621
Pb 0.364565 -1.602267 -0.771204
S 0.542872 1.060940 -1.996630
P -0.921578 1.415951 -0.633004
C 2.128535 -0.687356 0.617377
C -1.271314 -0.044248 0.181473
N 1.655370 -0.465388 3.112419
C 1.894919 -0.564469 1.961456
N -3.936106 -1.097256 -0.477260
P -2.739874 -0.683094 0.673141
C -4.960391 -0.148493 -0.901355
C -3.443579 -1.901147 -1.589473
C -0.346355 2.729594 0.498271
C -2.352036 2.182134 -1.476370
P 3.697964 -0.060614 -0.047081
C 4.072674 1.611944 0.484081
C 4.954128 -1.185251 0.629843
C 3.658028 -0.182969 -1.791210
C -2.397097 -2.280997 1.474652
C -3.712951 0.226222 1.914574
C 0.131003 2.377156 1.760495
C -0.318725 4.068839 0.099305
H 0.097185 1.334158 2.067349
C 0.621812 3.351910 2.622414
H 1.001343 3.058543 3.599072
C 0.624520 4.686405 2.232542

H 1.000321 5.452031 2.908987
 C 0.151842 5.043273 0.970988
 H 0.155041 6.087685 0.663074
 H -0.677005 4.347858 -0.890819
 C -2.556863 1.951411 -2.837983
 C -3.294791 2.920436 -0.754066
 H -1.802535 1.395494 -3.393954
 C -3.696177 2.442552 -3.466576
 H -3.846345 2.263437 -4.529759
 C -4.638216 3.166740 -2.741278
 H -5.528708 3.551934 -3.234608
 C -4.433594 3.407228 -1.385047
 H -5.162207 3.981385 -0.815638
 H -3.134718 3.123465 0.303185
 H -5.256566 0.475702 -0.054372
 H -4.564965 0.526395 -1.675272
 C -6.153732 -0.896143 -1.469299
 H -6.919597 -0.174778 -1.782178
 H -6.596289 -1.521909 -0.680361
 C -5.719134 -1.764526 -2.640808
 H -5.377021 -1.111600 -3.458284
 H -6.561837 -2.346460 -3.035158
 C -4.578880 -2.684048 -2.228264
 H -4.946638 -3.425395 -1.503912
 H -4.194490 -3.242851 -3.091091
 H -2.956462 -1.252504 -2.342565
 H -2.671565 -2.589695 -1.220843
 C -1.248190 -2.391960 2.264827
 C -3.271160 -3.363202 1.369233
 H -0.580271 -1.539587 2.373457
 C -0.975849 -3.580653 2.932807
 H -0.081962 -3.651497 3.549181
 C -1.840236 -4.663873 2.810330
 H -1.622557 -5.596249 3.328323
 C -2.987219 -4.554453 2.030271
 H -3.666548 -5.399635 1.936393
 H -4.168777 -3.267459 0.761371

C 3.249631 2.648296 0.018009
 C 5.129033 1.898725 1.356455
 H 2.406747 2.420102 -0.636072
 C 3.517941 3.957951 0.390767
 H 2.885138 4.758051 0.014877
 C 4.572724 4.242913 1.253348
 H 4.770972 5.270800 1.551202
 C 5.370943 3.210796 1.739891
 H 6.195922 3.429138 2.415255
 H 5.768800 1.100078 1.724116
 C 5.015246 -1.447694 2.004536
 C 5.908070 -1.743559 -0.225505
 H 4.274926 -1.026419 2.681430
 C 6.030322 -2.251632 2.510537
 H 6.078432 -2.445592 3.580299
 C 6.973475 -2.811812 1.655370
 H 7.762300 -3.446054 2.055464
 C 6.908045 -2.560456 0.286929
 H 7.643092 -2.998374 -0.385433
 H 5.860709 -1.530626 -1.291836
 C 3.241494 -1.437323 -2.322866
 C 3.887921 0.893929 -2.673533
 H 3.156884 -2.306951 -1.671551
 C 3.100276 -1.584490 -3.704291
 H 2.809544 -2.553755 -4.107096
 C 3.320104 -0.517707 -4.558024
 H 3.190227 -0.639147 -5.631104
 C 3.717392 0.730134 -4.029699
 H 3.898276 1.570171 -4.697007
 H 4.201465 1.857626 -2.279678
 C -3.189668 1.383360 2.482872
 C -4.937530 -0.274906 2.368342
 H -2.223153 1.750077 2.148850
 C -3.891803 2.054734 3.479449
 H -3.473344 2.959266 3.916324
 C -5.114841 1.562713 3.917813
 H -5.663828 2.083828 4.699997

C -5.635662 0.394496 3.363684
H -6.588929 0.002988 3.713652
H -5.338325 -1.191126 1.935824

3.3.4.3 Koordinaten der chlorido(ylid)substituierten Plumbylene

YPbCl

E = -2360.66356284
C 3.395759 -0.708270 -1.503688
H 3.172340 -0.211799 -2.444752
C 2.350286 -1.207309 -0.744355
O 0.128977 -2.391474 -1.473646
C -1.038391 3.737681 -0.912820
H -0.346946 4.215601 -0.219002
C 4.699261 -0.840185 -1.034603
H 5.522660 -0.442183 -1.626270
C -0.598729 0.615838 2.879044
H 0.009528 -0.246785 2.611595
C -0.906091 1.559577 1.893146
C 2.324892 1.728166 1.231440
H 1.951774 1.290804 2.155517
C 3.665790 2.070193 1.121819
H 4.336303 1.902833 1.962315
Pb -1.663608 -2.229330 0.211465
C 3.292846 2.822669 -1.136477
H 3.671437 3.239956 -2.067404
C 1.950805 2.472858 -1.037139
H 1.290904 2.590375 -1.893410
C -1.179812 2.344815 -0.919242
C 2.593242 -1.846011 0.468343
H 1.759301 -2.226095 1.056127
C -1.709713 2.653900 2.215995
H -1.980643 3.378710 1.452702
C 1.457704 1.941678 0.157195
C 6.371705 -1.574460 0.703059
H 6.602719 -2.601412 1.011206
H 6.516543 -0.934809 1.584259

H 7.105267 -1.272634 -0.051428
 C 4.148843 2.626820 -0.059231
 H 5.199934 2.896705 -0.142504
 C -0.267786 -0.376955 -0.062440
 P -0.242485 1.293721 0.222282
 O 0.770187 -0.162852 -2.524253
 S 0.668690 -0.983099 -1.311661
 C 4.970479 -1.462147 0.182561
 C 3.894771 -1.969077 0.923686
 H 4.086703 -2.466019 1.874036
 C -1.076891 0.775575 4.173687
 H -0.833331 0.037543 4.935427
 C -1.871479 1.872526 4.491842
 H -2.251524 1.994596 5.504279
 C -2.188802 2.806951 3.512293
 H -2.821900 3.658085 3.754354
 C -2.627341 3.894245 -2.714496
 H -3.194654 4.500864 -3.418138
 C -1.765354 4.509584 -1.808121
 H -1.655404 5.592302 -1.805830
 C -2.756184 2.510964 -2.728524
 H -3.423281 2.026485 -3.438238
 C -2.029416 1.729299 -1.835646
 H -2.126768 0.645390 -1.847939
 Cl -3.590149 -1.419921 -1.258554

³YPbCl

E = -2360.57781988
 C 3.308226 -0.801277 -1.729570
 H 3.176213 -0.095477 -2.545944
 C 2.193860 -1.441734 -1.203981
 O -0.022309 -2.320334 -2.271776
 C -0.554395 3.689808 0.107217
 H 0.204636 3.868920 0.868033
 C 4.555097 -1.066582 -1.184604
 H 5.432560 -0.564231 -1.589844
 C 0.238036 -0.475061 2.617415

H 0.737058 -1.212735 1.989446
 C -0.187394 0.741796 2.063293
 C 2.829722 1.199778 1.146400
 H 2.528416 0.650904 2.035381
 C 4.156981 1.579280 0.986492
 H 4.887612 1.316708 1.749121
 Pb -2.478417 -1.445791 0.234606
 C 3.611471 2.625351 -1.116390
 H 3.916455 3.180544 -2.001051
 C 2.283472 2.246749 -0.968121
 H 1.553872 2.484818 -1.739264
 C -0.805437 2.391199 -0.353927
 C 2.314292 -2.363273 -0.168392
 H 1.432874 -2.892334 0.192185
 C -0.827407 1.686605 2.869467
 H -1.176383 2.624375 2.444476
 C 1.888378 1.540085 0.172319
 C 6.051328 -2.173489 0.505012
 H 6.040497 -3.012573 1.207859
 H 6.381090 -1.280886 1.054709
 H 6.810199 -2.377003 -0.259760
 C 4.546956 2.295577 -0.140123
 H 5.585747 2.597841 -0.259323
 C -0.315889 -0.479645 -0.463466
 P 0.150907 1.020872 0.311301
 O 0.712064 0.072449 -2.757874
 S 0.576649 -1.068735 -1.837489
 C 4.703437 -1.948473 -0.109332
 C 3.567189 -2.596743 0.383170
 H 3.670387 -3.306802 1.202463
 C 0.004510 -0.744466 3.958441
 H 0.326276 -1.693940 4.381201
 C -0.645050 0.193642 4.756504
 H -0.832532 -0.021723 5.806310
 C -1.055220 1.406845 4.210179
 H -1.567923 2.138596 4.830931
 C -2.212455 4.526712 -1.425223

H -2.768398 5.363961 -1.843055
 C -1.267005 4.754193 -0.427227
 H -1.079231 5.764580 -0.069837
 C -2.439242 3.238419 -1.895788
 H -3.171146 3.052524 -2.678482
 C -1.734833 2.162173 -1.367868
 H -1.920090 1.158870 -1.748718
 Cl -3.482222 -0.737951 -2.036964

^{cy}YPbCl

E = -2371.54685752
 Pb -1.736010 -2.196279 -0.184103
 O -0.025592 -2.285701 -1.924830
 Cl -0.436419 -3.231289 1.797932
 S 0.556017 -0.898190 -1.694662
 C -0.358311 -0.329241 -0.427377
 C 2.237885 -1.198165 -1.172909
 O 0.677777 -0.043074 -2.886782
 P -0.367096 1.287499 0.102593
 C 3.283366 -0.669166 -1.913802
 C 2.474945 -1.910635 0.000763
 C 1.180898 2.201668 -0.320973
 C -0.714465 1.244928 1.903921
 C -1.742892 2.260269 -0.657259
 C 4.588527 -0.834355 -1.457871
 C 3.779924 -2.065208 0.437795
 C 2.353578 1.831959 0.591003
 C 1.037427 3.723597 -0.403730
 C 0.200865 0.311318 2.697549
 C -0.851826 2.602077 2.588226
 C -1.600220 2.198424 -2.179803
 C -3.113821 1.743934 -0.221935
 C 4.857857 -1.524849 -0.277107
 C 3.646311 2.456345 0.084556
 C 2.339173 4.363433 -0.876118
 C -0.359997 0.118436 4.099204
 C -1.386875 2.420715 4.005545

C -2.727725 2.938763 -2.883912
 C -4.242919 2.469513 -0.944620
 C 6.261799 -1.702417 0.217087
 C 3.522428 3.969513 -0.004854
 C -0.532222 1.452592 4.814355
 C -4.084516 2.400450 -2.456002
 H 3.061131 -0.126951 -2.829935
 H 1.644833 -2.325472 0.573192
 H 1.398843 1.821177 -1.333250
 H -1.709569 0.766825 1.905201
 H -1.639049 3.301444 -0.316460
 H 5.413811 -0.413586 -2.031087
 H 3.968844 -2.616428 1.358257
 H 2.454576 0.744654 0.679714
 H 2.149824 2.220361 1.599536
 H 0.767999 4.122431 0.585737
 H 0.232046 4.006841 -1.089186
 H 0.298463 -0.650841 2.183422
 H 1.204489 0.746397 2.772930
 H 0.136387 3.084783 2.628623
 H -1.508004 3.273887 2.017960
 H -1.596245 1.142953 -2.483531
 H -0.623509 2.584749 -2.498041
 H -3.244978 1.852737 0.862256
 H -3.169942 0.666513 -0.446993
 H 3.877159 2.045090 -0.907992
 H 4.478071 2.168838 0.740250
 H 2.530563 4.042540 -1.911090
 H 2.224119 5.454619 -0.904917
 H 0.296949 -0.546543 4.673060
 H -1.328514 -0.399536 4.028070
 H -2.415610 2.033240 3.945340
 H -1.450985 3.393331 4.510249
 H -2.603022 2.851581 -3.970393
 H -2.670686 4.012686 -2.647288
 H -5.209042 2.050187 -0.635488
 H -4.246950 3.524079 -0.629004

H 6.365418 -1.356609 1.253131
H 6.552438 -2.761035 0.203141
H 6.978207 -1.149988 -0.399450
H 3.382829 4.382847 1.006111
H 4.447343 4.411951 -0.396286
H -0.969889 1.305466 5.810098
H 0.460005 1.901825 4.975941
H -4.894750 2.951874 -2.949802
H -4.174180 1.353229 -2.782244

$^3(^{Cy}Y)PbCl$

E = -2371.46764186
Pb -2.456524 -1.607971 -0.267582
O -0.236899 -1.739217 -2.832523
Cl -1.069443 -3.272383 1.208335
S 0.515742 -0.696905 -2.147770
C -0.381023 -0.249622 -0.705388
C 2.009333 -1.395848 -1.496143
O 0.895501 0.516770 -2.898385
P 0.064049 1.214808 0.180237
C 3.233695 -0.916712 -1.943612
C 1.926989 -2.400415 -0.533510
C 1.773185 1.871005 -0.090862
C -0.296903 0.839319 1.930837
C -1.097634 2.546713 -0.345026
C 4.398907 -1.440132 -1.397803
C 3.102518 -2.889199 0.016260
C 2.820760 1.165879 0.775614
C 1.886115 3.391234 0.072544
C 0.434477 -0.381057 2.491774
C -0.214045 2.027212 2.885915
C -1.022224 2.738045 -1.861369
C -2.538681 2.334287 0.113820
C 4.353518 -2.420619 -0.402912
C 4.221884 1.640506 0.416891
C 3.300763 3.867919 -0.240149
C -0.212365 -0.777669 3.810694

C -0.830342 1.635989 4.226577
 C -1.910635 3.888311 -2.310949
 C -3.424957 3.483030 -0.354548
 C 5.612553 -2.982713 0.183486
 C 4.349136 3.145322 0.590809
 C -0.189049 0.378626 4.802259
 C -3.348726 3.679542 -1.861489
 H 3.255655 -0.134806 -2.700268
 H 0.961196 -2.782439 -0.198293
 H 1.960159 1.623068 -1.146790
 H -1.355933 0.537251 1.837092
 H -0.716864 3.451227 0.153351
 H 5.364969 -1.072069 -1.740888
 H 3.043968 -3.657468 0.785986
 H 2.745352 0.076353 0.683833
 H 2.631815 1.411505 1.829922
 H 1.619327 3.673822 1.102568
 H 1.186657 3.907558 -0.592927
 H 0.382353 -1.219019 1.788386
 H 1.491098 -0.146179 2.663812
 H 0.839587 2.308959 3.032462
 H -0.723909 2.910473 2.477002
 H -1.340767 1.806765 -2.349725
 H 0.013239 2.886236 -2.190571
 H -2.593295 2.245168 1.205468
 H -2.915413 1.384650 -0.291107
 H 4.435349 1.373371 -0.627184
 H 4.958931 1.108352 1.031472
 H 3.501049 3.690530 -1.307289
 H 3.361919 4.953024 -0.088176
 H 0.300594 -1.654640 4.223361
 H -1.244786 -1.098306 3.609164
 H -1.906106 1.459211 4.077020
 H -0.746201 2.471101 4.933803
 H -1.855122 3.988736 -3.401786
 H -1.528843 4.831738 -1.890134
 H -4.459020 3.296549 -0.038842

H -3.108313 4.409633 0.149020
H 5.524165 -3.114254 1.267952
H 5.831363 -3.970980 -0.243273
H 6.474250 -2.337911 -0.017860
H 4.215597 3.402697 1.652826
H 5.355071 3.483974 0.312630
H -0.691797 0.097316 5.736301
H 0.855941 0.601882 5.068925
H -3.976193 4.525851 -2.168030
H -3.756468 2.789448 -2.363469

(^{Pip}Y_s)PbCl

E = -2764.08357667
S -0.702134 -2.288288 -2.269419
P -1.241063 -1.262658 -0.599507
Pb 1.711421 -0.878768 -1.749333
C 0.035765 -0.173639 -0.255609
C -2.842146 -0.426512 -0.805466
C -1.533100 -2.508124 0.702424
Cl 2.939759 -2.302512 0.077310
P 0.124765 1.258357 0.608780
C -3.427986 -0.290057 -2.061255
C -3.427373 0.189231 0.305594
C -2.808115 -2.921861 1.089071
C -0.404905 -3.104956 1.274837
N 0.130556 1.156309 2.289822
C -1.162207 2.479088 0.189205
C 1.705443 2.057950 0.191240
C -4.593683 0.456390 -2.205250
C -4.589844 0.933129 0.158600
C -2.953804 -3.907095 2.062016
C -0.558366 -4.088235 2.241890
C -0.291021 -0.052486 2.973928
C 0.786597 2.129913 3.146647
C -1.805703 3.230401 1.171593
C -1.535131 2.628550 -1.149777
C 2.873781 1.320685 0.425307

C 1.793349 3.328676 -0.377677
 C -5.174085 1.066417 -1.098853
 C -1.832003 -4.487014 2.642124
 C 0.887147 -0.736805 3.644018
 C 1.976120 1.517035 3.874182
 C -2.805757 4.131088 0.817782
 C -2.532206 3.527989 -1.500491
 C 4.111814 1.847877 0.076417
 C 3.037261 3.854056 -0.715341
 C 1.583783 0.231004 4.591612
 C -3.167379 4.281507 -0.516079
 C 4.194519 3.115893 -0.491679
 H -2.958934 -0.773246 -2.917387
 H -2.963713 0.092881 1.288850
 H -3.691320 -2.480894 0.632186
 H 0.594285 -2.796891 0.962224
 H -5.051811 0.558750 -3.187286
 H -5.035688 1.419090 1.024177
 H -3.950750 -4.223032 2.363851
 H 0.325004 -4.547242 2.682009
 H -0.765743 -0.721325 2.253601
 H -1.054645 0.211346 3.726410
 H 0.057149 2.507160 3.885928
 H 1.099891 2.992158 2.545986
 H -1.535550 3.095559 2.216656
 H -1.057032 2.007507 -1.906390
 H 2.814513 0.321615 0.860640
 H 0.890952 3.908664 -0.559378
 H -6.084819 1.651200 -1.214431
 H -1.949119 -5.256563 3.403138
 H 1.579234 -1.079203 2.859276
 H 0.541900 -1.631192 4.178504
 H 2.763573 1.302087 3.140064
 H 2.388675 2.248596 4.581476
 H -3.308276 4.712601 1.588483
 H -2.828005 3.629681 -2.542690
 H 5.010523 1.259150 0.248542

H 3.100328 4.845850 -1.158833
H 0.900088 0.474388 5.420410
H 2.467437 -0.235064 5.045032
H -3.954608 4.981219 -0.790653
H 5.164172 3.529211 -0.762580

$^3(\text{PipY}_s)\text{PbCl}$

E = -2764.00133781
S 1.072209 1.446565 -2.579623
P 1.132535 1.372845 -0.593645
Pb -2.270431 1.202462 -1.072252
C -0.140260 0.243463 -0.199131
C 2.786734 0.910760 0.021189
C 0.827712 2.949971 0.242282
Cl -3.092573 1.016769 1.456897
P 0.187562 -1.431698 0.133195
C 3.829852 0.637790 -0.860138
C 2.993313 0.821933 1.400315
C 1.619325 4.039170 -0.126117
C -0.131941 3.082351 1.245974
N 0.307674 -1.679694 1.778723
C 1.712869 -2.043292 -0.626237
C -1.142664 -2.484620 -0.479830
C 5.076245 0.273229 -0.362323
C 4.234416 0.438382 1.891487
C 1.453762 5.260318 0.514012
C -0.287047 4.308266 1.885937
C 0.031469 -0.666278 2.790770
C 0.373340 -3.051810 2.272889
C 2.782847 -2.486583 0.152218
C 1.830303 -2.005306 -2.019484
C -2.443982 -2.157923 -0.070601
C -0.923231 -3.611706 -1.274634
C 5.277373 0.165367 1.009413
C 0.502706 5.393541 1.522740
C -1.180874 -1.017273 3.636692
C -0.859596 -3.427371 3.077092

C 3.951267 -2.920759 -0.461287
 C 3.005432 -2.430932 -2.624753
 C -3.509077 -2.962946 -0.461812
 C -1.996458 -4.404423 -1.666184
 C -1.080288 -2.425858 4.200771
 C 4.061901 -2.896814 -1.847512
 C -3.288076 -4.079220 -1.259857
 H 3.646259 0.706601 -1.931507
 H 2.187816 1.072262 2.089204
 H 2.352635 3.929175 -0.924741
 H -0.789115 2.253147 1.508106
 H 5.891491 0.062213 -1.051807
 H 4.394242 0.368070 2.965816
 H 2.065413 6.112069 0.222986
 H -1.045773 4.411825 2.658807
 H -0.128981 0.293146 2.287164
 H 0.924284 -0.567357 3.431420
 H 1.271588 -3.153696 2.905830
 H 0.508977 -3.732161 1.422525
 H 2.709247 -2.466669 1.236472
 H 1.011592 -1.621380 -2.625152
 H -2.625135 -1.301641 0.580963
 H 0.083983 -3.879640 -1.584261
 H 6.252797 -0.124916 1.395689
 H 0.372207 6.352323 2.021382
 H -2.079921 -0.913937 3.016570
 H -1.275842 -0.275310 4.439526
 H -1.730675 -3.436091 2.407481
 H -0.739047 -4.445825 3.468354
 H 4.784800 -3.262724 0.148616
 H 3.097197 -2.392911 -3.708149
 H -4.516040 -2.705900 -0.140053
 H -1.821123 -5.282036 -2.284817
 H -0.238700 -2.486391 4.909377
 H -1.984634 -2.676758 4.768494
 H 4.980652 -3.231933 -2.325220
 H -4.125876 -4.703435 -1.565298

Y_{Ph}PbCl

E = -1772.06141690

P -1.057185 -0.113931 -0.000176

C 0.474524 0.636359 -0.131701

C 0.547033 2.104776 -0.065881

C -0.316799 2.881954 0.731734

H -1.048343 2.391266 1.369772

C -0.256861 4.269525 0.735653

H -0.945328 4.831435 1.365259

C 0.675032 4.937870 -0.050324

H 0.725157 6.024933 -0.046549

C 1.544394 4.191347 -0.840775

H 2.283572 4.694053 -1.462509

C 1.480658 2.805554 -0.851963

H 2.165368 2.242239 -1.479582

C -1.890676 -0.002323 1.632787

C -3.267990 0.152042 1.798518

H -3.921155 0.228500 0.932995

C -3.810268 0.228563 3.077337

H -4.884315 0.354477 3.199507

C -2.985749 0.152464 4.194606

H -3.414327 0.216732 5.192900

C -1.610523 0.011245 4.034193

H -0.958902 -0.030430 4.904696

C -1.064922 -0.056621 2.758945

H 0.014237 -0.129088 2.621632

C -0.874558 -1.900151 -0.298303

C -0.974107 -2.851402 0.716580

H -1.223690 -2.544200 1.729705

C -0.748794 -4.195480 0.432546

H -0.820606 -4.933566 1.228665

C -0.431432 -4.592728 -0.861030

H -0.254728 -5.644257 -1.078651

C -0.343665 -3.647865 -1.880092

H -0.101122 -3.958197 -2.894288

C -0.564791 -2.305518 -1.602263

H -0.498751 -1.561294 -2.394981

C -2.302753 0.395360 -1.231659
 C -2.132147 1.569531 -1.967430
 H -1.267927 2.203174 -1.786719
 C -3.064958 1.918921 -2.938388
 H -2.927400 2.836116 -3.507296
 C -4.161100 1.100364 -3.186908
 H -4.885639 1.377012 -3.950504
 C -4.325226 -0.080206 -2.468163
 H -5.173129 -0.731556 -2.670912
 C -3.397797 -0.434339 -1.496587
 H -3.516871 -1.369407 -0.949826
 Pb 2.200022 -0.787402 -0.051181
 Cl 4.054749 0.943677 0.142798

³Y_{Ph}PbCl

E = -1772.00882756
 P -1.064773 -0.305066 -0.088487
 C 0.173180 0.839277 0.353704
 C 0.015488 2.246571 0.530675
 C -1.215957 2.884535 0.834206
 H -2.116172 2.287972 0.941368
 C -1.287648 4.251323 1.034393
 H -2.244004 4.707389 1.284394
 C -0.145280 5.043062 0.918836
 H -0.207599 6.119140 1.069642
 C 1.075616 4.445668 0.605471
 H 1.969759 5.057045 0.499168
 C 1.162723 3.077746 0.423734
 H 2.108655 2.620125 0.140831
 C -1.362788 -1.467880 1.271753
 C -2.353471 -2.450349 1.164262
 H -2.970995 -2.509418 0.269596
 C -2.573193 -3.335733 2.212196
 H -3.341377 -4.100779 2.120096
 C -1.820091 -3.237401 3.377954
 H -1.995009 -3.930799 4.198168
 C -0.854744 -2.243412 3.500886

H -0.276007 -2.151651 4.417423
 C -0.626487 -1.358776 2.453544
 H 0.113444 -0.566551 2.560058
 C -0.451990 -1.177889 -1.554162
 C -0.769079 -2.509249 -1.837411
 H -1.354773 -3.102777 -1.141276
 C -0.289718 -3.097424 -3.000756
 H -0.521953 -4.139832 -3.209674
 C 0.496825 -2.366098 -3.886074
 H 0.880198 -2.837880 -4.788686
 C 0.802784 -1.037122 -3.610384
 H 1.443088 -0.463610 -4.276272
 C 0.325225 -0.439146 -2.453142
 H 0.616056 0.582867 -2.218571
 C -2.728785 0.291601 -0.557301
 C -3.765924 0.370422 0.377696
 H -3.619120 -0.002427 1.389661
 C -4.985767 0.930987 0.020537
 H -5.789662 0.984657 0.752008
 C -5.178313 1.422885 -1.267057
 H -6.134398 1.862358 -1.544472
 C -4.148614 1.350797 -2.198877
 H -4.295318 1.733077 -3.206880
 C -2.927767 0.786796 -1.848296
 H -2.127441 0.726709 -2.583282
 Pb 2.330696 -0.383850 0.602241
 Cl 3.254104 0.814642 -1.525183

$Y_{PhF}PbCl$

E = -2268.97034856
 P -1.016312 0.939422 0.055253
 C 0.082636 -0.351310 -0.103536
 C 1.517199 -0.057728 -0.058064
 C 2.317382 -0.401496 1.037297
 C 3.683138 -0.162925 1.068992
 C 4.303700 0.422275 -0.027037
 C 3.548595 0.765571 -1.141089

C 2.185325 0.510777 -1.149706
 C -1.362346 1.506330 1.759034
 C -2.009300 2.724105 1.994298
 H -2.296710 3.358731 1.156519
 C -2.276146 3.126700 3.295919
 H -2.781940 4.072888 3.478380
 C -1.886622 2.324330 4.366767
 H -2.088659 2.646346 5.386626
 C -1.230431 1.121336 4.135081
 H -0.911826 0.502126 4.971190
 C -0.969019 0.709202 2.831482
 H -0.435051 -0.219026 2.635726
 C -2.613089 0.432025 -0.642956
 C -3.809722 0.512705 0.069875
 H -3.816078 0.911048 1.081831
 C -4.993869 0.066443 -0.508710
 H -5.922171 0.118979 0.056356
 C -4.991029 -0.451788 -1.798748
 H -5.919515 -0.801108 -2.246161
 C -3.801017 -0.529078 -2.517000
 H -3.796260 -0.935060 -3.526452
 C -2.613870 -0.093986 -1.941942
 H -1.674089 -0.164323 -2.488512
 C -0.477013 2.476731 -0.753089
 C 0.598844 3.150050 -0.164720
 H 0.999601 2.806683 0.788575
 C 1.161909 4.250179 -0.796591
 H 2.005472 4.763521 -0.339806
 C 0.646520 4.693663 -2.010782
 H 1.087861 5.556003 -2.506441
 C -0.433734 4.037076 -2.589765
 H -0.842240 4.387552 -3.535445
 C -0.992813 2.925805 -1.968216
 H -1.831890 2.412088 -2.432235
 Pb -0.672493 -2.437765 -0.156265
 Cl 1.668475 -3.405569 -0.171872
 F 1.504957 0.825373 -2.247208

F 4.137087 1.322137 -2.190283
 F 5.605786 0.658529 -0.007584
 F 4.400702 -0.493975 2.131743
 F 1.766705 -0.974096 2.102873

³Y_{PhF}PbCl

E = -2268.91068733
 P -1.006581 1.034302 0.080958
 C 0.217906 -0.160496 0.440182
 C 1.613821 0.098846 0.348998
 C 2.528290 -0.738189 1.037753
 C 3.898600 -0.596027 0.934056
 C 4.432582 0.401678 0.123377
 C 3.579882 1.239587 -0.590453
 C 2.212962 1.088591 -0.466788
 C -2.483239 0.622996 1.051222
 C -2.677549 1.151733 2.328134
 H -1.981817 1.884275 2.730580
 C -3.769068 0.747814 3.088975
 H -3.914923 1.161049 4.084604
 C -4.670096 -0.180717 2.576074
 H -5.524346 -0.494712 3.172871
 C -4.487065 -0.700638 1.300011
 H -5.196067 -1.419088 0.894128
 C -3.396833 -0.302507 0.532186
 H -3.255860 -0.707107 -0.468166
 C -1.529205 0.989709 -1.645970
 C -2.714769 1.623814 -2.032602
 H -3.334838 2.129144 -1.292937
 C -3.110118 1.587625 -3.364217
 H -4.029747 2.082554 -3.669448
 C -2.335581 0.907570 -4.299849
 H -2.651632 0.873703 -5.340790
 C -1.169108 0.258578 -3.907333
 H -0.575579 -0.295807 -4.630706
 C -0.758851 0.294469 -2.580113
 H 0.135832 -0.248726 -2.273951

C -0.532445 2.719746 0.563999
 C 0.250171 2.867572 1.714326
 H 0.539902 1.991342 2.292989
 C 0.670765 4.130981 2.111642
 H 1.279651 4.240182 3.006671
 C 0.323102 5.248718 1.360557
 H 0.658203 6.237001 1.668764
 C -0.442710 5.101694 0.208580
 H -0.703933 5.973302 -0.387934
 C -0.868304 3.841871 -0.194164
 H -1.445400 3.733371 -1.109059
 Pb -0.581337 -2.520890 0.200516
 Cl 1.272597 -2.529197 -1.641067
 F 1.445222 1.869423 -1.221825
 F 4.085921 2.166428 -1.386512
 F 5.738708 0.550912 0.027896
 F 4.709760 -1.389200 1.610955
 F 2.068820 -1.688209 1.828636

Y_{CN}PbCl

E = -1633.02336116
 N -0.201451 -3.251274 1.397897
 C -0.320396 -2.170025 0.977722
 C -0.421882 -0.865343 0.471336
 Pb -2.378729 0.133220 0.041656
 P 1.046342 -0.096003 0.051160
 Cl -3.746110 -1.818299 0.838233
 C 2.004642 -0.975386 -1.221384
 C 0.643067 1.534771 -0.626251
 C 2.216058 0.200285 1.413363
 C 1.397079 -2.034198 -1.896488
 C 3.313136 -0.601427 -1.540572
 C 0.591252 1.746336 -2.004385
 C 0.253522 2.552645 0.251379
 C 3.064667 1.311413 1.421515
 C 2.269107 -0.723755 2.461158
 H 0.384474 -2.329979 -1.628965

C 2.095089 -2.712111 -2.890700
 C 4.000618 -1.275440 -2.540880
 H 3.799071 0.211023 -1.003191
 H 0.892420 0.953347 -2.686488
 C 0.151849 2.969295 -2.501128
 C -0.183161 3.772222 -0.251352
 H 0.297894 2.386710 1.327172
 H 3.019255 2.042873 0.615911
 C 3.962123 1.494105 2.467238
 C 3.171211 -0.534146 3.501293
 H 1.609526 -1.589711 2.463745
 H 1.623275 -3.544944 -3.407760
 C 3.391709 -2.331095 -3.215366
 H 5.018384 -0.982106 -2.790190
 H 0.110835 3.131933 -3.576057
 C -0.235388 3.979185 -1.626954
 H -0.485648 4.562483 0.432466
 H 4.617608 2.362739 2.471631
 C 4.016305 0.571086 3.506299
 H 3.209419 -1.255735 4.314601
 H 3.936288 -2.863300 -3.993003
 H -0.579442 4.934190 -2.019070
 H 4.717688 0.716008 4.325733

³Y_{CN}PbCl

E = -1632.96354057
 N 0.439061 0.975913 -3.506708
 C 0.138279 0.526514 -2.462120
 C -0.231642 -0.021620 -1.256553
 Pb -2.647539 -0.235185 -0.723123
 P 1.020193 -0.063057 -0.016253
 Cl -1.922708 1.767225 0.805467
 C 1.875255 1.513125 0.197476
 C 0.331918 -0.614714 1.542754
 C 2.301872 -1.255364 -0.499445
 C 1.208062 2.712381 -0.060635
 C 3.202578 1.520359 0.639553

C 0.455695 0.152923 2.699300
 C -0.376222 -1.821445 1.561957
 C 2.692886 -2.293696 0.348153
 C 2.926270 -1.094038 -1.742299
 H 0.168119 2.700857 -0.380530
 C 1.876538 3.916432 0.128345
 C 3.856949 2.729651 0.829932
 H 3.724195 0.583560 0.827328
 H 0.973288 1.108802 2.665811
 C -0.104329 -0.301138 3.885985
 C -0.926040 -2.272111 2.758283
 H -0.473616 -2.415913 0.654932
 H 2.218173 -2.417227 1.318520
 C 3.697470 -3.169864 -0.049290
 C 3.927509 -1.974034 -2.129229
 H 2.631318 -0.284722 -2.407959
 H 1.359346 4.851776 -0.073701
 C 3.193980 3.926614 0.572586
 H 4.888984 2.737500 1.174189
 H -0.014603 0.298109 4.789064
 C -0.790030 -1.513167 3.914289
 H -1.472248 -3.212521 2.780323
 H 3.999391 -3.977801 0.613916
 C 4.312637 -3.012730 -1.285657
 H 4.408242 -1.847338 -3.096861
 H 3.710949 4.873468 0.716833
 H -1.228382 -1.865176 4.846178
 H 5.096926 -3.701032 -1.594471

3.3.4.4 Koordinaten der hexamethyldisilazan(ylid)substituierten Plumbylene

YPbHMDS

E = -2774.44361354
 Pb 1.288741 -1.320002 1.263708
 S -0.932362 -1.263726 -0.866267
 P -1.072156 1.478494 -0.028623
 Si 3.876070 0.686030 0.357879

Si 3.475848 -1.845870 -1.339918
O 0.004485 -2.414008 -0.538441
O -1.025030 -0.884325 -2.284839
N 3.007245 -0.743654 -0.077391
C -0.473444 -0.083351 0.218808
C -2.553672 -1.888037 -0.437845
C -2.831958 -2.231654 0.882191
H -2.058807 -2.129131 1.642274
C -4.098807 -2.679196 1.216023
H -4.318739 -2.947652 2.248756
C -5.104790 -2.789260 0.246854
C -4.795515 -2.447644 -1.068168
H -5.564344 -2.527563 -1.835643
C -3.525834 -1.997846 -1.418151
H -3.277882 -1.717873 -2.438979
C -6.479754 -3.248346 0.628718
H -6.444523 -4.189522 1.191040
H -7.110365 -3.402967 -0.252689
H -6.977761 -2.509601 1.271114
C -2.845303 1.468762 -0.444704
C -3.788058 1.252704 0.563573
H -3.473859 1.221248 1.605443
C -5.125483 1.071234 0.238625
H -5.855099 0.902811 1.028180
C -5.530312 1.105835 -1.092936
H -6.579729 0.966093 -1.345428
C -4.592257 1.300821 -2.099582
H -4.902524 1.307885 -3.142569
C -3.249294 1.470985 -1.781848
H -2.511593 1.580661 -2.573048
C -0.306042 2.420390 -1.381038
C -0.837420 3.631249 -1.840389
H -1.717449 4.059842 -1.361283
C -0.263374 4.270812 -2.930409
H -0.675997 5.212730 -3.286511
C 0.827429 3.693971 -3.577721
H 1.268199 4.188155 -4.441484

C 1.344238 2.483961 -3.132253
 H 2.184912 2.026439 -3.648852
 C 0.784060 1.844332 -2.030512
 H 1.179056 0.892246 -1.675417
 C -0.846925 2.400341 1.519903
 C -0.958565 1.695068 2.721770
 H -1.185129 0.630692 2.689287
 C -0.762318 2.345312 3.933986
 H -0.847837 1.789737 4.865806
 C -0.447678 3.700348 3.954500
 H -0.285220 4.207618 4.903518
 C -0.331412 4.403967 2.760721
 H -0.073329 5.460875 2.772930
 C -0.529298 3.758727 1.545589
 H -0.407240 4.311701 0.617894
 C 4.450921 1.708939 -1.115982
 H 5.034280 2.574262 -0.772933
 H 3.594717 2.088482 -1.684059
 H 5.083449 1.135398 -1.803674
 C 2.727369 1.805003 1.359110
 H 3.260439 2.699397 1.708112
 H 2.298788 1.331507 2.257161
 H 1.893835 2.142835 0.731371
 C 5.386574 0.309551 1.420655
 H 6.112775 -0.296770 0.864543
 H 5.101611 -0.258066 2.316580
 H 5.893989 1.227387 1.747241
 C 2.679111 -1.344851 -2.965773
 H 3.004249 -0.331837 -3.241732
 H 1.585658 -1.335655 -2.864939
 H 2.942200 -2.020480 -3.790290
 C 2.971080 -3.607821 -0.907736
 H 3.342398 -4.298870 -1.676760
 H 1.882236 -3.725897 -0.860998
 H 3.410304 -3.920737 0.050005
 C 5.351173 -1.899427 -1.560704
 H 5.831622 -2.295597 -0.656473

H 5.796630 -0.920219 -1.772653

H 5.609586 -2.566423 -2.394384

³YPbHMDS

E = -2774.35141436

Pb -1.199382 -1.290169 -1.542483

S 0.890956 -1.236483 1.207938

P 0.913874 1.340995 -0.013043

Si -3.836709 0.724743 -0.069592

Si -3.265371 -1.962590 1.474747

O 0.060802 -2.446147 1.307433

O 1.101968 -0.449871 2.445534

N -2.914141 -0.765606 0.197857

C 0.318555 -0.262493 -0.072236

C 2.524353 -1.810612 0.740401

C 2.726210 -2.398313 -0.504120

H 1.887341 -2.514108 -1.188897

C 3.997504 -2.821395 -0.859491

H 4.157858 -3.277304 -1.836016

C 5.078890 -2.677778 0.017530

C 4.841930 -2.113125 1.270662

H 5.668426 -2.000865 1.971662

C 3.573466 -1.677761 1.637192

H 3.382540 -1.218437 2.603906

C 6.460006 -3.091626 -0.393623

H 6.439630 -3.967336 -1.052079

H 7.083376 -3.330091 0.474950

H 6.962534 -2.283490 -0.944090

C 2.712075 1.442435 0.307414

C 3.613282 1.153122 -0.720177

H 3.251244 0.941969 -1.723409

C 4.978593 1.135655 -0.469155

H 5.672172 0.909345 -1.276511

C 5.455497 1.408509 0.809406

H 6.526194 1.398609 1.004863

C 4.561657 1.678892 1.838898

H 4.928686 1.873603 2.844746

C 3.192880 1.685768 1.596093
 H 2.494390 1.851747 2.411744
 C 0.213472 2.433145 1.268668
 C 0.725187 3.713863 1.501216
 H 1.540063 4.096538 0.887563
 C 0.217292 4.488573 2.536103
 H 0.615065 5.486018 2.712429
 C -0.784677 3.978773 3.358073
 H -1.171138 4.579584 4.179227
 C -1.279110 2.697848 3.140883
 H -2.043889 2.287500 3.797860
 C -0.786316 1.926317 2.094452
 H -1.150628 0.915468 1.919717
 C 0.647296 2.119666 -1.633801
 C 0.881117 1.348844 -2.778619
 H 1.208832 0.316636 -2.669226
 C 0.710567 1.900116 -4.043397
 H 0.899185 1.292798 -4.926144
 C 0.283296 3.216371 -4.176782
 H 0.138720 3.644401 -5.166934
 C 0.032745 3.982301 -3.043586
 H -0.314797 5.008518 -3.142515
 C 0.216826 3.438327 -1.776844
 H -0.006308 4.040534 -0.900497
 C -4.498126 1.510222 1.503978
 H -5.150540 2.351015 1.231731
 H -3.676660 1.918062 2.102961
 H -5.075751 0.828086 2.135309
 C -2.832256 2.032422 -0.946763
 H -3.493695 2.867720 -1.216443
 H -2.356001 1.657167 -1.860652
 H -2.051942 2.428231 -0.288888
 C -5.252729 0.181329 -1.184404
 H -5.904292 -0.550833 -0.695787
 H -4.860477 -0.261903 -2.107844
 H -5.857798 1.057213 -1.454154
 C -2.529708 -1.324253 3.075703

H -2.940134 -0.338244 3.328776
H -1.439190 -1.255392 3.000576
H -2.774386 -2.016324 3.892247
C -2.719749 -3.680833 1.001065
H -3.051332 -4.383979 1.778021
H -1.634070 -3.750712 0.902644
H -3.191822 -3.981698 0.056593
C -5.145887 -2.089544 1.643218
H -5.583334 -2.512239 0.729922
H -5.657691 -1.147653 1.863963
H -5.363352 -2.788828 2.462232

Y_{Ph}PbHMDS

E = -2185.83884387
P -2.094408 0.048540 -0.066538
C -0.443819 0.396592 -0.330934
C -0.023055 1.777040 -0.594985
C -0.637799 2.906225 -0.017095
H -1.487515 2.775902 0.649524
C -0.163727 4.191107 -0.248001
H -0.661211 5.036175 0.225716
C 0.945052 4.401534 -1.061917
H 1.324005 5.407236 -1.232271
C 1.551649 3.303571 -1.667312
H 2.410264 3.446261 -2.322160
C 1.068435 2.021976 -1.448999
H 1.537375 1.173746 -1.937326
C -2.857262 0.743812 1.453742
C -4.164379 1.228568 1.519679
H -4.800010 1.217095 0.637745
C -4.655002 1.746095 2.714374
H -5.673535 2.127046 2.757642
C -3.848021 1.784069 3.846379
H -4.234878 2.194161 4.777295
C -2.540405 1.311789 3.782945
H -1.898323 1.354819 4.660413
C -2.045720 0.801910 2.589791

H -1.011920 0.462504 2.520550
 C -2.307381 -1.750460 0.093173
 C -2.639723 -2.369750 1.297054
 H -2.833005 -1.770391 2.183902
 C -2.716144 -3.758165 1.365152
 H -2.967801 -4.238154 2.308590
 C -2.469121 -4.527816 0.234643
 H -2.528033 -5.612971 0.292336
 C -2.150162 -3.912282 -0.973091
 H -1.961669 -4.513222 -1.860305
 C -2.069577 -2.528256 -1.046141
 H -1.818743 -2.040361 -1.987185
 C -3.227209 0.495864 -1.424944
 C -2.841094 1.432141 -2.385903
 H -1.868776 1.912865 -2.314780
 C -3.699034 1.738957 -3.436817
 H -3.393736 2.470786 -4.181900
 C -4.935174 1.110472 -3.540855
 H -5.600726 1.351207 -4.367705
 C -5.316818 0.164237 -2.594182
 H -6.277206 -0.340284 -2.680616
 C -4.465241 -0.144980 -1.541158
 H -4.758302 -0.898633 -0.810805
 Pb 0.971772 -1.249702 0.264150
 N 2.917802 -0.087828 0.016735
 Si 3.925562 -0.589733 -1.293088
 Si 3.458487 0.868440 1.355016
 C 2.946814 -1.773231 -2.401921
 H 2.696896 -2.719297 -1.901038
 H 2.011426 -1.313066 -2.755887
 H 3.534287 -2.028962 -3.294101
 C 4.490176 0.810087 -2.424494
 H 5.050395 1.581400 -1.884558
 H 5.145158 0.410503 -3.211190
 H 3.639513 1.296783 -2.917335
 C 5.468735 -1.501204 -0.704764
 H 6.081292 -1.858673 -1.543240

H 6.099447 -0.848555 -0.086348
H 5.191847 -2.367182 -0.088978
C 4.862586 2.037566 0.896973
H 5.191123 2.592058 1.786182
H 5.736822 1.512802 0.490945
H 4.524565 2.767650 0.150270
C 4.067713 -0.255107 2.748321
H 4.423984 0.313449 3.618031
H 3.263218 -0.920452 3.093525
H 4.889593 -0.894346 2.399384
C 2.078267 1.936747 2.059981
H 1.134488 1.388216 2.187263
H 2.369557 2.332306 3.042459
H 1.868283 2.785278 1.397421

³Y_{Ph}PbHMDS

E = -2185.78354357
P -2.176145 0.009055 0.009175
C -0.649771 0.389037 -0.736928
C -0.265526 1.687617 -1.167268
C -1.001304 2.878552 -0.909117
H -1.954367 2.817649 -0.390788
C -0.513895 4.120701 -1.266307
H -1.091691 5.012998 -1.032040
C 0.716316 4.236610 -1.917607
H 1.099384 5.217373 -2.192377
C 1.450583 3.087103 -2.209072
H 2.411106 3.166304 -2.714163
C 0.977507 1.841927 -1.839578
H 1.564074 0.951656 -2.039830
C -2.111913 0.336272 1.783589
C -2.456688 1.602562 2.266557
H -2.934674 2.327826 1.610581
C -2.184662 1.941685 3.584551
H -2.451324 2.929188 3.954384
C -1.558441 1.022762 4.424740
H -1.335060 1.294340 5.454560

C -1.218664 -0.238095 3.951655
 H -0.727603 -0.954596 4.606548
 C -1.491078 -0.589524 2.632819
 H -1.209425 -1.571901 2.260482
 C -2.486994 -1.751222 -0.240948
 C -3.283632 -2.476533 0.651660
 H -3.672773 -1.998531 1.549377
 C -3.567524 -3.810480 0.396418
 H -4.178431 -4.376368 1.096718
 C -3.070389 -4.424096 -0.752118
 H -3.292185 -5.471402 -0.947113
 C -2.296043 -3.698948 -1.651356
 H -1.910697 -4.175412 -2.550276
 C -2.006875 -2.362101 -1.405279
 H -1.399266 -1.789317 -2.104572
 C -3.675352 0.810667 -0.645326
 C -3.665292 1.273344 -1.963158
 H -2.746778 1.227183 -2.545774
 C -4.822552 1.804215 -2.519665
 H -4.810176 2.169040 -3.544562
 C -5.990194 1.873163 -1.766814
 H -6.894461 2.292672 -2.203402
 C -6.004544 1.406767 -0.455558
 H -6.918385 1.458460 0.132859
 C -4.851179 0.872661 0.106136
 H -4.863409 0.506410 1.131785
 Pb 1.036113 -1.453261 -0.132853
 N 2.846257 -0.029876 0.039027
 Si 4.227188 -0.387082 -0.941957
 Si 2.941515 1.089095 1.359855
 C 4.000777 -1.977384 -1.934150
 H 3.832631 -2.850617 -1.289266
 H 3.160709 -1.915686 -2.638010
 H 4.912205 -2.168517 -2.518114
 C 4.582568 0.961238 -2.219701
 H 4.637072 1.954515 -1.758230
 H 5.535120 0.773509 -2.733757

H 3.796133 0.986348 -2.986218
 C 5.797656 -0.648900 0.076340
 H 6.650235 -0.879175 -0.576857
 H 6.067006 0.227703 0.678025
 H 5.663592 -1.493173 0.765708
 C 4.079493 2.550498 0.983100
 H 4.148967 3.208657 1.859798
 H 5.098586 2.255172 0.706248
 H 3.663609 3.140151 0.155100
 C 3.559113 0.229747 2.924827
 H 3.625754 0.922779 3.774600
 H 2.866610 -0.577834 3.200939
 H 4.547844 -0.221030 2.774277
 C 1.286228 1.867868 1.807756
 H 0.479710 1.127771 1.861999
 H 1.365356 2.341554 2.796150
 H 0.993895 2.640504 1.086548

Y_{PhF}PbHMDS

E = -2682.74644667
 P -2.124545 -0.168083 -0.022279
 C -0.558518 0.206243 -0.573190
 C 0.032129 1.526008 -0.542471
 C -0.429451 2.615298 0.212420
 C 0.159346 3.868718 0.202621
 C 1.271846 4.101359 -0.595013
 C 1.760996 3.062302 -1.378286
 C 1.151092 1.820942 -1.343861
 C -2.325171 -0.376492 1.788605
 C -2.978014 0.554331 2.596104
 H -3.507902 1.390474 2.146594
 C -2.922446 0.435366 3.981510
 H -3.425055 1.173118 4.603671
 C -2.217993 -0.607924 4.569806
 H -2.169630 -0.690735 5.653730
 C -1.563181 -1.541182 3.769826
 H -0.998180 -2.354115 4.221323

C -1.614011 -1.418736 2.389592
 H -1.078922 -2.140344 1.767738
 C -2.597009 -1.787041 -0.722988
 C -3.328559 -2.735019 -0.005051
 H -3.578254 -2.558739 1.038700
 C -3.737064 -3.914062 -0.620551
 H -4.298152 -4.651929 -0.050696
 C -3.428790 -4.149870 -1.955199
 H -3.747312 -5.074476 -2.432667
 C -2.719047 -3.198543 -2.682163
 H -2.485620 -3.373492 -3.730422
 C -2.310923 -2.019715 -2.072675
 H -1.762285 -1.265321 -2.634670
 C -3.473312 0.925566 -0.566816
 C -3.206944 1.921928 -1.504806
 H -2.190828 2.062330 -1.867110
 C -4.240347 2.723327 -1.977623
 H -4.028034 3.504813 -2.704300
 C -5.539956 2.525062 -1.525021
 H -6.347197 3.153366 -1.896476
 C -5.811600 1.518851 -0.601941
 H -6.829993 1.355852 -0.254931
 C -4.782059 0.718126 -0.124864
 H -4.996991 -0.073974 0.591994
 Pb 0.840448 -1.602148 -0.674068
 N 2.600464 -0.600958 0.323878
 Si 4.105683 -0.829979 -0.518578
 Si 2.527774 -0.239304 2.023209
 C 3.794122 -1.572591 -2.231561
 H 3.416545 -2.603394 -2.186395
 H 3.105128 -0.970966 -2.838664
 H 4.747635 -1.609025 -2.776339
 C 5.008578 0.794267 -0.784426
 H 5.309748 1.257206 0.162109
 H 5.913380 0.647015 -1.389358
 H 4.356659 1.499446 -1.314134
 C 5.242020 -2.068095 0.343102

H 6.168352 -2.219012 -0.227453
H 5.523623 -1.758610 1.356464
H 4.737176 -3.040431 0.425327
C 4.092915 0.596383 2.661980
H 4.022869 0.699550 3.753325
H 5.017764 0.053385 2.437958
H 4.183968 1.605828 2.241101
C 2.285974 -1.853552 2.980926
H 2.189889 -1.693037 4.063190
H 1.380456 -2.378701 2.642648
H 3.134332 -2.529334 2.807437
C 1.145588 0.933076 2.520134
H 0.162643 0.665579 2.122410
H 1.068778 0.948196 3.616252
H 1.379097 1.952277 2.188511
F 1.652249 0.874638 -2.146265
F -1.476788 2.438494 1.025628
F -0.326879 4.841211 0.959934
F 1.850199 5.292410 -0.617882
F 2.806203 3.271611 -2.166947

³Y_{PhF}PbHMDS

E = -2682.68496579
P -2.216381 -0.170711 -0.015878
C -0.636167 0.287877 -0.598573
C -0.076565 1.587046 -0.622128
C -0.513711 2.680558 0.164603
C 0.113367 3.908743 0.175677
C 1.218901 4.120829 -0.646148
C 1.676308 3.090587 -1.464096
C 1.054049 1.857036 -1.438633
C -2.260634 -0.505439 1.760664
C -2.719681 0.457171 2.664775
H -3.182181 1.372049 2.304142
C -2.565749 0.251826 4.029121
H -2.920824 1.004506 4.729505
C -1.942570 -0.903080 4.496835

H -1.809381 -1.052105 5.566621
 C -1.496448 -1.867737 3.602033
 H -1.012983 -2.772039 3.965150
 C -1.660339 -1.680432 2.233817
 H -1.307133 -2.434911 1.533273
 C -2.626320 -1.712969 -0.863362
 C -3.486129 -2.648229 -0.276119
 H -3.859359 -2.490404 0.734253
 C -3.847145 -3.790366 -0.976951
 H -4.505868 -4.521823 -0.513351
 C -3.363986 -4.003104 -2.266143
 H -3.645451 -4.902267 -2.810397
 C -2.524683 -3.065086 -2.859640
 H -2.148441 -3.227472 -3.867428
 C -2.159401 -1.917510 -2.167967
 H -1.500012 -1.182781 -2.628015
 C -3.596766 0.944655 -0.409383
 C -3.425974 1.955832 -1.355270
 H -2.452420 2.114754 -1.814335
 C -4.502028 2.760627 -1.711494
 H -4.364113 3.551104 -2.446180
 C -5.748345 2.556909 -1.129896
 H -6.588299 3.190301 -1.408029
 C -5.923642 1.541856 -0.193611
 H -6.899203 1.378853 0.259743
 C -4.852962 0.733454 0.164632
 H -4.993088 -0.061015 0.896435
 Pb 0.897403 -1.769255 -0.599750
 N 2.616832 -0.522493 0.304064
 Si 4.132135 -0.614065 -0.540396
 Si 2.540140 -0.198523 2.004807
 C 3.938860 -1.305281 -2.285788
 H 3.598790 -2.349363 -2.293902
 H 3.239932 -0.717232 -2.891949
 H 4.919751 -1.277733 -2.781352
 C 4.949377 1.071607 -0.737306
 H 5.194175 1.533205 0.225607

H 5.881137 0.982414 -1.312336
 H 4.286946 1.754797 -1.282054
 C 5.346736 -1.781568 0.320549
 H 6.300039 -1.841456 -0.221831
 H 5.567733 -1.477233 1.350964
 H 4.921438 -2.793841 0.364211
 C 4.006223 0.804137 2.650003
 H 3.916611 0.907167 3.740130
 H 4.982161 0.352271 2.438367
 H 4.004240 1.814605 2.221534
 C 2.467056 -1.804535 2.997930
 H 2.407828 -1.620796 4.079341
 H 1.588702 -2.396802 2.705454
 H 3.357736 -2.416843 2.802333
 C 1.042634 0.836393 2.492880
 H 0.105361 0.466433 2.067324
 H 0.929690 0.839023 3.585771
 H 1.175404 1.877071 2.170327
 F 1.501201 0.928708 -2.261553
 F -1.536988 2.504513 0.993885
 F -0.317822 4.881664 0.960598
 F 1.812758 5.296635 -0.665203
 F 2.700237 3.310696 -2.270831

$Y_{CN}PbHMDS$

Nicht gefunden.

$^3Y_{CN}PbHMDS$

E = -2046.73232717
 N -2.853412 -0.101184 -0.137091
 C 0.461529 -0.109520 -0.831758
 Si -3.621287 0.235017 -1.663088
 C -2.614460 1.458002 -2.687186
 C -5.318488 1.017923 -1.400876
 C -3.838092 -1.298959 -2.737019
 Si -3.210039 -1.523307 0.783501

C -2.243006 -3.023815 0.170480
 C -2.811224 -1.293314 2.618319
 C -5.046442 -1.960080 0.749400
 H -3.102673 1.597974 -3.661944
 H -1.598954 1.087250 -2.876666
 H -2.537115 2.443395 -2.209472
 H -5.789217 1.286785 -2.356358
 H -5.228381 1.931551 -0.798170
 H -5.996869 0.337636 -0.871227
 H -4.376092 -1.036245 -3.658215
 H -4.406554 -2.094119 -2.239507
 H -2.858618 -1.704643 -3.018443
 H -5.233869 -2.872173 1.332033
 H -5.425329 -2.130822 -0.265261
 H -5.638797 -1.149122 1.193019
 H -2.516488 -3.935079 0.720152
 H -1.160103 -2.879656 0.276910
 H -2.434892 -3.195732 -0.895927
 H -3.103453 -2.197353 3.171403
 H -3.381010 -0.451486 3.034358
 H -1.751778 -1.100954 2.829076
 P 2.072802 -0.164710 -0.173520
 C 0.094100 -0.940123 -1.848381
 C 2.187069 -1.424893 1.113944
 C 2.415331 1.451812 0.529598
 C 3.357807 -0.544860 -1.387772
 C 1.038417 -1.785006 1.821668
 C 3.413755 -2.027568 1.404751
 C 3.119722 1.599055 1.728536
 C 1.979829 2.581260 -0.178258
 C 3.265205 -1.757934 -2.080161
 C 4.398647 0.343992 -1.660925
 H 0.087548 -1.308324 1.590998
 C 1.118517 -2.745548 2.821072
 C 3.486191 -2.981218 2.414088
 H 4.304916 -1.762099 0.838539
 H 3.445754 0.720154 2.281749

C 3.382313 2.869666 2.219226
C 2.247405 3.849214 0.325352
H 1.425076 2.463684 -1.108522
H 2.446404 -2.446760 -1.878965
C 4.216988 -2.075294 -3.038514
H 4.465201 1.288737 -1.124998
C 5.348424 0.015314 -2.622249
C 2.341582 -3.338910 3.120017
H 0.217967 -3.029324 3.361662
H 4.439709 -3.452224 2.643384
H 3.921904 2.985551 3.156656
C 2.945493 3.994293 1.518982
H 1.900453 4.726454 -0.216391
H 4.142482 -3.015345 -3.580680
C 5.257646 -1.190349 -3.308931
H 6.160826 0.706688 -2.835885
H 2.402451 -4.090842 3.904383
H 3.148502 4.988973 1.910581
H 6.000814 -1.442048 -4.062954
N -0.270415 -1.644527 -2.719858
Pb -1.229049 1.309236 0.581584

3.4 Energien der Übergangszustände der H₂-Aktivierung

3.4.1 Bei Silylenen

Tabelle 3.38. Energien der Übergangszustände der geminalen H₂-Aktivierung mit Silylenen (Reaktionspfad A).

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
Y₂Si	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–
YSiCl	-2648.09474676	0.460703	0.365522	0.063115	165.707297	157.781
YSiHMDS	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–
YSiC₆F₅	-2916.43414688	0.519119	0.411274	0.058955	154.786714	146.861
YSiPy	-2435.58864556	0.542606	0.440330	0.043657	114.621526	106.696
YSiPyr	-2451.64781124	0.530847	0.428157	0.039911	104.786062	96.860
YSiB¹	-2863.78984158	0.708304	0.592292	0.035629	93.543251	85.617
YSiB²	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–
(Y_{Ph})₂Si	-2906.90295520	0.813708	0.684995	0.051124	134.227342	126.301
Y_{Ph}SiCl	-2059.50135336	0.417842	0.334144	0.064501	169.348419	161.423
Y_{Ph}SiHMDS	-2473.30450431	0.661988	0.549815	0.057630	151.309790	143.384
Y_{Ph}SiC₆F₅	-2327.84652376	0.475707	0.374760	0.050726	133.180660	125.255
Y_{Ph}SiPy	-1846.99403111	0.499349	0.407866	0.043186	113.385572	105.460
Y_{Ph}SiPyr	-1863.05446373	0.487207	0.395952	0.044525	116.901011	108.975
Y_{Ph}SiB¹	-2275.19632499	0.664403	0.554836	0.037681	98.932641	91.007
Y_{Ph}SiB²	-2006.01208498	0.516718	0.419523	0.032571	85.515522	77.590
(Y_{PhF})₂Si	-3900.70679059	0.741602	0.595646	0.069468	182.387860	174.462
Y_{PhF}SiCl	-2556.40629877	0.381510	0.288899	0.067220	176.486366	168.560
Y_{PhF}SiHMDS	-2970.20311110	0.626554	0.505759	0.063859	167.661483	159.736
Y_{PhF}SiC₆F₅	-2824.73943180	0.439171	0.327440	0.062413	163.864511	155.939
Y_{PhF}SiPy	-2343.88774585	0.463075	0.362416	0.056029	147.104002	139.178
Y_{PhF}SiPyr	-2359.94742654	0.451125	0.350302	0.057529	151.042620	143.117
Y_{PhF}SiB¹	-2772.10305387	0.628397	0.509595	0.035890	94.228191	86.302
Y_{PhF}SiB²	-2502.91460494	0.481004	0.376110	0.038521	101.137877	93.212
V^{Si}	-1308.98949021	0.333195	0.265370	0.088184	232.062586	224.137
VI^{Si}	-1858.19991151	0.348197	0.273636	0.069470	182.816082	174.890
VII^{Si}	-2620.28203911	0.388190	0.307853	0.050179	132.050937	124.125
VIII^{Si}	-1828.26230535	0.345777	0.270661	0.038663	101.745447	93.820
IX^{Si}	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–

Tabelle 3.39. Energien der Übergangszustände der kooperativen H₂-Aktivierung mit ylidsubstituierten Silylenen entlang der C^{Ylid}-Si-Einheit (Reaktionspfad B).

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
Y ₂ Si	-4084.06900568	0.899216	0.748627	0.082214	215.852116	207.926
YSiCl	-2648.09725670	0.461091	0.368316	0.063399	166.453097	158.527
YSiHMDS	-3061.88581469	0.705785	0.585043	0.071393	187.442499	179.517
YSiB ¹	-2863.77567360	0.707814	0.589464	0.046969	123.316368	115.390
(Y _{Ph}) ₂ Si	-2906.89499356	0.813815	0.684376	0.058467	153.505444	145.580
Y _{Ph} SiCl	-2059.50608727	0.417814	0.334989	0.060612	159.138086	151.212
Y _{Ph} SiHMDS	-2473.30116145	0.662058	0.548776	0.059935	157.358575	149.433
Y _{Ph} SiB ¹	-2275.18420059	0.663695	0.553983	0.048953	128.525701	120.600
V ^{Si}	-1309.00443033	0.333177	0.265557	0.073465	193.328269	185.402
VI ^{Si}	-1858.20497995	0.347771	0.273719	0.064496	169.726809	161.801
VII ^{Si}	-2620.28368690	0.388604	0.308551	0.049232	129.557263	121.631
VIII ^{Si}	-1828.25649934	0.345942	0.272193	0.045984	121.011392	113.085
IX ^{Si}	-1279.04316670	0.332233	0.263485	0.033644	88.537265	80.611

Tabelle 3.40. Energien der Übergangszustände der H₂-Aktivierung mit Silylenen entlang der Si-B-Einheit (Reaktionspfad C).

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
VIII ^{Si}	-1828.25649934	0.345942	0.272193	0.034538	90.888085	82.962
IX ^{Si}	-1279.05823590	0.332770	0.263562	0.018687	49.175244	41.249

3.4.2 Bei Germylenen

Tabelle 3.41. Energien der Übergangszustände der geminalen H₂-Aktivierung mit Germylenen (Reaktionspfad A).

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
Y₂Ge	-5872.32885309	0.899807	0.748681	0.081035	212.758256	204.832
YGeCl	-4436.32799327	0.459574	0.361842	0.083896	220.268551	212.343
YGeHMDS	-4850.11913580	0.704391	0.582850	0.086991	228.393686	220.468
YGeC₆F₅	-4704.66376435	0.517617	0.407213	0.081253	213.328645	205.403
YGePy	-4223.82047984	0.541284	0.437968	0.065372	171.635075	163.709
YGePyr	-4239.88106424	0.529245	0.424494	0.058572	153.779522	145.854
YGeB¹	-4652.02225209	0.706647	0.588444	0.060209	158.077938	150.152
YGeB²	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–
(Y_{Ph})₂Ge	-4695.13169882	0.812204	0.681408	0.073094	191.908504	183.983
Y_{Ph}GeCl	-3847.73579749	0.416670	0.330852	0.085845	225.385493	217.460
Y_{Ph}GeHMDS	-4261.53209731	0.660592	0.546603	0.078049	204.916386	196.990
Y_{Ph}GeC₆F₅	-4116.08051812	0.474524	0.371787	0.073630	193.314853	185.389
Y_{Ph}GePy	-3635.22926625	0.497940	0.404944	0.061963	162.683039	154.757
Y_{Ph}GePyr	-3651.28903708	0.485994	0.393685	0.065031	170.738756	162.813
Y_{Ph}GeB¹	-4063.43862562	0.663288	0.552615	0.053288	139.908533	131.983
Y_{Ph}GeB²	-3794.25246723	0.515549	0.415870	0.050375	132.260767	124.335
(Y_{PhF})₂Ge	-5688.93541287	0.740459	0.593570	0.091614	240.531845	232.606
Y_{PhF}GeCl	-4344.63965990	0.380298	0.285274	0.090004	236.305315	228.379
Y_{PhF}GeHMDS	-4758.43020898	0.624742	0.502040	0.082820	217.443040	209.517
Y_{PhF}GeC₆F₅	-4612.97387142	0.437717	0.324237	0.084092	220.782545	212.857
Y_{PhF}GePy	-4132.12258437	0.461413	0.358283	0.075641	198.595232	190.669
Y_{PhF}GePyr	-4148.18183200	0.449731	0.347838	0.079382	208.416204	200.490
Y_{PhF}GeB¹	-4560.34530620	0.627147	0.506435	0.053699	140.985986	133.060
Y_{PhF}GeB²	-4291.15537747	0.479535	0.371615	0.054412	142.859753	134.934
V^{Ge}	-3097.21826486	0.331392	0.261761	0.10712496	281.907782	273.982
VI^{Ge}	-3646.42412950	0.346023	0.269640	0.091408	240.547860	232.622
VII^{Ge}	-4408.51351673	0.386971	0.305697	0.073522	193.480233	185.554
VIII^{Ge}	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–
IX^{Ge}	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–

Tabelle 3.42. Energien der Übergangszustände der kooperativen H₂-Aktivierung mit ylidsubstituierten Germylenen entlang der C^{Ylid}-Ge-Einheit (Reaktionspfad B).

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
Y₂Ge	-5872.32529315	0.898422	0.745866	0.081780	214.714095	206.788
YGeCl	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–
YGeHMDS	-4850.13544038	0.704122	0.580903	0.068739	180.474162	172.548
YGeB¹	-4652.03189161	0.707501	0.587652	0.049777	130.689983	122.764
(Y_{Ph})₂Ge	-4695.15027900	0.812840	0.681252	0.054358	142.716663	134.791
Y_{Ph}GeCl	-3847.76254297	0.417230	0.331555	0.059802	157.010962	149.085
Y_{Ph}GeHMDS	-4261.54953800	0.661386	0.546593	0.060598	159.099599	151.174
Y_{Ph}GeB¹	-4063.44202020	0.664054	0.553734	0.051013	133.933998	126.008
V^{Ge}	-3097.25319055	0.332821	0.264082	0.074596	196.304168	188.378
VI^{Ge}	-3646.45487748	0.347149	0.270062	0.061152	160.927000	153.001
VII^{Ge}	-4408.53661898	0.387066	0.304765	0.049544	130.378310	122.452
VIII^{Ge}	-3616.51971628	0.345820	0.270044	0.044543	117.217833	109.292
IX^{Ge}	-3067.30074352	0.331958	0.261833	0.036817	96.887432	88.962

Tabelle 3.43. Energien der Übergangszustände der H₂-Aktivierung mit Germylenen entlang der Ge–B-Einheit (Reaktionspfad C).

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
VIII^{Ge}	-3616.52695199	0.345047	0.269262	0.036544	96.167336	88.241
IX^{Ge}	-3067.31179563	0.330850	0.260750	0.024710	65.026700	57.101

3.4.3 Bei Stannylene

Tabelle 3.44. Energien der Übergangszustände der geminalen H₂-Aktivierung mit Stannylene (Reaktionspfad A).

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
Y₂Sn	-3797.68220505	0.897461	0.744010	0.113342	297.580124	289.654
YSnCl	-2361.68717424	0.457925	0.359170	0.110873	291.097528	283.172
YSnHMDS	-2775.47081470	0.702478	0.580060	0.119072	312.624265	304.698
YSnC₆F₅	-2630.02508219	0.516107	0.405024	0.103198	270.945109	263.019
YSnPy	-2149.17493559	0.539547	0.435833	0.091579	240.441078	232.515
YSnPyr	-2165.23134254	0.527142	0.422786	0.090992	238.900724	230.975
YSnB¹	-2577.38249734	0.704886	0.585832	0.082804	217.402395	209.476
YSnB²	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–
(Y_{Ph})₂Sn	-2620.48405265	0.810424	0.678825	0.090334	237.172357	229.246
Y_{Ph}SnCl	-1773.09232286	0.414498	0.327307	0.105507	277.008465	269.083
Y_{Ph}SnHMDS	-2186.88399426	0.658785	0.543768	0.098097	257.554849	249.629
Y_{Ph}SnC₆F₅	-2041.43162396	0.472659	0.370274	0.097398	255.717786	247.792
Y_{Ph}SnPy	-1560.57715178	0.495887	0.400731	0.081041	212.773612	204.848
Y_{Ph}SnPyr	-1576.63642433	0.483929	0.389539	0.085115	223.470083	215.544
Y_{Ph}SnB¹	-1988.78927655	0.661379	0.548735	0.072765	191.044396	183.118
Y_{Ph}SnB²	-1719.59998698	0.514065	0.412882	0.072490	190.322436	182.397
(Y_{PhF})₂Sn	-3614.29083094	0.738189	0.588744	0.105594	277.237776	269.312
Y_{PhF}SnCl	-2269.99998836	0.378648	0.283176	0.108324	284.405680	276.480
Y_{PhF}SnHMDS	-2683.78422834	0.623336	0.499101	0.104095	273.302414	265.377
Y_{PhF}SnC₆F₅	-2538.32491531	0.435961	0.322077	0.109606	287.771807	279.846
Y_{PhF}SnPy	-2057.46965553	0.459537	0.354925	0.100783	264.604946	256.679
Y_{PhF}SnPyr	-2073.52863446	0.447589	0.343706	0.103063	270.592452	262.667
Y_{PhF}SnB¹	-2485.69725006	0.625560	0.504776	0.076443	200.699909	192.774
Y_{PhF}SnB²	-2216.50349980	0.477847	0.369020	0.078333	205.664545	197.739
V^{Sn}	-1022.56486991	0.329747	0.259556	0.125063	329.112355	321.186
VI^{Sn}	-1571.77998350	0.344096	0.269090	0.111595	293.669812	285.744
VII^{Sn}	-2333.86304916	0.385261	0.302916	0.102568	269.916441	261.991
VIII^{Sn}	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–
IX^{Sn}	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–

Tabelle 3.45. Energien der Übergangszustände der kooperativen H₂-Aktivierung mit ylidsubstituierten Stannyleneen entlang der C^{Ylid}-Sn-Einheit (Reaktionspfad B)..

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
Y₂Sn	-3797.71955061	0.897874	0.743979	0.075966	199.447965	191.522
YSnCl	-2361.74633085	0.459510	0.362395	0.054942	144.249086	136.323
YSnHMDS	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–
YSnB¹	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–
(Y_{Ph})₂Sn	-2620.52892475	0.812317	0.680373	0.047010	123.424933	115.499
Y_{Ph}SnCl	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–
Y_{Ph}SnHMDS	-2186.92670619	0.660769	0.545090	0.056708	148.885588	140.960
Y_{Ph}SnB¹	-1988.81751873	0.663026	0.551140	0.046928	123.208880	115.283
V^{Sn}	-1022.62302873	0.331720	0.261782	0.069259	182.260736	174.335
VI^{Sn}	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–
VII^{Sn}	-2333.91204800	0.386460	0.303704	0.054469	143.338880	135.413
VIII^{Sn}	-1541.89807114	0.344972	0.268504	0.046680	122.841234	114.915
IX^{Sn}	-992.66893030	0.330931	0.259448	0.039106	102.673600	94.748

Tabelle 3.46. Energien der Übergangszustände der H₂-Aktivierung mit Stannyleneen entlang der Sn–B-Einheit (Reaktionspfad C).

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
VIII^{Sn}	-1541.89766699	0.344035	0.267564	0.046145	121.434360	113.508
IX^{Sn}	-992.68335500	0.329783	0.258895	0.024129	63.349652	55.424

3.5 Koordinaten der Übergangszustände der H₂-Aktivierung

3.5.1 Bei Silylenen

3.5.1.1 Reaktionspfad A

Y₂Si

Nicht gefunden.

YSiCl

E = -2648.09474676

S 0.739044 1.934663 -0.831398

P -0.911119 -0.435098 0.052049

O 0.709102 3.327485 -0.307170

O 0.559972 1.689315 -2.263056

C -0.438153 1.200108 0.165345

C -1.019857 -1.149713 1.718441

C -1.985072 -2.091644 2.075213
 H -2.735426 -2.408797 1.355133
 C -2.004636 -2.607662 3.366229
 H -2.765907 -3.333875 3.643726
 C -1.063031 -2.192159 4.301372
 H -1.084682 -2.596113 5.311626
 C -0.098938 -1.252380 3.947816
 H 0.634659 -0.919221 4.679097
 C -0.076980 -0.727876 2.662250
 H 0.660984 0.021971 2.380571
 C 0.330297 -1.405234 -0.848374
 C 1.320552 -2.119153 -0.170292
 H 1.327356 -2.151096 0.916612
 C 2.301093 -2.792679 -0.887715
 H 3.072003 -3.346861 -0.356610
 C 2.297095 -2.754931 -2.277984
 H 3.065291 -3.284975 -2.838050
 C 1.315940 -2.037023 -2.954686
 H 1.317280 -1.998337 -4.041956
 C 0.332915 -1.358863 -2.245481
 H -0.419121 -0.776214 -2.772417
 C -2.480310 -0.750989 -0.792717
 C -2.801803 -2.037652 -1.236951
 H -2.100920 -2.858732 -1.089493
 C -4.008726 -2.262484 -1.885844
 H -4.257911 -3.261920 -2.236691
 C -4.891524 -1.205974 -2.095615
 H -5.835220 -1.382681 -2.608291
 C -4.564934 0.075005 -1.664301
 H -5.248072 0.903444 -1.839000
 C -3.357730 0.309667 -1.014972
 H -3.089513 1.315078 -0.695115
 C 2.339356 1.270776 -0.410674
 C 2.785688 1.353146 0.906232
 H 2.178734 1.870424 1.648955
 C 3.997419 0.774705 1.244760
 H 4.351025 0.832427 2.273635

C 4.781920 0.122561 0.282965
 C 4.318735 0.078518 -1.030887
 H 4.917396 -0.419895 -1.792222
 C 3.100792 0.649866 -1.386137
 H 2.722606 0.610074 -2.404709
 C 6.091306 -0.498021 0.667313
 H 5.965733 -1.217989 1.485948
 H 6.801499 0.262656 1.016714
 H 6.550458 -1.021453 -0.177466
 Si -1.052729 2.551831 1.229293
 H -2.141100 1.341913 1.875343
 H -1.521918 2.026464 2.576830
 Cl -2.650941 3.645062 0.408783

YSiHMDS

Nicht gefunden.

YSiC₆F₅

E = -2916.43414688
 S 1.599836 -1.782071 -1.023782
 P 0.312664 0.417531 0.459876
 O 1.372460 -2.561367 -2.242283
 O 1.543477 -2.487153 0.272564
 C 0.507612 -0.441506 -1.037297
 C -0.639912 1.928940 0.154337
 C -1.803709 2.232041 0.860926
 H -2.189576 1.539822 1.604781
 C -2.490254 3.413900 0.597185
 H -3.409019 3.632625 1.136549
 C -2.008911 4.303482 -0.354754
 H -2.545897 5.228411 -0.555048
 C -0.851745 4.003342 -1.068021
 H -0.482664 4.689861 -1.826933
 C -0.178029 2.814702 -0.826963
 H 0.711278 2.560575 -1.402326
 C 1.891523 0.936179 1.209349

C 2.383421 2.238919 1.097652
 H 1.780027 3.022089 0.648528
 C 3.652576 2.547679 1.572498
 H 4.025800 3.565975 1.483865
 C 4.439638 1.561515 2.156064
 H 5.438651 1.802372 2.515309
 C 3.943154 0.269462 2.290683
 H 4.551833 -0.505933 2.750857
 C 2.670270 -0.044849 1.833390
 H 2.292349 -1.061447 1.918922
 C -0.535152 -0.481260 1.785549
 C -0.640913 0.085914 3.059872
 H -0.163059 1.041459 3.274802
 C -1.359266 -0.572029 4.048825
 H -1.445873 -0.131297 5.039913
 C -1.967166 -1.795295 3.771057
 H -2.534281 -2.305908 4.547087
 C -1.836780 -2.372005 2.513470
 H -2.296120 -3.333755 2.295976
 C -1.111996 -1.719948 1.521464
 H -0.953708 -2.185817 0.555103
 C 3.267665 -1.132935 -1.075941
 C 3.552897 0.143154 -1.540674
 H 2.747462 0.765520 -1.925339
 C 4.853127 0.622575 -1.461655
 H 5.071857 1.633558 -1.803312
 C 5.882756 -0.163144 -0.938476
 C 5.576213 -1.458371 -0.513955
 H 6.367403 -2.090738 -0.112999
 C 4.277358 -1.943744 -0.569637
 H 4.029086 -2.933830 -0.194171
 C 7.268063 0.390412 -0.796354
 H 7.544353 1.012155 -1.655541
 H 8.012717 -0.405914 -0.694587
 H 7.338906 1.025340 0.098442
 Si -0.700410 -0.531538 -2.410172
 H -0.815760 1.124261 -2.597410

H -0.590163 0.527319 -3.500763
 C -2.460206 -0.447875 -1.689741
 C -2.930708 -1.620546 -1.104984
 C -3.278749 0.669198 -1.549945
 C -4.080728 -1.677556 -0.331976
 C -4.444067 0.650520 -0.795290
 C -4.849732 -0.529991 -0.185627
 F -2.941796 1.833805 -2.091868
 F -2.216567 -2.739081 -1.224694
 F -5.161632 1.753907 -0.638916
 F -5.953766 -0.557124 0.538653
 F -4.446705 -2.802854 0.260673

YSiPy

E = -2435.58864556
 S 0.341335 -1.875138 0.689703
 P -0.143205 0.992855 -0.017519
 O -0.249559 -3.113764 0.121206
 O 0.252914 -1.642993 2.136720
 C -0.405752 -0.671959 -0.247567
 C -0.000781 1.790565 -1.644231
 C -0.503430 3.065128 -1.911131
 H -1.027500 3.621105 -1.137484
 C -0.353347 3.617605 -3.177739
 H -0.753971 4.608020 -3.383917
 C 0.297077 2.905411 -4.180219
 H 0.407835 3.340169 -5.171699
 C 0.796171 1.633230 -3.918544
 H 1.296472 1.069205 -4.702989
 C 0.646088 1.072863 -2.656232
 H 1.015999 0.070617 -2.445437
 C 1.409150 1.304909 0.867182
 C 2.595949 1.551926 0.174147
 H 2.592627 1.621996 -0.911188
 C 3.784997 1.709837 0.874695
 H 4.708473 1.900964 0.332290
 C 3.793294 1.620842 2.262862

H 4.725985 1.747214 2.809546
 C 2.613562 1.363156 2.953486
 H 2.620776 1.281112 4.038373
 C 1.420397 1.200609 2.260788
 H 0.502020 0.970646 2.796045
 C -1.413465 1.900245 0.905963
 C -1.148831 3.162438 1.445936
 H -0.161758 3.609689 1.333390
 C -2.142652 3.837334 2.143839
 H -1.935719 4.817060 2.569835
 C -3.397028 3.254909 2.305482
 H -4.172878 3.783959 2.855774
 C -3.656877 1.995252 1.775938
 H -4.632470 1.532588 1.909723
 C -2.666086 1.313949 1.078225
 H -2.852993 0.321258 0.675647
 C 2.081599 -1.918323 0.302515
 C 2.471007 -2.072036 -1.026303
 H 1.713305 -2.219952 -1.795647
 C 3.818140 -2.034636 -1.343809
 H 4.128522 -2.150662 -2.381703
 C 4.791114 -1.857514 -0.350020
 C 4.371159 -1.730428 0.972600
 H 5.113574 -1.595526 1.758225
 C 3.020467 -1.759389 1.307465
 H 2.680041 -1.644128 2.333584
 C 6.245323 -1.815374 -0.712080
 H 6.872401 -1.634152 0.166825
 H 6.450288 -1.023722 -1.444191
 H 6.567981 -2.761363 -1.165829
 Si -1.531204 -1.549410 -1.437148
 H -2.184378 -0.028847 -1.863038
 H -1.796586 -0.646668 -2.662064
 C -3.234094 -1.913432 -0.691951
 C -5.469650 -2.254134 -1.049553
 C -4.625636 -2.527465 1.166349
 C -5.705156 -2.547579 0.291852

H -6.294932 -2.269142 -1.765658
H -4.759027 -2.761088 2.221763
H -6.708469 -2.793411 0.633393
N -4.273317 -1.951492 -1.534433
C -3.367908 -2.209147 0.670264
H -2.494466 -2.184071 1.320408

YSiPyr

E = -2451.64781124
S -1.344536 -0.478967 -1.756435
P 0.389182 0.665320 0.256182
O -1.116368 -1.417605 -2.860225
O -1.390667 0.970151 -2.024521
C -0.160405 -0.768512 -0.533254
C 1.404848 0.180267 1.682423
C 2.689918 0.684235 1.883609
H 3.117677 1.384346 1.171547
C 3.441170 0.267610 2.977153
H 4.445417 0.661239 3.119752
C 2.916802 -0.652800 3.877213
H 3.507457 -0.977335 4.731737
C 1.641902 -1.170448 3.675541
H 1.233425 -1.906098 4.365171
C 0.894099 -0.766498 2.577087
H -0.083836 -1.207045 2.394817
C -0.982353 1.692190 0.895248
C -1.702883 1.283618 2.018934
H -1.412110 0.393318 2.567576
C -2.809389 2.006667 2.446724
H -3.363287 1.674202 3.322118
C -3.208702 3.144189 1.753900
H -4.077615 3.709037 2.086444
C -2.497494 3.554484 0.630865
H -2.811898 4.435822 0.075671
C -1.392315 2.832171 0.198000
H -0.871915 3.127047 -0.708207
C 1.372890 1.810085 -0.751719

C 1.794187 3.035910 -0.229737
 H 1.522056 3.320092 0.786706
 C 2.551475 3.899727 -1.011621
 H 2.880614 4.853457 -0.603978
 C 2.877499 3.544360 -2.317594
 H 3.465915 4.222766 -2.932804
 C 2.442717 2.331357 -2.841935
 H 2.684869 2.060644 -3.867418
 C 1.689813 1.462008 -2.062247
 H 1.337992 0.514330 -2.461774
 C -2.930668 -0.908097 -1.060123
 C -3.317636 -2.245174 -1.039879
 H -2.672862 -2.994981 -1.494927
 C -4.522436 -2.591027 -0.448550
 H -4.829305 -3.636306 -0.430478
 C -5.356611 -1.619717 0.118370
 C -4.949880 -0.286241 0.067050
 H -5.589252 0.485698 0.493882
 C -3.744490 0.078589 -0.523041
 H -3.434051 1.119397 -0.572833
 C -6.662168 -2.010427 0.743824
 H -7.363886 -2.388389 -0.011509
 H -7.137556 -1.160690 1.244573
 H -6.527200 -2.809642 1.483187
 Si 0.694423 -2.370355 -0.687604
 H 0.814027 -2.723288 0.934628
 H 0.301306 -3.467648 0.314536
 C 2.572470 -2.242111 -0.533562
 C 4.587954 -3.194573 -0.100621
 C 4.429568 -0.947232 -0.795952
 C 5.241527 -2.002106 -0.407570
 H 5.154760 -4.076603 0.208128
 H 4.850217 0.024871 -1.066700
 H 6.323127 -1.909236 -0.353572
 N 3.108497 -1.061249 -0.854007
 N 3.273886 -3.323861 -0.169254

YSiB²

Nicht gefunden.

YSiB¹

E = -2863.78984158

S -1.653428 1.531369 -0.205710

P -0.233959 -0.984682 0.354349

O -1.524396 2.645751 -1.155241

O -1.632750 1.812592 1.242768

C -0.466775 0.384457 -0.640304

C 0.238442 -2.370771 -0.722686

C 1.309721 -3.226868 -0.475670

H 1.957274 -3.073246 0.382232

C 1.589529 -4.261534 -1.363318

H 2.434127 -4.917458 -1.165830

C 0.814436 -4.441579 -2.501293

H 1.039766 -5.251125 -3.192889

C -0.238721 -3.569700 -2.767780

H -0.834661 -3.689914 -3.670285

C -0.523034 -2.535343 -1.888162

H -1.320274 -1.824752 -2.105251

C -1.746150 -1.504724 1.231055

C -2.662719 -2.384560 0.650232

H -2.465754 -2.823055 -0.323723

C -3.834434 -2.711478 1.319894

H -4.542984 -3.397222 0.859740

C -4.099159 -2.164911 2.571149

H -5.017430 -2.423741 3.095142

C -3.192626 -1.283500 3.149436

H -3.399630 -0.846252 4.124059

C -2.019835 -0.949270 2.483963

H -1.325441 -0.238902 2.924939

C 0.979479 -0.809464 1.695275

C 1.321851 -1.878138 2.531414

H 0.902468 -2.867739 2.357842

C 2.175076 -1.670032 3.606062

H 2.444381 -2.502410 4.253321

C 2.668249 -0.392380 3.866775
 H 3.331132 -0.230168 4.714819
 C 2.297941 0.676473 3.059365
 H 2.665329 1.678625 3.267684
 C 1.449912 0.471207 1.974551
 H 1.118832 1.301684 1.354867
 C -3.250750 0.783972 -0.512010
 C -3.501232 0.197100 -1.748674
 H -2.731580 0.223404 -2.519229
 C -4.723840 -0.415715 -1.973789
 H -4.923001 -0.880146 -2.939165
 C -5.712192 -0.442485 -0.981472
 C -5.443202 0.179597 0.237112
 H -6.202595 0.175095 1.018311
 C -4.218070 0.791655 0.479552
 H -3.988181 1.258995 1.434030
 C -7.014205 -1.146965 -1.219238
 H -7.787807 -0.806327 -0.522924
 H -6.904141 -2.232195 -1.082906
 H -7.378201 -0.986597 -2.240666
 Si 0.732643 1.011256 -1.932531
 H 1.487543 -0.485090 -1.943890
 H 1.041279 -0.247416 -2.824396
 N 3.613688 0.816721 -0.470409
 C 3.594171 2.830732 0.507681
 C 4.265798 1.660843 0.423537
 H 3.844367 3.722589 1.071264
 H 5.198424 1.375568 0.896147
 N 2.495005 2.786059 -0.334283
 C 4.005918 -0.519113 -0.635716
 C 4.040665 -1.094434 -1.908621
 C 4.386800 -1.284610 0.470170
 C 4.462430 -2.407669 -2.070653
 H 3.769529 -0.485956 -2.768792
 C 4.822545 -2.592920 0.298568
 H 4.317826 -0.848445 1.464673
 C 4.867036 -3.159405 -0.971531

H 4.490386 -2.841300 -3.068486
H 5.121811 -3.175202 1.168394
H 5.215011 -4.181963 -1.104942
C 1.506007 3.800091 -0.367542
C 1.208360 4.439077 -1.569497
C 0.795592 4.123616 0.786519
C 0.200009 5.391862 -1.613679
H 1.768559 4.171533 -2.462514
C -0.210347 5.079283 0.735447
H 1.013017 3.602045 1.716505
C -0.509400 5.715450 -0.462740
H -0.037528 5.879596 -2.556880
H -0.779212 5.306292 1.634401
H -1.308432 6.452730 -0.504082
B 2.437937 1.497183 -0.975527

(Y_{Ph})₂Si

E = -2906.90295520
P 2.753197 0.132709 0.215171
P -2.632125 0.377815 -0.066065
C 1.435329 -0.960559 0.191859
C 1.614990 -2.288482 -0.413812
C 2.871263 -2.910402 -0.567089
H 3.769420 -2.417667 -0.199893
C 3.004839 -4.150118 -1.180152
H 3.996648 -4.590249 -1.275617
C 1.891142 -4.831030 -1.658907
H 1.996270 -5.804843 -2.132817
C 0.638909 -4.239105 -1.517010
H -0.250713 -4.749642 -1.883625
C 0.503685 -2.996002 -0.915723
H -0.483436 -2.547732 -0.819635
C 4.137990 -0.395842 1.298069
C 5.480567 -0.075360 1.091481
H 5.781545 0.500088 0.219702
C 6.445968 -0.509796 1.993451
H 7.491990 -0.260777 1.825043

C 6.078927 -1.264688 3.102996
 H 6.838191 -1.604895 3.804709
 C 4.743320 -1.596830 3.306333
 H 4.453828 -2.201272 4.163658
 C 3.776775 -1.170308 2.403633
 H 2.730480 -1.449124 2.531199
 C 2.277175 1.764896 0.856472
 C 2.633607 2.192477 2.133581
 H 3.233588 1.552967 2.776823
 C 2.197588 3.430136 2.595738
 H 2.466621 3.755531 3.598670
 C 1.419761 4.246083 1.782394
 H 1.080428 5.214091 2.147097
 C 1.086314 3.830418 0.494916
 H 0.483785 4.465790 -0.150888
 C 1.513934 2.595268 0.030526
 H 1.247056 2.264168 -0.970543
 C 3.496754 0.522758 -1.408351
 C 3.186519 -0.248259 -2.529936
 H 2.527891 -1.106539 -2.429478
 C 3.705313 0.091516 -3.774718
 H 3.464359 -0.521042 -4.641506
 C 4.519425 1.210396 -3.914647
 H 4.919408 1.475759 -4.891532
 C 4.811432 1.998027 -2.805495
 H 5.431515 2.886000 -2.912240
 C 4.301968 1.657354 -1.558137
 H 4.511602 2.292144 -0.698165
 C -1.767135 -0.917361 0.646876
 C -2.483904 -2.037757 1.265065
 C -1.831283 -3.252959 1.564135
 H -0.765357 -3.339337 1.365133
 C -2.509150 -4.335541 2.100936
 H -1.960725 -5.254983 2.302531
 C -3.872882 -4.261531 2.381340
 H -4.401682 -5.111954 2.806836
 C -4.534298 -3.067132 2.125743

H -5.593473 -2.967379 2.360204
 C -3.854406 -1.979128 1.591489
 H -4.401833 -1.050012 1.444948
 C -3.266815 1.675638 1.054127
 C -2.321238 2.522454 1.649066
 H -1.278488 2.470233 1.337205
 C -2.705215 3.410841 2.644270
 H -1.959434 4.063734 3.094533
 C -4.031138 3.459460 3.065655
 H -4.331278 4.155655 3.846623
 C -4.971511 2.610905 2.491064
 H -6.007791 2.639562 2.822305
 C -4.592813 1.719972 1.492345
 H -5.336524 1.056912 1.053088
 C -1.567924 1.260061 -1.256943
 C -0.714142 0.500711 -2.066122
 H -0.609095 -0.567054 -1.884247
 C -0.008388 1.109912 -3.096280
 H 0.649441 0.513927 -3.723183
 C -0.140757 2.476645 -3.325739
 H 0.419482 2.949997 -4.129808
 C -0.993732 3.233389 -2.528661
 H -1.107644 4.300728 -2.709583
 C -1.711697 2.627934 -1.502318
 H -2.388669 3.223238 -0.893687
 C -4.023243 -0.133159 -1.124456
 C -4.927610 0.811331 -1.614978
 H -4.855484 1.850504 -1.296509
 C -5.915091 0.429900 -2.515290
 H -6.618536 1.169450 -2.892761
 C -5.997758 -0.893670 -2.936141
 H -6.772129 -1.192845 -3.640125
 C -5.086551 -1.832623 -2.463645
 H -5.145559 -2.867020 -2.795936
 C -4.096737 -1.456344 -1.563456
 H -3.379348 -2.185107 -1.193219
 Si -0.056716 -0.313970 1.051525

H 0.097779 -0.405990 2.615264
H -0.054609 -1.374269 2.398153

Y_{Ph}SiCl

E = -2059.50135336
P -0.448909 0.191008 -0.019870
C 0.894660 -0.751236 -0.535028
C 2.257931 -0.246493 -0.301190
C 2.519431 1.020850 0.261636
H 1.699552 1.666998 0.568963
C 3.812718 1.492019 0.445939
H 3.958637 2.481740 0.876268
C 4.908842 0.716131 0.088888
H 5.922352 1.084209 0.233970
C 4.678701 -0.547894 -0.445085
H 5.518309 -1.186375 -0.715969
C 3.387855 -1.020104 -0.631871
H 3.244972 -2.024824 -1.021818
C -0.612136 0.418257 1.782909
C -1.787642 0.925194 2.347560
H -2.620011 1.215630 1.707531
C -1.911462 1.025932 3.727417
H -2.829541 1.416542 4.161906
C -0.867721 0.612863 4.550913
H -0.966259 0.690315 5.632048
C 0.291039 0.082926 3.994418
H 1.099596 -0.259499 4.636805
C 0.418511 -0.023850 2.613548
H 1.310251 -0.464827 2.173282
C -2.016254 -0.584630 -0.489505
C -2.513708 -1.625730 0.300615
H -1.986839 -1.919710 1.207131
C -3.674193 -2.287076 -0.076788
H -4.054085 -3.103009 0.534261
C -4.344597 -1.909216 -1.236467
H -5.253659 -2.429585 -1.531793
C -3.857666 -0.866257 -2.016533

H -4.384278 -0.568218 -2.920752
 C -2.694151 -0.201680 -1.646033
 H -2.310532 0.610656 -2.259517
 C -0.455124 1.851358 -0.784688
 C -0.996234 2.989258 -0.184574
 H -1.415807 2.939099 0.816428
 C -0.979863 4.204686 -0.859437
 H -1.400797 5.089368 -0.385824
 C -0.421115 4.292242 -2.130316
 H -0.407004 5.246403 -2.653622
 C 0.132994 3.163448 -2.725051
 H 0.588015 3.231919 -3.711062
 C 0.121879 1.947093 -2.053671
 H 0.576807 1.060411 -2.493880
 Si 0.442552 -2.360638 -1.252683
 H 1.649282 -2.244389 -2.447970
 H 0.609631 -2.543799 -2.755959
 Cl 1.425479 -3.992576 -0.341203

Y_{Ph}SiHMDS

E = -2473.30450431
 P -1.643857 -0.168171 -0.157357
 C -0.063522 0.477140 -0.319054
 C 0.207391 1.831310 0.176772
 C -0.662132 2.534832 1.038203
 H -1.593260 2.077746 1.368646
 C -0.375037 3.815904 1.490599
 H -1.084295 4.315738 2.148844
 C 0.801959 4.455685 1.118440
 H 1.031126 5.455618 1.480597
 C 1.679484 3.784052 0.272303
 H 2.609306 4.259373 -0.038900
 C 1.389016 2.508138 -0.187113
 H 2.090250 2.007666 -0.847308
 C -2.169233 -0.714381 1.509086
 C -3.296331 -1.519448 1.705622
 H -3.896062 -1.835474 0.852854

C -3.638121 -1.941439 2.984677
 H -4.513007 -2.571896 3.131159
 C -2.855984 -1.567290 4.074078
 H -3.124314 -1.900670 5.074804
 C -1.724218 -0.782746 3.882022
 H -1.100776 -0.502396 4.728505
 C -1.376908 -0.363262 2.602844
 H -0.473599 0.221064 2.438378
 C -1.871126 -1.641703 -1.190625
 C -1.586791 -2.911694 -0.684487
 H -1.290832 -3.032376 0.355160
 C -1.670221 -4.023340 -1.513458
 H -1.438401 -5.009694 -1.116997
 C -2.042173 -3.874206 -2.845071
 H -2.105515 -4.746292 -3.493099
 C -2.338024 -2.611257 -3.348296
 H -2.635381 -2.493029 -4.388252
 C -2.253660 -1.496141 -2.524899
 H -2.480561 -0.508449 -2.920931
 C -2.900579 1.037906 -0.713623
 C -4.200841 1.089935 -0.210602
 H -4.510622 0.419634 0.586605
 C -5.105631 2.017798 -0.714318
 H -6.117846 2.054134 -0.316390
 C -4.717007 2.900913 -1.715938
 H -5.426355 3.629080 -2.104749
 C -3.417222 2.861853 -2.210290
 H -3.103533 3.562941 -2.981036
 C -2.509099 1.937592 -1.709475
 H -1.481128 1.914624 -2.068943
 Si 1.179401 -0.616807 -1.128915
 H 1.493755 0.573026 -2.356190
 H 1.281923 -0.445056 -2.650547
 Si 2.795898 -1.073453 1.293045
 Si 4.274261 0.115356 -1.090241
 C 1.448809 -2.370139 1.508825
 H 0.446325 -1.934700 1.444881

H 1.532531 -3.155107 0.745686
H 1.545310 -2.838659 2.497618
C 4.408623 -1.934898 1.736387
H 5.292931 -1.293837 1.648445
H 4.345379 -2.263675 2.782600
H 4.567768 -2.824209 1.114304
C 2.521576 0.325542 2.513056
H 1.632443 0.910101 2.250131
H 2.400413 -0.062960 3.533550
H 3.370677 1.019885 2.515142
C 4.009635 1.033296 -2.710561
H 3.608059 0.385968 -3.499766
H 3.361125 1.912922 -2.629059
H 4.999451 1.377629 -3.042715
C 5.452006 -1.288158 -1.514766
H 6.331057 -0.898158 -2.045376
H 5.807093 -1.833743 -0.634818
H 4.951874 -2.007796 -2.176070
C 5.105094 1.320953 0.092579
H 5.415858 0.850772 1.032981
H 6.000225 1.756504 -0.370492
H 4.414819 2.137512 0.342254
N 2.787346 -0.495573 -0.374727

$Y_{Ph}SiC_6F_5$

E = -2327.84652376
P -1.716075 -0.155098 -0.096324
C -0.299394 0.682031 -0.594049
C 0.026870 1.974210 0.032559
C 1.134918 2.739750 -0.382849
H 1.771651 2.364632 -1.180554
C 1.440995 3.964207 0.193774
H 2.309611 4.513691 -0.166289
C 0.658456 4.489977 1.216514
H 0.900776 5.449834 1.667581
C -0.437734 3.754787 1.651930
H -1.068505 4.134817 2.454229

C -0.742700 2.527884 1.078927
 H -1.604027 1.990297 1.470599
 C -3.203719 0.893433 -0.244178
 C -3.184286 1.849502 -1.263203
 H -2.289098 1.948927 -1.875814
 C -4.283851 2.673498 -1.467902
 H -4.260215 3.419068 -2.260047
 C -5.403497 2.555926 -0.651025
 H -6.262574 3.205684 -0.806859
 C -5.419315 1.617556 0.375736
 H -6.288194 1.533636 1.025473
 C -4.322730 0.788073 0.582912
 H -4.338260 0.074091 1.402022
 C -2.010236 -1.617405 -1.123161
 C -1.315636 -2.795399 -0.830088
 C -1.471232 -3.909631 -1.643056
 C -2.319235 -3.854770 -2.745246
 C -3.013867 -2.685392 -3.034932
 C -2.861754 -1.564891 -2.225908
 C -1.690114 -0.837554 1.596199
 C -2.649686 -1.763393 2.020073
 H -3.449813 -2.067854 1.346240
 C -2.564480 -2.324986 3.287426
 H -3.310379 -3.048160 3.611261
 C -1.515973 -1.974463 4.133670
 H -1.446679 -2.418804 5.124776
 C -0.547109 -1.073025 3.707161
 H 0.283976 -0.813561 4.359517
 C -0.627606 -0.509265 2.438437
 H 0.140637 0.175917 2.086589
 Si 0.806315 -0.271754 -1.683412
 H 0.915975 0.123433 -3.161705
 H 1.260227 1.017577 -2.659229
 C 2.570138 -0.308305 -0.979761
 C 3.953208 -1.170992 0.842704
 C 4.926217 0.294327 -0.795887
 C 5.055091 -0.483874 0.347691

H -0.645847 -2.832269 0.027510
H -0.924181 -4.822610 -1.417879
H -2.440154 -4.729589 -3.381300
H -3.679198 -2.643596 -3.894826
H -3.404375 -0.649582 -2.453011
C 3.696090 0.367243 -1.437107
C 2.745580 -1.076079 0.167497
F 1.707490 -1.755779 0.668144
F 3.623090 1.150926 -2.511760
F 5.972710 0.959315 -1.258506
F 6.220381 -0.567897 0.964985
F 4.069763 -1.912392 1.933268

Y_{Ph}SiPy

E = -1846.99403111
P -1.026107 -0.217048 -0.020287
C 0.525649 0.306072 -0.535895
C 0.894511 1.719866 -0.351150
C 2.009660 2.272140 -1.011869
H 2.606763 1.629491 -1.655744
C 2.364183 3.605173 -0.866303
H 3.235368 3.981977 -1.400392
C 1.624571 4.457000 -0.051360
H 1.904643 5.502157 0.062593
C 0.523519 3.938552 0.620141
H -0.072257 4.577800 1.270203
C 0.171615 2.602635 0.479990
H -0.690594 2.244114 1.039667
C -2.330774 0.933264 -0.576114
C -2.104173 1.603087 -1.782001
H -1.160061 1.450300 -2.302940
C -3.064024 2.469916 -2.288769
H -2.878399 2.992499 -3.224909
C -4.250176 2.680822 -1.592927
H -4.999413 3.364332 -1.987877
C -4.472069 2.028515 -0.385018
H -5.392986 2.201485 0.168308

C -3.515154 1.158705 0.125968
 H -3.690896 0.671935 1.081406
 C -1.453522 -1.838618 -0.710315
 C -1.073691 -3.004354 -0.040313
 H -0.572897 -2.940261 0.923651
 C -1.326220 -4.245618 -0.609621
 H -1.020946 -5.150414 -0.088351
 C -1.957854 -4.329526 -1.846012
 H -2.153049 -5.303036 -2.291677
 C -2.341199 -3.170695 -2.513112
 H -2.838475 -3.234775 -3.478756
 C -2.091014 -1.926074 -1.948366
 H -2.390296 -1.020585 -2.472091
 C -1.254835 -0.445747 1.780178
 C -2.357953 -1.123001 2.310782
 H -3.124470 -1.521131 1.646814
 C -2.463033 -1.318004 3.682216
 H -3.320591 -1.849730 4.089886
 C -1.465541 -0.845321 4.530999
 H -1.548137 -1.001090 5.605000
 C -0.356682 -0.190544 4.006613
 H 0.431565 0.164995 4.666973
 C -0.246234 0.002253 2.633626
 H 0.629738 0.490623 2.208773
 Si 1.645881 -1.022024 -1.115046
 H 1.763993 -1.267071 -2.635949
 H 2.183940 -0.283758 -2.532983
 C 3.428682 -0.845698 -0.512875
 N 4.366171 -1.512009 -1.200390
 C 5.057421 -0.084230 1.085376
 C 5.620345 -1.465889 -0.775121
 C 6.024650 -0.771568 0.363032
 H 5.325483 0.478460 1.978632
 H 6.354862 -2.016289 -1.368458
 H 7.068816 -0.773141 0.668349
 C 3.742066 -0.117623 0.641710
 H 2.958031 0.426291 1.166609

Y_{Ph}SiPyr

E = -1863.05446373

P -1.051894 -0.187158 -0.030136

C 0.434422 0.289867 -0.739655

C 0.936213 1.652206 -0.488036

C 2.007067 2.179065 -1.234346

H 2.470834 1.553588 -1.994887

C 2.483987 3.464738 -1.029855

H 3.313462 3.825720 -1.636616

C 1.917806 4.290212 -0.062612

H 2.294093 5.298202 0.099742

C 0.867061 3.792519 0.698541

H 0.410310 4.409768 1.470963

C 0.392484 2.503080 0.496074

H -0.417217 2.154379 1.134412

C -2.337574 1.075922 -0.318195

C -2.235083 1.801388 -1.508944

H -1.392046 1.611461 -2.171679

C -3.181424 2.768648 -1.820963

H -3.090746 3.333510 -2.746513

C -4.230193 3.025832 -0.944108

H -4.968412 3.788328 -1.185310

C -4.326673 2.317784 0.248973

H -5.137701 2.526346 0.943931

C -3.382915 1.346662 0.565287

H -3.456354 0.818402 1.511876

C -1.674064 -1.728077 -0.758139

C -1.332501 -2.959857 -0.194965

H -0.739287 -2.995998 0.716430

C -1.741367 -4.139496 -0.804770

H -1.466006 -5.096548 -0.366712

C -2.492274 -4.095531 -1.974260

H -2.811338 -5.020564 -2.450762

C -2.836496 -2.869944 -2.536011

H -3.426182 -2.833592 -3.449730

C -2.428595 -1.687569 -1.931695

H -2.697197 -0.729949 -2.372851

C -0.992507 -0.535255 1.761861
 C -2.058587 -1.111740 2.460864
 H -2.984380 -1.357490 1.941661
 C -1.925791 -1.407499 3.811465
 H -2.754761 -1.860341 4.352027
 C -0.726911 -1.137592 4.467284
 H -0.623652 -1.371989 5.525253
 C 0.343009 -0.590443 3.768387
 H 1.287549 -0.401087 4.274322
 C 0.218827 -0.295175 2.414095
 H 1.069383 0.088858 1.848075
 Si 1.481533 -1.083060 -1.318492
 H 1.609702 -1.371786 -2.828589
 H 2.076399 -0.403559 -2.732291
 C 3.260876 -0.949895 -0.693518
 N 3.407459 -0.402218 0.520208
 N 4.263984 -1.446647 -1.430194
 C 4.638828 -0.316887 1.007263
 C 5.485597 -1.357783 -0.930453
 C 5.745330 -0.779864 0.309413
 H 4.747322 0.139326 1.994142
 H 6.298543 -1.762308 -1.539069
 H 6.753209 -0.702295 0.709102

$Y_{Ph}SiB^2$

E = -2006.01208498
 P -1.643538 -0.220405 -0.009521
 C -0.132294 0.246325 -0.670893
 C 0.310355 1.641338 -0.503391
 C 1.350571 2.176439 -1.287137
 H 1.837775 1.536198 -2.019072
 C 1.766135 3.493542 -1.159999
 H 2.575684 3.856998 -1.791502
 C 1.161796 4.347113 -0.242049
 H 1.489501 5.379711 -0.141468
 C 0.133789 3.846809 0.548218
 H -0.354864 4.487642 1.280840

C -0.277242 2.526275 0.425233
 H -1.074034 2.179712 1.081126
 C -2.942978 1.000138 -0.401481
 C -2.811515 1.688664 -1.611078
 H -1.936799 1.503195 -2.232719
 C -3.772514 2.615638 -1.993873
 H -3.659780 3.152569 -2.933509
 C -4.864769 2.868269 -1.170239
 H -5.614404 3.599013 -1.467881
 C -4.990771 2.196761 0.040908
 H -5.836715 2.401856 0.693972
 C -4.032163 1.266973 0.428308
 H -4.130259 0.766979 1.387926
 C -2.207238 -1.804927 -0.690736
 C -1.855215 -3.004769 -0.067880
 C -2.216570 -4.217401 -0.641885
 C -2.930277 -4.238264 -1.835076
 C -3.284381 -3.044684 -2.456559
 C -2.923864 -1.829596 -1.888151
 C -1.679690 -0.487994 1.799389
 C -2.756926 -1.098799 2.450249
 H -3.627143 -1.422516 1.880144
 C -2.706123 -1.324478 3.819914
 H -3.544086 -1.804091 4.322106
 C -1.578221 -0.948909 4.545408
 H -1.539193 -1.128021 5.618285
 C -0.495831 -0.363061 3.898601
 H 0.393263 -0.085750 4.461129
 C -0.540158 -0.139591 2.526218
 H 0.314364 0.290070 2.003426
 Si 0.931724 -1.146270 -1.213918
 H 0.931414 -1.404610 -2.756876
 H 1.527397 -0.531271 -2.653031
 H -1.291462 -2.990444 0.862690
 H -1.933565 -5.149223 -0.156822
 H -3.212516 -5.189049 -2.283230
 H -3.845172 -3.059189 -3.388861

H -3.200138 -0.896989 -2.375822
 C 5.039618 -0.912095 -0.736410
 C 4.590856 -0.193998 0.369564
 C 6.383849 -1.114629 -0.977833
 C 5.464866 0.358156 1.284427
 C 7.277062 -0.561380 -0.056630
 H 6.720296 -1.677143 -1.844579
 C 6.827794 0.159246 1.049269
 H 5.099781 0.920613 2.139498
 H 8.346118 -0.695523 -0.207675
 H 7.553068 0.577643 1.743963
 B 2.841527 -0.851101 -0.792590
 O 3.230845 -0.157315 0.349731
 O 3.964786 -1.329145 -1.460717

Y_{Ph}SiB¹

E = -2275.19632499
 P 1.779359 -0.789674 -0.009784
 C 0.217407 -0.161806 0.293389
 C 0.024720 0.719667 1.453480
 C 1.065192 1.495878 2.007651
 H 2.062806 1.452672 1.573513
 C 0.862008 2.337442 3.092357
 H 1.699276 2.918266 3.477108
 C -0.394542 2.450305 3.679318
 H -0.556915 3.117806 4.523218
 C -1.434755 1.678273 3.169020
 H -2.425536 1.730218 3.618563
 C -1.228857 0.830246 2.089750
 H -2.057274 0.226705 1.726094
 C 2.995994 0.260695 -0.881042
 C 4.175971 -0.265177 -1.419312
 H 4.392262 -1.328625 -1.321462
 C 5.061590 0.562247 -2.096761
 H 5.977008 0.150094 -2.517114
 C 4.770888 1.916587 -2.244516
 H 5.465170 2.565496 -2.775305

C 3.589512 2.436860 -1.729537
 H 3.352370 3.489946 -1.857618
 C 2.695221 1.610217 -1.055557
 H 1.751799 2.000661 -0.673234
 C 1.693607 -2.269326 -1.058637
 C 1.694122 -2.131071 -2.448730
 H 1.820206 -1.147391 -2.896721
 C 1.522147 -3.246186 -3.258639
 H 1.515555 -3.131764 -4.340634
 C 1.350920 -4.502485 -2.687108
 H 1.215709 -5.375619 -3.322677
 C 1.354611 -4.644293 -1.303046
 H 1.225611 -5.626984 -0.853874
 C 1.524498 -3.531271 -0.488296
 H 1.524603 -3.643694 0.593993
 C 2.578314 -1.294862 1.552685
 C 3.951699 -1.211621 1.782922
 H 4.612612 -0.799840 1.024919
 C 4.481589 -1.636290 2.996690
 H 5.553547 -1.565387 3.170412
 C 3.645701 -2.140091 3.986889
 H 4.063227 -2.466905 4.937421
 C 2.273740 -2.212464 3.766766
 H 1.613433 -2.588524 4.545562
 C 1.739410 -1.787503 2.557475
 H 0.664373 -1.810608 2.386325
 Si -1.124029 -0.611586 -0.896029
 N -4.058077 0.464159 -0.389203
 C -3.670816 2.662341 -0.237318
 C -4.610434 1.707314 -0.087330
 H -3.769625 3.737082 -0.137375
 H -5.660355 1.825991 0.151349
 B -2.659556 0.652292 -0.717222
 N -2.477014 2.078698 -0.651003
 C -1.337213 2.863917 -0.917779
 C -0.840237 3.735875 0.051689
 C -0.739991 2.820455 -2.179005

C 0.209490 4.592251 -0.257577
 H -1.273279 3.721210 1.050024
 C 0.308013 3.680905 -2.482769
 H -1.133176 2.131471 -2.923861
 C 0.772826 4.582849 -1.529725
 H 0.588972 5.269903 0.504679
 H 0.755085 3.654150 -3.474894
 H 1.577826 5.273308 -1.775544
 C -4.762591 -0.737812 -0.256101
 C -4.461635 -1.813231 -1.097039
 C -5.758924 -0.893566 0.712354
 C -5.134370 -3.020068 -0.962435
 H -3.704179 -1.682554 -1.869561
 C -6.438131 -2.099509 0.830120
 H -5.982602 -0.073680 1.390750
 C -6.129763 -3.170425 -0.001978
 H -4.885383 -3.846805 -1.625358
 H -7.208781 -2.205286 1.591658
 H -6.661179 -4.114548 0.096994
 H -2.077308 -1.508922 0.164566
 H -1.648002 -2.053591 -0.657108

(Y_{PhF})₂Si

E = -3900.70679059
 P 3.078275 0.624163 0.166503
 P -2.575477 1.335420 0.008691
 C 1.489921 0.021647 0.058211
 C 1.224717 -1.290781 -0.538737
 C 1.849578 -2.478204 -0.141216
 C 1.463961 -3.727671 -0.600361
 C 0.444181 -3.828802 -1.539638
 C -0.160221 -2.671997 -2.011509
 C 0.259603 -1.435366 -1.542180
 C 3.860140 0.531783 1.812200
 C 3.260491 -0.269838 2.783763
 H 2.362140 -0.830580 2.532490
 C 3.814535 -0.341420 4.058348

H 3.343336 -0.964691 4.815540
 C 4.962371 0.381095 4.362517
 H 5.392569 0.323686 5.360779
 C 5.561422 1.185057 3.394578
 H 6.456974 1.754640 3.635544
 C 5.009253 1.266639 2.123455
 H 5.464751 1.909450 1.370749
 C 3.222056 2.400842 -0.228463
 C 3.661624 2.833364 -1.481231
 H 3.951832 2.110108 -2.239487
 C 3.756813 4.192788 -1.759397
 H 4.116611 4.518786 -2.733447
 C 3.407270 5.129779 -0.792597
 H 3.489422 6.193436 -1.009682
 C 2.958493 4.705044 0.453180
 H 2.677115 5.432870 1.211467
 C 2.870194 3.348425 0.739316
 H 2.534301 3.021649 1.720324
 C 4.136927 -0.285059 -0.990600
 C 3.660644 -0.472021 -2.293700
 H 2.692356 -0.057850 -2.572766
 C 4.408587 -1.197980 -3.210524
 H 4.033061 -1.342639 -4.221457
 C 5.627903 -1.751398 -2.829830
 H 6.210425 -2.327685 -3.546064
 C 6.096413 -1.579296 -1.532258
 H 7.042758 -2.023302 -1.230394
 C 5.353458 -0.849374 -0.610388
 H 5.713491 -0.732987 0.409165
 C -1.516071 0.195076 0.770410
 C -1.934526 -1.167229 1.087203
 C -1.088661 -2.180280 1.599671
 C -1.472289 -3.504545 1.761028
 C -2.774809 -3.909986 1.517774
 C -3.671425 -2.945486 1.085602
 C -3.255529 -1.635177 0.917994
 C -3.942986 1.905212 1.077244

C -3.652486 2.016145 2.438658
 H -2.661333 1.733904 2.793230
 C -4.624288 2.463604 3.325564
 H -4.391739 2.548958 4.385248
 C -5.894559 2.787278 2.859891
 H -6.659009 3.129810 3.554748
 C -6.192076 2.657601 1.507181
 H -7.190378 2.892806 1.143313
 C -5.220794 2.217537 0.614869
 H -5.469021 2.099234 -0.436804
 C -1.637378 2.840465 -0.394907
 C -0.702837 2.771650 -1.437017
 H -0.550983 1.834449 -1.966207
 C 0.041790 3.891231 -1.773305
 H 0.783873 3.828316 -2.566028
 C -0.154123 5.089704 -1.091594
 H 0.433497 5.965987 -1.357919
 C -1.096525 5.166525 -0.074331
 H -1.255971 6.104263 0.454362
 C -1.841526 4.044606 0.275887
 H -2.572401 4.107583 1.078222
 C -3.276283 0.904797 -1.619875
 C -3.822810 1.906484 -2.428283
 H -3.860980 2.934726 -2.070506
 C -4.295396 1.598407 -3.697761
 H -4.722056 2.381829 -4.321037
 C -4.205901 0.294186 -4.175481
 H -4.567349 0.055259 -5.173941
 C -3.639504 -0.699532 -3.385000
 H -3.541698 -1.715421 -3.760471
 C -3.178267 -0.395814 -2.110631
 H -2.713212 -1.168783 -1.505393
 Si 0.176515 0.918454 0.984736
 H 0.506755 1.283749 2.442354
 H 0.289498 0.235188 2.585632
 F 2.808374 -2.430223 0.780099
 F 2.055377 -4.823932 -0.152447

F 0.063549 -5.013509 -1.989530
 F -0.574902 -4.383636 2.184195
 F -1.106786 -2.754153 -2.941792
 F 0.174341 -1.938281 1.954310
 F -0.278623 -0.355900 -2.108456
 F -3.146164 -5.171085 1.681147
 F -4.200718 -0.779734 0.500411
 F -4.934256 -3.268117 0.847819

Y_{PhF}SiCl

E = -2556.40629877
 P 0.933145 0.142769 0.253410
 C -0.110732 -1.052188 -0.420891
 C -1.548580 -0.764177 -0.492080
 C -2.075530 0.454436 -0.935691
 C -3.432175 0.741751 -0.937211
 C -4.335455 -0.214687 -0.493884
 C -3.861224 -1.444152 -0.053113
 C -2.496530 -1.692587 -0.037314
 C 1.857074 1.195869 -0.908756
 C 2.893661 2.010646 -0.441985
 H 3.153480 2.009786 0.616294
 C 3.598243 2.812697 -1.329454
 H 4.403067 3.448196 -0.965469
 C 3.279971 2.792895 -2.685406
 H 3.837617 3.416250 -3.381923
 C 2.259718 1.972233 -3.152264
 H 2.019775 1.947906 -4.213100
 C 1.546614 1.172886 -2.265851
 H 0.753122 0.517679 -2.617580
 C 2.257017 -0.563114 1.280119
 C 3.375995 -1.112692 0.642443
 H 3.455432 -1.085259 -0.443725
 C 4.387450 -1.695734 1.395878
 H 5.251747 -2.124675 0.893115
 C 4.294345 -1.731686 2.783175
 H 5.090197 -2.185004 3.371073

C 3.185884 -1.183375 3.419367
 H 3.112980 -1.202137 4.504846
 C 2.168143 -0.600874 2.672439
 H 1.311741 -0.165605 3.180917
 C -0.053238 1.233685 1.317984
 C -0.009502 2.623386 1.218719
 H 0.651209 3.099411 0.498331
 C -0.832764 3.400898 2.026141
 H -0.799989 4.485120 1.942072
 C -1.703028 2.797390 2.926675
 H -2.349925 3.410217 3.551381
 C -1.758473 1.409442 3.020203
 H -2.449145 0.933671 3.713291
 C -0.942100 0.627958 2.214285
 H -1.000627 -0.459172 2.257942
 Si 0.509338 -2.575199 -1.194686
 H 0.905164 -3.774736 -0.350597
 H 1.583942 -2.954501 0.052009
 Cl 2.133648 -2.226351 -2.512579
 F -2.090076 -2.853314 0.466647
 F -4.713070 -2.354921 0.392075
 F -5.634284 0.037860 -0.498729
 F -3.869543 1.913833 -1.370800
 F -1.248405 1.400611 -1.383831

Y_{PhF}SiHMDS

E = -2970.20311110
 P -1.889420 -0.451287 -0.185933
 C -0.204653 -0.172977 -0.275062
 C 0.315760 1.181322 -0.193805
 C -0.093630 2.098337 0.784056
 C 0.431203 3.373924 0.904237
 C 1.436031 3.786065 0.037401
 C 1.879048 2.909437 -0.945381
 C 1.314196 1.647975 -1.056778
 C -2.610826 -0.965288 1.406285
 C -3.990236 -1.113816 1.582904

H -4.672281 -0.911378 0.757498
 C -4.493600 -1.501755 2.818216
 H -5.567379 -1.613565 2.955111
 C -3.624797 -1.740251 3.880530
 H -4.021611 -2.044341 4.847279
 C -2.254393 -1.578647 3.711186
 H -1.574203 -1.752551 4.542402
 C -1.748871 -1.185131 2.477206
 H -0.681960 -1.027836 2.332424
 C -2.294554 -1.766704 -1.383508
 C -3.171999 -2.821187 -1.121593
 H -3.646898 -2.912390 -0.148895
 C -3.416678 -3.781798 -2.095444
 H -4.093613 -4.605704 -1.878570
 C -2.792058 -3.700390 -3.335598
 H -2.984912 -4.457191 -4.093484
 C -1.908791 -2.658519 -3.599411
 H -1.402342 -2.598956 -4.560676
 C -1.654641 -1.698977 -2.628274
 H -0.922494 -0.912747 -2.809435
 C -2.812505 1.042813 -0.672602
 C -3.486005 1.821735 0.270734
 H -3.502530 1.520717 1.314517
 C -4.113484 2.999992 -0.117816
 H -4.630715 3.602955 0.625607
 C -4.072852 3.409897 -1.445035
 H -4.563261 4.333714 -1.745700
 C -3.398394 2.640305 -2.387864
 H -3.358898 2.958345 -3.427573
 C -2.768928 1.463907 -2.004517
 H -2.240861 0.872358 -2.747654
 Si 0.835850 -1.698828 -0.271596
 H 1.108279 -1.856398 -1.996964
 H 0.664360 -2.662336 -1.448966
 Si 2.756645 -1.308685 1.898642
 Si 3.915947 -1.247182 -0.947013
 C 1.819995 -2.700966 2.747723

H 0.758515 -2.751336 2.478943
 H 2.265801 -3.665857 2.473474
 H 1.892599 -2.588877 3.838110
 C 4.545519 -1.485909 2.440295
 H 5.231846 -0.777375 1.963751
 H 4.570351 -1.291489 3.521187
 H 4.925669 -2.499895 2.275739
 C 2.150329 0.352491 2.530629
 H 1.059225 0.440994 2.482382
 H 2.454620 0.507661 3.574069
 H 2.573239 1.165874 1.924614
 C 3.519136 -1.538629 -2.758674
 H 3.194162 -2.570739 -2.941098
 H 2.773572 -0.857345 -3.175801
 H 4.461509 -1.390858 -3.306675
 C 5.211476 -2.567397 -0.563456
 H 5.804414 -2.753141 -1.469050
 H 5.909756 -2.286054 0.230637
 H 4.734748 -3.514860 -0.280054
 C 4.702441 0.450023 -0.752433
 H 4.807385 0.733685 0.302375
 H 5.705658 0.460474 -1.199135
 H 4.110049 1.225332 -1.249092
 N 2.528042 -1.413885 0.142839
 F 1.739984 0.865711 -2.045611
 F 2.818576 3.296964 -1.797961
 F 1.953011 5.001494 0.135753
 F 0.010521 4.186591 1.862453
 F -0.977024 1.706355 1.710083

$Y_{PhF}SiC_6F_5$

E = -2824.73943180
 P 1.436062 -0.568637 0.099839
 C -0.117960 -0.709968 -0.603104
 C -0.712189 -2.049336 -0.763222
 C -1.846440 -2.247069 -1.572474
 H -2.284777 -1.393079 -2.084097

C -2.413514 -3.501641 -1.746451
 H -3.290998 -3.602646 -2.383348
 C -1.873665 -4.620753 -1.121870
 H -2.320530 -5.603380 -1.256723
 C -0.753406 -4.454473 -0.315872
 H -0.310399 -5.311287 0.189301
 C -0.190786 -3.198696 -0.134712
 H 0.676294 -3.120849 0.518657
 C 2.615659 -1.725445 -0.670108
 C 2.372383 -2.076805 -2.000571
 H 1.515961 -1.646256 -2.515985
 C 3.209046 -2.975792 -2.644568
 H 3.011879 -3.250454 -3.678577
 C 4.290549 -3.531500 -1.966714
 H 4.944797 -4.238768 -2.472843
 C 4.528016 -3.193165 -0.639832
 H 5.364861 -3.635530 -0.103363
 C 3.689421 -2.295915 0.013164
 H 3.867761 -2.062709 1.058891
 C 2.052079 1.140969 -0.095750
 C 1.591599 2.134144 0.773324
 C 2.007559 3.452045 0.671095
 C 2.900181 3.808349 -0.333046
 C 3.365986 2.847693 -1.220374
 C 2.932525 1.532423 -1.102697
 C 1.596404 -0.810317 1.903282
 C 2.745293 -0.423946 2.599667
 H 3.591681 0.009472 2.066950
 C 2.803329 -0.570347 3.979529
 H 3.697237 -0.265850 4.520227
 C 1.713104 -1.094611 4.668859
 H 1.758349 -1.205931 5.750476
 C 0.561200 -1.457363 3.980154
 H -0.299464 -1.846712 4.519827
 C 0.494954 -1.307651 2.599112
 H -0.418594 -1.551211 2.060374
 Si -1.016502 0.845901 -0.878951

H -0.935780 1.514224 -2.256194
H -1.472222 0.593178 -2.486568
C -2.859450 0.774785 -0.458711
C -4.685876 0.024001 0.973075
C -5.160683 1.470811 -0.885878
C -5.600640 0.737851 0.211057
F 0.703694 1.846172 1.709338
F 1.549200 4.368338 1.500842
F 3.301669 5.055875 -0.443965
F 4.209158 3.187700 -2.176729
F 3.386474 0.670306 -1.994038
C -3.808506 1.481030 -1.192236
C -3.338439 0.060268 0.634168
F -3.417905 2.185406 -2.253825
F -2.503101 -0.625113 1.412852
F -5.099227 -0.671423 2.019870
F -6.884081 0.721240 0.524805
F -6.029477 2.148971 -1.617934

Y_{PhF}SiPy

E = -2343.88774585
P -0.507760 0.700097 0.162818
C 1.004888 0.357663 -0.559181
C 2.025100 1.421952 -0.603582
C 3.170156 1.291693 -1.412556
H 3.298250 0.384127 -1.998533
C 4.135166 2.285590 -1.485456
H 5.002032 2.134653 -2.127067
C 4.006194 3.461684 -0.753510
H 4.763704 4.240421 -0.811572
C 2.889895 3.615453 0.059930
H 2.762398 4.521990 0.649690
C 1.927393 2.617606 0.139610
H 1.080303 2.783549 0.803000
C -1.211743 2.275530 -0.430132
C -0.836798 2.684573 -1.712593
H -0.163097 2.057548 -2.293782

C -1.310817 3.883061 -2.224750
 H -1.010756 4.199911 -3.221300
 C -2.159475 4.680911 -1.462493
 H -2.529308 5.621921 -1.865259
 C -2.525442 4.282016 -0.182398
 H -3.179299 4.908899 0.420429
 C -2.048169 3.084114 0.338861
 H -2.317931 2.798357 1.351404
 C -1.693459 -0.644671 -0.188156
 C -1.629198 -1.824474 0.558370
 C -2.487773 -2.887608 0.329478
 C -3.434955 -2.791944 -0.683201
 C -3.514802 -1.638952 -1.451674
 C -2.642136 -0.585450 -1.207136
 C -0.581287 0.783385 1.989359
 C -1.790674 0.734144 2.687849
 H -2.734883 0.672144 2.147067
 C -1.793051 0.737101 4.076981
 H -2.736460 0.693371 4.617561
 C -0.589152 0.782771 4.774253
 H -0.592108 0.782203 5.862494
 C 0.616378 0.809869 4.081929
 H 1.558610 0.826160 4.625655
 C 0.622909 0.799328 2.691672
 H 1.562559 0.784538 2.141203
 Si 1.256254 -1.380412 -1.079096
 H 1.015494 -1.730852 -2.563018
 H 1.874568 -1.081013 -2.610579
 C 2.951504 -2.086752 -0.647347
 N 3.355534 -3.158251 -1.341331
 C 4.921762 -2.151771 0.726944
 C 4.515700 -3.717186 -1.027051
 C 5.338877 -3.258811 -0.000856
 H 5.534151 -1.754777 1.535354
 H 4.813429 -4.585096 -1.620384
 H 6.279471 -3.760228 0.216522
 F -0.706357 -1.976058 1.492536

F -2.398110 -3.991297 1.045464
 F -4.254858 -3.794675 -0.913970
 F -4.410985 -1.550824 -2.416741
 F -2.744381 0.471077 -1.993128
 C 3.712270 -1.553535 0.399345
 H 3.355608 -0.673486 0.932993

Y_{PhF}SiPyr

E = -2359.94742654
 P -0.454878 0.669637 0.184067
 C 0.915160 0.277530 -0.758203
 C 2.041251 1.231064 -0.797019
 C 3.072189 1.093892 -1.743900
 H 3.034509 0.258707 -2.440860
 C 4.128300 1.990139 -1.814373
 H 4.900472 1.841834 -2.568007
 C 4.208733 3.067387 -0.936936
 H 5.038309 3.769272 -0.991782
 C 3.211037 3.219681 0.018145
 H 3.252411 4.045680 0.726588
 C 2.157333 2.318396 0.091740
 H 1.415277 2.470314 0.873034
 C -1.020143 2.375804 -0.132794
 C -0.762128 2.895576 -1.404353
 H -0.271792 2.266117 -2.144436
 C -1.118235 4.201021 -1.706913
 H -0.909175 4.600987 -2.696813
 C -1.731086 4.998600 -0.744517
 H -2.007745 6.023910 -0.982745
 C -1.978327 4.489358 0.524527
 H -2.445196 5.113520 1.283708
 C -1.617863 3.182228 0.835290
 H -1.786197 2.809048 1.840886
 C -1.824149 -0.487194 -0.183072
 C -1.896475 -1.727298 0.458257
 C -2.909126 -2.636210 0.188429
 C -3.873723 -2.323878 -0.761045

C -3.818797 -1.108551 -1.429558
 C -2.794169 -0.214419 -1.146970
 C -0.283763 0.516610 1.996668
 C -1.372280 0.578454 2.870886
 H -2.378680 0.743908 2.486425
 C -1.178330 0.399053 4.234241
 H -2.026941 0.443728 4.914051
 C 0.100182 0.149391 4.726480
 H 0.250981 0.008095 5.795080
 C 1.178374 0.057068 3.853726
 H 2.172841 -0.165154 4.235207
 C 0.990670 0.227812 2.485976
 H 1.820638 0.097836 1.789400
 Si 1.060190 -1.480041 -1.215532
 H 0.759156 -1.916298 -2.663480
 H 1.648143 -1.310767 -2.772177
 C 2.751550 -2.206862 -0.793553
 N 3.347580 -1.686404 0.285814
 N 3.240630 -3.215023 -1.525988
 C 4.524413 -2.191551 0.634045
 C 4.413632 -3.710885 -1.165957
 C 5.125458 -3.223362 -0.073349
 H 5.006964 -1.756095 1.512111
 H 4.808900 -4.532027 -1.769232
 H 6.091781 -3.631044 0.212250
 F -0.972821 -2.095545 1.327555
 F -2.947698 -3.800120 0.808097
 F -4.836837 -3.179842 -1.028162
 F -4.729683 -0.813989 -2.338488
 F -2.774043 0.908527 -1.841994

$Y_{PhF}SiB^2$

E = -2502.91460494
 P -1.564088 -0.821280 0.008780
 C -0.190660 0.113700 -0.429640
 C -0.178404 1.568544 -0.330385
 C 0.980486 2.279381 0.026592

C 1.029605 3.663519 0.098503
 C -0.116683 4.415292 -0.129471
 C -1.292494 3.757227 -0.461230
 C -1.303255 2.374031 -0.555269
 C -2.773310 -1.234334 -1.298936
 C -2.394500 -2.194889 -2.244732
 H -1.452207 -2.729123 -2.126453
 C -3.209907 -2.464040 -3.336619
 H -2.905705 -3.214228 -4.063726
 C -4.407863 -1.775695 -3.499272
 H -5.047088 -1.987939 -4.354154
 C -4.783755 -0.811485 -2.570488
 H -5.715178 -0.263497 -2.697926
 C -3.970268 -0.535995 -1.477899
 H -4.265189 0.233852 -0.770239
 C -0.991212 -2.439407 0.627074
 C 0.250288 -2.517887 1.265049
 C 0.670254 -3.718398 1.824305
 C -0.149759 -4.840497 1.767526
 C -1.396292 -4.759802 1.155329
 C -1.819162 -3.563569 0.587997
 C -2.485309 -0.137024 1.416171
 C -3.766267 -0.601601 1.726144
 H -4.253501 -1.333222 1.084630
 C -4.419612 -0.140678 2.861761
 H -5.418394 -0.504199 3.094516
 C -3.796426 0.778240 3.700252
 H -4.311302 1.142159 4.587233
 C -2.509870 1.219142 3.412183
 H -2.011518 1.923058 4.075415
 C -1.849145 0.757682 2.279363
 H -0.832301 1.079876 2.071372
 Si 1.025253 -0.884894 -1.398749
 H 0.975533 -0.467225 -2.926783
 H 1.407838 0.324415 -2.482260
 H 0.888188 -1.636668 1.320313
 H 1.644900 -3.772339 2.304677

H 0.181740 -5.780628 2.204278
H -2.042919 -5.634016 1.114538
H -2.794231 -3.508675 0.108047
C 5.130268 -0.619205 -0.974939
C 4.737925 -0.860332 0.339174
C 6.458748 -0.501253 -1.330558
C 5.656301 -0.993761 1.361221
C 7.396521 -0.635499 -0.303685
H 6.750117 -0.311888 -2.360094
C 7.004125 -0.876118 1.012448
H 5.336920 -1.178447 2.383371
H 8.455483 -0.548660 -0.537247
H 7.762832 -0.972962 1.786103
B 2.935626 -0.707984 -0.912145
O 3.378783 -0.930594 0.387899
O 4.019970 -0.529514 -1.760174
F 2.096478 1.617264 0.317492
F 2.157296 4.271696 0.433116
F -0.084528 5.736183 -0.039409
F -2.458675 1.795266 -0.897554
F -2.396858 4.450382 -0.695170

$Y_{PhF}SiB^I$

E = -2772.10305387
P 1.652668 1.353247 -0.082609
C 0.259946 0.359453 -0.111039
C 0.356002 -0.997569 -0.637175
C 1.390613 -1.877238 -0.282756
C 1.482876 -3.175816 -0.750726
C 0.507797 -3.669560 -1.605839
C -0.543816 -2.843537 -1.976424
C -0.594469 -1.533458 -1.521206
C 2.545826 1.564258 1.496007
C 3.513952 2.560483 1.656029
H 3.754381 3.225846 0.827217
C 4.159699 2.708516 2.876433
H 4.915563 3.481588 3.000379

C 3.831517 1.874727 3.943506
 H 4.333855 1.997307 4.901276
 C 2.858899 0.893442 3.789266
 H 2.597255 0.247387 4.625404
 C 2.216389 0.737725 2.565453
 H 1.457337 -0.025512 2.413830
 C 1.255344 3.082884 -0.511889
 C 0.774335 3.933943 0.488373
 H 0.697588 3.577427 1.513745
 C 0.385390 5.230368 0.176182
 H 0.008630 5.883226 0.960927
 C 0.477036 5.690385 -1.133447
 H 0.174435 6.707108 -1.376706
 C 0.960007 4.850240 -2.130853
 H 1.040216 5.207410 -3.155558
 C 1.346479 3.550522 -1.823931
 H 1.728614 2.904757 -2.610614
 C 2.845618 0.749261 -1.309402
 C 4.198038 0.574788 -1.017917
 H 4.580240 0.816603 -0.029417
 C 5.056692 0.066719 -1.986418
 H 6.110044 -0.072308 -1.752006
 C 4.570796 -0.274624 -3.243368
 H 5.245335 -0.677590 -3.996366
 C 3.219388 -0.114320 -3.534745
 H 2.832285 -0.394765 -4.512126
 C 2.356445 0.389591 -2.570812
 H 1.292773 0.490534 -2.781655
 Si -1.270312 0.997299 0.707358
 N -4.149017 -0.198608 0.653924
 C -3.833676 -2.351671 1.172656
 C -4.754554 -1.442875 0.800213
 H -3.976909 -3.393088 1.433966
 H -5.823275 -1.574398 0.679918
 B -2.735595 -0.341105 0.926782
 N -2.587673 -1.733695 1.286872
 C -1.449562 -2.448749 1.695601

C -1.241266 -3.760229 1.260963
 C -0.520545 -1.865012 2.560636
 C -0.118618 -4.466918 1.672536
 H -1.947707 -4.211770 0.567571
 C 0.606224 -2.574002 2.956787
 H -0.705763 -0.858402 2.932349
 C 0.817851 -3.875268 2.513193
 H 0.041416 -5.478128 1.302758
 H 1.326600 -2.107451 3.626373
 H 1.706370 -4.422769 2.818307
 C -4.843447 0.930226 0.195339
 C -4.532574 2.192941 0.704486
 C -5.844904 0.815001 -0.772708
 C -5.198089 3.319826 0.240283
 H -3.771841 2.277506 1.479307
 C -6.519001 1.944589 -1.218556
 H -6.074657 -0.161689 -1.192454
 C -6.197832 3.202839 -0.719839
 H -4.940816 4.296970 0.645179
 H -7.293926 1.839782 -1.975765
 H -6.723767 4.085780 -1.076806
 H -2.183226 1.364732 -0.632408
 H -1.837976 2.228834 -0.020145
 F -1.584404 -0.772319 -1.977419
 F 2.326707 -1.469528 0.578546
 F 2.456851 -3.972135 -0.332365
 F -1.481666 -3.301569 -2.794960
 F 0.555980 -4.928388 -2.021487

V^{Si}

E = -1308.98949021
 C 1.683067 2.173236 -0.238080
 C -0.469624 1.066156 -0.239903
 C -1.095655 2.306796 -0.306575
 C -0.338155 3.477793 -0.312957
 C 1.047157 3.413196 -0.268534
 H 2.772773 2.139990 -0.246438

H -2.179400 2.362189 -0.363599
 H -0.842605 4.440591 -0.364832
 H 1.641582 4.324815 -0.277407
 N -1.122681 -0.176859 -0.224604
 C -2.493919 -0.353651 -0.017766
 C -3.201628 0.366542 0.954169
 C -3.176055 -1.324619 -0.759859
 C -4.551878 0.123313 1.162469
 H -2.677118 1.103524 1.557323
 C -4.524079 -1.573772 -0.533805
 H -2.636857 -1.870912 -1.532708
 C -5.223202 -0.847307 0.423285
 H -5.083547 0.690215 1.925066
 H -5.033661 -2.334854 -1.122281
 H -6.280900 -1.035934 0.594521
 C 0.953642 0.980893 -0.225434
 C 1.472190 -0.384639 -0.194145
 P 3.047046 -0.820457 0.231511
 C 4.355091 -0.393797 -0.967439
 H 4.365528 0.689951 -1.124256
 H 5.343075 -0.719170 -0.620758
 H 4.117506 -0.873441 -1.922838
 C 3.626421 -0.083568 1.791193
 H 4.688357 -0.286228 1.969396
 H 3.461444 0.998454 1.750865
 H 3.022851 -0.489219 2.609623
 C 3.172774 -2.612771 0.431558
 H 4.180926 -2.885653 0.760722
 H 2.436247 -2.943899 1.171120
 H 2.956749 -3.104098 -0.522864
 Si 0.055042 -1.476698 -0.467130
 H -0.218725 -2.494730 -1.538920
 H -0.068622 -1.495752 -2.251411

V^{Si}

E = -1858.19991151
 C 0.762787 2.889278 -0.236736

C 0.379351 1.601061 0.127478
 C -0.853411 1.051583 -0.292205
 C -1.661306 1.875517 -1.099919
 C -1.281405 3.161887 -1.440961
 C -0.061945 3.683852 -1.016025
 H 1.728897 3.246329 0.114235
 H -2.605252 1.478759 -1.464556
 H -1.944453 3.759749 -2.064042
 H 0.240030 4.692243 -1.288623
 N -1.260245 -0.252605 -0.013719
 S 1.505452 0.717958 1.194388
 O 2.846189 1.304922 0.965991
 O 0.951466 0.748167 2.542636
 C 1.509156 -0.874190 0.526512
 C -2.641558 -0.564039 -0.008726
 C -3.525112 0.164595 0.795141
 C -3.132619 -1.632845 -0.761578
 C -4.873050 -0.163908 0.828301
 H -3.137022 0.989882 1.388724
 C -4.481084 -1.967115 -0.711746
 H -2.443534 -2.198385 -1.386347
 C -5.357791 -1.232955 0.079074
 H -5.549572 0.412454 1.456768
 H -4.848979 -2.802429 -1.304777
 H -6.413797 -1.492510 0.113715
 P 2.832344 -1.220401 -0.510470
 C 3.081455 -0.053201 -1.875582
 H 3.952972 -0.326682 -2.480911
 H 2.180262 -0.038671 -2.498081
 H 3.225543 0.937393 -1.431918
 C 2.565731 -2.839404 -1.266529
 H 1.645885 -2.820071 -1.860887
 H 3.414697 -3.094532 -1.909935
 H 2.455971 -3.592136 -0.479399
 C 4.407056 -1.302761 0.370000
 H 4.538959 -0.336476 0.867402
 H 4.343072 -2.091242 1.126760

H 5.237282 -1.500740 -0.317095
 Si -0.146150 -1.574833 0.447086
 H -0.383144 -1.385505 2.090534
 H -0.741167 -2.411699 1.544077

VII^{Si}

E = -2620.28203911
 C 0.359755 1.537118 0.568191
 C -0.436759 1.547661 -0.582941
 C -0.816596 2.768386 -1.141249
 C -0.436782 3.969874 -0.559288
 C 0.333197 3.960327 0.596653
 C 0.726259 2.750251 1.151819
 H -1.435013 2.748360 -2.035008
 H -0.746429 4.910562 -1.010364
 H 0.632773 4.893674 1.069281
 H 1.345316 2.718133 2.044984
 S 0.952040 0.080214 1.503002
 S -1.017506 0.094184 -1.521678
 O 2.163329 0.603771 2.169274
 O -0.189448 -0.314594 2.341220
 O 0.151402 -0.319784 -2.329273
 O -2.214778 0.614146 -2.206705
 C 1.411626 -1.146970 0.427096
 C -1.399219 -1.151685 -0.459583
 P -2.842999 -0.938434 0.444519
 P 2.904473 -0.866404 -0.387513
 C -2.893596 -2.056429 1.853490
 H -3.824608 -1.893745 2.407759
 H -2.844512 -3.095863 1.515406
 H -2.024709 -1.824990 2.479651
 C -3.072154 0.725819 1.121418
 H -3.091749 1.440661 0.291928
 H -4.014545 0.780595 1.677865
 H -2.221210 0.935723 1.778687
 C -4.314188 -1.247155 -0.565241
 H -4.302952 -2.290986 -0.895868

H -5.239679 -1.032637 -0.018694
H -4.225091 -0.599967 -1.445003
C 3.009705 -1.965344 -1.812513
H 3.962963 -1.805835 -2.328255
H 2.926504 -3.007334 -1.488712
H 2.170121 -1.725617 -2.476926
C 3.094500 0.807692 -1.049890
H 3.059398 1.521088 -0.220151
H 4.048090 0.902085 -1.581236
H 2.254296 0.985805 -1.731286
C 4.350486 -1.155085 0.659608
H 5.283995 -0.913119 0.139110
H 4.223421 -0.521031 1.543605
H 4.353052 -2.203946 0.973781
Si 0.110688 -2.217373 -0.284831
H -0.120207 -3.531496 0.455762
H -0.374978 -2.799751 1.243519

VIII^{Si}

E = -1828.26230535
C -0.631190 3.161817 -0.214273
C -0.154731 1.862229 -0.238801
C 1.038151 1.424225 0.340268
C 1.813318 2.399705 0.971000
C 1.380221 3.722255 0.999537
C 0.170630 4.107748 0.414827
H -1.575179 3.429491 -0.684798
H 2.762205 2.124826 1.430286
H 1.999326 4.478056 1.480464
H -0.138732 5.150503 0.442600
B 1.222382 -0.158478 0.110947
S -0.981195 0.435571 -0.858605
O -1.837211 0.661555 -2.025203
O 0.347044 -0.364927 -1.151967
C -1.678971 -0.409127 0.407568
C 2.665757 -0.790639 -0.024974
C 3.667132 -0.059879 -0.681195

C 3.009857 -2.057885 0.456613
 C 4.948648 -0.571398 -0.854116
 H 3.433851 0.932072 -1.068590
 C 4.289171 -2.578763 0.290929
 H 2.253791 -2.646323 0.976480
 C 5.263873 -1.835634 -0.366167
 H 5.705075 0.018059 -1.370433
 H 4.527516 -3.568347 0.678247
 H 6.267077 -2.238896 -0.495722
 P -3.251103 -1.013463 0.133450
 C -4.474430 0.285069 -0.170101
 H -5.468533 -0.140013 -0.347963
 H -4.500206 0.955631 0.694742
 H -4.145932 0.845177 -1.052132
 C -3.762998 -1.918279 1.606169
 H -3.780187 -1.232339 2.458935
 H -4.753558 -2.361365 1.457873
 H -3.025718 -2.703073 1.808727
 C -3.412170 -2.154474 -1.268090
 H -3.071311 -1.616853 -2.159970
 H -2.751761 -3.011938 -1.099446
 H -4.444328 -2.496707 -1.405106
 Si -0.231241 -1.161236 1.406498
 H -0.515191 -0.735778 2.864635
 H -0.059361 0.205465 2.283609

IX^{Si}

Nicht gefunden.

3.5.1.2 Reaktionspfad B

Y₂Si

E = -4084.06900568
 C 3.778949 2.926393 -0.131907
 H 3.371071 3.256561 0.820231
 C 3.073672 1.996633 -0.879027
 C -4.049463 -1.473805 -1.378428

O 0.470470 1.748864 -1.264278
 C -4.198532 -0.855530 -2.615919
 H -3.332004 -0.441520 -3.131524
 C 2.647359 -3.115070 2.319958
 H 3.664381 -2.774264 2.508103
 C 5.000893 3.388325 -0.610764
 H 5.567456 4.109973 -0.023645
 C -0.903935 4.925107 0.594370
 H -0.303843 5.554092 1.248562
 C -1.177328 3.615474 0.969571
 H -0.763256 3.223098 1.892447
 C 2.836686 -2.195978 -2.594053
 H 2.057602 -1.455826 -2.779507
 C 3.294174 -2.400785 -1.293359
 C 5.251020 -0.464113 0.310783
 H 5.457391 -0.937526 -0.646635
 C 6.231323 0.297405 0.937580
 H 7.207448 0.409647 0.469798
 C -1.373922 5.420508 -0.615489
 H -1.150341 6.444345 -0.909736
 C -1.779015 0.040044 -0.735879
 Si -0.123239 0.117488 -1.956782
 O -2.655444 -1.944992 0.780719
 S -2.429621 -1.563898 -0.629362
 P -2.275099 1.073134 0.581622
 C -5.463650 -0.760049 -3.173648
 H -5.587175 -0.270219 -4.138843
 C -4.515288 0.092933 1.945554
 H -3.795941 -0.453242 2.548931
 C -0.546897 -0.259540 2.276818
 H -0.248608 -0.785105 1.376977
 C 4.705502 0.793923 2.737658
 H 4.486929 1.294086 3.678863
 C 3.720228 0.038255 2.117487
 H 2.725092 -0.030261 2.555119
 C -2.391616 3.291462 -1.091706
 H -2.931632 2.649993 -1.782725

C 1.933441 -2.632660 1.221004
 C 3.559387 1.534745 -2.098996
 H 2.987961 0.800048 -2.665164
 C 4.254297 -3.382576 -1.031595
 H 4.592562 -3.555712 -0.009885
 C 3.995905 -0.604761 0.905006
 C -1.341777 1.134671 4.553698
 H -1.653279 1.677388 5.443978
 C -1.507875 0.739029 2.183145
 C -1.914628 1.434997 3.325374
 H -2.685452 2.202014 3.255636
 C -1.938316 2.795909 0.135502
 C -2.115802 4.601043 -1.459082
 H -2.467364 4.974831 -2.418311
 C 6.850221 3.411812 -2.324426
 H 7.581418 2.592546 -2.341269
 H 7.255600 4.208921 -1.692936
 H 6.775600 3.794572 -3.349756
 C -0.383221 0.127235 4.646360
 H 0.051582 -0.117684 5.613941
 C -6.585389 -1.282446 -2.518161
 C 5.961557 0.921374 2.150675
 H 6.730264 1.519214 2.636873
 C -6.363282 1.405540 0.331185
 H -7.080829 1.916972 -0.307242
 C 1.455825 -0.303030 -0.483221
 P 2.606029 -1.408806 0.059786
 O 1.369354 1.934948 1.079753
 S 1.566214 1.299749 -0.231228
 O -1.622101 -2.467809 -1.456881
 C 5.520272 2.935301 -1.822990
 C 4.775316 2.007561 -2.562892
 H 5.160840 1.648077 -3.516196
 C 3.353571 -2.964821 -3.633062
 H 2.987520 -2.813233 -4.646421
 C 4.324463 -3.925385 -3.376132
 H 4.728311 -4.522337 -4.191872

C 4.774886 -4.136102 -2.074135
 H 5.528003 -4.895344 -1.872530
 C -5.003551 1.581012 0.111475
 H -4.678503 2.233120 -0.693125
 C 0.007971 -0.574144 3.511778
 H 0.736321 -1.379945 3.582065
 C -4.067563 0.934807 0.923456
 C -6.803566 0.583801 1.363861
 H -7.869686 0.449436 1.537324
 C -6.399466 -1.919372 -1.291636
 H -7.260127 -2.334581 -0.768643
 C -5.877620 -0.071918 2.166467
 H -6.214368 -0.726597 2.967945
 C 0.730803 -4.428096 2.970920
 H 0.255822 -5.116862 3.667289
 C 2.043027 -4.017018 3.190296
 H 2.595325 -4.389496 4.051099
 C -5.137826 -2.016859 -0.714871
 H -4.985829 -2.486638 0.253924
 C -7.953637 -1.131952 -3.112277
 H -7.944215 -1.312064 -4.193566
 H -8.337060 -0.113579 -2.958585
 H -8.668195 -1.824852 -2.655750
 C 0.024690 -3.956958 1.867655
 H -1.007890 -4.249056 1.690129
 C 0.629740 -3.072739 0.984487
 H 0.071751 -2.705517 0.123714
 H -1.875092 0.785571 -1.840422
 H -1.309969 1.217938 -2.730712

YSiCl

E = -2648.09725670
 C -2.381881 -0.325453 -1.300390
 C -2.725322 1.019543 -1.372987
 H -2.063540 1.722907 -1.876509
 C 2.938664 3.099542 1.947271
 H 3.886064 3.242337 2.462621

C 2.575767 1.828723 1.519853
 H 3.250801 0.992040 1.677187
 C 2.107546 4.187281 1.700902
 H 2.400145 5.181758 2.031899
 C 0.368175 0.204565 -1.415572
 Si 1.589766 0.820524 -2.891910
 O -0.622981 -2.244285 -1.466854
 S -0.835097 -0.888252 -2.002241
 P 0.815267 0.019717 0.246337
 C -3.908037 1.451323 -0.790054
 H -4.176965 2.505869 -0.836731
 C -0.758760 -1.874114 1.539150
 H -0.100506 -2.598682 1.067736
 C 2.535938 -2.014790 -0.500029
 H 2.134209 -1.849366 -1.496843
 C 0.543634 2.738174 0.585324
 H -0.385075 2.596749 0.032049
 C 3.468729 -2.485813 2.085707
 H 3.826043 -2.676822 3.095538
 C 2.086054 -1.231550 0.559970
 C 2.536461 -1.482388 1.859630
 H 2.147556 -0.902238 2.695895
 C 1.366322 1.639044 0.851609
 C 0.911718 4.007023 1.014880
 H 0.267037 4.857240 0.802656
 C 3.934729 -3.253186 1.020769
 H 4.662206 -4.042638 1.199821
 C -4.763311 0.552567 -0.144066
 C -2.497091 -0.022137 2.679448
 H -3.176842 0.705234 3.118953
 O -0.917446 -0.697617 -3.451962
 C -1.438454 0.416339 1.894867
 H -1.298625 1.481925 1.740162
 C 3.461891 -3.024806 -0.266289
 H 3.809971 -3.637539 -1.094808
 C -0.559850 -0.507211 1.323342
 C -2.684709 -1.382147 2.902625

H -3.512806 -1.723436 3.521053
 C -4.410808 -0.797928 -0.121237
 H -5.068590 -1.514438 0.369353
 C -1.816256 -2.304663 2.330840
 H -1.963180 -3.370201 2.494716
 C -3.225668 -1.242869 -0.692849
 H -2.927315 -2.287771 -0.653099
 C -6.008128 1.030052 0.540654
 H -6.823204 0.303942 0.445937
 H -6.351463 1.987342 0.134438
 H -5.827291 1.174916 1.615494
 H 0.456392 1.683238 -1.801265
 H 0.911835 2.363744 -2.365336
 Cl 3.363428 1.083372 -1.689591

YSiHMDS

E = -3061.88581469
 C -2.471868 -1.979731 -0.015799
 C -2.754848 -2.150387 -1.366663
 H -1.948187 -2.098072 -2.096821
 C 0.148570 4.544699 -2.066253
 H 0.535816 5.544341 -1.880793
 C 0.051176 3.641187 -1.014868
 H 0.381936 3.938183 -0.023455
 C -0.232028 4.169835 -3.349701
 H -0.147632 4.877322 -4.172237
 C -0.129020 -0.423053 -0.528183
 Si 1.374151 -1.427666 -1.549676
 O -0.887904 -1.125408 1.876175
 S -0.794242 -1.664938 0.502888
 P -0.598225 1.130489 0.104668
 C -4.066288 -2.370503 -1.757781
 H -4.295759 -2.499845 -2.814919
 C -2.727970 1.153209 1.943763
 H -1.967034 1.030614 2.709197
 C 1.451467 1.012481 1.947979
 H 1.726168 0.106733 1.409033

C -0.811439 1.979491 -2.533427
 H -1.174080 0.969429 -2.718581
 C 0.687855 3.316039 3.325677
 H 0.385243 4.209208 3.868577
 C 0.338387 1.740949 1.531961
 C -0.049190 2.890021 2.228602
 H -0.937811 3.441811 1.924283
 C -0.431908 2.351407 -1.238726
 C -0.712257 2.885415 -3.581886
 H -1.004684 2.582037 -4.584914
 C 1.804541 2.591862 3.734986
 H 2.377538 2.921817 4.599468
 C -5.101530 -2.433869 -0.816959
 C -4.682576 1.344371 -0.031488
 H -5.442584 1.408093 -0.807416
 O -0.051918 -2.917448 0.314483
 C -3.339938 1.320056 -0.384983
 H -3.064816 1.367482 -1.435335
 C 2.182336 1.442710 3.049620
 H 3.047696 0.870826 3.376939
 C -2.353759 1.234521 0.600723
 C -5.050447 1.287725 1.308900
 H -6.102654 1.310405 1.586351
 C -4.781220 -2.284188 0.532335
 H -5.572947 -2.335667 1.278708
 C -4.072551 1.190154 2.292542
 H -4.355982 1.129624 3.341424
 C -3.472268 -2.054641 0.940727
 H -3.216973 -1.910196 1.987736
 C -6.520470 -2.633879 -1.257751
 H -6.937866 -1.704560 -1.669788
 H -7.160311 -2.940887 -0.423913
 H -6.593202 -3.394844 -2.043493
 H 0.485006 0.052143 -1.718191
 H 1.222127 -0.073794 -2.477392
 Si 3.951857 0.283041 -0.885082
 Si 3.462385 -2.527563 0.241482

C 2.807815 -4.118081 -0.503260
 H 1.718212 -4.192456 -0.431422
 H 3.100604 -4.210428 -1.557098
 H 3.246810 -4.963328 0.045127
 C 5.339602 -2.672410 0.176643
 H 5.883279 -1.779188 0.501430
 H 5.642134 -3.499233 0.833656
 H 5.669118 -2.924262 -0.839205
 C 2.896192 -2.391371 2.026152
 H 3.160544 -3.300849 2.581784
 H 3.351851 -1.540229 2.547862
 H 1.805752 -2.278995 2.065772
 C 2.995734 1.842575 -1.298473
 H 3.717937 2.668663 -1.361990
 H 2.438164 1.812065 -2.240977
 H 2.297854 2.088092 -0.491113
 C 5.185689 -0.012924 -2.269852
 H 4.659785 -0.231667 -3.208217
 H 5.814332 0.873083 -2.431357
 H 5.845862 -0.860008 -2.050576
 N 2.903649 -1.119279 -0.695076
 C 4.877756 0.672488 0.721457
 H 5.964963 0.614840 0.584093
 H 4.636547 1.688566 1.058500
 H 4.610765 -0.013687 1.533093

YSiB¹

E = -2863.77567360
 C -3.424535 0.382263 -1.318754
 C -3.403221 1.270682 -2.390707
 H -2.628117 1.177909 -3.147259
 C 3.476283 0.181943 2.156074
 H 4.488234 -0.205779 2.067907
 C 2.420586 -0.525698 1.593628
 H 2.612214 -1.456160 1.065618
 C 3.239499 1.383388 2.811959
 H 4.066589 1.935139 3.254569

C -0.765967 -0.131127 -0.468622
 Si 0.089543 1.211868 -1.619906
 O -2.668602 -1.885848 -0.243646
 S -2.167527 -0.871063 -1.192990
 P -0.284883 -0.947330 0.986378
 C -4.379779 2.251753 -2.468809
 H -4.366210 2.952512 -3.302670
 C -1.857395 -1.915256 3.141579
 H -1.289176 -2.839224 3.084895
 C -0.036171 -3.432855 -0.248854
 H -0.538978 -2.981482 -1.098874
 C 0.887575 1.180456 2.345105
 H -0.122048 1.574366 2.432746
 C 1.282922 -4.600394 1.916887
 H 1.802215 -5.052009 2.759815
 C 0.253453 -2.674262 0.882855
 C 0.919816 -3.262139 1.966192
 H 1.159467 -2.668992 2.847514
 C 1.116311 -0.040650 1.704695
 C 1.947384 1.892043 2.889036
 H 1.762809 2.846521 3.376737
 C 0.979601 -5.359590 0.789380
 H 1.260252 -6.410565 0.751192
 C -5.388118 2.350448 -1.503733
 C -3.387973 0.406590 3.257618
 H -3.993225 1.310586 3.285678
 O -1.866104 -1.283877 -2.569572
 C -2.386438 0.280450 2.303201
 H -2.236252 1.073553 1.571652
 C 0.325584 -4.775055 -0.286935
 H 0.098364 -5.360082 -1.174737
 C -1.603781 -0.875372 2.248238
 C -3.625317 -0.626364 4.157893
 H -4.413540 -0.531896 4.902270
 C -5.400888 1.424814 -0.458530
 H -6.194558 1.470871 0.286243
 C -2.863178 -1.787515 4.092399

H -3.058363 -2.607924 4.780108
 C -4.427350 0.437130 -0.359847
 H -4.441127 -0.302765 0.436634
 C -6.432490 3.421424 -1.603469
 H -6.946240 3.385575 -2.572261
 H -5.983674 4.419508 -1.515997
 H -7.186870 3.321934 -0.816333
 H -0.624870 1.335689 -0.050631
 H -0.302903 2.247023 -0.348278
 N 3.012074 2.047842 -0.734094
 C 4.214603 0.226584 -1.237710
 C 4.287015 1.491374 -0.778121
 H 5.028982 -0.454094 -1.452836
 H 5.173727 2.063557 -0.534923
 C 2.514401 -1.351128 -2.014534
 C 1.400135 -1.482101 -2.845434
 C 3.268188 -2.493524 -1.718271
 C 1.062818 -2.714047 -3.388878
 H 0.798888 -0.613833 -3.112531
 C 2.939901 -3.718801 -2.283068
 H 4.116730 -2.420386 -1.041590
 C 1.842738 -3.835550 -3.130223
 H 0.176996 -2.780158 -4.016511
 H 3.543655 -4.593026 -2.046311
 H 1.588612 -4.797092 -3.571855
 C 2.793045 3.368816 -0.309051
 C 1.742757 4.121619 -0.840038
 C 3.630859 3.965248 0.639102
 C 1.513493 5.419556 -0.401825
 H 1.118671 3.696270 -1.622771
 C 3.406155 5.268631 1.061424
 H 4.451063 3.393235 1.064573
 C 2.339479 6.002272 0.553357
 H 0.687202 5.985078 -0.828579
 H 4.069114 5.711005 1.803076
 H 2.160801 7.021283 0.889725
 N 2.889151 -0.093508 -1.512593

B 2.059744 1.051156 -1.186770

(Y_{Ph})₂Si

E = -2906.89499356

P 2.975321 0.362773 -0.071366

P -3.004461 0.425580 -0.070158

C 1.496034 -0.043392 -0.797270

C 1.228633 -1.407942 -1.249592

C 1.752655 -2.566336 -0.647680

H 2.373782 -2.465616 0.239476

C 1.444773 -3.834046 -1.118855

H 1.862697 -4.704767 -0.615734

C 0.580123 -4.002132 -2.197106

H 0.328669 -4.998318 -2.555572

C 0.046474 -2.872901 -2.810925

H -0.619670 -2.982101 -3.666653

C 0.378180 -1.603539 -2.356320

H 0.006835 -0.722899 -2.883741

C 3.176860 0.037141 1.725899

C 3.718309 -1.166787 2.186986

H 4.167321 -1.865472 1.483133

C 3.696158 -1.479478 3.540756

H 4.127401 -2.418028 3.883769

C 3.119181 -0.600865 4.452003

H 3.097004 -0.848540 5.511525

C 2.569942 0.596129 4.002891

H 2.115379 1.287395 4.709977

C 2.600090 0.915900 2.650923

H 2.164483 1.851981 2.306785

C 3.324688 2.143697 -0.252976

C 4.150840 2.827033 0.642418

H 4.534258 2.322176 1.526621

C 4.488524 4.154920 0.408873

H 5.130417 4.680314 1.113357

C 4.008519 4.808143 -0.721660

H 4.269949 5.849522 -0.900812

C 3.203747 4.125717 -1.627330

H 2.833500 4.628536 -2.518390
 C 2.870439 2.795551 -1.401737
 H 2.259013 2.248847 -2.115993
 C 4.423949 -0.433791 -0.844594
 C 4.309218 -0.982338 -2.122607
 H 3.338252 -1.005411 -2.610721
 C 5.433053 -1.494909 -2.760731
 H 5.335043 -1.931865 -3.752461
 C 6.675447 -1.449229 -2.137335
 H 7.552986 -1.850910 -2.640744
 C 6.797949 -0.882271 -0.872494
 H 7.770381 -0.832662 -0.386395
 C 5.676643 -0.374395 -0.228530
 H 5.776440 0.073880 0.759115
 C -1.339331 0.066260 0.130041
 C -1.033112 -1.225893 0.789160
 C -0.135907 -1.274895 1.867969
 H 0.313884 -0.351061 2.222770
 C 0.186272 -2.471733 2.492726
 H 0.882542 -2.464738 3.329572
 C -0.380286 -3.667937 2.060884
 H -0.126185 -4.607570 2.548200
 C -1.268472 -3.644801 0.991668
 H -1.705932 -4.571538 0.623190
 C -1.581055 -2.445844 0.362578
 H -2.237559 -2.459202 -0.505389
 C -3.952349 0.084374 1.450106
 C -4.157141 1.088150 2.399197
 H -3.841874 2.108109 2.190976
 C -4.771481 0.792692 3.610080
 H -4.933070 1.584062 4.339434
 C -5.178444 -0.508140 3.888113
 H -5.655174 -0.738920 4.838950
 C -4.977813 -1.512308 2.947483
 H -5.292546 -2.532153 3.159307
 C -4.372191 -1.219707 1.731443
 H -4.225611 -2.008425 0.997714

C -3.246090 2.183134 -0.460567
 C -4.192451 2.607861 -1.393938
 H -4.792767 1.880452 -1.934113
 C -4.363155 3.964417 -1.648989
 H -5.099932 4.285031 -2.382768
 C -3.592578 4.904654 -0.975443
 H -3.726086 5.965534 -1.178960
 C -2.644270 4.487598 -0.047143
 H -2.028266 5.217450 0.473825
 C -2.466291 3.134085 0.207205
 H -1.713979 2.817200 0.925754
 C -3.947337 -0.464980 -1.367338
 C -5.334571 -0.625986 -1.314518
 H -5.895802 -0.246967 -0.461782
 C -5.997900 -1.274774 -2.349891
 H -7.077725 -1.403565 -2.304393
 C -5.282198 -1.763196 -3.439711
 H -5.803989 -2.274896 -4.246358
 C -3.901284 -1.604729 -3.494257
 H -3.338759 -1.992505 -4.341423
 C -3.235466 -0.957967 -2.459406
 H -2.152282 -0.852146 -2.468676
 Si 0.048837 1.179901 -0.797347
 H -0.511304 1.096134 0.953924
 H 0.258504 1.728443 0.976649

Y_{Ph}SiCl

E = -2059.50608727
 P -0.534757 -0.143488 -0.040760
 C 0.827092 0.647168 -0.727156
 C 2.178051 0.141206 -0.415460
 C 3.244646 0.362892 -1.306805
 H 3.068656 0.938852 -2.213611
 C 4.517992 -0.124085 -1.053979
 H 5.314338 0.070061 -1.770948
 C 4.784169 -0.853773 0.101569
 H 5.783893 -1.235737 0.298012

C 3.752195 -1.071911 1.006311
 H 3.937471 -1.627001 1.924737
 C 2.479229 -0.573682 0.758210
 H 1.701147 -0.743784 1.501734
 C -2.037783 0.100241 -1.040674
 C -2.353791 -0.800977 -2.059675
 H -1.735372 -1.681678 -2.220106
 C -3.463303 -0.579295 -2.866343
 H -3.704922 -1.287074 -3.656635
 C -4.262566 0.540696 -2.661755
 H -5.131085 0.712302 -3.294714
 C -3.951363 1.441052 -1.648454
 H -4.570667 2.321081 -1.488369
 C -2.843103 1.224423 -0.839360
 H -2.596147 1.938599 -0.056597
 C -1.009061 0.468246 1.613556
 C -2.245982 0.188477 2.204157
 H -2.977629 -0.422438 1.676291
 C -2.551988 0.709951 3.454312
 H -3.515036 0.492079 3.911918
 C -1.632107 1.521326 4.114893
 H -1.877160 1.933577 5.091896
 C -0.409829 1.817556 3.522831
 H 0.302868 2.463800 4.030727
 C -0.097335 1.295629 2.271722
 H 0.850628 1.537596 1.789513
 C -0.287499 -1.940347 0.064950
 C 0.473279 -2.549884 -0.937876
 H 0.926199 -1.935919 -1.714176
 C 0.671190 -3.923959 -0.920631
 H 1.270849 -4.391527 -1.698718
 C 0.119112 -4.696128 0.097011
 H 0.280636 -5.772274 0.112438
 C -0.628954 -4.091377 1.100731
 H -1.052796 -4.691086 1.903644
 C -0.832354 -2.715641 1.088343
 H -1.402600 -2.249400 1.887736

Si 0.417067 2.517123 -1.206945
 Cl 2.284806 3.425361 -0.763133
 H 0.913808 1.931225 -2.821057
 H 0.914026 1.153399 -2.234395

Y_{Ph}SiHMDS

E = -2473.30116145
 P -1.693447 0.228292 -0.107178
 C -0.052819 -0.144480 -0.403007
 C 0.332303 -1.488935 0.116382
 C -0.034342 -2.670256 -0.545959
 H -0.591674 -2.600465 -1.478906
 C 0.299628 -3.921369 -0.038819
 H -0.002648 -4.819980 -0.574300
 C 1.027800 -4.024313 1.142360
 H 1.296623 -5.001640 1.539065
 C 1.409503 -2.864734 1.811304
 H 1.976174 -2.931233 2.739098
 C 1.059086 -1.618136 1.307000
 H 1.332760 -0.714968 1.845643
 C -2.889477 -0.679190 -1.158101
 C -4.155903 -1.059750 -0.710485
 H -4.453925 -0.856189 0.316221
 C -5.036531 -1.701141 -1.575631
 H -6.019736 -2.003297 -1.219985
 C -4.661947 -1.957064 -2.890671
 H -5.352207 -2.461232 -3.564430
 C -3.403739 -1.571282 -3.344286
 H -3.108695 -1.768936 -4.372899
 C -2.520402 -0.937583 -2.479415
 H -1.528313 -0.642206 -2.820771
 C -2.100534 1.974162 -0.375535
 C -3.185218 2.367702 -1.159923
 H -3.804093 1.621911 -1.652623
 C -3.475884 3.719158 -1.317452
 H -4.321348 4.019282 -1.933086
 C -2.690503 4.680617 -0.692900

H -2.920154 5.736978 -0.819250
 C -1.608284 4.292731 0.091668
 H -0.986195 5.041334 0.577755
 C -1.310743 2.946130 0.245898
 H -0.463189 2.638805 0.852292
 C -2.207599 -0.195923 1.592924
 C -2.273291 -1.547183 1.955201
 H -2.116330 -2.321525 1.206534
 C -2.534133 -1.906981 3.271070
 H -2.574283 -2.960328 3.540946
 C -2.738332 -0.927138 4.237157
 H -2.942117 -1.210934 5.267908
 C -2.686219 0.416014 3.881359
 H -2.855482 1.187196 4.630305
 C -2.420928 0.782551 2.566370
 H -2.388489 1.836304 2.300710
 Si 1.246264 1.183503 -1.067024
 N 2.804045 0.507545 -0.455528
 Si 3.414158 1.305828 0.983579
 Si 3.841516 -0.478663 -1.477695
 C 1.976209 2.172998 1.847502
 H 1.646957 3.046608 1.269785
 H 1.111592 1.512331 1.999984
 H 2.303356 2.533342 2.831833
 C 4.194431 0.114911 2.217826
 H 5.269060 -0.007674 2.044112
 H 4.066420 0.504900 3.236428
 H 3.729670 -0.877029 2.171410
 C 4.656380 2.649324 0.547287
 H 5.021709 3.167425 1.444179
 H 5.527140 2.246903 0.015058
 H 4.183641 3.392720 -0.107884
 C 5.496509 -0.838846 -0.655012
 H 6.139670 -1.327858 -1.399198
 H 6.023575 0.055867 -0.303684
 H 5.386870 -1.527503 0.190677
 C 4.198957 0.447689 -3.075894

H 4.836107 -0.142620 -3.747721
H 3.276151 0.694685 -3.615899
H 4.715643 1.391483 -2.856259
C 3.107466 -2.160560 -1.865385
H 2.164730 -2.110744 -2.420050
H 3.824461 -2.728662 -2.474300
H 2.924211 -2.721287 -0.939955
H 1.223278 0.119881 -2.474805
H 0.566656 -0.232929 -1.848593

Y_{Ph}SiB¹

E = -2275.18420059
P 1.725272 0.788111 0.026891
C 0.187884 0.033305 0.135415
C 0.006238 -1.092291 1.065898
C -1.167981 -1.208782 1.834870
H -1.951548 -0.460399 1.717086
C -1.346126 -2.244775 2.739724
H -2.270498 -2.297881 3.313414
C -0.348903 -3.200440 2.929497
H -0.485707 -4.008234 3.645943
C 0.820496 -3.105466 2.184221
H 1.609252 -3.846084 2.307669
C 0.986693 -2.081577 1.259972
H 1.903969 -2.044187 0.673024
C 1.551816 2.584106 -0.255824
C 1.506339 3.468844 0.823284
H 1.651722 3.102049 1.836913
C 1.284715 4.823983 0.607166
H 1.254454 5.506787 1.453877
C 1.106459 5.304323 -0.685813
H 0.933080 6.365689 -0.853378
C 1.149777 4.427141 -1.764303
H 1.005866 4.797197 -2.777370
C 1.369718 3.071366 -1.553189
H 1.387449 2.384439 -2.396969
C 2.836309 0.262491 -1.324318

C 3.917046 1.035551 -1.759640
 H 4.103827 2.011422 -1.312747
 C 4.745808 0.562053 -2.769081
 H 5.587218 1.163890 -3.107219
 C 4.496066 -0.678637 -3.351229
 H 5.146023 -1.046499 -4.143023
 C 3.413643 -1.442069 -2.929151
 H 3.215418 -2.407796 -3.389789
 C 2.580575 -0.970817 -1.920018
 H 1.717242 -1.548094 -1.591658
 C 2.665633 0.603756 1.572594
 C 1.962698 0.668317 2.781182
 H 0.881766 0.793185 2.768247
 C 2.637495 0.543501 3.987430
 H 2.081800 0.586681 4.921812
 C 4.015660 0.348046 3.999815
 H 4.542462 0.244260 4.946546
 C 4.716621 0.276020 2.802111
 H 5.792793 0.114919 2.807234
 C 4.045684 0.401869 1.589875
 H 4.600951 0.329150 0.658118
 Si -1.025948 0.527859 -1.348350
 N -2.681460 -2.062681 -0.750541
 C -4.645074 -1.341819 0.034281
 C -3.904075 -2.441825 -0.210644
 H -5.668694 -1.281049 0.384730
 H -4.185038 -3.482176 -0.098507
 B -2.622088 -0.619144 -0.809462
 N -3.926788 -0.207470 -0.335943
 C -4.432749 1.090790 -0.161775
 C -5.211109 1.413253 0.952943
 C -4.162561 2.080843 -1.110216
 C -5.707363 2.701407 1.112563
 H -5.408089 0.653318 1.706023
 C -4.648496 3.369312 -0.935956
 H -3.575064 1.825108 -1.990245
 C -5.426498 3.687289 0.173245

H -6.310224 2.937357 1.987704
H -4.425354 4.128883 -1.682903
H -5.812379 4.696213 0.303080
C -1.650560 -2.973195 -1.014131
C -0.762537 -2.728970 -2.064610
C -1.487296 -4.124540 -0.240688
C 0.272829 -3.616559 -2.325953
H -0.911762 -1.855930 -2.700152
C -0.448040 -5.004869 -0.507617
H -2.149353 -4.301187 0.602857
C 0.441897 -4.756373 -1.546985
H 0.942094 -3.421430 -3.161937
H -0.323327 -5.886423 0.118395
H 1.254495 -5.449470 -1.754169
H -0.936284 1.227014 0.246057
H -1.558566 1.776990 -0.242117

V^{Si}

E = -1309.00443033
C 1.670449 2.178436 -0.249992
C -0.460117 1.035130 -0.270476
C -1.109181 2.266661 -0.307785
C -0.370667 3.450142 -0.282471
C 1.014708 3.410451 -0.235588
H 2.760415 2.160777 -0.260511
H -2.194428 2.305376 -0.348778
H -0.891859 4.405335 -0.303082
H 1.593053 4.331937 -0.212038
N -1.085155 -0.219321 -0.243922
Si -0.023409 -1.659821 -0.457054
C -2.466383 -0.368827 -0.033954
C -3.129610 0.295960 1.006774
C -3.197655 -1.254231 -0.833072
C -4.483022 0.085510 1.227505
H -2.565941 0.969176 1.648821
C -4.549276 -1.475778 -0.594084
H -2.691464 -1.762518 -1.652182

C -5.202378 -0.802669 0.431180
 H -4.979294 0.610291 2.042353
 H -5.097207 -2.172225 -1.226471
 H -6.262546 -0.968118 0.611523
 C 0.957718 0.980057 -0.284402
 C 1.484638 -0.390964 -0.358367
 P 3.032203 -0.801510 0.224258
 C 4.437569 -0.262319 -0.803840
 H 4.436196 0.828802 -0.891651
 H 5.391637 -0.589184 -0.373793
 H 4.318892 -0.687301 -1.806224
 C 3.407658 -0.138951 1.876589
 H 4.443712 -0.338239 2.172616
 H 3.229122 0.941986 1.864385
 H 2.718376 -0.591622 2.596988
 C 3.203788 -2.597173 0.332227
 H 4.202006 -2.862970 0.695987
 H 2.438717 -2.992069 1.009025
 H 3.044610 -3.038141 -0.657600
 H 0.280205 -1.370065 -2.212160
 H 1.017134 -0.854429 -1.676327

Vl^{Si}

E = -1858.20497995
 C 0.119960 3.177921 -0.025447
 C -0.014282 1.795259 -0.008039
 C -1.161882 1.143666 -0.481625
 C -2.208009 1.951122 -0.949852
 C -2.087891 3.332290 -0.953997
 C -0.923592 3.955538 -0.504823
 H 1.041263 3.612883 0.356249
 H -3.114106 1.471710 -1.313531
 H -2.914088 3.935228 -1.326762
 H -0.837114 5.039527 -0.520655
 N -1.244219 -0.253469 -0.516190
 S 1.224782 0.816132 0.778209
 O 2.417010 1.653421 1.033822

O 0.619025 0.183424 1.956510
 C 1.593988 -0.359636 -0.433438
 C -2.472378 -0.830922 -0.106846
 C -2.977673 -0.520084 1.160325
 C -3.171313 -1.720934 -0.923727
 C -4.171557 -1.079843 1.590519
 H -2.398350 0.144540 1.798553
 C -4.357336 -2.295066 -0.476355
 H -2.780635 -1.954408 -1.912599
 C -4.865858 -1.972294 0.776141
 H -4.555199 -0.832211 2.578733
 H -4.893406 -2.989199 -1.121177
 H -5.798262 -2.415794 1.119608
 P 3.150835 -1.052572 -0.158116
 C 4.504625 0.029263 -0.670047
 H 5.479182 -0.397929 -0.408278
 H 4.442145 0.189519 -1.751427
 H 4.347587 0.982982 -0.154873
 C 3.295243 -2.585375 -1.100723
 H 3.138022 -2.379065 -2.164879
 H 4.289601 -3.021250 -0.955900
 H 2.525241 -3.289129 -0.766823
 C 3.446617 -1.448873 1.583502
 H 3.379460 -0.510772 2.145782
 H 2.650024 -2.113613 1.932644
 H 4.429373 -1.911496 1.728915
 Si 0.029561 -1.353999 -1.158239
 H 0.367215 -0.227947 -2.496786
 H 1.058435 0.000213 -1.793793

VII^{Si}

E = -2620.28368690
 C 0.363720 1.595953 0.533262
 C -0.450438 1.589143 -0.601218
 C -0.845132 2.799170 -1.170356
 C -0.457260 4.008206 -0.609236
 C 0.336610 4.015418 0.530928

C 0.744574 2.814482 1.095696
 H -1.477207 2.761943 -2.054088
 H -0.777723 4.943132 -1.064798
 H 0.642998 4.955872 0.984563
 H 1.380058 2.795961 1.977431
 S 0.955879 0.152080 1.470951
 S -1.024129 0.106484 -1.482769
 O 2.185594 0.669939 2.107338
 O -0.159013 -0.240189 2.347671
 O 0.156678 -0.339675 -2.262943
 O -2.207778 0.603067 -2.207702
 C -1.389182 -1.105401 -0.395737
 P -2.848988 -0.967606 0.475016
 P 2.896990 -0.906880 -0.367147
 C -2.834278 -2.123639 1.855088
 H -3.773779 -2.057182 2.413934
 H -2.698504 -3.143239 1.479595
 H -1.984574 -1.852075 2.490782
 C -3.114684 0.680969 1.173399
 H -3.139034 1.401326 0.347829
 H -4.059919 0.721284 1.726181
 H -2.267802 0.899589 1.833614
 C -4.317787 -1.303024 -0.532366
 H -4.277841 -2.340418 -0.880963
 H -5.249075 -1.124788 0.017495
 H -4.248918 -0.639965 -1.402559
 C 3.011938 -2.012913 -1.783709
 H 3.967466 -1.846748 -2.293506
 H 2.928770 -3.054967 -1.462012
 H 2.172584 -1.777854 -2.449936
 C 3.103352 0.759914 -1.042397
 H 3.082347 1.481395 -0.219832
 H 4.055556 0.833102 -1.579630
 H 2.262503 0.938947 -1.723002
 C 4.325202 -1.207542 0.700935
 H 5.267690 -0.999792 0.181746
 H 4.208419 -0.551803 1.570121

H 4.303327 -2.250367 1.034555
H -0.099695 -2.838174 1.196029
C 1.375034 -1.139488 0.433445
H 0.662422 -2.164625 1.231361
Si 0.041289 -2.348780 -0.413227

VIII^{Si}

E = -1828.25649934
C 0.669641 3.177787 0.495705
C 0.190413 1.877994 0.433601
C -0.981498 1.464044 -0.210250
C -1.726355 2.476315 -0.827239
C -1.294600 3.795460 -0.765736
C -0.109874 4.153796 -0.109657
H 1.598180 3.416492 1.010443
H -2.657245 2.229523 -1.336234
H -1.895411 4.575913 -1.230355
H 0.195473 5.197195 -0.069769
B -1.161299 -0.120283 -0.079370
S 0.997193 0.408274 0.930113
O 1.929128 0.483203 2.057296
O -0.296047 -0.419843 1.201993
C -2.604706 -0.745623 0.050257
C -3.066657 -1.309140 1.245331
C -3.487980 -0.730317 -1.038209
C -4.352854 -1.828868 1.351827
H -2.400478 -1.335846 2.106671
C -4.778152 -1.238261 -0.937432
H -3.153020 -0.320119 -1.993088
C -5.216461 -1.792238 0.261803
H -4.685889 -2.262909 2.293934
H -5.442786 -1.210485 -1.800006
H -6.223902 -2.196938 0.344070
C 1.641348 -0.281645 -0.490754
H 1.097385 0.382450 -1.717034
P 3.156681 -1.076414 -0.288152
C 4.487394 0.016259 0.265175

H 4.619796 0.812199 -0.474943
H 4.184558 0.457243 1.220114
H 5.423579 -0.540103 0.385815
C 3.648365 -1.759987 -1.880786
H 4.593766 -2.304627 -1.781797
H 2.853558 -2.427622 -2.231897
H 3.762307 -0.944218 -2.602294
C 3.096449 -2.445460 0.895381
H 4.064584 -2.949712 0.990874
H 2.793835 -2.025343 1.861314
H 2.333820 -3.158194 0.562548
Si 0.091789 -1.072875 -1.554603
H 0.402559 0.353001 -2.445003

IX^{Si}

E = -1279.04316670
C -1.780857 2.109305 0.036896
C 0.433767 1.086488 0.167727
C 0.974161 2.378359 0.326863
C 0.177327 3.506520 0.342745
C -1.208363 3.355860 0.192323
H -2.863201 2.048881 -0.067776
H 2.050286 2.478263 0.465912
H 0.609374 4.495557 0.480169
H -1.849722 4.236836 0.205486
B 1.221964 -0.227199 0.157437
C 2.764388 -0.379145 0.031514
C 3.538185 0.481533 -0.768615
C 3.442728 -1.421220 0.688360
C 4.911579 0.316329 -0.898709
H 3.044627 1.283403 -1.316381
C 4.819208 -1.576979 0.583917
H 2.870535 -2.120043 1.298796
C 5.558537 -0.708583 -0.213920
H 5.483067 0.990715 -1.534830
H 5.318025 -2.385590 1.116057
H 6.635945 -0.834868 -0.308121

C -0.985763 0.935930 0.022543
P -3.144959 -0.795045 -0.120821
C -4.076626 -0.290284 1.363617
H -3.956064 0.786037 1.522776
H -5.142222 -0.531469 1.275693
H -3.648944 -0.813200 2.225807
C -4.097134 -0.115207 -1.518590
H -5.153921 -0.397342 -1.447811
H -4.013634 0.975107 -1.543582
H -3.671481 -0.511391 -2.446613
C -3.385940 -2.581562 -0.238254
H -4.456665 -2.811869 -0.268487
H -2.899896 -2.956173 -1.145146
H -2.914855 -3.066902 0.622449
Si -0.110653 -1.767737 0.327289
H 0.089943 -1.878921 -1.419825
C -1.473606 -0.415937 -0.116205
H -0.587034 -1.265490 -1.284756

3.5.1.3 Reaktionspfad C

VIII^{Si}

E = -1828.25649934
C -0.841344 2.986337 -0.224582
C -0.261507 1.730304 -0.278490
C 0.939797 1.368563 0.336800
C 1.590694 2.367030 1.065312
C 1.046461 3.647004 1.131767
C -0.155497 3.961504 0.492427
H -1.776134 3.202362 -0.738765
H 2.533743 2.146780 1.564732
H 1.571452 4.424609 1.684253
H -0.550981 4.973702 0.547651
B 1.252024 -0.187732 0.052949
S -0.931617 0.258385 -0.984976
O -1.793001 0.504162 -2.143326
O 0.462136 -0.405748 -1.264007

C -1.566438 -0.700240 0.223802
 C 2.754451 -0.679083 -0.028101
 C 3.716858 0.189559 -0.564491
 C 3.193713 -1.941698 0.385426
 C 5.050753 -0.182943 -0.686533
 H 3.410568 1.180666 -0.899308
 C 4.526633 -2.323572 0.270938
 H 2.470980 -2.639637 0.807253
 C 5.460639 -1.444153 -0.265801
 H 5.773845 0.512375 -1.110642
 H 4.837955 -3.312749 0.603575
 H 6.504931 -1.739711 -0.354938
 P -3.252040 -0.955274 0.194416
 C -4.224253 0.573882 0.140070
 H -5.299926 0.364971 0.137409
 H -3.962607 1.194224 1.003655
 H -3.951498 1.102912 -0.780252
 C -3.716295 -1.848961 1.689683
 H -3.464045 -1.239204 2.563122
 H -4.787491 -2.076659 1.682659
 H -3.137259 -2.777801 1.739166
 C -3.836470 -1.927711 -1.218515
 H -3.500583 -1.405585 -2.121448
 H -3.361392 -2.913907 -1.185686
 H -4.927253 -2.034327 -1.223063
 Si -0.185596 -1.611746 1.213893
 H -0.201030 -0.538730 2.451807
 H 0.419164 -0.168481 1.653343

IX^{Si}

E = -1279.05823590
 C -1.777187 2.110375 0.060327
 C 0.438630 1.099952 0.112324
 C 0.979785 2.386869 0.266660
 C 0.180499 3.518263 0.312776
 C -1.202502 3.364358 0.196146
 H -2.862195 2.047521 -0.009025

H 2.058883 2.491801 0.370766
 H 0.616383 4.506707 0.440999
 H -1.847281 4.242443 0.226980
 C 2.773322 -0.377493 -0.017575
 C 3.602365 0.524064 -0.707938
 C 3.397941 -1.479023 0.593129
 C 4.979404 0.343699 -0.772320
 H 3.154204 1.368900 -1.228379
 C 4.775458 -1.648511 0.561991
 H 2.783611 -2.219786 1.105731
 C 5.571597 -0.735966 -0.125321
 H 5.594995 1.050161 -1.327051
 H 5.231240 -2.503275 1.059167
 H 6.650919 -0.873563 -0.165917
 C -0.985692 0.942238 0.041263
 C -1.482216 -0.422377 -0.032958
 P -3.148599 -0.794897 -0.094719
 C -4.127005 -0.246609 1.344378
 H -4.012248 0.832966 1.482485
 H -5.189233 -0.488716 1.224480
 H -3.731661 -0.747450 2.234496
 C -4.054283 -0.138155 -1.535695
 H -5.119989 -0.390091 -1.489349
 H -3.939061 0.948748 -1.587476
 H -3.609612 -0.570811 -2.438206
 C -3.421368 -2.580065 -0.171586
 H -4.496934 -2.784007 -0.214892
 H -2.923043 -2.987461 -1.056785
 H -2.983164 -3.055222 0.711484
 Si -0.192115 -1.737858 -0.167118
 H 0.461380 -1.396792 1.718507
 H 0.057003 -2.095458 1.757377
 B 1.226382 -0.218574 0.038287

3.5.2 Bei Germylenen

3.5.2.1 Reaktionspfad A

Y_2Ge

E = -5872.32885309

S -2.239495 1.328848 0.436903

S 2.005727 -1.292497 0.276699

P -2.265541 -1.566437 0.108656

P 2.427508 1.580251 0.207837

O -1.316687 2.442412 0.131808

O -2.522764 1.024203 1.854784

O 0.989827 -2.312171 -0.019345

O 2.370255 -1.097410 1.700748

C -1.643484 -0.042789 -0.385049

C -4.075289 -1.459689 0.352993

C -4.586194 -1.259167 1.637935

H -3.907813 -1.202550 2.484723

C -5.954452 -1.102887 1.828129

H -6.341725 -0.950384 2.833636

C -6.820467 -1.128982 0.741746

H -7.890994 -1.003084 0.893215

C -6.314564 -1.305204 -0.542354

H -6.985227 -1.316959 -1.399183

C -4.949646 -1.469953 -0.736534

H -4.570970 -1.613552 -1.744217

C -1.955463 -2.767175 -1.211690

C -2.264411 -2.407244 -2.528344

H -2.648819 -1.409364 -2.736083

C -2.034818 -3.298261 -3.566974

H -2.278696 -3.013386 -4.588559

C -1.471775 -4.543849 -3.301779

H -1.282056 -5.239571 -4.117088

C -1.129246 -4.887863 -2.000075

H -0.657264 -5.846321 -1.794498

C -1.366626 -4.002861 -0.953844

H -1.052090 -4.255297 0.054689

C -1.684798 -2.272900 1.672460

C -2.264042 -3.423547 2.216931
 H -3.092085 -3.916289 1.707811
 C -1.783394 -3.931236 3.416660
 H -2.230720 -4.827062 3.843252
 C -0.729116 -3.295190 4.071458
 H -0.351630 -3.702431 5.007936
 C -0.159149 -2.149008 3.531701
 H 0.679204 -1.652417 4.014748
 C -0.646773 -1.635874 2.337279
 H -0.202048 -0.751500 1.898575
 C -3.812960 1.784414 -0.277398
 C -3.925277 1.902451 -1.659567
 H -3.054865 1.718937 -2.288196
 C -5.150630 2.237353 -2.212270
 H -5.245155 2.326345 -3.294104
 C -6.271634 2.464710 -1.403448
 C -6.123026 2.358822 -0.021460
 H -6.983209 2.534569 0.623519
 C -4.900310 2.018255 0.548231
 H -4.778084 1.911504 1.623279
 C -7.600710 2.788165 -2.017408
 H -8.301498 3.180962 -1.273325
 H -8.056922 1.892160 -2.460814
 H -7.503005 3.529092 -2.819768
 C 1.597181 0.209110 -0.438990
 C 1.941048 3.023164 -0.769130
 C 1.446990 4.171431 -0.153254
 H 1.344031 4.209353 0.927917
 C 1.053640 5.257144 -0.927586
 H 0.654821 6.145376 -0.442648
 C 1.153706 5.201886 -2.311914
 H 0.841275 6.053030 -2.914093
 C 1.637914 4.053206 -2.931715
 H 1.701285 4.000799 -4.016584
 C 2.020817 2.962146 -2.165262
 H 2.368504 2.049173 -2.645283
 C 4.240583 1.417998 0.107665

C 4.966359 1.989945 -0.939617
 H 4.479224 2.658354 -1.644484
 C 6.320619 1.712213 -1.084761
 H 6.877569 2.164416 -1.903089
 C 6.959289 0.861601 -0.189174
 H 8.017325 0.635841 -0.310981
 C 6.244872 0.305291 0.866330
 H 6.738654 -0.360810 1.570880
 C 4.893411 0.585143 1.023769
 H 4.327453 0.128547 1.832669
 C 2.074374 1.984495 1.938853
 C 2.985015 2.648297 2.762834
 H 3.977301 2.902547 2.394775
 C 2.618007 2.978014 4.063324
 H 3.328870 3.487681 4.710997
 C 1.347580 2.658715 4.536435
 H 1.068018 2.922553 5.554988
 C 0.436582 2.008684 3.709757
 H -0.568092 1.763835 4.048414
 C 0.805860 1.669007 2.416409
 H 0.096841 1.172281 1.765923
 C 3.535595 -1.862272 -0.466240
 C 3.995800 -1.377557 -1.682248
 H 3.397679 -0.647933 -2.224765
 C 5.231061 -1.795272 -2.158598
 H 5.602091 -1.397948 -3.102747
 C 6.014512 -2.701180 -1.439590
 C 5.514598 -3.196302 -0.232333
 H 6.108120 -3.909226 0.339089
 C 4.286773 -2.778361 0.261069
 H 3.914963 -3.129389 1.221158
 C 7.373813 -3.094331 -1.934346
 H 7.731579 -4.008090 -1.448247
 H 8.105879 -2.300975 -1.726590
 H 7.376431 -3.258410 -3.018192
 Ge -0.067547 0.440258 -1.390527
 H -0.014554 -0.226894 -2.809041

H 0.101186 -1.157127 -2.035812

YGeCl

E = -4436.32799327

S 0.684486 1.643520 -1.159647

P -0.739595 -0.661573 0.096995

O 0.559760 3.106874 -1.016885

O 0.529765 1.021973 -2.479027

C -0.419442 1.016842 -0.006083

C -1.017061 -1.100871 1.838041

C -1.973072 -2.034591 2.236399

H -2.610465 -2.516745 1.499760

C -2.134409 -2.328770 3.586194

H -2.889893 -3.049334 3.892584

C -1.343713 -1.698889 4.540196

H -1.476281 -1.929242 5.595462

C -0.389172 -0.765155 4.145779

H 0.226001 -0.263859 4.890267

C -0.227889 -0.461688 2.800843

H 0.499712 0.283977 2.482671

C 0.693318 -1.629348 -0.460845

C 1.701662 -1.994316 0.434591

H 1.613515 -1.752439 1.490721

C 2.822360 -2.674358 -0.023182

H 3.605779 -2.954533 0.677764

C 2.940490 -2.994531 -1.371796

H 3.818291 -3.530465 -1.728079

C 1.942213 -2.624433 -2.266367

H 2.037739 -2.863739 -3.323404

C 0.820517 -1.938188 -1.817710

H 0.054388 -1.621969 -2.521163

C -2.134855 -1.284665 -0.873721

C -2.319292 -2.658810 -1.064644

H -1.616472 -3.371396 -0.633898

C -3.389331 -3.112382 -1.823742

H -3.532034 -4.180365 -1.975934

C -4.270841 -2.198771 -2.397771

H -5.107141 -2.556240 -2.995669
 C -4.077058 -0.834115 -2.220307
 H -4.756423 -0.118162 -2.677767
 C -3.006418 -0.370923 -1.462267
 H -2.843281 0.697573 -1.337822
 C 2.330292 1.212625 -0.612009
 C 2.727410 1.519476 0.686583
 H 2.040710 2.041289 1.351501
 C 3.992855 1.150910 1.112067
 H 4.306756 1.384298 2.128942
 C 4.880642 0.489319 0.252692
 C 4.463370 0.218841 -1.049182
 H 5.141456 -0.290879 -1.732461
 C 3.191850 0.574665 -1.488166
 H 2.847657 0.350658 -2.494925
 C 6.241196 0.083170 0.733723
 H 6.795423 0.942272 1.131894
 H 6.836100 -0.358506 -0.072147
 H 6.170787 -0.655151 1.543549
 Ge -1.402084 2.466077 0.745158
 H -2.383905 1.217515 1.552119
 H -1.925092 2.260304 2.195371
 Cl -3.107907 3.126523 -0.487858

YGeHMDS

E = -4850.11913580
 S 1.160392 -1.967524 0.032740
 P 0.630558 0.897505 0.311690
 O 0.707714 -3.172273 -0.667037
 O 1.193280 -1.986462 1.512408
 C 0.310622 -0.572784 -0.532887
 C -0.033159 2.274438 -0.665993
 C -0.709194 3.339845 -0.072390
 H -0.916208 3.330049 0.994774
 C -1.127592 4.416726 -0.848986
 H -1.663381 5.240145 -0.381811
 C -0.866654 4.436880 -2.213480

H -1.196461 5.279354 -2.818116
 C -0.194988 3.372810 -2.811141
 H -0.001977 3.379255 -3.881640
 C 0.216945 2.292306 -2.043940
 H 0.726218 1.447672 -2.504646
 C 2.394328 1.283966 0.551414
 C 3.062777 2.192481 -0.271402
 H 2.521771 2.747418 -1.033313
 C 4.429390 2.394053 -0.118273
 H 4.943792 3.106097 -0.760477
 C 5.134831 1.685141 0.847576
 H 6.207519 1.834515 0.958112
 C 4.468077 0.789235 1.676999
 H 5.017000 0.230393 2.431929
 C 3.099943 0.594340 1.542592
 H 2.579607 -0.123729 2.174428
 C -0.061964 1.038115 1.984399
 C 0.387914 2.024419 2.868169
 H 1.179610 2.708986 2.566134
 C -0.168423 2.121950 4.136642
 H 0.180406 2.889713 4.824362
 C -1.161507 1.227920 4.529870
 H -1.589497 1.298331 5.528097
 C -1.598382 0.239629 3.655811
 H -2.362022 -0.468071 3.970596
 C -1.051909 0.142509 2.381140
 H -1.380660 -0.627178 1.688340
 C 2.879449 -1.782113 -0.439055
 C 3.277976 -1.030637 -1.534506
 H 2.528302 -0.509414 -2.126723
 C 4.630406 -0.920687 -1.827717
 H 4.946279 -0.309823 -2.672649
 C 5.594287 -1.568538 -1.051329
 C 5.162272 -2.352356 0.021322
 H 5.897575 -2.875788 0.631361
 C 3.815084 -2.456718 0.336720
 H 3.477851 -3.032907 1.195318

C 7.053834 -1.386539 -1.338200
 H 7.654942 -2.189859 -0.899372
 H 7.413652 -0.436981 -0.916284
 H 7.253257 -1.356807 -2.415460
 Ge -1.340371 -0.640138 -1.549317
 H -1.266411 -1.627801 -2.757882
 H -1.094271 -2.338131 -1.772912
 N -2.923176 -0.812752 -0.563637
 Si -3.402958 -2.314719 0.235898
 Si -4.064430 0.521606 -0.715193
 C -4.129414 1.524946 0.873270
 H -3.143612 1.958841 1.082984
 H -4.850841 2.348460 0.786219
 H -4.410884 0.916966 1.740422
 C -5.788829 -0.089094 -1.162134
 H -6.219538 -0.791607 -0.440814
 H -6.471498 0.767676 -1.239970
 H -5.765329 -0.587617 -2.139905
 C -3.565526 1.683775 -2.101199
 H -2.594409 2.159094 -1.930102
 H -3.517420 1.163892 -3.065992
 H -4.317818 2.481169 -2.178312
 C -4.335193 -3.395455 -0.986027
 H -4.627549 -4.348968 -0.526722
 H -5.239431 -2.905255 -1.364751
 H -3.689516 -3.624826 -1.844294
 C -1.984728 -3.321108 0.913702
 H -1.421955 -3.833026 0.127554
 H -1.250081 -2.756859 1.499288
 H -2.419547 -4.084804 1.574574
 C -4.514745 -1.920352 1.709686
 H -5.407882 -1.334116 1.469474
 H -4.848817 -2.863723 2.161618
 H -3.951398 -1.370415 2.474221

YGeC₆F₅

E = -4704.66376435

S 1.721747 -1.673776 -1.156908
 P 0.380932 0.321261 0.594419
 O 1.560053 -2.179255 -2.524443
 O 1.670743 -2.640135 -0.042257
 C 0.602297 -0.397137 -0.944962
 C -0.551823 1.855400 0.330304
 C -1.678012 2.200618 1.079157
 H -2.067193 1.517111 1.829522
 C -2.323024 3.409918 0.843691
 H -3.214111 3.663617 1.413454
 C -1.837464 4.285555 -0.121120
 H -2.343771 5.232192 -0.298559
 C -0.720923 3.942372 -0.876308
 H -0.351768 4.615978 -1.646521
 C -0.086068 2.726185 -0.662572
 H 0.774365 2.438502 -1.265381
 C 1.938114 0.775778 1.412730
 C 2.396850 2.093294 1.459362
 H 1.782352 2.905156 1.079065
 C 3.647791 2.372795 1.997206
 H 3.999542 3.401791 2.035657
 C 4.446267 1.341577 2.478880
 H 5.431167 1.560962 2.887468
 C 3.984597 0.029671 2.444231
 H 4.608552 -0.779961 2.816495
 C 2.728804 -0.257586 1.926204
 H 2.377806 -1.287668 1.874954
 C -0.498098 -0.660079 1.840791
 C -0.680299 -0.178144 3.141644
 H -0.254201 0.781092 3.435345
 C -1.405001 -0.928255 4.057296
 H -1.554537 -0.554487 5.068282
 C -1.938278 -2.160333 3.681045
 H -2.511929 -2.742779 4.399571
 C -1.724254 -2.655246 2.400178
 H -2.124359 -3.623688 2.108366
 C -0.992919 -1.910101 1.480317

H -0.774154 -2.303699 0.492348
 C 3.370032 -0.979098 -1.046211
 C 3.633160 0.343871 -1.372943
 H 2.819561 0.982357 -1.711608
 C 4.918871 0.841764 -1.216537
 H 5.119942 1.886871 -1.449030
 C 5.957490 0.028885 -0.754347
 C 5.674296 -1.308922 -0.470762
 H 6.472884 -1.961455 -0.119757
 C 4.388505 -1.815194 -0.604848
 H 4.155378 -2.844474 -0.342352
 C 7.326419 0.595487 -0.529117
 H 7.609703 1.294313 -1.324535
 H 8.085673 -0.191792 -0.476924
 H 7.362046 1.152625 0.418066
 Ge -0.752314 -0.191367 -2.333036
 H -0.626644 -1.050479 -3.614852
 H -0.879210 -1.869280 -2.686562
 C -2.542867 -0.362308 -1.490472
 C -3.041747 -1.515524 -0.891763
 C -3.288114 0.797326 -1.316037
 C -4.171233 -1.499946 -0.082948
 C -4.424359 0.849224 -0.520426
 C -4.866708 -0.311496 0.100381
 F -2.889843 1.933923 -1.875072
 F -2.439605 -2.688330 -1.034286
 F -5.073952 1.989366 -0.336570
 F -5.940729 -0.284072 0.867015
 F -4.587552 -2.604722 0.515605

YGePy

E = -4223.82047984
 S 0.343639 -1.847777 0.101220
 P 0.071375 1.102514 0.164299
 O -0.323071 -2.929685 -0.653084
 O 0.228999 -1.880234 1.574362
 C -0.256098 -0.406585 -0.568326

C -0.351513 2.400275 -1.028125
 C -0.972490 3.588836 -0.643986
 H -1.243754 3.753326 0.396036
 C -1.267784 4.555618 -1.598684
 H -1.760880 5.477189 -1.296431
 C -0.944676 4.342450 -2.934236
 H -1.182664 5.099361 -3.679028
 C -0.325592 3.157040 -3.320464
 H -0.080379 2.983192 -4.366126
 C -0.029750 2.185762 -2.372973
 H 0.432882 1.245136 -2.668399
 C 1.834817 1.306705 0.548951
 C 2.679321 2.059579 -0.268955
 H 2.272614 2.627736 -1.102199
 C 4.046828 2.080658 -0.021039
 H 4.701195 2.671607 -0.658748
 C 4.575649 1.343977 1.033141
 H 5.648568 1.350537 1.217649
 C 3.734093 0.599891 1.854016
 H 4.145957 0.017743 2.675581
 C 2.364448 0.587045 1.624971
 H 1.707085 -0.015530 2.250320
 C -0.778489 1.470508 1.723555
 C -0.345162 2.511303 2.550169
 H 0.520420 3.109757 2.267462
 C -1.011197 2.768401 3.741381
 H -0.674089 3.575623 4.388635
 C -2.102200 1.984831 4.110209
 H -2.619924 2.184705 5.046569
 C -2.522747 0.940520 3.293826
 H -3.365899 0.318457 3.586776
 C -1.859311 0.677565 2.101103
 H -2.159697 -0.152625 1.467679
 C 2.101635 -1.974653 -0.198910
 C 2.699884 -1.344511 -1.281729
 H 2.084293 -0.774378 -1.974686
 C 4.077082 -1.413834 -1.432292

H 4.550308 -0.900090 -2.268207
 C 4.869502 -2.117567 -0.520810
 C 4.238079 -2.771361 0.539435
 H 4.838181 -3.332959 1.254403
 C 2.862387 -2.698052 0.711262
 H 2.370683 -3.167762 1.559739
 C 6.361610 -2.128969 -0.659574
 H 6.788420 -1.177929 -0.310345
 H 6.668435 -2.254995 -1.704297
 H 6.815851 -2.931292 -0.068962
 Ge -1.805012 -0.861509 -1.672643
 H -2.492857 0.715041 -1.348092
 H -2.303275 0.376648 -2.510648
 C -3.375259 -1.527511 -0.677599
 C -5.647816 -1.768831 -0.705028
 C -4.425311 -2.737864 1.099982
 C -5.646871 -2.489063 0.486074
 H -6.587357 -1.562388 -1.222651
 H -4.373594 -3.308255 2.026361
 H -6.580498 -2.850940 0.911434
 N -4.543716 -1.302965 -1.275170
 C -3.263335 -2.255462 0.509951
 H -2.288336 -2.442009 0.954932

YGePyr

E = -4239.88106424
 S 0.416757 -1.615469 0.908552
 P 0.017041 1.112479 -0.092049
 O -0.238684 -2.915670 0.667312
 O 0.418275 -1.030831 2.258575
 C -0.259099 -0.561319 -0.245698
 C -0.204329 1.852676 -1.736577
 C -0.888869 3.049283 -1.948847
 H -1.330511 3.585166 -1.113207
 C -1.037458 3.545698 -3.239631
 H -1.580920 4.474879 -3.398380
 C -0.506480 2.854419 -4.322322

H -0.628706 3.244746 -5.330786
 C 0.168769 1.654761 -4.116613
 H 0.572618 1.101883 -4.962269
 C 0.314937 1.150837 -2.831310
 H 0.809904 0.194670 -2.664484
 C 1.720414 1.461783 0.446156
 C 2.771202 1.463859 -0.474385
 H 2.572813 1.328711 -1.534609
 C 4.077045 1.644677 -0.038935
 H 4.890651 1.646823 -0.761307
 C 4.341663 1.820836 1.315878
 H 5.365870 1.963341 1.655539
 C 3.299820 1.803934 2.235923
 H 3.504951 1.926421 3.297460
 C 1.990469 1.619677 1.807579
 H 1.179649 1.573747 2.530082
 C -1.013063 2.011968 1.098279
 C -0.797293 3.367432 1.371985
 H -0.009507 3.913410 0.853334
 C -1.572968 4.010841 2.325726
 H -1.407823 5.064928 2.540001
 C -2.553432 3.300309 3.016457
 H -3.158441 3.804952 3.767644
 C -2.747016 1.948182 2.761560
 H -3.498527 1.389718 3.316208
 C -1.974112 1.294035 1.806209
 H -2.097576 0.226270 1.623270
 C 2.143104 -1.841161 0.492612
 C 2.494145 -2.177985 -0.811910
 H 1.715641 -2.313514 -1.561528
 C 3.832297 -2.322233 -1.138735
 H 4.110896 -2.580391 -2.160004
 C 4.834997 -2.145624 -0.176062
 C 4.452667 -1.830387 1.126601
 H 5.218307 -1.692188 1.889152
 C 3.112287 -1.674872 1.467759
 H 2.803742 -1.406895 2.475390

C 6.280472 -2.279993 -0.550994
 H 6.928002 -2.250220 0.331358
 H 6.591778 -1.467320 -1.221333
 H 6.470419 -3.221776 -1.080363
 Ge -1.594493 -1.522286 -1.254782
 H -2.290702 -0.033995 -1.853741
 H -1.900165 -0.858922 -2.655459
 C -3.335399 -1.706504 -0.346574
 C -5.527837 -2.266620 -0.499101
 C -4.512412 -1.852022 1.588311
 C -5.658149 -2.195518 0.884176
 H -6.381234 -2.524989 -1.130583
 H -4.521607 -1.772448 2.677847
 H -6.601404 -2.400022 1.384222
 N -3.358136 -1.603848 0.980266
 N -4.376582 -2.035769 -1.112941

YGeB²

Nicht gefunden.

YGeB¹

E = -4652.02225209
 S -1.630963 1.386269 -0.200397
 P -0.275309 -1.193388 0.211468
 O -1.586056 2.566142 -1.070285
 O -1.521993 1.606139 1.261602
 C -0.513088 0.201749 -0.758041
 C 0.644311 -2.395386 -0.792727
 C 1.652288 -3.206510 -0.276500
 H 1.997774 -3.076493 0.744703
 C 2.242814 -4.175422 -1.082341
 H 3.035339 -4.797749 -0.673532
 C 1.839739 -4.332392 -2.401558
 H 2.307000 -5.090194 -3.027709
 C 0.845526 -3.510636 -2.926897
 H 0.536768 -3.617974 -3.964619

C 0.250158 -2.545632 -2.128610
 H -0.518357 -1.887863 -2.530823
 C -1.806434 -2.042221 0.710384
 C -2.266441 -3.173134 0.033595
 H -1.669051 -3.621923 -0.755983
 C -3.495268 -3.730203 0.367152
 H -3.847213 -4.614373 -0.160681
 C -4.272559 -3.156051 1.366704
 H -5.240620 -3.585727 1.618767
 C -3.811836 -2.033492 2.047653
 H -4.420699 -1.577942 2.825735
 C -2.576903 -1.481199 1.733208
 H -2.222868 -0.587999 2.246339
 C 0.603486 -0.970519 1.791596
 C 0.755903 -2.039938 2.681627
 H 0.335694 -3.015480 2.438503
 C 1.427884 -1.855503 3.881866
 H 1.552339 -2.690696 4.568397
 C 1.922239 -0.595317 4.213993
 H 2.437676 -0.448149 5.161503
 C 1.738606 0.476204 3.348480
 H 2.104618 1.466404 3.609593
 C 1.083087 0.291894 2.134495
 H 0.907766 1.131966 1.467700
 C -3.277102 0.703077 -0.398999
 C -3.578637 -0.243607 -1.367535
 H -2.790480 -0.600945 -2.027284
 C -4.868665 -0.750004 -1.445558
 H -5.099715 -1.512162 -2.189011
 C -5.873086 -0.309484 -0.579774
 C -5.552059 0.672424 0.360070
 H -6.323903 1.036864 1.037195
 C -4.262000 1.174258 0.460985
 H -3.996421 1.908137 1.218295
 C -7.244636 -0.911276 -0.633547
 H -7.985809 -0.271121 -0.143464
 H -7.259499 -1.884809 -0.122678

H -7.569373 -1.084623 -1.666001
 Ge 1.045835 0.711222 -1.852915
 H 0.495838 1.512637 -3.094195
 H 0.364529 2.236224 -2.109372
 N 3.461267 1.110433 0.026332
 C 3.135940 3.058847 1.074454
 C 3.890530 1.937741 1.056695
 H 3.228621 3.933198 1.708570
 H 4.745878 1.683478 1.671318
 N 2.193215 2.997397 0.059507
 C 4.004260 -0.176966 -0.149423
 C 4.272424 -0.666759 -1.430165
 C 4.316909 -0.964608 0.962459
 C 4.867521 -1.910749 -1.589722
 H 4.033181 -0.051389 -2.293298
 C 4.928403 -2.201341 0.793865
 H 4.070176 -0.603673 1.958626
 C 5.214008 -2.677059 -0.480936
 H 5.077051 -2.276319 -2.593109
 H 5.177410 -2.797471 1.670117
 H 5.698708 -3.642700 -0.611455
 C 1.174283 3.969830 -0.070803
 C 0.988862 4.627188 -1.284573
 C 0.332311 4.239704 1.004838
 C -0.059434 5.525611 -1.429583
 H 1.669964 4.420760 -2.107252
 C -0.706563 5.148176 0.856219
 H 0.461146 3.693876 1.936859
 C -0.909666 5.786644 -0.361082
 H -0.212595 6.025285 -2.384112
 H -1.379235 5.333301 1.691039
 H -1.736753 6.483462 -0.480596
 B 2.346754 1.750578 -0.638729

(Y_{Ph})₂Ge

E = -4695.13169882

P 3.016675 0.229248 0.090020

P -2.937554 0.418236 -0.018796
 C 1.452754 -0.329334 -0.254399
 C 1.242587 -1.663878 -0.834594
 C 2.060289 -2.772031 -0.553417
 H 2.884765 -2.658081 0.147340
 C 1.815317 -4.019694 -1.113675
 H 2.469192 -4.854992 -0.866902
 C 0.730566 -4.211554 -1.961685
 H 0.527301 -5.192180 -2.387102
 C -0.089316 -3.126642 -2.260609
 H -0.935984 -3.251121 -2.934942
 C 0.169934 -1.875975 -1.719187
 H -0.466190 -1.030332 -1.972758
 C 3.799131 -0.344169 1.651204
 C 4.663335 -1.441734 1.701484
 H 5.025527 -1.892090 0.778622
 C 5.064207 -1.966565 2.924718
 H 5.741238 -2.818384 2.949721
 C 4.602272 -1.407277 4.111628
 H 4.915265 -1.821200 5.068188
 C 3.733942 -0.320906 4.071925
 H 3.364840 0.118164 4.996689
 C 3.330631 0.203951 2.850781
 H 2.654962 1.058773 2.823321
 C 3.066448 2.046818 0.222731
 C 4.078950 2.687192 0.939188
 H 4.791799 2.102558 1.517825
 C 4.175817 4.074295 0.923513
 H 4.965070 4.567076 1.487883
 C 3.266172 4.826628 0.189121
 H 3.340736 5.912535 0.178760
 C 2.263559 4.189709 -0.536088
 H 1.550870 4.775000 -1.112594
 C 2.165312 2.804770 -0.526319
 H 1.390411 2.293884 -1.094405
 C 4.217091 -0.160684 -1.222453
 C 3.763158 -0.548563 -2.483851

H 2.698394 -0.688955 -2.651276
 C 4.673012 -0.753988 -3.514476
 H 4.314494 -1.067904 -4.492721
 C 6.033135 -0.558961 -3.298774
 H 6.742136 -0.720111 -4.108791
 C 6.487241 -0.150478 -2.048558
 H 7.549353 0.014837 -1.878681
 C 5.582412 0.050220 -1.013491
 H 5.939518 0.374127 -0.036747
 C -1.665484 -0.487037 0.668272
 C -1.908344 -1.873682 1.080234
 C -0.857767 -2.727110 1.472398
 H 0.153743 -2.333011 1.497645
 C -1.075425 -4.051478 1.816774
 H -0.221854 -4.669338 2.092539
 C -2.358158 -4.593549 1.811309
 H -2.527164 -5.633148 2.084532
 C -3.418138 -3.770536 1.451247
 H -4.436015 -4.158589 1.444875
 C -3.200165 -2.445638 1.095082
 H -4.067103 -1.849542 0.814035
 C -4.357818 0.686021 1.111942
 C -4.049678 0.691902 2.474427
 H -3.021167 0.497680 2.778835
 C -5.046858 0.916375 3.416006
 H -4.800103 0.915197 4.475878
 C -6.358759 1.124706 3.003581
 H -7.141697 1.294208 3.740478
 C -6.673513 1.100256 1.648378
 H -7.701937 1.248083 1.324283
 C -5.678359 0.879144 0.702768
 H -5.940318 0.841655 -0.351380
 C -2.374663 2.075606 -0.497360
 C -1.616604 2.205577 -1.666110
 H -1.397125 1.325340 -2.269558
 C -1.149240 3.453507 -2.054553
 H -0.558707 3.550822 -2.963649

C -1.437995 4.575606 -1.281623
 H -1.076473 5.555311 -1.589298
 C -2.192173 4.448472 -0.121122
 H -2.416805 5.324999 0.483053
 C -2.665011 3.200559 0.271476
 H -3.255051 3.100610 1.179880
 C -3.642496 -0.220638 -1.583628
 C -4.414684 0.602767 -2.410265
 H -4.631140 1.627226 -2.109254
 C -4.879324 0.132086 -3.632549
 H -5.475117 0.781100 -4.271547
 C -4.569457 -1.161111 -4.042772
 H -4.931101 -1.529050 -5.001173
 C -3.783970 -1.975829 -3.234572
 H -3.526746 -2.983057 -3.557377
 C -3.314358 -1.508358 -2.011748
 H -2.677645 -2.136030 -1.393703
 Ge 0.009377 0.459562 0.784008
 H 0.369799 0.865036 2.264834
 H 0.372048 -0.327968 2.364173

Y_{Ph}GeCl

E = -3847.73579749
 P -0.581232 0.279148 0.009854
 C 0.949225 -0.393483 -0.372970
 C 2.171474 0.396789 -0.187983
 C 2.145157 1.720224 0.304792
 H 1.203093 2.180351 0.596545
 C 3.299728 2.478807 0.439689
 H 3.221756 3.497666 0.816314
 C 4.540479 1.948880 0.105966
 H 5.446627 2.540892 0.215935
 C 4.596700 0.637586 -0.355016
 H 5.556751 0.188593 -0.605275
 C 3.444585 -0.122360 -0.494752
 H 3.528248 -1.152826 -0.829977
 C -0.896846 0.612969 1.776684

C -2.175916 0.915849 2.255982
 H -3.017425 0.980569 1.567057
 C -2.384181 1.099222 3.617128
 H -3.381624 1.329337 3.986482
 C -1.320329 0.973819 4.506610
 H -1.485400 1.115960 5.572958
 C -0.053072 0.647809 4.036621
 H 0.775221 0.529832 4.732052
 C 0.159754 0.458083 2.675287
 H 1.141803 0.173049 2.302257
 C -1.922740 -0.842013 -0.463350
 C -2.313817 -1.849863 0.422672
 H -1.858555 -1.914234 1.409406
 C -3.277881 -2.773064 0.039352
 H -3.574145 -3.561808 0.727492
 C -3.857094 -2.690988 -1.222945
 H -4.611872 -3.415698 -1.522085
 C -3.475928 -1.683165 -2.102531
 H -3.932061 -1.616382 -3.088035
 C -2.509309 -0.757806 -1.726355
 H -2.208259 0.028860 -2.415239
 C -0.863325 1.837430 -0.901685
 C -1.665149 2.879404 -0.433678
 H -2.138359 2.816867 0.542347
 C -1.843911 4.019820 -1.208519
 H -2.468293 4.830269 -0.837791
 C -1.220530 4.129088 -2.447174
 H -1.358897 5.025715 -3.048331
 C -0.408420 3.098851 -2.909743
 H 0.096576 3.188800 -3.869318
 C -0.225315 1.957419 -2.139212
 H 0.430426 1.154925 -2.474749
 Ge 0.907920 -2.243572 -0.809268
 H 2.095434 -2.065922 -2.106486
 H 1.039047 -2.750616 -2.274034
 Cl 2.341465 -3.393703 0.415412

Y_{Ph}GeHMDS

E = -4261.53209731

P -1.752798 -0.149086 -0.104955

C -0.184920 0.499875 -0.304144

C 0.106966 1.868718 0.118941

C -0.753749 2.614825 0.954504

H -1.680976 2.173828 1.316995

C -0.460404 3.915897 1.340188

H -1.162224 4.448342 1.980594

C 0.714424 4.534098 0.926511

H 0.949053 5.549704 1.237872

C 1.583054 3.819468 0.106914

H 2.511258 4.276564 -0.234839

C 1.287438 2.523395 -0.287782

H 1.981755 1.990183 -0.929469

C -2.267549 -0.639804 1.581810

C -3.382002 -1.453746 1.811256

H -3.978602 -1.811102 0.972602

C -3.715253 -1.831219 3.106308

H -4.579957 -2.469017 3.279158

C -2.937164 -1.403042 4.178608

H -3.198546 -1.701754 5.192036

C -1.818085 -0.608832 3.954157

H -1.197868 -0.286442 4.787951

C -1.479022 -0.233675 2.658999

H -0.584725 0.357368 2.470218

C -1.950681 -1.663625 -1.082895

C -1.637941 -2.907995 -0.531359

H -1.348883 -2.985139 0.514607

C -1.683416 -4.048714 -1.323710

H -1.429844 -5.014847 -0.892412

C -2.044773 -3.953493 -2.663060

H -2.078312 -4.848029 -3.282042

C -2.366476 -2.716037 -3.212113

H -2.654498 -2.640510 -4.258624

C -2.319894 -1.572035 -2.425799

H -2.566629 -0.603780 -2.856777

C -3.024755 1.021127 -0.700140
 C -4.322091 1.080486 -0.190126
 H -4.619679 0.439819 0.635609
 C -5.239391 1.978279 -0.724812
 H -6.249438 2.020569 -0.322011
 C -4.865836 2.824336 -1.763500
 H -5.585049 3.529212 -2.176368
 C -3.568753 2.778844 -2.264412
 H -3.266998 3.452000 -3.064244
 C -2.648131 1.884231 -1.733507
 H -1.622116 1.856777 -2.098241
 Ge 1.128550 -0.672558 -1.081168
 H 1.455752 0.478551 -2.413443
 H 1.248984 -0.705726 -2.638920
 Si 2.743753 -0.912895 1.465695
 Si 4.276400 0.148983 -0.954868
 C 1.408418 -2.216476 1.722510
 H 0.402826 -1.814728 1.557918
 H 1.554927 -3.067755 1.044570
 H 1.448802 -2.589528 2.754656
 C 4.352419 -1.706864 2.034074
 H 5.225453 -1.052046 1.933303
 H 4.256494 -1.962791 3.098011
 H 4.554755 -2.633252 1.482607
 C 2.399005 0.558690 2.580035
 H 1.508120 1.107488 2.253971
 H 2.254533 0.236652 3.620550
 H 3.234448 1.269384 2.560600
 C 4.035332 0.945219 -2.640808
 H 3.667606 0.236546 -3.392771
 H 3.361726 1.809565 -2.633561
 H 5.024299 1.292542 -2.972360
 C 5.517764 -1.236353 -1.242668
 H 6.404265 -0.850942 -1.764326
 H 5.855594 -1.710394 -0.315382
 H 5.070003 -2.016022 -1.872849
 C 5.031897 1.460160 0.165807

H 5.332388 1.062929 1.142634
H 5.923596 1.898927 -0.300848
H 4.305001 2.263583 0.344030
N 2.795768 -0.461179 -0.234228

$Y_{Ph}GeC_6F_5$

E = -4116.08051812
P -1.775542 -0.124040 0.002878
C -0.400925 0.699349 -0.606457
C -0.016257 2.000541 -0.046769
C 1.093427 2.726657 -0.526029
H 1.696555 2.306858 -1.327065
C 1.440151 3.966806 -0.008846
H 2.307084 4.483381 -0.418450
C 0.701990 4.549387 1.015849
H 0.976824 5.521426 1.419622
C -0.390811 3.851943 1.517674
H -0.985836 4.274088 2.326262
C -0.736523 2.609186 1.006617
H -1.589942 2.102152 1.452423
C -3.275607 0.914139 -0.087221
C -3.316305 1.862596 -1.112735
H -2.452042 1.968188 -1.767394
C -4.435550 2.670513 -1.270573
H -4.458636 3.411339 -2.067200
C -5.515136 2.542719 -0.402724
H -6.389584 3.179345 -0.523363
C -5.470908 1.611016 0.629257
H -6.308211 1.518822 1.318145
C -4.353807 0.799417 0.791334
H -4.321509 0.091528 1.615046
C -2.124467 -1.613931 -0.966181
C -1.459893 -2.803204 -0.652207
C -1.656649 -3.932612 -1.435912
C -2.515620 -3.880879 -2.529308
C -3.180394 -2.699301 -2.840456
C -2.986947 -1.564590 -2.061232

C -1.644450 -0.747392 1.715466
 C -2.559731 -1.664877 2.242624
 H -3.398454 -2.009374 1.638646
 C -2.381882 -2.168136 3.525199
 H -3.093352 -2.885764 3.929044
 C -1.286150 -1.766237 4.284563
 H -1.145767 -2.164772 5.287555
 C -0.361454 -0.873092 3.755654
 H 0.507347 -0.574830 4.338569
 C -0.534069 -0.369543 2.471332
 H 0.201324 0.305393 2.038359
 Ge 0.738202 -0.371983 -1.698777
 H 0.841060 -0.139119 -3.241792
 H 1.221978 0.913632 -2.769132
 C 2.544538 -0.375094 -0.895797
 C 3.833340 -1.133728 1.031735
 C 4.863249 0.298084 -0.604304
 C 4.943509 -0.434190 0.573705
 H -0.781216 -2.837998 0.198107
 H -1.132866 -4.854979 -1.194228
 H -2.668636 -4.767227 -3.142058
 H -3.854174 -2.659553 -3.693833
 H -3.506083 -0.639743 -2.304487
 C 3.672015 0.313601 -1.320554
 C 2.665470 -1.097392 0.284049
 F 1.615669 -1.784506 0.748789
 F 3.644745 1.047014 -2.429764
 F 5.919965 0.970863 -1.030388
 F 6.071964 -0.462342 1.260115
 F 3.905424 -1.829836 2.155518

Y_{Ph}GePy

E = -3635.22926625
 P -1.162732 -0.184726 0.039746
 C 0.369847 0.361769 -0.484869
 C 0.710664 1.784694 -0.372973
 C 1.806133 2.334064 -1.069654

H 2.414263 1.675597 -1.686503
 C 2.123348 3.682021 -0.993417
 H 2.979754 4.055610 -1.553187
 C 1.365502 4.553571 -0.216628
 H 1.617027 5.610441 -0.157417
 C 0.284172 4.038919 0.489462
 H -0.324359 4.693172 1.112301
 C -0.030125 2.688376 0.421151
 H -0.875747 2.332443 1.007504
 C -2.493226 0.911590 -0.564034
 C -2.275207 1.544678 -1.791389
 H -1.323725 1.398019 -2.300470
 C -3.252936 2.368415 -2.334253
 H -3.073632 2.862676 -3.286869
 C -4.449154 2.572939 -1.653957
 H -5.212788 3.222593 -2.077477
 C -4.663028 1.957788 -0.425301
 H -5.592068 2.126205 0.115744
 C -3.687854 1.131389 0.122237
 H -3.857985 0.674305 1.093215
 C -1.531822 -1.839877 -0.605270
 C -1.161434 -2.977784 0.115319
 H -0.708463 -2.876617 1.099502
 C -1.361294 -4.240229 -0.429486
 H -1.063044 -5.123252 0.131717
 C -1.931535 -4.372601 -1.690859
 H -2.085682 -5.362280 -2.116548
 C -2.305450 -3.241182 -2.409084
 H -2.754408 -3.342975 -3.394937
 C -2.106461 -1.976583 -1.869770
 H -2.396903 -1.092453 -2.433495
 C -1.409433 -0.360146 1.845851
 C -2.498752 -1.045506 2.394063
 H -3.249838 -1.488107 1.740546
 C -2.610297 -1.189782 3.771360
 H -3.456670 -1.728398 4.193213
 C -1.633880 -0.656374 4.608823

H -1.722093 -0.772032 5.687444
 C -0.539176 0.008627 4.067963
 H 0.232350 0.412663 4.720165
 C -0.421885 0.149604 2.689237
 H 0.443745 0.645286 2.251011
 Ge 1.615511 -1.015141 -0.969785
 H 1.738554 -1.438908 -2.483027
 H 2.147646 -0.310536 -2.479960
 C 3.429398 -0.675493 -0.294880
 N 4.423254 -1.352664 -0.872144
 C 4.932596 0.336470 1.278343
 C 5.654607 -1.192116 -0.404963
 C 5.967272 -0.361898 0.668175
 H 5.129032 1.000419 2.119024
 H 6.442532 -1.758010 -0.907607
 H 6.995153 -0.269929 1.012443
 C 3.641788 0.180512 0.790200
 H 2.804937 0.722990 1.227235

Y_{Ph}GePyr

E = -3651.28903708
 P -1.167546 -0.145901 0.031816
 C 0.302344 0.332265 -0.696343
 C 0.777200 1.712381 -0.534089
 C 1.850726 2.212113 -1.296764
 H 2.343238 1.545075 -2.001518
 C 2.289924 3.521662 -1.177653
 H 3.122426 3.859273 -1.793802
 C 1.682949 4.401210 -0.285366
 H 2.030416 5.428000 -0.190848
 C 0.629545 3.932318 0.490508
 H 0.141532 4.591788 1.206968
 C 0.193398 2.619115 0.376425
 H -0.617848 2.295042 1.025826
 C -2.493167 1.051015 -0.349460
 C -2.404260 1.710760 -1.578934
 H -1.546504 1.515745 -2.221035

C -3.383466 2.621222 -1.954903
 H -3.303121 3.135646 -2.910362
 C -4.452406 2.886412 -1.105217
 H -5.216630 3.604071 -1.397636
 C -4.536016 2.244266 0.125411
 H -5.363016 2.459781 0.799115
 C -3.558801 1.331260 0.506313
 H -3.623246 0.856344 1.481224
 C -1.723438 -1.752434 -0.604182
 C -1.395404 -2.934507 0.063191
 H -0.851609 -2.895366 1.004749
 C -1.754521 -4.162059 -0.480893
 H -1.489938 -5.080427 0.039062
 C -2.442252 -4.215087 -1.688023
 H -2.722802 -5.177299 -2.112258
 C -2.771925 -3.038800 -2.354698
 H -3.311468 -3.078192 -3.298754
 C -2.412976 -1.809747 -1.816643
 H -2.668944 -0.890429 -2.339459
 C -1.136796 -0.372619 1.846513
 C -2.191589 -0.946134 2.564854
 H -3.094178 -1.269325 2.047124
 C -2.076979 -1.138077 3.935768
 H -2.897222 -1.588740 4.491316
 C -0.907288 -0.765809 4.594271
 H -0.818477 -0.918075 5.668437
 C 0.152439 -0.220026 3.878999
 H 1.074783 0.050758 4.388911
 C 0.046111 -0.029225 2.504555
 H 0.889446 0.356715 1.929164
 Ge 1.470157 -1.109777 -1.148110
 H 1.620762 -1.585208 -2.642619
 H 2.078411 -0.473441 -2.650952
 C 3.272508 -0.801610 -0.426315
 N 3.314515 -0.119287 0.721163
 N 4.333714 -1.317196 -1.051563
 C 4.509551 0.095204 1.257776

C 5.520581 -1.100441 -0.504549
 C 5.676917 -0.373620 0.671618
 H 4.535890 0.662211 2.191088
 H 6.386273 -1.522022 -1.021347
 H 6.654931 -0.191194 1.109673

$Y_{Ph}GeB^2$

E = -3794.25246723
 P -1.760397 -0.157697 0.060610
 C -0.189662 0.264071 -0.460595
 C 0.230027 1.669848 -0.417910
 C 1.330405 2.134800 -1.164982
 H 1.890705 1.424516 -1.767791
 C 1.710245 3.468484 -1.163424
 H 2.568917 3.774684 -1.759518
 C 1.009212 4.411004 -0.416987
 H 1.309365 5.456793 -0.415759
 C -0.080096 3.982379 0.332697
 H -0.646160 4.694043 0.932193
 C -0.454900 2.645823 0.339104
 H -1.303765 2.358212 0.957477
 C -3.007414 0.993030 -0.615654
 C -2.728685 1.552867 -1.866216
 H -1.781943 1.318759 -2.350701
 C -3.637945 2.416981 -2.462282
 H -3.410329 2.853924 -3.432432
 C -4.826146 2.735427 -1.812683
 H -5.536013 3.417022 -2.277533
 C -5.099892 2.193307 -0.561749
 H -6.022043 2.450880 -0.044515
 C -4.193041 1.326981 0.039194
 H -4.408369 0.929354 1.027184
 C -2.213660 -1.815785 -0.523396
 C -1.964605 -2.941247 0.265027
 C -2.218221 -4.212008 -0.238171
 C -2.722512 -4.364268 -1.524750
 C -2.975059 -3.244398 -2.311504

C -2.720214 -1.972856 -1.814743
 C -2.045976 -0.241270 1.867651
 C -3.191443 -0.816370 2.428254
 H -3.968697 -1.225365 1.783387
 C -3.327218 -0.895531 3.808590
 H -4.217471 -1.348318 4.240941
 C -2.319520 -0.406674 4.636408
 H -2.427074 -0.470966 5.717593
 C -1.170529 0.147745 4.083699
 H -0.375781 0.516261 4.729057
 C -1.028437 0.223264 2.701894
 H -0.121727 0.630907 2.255064
 Ge 0.986686 -1.222762 -0.788254
 H 0.975193 -1.724544 -2.304395
 H 1.649587 -0.721229 -2.311993
 H -1.564380 -2.825079 1.270145
 H -2.014779 -5.086118 0.376889
 H -2.919895 -5.360054 -1.917081
 H -3.371942 -3.361505 -3.317801
 H -2.913648 -1.097978 -2.432147
 C 5.143620 -0.887525 -0.425230
 C 4.727395 0.072916 0.492967
 C 6.479801 -1.156349 -0.644760
 C 5.626148 0.813785 1.233659
 C 7.398428 -0.413336 0.101120
 H 6.791217 -1.908645 -1.364366
 C 6.981294 0.550168 1.018849
 H 5.285232 1.563694 1.942222
 H 8.462606 -0.590511 -0.039486
 H 7.726406 1.110741 1.579361
 B 2.950017 -0.811365 -0.443503
 O 3.365567 0.119322 0.496290
 O 4.046721 -1.449369 -1.007284

$Y_{Ph}GeB^1$

E = -4063.43862562

P 1.872253 -0.774398 0.036213

C 0.322732 -0.139207 0.343612
 C 0.119905 0.778319 1.466057
 C 1.151917 1.591406 1.984494
 H 2.142332 1.558424 1.532583
 C 0.946184 2.453854 3.051918
 H 1.776621 3.060097 3.411642
 C -0.305661 2.558690 3.651239
 H -0.470138 3.243520 4.480720
 C -1.338864 1.757943 3.170597
 H -2.325508 1.805204 3.629800
 C -1.130289 0.885438 2.111741
 H -1.949478 0.254744 1.773758
 C 3.065305 0.224979 -0.926849
 C 4.234867 -0.319353 -1.469144
 H 4.463639 -1.374591 -1.322308
 C 5.094899 0.478418 -2.212337
 H 6.001898 0.051575 -2.636364
 C 4.789930 1.821724 -2.420336
 H 5.464307 2.446970 -3.002701
 C 3.620076 2.360529 -1.898054
 H 3.372438 3.404874 -2.070857
 C 2.751373 1.562947 -1.158774
 H 1.816180 1.965925 -0.768413
 C 1.749745 -2.316540 -0.917475
 C 1.792713 -2.292544 -2.312906
 H 1.985815 -1.358027 -2.835545
 C 1.574920 -3.459370 -3.035973
 H 1.602003 -3.433109 -4.123419
 C 1.314461 -4.652732 -2.371965
 H 1.142998 -5.565360 -2.939689
 C 1.273084 -4.680713 -0.981038
 H 1.072031 -5.613845 -0.458660
 C 1.488168 -3.516697 -0.254502
 H 1.449937 -3.539283 0.832663
 C 2.719177 -1.182589 1.602733
 C 4.098346 -1.078282 1.785165
 H 4.732948 -0.710374 0.983470

C 4.668611 -1.425016 3.005397
 H 5.745006 -1.338582 3.140475
 C 3.867309 -1.870496 4.050498
 H 4.316171 -2.136059 5.005841
 C 2.489752 -1.962940 3.877958
 H 1.856203 -2.293213 4.698625
 C 1.915363 -1.616689 2.662049
 H 0.835766 -1.656409 2.526514
 Ge -1.089617 -0.599193 -0.897242
 N -4.028432 0.529129 -0.276957
 C -3.614088 2.724476 -0.139843
 C -4.555754 1.777489 0.048209
 H -3.698134 3.799814 -0.033736
 H -5.593707 1.905053 0.330589
 B -2.648566 0.710366 -0.661647
 N -2.444184 2.130283 -0.603712
 C -1.300748 2.898434 -0.905782
 C -0.763021 3.763514 0.047473
 C -0.738354 2.840056 -2.182143
 C 0.297783 4.594794 -0.290282
 H -1.170870 3.761379 1.056359
 C 0.321131 3.675779 -2.514251
 H -1.165633 2.159709 -2.915947
 C 0.830723 4.567907 -1.575146
 H 0.711199 5.265022 0.460740
 H 0.742363 3.636487 -3.517188
 H 1.646772 5.237338 -1.841779
 C -4.740899 -0.667373 -0.124869
 C -4.491224 -1.735871 -0.990421
 C -5.694264 -0.820952 0.885284
 C -5.174637 -2.934721 -0.840976
 H -3.766919 -1.606766 -1.793682
 C -6.384473 -2.019138 1.019052
 H -5.875553 -0.006408 1.582580
 C -6.128545 -3.083142 0.160843
 H -4.966733 -3.756618 -1.523670
 H -7.121742 -2.124200 1.812980

H -6.668531 -4.021035 0.271934
H -2.035148 -1.549689 0.220035
H -1.559396 -2.104110 -0.733386

(Y_{PhF})₂Ge

E = -5688.93541287
P -3.179496 0.612147 -0.118706
P 2.798555 1.177844 -0.012364
C -1.593151 0.160368 0.286165
C -1.234276 -1.133029 0.849361
C -1.805909 -2.354461 0.469818
C -1.374595 -3.581004 0.948394
C -0.330737 -3.630228 1.863119
C 0.239514 -2.442467 2.301881
C -0.221116 -1.227636 1.816044
C -3.709979 0.384738 -1.855813
C -4.308067 -0.793944 -2.313483
H -4.590804 -1.571934 -1.610226
C -4.539131 -0.980403 -3.670131
H -5.011853 -1.898883 -4.012206
C -4.163849 -0.004457 -4.588191
H -4.343654 -0.156905 -5.650655
C -3.550829 1.161129 -4.144726
H -3.244722 1.924798 -4.856888
C -3.321962 1.353720 -2.787635
H -2.845395 2.272414 -2.447028
C -3.421069 2.400913 0.165168
C -4.535434 3.053072 -0.367903
H -5.213266 2.519166 -1.032473
C -4.778211 4.385392 -0.058262
H -5.647276 4.888895 -0.477014
C -3.910207 5.072066 0.785441
H -4.098521 6.116967 1.025295
C -2.806442 4.421315 1.326020
H -2.127776 4.955660 1.987494
C -2.563479 3.086146 1.024566
H -1.710865 2.559760 1.449243

C -4.413179 -0.179514 0.951788
 C -4.033636 -0.540908 2.247000
 H -3.007420 -0.382739 2.569273
 C -4.968570 -1.083064 3.119971
 H -4.664248 -1.370245 4.124388
 C -6.288089 -1.251929 2.714381
 H -7.018589 -1.678058 3.399329
 C -6.676370 -0.864420 1.436234
 H -7.711180 -0.980475 1.120445
 C -5.744638 -0.325759 0.556764
 H -6.058021 -0.016655 -0.438156
 C 1.519929 0.186479 -0.617188
 C 1.722948 -1.205639 -0.997590
 C 0.717200 -2.052220 -1.520430
 C 0.881797 -3.416139 -1.719794
 C 2.109383 -4.028463 -1.523978
 C 3.158221 -3.230434 -1.095559
 C 2.958661 -1.876900 -0.879505
 C 4.114996 1.468768 -1.244427
 C 3.713132 1.511663 -2.581415
 H 2.664450 1.342172 -2.825169
 C 4.647963 1.744147 -3.583801
 H 4.328710 1.775767 -4.623660
 C 5.988793 1.919007 -3.258087
 H 6.722316 2.092559 -4.043155
 C 6.394410 1.853930 -1.928974
 H 7.445700 1.970438 -1.673088
 C 5.462962 1.627888 -0.922606
 H 5.794878 1.553134 0.109404
 C 2.139948 2.822203 0.398039
 C 1.445672 2.967455 1.605352
 H 1.337279 2.115529 2.274220
 C 0.879756 4.190102 1.934295
 H 0.334369 4.297086 2.870378
 C 1.004733 5.273136 1.067694
 H 0.555310 6.230757 1.324301
 C 1.712917 5.135581 -0.120038

H 1.820769 5.983926 -0.792752
 C 2.286910 3.913352 -0.454911
 H 2.835778 3.806724 -1.387814
 C 3.598024 0.729505 1.567225
 C 4.387076 1.662968 2.247006
 H 4.554233 2.650756 1.819136
 C 4.938519 1.342318 3.480786
 H 5.554893 2.070695 4.004093
 C 4.688409 0.097394 4.051369
 H 5.114694 -0.150943 5.021537
 C 3.880887 -0.822010 3.391704
 H 3.661187 -1.786771 3.841831
 C 3.336757 -0.506535 2.152798
 H 2.688590 -1.214925 1.644074
 Ge -0.172868 1.135458 -0.612655
 H -0.521458 1.868001 -1.947820
 H -0.532322 0.726866 -2.351429
 F -2.778401 -2.357691 -0.437559
 F -1.933943 -4.703170 0.526074
 F 0.099131 -4.790891 2.332331
 F -0.154891 -4.131916 -2.131899
 F 1.199726 -2.482927 3.220789
 F -0.493108 -1.595379 -1.827308
 F 0.316866 -0.115528 2.320591
 F 2.272720 -5.326772 -1.730838
 F 4.039746 -1.192752 -0.474355
 F 4.361104 -3.753775 -0.907550

$Y_{PhF}GeCl$

E = -4344.63965990
 P -0.869599 0.503710 -0.243240
 C 0.152635 -0.840479 0.034835
 C 1.581210 -0.666137 0.231544
 C 2.156481 0.422228 0.900674
 C 3.526515 0.602035 1.019531
 C 4.395590 -0.327460 0.464618
 C 3.871658 -1.425585 -0.208292

C 2.499168 -1.567155 -0.330134
 C -1.701953 1.249297 1.193840
 C -2.722245 2.190193 1.020269
 H -3.013672 2.502627 0.017448
 C -3.375402 2.715081 2.127111
 H -4.167477 3.449122 1.993094
 C -3.023550 2.290227 3.406503
 H -3.541384 2.696745 4.273249
 C -2.024246 1.339494 3.578156
 H -1.762346 0.995232 4.576332
 C -1.362898 0.815610 2.472802
 H -0.594816 0.053786 2.588217
 C -2.264066 0.002487 -1.295902
 C -3.373679 -0.606723 -0.700102
 H -3.425972 -0.713400 0.382247
 C -4.406369 -1.093046 -1.494435
 H -5.260259 -1.577991 -1.026312
 C -4.345938 -0.959515 -2.876449
 H -5.158257 -1.335279 -3.495558
 C -3.247425 -0.344216 -3.470115
 H -3.201274 -0.233591 -4.551541
 C -2.204598 0.130437 -2.685172
 H -1.347729 0.607893 -3.154781
 C 0.072736 1.802151 -1.091175
 C 0.000026 3.147888 -0.732146
 H -0.643403 3.462667 0.085410
 C 0.774568 4.085937 -1.404670
 H 0.718644 5.134253 -1.118996
 C 1.627450 3.686278 -2.427900
 H 2.236254 4.423895 -2.947130
 C 1.715280 2.342359 -2.777438
 H 2.394406 2.024312 -3.565718
 C 0.946194 1.399726 -2.107553
 H 1.027835 0.341540 -2.352706
 Ge -0.747461 -2.535054 0.105977
 H 0.633018 -3.252841 0.917089
 H 0.026941 -3.875698 -0.007721

Cl -1.989496 -2.623174 1.958315
 F 2.041153 -2.592312 -1.051342
 F 4.688242 -2.308166 -0.762749
 F 5.705602 -0.175370 0.580827
 F 4.007898 1.645896 1.676530
 F 1.363863 1.331072 1.474842

Y_{PhF}GeHMDS

E = -4758.43020898
 P -1.963740 -0.369089 -0.194487
 C -0.285446 -0.069481 -0.267145
 C 0.231354 1.279685 -0.136969
 C -0.279420 2.207571 0.784082
 C 0.222425 3.486964 0.948817
 C 1.296523 3.908974 0.176124
 C 1.826548 3.034653 -0.764097
 C 1.285651 1.767550 -0.923653
 C -2.744481 -0.809090 1.394571
 C -4.097395 -1.152862 1.488590
 H -4.727327 -1.144508 0.599390
 C -4.637636 -1.519713 2.714627
 H -5.690755 -1.784608 2.785533
 C -3.829947 -1.554657 3.849095
 H -4.254469 -1.846379 4.807828
 C -2.483610 -1.221581 3.757187
 H -1.849658 -1.251553 4.640890
 C -1.942319 -0.847761 2.532195
 H -0.892321 -0.576991 2.442759
 C -2.312808 -1.792651 -1.282814
 C -2.829042 -3.003661 -0.817078
 H -3.088456 -3.124022 0.230781
 C -2.981747 -4.077609 -1.686862
 H -3.375145 -5.020187 -1.311805
 C -2.619652 -3.954354 -3.022921
 H -2.736628 -4.798362 -3.699897
 C -2.095959 -2.752801 -3.491258
 H -1.798896 -2.653435 -4.533156

C -1.937872 -1.678997 -2.626345
 H -1.492659 -0.755905 -2.989147
 C -2.830044 1.099632 -0.836010
 C -3.943185 1.672167 -0.219776
 H -4.348551 1.243272 0.692196
 C -4.522033 2.818542 -0.753948
 H -5.387292 3.260567 -0.264232
 C -3.991744 3.405378 -1.896956
 H -4.446021 4.304654 -2.308329
 C -2.866431 2.853751 -2.500766
 H -2.430201 3.322875 -3.380142
 C -2.282399 1.712792 -1.968991
 H -1.372668 1.310846 -2.410368
 Ge 0.825564 -1.645143 -0.380776
 H 1.112283 -1.602446 -2.162078
 H 0.689684 -2.596213 -1.606501
 Si 2.680381 -1.153659 1.927480
 Si 3.996970 -1.081564 -0.856575
 C 1.607491 -2.475606 2.730395
 H 0.552881 -2.429778 2.432845
 H 1.976692 -3.474537 2.464700
 H 1.650490 -2.375388 3.823512
 C 4.418993 -1.427423 2.583243
 H 5.166716 -0.747307 2.160176
 H 4.392344 -1.255258 3.667712
 H 4.756749 -2.456368 2.415881
 C 2.110722 0.535604 2.528777
 H 1.020409 0.637170 2.478389
 H 2.414325 0.699065 3.571168
 H 2.544242 1.336850 1.914705
 C 3.672093 -1.290589 -2.692930
 H 3.328362 -2.304735 -2.932225
 H 2.955472 -0.575393 -3.104388
 H 4.636466 -1.142666 -3.200473
 C 5.285657 -2.408006 -0.479274
 H 6.011845 -2.443821 -1.302701
 H 5.846386 -2.235055 0.444009

H 4.812897 -3.396597 -0.410508
 C 4.762242 0.610179 -0.555237
 H 4.892293 0.815891 0.514716
 H 5.751801 0.677036 -1.026681
 H 4.139388 1.407151 -0.975081
 N 2.574062 -1.285586 0.170913
 F 1.785270 1.011426 -1.896933
 F 2.822248 3.433738 -1.544586
 F 1.791426 5.129237 0.316636
 F -0.297253 4.297989 1.858232
 F -1.264267 1.828682 1.606158

$Y_{Ph}FGeC_6F_5$

E = -4612.97387142
 P 1.504443 -0.631991 0.126816
 C -0.050676 -0.680165 -0.569221
 C -0.722978 -1.969533 -0.779239
 C -1.840559 -2.080431 -1.628113
 H -2.208606 -1.189524 -2.131862
 C -2.472361 -3.295520 -1.851832
 H -3.333108 -3.330083 -2.518049
 C -2.017367 -4.459346 -1.241285
 H -2.515943 -5.410532 -1.414761
 C -0.915211 -4.378680 -0.397637
 H -0.539028 -5.272056 0.098344
 C -0.289136 -3.162501 -0.163887
 H 0.558116 -3.148407 0.519532
 C 2.603703 -1.850653 -0.666215
 C 2.338057 -2.160627 -2.002895
 H 1.518376 -1.657516 -2.512036
 C 3.104748 -3.110415 -2.660306
 H 2.889308 -3.352601 -3.698766
 C 4.138918 -3.758331 -1.990260
 H 4.737976 -4.505844 -2.506806
 C 4.399199 -3.459696 -0.658229
 H 5.198824 -3.972981 -0.128177
 C 3.629924 -2.511818 0.008653

H 3.823204 -2.309834 1.058258
 C 2.207896 1.046800 -0.059663
 C 1.828408 2.053929 0.831969
 C 2.308587 3.350189 0.726234
 C 3.184880 3.670182 -0.303749
 C 3.571280 2.695303 -1.213906
 C 3.072949 1.403577 -1.092901
 C 1.683088 -0.900887 1.926835
 C 2.858974 -0.582753 2.612352
 H 3.719782 -0.186653 2.073418
 C 2.927319 -0.751452 3.989147
 H 3.842168 -0.499792 4.522015
 C 1.821288 -1.231101 4.686163
 H 1.875008 -1.359665 5.765483
 C 0.644417 -1.528118 4.008356
 H -0.226854 -1.883697 4.554336
 C 0.568286 -1.355198 2.630349
 H -0.362273 -1.547174 2.099180
 Ge -0.965595 0.982375 -0.728199
 H -0.833209 1.839337 -2.029733
 H -1.417242 0.835926 -2.415833
 C -2.880275 0.837299 -0.307048
 C -4.682992 -0.088295 1.039278
 C -5.193968 1.471317 -0.719357
 C -5.615355 0.642776 0.314907
 F 0.959460 1.805486 1.797190
 F 1.925422 4.280336 1.578379
 F 3.645864 4.896605 -0.418290
 F 4.398819 3.000862 -2.195054
 F 3.451789 0.527326 -2.005045
 C -3.839094 1.559355 -1.005519
 C -3.334284 0.027322 0.724517
 F -3.464793 2.356319 -2.003772
 F -2.475778 -0.675776 1.460700
 F -5.082325 -0.872222 2.026959
 F -6.900405 0.552737 0.607501
 F -6.082509 2.166082 -1.410725

$Y_{PhF}GePy$

E = -4132.12258437

P -0.680978 0.732334 0.196324

C 0.864053 0.519395 -0.492026

C 1.780799 1.666266 -0.566294

C 2.936507 1.631077 -1.371657

H 3.153144 0.727108 -1.936561

C 3.798080 2.714102 -1.466809

H 4.677687 2.634188 -2.103965

C 3.551123 3.889634 -0.764653

H 4.228519 4.737518 -0.840750

C 2.421488 3.951767 0.043082

H 2.202554 4.855226 0.610335

C 1.563671 2.865577 0.147463

H 0.702964 2.962861 0.806819

C -1.513838 2.223668 -0.447985

C -1.159974 2.628363 -1.737800

H -0.430078 2.044549 -2.295528

C -1.725852 3.769045 -2.287021

H -1.441550 4.083133 -3.289058

C -2.646466 4.513532 -1.554804

H -3.088325 5.409613 -1.986466

C -2.992950 4.119391 -0.267933

H -3.703511 4.705368 0.311449

C -2.423609 2.979706 0.290678

H -2.679820 2.699463 1.308338

C -1.728724 -0.727279 -0.140925

C -1.569612 -1.878157 0.635353

C -2.316979 -3.024350 0.415006

C -3.245558 -3.042918 -0.619061

C -3.417562 -1.920329 -1.417115

C -2.654453 -0.783003 -1.181000

C -0.811064 0.853599 2.020334

C -2.025485 0.705129 2.695589

H -2.946878 0.538170 2.137739

C -2.059703 0.745644 4.083869

H -3.006424 0.624576 4.606649

C -0.882339 0.928703 4.803678
 H -0.910187 0.957686 5.891191
 C 0.330129 1.056241 4.135110
 H 1.253536 1.181130 4.696811
 C 0.368796 1.008326 2.746182
 H 1.317225 1.072000 2.214806
 Ge 1.340455 -1.282649 -0.952033
 H 1.081225 -1.767571 -2.429536
 H 1.943691 -0.940125 -2.549053
 C 3.173593 -1.762891 -0.446254
 N 3.698205 -2.837748 -1.034637
 C 5.124296 -1.454138 0.912461
 C 4.916643 -3.222709 -0.676458
 C 5.673918 -2.569263 0.292243
 H 5.681147 -0.909659 1.673637
 H 5.316500 -4.103778 -1.183456
 H 6.667173 -2.930207 0.550203
 F -0.660571 -1.918425 1.594892
 F -2.139058 -4.097373 1.160449
 F -3.960322 -4.124685 -0.842174
 F -4.295820 -1.940478 -2.402138
 F -2.840358 0.241032 -1.993822
 C 3.852655 -1.040051 0.538113
 H 3.389751 -0.162355 0.986010

Y_{PhF}GePyr

E = -4148.18183200
 P -0.596093 0.741993 0.218296
 C 0.808181 0.413917 -0.686543
 C 1.875992 1.424378 -0.753871
 C 2.924758 1.312618 -1.685583
 H 2.944173 0.449775 -2.348055
 C 3.924467 2.268340 -1.784270
 H 4.712620 2.136460 -2.524379
 C 3.929518 3.384540 -0.952903
 H 4.715787 4.132764 -1.029016
 C 2.912548 3.515277 -0.014750

H 2.895047 4.371225 0.658374
 C 1.915684 2.554380 0.089298
 H 1.156987 2.691113 0.857635
 C -1.269183 2.391860 -0.175689
 C -1.021111 2.877842 -1.462358
 H -0.469338 2.256258 -2.164895
 C -1.463442 4.140909 -1.825128
 H -1.261212 4.515923 -2.826161
 C -2.154555 4.928710 -0.908743
 H -2.499655 5.920630 -1.194378
 C -2.393077 4.453489 0.375077
 H -2.921484 5.071218 1.098367
 C -1.945590 3.189713 0.746728
 H -2.109486 2.844396 1.763088
 C -1.872622 -0.524714 -0.126779
 C -1.855324 -1.745970 0.552522
 C -2.785572 -2.742973 0.298851
 C -3.758046 -2.539009 -0.671800
 C -3.792676 -1.343254 -1.376409
 C -2.847622 -0.360350 -1.110257
 C -0.468054 0.671301 2.042193
 C -1.580546 0.677471 2.887871
 H -2.586274 0.752819 2.474265
 C -1.409170 0.559112 4.261070
 H -2.276373 0.559502 4.918592
 C -0.128658 0.427068 4.792237
 H 0.004030 0.332681 5.868384
 C 0.976390 0.392695 3.949336
 H 1.974779 0.263575 4.362192
 C 0.811249 0.502502 2.572542
 H 1.666558 0.418770 1.900163
 Ge 1.118873 -1.430575 -1.075836
 H 0.804293 -1.997628 -2.511437
 H 1.719462 -1.238569 -2.693376
 C 2.934928 -1.967767 -0.561993
 N 3.448375 -1.308036 0.477874
 N 3.531973 -2.968377 -1.211866

C 4.667109 -1.655995 0.873563
 C 4.746630 -3.309306 -0.806369
 C 5.384833 -2.667165 0.249841
 H 5.085479 -1.107401 1.720280
 H 5.234096 -4.127462 -1.341886
 H 6.384547 -2.946312 0.572772
 F -0.919630 -2.011517 1.447228
 F -2.738084 -3.887046 0.953721
 F -4.643879 -3.478496 -0.925305
 F -4.711584 -1.151422 -2.304495
 F -2.909182 0.740253 -1.837413

$Y_{PhF}GeB^2$

E = -4291.15537747
 P -1.594318 -0.810446 0.096916
 C -0.287170 0.186517 -0.373203
 C -0.325077 1.637756 -0.305602
 C 0.826033 2.394295 -0.018717
 C 0.832931 3.779538 0.028187
 C -0.349780 4.489170 -0.143955
 C -1.518237 3.786648 -0.401911
 C -1.488564 2.402396 -0.475343
 C -2.832107 -1.281193 -1.167358
 C -2.446222 -2.217973 -2.133676
 H -1.479035 -2.713207 -2.053508
 C -3.287384 -2.518082 -3.197435
 H -2.976564 -3.250136 -3.940064
 C -4.520100 -1.883496 -3.312088
 H -5.179947 -2.119700 -4.144703
 C -4.904316 -0.941977 -2.363578
 H -5.863350 -0.435678 -2.453400
 C -4.064834 -0.636307 -1.299079
 H -4.367443 0.116068 -0.575822
 C -0.916624 -2.402359 0.679243
 C 0.348569 -2.412355 1.273516
 C 0.860621 -3.591202 1.801752
 C 0.107743 -4.759719 1.760920

C -1.163308 -4.747720 1.194833
 C -1.676870 -3.574024 0.656066
 C -2.505330 -0.182865 1.536980
 C -3.736970 -0.738169 1.893347
 H -4.191809 -1.506068 1.270397
 C -4.382426 -0.320034 3.049744
 H -5.342518 -0.755100 3.319639
 C -3.800245 0.648700 3.861265
 H -4.308888 0.979313 4.764754
 C -2.562045 1.183654 3.524468
 H -2.095751 1.928967 4.165458
 C -1.908321 0.764311 2.371186
 H -0.927125 1.160682 2.123612
 Ge 1.000409 -0.786992 -1.453427
 H 0.898073 -0.343911 -2.991937
 H 1.388383 0.551262 -2.445413
 H 0.932201 -1.494214 1.319394
 H 1.853686 -3.590431 2.246302
 H 0.510015 -5.682652 2.174343
 H -1.757858 -5.658686 1.167626
 H -2.669817 -3.573476 0.210799
 C 5.124659 -0.474382 -0.788833
 C 4.650564 -0.682045 0.503216
 C 6.471785 -0.345426 -1.060261
 C 5.499423 -0.770033 1.587857
 C 7.340400 -0.433521 0.030321
 H 6.828240 -0.182124 -2.073607
 C 6.865291 -0.640857 1.324867
 H 5.115196 -0.928258 2.591924
 H 8.411119 -0.336254 -0.135541
 H 7.572603 -0.701526 2.149149
 B 2.937243 -0.594620 -0.865070
 O 3.290526 -0.772652 0.464615
 O 4.064951 -0.427389 -1.647858
 F 1.978859 1.773181 0.218562
 F 1.956110 4.430317 0.291641
 F -0.358089 5.812054 -0.073549

F -2.641033 1.782291 -0.748910

F -2.656992 4.439213 -0.583584

$Y_{PhF}GeB^1$

E = -4560.34530620

P -1.740065 1.323854 0.128783

C -0.355543 0.332150 0.163397

C -0.442281 -1.033196 0.657382

C -1.481071 -1.908199 0.299903

C -1.573018 -3.211927 0.753411

C -0.594330 -3.718501 1.596459

C 0.462193 -2.899278 1.968614

C 0.513737 -1.584527 1.528294

C -2.642195 1.540026 -1.447288

C -3.613990 2.533244 -1.603819

H -3.858330 3.193530 -0.771989

C -4.258855 2.685799 -2.824240

H -5.017333 3.456873 -2.944915

C -3.926835 1.858787 -3.895409

H -4.428693 1.984547 -4.853027

C -2.951123 0.880023 -3.744967

H -2.686876 0.238738 -4.584006

C -2.309235 0.720717 -2.521236

H -1.547657 -0.041173 -2.373025

C -1.324408 3.050925 0.552696

C -0.905823 3.924037 -0.455736

H -0.896542 3.592951 -1.492271

C -0.492664 5.212533 -0.139042

H -0.163740 5.882431 -0.930928

C -0.499422 5.642217 1.183461

H -0.178897 6.652555 1.430337

C -0.918779 4.778954 2.190538

H -0.930478 5.111772 3.226438

C -1.326079 3.487468 1.878854

H -1.653604 2.821571 2.673404

C -2.936336 0.722838 1.355793

C -4.292646 0.568461 1.069964

H -4.677355 0.824690 0.086223
 C -5.153282 0.061837 2.037385
 H -6.209542 -0.060571 1.806683
 C -4.666028 -0.299245 3.288297
 H -5.342230 -0.700797 4.040576
 C -3.311052 -0.160914 3.573628
 H -2.922460 -0.457695 4.545601
 C -2.446239 0.341719 2.610596
 H -1.379982 0.424088 2.815948
 Ge 1.242486 0.987586 -0.712516
 N 4.125034 -0.306978 -0.580092
 C 3.769645 -2.450176 -1.115919
 C 4.703841 -1.565095 -0.719307
 H 3.893647 -3.493913 -1.377459
 H 5.766098 -1.722347 -0.575420
 B 2.720963 -0.419481 -0.886108
 N 2.540854 -1.802694 -1.254477
 C 1.391383 -2.492731 -1.679495
 C 1.154216 -3.800875 -1.250312
 C 0.481149 -1.889126 -2.550902
 C 0.022937 -4.485995 -1.674300
 H 1.843804 -4.266948 -0.549721
 C -0.653888 -2.577350 -2.960642
 H 0.685056 -0.885479 -2.920003
 C -0.893933 -3.875464 -2.522744
 H -0.159947 -5.494102 -1.306748
 H -1.358049 -2.096063 -3.636925
 H -1.789513 -4.405590 -2.837677
 C 4.837953 0.805820 -0.107959
 C 4.575500 2.073620 -0.630338
 C 5.809677 0.666182 0.885995
 C 5.261607 3.183245 -0.154863
 H 3.839177 2.176376 -1.425956
 C 6.504120 1.778285 1.344486
 H 5.999569 -0.314766 1.315690
 C 6.232311 3.042290 0.831377
 H 5.043316 4.165284 -0.570495

H 7.255588 1.655456 2.122287
H 6.774154 3.911666 1.197710
H 2.153644 1.423067 0.691843
H 1.772485 2.315892 -0.048995
F 1.510568 -0.833054 1.984761
F -2.421742 -1.490987 -0.551986
F -2.549450 -4.002124 0.328316
F 1.406358 -3.370317 2.772817
F -0.640979 -4.983402 1.994540

V^{Ge}

E = -1585.95026060
C 1.651354 2.362887 0.117609
C -0.481928 1.226109 -0.021896
C -1.089202 2.443316 -0.323409
C -0.337777 3.614781 -0.389338
C 1.030777 3.577633 -0.160291
H 2.726421 2.348804 0.297140
H -2.156032 2.475232 -0.526531
H -0.832585 4.555224 -0.623309
H 1.622291 4.490293 -0.198967
N -1.145540 -0.001852 0.052808
C -2.531186 -0.182229 0.012433
C -3.413284 0.615266 0.753934
C -3.053899 -1.236725 -0.745191
C -4.778115 0.365499 0.720720
H -3.016070 1.418097 1.370175
C -4.419782 -1.489742 -0.760224
H -2.370206 -1.841999 -1.340692
C -5.291485 -0.686750 -0.033350
H -5.448800 0.993183 1.305263
H -4.805348 -2.315054 -1.356383
H -6.362078 -0.879564 -0.050504
C 0.929837 1.164579 0.177659
C 1.491206 -0.160791 0.400669
P 3.082336 -0.600113 0.017434
C 3.615104 -0.068375 -1.638094

H 3.488131 1.017363 -1.712485
H 4.657328 -0.335275 -1.845400
H 2.949027 -0.542213 -2.368196
C 4.377068 0.004686 1.143223
H 5.366197 -0.352313 0.833657
H 4.376627 1.099431 1.152107
H 4.149985 -0.347986 2.154536
C 3.208122 -2.401712 0.028341
H 4.231127 -2.723689 -0.191256
H 2.906275 -2.781962 1.010002
H 2.530064 -2.792606 -0.742547
H -0.137719 -2.736415 -0.447981
H 0.274006 -2.058221 -1.575736
Ge 0.068570 -1.392696 0.266537

Vl^{Ge}

E = -3646.42412950
C 0.903606 2.925174 -0.050865
C 0.431266 1.649515 0.236616
C -0.788955 1.174535 -0.290820
C -1.489422 2.048774 -1.140650
C -1.018313 3.322266 -1.417444
C 0.182434 3.774751 -0.876533
H 1.846026 3.229624 0.400127
H -2.421719 1.707181 -1.583054
H -1.596684 3.967297 -2.076753
H 0.548605 4.775768 -1.092030
N -1.285282 -0.097396 -0.023227
S 1.398823 0.617379 1.321094
O 2.702006 1.286189 1.474959
O 0.559814 0.341377 2.490894
C 1.583217 -0.843023 0.445858
C -2.674822 -0.327917 -0.065957
C -3.557167 0.488671 0.653002
C -3.187138 -1.408029 -0.787531
C -4.918082 0.226814 0.640131
H -3.154414 1.321625 1.225532

C -4.552873 -1.676572 -0.780684
 H -2.508415 -2.020712 -1.379010
 C -5.424026 -0.860163 -0.071847
 H -5.591903 0.867681 1.206022
 H -4.935726 -2.524128 -1.346324
 H -6.492189 -1.066763 -0.070541
 P 2.917452 -0.918644 -0.626157
 C 3.028592 0.446245 -1.817113
 H 3.893194 0.333006 -2.480696
 H 2.102822 0.485255 -2.401656
 H 3.119719 1.375441 -1.243664
 C 2.875514 -2.442085 -1.589601
 H 1.970561 -2.455729 -2.206268
 H 3.768399 -2.497994 -2.222140
 H 2.853166 -3.298981 -0.908377
 C 4.488632 -0.917362 0.266248
 H 4.498696 -0.027074 0.902867
 H 4.527868 -1.808843 0.900375
 H 5.334665 -0.908876 -0.430255
 Ge -0.178573 -1.569986 0.407457
 H -0.569040 -2.870514 -0.329853
 H -0.014611 -2.270461 -1.329150

VII^{Ge}

E = -4408.51351673
 C 0.348272 1.728415 0.535327
 C -0.456235 1.700868 -0.609685
 C -0.844941 2.902976 -1.202197
 C -0.467203 4.123325 -0.659998
 C 0.309389 4.152166 0.491085
 C 0.711107 2.961150 1.079786
 H -1.468552 2.852970 -2.091057
 H -0.783837 5.048314 -1.137898
 H 0.607205 5.100496 0.934112
 H 1.334372 2.959335 1.970348
 S 0.954103 0.304667 1.514449
 S -1.035310 0.220092 -1.506658

O 2.156862 0.866662 2.165486
 O -0.187162 -0.074322 2.358881
 O 0.133910 -0.212481 -2.302375
 O -2.232902 0.721633 -2.205866
 C 1.447433 -0.949420 0.491975
 C -1.438494 -0.998533 -0.422162
 P -2.875280 -0.755114 0.483585
 P 2.924257 -0.664656 -0.342763
 C -2.926546 -1.836485 1.920049
 H -3.855586 -1.655990 2.472130
 H -2.879748 -2.884245 1.608820
 H -2.053693 -1.594095 2.536448
 C -3.080582 0.926587 1.123363
 H -3.101807 1.622904 0.278371
 H -4.016638 1.002879 1.687879
 H -2.220832 1.142628 1.767387
 C -4.357446 -1.070560 -0.508493
 H -4.360995 -2.121877 -0.814699
 H -5.276659 -0.832555 0.038946
 H -4.266504 -0.445099 -1.403680
 C 3.051057 -1.822391 -1.719198
 H 4.003142 -1.672198 -2.239531
 H 2.985990 -2.851055 -1.351042
 H 2.212234 -1.624688 -2.397422
 C 3.070967 0.982270 -1.080205
 H 3.030178 1.730141 -0.281565
 H 4.016436 1.073451 -1.626506
 H 2.218780 1.113164 -1.757590
 C 4.385435 -0.872648 0.703260
 H 5.308449 -0.625879 0.166476
 H 4.246141 -0.208137 1.562705
 H 4.418917 -1.907621 1.058985
 H -0.077739 -3.499377 0.522293
 H -0.375053 -2.692675 1.414723
 Ge 0.107547 -2.128394 -0.191939

VIII^{Ge}

Nicht gefunden.

IX^{Ge}

Nicht gefunden.

3.5.2.2 Reaktionspfad B

Y₂Ge

E = -5872.32529315

C 3.638979 2.965356 0.020368

H 3.115636 3.252837 0.928618

C 3.064652 2.016038 -0.811416

C -4.218166 -1.446085 -1.212975

O 0.505760 1.683915 -1.399294

C -4.443509 -0.807950 -2.429479

H -3.611609 -0.384294 -2.992220

C 2.623859 -3.189106 2.290214

H 3.635200 -2.853837 2.516762

C 4.875622 3.502924 -0.317393

H 5.334608 4.242280 0.337910

C -0.838145 4.920328 0.540632

H -0.245595 5.567776 1.183753

C -1.111862 3.620154 0.946535

H -0.700276 3.250731 1.879788

C 3.175483 -2.193842 -2.542828

H 2.414534 -1.456089 -2.793537

C 3.501869 -2.401931 -1.204593

C 5.247671 -0.381643 0.499090

H 5.525448 -0.836214 -0.449348

C 6.159939 0.414358 1.182295

H 7.153978 0.571902 0.768107

C -1.296754 5.383430 -0.686560

H -1.071090 6.399555 -1.005038

C -1.858128 0.001676 -0.697561

Ge -0.147183 -0.137970 -2.076994

O -2.680640 -2.018253 0.820869

S -2.552059 -1.572391 -0.580513
 P -2.235688 1.076468 0.615853
 C -5.741157 -0.701600 -2.903618
 H -5.923843 -0.196998 -3.851704
 C -4.459097 0.187135 2.068450
 H -3.738004 -0.367022 2.662868
 C -0.537256 -0.325591 2.280209
 H -0.284134 -0.864870 1.374807
 C 4.520333 0.828818 2.900695
 H 4.230122 1.310665 3.832084
 C 3.601690 0.039106 2.222646
 H 2.588635 -0.073488 2.605044
 C -2.307773 3.241412 -1.116803
 H -2.836482 2.579224 -1.797142
 C 1.940937 -2.670019 1.187759
 C 3.702421 1.609193 -1.978859
 H 3.238756 0.856088 -2.613361
 C 4.450924 -3.368316 -0.859645
 H 4.695988 -3.543625 0.187612
 C 3.969228 -0.581311 1.023556
 C -1.215663 1.110039 4.568439
 H -1.481228 1.669956 5.462976
 C -1.442556 0.724348 2.201531
 C -1.791351 1.441534 3.348970
 H -2.522977 2.246990 3.292242
 C -1.863712 2.778757 0.126159
 C -2.028233 4.540788 -1.516092
 H -2.368709 4.887581 -2.489350
 C 6.903522 3.645116 -1.806043
 H 7.690723 2.945040 -1.492252
 H 7.091366 4.597491 -1.299157
 H 7.021845 3.800349 -2.884461
 C -0.317126 0.048118 4.647173
 H 0.116504 -0.223215 5.608225
 C -6.821092 -1.230564 -2.185832
 C 5.799531 1.014516 2.383805
 H 6.514823 1.639619 2.915161

C -6.315615 1.521638 0.481788
 H -7.037451 2.039732 -0.146341
 C 1.534323 -0.367419 -0.567136
 P 2.667035 -1.423926 0.081702
 O 1.229294 1.814480 1.003646
 S 1.528812 1.245777 -0.321103
 O -1.812812 -2.444878 -1.509404
 C 5.546163 3.102841 -1.473386
 C 4.934631 2.154641 -2.302461
 H 5.437929 1.836623 -3.214739
 C 3.802740 -2.943073 -3.533897
 H 3.538204 -2.785816 -4.577560
 C 4.758270 -3.891917 -3.190174
 H 5.249601 -4.475449 -3.966572
 C 5.082669 -4.105034 -1.851821
 H 5.825937 -4.852871 -1.582438
 C -4.958404 1.657548 0.222354
 H -4.634950 2.284907 -0.603247
 C 0.014751 -0.674818 3.506627
 H 0.695719 -1.521631 3.566106
 C -4.018832 1.001201 1.021418
 C -6.748210 0.731046 1.541965
 H -7.812338 0.628838 1.746763
 C -6.560383 -1.880625 -0.980316
 H -7.387879 -2.299026 -0.408626
 C -5.818788 0.063430 2.330244
 H -6.150795 -0.568670 3.151562
 C 0.688879 -4.515256 2.850528
 H 0.194171 -5.224157 3.512021
 C 1.995948 -4.115373 3.116661
 H 2.524434 -4.514804 3.980310
 C -5.264693 -1.990445 -0.486782
 H -5.052417 -2.474778 0.463320
 C -8.222445 -1.075006 -2.695334
 H -8.568880 -0.038669 -2.580426
 H -8.921114 -1.719643 -2.152000
 H -8.290476 -1.319373 -3.762111

C 0.010987 -4.004567 1.747268
H -1.018683 -4.284929 1.538174
C 0.640231 -3.093914 0.908425
H 0.097698 -2.688757 0.054394
H -1.979028 0.646684 -1.852163
H -1.538929 1.023475 -2.843831

YGeCl

Nicht gefunden.

YGeHMDS

Nicht gefunden.

YGeB¹

E = -4652.03189161
C -3.434275 0.506901 -1.235849
C -3.391746 1.417279 -2.287837
H -2.637208 1.304997 -3.062384
C 3.438509 -0.133235 2.281533
H 4.428315 -0.575818 2.199804
C 2.355889 -0.760662 1.676738
H 2.505488 -1.683738 1.122955
C 3.257326 1.058758 2.971207
H 4.105012 1.547670 3.447581
C -0.814909 -0.138488 -0.389460
Ge 0.153636 1.254313 -1.613895
O -2.783542 -1.834457 -0.255455
S -2.227147 -0.799759 -1.150853
P -0.358771 -1.023988 1.023785
C -4.324417 2.442846 -2.328658
H -4.293541 3.159780 -3.148194
C -2.009603 -2.029499 3.106634
H -1.501106 -2.982420 2.992635
C -0.200036 -3.470395 -0.301344
H -0.664993 -2.963155 -1.141682
C 0.908029 1.007494 2.450597

H -0.077298 1.459349 2.528041
 C 1.022624 -4.780303 1.839519
 H 1.504425 -5.287656 2.672980
 C 0.106612 -2.769035 0.862059
 C 0.724449 -3.428479 1.932873
 H 0.975582 -2.880589 2.840035
 C 1.078619 -0.206347 1.779157
 C 1.995177 1.639228 3.037447
 H 1.855142 2.588410 3.549718
 C 0.700509 -5.482342 0.680489
 H 0.928360 -6.544260 0.608116
 C -5.310730 2.565501 -1.344359
 C -3.392433 0.371882 3.363956
 H -3.939742 1.308828 3.447178
 O -1.925523 -1.166101 -2.542085
 C -2.390046 0.244861 2.410485
 H -2.183855 1.072853 1.733557
 C 0.094521 -4.827226 -0.383182
 H -0.147674 -5.368355 -1.294611
 C -1.679390 -0.951615 2.286165
 C -3.705069 -0.700390 4.192323
 H -4.494586 -0.604939 4.935231
 C -5.348105 1.617359 -0.319832
 H -6.127177 1.681366 0.438940
 C -3.017104 -1.900920 4.055548
 H -3.272538 -2.751115 4.684887
 C -4.418616 0.585649 -0.259145
 H -4.455329 -0.170794 0.520776
 C -6.303292 3.687857 -1.397862
 H -6.785209 3.746760 -2.381425
 H -5.813421 4.654923 -1.222562
 H -7.086451 3.568188 -0.642198
 H -0.670899 1.307428 0.052404
 H -0.294057 2.227150 -0.131941
 N 3.149361 1.874588 -0.552061
 C 4.265619 0.007572 -1.086991
 C 4.392853 1.249358 -0.578742

H 5.047295 -0.710830 -1.300923
 H 5.301235 1.761084 -0.285692
 C 2.501549 -1.446310 -1.962308
 C 1.403689 -1.491316 -2.824019
 C 3.179746 -2.638457 -1.680746
 C 1.004535 -2.687090 -3.404666
 H 0.869049 -0.582213 -3.093900
 C 2.794183 -3.827233 -2.285956
 H 4.014097 -2.632725 -0.982900
 C 1.710904 -3.858615 -3.158109
 H 0.130580 -2.684437 -4.052084
 H 3.340470 -4.741079 -2.059708
 H 1.410456 -4.792502 -3.628874
 C 2.986199 3.189823 -0.083026
 C 1.992051 4.014927 -0.614415
 C 3.822383 3.706809 0.911475
 C 1.814784 5.306045 -0.135088
 H 1.369183 3.653233 -1.428503
 C 3.650548 5.004153 1.376065
 H 4.598134 3.077786 1.339860
 C 2.639110 5.810217 0.864821
 H 1.030871 5.927763 -0.563401
 H 4.311225 5.384074 2.153476
 H 2.501905 6.824137 1.234363
 N 2.933503 -0.226893 -1.413242
 B 2.161284 0.950003 -1.069520

(Y_{Ph})₂Ge

E = -4695.15027900
 P 3.009226 0.296843 -0.026345
 P -3.056937 0.369290 0.002886
 C 1.531530 -0.048197 -0.778879
 C 1.228480 -1.383643 -1.281555
 C 1.746260 -2.575796 -0.741392
 H 2.382656 -2.524297 0.139456
 C 1.416535 -3.816383 -1.266564
 H 1.831358 -4.714053 -0.810420

C 0.533729 -3.925206 -2.337794
 H 0.265246 -4.900823 -2.737920
 C 0.004286 -2.762747 -2.890055
 H -0.677586 -2.823604 -3.738386
 C 0.359513 -1.519839 -2.383434
 H -0.008031 -0.613195 -2.867888
 C 3.241340 -0.177713 1.734883
 C 3.854553 -1.382168 2.090926
 H 4.320754 -2.000835 1.326079
 C 3.880297 -1.796826 3.417568
 H 4.366494 -2.734666 3.679348
 C 3.283357 -1.019695 4.404366
 H 3.301615 -1.345567 5.442605
 C 2.657068 0.174159 4.058123
 H 2.181051 0.783327 4.824090
 C 2.635653 0.593288 2.733829
 H 2.134383 1.522432 2.466842
 C 3.345314 2.089045 -0.068134
 C 4.120726 2.724951 0.904067
 H 4.478642 2.169631 1.768131
 C 4.441678 4.071229 0.772836
 H 5.043049 4.558742 1.537710
 C 3.997069 4.791035 -0.330934
 H 4.245611 5.846175 -0.429485
 C 3.245034 4.156983 -1.314041
 H 2.904892 4.711328 -2.186359
 C 2.929016 2.809682 -1.190451
 H 2.364864 2.299541 -1.968158
 C 4.461288 -0.422199 -0.871330
 C 4.329978 -0.934280 -2.162287
 H 3.347298 -0.974683 -2.625261
 C 5.453041 -1.387802 -2.845845
 H 5.342967 -1.797260 -3.848023
 C 6.709693 -1.317455 -2.254540
 H 7.586358 -1.671836 -2.793741
 C 6.847679 -0.786198 -0.975488
 H 7.831027 -0.717279 -0.514305

C 5.727677 -0.339101 -0.286410
 H 5.837916 0.080683 0.712891
 C -1.398715 0.024292 0.217391
 C -1.050729 -1.292238 0.790306
 C -0.124614 -1.374209 1.843175
 H 0.309951 -0.457423 2.230380
 C 0.241040 -2.589775 2.402468
 H 0.960848 -2.604687 3.219383
 C -0.313836 -3.777016 1.931199
 H -0.028384 -4.732644 2.367385
 C -1.232300 -3.722861 0.889074
 H -1.662721 -4.640840 0.491346
 C -1.585192 -2.503733 0.322585
 H -2.265281 -2.492664 -0.527312
 C -4.041121 -0.073748 1.474254
 C -4.265808 0.857338 2.490480
 H -3.946062 1.889245 2.364620
 C -4.905744 0.474483 3.662920
 H -5.083377 1.210247 4.444898
 C -5.317435 -0.843105 3.836151
 H -5.813788 -1.142662 4.757312
 C -5.095940 -1.775644 2.828993
 H -5.413864 -2.808147 2.959073
 C -4.465568 -1.394584 1.650525
 H -4.303724 -2.127211 0.863665
 C -3.297519 2.147725 -0.289317
 C -4.187625 2.630200 -1.249938
 H -4.753649 1.937853 -1.867627
 C -4.344936 4.000064 -1.432483
 H -5.037870 4.365450 -2.187800
 C -3.616869 4.897384 -0.660226
 H -3.740015 5.968725 -0.807644
 C -2.724189 4.423342 0.295364
 H -2.141344 5.119391 0.894934
 C -2.560861 3.056579 0.478760
 H -1.850118 2.694839 1.218180
 C -3.975797 -0.445616 -1.362751

C -5.367918 -0.571493 -1.364887
H -5.949888 -0.203174 -0.521080
C -6.008882 -1.173027 -2.441725
H -7.092701 -1.273523 -2.439715
C -5.265860 -1.652724 -3.517671
H -5.770690 -2.129001 -4.356200
C -3.880344 -1.532137 -3.516295
H -3.295227 -1.916034 -4.350034
C -3.237717 -0.929837 -2.440395
H -2.152578 -0.855393 -2.404525
Ge 0.041927 1.258942 -0.734230
H -0.580885 1.044851 1.080673
H 0.166908 1.672196 1.187579

Y_{Ph}GeCl

E = -3847.76254297
P 0.613081 0.283900 -0.001168
C -0.864474 -0.398508 -0.518744
C -2.126225 0.318579 -0.276169
C -3.248901 0.075597 -1.091224
H -3.184918 -0.681694 -1.869893
C -4.435609 0.771465 -0.921362
H -5.279200 0.552137 -1.574209
C -4.556497 1.742380 0.069632
H -5.488698 2.288217 0.200280
C -3.467740 1.992496 0.896006
H -3.539677 2.739285 1.685448
C -2.281911 1.286624 0.733852
H -1.455158 1.497576 1.411749
C 1.999405 -0.401505 -0.965293
C 2.310403 0.165486 -2.203592
H 1.773096 1.047093 -2.547472
C 3.307776 -0.389240 -2.994614
H 3.546914 0.060673 -3.955965
C 3.998191 -1.516003 -2.558456
H 4.778514 -1.950827 -3.180027
C 3.689400 -2.087601 -1.329284

H 4.222325 -2.972447 -0.987549
 C 2.694223 -1.533390 -0.532121
 H 2.452547 -1.989476 0.425932
 C 1.071195 -0.055918 1.736119
 C 2.359745 0.140168 2.244756
 H 3.150952 0.516934 1.597169
 C 2.638486 -0.168729 3.569796
 H 3.641842 -0.016400 3.962827
 C 1.637403 -0.683374 4.390665
 H 1.859601 -0.928186 5.427598
 C 0.360675 -0.898153 3.884479
 H -0.418245 -1.313372 4.520481
 C 0.076559 -0.590002 2.557829
 H -0.917078 -0.771199 2.145849
 C 0.659580 2.085350 -0.249726
 C -0.066376 2.605695 -1.326026
 H -0.663612 1.934951 -1.941067
 C -0.044597 3.969775 -1.584199
 H -0.617649 4.369207 -2.418316
 C 0.693858 4.822782 -0.769654
 H 0.705972 5.892338 -0.970529
 C 1.406522 4.310092 0.308399
 H 1.975583 4.975933 0.954036
 C 1.389207 2.944725 0.571888
 H 1.933806 2.557076 1.428826
 Ge -0.717815 -2.484664 -0.648874
 Cl -2.808729 -2.971558 -0.060920
 H -1.140123 -1.955165 -2.426147
 H -1.016330 -1.138156 -1.929623

Y_{Ph}GeHMDS

E = -4261.54953800
 P -1.796582 0.184209 -0.054964
 C -0.172164 -0.191168 -0.400991
 C 0.214009 -1.573432 -0.009144
 C -0.146191 -2.681890 -0.792094
 H -0.684550 -2.515158 -1.723696

C 0.165060 -3.979989 -0.403179
 H -0.133714 -4.818325 -1.030488
 C 0.864890 -4.206628 0.777909
 H 1.114517 -5.221007 1.083652
 C 1.244860 -3.121626 1.562884
 H 1.791312 -3.284404 2.490979
 C 0.918938 -1.827638 1.175096
 H 1.192725 -0.986275 1.805107
 C -3.028167 -0.603746 -1.160951
 C -4.303493 -0.971452 -0.727967
 H -4.585694 -0.830114 0.313589
 C -5.211878 -1.522238 -1.625853
 H -6.202212 -1.814826 -1.282160
 C -4.855276 -1.701465 -2.958579
 H -5.567009 -2.135710 -3.658226
 C -3.587530 -1.329601 -3.396744
 H -3.306105 -1.469199 -4.438626
 C -2.676525 -0.785473 -2.499709
 H -1.676661 -0.503149 -2.829013
 C -2.137820 1.960518 -0.190631
 C -3.146090 2.462681 -1.013777
 H -3.759767 1.784371 -1.601651
 C -3.365085 3.834682 -1.088207
 H -4.149880 4.219737 -1.736093
 C -2.585383 4.709286 -0.340792
 H -2.758965 5.781911 -0.402678
 C -1.580675 4.213322 0.484981
 H -0.964740 4.893648 1.069387
 C -1.354683 2.845908 0.556965
 H -0.567888 2.455848 1.198884
 C -2.335310 -0.346719 1.608279
 C -2.351628 -1.719474 1.889300
 H -2.123404 -2.441236 1.106828
 C -2.656890 -2.167492 3.167665
 H -2.658976 -3.235718 3.374722
 C -2.954998 -1.257025 4.176846
 H -3.193694 -1.610729 5.178065

C -2.952975 0.105503 3.901155
 H -3.196697 0.822231 4.683005
 C -2.644538 0.561146 2.623642
 H -2.656334 1.628938 2.419900
 Ge 1.237034 1.281012 -0.920869
 N 2.835697 0.412963 -0.304453
 Si 3.390638 1.002253 1.245530
 Si 3.850103 -0.501956 -1.405659
 C 1.923956 1.815163 2.122245
 H 1.643648 2.755109 1.626137
 H 1.037499 1.167363 2.161524
 H 2.201842 2.067816 3.153873
 C 4.076024 -0.347111 2.366611
 H 3.949356 -0.056512 3.418174
 H 3.562703 -1.303034 2.210444
 H 5.146552 -0.506665 2.195460
 C 4.690556 2.353271 1.070083
 H 4.994532 2.743699 2.050880
 H 5.592853 1.993446 0.560739
 H 4.289982 3.188773 0.481107
 C 5.497608 -0.951841 -0.609682
 H 6.150864 -1.369580 -1.387620
 H 6.021472 -0.098181 -0.163607
 H 5.372269 -1.719643 0.162794
 C 4.213857 0.539224 -2.931232
 H 4.837001 -0.008108 -3.650884
 H 3.287826 0.830477 -3.443921
 H 4.743078 1.459493 -2.650917
 C 3.087122 -2.131274 -1.934879
 H 2.161522 -2.004360 -2.505871
 H 3.801815 -2.675407 -2.568000
 H 2.859546 -2.754180 -1.060478
 H 1.080083 0.163599 -2.486705
 H 0.399199 -0.145848 -1.854863

$Y_{Ph}GeB^I$

E = -4063.44202020

P 1.768085 0.766502 0.074123
 C 0.180905 0.166017 0.280394
 C -0.105157 -0.725043 1.410820
 C -1.368195 -0.716161 2.036664
 H -2.131616 -0.034017 1.668299
 C -1.658510 -1.538560 3.115380
 H -2.652997 -1.501279 3.557845
 C -0.688705 -2.388830 3.644786
 H -0.914001 -3.025808 4.497869
 C 0.574866 -2.399319 3.063697
 H 1.353145 -3.051152 3.458507
 C 0.853950 -1.598090 1.963955
 H 1.845532 -1.655697 1.516650
 C 1.745943 2.396585 -0.745858
 C 1.593782 3.553469 0.020956
 H 1.561779 3.487219 1.106353
 C 1.488794 4.793505 -0.597312
 H 1.373095 5.689969 0.008453
 C 1.534066 4.887087 -1.984399
 H 1.451986 5.858926 -2.467571
 C 1.681966 3.737793 -2.753241
 H 1.709550 3.805045 -3.838892
 C 1.784895 2.495668 -2.138814
 H 1.882702 1.597231 -2.744150
 C 2.907647 -0.222154 -0.956569
 C 4.087460 0.302024 -1.494511
 H 4.347183 1.346000 -1.321593
 C 4.920135 -0.502773 -2.261152
 H 5.837468 -0.092858 -2.679547
 C 4.575155 -1.831190 -2.499134
 H 5.227395 -2.461015 -3.101427
 C 3.395211 -2.350395 -1.979241
 H 3.117482 -3.383555 -2.172159
 C 2.556293 -1.547551 -1.212345
 H 1.618600 -1.940405 -0.815772
 C 2.603814 1.022651 1.673239
 C 1.818261 1.429506 2.757312

H 0.744078 1.545189 2.625232
 C 2.402160 1.654346 3.996391
 H 1.782461 1.963295 4.835648
 C 3.770970 1.469220 4.167143
 H 4.226761 1.640222 5.140604
 C 4.553635 1.055357 3.095689
 H 5.622658 0.900066 3.227330
 C 3.973823 0.830028 1.851410
 H 4.592293 0.489556 1.024864
 Ge -0.922097 0.326041 -1.516064
 N -2.506331 -2.177817 -0.545406
 C -4.447413 -1.511806 0.329876
 C -3.639367 -2.578636 0.149299
 H -5.438861 -1.481759 0.766192
 H -3.809907 -3.614969 0.417941
 B -2.568728 -0.758846 -0.769784
 N -3.858965 -0.383338 -0.238079
 C -4.417441 0.899617 -0.130755
 C -5.114664 1.286412 1.016545
 C -4.271234 1.814126 -1.177444
 C -5.655952 2.563126 1.110097
 H -5.211654 0.588432 1.845331
 C -4.802522 3.091540 -1.071036
 H -3.743232 1.505389 -2.077469
 C -5.501164 3.473304 0.070672
 H -6.193935 2.850595 2.011705
 H -4.677623 3.792103 -1.894582
 H -5.922534 4.473319 0.148490
 C -1.424779 -3.030420 -0.820803
 C -0.872169 -3.059206 -2.103843
 C -0.896184 -3.851375 0.176020
 C 0.184285 -3.916161 -2.388864
 H -1.302755 -2.428944 -2.879994
 C 0.158872 -4.705580 -0.116397
 H -1.296664 -3.781944 1.185621
 C 0.697331 -4.749212 -1.399465
 H 0.600100 -3.938040 -3.394583

H 0.570514 -5.334373 0.670755
H 1.516279 -5.429860 -1.625381
H -0.891905 1.382161 0.013343
H -1.491426 1.838910 -0.573337

V^{Ge}

E = -3097.25319055
C 1.658587 2.343910 -0.243367
C -0.470552 1.198805 -0.260738
C -1.111452 2.433032 -0.364686
C -0.374990 3.616803 -0.372889
C 1.008691 3.577185 -0.292823
H 2.748434 2.326928 -0.229299
H -2.195431 2.470714 -0.432308
H -0.895313 4.569981 -0.445105
H 1.590308 4.496916 -0.293037
N -1.121344 -0.035282 -0.192554
C -2.501625 -0.164278 0.007106
C -3.179962 0.556164 1.002061
C -3.226883 -1.091774 -0.751201
C -4.535652 0.356629 1.217343
H -2.624774 1.264206 1.613296
C -4.581147 -1.300892 -0.516874
H -2.712655 -1.640144 -1.539155
C -5.246674 -0.574050 0.462624
H -5.041307 0.925021 1.996488
H -5.121647 -2.029918 -1.118294
H -6.308929 -0.729617 0.639175
C 0.949468 1.140861 -0.248287
P 3.082847 -0.571875 0.262170
C 4.443434 -0.016644 -0.819466
H 4.416387 1.072525 -0.923425
H 5.417949 -0.317297 -0.417056
H 4.300444 -0.458688 -1.811278
C 3.512455 0.105527 1.896886
H 4.562577 -0.074232 2.153755
H 3.315294 1.183263 1.886848

H 2.859749 -0.353994 2.646445
 C 3.302478 -2.363770 0.375198
 H 4.329092 -2.606367 0.669215
 H 2.600821 -2.771327 1.110519
 H 3.087063 -2.816810 -0.598802
 C 1.509970 -0.215408 -0.274386
 H 1.071562 -0.796650 -1.573150
 Ge -0.035283 -1.598053 -0.271718
 H 0.399256 -1.364305 -2.123550

V/Ge

E = -3646.45487748
 C 0.119960 3.177921 -0.025447
 C -0.014282 1.795259 -0.008039
 C -1.161882 1.143666 -0.481625
 C -2.208009 1.951122 -0.949852
 C -2.087891 3.332290 -0.953997
 C -0.923592 3.955538 -0.504823
 H 1.041263 3.612883 0.356249
 H -3.114106 1.471710 -1.313531
 H -2.914088 3.935228 -1.326762
 H -0.837114 5.039527 -0.520655
 N -1.244219 -0.253469 -0.516190
 S 1.224782 0.816132 0.778209
 O 2.417010 1.653421 1.033822
 O 0.619025 0.183424 1.956510
 C 1.593988 -0.359636 -0.433438
 C -2.472378 -0.830922 -0.106846
 C -2.977673 -0.520084 1.160325
 C -3.171313 -1.720934 -0.923727
 C -4.171557 -1.079843 1.590519
 H -2.398350 0.144540 1.798553
 C -4.357336 -2.295066 -0.476355
 H -2.780635 -1.954408 -1.912599
 C -4.865858 -1.972294 0.776141
 H -4.555199 -0.832211 2.578733
 H -4.893406 -2.989199 -1.121177

H -5.798262 -2.415794 1.119608
P 3.150835 -1.052572 -0.158116
C 4.504625 0.029263 -0.670047
H 5.479182 -0.397929 -0.408278
H 4.442145 0.189519 -1.751427
H 4.347587 0.982982 -0.154873
C 3.295243 -2.585375 -1.100723
H 3.138022 -2.379065 -2.164879
H 4.289601 -3.021250 -0.955900
H 2.525241 -3.289129 -0.766823
C 3.446617 -1.448873 1.583502
H 3.379460 -0.510772 2.145782
H 2.650024 -2.113613 1.932644
H 4.429373 -1.911496 1.728915
Si 0.029561 -1.353999 -1.158239
H 0.367215 -0.227947 -2.496786
H 1.058435 0.000213 -1.793793

VII^{Ge}

E = -4408.53661898
C 0.345561 1.793365 0.464735
C -0.467572 1.731202 -0.669409
C -0.856620 2.912107 -1.300875
C -0.466790 4.147728 -0.802913
C 0.322517 4.211292 0.338395
C 0.725261 3.039699 0.964659
H -1.488011 2.830843 -2.182037
H -0.783471 5.058587 -1.307254
H 0.629223 5.172651 0.745734
H 1.356369 3.065204 1.849108
S 0.940240 0.401860 1.482534
S -1.056431 0.210301 -1.472318
O 2.145095 0.976130 2.120320
O -0.185651 0.037656 2.356314
O 0.121536 -0.291444 -2.228138
O -2.229563 0.681950 -2.230157
C -1.433705 -0.940491 -0.329980

P -2.859977 -0.745994 0.580458
 P 2.935602 -0.690606 -0.261105
 C -2.801210 -1.820946 2.023817
 H -3.717357 -1.713988 2.614428
 H -2.688685 -2.861447 1.701634
 H -1.922015 -1.521577 2.606373
 C -3.106277 0.942185 1.185094
 H -3.147768 1.612628 0.319026
 H -4.039372 1.016899 1.754573
 H -2.245939 1.196893 1.813325
 C -4.361998 -1.130688 -0.359931
 H -4.338097 -2.185847 -0.652004
 H -5.276157 -0.916429 0.205638
 H -4.317320 -0.517844 -1.267844
 C 3.104698 -1.885760 -1.599593
 H 4.067164 -1.739563 -2.101860
 H 3.036173 -2.906504 -1.211557
 H 2.278905 -1.711646 -2.299859
 C 3.096780 0.929949 -1.051044
 H 3.057172 1.705128 -0.279448
 H 4.045303 0.992919 -1.596062
 H 2.249276 1.041364 -1.738125
 C 4.365576 -0.874142 0.832049
 H 5.304837 -0.666624 0.306891
 H 4.217904 -0.170639 1.658162
 H 4.376703 -1.894212 1.230447
 Ge 0.036943 -2.266879 -0.356038
 H 0.015669 -2.641162 1.422608
 C 1.415088 -0.926049 0.528959
 H 0.772788 -1.962128 1.357093

VIII^{Ge}

E = -3616.51971628
 C 0.698969 3.305714 0.386395
 C 0.198830 2.012982 0.420048
 C -0.987850 1.575399 -0.179365
 C -1.724089 2.556558 -0.855413

C -1.269680 3.868694 -0.891974
 C -0.070772 4.251274 -0.276904
 H 1.637503 3.563241 0.873211
 H -2.666454 2.294038 -1.334177
 H -1.863810 4.624801 -1.403101
 H 0.252986 5.289182 -0.314085
 B -1.195731 0.014866 0.073634
 S 0.997312 0.576128 1.019000
 O 1.904340 0.728984 2.159491
 O -0.307355 -0.224934 1.339233
 C -2.634881 -0.603189 0.252383
 C -3.062104 -1.152619 1.467384
 C -3.546802 -0.611679 -0.813041
 C -4.341454 -1.679409 1.614924
 H -2.374009 -1.160855 2.311746
 C -4.829598 -1.127774 -0.671285
 H -3.240806 -0.213966 -1.782661
 C -5.232986 -1.666417 0.547220
 H -4.646832 -2.100590 2.572112
 H -5.516341 -1.118012 -1.516730
 H -6.234776 -2.077180 0.661620
 C 1.671026 -0.194415 -0.333581
 H 1.160152 0.359926 -1.624707
 P 3.172177 -0.982579 -0.054873
 C 4.504647 0.135256 0.444889
 H 4.651680 0.881146 -0.343074
 H 4.190013 0.639023 1.364367
 H 5.436090 -0.416066 0.615297
 C 3.686931 -1.769392 -1.592561
 H 4.637654 -2.294342 -1.448798
 H 2.905660 -2.470411 -1.906172
 H 3.798844 -1.002877 -2.366507
 C 3.097052 -2.271379 1.215544
 H 4.065997 -2.762774 1.358455
 H 2.779361 -1.788896 2.146911
 H 2.342925 -3.009556 0.921551
 H 0.491951 0.331431 -2.372762

Ge 0.028497 -1.122843 -1.395605

IX^{Ge}

E = -3067.30074352

C -1.739911 2.317663 0.084434

C 0.455527 1.250372 0.162958

C 1.019580 2.530100 0.348848

C 0.245194 3.671277 0.406803

C -1.144990 3.548677 0.268502

H -2.824303 2.278351 -0.008639

H 2.099065 2.606799 0.475712

H 0.696933 4.647943 0.567122

H -1.771227 4.439378 0.315305

B 1.248088 -0.055575 0.120404

C 2.791077 -0.193215 -0.011053

C 3.548096 0.668256 -0.826202

C 3.487861 -1.217012 0.654630

C 4.922903 0.520425 -0.962604

H 3.040015 1.457595 -1.378903

C 4.866005 -1.353461 0.545902

H 2.930748 -1.917992 1.276570

C 5.588398 -0.485568 -0.267844

H 5.480923 1.194538 -1.610825

H 5.379201 -2.147510 1.086163

H 6.666892 -0.597929 -0.366707

C -0.969298 1.126918 0.031839

P -3.171972 -0.543489 -0.173029

C -4.107945 -0.082193 1.323793

H -3.978681 0.986917 1.520763

H -5.175252 -0.309715 1.220800

H -3.691723 -0.638389 2.170575

C -4.109554 0.205158 -1.547281

H -5.171379 -0.060950 -1.490536

H -4.006942 1.294055 -1.530445

H -3.687617 -0.162871 -2.488539

C -3.446598 -2.319344 -0.363617

H -4.520502 -2.526379 -0.427597

H -2.946034 -2.668652 -1.272770
H -3.007807 -2.848522 0.488016
Ge -0.093145 -1.687170 0.256326
H 0.023158 -1.550868 -1.604873
C -1.497534 -0.199667 -0.146380
H -0.668575 -0.986445 -1.366584

3.5.2.3 Reaktionspfad C

VIII^{Ge}

E = -3616.52695199
C 1.028057 3.068613 0.270755
C 0.354721 1.862604 0.366496
C -0.888279 1.586269 -0.209805
C -1.479927 2.619443 -0.940227
C -0.836040 3.848580 -1.053133
C 0.405014 4.079251 -0.454367
H 1.987009 3.223076 0.762259
H -2.455312 2.472688 -1.401948
H -1.314316 4.654076 -1.607964
H 0.878417 5.054847 -0.544082
B -1.309747 0.081226 0.146608
S 0.935418 0.366913 1.107925
O 1.798626 0.611240 2.265495
O -0.505802 -0.193313 1.411223
C 1.516796 -0.669760 -0.050780
C -2.804715 -0.385424 0.218202
C -3.346978 -0.910558 1.396887
C -3.653237 -0.270633 -0.891550
C -4.679923 -1.301232 1.466849
H -2.706605 -1.011122 2.272141
C -4.986640 -0.657110 -0.828268
H -3.258398 0.114892 -1.832930
C -5.506220 -1.174461 0.354916
H -5.078095 -1.706567 2.396130
H -5.623574 -0.559516 -1.706317
H -6.549770 -1.480254 0.408039

P 3.207666 -0.863658 -0.115001
 C 4.133773 0.696121 -0.172617
 H 5.212283 0.521480 -0.256739
 H 3.779924 1.290598 -1.021716
 H 3.923195 1.237182 0.757196
 C 3.624469 -1.793286 -1.602816
 H 3.276201 -1.235983 -2.478443
 H 4.705721 -1.957367 -1.661553
 H 3.104122 -2.756835 -1.577490
 C 3.905696 -1.759915 1.296656
 H 3.595588 -1.216896 2.196563
 H 3.469710 -2.764025 1.325837
 H 4.998642 -1.824211 1.246224
 Ge 0.028615 -1.603702 -1.081475
 H 0.077973 -0.391454 -2.329860
 H -0.533346 -0.042466 -1.489919

***IX*^{Ge}**

E = -3067.31179563
 C 1.720620 2.316421 -0.026872
 C -0.468500 1.235143 0.077970
 C -1.042627 2.517969 0.206329
 C -0.277933 3.665921 0.220737
 C 1.114952 3.548844 0.094279
 H 2.804498 2.280264 -0.127988
 H -2.123972 2.592546 0.314900
 H -0.738939 4.645109 0.330974
 H 1.732706 4.446681 0.095979
 B -1.264456 -0.067186 0.056267
 C -2.815266 -0.221540 0.070029
 C -3.456809 -1.202756 0.843976
 C -3.632953 0.589866 -0.735614
 C -4.837788 -1.349813 0.839612
 H -2.857926 -1.863737 1.470818
 C -5.014198 0.433762 -0.762386
 H -3.171869 1.346670 -1.369066
 C -5.623107 -0.531651 0.032534

H -5.305119 -2.111870 1.461389
H -5.619730 1.071181 -1.405024
H -6.705245 -0.650344 0.019566
C 0.963053 1.114513 -0.016802
C 1.515529 -0.208952 -0.077700
P 3.181004 -0.542187 0.053071
C 4.259716 0.050751 -1.297137
H 4.184101 1.138582 -1.389298
H 5.306136 -0.226431 -1.123582
H 3.908775 -0.395897 -2.233568
C 3.968584 0.096674 1.568022
H 5.045510 -0.106267 1.579333
H 3.798296 1.175532 1.640896
H 3.490480 -0.382755 2.428619
C 3.475815 -2.326174 0.092752
H 4.547587 -2.523840 0.201391
H 2.926348 -2.764610 0.931770
H 3.108483 -2.779919 -0.833420
Ge 0.181869 -1.611565 -0.388721
H -0.581942 -1.222045 1.225791
H -0.055285 -2.003906 1.363797

3.5.3 Bei Stannylene

3.5.3.1 Reaktionspfad A

Y_2Sn

E = -3797.68220505
S -2.291390 1.305580 0.449441
S 2.032856 -1.273997 0.329879
P -2.340082 -1.594449 0.148973
P 2.540509 1.581137 0.267158
O -1.363632 2.400370 0.075815
O -2.512477 1.039225 1.885422
O 0.971484 -2.238715 0.017683
O 2.373343 -1.081460 1.760690
C -1.756415 -0.074832 -0.387016
C -4.143799 -1.498125 0.442881

C -4.618415 -1.280048 1.738929
 H -3.918235 -1.223093 2.567839
 C -5.979842 -1.108366 1.963987
 H -6.338500 -0.942906 2.978051
 C -6.874709 -1.135062 0.901527
 H -7.939494 -0.996752 1.080149
 C -6.404513 -1.326677 -0.394041
 H -7.097780 -1.338488 -1.232727
 C -5.047095 -1.506721 -0.622830
 H -4.696514 -1.660344 -1.639041
 C -2.017261 -2.805328 -1.155793
 C -2.391117 -2.494846 -2.467603
 H -2.847166 -1.530188 -2.684591
 C -2.133146 -3.389075 -3.496226
 H -2.428677 -3.143426 -4.514290
 C -1.470678 -4.583398 -3.227391
 H -1.255380 -5.279613 -4.035934
 C -1.060210 -4.874025 -1.932326
 H -0.508872 -5.788941 -1.726042
 C -1.330253 -3.989015 -0.894648
 H -0.961056 -4.194078 0.106105
 C -1.714017 -2.265847 1.710248
 C -2.267779 -3.423973 2.265228
 H -3.091904 -3.932831 1.765538
 C -1.766994 -3.919533 3.461333
 H -2.194657 -4.821134 3.895804
 C -0.716578 -3.263105 4.101924
 H -0.322514 -3.659326 5.036323
 C -0.169729 -2.111232 3.550427
 H 0.666658 -1.600878 4.022269
 C -0.676469 -1.610274 2.358175
 H -0.247740 -0.722726 1.909329
 C -3.890920 1.774442 -0.196739
 C -4.063664 1.893533 -1.572563
 H -3.223553 1.707153 -2.239982
 C -5.310903 2.229470 -2.072639
 H -5.450989 2.319097 -3.149428

C -6.396533 2.455028 -1.216800
 C -6.188832 2.347228 0.157363
 H -7.020688 2.521305 0.838890
 C -4.942716 2.007026 0.674188
 H -4.774701 1.899734 1.742927
 C -7.751663 2.774898 -1.772753
 H -8.237441 1.870695 -2.165427
 H -7.687985 3.490712 -2.600723
 H -8.410909 3.195923 -1.006432
 C 1.713929 0.231908 -0.408306
 C 2.098679 3.015758 -0.745707
 C 1.501766 4.139499 -0.176899
 H 1.315913 4.176077 0.893226
 C 1.112219 5.201124 -0.986546
 H 0.631605 6.068127 -0.538896
 C 1.320164 5.148310 -2.358835
 H 1.011341 5.980797 -2.988233
 C 1.907741 4.024339 -2.933154
 H 2.056097 3.972641 -4.009731
 C 2.284761 2.955499 -2.132860
 H 2.711995 2.059802 -2.581326
 C 4.354713 1.400005 0.254374
 C 5.147261 1.986970 -0.734442
 H 4.709787 2.670457 -1.456979
 C 6.507916 1.708674 -0.795854
 H 7.116795 2.171877 -1.569831
 C 7.087972 0.847431 0.128868
 H 8.152391 0.625921 0.074755
 C 6.306398 0.276570 1.127657
 H 6.753818 -0.397885 1.854864
 C 4.946447 0.550648 1.197120
 H 4.328449 0.081943 1.959992
 C 2.110180 2.005853 1.976015
 C 2.992523 2.657630 2.839096
 H 4.004731 2.894301 2.516506
 C 2.572042 2.996683 4.120668
 H 3.260453 3.497115 4.799075

C 1.276925 2.697110 4.536082
 H 0.955620 2.966612 5.540745
 C 0.393766 2.059778 3.669957
 H -0.628350 1.830622 3.964296
 C 0.815290 1.711889 2.394695
 H 0.127361 1.228354 1.711148
 C 3.553299 -1.909540 -0.378771
 C 4.008190 -1.495073 -1.622801
 H 3.415168 -0.784394 -2.194734
 C 5.223998 -1.968382 -2.096986
 H 5.587873 -1.631828 -3.067169
 C 5.995548 -2.858484 -1.345439
 C 5.502949 -3.279285 -0.107537
 H 6.087272 -3.978546 0.489725
 C 4.292297 -2.807917 0.381800
 H 3.924199 -3.104363 1.361589
 C 7.333886 -3.317162 -1.841464
 H 7.659811 -4.231611 -1.334536
 H 8.099075 -2.549137 -1.660644
 H 7.319152 -3.509521 -2.920480
 H 0.035832 -0.152464 -3.167108
 H 0.210482 -1.295084 -2.405152
 Sn -0.062761 0.463349 -1.562262

YSnCl

E = -2361.68717424
 S -0.644702 -1.457964 -1.264304
 P 0.510283 0.927283 0.113661
 O -0.320830 -2.901850 -1.198983
 O -0.592118 -0.760358 -2.552795
 C 0.371439 -0.766182 -0.075068
 C 0.796562 1.293618 1.868724
 C 1.621990 2.335046 2.291287
 H 2.147239 2.949208 1.564320
 C 1.800377 2.569267 3.650078
 H 2.454983 3.375193 3.975302
 C 1.156929 1.771174 4.589195

H 1.303883 1.955000 5.651681
 C 0.332387 0.730966 4.170182
 H -0.167310 0.100229 4.902670
 C 0.154068 0.488360 2.814771
 H -0.472094 -0.335133 2.473664
 C -1.044649 1.739578 -0.354761
 C -2.069265 1.900392 0.581329
 H -1.918623 1.602089 1.616123
 C -3.284488 2.446452 0.190750
 H -4.080274 2.569061 0.922385
 C -3.481212 2.833999 -1.131075
 H -4.433628 3.264630 -1.434635
 C -2.466528 2.664321 -2.066452
 H -2.622991 2.955236 -3.103085
 C -1.249327 2.112575 -1.685494
 H -0.466260 1.951216 -2.422101
 C 1.798924 1.754586 -0.852641
 C 1.803230 3.145768 -1.003961
 H 1.016831 3.748731 -0.550907
 C 2.801249 3.755857 -1.751874
 H 2.803029 4.837208 -1.873491
 C 3.791085 2.981428 -2.352915
 H 4.570496 3.461230 -2.941946
 C 3.778393 1.598790 -2.212347
 H 4.542794 0.988646 -2.688462
 C 2.781477 0.979858 -1.465945
 H 2.768750 -0.103690 -1.372094
 C -2.326792 -1.284588 -0.687077
 C -2.663649 -1.706667 0.595863
 H -1.904382 -2.161662 1.229800
 C -3.960933 -1.531536 1.047383
 H -4.228106 -1.855467 2.052698
 C -4.938638 -0.949266 0.229106
 C -4.576617 -0.558998 -1.058791
 H -5.324223 -0.108422 -1.710310
 C -3.275177 -0.721414 -1.523820
 H -2.977160 -0.402772 -2.519652

C -6.334094 -0.749547 0.739085
H -6.761907 -1.690253 1.107410
H -6.994798 -0.360604 -0.042295
H -6.351140 -0.040464 1.577491
Sn 1.696055 -2.267110 0.566142
H 2.695498 -0.805039 1.485405
H 2.372796 -2.096821 2.133281
Cl 3.487526 -2.631121 -1.004432

Y_{Sn}H₄MDS

E = -2775.47081470
S 1.293664 -1.923235 0.212997
P 0.766193 0.946297 0.314656
O 0.807543 -3.163683 -0.389628
O 1.336786 -1.823560 1.689029
C 0.462235 -0.567541 -0.447289
C 0.044430 2.257056 -0.714720
C -0.648370 3.328948 -0.151157
H -0.823168 3.362444 0.921247
C -1.120388 4.356733 -0.962017
H -1.667560 5.184444 -0.516161
C -0.899882 4.322080 -2.333599
H -1.272410 5.125990 -2.965262
C -0.212381 3.252946 -2.902349
H -0.046798 3.217675 -3.976870
C 0.256773 2.222122 -2.099133
H 0.792397 1.381326 -2.537057
C 2.531209 1.364783 0.477709
C 3.166999 2.221094 -0.423046
H 2.598357 2.725361 -1.199978
C 4.536565 2.438120 -0.327885
H 5.025281 3.110218 -1.030369
C 5.277108 1.797630 0.659079
H 6.351391 1.960533 0.726303
C 4.643868 0.951294 1.563736
H 5.220515 0.443515 2.333887
C 3.273714 0.740134 1.485229

H 2.778738 0.059442 2.176172
 C 0.112168 1.183419 1.991298
 C 0.614443 2.192373 2.819215
 H 1.428274 2.828646 2.474462
 C 0.079878 2.375728 4.087589
 H 0.470800 3.160008 4.732700
 C -0.946304 1.547516 4.534549
 H -1.358287 1.684886 5.532530
 C -1.439160 0.539439 3.713770
 H -2.231192 -0.115069 4.070421
 C -0.913205 0.354921 2.440147
 H -1.287325 -0.429681 1.787648
 C 3.014773 -1.794015 -0.275841
 C 3.419768 -1.117333 -1.417109
 H 2.674526 -0.627302 -2.040618
 C 4.772604 -1.037474 -1.717593
 H 5.092625 -0.484953 -2.600323
 C 5.731952 -1.641886 -0.901269
 C 5.294194 -2.349434 0.220843
 H 6.025705 -2.837451 0.863951
 C 3.946086 -2.423145 0.542222
 H 3.605470 -2.938957 1.437180
 C 7.192675 -1.492461 -1.201157
 H 7.789162 -2.258734 -0.695018
 H 7.557706 -0.512257 -0.862085
 H 7.392663 -1.556130 -2.276912
 Sn -1.339227 -0.780104 -1.586711
 H -1.422453 -1.937869 -2.851832
 H -1.330512 -2.721367 -1.734969
 N -3.029611 -0.775591 -0.365214
 Si -3.449261 -2.213691 0.565429
 Si -4.125994 0.581932 -0.523355
 C -4.088055 1.672820 1.008049
 H -3.076890 2.069879 1.161968
 H -4.775100 2.523111 0.901815
 H -4.365653 1.124157 1.915215
 C -5.891528 0.020451 -0.859498

H -6.303387 -0.624628 -0.075393
H -6.552867 0.892177 -0.953751
H -5.933645 -0.536525 -1.804598
C -3.639042 1.660057 -1.985580
H -2.627757 2.073273 -1.892444
H -3.691779 1.109915 -2.934112
H -4.333752 2.509151 -2.050223
C -4.442420 -3.395775 -0.505734
H -4.698893 -4.311563 0.043094
H -5.372242 -2.941357 -0.868204
H -3.843918 -3.688670 -1.378949
C -1.966498 -3.145501 1.220350
H -1.431405 -3.687376 0.433844
H -1.217878 -2.527827 1.730360
H -2.333926 -3.882641 1.948902
C -4.477907 -1.716681 2.068081
H -5.385879 -1.152489 1.828227
H -4.782758 -2.622475 2.608684
H -3.877911 -1.107121 2.755177

YSnC₆F₅

E = -2630.02508219
S -1.951098 -0.142696 -1.904565
P -0.426875 0.611942 0.514020
O -1.782333 -1.172779 -2.944021
O -1.981891 1.276694 -2.292721
C -0.745577 -0.487080 -0.751333
C 0.298697 -0.348908 1.873619
C 1.414922 0.062206 2.603701
H 1.919482 0.992978 2.360518
C 1.915878 -0.743375 3.619736
H 2.802901 -0.430410 4.165274
C 1.298714 -1.951288 3.924418
H 1.696715 -2.578820 4.719229
C 0.188786 -2.368333 3.197967
H -0.284841 -3.322163 3.420469
C -0.302431 -1.579011 2.166319

H -1.145364 -1.913647 1.562823
 C -1.947507 1.407582 1.106094
 C -2.770465 0.787243 2.048578
 H -2.478950 -0.160129 2.495016
 C -3.965730 1.386313 2.423746
 H -4.603379 0.901451 3.159944
 C -4.344820 2.600474 1.859048
 H -5.281961 3.067773 2.155650
 C -3.532663 3.212263 0.911124
 H -3.832882 4.155318 0.459246
 C -2.335890 2.618608 0.528633
 H -1.713946 3.081079 -0.233765
 C 0.680170 1.994637 0.121178
 C 1.053309 2.951184 1.073179
 H 0.661456 2.898374 2.088286
 C 1.918191 3.976286 0.717407
 H 2.218400 4.714141 1.458739
 C 2.398077 4.061758 -0.589054
 H 3.084895 4.860637 -0.861788
 C 1.989987 3.140872 -1.545383
 H 2.352383 3.209361 -2.568345
 C 1.120907 2.112161 -1.194403
 H 0.785146 1.393069 -1.939241
 C -3.526193 -0.451856 -1.115699
 C -3.734926 -1.652647 -0.443360
 H -2.934469 -2.389450 -0.399413
 C -4.955375 -1.883488 0.169360
 H -5.121229 -2.819995 0.700949
 C -5.983727 -0.933123 0.112956
 C -5.752499 0.251383 -0.584241
 H -6.541288 1.000504 -0.640579
 C -4.529042 0.499830 -1.199167
 H -4.331458 1.427869 -1.730074
 C -7.293059 -1.190426 0.796298
 H -8.016348 -0.395002 0.589927
 H -7.165258 -1.253964 1.885173
 H -7.732494 -2.141242 0.469932

Sn 0.689861 -1.864934 -1.536943
H 0.784863 -2.389810 -3.157814
H 1.019385 -0.991753 -3.238756
C 2.638912 -1.086532 -0.848813
C 3.363112 -0.064149 -1.450411
C 3.108813 -1.535857 0.376462
C 4.451143 0.539200 -0.830597
C 4.206985 -0.977304 1.016737
C 4.872077 0.080209 0.410712
F 2.475690 -2.521428 1.010646
F 3.033510 0.416875 -2.642833
F 4.603472 -1.416836 2.202803
F 5.907125 0.640991 1.009374
F 5.080986 1.550421 -1.407372

Y_{Sn}Py

E = -2149.17493559
S 0.343799 -1.761623 0.149363
P 0.335071 1.190057 0.222607
O -0.438476 -2.776406 -0.595370
O 0.242425 -1.792750 1.624324
C -0.111880 -0.276546 -0.527484
C -0.039547 2.532784 -0.934212
C -0.542116 3.760573 -0.502842
H -0.743014 3.929364 0.552319
C -0.813420 4.761201 -1.428465
H -1.215452 5.713532 -1.089037
C -0.584771 4.542831 -2.782822
H -0.804946 5.326658 -3.504942
C -0.082682 3.319452 -3.215795
H 0.089799 3.142898 -4.275469
C 0.189946 2.314197 -2.296517
H 0.563955 1.346318 -2.626886
C 2.117516 1.260644 0.564626
C 2.996553 1.939922 -0.280394
H 2.612031 2.538669 -1.103152
C 4.367887 1.847727 -0.072516

H 5.050252 2.382247 -0.730408
 C 4.864626 1.071175 0.968807
 H 5.939354 0.990527 1.122812
 C 3.989167 0.397241 1.814641
 H 4.375561 -0.217416 2.624867
 C 2.617020 0.496203 1.624130
 H 1.930177 -0.051818 2.268042
 C -0.450249 1.578369 1.810930
 C 0.081023 2.554436 2.658720
 H 0.992586 3.082591 2.380650
 C -0.547456 2.837791 3.864536
 H -0.134048 3.595470 4.527260
 C -1.699073 2.143703 4.227173
 H -2.187941 2.363799 5.174459
 C -2.218002 1.161828 3.389981
 H -3.109626 0.608504 3.677371
 C -1.593596 0.874434 2.182373
 H -1.976428 0.093333 1.531266
 C 2.077778 -2.056721 -0.171726
 C 2.721311 -1.474221 -1.255504
 H 2.153800 -0.841027 -1.934482
 C 4.084473 -1.669600 -1.421428
 H 4.595127 -1.194097 -2.257943
 C 4.817195 -2.450890 -0.523380
 C 4.138550 -3.051899 0.539047
 H 4.691452 -3.671679 1.243927
 C 2.776961 -2.854323 0.725573
 H 2.252458 -3.283294 1.575999
 C 6.300542 -2.598437 -0.677536
 H 6.684789 -3.443613 -0.097091
 H 6.816239 -1.693284 -0.326337
 H 6.584313 -2.744063 -1.726226
 Sn -1.928587 -0.645458 -1.640736
 H -2.568461 1.156851 -1.153900
 H -2.447600 0.769915 -2.502261
 C -3.539183 -1.417381 -0.394666
 C -5.800553 -1.655759 -0.178670

C -4.392910 -2.569183 1.518802
 C -5.672051 -2.339420 1.025985
 H -6.788936 -1.463957 -0.601992
 H -4.244418 -3.108423 2.453428
 H -6.555306 -2.687369 1.557565
 N -4.760662 -1.206346 -0.873712
 C -3.299303 -2.106402 0.796437
 H -2.282702 -2.277330 1.145569

YSnPyr

E = -2165.23134254
 S 0.304358 -1.727575 0.329907
 P 0.314266 1.230980 0.201566
 O -0.496962 -2.775390 -0.344070
 O 0.273771 -1.658184 1.801065
 C -0.153953 -0.280718 -0.434615
 C -0.104112 2.482092 -1.040665
 C -0.702028 3.696413 -0.704682
 H -0.937837 3.921310 0.332543
 C -1.024870 4.608793 -1.702846
 H -1.501762 5.549990 -1.437285
 C -0.753112 4.315713 -3.034513
 H -1.014004 5.029977 -3.813045
 C -0.154865 3.105458 -3.373063
 H 0.052658 2.869842 -4.414825
 C 0.168476 2.188942 -2.381430
 H 0.616035 1.230245 -2.639569
 C 2.107124 1.321137 0.483393
 C 2.965539 1.942368 -0.425366
 H 2.562269 2.499745 -1.267719
 C 4.341862 1.845964 -0.256307
 H 5.007647 2.335080 -0.964654
 C 4.864552 1.122294 0.810101
 H 5.942863 1.036103 0.932994
 C 4.010099 0.508946 1.720736
 H 4.416178 -0.063908 2.551681
 C 2.633466 0.614030 1.569367

H 1.962766 0.110542 2.264537
 C -0.427618 1.716112 1.781776
 C 0.055624 2.810038 2.506927
 H 0.906790 3.380583 2.135504
 C -0.545087 3.158345 3.709268
 H -0.172464 4.008901 4.276740
 C -1.617376 2.410013 4.191085
 H -2.084088 2.681633 5.136328
 C -2.080828 1.310982 3.477606
 H -2.906177 0.716640 3.864596
 C -1.486940 0.954817 2.271286
 H -1.820235 0.071971 1.726965
 C 2.028094 -2.054761 -0.039003
 C 2.633181 -1.551578 -1.183106
 H 2.042254 -0.964832 -1.883663
 C 3.989307 -1.761290 -1.385692
 H 4.468717 -1.345725 -2.271306
 C 4.754532 -2.481971 -0.464407
 C 4.114925 -3.005733 0.660983
 H 4.693039 -3.577505 1.386081
 C 2.761153 -2.790607 0.883583
 H 2.268933 -3.157357 1.781137
 C 6.230704 -2.646841 -0.664567
 H 6.637667 -3.441343 -0.030438
 H 6.760891 -1.717265 -0.412997
 H 6.472113 -2.882551 -1.707613
 Sn -1.872123 -0.757217 -1.625801
 H -2.642394 1.054654 -1.418400
 H -2.382913 0.514618 -2.690879
 C -3.513101 -1.421362 -0.360607
 C -5.658208 -2.123832 -0.156705
 C -4.192453 -2.112156 1.691630
 C -5.458383 -2.389979 1.192594
 H -6.627575 -2.303536 -0.627393
 H -3.944822 -2.283878 2.741559
 H -6.248916 -2.791159 1.822002
 N -3.226645 -1.625746 0.921204

N -4.692478 -1.649483 -0.935113

YSnB²

Nicht gefunden.

YSnB¹

E = -2577.38249734

S -1.684904 1.332499 -0.116416

P -0.384070 -1.320724 0.250229

O -1.464205 2.484761 -1.011373

O -1.611732 1.590574 1.340613

C -0.628188 0.112128 -0.646521

C 0.397762 -2.528198 -0.853451

C 1.563648 -3.221320 -0.532561

H 2.060572 -3.059798 0.419830

C 2.127585 -4.090444 -1.460680

H 3.043916 -4.618139 -1.207704

C 1.540396 -4.265074 -2.707522

H 1.990929 -4.940474 -3.432386

C 0.381865 -3.565032 -3.034756

H -0.073605 -3.687209 -4.015384

C -0.186892 -2.697271 -2.113763

H -1.072275 -2.118504 -2.372422

C -1.945218 -2.070962 0.816644

C -2.493343 -3.205223 0.214513

H -1.941049 -3.742650 -0.551901

C -3.753776 -3.653519 0.594006

H -4.174033 -4.539476 0.121936

C -4.474784 -2.970295 1.566574

H -5.467517 -3.314485 1.851747

C -3.923327 -1.849872 2.179743

H -4.484063 -1.310735 2.940361

C -2.658374 -1.405463 1.819589

H -2.240408 -0.512566 2.281730

C 0.597558 -1.193515 1.777622

C 0.848318 -2.323202 2.564409

H 0.497211 -3.302576 2.240778
 C 1.527430 -2.194144 3.767579
 H 1.727232 -3.074463 4.375439
 C 1.929707 -0.933353 4.206349
 H 2.447020 -0.830977 5.158726
 C 1.657585 0.192364 3.438610
 H 1.958455 1.179399 3.781488
 C 0.997696 0.065825 2.218767
 H 0.749924 0.943082 1.625825
 C -3.374077 0.777573 -0.345553
 C -3.704552 -0.189454 -1.284940
 H -2.924576 -0.597152 -1.924975
 C -5.010040 -0.654334 -1.355022
 H -5.263038 -1.432736 -2.073998
 C -6.001987 -0.153556 -0.507765
 C -5.652362 0.848372 0.400249
 H -6.414154 1.258858 1.062192
 C -4.346317 1.309729 0.492698
 H -4.058989 2.053299 1.232169
 C -7.391298 -0.714410 -0.545579
 H -8.112256 -0.039858 -0.071866
 H -7.434165 -1.673519 -0.009762
 H -7.722153 -0.904616 -1.573116
 H 1.945940 -0.611061 -1.805032
 H 1.437701 -0.172923 -3.034003
 N 3.581526 0.973847 0.288386
 C 3.194534 2.860083 1.436414
 C 3.949484 1.740232 1.390006
 H 3.246642 3.690961 2.130832
 H 4.768374 1.445021 2.035463
 N 2.317569 2.864955 0.362260
 C 4.121602 -0.308144 0.082501
 C 4.496794 -0.721930 -1.197062
 C 4.304986 -1.173890 1.163224
 C 5.056629 -1.978366 -1.387335
 H 4.367428 -0.037777 -2.032048
 C 4.877322 -2.425397 0.967444

H 3.979959 -0.865828 2.154131
 C 5.258964 -2.831929 -0.306796
 H 5.349193 -2.286837 -2.389126
 H 5.018098 -3.087717 1.819794
 H 5.713136 -3.809399 -0.458318
 C 1.297345 3.835101 0.211750
 C 1.154407 4.511234 -0.998211
 C 0.405887 4.075363 1.254249
 C 0.105785 5.404656 -1.169407
 H 1.867145 4.323746 -1.798332
 C -0.634115 4.977465 1.078619
 H 0.500949 3.515662 2.182076
 C -0.790135 5.639491 -0.132953
 H -0.012071 5.919234 -2.120872
 H -1.344161 5.138266 1.886980
 H -1.617804 6.331414 -0.274261
 B 2.512979 1.662326 -0.395629
 Sn 0.924159 1.025791 -1.872543

(Y_{Ph})₂Sn

E = -2620.48405265
 P -3.155991 0.182471 -0.024132
 P 3.095413 0.393376 0.082457
 C -1.575618 -0.343686 0.279567
 C -1.304954 -1.703920 0.762430
 C -2.090682 -2.819202 0.419173
 H -2.926506 -2.687847 -0.265592
 C -1.803367 -4.089845 0.901980
 H -2.434560 -4.928168 0.610373
 C -0.707153 -4.299028 1.731263
 H -0.471694 -5.296367 2.096840
 C 0.085310 -3.210274 2.085049
 H 0.940662 -3.351295 2.744734
 C -0.213143 -1.938043 1.619720
 H 0.406058 -1.092072 1.914276
 C -3.957321 -0.333839 -1.593862
 C -4.844069 -1.411333 -1.671177

H -5.206956 -1.884619 -0.760293
 C -5.262906 -1.889199 -2.907802
 H -5.956375 -2.726732 -2.955101
 C -4.797238 -1.301865 -4.079491
 H -5.124932 -1.678834 -5.046369
 C -3.903818 -0.237294 -4.012392
 H -3.527462 0.220013 -4.925158
 C -3.480704 0.238929 -2.778432
 H -2.779153 1.071624 -2.730611
 C -3.221534 2.005573 -0.071264
 C -4.190465 2.687907 -0.808464
 H -4.875586 2.138030 -1.450779
 C -4.278277 4.073864 -0.732531
 H -5.031729 4.599598 -1.315751
 C -3.406278 4.783836 0.085004
 H -3.475625 5.868571 0.142663
 C -2.449897 4.105383 0.834362
 H -1.771685 4.658532 1.480786
 C -2.359224 2.721672 0.762151
 H -1.622260 2.174225 1.347570
 C -4.335260 -0.276120 1.286802
 C -3.866787 -0.767318 2.505780
 H -2.802443 -0.939964 2.642046
 C -4.762650 -1.031955 3.535694
 H -4.393534 -1.426144 4.480385
 C -6.121668 -0.793468 3.361974
 H -6.819225 -1.000883 4.171418
 C -6.589576 -0.281994 2.155151
 H -7.650688 -0.082081 2.019618
 C -5.699423 -0.022378 1.120808
 H -6.065902 0.382652 0.178140
 C 1.825966 -0.462416 -0.660864
 C 2.026277 -1.851379 -1.080196
 C 0.959762 -2.653856 -1.534584
 H -0.033426 -2.217508 -1.604519
 C 1.135061 -3.982149 -1.887083
 H 0.268984 -4.556489 -2.213108

C 2.390341 -4.581895 -1.825515
 H 2.526139 -5.624843 -2.104288
 C 3.466204 -3.812178 -1.400627
 H 4.463821 -4.246555 -1.346989
 C 3.290498 -2.482675 -1.038166
 H 4.167343 -1.929986 -0.703518
 C 4.583542 0.604107 -0.970441
 C 4.365770 0.557589 -2.349478
 H 3.357341 0.359142 -2.712963
 C 5.425995 0.736794 -3.230292
 H 5.250347 0.693424 -4.303368
 C 6.709317 0.954386 -2.739838
 H 7.540704 1.089534 -3.429254
 C 6.933317 0.983542 -1.366807
 H 7.938973 1.139564 -0.981002
 C 5.875834 0.805196 -0.482205
 H 6.067085 0.808072 0.587611
 C 2.547255 2.071715 0.498917
 C 1.747096 2.250225 1.633044
 H 1.545240 1.406151 2.292047
 C 1.207645 3.499318 1.910746
 H 0.580918 3.633744 2.790532
 C 1.463545 4.571989 1.060781
 H 1.034458 5.549209 1.274945
 C 2.269537 4.399409 -0.058617
 H 2.471552 5.238943 -0.720453
 C 2.815444 3.151454 -0.340301
 H 3.437238 3.011864 -1.222247
 C 3.697349 -0.246117 1.689062
 C 4.431195 0.567552 2.558783
 H 4.677706 1.589141 2.271265
 C 4.819398 0.090969 3.805154
 H 5.385502 0.732204 4.478113
 C 4.472013 -1.199079 4.194814
 H 4.774637 -1.572273 5.171446
 C 3.724244 -2.004325 3.342133
 H 3.438708 -3.008897 3.649018

C 3.329480 -1.530218 2.095771
H 2.722350 -2.148529 1.439022
Sn -0.011435 0.611910 -0.848669
H -0.366945 1.153913 -2.460001
H -0.430960 -0.177427 -2.667010

Y_{Ph}SnCl

E = -1773.09232286
P -0.834506 -0.160387 0.024796
C 0.726052 0.492420 -0.219892
C 0.970627 1.929460 -0.090303
C -0.045145 2.832786 0.296958
H -1.037879 2.465965 0.552100
C 0.175285 4.201405 0.365612
H -0.645282 4.854706 0.658770
C 1.424865 4.735501 0.073508
H 1.599850 5.807551 0.133880
C 2.450683 3.864303 -0.279172
H 3.445679 4.250857 -0.494032
C 2.233025 2.497098 -0.356191
H 3.066949 1.846197 -0.607997
C -1.482749 -0.142007 1.730875
C -2.612694 -0.876301 2.107299
H -3.149036 -1.472364 1.369599
C -3.033970 -0.875502 3.431002
H -3.909648 -1.452606 3.721539
C -2.327737 -0.147615 4.385197
H -2.658282 -0.149147 5.422142
C -1.191519 0.565255 4.018995
H -0.628443 1.119787 4.766696
C -0.761802 0.562602 2.696120
H 0.142553 1.094553 2.404703
C -0.851262 -1.913086 -0.437545
C -0.533617 -2.886528 0.513863
H -0.371717 -2.601657 1.551804
C -0.414967 -4.216999 0.130306
H -0.159936 -4.971743 0.871084

C -0.612765 -4.578959 -1.198001
 H -0.515688 -5.620818 -1.496920
 C -0.935840 -3.612446 -2.145512
 H -1.094227 -3.896444 -3.183723
 C -1.055883 -2.280387 -1.768880
 H -1.304510 -1.522826 -2.509665
 C -2.068680 0.672071 -1.034642
 C -3.418600 0.796238 -0.703408
 H -3.790856 0.424517 0.247240
 C -4.294695 1.420985 -1.583807
 H -5.346066 1.516676 -1.320042
 C -3.828573 1.929660 -2.791547
 H -4.516778 2.422253 -3.475793
 C -2.480345 1.822626 -3.116968
 H -2.108113 2.237672 -4.051333
 C -1.599857 1.200400 -2.240885
 H -0.536334 1.135221 -2.467811
 Sn 2.268057 -0.916748 -0.499435
 H 3.075204 0.031849 -2.050784
 H 2.895359 -1.374038 -2.028466
 Cl 4.122524 -0.344754 0.934643

Y_{Ph}SnHMDS

E = -2186.88399426
 P -1.907377 -0.121157 -0.042741
 C -0.357821 0.513920 -0.357199
 C -0.041719 1.908491 -0.058614
 C -0.884091 2.731078 0.723612
 H -1.808634 2.329337 1.135746
 C -0.572961 4.056381 0.996773
 H -1.260493 4.646416 1.601211
 C 0.601544 4.626206 0.518657
 H 0.850483 5.661114 0.742961
 C 1.451875 3.837401 -0.250746
 H 2.379938 4.253890 -0.640920
 C 1.138528 2.517102 -0.534533
 H 1.825678 1.929796 -1.137608

C -2.365021 -0.454502 1.697503
 C -3.466068 -1.246916 2.039975
 H -4.090595 -1.680862 1.259632
 C -3.749776 -1.506840 3.375078
 H -4.603768 -2.128739 3.636435
 C -2.935728 -0.981294 4.375203
 H -3.158736 -1.187697 5.420304
 C -1.830006 -0.208283 4.039208
 H -1.181626 0.189785 4.817019
 C -1.539816 0.048847 2.703856
 H -0.655482 0.621572 2.430973
 C -2.082473 -1.732001 -0.858255
 C -1.736144 -2.906438 -0.185287
 H -1.458959 -2.872217 0.866600
 C -1.730884 -4.119042 -0.865302
 H -1.450722 -5.030053 -0.340716
 C -2.074115 -4.164339 -2.211857
 H -2.066307 -5.114212 -2.742909
 C -2.428667 -2.997066 -2.881860
 H -2.701077 -3.032430 -3.934594
 C -2.432829 -1.781886 -2.208804
 H -2.701962 -0.867268 -2.733785
 C -3.215809 0.962696 -0.717832
 C -4.501601 1.056495 -0.183708
 H -4.770357 0.497895 0.708822
 C -5.443971 1.885586 -0.781935
 H -6.444903 1.955353 -0.360629
 C -5.106982 2.629229 -1.908020
 H -5.846075 3.280605 -2.370652
 C -3.821217 2.551300 -2.433168
 H -3.547708 3.146379 -3.302069
 C -2.875431 1.724994 -1.839341
 H -1.857144 1.674659 -2.223082
 Sn 1.108776 -0.825094 -1.114805
 H 1.468673 0.303501 -2.727693
 H 1.309156 -1.069120 -2.804964
 Si 2.743217 -0.656453 1.641358

Si 4.370015 0.206302 -0.786811
 C 1.418481 -1.958112 1.985786
 H 0.412617 -1.617768 1.711105
 H 1.628082 -2.893951 1.450003
 H 1.398575 -2.183137 3.060891
 C 4.329611 -1.330153 2.398547
 H 5.185290 -0.655040 2.280082
 H 4.176006 -1.478711 3.476007
 H 4.598407 -2.298667 1.958803
 C 2.282478 0.913976 2.564356
 H 1.407220 1.396998 2.114785
 H 2.063386 0.698891 3.619491
 H 3.099275 1.645234 2.533170
 C 4.174179 0.801227 -2.558422
 H 3.869484 -0.000020 -3.242847
 H 3.458222 1.623744 -2.669079
 H 5.157547 1.162322 -2.891445
 C 5.702242 -1.123738 -0.851420
 H 6.605099 -0.741454 -1.346705
 H 5.992122 -1.483234 0.141628
 H 5.344452 -1.987724 -1.427064
 C 4.993258 1.673489 0.217024
 H 5.251576 1.402825 1.248047
 H 5.889357 2.107873 -0.245388
 H 4.217611 2.449566 0.262024
 N 2.886933 -0.406877 -0.087363

Y_{Ph}SnC₆F₅

E = -2041.43162396
 P -1.896213 0.004149 0.129103
 C -0.493290 0.565363 -0.667820
 C 0.090298 1.865328 -0.325574
 C 1.171536 2.408145 -1.050676
 H 1.591860 1.841289 -1.878728
 C 1.714972 3.647187 -0.746053
 H 2.551051 4.015054 -1.339165
 C 1.207229 4.414450 0.297336

H 1.636114 5.385048 0.536981
 C 0.142510 3.905654 1.032650
 H -0.274723 4.478512 1.859628
 C -0.396526 2.661135 0.736997
 H -1.215644 2.301938 1.357976
 C -3.241173 1.234773 0.037371
 C -3.235061 2.091686 -1.066857
 H -2.422003 2.016969 -1.787778
 C -4.240728 3.038150 -1.218851
 H -4.226477 3.707224 -2.076791
 C -5.252152 3.139615 -0.269278
 H -6.037056 3.884356 -0.386707
 C -5.252544 2.298391 0.838440
 H -6.034955 2.384702 1.589773
 C -4.248495 1.349905 0.996376
 H -4.246406 0.715320 1.878388
 C -2.502580 -1.504915 -0.673086
 C -2.051533 -2.755871 -0.241765
 C -2.427877 -3.903077 -0.930360
 C -3.252596 -3.806511 -2.045922
 C -3.704356 -2.562316 -2.475728
 C -3.330700 -1.411465 -1.792529
 C -1.717393 -0.478113 1.883646
 C -2.693832 -1.210656 2.567705
 H -3.622026 -1.486011 2.067909
 C -2.466295 -1.623429 3.874435
 H -3.225608 -2.198264 4.401084
 C -1.260906 -1.317496 4.501534
 H -1.081460 -1.649217 5.522450
 C -0.280305 -0.606527 3.819408
 H 0.672211 -0.387192 4.297120
 C -0.505285 -0.190560 2.511826
 H 0.266192 0.343337 1.960006
 Sn 0.645212 -0.914523 -1.664194
 H 0.735777 -1.120264 -3.368305
 H 1.204363 0.166131 -3.208418
 C 2.620939 -0.685804 -0.739141

C 3.801598 -0.919927 1.380661
 C 4.826507 0.285410 -0.433391
 C 4.871667 -0.195609 0.869247
 H -1.398320 -2.829572 0.626281
 H -2.069209 -4.874480 -0.596830
 H -3.545209 -4.705847 -2.584408
 H -4.350893 -2.487073 -3.347550
 H -3.680521 -0.437427 -2.129331
 C 3.705508 0.032350 -1.217251
 C 2.706181 -1.155055 0.562594
 F 1.688352 -1.851142 1.085363
 F 3.706764 0.534021 -2.447685
 F 5.847619 0.979193 -0.909874
 F 5.931725 0.036237 1.622631
 F 3.839278 -1.371853 2.625558

Y_{Ph}SnPy

E = -1560.57715178
 P -1.353297 -0.146911 0.090360
 C 0.177345 0.393314 -0.426432
 C 0.493184 1.823228 -0.409415
 C 1.576350 2.347429 -1.146181
 H 2.196263 1.662946 -1.723466
 C 1.868302 3.702950 -1.159411
 H 2.716869 4.054368 -1.744858
 C 1.092806 4.609969 -0.442405
 H 1.323658 5.673114 -0.454546
 C 0.019558 4.123353 0.295391
 H -0.603537 4.806720 0.870871
 C -0.267428 2.765248 0.320505
 H -1.107449 2.431869 0.928278
 C -2.686240 0.876749 -0.628389
 C -2.433014 1.431659 -1.886820
 H -1.461566 1.266936 -2.350806
 C -3.400131 2.204640 -2.516110
 H -3.192596 2.638202 -3.492259
 C -4.621332 2.437412 -1.892122

H -5.376980 3.047882 -2.382932
 C -4.870754 1.901524 -0.633268
 H -5.819578 2.093308 -0.136051
 C -3.906249 1.125894 0.000902
 H -4.105146 0.733062 0.994252
 C -1.639182 -1.852015 -0.463585
 C -1.321489 -2.933294 0.361545
 H -0.987483 -2.761090 1.382633
 C -1.419139 -4.231661 -0.125896
 H -1.161181 -5.070232 0.517450
 C -1.833852 -4.455418 -1.433629
 H -1.906112 -5.472243 -1.814676
 C -2.155841 -3.380285 -2.256940
 H -2.482470 -3.554051 -3.280118
 C -2.058295 -2.081252 -1.775650
 H -2.302741 -1.240358 -2.421776
 C -1.665314 -0.217477 1.894478
 C -2.767859 -0.876084 2.449008
 H -3.495945 -1.362838 1.800737
 C -2.921625 -0.938304 3.828442
 H -3.777700 -1.456923 4.255798
 C -1.975046 -0.347877 4.662086
 H -2.096547 -0.399159 5.742458
 C -0.868064 0.292355 4.116360
 H -0.120360 0.741641 4.766760
 C -0.708288 0.350491 2.735797
 H 0.167111 0.825800 2.293382
 Sn 1.637804 -1.107144 -0.820893
 H 1.810521 -1.755047 -2.420473
 H 2.192017 -0.468426 -2.605624
 C 3.566261 -0.463866 -0.043043
 N 4.636035 -1.136224 -0.464835
 C 4.903725 0.917899 1.391183
 C 5.828714 -0.794821 0.010620
 C 6.019503 0.224100 0.938893
 H 5.005275 1.723677 2.116948
 H 6.682563 -1.364465 -0.363350

H 7.018936 0.462379 1.296865
 C 3.654055 0.570123 0.893630
 H 2.757197 1.101451 1.210352

Y_{Ph}SnPyr

E = -1576.63642433
 P -1.329780 -0.064770 0.087594
 C 0.128022 0.312257 -0.707877
 C 0.649749 1.682008 -0.680686
 C 1.708215 2.075752 -1.524494
 H 2.152580 1.331672 -2.184055
 C 2.194066 3.373657 -1.537402
 H 3.013038 3.626122 -2.209841
 C 1.648017 4.349270 -0.707284
 H 2.030918 5.367756 -0.717078
 C 0.608593 3.988678 0.142315
 H 0.167983 4.726739 0.811369
 C 0.128441 2.685934 0.164228
 H -0.667170 2.446153 0.867845
 C -2.638894 1.126465 -0.366430
 C -2.555203 1.697826 -1.639978
 H -1.707623 1.445973 -2.275940
 C -3.526677 2.593929 -2.067607
 H -3.450390 3.039341 -3.057461
 C -4.582603 2.932328 -1.227629
 H -5.341071 3.637633 -1.562108
 C -4.659904 2.379660 0.045940
 H -5.476009 2.653144 0.711854
 C -3.689895 1.482467 0.479165
 H -3.749073 1.078859 1.485771
 C -1.911530 -1.707392 -0.427233
 C -1.687437 -2.840530 0.357093
 H -1.221628 -2.744061 1.335405
 C -2.047543 -4.097240 -0.117921
 H -1.862887 -4.977819 0.493852
 C -2.631484 -4.227514 -1.372427
 H -2.911012 -5.212030 -1.742662

C -2.856683 -3.099795 -2.156971
 H -3.313166 -3.199689 -3.139570
 C -2.496510 -1.843496 -1.688310
 H -2.665084 -0.962360 -2.304373
 C -1.287550 -0.150494 1.916178
 C -2.343788 -0.641769 2.691422
 H -3.258256 -0.990054 2.212170
 C -2.217107 -0.720592 4.072473
 H -3.038832 -1.108163 4.671765
 C -1.034185 -0.315201 4.686175
 H -0.936083 -0.378313 5.768429
 C 0.025911 0.150994 3.917191
 H 0.957920 0.448863 4.393379
 C -0.092627 0.227853 2.532608
 H 0.750935 0.555082 1.921181
 Sn 1.450082 -1.326568 -0.977976
 H 1.668394 -2.111765 -2.507696
 H 2.129157 -0.862138 -2.764110
 C 3.353964 -0.678097 -0.132547
 N 3.235767 0.181711 0.882056
 N 4.507271 -1.152891 -0.603489
 C 4.356206 0.635973 1.431327
 C 5.621655 -0.698878 -0.043684
 C 5.608357 0.229417 0.991120
 H 4.249515 1.348687 2.252139
 H 6.564360 -1.089580 -0.434430
 H 6.525360 0.607334 1.436530

$Y_{Ph}SnB^2$

E = -1719.59998698
 P -1.917834 -0.074659 0.105313
 C -0.349167 0.310031 -0.434210
 C 0.084285 1.707922 -0.489607
 C 1.199770 2.102724 -1.257093
 H 1.752603 1.343133 -1.805877
 C 1.600416 3.427128 -1.346503
 H 2.470074 3.676583 -1.953042

C 0.904063 4.431577 -0.680456
 H 1.219464 5.470428 -0.751769
 C -0.202148 4.074576 0.082306
 H -0.766300 4.836950 0.617995
 C -0.596464 2.747549 0.183713
 H -1.458603 2.517693 0.808167
 C -3.167033 1.015958 -0.663930
 C -2.878140 1.496914 -1.944670
 H -1.922735 1.242271 -2.401253
 C -3.789339 2.310409 -2.605969
 H -3.554024 2.686453 -3.599537
 C -4.989528 2.656137 -1.992999
 H -5.700717 3.297593 -2.510056
 C -5.273264 2.193323 -0.712948
 H -6.204664 2.473082 -0.224575
 C -4.364462 1.378857 -0.046396
 H -4.588042 1.044520 0.962818
 C -2.343278 -1.776514 -0.366121
 C -2.129230 -2.839446 0.514342
 C -2.335265 -4.147252 0.089178
 C -2.755642 -4.398720 -1.211471
 C -2.973854 -3.341512 -2.090455
 C -2.767313 -2.033810 -1.671375
 C -2.237624 -0.030996 1.909948
 C -3.386393 -0.576871 2.492769
 H -4.146475 -1.044026 1.867180
 C -3.548156 -0.551628 3.872426
 H -4.440930 -0.982406 4.321788
 C -2.563765 0.014709 4.678610
 H -2.692004 0.033087 5.759290
 C -1.411865 0.541949 4.105759
 H -0.635517 0.972198 4.735174
 C -1.243737 0.511810 2.725075
 H -0.334530 0.898281 2.264747
 Sn 0.998115 -1.326878 -0.666894
 H 0.958910 -2.127470 -2.224209
 H 1.608971 -0.977437 -2.495927

H -1.792308 -2.647084 1.530810
H -2.158623 -4.972006 0.776432
H -2.913791 -5.422992 -1.543537
H -3.304521 -3.536606 -3.108491
H -2.929852 -1.207858 -2.361099
C 5.324237 -0.743874 -0.216435
C 4.853589 0.320832 0.546036
C 6.673805 -0.993727 -0.367768
C 5.707295 1.192027 1.192632
C 7.547016 -0.119940 0.283837
H 7.028156 -1.828755 -0.965968
C 7.074728 0.948885 1.046024
H 5.323719 2.021898 1.779814
H 8.619760 -0.276588 0.192978
H 7.786756 1.609221 1.536455
B 3.132147 -0.751945 -0.288593
O 3.490254 0.316093 0.514407
O 4.259126 -1.422446 -0.732630

$Y_{Ph}SnB^1$

E = -1988.78927655
P 2.047609 -0.741316 0.105243
C 0.486630 -0.143098 0.395585
C 0.249791 0.827362 1.461687
C 1.249877 1.706797 1.934406
H 2.236576 1.694166 1.472700
C 1.014991 2.604166 2.966624
H 1.821977 3.258056 3.295196
C -0.237067 2.684123 3.569899
H -0.423920 3.395716 4.371670
C -1.241197 1.824303 3.129818
H -2.226646 1.852019 3.593122
C -1.001876 0.913800 2.110431
H -1.794896 0.230335 1.812489
C 3.204859 0.236793 -0.923758
C 4.399939 -0.286422 -1.429793
H 4.681706 -1.315525 -1.207872

C 5.217310 0.495843 -2.235298
 H 6.144122 0.084694 -2.631095
 C 4.844089 1.802420 -2.542662
 H 5.484604 2.414687 -3.174901
 C 3.649784 2.319666 -2.054962
 H 3.349637 3.334489 -2.304051
 C 2.825017 1.537102 -1.252267
 H 1.872029 1.920571 -0.885188
 C 1.927055 -2.327236 -0.776673
 C 2.037556 -2.390847 -2.166847
 H 2.311767 -1.503737 -2.733555
 C 1.777357 -3.584233 -2.832086
 H 1.855141 -3.625133 -3.916611
 C 1.406371 -4.715212 -2.115136
 H 1.198298 -5.647023 -2.637603
 C 1.298402 -4.656554 -0.728164
 H 1.008282 -5.540858 -0.164472
 C 1.555215 -3.466942 -0.060209
 H 1.455525 -3.417721 1.022303
 C 2.920453 -1.048742 1.681756
 C 4.296405 -0.891622 1.851980
 H 4.917042 -0.546824 1.029522
 C 4.881169 -1.153738 3.086352
 H 5.954766 -1.026440 3.211205
 C 4.097675 -1.566178 4.158207
 H 4.557868 -1.765342 5.124260
 C 2.723062 -1.709588 3.997895
 H 2.102532 -2.013001 4.838639
 C 2.134223 -1.447988 2.767909
 H 1.055540 -1.524928 2.640417
 Sn -1.078119 -0.694423 -0.962701
 N -4.089443 0.597745 -0.123902
 C -3.621759 2.782710 0.027702
 C -4.562023 1.846256 0.274183
 H -3.676104 3.856062 0.168323
 H -5.569095 1.985170 0.648387
 B -2.749669 0.768435 -0.623415

N -2.508866 2.180332 -0.549436
 C -1.361929 2.918759 -0.906067
 C -0.757708 3.774017 0.015711
 C -0.850380 2.826702 -2.202059
 C 0.319420 4.560965 -0.372107
 H -1.120205 3.794845 1.041572
 C 0.229401 3.614504 -2.582251
 H -1.332504 2.159950 -2.914192
 C 0.805757 4.497661 -1.673930
 H 0.785550 5.222232 0.355609
 H 0.610935 3.547649 -3.599498
 H 1.636962 5.131580 -1.977555
 C -4.814182 -0.590934 0.050478
 C -4.654671 -1.638775 -0.859962
 C -5.690816 -0.753526 1.125613
 C -5.351260 -2.826976 -0.691551
 H -3.988287 -1.505968 -1.710951
 C -6.395660 -1.940937 1.279412
 H -5.799572 0.043510 1.857381
 C -6.229701 -2.984481 0.375400
 H -5.212612 -3.633374 -1.409246
 H -7.072283 -2.053784 2.124564
 H -6.780405 -3.914105 0.502205
 H -2.056749 -1.865243 0.275749
 H -1.548723 -2.374054 -0.863267

(Y_{PhF})₂Sn

E = -3614.29083094
 P -3.320396 -0.528397 0.049491
 P 2.970994 -1.137277 -0.034846
 C -1.716310 -0.121163 -0.319378
 C -1.292363 1.175814 -0.820088
 C -1.834019 2.401561 -0.407828
 C -1.360747 3.629560 -0.840300
 C -0.297078 3.678750 -1.732440
 C 0.247574 2.490014 -2.199700
 C -0.249366 1.273320 -1.756055

C -3.907658 -0.276193 1.763086
 C -4.581472 0.877681 2.175506
 H -4.885084 1.623253 1.445530
 C -4.856488 1.082943 3.521115
 H -5.386372 1.981924 3.829601
 C -4.450923 0.150567 4.471379
 H -4.665309 0.317789 5.525165
 C -3.761505 -0.988118 4.072814
 H -3.427587 -1.714199 4.810954
 C -3.487093 -1.198776 2.727212
 H -2.950945 -2.096927 2.422255
 C -3.565112 -2.320674 -0.222844
 C -4.644106 -2.991122 0.357918
 H -5.302629 -2.467862 1.049117
 C -4.874698 -4.329654 0.065003
 H -5.715010 -4.846555 0.524134
 C -4.031349 -5.006155 -0.810874
 H -4.210264 -6.055859 -1.036434
 C -2.964798 -4.338020 -1.402571
 H -2.307983 -4.862953 -2.093479
 C -2.734488 -2.997146 -1.117240
 H -1.911243 -2.457685 -1.582687
 C -4.519512 0.265131 -1.061460
 C -4.088306 0.699271 -2.316882
 H -3.041446 0.596164 -2.590278
 C -4.998437 1.243105 -3.215396
 H -4.653958 1.587998 -4.188194
 C -6.343406 1.339817 -2.875917
 H -7.054149 1.766693 -3.580923
 C -6.782143 0.879211 -1.638684
 H -7.836341 0.938258 -1.375595
 C -5.875690 0.340036 -0.734195
 H -6.227494 -0.026090 0.228271
 C 1.681783 -0.181652 0.585675
 C 1.857373 1.212883 0.953145
 C 0.829510 2.010955 1.503225
 C 0.939858 3.374359 1.728753

C 2.134918 4.039708 1.499025
 C 3.203335 3.294264 1.024887
 C 3.058090 1.935619 0.794494
 C 4.332218 -1.370770 1.159953
 C 3.970124 -1.396351 2.509110
 H 2.924242 -1.251323 2.779676
 C 4.939592 -1.579170 3.488391
 H 4.650959 -1.597627 4.537458
 C 6.275295 -1.719845 3.127319
 H 7.036024 -1.853875 3.894028
 C 6.640983 -1.670447 1.785822
 H 7.687834 -1.759696 1.502265
 C 5.674963 -1.494775 0.802241
 H 5.974955 -1.431539 -0.240357
 C 2.322767 -2.798579 -0.388464
 C 1.601401 -2.980314 -1.575389
 H 1.532528 -2.168005 -2.297429
 C 0.955564 -4.185490 -1.814782
 H 0.387318 -4.319899 -2.733313
 C 1.027837 -5.212514 -0.877649
 H 0.510504 -6.152542 -1.060200
 C 1.767676 -5.043227 0.287160
 H 1.833647 -5.850456 1.013584
 C 2.420274 -3.839567 0.532588
 H 2.986552 -3.702696 1.451359
 C 3.702570 -0.700797 -1.648334
 C 4.496512 -1.621978 -2.338888
 H 4.716668 -2.593170 -1.896918
 C 4.985236 -1.310748 -3.601102
 H 5.605863 -2.028597 -4.133873
 C 4.667313 -0.088557 -4.187710
 H 5.044467 0.151566 -5.180047
 C 3.855947 0.817853 -3.514756
 H 3.583963 1.764750 -3.974623
 C 3.374552 0.512371 -2.247543
 H 2.727293 1.211084 -1.725722
 Sn -0.184413 -1.258499 0.665829

H -0.501118 -2.164220 2.092920
H -0.562098 -0.932340 2.676575
F -2.829020 2.401932 0.475153
F -1.894593 4.753143 -0.390147
F 0.173315 4.841360 -2.155922
F -0.111695 4.040683 2.183478
F 1.225520 2.534429 -3.100141
F -0.347355 1.475279 1.814352
F 0.277059 0.161068 -2.273601
F 2.251432 5.340612 1.722406
F 4.150641 1.301432 0.341120
F 4.373664 3.875254 0.803295

$Y_{PhF}SnCl$

E = -2269.99998836
P 0.764757 0.763860 0.243915
C -0.202118 -0.626215 0.027531
C -1.631824 -0.556312 -0.191283
C -2.280662 0.489654 -0.863217
C -3.658213 0.557320 -1.008623
C -4.460442 -0.449172 -0.487538
C -3.862147 -1.513501 0.177664
C -2.486374 -1.541840 0.327585
C 1.549609 1.504971 -1.220080
C 2.525440 2.498813 -1.090353
H 2.814366 2.857061 -0.102291
C 3.139937 3.016982 -2.222130
H 3.897920 3.791353 -2.122425
C 2.793397 2.534398 -3.482398
H 3.281068 2.936260 -4.368557
C 1.839503 1.531715 -3.610198
H 1.583890 1.141476 -4.592868
C 1.217909 1.013163 -2.479764
H 0.488530 0.209630 -2.560694
C 2.181521 0.333090 1.301871
C 3.365266 -0.130334 0.718710
H 3.468325 -0.166405 -0.363843

C 4.407055 -0.575357 1.526893
 H 5.318950 -0.949131 1.066310
 C 4.281148 -0.543761 2.910056
 H 5.099828 -0.887442 3.539344
 C 3.107340 -0.072327 3.492633
 H 3.008567 -0.041809 4.575744
 C 2.057375 0.358883 2.693613
 H 1.141492 0.722366 3.153868
 C -0.219651 2.045864 1.073667
 C -0.174648 3.391110 0.707004
 H 0.468656 3.716812 -0.106080
 C -0.976972 4.315594 1.365170
 H -0.941020 5.363049 1.073133
 C -1.832364 3.903601 2.381494
 H -2.463146 4.630551 2.889376
 C -1.894180 2.560280 2.737337
 H -2.575426 2.231274 3.519279
 C -1.096290 1.631034 2.082063
 H -1.158406 0.573104 2.332820
 Sn 0.835080 -2.470798 -0.029277
 H -0.575058 -3.336799 -1.103572
 H 0.106322 -4.017757 -0.059711
 Cl 2.389313 -2.305695 -1.896954
 F -1.953674 -2.550171 1.025751
 F -4.612758 -2.473849 0.693896
 F -5.776037 -0.401846 -0.629994
 F -4.209770 1.567982 -1.662165
 F -1.552897 1.462251 -1.418899

$Y_{PhF}SnHMDS$

E = -2683.78422834
 P -2.082632 -0.338051 -0.140182
 C -0.423931 -0.013291 -0.333538
 C 0.099501 1.336799 -0.267319
 C -0.325501 2.286506 0.672483
 C 0.170229 3.577551 0.739401
 C 1.170607 3.972266 -0.139186

C 1.634701 3.063534 -1.082774
 C 1.103657 1.784334 -1.139182
 C -2.754141 -0.691676 1.522323
 C -4.127865 -0.792943 1.762420
 H -4.838220 -0.625932 0.953044
 C -4.589489 -1.096229 3.037303
 H -5.659182 -1.171251 3.222875
 C -3.684284 -1.298393 4.076384
 H -4.048428 -1.534796 5.074377
 C -2.318070 -1.188048 3.842881
 H -1.608709 -1.333717 4.654954
 C -1.854896 -0.880772 2.568593
 H -0.789662 -0.763431 2.375103
 C -2.448459 -1.828214 -1.128355
 C -3.280634 -2.860252 -0.687647
 H -3.742403 -2.812213 0.294569
 C -3.498516 -3.971248 -1.493353
 H -4.139109 -4.775571 -1.137459
 C -2.890564 -4.063496 -2.741062
 H -3.059643 -4.938705 -3.365447
 C -2.057357 -3.041909 -3.184296
 H -1.566092 -3.113741 -4.152412
 C -1.834514 -1.928977 -2.383541
 H -1.147746 -1.147680 -2.708424
 C -3.093480 1.038280 -0.775367
 C -3.697957 1.957013 0.085816
 H -3.611777 1.834015 1.162012
 C -4.388907 3.046341 -0.433029
 H -4.851161 3.761131 0.244630
 C -4.482916 3.225056 -1.808093
 H -5.024576 4.078694 -2.210889
 C -3.878673 2.314314 -2.669500
 H -3.946489 2.451458 -3.746674
 C -3.183344 1.227610 -2.156876
 H -2.709618 0.523168 -2.836026
 Sn 0.867696 -1.719285 -0.301073
 H 1.143996 -1.944667 -2.284033

H 0.788577 -2.973413 -1.468864
 Si 2.908322 -0.787238 1.962673
 Si 4.146411 -0.840956 -0.844434
 C 2.038882 -2.146452 2.941036
 H 0.967038 -2.241302 2.723257
 H 2.500007 -3.121548 2.736911
 H 2.135679 -1.944861 4.016805
 C 4.676669 -0.757926 2.596978
 H 5.324732 -0.047434 2.071877
 H 4.646791 -0.459894 3.653697
 H 5.140231 -1.749543 2.542311
 C 2.106367 0.853429 2.411812
 H 1.011803 0.794352 2.362484
 H 2.375537 1.159764 3.431257
 H 2.425434 1.643256 1.717626
 C 3.787055 -1.239530 -2.641355
 H 3.537479 -2.297845 -2.787775
 H 2.982966 -0.636126 -3.071082
 H 4.709455 -1.035975 -3.204192
 C 5.587554 -1.974791 -0.397561
 H 6.312261 -1.979229 -1.223081
 H 6.123809 -1.675383 0.507944
 H 5.235395 -3.005521 -0.258756
 C 4.715074 0.949399 -0.737434
 H 4.818074 1.289156 0.300792
 H 5.687986 1.083272 -1.228819
 H 3.999768 1.613429 -1.234364
 N 2.782657 -1.101499 0.238938
 F 1.562145 0.967577 -2.081595
 F 2.565711 3.437352 -1.949415
 F 1.657409 5.202522 -0.096806
 F -0.272196 4.419370 1.661790
 F -1.199197 1.916359 1.616304

$Y_{PhF}SnC_6F_5$

E = -2538.32491531

P -1.584799 0.727594 0.135091

C -0.042179 0.605239 -0.564724
 C 0.747488 1.807471 -0.856014
 C 1.825101 1.766278 -1.762201
 H 2.071391 0.821294 -2.244028
 C 2.569046 2.896920 -2.066729
 H 3.393551 2.814591 -2.773313
 C 2.268190 4.124943 -1.486164
 H 2.854086 5.010374 -1.723229
 C 1.207547 4.195067 -0.589937
 H 0.952894 5.142223 -0.116988
 C 0.472736 3.061603 -0.271481
 H -0.335557 3.159721 0.451325
 C -2.558164 2.038625 -0.676799
 C -2.271163 2.306686 -2.018565
 H -1.513187 1.715311 -2.528001
 C -2.941957 3.323138 -2.681317
 H -2.709461 3.531566 -3.723411
 C -3.902201 4.078236 -2.013371
 H -4.426424 4.876564 -2.535262
 C -4.183740 3.820205 -0.677425
 H -4.925152 4.415738 -0.148800
 C -3.508553 2.807011 -0.004480
 H -3.714908 2.636901 1.048086
 C -2.452403 -0.879426 -0.033741
 C -2.262498 -1.895178 0.907406
 C -2.878552 -3.133005 0.789985
 C -3.694498 -3.388915 -0.304960
 C -3.890996 -2.406729 -1.266837
 C -3.259650 -1.176638 -1.132238
 C -1.741848 1.050965 1.929315
 C -2.938044 0.867680 2.628919
 H -3.835198 0.534444 2.106727
 C -2.981861 1.090703 3.998675
 H -3.912653 0.943812 4.543038
 C -1.832117 1.491310 4.675350
 H -1.867893 1.663293 5.749353
 C -0.637016 1.654200 3.984536

H 0.266370 1.948408 4.514657
 C -0.586291 1.425660 2.613197
 H 0.354376 1.512702 2.071366
 Sn 0.902710 -1.283805 -0.521065
 H 0.740550 -2.449119 -1.778385
 H 1.377642 -1.406963 -2.429979
 C 3.015748 -0.964168 -0.106602
 C 4.760571 0.295349 1.024668
 C 5.359929 -1.459931 -0.512199
 C 5.731861 -0.454375 0.372985
 F -1.453270 -1.721956 1.939522
 F -2.672504 -4.071843 1.692343
 F -4.278601 -4.560118 -0.431629
 F -4.659749 -2.651444 -2.310249
 F -3.454721 -0.295488 -2.095197
 C 4.009577 -1.699584 -0.732616
 C 3.421002 0.022914 0.777318
 F 3.683093 -2.665715 -1.587205
 F 2.517816 0.752178 1.432799
 F 5.118528 1.245204 1.872688
 F 7.011161 -0.216959 0.600259
 F 6.289991 -2.172531 -1.126667

Y_{PhF}SnPy

E = -2057.46965553
 P -0.895369 0.748051 0.226111
 C 0.677723 0.632951 -0.401390
 C 1.495620 1.844742 -0.533702
 C 2.618040 1.883049 -1.386173
 H 2.885194 0.985869 -1.942428
 C 3.384652 3.028661 -1.540055
 H 4.242464 3.003519 -2.210546
 C 3.067590 4.198925 -0.856761
 H 3.669909 5.096574 -0.979352
 C 1.966352 4.191831 -0.008270
 H 1.694520 5.090489 0.543614
 C 1.206511 3.042131 0.158305

H 0.364061 3.083864 0.846909
 C -1.804095 2.162923 -0.487194
 C -1.438025 2.554685 -1.778039
 H -0.659982 2.000645 -2.299676
 C -2.054286 3.644556 -2.373709
 H -1.760046 3.948728 -3.375927
 C -3.038367 4.351381 -1.687920
 H -3.519961 5.207698 -2.156290
 C -3.398144 3.970623 -0.400863
 H -4.158803 4.527527 0.142503
 C -2.778113 2.882368 0.204783
 H -3.046548 2.614543 1.222585
 C -1.822084 -0.794499 -0.118386
 C -1.650446 -1.908040 0.708078
 C -2.306868 -3.107218 0.475893
 C -3.147358 -3.221751 -0.624464
 C -3.328531 -2.138307 -1.473823
 C -2.657555 -0.947251 -1.224160
 C -1.128990 0.901166 2.038874
 C -2.361935 0.678599 2.657558
 H -3.237367 0.423580 2.060133
 C -2.472353 0.760442 4.039739
 H -3.432977 0.582047 4.518991
 C -1.351848 1.059415 4.810388
 H -1.438996 1.121014 5.893407
 C -0.119569 1.261490 4.199204
 H 0.760318 1.477294 4.801808
 C -0.004461 1.172531 2.816026
 H 0.962300 1.293527 2.328264
 Sn 1.465127 -1.316001 -0.756997
 H 1.198635 -2.060649 -2.301483
 H 2.018067 -1.025819 -2.617499
 C 3.555113 -1.417798 -0.179388
 N 4.237619 -2.471188 -0.622271
 C 5.459256 -0.580362 1.010453
 C 5.514702 -2.590432 -0.275735
 C 6.174139 -1.673887 0.537694

H 5.935278 0.162294 1.649179
H 6.044003 -3.464175 -0.662150
H 7.221587 -1.819445 0.793210
F -0.818663 -1.863136 1.736140
F -2.116944 -4.141614 1.271235
F -3.771406 -4.355161 -0.861489
F -4.123289 -2.248613 -2.521285
F -2.842356 0.035645 -2.085808
C 4.124785 -0.446321 0.647315
H 3.534354 0.404755 0.983987

Y_{PhF}SnPyr

E = -2073.52863446
P -0.743125 0.796386 0.234903
C 0.646447 0.485781 -0.687773
C 1.691154 1.515168 -0.792833
C 2.710987 1.419735 -1.759596
H 2.724120 0.554870 -2.421072
C 3.692281 2.390311 -1.890776
H 4.458753 2.268765 -2.655016
C 3.704333 3.509529 -1.062993
H 4.475909 4.269886 -1.165182
C 2.712979 3.628594 -0.096175
H 2.700827 4.488031 0.572694
C 1.737210 2.650844 0.043337
H 0.999695 2.777341 0.833816
C -1.453169 2.429041 -0.170980
C -1.232857 2.903121 -1.467327
H -0.684694 2.280214 -2.171452
C -1.698059 4.155847 -1.837230
H -1.517015 4.521607 -2.845726
C -2.385107 4.945159 -0.919038
H -2.748250 5.928905 -1.210572
C -2.596724 4.481822 0.373777
H -3.121903 5.100784 1.098391
C -2.125828 3.228745 0.752784
H -2.268522 2.893759 1.775753

C -2.000506 -0.502203 -0.078007
 C -1.984583 -1.701595 0.639401
 C -2.905113 -2.713237 0.406023
 C -3.864882 -2.549111 -0.584136
 C -3.898632 -1.376214 -1.326661
 C -2.963204 -0.379059 -1.080496
 C -0.604381 0.756245 2.061134
 C -1.710366 0.747665 2.915194
 H -2.720616 0.791282 2.507754
 C -1.526724 0.655268 4.288664
 H -2.389007 0.643732 4.952567
 C -0.239479 0.564385 4.812550
 H -0.096954 0.489721 5.888990
 C 0.860169 0.547107 3.962238
 H 1.864610 0.451637 4.369684
 C 0.682773 0.631882 2.584916
 H 1.537665 0.565468 1.909030
 Sn 1.149324 -1.555358 -0.989249
 H 0.841611 -2.356092 -2.495547
 H 1.763970 -1.422765 -2.841900
 C 3.211655 -1.757768 -0.327050
 N 3.557003 -0.912051 0.644752
 N 4.007888 -2.681275 -0.863369
 C 4.810353 -0.966561 1.081250
 C 5.256860 -2.732901 -0.416686
 C 5.728835 -1.871667 0.567183
 H 5.089293 -0.263659 1.869179
 H 5.908021 -3.490164 -0.859567
 H 6.756239 -1.911164 0.920589
 F -1.062557 -1.935254 1.558788
 F -2.856729 -3.835226 1.097787
 F -4.739735 -3.503107 -0.819654
 F -4.805398 -1.221550 -2.272905
 F -3.022898 0.697099 -1.842609

$Y_{PhF}SnB^2$

E = -2216.50349980

P -1.678443 -0.803453 0.194482
 C -0.427393 0.237807 -0.307538
 C -0.522212 1.685436 -0.280319
 C 0.612235 2.485923 -0.046762
 C 0.574375 3.870427 -0.023090
 C -0.636749 4.537008 -0.171777
 C -1.789243 3.791461 -0.375794
 C -1.716244 2.407688 -0.424919
 C -2.942455 -1.331256 -1.024316
 C -2.554469 -2.238302 -2.017267
 H -1.564266 -2.692376 -1.982624
 C -3.422585 -2.566662 -3.050396
 H -3.108536 -3.275717 -3.813714
 C -4.686665 -1.988278 -3.108192
 H -5.367540 -2.244842 -3.917502
 C -5.075143 -1.076627 -2.132718
 H -6.059007 -0.613892 -2.178216
 C -4.208441 -0.744491 -1.098177
 H -4.514438 -0.014907 -0.352889
 C -0.910903 -2.363997 0.756027
 C 0.354255 -2.299474 1.349793
 C 0.949570 -3.449475 1.853212
 C 0.278892 -4.666370 1.790450
 C -0.993097 -4.729884 1.230338
 C -1.589312 -3.584084 0.716010
 C -2.585314 -0.221544 1.658328
 C -3.750569 -0.874812 2.068174
 H -4.154670 -1.694121 1.476013
 C -4.394571 -0.487252 3.235720
 H -5.302489 -0.999423 3.547689
 C -3.876995 0.550781 4.004419
 H -4.384696 0.857908 4.916703
 C -2.704252 1.186590 3.613073
 H -2.288605 1.988442 4.219777
 C -2.051195 0.797405 2.448574
 H -1.119546 1.275368 2.157569
 Sn 1.041420 -0.763608 -1.532719

H 0.902490 -0.308173 -3.224632
H 1.368255 0.769813 -2.641089
H 0.869214 -1.341607 1.414093
H 1.941368 -3.388006 2.296390
H 0.745508 -5.567640 2.183509
H -1.524065 -5.678764 1.187673
H -2.582477 -3.643933 0.275671
C 5.292372 -0.307081 -0.557842
C 4.751270 -0.491168 0.710464
C 6.647783 -0.138639 -0.757603
C 5.537880 -0.515100 1.844673
C 7.453519 -0.162201 0.382664
H 7.056224 0.005616 -1.754021
C 6.911086 -0.345990 1.654666
H 5.102093 -0.655425 2.830153
H 8.528234 -0.032441 0.275464
H 7.571303 -0.355910 2.519181
B 3.121309 -0.511663 -0.756607
O 3.397792 -0.631942 0.594625
O 4.283177 -0.327714 -1.477520
F 1.791796 1.903707 0.160636
F 1.682802 4.563654 0.190640
F -0.687362 5.860315 -0.125076
F -2.856398 1.743625 -0.642408
F -2.954795 4.403230 -0.529299

$Y_{PhF}SnB^1$

E = -2485.69725006
P 1.950077 1.244261 -0.137903
C 0.506537 0.356642 -0.213796
C 0.500344 -1.005049 -0.719083
C 1.463958 -1.962153 -0.366219
C 1.478471 -3.252407 -0.866514
C 0.473326 -3.667060 -1.727522
C -0.528536 -2.770810 -2.075562
C -0.494756 -1.469459 -1.597504
C 2.957634 1.227997 1.391453

C 4.246455 1.766161 1.453222
 H 4.702051 2.196352 0.561600
 C 4.954870 1.740130 2.648589
 H 5.959894 2.155432 2.692391
 C 4.381242 1.178423 3.786412
 H 4.938177 1.158273 4.721290
 C 3.102400 0.635550 3.726208
 H 2.656679 0.188059 4.612814
 C 2.394926 0.656438 2.529755
 H 1.405575 0.207856 2.452233
 C 1.539517 3.001848 -0.413015
 C 2.143198 4.054459 0.277586
 H 2.887611 3.854269 1.043162
 C 1.775262 5.367817 0.007909
 H 2.244524 6.181203 0.557772
 C 0.804818 5.641336 -0.949615
 H 0.516889 6.670789 -1.154477
 C 0.193253 4.596782 -1.635388
 H -0.579023 4.802198 -2.373854
 C 0.554130 3.282881 -1.367040
 H 0.049141 2.456957 -1.867752
 C 3.094996 0.724365 -1.458560
 C 4.193969 -0.097322 -1.199449
 H 4.419165 -0.399437 -0.180251
 C 4.984735 -0.553795 -2.248297
 H 5.835134 -1.199333 -2.038280
 C 4.686482 -0.194780 -3.557398
 H 5.307069 -0.554242 -4.376013
 C 3.588927 0.619277 -3.820773
 H 3.347952 0.899263 -4.844192
 C 2.794051 1.074002 -2.777459
 H 1.933389 1.703622 -2.990209
 Sn -1.223589 1.102775 0.816553
 N -4.197342 -0.380662 0.509807
 C -3.814875 -2.540439 0.955024
 C -4.750833 -1.656478 0.556331
 H -3.927559 -3.599068 1.154249

H -5.800349 -1.830278 0.350589
 B -2.812512 -0.480818 0.879963
 N -2.611243 -1.874451 1.184892
 C -1.451690 -2.556308 1.599339
 C -1.187823 -3.847920 1.138046
 C -0.553558 -1.959313 2.488845
 C -0.043832 -4.520775 1.548188
 H -1.863838 -4.311296 0.422949
 C 0.599448 -2.629523 2.875782
 H -0.781724 -0.977530 2.899697
 C 0.863863 -3.911869 2.407046
 H 0.158642 -5.515738 1.156221
 H 1.296726 -2.146259 3.557345
 H 1.772083 -4.430269 2.704632
 C -4.920154 0.743888 0.075606
 C -4.727601 1.979518 0.695252
 C -5.834166 0.642348 -0.975058
 C -5.426472 3.097484 0.259909
 H -4.037209 2.053400 1.534325
 C -6.541765 1.761367 -1.394704
 H -5.967212 -0.312478 -1.478694
 C -6.340106 2.994479 -0.783507
 H -5.263102 4.054690 0.751481
 H -7.247660 1.669415 -2.218056
 H -6.892374 3.869883 -1.118593
 H -2.169126 1.952272 -0.683932
 H -1.741066 2.691484 0.337370
 F -1.451635 -0.643857 -2.008338
 F 2.401689 -1.644498 0.532795
 F 2.393908 -4.120371 -0.455503
 F -1.502165 -3.159134 -2.888371
 F 0.438938 -4.919765 -2.164120

V^{Sn}

E = -1022.56486991
 C 1.597128 2.505454 0.195586
 C -0.514914 1.343281 -0.064459

C -1.110082 2.575361 -0.352906
 C -0.374707 3.755445 -0.354333
 C 0.982913 3.724753 -0.064808
 H 2.661701 2.494979 0.428187
 H -2.167919 2.604741 -0.599021
 H -0.871682 4.696474 -0.581678
 H 1.567719 4.642228 -0.042209
 N -1.213988 0.138547 -0.052605
 C -2.602778 0.011307 -0.053365
 C -3.444762 0.828233 0.717638
 C -3.186232 -1.023434 -0.798128
 C -4.815934 0.615965 0.726896
 H -3.008554 1.617880 1.324428
 C -4.558070 -1.239322 -0.771208
 H -2.543388 -1.648996 -1.418928
 C -5.384841 -0.416767 -0.014478
 H -5.448839 1.259253 1.336364
 H -4.983691 -2.050650 -1.359369
 H -6.460437 -0.578988 0.001274
 C 0.897024 1.289372 0.173705
 C 1.537454 -0.009060 0.341494
 P 3.158895 -0.325957 -0.025262
 C 3.694851 0.333317 -1.633932
 H 3.473939 1.405951 -1.660480
 H 4.763619 0.170245 -1.811725
 H 3.101309 -0.158200 -2.412628
 C 4.411654 0.273441 1.156924
 H 5.420564 -0.024511 0.848068
 H 4.365220 1.364904 1.226092
 H 4.183319 -0.143356 2.143410
 C 3.411271 -2.115077 -0.109106
 H 4.454105 -2.351480 -0.344854
 H 3.150178 -2.565689 0.855004
 H 2.761201 -2.519623 -0.897541
 H -0.164552 -2.962664 -0.559411
 H 0.393064 -2.218698 -1.751433
 Sn 0.064555 -1.476558 0.229010

Vl^{Sn}

E = -1571.77998350

C 1.327305 2.857317 0.341540

C 0.682275 1.639576 0.539645

C -0.563669 1.342055 -0.075539

C -1.084080 2.350794 -0.914197

C -0.434380 3.557505 -1.108716

C 0.779244 3.829900 -0.480410

H 2.269839 3.015794 0.862221

H -2.020803 2.157093 -1.430249

H -0.882673 4.295104 -1.772441

H 1.284130 4.781948 -0.624592

N -1.231352 0.138067 0.059030

S 1.549507 0.407799 1.489901

O 2.817238 0.990696 1.926271

O 0.586296 -0.095599 2.498242

C 1.732749 -0.900939 0.393992

C -2.620109 0.069125 -0.135747

C -3.489554 0.970538 0.496387

C -3.168375 -0.950513 -0.920412

C -4.861360 0.849232 0.340257

H -3.069569 1.758613 1.118067

C -4.547248 -1.077236 -1.057754

H -2.499701 -1.631765 -1.446844

C -5.401046 -0.177584 -0.433101

H -5.520379 1.555406 0.842545

H -4.952151 -1.880124 -1.671311

H -6.478982 -0.273378 -0.544107

P 2.609536 -0.656120 -1.061551

C 4.092704 0.325398 -0.745280

H 4.740032 0.319139 -1.628769

H 3.791324 1.350985 -0.509336

H 4.610702 -0.081596 0.127770

C 1.736078 0.191918 -2.411146

H 1.555299 1.235429 -2.127953

H 2.316835 0.155913 -3.340050

H 0.770972 -0.307730 -2.558818

C 3.120927 -2.249634 -1.735515
H 3.717798 -2.776629 -0.984778
H 2.213905 -2.827139 -1.949687
H 3.697884 -2.113305 -2.656845
Sn -0.219329 -1.677751 0.515367
H -0.814224 -3.046753 -0.308321
H -0.116522 -2.374419 -1.453333

VII^{Sn}

E = -2333.86304916
C 0.331955 1.901499 0.501286
C -0.487538 1.848938 -0.633145
C -0.887445 3.037921 -1.244817
C -0.511896 4.271254 -0.731430
C 0.273327 4.326181 0.412155
C 0.688110 3.148440 1.018254
H -1.519269 2.966340 -2.126123
H -0.838101 5.184478 -1.225238
H 0.568302 5.283970 0.836397
H 1.318037 3.168255 1.903553
S 0.965383 0.503425 1.508608
S -1.079474 0.351525 -1.494346
O 2.134517 1.118504 2.174310
O -0.178805 0.096306 2.333575
O 0.098322 -0.137381 -2.249361
O -2.246111 0.856052 -2.241766
C 1.529201 -0.746052 0.521888
C -1.529277 -0.829084 -0.388153
P -2.952332 -0.542029 0.518703
P 2.998346 -0.409163 -0.296541
C -3.002764 -1.605714 1.967444
H -3.910978 -1.397575 2.543606
H -2.986155 -2.657404 1.666281
H -2.104246 -1.383702 2.554761
C -3.094643 1.151446 1.141259
H -3.111553 1.839284 0.289192
H -4.015789 1.262783 1.724032

H -2.214963 1.347860 1.764478
 C -4.456060 -0.821086 -0.452725
 H -4.497603 -1.875010 -0.747108
 H -5.362521 -0.547139 0.099128
 H -4.353072 -0.209831 -1.356714
 C 3.197582 -1.582213 -1.654076
 H 4.148140 -1.398729 -2.166580
 H 3.179428 -2.608880 -1.273534
 H 2.362220 -1.431751 -2.349193
 C 3.074987 1.223397 -1.075557
 H 3.004943 1.989582 -0.296828
 H 4.013676 1.340315 -1.628602
 H 2.215148 1.302332 -1.751489
 C 4.462758 -0.526794 0.759850
 H 5.376861 -0.245635 0.224705
 H 4.283860 0.146104 1.605419
 H 4.543594 -1.551612 1.136875
 H -0.049483 -3.695112 0.565465
 H -0.412421 -2.851875 1.629597
 Sn 0.110081 -2.152900 -0.163403

VIII^{Sn}

Nicht gefunden.

IX^{Sn}

Nicht gefunden.

3.5.3.2 Reaktionspfad B

Y₂Sn

E = -3797.71955061
 C 3.582518 2.937439 -0.035086
 H 3.004750 3.242717 0.833601
 C 3.061835 1.968040 -0.878045
 C -4.284027 -1.485434 -0.966229
 O 0.578144 1.569133 -1.651957
 C -4.595484 -0.943368 -2.210227

H -3.808339 -0.530236 -2.841286
 C 2.583776 -2.984479 2.562577
 H 3.594093 -2.640116 2.780184
 C 4.836255 3.472185 -0.310475
 H 5.253791 4.226384 0.355664
 C -0.828129 5.035808 0.370083
 H -0.307643 5.744132 1.011523
 C -1.140342 3.773039 0.855760
 H -0.829562 3.488038 1.856193
 C 3.527116 -2.288980 -2.260899
 H 2.846578 -1.529440 -2.640742
 C 3.640034 -2.460768 -0.883299
 C 5.222035 -0.272268 0.732447
 H 5.562806 -0.796111 -0.158098
 C 6.090108 0.567104 1.421376
 H 7.112460 0.691454 1.069525
 C -1.156368 5.384579 -0.935323
 H -0.901230 6.372085 -1.315696
 C -1.911186 0.051831 -0.603475
 Sn -0.112784 -0.568806 -2.301125
 O -2.598899 -2.001395 0.963463
 S -2.583071 -1.496074 -0.422047
 P -2.234960 1.206788 0.635057
 C -5.918526 -0.919584 -2.620277
 H -6.168973 -0.492291 -3.590619
 C -4.502953 0.447561 2.100980
 H -3.807567 -0.058886 2.765162
 C -0.546997 -0.107856 2.377014
 H -0.261127 -0.660941 1.488608
 C 4.337216 1.105477 2.986795
 H 3.985829 1.651170 3.860156
 C 3.462661 0.271865 2.302679
 H 2.426145 0.185257 2.622512
 C -2.106819 3.198933 -1.282357
 H -2.549493 2.466898 -1.954534
 C 1.918632 -2.534311 1.418574
 C 3.766240 1.546390 -2.000335

H 3.335680 0.788378 -2.651602
 C 4.495019 -3.443037 -0.375832
 H 4.579318 -3.592162 0.699455
 C 3.909452 -0.432415 1.179915
 C -1.295018 1.379599 4.610849
 H -1.586982 1.961120 5.483144
 C -1.468207 0.924141 2.250153
 C -1.848702 1.668321 3.369819
 H -2.590963 2.460458 3.276659
 C -1.800393 2.856288 0.037303
 C -1.788363 4.462610 -1.761745
 H -2.018946 4.717576 -2.793896
 C 6.950041 3.590311 -1.676058
 H 7.143863 3.699031 -2.749179
 H 7.717429 2.912393 -1.276055
 H 7.096049 4.565826 -1.200135
 C -0.386154 0.332097 4.738435
 H 0.029453 0.091681 5.715548
 C -6.938859 -1.432242 -1.809752
 C 5.651172 1.250004 2.550658
 H 6.333078 1.906850 3.087654
 C -6.293474 1.640341 0.335405
 H -6.990299 2.096496 -0.364997
 C 1.584539 -0.434130 -0.606698
 P 2.684940 -1.383180 0.235217
 O 1.090242 1.814658 0.797794
 S 1.489735 1.209828 -0.485532
 O -1.855048 -2.314552 -1.440876
 C 5.575606 3.051202 -1.415844
 C 5.015034 2.086982 -2.262034
 H 5.570390 1.755466 -3.138663
 C 4.264946 -3.089732 -3.127445
 H 4.165308 -2.956716 -4.202849
 C 5.122831 -4.057615 -2.619199
 H 5.701223 -4.682986 -3.296712
 C 5.237898 -4.233647 -1.242006
 H 5.905090 -4.995054 -0.842825

C -4.926928 1.777366 0.132536
 H -4.563970 2.340220 -0.724604
 C -0.018909 -0.415938 3.624665
 H 0.673820 -1.248997 3.723854
 C -4.021495 1.193767 1.022026
 C -6.768676 0.925252 1.430888
 H -7.840446 0.822707 1.590644
 C -6.591939 -1.983962 -0.577374
 H -7.371849 -2.391008 0.065141
 C -5.872569 0.329001 2.309224
 H -6.238424 -0.247973 3.156432
 C 0.632199 -4.255313 3.187826
 H 0.124919 -4.915918 3.888601
 C 1.940313 -3.849476 3.440933
 H 2.456397 -4.194728 4.334913
 C -5.269241 -2.013192 -0.148200
 H -4.987523 -2.426838 0.817034
 C -8.370526 -1.357425 -2.248036
 H -8.478405 -1.598881 -3.311869
 H -8.769981 -0.343448 -2.105828
 H -9.002977 -2.043498 -1.674851
 C -0.032722 -3.805908 2.051196
 H -1.066087 -4.080626 1.854257
 C 0.613884 -2.956763 1.161874
 H 0.078814 -2.587268 0.288223
 H -2.059571 0.488024 -1.888971
 H -1.859702 0.645013 -2.959063

YSnCl

E = -2361.74633085
 C 2.470772 -1.209298 -0.677272
 C 2.729866 -1.739661 0.582743
 H 1.947647 -2.275438 1.119325
 C -2.473625 1.699634 3.637945
 H -3.335458 2.286701 3.947933
 C -2.111746 1.669603 2.297442
 H -2.709242 2.205336 1.565564

C -1.755324 0.965718 4.575611
 H -2.047716 0.987492 5.623636
 C -0.280368 -0.877056 -0.202931
 Sn -1.989929 -2.517944 -0.340368
 O 0.830959 -0.542301 -2.598444
 S 0.838566 -1.373167 -1.383531
 P -0.476031 0.787001 0.165414
 C 3.987522 -1.572644 1.141309
 H 4.194592 -1.981631 2.129479
 C 1.417830 2.238732 -1.248539
 H 0.733757 2.123255 -2.085508
 C -2.154283 1.054568 -2.016576
 H -1.897608 0.014778 -2.205376
 C -0.312123 0.150017 2.831180
 H 0.514319 -0.480779 2.505350
 C -2.678539 3.756788 -1.581108
 H -2.875041 4.814524 -1.418147
 C -1.609290 1.702451 -0.911048
 C -1.853061 3.063539 -0.706508
 H -1.386068 3.584021 0.128856
 C -1.016593 0.908050 1.890780
 C -0.677294 0.186129 4.170813
 H -0.126056 -0.407661 4.896865
 C -3.243857 3.099803 -2.671443
 H -3.888307 3.645375 -3.358096
 C 4.998353 -0.889677 0.454416
 C 3.201327 2.476787 0.876531
 H 3.896995 2.565908 1.708545
 O 0.571289 -2.823010 -1.524314
 C 1.987288 1.827842 1.063773
 H 1.742053 1.424366 2.042214
 C -2.972803 1.754943 -2.894935
 H -3.394705 1.247604 -3.759693
 C 1.086441 1.711140 0.003164
 C 3.522822 3.012787 -0.366156
 H 4.473046 3.523956 -0.509027
 C 4.717011 -0.395345 -0.819452

H 5.493823 0.131246 -1.372484
 C 2.631664 2.890744 -1.426367
 H 2.882076 3.301117 -2.402474
 C 3.458321 -0.547804 -1.389594
 H 3.219450 -0.146522 -2.371621
 C 6.338257 -0.666632 1.088198
 H 6.614883 -1.495145 1.749520
 H 6.332002 0.247986 1.698085
 H 7.124949 -0.550167 0.335137
 H -0.408546 -1.884954 0.961440
 H -0.795795 -2.644824 1.430486
 Cl -3.573799 -0.875187 0.651993

YSnHMDS

Nicht gefunden.

YSnB¹

Nicht gefunden.

(Y_{Ph})₂Sn

E = -2620.52892475
 P 3.115203 0.215335 0.028417
 P -3.173986 0.277747 0.087268
 C 1.648535 -0.027753 -0.778797
 C 1.291461 -1.331665 -1.321174
 C 1.783466 -2.559793 -0.834712
 H 2.424610 -2.561636 0.044608
 C 1.434012 -3.768701 -1.416484
 H 1.834783 -4.692416 -1.001581
 C 0.550599 -3.815729 -2.491889
 H 0.268132 -4.767349 -2.937368
 C 0.038985 -2.620663 -2.987830
 H -0.642831 -2.630458 -3.838103
 C 0.416389 -1.408552 -2.426244
 H 0.069041 -0.478014 -2.881482
 C 3.309543 -0.389184 1.754344

C 3.972021 -1.583102 2.050550
 H 4.484770 -2.130783 1.261920
 C 3.982550 -2.080745 3.349244
 H 4.505104 -3.010659 3.565233
 C 3.326428 -1.395639 4.365610
 H 3.335823 -1.784882 5.381931
 C 2.646124 -0.215849 4.075958
 H 2.116539 0.317420 4.863028
 C 2.632660 0.281017 2.779252
 H 2.076785 1.190987 2.554180
 C 3.474198 2.003218 0.116605
 C 4.137387 2.596598 1.192650
 H 4.406563 2.004803 2.064071
 C 4.459053 3.949135 1.157158
 H 4.969366 4.402859 2.004536
 C 4.131263 4.718275 0.046158
 H 4.380991 5.777415 0.023300
 C 3.495393 4.127719 -1.040713
 H 3.249866 4.719681 -1.920065
 C 3.177439 2.775772 -1.010964
 H 2.705003 2.298433 -1.867816
 C 4.579896 -0.457691 -0.837395
 C 4.454139 -0.944056 -2.138474
 H 3.471041 -0.988015 -2.600781
 C 5.583334 -1.365773 -2.832899
 H 5.478504 -1.755360 -3.843565
 C 6.839507 -1.288455 -2.241566
 H 7.720860 -1.616954 -2.789472
 C 6.971351 -0.783354 -0.951036
 H 7.954350 -0.709294 -0.489825
 C 5.845503 -0.368967 -0.251344
 H 5.950005 0.029669 0.757506
 C -1.515648 -0.010266 0.336786
 C -1.095007 -1.354686 0.770586
 C -0.144435 -1.487173 1.797571
 H 0.259693 -0.587447 2.250802
 C 0.273547 -2.728133 2.253836

H 1.011174 -2.780504 3.053408
 C -0.253873 -3.894535 1.704835
 H 0.068346 -4.870472 2.063621
 C -1.190604 -3.791859 0.682945
 H -1.598280 -4.690991 0.222905
 C -1.591072 -2.545962 0.214804
 H -2.285310 -2.493177 -0.622517
 C -4.216469 -0.355632 1.445522
 C -4.511415 0.440918 2.553940
 H -4.209926 1.485594 2.570576
 C -5.199224 -0.091525 3.637445
 H -5.431304 0.541044 4.492075
 C -5.589207 -1.426967 3.629773
 H -6.123269 -1.844080 4.481492
 C -5.297488 -2.226656 2.530596
 H -5.598150 -3.272391 2.519008
 C -4.618782 -1.695029 1.440446
 H -4.403979 -2.324067 0.580053
 C -3.456343 2.072829 -0.028099
 C -4.263048 2.644677 -1.013341
 H -4.755267 2.015109 -1.749970
 C -4.429587 4.024531 -1.068092
 H -5.056428 4.459665 -1.843982
 C -3.794338 4.844283 -0.142888
 H -3.924449 5.923825 -0.190653
 C -2.985501 4.281990 0.839339
 H -2.476802 4.917692 1.561120
 C -2.813099 2.905012 0.896124
 H -2.166701 2.472846 1.656879
 C -4.005914 -0.400660 -1.405478
 C -5.394805 -0.524773 -1.502534
 H -6.026796 -0.240601 -0.661955
 C -5.968618 -1.016683 -2.668832
 H -7.050207 -1.115547 -2.741092
 C -5.160997 -1.388865 -3.741100
 H -5.613162 -1.778739 -4.651255
 C -3.778627 -1.271933 -3.645421

H -3.144277 -1.572460 -4.477310
 C -3.203172 -0.779769 -2.478838
 H -2.121860 -0.710451 -2.371553
 Sn 0.034234 1.464352 -0.704607
 H -0.752349 0.994923 1.283226
 H -0.055012 1.625744 1.524387

Y_{Ph}SnCl

Nicht gefunden.

Y_{Ph}SnHMDS

E = -2186.92670619
 P -1.954194 0.132567 -0.006917
 C -0.351144 -0.201840 -0.453767
 C 0.061788 -1.609217 -0.214317
 C -0.189698 -2.610622 -1.167454
 H -0.655599 -2.331216 -2.111392
 C 0.124596 -3.943599 -0.922626
 H -0.091981 -4.696813 -1.678616
 C 0.715146 -4.313584 0.281485
 H 0.963367 -5.355417 0.475079
 C 0.992571 -3.335522 1.231698
 H 1.458271 -3.610510 2.177203
 C 0.673570 -2.006884 0.983329
 H 0.871128 -1.251401 1.738857
 C -3.231030 -0.508603 -1.156415
 C -4.515700 -0.856046 -0.731862
 H -4.776826 -0.786727 0.322586
 C -5.459203 -1.295425 -1.653715
 H -6.456923 -1.571068 -1.317395
 C -5.127707 -1.386486 -3.002306
 H -5.866818 -1.734631 -3.721470
 C -3.851004 -1.036996 -3.430750
 H -3.589043 -1.108532 -4.484546
 C -2.904607 -0.601568 -2.510197
 H -1.899677 -0.334288 -2.835321

C -2.269452 1.918161 0.081363
 C -3.299004 2.532154 -0.632034
 H -3.952701 1.937852 -1.266204
 C -3.486798 3.907796 -0.538431
 H -4.287869 4.380923 -1.102710
 C -2.655230 4.675316 0.268628
 H -2.805273 5.750984 0.338049
 C -1.628771 4.067874 0.986110
 H -0.973731 4.663525 1.618594
 C -1.434337 2.696628 0.889938
 H -0.631690 2.217573 1.448019
 C -2.458431 -0.587337 1.594487
 C -2.510808 -1.984242 1.687142
 H -2.331828 -2.597296 0.804500
 C -2.783772 -2.594063 2.904158
 H -2.814963 -3.679991 2.965344
 C -3.010670 -1.820828 4.038786
 H -3.224064 -2.300690 4.992049
 C -2.967957 -0.433948 3.951357
 H -3.154286 0.175454 4.833582
 C -2.692364 0.182908 2.735263
 H -2.670957 1.268583 2.678189
 Sn 1.243019 1.453393 -0.939484
 N 2.963724 0.401485 -0.212447
 Si 3.362104 0.687245 1.457776
 Si 4.005956 -0.546214 -1.247504
 C 1.848273 1.413915 2.337041
 H 1.633500 2.432132 1.977389
 H 0.942197 0.804727 2.219425
 H 2.052444 1.503480 3.412367
 C 3.909628 -0.866579 2.366921
 H 4.094497 -0.644984 3.426629
 H 3.159466 -1.662398 2.303811
 H 4.842583 -1.261835 1.946028
 C 4.711702 1.984678 1.674122
 H 4.858691 2.224814 2.736145
 H 5.673854 1.650007 1.270214

H 4.437830 2.911792 1.153085
 C 5.827074 -0.239074 -0.857507
 H 6.451661 -0.841418 -1.530955
 H 6.090093 0.815729 -1.008576
 H 6.100307 -0.509882 0.169830
 C 3.778737 -0.057708 -3.052658
 H 4.549141 -0.552488 -3.659648
 H 2.801800 -0.355997 -3.451006
 H 3.891415 1.025712 -3.197625
 C 3.674839 -2.384135 -1.077930
 H 2.635529 -2.618325 -1.338178
 H 4.335614 -2.969994 -1.731324
 H 3.833426 -2.717703 -0.044693
 H 0.733934 0.138203 -2.627951
 H 0.095107 -0.081608 -1.937223

$Y_{Ph}SnB^1$

E = -1988.81751873
 P 1.898695 0.726124 0.155615
 C 0.297287 0.192871 0.382778
 C -0.002613 -0.727374 1.483608
 C -1.263605 -0.699864 2.114791
 H -2.012819 0.002606 1.754376
 C -1.565343 -1.525080 3.188046
 H -2.556339 -1.470297 3.636473
 C -0.611697 -2.402485 3.703420
 H -0.845541 -3.040554 4.553427
 C 0.646618 -2.439306 3.111760
 H 1.411801 -3.113148 3.495304
 C 0.938087 -1.631965 2.019493
 H 1.926452 -1.705446 1.566666
 C 1.904386 2.354741 -0.668238
 C 1.674458 3.497609 0.100630
 H 1.571996 3.413738 1.180569
 C 1.576543 4.742425 -0.507164
 H 1.398965 5.627300 0.100556
 C 1.703982 4.855674 -1.888160

H 1.626330 5.831479 -2.363998
 C 1.925689 3.721058 -2.660007
 H 2.015325 3.802974 -3.741306
 C 2.023088 2.473050 -2.054596
 H 2.179869 1.586875 -2.665674
 C 2.989345 -0.301423 -0.893251
 C 4.197151 0.165445 -1.421858
 H 4.520925 1.186109 -1.219797
 C 4.976269 -0.663590 -2.218472
 H 5.915454 -0.297304 -2.628806
 C 4.549317 -1.959630 -2.497329
 H 5.158755 -2.608383 -3.123855
 C 3.341709 -2.422059 -1.986927
 H 3.000810 -3.429554 -2.211369
 C 2.557206 -1.594695 -1.189094
 H 1.599947 -1.943292 -0.795966
 C 2.772672 0.958524 1.741278
 C 2.007439 1.369263 2.838351
 H 0.933870 1.504518 2.718842
 C 2.609138 1.572533 4.072713
 H 2.004606 1.885373 4.921575
 C 3.975934 1.360495 4.226551
 H 4.445934 1.514803 5.196052
 C 4.738204 0.939737 3.143013
 H 5.805306 0.761885 3.261479
 C 4.140294 0.736022 1.903619
 H 4.743348 0.388117 1.069016
 Sn -0.927666 0.361545 -1.651980
 N -2.608789 -2.187944 -0.381085
 C -4.445512 -1.468777 0.660856
 C -3.662690 -2.548860 0.447115
 H -5.384336 -1.412372 1.199440
 H -3.805132 -3.569204 0.784768
 B -2.696953 -0.780824 -0.671567
 N -3.917599 -0.372380 -0.016913
 C -4.434875 0.926524 0.109383
 C -4.995437 1.363056 1.312194

C -4.377586 1.809442 -0.972312
 C -5.488543 2.657410 1.425997
 H -5.020243 0.691095 2.167309
 C -4.858623 3.104767 -0.846826
 H -3.959971 1.462351 -1.915234
 C -5.420551 3.536308 0.351044
 H -5.918261 2.983874 2.371353
 H -4.803021 3.780197 -1.698463
 H -5.802756 4.550527 0.445059
 C -1.539018 -3.039161 -0.698806
 C -1.059751 -3.095029 -2.011352
 C -0.938925 -3.826090 0.285088
 C -0.000388 -3.935753 -2.333902
 H -1.556113 -2.507164 -2.782072
 C 0.113905 -4.668450 -0.046138
 H -1.279510 -3.737832 1.314644
 C 0.583294 -4.733733 -1.355078
 H 0.356732 -3.977423 -3.361318
 H 0.580628 -5.268726 0.732482
 H 1.402250 -5.404074 -1.609521
 H -0.716777 1.456338 0.159536
 H -1.327259 1.990126 -0.336236

V^{Sn}

E = -1022.62302873
 C 1.613134 2.517621 -0.071080
 C -0.494192 1.347089 -0.257819
 C -1.121032 2.582211 -0.448851
 C -0.400994 3.773059 -0.415476
 C 0.968870 3.745595 -0.200389
 H 2.694552 2.514131 0.064829
 H -2.194656 2.609453 -0.616004
 H -0.920935 4.719013 -0.554868
 H 1.543920 4.668305 -0.152886
 N -1.186045 0.137469 -0.205786
 C -2.571436 0.063235 -0.037879
 C -3.261668 0.834490 0.913618

C -3.305545 -0.877983 -0.774375
 C -4.623635 0.664813 1.109961
 H -2.707971 1.558048 1.507806
 C -4.667927 -1.055297 -0.559908
 H -2.791104 -1.460499 -1.538137
 C -5.339109 -0.281763 0.378271
 H -5.132911 1.271118 1.857712
 H -5.209355 -1.795891 -1.146322
 H -6.407102 -0.411568 0.540027
 C 0.926963 1.298843 -0.137662
 C 1.555522 -0.024887 -0.139685
 P 3.199708 -0.286360 0.185941
 C 4.367962 0.418998 -1.027402
 H 4.237410 1.503455 -1.087536
 H 5.406202 0.191400 -0.759399
 H 4.137858 -0.006410 -2.010222
 C 3.838463 0.279258 1.798248
 H 4.911960 0.083291 1.904060
 H 3.651877 1.354202 1.895817
 H 3.286008 -0.235938 2.591085
 C 3.523908 -2.067883 0.123191
 H 4.598633 -2.270227 0.181807
 H 3.015792 -2.568721 0.953976
 H 3.134096 -2.463973 -0.822740
 Sn -0.061012 -1.660627 -0.043711
 H 0.793891 -1.443937 -2.037498
 H 1.253405 -0.755208 -1.451141

V^{Sn}

Nicht gefunden.

VII^{Sn}

E = -2333.91204800
 C 0.315657 1.979858 0.347385
 C -0.516326 1.838886 -0.768326
 C -0.914199 2.972360 -1.477266

C -0.522460 4.241697 -1.075882
 C 0.278480 4.386875 0.048776
 C 0.692594 3.262541 0.749904
 H -1.556820 2.826200 -2.341450
 H -0.848107 5.112851 -1.640960
 H 0.586155 5.374767 0.385942
 H 1.333019 3.353928 1.622969
 S 0.943363 0.677753 1.472462
 S -1.137252 0.273526 -1.451125
 O 2.111448 1.348087 2.088311
 O -0.177938 0.340499 2.359258
 O 0.041246 -0.327817 -2.149296
 O -2.275339 0.708849 -2.279134
 C -1.535315 -0.781741 -0.233179
 P -2.906011 -0.487001 0.726207
 P 3.031917 -0.422227 -0.127286
 C -2.807508 -1.507653 2.206312
 H -3.677856 -1.343580 2.850452
 H -2.756606 -2.562701 1.916543
 H -1.879473 -1.227114 2.718001
 C -3.077659 1.232861 1.265770
 H -3.146913 1.868458 0.375434
 H -3.979313 1.356395 1.875967
 H -2.181665 1.492253 1.839225
 C -4.463683 -0.857837 -0.128599
 H -4.492777 -1.925971 -0.368484
 H -5.345322 -0.580572 0.460751
 H -4.435881 -0.294111 -1.068802
 C 3.319614 -1.708897 -1.361111
 H 4.299752 -1.563507 -1.828629
 H 3.275402 -2.700795 -0.899881
 H 2.529222 -1.625840 -2.117538
 C 3.117597 1.125890 -1.062211
 H 3.035451 1.965500 -0.365252
 H 4.061647 1.188160 -1.614984
 H 2.265487 1.133580 -1.753207
 C 4.446660 -0.431562 1.001423

H 5.383706 -0.215118 0.475918
H 4.241458 0.327380 1.763189
H 4.506130 -1.413017 1.483915
C 1.501808 -0.689415 0.625260
H 0.995769 -1.723013 1.487118
Sn 0.042190 -2.297561 -0.345223
H 0.284765 -2.468279 1.697067

VIII^{Sn}

E = -1541.89807114
C -0.757062 3.382019 -0.164073
C -0.215438 2.115497 -0.326014
C 0.993466 1.664837 0.218091
C 1.704150 2.607247 0.975607
C 1.205611 3.891646 1.142188
C -0.014886 4.288145 0.579380
H -1.709364 3.651582 -0.616704
H 2.661887 2.337206 1.417703
H 1.780544 4.615805 1.717516
H -0.375570 5.304678 0.720264
B 1.262979 0.155149 -0.188668
S -0.990954 0.735745 -1.071384
O -1.834041 1.001255 -2.242072
O 0.329132 -0.033720 -1.415700
C 2.705428 -0.407319 -0.471357
C 3.698408 -0.404304 0.520675
C 3.057431 -0.925558 -1.724930
C 4.980975 -0.877096 0.272473
H 3.457040 -0.033077 1.518607
C 4.336692 -1.410211 -1.978270
H 2.308668 -0.941124 -2.515650
C 5.307135 -1.385397 -0.982259
H 5.729612 -0.857157 1.063483
H 4.579820 -1.806640 -2.963478
H 6.309099 -1.762971 -1.179131
C -1.749042 -0.138731 0.159038
H -1.360421 0.327546 1.508121

P -3.270382 -0.810558 -0.252643
 C -4.538001 0.413542 -0.672815
 H -4.676248 1.083218 0.182449
 H -4.169664 0.990502 -1.527099
 H -5.488184 -0.070538 -0.924859
 C -3.882824 -1.724904 1.176850
 H -4.858823 -2.170114 0.954699
 H -3.158891 -2.505495 1.434761
 H -3.973255 -1.039903 2.026539
 C -3.216409 -1.962370 -1.649622
 H -4.204994 -2.378271 -1.874383
 H -2.838440 -1.402540 -2.512544
 H -2.515351 -2.770026 -1.413694
 H -0.791210 0.332275 2.341919
 Sn 0.044706 -1.275936 1.386580

IX^{Sn}

E = -992.668930301
 C 1.645438 2.536064 -0.055488
 C -0.493476 1.359603 -0.118661
 C -1.117775 2.626159 -0.212928
 C -0.408807 3.807689 -0.204388
 C 0.989008 3.746403 -0.105089
 H 2.732535 2.546679 0.004862
 H -2.203200 2.657228 -0.293879
 H -0.915995 4.767888 -0.269872
 H 1.570449 4.667829 -0.077951
 B -1.310209 0.069470 -0.076886
 C -2.866577 -0.005282 -0.049893
 C -3.628411 0.769821 0.842577
 C -3.571090 -0.886841 -0.887447
 C -5.014614 0.672683 0.893501
 H -3.118671 1.453184 1.521171
 C -4.957589 -0.963431 -0.866499
 H -3.013953 -1.522326 -1.576730
 C -5.686282 -0.186411 0.030447
 H -5.574772 1.277046 1.605629

H -5.474317 -1.643196 -1.542420
H -6.772283 -0.256725 0.060644
C 0.945766 1.297871 -0.083249
C 1.593652 0.015766 -0.117408
P 3.283526 -0.190279 0.001752
C 4.297332 0.567974 -1.316287
H 4.129383 1.647824 -1.357157
H 5.363654 0.371129 -1.155509
H 3.985452 0.137935 -2.274230
C 4.052815 0.379187 1.554812
H 5.134162 0.199543 1.558655
H 3.859136 1.448240 1.689706
H 3.585753 -0.160614 2.385397
C 3.700567 -1.947463 -0.103448
H 4.788483 -2.076946 -0.112317
H 3.265971 -2.481041 0.747574
H 3.272834 -2.364977 -1.021678
Sn 0.085075 -1.774994 0.171270
H 1.057339 -0.776817 -1.429861
H 0.492688 -1.374132 -1.870703

3.5.3.3 Reaktionspfad C

VIII^{Sn}

E = -1541.89766699
C 0.994756 3.227486 -0.049454
C 0.319085 2.044429 0.196492
C -0.947462 1.727541 -0.301109
C -1.553924 2.682221 -1.122072
C -0.903106 3.881835 -1.392399
C 0.358686 4.160907 -0.861635
H 1.968706 3.427250 0.393427
H -2.546811 2.499065 -1.529909
H -1.391738 4.626824 -2.018209
H 0.839110 5.113938 -1.073299
B -1.377028 0.288165 0.227988
S 0.923802 0.648201 1.104917

O 1.740119 1.062826 2.250930
 O -0.511790 0.095863 1.455374
 C 1.589061 -0.497213 0.110597
 C -2.862131 -0.174980 0.394268
 C -3.761293 -0.128867 -0.681091
 C -3.351292 -0.625532 1.626802
 C -5.088922 -0.511360 -0.534593
 H -3.409363 0.195679 -1.661554
 C -4.678380 -1.011613 1.779930
 H -2.672113 -0.670986 2.477095
 C -5.554161 -0.955086 0.700222
 H -5.764475 -0.468102 -1.387828
 H -5.033680 -1.357633 2.749739
 H -6.593227 -1.257680 0.818708
 P 3.285556 -0.619900 0.174130
 C 4.173824 0.954222 0.000874
 H 5.258909 0.802063 -0.014749
 H 3.849353 1.448240 -0.921235
 H 3.904296 1.578250 0.860371
 C 3.844129 -1.682178 -1.175041
 H 3.524800 -1.245546 -2.127037
 H 4.934435 -1.784805 -1.154521
 H 3.382675 -2.670220 -1.071475
 C 3.928200 -1.337544 1.710038
 H 3.549312 -0.713480 2.527102
 H 3.522476 -2.348340 1.823494
 H 5.023726 -1.366938 1.726829
 Sn 0.047385 -1.756093 -1.004215
 H -0.088980 -0.286216 -2.293321
 H -0.674754 -0.025370 -1.404808

IX^{Sn}

E = -992.683355000
 C 1.626408 2.491038 -0.352953
 C -0.522692 1.332698 -0.194508
 C -1.144569 2.587226 -0.412112
 C -0.428982 3.751966 -0.567462

C 0.974787 3.690278 -0.520157
 H 2.715215 2.490386 -0.371074
 H -2.232126 2.618579 -0.459352
 H -0.932721 4.702471 -0.729633
 H 1.559574 4.601968 -0.640683
 B -1.343438 0.068073 0.015282
 C -2.894729 -0.032482 0.137368
 C -3.628618 0.852033 0.947799
 C -3.616218 -1.041685 -0.521914
 C -5.007494 0.742446 1.082483
 H -3.100953 1.633257 1.494035
 C -4.997579 -1.142443 -0.410712
 H -3.076306 -1.756536 -1.143083
 C -5.698740 -0.251059 0.395752
 H -5.547228 1.437047 1.724483
 H -5.530049 -1.926268 -0.947197
 H -6.779757 -0.334820 0.494510
 C 0.921106 1.261099 -0.199934
 C 1.563409 -0.008851 -0.057445
 P 3.212604 -0.176404 0.333418
 C 4.452618 0.282767 -0.931680
 H 4.354175 1.340714 -1.193164
 H 5.472406 0.090809 -0.577567
 H 4.257377 -0.310429 -1.831596
 C 3.728415 0.738305 1.822651
 H 4.803327 0.633510 2.008175
 H 3.477368 1.797123 1.704314
 H 3.163001 0.346290 2.674509
 C 3.614440 -1.904676 0.695261
 H 4.667075 -1.991992 0.985144
 H 2.972123 -2.261565 1.506967
 H 3.431277 -2.521406 -0.191197
 Sn 0.242793 -1.716312 -0.355795
 H -0.762757 -0.907698 1.136659
 H -0.171926 -1.652098 1.593223

3.6 Energien der H₂-Aktivierungsprodukte

3.6.1 Bei Silylenen

Tabelle 3.47. Energien der Produkte der geminalen H₂-Aktivierung mit Silylenen (Reaktionspfad A).

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
Y₂Si	-4084.20221490	0.905735	0.756086	-0.043537	-114.305087	-122.231
YSiCl	-2648.19894660	0.465524	0.371191	-0.035416	-92.985423	-100.911
YSiHMDS	-3062.01021364	0.710441	0.588421	-0.049628	-130.298005	-138.224
YSiC₆F₅	-2916.53728533	0.523588	0.412583	-0.042874	-112.566507	-120.492
YSiPy	-2435.68222444	0.546615	0.442860	-0.047392	-124.427308	-132.353
YSiPyr	-2451.73835013	0.534822	0.431387	-0.047398	-124.443429	-132.369
YSiB¹	-2863.86877333	0.711715	0.590654	-0.044941	-117.992628	-125.919
YSiB²	-2594.69234496	0.564347	0.458131	-0.054588	-143.320958	-151.247
(Y_{Ph})₂Si	-2907.00165557	0.817788	0.687517	-0.045054	-118.288968	-126.215
Y_{Ph}SiCl	-2059.61012190	0.422292	0.339833	-0.038578	-101.286913	-109.213
Y_{Ph}SiHMDS	-2473.40958015	0.666935	0.553715	-0.043545	-114.327377	-122.253
Y_{Ph}SiC₆F₅	-2327.93992590	0.479251	0.376858	-0.040578	-106.538359	-114.464
Y_{Ph}SiPy	-1847.08712655	0.503605	0.412827	-0.044948	-118.011400	-125.937
Y_{Ph}SiPyr	-1863.14632866	0.491315	0.399348	-0.043944	-115.374164	-123.300
Y_{Ph}SiB¹	-2275.28042292	0.668346	0.558259	-0.042993	-112.879388	-120.805
Y_{Ph}SiB²	-2006.09230180	0.520629	0.421314	-0.045855	-120.391469	-128.317
(Y_{PhF})₂Si	-3900.82263892	0.746355	0.601497	-0.040529	-106.410130	-114.336
Y_{PhF}SiCl	-2556.51391356	0.385772	0.294033	-0.035261	-92.576948	-100.503
Y_{PhF}SiHMDS	-2970.31815159	0.631347	0.510647	-0.046294	-121.543879	-129.470
Y_{PhF}SiC₆F₅	-2824.84605413	0.443557	0.334097	-0.037553	-98.594463	-106.520
Y_{PhF}SiPy	-2343.99344619	0.467164	0.367363	-0.044724	-117.423892	-125.350
Y_{PhF}SiPyr	-2360.05064089	0.454835	0.352989	-0.042998	-112.891938	-120.818
Y_{PhF}SiB¹	-2772.18989022	0.632859	0.515605	-0.044937	-117.981391	-125.907
Y_{PhF}SiB²	-2502.99787334	0.484614	0.380128	-0.040729	-106.934048	-114.860
V^{Si}	-1309.09965466	0.337770	0.269667	-0.017439	-45.892404	-53.818
VI^{Si}	-1858.30978327	0.352567	0.278854	-0.034942	-91.952365	-99.878
VII^{Si}	-2620.39041897	0.393005	0.313967	-0.051850	-136.448079	-144.374
VIII^{Si}	-1828.35408176	0.349865	0.274635	-0.048936	-128.779781	-136.706
IX^{Si}	-1279.13297082	0.335689	0.266501	-0.052943	-139.324944	-147.251

Tabelle 3.48. Energien der Produkte der kooperativen H₂-Aktivierung mit ylidsubstituierten Silylenen entlang der C^{Ylid}-Si-Einheit (Reaktionspfad B).

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
Y ₂ Si	-4084.10313370	0.905776	0.754707	0.054166	142.212039	134.286
YSiCl	-2648.14565424	0.466285	0.372292	0.018977	49.824344	41.898
YSiHMDS	-3061.94179912	0.710952	0.587763	0.018129	47.596738	39.671
YSiB ¹	-2863.81681644	0.713541	0.593515	0.009877	25.931742	18.006
(Y _{Ph}) ₂ Si	-2906.96124534	0.819298	0.690563	-0.001598	-4.194636	-12.121
Y _{Ph} SiCl	-2059.57243373	0.423769	0.339798	-0.00092497	-2.428515	-10.354
Y _{Ph} SiHMDS	-2473.36838754	0.668231	0.556823	0.00075562	1.983874	-5.942
Y _{Ph} SiB ¹	-2275.24619115	0.669959	0.561668	-0.00535271	-14.053546	-21.979
V ^{Si}	-1309.07213660	0.339175	0.272356	0.012698	33.416232	25.490
VI ^{Si}	-1858.27449606	0.353707	0.281431	0.002835	7.460119	-0.466
VII ^{Si}	-2620.32742581	0.393862	0.314601	0.011630	30.605030	22.679
VIII ^{Si}	-1828.30293237	0.350921	0.276831	0.004286	11.278541	3.353
IX ^{Si}	-1279.10934965	0.337705	0.268261	-0.027621	-72.686682	-80.613

Tabelle 3.49. Energien der Produkte der H₂-Aktivierung mit Silylenen entlang der Si-B-Einheit (Reaktionspfad C).

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
VIII ^{Si}	-1828.30293237	0.350921	0.276831	-0.01256	-33.053814	-40.980
IX ^{Si}	-1279.12258772	0.336082	0.268223	-0.04087	-107.54300	-115.469

3.6.2 Bei Germylenen

Tabelle 3.50. Energien der Produkte der H₂-Aktivierung mit Germylenen nach Reaktionspfad A.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
Y ₂ Ge	-5872.42401869	0.904050	0.752127	-0.010684	-28.051554	-35.977
YGeCl	-4436.42158259	0.464058	0.367453	-0.004082	-10.718528	-18.644
YGeHMDS	-4850.22337441	0.708964	0.585662	-0.014436	-37.901879	-45.828
YGeC ₆ F ₅	-4704.76238422	0.522007	0.409895	-0.014685	-38.556232	-46.482
YGePy	-4223.90829333	0.545494	0.442275	-0.018134	-47.611214	-55.537
YGePyr	-4239.96535233	0.533316	0.430997	-0.019214	-50.445231	-58.371
YGeB ¹	-4652.10228587	0.710389	0.588252	-0.020017	-52.554847	-60.481
YGeB ²	-4382.92514797	0.562883	0.455363	-0.028891	-75.854505	-83.780
Y ^{Ph} ₂ Ge	-4695.22357507	0.816368	0.686331	-0.013859	-36.387254	-44.313
Y ^{Ph} GeCl	-3847.83356599	0.420931	0.337694	-0.005082	-13.342033	-21.268
Y ^{Ph} GeHMDS	-4261.62255210	0.665090	0.550013	-0.008996	-23.619710	-31.546
Y ^{Ph} GeC ₆ F ₅	-4116.16452380	0.477810	0.374047	-0.008116	-21.308430	-29.234
Y ^{Ph} GePy	-3635.30673197	0.501657	0.407125	-0.013322	-34.976993	-42.903
Y ^{Ph} GePyr	-3651.37222768	0.489750	0.396843	-0.015002	-39.386835	-47.313
Y ^{Ph} GeB ¹	-4063.51376319	0.666848	0.554732	-0.019732	-51.806973	-59.733
Y ^{Ph} GeB ²	-3794.32403634	0.519452	0.420220	-0.016844	-44.223006	-52.149
Y ^{PhF} ₂ Ge	-5689.04492829	0.744601	0.597840	-0.013632	-35.790005	-43.716
Y ^{PhF} GeCl	-4344.73667122	0.384499	0.291942	-0.000339	-0.891072	-8.817
Y ^{PhF} GeHMDS	-4758.53129273	0.629484	0.506721	-0.013583	-35.662380	-43.588
Y ^{PhF} GeC ₆ F ₅	-4613.07173097	0.441827	0.330443	-0.007562	-19.853851	-27.780
Y ^{PhF} GePy	-4132.21905465	0.465709	0.364282	-0.014830	-38.937114	-46.863
Y ^{PhF} GePyr	-4148.27595621	0.453489	0.351908	-0.010673	-28.021125	-35.947
Y ^{PhF} GeB ¹	-4560.42388592	0.631535	0.512854	-0.018462	-48.471984	-56.398
Y ^{PhF} GeB ²	-4291.23124642	0.482892	0.374544	-0.018528	-48.644086	-56.570
V ^{Ge}	-3097.31387278	0.335856	0.266002	0.015969	42.023933	34.098
VI ^{Ge}	-3646.52404562	0.350828	0.276117	-0.001815	-4.776549	-12.702
VII ^{Ge}	-4408.61051045	0.391654	0.311589	-0.017369	-45.707333	-53.633
VIII ^{Ge}	-3616.59318818	0.348696	0.272989	-0.025821	-67.950543	-75.876
IX ^{Ge}	-3067.36886792	0.334492	0.263982	-0.029005	-76.330981	-84.257

Tabelle 3.51. Energien der Produkte der kooperativen H₂-Aktivierung mit ylidsubstituierten Germylenen entlang der C^{Ylid}-Ge-Einheit (Reaktionspfad B).

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
Y ₂ Ge	-5872.35282600	0.905361	0.755025	0.063406	166.473552	158.548

YGeCl	-4436.40897421	0.465860	0.370939	0.012012	31.537266	23.611
YGeHMDS	-4850.19171900	0.710220	0.585891	0.017448	45.810640	37.885
YGeB¹	-4652.07484986	0.712862	0.591109	0.010276	26.979451	19.054
(Y_{Ph})₂Ge	-4695.21551874	0.818578	0.687382	-0.004752	-12.475959	-20.402
Y_{Ph}GeCl	-3847.83180999	0.422879	0.337611	-0.003409	-8.949571	-16.875
Y_{Ph}GeHMDS	-4261.61961327	0.667368	0.554299	-0.001771	-4.650919	-12.577
Y_{Ph}GeB¹	-4063.50254157	0.669439	0.558165	-0.005078	-13.331268	-21.257
V^{Ge}	-3097.32626955	0.338532	0.271217	0.008804	23.168196	15.242
VI^{Ge}	-3646.52430545	0.352619	0.278128	-0.000068	-0.178852	-8.105
VII^{Ge}	-4408.58161691	0.392732	0.311320	0.011190	29.446397	21.520
VIII^{Ge}	-3616.56412120	0.350198	0.274821	0.005006	13.174729	5.249
IX^{Ge}	-3067.36305632	0.336989	0.266060	-0.021134	-55.616836	-63.543

Tabelle 3.52. Energien der Produkte der H₂-Aktivierung mit Germylenen entlang der Ge–B-Einheit (Reaktionspfad C).

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
VIII^{Ge}	-3616.57722538	0.349240	0.274007	-0.008880	-23.36745	-31.293
IX^{Ge}	-3067.36728974	0.335161	0.265602	-0.025815	-67.93416	-75.860

3.6.3 Bei Stannylene

Tabelle 3.53. Energien der Produkte der geminalen H₂-Aktivierung mit Stannylene (Reaktionspfad A)

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
Y ₂ Sn	-3797.77917506	0.902175	0.749892	0.022254	58.428553	50.503
YSnCl	-2361.77899927	0.461862	0.364658	0.024536	64.419656	56.494
YSnHMDS	-2775.57458786	0.706788	0.582090	0.017329	45.497598	37.572
YSnC ₆ F ₅	-2630.11579236	0.519967	0.406166	0.013629	35.783878	27.858
YSnPy	-2149.25791222	0.542983	0.438035	0.010805	28.367287	20.441
YSnPyr	-2165.31623436	0.530797	0.426213	0.009528	25.014839	17.089
YSnB ¹	-2577.45693301	0.708249	0.583635	0.006172	16.203320	8.277
YSnB ²	-2308.27645164	0.560815	0.451134	-0.000962	-2.526499	-10.452
(Y _{Ph}) ₂ Sn	-2620.57497065	0.813836	0.682108	0.002699	7.086665	-0.839
Y _{Ph} SnCl	-1773.18870127	0.418383	0.332384	0.014206	37.296613	29.371
Y _{Ph} SnHMDS	-2186.97193692	0.662394	0.545340	0.011727	30.788681	22.863
Y _{Ph} SnC ₆ F ₅	-2041.51632429	0.475468	0.370713	0.013136	34.489664	26.564
Y _{Ph} SnPy	-1560.65390547	0.499014	0.402109	0.005665	14.874738	6.949
Y _{Ph} SnPyr	-1576.72065164	0.487386	0.393661	0.005010	13.153591	5.228
Y _{Ph} SnB ¹	-1988.86624564	0.664662	0.551147	-0.001792	-4.705244	-12.631
Y _{Ph} SnB ²	-1719.67372922	0.517379	0.417846	0.003712	9.745167	1.819
(Y _{PhF}) ₂ Sn	-3614.39676385	0.742686	0.596278	0.007195	18.891438	10.966
Y _{PhF} SnCl	-2270.09241554	0.382126	0.287470	0.020191	53.012016	45.086
Y _{PhF} SnHMDS	-2683.88011039	0.626521	0.500716	0.009828	25.804274	17.878
Y _{PhF} SnC ₆ F ₅	-2538.42233005	0.439963	0.327919	0.018034	47.347578	39.422
Y _{PhF} SnPy	-2057.56659845	0.462980	0.356644	0.005559	14.594544	6.669
Y _{PhF} SnPyr	-2073.62521702	0.449947	0.347901	0.010676	28.028913	20.103
Y _{PhF} SnB ¹	-2485.77711052	0.628970	0.508353	0.000159	0.417685	-7.508
Y _{PhF} SnB ²	-2216.58280477	0.480863	0.372091	0.002100	5.512257	-2.414
V ^{Sn}	-1022.65604664	0.333336	0.262203	0.036738	96.677549	88.752
VI ^{Sn}	-1571.87088588	0.348468	0.272594	0.024398	64.205365	56.279
VII ^{Sn}	-2333.95836046	0.388943	0.305636	0.010191	26.817983	18.892
VIII ^{Sn}	-1541.94749500	0.346416	0.268209	-0.002924	-7.695633	-15.622
IX ^{Sn}	-992.71561093	0.332317	0.260538	-0.006484	-17.024599	-24.950

Tabelle 3.54. Energien der Produkte der kooperativen H₂-Aktivierung mit ylidsubstituierten Stannyleneen entlang der C^{Ylid}-Sn-Einheit (Reaktionspfad B).

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
Y ₂ Sn	-3797.74178854	0.903412	0.750108	0.059857	157.153970	149.228
YSnCl	-2361.79594561	0.464515	0.365917	0.008849	23.232544	15.307
YSnHMDS	-2775.57104813	0.709068	0.583446	0.022225	58.351337	50.425
YSnB ¹	-2577.44789013	0.711697	0.586848	0.018427	48.381132	40.455
(Y _{Ph}) ₂ Sn	-2620.58994123	0.817045	0.683788	-0.010591	-27.807753	-35.734
Y _{Ph} SnCl	-1773.21469715	0.421662	0.335384	-0.008790	-19.204200	-31.005
Y _{Ph} SnHMDS	-2186.99803690	0.665667	0.551016	-0.008697	-22.834479	-30.760
Y _{Ph} SnB ¹	-1988.87613300	0.668315	0.555512	-0.007314	-23.079070	-27.130
V ^{Sn}	-1022.69769888	0.337176	0.268619	0.001583	4.164801	-3.761
VI ^{Sn}	-1571.89629800	0.351327	0.274771	0.001217	3.201558	-4.724
VII ^{Sn}	-2333.95557594	0.391230	0.306899	0.014229	37.444746	29.519
VIII ^{Sn}	-1541.93264299	0.349394	0.271380	0.015057	39.623780	31.698
IX ^{Sn}	-992.72470864	0.335532	0.263086	-0.013034	-34.220852	-42.147

Tabelle 3.55. Energien der Produkte der H₂-Aktivierung mit Stannyleneen entlang der Sn-B-Einheit (Reaktionspfad C).

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
VIII ^{Sn}	-1541.95645177	0.348178	0.271419	-0.008658	-22.783777	-30.710
IX ^{Sn}	-992.73003731	0.333927	0.262447	-0.019002	-49.888975	-57.815

3.7 Koordinaten der H₂-Aktivierungsprodukte

3.7.1 Bei Silylenen

3.7.1.1 Reaktionspfad A

Y₂Si

E = -4084.20221490

C -4.628741 -2.209900 0.351861

H -4.557965 -2.131465 1.434037

C -3.531806 -1.862194 -0.418824

C 3.531643 1.862444 -0.418385

O -0.999278 -2.311456 0.055316

C 3.578400 1.941199 -1.806934

H 2.699939 1.669850 -2.390739

C -2.515136 3.343945 2.325617

H -3.388029 3.772491 1.833598

C -5.797143 -2.623922 -0.280045
 H -6.665844 -2.888924 0.321602
 C 1.293097 -5.045984 -1.790770
 H 0.869594 -6.013793 -1.530740
 C 1.514684 -4.104438 -0.792021
 H 1.241190 -4.327338 0.235460
 C -2.306485 2.546015 -2.456810
 H -2.639774 1.543492 -2.720028
 C -2.044965 2.857833 -1.118646
 C -4.975884 1.326430 -0.779533
 H -4.589076 1.554025 -1.768595
 C -6.324859 1.034403 -0.628331
 H -6.976107 1.032873 -1.500070
 C 1.591494 -4.747142 -3.114623
 H 1.414847 -5.487134 -3.893064
 C 1.558170 -0.147742 -0.385405
 O 2.391327 1.083617 1.789225
 S 2.028834 1.302810 0.373737
 P 2.328437 -1.586116 0.139988
 C 4.750441 2.349474 -2.422181
 H 4.794253 2.407443 -3.509365
 C 4.645967 -1.025561 1.590574
 H 3.984133 -0.985399 2.451318
 C 0.730419 -1.721648 2.381936
 H 0.202795 -0.902944 1.911257
 C -5.998427 0.739949 1.737743
 H -6.392099 0.501840 2.723937
 C -4.645767 1.024909 1.590894
 H -3.983828 0.984529 2.451547
 C 2.306126 -2.545432 -2.457274
 H 2.639119 -1.542771 -2.720343
 C -1.829350 2.274419 1.740498
 C -3.578756 -1.940607 -1.807341
 H -2.700393 -1.669112 -2.391224
 C -1.514336 4.104471 -0.791378
 H -1.240645 4.327123 0.236103
 C -4.127983 1.334812 0.330661

C 2.082202 -3.853991 3.542066
 H 2.613497 -4.686062 4.000208
 C 1.829541 -2.274820 1.740165
 C 2.515429 -3.344428 2.325019
 H 3.388301 -3.772830 1.832837
 C 2.044912 -2.857588 -1.119130
 C 2.091764 -3.491967 -3.448843
 H 2.297562 -3.242897 -4.487906
 C -7.156467 -3.091880 -2.349908
 H -6.968694 -3.782574 -3.180493
 H -7.669919 -2.215737 -2.769910
 H -7.848214 -3.576022 -1.652621
 C 0.967517 -3.302707 4.173567
 H 0.627928 -3.712508 5.123296
 C 5.881540 2.691063 -1.669578
 C -6.839879 0.747111 0.631968
 H -7.897948 0.520098 0.749232
 C 6.324824 -1.034548 -0.628828
 H 6.975980 -1.032787 -1.500634
 C -1.558223 0.147859 -0.385590
 P -2.328434 1.586099 0.140225
 O -2.391441 -1.083770 1.788847
 S -2.028923 -1.302796 0.373334
 O 0.999178 2.311490 0.055798
 C -5.881847 -2.690619 -1.669883
 C -4.750894 -2.348841 -2.422533
 H -4.794835 -2.406650 -3.509716
 C -2.092036 3.492688 -3.448227
 H -2.298085 3.243882 -4.487304
 C -1.591357 4.747657 -3.113842
 H -1.414639 5.487757 -3.892165
 C -1.292654 5.046153 -1.789980
 H -0.868846 6.013795 -1.529830
 C 4.975798 -1.326344 -0.779989
 H 4.588858 -1.553567 -1.769083
 C 0.289541 -2.238217 3.593014
 H -0.596529 -1.810800 4.056662

C 4.128014 -1.334987 0.330299
 C 6.840017 -0.747752 0.631514
 H 7.898127 -0.520912 0.748740
 C 5.797058 2.623961 -0.279794
 H 6.665922 2.888627 0.321758
 C 5.998685 -0.740839 1.737379
 H 6.392494 -0.503111 2.723610
 C -0.966987 3.301800 4.173963
 H -0.627240 3.711419 5.123714
 C -2.081738 3.853251 3.542713
 H -2.612922 4.685275 4.001071
 C 4.628684 2.209849 0.352210
 H 4.558092 2.131089 1.434372
 C 7.155671 3.093305 -2.349942
 H 7.852996 3.564927 -1.649669
 H 6.968355 3.795464 -3.171035
 H 7.662204 2.219659 -2.783230
 C -0.289127 2.237386 3.593130
 H 0.597010 1.809878 4.056574
 C -0.730199 1.721044 2.382031
 H -0.202692 0.902401 1.911109
 Si 0.000040 0.000142 -1.376763
 H 0.127707 1.189255 -2.257411
 H -0.127582 -1.188877 -2.257543

YSiCl

E = -2648.19894660
 C -3.167105 0.803615 -1.199231
 H -2.784415 0.856021 -2.215702
 C -2.366366 1.238438 -0.155892
 O -0.756599 3.310317 -0.116141
 C 2.518158 -1.635093 -1.918191
 H 2.071580 -2.584396 -1.623330
 C -4.429028 0.290134 -0.916801
 H -5.059274 -0.059699 -1.733501
 C 0.890987 -1.255441 2.672877
 H -0.014275 -0.654365 2.742886

C 1.580226 -1.321495 1.456564
 C -1.377876 -2.075865 0.263183
 H -1.215651 -2.020456 1.336443
 C -2.473053 -2.774173 -0.226591
 H -3.159325 -3.255614 0.466844
 C -1.818153 -2.225798 -2.479060
 H -1.993915 -2.273754 -3.551761
 C -0.724647 -1.517143 -1.995120
 H -0.066856 -0.988989 -2.680187
 C 2.122132 -0.446917 -1.293436
 C -2.815963 1.186099 1.159948
 H -2.174137 1.543244 1.963728
 C 2.774411 -2.038738 1.381817
 H 3.339327 -2.069982 0.454177
 C -0.492029 -1.453485 -0.619566
 C -6.243651 -0.380221 0.700079
 H -6.830894 0.287178 1.342596
 H -6.147677 -1.335795 1.233181
 H -6.818397 -0.564442 -0.213319
 C -2.689670 -2.856222 -1.598767
 H -3.547379 -3.406018 -1.981691
 C 0.350332 1.097649 0.549972
 P 0.881294 -0.449277 0.025921
 O -0.467699 1.531918 -1.910894
 S -0.742395 1.899112 -0.511435
 C -4.897019 0.202975 0.393352
 C -4.071031 0.664249 1.426706
 H -4.424484 0.615407 2.456159
 C 1.377192 -1.922360 3.788434
 H 0.836489 -1.863630 4.730708
 C 2.561905 -2.648210 3.704853
 H 2.946878 -3.164536 4.582032
 C 3.260818 -2.699429 2.505020
 H 4.196945 -3.250044 2.440567
 C 4.018192 -0.382306 -3.323298
 H 4.761053 -0.356161 -4.118374
 C 3.469123 -1.600685 -2.928365

H 3.778038 -2.523767 -3.414751
 C 3.611548 0.798715 -2.714464
 H 4.029424 1.751575 -3.031666
 C 2.659079 0.772434 -1.700935
 H 2.322596 1.694875 -1.233017
 Cl 2.580271 3.481017 0.873018
 Si 1.183450 2.194781 1.745481
 H 1.974776 1.369534 2.690583
 H 0.228885 3.040731 2.491259

YSiHMDS

E = -3062.01021364
 S 0.749044 -1.563345 0.736758
 P 0.614615 1.206313 0.035481
 Si -4.005609 0.209009 -0.664935
 Si -3.354364 -2.652248 0.204700
 O -0.063473 -2.780258 0.590579
 O 0.941276 -1.005977 2.088847
 N -2.868659 -1.138876 -0.594534
 C 0.114047 -0.390243 -0.336572
 C 2.388729 -1.976351 0.154845
 C 2.586087 -2.267408 -1.191376
 H 1.741602 -2.240300 -1.878364
 C 3.861697 -2.571013 -1.638352
 H 4.021966 -2.794137 -2.692653
 C 4.949682 -2.598420 -0.756509
 C 4.716733 -2.325684 0.590838
 H 5.550044 -2.346926 1.292123
 C 3.442491 -2.013347 1.053535
 H 3.254388 -1.777289 2.098184
 C 6.330559 -2.893490 -1.260312
 H 6.335497 -3.760127 -1.932068
 H 7.023253 -3.096147 -0.436963
 H 6.731248 -2.043415 -1.829607
 C 2.394484 1.304606 0.419275
 C 3.324375 1.263982 -0.622683
 H 2.989433 1.235634 -1.656600

C 4.684345 1.259544 -0.344263
 H 5.401796 1.226101 -1.161489
 C 5.124860 1.298252 0.975165
 H 6.191287 1.297829 1.192799
 C 4.202487 1.324166 2.014676
 H 4.542873 1.336430 3.048128
 C 2.839281 1.317938 1.742676
 H 2.119302 1.291507 2.555866
 C -0.205220 1.950207 1.475394
 C 0.211438 3.176527 2.002659
 H 1.042380 3.713949 1.546656
 C -0.416998 3.698369 3.125550
 H -0.093102 4.653375 3.534304
 C -1.450462 2.990212 3.733869
 H -1.937195 3.395098 4.619136
 C -1.851818 1.761408 3.222150
 H -2.646447 1.198834 3.708055
 C -1.231448 1.236711 2.093798
 H -1.528043 0.267413 1.693148
 C 0.340981 2.272449 -1.408538
 C 0.634589 1.756711 -2.674551
 H 0.973762 0.726511 -2.765830
 C 0.463559 2.543123 -3.806323
 H 0.688359 2.131273 -4.787882
 C -0.008533 3.845931 -3.684666
 H -0.149909 4.459108 -4.572565
 C -0.311632 4.359708 -2.428722
 H -0.695897 5.372733 -2.330233
 C -0.138548 3.577870 -1.293066
 H -0.407401 3.980647 -0.320398
 C -4.867679 0.473886 0.987274
 H -5.598926 1.286700 0.882588
 H -4.138454 0.782846 1.745860
 H -5.398207 -0.403630 1.369393
 C -3.137102 1.837269 -1.018938
 H -3.884422 2.640116 -0.953111
 H -2.672906 1.890970 -2.009681

H -2.369050 2.051897 -0.267897
 C -5.269103 -0.048394 -2.030066
 H -5.900724 -0.926606 -1.859951
 H -4.753692 -0.186397 -2.989569
 H -5.923772 0.828537 -2.121989
 C -2.987826 -2.525519 2.039592
 H -3.521166 -1.677110 2.487560
 H -1.911723 -2.385578 2.191812
 H -3.292039 -3.435321 2.573588
 C -2.557414 -4.152724 -0.581082
 H -2.991561 -5.052157 -0.123114
 H -1.474731 -4.177802 -0.438357
 H -2.779697 -4.184746 -1.655692
 C -5.202766 -2.952350 -0.041753
 H -5.416350 -3.154528 -1.099253
 H -5.867879 -2.148556 0.289786
 H -5.473323 -3.854696 0.523607
 Si -1.309935 -0.976860 -1.374237
 H -0.916812 -2.269541 -1.984991
 H -1.474037 0.006124 -2.476909

YSiC₆F₅

E = -2916.53728533
 C 3.301696 -2.034031 -1.316865
 H 2.927098 -1.813861 -2.313422
 C 2.418206 -2.028290 -0.249876
 O -0.096040 -2.822754 -0.168851
 C -0.253184 3.166167 -1.736634
 H 0.562392 3.776101 -1.348357
 C 4.648029 -2.295006 -1.081332
 H 5.347654 -2.290422 -1.916197
 C 1.123195 1.930885 2.673236
 H 1.728664 1.026902 2.697781
 C 0.431759 2.271721 1.504883
 C 3.408837 1.342243 0.227939
 H 3.280403 1.341926 1.306142
 C 4.691888 1.342705 -0.301352

H 5.550019 1.342377 0.367383
 C 3.776212 1.324905 -2.527918
 H 3.915586 1.305843 -3.606845
 C 2.488557 1.319699 -2.003582
 H 1.629925 1.265958 -2.667382
 C -0.451089 1.868548 -1.254677
 C 2.857355 -2.296603 1.043404
 H 2.147081 -2.292259 1.868580
 C -0.434031 3.365394 1.515304
 H -1.027140 3.603185 0.636751
 C 2.298297 1.343719 -0.620133
 C 6.573421 -2.812374 0.462958
 H 6.723054 -3.809891 0.895712
 H 6.989379 -2.088949 1.176030
 H 7.161359 -2.754464 -0.458676
 C 4.877260 1.339942 -1.680545
 H 5.883979 1.339510 -2.094135
 C 0.277925 -0.403362 0.568217
 P 0.611477 1.197253 0.053698
 O 0.646526 -1.147412 -1.928472
 S 0.696795 -1.643867 -0.541544
 C 5.120632 -2.546623 0.205445
 C 4.201584 -2.547380 1.263196
 H 4.550796 -2.750398 2.275071
 C 0.992685 2.707383 3.815175
 H 1.534453 2.434673 4.718379
 C 0.151650 3.816532 3.810582
 H 0.043050 4.421198 4.708828
 C -0.568797 4.134843 2.666265
 H -1.251550 4.981868 2.667647
 C -2.133858 2.892581 -3.215352
 H -2.798111 3.296210 -3.977111
 C -1.096779 3.676346 -2.714361
 H -0.946036 4.687391 -3.087294
 C -2.314783 1.593477 -2.754868
 H -3.115619 0.975747 -3.155869
 C -1.466800 1.076018 -1.782747

H -1.570564 0.049723 -1.441092
 Si -0.893562 -0.943271 1.878004
 H -1.036091 0.122662 2.901117
 H -0.472797 -2.198200 2.537378
 C -2.616047 -1.176838 1.128656
 C -4.369930 -2.505271 0.102253
 C -4.422334 -0.103794 -0.107743
 C -4.977755 -1.350258 -0.375718
 C -3.267872 -0.045832 0.656671
 C -3.200003 -2.405598 0.848865
 F -2.652196 -3.527640 1.281237
 F -2.738090 1.159189 0.893352
 F -4.913849 -3.682605 -0.156113
 F -6.083447 -1.436356 -1.093345
 F -4.986577 0.994775 -0.587432

YSiPy

E = -2435.68222444
 C 3.489364 -1.411766 -0.961288
 H 3.121110 -1.511410 -1.979411
 C 2.604796 -1.578677 0.092417
 O 0.629602 -3.315955 0.207610
 C -1.725076 1.885086 -2.157045
 H -1.202221 2.801326 -1.883303
 C 4.816369 -1.094110 -0.690599
 H 5.511704 -0.952527 -1.517169
 C -0.184937 1.899832 2.396892
 H 0.666354 1.241918 2.562638
 C -0.890477 1.824073 1.191718
 C 2.219476 1.905326 0.039946
 H 2.046446 2.001692 1.107636
 C 3.425614 2.339017 -0.493239
 H 4.181076 2.766984 0.162446
 C 2.700524 1.661983 -2.686514
 H 2.889237 1.554362 -3.752747
 C 1.493442 1.220377 -2.157077
 H 0.757932 0.743525 -2.798798

C -1.475723 0.700323 -1.457736
 C 3.033528 -1.448948 1.409448
 H 2.323286 -1.583029 2.223528
 C -2.045395 2.587843 1.025462
 H -2.639288 2.491309 0.121384
 C 1.240619 1.353374 -0.790092
 C 6.689760 -0.554510 0.908037
 H 7.128133 -1.197772 1.680589
 H 6.752610 0.478475 1.276815
 H 7.314557 -0.625144 0.011682
 C 3.665627 2.223143 -1.858805
 H 4.611560 2.563236 -2.276225
 C -0.037117 -0.850502 0.676769
 P -0.294822 0.670839 -0.078055
 O 0.727467 -1.650624 -1.695515
 S 0.888874 -1.952563 -0.259424
 C 5.269127 -0.936631 0.618484
 C 4.356623 -1.126191 1.664170
 H 4.693754 -1.017132 2.694542
 C -0.599698 2.767464 3.397896
 H -0.044909 2.817823 4.332458
 C -1.734118 3.551138 3.213122
 H -2.063562 4.226622 4.000303
 C -2.460116 3.451327 2.032263
 H -3.365123 4.039709 1.895921
 C -3.280369 0.714443 -3.573000
 H -3.989534 0.719811 -4.398803
 C -2.631418 1.892006 -3.209235
 H -2.827273 2.815263 -3.750916
 C -3.013495 -0.469021 -2.893904
 H -3.507289 -1.393215 -3.186367
 C -2.107562 -0.480445 -1.839784
 H -1.872447 -1.404850 -1.318176
 C -2.886822 -1.680777 1.277282
 N -3.465752 -0.485809 1.069064
 C -4.721047 -2.812978 0.212788
 C -4.642776 -0.440141 0.461369

C -5.314592 -1.573394 0.011008
H -5.209175 -3.724112 -0.130320
H -5.075819 0.551571 0.309444
H -6.276226 -1.480198 -0.489182
C -3.490620 -2.868681 0.858215
H -2.988484 -3.820315 1.023049
Si -1.143885 -1.520266 1.992088
H -1.261223 -0.583693 3.140565
H -0.637792 -2.824682 2.476774

YSiPyr

E = -2451.73835013
C -3.504393 -1.563999 0.650182
H -3.139091 -1.916081 1.611894
C -2.624529 -1.496787 -0.418415
O -0.743104 -3.246987 -0.957470
C 1.799154 1.312394 2.454070
H 1.288218 2.272824 2.391712
C -4.821493 -1.153055 0.473050
H -5.512925 -1.196249 1.313771
C 0.124826 2.238010 -1.981870
H -0.692717 1.578371 -2.268598
C 0.844387 1.971053 -0.812833
C -2.188985 1.837317 0.414408
H -2.030186 2.170839 -0.607018
C -3.371807 2.168340 1.061334
H -4.125557 2.753534 0.538704
C -2.628660 0.991593 3.026359
H -2.801750 0.649938 4.044829
C -1.444153 0.653552 2.382695
H -0.708404 0.029781 2.882662
C 1.510993 0.303147 1.530420
C -3.049341 -1.041395 -1.662327
H -2.343446 -0.998045 -2.490059
C 1.950567 2.758121 -0.494307
H 2.554899 2.525493 0.377547
C -1.213911 1.086105 1.074962

C -6.678645 -0.192153 -0.935943
 H -7.133071 -0.613909 -1.840569
 H -6.712838 0.901112 -1.039436
 H -7.306647 -0.463961 -0.081237
 C -3.591187 1.749647 2.369918
 H -4.519306 2.008929 2.875933
 C 0.046975 -0.770001 -0.849779
 P 0.299514 0.566118 0.201616
 O -0.747795 -2.063947 1.281098
 S -0.927050 -2.020706 -0.183952
 C -5.269466 -0.671818 -0.756377
 C -4.362426 -0.628229 -1.822635
 H -4.695877 -0.264441 -2.794091
 C 0.480083 3.306018 -2.794592
 H -0.084342 3.503777 -3.703416
 C 1.566902 4.105196 -2.456473
 H 1.850176 4.938761 -3.096283
 C 2.304867 3.823941 -1.312288
 H 3.172004 4.430454 -1.059042
 C 3.354318 -0.153532 3.562905
 H 4.078292 -0.331588 4.355994
 C 2.725864 1.085402 3.463413
 H 2.951894 1.872924 4.179599
 C 3.043582 -1.168219 2.664547
 H 3.514756 -2.144694 2.755113
 C 2.117768 -0.945572 1.651487
 H 1.841470 -1.743006 0.965662
 Si 1.186849 -1.143864 -2.252923
 H 1.230565 -0.031110 -3.240514
 H 0.795659 -2.398257 -2.924219
 C 2.951708 -1.265477 -1.550762
 N 3.499381 -2.459543 -1.302715
 N 3.510526 -0.091677 -1.219951
 C 4.675289 -2.475238 -0.687194
 C 4.684618 -0.118681 -0.605712
 C 5.330618 -1.310929 -0.305167
 H 5.112853 -3.456226 -0.486500

H 5.124864 0.844249 -0.334653
H 6.291405 -1.332284 0.203300

YSiB²

E = -2594.69234496
C -1.441389 2.986678 -1.290577
H -1.088418 2.668766 -2.268637
C -0.861493 2.441401 -0.157218
O 1.657375 1.869644 0.234787
C -1.170587 -3.247892 -1.897570
H -2.250459 -3.238063 -1.751084
C -2.473635 3.908679 -1.146827
H -2.938173 4.334514 -2.035337
C -1.995341 -1.490197 2.620198
H -1.788963 -0.422645 2.685628
C -1.707685 -2.175193 1.434103
C -3.480826 0.135089 -0.043661
H -3.487904 0.023915 1.038180
C -4.502372 0.836300 -0.668919
H -5.302871 1.269558 -0.072935
C -3.465392 0.443689 -2.808298
H -3.451264 0.573090 -3.888578
C -2.434764 -0.253078 -2.187534
H -1.604921 -0.641267 -2.772302
C -0.354624 -2.371819 -1.173516
C -1.287500 2.812923 1.114787
H -0.816200 2.373604 1.992881
C -1.924626 -3.551212 1.363649
H -1.673892 -4.101274 0.460637
C -2.448748 -0.423254 -0.801866
C -4.065786 5.257919 0.267960
H -3.795308 6.082174 0.939385
H -4.949130 4.769162 0.700568
H -4.359996 5.687699 -0.694994
C -4.499137 0.984635 -2.052947
H -5.301323 1.533816 -2.542336
C 0.054801 -0.079191 0.682311

P -1.045742 -1.216876 0.041359
 O 0.438483 0.848798 -1.752821
 S 0.447753 1.236847 -0.333190
 C -2.933943 4.286980 0.113287
 C -2.320168 3.727297 1.241653
 H -2.660444 4.017820 2.235056
 C -2.513801 -2.173252 3.712027
 H -2.730818 -1.634213 4.631808
 C -2.739455 -3.543997 3.633237
 H -3.139091 -4.080303 4.491693
 C -2.440351 -4.230497 2.462111
 H -2.600000 -5.305110 2.402684
 C 0.773063 -4.106219 -3.029200
 H 1.215303 -4.785428 -3.755742
 C -0.604495 -4.117279 -2.819929
 H -1.238184 -4.799280 -3.383392
 C 1.580172 -3.221460 -2.324211
 H 2.653885 -3.199753 -2.498692
 C 1.020858 -2.347546 -1.397429
 H 1.646082 -1.632991 -0.865418
 C 4.665438 0.147552 -0.085615
 C 4.981677 1.012804 0.959155
 C 5.511163 -0.039251 -1.160350
 C 6.161814 1.728747 0.979122
 C 6.706860 0.683204 -1.151064
 H 5.248219 -0.712423 -1.972068
 C 7.025293 1.547215 -0.104011
 H 6.395493 2.401392 1.799899
 H 7.401997 0.570646 -1.980431
 H 7.964837 2.095159 -0.131534
 B 3.006647 0.155375 1.352405
 O 3.458527 -0.427214 0.169135
 O 3.975076 0.993798 1.874862
 Si 1.216568 -0.328350 2.103793
 H 1.131567 -1.756908 2.527076
 H 0.851064 0.493093 3.298663

YSiB¹

E = -2863.86877333
 C 4.057170 1.037451 -1.140930
 H 4.020942 1.922350 -0.510093
 C 2.868398 0.496804 -1.602584
 O 0.711423 1.693054 -2.439777
 C 0.206098 -0.365040 3.692599
 H 1.171143 -0.843523 3.852831
 C 5.258213 0.421524 -1.475825
 H 6.194366 0.838251 -1.105686
 C 0.618930 -3.133339 -0.397665
 H 0.995505 -2.538298 -1.227756
 C 0.319224 -2.498355 0.810668
 C 3.324025 -1.561424 1.066060
 H 2.990785 -2.463227 0.557995
 C 4.666064 -1.405627 1.387791
 H 5.376519 -2.187568 1.127623
 C 4.188479 0.749802 2.355667
 H 4.526507 1.657090 2.852073
 C 2.844888 0.604376 2.034031
 H 2.138022 1.400293 2.254666
 C -0.260971 -0.144553 2.392883
 C 2.867437 -0.626446 -2.423217
 H 1.922139 -1.008127 -2.806983
 C -0.196123 -3.239789 1.873042
 H -0.452900 -2.751355 2.809861
 C 2.408881 -0.558854 1.393968
 C 6.578519 -1.422207 -2.573738
 H 6.590271 -1.813058 -3.597662
 H 6.737088 -2.276603 -1.900448
 H 7.433739 -0.748578 -2.454509
 C 5.097632 -0.253416 2.036339
 H 6.149601 -0.133775 2.289048
 C 0.296631 0.038500 -0.559257
 P 0.661152 -0.715348 0.931011
 O 1.662313 2.280620 -0.152870
 S 1.313436 1.272471 -1.163854

C 5.285751 -0.729225 -2.262994
 C 4.070770 -1.237071 -2.740263
 H 4.074190 -2.120984 -3.377353
 C 0.418554 -4.499935 -0.534776
 H 0.650685 -4.988088 -1.479059
 C -0.092570 -5.238573 0.528542
 H -0.258916 -6.308418 0.417876
 C -0.401629 -4.607903 1.728176
 H -0.812839 -5.181118 2.556587
 C -1.790652 0.653394 4.580011
 H -2.386307 0.966820 5.435359
 C -0.558391 0.036208 4.781216
 H -0.189722 -0.130439 5.791473
 C -2.255666 0.875566 3.288805
 H -3.214223 1.362781 3.119960
 C -1.489271 0.482797 2.196877
 H -1.839304 0.678207 1.186342
 N -4.148191 0.536821 -0.851095
 C -4.047233 2.581645 0.035749
 C -4.855437 1.517923 -0.168722
 H -4.283943 3.541723 0.480238
 H -5.908668 1.411646 0.062862
 B -2.793770 1.003043 -1.072555
 C -1.755689 3.284320 -0.400580
 C -1.113716 3.741550 -1.546615
 C -1.403379 3.803714 0.846079
 C -0.122960 4.709113 -1.446406
 H -1.385342 3.321735 -2.510620
 C -0.416889 4.775871 0.938327
 H -1.902385 3.435156 1.739708
 C 0.223972 5.232881 -0.207984
 H 0.387256 5.043570 -2.346833
 H -0.140936 5.170609 1.914386
 H 1.004686 5.987027 -0.132617
 C -4.696732 -0.718954 -1.157463
 C -4.347542 -1.360968 -2.347803
 C -5.586513 -1.346112 -0.281869

C -4.866932 -2.613353 -2.646212
H -3.675793 -0.859899 -3.042546
C -6.115546 -2.591420 -0.595238
H -5.842189 -0.863142 0.658645
C -5.756939 -3.233885 -1.775625
H -4.581818 -3.101640 -3.576132
H -6.805391 -3.069268 0.098093
H -6.169482 -4.211428 -2.016151
N -2.793780 2.325498 -0.502959
Si -1.278310 -0.251077 -1.503605
H -1.782194 -1.556321 -0.967598
H -1.007376 -0.479421 -2.950673

(Y_{Ph})₂Si

E = -2907.00165557
P 2.973180 0.335191 -0.072433
P -3.021755 0.426766 -0.060505
C 1.473662 -0.045199 -0.773059
C 1.215555 -1.403660 -1.264427
C 1.764299 -2.559576 -0.683928
H 2.394493 -2.460938 0.197570
C 1.467493 -3.827172 -1.165643
H 1.901603 -4.698388 -0.677498
C 0.593444 -3.991331 -2.235344
H 0.347578 -4.985932 -2.602071
C 0.038571 -2.860768 -2.829079
H -0.637404 -2.969123 -3.677216
C 0.352430 -1.592626 -2.359118
H -0.057588 -0.709780 -2.849672
C 3.261529 -0.083864 1.695242
C 3.882613 -1.272039 2.087316
H 4.332838 -1.922803 1.339603
C 3.934648 -1.630692 3.429887
H 4.426294 -2.556840 3.721376
C 3.356817 -0.812943 4.394668
H 3.396058 -1.095214 5.445006
C 2.720505 0.364658 4.011620

H 2.257769 1.004027 4.760911
 C 2.671870 0.726607 2.671688
 H 2.161517 1.642265 2.373606
 C 3.299294 2.127047 -0.158949
 C 4.197742 2.748152 0.710949
 H 4.659433 2.180535 1.516581
 C 4.500622 4.095941 0.556569
 H 5.197860 4.574331 1.241679
 C 3.912739 4.830062 -0.468161
 H 4.147928 5.886372 -0.585267
 C 3.028557 4.211023 -1.345787
 H 2.569947 4.779694 -2.152283
 C 2.728037 2.862561 -1.198836
 H 2.045233 2.367559 -1.887070
 C 4.387637 -0.396629 -0.961331
 C 4.214098 -0.876987 -2.260119
 H 3.220340 -0.888383 -2.699646
 C 5.309499 -1.337060 -2.981843
 H 5.165189 -1.721137 -3.989640
 C 6.581968 -1.305940 -2.421750
 H 7.437131 -1.666653 -2.990415
 C 6.762878 -0.805163 -1.136213
 H 7.758484 -0.766115 -0.698550
 C 5.670294 -0.349882 -0.408847
 H 5.817184 0.047565 0.594423
 C -1.400003 -0.002634 0.178517
 C -1.087932 -1.268683 0.867773
 C -0.156105 -1.280190 1.917924
 H 0.267639 -0.333146 2.244526
 C 0.219233 -2.458998 2.546900
 H 0.948139 -2.425378 3.355152
 C -0.344775 -3.671880 2.158603
 H -0.055104 -4.598257 2.651488
 C -1.282055 -3.683818 1.131235
 H -1.721419 -4.625133 0.804125
 C -1.637821 -2.503390 0.489171
 H -2.324189 -2.540883 -0.356180

C -4.064763 0.034915 1.387823
 C -4.245199 0.961818 2.416291
 H -3.845796 1.968399 2.319921
 C -4.943856 0.609246 3.564257
 H -5.086896 1.343403 4.354805
 C -5.457689 -0.676276 3.702760
 H -5.999626 -0.952834 4.605238
 C -5.279394 -1.605536 2.684608
 H -5.676488 -2.613438 2.787243
 C -4.591865 -1.252195 1.529236
 H -4.467364 -1.980983 0.731951
 C -3.146730 2.217158 -0.364445
 C -3.910195 2.754333 -1.401532
 H -4.461891 2.098700 -2.070197
 C -3.953235 4.130757 -1.595964
 H -4.545501 4.540169 -2.411990
 C -3.236652 4.979366 -0.759915
 H -3.269913 6.055771 -0.917991
 C -2.470271 4.449870 0.273424
 H -1.898139 5.107653 0.924567
 C -2.422274 3.076112 0.469783
 H -1.804453 2.655770 1.261031
 C -3.970563 -0.345920 -1.430642
 C -5.366920 -0.305464 -1.491497
 H -5.932551 0.176258 -0.694463
 C -6.031998 -0.886221 -2.564032
 H -7.119093 -0.855192 -2.609896
 C -5.308473 -1.514426 -3.575850
 H -5.832624 -1.973780 -4.412040
 C -3.920547 -1.563663 -3.512989
 H -3.354874 -2.063762 -4.296945
 C -3.252550 -0.980085 -2.440766
 H -2.168295 -1.027607 -2.355233
 Si 0.008566 1.033988 -0.414848
 H 0.483969 2.068984 0.572333
 H -0.453716 1.856763 -1.583978

Y_{Ph}SiCl

E = -2059.61012190

P -0.476247 0.232372 -0.009140

C 0.674708 -0.485768 -1.052531

C 2.063511 -0.002976 -1.002391

C 2.407898 1.294467 -0.574020

H 1.629089 1.991542 -0.269289

C 3.726881 1.726154 -0.525878

H 3.941693 2.738117 -0.185497

C 4.763559 0.884693 -0.911509

H 5.796673 1.224191 -0.878899

C 4.451639 -0.405669 -1.329475

H 5.245953 -1.091583 -1.620237

C 3.135845 -0.843308 -1.364237

H 2.937963 -1.874889 -1.650511

C 0.244039 0.465509 1.651607

C -0.004656 1.562360 2.476361

H -0.653697 2.368059 2.143972

C 0.602454 1.644155 3.724873

H 0.409026 2.504597 4.362398

C 1.461077 0.637459 4.152560

H 1.938270 0.707970 5.128184

C 1.722384 -0.451146 3.326681

H 2.408173 -1.231849 3.648986

C 1.123912 -0.536105 2.076652

H 1.349116 -1.368884 1.409402

C -1.932640 -0.833057 0.176767

C -1.844588 -1.966565 0.988593

H -0.937943 -2.163415 1.556048

C -2.905983 -2.859600 1.050076

H -2.828362 -3.744561 1.677758

C -4.056959 -2.627778 0.303808

H -4.885864 -3.331445 0.350712

C -4.147202 -1.500926 -0.506269

H -5.043453 -1.322270 -1.096791

C -3.087902 -0.604056 -0.573363

H -3.155524 0.265870 -1.222251

C -1.150187 1.838064 -0.549161
 C -0.627043 2.403070 -1.712020
 H 0.172283 1.881310 -2.237465
 C -1.133931 3.606792 -2.190389
 H -0.718968 4.046535 -3.094956
 C -2.173494 4.240057 -1.518792
 H -2.573140 5.179337 -1.896423
 C -2.715205 3.668107 -0.370133
 H -3.541139 4.154640 0.145016
 C -2.208263 2.468817 0.114041
 H -2.652119 2.008870 0.996391
 Cl 0.842545 -3.708578 -0.654258
 Si 0.270845 -2.058176 -1.854087
 H 1.026201 -2.249102 -3.115892
 H -1.174723 -2.254823 -2.105059

Y_{Ph}SiHMDS

E = -2473.40958015
 P -1.715123 0.131013 -0.060902
 C -0.068433 -0.248684 0.092298
 C 0.327852 -1.589253 0.588084
 C -0.224143 -2.789979 0.112797
 H -0.983046 -2.757084 -0.666105
 C 0.196779 -4.023393 0.598680
 H -0.251208 -4.934629 0.205159
 C 1.193472 -4.100108 1.565705
 H 1.529087 -5.066348 1.937282
 C 1.749647 -2.921403 2.057174
 H 2.520273 -2.960194 2.826378
 C 1.314947 -1.691120 1.583474
 H 1.724971 -0.772518 1.992078
 C -2.658439 -0.746349 -1.373688
 C -3.981920 -1.172159 -1.254359
 H -4.532541 -1.001076 -0.332537
 C -4.598726 -1.835660 -2.310544
 H -5.628898 -2.171494 -2.207822
 C -3.902196 -2.075495 -3.490022

H -4.387928 -2.596700 -4.312823
 C -2.578899 -1.661028 -3.611682
 H -2.025186 -1.858238 -4.527506
 C -1.956605 -1.008122 -2.555227
 H -0.910135 -0.710702 -2.630516
 C -1.896348 1.891071 -0.459408
 C -2.324543 2.347357 -1.703699
 H -2.619718 1.638786 -2.474334
 C -2.363686 3.714758 -1.962884
 H -2.690860 4.069412 -2.938129
 C -1.981653 4.621908 -0.982411
 H -2.009916 5.690009 -1.189713
 C -1.564907 4.166850 0.266887
 H -1.267253 4.876376 1.036356
 C -1.522933 2.805791 0.529754
 H -1.183363 2.441159 1.497808
 C -2.704877 -0.086485 1.454823
 C -2.256795 -0.900303 2.497030
 H -1.310955 -1.426729 2.408976
 C -3.018151 -1.028667 3.653689
 H -2.662378 -1.666048 4.460643
 C -4.221176 -0.343582 3.783419
 H -4.811184 -0.444499 4.692446
 C -4.664806 0.480757 2.753920
 H -5.598400 1.030601 2.856104
 C -3.909654 0.611147 1.595002
 H -4.251233 1.270688 0.797977
 N 2.815950 0.457929 -0.283232
 Si 3.412068 1.479102 1.018160
 Si 3.833404 -0.614895 -1.248000
 C 1.954671 2.337084 1.839957
 H 1.454078 3.040178 1.163812
 H 1.205855 1.606651 2.173982
 H 2.306799 2.897753 2.715772
 C 4.325859 0.532614 2.368625
 H 5.374125 0.346236 2.112710
 H 4.313513 1.131619 3.289228

H 3.859614 -0.434195 2.592327
 C 4.583748 2.769836 0.317172
 H 4.961504 3.444120 1.097011
 H 5.450240 2.291792 -0.159387
 H 4.077130 3.375379 -0.445205
 C 5.408629 -1.061747 -0.328893
 H 6.003073 -1.727876 -0.968430
 H 6.030729 -0.188500 -0.096373
 H 5.195345 -1.594941 0.605095
 C 4.326630 0.248242 -2.843383
 H 4.976213 -0.386787 -3.460361
 H 3.442268 0.508909 -3.437585
 H 4.868314 1.177851 -2.624170
 C 2.935807 -2.215789 -1.636538
 H 1.961454 -2.045569 -2.109683
 H 3.541295 -2.820597 -2.325200
 H 2.763600 -2.801913 -0.725031
 Si 1.181088 0.692971 -0.879839
 H 0.844337 2.140714 -0.958994
 H 1.248831 0.248677 -2.314105

Y_{Ph}SiC₆F₅

E = -2327.93992590
 P -1.773358 0.000539 -0.057667
 C -0.209314 0.184804 -0.671518
 C 0.696295 1.201589 -0.064769
 C 1.290636 0.993578 1.190145
 H 1.030164 0.095808 1.749876
 C 2.225042 1.883290 1.706499
 H 2.679253 1.688833 2.676925
 C 2.592939 3.009777 0.975808
 H 3.335790 3.701034 1.369318
 C 2.005662 3.241899 -0.263342
 H 2.286877 4.119570 -0.842841
 C 1.063265 2.353260 -0.771403
 H 0.613241 2.529010 -1.746503
 C -1.972607 -0.860880 1.548961

C -3.042274 -0.603320 2.410048
 H -3.776971 0.158352 2.153740
 C -3.165543 -1.315039 3.598010
 H -3.996817 -1.108629 4.269542
 C -2.224322 -2.285134 3.930324
 H -2.320250 -2.837647 4.863204
 C -1.157509 -2.543992 3.075361
 H -0.416911 -3.297892 3.334671
 C -1.029817 -1.832314 1.887751
 H -0.188525 -2.018965 1.220894
 C -2.771925 -0.953378 -1.233731
 C -3.639698 -1.967508 -0.826204
 H -3.732161 -2.214676 0.228896
 C -4.375183 -2.672957 -1.772080
 H -5.044281 -3.468437 -1.450402
 C -4.250050 -2.370383 -3.123698
 H -4.823844 -2.928612 -3.861024
 C -3.387935 -1.358268 -3.534334
 H -3.285154 -1.121765 -4.591366
 C -2.649788 -0.649934 -2.594486
 H -1.965727 0.138102 -2.905901
 C -2.597890 1.596551 0.229661
 C -2.106399 2.419505 1.249120
 H -1.294489 2.073027 1.886376
 C -2.651989 3.680595 1.449362
 H -2.259873 4.317898 2.239305
 C -3.695733 4.125762 0.643795
 H -4.124581 5.113075 0.804348
 C -4.192576 3.307431 -0.364729
 H -5.012776 3.650367 -0.992382
 C -3.644379 2.046542 -0.576035
 H -4.035702 1.411441 -1.368262
 C 2.371217 -1.046780 -1.162436
 C 3.964696 -1.501264 0.621738
 C 4.412566 0.267345 -0.949126
 C 4.784528 -0.477243 0.162790
 Si 0.566593 -1.066677 -1.757919

H 0.598731 -0.783665 -3.222368
H 0.009434 -2.438607 -1.603330
C 3.224076 -0.040202 -1.596891
C 2.777282 -1.764240 -0.047126
F 1.982758 -2.706541 0.468490
F 2.882851 0.716867 -2.636257
F 5.185382 1.253790 -1.371157
F 5.914241 -0.206388 0.791559
F 4.316212 -2.198480 1.691628

Y_{Ph}SiPy

E = -1847.08712655
P -0.468187 -0.537587 -0.054517
C -0.438522 0.698243 -1.218019
C -1.511316 1.726197 -1.162126
C -1.221623 3.055715 -0.811322
C -2.214690 4.026259 -0.768238
C -3.534706 3.695460 -1.059472
C -3.842833 2.386798 -1.416359
C -2.844421 1.421548 -1.478964
C -0.157791 -0.041575 1.681761
C -0.461179 -0.882577 2.758073
H -0.926544 -1.851154 2.578803
C -0.172937 -0.481537 4.055742
H -0.407582 -1.137869 4.891738
C 0.410393 0.763045 4.286231
H 0.630700 1.077966 5.304735
C 0.704992 1.602920 3.218991
H 1.157019 2.576869 3.396607
C 0.421453 1.203143 1.916044
H 0.658428 1.848406 1.072373
C 0.808235 -1.767728 -0.446734
C 1.747974 -2.192682 0.494180
H 1.724352 -1.795997 1.505974
C 2.730599 -3.106952 0.132201
H 3.464520 -3.427515 0.868823
C 2.781866 -3.602727 -1.166305

H 3.553956 -4.316989 -1.446425
 C 1.848928 -3.181434 -2.109133
 H 1.889635 -3.560410 -3.128219
 C 0.866938 -2.265227 -1.753191
 H 0.149219 -1.909689 -2.490385
 C -2.061626 -1.418804 0.108864
 C -3.087171 -0.806129 0.836142
 H -2.902760 0.140612 1.341280
 C -4.343541 -1.393565 0.904917
 H -5.137136 -0.904892 1.466621
 C -4.585589 -2.600841 0.256522
 H -5.569534 -3.062513 0.313595
 C -3.567311 -3.218734 -0.461209
 H -3.749956 -4.166943 -0.963041
 C -2.309857 -2.629463 -0.538630
 H -1.519380 -3.122572 -1.099559
 C 2.650571 1.179788 -1.078108
 C 4.755384 0.364161 -0.237520
 C 3.732191 2.364107 0.569429
 C 4.790984 1.460393 0.613982
 N 2.691601 2.231036 -0.241658
 H 5.557680 -0.372481 -0.229976
 H 5.617203 1.616010 1.304593
 H 3.728194 3.234572 1.229922
 H -0.189466 3.320654 -0.577854
 H -1.955566 5.048673 -0.497107
 H -4.314664 4.453634 -1.018434
 H -4.867923 2.116317 -1.666195
 H -3.088403 0.409325 -1.795124
 C 3.673199 0.226759 -1.098464
 H 3.601174 -0.624256 -1.775561
 Si 1.093535 1.064046 -2.158067
 H 0.904943 2.381559 -2.820411
 H 1.452445 0.071228 -3.220207

Y_{Ph}SiPyr

E = -1863.14632866

P -1.081886 -0.113557 -0.041038
 C 0.460936 -0.004014 -0.742748
 C 1.238848 1.236678 -0.666043
 C 1.073314 2.199684 0.346216
 C 1.839771 3.357670 0.384719
 C 2.826918 3.587168 -0.567312
 C 3.031057 2.634353 -1.562107
 C 2.249386 1.489891 -1.615115
 C -1.170824 -0.345924 1.771679
 C -2.363168 -0.258978 2.499542
 H -3.296841 -0.017661 1.991864
 C -2.357420 -0.470885 3.871974
 H -3.285860 -0.403829 4.436048
 C -1.161749 -0.764559 4.524601
 H -1.158424 -0.927772 5.600881
 C 0.024391 -0.843474 3.804760
 H 0.959396 -1.067846 4.314400
 C 0.026363 -0.633981 2.428202
 H 0.958134 -0.689418 1.859407
 C -1.949661 -1.539853 -0.773534
 C -2.747402 -2.405743 -0.024839
 H -2.858339 -2.261153 1.046168
 C -3.384576 -3.477424 -0.640773
 H -3.998109 -4.151302 -0.046127
 C -3.229454 -3.695792 -2.004834
 H -3.725986 -4.538442 -2.482189
 C -2.427954 -2.842092 -2.755569
 H -2.290477 -3.014801 -3.821010
 C -1.789148 -1.770813 -2.144815
 H -1.138762 -1.116352 -2.723370
 C -2.107160 1.365240 -0.366262
 C -2.352763 2.337263 0.604997
 H -1.979250 2.205540 1.617810
 C -3.067740 3.485773 0.282990
 H -3.247526 4.239610 1.046839
 C -3.542681 3.673087 -1.009329
 H -4.102054 4.572386 -1.259996

C -3.295549 2.711470 -1.984240
 H -3.660146 2.855025 -2.999319
 C -2.577364 1.566670 -1.666085
 H -2.378454 0.824427 -2.435665
 C 3.113633 -1.358916 -0.436205
 C 4.358170 -0.816336 1.395836
 C 5.374199 -1.262453 -0.684205
 C 5.526172 -0.904970 0.648378
 N 4.183580 -1.488457 -1.226150
 N 3.165379 -1.041462 0.864969
 H 4.387853 -0.551986 2.455413
 H 6.502627 -0.707265 1.083793
 H 6.242633 -1.365988 -1.339252
 H 0.352987 2.020834 1.142418
 H 1.674716 4.079444 1.183753
 H 3.433573 4.489768 -0.530654
 H 3.802482 2.789012 -2.315332
 H 2.415816 0.768657 -2.415961
 Si 1.369184 -1.539498 -1.182232
 H 1.565803 -1.805594 -2.638300
 H 0.729953 -2.751978 -0.595786

$Y_{Ph}SiB^2$

E = -2006.09230180
 P -1.570822 -0.205367 -0.057180
 C -0.252881 0.214214 -1.028422
 C 0.379628 1.538643 -0.762395
 C 1.445870 1.676933 0.139666
 C 2.029153 2.914631 0.389793
 C 1.550278 4.052932 -0.250121
 C 0.488812 3.939797 -1.142955
 C -0.083441 2.699036 -1.397666
 C -1.205529 -0.829288 1.632436
 C -2.117818 -0.734855 2.687506
 H -3.086672 -0.262838 2.528852
 C -1.786630 -1.233599 3.941964
 H -2.498198 -1.155214 4.761911

C -0.543578 -1.825513 4.150824
 H -0.284280 -2.210490 5.135427
 C 0.368446 -1.916673 3.104923
 H 1.344158 -2.371882 3.264315
 C 0.040508 -1.417265 1.849035
 H 0.760878 -1.472087 1.033702
 C -2.584877 -1.491988 -0.839489
 C -3.195793 -2.511090 -0.108374
 H -3.046444 -2.576599 0.966819
 C -3.984965 -3.454491 -0.757298
 H -4.454072 -4.251265 -0.183529
 C -4.167081 -3.385690 -2.134195
 H -4.782246 -4.128137 -2.639179
 C -3.556940 -2.372318 -2.867423
 H -3.691159 -2.320538 -3.946015
 C -2.767262 -1.427675 -2.224501
 H -2.272101 -0.637301 -2.787126
 C -2.650417 1.223096 0.269691
 C -2.202441 2.216761 1.146011
 H -1.257147 2.091673 1.672683
 C -2.954890 3.368629 1.335367
 H -2.595473 4.142007 2.011110
 C -4.160358 3.533433 0.659949
 H -4.750131 4.435557 0.811603
 C -4.611836 2.545193 -0.208102
 H -5.556412 2.669565 -0.734043
 C -3.858066 1.393577 -0.407498
 H -4.213034 0.624786 -1.090908
 H 1.805621 0.793423 0.665920
 H 2.857359 2.988656 1.092826
 H 2.002298 5.023744 -0.054649
 H 0.105594 4.825098 -1.648127
 H -0.914306 2.608504 -2.095324
 Si 0.682676 -1.046279 -1.982932
 H 0.659269 -0.846541 -3.467205
 H 0.144279 -2.415269 -1.726630
 C 4.662478 -0.331401 -0.988239

C 4.253974 -1.081080 0.110842
 C 5.925475 0.222581 -1.064144
 C 5.085732 -1.314599 1.188415
 C 6.774815 -0.006634 0.020148
 H 6.231226 0.807307 -1.927367
 C 6.364607 -0.758190 1.121964
 H 4.752595 -1.901776 2.040195
 H 7.778970 0.411675 0.005061
 H 7.055326 -0.913995 1.947889
 B 2.582139 -0.966955 -1.324416
 O 2.971223 -1.490841 -0.091401
 O 3.639829 -0.268847 -1.884056

$Y_{Ph}SiB^1$

E = -2275.28042292
 P 1.767138 -0.707208 0.035126
 C 0.153152 -0.187989 0.207518
 C -0.256330 0.507596 1.433607
 C 0.617956 1.311999 2.196420
 H 1.652191 1.431477 1.883672
 C 0.193228 1.986297 3.333844
 H 0.908004 2.596414 3.884816
 C -1.129430 1.907473 3.759547
 H -1.464571 2.449014 4.641748
 C -2.007311 1.097400 3.042824
 H -3.041242 0.987480 3.367689
 C -1.574060 0.396296 1.926296
 H -2.267688 -0.277136 1.427974
 C 3.042872 0.604898 -0.068355
 C 4.372998 0.432769 0.319274
 H 4.698543 -0.501039 0.770161
 C 5.287434 1.465326 0.144951
 H 6.322417 1.327565 0.452130
 C 4.879099 2.670876 -0.416341
 H 5.596746 3.477726 -0.553574
 C 3.550578 2.850614 -0.787556
 H 3.222897 3.796508 -1.210379

C 2.629417 1.825536 -0.607013
 H 1.577430 1.965593 -0.860933
 C 1.954269 -1.645254 -1.506449
 C 2.628321 -1.126641 -2.610813
 H 3.095430 -0.146135 -2.553704
 C 2.693397 -1.861834 -3.789573
 H 3.216814 -1.453483 -4.651715
 C 2.089452 -3.111622 -3.867103
 H 2.140451 -3.683488 -4.791787
 C 1.420632 -3.633796 -2.763462
 H 0.946769 -4.611412 -2.822557
 C 1.352910 -2.904893 -1.584316
 H 0.824823 -3.305027 -0.720042
 C 2.358138 -1.870336 1.316171
 C 1.674171 -1.981754 2.528281
 H 0.803877 -1.359361 2.717785
 C 2.098304 -2.898277 3.484242
 H 1.561333 -2.975827 4.427473
 C 3.193266 -3.718202 3.234238
 H 3.518195 -4.438022 3.983213
 C 3.863396 -3.629213 2.018106
 H 4.707788 -4.283238 1.808940
 C 3.446541 -2.711755 1.061235
 H 3.957610 -2.664432 0.100287
 N -3.966542 0.342964 -0.479421
 C -3.724332 2.528015 -0.071429
 C -4.575983 1.484016 0.030013
 H -3.890550 3.569913 0.177396
 H -5.604852 1.478379 0.370610
 B -2.623588 0.683953 -0.890118
 N -2.539323 2.097918 -0.650143
 C -1.432850 2.956029 -0.803121
 C -0.947046 3.671065 0.292285
 C -0.845291 3.123374 -2.057573
 C 0.083329 4.586454 0.118736
 H -1.373505 3.484179 1.276684
 C 0.185445 4.041094 -2.223943

H -1.227979 2.550213 -2.899229
 C 0.637350 4.790410 -1.141460
 H 0.456456 5.141569 0.977133
 H 0.624662 4.183214 -3.209731
 H 1.425906 5.528260 -1.277858
 C -4.553917 -0.929941 -0.381874
 C -4.422920 -1.846417 -1.427060
 C -5.267171 -1.296689 0.762424
 C -4.985735 -3.110943 -1.321231
 H -3.882812 -1.549797 -2.322968
 C -5.839868 -2.559054 0.855109
 H -5.350376 -0.591854 1.587375
 C -5.699922 -3.473373 -0.183264
 H -4.874132 -3.816111 -2.142750
 H -6.389673 -2.832967 1.753715
 H -6.145580 -4.462955 -0.106877
 Si -1.040022 -0.511406 -1.184653
 H -1.501012 -1.934493 -1.277683
 H -0.393067 -0.256178 -2.510327

(Y_{PhF})₂Si

E = -3900.82263892
 P 3.002688 0.852097 -0.129381
 P -2.988565 1.007307 -0.038192
 C 1.488788 0.339696 -0.727891
 C 1.204431 -1.018491 -1.157918
 C 1.635421 -2.188547 -0.520221
 C 1.187899 -3.452498 -0.871015
 C 0.271422 -3.607606 -1.904080
 C -0.152042 -2.479320 -2.594862
 C 0.341651 -1.234036 -2.243404
 C 3.158558 1.065536 1.676078
 C 3.400051 -0.035903 2.503438
 H 3.641622 -1.002411 2.071201
 C 3.312948 0.094081 3.882793
 H 3.495050 -0.772291 4.514505
 C 2.971375 1.315866 4.451489

H 2.892930 1.410638 5.532855
 C 2.724295 2.413657 3.635544
 H 2.451683 3.371536 4.074302
 C 2.817259 2.291991 2.254922
 H 2.608085 3.152301 1.623700
 C 3.437840 2.486068 -0.818489
 C 4.509373 3.220507 -0.302519
 H 5.052787 2.852440 0.566976
 C 4.878098 4.421018 -0.894479
 H 5.711663 4.990889 -0.488608
 C 4.181844 4.894264 -2.004419
 H 4.470219 5.837814 -2.464074
 C 3.124785 4.159354 -2.527087
 H 2.582768 4.522704 -3.397815
 C 2.756660 2.952289 -1.941628
 H 1.942683 2.359247 -2.354537
 C 4.364628 -0.212402 -0.683931
 C 4.275342 -0.792965 -1.952083
 H 3.385751 -0.633390 -2.556927
 C 5.324840 -1.560823 -2.440178
 H 5.245912 -2.016504 -3.425073
 C 6.472320 -1.743469 -1.675263
 H 7.291935 -2.348170 -2.058579
 C 6.574852 -1.145178 -0.424408
 H 7.475642 -1.275633 0.171890
 C 5.526562 -0.378597 0.071565
 H 5.616450 0.089951 1.048973
 C -1.378201 0.493867 0.174804
 C -1.103176 -0.752650 0.886119
 C -0.214625 -0.778891 1.970925
 C 0.170731 -1.956970 2.592275
 C -0.343921 -3.172517 2.156387
 C -1.257235 -3.186496 1.111943
 C -1.612829 -1.995482 0.498203
 C -4.038486 0.412709 1.327821
 C -4.149272 1.139418 2.514682
 H -3.683093 2.117797 2.602184

C -4.863493 0.619587 3.586965
 H -4.951897 1.196241 4.505516
 C -5.462214 -0.632410 3.487170
 H -6.017331 -1.039489 4.330129
 C -5.350827 -1.362119 2.309159
 H -5.814625 -2.342964 2.226348
 C -4.645833 -0.842410 1.229449
 H -4.563728 -1.414163 0.307970
 C -3.020359 2.827259 -0.029643
 C -3.778292 3.577004 -0.930493
 H -4.376991 3.078659 -1.688603
 C -3.753654 4.965820 -0.872601
 H -4.340733 5.544439 -1.582977
 C -2.975892 5.613509 0.081081
 H -2.956907 6.701055 0.120449
 C -2.213984 4.871140 0.977521
 H -1.594916 5.373423 1.718068
 C -2.229890 3.483420 0.921233
 H -1.616064 2.893949 1.600619
 C -3.921156 0.507774 -1.527095
 C -5.311519 0.638818 -1.602471
 H -5.869835 1.041591 -0.757740
 C -5.982225 0.239577 -2.751640
 H -7.064536 0.338909 -2.809508
 C -5.271955 -0.300156 -3.822392
 H -5.802753 -0.623074 -4.716187
 C -3.890913 -0.437915 -3.744963
 H -3.328509 -0.876371 -4.566816
 C -3.216944 -0.030253 -2.599350
 H -2.141583 -0.146392 -2.518839
 Si 0.048927 1.484806 -0.464129
 H 0.570854 2.559079 0.444381
 H -0.428252 2.243492 -1.664701
 F 2.447190 -2.099436 0.537391
 F 1.569004 -4.508322 -0.166476
 F -0.190828 -4.807357 -2.218598
 F 0.029224 -4.301753 2.737053

F -1.721970 -4.339481 0.652004
 F -1.012993 -2.594167 -3.597844
 F -2.430981 -2.071961 -0.555774
 F -0.050094 -0.185303 -2.972925
 F 0.275256 0.367652 2.436355
 F 1.017379 -1.942139 3.613265

Y_{PhF}SiCl

E = -2556.51391356
 P -0.995190 0.345950 0.079727
 C 0.069705 -0.664576 -0.810303
 C 1.509140 -0.444106 -0.724653
 C 2.098202 0.827239 -0.711986
 C 3.462243 1.035583 -0.578266
 C 4.315406 -0.052534 -0.455365
 C 3.780443 -1.335256 -0.472992
 C 2.409613 -1.511083 -0.581942
 C -0.132040 1.012170 1.530202
 C -0.217965 2.349214 1.916851
 H -0.826157 3.046808 1.346580
 C 0.497793 2.797710 3.021098
 H 0.431455 3.842530 3.317184
 C 1.304838 1.919890 3.736430
 H 1.867458 2.277241 4.596685
 C 1.405636 0.588569 3.344340
 H 2.048693 -0.097312 3.891786
 C 0.696260 0.135101 2.240155
 H 0.790930 -0.898330 1.908733
 C -2.411462 -0.635633 0.654240
 C -2.348919 -1.333468 1.861771
 H -1.512682 -1.183420 2.539497
 C -3.351715 -2.231779 2.197271
 H -3.296644 -2.773674 3.138963
 C -4.413289 -2.451162 1.325590
 H -5.188270 -3.170531 1.582527
 C -4.487086 -1.748948 0.128589
 H -5.318582 -1.914276 -0.553190

C -3.495525 -0.834830 -0.204890
 H -3.556077 -0.288450 -1.143939
 C -1.779552 1.732056 -0.801061
 C -1.353536 2.054103 -2.087137
 H -0.534646 1.487508 -2.527167
 C -1.975463 3.083819 -2.785365
 H -1.641752 3.334666 -3.790128
 C -3.022630 3.787930 -2.201517
 H -3.508890 4.592355 -2.750162
 C -3.458352 3.460772 -0.919504
 H -4.285095 4.005251 -0.467708
 C -2.843370 2.430201 -0.221108
 H -3.197921 2.157301 0.772648
 Cl -1.257777 -3.692235 -0.596747
 Si -0.626252 -2.064564 -1.750037
 H 0.378226 -2.561585 -2.718225
 H -1.855103 -1.666593 -2.485475
 F 3.953852 2.265336 -0.578386
 F 5.621747 0.127825 -0.335246
 F 4.579816 -2.382014 -0.338429
 F 1.938234 -2.754544 -0.521612
 F 1.321062 1.906425 -0.849882

Y^{Ph}SiHMDS

E = -2970.31815159
 P -1.931361 -0.463916 -0.063493
 C -0.242309 -0.275091 0.012016
 C 0.317491 1.067611 -0.158304
 C -0.005869 2.155796 0.655985
 C 0.557477 3.413736 0.498953
 C 1.499752 3.620577 -0.500239
 C 1.842808 2.568827 -1.341728
 C 1.235860 1.332847 -1.179779
 C -2.894523 -0.453297 1.488769
 C -4.286984 -0.324074 1.491231
 H -4.825446 -0.207296 0.550982
 C -4.983291 -0.329895 2.693119

H -6.066513 -0.224931 2.693314
 C -4.293480 -0.462266 3.895915
 H -4.840194 -0.463697 4.837046
 C -2.908270 -0.581051 3.896807
 H -2.367727 -0.672790 4.836567
 C -2.207860 -0.571952 2.695348
 H -1.121434 -0.641985 2.681644
 C -2.323613 -2.053627 -0.863150
 C -3.342002 -2.901903 -0.426348
 H -3.935793 -2.643395 0.446407
 C -3.588416 -4.095194 -1.096827
 H -4.378956 -4.755850 -0.746726
 C -2.823246 -4.447602 -2.202900
 H -3.017389 -5.384025 -2.722536
 C -1.799848 -3.610024 -2.636761
 H -1.185893 -3.889622 -3.490493
 C -1.545613 -2.421474 -1.966522
 H -0.723296 -1.773777 -2.268483
 C -2.672320 0.872361 -1.051831
 C -3.113608 2.041661 -0.426921
 H -3.095631 2.118493 0.657662
 C -3.562502 3.111955 -1.192421
 H -3.898315 4.022191 -0.699840
 C -3.579078 3.020269 -2.579576
 H -3.932316 3.858865 -3.176529
 C -3.142386 1.856366 -3.204623
 H -3.155260 1.780563 -4.289947
 C -2.685970 0.786465 -2.445216
 H -2.342458 -0.119282 -2.939518
 N 2.558022 -1.213680 0.445132
 Si 3.596366 -1.752742 -0.879339
 Si 3.235665 -0.603440 1.960046
 C 2.572805 -2.596744 -2.209757
 H 2.178102 -3.561647 -1.871415
 H 1.730778 -1.973836 -2.532148
 H 3.211764 -2.778558 -3.084030
 C 4.577924 -0.353585 -1.662928

H 5.434442 -0.055757 -1.049126
H 4.974884 -0.701500 -2.626521
H 3.970437 0.535330 -1.860145
C 4.831020 -3.014931 -0.226660
H 5.453418 -3.406807 -1.042065
H 5.505364 -2.579931 0.522114
H 4.311882 -3.861051 0.241759
C 4.851865 0.302509 1.664962
H 5.192435 0.728566 2.618106
H 5.651508 -0.346762 1.289472
H 4.717338 1.128597 0.955713
C 3.540798 -2.024172 3.149980
H 3.968052 -1.664428 4.095389
H 2.603318 -2.546176 3.377989
H 4.235908 -2.755773 2.719867
C 2.061869 0.632622 2.752494
H 1.004881 0.347337 2.682361
H 2.309119 0.746142 3.816142
H 2.170951 1.615845 2.278605
Si 0.866295 -1.659093 0.535499
H 0.595934 -2.909598 -0.222084
H 0.615558 -2.038520 1.966680
F 1.529788 0.382338 -2.061180
F 2.719498 2.764625 -2.317791
F 2.056243 4.810752 -0.658324
F 0.223466 4.408471 1.308483
F -0.861508 1.983047 1.664906

$Y_{PhF}SiC_6F_5$

E = -2824.84605413
P 2.125337 -0.216359 -0.026978
C 0.466023 -0.512163 -0.273883
C -0.482792 0.582829 -0.480193
C -1.414122 0.541272 -1.526459
C -2.426974 1.477261 -1.676938
C -2.524010 2.532375 -0.777487
C -1.621485 2.615588 0.275398

C -0.644053 1.642412 0.421997
 C 3.212564 -0.897389 -1.326389
 C 4.549171 -0.495075 -1.420485
 H 4.949267 0.233360 -0.715590
 C 5.361492 -1.009869 -2.422091
 H 6.399817 -0.692244 -2.494585
 C 4.843832 -1.922781 -3.338015
 H 5.481363 -2.323858 -4.123602
 C 3.510915 -2.308359 -3.259686
 H 3.099769 -3.007397 -3.984999
 C 2.692172 -1.791204 -2.260262
 H 1.638877 -2.060661 -2.216822
 C 2.744394 -0.894169 1.544991
 C 3.955370 -1.575832 1.674712
 H 4.585198 -1.750314 0.806321
 C 4.351910 -2.055005 2.918807
 H 5.293102 -2.592658 3.014105
 C 3.545068 -1.856419 4.033431
 H 3.857457 -2.234757 5.004968
 C 2.331646 -1.186249 3.904929
 H 1.691399 -1.041062 4.772584
 C 1.925670 -0.711858 2.664735
 H 0.968244 -0.208527 2.548708
 C 2.507724 1.553406 -0.070862
 C 2.204752 2.248572 -1.245181
 H 1.772738 1.718094 -2.092886
 C 2.451524 3.612294 -1.324116
 H 2.209289 4.154079 -2.235995
 C 3.007659 4.282558 -0.237894
 H 3.200140 5.351785 -0.300906
 C 3.316954 3.589226 0.926843
 H 3.750320 4.113789 1.775786
 C 3.064951 2.224520 1.015658
 H 3.290443 1.685322 1.933269
 C -2.075788 -1.888609 0.303198
 C -4.403371 -1.773480 -0.398174
 C -3.703251 -0.609050 1.592548

C -4.701371 -0.964199 0.691152
 C -2.416706 -1.082912 1.383346
 C -3.099324 -2.223394 -0.575112
 F -2.852645 -2.962053 -1.647678
 F -1.474932 -0.700109 2.245282
 F -3.989138 0.166158 2.624718
 F -5.934560 -0.533861 0.873524
 F -5.357798 -2.104874 -1.250209
 F 0.126448 1.712565 1.505591
 F -1.725357 3.600328 1.153883
 F -3.468462 3.447265 -0.921453
 F -3.288674 1.380644 -2.677174
 F -1.368003 -0.469861 -2.392692
 Si -0.245652 -2.196457 -0.080353
 H 0.398840 -2.935148 1.041705
 H -0.212335 -3.105652 -1.257669

Y_{PhF}SiPy

E = -2343.99344619
 P -1.566115 -0.102628 0.093633
 C -0.013655 -0.521291 0.659677
 C 1.110999 0.397439 0.501183
 C 2.147612 0.412101 1.446388
 C 3.324437 1.124846 1.277453
 C 3.490950 1.922240 0.152842
 C 2.487416 1.950176 -0.806727
 C 1.342315 1.188866 -0.632609
 C -2.907260 -0.588409 1.235466
 C -4.127846 0.094246 1.201693
 H -4.265661 0.930962 0.518453
 C -5.161042 -0.269912 2.056431
 H -6.104241 0.271837 2.024018
 C -4.984327 -1.314197 2.957920
 H -5.792334 -1.597744 3.629509
 C -3.766370 -1.982699 3.011059
 H -3.614251 -2.787941 3.726740
 C -2.729869 -1.617773 2.159753

H -1.773726 -2.127755 2.241103
 C -2.029875 -0.830696 -1.516525
 C -3.348585 -0.863490 -1.979453
 H -4.157321 -0.464687 -1.371099
 C -3.637466 -1.419069 -3.219323
 H -4.665335 -1.440976 -3.576122
 C -2.614677 -1.955652 -3.996673
 H -2.843546 -2.396886 -4.965101
 C -1.304797 -1.936861 -3.531708
 H -0.504116 -2.365536 -4.131001
 C -1.006461 -1.375774 -2.294705
 H 0.021503 -1.369797 -1.928259
 C -1.756096 1.697214 -0.019930
 C -1.408252 2.447315 1.106448
 H -1.031655 1.940178 1.993757
 C -1.535569 3.829779 1.082143
 H -1.259687 4.413709 1.957820
 C -2.010639 4.465346 -0.061593
 H -2.108475 5.549116 -0.079750
 C -2.352749 3.718713 -1.183687
 H -2.713977 4.216178 -2.081425
 C -2.222223 2.334230 -1.168266
 H -2.466038 1.751837 -2.054154
 C 2.198943 -2.431418 0.199236
 C 4.583117 -2.659850 0.412434
 C 3.535755 -1.872413 -1.583934
 C 4.700554 -2.183383 -0.885590
 F 0.474989 1.159201 -1.646767
 F 2.649394 2.671664 -1.907228
 F 4.596177 2.635592 -0.008642
 F 4.276373 1.073115 2.197965
 F 2.042496 -0.354334 2.533606
 N 2.322611 -1.987890 -1.062543
 H 5.468346 -2.913129 0.993557
 H 5.673085 -2.048568 -1.353926
 H 3.592700 -1.501915 -2.609636
 C 3.312254 -2.789663 0.961347

H 3.179195 -3.132550 1.985699
 Si 0.453101 -2.285448 0.916249
 H -0.510793 -3.172129 0.198615
 H 0.511932 -2.790200 2.322113

Y_{PhF}SiPyr

E = -2360.05064089
 P 1.541561 -0.110088 -0.093860
 C -0.016694 -0.494520 -0.668540
 C -1.127417 0.431730 -0.468302
 C -2.151644 0.528482 -1.422818
 C -3.282716 1.311962 -1.248485
 C -3.426587 2.066813 -0.091296
 C -2.443919 1.994997 0.887472
 C -1.341776 1.175602 0.700623
 C 2.876081 -0.534669 -1.267328
 C 4.097714 0.143561 -1.196112
 H 4.238110 0.938363 -0.465127
 C 5.128329 -0.169205 -2.073580
 H 6.072122 0.368834 -2.011023
 C 4.947982 -1.156801 -3.036202
 H 5.753739 -1.400093 -3.726015
 C 3.728968 -1.819272 -3.126637
 H 3.573589 -2.579148 -3.889619
 C 2.694955 -1.505847 -2.251957
 H 1.738355 -2.009230 -2.363230
 C 2.015231 -0.917542 1.475087
 C 3.335227 -0.968879 1.932474
 H 4.141198 -0.537682 1.343043
 C 3.629276 -1.584220 3.142548
 H 4.658173 -1.620008 3.495197
 C 2.610571 -2.162022 3.895268
 H 2.843548 -2.649416 4.840279
 C 1.299363 -2.124551 3.435252
 H 0.502018 -2.584492 4.015557
 C 0.996168 -1.503810 2.228312
 H -0.031859 -1.479748 1.864202

C 1.732891 1.682116 0.108224
 C 1.385745 2.484516 -0.981967
 H 1.011515 2.019477 -1.893086
 C 1.510453 3.864325 -0.891865
 H 1.235043 4.488700 -1.739320
 C 1.982389 4.445445 0.281790
 H 2.078185 5.527285 0.351694
 C 2.324241 3.646845 1.367603
 H 2.683339 4.101782 2.288441
 C 2.196260 2.264332 1.286216
 H 2.439723 1.640797 2.143760
 C -2.216282 -2.454265 -0.296825
 C -4.434828 -2.901388 -0.523124
 C -3.557372 -2.091461 1.512116
 C -4.669994 -2.495295 0.783581
 F -0.490589 1.060684 1.722485
 F -2.588231 2.675505 2.016179
 F -4.490938 2.837838 0.080075
 F -4.214912 1.362413 -2.188532
 F -2.060367 -0.190369 -2.539801
 Si -0.484809 -2.232249 -1.054933
 H 0.478948 -3.163855 -0.393286
 H -0.560682 -2.639539 -2.484200
 N -2.343130 -2.067303 0.981155
 N -3.221235 -2.884095 -1.062788
 H -5.252653 -3.247591 -1.159141
 H -5.667891 -2.496781 1.215127
 H -3.650420 -1.771569 2.552294

$Y_{PhF}SiB^2$

E = -2502.99787334
 P -1.964949 -0.094406 0.083222
 C -0.473783 -0.442101 0.829099
 C 0.690114 0.411418 0.578092
 C 1.613725 0.675433 1.600923
 C 2.815227 1.337769 1.388034
 C 3.132019 1.803306 0.119957

C 2.241243 1.579567 -0.921622
 C 1.063929 0.887837 -0.687421
 C -3.397253 -0.209703 1.210815
 C -4.554487 0.529569 0.944698
 H -4.593443 1.187919 0.078060
 C -5.649953 0.449572 1.795656
 H -6.543240 1.033181 1.582081
 C -5.598503 -0.364187 2.922503
 H -6.454989 -0.424472 3.591170
 C -4.444164 -1.087620 3.201767
 H -4.391261 -1.712522 4.090845
 C -3.345063 -1.006651 2.354717
 H -2.438280 -1.551220 2.604747
 C -2.398474 -1.166089 -1.332783
 C -3.703245 -1.279142 -1.820944
 H -4.518129 -0.738762 -1.344626
 C -3.970411 -2.096456 -2.912130
 H -4.988130 -2.180604 -3.288153
 C -2.940464 -2.813480 -3.514359
 H -3.152851 -3.458465 -4.365018
 C -1.643591 -2.713184 -3.023246
 H -0.837455 -3.279492 -3.485097
 C -1.369778 -1.892393 -1.935256
 H -0.356461 -1.812352 -1.545153
 C -2.018257 1.626140 -0.485139
 C -1.712686 2.616608 0.452413
 H -1.453111 2.330548 1.470901
 C -1.732599 3.952932 0.077031
 H -1.490194 4.723321 0.806128
 C -2.057774 4.303803 -1.230516
 H -2.071499 5.351741 -1.523908
 C -2.358325 3.318008 -2.163874
 H -2.603519 3.592053 -3.187895
 C -2.335620 1.976957 -1.795733
 H -2.549422 1.203674 -2.530466
 C 3.333603 -1.671939 -0.592142
 C 3.874178 -1.645932 0.689296

C 4.028074 -1.201395 -1.689451
 C 5.135929 -1.145286 0.942900
 C 5.301493 -0.685255 -1.443744
 H 3.583163 -1.199849 -2.680805
 C 5.843539 -0.659427 -0.157534
 H 5.532463 -1.104622 1.953406
 H 5.878881 -0.282082 -2.272608
 H 6.834028 -0.236336 -0.006598
 B 1.782717 -2.295647 0.836215
 O 2.932149 -2.081125 1.575407
 O 2.051086 -2.129586 -0.518427
 F 0.312977 0.591016 -1.750309
 F 1.368778 0.213753 2.824466
 F 3.672916 1.504426 2.383816
 F 2.563163 1.951406 -2.152695
 F 4.282781 2.419100 -0.102567
 Si -0.104175 -2.133473 1.503260
 H -1.048272 -3.125105 0.904013
 H -0.202440 -2.317327 2.981641

$Y_{PhF}SiB^1$

E = -2772.18989022
 P -1.944282 0.947861 0.108366
 C -0.327915 0.472160 -0.108445
 C 0.314562 -0.412976 0.861335
 C -0.155841 -1.685910 1.191189
 C 0.556642 -2.566986 1.990997
 C 1.786602 -2.190694 2.511292
 C 2.281822 -0.923687 2.228322
 C 1.538704 -0.055523 1.445419
 C -3.283651 -0.035312 -0.648188
 C -4.620045 0.147157 -0.279210
 H -4.878170 0.869982 0.494475
 C -5.616740 -0.602337 -0.890639
 H -6.656471 -0.463369 -0.600549
 C -5.281599 -1.536258 -1.868357
 H -6.062799 -2.125909 -2.344718

C -3.951770 -1.726024 -2.226778
 H -3.687795 -2.466763 -2.978049
 C -2.950159 -0.979532 -1.615045
 H -1.900904 -1.141135 -1.858728
 C -2.149149 2.629814 -0.556412
 C -3.248496 3.023109 -1.321658
 H -4.029859 2.308272 -1.566172
 C -3.338742 4.329551 -1.788564
 H -4.195093 4.627985 -2.389974
 C -2.336702 5.248634 -1.496114
 H -2.410663 6.269640 -1.865902
 C -1.234225 4.859514 -0.742382
 H -0.440300 5.570601 -0.523797
 C -1.134899 3.553950 -0.279307
 H -0.261745 3.228952 0.284521
 C -2.384263 0.974997 1.876339
 C -2.872929 -0.185250 2.483638
 H -3.070722 -1.070614 1.883691
 C -3.100145 -0.210447 3.855149
 H -3.474328 -1.119561 4.321626
 C -2.850859 0.919409 4.625847
 H -3.032597 0.898390 5.698686
 C -2.369104 2.077589 4.023846
 H -2.176288 2.965593 4.622407
 C -2.130997 2.105538 2.655490
 H -1.752715 3.014163 2.193362
 N 3.547862 -0.095907 -1.086522
 C 3.245942 -2.310754 -1.001553
 C 4.117921 -1.313236 -0.734629
 H 3.393824 -3.380797 -0.913124
 H 5.135715 -1.382310 -0.368930
 B 2.210646 -0.332873 -1.568970
 N 2.082939 -1.771618 -1.536442
 C 0.992265 -2.558156 -1.943989
 C 0.599594 -3.689582 -1.224995
 C 0.302432 -2.218515 -3.110632
 C -0.477013 -4.452207 -1.658371

H 1.122637 -3.958744 -0.310501
 C -0.768688 -2.989635 -3.540977
 H 0.631933 -1.356487 -3.685194
 C -1.166384 -4.108758 -2.816270
 H -0.782350 -5.319436 -1.076494
 H -1.290597 -2.715114 -4.456227
 H -2.005190 -4.714226 -3.153770
 C 4.215654 1.131041 -0.907814
 C 4.128245 2.117407 -1.890221
 C 4.967727 1.371219 0.242973
 C 4.776143 3.333531 -1.716990
 H 3.555775 1.914673 -2.792529
 C 5.626481 2.583149 0.401629
 H 4.993261 0.619101 1.027511
 C 5.532793 3.570442 -0.574433
 H 4.698619 4.096377 -2.489438
 H 6.205052 2.762755 1.305844
 H 6.046761 4.520611 -0.444264
 Si 0.682242 0.978601 -1.589201
 H 1.201832 2.379551 -1.535823
 H -0.165144 0.947659 -2.824195
 F -1.300719 -2.121078 0.663255
 F 0.099445 -3.795892 2.202504
 F 2.488785 -3.035736 3.251670
 F 3.459429 -0.554086 2.718091
 F 2.034506 1.157936 1.216285

V^{Si}

E = -1279.05823590
 C 1.668230 2.181834 -0.003779
 C -0.475910 1.082643 -0.192618
 C -1.084619 2.318530 -0.374065
 C -0.324601 3.489363 -0.346434
 C 1.046363 3.421682 -0.150080
 H 2.749458 2.152146 0.133066
 H -2.156095 2.372741 -0.547826
 H -0.815745 4.450612 -0.483312

H 1.643795 4.330972 -0.118786
 N -1.128326 -0.161962 -0.210922
 C -2.509325 -0.340398 -0.062635
 C -3.279927 0.445634 0.805749
 C -3.138554 -1.388946 -0.745277
 C -4.635857 0.195603 0.963848
 H -2.801451 1.241851 1.369856
 C -4.492787 -1.642821 -0.568724
 H -2.551396 -1.999821 -1.429766
 C -5.254142 -0.847484 0.279969
 H -5.214683 0.817617 1.644832
 H -4.957488 -2.464475 -1.111158
 H -6.316900 -1.039514 0.411085
 C 0.936775 0.990675 -0.035504
 C 1.441287 -0.376715 0.039438
 P 3.071735 -0.802919 0.128039
 C 4.122467 -0.225106 -1.245904
 H 4.031125 0.862642 -1.333115
 H 5.174772 -0.492151 -1.095216
 H 3.751650 -0.671847 -2.174343
 C 3.957243 -0.240556 1.618757
 H 5.015686 -0.524511 1.594293
 H 3.874910 0.848642 1.696443
 H 3.470258 -0.681085 2.494944
 C 3.216222 -2.606274 0.126674
 H 4.266396 -2.911527 0.177865
 H 2.676959 -3.012199 0.989578
 H 2.767528 -3.001946 -0.791507
 Si 0.027058 -1.502462 -0.151051
 H -0.337554 -2.436067 0.959652
 H 0.015043 -2.376087 -1.372502

V^{Si}

E = -1858.30978327
 C 0.725090 2.865269 -0.062015
 C 0.314075 1.560083 0.175754
 C -0.853048 1.031245 -0.404758

C -1.590684 1.881759 -1.239864
 C -1.189666 3.190459 -1.465605
 C -0.028104 3.692251 -0.884090
 H 1.636798 3.211103 0.421154
 H -2.492399 1.496481 -1.710373
 H -1.788991 3.823526 -2.117551
 H 0.284019 4.718205 -1.065569
 N -1.259051 -0.292295 -0.186935
 S 1.270678 0.535353 1.273954
 O 2.578588 1.201485 1.445507
 O 0.440523 0.268197 2.444950
 C 1.475407 -0.893813 0.347554
 C -2.640078 -0.566808 -0.080224
 C -3.477373 0.262449 0.676759
 C -3.181643 -1.707424 -0.677493
 C -4.822359 -0.041673 0.815901
 H -3.052245 1.137494 1.163190
 C -4.528557 -2.017284 -0.516396
 H -2.544098 -2.348106 -1.285147
 C -5.357285 -1.184286 0.223438
 H -5.458612 0.611992 1.409977
 H -4.931333 -2.912425 -0.986834
 H -6.412107 -1.422302 0.342623
 P 2.983648 -1.052047 -0.439349
 C 3.440644 0.342611 -1.504226
 H 4.423197 0.187919 -1.964006
 H 2.675729 0.463478 -2.278754
 H 3.457824 1.238824 -0.875414
 C 2.965372 -2.513407 -1.501612
 H 2.214363 -2.389524 -2.287924
 H 3.953138 -2.648946 -1.954932
 H 2.711378 -3.396478 -0.906460
 C 4.359893 -1.255300 0.714824
 H 4.331631 -0.391372 1.387816
 H 4.197364 -2.168335 1.296736
 H 5.320285 -1.304334 0.189351
 Si -0.131798 -1.662083 0.006469

H -0.745946 -2.517852 1.048899
H -0.030035 -2.493307 -1.233155

VII^{Si}

E = -2620.39041897
C -0.398195 1.556905 -0.575182
C 0.398326 1.556886 0.575169
C 0.773188 2.773027 1.146164
C 0.386037 3.978775 0.577376
C -0.385793 3.978784 -0.577466
C -0.772981 2.773041 -1.146230
H 1.392569 2.746324 2.039222
H 0.691389 4.916080 1.038342
H -0.691094 4.916093 -1.038458
H -1.392339 2.746328 -2.039308
S -0.978930 0.097542 -1.507142
S 0.979019 0.097507 1.507183
O -2.179106 0.614205 -2.192395
O 0.178785 -0.315656 -2.321486
O -0.178626 -0.315435 2.321738
O 2.179373 0.614081 2.192197
C -1.402942 -1.134756 -0.439305
C 1.402826 -1.134917 0.439414
P 2.876356 -0.911205 -0.412667
P -2.876501 -0.911040 0.412697
C 2.954676 -2.034622 -1.818277
H 3.892900 -1.870076 -2.358848
H 2.902283 -3.072406 -1.476141
H 2.095736 -1.815739 -2.463004
C 3.081576 0.751549 -1.096241
H 3.075679 1.472590 -0.271987
H 4.027857 0.823008 -1.643971
H 2.232509 0.938072 -1.763874
C 4.334005 -1.200258 0.620051
H 4.329825 -2.243591 0.952341
H 5.264406 -0.976719 0.085772
H 4.224528 -0.551537 1.496054

C -2.955020 -2.034699 1.818090
H -3.893056 -1.869897 2.358910
H -2.903122 -3.072425 1.475703
H -2.095871 -1.816274 2.462672
C -3.081567 0.751635 1.096509
H -3.075246 1.472805 0.272374
H -4.028020 0.823214 1.643921
H -2.232671 0.937877 1.764456
C -4.334119 -1.199831 -0.620147
H -5.264548 -0.976393 -0.085870
H -4.224579 -0.550915 -1.495997
H -4.329953 -2.243089 -0.952679
Si -0.000114 -2.237453 -0.000035
H -0.428970 -3.131465 1.109294

VIII^{Si}

E = -1828.35408176
C 0.752359 3.036625 0.228358
C 0.223949 1.758168 0.260193
C -0.944900 1.344969 -0.381075
C -1.620665 2.317892 -1.118092
C -1.129558 3.621036 -1.169082
C 0.041941 3.984850 -0.501615
H 1.665694 3.287852 0.764324
H -2.544034 2.061632 -1.636510
H -1.674262 4.377384 -1.732086
H 0.395609 5.013000 -0.545818
B -1.223045 -0.220788 -0.105012
S 0.930774 0.309081 0.983194
O 1.825283 0.561988 2.114144
O -0.430214 -0.382482 1.281518
C 1.593138 -0.624383 -0.248639
C -2.722929 -0.713945 0.034552
C -3.654852 0.081782 0.716392
C -3.184719 -1.922191 -0.499165
C -4.980653 -0.309294 0.862515
H -3.328747 1.031167 1.141839

C -4.510860 -2.322484 -0.364180
 H -2.488164 -2.569275 -1.033029
 C -5.413633 -1.515478 0.319020
 H -5.681444 0.328452 1.399674
 H -4.840645 -3.267735 -0.793009
 H -6.452315 -1.824174 0.427267
 P 3.255194 -0.977597 -0.170395
 C 4.317879 0.486288 -0.070255
 H 5.376783 0.210638 -0.013254
 H 4.138620 1.117615 -0.946628
 H 4.031118 1.035010 0.833832
 C 3.698810 -1.881283 -1.666380
 H 3.481418 -1.255713 -2.538232
 H 4.759824 -2.151972 -1.652786
 H 3.085765 -2.787339 -1.724014
 C 3.735579 -2.001790 1.244844
 H 3.411749 -1.467722 2.145287
 H 3.197704 -2.953944 1.187873
 H 4.816601 -2.179372 1.276593
 Si 0.154947 -1.224332 -1.300333
 H 0.165496 -2.723334 -1.333597
 H 0.343057 -0.799533 -2.722829

IX^{Si}

Nicht gefunden.

3.7.1.2 Reaktionspfad B

Y₂Si

E = -4084.10313426
 C -4.019273 -2.434375 -1.351154
 H -3.836010 -3.194624 -0.595859
 C -3.073983 -1.436210 -1.537997
 C 3.480948 2.221129 -1.008235
 O -0.454220 -1.723033 -1.452160
 C 3.453095 2.466784 -2.378784
 H 2.575496 2.189234 -2.963445

C -2.805044 1.665469 3.476736
 H -3.825166 1.294498 3.404745
 C -5.183131 -2.414432 -2.110894
 H -5.936590 -3.186137 -1.955119
 C 2.127647 -4.808391 -2.130670
 H 1.323454 -5.335761 -2.639124
 C 1.834447 -3.654382 -1.415404
 H 0.810654 -3.289788 -1.351968
 C -2.027354 2.808438 -1.445765
 H -1.307276 2.043029 -1.739931
 C -2.753295 2.637748 -0.268968
 C -5.252406 0.692046 0.193364
 H -5.216931 1.539286 -0.487914
 C -6.420530 -0.053886 0.315229
 H -7.298289 0.221682 -0.266622
 C 3.432930 -5.283131 -2.201366
 H 3.654884 -6.185866 -2.767699
 C 2.002989 -0.180652 -0.970816
 Si 0.460919 -0.417254 -2.312055
 O 2.341289 1.376766 1.202696
 S 2.052157 1.486560 -0.238053
 P 2.457422 -1.486316 0.198867
 C 4.551020 3.068141 -2.972176
 H 4.543165 3.256444 -4.044887
 C 4.086862 -1.192955 2.462189
 H 3.242827 -1.575028 3.031676
 C 0.570190 -0.948072 2.164984
 H 0.741754 0.096633 1.945214
 C -5.331683 -1.516846 1.889893
 H -5.355630 -2.387953 2.541736
 C -4.160109 -0.783117 1.765478
 H -3.257835 -1.095096 2.291046
 C 4.172872 -3.458716 -0.813108
 H 4.976022 -2.955701 -0.282927
 C -1.999226 1.734587 2.340553
 C -3.268163 -0.437311 -2.486569
 H -2.512650 0.335605 -2.615902

C -3.638434 3.628562 0.164651
 H -4.184368 3.500047 1.099712
 C -4.120593 0.339259 0.928763
 C 0.150671 -3.638633 2.753773
 H -0.020720 -4.689730 2.974746
 C 1.231114 -1.937534 1.432379
 C 1.022233 -3.287959 1.733324
 H 1.532547 -4.066282 1.172814
 C 2.864680 -2.969463 -0.757888
 C 4.453674 -4.609811 -1.540279
 H 5.474848 -4.983032 -1.580822
 C -6.697936 -1.368371 -3.829422
 H -7.453812 -0.777139 -3.292759
 H -7.115734 -2.370424 -3.977247
 H -6.561765 -0.904200 -4.812492
 C -0.506304 -2.651897 3.481273
 H -1.191367 -2.933401 4.279180
 C 5.664604 3.452105 -2.213092
 C -6.464425 -1.151104 1.167654
 H -7.379592 -1.733411 1.258874
 C 6.238026 -0.187018 1.002807
 H 7.071777 0.213226 0.429403
 C -1.322696 0.138580 0.025565
 P -2.490524 1.119947 0.693983
 O -1.789170 -2.498380 0.454012
 S -1.645252 -1.346616 -0.454845
 O 0.918174 2.293153 -0.669907
 C -5.412861 -1.414804 -3.058205
 C -4.430605 -0.436727 -3.243098
 H -4.584180 0.345013 -3.986185
 C -2.207025 3.964971 -2.199068
 H -1.634592 4.102739 -3.114360
 C -3.103722 4.941378 -1.781047
 H -3.242251 5.843674 -2.374551
 C -3.819135 4.775589 -0.596291
 H -4.513016 5.545698 -0.264190
 C 5.058883 -0.528230 0.353583

H 4.981142 -0.388885 -0.724164
 C -0.292536 -1.310358 3.191587
 H -0.797681 -0.529072 3.757412
 C 3.980299 -1.036635 1.081024
 C 6.342322 -0.342755 2.381512
 H 7.263816 -0.069152 2.891780
 C 5.647497 3.215295 -0.838106
 H 6.501098 3.518221 -0.233159
 C 5.267028 -0.843631 3.107817
 H 5.344069 -0.960550 4.186777
 C -0.989389 2.518628 4.817558
 H -0.591498 2.810716 5.787882
 C -2.296726 2.056791 4.713214
 H -2.925849 1.993453 5.599374
 C 4.559523 2.600553 -0.226440
 H 4.536900 2.402047 0.842599
 C 6.836284 4.115307 -2.871742
 H 6.547441 5.080998 -3.306292
 H 7.231062 3.501204 -3.690702
 H 7.648155 4.296680 -2.160352
 C -0.192325 2.613594 3.678402
 H 0.831543 2.975930 3.746883
 C -0.696855 2.232056 2.443281
 H -0.074963 2.295271 1.552480
 H 2.833037 -0.194405 -1.692311
 H 1.292253 -1.503364 -3.008122

YSiCl

E = -2648.14565424
 C 2.404098 -0.634331 1.221779
 C 2.835093 0.599767 1.696053
 H 2.250924 1.139728 2.439969
 C -2.958271 3.510819 -1.099237
 H -3.905969 3.756595 -1.573189
 C -2.570962 2.181787 -0.995100
 H -3.229629 1.395980 -1.353813
 C -2.155744 4.519471 -0.577350

H -2.468779 5.558780 -0.653259
 C -0.371389 -0.084836 1.487602
 Si -1.931839 -0.483932 2.915491
 O 0.553475 -2.465466 0.922322
 S 0.856736 -1.319622 1.787480
 P -0.806540 0.142272 -0.224441
 C 4.025672 1.129100 1.217710
 H 4.363916 2.099764 1.577463
 C 0.805544 -1.313524 -1.961579
 H 0.155665 -2.146669 -1.707204
 C -2.485712 -2.077984 -0.052779
 H -2.143464 -2.190612 0.974641
 C -0.568387 2.870330 0.165919
 H 0.360458 2.629793 0.681937
 C -3.322723 -1.828951 -2.707720
 H -3.642761 -1.736690 -3.743366
 C -2.019952 -1.029126 -0.843464
 C -2.421886 -0.915829 -2.179439
 H -2.021334 -0.122322 -2.809333
 C -1.363310 1.857214 -0.376951
 C -0.963727 4.197995 0.061333
 H -0.342207 4.980548 0.490937
 C -3.804158 -2.866151 -1.912625
 H -4.507953 -3.584745 -2.328343
 C 4.806003 0.429864 0.291976
 C 2.515203 0.800483 -2.560692
 H 3.181932 1.629283 -2.790370
 O 0.959896 -1.465313 3.233977
 C 1.456858 0.996160 -1.682733
 H 1.302022 1.980130 -1.250211
 C -3.379376 -2.993647 -0.595559
 H -3.743617 -3.810639 0.022904
 C 0.590481 -0.058239 -1.383238
 C 2.714198 -0.443842 -3.149409
 H 3.538577 -0.591954 -3.844430
 C 4.370189 -0.829174 -0.127160
 H 4.972086 -1.395552 -0.836590

C 1.860773 -1.498470 -2.846093
H 2.016249 -2.476369 -3.297050
C 3.173187 -1.363901 0.327208
H 2.812536 -2.331316 -0.013186
C 6.065606 1.023953 -0.260704
H 6.857229 0.271841 -0.352894
H 6.437635 1.839652 0.367659
H 5.890825 1.433576 -1.265675
H -0.002091 0.869860 1.867436
H -1.466155 0.752665 3.680085
Cl -3.456520 0.598600 1.733474

YSiHMDS

E = -3061.94179912
C -2.382776 -2.219088 0.270588
C -2.089037 -3.383849 -0.430562
H -1.055242 -3.710478 -0.527705
C 0.617312 4.543055 -2.302803
H 1.028718 5.538460 -2.150785
C 0.279759 3.763528 -1.204417
H 0.445498 4.150156 -0.201892
C 0.444437 4.045242 -3.589873
H 0.718188 4.653109 -4.449922
C -0.504745 -0.249730 -0.414593
Si 1.036652 -1.337357 -1.436652
O -1.617378 -0.399444 2.010569
S -1.056759 -1.274368 0.970408
P -0.692124 1.478555 0.047301
C -3.134414 -4.086575 -1.012185
H -2.918952 -4.998586 -1.566904
C -2.917203 2.052151 1.692468
H -2.260888 1.881978 2.540708
C 1.301841 0.949947 1.873472
H 1.466938 0.025211 1.318845
C -0.406308 1.981366 -2.682512
H -0.779450 0.974315 -2.845415
C 0.935874 3.332387 3.288389

H 0.791475 4.258331 3.840994
 C 0.332854 1.871573 1.467124
 C 0.147529 3.062124 2.177491
 H -0.625277 3.767903 1.876308
 C -0.230702 2.477928 -1.388895
 C -0.071440 2.767994 -3.778123
 H -0.200852 2.371119 -4.782525
 C 1.896315 2.412595 3.698125
 H 2.505752 2.619901 4.575534
 C -4.457156 -3.645105 -0.900318
 C -4.627250 2.362681 -0.487944
 H -5.291151 2.480988 -1.341711
 O 0.014162 -2.189511 1.355782
 C -3.273320 2.131399 -0.696289
 H -2.890085 2.079521 -1.713670
 C 2.073925 1.226370 2.994760
 H 2.815135 0.499805 3.317919
 C -2.410006 1.969804 0.391894
 C -5.126607 2.449172 0.807110
 H -6.186520 2.633500 0.971349
 C -4.713381 -2.468932 -0.190206
 H -5.738392 -2.113527 -0.095655
 C -4.268360 2.300761 1.893108
 H -4.655759 2.363983 2.907876
 C -3.683315 -1.747653 0.399372
 H -3.876702 -0.832055 0.955897
 C -5.574138 -4.433055 -1.515130
 H -5.772092 -5.344840 -0.935670
 H -5.325091 -4.748710 -2.534994
 H -6.503052 -3.854810 -1.550965
 H -1.253942 -0.394438 -1.204223
 H 1.253873 -0.160982 -2.389951
 Si 3.763975 0.039993 -0.873429
 Si 3.118235 -2.651334 0.373294
 C 2.049389 -4.156706 0.039773
 H 1.034213 -4.031878 0.425042
 H 1.994711 -4.367880 -1.034977

H 2.510407 -5.020571 0.539621
 C 4.832972 -3.191601 -0.214245
 H 5.619317 -2.434077 -0.131801
 H 5.149362 -4.061742 0.377243
 H 4.782720 -3.508924 -1.264225
 C 3.191988 -2.320508 2.223051
 H 3.504830 -3.221344 2.767628
 H 3.905956 -1.522557 2.461027
 H 2.197675 -2.033366 2.585292
 C 3.042269 1.747772 -1.175748
 H 3.886053 2.441746 -1.298380
 H 2.428395 1.799426 -2.080648
 H 2.450091 2.107392 -0.327767
 C 4.708945 -0.412454 -2.435540
 H 3.998676 -0.529434 -3.265021
 H 5.423591 0.374721 -2.710653
 H 5.259849 -1.353607 -2.331165
 N 2.575623 -1.204273 -0.492881
 C 4.969068 0.311686 0.555478
 H 5.723028 1.049080 0.248236
 H 4.436236 0.728255 1.419904
 H 5.499156 -0.585902 0.888607

YSiB¹

E = -2863.81681644
 C -3.273487 1.259037 -1.309149
 C -3.001493 2.106994 -2.378155
 H -2.237551 1.832198 -3.100671
 C 3.438841 -0.591081 2.119304
 H 4.359785 -1.122457 1.894334
 C 2.244900 -1.035112 1.564873
 H 2.249152 -1.900180 0.906857
 C 3.454992 0.540486 2.925322
 H 4.391924 0.892302 3.352236
 C -0.880127 0.280616 -0.238553
 Si 0.398218 1.480660 -1.234109
 O -3.111795 -1.144210 -0.254195

S -2.356103 -0.246231 -1.143775
 P -0.498832 -0.895888 1.089856
 C -3.715047 3.291904 -2.479142
 H -3.510316 3.967608 -3.308178
 C -2.375506 -1.913884 2.921691
 H -2.030636 -2.901219 2.628635
 C -0.818846 -3.207249 -0.481765
 H -1.250430 -2.596244 -1.267056
 C 1.078445 0.786979 2.641195
 H 0.166134 1.336465 2.852494
 C 0.321665 -4.833602 1.484015
 H 0.769134 -5.463283 2.250099
 C -0.313555 -2.641360 0.687493
 C 0.260266 -3.461219 1.671287
 H 0.653977 -3.023885 2.587004
 C 1.053557 -0.360113 1.844967
 C 2.278037 1.237579 3.172823
 H 2.292519 2.138604 3.781429
 C -0.195230 -5.397794 0.320821
 H -0.153065 -6.475423 0.174478
 C -4.689233 3.635341 -1.535803
 C -3.338072 0.596894 3.633103
 H -3.715640 1.582245 3.898275
 O -2.004859 -0.716776 -2.482506
 C -2.310354 0.484848 2.705920
 H -1.921910 1.394839 2.251543
 C -0.758409 -4.585927 -0.653731
 H -1.149799 -5.018508 -1.570550
 C -1.808892 -0.772745 2.351806
 C -3.886842 -0.543854 4.208580
 H -4.696573 -0.456187 4.930079
 C -4.943596 2.753617 -0.482087
 H -5.710864 3.002214 0.249643
 C -3.405666 -1.796391 3.846626
 H -3.842048 -2.695041 4.277576
 C -4.240316 1.561541 -0.359532
 H -4.438521 0.859008 0.447595

C -5.440571 4.926201 -1.660787
 H -5.928627 5.006406 -2.639984
 H -4.762353 5.784442 -1.569651
 H -6.210460 5.021110 -0.888470
 H -1.285166 1.098744 0.372132
 H 0.526885 2.373082 -0.005845
 N 3.453092 1.330532 -0.698709
 C 4.103711 -0.721969 -1.306508
 C 4.528893 0.459639 -0.818593
 H 4.700588 -1.578990 -1.592681
 H 5.546427 0.770684 -0.613676
 C 2.048730 -1.740412 -2.117589
 C 0.934065 -1.510970 -2.926896
 C 2.502920 -3.056452 -1.952956
 C 0.322008 -2.563779 -3.593963
 H 0.559636 -0.497673 -3.057234
 C 1.896725 -4.100606 -2.638845
 H 3.343674 -3.259657 -1.293093
 C 0.811544 -3.860318 -3.476030
 H -0.549123 -2.351840 -4.210071
 H 2.274387 -5.113548 -2.509057
 H 0.342670 -4.679118 -4.018633
 C 3.623431 2.638200 -0.221247
 C 2.842511 3.682092 -0.723479
 C 4.593292 2.931242 0.743902
 C 3.003382 4.974957 -0.244433
 H 2.120557 3.476647 -1.511604
 C 4.758714 4.229246 1.209406
 H 5.209389 2.129293 1.142935
 C 3.958946 5.259233 0.725704
 H 2.380623 5.771367 -0.647926
 H 5.517096 4.434278 1.963404
 H 4.086080 6.275110 1.094192
 N 2.730541 -0.666289 -1.529021
 B 2.233862 0.644547 -1.122065

(Y_{Ph})₂Si

E = -2906.96124534

P 2.645670 -0.415291 -0.066495

P -2.626953 -0.334784 -0.138956

C 1.272176 0.685330 -0.245277

C 1.584589 2.143411 -0.202182

C 2.196274 2.783080 -1.286798

H 2.447120 2.201634 -2.171853

C 2.446841 4.149382 -1.253931

H 2.922454 4.629589 -2.107546

C 2.067288 4.908181 -0.150441

H 2.245014 5.981790 -0.135718

C 1.440559 4.286964 0.924475

H 1.117577 4.872310 1.783084

C 1.212341 2.916932 0.900909

H 0.717542 2.436446 1.743918

C 3.690609 -0.597822 -1.527486

C 5.029627 -0.975440 -1.373217

H 5.452076 -1.099426 -0.378104

C 5.823735 -1.183427 -2.492917

H 6.865346 -1.472783 -2.369651

C 5.289463 -1.014900 -3.767410

H 5.915985 -1.173308 -4.643368

C 3.959518 -0.640044 -3.921626

H 3.538394 -0.502561 -4.915422

C 3.153717 -0.432646 -2.807354

H 2.109925 -0.124472 -2.935977

C 1.981439 -2.041448 0.365920

C 2.127589 -3.141836 -0.477697

H 2.644354 -3.034577 -1.428781

C 1.603068 -4.373645 -0.102158

H 1.716241 -5.229477 -0.764470

C 0.938059 -4.512261 1.112012

H 0.533595 -5.479638 1.403593

C 0.784019 -3.412965 1.952236

H 0.259002 -3.510210 2.899106

C 1.299055 -2.178207 1.579409

H 1.181259 -1.324300 2.243817
 C 3.797106 0.043633 1.268663
 C 4.348535 1.332545 1.247963
 H 4.106771 2.021692 0.442310
 C 5.211239 1.736620 2.257790
 H 5.627957 2.741317 2.234032
 C 5.539836 0.865091 3.291841
 H 6.215153 1.186625 4.082376
 C 5.009805 -0.419749 3.308240
 H 5.273724 -1.110625 4.106552
 C 4.143278 -0.832771 2.301703
 H 3.746378 -1.844367 2.320017
 C -1.620884 0.821219 -0.858728
 C -1.848526 2.250216 -0.612134
 C -1.351678 3.214011 -1.519190
 H -0.820300 2.863102 -2.403306
 C -1.500292 4.573316 -1.303868
 H -1.087854 5.272964 -2.030377
 C -2.164814 5.052784 -0.174864
 H -2.276903 6.121805 -0.004398
 C -2.678980 4.129786 0.727091
 H -3.205496 4.471244 1.618010
 C -2.522188 2.764438 0.516987
 H -2.928837 2.080117 1.260765
 C -4.366946 0.230090 -0.050646
 C -4.809405 1.077160 -1.072264
 H -4.104140 1.390688 -1.840076
 C -6.124119 1.523827 -1.089524
 H -6.456797 2.188124 -1.884678
 C -7.007485 1.135266 -0.086844
 H -8.036774 1.489313 -0.098785
 C -6.570243 0.301077 0.935814
 H -7.255348 0.000454 1.726423
 C -5.253979 -0.149361 0.956782
 H -4.920489 -0.789925 1.769455
 C -2.716782 -1.913661 -1.051518
 C -1.819771 -2.951964 -0.790163

H -1.067038 -2.832377 -0.015737
 C -1.876432 -4.128350 -1.526282
 H -1.170602 -4.928726 -1.313042
 C -2.822592 -4.276327 -2.535835
 H -2.864998 -5.198101 -3.113413
 C -3.712518 -3.243082 -2.806467
 H -4.453434 -3.351241 -3.596142
 C -3.661401 -2.066751 -2.066692
 H -4.363189 -1.263712 -2.280538
 C -2.245185 -0.884214 1.586904
 C -2.713745 -2.075975 2.148127
 H -3.322563 -2.753626 1.551158
 C -2.402133 -2.403396 3.463124
 H -2.771384 -3.333533 3.892194
 C -1.616533 -1.545523 4.229555
 H -1.375030 -1.802370 5.259591
 C -1.144011 -0.359113 3.677443
 H -0.532578 0.316367 4.273496
 C -1.455752 -0.032930 2.360810
 H -1.090857 0.891400 1.913646
 Si -0.075115 0.302336 -1.845350
 H -0.069760 -1.197447 -1.548517
 H 0.649154 0.398937 0.611310

Y_{Ph}SiCl

E = -2059.57243373
 P 0.584840 0.145781 -0.081250
 C -0.746242 -0.359375 -1.164495
 C -2.113995 0.118994 -0.824977
 C -3.013056 0.386875 -1.864320
 H -2.686687 0.242139 -2.893464
 C -4.309396 0.802532 -1.598606
 H -4.988889 1.001585 -2.425578
 C -4.744507 0.959554 -0.285282
 H -5.762282 1.283084 -0.077038
 C -3.865166 0.690360 0.755756
 H -4.189402 0.802399 1.788798

C -2.567055 0.272376 0.488826
 H -1.896907 0.074973 1.324553
 C 2.107373 0.256849 -1.054259
 C 2.639014 1.491111 -1.432566
 H 2.162391 2.416092 -1.115888
 C 3.789708 1.536564 -2.211961
 H 4.203643 2.499035 -2.505170
 C 4.408963 0.357027 -2.610560
 H 5.309445 0.396382 -3.220599
 C 3.882232 -0.872933 -2.227655
 H 4.365929 -1.796699 -2.537937
 C 2.734414 -0.930588 -1.447791
 H 2.304909 -1.890872 -1.160815
 C 0.952704 -0.979929 1.277549
 C 2.209643 -0.913759 1.890254
 H 2.964877 -0.222547 1.518702
 C 2.498840 -1.744906 2.964382
 H 3.476392 -1.693766 3.439278
 C 1.544078 -2.649991 3.419970
 H 1.776644 -3.307801 4.255263
 C 0.302178 -2.726372 2.800108
 H -0.438296 -3.449351 3.134597
 C -0.000742 -1.893091 1.729559
 H -0.961969 -1.992911 1.228283
 C 0.279316 1.791976 0.615361
 C -0.361798 2.735763 -0.194211
 H -0.691206 2.462572 -1.195094
 C -0.605222 4.013568 0.289748
 H -1.110109 4.741686 -0.341299
 C -0.220885 4.353700 1.583555
 H -0.420383 5.353441 1.964281
 C 0.406193 3.414280 2.394043
 H 0.697659 3.675361 3.409203
 C 0.657063 2.133388 1.914218
 H 1.134995 1.397978 2.557158
 Cl -2.319390 -3.076876 -0.534275
 Si -0.572683 -2.377407 -1.643387

H -1.325428 -2.086970 -2.937393

H -0.432664 0.034228 -2.140853

Y_{Ph}SiHMDS

E = -2473.36838754

P -1.726105 0.173508 -0.156915

C -0.218486 -0.372666 -0.931875

C 0.256590 -1.684551 -0.411180

C 0.217757 -2.835741 -1.208816

H -0.129025 -2.755321 -2.238757

C 0.637463 -4.066887 -0.723562

H 0.599890 -4.941960 -1.370008

C 1.100762 -4.182846 0.583465

H 1.422531 -5.147768 0.970055

C 1.164476 -3.047710 1.383472

H 1.549447 -3.116682 2.399512

C 0.763869 -1.812355 0.887279

H 0.865473 -0.922872 1.503179

C -3.043734 -1.082067 -0.179962

C -4.064843 -1.124153 0.773941

H -4.061305 -0.428466 1.610814

C -5.086317 -2.059896 0.659596

H -5.876395 -2.088569 1.407184

C -5.097370 -2.956672 -0.403703

H -5.895926 -3.691226 -0.487171

C -4.088164 -2.913740 -1.359396

H -4.092937 -3.612720 -2.192982

C -3.066724 -1.979588 -1.249769

H -2.280418 -1.948096 -1.999189

C -2.409114 1.576700 -1.068309

C -3.617618 2.124595 -0.627906

H -4.111418 1.720994 0.255154

C -4.189090 3.187453 -1.312418

H -5.128118 3.613166 -0.965232

C -3.558953 3.704379 -2.441454

H -4.007179 4.537467 -2.979505

C -2.357604 3.160859 -2.880234

H -1.858957 3.568613 -3.756738
 C -1.775345 2.098040 -2.196410
 H -0.824124 1.694254 -2.536964
 C -1.549653 0.685248 1.565066
 C -1.571499 -0.270362 2.585154
 H -1.715898 -1.322132 2.345407
 C -1.399345 0.124865 3.906577
 H -1.411057 -0.620533 4.698782
 C -1.214876 1.469934 4.210946
 H -1.082009 1.777665 5.246385
 C -1.191530 2.421636 3.196928
 H -1.032308 3.470921 3.434701
 C -1.348548 2.034605 1.871641
 H -1.296594 2.767926 1.070885
 N 2.698187 0.502123 -0.321908
 Si 3.439656 0.810096 1.238696
 Si 3.664202 -0.055145 -1.682684
 C 2.188210 1.513321 2.454239
 H 1.770411 2.462079 2.098697
 H 1.342957 0.836004 2.633638
 H 2.687323 1.684286 3.418578
 C 4.157318 -0.740413 2.040388
 H 5.169967 -0.966715 1.689985
 H 4.208638 -0.597513 3.128416
 H 3.530495 -1.617003 1.840812
 C 4.825367 2.076457 1.072210
 H 5.285998 2.298938 2.044035
 H 5.618385 1.722753 0.400778
 H 4.432294 3.013629 0.656650
 C 5.180417 -1.026136 -1.122204
 H 5.724673 -1.365100 -2.014268
 H 5.877530 -0.433425 -0.517627
 H 4.896241 -1.914180 -0.544456
 C 4.285232 1.415359 -2.681070
 H 4.911160 1.090714 -3.523231
 H 3.445394 1.995241 -3.082342
 H 4.884379 2.084226 -2.049852

C 2.729524 -1.216594 -2.828373
H 1.739751 -0.829088 -3.095641
H 3.304636 -1.341139 -3.756129
H 2.607317 -2.204198 -2.369631
H -0.453697 -0.442297 -2.001868
Si 1.122530 1.327419 -0.693569
H 1.268282 1.371022 -2.224734

$Y_{Ph}SiB^1$

E = -2275.24619115
P 1.848560 -0.354494 0.060040
C 0.592347 0.766376 0.735687
C 0.096294 1.682995 -0.333466
C -0.704652 1.208192 -1.380361
H -1.042286 0.173084 -1.367805
C -1.078517 2.046636 -2.423992
H -1.699579 1.655973 -3.228030
C -0.666134 3.376533 -2.440447
H -0.957654 4.030722 -3.260034
C 0.100511 3.868275 -1.388353
H 0.405939 4.912792 -1.374779
C 0.473749 3.030677 -0.345964
H 1.076507 3.420944 0.472639
C 1.164397 -1.505937 -1.147436
C 1.273568 -1.277981 -2.522090
H 1.862377 -0.448658 -2.900862
C 0.623339 -2.116598 -3.418518
H 0.706532 -1.928946 -4.486871
C -0.133794 -3.185687 -2.948093
H -0.654185 -3.834555 -3.650441
C -0.216354 -3.436762 -1.583970
H -0.799224 -4.275540 -1.212932
C 0.434819 -2.607668 -0.677250
H 0.358313 -2.786435 0.393502
C 2.601895 -1.321171 1.379860
C 3.244501 -2.519303 1.058251
H 3.217502 -2.895475 0.037319

C 3.908825 -3.236642 2.048395
 H 4.399696 -4.174470 1.796540
 C 3.941438 -2.758289 3.352015
 H 4.458619 -3.322099 4.125877
 C 3.306303 -1.559058 3.671771
 H 3.321315 -1.188026 4.694182
 C 2.635993 -0.841546 2.693118
 H 2.111400 0.073228 2.959208
 C 3.208811 0.565469 -0.731659
 C 2.945610 1.474395 -1.767528
 H 1.936584 1.606827 -2.149672
 C 3.977480 2.225538 -2.316226
 H 3.757037 2.926918 -3.118198
 C 5.276892 2.089206 -1.840343
 H 6.081213 2.681960 -2.271732
 C 5.544300 1.195878 -0.809562
 H 6.557891 1.085036 -0.429687
 C 4.518391 0.439184 -0.255732
 H 4.740093 -0.252164 0.553360
 N -3.096531 1.396113 0.798794
 C -4.439039 -0.065258 -0.232176
 C -4.262294 1.237686 0.061491
 H -5.281742 -0.536129 -0.724440
 H -4.930094 2.065176 -0.145175
 B -2.465483 0.094225 0.981288
 N -3.391386 -0.806439 0.303517
 C -3.319499 -2.194898 0.094264
 C -3.729423 -2.746035 -1.124459
 C -2.882306 -3.053494 1.107608
 C -3.727668 -4.122647 -1.316525
 H -4.044528 -2.084372 -1.928357
 C -2.860093 -4.426814 0.900464
 H -2.576537 -2.633658 2.061188
 C -3.293264 -4.972801 -0.305395
 H -4.061612 -4.530389 -2.269258
 H -2.521971 -5.078704 1.704041
 H -3.293964 -6.051028 -0.453074

C -2.611397 2.674029 1.121126
 C -1.834764 2.872810 2.266364
 C -2.891516 3.768521 0.298222
 C -1.332530 4.132571 2.560973
 H -1.627275 2.024834 2.911480
 C -2.401826 5.030150 0.611767
 H -3.460841 3.623144 -0.616250
 C -1.611265 5.221078 1.738373
 H -0.727233 4.267042 3.456247
 H -2.625430 5.867331 -0.047441
 H -1.221899 6.208530 1.978358
 H 1.138250 1.353610 1.485189
 Si -0.662432 -0.513461 1.720254
 H -0.553491 0.204875 3.057920

V^{Si}

E = -1828.35408176
 C -1.924354 2.276573 -0.509017
 C 0.171948 1.087122 -0.140298
 C 0.675724 2.240297 0.489319
 C -0.101024 3.388190 0.575809
 C -1.393516 3.432342 0.058661
 H -2.945119 2.277166 -0.893736
 H 1.682178 2.237199 0.897951
 H 0.320235 4.272773 1.051622
 H -1.981702 4.345694 0.108101
 N 0.826705 -0.106819 -0.317795
 C 2.195969 -0.271734 -0.058414
 C 3.158923 0.648979 -0.493749
 C 2.633860 -1.430160 0.595620
 C 4.508781 0.429468 -0.251419
 H 2.837451 1.532731 -1.040257
 C 3.985642 -1.651396 0.823754
 H 1.890329 -2.159077 0.912480
 C 4.931979 -0.719234 0.409901
 H 5.239551 1.158309 -0.598649
 H 4.301780 -2.559316 1.334914

H 5.990755 -0.890108 0.593797
 C -1.171068 1.110893 -0.595714
 P -2.559352 -1.023699 0.271532
 C -1.465042 -1.249923 1.683150
 H -1.071330 -0.271770 1.981509
 H -2.011582 -1.707350 2.514527
 H -0.630474 -1.888406 1.371622
 C -3.987632 -0.087248 0.871754
 H -4.478017 -0.615976 1.696716
 H -3.645189 0.894556 1.215909
 H -4.702653 0.054040 0.053764
 C -3.155503 -2.641393 -0.252174
 H -3.642859 -3.163213 0.578030
 H -3.865217 -2.519211 -1.077837
 H -2.284251 -3.206673 -0.606300
 Si -0.040905 -1.351234 -1.439062
 H 0.212285 -0.607652 -2.753724
 C -1.679674 -0.225397 -1.059458
 H -2.350245 -0.187488 -1.928334

VI^{Si}

E = -1858.27449606
 C -0.590950 3.451798 0.179877
 C -0.354307 2.100013 -0.035544
 C -1.355955 1.206254 -0.446498
 C -2.652253 1.722066 -0.573086
 C -2.902714 3.066824 -0.342610
 C -1.878020 3.943283 0.014945
 H 0.235615 4.086201 0.492066
 H -3.451218 1.050211 -0.879130
 H -3.916360 3.445393 -0.463544
 H -2.085565 4.998475 0.175691
 N -1.030112 -0.106788 -0.784836
 S 1.187219 1.438709 0.502964
 O 2.139170 2.532143 0.694978
 O 0.890481 0.558172 1.653004
 C -1.774678 -1.151127 -0.225548

C -2.240604 -1.061174 1.095951
 C -2.020163 -2.333595 -0.937864
 C -2.936008 -2.114344 1.673749
 H -2.021070 -0.163304 1.670060
 C -2.702229 -3.388027 -0.343463
 H -1.667221 -2.412011 -1.964160
 C -3.170556 -3.288156 0.962830
 H -3.285004 -2.020687 2.701062
 H -2.882866 -4.295023 -0.918593
 H -3.711417 -4.113322 1.421217
 C 1.774904 0.331855 -0.771623
 H 2.511391 0.874050 -1.377415
 P 2.566387 -1.061472 0.027126
 C 3.715182 -0.578427 1.332807
 H 4.414341 0.164102 0.933478
 H 3.136499 -0.122778 2.141425
 H 4.266637 -1.452380 1.696934
 C 3.522826 -1.890347 -1.256909
 H 3.989263 -2.793830 -0.849370
 H 2.834023 -2.152910 -2.069048
 H 4.298284 -1.217259 -1.637696
 C 1.369769 -2.238568 0.665869
 H 1.899702 -3.075624 1.133386
 H 0.731181 -1.724668 1.390110
 H 0.756262 -2.599751 -0.168347
 Si 0.315041 -0.372987 -2.033592
 H 0.193755 1.004702 -2.659437

VII^{Si}

E = -2620.32742581
 C 0.410792 1.576775 0.521724
 C -0.396006 1.541189 -0.615971
 C -0.767284 2.742905 -1.217523
 C -0.375462 3.961766 -0.681766
 C 0.412023 3.992660 0.463166
 C 0.807360 2.803419 1.058641
 H -1.384757 2.685434 -2.110828

H -0.683845 4.888139 -1.162649
 H 0.724090 4.940865 0.895704
 H 1.438183 2.803654 1.944136
 S 0.931198 0.197885 1.573186
 S -0.927812 0.026523 -1.486687
 O 2.175864 0.678461 2.208213
 O -0.191173 -0.138461 2.446935
 O 0.324074 -0.377623 -2.172458
 O -2.050638 0.523040 -2.306364
 C -1.353892 -1.122650 -0.372235
 P -2.857595 -0.868974 0.404331
 P 2.806367 -0.927554 -0.456660
 C -2.986835 -1.877944 1.889363
 H -3.944621 -1.677645 2.382353
 H -2.911807 -2.937907 1.630236
 H -2.144967 -1.610882 2.537576
 C -3.144041 0.838272 0.950809
 H -3.117891 1.493874 0.073816
 H -4.116689 0.926487 1.447896
 H -2.337093 1.108982 1.640367
 C -4.276495 -1.255391 -0.657013
 H -4.239628 -2.318384 -0.917763
 H -5.232922 -1.017195 -0.177331
 H -4.144459 -0.666582 -1.571863
 C 2.829850 -2.070688 -1.840391
 H 3.738821 -1.894648 -2.427625
 H 2.797043 -3.097762 -1.466105
 H 1.925490 -1.883214 -2.430873
 C 2.973599 0.749101 -1.093113
 H 3.034881 1.446318 -0.252141
 H 3.901428 0.785722 -1.675336
 H 2.115424 0.972995 -1.732338
 C 4.287487 -1.207747 0.541100
 H 5.196648 -1.001908 -0.034288
 H 4.220746 -0.538683 1.406937
 H 4.302025 -2.247138 0.886876
 Si -0.048573 -2.514564 -0.074735

H -0.467505 -2.805214 1.367338
 C 1.388082 -1.243081 0.611664
 H 1.805563 -1.848874 1.431792

VIII^{Si}

E = -1828.30293237
 C -0.473809 3.424877 -0.473203
 C -0.130506 2.073875 -0.434160
 C 0.996011 1.517508 0.202310
 C 1.853698 2.453285 0.812106
 C 1.566394 3.804037 0.758942
 C 0.411091 4.301115 0.123132
 H -1.379503 3.764475 -0.971604
 H 2.754881 2.104619 1.314080
 H 2.255607 4.512219 1.216746
 H 0.222380 5.371803 0.097676
 B 1.017327 -0.061959 0.122821
 S -1.087291 0.732733 -0.908296
 O -2.029666 0.851348 -2.019186
 O 0.030387 -0.312830 -1.109707
 C 2.369818 -0.846191 -0.069459
 C 2.716914 -1.458519 -1.279766
 C 3.293028 -0.934335 0.981900
 C 3.928892 -2.124541 -1.435987
 H 2.020932 -1.407519 -2.116538
 C 4.511783 -1.585357 0.830113
 H 3.043504 -0.494583 1.949254
 C 4.835216 -2.186920 -0.382821
 H 4.170509 -2.594000 -2.389087
 H 5.209230 -1.634656 1.665443
 H 5.785316 -2.704811 -0.503876
 C -1.808769 0.102349 0.632630
 H -2.351298 0.922716 1.116857
 P -2.918352 -1.251635 0.283544
 C -4.374329 -0.762427 -0.673210
 H -4.949335 -0.026041 -0.100727
 H -4.037533 -0.303763 -1.607799

H -5.006123 -1.634075 -0.877707
 C -3.532864 -1.943129 1.827599
 H -4.266083 -2.728476 1.607884
 H -2.674795 -2.334939 2.384491
 H -4.007659 -1.148799 2.414190
 C -2.042327 -2.514629 -0.646212
 H -2.666545 -3.410599 -0.727254
 H -1.804798 -2.123376 -1.640927
 H -1.109069 -2.738164 -0.113654
 Si -0.259021 -0.634828 1.765016
 H -0.225223 0.622044 2.625456

IX^{Si}

E = -1279.10934965
 C -1.810379 2.169775 -0.410354
 C 0.313484 1.028014 -0.047919
 C 0.838023 2.248141 0.410753
 C 0.068336 3.402593 0.455736
 C -1.256804 3.368784 0.029175
 H -2.835275 2.165089 -0.777899
 H 1.875774 2.283215 0.739281
 H 0.500728 4.335899 0.813244
 H -1.857227 4.277019 0.027776
 B 1.128542 -0.304201 -0.231430
 C 2.675115 -0.403174 -0.069955
 C 3.536288 0.571577 -0.605551
 C 3.279448 -1.498886 0.571242
 C 4.918588 0.459279 -0.509812
 H 3.111309 1.427509 -1.129546
 C 4.659274 -1.606823 0.689325
 H 2.641504 -2.276161 0.991875
 C 5.487109 -0.627701 0.146583
 H 5.556934 1.225998 -0.947088
 H 5.094576 -2.463596 1.202108
 H 6.569199 -0.713520 0.232064
 C -1.045655 1.001970 -0.441438
 P -3.015840 -0.827546 0.091434

C -2.626622 -0.720757 1.846006
 H -2.422276 0.327021 2.093240
 H -3.466829 -1.090547 2.442716
 H -1.726288 -1.319907 2.026193
 C -4.541892 0.139183 -0.133910
 H -5.375144 -0.361421 0.372262
 H -4.419551 1.140214 0.288705
 H -4.771287 0.225675 -1.201742
 C -3.497349 -2.517359 -0.319307
 H -4.376611 -2.811492 0.264139
 H -3.730866 -2.575611 -1.388536
 H -2.649664 -3.176484 -0.100300
 Si -0.177692 -1.701244 -0.492539
 H -0.159942 -2.550571 -1.730596
 C -1.596344 -0.338878 -0.876932
 H -1.880199 -0.371154 -1.938559

3.7.1.3 Reaktionspfad C

VIII^{Si}

E = -1828.30293237
 C 0.478650 3.287544 0.259278
 C 0.065237 1.967947 0.251901
 C -1.149489 1.503143 -0.244472
 C -2.022367 2.460655 -0.755992
 C -1.655537 3.804892 -0.749783
 C -0.420388 4.220252 -0.248860
 H 1.449555 3.579322 0.653537
 H -2.988874 2.157565 -1.156311
 H -2.344962 4.550798 -1.141868
 H -0.161159 5.276894 -0.251545
 B -1.218428 -0.093771 -0.092232
 S 1.016673 0.573854 0.763572
 O 1.782171 0.731266 2.003629
 O -0.245383 -0.372298 1.006889
 C 1.834322 -0.074720 -0.536385
 C -2.582467 -0.882963 0.031442

C -3.652381 -0.331550 0.747884
 C -2.767473 -2.145843 -0.540563
 C -4.854735 -1.015998 0.894046
 H -3.540442 0.652504 1.203626
 C -3.965796 -2.837426 -0.400091
 H -1.955817 -2.592644 -1.115140
 C -5.014024 -2.272773 0.319444
 H -5.671335 -0.566919 1.457502
 H -4.085212 -3.818679 -0.857007
 H -5.954958 -2.809582 0.429254
 P 3.127083 -1.104390 -0.028407
 C 4.507575 -0.181983 0.686025
 H 5.307717 -0.859305 1.004725
 H 4.884674 0.518425 -0.066140
 H 4.122934 0.380973 1.542026
 C 3.772514 -1.992859 -1.456788
 H 4.106876 -1.270972 -2.208888
 H 4.610350 -2.625399 -1.143439
 H 2.974895 -2.600578 -1.896277
 C 2.660955 -2.350325 1.202899
 H 2.267917 -1.822908 2.079215
 H 1.863752 -2.972400 0.781904
 H 3.513751 -2.974204 1.493203
 Si 0.793199 -0.462650 -2.098610
 H 0.359123 0.956515 -2.399248
 H -0.646303 -0.648963 -1.202538

IX^{Si}

E = -1279.12258772
 C -1.810379 2.169775 -0.410354
 C 0.313484 1.028014 -0.047919
 C 0.838023 2.248141 0.410753
 C 0.068336 3.402593 0.455736
 C -1.256804 3.368784 0.029175
 H -2.835275 2.165089 -0.777899
 H 1.875774 2.283215 0.739281
 H 0.500728 4.335899 0.813244

H -1.857227 4.277019 0.027776
 B 1.128542 -0.304201 -0.231430
 C 2.675115 -0.403174 -0.069955
 C 3.536288 0.571577 -0.605551
 C 3.279448 -1.498886 0.571242
 C 4.918588 0.459279 -0.509812
 H 3.111309 1.427509 -1.129546
 C 4.659274 -1.606823 0.689325
 H 2.641504 -2.276161 0.991875
 C 5.487109 -0.627701 0.146583
 H 5.556934 1.225998 -0.947088
 H 5.094576 -2.463596 1.202108
 H 6.569199 -0.713520 0.232064
 C -1.045655 1.001970 -0.441438
 P -3.015840 -0.827546 0.091434
 C -2.626622 -0.720757 1.846006
 H -2.422276 0.327021 2.093240
 H -3.466829 -1.090547 2.442716
 H -1.726288 -1.319907 2.026193
 C -4.541892 0.139183 -0.133910
 H -5.375144 -0.361421 0.372262
 H -4.419551 1.140214 0.288705
 H -4.771287 0.225675 -1.201742
 C -3.497349 -2.517359 -0.319307
 H -4.376611 -2.811492 0.264139
 H -3.730866 -2.575611 -1.388536
 H -2.649664 -3.176484 -0.100300
 Si -0.177692 -1.701244 -0.492539
 H -0.159942 -2.550571 -1.730596
 C -1.596344 -0.338878 -0.876932
 H -1.880199 -0.371154 -1.938559

3.7.2 Bei Germylenen

3.7.2.1 Reaktionspfad A

Y_2Ge

E = -5872.42401869

C 4.647581 2.195040 0.442141
 H 4.554098 2.112197 1.522219
 C 3.565070 1.854431 -0.351951
 C -3.593929 -1.846227 -0.360378
 O 1.023532 2.301553 0.075003
 C -3.673369 -1.919974 -1.747746
 H -2.805715 -1.658315 -2.351619
 C 2.490497 -3.363800 2.369697
 H 3.376084 -3.788539 1.897434
 C 5.830240 2.607944 -0.163462
 H 6.687014 2.867393 0.457428
 C -1.188119 5.002996 -1.757141
 H -0.702780 5.943540 -1.505319
 C -1.432941 4.069225 -0.756421
 H -1.113133 4.266774 0.262888
 C 2.361575 -2.558361 -2.412720
 H 2.720926 -1.563069 -2.669209
 C 2.070232 -2.865416 -1.079359
 C 5.011406 -1.347346 -0.689388
 H 4.640288 -1.573481 -1.684754
 C 6.357825 -1.055645 -0.516715
 H 7.022777 -1.053123 -1.378051
 C -1.541227 4.729649 -3.072973
 H -1.346601 5.463692 -3.852771
 C -1.603829 0.143968 -0.356086
 O -2.404590 -1.086792 1.825290
 S -2.068102 -1.304966 0.402588
 P -2.340110 1.589880 0.187858
 C -4.863910 -2.310419 -2.338535
 H -4.932117 -2.364310 -3.424688
 C -4.637147 1.056755 1.677809
 H -3.958674 1.003463 2.524908
 C -0.707730 1.711370 2.406786
 H -0.198807 0.882993 1.932382
 C 5.994069 -0.763706 1.844213
 H 6.372104 -0.526293 2.836680
 C 4.643662 -1.048085 1.675722

H 3.967606 -1.007321 2.525441
 C -2.356150 2.566334 -2.405477
 H -2.748648 1.584524 -2.664917
 C 1.817490 -2.292243 1.773056
 C 3.642236 1.938267 -1.738814
 H 2.776710 1.671710 -2.343613
 C 1.510412 -4.102162 -0.762960
 H 1.215586 -4.320768 0.259533
 C 4.146031 -1.356979 0.407178
 C -2.007184 3.873296 3.571728
 H -2.517368 4.717669 4.031404
 C -1.807886 2.277033 1.778482
 C -2.467113 3.362310 2.365278
 H -3.339246 3.802463 1.882204
 C -2.041536 2.855935 -1.073552
 C -2.118900 3.505696 -3.398595
 H -2.367592 3.274788 -4.432479
 C 7.234075 3.080368 -2.202471
 H 7.065752 3.773332 -3.035330
 H 7.754678 2.204059 -2.613252
 H 7.911686 3.561459 -1.489359
 C -0.892303 3.307974 4.190590
 H -0.531764 3.718898 5.132092
 C -5.983031 -2.638719 -1.562493
 C 6.852896 -0.769830 0.751902
 H 7.908937 -0.542775 0.886113
 C -6.358834 1.095127 -0.507923
 H -7.026756 1.104881 -1.366910
 C 1.597557 -0.159162 -0.356576
 P 2.348844 -1.597946 0.185533
 O 2.386778 1.069828 1.830307
 S 2.046489 1.290899 0.409100
 O -1.057009 -2.325157 0.063613
 C 5.944301 2.680420 -1.550831
 C 4.828047 2.345339 -2.328023
 H 4.894632 2.407286 -3.413838
 C 2.145699 -3.499692 -3.408914

H 2.375592 -3.254613 -4.443881
 C 1.613917 -4.744582 -3.084748
 H 1.435817 -5.480299 -3.866890
 C 1.286800 -5.038175 -1.766587
 H 0.839369 -5.997348 -1.514832
 C -5.009945 1.373319 -0.683920
 H -4.641123 1.601629 -1.679440
 C -0.240214 2.228904 3.607637
 H 0.646142 1.791167 4.060777
 C -4.140227 1.367345 0.409224
 C -6.852581 0.807417 0.760698
 H -7.910529 0.590979 0.897414
 C -5.867003 -2.576425 -0.174858
 H -6.726067 -2.830489 0.445088
 C -5.989895 0.786017 1.849729
 H -6.366754 0.547171 2.842299
 C 0.895622 -3.334222 4.178284
 H 0.532986 -3.749480 5.117072
 C 2.027366 -3.880139 3.572679
 H 2.548471 -4.713497 4.040144
 C -4.679347 -2.180367 0.432380
 H -4.584141 -2.105774 1.512899
 C -7.277091 -3.021601 -2.215888
 H -7.965589 -3.484989 -1.501520
 H -7.117494 -3.724598 -3.042125
 H -7.780701 -2.140089 -2.636477
 C 0.230012 -2.268601 3.585974
 H -0.668740 -1.845452 4.028505
 C 0.700800 -1.745339 2.388857
 H 0.183288 -0.925772 1.908613
 Ge -0.004107 -0.011131 -1.427649
 H -0.149163 -1.255807 -2.314942
 H 0.141602 1.229348 -2.321392

YGeCl

E = -4436.42158259
 C -3.271691 0.314575 -1.434159

H -2.934033 -0.090930 -2.384851
 C -2.394460 1.076570 -0.679059
 O -0.652343 2.829808 -1.559528
 C 2.178345 -2.681515 -1.097330
 H 1.683468 -3.365205 -0.407874
 C -4.551565 0.071285 -0.947252
 H -5.241430 -0.532644 -1.535517
 C 0.825623 -0.233541 2.895124
 H -0.044999 0.396275 2.719155
 C 1.451046 -0.860532 1.811119
 C -1.621131 -1.799403 1.116452
 H -1.399990 -1.299926 2.055899
 C -2.787693 -2.542215 0.996998
 H -3.468970 -2.615391 1.842080
 C -2.215102 -3.078908 -1.280338
 H -2.450261 -3.569089 -2.222833
 C -1.049541 -2.329385 -1.170326
 H -0.393033 -2.208118 -2.027705
 C 1.897930 -1.310964 -1.052126
 C -2.786778 1.613765 0.542476
 H -2.086406 2.218607 1.115916
 C 2.604357 -1.615246 2.027261
 H 3.121755 -2.078544 1.191626
 C -0.740335 -1.699172 0.037052
 C -6.327213 0.269665 0.829780
 H -6.769038 1.143756 1.321889
 H -6.279278 -0.532672 1.579386
 H -7.009911 -0.059885 0.039607
 C -3.081826 -3.189076 -0.199468
 H -3.995710 -3.772961 -0.291470
 C 0.332367 1.024181 -0.015264
 P 0.732003 -0.636118 0.158295
 O -0.564243 0.436024 -2.410868
 S -0.746260 1.390453 -1.303520
 C -4.963980 0.575283 0.285887
 C -4.062323 1.356525 1.019199
 H -4.371097 1.771268 1.978176

C 1.331480 -0.385920 4.178359
 H 0.839602 0.106250 5.014751
 C 2.474252 -1.151690 4.390091
 H 2.875409 -1.264617 5.395348
 C 3.111548 -1.758331 3.314585
 H 4.015978 -2.341835 3.473253
 C 3.688284 -2.298861 -2.932263
 H 4.390589 -2.684936 -3.668754
 C 3.076582 -3.171929 -2.034466
 H 3.295910 -4.237123 -2.071006
 C 3.395649 -0.940962 -2.897880
 H 3.862711 -0.260542 -3.606447
 C 2.495730 -0.441551 -1.961956
 H 2.249221 0.617571 -1.941363
 Cl 2.958359 3.017824 -0.813763
 Ge 1.368349 2.493344 0.605829
 H 2.135053 2.108020 1.877256
 H 0.530681 3.754655 0.790993

YGeHMDS

E = -4850.22337441
 S -0.839816 -1.537662 -0.787306
 P -0.714099 1.232818 -0.065870
 Si 3.999319 0.322069 0.544701
 Si 3.367663 -2.513503 -0.427688
 O -0.031864 -2.757441 -0.643909
 O -1.028617 -0.974772 -2.137855
 N 2.904124 -1.049952 0.456049
 C -0.215138 -0.365585 0.290068
 C -2.483153 -1.952235 -0.213809
 C -2.688399 -2.248539 1.130049
 H -1.848359 -2.223391 1.822438
 C -3.965936 -2.554864 1.569620
 H -4.131406 -2.782177 2.622232
 C -5.049405 -2.579149 0.682227
 C -4.809327 -2.300588 -0.662637
 H -5.638944 -2.319054 -1.368376

C -3.532786 -1.985980 -1.117478
 H -3.339429 -1.745974 -2.160246
 C -6.432884 -2.876272 1.177586
 H -6.440898 -3.743051 1.849115
 H -7.120243 -3.079660 0.349952
 H -6.838284 -2.026778 1.744446
 C -2.494374 1.331861 -0.447229
 C -3.424682 1.283286 0.593923
 H -3.090137 1.251148 1.627919
 C -4.784448 1.276307 0.314464
 H -5.502463 1.237151 1.130952
 C -5.224196 1.320172 -1.005093
 H -6.290489 1.317787 -1.223363
 C -4.301276 1.353481 -2.043885
 H -4.641009 1.369475 -3.077498
 C -2.938280 1.349813 -1.770947
 H -2.217554 1.329193 -2.583666
 C 0.097261 2.002211 -1.497070
 C -0.332709 3.230684 -2.008876
 H -1.162377 3.758773 -1.539780
 C 0.279732 3.765557 -3.134232
 H -0.054363 4.721993 -3.531285
 C 1.309165 3.067737 -3.761612
 H 1.781558 3.481884 -4.650354
 C 1.724464 1.837882 -3.264175
 H 2.515348 1.282028 -3.764042
 C 1.122078 1.301623 -2.131362
 H 1.430968 0.332662 -1.740582
 C -0.435696 2.278642 1.392292
 C -0.726012 1.746754 2.652423
 H -1.072116 0.717554 2.730145
 C -0.545792 2.516072 3.794584
 H -0.768380 2.091795 4.771363
 C -0.068460 3.818373 3.688965
 H 0.080086 4.418258 4.584725
 C 0.230223 4.348700 2.438863
 H 0.618220 5.361423 2.352817

C 0.048315 3.583784 1.293121
 H 0.313758 3.999059 0.324750
 C 4.803843 0.681034 -1.119699
 H 5.527816 1.498456 -1.000909
 H 4.045493 1.014275 -1.837903
 H 5.332254 -0.169797 -1.560869
 C 3.089878 1.907342 0.986210
 H 3.804203 2.740124 0.929086
 H 2.650764 1.912852 1.990042
 H 2.294079 2.116576 0.262485
 C 5.323183 0.048201 1.849794
 H 5.960028 -0.812069 1.615588
 H 4.854668 -0.138284 2.825043
 H 5.967927 0.931779 1.947977
 C 2.894128 -2.322086 -2.233593
 H 3.358147 -1.425026 -2.665113
 H 1.805373 -2.227543 -2.320692
 H 3.209329 -3.187458 -2.831141
 C 2.627182 -4.061700 0.321986
 H 3.059913 -4.932455 -0.189510
 H 1.540769 -4.103125 0.213129
 H 2.886825 -4.137872 1.386095
 C 5.230803 -2.793260 -0.288269
 H 5.497637 -3.034731 0.748889
 H 5.863590 -1.961072 -0.613115
 H 5.492608 -3.664324 -0.904395
 Ge 1.282657 -0.965705 1.357718
 H 0.943753 -2.348646 1.920273
 H 1.478281 0.022992 2.517710

YGeC₆F₅

E = -4704.76238422
 C 3.381257 -1.953868 -1.450065
 H 3.001751 -1.711843 -2.439676
 C 2.501892 -1.975338 -0.379818
 O -0.006441 -2.786111 -0.321893
 C -0.196586 3.248594 -1.730127

H 0.614374 3.852950 -1.323802
 C 4.729399 -2.216124 -1.226301
 H 5.425410 -2.190207 -2.063822
 C 1.173029 1.900677 2.649372
 H 1.791614 1.005303 2.650347
 C 0.481905 2.265196 1.487941
 C 3.472254 1.378308 0.191027
 H 3.341463 1.339422 1.268275
 C 4.756508 1.398192 -0.334831
 H 5.613143 1.375816 0.335454
 C 3.845822 1.453513 -2.562780
 H 3.987636 1.470019 -3.641432
 C 2.556963 1.429509 -2.041819
 H 1.700172 1.397023 -2.709315
 C -0.387674 1.937484 -1.282980
 C 2.948164 -2.271019 0.904943
 H 2.241675 -2.285914 1.733259
 C -0.398175 3.346961 1.526146
 H -0.991804 3.601026 0.652468
 C 2.363482 1.407645 -0.658893
 C 6.663109 -2.763409 0.297279
 H 6.817511 -3.770485 0.705576
 H 7.080326 -2.055876 1.025421
 H 7.246839 -2.682031 -0.625271
 C 4.944980 1.441935 -1.712953
 H 5.952615 1.456198 -2.124060
 C 0.358407 -0.380886 0.482967
 P 0.676515 1.232058 0.007829
 O 0.725985 -1.053594 -2.028951
 S 0.777267 -1.590173 -0.656326
 C 5.208458 -2.495841 0.052224
 C 4.293997 -2.522968 1.113578
 H 4.648259 -2.747415 2.119185
 C 1.027026 2.642189 3.812772
 H 1.569170 2.351332 4.710108
 C 0.170896 3.739423 3.836353
 H 0.050073 4.316288 4.751177

C -0.548596 4.080954 2.698110
 H -1.243016 4.918142 2.720618
 C -2.071135 3.002564 -3.221624
 H -2.735133 3.421760 -3.975145
 C -1.040687 3.779279 -2.696545
 H -0.895177 4.800758 -3.042187
 C -2.245740 1.691129 -2.795366
 H -3.040963 1.079243 -3.216083
 C -1.397850 1.153754 -1.833703
 H -1.498200 0.119125 -1.516828
 Ge -0.883096 -0.968870 1.822174
 H -1.043819 0.098069 2.912796
 H -0.473783 -2.309054 2.427667
 C -2.641760 -1.142913 0.960005
 C -4.359297 -2.404340 -0.197818
 C -4.401434 0.005211 -0.268771
 C -4.949389 -1.221298 -0.627353
 C -3.270037 0.016521 0.532483
 C -3.215562 -2.351646 0.593073
 F -2.684564 -3.498272 0.981953
 F -2.745491 1.204882 0.851043
 F -4.896175 -3.562920 -0.541483
 F -6.030854 -1.261614 -1.385194
 F -4.949933 1.130969 -0.701089

YGePy

E = -4223.90829333
 C 3.584596 -0.795591 -1.518052
 H 3.233104 -0.459307 -2.490406
 C 2.682700 -1.383166 -0.645495
 O 0.725986 -3.010935 -1.309488
 C -1.614095 2.776917 -1.137090
 H -1.096436 3.462816 -0.466893
 C 4.905536 -0.623055 -1.116858
 H 5.613603 -0.150528 -1.796653
 C -0.054568 0.666177 2.901345
 H 0.765774 -0.028004 2.725622

C -0.754424 1.191878 1.810485
 C 2.328955 1.776119 0.798372
 H 2.148823 1.410944 1.805239
 C 3.537948 2.392852 0.506037
 H 4.289646 2.500058 1.285312
 C 2.825103 2.715427 -1.770696
 H 3.019505 3.072208 -2.780127
 C 1.614850 2.094276 -1.485191
 H 0.880601 1.941011 -2.271159
 C -1.363769 1.403304 -1.065397
 C 3.089319 -1.813426 0.613790
 H 2.365567 -2.269963 1.286717
 C -1.870088 1.997251 2.036104
 H -2.462236 2.357491 1.200096
 C 1.355556 1.631876 -0.193111
 C 6.752487 -0.814608 0.589620
 H 7.210649 -1.753268 0.925593
 H 6.801765 -0.114085 1.433971
 H 7.369022 -0.407903 -0.218564
 C 3.785718 2.867964 -0.777942
 H 4.734080 3.350919 -1.006145
 C 0.026356 -0.974504 0.137715
 P -0.191403 0.726353 0.147510
 O 0.839646 -0.701590 -2.337507
 S 0.975082 -1.576015 -1.155031
 C 5.336228 -1.027357 0.145678
 C 4.406652 -1.630960 1.002301
 H 4.725373 -1.960219 1.990913
 C -0.435285 0.985643 4.197585
 H 0.114533 0.570669 5.039764
 C -1.529958 1.815719 4.415826
 H -1.833511 2.061229 5.431734
 C -2.250629 2.310889 3.335301
 H -3.125700 2.935459 3.502722
 C -3.153325 2.395261 -2.948773
 H -3.857926 2.782570 -3.682542
 C -2.514152 3.269710 -2.072981

H -2.712248 4.338505 -2.124967
 C -2.879714 1.032994 -2.899241
 H -3.363037 0.350022 -3.594648
 C -1.980843 0.535322 -1.963150
 H -1.735454 -0.523057 -1.933538
 C -2.986934 -1.757567 0.285476
 N -3.470164 -0.580826 0.705397
 C -4.833963 -2.041624 -1.223554
 C -4.607592 -0.133390 0.190363
 C -5.330066 -0.822626 -0.778645
 H -5.364714 -2.612455 -1.984252
 H -4.963044 0.832304 0.558045
 H -6.254735 -0.408304 -1.174592
 C -3.645818 -2.519062 -0.682025
 H -3.221777 -3.465130 -1.013749
 Ge -1.209637 -2.167596 1.014026
 H -1.283376 -1.878210 2.522127
 H -0.814328 -3.621653 0.760786

YGePyr

E = -4239.96535233
 C 3.600325 -0.676343 -1.562231
 H 3.257313 -0.297511 -2.521975
 C 2.693171 -1.311253 -0.728893
 O 0.796158 -2.944702 -1.517201
 C -1.660681 2.808177 -0.929196
 H -1.153709 3.449172 -0.208534
 C 4.915904 -0.516261 -1.139511
 H 5.628550 -0.009377 -1.789137
 C -0.013467 0.376146 2.910765
 H 0.789024 -0.313743 2.653111
 C -0.723442 1.012966 1.887556
 C 2.306987 1.734487 0.892719
 H 2.131862 1.312929 1.878465
 C 3.502840 2.391471 0.635918
 H 4.251209 2.473501 1.421428
 C 2.785020 2.820492 -1.622245

H 2.972803 3.235671 -2.610339
 C 1.588372 2.159214 -1.373395
 H 0.858068 2.032352 -2.167832
 C -1.387345 1.437457 -0.963794
 C 3.089769 -1.800339 0.511725
 H 2.362856 -2.297526 1.151793
 C -1.808041 1.827514 2.210251
 H -2.406951 2.278171 1.424437
 C 1.339327 1.622069 -0.108368
 C 6.745093 -0.773467 0.576875
 H 7.172329 -1.699976 0.979208
 H 6.787457 -0.025176 1.380212
 H 7.391915 -0.425195 -0.234998
 C 3.741220 2.939668 -0.620377
 H 4.679023 3.454723 -0.820220
 C 0.016024 -1.014366 0.034140
 P -0.194509 0.680509 0.181844
 O 0.856644 -0.575486 -2.407403
 S 0.998529 -1.516055 -1.277507
 C 5.336350 -0.979237 0.106564
 C 4.402054 -1.629117 0.922857
 H 4.713399 -2.006711 1.896404
 C -0.356944 0.589120 4.239005
 H 0.199986 0.087801 5.027820
 C -1.422700 1.424802 4.555741
 H -1.697293 1.586795 5.596327
 C -2.150924 2.034871 3.540751
 H -3.002191 2.667340 3.784129
 C -3.186972 2.545243 -2.773029
 H -3.893977 2.977842 -3.478619
 C -2.566989 3.357819 -1.826860
 H -2.782742 4.424017 -1.795540
 C -2.888283 1.188573 -2.831080
 H -3.351908 0.556520 -3.585629
 C -1.985359 0.632642 -1.931594
 H -1.719870 -0.420406 -1.988638
 Ge -1.244411 -2.257879 0.798607

H -1.263825 -2.146106 2.334086
H -0.938936 -3.679736 0.347260
C -3.027462 -1.683251 0.178576
N -3.607114 -2.330071 -0.835215
N -3.514192 -0.576859 0.753311
C -4.747222 -1.834279 -1.301473
C -4.653008 -0.089160 0.280119
C -5.331001 -0.690336 -0.771984
H -5.212681 -2.368639 -2.133105
H -5.036466 0.818970 0.751924
H -6.261896 -0.286260 -1.162050

YGeB²

E = -4382.92514797
C 1.399389 -3.083104 -1.266606
H 1.052868 -2.782471 -2.252349
C 0.846118 -2.481937 -0.148184
O -1.648006 -1.796696 0.228640
C 1.343902 3.128408 -2.113908
H 2.422678 3.096871 -1.962338
C 2.398742 -4.036815 -1.099362
H 2.842408 -4.506225 -1.976524
C 2.115617 1.551035 2.472723
H 1.881548 0.493489 2.586521
C 1.847087 2.185929 1.254805
C 3.542027 -0.260433 -0.118977
H 3.548517 -0.110300 0.958273
C 4.537969 -1.022870 -0.713020
H 5.319373 -1.464041 -0.097785
C 3.522388 -0.672697 -2.869955
H 3.505713 -0.843251 -3.944483
C 2.517579 0.086033 -2.280199
H 1.703737 0.481320 -2.882507
C 0.503301 2.304079 -1.358032
C 1.267431 -2.828263 1.132320
H 0.820903 -2.342281 1.998408
C 2.099536 3.551387 1.120613

H 1.863929 4.064968 0.192552
 C 2.534786 0.308774 -0.902116
 C 3.950303 -5.397900 0.348682
 H 3.655100 -6.190718 1.047025
 H 4.853239 -4.927750 0.761001
 H 4.222913 -5.867657 -0.601893
 C 4.532946 -1.223150 -2.090542
 H 5.314789 -1.820800 -2.555459
 C 0.038270 0.101129 0.605579
 P 1.158486 1.180411 -0.092205
 O -0.395344 -0.896947 -1.793659
 S -0.412871 -1.229520 -0.359168
 C 2.852769 -4.392381 0.169513
 C 2.266453 -3.775909 1.282767
 H 2.602676 -4.046830 2.283076
 C 2.649754 2.271670 3.532577
 H 2.851913 1.771325 4.477311
 C 2.910750 3.630992 3.389918
 H 3.322837 4.196802 4.223202
 C 2.631078 4.268581 2.186850
 H 2.818337 5.334743 2.076963
 C -0.572627 3.990000 -3.288716
 H -0.994516 4.650456 -4.044087
 C 0.803970 3.973646 -3.073789
 H 1.457280 4.615277 -3.661768
 C -1.404794 3.155265 -2.552477
 H -2.477987 3.153534 -2.731416
 C -0.871090 2.305552 -1.588888
 H -1.515414 1.625982 -1.034601
 C -4.570114 -0.126226 -0.304534
 C -4.926220 -0.962887 0.750662
 C -5.362016 0.012984 -1.425953
 C -6.095348 -1.696496 0.734191
 C -6.546086 -0.728066 -1.453846
 H -5.067201 0.663709 -2.244905
 C -6.904896 -1.563289 -0.396767
 H -6.360812 -2.346844 1.563207

H -7.199221 -0.653428 -2.320757
H -7.833516 -2.127309 -0.453974
B -2.984469 -0.072220 1.205847
O -3.385705 0.477322 -0.008596
O -3.967047 -0.898688 1.715921
Ge -1.204305 0.498395 2.039744
H -1.090213 2.004211 2.348343
H -0.818129 -0.262356 3.327247

YGeB¹

E = -4652.10228587
C -4.161775 -1.042388 -1.042300
H -4.122630 -1.914020 -0.393363
C -2.974930 -0.514691 -1.523256
O -0.849877 -1.752209 -2.363566
C -0.303610 0.488461 3.730759
H -1.226420 1.051929 3.862779
C -5.363958 -0.430268 -1.380555
H -6.298243 -0.836832 -0.994681
C -0.684572 3.131343 -0.394107
H -1.133978 2.542676 -1.192189
C -0.347013 2.499676 0.806673
C -3.396580 1.632663 1.071449
H -3.050976 2.515227 0.538946
C -4.739558 1.509374 1.403582
H -5.437283 2.296736 1.125808
C -4.295184 -0.626292 2.428447
H -4.646332 -1.513573 2.951253
C -2.950990 -0.513035 2.096827
H -2.257054 -1.315099 2.335657
C 0.140661 0.162631 2.445041
C -2.978118 0.592024 -2.366059
H -2.034885 0.964977 -2.763041
C 0.266556 3.231001 1.822737
H 0.556138 2.745187 2.751049
C -2.497330 0.624061 1.422709
C -6.688276 1.394038 -2.506230

H -6.707182 1.762670 -3.538292
 H -6.839479 2.263339 -1.850507
 H -7.544370 0.725604 -2.365783
 C -5.188323 0.383376 2.085739
 H -6.240985 0.289565 2.346350
 C -0.391124 -0.049350 -0.518289
 P -0.744725 0.729853 0.957777
 O -1.757432 -2.270668 -0.044891
 S -1.417317 -1.289887 -1.087042
 C -5.394916 0.704169 -2.190864
 C -4.182253 1.199163 -2.686923
 H -4.188146 2.070192 -3.341576
 C -0.427655 4.484091 -0.567030
 H -0.691207 4.968919 -1.504777
 C 0.181411 5.212404 0.451069
 H 0.393326 6.270759 0.311538
 C 0.530354 4.584880 1.641063
 H 1.018979 5.148720 2.433075
 C 1.604008 -0.644662 4.672764
 H 2.174829 -0.960060 5.544191
 C 0.427897 0.083413 4.839892
 H 0.077925 0.333133 5.839654
 C 2.042839 -0.975593 3.396141
 H 2.956757 -1.550074 3.255784
 C 1.307865 -0.578618 2.283624
 H 1.630959 -0.856664 1.284032
 N 4.130955 -0.593319 -0.651889
 C 3.972273 -2.630786 0.246164
 C 4.796223 -1.573688 0.074134
 H 4.180749 -3.588752 0.708802
 H 5.836891 -1.469975 0.357901
 B 2.790618 -1.055260 -0.933979
 C 1.693963 -3.316537 -0.298945
 C 1.058937 -3.724365 -1.466855
 C 1.313801 -3.867827 0.926159
 C 0.047850 -4.674406 -1.410427
 H 1.349949 -3.280270 -2.414457

C 0.308937 -4.823724 0.974002
 H 1.803005 -3.535312 1.839328
 C -0.325008 -5.231424 -0.194694
 H -0.458842 -4.965682 -2.327468
 H 0.011229 -5.242510 1.933421
 H -1.121774 -5.971177 -0.153639
 C 4.707902 0.652276 -0.952112
 C 4.452393 1.259605 -2.183300
 C 5.533720 1.300257 -0.030793
 C 4.998843 2.501367 -2.477995
 H 3.834032 0.739196 -2.912354
 C 6.090925 2.534674 -0.339253
 H 5.716593 0.841764 0.938607
 C 5.823747 3.144044 -1.560717
 H 4.787247 2.963366 -3.440361
 H 6.730122 3.030096 0.389335
 H 6.257673 4.113263 -1.797218
 N 2.747838 -2.371415 -0.356465
 Ge 1.266102 0.212439 -1.501246
 H 1.749948 1.615361 -1.060337
 H 0.960337 0.304117 -3.005161

(Y^{Ph})₂Ge

E = -4695.22357507
 P -3.018558 -0.282921 -0.057149
 P 3.079889 -0.373285 -0.022236
 C -1.516421 0.044425 -0.773437
 C -1.215335 1.384737 -1.279794
 C -1.771290 2.562257 -0.749795
 H -2.432492 2.495462 0.111470
 C -1.446971 3.813526 -1.255832
 H -1.889493 4.701027 -0.806064
 C -0.536379 3.941792 -2.299375
 H -0.268876 4.923801 -2.684277
 C 0.027356 2.790168 -2.842465
 H 0.733600 2.868616 -3.669110
 C -0.313295 1.538333 -2.349508

H 0.107965 0.640436 -2.801760
 C -3.329199 0.220517 1.687342
 C -3.965064 1.420098 2.016152
 H -4.406982 2.033528 1.232777
 C -4.044673 1.837142 3.340584
 H -4.548543 2.771154 3.581716
 C -3.479688 1.067188 4.350943
 H -3.541181 1.394392 5.387060
 C -2.825481 -0.119725 4.031228
 H -2.370919 -0.721439 4.815848
 C -2.749252 -0.539007 2.709500
 H -2.228215 -1.464083 2.462237
 C -3.357185 -2.074479 -0.064448
 C -4.244367 -2.657330 0.842860
 H -4.691075 -2.057276 1.633064
 C -4.556626 -4.008379 0.745141
 H -5.244851 -4.455862 1.459607
 C -3.990206 -4.784790 -0.260126
 H -4.232666 -5.843439 -0.332620
 C -3.119597 -4.204219 -1.176705
 H -2.679874 -4.805163 -1.970213
 C -2.810513 -2.852741 -1.086769
 H -2.143496 -2.386915 -1.809712
 C -4.418122 0.421123 -0.992984
 C -4.220884 0.862101 -2.302175
 H -3.219084 0.858548 -2.723302
 C -5.302683 1.300790 -3.056920
 H -5.140061 1.654694 -4.072959
 C -6.585092 1.286126 -2.519255
 H -7.429780 1.629318 -3.113840
 C -6.789502 0.823742 -1.222806
 H -7.792990 0.797252 -0.802509
 C -5.710375 0.390631 -0.462421
 H -5.874992 0.023270 0.549635
 C 1.455480 0.023848 0.226270
 C 1.092269 1.287910 0.882453
 C 0.113612 1.287426 1.890174

H -0.302944 0.332595 2.202684
 C -0.316847 2.459328 2.493819
 H -1.087638 2.411515 3.261747
 C 0.242623 3.681688 2.127693
 H -0.088295 4.604520 2.600762
 C 1.227391 3.707106 1.145858
 H 1.663658 4.655661 0.835853
 C 1.634147 2.532504 0.523082
 H 2.353496 2.582580 -0.293692
 C 4.127304 0.062500 1.411553
 C 4.315640 -0.836584 2.463326
 H 3.921586 -1.847504 2.394224
 C 5.015596 -0.451165 3.599670
 H 5.165405 -1.164241 4.408063
 C 5.521756 0.840716 3.704292
 H 6.064167 1.143400 4.598053
 C 5.335083 1.742653 2.663416
 H 5.726147 2.755271 2.739482
 C 4.647376 1.355586 1.518895
 H 4.518413 2.062774 0.703123
 C 3.229602 -2.165922 -0.303788
 C 3.981049 -2.705867 -1.348286
 H 4.511188 -2.051250 -2.035050
 C 4.039131 -4.083933 -1.527230
 H 4.621518 -4.495109 -2.349452
 C 3.349876 -4.932010 -0.668078
 H 3.395024 -6.009703 -0.813881
 C 2.595332 -4.400303 0.372815
 H 2.044687 -5.057796 1.042517
 C 2.532314 -3.024956 0.553431
 H 1.923310 -2.603015 1.350735
 C 4.014049 0.394119 -1.407919
 C 5.409567 0.351590 -1.487050
 H 5.984688 -0.134568 -0.699380
 C 6.061794 0.936213 -2.565264
 H 7.148115 0.902665 -2.625893
 C 5.326622 1.572530 -3.563891

H 5.841071 2.035468 -4.404123
 C 3.940026 1.625575 -3.481841
 H 3.364298 2.133223 -4.253665
 C 3.285103 1.036511 -2.404389
 H 2.202467 1.086765 -2.304305
 Ge -0.000500 -1.094981 -0.369578
 H -0.467794 -2.126227 0.701232
 H 0.457189 -1.958384 -1.576480

Y_{Ph}GeCl

E = -3847.83356599
 P -0.574342 0.325892 0.058623
 C 0.707415 -0.301704 -0.883140
 C 1.986918 0.418149 -0.901391
 C 2.072279 1.810948 -0.702375
 H 1.165618 2.393414 -0.545641
 C 3.288925 2.479696 -0.699471
 H 3.302389 3.556663 -0.537549
 C 4.477556 1.789676 -0.906662
 H 5.431526 2.312894 -0.909590
 C 4.421674 0.412366 -1.098323
 H 5.339859 -0.155041 -1.243720
 C 3.208258 -0.260170 -1.085696
 H 3.213348 -1.344453 -1.183084
 C 0.067167 0.944223 1.651647
 C -0.384306 2.093890 2.299483
 H -1.161403 2.710084 1.854753
 C 0.179610 2.473192 3.513070
 H -0.173105 3.373559 4.012443
 C 1.195456 1.712302 4.080981
 H 1.636352 2.015039 5.028982
 C 1.659283 0.574017 3.429122
 H 2.467451 -0.013761 3.859477
 C 1.105722 0.193468 2.214307
 H 1.487878 -0.678380 1.681725
 C -1.791564 -0.968095 0.424820
 C -1.479911 -1.927400 1.391055

H -0.559062 -1.849047 1.963504
 C -2.330433 -3.004368 1.599857
 H -2.075848 -3.753464 2.346326
 C -3.494048 -3.129668 0.847746
 H -4.157325 -3.977347 1.009443
 C -3.808174 -2.176113 -0.114655
 H -4.714419 -2.276401 -0.708641
 C -2.959665 -1.096065 -0.329871
 H -3.199512 -0.361693 -1.095600
 C -1.545463 1.669149 -0.701896
 C -1.130815 2.147977 -1.944391
 H -0.240342 1.718098 -2.402866
 C -1.855119 3.149505 -2.582121
 H -1.524600 3.524210 -3.548780
 C -3.001786 3.664115 -1.988017
 H -3.570536 4.445307 -2.489052
 C -3.432989 3.173510 -0.757582
 H -4.340312 3.564949 -0.301481
 C -2.709847 2.176408 -0.115292
 H -3.061989 1.775830 0.834938
 Cl 1.522515 -3.392921 0.130343
 Ge 0.626943 -2.101818 -1.445741
 H 1.508767 -2.374772 -2.670107
 H -0.781390 -2.670288 -1.634178

Y_{Ph}GeHMDS

E = -4261.62255210
 P -1.825677 -0.104535 0.010642
 C -0.187649 0.295592 -0.152013
 C 0.215126 1.659764 -0.556024
 C -0.349987 2.827687 -0.016475
 H -1.118978 2.743732 0.748938
 C 0.068780 4.090174 -0.422425
 H -0.390118 4.973795 0.018638
 C 1.077994 4.229704 -1.369492
 H 1.412684 5.218167 -1.678092
 C 1.647818 3.085349 -1.922832

H 2.428391 3.174074 -2.677751
 C 1.214518 1.826464 -1.530546
 H 1.636058 0.936860 -1.988108
 C -2.766009 0.659826 1.396725
 C -4.111801 1.025108 1.339860
 H -4.682199 0.877225 0.425996
 C -4.726523 1.597477 2.449010
 H -5.774597 1.886032 2.395327
 C -4.005529 1.806767 3.619852
 H -4.489968 2.256647 4.484438
 C -2.660632 1.453624 3.679761
 H -2.088449 1.627967 4.588835
 C -2.041416 0.891396 2.570429
 H -0.980242 0.642050 2.599110
 C -1.958381 -1.891009 0.293468
 C -2.334754 -2.438148 1.517939
 H -2.633211 -1.788896 2.338171
 C -2.316388 -3.819399 1.693176
 H -2.601747 -4.245137 2.652962
 C -1.930131 -4.649719 0.648411
 H -1.913164 -5.728735 0.789953
 C -1.565960 -4.104130 -0.581058
 H -1.264307 -4.753894 -1.400119
 C -1.579339 -2.728872 -0.759983
 H -1.275803 -2.292920 -1.710590
 C -2.845273 0.201539 -1.469042
 C -2.445533 1.118285 -2.443652
 H -1.518670 1.671908 -2.323532
 C -3.230677 1.314468 -3.574545
 H -2.913098 2.031800 -4.328592
 C -4.408648 0.595648 -3.746739
 H -5.016822 0.750222 -4.636025
 C -4.803304 -0.329990 -2.786035
 H -5.716753 -0.905617 -2.922488
 C -4.024744 -0.528115 -1.652242
 H -4.328690 -1.265348 -0.910038
 N 2.829225 -0.389190 0.171830

Si 3.435029 -1.293914 -1.201526
 Si 3.796128 0.650445 1.208860
 C 1.990989 -2.131979 -2.071797
 H 1.554234 -2.938115 -1.470079
 H 1.191556 -1.411562 -2.292638
 H 2.334392 -2.565997 -3.019792
 C 4.305018 -0.220110 -2.485048
 H 5.346798 -0.013619 -2.217699
 H 4.311509 -0.749252 -3.447559
 H 3.801752 0.742592 -2.634602
 C 4.657453 -2.599407 -0.621327
 H 5.058510 -3.188384 -1.456721
 H 5.505946 -2.129598 -0.105189
 H 4.179556 -3.288593 0.086750
 C 5.352124 1.225610 0.328687
 H 5.923889 1.866490 1.013074
 H 6.004195 0.393200 0.035494
 H 5.116651 1.813906 -0.566148
 C 4.326441 -0.298235 2.744782
 H 4.947207 0.318542 3.408205
 H 3.454894 -0.638984 3.317603
 H 4.907721 -1.186091 2.462228
 C 2.827581 2.176499 1.715823
 H 1.858596 1.926885 2.165289
 H 3.399247 2.752431 2.456064
 H 2.632861 2.823873 0.851602
 Ge 1.114574 -0.762460 0.794871
 H 0.850844 -2.276074 0.717421
 H 1.180359 -0.413155 2.308793

$Y_{Ph}GeC_6F_5$

E = -4116.16452380
 P -1.815536 0.073315 0.024730
 C -0.281876 0.188355 -0.670014
 C 0.637363 1.293848 -0.293769
 C 1.192608 1.391350 0.993221
 H 0.887037 0.672276 1.752502

C 2.145674 2.354631 1.301629
 H 2.566065 2.397190 2.305315
 C 2.579038 3.246760 0.324507
 H 3.339196 3.990011 0.557177
 C 2.033292 3.176485 -0.952716
 H 2.363896 3.869184 -1.724756
 C 1.067947 2.221030 -1.252157
 H 0.648555 2.162270 -2.254704
 C -1.971669 -0.453590 1.777806
 C -3.037480 -0.058289 2.590450
 H -3.801839 0.611279 2.199160
 C -3.118812 -0.513858 3.901652
 H -3.947311 -0.199769 4.533783
 C -2.139361 -1.364262 4.406816
 H -2.202338 -1.714591 5.435431
 C -1.076667 -1.760342 3.600711
 H -0.305830 -2.420614 3.993126
 C -0.991883 -1.304735 2.289936
 H -0.153052 -1.598557 1.660350
 C -2.799601 -1.129029 -0.912507
 C -3.604400 -2.083337 -0.289172
 H -3.657824 -2.126298 0.796212
 C -4.326688 -2.990739 -1.056631
 H -4.945793 -3.738695 -0.565455
 C -4.252049 -2.949011 -2.444495
 H -4.815495 -3.663945 -3.041070
 C -3.454059 -1.996175 -3.070788
 H -3.392182 -1.962210 -4.156573
 C -2.729288 -1.087795 -2.309779
 H -2.095681 -0.342473 -2.788481
 C -2.692032 1.668561 0.007765
 C -2.218612 2.695673 0.831588
 H -1.388452 2.510764 1.511177
 C -2.805369 3.953503 0.783038
 H -2.426780 4.749402 1.421176
 C -3.873170 4.193653 -0.076450
 H -4.334137 5.178962 -0.110289

C -4.352731 3.172841 -0.889714
 H -5.191813 3.355283 -1.558291
 C -3.763101 1.913666 -0.852470
 H -4.141977 1.120030 -1.493194
 C 2.392128 -1.145875 -0.850916
 C 3.866018 -1.244296 1.081804
 C 4.418089 0.199423 -0.763442
 C 4.716600 -0.318309 0.490478
 Ge 0.548219 -1.302998 -1.540674
 H 0.629209 -1.231078 -3.078447
 H -0.031440 -2.671796 -1.149735
 C 3.272323 -0.234938 -1.417150
 C 2.724996 -1.641514 0.398905
 F 1.902890 -2.489956 1.025085
 F 3.006711 0.299941 -2.606088
 F 5.219475 1.095375 -1.314492
 F 5.804940 0.077208 1.126617
 F 4.148724 -1.728403 2.281924

Y_{Ph}GePy

E = -3635.30673197
 P -1.104380 -0.194568 0.022904
 C 0.289519 0.214218 -0.834371
 C 0.757269 1.623028 -0.716733
 C 1.653849 2.026981 0.283545
 C 2.044475 3.354870 0.412733
 C 1.544131 4.318580 -0.456976
 C 0.656865 3.939529 -1.459284
 C 0.274316 2.609664 -1.587369
 C -0.950999 -0.555928 1.823135
 C -2.029173 -0.459046 2.707620
 H -3.007320 -0.150287 2.340137
 C -1.853390 -0.745969 4.056059
 H -2.695081 -0.667397 4.741783
 C -0.600184 -1.125260 4.530852
 H -0.463572 -1.343794 5.588393
 C 0.477710 -1.213507 3.656775

H 1.460894 -1.498530 4.026592
 C 0.302360 -0.925763 2.307181
 H 1.144105 -0.970671 1.616245
 C -1.912776 -1.660351 -0.685488
 C -2.499063 -2.655378 0.097213
 H -2.463485 -2.589269 1.181933
 C -3.116565 -3.744006 -0.509454
 H -3.565669 -4.520753 0.106329
 C -3.153103 -3.844736 -1.895789
 H -3.634481 -4.699832 -2.366718
 C -2.567648 -2.855677 -2.680667
 H -2.587990 -2.934922 -3.765771
 C -1.947722 -1.767803 -2.079652
 H -1.470741 -0.994102 -2.679899
 C -2.310003 1.169055 0.016494
 C -2.044132 2.292779 0.805236
 H -1.170533 2.306030 1.455641
 C -2.882317 3.398067 0.747763
 H -2.662192 4.273703 1.354941
 C -3.995606 3.386052 -0.087199
 H -4.653813 4.251892 -0.129276
 C -4.267402 2.267790 -0.867961
 H -5.139852 2.254374 -1.518360
 C -3.424761 1.162087 -0.821850
 H -3.637939 0.291295 -1.438735
 C 3.239586 -0.946203 -0.597121
 C 4.855412 -1.451707 1.113996
 C 5.158607 0.305556 -0.471733
 C 5.632146 -0.409295 0.625094
 N 4.002029 0.048284 -1.068693
 H 5.191413 -2.044375 1.963928
 H 6.588359 -0.154594 1.077415
 H 5.746186 1.128171 -0.885707
 H 2.042045 1.278246 0.973021
 H 2.741427 3.638753 1.199880
 H 1.846203 5.359582 -0.355450
 H 0.259438 4.684973 -2.146426

H -0.426226 2.311420 -2.365550
 C 3.641706 -1.723795 0.493983
 H 3.007275 -2.535820 0.847495
 Ge 1.486931 -1.137877 -1.472535
 H 1.743653 -1.044417 -2.990566
 H 0.938949 -2.540083 -1.129031

Y_{Ph}GePyr

E = -3651.37222768
 P -1.198476 -0.031692 0.002341
 C 0.344247 -0.012681 -0.701871
 C 1.124738 1.221914 -0.789611
 C 0.913824 2.336956 0.043570
 C 1.691908 3.483251 -0.056096
 C 2.736711 3.554976 -0.970632
 C 2.980932 2.456918 -1.792133
 C 2.186828 1.322957 -1.711655
 C -1.310928 0.066841 1.828509
 C -2.514449 0.246724 2.519800
 H -3.448517 0.359464 1.969666
 C -2.519873 0.291060 3.907904
 H -3.457206 0.429521 4.443600
 C -1.324137 0.162806 4.611873
 H -1.329683 0.200605 5.699800
 C -0.126606 -0.006366 3.927162
 H 0.808647 -0.100122 4.475651
 C -0.114045 -0.053549 2.535741
 H 0.826906 -0.176093 1.993298
 C -2.020612 -1.590824 -0.462793
 C -2.798212 -2.330610 0.428798
 H -2.921196 -1.998063 1.455628
 C -3.399653 -3.514662 0.016351
 H -3.997745 -4.087476 0.722275
 C -3.228733 -3.971750 -1.285244
 H -3.697628 -4.901067 -1.603029
 C -2.446881 -3.244495 -2.176791
 H -2.297642 -3.602907 -3.193269

C -1.843886 -2.061586 -1.769286
 H -1.209239 -1.501919 -2.454821
 C -2.254334 1.338865 -0.591898
 C -2.540254 2.461868 0.186436
 H -2.180656 2.523227 1.211045
 C -3.277327 3.514588 -0.345166
 H -3.487805 4.388141 0.268601
 C -3.735438 3.454441 -1.655610
 H -4.312380 4.278902 -2.070214
 C -3.448713 2.340722 -2.439199
 H -3.799999 2.290299 -3.467798
 C -2.707413 1.291848 -1.912346
 H -2.475831 0.430159 -2.534078
 C 3.102557 -1.204854 -0.066414
 C 4.247380 -0.138056 1.586671
 C 5.349375 -0.979182 -0.320208
 C 5.435951 -0.295478 0.884612
 N 4.195208 -1.431251 -0.796876
 N 3.091598 -0.590078 1.121360
 H 4.227440 0.372391 2.552112
 H 6.380122 0.090473 1.260841
 H 6.239770 -1.164189 -0.925740
 H 0.148337 2.292052 0.815703
 H 1.490406 4.322556 0.608501
 H 3.354466 4.448101 -1.039251
 H 3.794601 2.487541 -2.515684
 H 2.387523 0.485270 -2.379962
 Ge 1.332904 -1.659900 -0.811702
 H 1.563969 -2.201737 -2.238276
 H 0.692169 -2.779494 0.030525

$Y_{Ph}GeB^2$

E = -3794.32403634
 P 1.634594 0.057013 0.062425
 C 0.301248 -0.077861 -0.959377
 C -0.500528 -1.330773 -0.870194
 C -1.492081 -1.506441 0.108666

C -2.244699 -2.673585 0.181772
 C -2.013602 -3.707692 -0.719447
 C -1.027121 -3.560896 -1.689824
 C -0.284669 -2.387622 -1.764519
 C 1.341762 0.447415 1.838555
 C 2.229258 0.077207 2.852918
 H 3.134232 -0.477400 2.607798
 C 1.955108 0.406906 4.175475
 H 2.647296 0.112729 4.962371
 C 0.793648 1.105822 4.493268
 H 0.578446 1.358797 5.529881
 C -0.094774 1.472515 3.487942
 H -1.007002 2.013248 3.732534
 C 0.175905 1.141004 2.164864
 H -0.530457 1.409840 1.379539
 C 2.769481 1.348508 -0.521593
 C 3.477155 2.176412 0.350709
 H 3.337930 2.082904 1.425237
 C 4.351071 3.132787 -0.154529
 H 4.896204 3.779937 0.529729
 C 4.521596 3.268111 -1.528080
 H 5.203389 4.020685 -1.919872
 C 3.815926 2.445900 -2.401494
 H 3.942578 2.553812 -3.476877
 C 2.942380 1.488171 -1.902306
 H 2.375211 0.843378 -2.572160
 C 2.561586 -1.506968 0.147962
 C 1.995333 -2.584938 0.836061
 H 1.055080 -2.455967 1.370394
 C 2.625453 -3.822702 0.830536
 H 2.173915 -4.659438 1.359677
 C 3.826929 -3.991228 0.149063
 H 4.321136 -4.960986 0.148574
 C 4.396529 -2.920005 -0.530777
 H 5.338346 -3.047756 -1.060926
 C 3.764659 -1.681116 -0.536779
 H 4.210786 -0.847156 -1.075076

H -1.662001 -0.708741 0.830777
H -3.011728 -2.774516 0.948156
H -2.599111 -4.623855 -0.665980
H -0.836276 -4.366372 -2.397441
H 0.486820 -2.270560 -2.523437
Ge -0.565242 1.491087 -1.668922
H -0.494249 1.578137 -3.212253
H 0.077811 2.776204 -1.109098
C -4.514157 0.445024 -0.746943
C -4.136708 1.052085 0.447052
C -5.725569 -0.203356 -0.885319
C -4.951313 1.043554 1.562145
C -6.556610 -0.219805 0.236420
H -6.004610 -0.677737 -1.822056
C -6.178506 0.389935 1.433285
H -4.643637 1.520508 2.488847
H -7.519958 -0.721594 0.175728
H -6.853225 0.354432 2.285932
B -2.501681 1.284476 -1.007678
O -2.895714 1.594493 0.290127
O -3.515264 0.605118 -1.658319

$Y_{Ph}GeB^I$

E = -4063.51376319
P 1.855259 -0.686721 0.089294
C 0.245090 -0.178895 0.287845
C -0.159026 0.539373 1.496902
C 0.722348 1.349596 2.247908
H 1.757842 1.454581 1.933725
C 0.304101 2.044772 3.374726
H 1.024755 2.657540 3.915111
C -1.018483 1.983034 3.804365
H -1.347925 2.540465 4.678728
C -1.902995 1.168024 3.101315
H -2.937113 1.070122 3.429587
C -1.477597 0.447731 1.994303
H -2.178066 -0.228109 1.508963

C 3.125556 0.630538 -0.045361
 C 4.464559 0.464766 0.313529
 H 4.803669 -0.467025 0.758560
 C 5.371103 1.500401 0.117510
 H 6.413206 1.366925 0.401730
 C 4.945871 2.703635 -0.436139
 H 5.657125 3.513121 -0.590176
 C 3.608819 2.877542 -0.778172
 H 3.268322 3.821681 -1.194662
 C 2.695976 1.848863 -0.576400
 H 1.638030 1.983945 -0.807814
 C 2.024388 -1.633833 -1.448524
 C 2.655368 -1.105862 -2.573683
 H 3.104420 -0.116145 -2.532862
 C 2.699635 -1.842843 -3.752299
 H 3.188869 -1.426694 -4.630645
 C 2.118372 -3.104455 -3.808991
 H 2.152784 -3.677828 -4.733511
 C 1.493918 -3.636665 -2.684351
 H 1.038558 -4.623915 -2.726820
 C 1.446917 -2.905599 -1.505374
 H 0.953868 -3.314159 -0.624503
 C 2.479073 -1.833398 1.371254
 C 1.818230 -1.930010 2.597409
 H 0.949518 -1.307232 2.793591
 C 2.262571 -2.831846 3.557994
 H 1.744073 -2.897229 4.512441
 C 3.354200 -3.653422 3.298275
 H 3.694775 -4.362390 4.050656
 C 4.000704 -3.580035 2.068455
 H 4.842126 -4.235618 1.852175
 C 3.564326 -2.675901 1.107337
 H 4.057706 -2.640130 0.136679
 N -3.958990 0.388843 -0.346478
 C -3.674162 2.573090 0.041156
 C -4.537121 1.542353 0.173455
 H -3.817850 3.618552 0.288736

H -5.555779 1.553371 0.543130
 B -2.628032 0.712225 -0.798957
 N -2.511457 2.123243 -0.569084
 C -1.398267 2.965836 -0.759000
 C -0.879999 3.690627 0.314890
 C -0.838057 3.109002 -2.028743
 C 0.152852 4.595286 0.103628
 H -1.283679 3.521115 1.311922
 C 0.196667 4.014486 -2.232322
 H -1.245400 2.528122 -2.853387
 C 0.678525 4.776701 -1.172067
 H 0.550554 5.159241 0.945028
 H 0.614506 4.137892 -3.229791
 H 1.468533 5.506844 -1.338036
 C -4.561650 -0.875356 -0.227824
 C -4.465018 -1.800260 -1.269131
 C -5.255821 -1.224396 0.933500
 C -5.043452 -3.055963 -1.143372
 H -3.939765 -1.517540 -2.178364
 C -5.844736 -2.477623 1.046058
 H -5.311352 -0.513711 1.755665
 C -5.739500 -3.400477 0.011190
 H -4.958542 -3.767956 -1.962151
 H -6.379652 -2.737769 1.957614
 H -6.197695 -4.382940 0.103300
 Ge -1.034554 -0.537690 -1.133321
 H -1.492456 -2.018037 -1.161407
 H -0.367564 -0.310805 -2.510129

(Y_{PhF})₂Ge

E = -5689.04492829
 P 3.047828 0.773479 -0.120703
 P -3.037414 0.948875 0.001415
 C 1.535408 0.307570 -0.749702
 C 1.203731 -1.039673 -1.169534
 C 1.629219 -2.221456 -0.548022
 C 1.165445 -3.477816 -0.903890

C 0.233033 -3.615394 -1.924866
C -0.192510 -2.475817 -2.595756
C 0.315774 -1.237919 -2.239406
C 3.204712 0.949720 1.691588
C 3.451133 -0.163780 2.500644
H 3.694298 -1.122512 2.052496
C 3.371055 -0.055784 3.882572
H 3.557712 -0.932043 4.499211
C 3.030081 1.155673 4.472737
H 2.957105 1.233101 5.555847
C 2.777624 2.265946 3.675384
H 2.506486 3.216638 4.130399
C 2.865276 2.166452 2.292863
H 2.656600 3.038498 1.677812
C 3.520466 2.418068 -0.759716
C 4.599081 3.110166 -0.201596
H 5.117656 2.702157 0.665023
C 5.007449 4.319763 -0.746234
H 5.846448 4.855676 -0.306770
C 4.343343 4.845517 -1.852000
H 4.661612 5.796429 -2.275293
C 3.280087 4.152628 -2.418279
H 2.764354 4.556531 -3.287149
C 2.872818 2.935687 -1.880191
H 2.056387 2.373084 -2.329559
C 4.396719 -0.300726 -0.689780
C 4.294524 -0.880803 -1.956877
H 3.400864 -0.716525 -2.554281
C 5.336657 -1.653897 -2.452883
H 5.247689 -2.109634 -3.436912
C 6.489599 -1.841377 -1.697444
H 7.303435 -2.449622 -2.087414
C 6.604933 -1.243315 -0.447555
H 7.510033 -1.377385 0.141377
C 5.563957 -0.472296 0.056495
H 5.663616 -0.004033 1.033158
C -1.422960 0.462825 0.211851

C -1.115995 -0.791301 0.889297
 C -0.207294 -0.831403 1.958270
 C 0.183278 -2.015742 2.563761
 C -0.340439 -3.226704 2.125674
 C -1.268917 -3.228907 1.095010
 C -1.629961 -2.031885 0.496537
 C -4.070761 0.331017 1.370503
 C -4.157657 1.038775 2.570949
 H -3.687928 2.014868 2.664844
 C -4.851126 0.503009 3.648674
 H -4.921112 1.065229 4.577712
 C -5.451875 -0.747559 3.541237
 H -5.990010 -1.167931 4.388682
 C -5.363443 -1.458964 2.350289
 H -5.828080 -2.438927 2.261846
 C -4.679877 -0.922362 1.264767
 H -4.615382 -1.479788 0.333242
 C -3.096342 2.769069 0.011804
 C -3.869168 3.506826 -0.886465
 H -4.463402 2.998901 -1.641621
 C -3.866008 4.895985 -0.829913
 H -4.465126 5.464536 -1.538365
 C -3.094415 5.556695 0.119667
 H -3.092094 6.644435 0.158000
 C -2.317641 4.826893 1.013748
 H -1.703781 5.339377 1.751640
 C -2.313122 3.438977 0.959060
 H -1.689279 2.859361 1.637794
 C -3.976023 0.447965 -1.485615
 C -5.368882 0.556311 -1.548826
 H -5.927019 0.939976 -0.695111
 C -6.042344 0.159316 -2.697228
 H -7.126691 0.240359 -2.744983
 C -5.331744 -0.354476 -3.780344
 H -5.864154 -0.675558 -4.673840
 C -3.947868 -0.468886 -3.715848
 H -3.385584 -0.886417 -4.548515

C -3.271679 -0.064537 -2.570296
H -2.193642 -0.164332 -2.499287
Ge 0.049846 1.524668 -0.455522
H 0.569595 2.611014 0.520811
H -0.428775 2.300107 -1.706482
F 2.457946 -2.149775 0.498160
F 1.548609 -4.543509 -0.215509
F -0.242309 -4.808222 -2.246905
F 0.037087 -4.361335 2.693145
F -1.744746 -4.376300 0.632582
F -1.068781 -2.574727 -3.587198
F -2.463628 -2.098914 -0.546016
F -0.083496 -0.177825 -2.948997
F 0.291918 0.309852 2.427877
F 1.039931 -2.012435 3.576305

$Y_{PhF}GeCl$

E = -4344.73667122
P -0.925900 0.551607 0.151079
C 0.082252 -0.595167 -0.626817
C 1.529318 -0.438792 -0.587165
C 2.173047 0.799593 -0.718899
C 3.546713 0.961062 -0.629054
C 4.355843 -0.144079 -0.402546
C 3.766610 -1.396362 -0.274244
C 2.387538 -1.522708 -0.341107
C -0.012125 1.329062 1.512663
C -0.024895 2.703317 1.749073
H -0.604971 3.364205 1.109937
C 0.728255 3.233422 2.790464
H 0.719347 4.306627 2.969010
C 1.499842 2.399309 3.592115
H 2.092305 2.819965 4.402257
C 1.527168 1.029355 3.349862
H 2.142265 0.375734 3.964764
C 0.780123 0.493932 2.308977
H 0.817202 -0.573292 2.093181

C -2.383443 -0.287048 0.836235
 C -2.346076 -0.852195 2.112158
 H -1.494746 -0.677192 2.764734
 C -3.394100 -1.650015 2.548875
 H -3.358456 -2.088797 3.543659
 C -4.474883 -1.903770 1.711194
 H -5.285392 -2.546501 2.048867
 C -4.522257 -1.334127 0.444528
 H -5.368617 -1.526561 -0.211354
 C -3.485752 -0.517993 0.009092
 H -3.527215 -0.073173 -0.983185
 C -1.650212 1.875349 -0.870098
 C -1.215021 2.038863 -2.182818
 H -0.425353 1.391228 -2.559718
 C -1.786691 3.019099 -2.986750
 H -1.444576 3.145642 -4.011839
 C -2.794106 3.833307 -2.481513
 H -3.241494 4.599292 -3.112117
 C -3.239543 3.665638 -1.172371
 H -4.035186 4.296410 -0.780954
 C -2.674517 2.684562 -0.368280
 H -3.037450 2.537624 0.648783
 Cl -1.418022 -3.604972 0.023271
 Ge -0.712293 -2.124028 -1.433577
 H 0.292649 -2.834746 -2.343818
 H -1.992832 -1.772363 -2.206846
 F 4.089284 2.161024 -0.769097
 F 5.670853 -0.009924 -0.322892
 F 4.523373 -2.456966 -0.039358
 F 1.866070 -2.730722 -0.137534
 F 1.439557 1.891427 -0.960466

Y_{PhF}GeHMDS

E = -4758.53129273
 P -1.999770 -0.445748 -0.079495
 C -0.327936 -0.161899 0.002522
 C 0.183340 1.196272 -0.173733

C -0.215719 2.286306 0.604923
 C 0.306413 3.561657 0.449763
 C 1.291904 3.784329 -0.503282
 C 1.716174 2.730291 -1.304520
 C 1.140761 1.477314 -1.155890
 C -2.989007 -0.442939 1.458413
 C -4.386786 -0.407082 1.439105
 H -4.918125 -0.360665 0.488696
 C -5.098653 -0.416155 2.631984
 H -6.186352 -0.383773 2.615094
 C -4.419568 -0.458577 3.847426
 H -4.978984 -0.462563 4.781046
 C -3.029713 -0.483106 3.869880
 H -2.498269 -0.502549 4.819071
 C -2.314376 -0.470028 2.677438
 H -1.225506 -0.459676 2.680821
 C -2.281468 -2.084710 -0.826251
 C -3.245801 -2.986846 -0.375301
 H -3.876162 -2.738248 0.474583
 C -3.388452 -4.221077 -1.001162
 H -4.136709 -4.923746 -0.640047
 C -2.572661 -4.561466 -2.074584
 H -2.685059 -5.530773 -2.556665
 C -1.603829 -3.668511 -2.522943
 H -0.949872 -3.935492 -3.350708
 C -1.455582 -2.437938 -1.898802
 H -0.677796 -1.742611 -2.210958
 C -2.802105 0.811920 -1.121257
 C -3.303607 1.981284 -0.543450
 H -3.289057 2.104583 0.536970
 C -3.807286 2.994687 -1.351097
 H -4.189489 3.905828 -0.895381
 C -3.819628 2.845637 -2.733331
 H -4.216317 3.639576 -3.363160
 C -3.323035 1.681527 -3.311462
 H -3.332508 1.560650 -4.392736
 C -2.811168 0.668808 -2.510094

H -2.421767 -0.237542 -2.967904
 N 2.642931 -1.016808 0.409388
 Si 3.584085 -1.650952 -0.938013
 Si 3.389766 -0.273085 1.819589
 C 2.455992 -2.507849 -2.174504
 H 2.016442 -3.429703 -1.776380
 H 1.643984 -1.844071 -2.493292
 H 3.042955 -2.771108 -3.064250
 C 4.551572 -0.323344 -1.854866
 H 5.474056 -0.045091 -1.334594
 H 4.838750 -0.713486 -2.840906
 H 3.959881 0.583388 -2.017192
 C 4.817962 -2.920210 -0.295726
 H 5.404581 -3.355790 -1.115476
 H 5.525115 -2.468204 0.412296
 H 4.301700 -3.736939 0.225381
 C 5.007084 0.564732 1.368225
 H 5.403598 1.064960 2.261836
 H 5.771831 -0.138727 1.017624
 H 4.858372 1.325964 0.592641
 C 3.738413 -1.562725 3.142231
 H 4.219356 -1.112701 4.020857
 H 2.812727 -2.047980 3.475339
 H 4.404113 -2.343890 2.753470
 C 2.265246 1.059214 2.520680
 H 1.219272 0.741924 2.624112
 H 2.620600 1.368404 3.512323
 H 2.283788 1.940975 1.867782
 Ge 0.873595 -1.525781 0.652712
 H 0.600042 -2.895834 0.012370
 H 0.725305 -1.725596 2.185299
 F 1.502718 0.528686 -2.012682
 F 2.631270 2.943132 -2.240700
 F 1.812125 4.991154 -0.658122
 F -0.102756 4.557396 1.222508
 F -1.099835 2.097274 1.586542

$Y_{PhF}GeC_6F_5$

E = -4613.07173097

P -2.176520 -0.062939 0.030931

C -0.519496 -0.378857 0.187973

C 0.470229 0.654558 0.472281

C 1.408289 0.477885 1.498449

C 2.495775 1.316957 1.686115

C 2.646961 2.432022 0.870730

C 1.731668 2.658817 -0.150608

C 0.681797 1.772727 -0.347027

C -3.207588 -0.707677 1.395868

C -4.558585 -0.362909 1.508183

H -5.017931 0.290896 0.766918

C -5.310234 -0.838645 2.574010

H -6.360527 -0.567415 2.661483

C -4.716264 -1.652702 3.536444

H -5.306357 -2.022005 4.373077

C -3.368948 -1.979262 3.438833

H -2.899780 -2.599661 4.199707

C -2.611295 -1.502684 2.372933

H -1.546147 -1.719421 2.304393

C -2.849303 -0.773655 -1.501535

C -4.019037 -1.530353 -1.569338

H -4.595941 -1.733592 -0.670764

C -4.439089 -2.048545 -2.790397

H -5.346735 -2.646761 -2.838413

C -3.697250 -1.811704 -3.941799

H -4.027801 -2.221018 -4.894576

C -2.523745 -1.064626 -3.875291

H -1.933668 -0.890939 -4.772738

C -2.093053 -0.553477 -2.658784

H -1.158261 0.001538 -2.585207

C -2.548987 1.709390 0.051992

C -2.219202 2.424544 1.206831

H -1.785323 1.906280 2.061145

C -2.443085 3.793642 1.259945

H -2.179042 4.350653 2.156481

C -3.005981 4.449607 0.168719
 H -3.181819 5.522656 0.212059
 C -3.345034 3.736245 -0.975422
 H -3.786158 4.248685 -1.827819
 C -3.114023 2.366693 -1.039327
 H -3.364847 1.812893 -1.941380
 C 2.071573 -1.773984 -0.482950
 C 4.361651 -1.614982 0.314883
 C 3.657031 -0.272427 -1.558959
 C 4.646245 -0.673817 -0.667022
 C 2.396397 -0.842709 -1.459965
 C 3.081209 -2.152560 0.390189
 F 2.837058 -3.013696 1.369322
 F 1.459927 -0.418762 -2.309164
 F 3.925662 0.638114 -2.479444
 F 5.856501 -0.156384 -0.752203
 F 5.306850 -1.988095 1.159828
 F -0.098875 1.973627 -1.404912
 F 1.888698 3.700536 -0.952284
 F 3.659682 3.262576 1.055715
 F 3.375922 1.073781 2.645055
 F 1.306775 -0.591244 2.289694
 Ge 0.171768 -2.147321 -0.138018
 H -0.476711 -2.797912 -1.371219
 H 0.102709 -3.145692 1.029295

Y_{PhF}GePy

E = -4132.21905465
 P -1.606689 0.010658 0.049155
 C -0.050867 -0.424858 0.578806
 C 1.067041 0.506667 0.506301
 C 2.111147 0.426774 1.441434
 C 3.278729 1.167434 1.349926
 C 3.430408 2.089945 0.323151
 C 2.421624 2.213293 -0.623219
 C 1.286294 1.422996 -0.533225
 C -2.939994 -0.603267 1.139408

C -4.168936 0.063942 1.176094
 H -4.320745 0.959585 0.575517
 C -5.192998 -0.391919 1.997612
 H -6.142391 0.139397 2.021120
 C -4.999517 -1.514678 2.795123
 H -5.800170 -1.870000 3.440889
 C -3.773906 -2.170973 2.777912
 H -3.608451 -3.038983 3.412741
 C -2.746815 -1.714112 1.960474
 H -1.784841 -2.217816 1.988828
 C -2.062781 -0.577879 -1.620878
 C -3.384003 -0.625781 -2.075204
 H -4.201935 -0.321504 -1.425874
 C -3.662890 -1.077309 -3.358932
 H -4.692951 -1.111928 -3.708393
 C -2.627108 -1.494931 -4.190288
 H -2.848066 -1.855507 -5.193323
 C -1.313879 -1.461731 -3.735446
 H -0.502468 -1.798740 -4.377363
 C -1.026414 -1.004542 -2.454009
 H 0.003982 -0.990071 -2.095393
 C -1.834050 1.809157 0.097383
 C -1.480700 2.466792 1.278453
 H -1.077714 1.892921 2.111767
 C -1.635968 3.843309 1.375474
 H -1.355601 4.355686 2.293511
 C -2.144966 4.564544 0.299234
 H -2.264880 5.643494 0.376402
 C -2.493342 3.909893 -0.877140
 H -2.881643 4.474753 -1.722179
 C -2.334463 2.532480 -0.983563
 H -2.583762 2.023245 -1.912032
 C 2.279004 -2.254460 -0.122121
 C 4.669660 -2.375690 0.056241
 C 3.561180 -1.434927 -1.838143
 C 4.747650 -1.757543 -1.184496
 F 0.417616 1.495129 -1.544294

F 2.570392 3.055354 -1.636759
 F 4.526519 2.830744 0.239451
 F 4.236693 1.020962 2.254120
 F 2.022334 -0.459564 2.435713
 N 2.360699 -1.669935 -1.323893
 H 5.573400 -2.641472 0.602231
 H 5.706613 -1.522483 -1.640937
 H 3.585918 -0.952241 -2.817239
 C 3.414175 -2.632624 0.594890
 H 3.310540 -3.091197 1.576383
 Ge 0.471667 -2.280511 0.642203
 H -0.495306 -3.126245 -0.212159
 H 0.540670 -2.928505 2.043332

Y_{Ph}FGePyr

E = -4148.27595621
 P -1.611623 0.014119 0.054128
 C -0.056732 -0.453009 0.559524
 C 1.066148 0.473858 0.518791
 C 2.125320 0.330175 1.431239
 C 3.316715 1.032242 1.334132
 C 3.470887 1.996148 0.345797
 C 2.442491 2.192017 -0.566425
 C 1.284992 1.434041 -0.480107
 C -2.948256 -0.665999 1.098644
 C -4.174493 0.003267 1.172225
 H -4.318923 0.936814 0.630511
 C -5.205475 -0.500468 1.955995
 H -6.152683 0.032620 2.008752
 C -5.021525 -1.673874 2.679227
 H -5.827394 -2.067130 3.295839
 C -3.798735 -2.333666 2.625742
 H -3.640840 -3.242274 3.203026
 C -2.764762 -1.829626 1.845446
 H -1.805966 -2.340115 1.845709
 C -2.066462 -0.467363 -1.651026
 C -3.386396 -0.482923 -2.111081

H -4.205183 -0.216183 -1.446515
 C -3.663071 -0.853599 -3.420971
 H -4.692199 -0.862669 -3.774712
 C -2.626526 -1.222935 -4.273778
 H -2.845820 -1.519938 -5.297768
 C -1.314313 -1.222153 -3.814473
 H -0.502560 -1.520864 -4.474644
 C -1.029602 -0.845520 -2.506712
 H -0.000818 -0.851932 -2.144351
 C -1.835660 1.806640 0.215227
 C -1.482283 2.386770 1.436253
 H -1.079997 1.760338 2.231152
 C -1.638139 3.754076 1.621943
 H -1.358438 4.205976 2.571415
 C -2.147260 4.543171 0.594468
 H -2.267842 5.614782 0.741361
 C -2.494920 3.965790 -0.621945
 H -2.883242 4.584034 -1.428734
 C -2.335994 2.598128 -0.816928
 H -2.585631 2.149715 -1.776191
 C 2.285983 -2.217362 -0.217454
 C 4.531406 -2.360457 0.091143
 C 3.624490 -1.234748 -1.774143
 C 4.753761 -1.611140 -1.056537
 F 0.398973 1.573579 -1.469176
 F 2.592081 3.072792 -1.546625
 F 4.589553 2.702744 0.262394
 F 4.295025 0.813039 2.200562
 F 2.027568 -0.587198 2.391986
 Ge 0.466270 -2.313805 0.531950
 H -0.482488 -3.101350 -0.396877
 H 0.522105 -3.037388 1.887770
 N 2.399609 -1.534718 -1.362835
 N 3.307990 -2.663824 0.511268
 H 5.364941 -2.720964 0.697698
 H 5.755177 -1.339719 -1.380858
 H 3.710008 -0.667469 -2.703499

$Y_{PhF}GeB^2$

E = -4291.23124642

P -2.030188 0.044640 -0.017831

C -0.473488 -0.530411 0.307982

C 0.686370 0.357647 0.381962

C 1.531194 0.348110 1.500564

C 2.728679 1.049581 1.553487

C 3.115626 1.827425 0.471754

C 2.303197 1.877324 -0.654457

C 1.125284 1.147538 -0.690936

C -3.199620 -0.045162 1.385436

C -4.448760 0.580804 1.328278

H -4.747439 1.119312 0.428930

C -5.301336 0.532465 2.423039

H -6.271780 1.023052 2.377743

C -4.908486 -0.134143 3.581773

H -5.576831 -0.169016 4.440118

C -3.659287 -0.739709 3.648435

H -3.344797 -1.245725 4.559000

C -2.800147 -0.690854 2.553977

H -1.804114 -1.128943 2.603853

C -2.827726 -0.843918 -1.392804

C -4.126355 -1.350981 -1.354138

H -4.736942 -1.231954 -0.462858

C -4.637555 -2.034699 -2.452911

H -5.647683 -2.437587 -2.414649

C -3.858574 -2.211077 -3.590304

H -4.261451 -2.748068 -4.447045

C -2.557837 -1.714789 -3.628537

H -1.941105 -1.864368 -4.512434

C -2.038149 -1.042158 -2.531101

H -1.011645 -0.677121 -2.532085

C -2.025725 1.814436 -0.413718

C -1.594141 2.691630 0.585806

H -1.315698 2.301856 1.564267

C -1.517991 4.053516 0.328013

H -1.175094 4.733120 1.105448

C -1.881013 4.545785 -0.922572
 H -1.822215 5.613689 -1.123808
 C -2.319499 3.675465 -1.914081
 H -2.604127 4.060026 -2.891313
 C -2.389086 2.309078 -1.664850
 H -2.718507 1.628535 -2.446949
 C 3.563775 -1.338813 -1.011595
 C 3.954555 -1.665183 0.282695
 C 4.362937 -0.588142 -1.851384
 C 5.163554 -1.254830 0.808611
 C 5.584927 -0.162445 -1.328476
 H 4.033213 -0.317741 -2.850746
 C 5.975666 -0.487984 -0.028345
 H 5.442565 -1.491628 1.831363
 H 6.240685 0.449815 -1.943321
 H 6.929661 -0.124521 0.346731
 B 1.888567 -2.338366 -0.009321
 O 2.931932 -2.329080 0.897619
 O 2.297522 -1.800773 -1.219118
 F 0.440841 1.152226 -1.833555
 F 1.209752 -0.411250 2.545102
 F 3.511887 0.964215 2.618831
 F 2.699263 2.564685 -1.716877
 F 4.263382 2.486376 0.495945
 Ge -0.107812 -2.432281 0.458977
 H -0.978559 -3.216966 -0.541388
 H -0.375873 -3.041010 1.853305

$Y_{PhF}GeB^1$

E = -4560.42388592
 P -2.001336 0.909469 0.198215
 C -0.382591 0.451920 0.003114
 C 0.240810 -0.504217 0.909413
 C -0.249383 -1.789801 1.154406
 C 0.441654 -2.728808 1.905376
 C 1.675696 -2.407627 2.451732
 C 2.193450 -1.133754 2.249959

C 1.468919 -0.206036 1.520698
 C -3.326491 -0.013177 -0.659367
 C -4.673626 0.151921 -0.322713
 H -4.955473 0.828850 0.483561
 C -5.652044 -0.556713 -1.008058
 H -6.700166 -0.430885 -0.743155
 C -5.288498 -1.433792 -2.027446
 H -6.055588 -1.991919 -2.561259
 C -3.948384 -1.607637 -2.354106
 H -3.662430 -2.305833 -3.137612
 C -2.965809 -0.900849 -1.668805
 H -1.909479 -1.051840 -1.886478
 C -2.191099 2.633696 -0.357445
 C -3.275813 3.080393 -1.114353
 H -4.053874 2.385965 -1.420031
 C -3.355740 4.414893 -1.496134
 H -4.200875 4.754435 -2.091619
 C -2.357513 5.309772 -1.126779
 H -2.422859 6.353118 -1.429852
 C -1.269001 4.868219 -0.381333
 H -0.477552 5.561064 -0.103103
 C -1.180360 3.534716 -0.003242
 H -0.317606 3.168821 0.551769
 C -2.488576 0.813391 1.951837
 C -3.026077 -0.372666 2.459100
 H -3.234586 -1.204319 1.790263
 C -3.285967 -0.493735 3.819731
 H -3.697873 -1.423061 4.208075
 C -3.020516 0.566318 4.678842
 H -3.227665 0.470663 5.742999
 C -2.488898 1.750332 4.176722
 H -2.282287 2.583752 4.845131
 C -2.217978 1.873113 2.819900
 H -1.799182 2.800098 2.435367
 N 3.583248 -0.094697 -0.953341
 C 3.287025 -2.311785 -0.982250
 C 4.150163 -1.327154 -0.650090

H 3.436178 -3.384351 -0.941729
 H 5.160166 -1.410912 -0.266473
 B 2.261769 -0.314163 -1.478127
 N 2.131055 -1.750674 -1.512439
 C 1.041229 -2.524276 -1.948998
 C 0.661079 -3.685700 -1.272172
 C 0.337319 -2.141257 -3.092838
 C -0.422767 -4.430427 -1.717113
 H 1.200724 -3.993867 -0.380257
 C -0.738919 -2.897436 -3.537938
 H 0.657522 -1.257682 -3.639131
 C -1.129766 -4.041418 -2.849746
 H -0.719695 -5.318836 -1.163637
 H -1.272341 -2.588610 -4.435488
 H -1.976084 -4.630782 -3.196670
 C 4.238614 1.123271 -0.684824
 C 4.187160 2.160761 -1.615438
 C 4.943401 1.301312 0.506555
 C 4.824333 3.366388 -1.351075
 H 3.651855 2.006938 -2.549759
 C 5.591220 2.503471 0.756685
 H 4.941191 0.507721 1.249549
 C 5.533612 3.541840 -0.167821
 H 4.775666 4.169769 -2.083718
 H 6.132571 2.634601 1.691732
 H 6.038827 4.484153 0.033909
 Ge 0.707114 1.040134 -1.500341
 H 1.210136 2.492769 -1.344825
 H -0.159028 1.050289 -2.783653
 F -1.387886 -2.180484 0.579744
 F -0.032888 -3.963066 2.030750
 F 2.361221 -3.310048 3.138828
 F 3.375855 -0.816155 2.764630
 F 1.986367 1.011663 1.371711

V^{Ge}

E = -3067.31179563

C 1.651092 2.336652 0.010224
 C -0.489004 1.231229 -0.205966
 C -1.087048 2.471354 -0.412545
 C -0.329981 3.642290 -0.382882
 C 1.037007 3.576144 -0.158839
 H 2.729138 2.307413 0.169611
 H -2.154743 2.524279 -0.608728
 H -0.819157 4.601516 -0.539749
 H 1.636055 4.484179 -0.123865
 N -1.165883 0.005310 -0.228551
 C -2.540395 -0.162106 -0.054448
 C -3.304085 0.655658 0.792861
 C -3.182022 -1.234870 -0.689734
 C -4.658308 0.412375 0.974487
 H -2.821491 1.471144 1.324614
 C -4.534135 -1.479842 -0.490554
 H -2.604167 -1.872232 -1.358232
 C -5.286716 -0.653327 0.336321
 H -5.228109 1.059648 1.639518
 H -5.004790 -2.320261 -0.998154
 H -6.348190 -0.838648 0.485711
 C 0.923202 1.141631 -0.024780
 C 1.461101 -0.209984 0.071856
 P 3.097713 -0.604027 0.158827
 C 4.139983 -0.013851 -1.218374
 H 4.019293 1.069876 -1.318687
 H 5.198701 -0.250060 -1.061064
 H 3.785139 -0.480824 -2.143127
 C 3.980453 -0.021401 1.645384
 H 5.043193 -0.288792 1.617573
 H 3.882148 1.066502 1.721094
 H 3.503693 -0.466956 2.524663
 C 3.286257 -2.403794 0.167468
 H 4.344473 -2.679133 0.223472
 H 2.758220 -2.820099 1.032250
 H 2.854022 -2.818060 -0.750294
 Ge 0.027773 -1.430700 -0.137473

H -0.388313 -2.355791 1.029535
H 0.017238 -2.317001 -1.412427

Vl^{Ge}

E = -3646.52404562
C 0.818318 2.954728 -0.015441
C 0.357523 1.662965 0.212416
C -0.821888 1.179792 -0.388580
C -1.507640 2.064000 -1.237309
C -1.054951 3.356370 -1.452041
C 0.113521 3.813164 -0.846584
H 1.732206 3.265381 0.487221
H -2.414004 1.714065 -1.726286
H -1.618070 4.012352 -2.113676
H 0.467137 4.827521 -1.016661
N -1.288926 -0.120012 -0.189764
S 1.282161 0.614335 1.318327
O 2.582558 1.281552 1.535011
O 0.417999 0.321171 2.458439
C 1.530452 -0.802801 0.388985
C -2.670654 -0.356717 -0.098265
C -3.509215 0.524568 0.599763
C -3.230234 -1.514592 -0.648447
C -4.862402 0.254219 0.726980
H -3.078601 1.414562 1.052805
C -4.585842 -1.788516 -0.499650
H -2.599446 -2.198365 -1.214930
C -5.412093 -0.904749 0.181920
H -5.494555 0.949747 1.276410
H -4.997501 -2.697503 -0.934751
H -6.473560 -1.115515 0.292281
P 3.007517 -0.873978 -0.466186
C 3.365138 0.562404 -1.514957
H 4.336376 0.462913 -2.012517
H 2.567969 0.669691 -2.258478
H 3.365476 1.445032 -0.866515
C 3.005246 -2.311594 -1.561239

H 2.216159 -2.205594 -2.312376
H 3.976131 -2.393704 -2.061318
H 2.819344 -3.217698 -0.975459
C 4.437474 -1.044315 0.626048
H 4.396479 -0.200888 1.323919
H 4.339323 -1.978604 1.188204
H 5.376746 -1.035360 0.061603
Ge -0.140318 -1.607436 0.013485
H -0.794987 -2.446708 1.112686
H -0.078299 -2.428327 -1.294980

VII^{Ge}

E = -4408.61051045
C -0.396148 1.723834 -0.576701
C 0.396309 1.723787 0.576708
C 0.767132 2.940779 1.149437
C 0.382727 4.146750 0.579616
C -0.382293 4.146793 -0.579614
C -0.766839 2.940866 -1.149429
H 1.382191 2.914209 2.045326
H 0.685275 5.083814 1.042963
H -0.684740 5.083891 -1.042959
H -1.381902 2.914361 -2.045318
S -0.983913 0.265959 -1.510049
S 0.983900 0.265843 1.510065
O -2.172133 0.797858 -2.205508
O 0.177353 -0.159674 -2.313853
O -0.177457 -0.159694 2.313785
O 2.172120 0.797642 2.205604
C -1.438783 -0.960171 -0.453938
C 1.438714 -0.960292 0.453931
P 2.898295 -0.709293 -0.409451
P -2.898342 -0.709143 0.409479
C 2.979472 -1.834486 -1.813955
H 3.912502 -1.664536 -2.361656
H 2.939008 -2.872373 -1.469911
H 2.114987 -1.622968 -2.454185

C 3.076054 0.954627 -1.098320
 H 3.063696 1.676948 -0.275183
 H 4.018452 1.038862 -1.650931
 H 2.220704 1.128062 -1.761160
 C 4.370261 -0.971946 0.610956
 H 4.387980 -2.014802 0.944262
 H 5.293012 -0.730749 0.071077
 H 4.253582 -0.325304 1.487758
 C -2.979667 -1.834484 1.813854
 H -3.912670 -1.664473 2.361586
 H -2.939351 -2.872337 1.469691
 H -2.115153 -1.623158 2.454102
 C -3.075925 0.954716 1.098545
 H -3.063448 1.677142 0.275499
 H -4.018335 1.039002 1.651124
 H -2.220574 1.127966 1.761439
 C -4.370333 -0.971532 -0.610959
 H -5.293058 -0.730303 -0.071052
 H -4.253589 -0.324799 -1.487687
 H -4.388159 -2.014347 -0.944388
 Ge -0.000076 -2.142814 -0.000060
 H -0.419462 -3.045455 1.171697
 H 0.419244 -3.045421 -1.171869

VIII^{Ge}

E = -3616.59318818
 C 0.721460 3.208286 0.373034
 C 0.200866 1.926085 0.392499
 C -1.000236 1.528245 -0.196348
 C -1.721700 2.521212 -0.859074
 C -1.239573 3.827694 -0.893398
 C -0.032747 4.175883 -0.282608
 H 1.663453 3.446636 0.863005
 H -2.674340 2.280432 -1.329267
 H -1.819845 4.599407 -1.396736
 H 0.314188 5.206754 -0.312893
 B -1.245668 -0.042977 0.063338

S 0.967719 0.469013 1.035257
 O 1.851679 0.686162 2.181856
 O -0.385369 -0.263999 1.345980
 C 1.634434 -0.388847 -0.233588
 C -2.707862 -0.612196 0.219914
 C -3.172392 -1.115642 1.439764
 C -3.602156 -0.605846 -0.859258
 C -4.473338 -1.589730 1.578688
 H -2.496560 -1.132521 2.293709
 C -4.905169 -1.071419 -0.727103
 H -3.267296 -0.238065 -1.830870
 C -5.346514 -1.567218 0.496384
 H -4.809101 -1.977914 2.539522
 H -5.578655 -1.054148 -1.582985
 H -6.364919 -1.937115 0.603508
 P 3.237400 -0.928373 -0.064668
 C 4.439049 0.405796 0.173169
 H 5.455433 0.013288 0.289219
 H 4.391634 1.082317 -0.686211
 H 4.146951 0.950899 1.077336
 C 3.686204 -1.807356 -1.573899
 H 3.592366 -1.124448 -2.424360
 H 4.711044 -2.187632 -1.507740
 H 2.988588 -2.640148 -1.714897
 C 3.519821 -2.065957 1.319136
 H 3.210185 -1.541121 2.229972
 H 2.882231 -2.946361 1.185674
 H 4.570113 -2.369514 1.396348
 Ge 0.094822 -1.020756 -1.309716
 H 0.193316 -2.569104 -1.348363
 H 0.309367 -0.552444 -2.770406

IX^{Ge}

E = -3067.36886792
 C 1.726471 2.305789 -0.087935
 C -0.470509 1.231675 -0.118675
 C -1.037187 2.515830 -0.268517

C -0.272127 3.662961 -0.315425
 C 1.121479 3.538385 -0.211429
 H 2.813416 2.269252 -0.026721
 H -2.119098 2.592953 -0.367785
 H -0.731585 4.641244 -0.436555
 H 1.744682 4.432184 -0.240489
 B -1.290728 -0.051121 -0.062185
 C -2.833143 -0.208587 0.011062
 C -3.643031 0.668711 0.753906
 C -3.476829 -1.268097 -0.651476
 C -5.021303 0.503507 0.821377
 H -3.177564 1.481176 1.309599
 C -4.856409 -1.421611 -0.613206
 H -2.876171 -1.981870 -1.215422
 C -5.633622 -0.535786 0.127864
 H -5.622363 1.189480 1.416207
 H -5.328434 -2.242736 -1.150274
 H -6.714157 -0.661759 0.172856
 C 0.970478 1.102882 -0.052995
 C 1.541131 -0.207906 0.031319
 P 3.200777 -0.544861 0.097788
 C 4.202756 0.002681 -1.328377
 H 4.090371 1.082919 -1.465066
 H 5.263558 -0.238477 -1.193171
 H 3.819510 -0.495138 -2.225373
 C 4.097794 0.120171 1.541981
 H 5.164647 -0.128726 1.503149
 H 3.980066 1.207789 1.580629
 H 3.648878 -0.303075 2.446650
 C 3.454822 -2.332983 0.176840
 H 4.523890 -2.566413 0.216707
 H 2.955063 -2.727681 1.067525
 H 3.007173 -2.797459 -0.708196
 Ge 0.134426 -1.544163 -0.021967
 H 0.185976 -2.486684 1.205683
 H 0.287882 -2.490988 -1.240773

3.7.2.2 Reaktionspfad B

Y₂Ge

E = -5872.35282600

C 4.028632 2.657623 -0.430204

H 3.762236 3.151203 0.501172

C 3.145680 1.734618 -0.970732

C -3.928717 -1.827803 -1.155951

O 0.511229 1.889332 -0.958331

C -4.036123 -2.108779 -2.514860

H -3.138428 -2.145465 -3.129195

C 2.756923 -2.727672 2.908326

H 3.785450 -2.382218 2.993140

C 5.237017 2.897826 -1.073178

H 5.941902 3.607228 -0.640199

C -1.106131 5.120555 -0.521652

H -0.259921 5.762902 -0.288469

C -1.203190 3.879698 0.096556

H -0.409541 3.545403 0.759550

C 2.157604 -2.525389 -2.097804

H 1.406456 -1.738602 -2.187292

C 2.915816 -2.603872 -0.931072

C 5.342116 -0.781082 0.138576

H 5.352184 -1.387891 -0.764094

C 6.481067 -0.075469 0.512709

H 7.380160 -0.141969 -0.097588

C -2.058679 5.524480 -1.447839

H -1.973365 6.496281 -1.930410

C -2.080461 0.262891 -0.838483

Ge -0.388273 0.661388 -2.189857

O -2.426576 -1.649447 0.985743

S -2.321719 -1.472629 -0.471508

P -2.361982 1.384077 0.530479

C -5.290576 -2.351596 -3.052247

H -5.383987 -2.570326 -4.115208

C -4.056930 0.376260 2.487136

H -3.135557 0.062619 2.969390

C -0.480012 0.198213 2.242842

H -0.457391 -0.645523 1.571963
 C 5.305875 0.828617 2.411480
 H 5.284035 1.469856 3.290465
 C 4.162062 0.137388 2.036491
 H 3.235514 0.266237 2.595008
 C -3.204991 3.428772 -1.175839
 H -3.986712 2.752076 -1.509072
 C 2.010939 -2.441664 1.765282
 C 3.448390 1.066237 -2.152893
 H 2.749147 0.330224 -2.549944
 C 3.851990 -3.628024 -0.766836
 H 4.423555 -3.700877 0.158765
 C 4.181496 -0.691958 0.908182
 C -0.527251 2.377192 3.981554
 H -0.547635 3.228286 4.658813
 C -1.246371 1.318823 1.937066
 C -1.291890 2.400876 2.827289
 H -1.921986 3.263270 2.617783
 C -2.278457 3.038824 -0.202936
 C -3.103774 4.670549 -1.784144
 H -3.830070 4.960896 -2.540074
 C 6.908433 2.446653 -2.900987
 H 7.659098 1.763027 -2.478383
 H 7.274965 3.467042 -2.742361
 H 6.869166 2.259160 -3.979676
 C 0.250654 1.259701 4.277784
 H 0.842836 1.239309 5.191002
 C -6.438419 -2.330930 -2.250182
 C 6.468342 0.719384 1.653051
 H 7.361203 1.270488 1.942848
 C -6.425058 1.110457 1.229076
 H -7.346962 1.401921 0.730227
 C 1.425321 -0.292630 -0.063911
 P 2.584974 -1.394242 0.385310
 O 1.717153 2.110036 1.167340
 S 1.660326 1.289875 -0.064474
 O -1.360555 -2.273063 -1.224932

C 5.573401 2.232325 -2.253056
 C 4.653536 1.325004 -2.789253
 H 4.893863 0.801519 -3.714039
 C 2.354393 -3.462162 -3.108321
 H 1.757444 -3.405854 -4.016551
 C 3.301738 -4.467989 -2.955391
 H 3.454419 -5.197687 -3.748889
 C 4.050726 -4.552905 -1.783041
 H 4.785210 -5.346835 -1.660349
 C -5.203444 1.449733 0.660606
 H -5.205440 1.998254 -0.274016
 C 0.259793 0.169823 3.420884
 H 0.843544 -0.717122 3.658466
 C -4.005723 1.090494 1.284689
 C -6.467623 0.399461 2.422962
 H -7.424936 0.131195 2.865788
 C -6.293004 -2.066086 -0.887667
 H -7.173188 -2.054250 -0.246243
 C -5.280536 0.034140 3.048825
 H -5.302083 -0.526254 3.981076
 C 0.853448 -3.865598 3.861465
 H 0.397880 -4.406857 4.688901
 C 2.174622 -3.440198 3.954171
 H 2.755267 -3.655239 4.849586
 C -5.043747 -1.817413 -0.331040
 H -4.928256 -1.620012 0.732035
 C -7.785047 -2.608555 -2.846944
 H -7.967905 -1.979169 -3.726410
 H -8.588930 -2.429782 -2.125811
 H -7.858957 -3.652478 -3.178944
 C 0.115584 -3.602042 2.709115
 H -0.920840 -3.922645 2.624235
 C 0.695434 -2.903087 1.660240
 H 0.120418 -2.685653 0.761068
 H -2.856603 0.530740 -1.568521
 H -1.234403 1.948526 -2.673205

YGeCl

E = -4436.40897421

C -2.423513 1.436554 0.020717

C -2.822385 1.315872 1.347431

H -2.170648 1.654762 2.151556

C 2.604484 -3.037949 2.489793

H 3.504670 -3.648383 2.477593

C 2.265173 -2.298878 1.364505

H 2.916023 -2.303920 0.494881

C 1.817236 -2.976898 3.634556

H 2.093642 -3.551024 4.516572

C 0.346093 1.116681 0.535298

Ge 2.129864 2.497555 0.839006

O -0.575420 1.837515 -1.792781

S -0.805644 2.083653 -0.363997

P 0.618580 -0.528519 -0.061066

C -4.063919 0.765585 1.632959

H -4.378148 0.659767 2.670320

C -1.117036 -1.215773 -2.121778

H -0.420832 -0.671124 -2.754023

C 2.326146 0.500138 -2.005749

H 2.060756 1.485243 -1.630418

C 0.342127 -1.425229 2.536614

H -0.534478 -0.779276 2.572898

C 2.950418 -2.028503 -3.014725

H 3.188192 -3.012813 -3.412357

C 1.793326 -0.644250 -1.416558

C 2.087190 -1.910034 -1.934731

H 1.632507 -2.800758 -1.502643

C 1.119531 -1.503466 1.377463

C 0.689779 -2.164256 3.660145

H 0.082930 -2.094476 4.560206

C 3.499046 -0.886203 -3.591850

H 4.172928 -0.979339 -4.441363

C -4.924340 0.356171 0.609497

C -2.936013 -2.557492 -0.497192

H -3.644662 -3.080255 0.142147

O -0.742298 3.432273 0.190722
 C -1.799211 -1.988772 0.062646
 H -1.628640 -2.087215 1.130569
 C 3.179055 0.371867 -3.095108
 H 3.595260 1.265788 -3.553661
 C -0.877335 -1.321223 -0.747850
 C -3.161539 -2.466662 -1.866733
 H -4.048978 -2.920442 -2.303927
 C -4.513692 0.533446 -0.713398
 H -5.175584 0.232752 -1.524503
 C -2.253249 -1.792876 -2.675103
 H -2.427858 -1.711419 -3.745946
 C -3.267941 1.066038 -1.015381
 H -2.928460 1.182068 -2.041665
 C -6.242829 -0.284417 0.920176
 H -7.025117 0.052153 0.230621
 H -6.567844 -0.065437 1.942479
 H -6.174027 -1.377107 0.822092
 H 0.052012 1.074612 1.584858
 H 1.707820 2.525284 2.382005
 Cl 3.553919 0.688412 1.115649

YGeHMDS

E = -4850.19171900
 C -2.703412 -2.003022 0.010819
 C -3.031998 -2.404396 -1.282024
 H -2.244109 -2.605431 -2.007175
 C 0.077085 4.407372 -2.257030
 H 0.609289 5.350593 -2.155207
 C 0.006421 3.542699 -1.170692
 H 0.503812 3.810282 -0.243365
 C -0.511837 4.063667 -3.467045
 H -0.448967 4.740502 -4.316632
 C -0.438405 -0.429559 -0.568704
 Ge 1.569308 -0.934397 -1.707044
 O -0.940567 -1.325030 1.836306
 S -0.986986 -1.766795 0.433723

P -0.784225 1.164240 0.101372
 C -4.366370 -2.555861 -1.621258
 H -4.630230 -2.865395 -2.631793
 C -2.664222 1.195692 2.163035
 H -1.824467 0.943644 2.805814
 C 1.266086 0.688658 1.905652
 H 1.384172 -0.271917 1.418347
 C -1.242895 1.977199 -2.514437
 H -1.754808 1.024849 -2.637526
 C 0.999142 3.183982 3.136145
 H 0.892102 4.153307 3.618247
 C 0.321327 1.603037 1.445342
 C 0.171304 2.844387 2.076366
 H -0.603355 3.537485 1.750772
 C -0.655475 2.320334 -1.291044
 C -1.172926 2.846018 -3.593718
 H -1.627883 2.564686 -4.540900
 C 1.949678 2.272688 3.592047
 H 2.591466 2.533884 4.431238
 C -5.381931 -2.330871 -0.682381
 C -4.826851 1.752323 0.497469
 H -5.669262 1.969055 -0.156003
 O -0.289456 -2.982575 0.030794
 C -3.547043 1.669966 -0.035730
 H -3.401444 1.834050 -1.100437
 C 2.070652 1.028136 2.987854
 H 2.799642 0.310776 3.354946
 C -2.457360 1.393593 0.794370
 C -5.027808 1.565300 1.861337
 H -6.030555 1.636275 2.278499
 C -5.018291 -1.962104 0.612299
 H -5.793256 -1.793720 1.358816
 C -3.946171 1.289384 2.690938
 H -4.099245 1.138311 3.757640
 C -3.683457 -1.799852 0.968172
 H -3.393398 -1.511883 1.974874
 C -6.820603 -2.498922 -1.067714

H -7.028311 -3.531634 -1.375890
 H -7.082375 -1.853308 -1.915583
 H -7.489846 -2.255111 -0.236579
 H -0.923807 -0.515514 -1.544026
 H 1.618897 0.632144 -2.066201
 Si 4.047750 0.527208 -0.400402
 Si 3.404244 -2.426496 0.302579
 C 2.791699 -3.840200 -0.767885
 H 1.699936 -3.862727 -0.837376
 H 3.204302 -3.777123 -1.783075
 H 3.128903 -4.785500 -0.319774
 C 5.272351 -2.673904 0.448060
 H 5.700491 -2.213607 1.344821
 H 5.470543 -3.752732 0.505174
 H 5.811450 -2.286004 -0.426398
 C 2.681345 -2.621343 2.029328
 H 2.939761 -3.606419 2.440511
 H 3.081782 -1.864225 2.716682
 H 1.587516 -2.542236 2.021181
 C 3.202953 2.211038 -0.273039
 H 3.878157 2.954979 -0.718839
 H 2.265905 2.234240 -0.835624
 H 3.008270 2.516229 0.761982
 C 5.002867 0.531439 -2.023996
 H 4.307142 0.630310 -2.868565
 H 5.722383 1.359329 -2.079441
 H 5.552848 -0.409624 -2.154067
 N 2.973940 -0.861836 -0.386308
 C 5.293864 0.507994 1.022222
 H 6.199274 -0.059720 0.783438
 H 5.594707 1.541618 1.239394
 H 4.866248 0.087611 1.941698

YGeB¹

E = -4652.07484986
 C 3.373992 -1.146762 -1.258555
 C 3.061901 -2.065652 -2.256072

H 2.217439 -1.878033 -2.914269
 C -3.136767 -0.186132 2.597152
 H -4.175802 0.045403 2.373477
 C -2.138999 0.440710 1.864012
 H -2.413325 1.142021 1.080532
 C -2.809411 -1.115407 3.577499
 H -3.596442 -1.622167 4.132312
 C 0.980580 -0.236959 -0.111227
 Ge -0.394781 -1.497840 -1.195800
 O 3.147375 1.291301 -0.296845
 S 2.384834 0.315747 -1.092578
 P 0.529070 0.924643 1.176791
 C 3.841611 -3.206080 -2.374312
 H 3.603630 -3.935423 -3.147162
 C 2.043623 2.377353 3.047257
 H 1.359585 3.201998 2.863664
 C 0.564249 3.169554 -0.477703
 H 1.202204 2.618328 -1.159366
 C -0.469943 -0.754731 3.139711
 H 0.570456 -0.969417 3.371410
 C -1.103996 4.635907 1.213401
 H -1.758817 5.202618 1.871986
 C 0.003801 2.563215 0.649368
 C -0.832629 3.303654 1.495263
 H -1.261327 2.845431 2.383334
 C -0.797346 0.165310 2.141398
 C -1.475728 -1.401493 3.845768
 H -1.214041 -2.127876 4.611870
 C -0.528473 5.241510 0.101912
 H -0.732939 6.288452 -0.113862
 C 4.929193 -3.433775 -1.524289
 C 3.838165 0.299245 3.498559
 H 4.542091 -0.513749 3.664544
 O 1.940839 0.710413 -2.428474
 C 2.809076 0.139751 2.580844
 H 2.732256 -0.795330 2.029126
 C 0.300689 4.508238 -0.737234

H 0.741126 4.970782 -1.616088
 C 1.898862 1.175425 2.355643
 C 3.974651 1.497684 4.191989
 H 4.785922 1.625194 4.905853
 C 5.229422 -2.477785 -0.550744
 H 6.087915 -2.630835 0.101589
 C 3.078623 2.534567 3.962287
 H 3.187146 3.478513 4.492361
 C 4.458695 -1.329925 -0.410774
 H 4.698818 -0.565837 0.325815
 C 5.751985 -4.678611 -1.664161
 H 6.114445 -4.800275 -2.692234
 H 5.156415 -5.569711 -1.426726
 H 6.619282 -4.665834 -0.996436
 H 1.363300 -1.083555 0.473531
 H -0.591035 -2.308689 0.157472
 N -3.473428 -1.218720 -0.580555
 C -4.116765 0.846184 -1.147386
 C -4.533641 -0.323053 -0.623324
 H -4.720803 1.708296 -1.397405
 H -5.542593 -0.609369 -0.350225
 C -2.117713 1.790568 -2.173332
 C -0.987507 1.512367 -2.945297
 C -2.620203 3.098171 -2.169128
 C -0.394042 2.506123 -3.711529
 H -0.573858 0.507730 -2.961902
 C -2.039978 4.078427 -2.963764
 H -3.469180 3.356571 -1.541977
 C -0.927305 3.790236 -3.746898
 H 0.494652 2.256248 -4.286897
 H -2.458357 5.083820 -2.956109
 H -0.474574 4.560730 -4.368106
 C -3.638637 -2.525380 -0.097503
 C -2.915835 -3.580767 -0.659501
 C -4.544519 -2.807154 0.930385
 C -3.067784 -4.873887 -0.180032
 H -2.248802 -3.384224 -1.496775

C -4.702649 -4.106096 1.397335
H -5.119285 -2.000016 1.377305
C -3.959555 -5.146891 0.852322
H -2.489867 -5.678585 -0.630661
H -5.411357 -4.302526 2.200255
H -4.081197 -6.163061 1.221720
N -2.761921 0.762398 -1.464445
B -2.267984 -0.552752 -1.065088

Y^{Ph}_2Ge

E = -4695.21551874
P 2.683237 0.425874 -0.023739
P -2.658418 0.344377 0.058047
C 1.322031 -0.670552 0.166870
C 1.605954 -2.129443 0.121789
C 2.245296 -2.779561 1.184991
H 2.540824 -2.203296 2.059571
C 2.471438 -4.149982 1.147707
H 2.968376 -4.635398 1.986142
C 2.041098 -4.905453 0.060985
H 2.199483 -5.981992 0.043430
C 1.387693 -4.275108 -0.992728
H 1.023032 -4.856364 -1.837299
C 1.184752 -2.901700 -0.966305
H 0.668196 -2.416611 -1.793111
C 3.760030 0.585382 1.419273
C 5.099551 0.951969 1.247681
H 5.506886 1.081997 0.247151
C 5.913877 1.141166 2.356387
H 6.956064 1.421854 2.218780
C 5.399399 0.965178 3.637764
H 6.041458 1.109112 4.504857
C 4.068564 0.601038 3.810130
H 3.662553 0.457626 4.809291
C 3.244295 0.412416 2.706384
H 2.202106 0.115417 2.848431
C 2.013411 2.060435 -0.414473

C 2.156804 3.139062 0.456861
 H 2.684984 3.012284 1.399212
 C 1.613124 4.374161 0.121565
 H 1.723522 5.212966 0.805734
 C 0.932030 4.537172 -1.080403
 H 0.511883 5.506918 -1.340504
 C 0.781073 3.459418 -1.948699
 H 0.242951 3.575824 -2.886096
 C 1.315133 2.221328 -1.615378
 H 1.198545 1.383564 -2.300148
 C 3.815115 -0.003148 -1.387567
 C 4.340356 -1.302394 -1.417927
 H 4.089077 -2.015750 -0.636579
 C 5.188647 -1.686316 -2.447772
 H 5.585416 -2.699226 -2.464017
 C 5.527906 -0.784027 -3.451492
 H 6.191930 -1.089429 -4.257851
 C 5.022127 0.510343 -3.418335
 H 5.293440 1.223958 -4.193876
 C 4.170016 0.902995 -2.391491
 H 3.789926 1.921233 -2.371115
 C -1.661918 -0.812493 0.782068
 C -1.854380 -2.237954 0.506934
 C -1.348378 -3.211638 1.399540
 H -0.830875 -2.873600 2.296163
 C -1.469778 -4.568851 1.157067
 H -1.049315 -5.274125 1.873333
 C -2.115391 -5.039235 0.013505
 H -2.206540 -6.106662 -0.177884
 C -2.638974 -4.108289 -0.874953
 H -3.152074 -4.441925 -1.776634
 C -2.509811 -2.744661 -0.637526
 H -2.924236 -2.054464 -1.371487
 C -4.396593 -0.227281 -0.065056
 C -4.846439 -1.094046 0.936389
 H -4.147844 -1.416496 1.706679
 C -6.158680 -1.548591 0.930645

H -6.496869 -2.228172 1.710438
 C -7.032132 -1.148625 -0.076034
 H -8.059369 -1.508748 -0.082545
 C -6.587275 -0.295570 -1.079773
 H -7.264391 0.013632 -1.873966
 C -5.273520 0.162636 -1.077319
 H -4.934092 0.817460 -1.875980
 C -2.770658 1.914367 0.981600
 C -1.884230 2.964525 0.732285
 H -1.127117 2.859691 -0.039736
 C -1.955526 4.133667 1.478526
 H -1.256200 4.942676 1.275814
 C -2.906516 4.262281 2.486090
 H -2.960555 5.178100 3.072130
 C -3.786856 3.217452 2.744201
 H -4.531760 3.311080 3.531982
 C -3.720703 2.048204 1.994302
 H -4.414410 1.235397 2.198049
 C -2.256828 0.909825 -1.658270
 C -2.729340 2.100612 -2.218417
 H -3.356328 2.766571 -1.627126
 C -2.398150 2.442634 -3.524924
 H -2.770413 3.372132 -3.952760
 C -1.589755 1.599967 -4.284439
 H -1.333307 1.867962 -5.307992
 C -1.113073 0.414770 -3.733352
 H -0.483096 -0.248705 -4.323552
 C -1.443002 0.075077 -2.424607
 H -1.073549 -0.847092 -1.977334
 Ge -0.083759 -0.276716 1.878709
 H -0.080785 1.278512 1.523975
 H 0.649586 -0.365727 -0.642684

Y^{Ph}GeCl

E = -3847.83180999
 P 0.692082 0.240952 -0.035087
 C -0.740778 -0.186528 -0.990777

C -1.991874 0.566820 -0.729393
 C -2.891418 0.773794 -1.783361
 H -2.651534 0.371754 -2.766724
 C -4.084495 1.451563 -1.583368
 H -4.766364 1.593929 -2.420058
 C -4.415710 1.941619 -0.322830
 H -5.353586 2.470362 -0.165737
 C -3.536335 1.739303 0.732973
 H -3.780076 2.110154 1.726929
 C -2.341479 1.059011 0.532817
 H -1.670939 0.920403 1.379967
 C 2.163961 -0.147963 -1.014516
 C 2.889490 0.852697 -1.663264
 H 2.603656 1.896635 -1.554471
 C 3.987814 0.512053 -2.444902
 H 4.553718 1.293313 -2.947941
 C 4.362287 -0.820401 -2.579405
 H 5.222493 -1.083261 -3.192076
 C 3.641847 -1.817686 -1.928882
 H 3.933726 -2.860620 -2.031910
 C 2.545015 -1.487753 -1.143491
 H 1.973650 -2.267079 -0.639761
 C 0.885709 -0.664057 1.512930
 C 2.150140 -0.732224 2.110439
 H 3.010474 -0.271152 1.626900
 C 2.309647 -1.405049 3.314057
 H 3.292403 -1.458165 3.777907
 C 1.215592 -2.022400 3.915681
 H 1.345044 -2.558161 4.854176
 C -0.035025 -1.970425 3.312061
 H -0.888211 -2.473029 3.761935
 C -0.207812 -1.291512 2.110775
 H -1.186941 -1.292428 1.632838
 C 0.752924 2.015613 0.340476
 C 0.251371 2.901738 -0.618552
 H -0.191196 2.517715 -1.535979
 C 0.290265 4.269862 -0.386471

H -0.107050 4.954556 -1.132568
 C 0.817784 4.759872 0.804557
 H 0.839243 5.832220 0.988556
 C 1.304606 3.880573 1.765206
 H 1.706251 4.261578 2.701800
 C 1.272660 2.509277 1.537460
 H 1.639921 1.825967 2.299385
 Cl -2.889253 -2.408223 0.234877
 Ge -1.004433 -2.386873 -1.067963
 H -1.806040 -2.129424 -2.423449
 H -0.417837 -0.076601 -2.032851

Y^{Ph}GeHMDS

E = -4261.61961327
 P -1.834875 0.116893 -0.143639
 C -0.343366 -0.392051 -0.939757
 C 0.138990 -1.732701 -0.520934
 C 0.118352 -2.815543 -1.410752
 H -0.214374 -2.651925 -2.435701
 C 0.535369 -4.081012 -1.021120
 H 0.512811 -4.899848 -1.738161
 C 0.975411 -4.303497 0.280214
 H 1.293312 -5.296251 0.592226
 C 1.022333 -3.237079 1.170582
 H 1.390299 -3.388711 2.183930
 C 0.629317 -1.965453 0.769657
 H 0.725311 -1.128685 1.456017
 C -3.172561 -1.116117 -0.213660
 C -4.195870 -1.178338 0.736814
 H -4.185820 -0.511321 1.596861
 C -5.226733 -2.098847 0.590137
 H -6.019310 -2.143632 1.334292
 C -5.243165 -2.961532 -0.501193
 H -6.048696 -3.685111 -0.609839
 C -4.229930 -2.900244 -1.451615
 H -4.238250 -3.574371 -2.305399
 C -3.199117 -1.980405 -1.310130

H -2.406388 -1.935176 -2.052346
 C -2.492882 1.581934 -0.974301
 C -3.703138 2.111471 -0.515852
 H -4.219020 1.647811 0.323839
 C -4.247984 3.231621 -1.125535
 H -5.188667 3.641529 -0.764115
 C -3.588903 3.827128 -2.198327
 H -4.015647 4.706174 -2.677434
 C -2.386552 3.302468 -2.655752
 H -1.866025 3.769505 -3.488901
 C -1.831384 2.180514 -2.047038
 H -0.880847 1.789795 -2.405305
 C -1.651304 0.542709 1.603916
 C -1.677066 -0.459984 2.578232
 H -1.833786 -1.497657 2.289279
 C -1.494194 -0.130235 3.915436
 H -1.511169 -0.912553 4.671144
 C -1.290426 1.196388 4.283689
 H -1.147514 1.452037 5.331794
 C -1.261351 2.194489 3.316350
 H -1.089172 3.229563 3.602468
 C -1.434978 1.872766 1.975767
 H -1.390681 2.648148 1.215340
 N 2.721337 0.380120 -0.218100
 Si 3.411181 0.543399 1.378723
 Si 3.683536 -0.097187 -1.602126
 C 2.135690 1.205162 2.597652
 H 1.785775 2.207105 2.322448
 H 1.247859 0.563455 2.670419
 H 2.589264 1.257586 3.597222
 C 4.039609 -1.081715 2.101318
 H 5.008982 -1.380686 1.688624
 H 4.162041 -0.974549 3.187950
 H 3.331834 -1.897548 1.915870
 C 4.850043 1.762934 1.371788
 H 5.272792 1.895440 2.376810
 H 5.660150 1.426272 0.711941

H 4.514805 2.743799 1.009611
 C 5.166861 -1.151334 -1.102198
 H 5.726296 -1.420091 -2.008729
 H 5.861335 -0.633186 -0.429612
 H 4.849689 -2.082412 -0.616464
 C 4.365466 1.424030 -2.480784
 H 4.991554 1.147290 -3.339786
 H 3.550571 2.062176 -2.843823
 H 4.977954 2.019671 -1.791116
 C 2.734226 -1.147184 -2.840319
 H 1.757172 -0.716919 -3.088534
 H 3.315504 -1.224281 -3.769420
 H 2.581467 -2.159791 -2.450049
 H -0.544037 -0.355183 -2.017170
 Ge 1.103325 1.374175 -0.567703
 H 1.289385 1.425671 -2.164471

$Y^{Ph}GeB^1$

E = -4063.50254157
 P 1.891150 -0.276072 0.035673
 C 0.504609 0.715354 0.575730
 C -0.046845 1.483060 -0.580982
 C -0.854428 0.869674 -1.547367
 H -1.150594 -0.169443 -1.414328
 C -1.297588 1.578008 -2.657698
 H -1.931054 1.082383 -3.391014
 C -0.939828 2.913061 -2.829530
 H -1.287260 3.465725 -3.700513
 C -0.151030 3.538241 -1.869827
 H 0.118254 4.587032 -1.979741
 C 0.286506 2.831176 -0.757653
 H 0.900068 3.328760 -0.007805
 C 1.484156 -1.575520 -1.159755
 C 2.309854 -1.798473 -2.267481
 H 3.176927 -1.167805 -2.445528
 C 2.025416 -2.833926 -3.150697
 H 2.672178 -2.998199 -4.010170

C 0.921704 -3.651418 -2.936406
 H 0.700132 -4.459291 -3.631519
 C 0.105586 -3.440947 -1.829630
 H -0.757026 -4.076495 -1.645998
 C 0.385714 -2.414289 -0.938145
 H -0.236452 -2.271061 -0.051923
 C 2.734443 -1.039985 1.435687
 C 3.616084 -2.096068 1.197437
 H 3.732119 -2.493168 0.190245
 C 4.335096 -2.649080 2.250249
 H 5.016280 -3.476580 2.063375
 C 4.176696 -2.149445 3.538358
 H 4.736536 -2.586107 4.363149
 C 3.295903 -1.098438 3.776431
 H 3.159442 -0.716339 4.785681
 C 2.571541 -0.541816 2.730361
 H 1.860093 0.255910 2.931468
 C 3.124795 0.784285 -0.772911
 C 2.814290 1.371271 -2.007345
 H 1.883476 1.121540 -2.514973
 C 3.694292 2.275480 -2.586491
 H 3.444071 2.728289 -3.543494
 C 4.882790 2.606249 -1.942452
 H 5.569153 3.317045 -2.398680
 C 5.193171 2.029418 -0.716141
 H 6.122142 2.284844 -0.210523
 C 4.318065 1.121491 -0.130005
 H 4.565594 0.673853 0.830162
 N -3.194438 1.408292 0.687898
 C -4.508842 -0.071367 -0.356389
 C -4.333957 1.236719 -0.088282
 H -5.332058 -0.551468 -0.872824
 H -4.989436 2.061176 -0.340461
 B -2.587877 0.105709 0.939700
 N -3.490700 -0.804118 0.244033
 C -3.366639 -2.183152 0.005092
 C -3.642141 -2.702628 -1.264771

C -2.987742 -3.061255 1.025030
 C -3.558592 -4.069322 -1.504047
 H -3.916688 -2.022262 -2.068203
 C -2.877963 -4.422380 0.771141
 H -2.792678 -2.666748 2.017401
 C -3.170559 -4.937583 -0.488975
 H -3.786751 -4.453955 -2.496735
 H -2.579189 -5.089946 1.577159
 H -3.101638 -6.007581 -0.675124
 C -2.677011 2.691073 0.933215
 C -1.866386 2.931599 2.046267
 C -2.944971 3.746606 0.056559
 C -1.316194 4.188444 2.254655
 H -1.665954 2.115852 2.733567
 C -2.405832 5.006681 0.283490
 H -3.535721 3.570399 -0.838376
 C -1.579702 5.236749 1.376830
 H -0.683761 4.352677 3.125977
 H -2.619634 5.810896 -0.418716
 H -1.151845 6.222575 1.548113
 H 0.955648 1.416986 1.289028
 Ge -0.769298 -0.584245 1.786318
 H -0.635488 0.384396 3.040722

V^{Ge}

E = -3097.32626955
 C 1.651092 2.336652 0.010224
 C -0.489004 1.231229 -0.205966
 C -1.087048 2.471354 -0.412545
 C -0.329981 3.642290 -0.382882
 C 1.037007 3.576144 -0.158839
 H 2.729138 2.307413 0.169611
 H -2.154743 2.524279 -0.608728
 H -0.819157 4.601516 -0.539749
 H 1.636055 4.484179 -0.123865
 N -1.165883 0.005310 -0.228551
 C -2.540395 -0.162106 -0.054448

C -3.304085 0.655658 0.792861
 C -3.182022 -1.234870 -0.689734
 C -4.658308 0.412375 0.974487
 H -2.821491 1.471144 1.324614
 C -4.534135 -1.479842 -0.490554
 H -2.604167 -1.872232 -1.358232
 C -5.286716 -0.653327 0.336321
 H -5.228109 1.059648 1.639518
 H -5.004790 -2.320261 -0.998154
 H -6.348190 -0.838648 0.485711
 C 0.923202 1.141631 -0.024780
 C 1.461101 -0.209984 0.071856
 P 3.097713 -0.604027 0.158827
 C 4.139983 -0.013851 -1.218374
 H 4.019293 1.069876 -1.318687
 H 5.198701 -0.250060 -1.061064
 H 3.785139 -0.480824 -2.143127
 C 3.980453 -0.021401 1.645384
 H 5.043193 -0.288792 1.617573
 H 3.882148 1.066502 1.721094
 H 3.503693 -0.466956 2.524663
 C 3.286257 -2.403794 0.167468
 H 4.344473 -2.679133 0.223472
 H 2.758220 -2.820099 1.032250
 H 2.854022 -2.818060 -0.750294
 Ge 0.027773 -1.430700 -0.137473
 H -0.388313 -2.355791 1.029535
 H 0.017238 -2.317001 -1.412427

Vl^{Ge}

E = -3646.45487748
 C -0.757405 3.469557 0.261015
 C -0.474801 2.119998 0.087234
 C -1.443612 1.181964 -0.306668
 C -2.756055 1.652787 -0.452453
 C -3.051505 2.994593 -0.264083
 C -2.057612 3.914589 0.071533

H 0.044922 4.138360 0.564241
 H -3.530972 0.946576 -0.742826
 H -4.076195 3.336260 -0.401358
 H -2.299801 4.966955 0.198985
 N -1.074178 -0.122675 -0.606814
 S 1.075141 1.526584 0.680974
 O 1.966311 2.665939 0.898482
 O 0.774378 0.644436 1.829438
 C -1.772422 -1.183944 -0.038111
 C -2.270041 -1.089035 1.273548
 C -1.940058 -2.398731 -0.721093
 C -2.918758 -2.163669 1.864840
 H -2.107109 -0.167547 1.828994
 C -2.575697 -3.473585 -0.112216
 H -1.569519 -2.486402 -1.740580
 C -3.075908 -3.366975 1.181518
 H -3.292257 -2.063214 2.882969
 H -2.694994 -4.403265 -0.666917
 H -3.580757 -4.208355 1.651225
 C 1.788253 0.442827 -0.539582
 H 2.524504 1.011962 -1.118244
 P 2.579487 -0.909707 0.308424
 C 3.648034 -0.388734 1.667413
 H 4.342363 0.374247 1.299471
 H 3.014463 0.051930 2.442580
 H 4.207163 -1.243540 2.064032
 C 3.629142 -1.715471 -0.918317
 H 4.111298 -2.594219 -0.476547
 H 2.998180 -2.020513 -1.761390
 H 4.395540 -1.016960 -1.270507
 C 1.401535 -2.130229 0.900555
 H 1.942696 -2.933957 1.411907
 H 0.703491 -1.634529 1.581408
 H 0.847288 -2.536904 0.046798
 Ge 0.353537 -0.381104 -1.940487
 H 0.167160 1.078762 -2.527082

VII^{Ge}

E = -4408.58161691

C 0.437567 1.767939 0.503143

C -0.370958 1.723489 -0.633474

C -0.727769 2.920057 -1.254022

C -0.323719 4.143391 -0.738009

C 0.461196 4.183924 0.407982

C 0.843482 2.999768 1.021653

H -1.345887 2.854480 -2.146259

H -0.621684 5.064973 -1.234437

H 0.782208 5.135186 0.827092

H 1.472920 3.007463 1.907885

S 0.951203 0.402869 1.578114

S -0.930714 0.204728 -1.480979

O 2.186617 0.900075 2.218884

O -0.176539 0.077882 2.448966

O 0.315245 -0.238148 -2.154830

O -2.033882 0.713598 -2.320645

C -1.397823 -0.912075 -0.353645

P -2.886118 -0.608925 0.425593

P 2.831881 -0.739255 -0.427100

C -3.035519 -1.597547 1.922709

H -3.980682 -1.360811 2.423854

H -2.998624 -2.662144 1.674380

H -2.177679 -1.353638 2.559237

C -3.123350 1.111222 0.955138

H -3.084960 1.755848 0.070444

H -4.090140 1.231193 1.456844

H -2.305328 1.368337 1.636555

C -4.324949 -0.963653 -0.621540

H -4.323597 -2.029992 -0.871040

H -5.270819 -0.690437 -0.139519

H -4.180000 -0.389659 -1.543962

C 2.848304 -1.908593 -1.790367

H 3.751622 -1.744610 -2.389146

H 2.824232 -2.930313 -1.400418

H 1.940295 -1.730570 -2.378985

C 2.980614 0.919782 -1.110448
H 3.044782 1.641315 -0.290538
H 3.901690 0.946486 -1.703763
H 2.113629 1.118681 -1.746385
C 4.327386 -0.987929 0.558372
H 5.229791 -0.790071 -0.030384
H 4.264010 -0.299742 1.409461
H 4.352505 -2.018401 0.929392
Ge -0.080985 -2.410786 -0.065487
H -0.502996 -2.656890 1.459283
C 1.426393 -1.034328 0.644661
H 1.825300 -1.640285 1.472485

VIII^{Ge}

E = -3616.56412120
C 0.460452 3.491562 0.465307
C 0.104197 2.144795 0.471244
C -1.032747 1.577199 -0.134073
C -1.883412 2.500832 -0.771257
C -1.579111 3.849627 -0.771550
C -0.416206 4.356931 -0.160472
H 1.370702 3.838486 0.950267
H -2.793962 2.147941 -1.252463
H -2.262974 4.547576 -1.252521
H -0.214569 5.425410 -0.175525
B -1.078963 0.006548 0.021363
S 1.046356 0.816305 1.018535
O 1.955300 0.980711 2.152111
O -0.082416 -0.210586 1.250313
C -2.433663 -0.759815 0.252821
C -2.748187 -1.369336 1.473962
C -3.389263 -0.846351 -0.770449
C -3.958189 -2.028368 1.667743
H -2.028011 -1.320635 2.289952
C -4.605181 -1.492475 -0.581154
H -3.168754 -0.409585 -1.746030
C -4.895845 -2.089603 0.642195

H -4.173578 -2.493922 2.629008
H -5.326934 -1.540484 -1.395658
H -5.844249 -2.602831 0.792490
C 1.823666 0.153591 -0.448002
H 2.306715 0.968511 -0.996080
P 2.968154 -1.134624 -0.027189
C 4.419560 -0.551626 0.882763
H 4.976342 0.154545 0.256792
H 4.073107 -0.035861 1.783712
H 5.070868 -1.392281 1.147307
C 3.581207 -1.916269 -1.527802
H 4.331710 -2.671592 -1.266381
H 2.727357 -2.361956 -2.049983
H 4.034371 -1.153903 -2.171064
C 2.128324 -2.348739 0.997162
H 2.780616 -3.213370 1.157438
H 1.872227 -1.882491 1.954670
H 1.205708 -2.647080 0.484106
H 0.203316 0.510799 -2.586051
Ge 0.204817 -0.754195 -1.621861

***IX*^{Ge}**

E = -3067.36305632
C -1.715411 2.374961 -0.186940
C 0.427134 1.237698 -0.014369
C 1.001840 2.465489 0.351243
C 0.243582 3.622717 0.458743
C -1.121036 3.575132 0.187318
H -2.775862 2.371750 -0.429535
H 2.066295 2.498397 0.579610
H 0.708233 4.560760 0.757862
H -1.725469 4.478181 0.257878
B 1.194272 -0.125233 -0.080276
C 2.745177 -0.236782 -0.048420
C 3.562866 0.649802 -0.772867
C 3.392826 -1.262600 0.662749
C 4.946431 0.517548 -0.791426

H 3.099503 1.449590 -1.350530
 C 4.776138 -1.383829 0.671085
 H 2.788739 -1.973435 1.226488
 C 5.559749 -0.495353 -0.060714
 H 5.551094 1.211530 -1.373759
 H 5.248270 -2.181576 1.242737
 H 6.644043 -0.594684 -0.064224
 C -0.960525 1.202946 -0.293756
 P -3.120044 -0.558947 -0.057894
 C -3.122926 -0.384724 1.734426
 H -2.937727 0.665806 1.985028
 H -4.082327 -0.706142 2.152235
 H -2.303505 -0.999531 2.125996
 C -4.576353 0.360446 -0.659763
 H -5.493781 -0.146009 -0.338502
 H -4.584341 1.381912 -0.269851
 H -4.553218 0.398097 -1.754504
 C -3.496037 -2.270068 -0.488876
 H -4.492295 -2.539879 -0.122349
 H -3.463330 -2.380253 -1.578655
 H -2.729477 -2.914126 -0.043891
 Ge -0.166721 -1.622016 0.032276
 H -0.066838 -2.443345 -1.306328
 C -1.531871 -0.127185 -0.695067
 H -1.523128 -0.299364 -1.778941

3.7.2.3 Reaktionspfad C

VIII^{Ge}

E = -3616.57722538
 C 0.385038 3.274442 0.670443
 C -0.023618 1.957738 0.557313
 C -1.237127 1.529616 0.028048
 C -2.114950 2.522298 -0.400138
 C -1.751078 3.862797 -0.291686
 C -0.515285 4.241643 0.235961
 H 1.354095 3.536782 1.089249

H -3.086592 2.251587 -0.810784
 H -2.445080 4.634806 -0.620046
 H -0.258638 5.295963 0.314955
 B -1.300631 -0.077850 0.066042
 S 0.934066 0.539709 0.985024
 O 1.650540 0.612244 2.262816
 O -0.323987 -0.435575 1.130641
 C 1.812536 0.012309 -0.319795
 C -2.663232 -0.866287 0.162230
 C -2.972065 -1.637547 1.287623
 C -3.616635 -0.794503 -0.860917
 C -4.187637 -2.306419 1.392247
 H -2.242710 -1.707092 2.093580
 C -4.834376 -1.457595 -0.762869
 H -3.396562 -0.217416 -1.760188
 C -5.123643 -2.216940 0.367459
 H -4.406942 -2.900125 2.278646
 H -5.559640 -1.387616 -1.572245
 H -6.075676 -2.739249 0.446937
 P 3.073422 -1.064628 0.156942
 C 4.430326 -0.215950 0.997982
 H 5.213382 -0.922783 1.294433
 H 4.841359 0.539855 0.321012
 H 4.011457 0.280240 1.878930
 C 3.774373 -1.841123 -1.311359
 H 4.139406 -1.064080 -1.990823
 H 4.600096 -2.498658 -1.018597
 H 2.997306 -2.415006 -1.826672
 C 2.557384 -2.404944 1.263839
 H 2.131689 -1.946537 2.163447
 H 1.776095 -2.988319 0.764861
 H 3.397607 -3.053488 1.536276
 Ge 0.773175 -0.282974 -2.031422
 H 0.337593 1.230172 -2.176250
 H -0.745590 -0.521097 -1.091864

IX^{Ge}

E = -3067.36728974

C -1.703673 2.296111 0.068870

C 0.444651 1.161358 -0.200908

C 1.045166 2.428457 -0.268544

C 0.305652 3.598238 -0.198838

C -1.079031 3.526253 -0.034030

H -2.781368 2.272779 0.229634

H 2.123941 2.485783 -0.409719

H 0.797697 4.565926 -0.278419

H -1.671105 4.438368 0.026586

B 1.274190 -0.159655 -0.379300

C 2.829846 -0.280719 -0.196417

C 3.611907 -1.079337 -1.042943

C 3.499883 0.406323 0.827902

C 4.988390 -1.189898 -0.880783

H 3.126210 -1.624856 -1.852253

C 4.875288 0.301872 0.999502

H 2.924190 1.031641 1.510413

C 5.626762 -0.497778 0.143350

H 5.567465 -1.816893 -1.557523

H 5.365095 0.845084 1.806636

H 6.704581 -0.580873 0.273995

C -0.971063 1.092682 -0.004396

C -1.542904 -0.238735 0.121768

P -3.214887 -0.564927 -0.043129

C -4.276877 0.030903 1.312435

H -4.177006 1.115053 1.419666

H -5.327851 -0.222936 1.131943

H -3.936714 -0.437115 2.242361

C -3.941467 0.124959 -1.558942

H -5.022529 -0.048446 -1.599153

H -3.736923 1.199464 -1.600154

H -3.454578 -0.348895 -2.417642

C -3.546159 -2.340027 -0.112079

H -4.625700 -2.508261 -0.189273

H -3.037585 -2.773265 -0.978243

H -3.165361 -2.821692 0.794186
 Ge -0.155722 -1.493801 0.361157
 H 0.814455 -0.830341 -1.346157
 H -0.649671 -2.910684 -0.076174

3.7.3 Bei Stannylene

3.7.3.1 Reaktionspfad A

Y_2Sn

E = -3797.77917506
 C -4.748563 -2.186115 0.563915
 H -4.615272 -2.098582 1.639385
 C -3.691900 -1.861047 -0.270138
 C 3.691884 1.861097 -0.270030
 O -1.128573 -2.292899 0.031406
 C 3.818742 1.954522 -1.652813
 H 2.971281 1.701891 -2.288511
 C -2.520422 3.342746 2.429514
 H -3.434819 3.754050 2.002494
 C -5.956422 -2.589986 0.003275
 H -6.793235 -2.836460 0.655873
 C 1.314224 -4.979479 -1.745090
 H 0.801149 -5.909263 -1.508999
 C 1.560578 -4.057557 -0.733506
 H 1.221002 -4.258367 0.278852
 C -2.553635 2.568624 -2.353934
 H -2.975502 1.595585 -2.600320
 C -2.201138 2.855569 -1.030471
 C -5.166441 1.368370 -0.534876
 H -4.834604 1.605435 -1.541461
 C -6.505818 1.078190 -0.312171
 H -7.204641 1.087870 -1.146210
 C 1.702231 -4.707902 -3.051182
 H 1.505980 -5.432432 -3.839364
 C 1.741173 -0.158863 -0.345802
 O 2.420562 1.097097 1.867095
 S 2.144165 1.296460 0.428323

P 2.469556 -1.588681 0.238199
 C 5.028522 2.352653 -2.197064
 H 5.133762 2.421903 -3.279390
 C 4.705308 -1.038754 1.810343
 H 3.995323 -0.984086 2.631441
 C 0.707880 -1.749156 2.355877
 H 0.201197 -0.935510 1.852415
 C -6.049386 0.757018 2.028850
 H -6.388592 0.508689 3.032623
 C -4.705475 1.038570 1.810121
 H -3.995643 0.983894 2.631350
 C 2.554011 -2.568312 -2.354145
 H 2.976042 -1.595293 -2.600329
 C -1.866655 2.276330 1.802467
 C -3.818794 -1.954414 -1.652873
 H -2.971369 -1.701738 -2.288602
 C -1.560637 4.057773 -0.732947
 H -1.221219 4.258485 0.279484
 C -4.258128 1.362371 0.526426
 C 2.000657 -3.872172 3.602593
 H 2.506955 -4.701073 4.093689
 C 1.866626 -2.276555 1.802250
 C 2.520268 -3.343127 2.429160
 H 3.434621 -3.754479 2.002092
 C 2.201296 -2.855406 -1.030768
 C 2.318248 -3.497610 -3.356832
 H 2.596981 -3.268587 -4.383418
 C -7.436689 -3.059706 -1.981600
 H -7.305707 -3.763512 -2.812104
 H -7.959852 -2.181061 -2.384058
 H -8.095586 -3.524494 -1.240685
 C 0.830097 -3.344616 4.147699
 H 0.422588 -3.769287 5.063610
 C 6.120468 2.669735 -1.378511
 C -6.950988 0.779045 0.971758
 H -8.001653 0.553764 1.145302
 C 6.506021 -1.078316 -0.311638

H 7.204987 -1.087917 -1.145557
 C -1.741148 0.158880 -0.345868
 P -2.469483 1.588660 0.238293
 O -2.420620 -1.097096 1.867004
 S -2.144180 -1.296454 0.428240
 O 1.128553 2.292884 0.031462
 C -6.120446 -2.669872 -1.378561
 C -5.028593 -2.352679 -2.197109
 H -5.133846 -2.422002 -3.279424
 C -2.317886 3.498108 -3.356454
 H -2.596454 3.269189 -4.383108
 C -1.702104 4.708451 -3.050543
 H -1.505872 5.433139 -3.838586
 C -1.314303 4.979888 -1.744358
 H -0.801405 5.909717 -1.508061
 C 5.166674 -1.368438 -0.534598
 H 4.835005 -1.605437 -1.541253
 C 0.181579 -2.286340 3.524287
 H -0.747443 -1.879933 3.916409
 C 4.258174 -1.362448 0.526542
 C 6.950975 -0.779272 0.972386
 H 8.001618 -0.554041 1.146126
 C 5.956534 2.589679 0.003274
 H 6.793472 2.835844 0.655819
 C 6.049192 -0.757281 2.029326
 H 6.388240 -0.509041 3.033174
 C -0.830269 3.344212 4.148067
 H -0.422816 3.768811 5.064035
 C -2.000889 3.871695 3.603025
 H -2.507295 4.700465 4.094230
 C 4.748602 2.185927 0.563970
 H 4.615415 2.098236 1.639439
 C 7.436299 3.060469 -1.981870
 H 8.100850 3.511513 -1.237551
 H 7.305556 3.776541 -2.801942
 H 7.952744 2.184760 -2.399013
 C -0.181615 2.286098 3.524516

H 0.747462 1.879752 3.916576
 C -0.707846 1.748999 2.356035
 H -0.201060 0.935470 1.852488
 Sn 0.000018 0.000007 -1.571427
 H 0.179817 1.375386 -2.567639
 H -0.179760 -1.375356 -2.567664

YSnCl

E = -2361.77899927
 C 3.365502 -0.408696 -1.459406
 H 3.081885 0.117438 -2.367697
 C 2.402565 -1.130652 -0.773727
 O 0.438071 -2.586515 -1.731922
 C -1.689783 3.182287 -0.904228
 H -1.117991 3.753026 -0.172718
 C 4.661518 -0.357203 -0.955814
 H 5.419620 0.216042 -1.488049
 C -0.701661 0.262826 2.890380
 H 0.101406 -0.437596 2.665559
 C -1.226770 1.056586 1.863968
 C 1.953637 1.708991 1.251774
 H 1.662283 1.180597 2.156063
 C 3.203930 2.307895 1.181851
 H 3.881396 2.242334 2.030619
 C 2.723285 3.056412 -1.057154
 H 3.026508 3.572732 -1.965647
 C 1.473403 2.451189 -0.997693
 H 0.816341 2.465763 -1.863313
 C -1.577290 1.787945 -0.952644
 C 2.722683 -1.817992 0.392940
 H 1.952987 -2.388840 0.909305
 C -2.294126 1.913036 2.135889
 H -2.733240 2.511548 1.342152
 C 1.077326 1.789323 0.166665
 C 6.391456 -0.925518 0.787763
 H 6.774786 -1.914815 1.065232
 H 6.408623 -0.308236 1.696434

H 7.087968 -0.479500 0.070429
 C 3.586401 2.989388 0.030219
 H 4.566126 3.460508 -0.022165
 C -0.294340 -0.777889 -0.089749
 P -0.506566 0.895743 0.204459
 O 0.677967 -0.157853 -2.458720
 S 0.729015 -1.184464 -1.404270
 C 5.004862 -1.014081 0.224694
 C 4.014640 -1.751060 0.887389
 H 4.267184 -2.282762 1.804237
 C -1.223116 0.344489 4.173985
 H -0.810444 -0.277475 4.965598
 C -2.281530 1.207509 4.441803
 H -2.696588 1.264702 5.446130
 C -2.817840 1.985042 3.422402
 H -3.656778 2.647719 3.624144
 C -3.229639 3.109232 -2.752923
 H -3.877282 3.626281 -3.458573
 C -2.518788 3.839621 -1.802155
 H -2.606915 4.923640 -1.766442
 C -3.106285 1.726433 -2.809082
 H -3.652754 1.154819 -3.555896
 C -2.275953 1.060189 -1.913489
 H -2.168263 -0.021073 -1.964694
 Cl -3.345456 -2.449626 -1.309001
 Sn -1.648848 -2.315024 0.388661
 H -2.542525 -1.894658 1.777613
 H -0.927763 -3.838920 0.516289

YSnHMDS

E = -2775.57458786
 S 0.926416 -1.460415 0.835570
 P 0.881949 1.311902 0.066364
 Si -4.069196 0.424313 -0.337610
 Si -3.447118 -2.389906 0.687790
 O 0.057132 -2.638422 0.659207
 O 1.106366 -0.911277 2.192173

N -3.037637 -0.989133 -0.299701
 C 0.372546 -0.283128 -0.268609
 C 2.561811 -1.953932 0.305444
 C 2.776153 -2.307940 -1.023352
 H 1.946307 -2.287530 -1.727850
 C 4.049495 -2.666101 -1.433043
 H 4.221739 -2.938702 -2.473751
 C 5.120576 -2.686778 -0.529987
 C 4.871600 -2.348468 0.798963
 H 5.691237 -2.362435 1.516315
 C 3.598398 -1.980803 1.223724
 H 3.397677 -1.697565 2.254024
 C 6.498501 -3.052318 -0.993984
 H 6.496276 -4.002322 -1.542361
 H 7.192755 -3.147702 -0.152864
 H 6.900758 -2.290160 -1.674983
 C 2.665265 1.384179 0.434639
 C 3.585666 1.260118 -0.609343
 H 3.242359 1.208160 -1.639787
 C 4.945253 1.200754 -0.337074
 H 5.655587 1.103757 -1.155461
 C 5.395294 1.264495 0.978506
 H 6.461791 1.219965 1.191037
 C 4.481810 1.368598 2.020589
 H 4.828715 1.398359 3.051506
 C 3.117926 1.418544 1.754922
 H 2.403268 1.454946 2.572496
 C 0.092334 2.119282 1.488772
 C 0.547920 3.352047 1.968177
 H 1.378644 3.857040 1.475786
 C -0.041411 3.921517 3.088676
 H 0.312621 4.881126 3.459970
 C -1.073322 3.253719 3.743982
 H -1.526904 3.693716 4.630089
 C -1.516237 2.021753 3.277158
 H -2.308989 1.491210 3.800354
 C -0.938809 1.451559 2.147740

H -1.274491 0.482091 1.780880
 C 0.574967 2.327080 -1.407526
 C 0.864262 1.779501 -2.661497
 H 1.236232 0.758286 -2.725408
 C 0.649257 2.521066 -3.815624
 H 0.872445 2.084601 -4.786860
 C 0.134338 3.810288 -3.728873
 H -0.042371 4.388062 -4.633993
 C -0.167864 4.354625 -2.485762
 H -0.587241 5.355914 -2.414490
 C 0.050962 3.618319 -1.327601
 H -0.215106 4.043786 -0.363757
 C -4.742096 0.861821 1.366708
 H -5.439256 1.705851 1.276821
 H -3.923369 1.178126 2.023252
 H -5.272801 0.043074 1.863273
 C -3.108091 1.951259 -0.881301
 H -3.739790 2.837310 -0.730898
 H -2.797153 1.938305 -1.932021
 H -2.213056 2.086998 -0.261584
 C -5.502695 0.186080 -1.529879
 H -6.142034 -0.650554 -1.223954
 H -5.123946 -0.035150 -2.536469
 H -6.127376 1.087042 -1.593225
 C -2.832983 -2.132723 2.443947
 H -3.253942 -1.217097 2.879765
 H -1.739289 -2.044725 2.439688
 H -3.101393 -2.972866 3.097980
 C -2.736157 -3.973201 -0.022204
 H -3.122231 -4.819769 0.562069
 H -1.643397 -3.999090 0.027155
 H -3.052614 -4.117416 -1.063795
 C -5.316051 -2.660277 0.690151
 H -5.657644 -2.915355 -0.321690
 H -5.907494 -1.805963 1.036602
 H -5.553200 -3.511154 1.343093
 Sn -1.293493 -0.976716 -1.412422

H -0.970741 -2.518108 -2.046114
H -1.567614 0.114063 -2.698613

YSnC₆F₅

E = -2630.11579236
C 3.530240 -1.743821 -1.647967
H 3.142066 -1.408859 -2.606529
C 2.654486 -1.899157 -0.585907
O 0.156894 -2.738393 -0.514404
C -0.164831 3.356315 -1.594796
H 0.636806 3.954747 -1.161950
C 4.884759 -1.997377 -1.454025
H 5.577415 -1.865790 -2.284378
C 1.252002 1.767131 2.691402
H 1.903892 0.897726 2.630196
C 0.549865 2.188183 1.555822
C 3.565824 1.481952 0.191069
H 3.441963 1.380459 1.265203
C 4.845720 1.566746 -0.338694
H 5.706866 1.532158 0.325286
C 3.920633 1.718654 -2.556327
H 4.055585 1.798607 -3.633054
C 2.635940 1.631007 -2.031581
H 1.775667 1.613997 -2.695376
C -0.317397 2.015586 -1.227473
C 3.111081 -2.324800 0.658244
H 2.407513 -2.449609 1.479600
C -0.366182 3.234785 1.666736
H -0.965068 3.531569 0.810251
C 2.451620 1.527340 -0.651042
C 6.834279 -2.664269 -0.000147
H 7.011871 -3.705963 0.296660
H 7.238309 -2.030581 0.799893
H 7.413184 -2.470814 -0.908953
C 5.024734 1.690989 -1.713274
H 6.029103 1.756034 -2.127472
C 0.504571 -0.382167 0.394333

P 0.775093 1.260254 0.011134
 O 0.840684 -0.923238 -2.160205
 S 0.922185 -1.518109 -0.813327
 C 5.373443 -2.403709 -0.213926
 C 4.462271 -2.568566 0.837935
 H 4.823664 -2.895690 1.812358
 C 1.077094 2.417584 3.904352
 H 1.628281 2.083448 4.780876
 C 0.180819 3.477747 4.002775
 H 0.035955 3.981601 4.956409
 C -0.546718 3.875369 2.888071
 H -1.270871 4.683403 2.967268
 C -2.055609 3.156613 -3.072944
 H -2.741896 3.605264 -3.788535
 C -1.035635 3.924391 -2.515242
 H -0.920004 4.968634 -2.798557
 C -2.192376 1.817790 -2.726092
 H -2.982548 1.214390 -3.168165
 C -1.316831 1.242855 -1.811891
 H -1.388595 0.188485 -1.558613
 Sn -0.875168 -1.159740 1.804460
 H -1.083581 -0.078867 3.108851
 H -0.470635 -2.704951 2.364944
 C -2.781648 -1.152841 0.749870
 C -4.498634 -2.173724 -0.627664
 C -4.390913 0.228431 -0.443786
 C -4.986170 -0.915627 -0.963086
 C -3.305433 0.082310 0.407037
 C -3.400315 -2.273662 0.220751
 F -2.954837 -3.488406 0.508027
 F -2.724583 1.196464 0.869256
 F -5.079845 -3.252938 -1.123978
 F -6.019371 -0.805446 -1.779268
 F -4.844991 1.425243 -0.785292

Y_{Sn}Py

E = -2149.25791222

C 3.736435 -0.247422 -1.691341
 H 3.410917 0.363677 -2.529630
 C 2.807609 -1.045515 -1.042653
 O 0.845249 -2.379929 -2.179229
 C -1.484600 3.111488 -0.233819
 H -0.981215 3.550502 0.627014
 C 5.051374 -0.226611 -1.237119
 H 5.780596 0.408161 -1.739232
 C 0.083549 -0.220763 2.899169
 H 0.875467 -0.844011 2.485968
 C -0.596244 0.667292 2.059126
 C 2.470574 1.539497 1.282193
 H 2.276242 0.896568 2.136245
 C 3.687101 2.202481 1.190756
 H 4.432794 2.069330 1.971848
 C 2.997239 3.186708 -0.895961
 H 3.203841 3.822331 -1.754633
 C 1.779674 2.521628 -0.813012
 H 1.051051 2.611903 -1.614128
 C -1.213432 1.792625 -0.608996
 C 3.182786 -1.833170 0.041268
 H 2.438402 -2.451730 0.539461
 C -1.666267 1.404873 2.565398
 H -2.242475 2.052144 1.911296
 C 1.506028 1.703269 0.285309
 C 6.858726 -0.940382 0.370012
 H 7.275087 -1.947484 0.494952
 H 6.905224 -0.450152 1.351983
 H 7.512534 -0.384813 -0.310167
 C 3.949686 3.031194 0.104186
 H 4.903678 3.550573 0.034280
 C 0.138198 -0.856299 -0.223082
 P -0.050359 0.754048 0.327796
 O 1.010589 0.126595 -2.498807
 S 1.108208 -1.052899 -1.614901
 C 5.450115 -0.990375 -0.141335
 C 4.494268 -1.798858 0.486828

H 4.787860 -2.409829 1.339991
 C -0.276480 -0.336903 4.235373
 H 0.256756 -1.032850 4.879597
 C -1.328348 0.420126 4.739774
 H -1.616648 0.324132 5.784848
 C -2.025572 1.283053 3.901801
 H -2.866765 1.856202 4.286199
 C -3.002493 3.322216 -2.091688
 H -3.707724 3.918498 -2.667865
 C -2.386907 3.870124 -0.969058
 H -2.603176 4.894362 -0.671519
 C -2.703003 2.023588 -2.487945
 H -3.166531 1.600075 -3.376370
 C -1.807254 1.258653 -1.750606
 H -1.546749 0.250734 -2.062690
 C -3.201760 -1.385067 -0.287422
 N -3.463750 -0.342502 0.512281
 C -5.118089 -0.879563 -1.650505
 C -4.518648 0.421103 0.255699
 C -5.379204 0.198009 -0.813779
 H -5.763171 -1.089125 -2.502840
 H -4.685454 1.265425 0.929839
 H -6.226698 0.857844 -0.986521
 C -4.015227 -1.683248 -1.383608
 H -3.780561 -2.529887 -2.027400
 Sn -1.317234 -2.356178 0.208717
 H -1.370172 -2.674290 1.888740
 H -1.086821 -3.792057 -0.665088

YSnPyr

E = -2165.31623436
 C 3.758051 -0.218816 -1.662084
 H 3.445929 0.393751 -2.504461
 C 2.820293 -1.024131 -1.034720
 O 0.901763 -2.367869 -2.226922
 C -1.472809 3.099902 -0.236410
 H -0.961094 3.533602 0.622084

C 5.063609 -0.194886 -1.183214
 H 5.799761 0.444351 -1.669403
 C 0.042300 -0.323353 2.853608
 H 0.804392 -0.968905 2.419113
 C -0.600711 0.615302 2.040599
 C 2.445916 1.513848 1.310597
 H 2.239936 0.858982 2.153178
 C 3.658032 2.188347 1.249047
 H 4.390436 2.053010 2.042267
 C 2.998203 3.189981 -0.839787
 H 3.215556 3.836939 -1.687245
 C 1.785623 2.513095 -0.787592
 H 1.071677 2.604515 -1.601747
 C -1.215646 1.778446 -0.613368
 C 3.178662 -1.817541 0.050100
 H 2.428389 -2.444930 0.528146
 C -1.626424 1.395238 2.574732
 H -2.173596 2.087396 1.941780
 C 1.499653 1.680685 0.296881
 C 6.839988 -0.895557 0.461784
 H 7.201748 -1.885188 0.764126
 H 6.883407 -0.250769 1.350858
 H 7.539258 -0.486008 -0.274773
 C 3.932840 3.031773 0.176842
 H 4.883005 3.560734 0.130846
 C 0.132808 -0.872494 -0.270554
 P -0.052620 0.726265 0.311073
 O 1.039547 0.145609 -2.515609
 S 1.133965 -1.043976 -1.644898
 C 5.444760 -0.962471 -0.083091
 C 4.481806 -1.780040 0.520797
 H 4.762801 -2.396576 1.374128
 C -0.313859 -0.453889 4.189943
 H 0.189692 -1.189985 4.813042
 C -1.322733 0.341830 4.721281
 H -1.607471 0.235028 5.766270
 C -1.981104 1.260038 3.910663

H -2.787530 1.867043 4.317110
 C -2.988745 3.331158 -2.093628
 H -3.685898 3.936975 -2.669669
 C -2.367164 3.869656 -0.969678
 H -2.570881 4.896101 -0.670864
 C -2.702231 2.030629 -2.493165
 H -3.165129 1.615865 -3.386169
 C -1.813713 1.254272 -1.757825
 H -1.559842 0.246421 -2.077626
 Sn -1.342266 -2.370740 0.103464
 H -1.323946 -2.811494 1.758340
 H -1.202085 -3.726849 -0.895898
 C -3.221655 -1.311788 -0.244392
 N -3.931261 -1.563071 -1.348215
 N -3.513621 -0.351259 0.639967
 C -4.994024 -0.799775 -1.577826
 C -4.572912 0.410560 0.399250
 C -5.369692 0.228586 -0.722674
 H -5.566493 -1.012880 -2.483872
 H -4.789886 1.199448 1.124424
 H -6.234039 0.856854 -0.923590

YSnB²

E = -2308.27645164
 C 1.403191 3.226276 1.086912
 H 1.035151 3.003422 2.085517
 C 0.891231 2.520464 0.010868
 O -1.579935 1.764619 -0.379471
 C 1.456126 -2.890518 2.455411
 H 2.536014 -2.857633 2.311857
 C 2.390672 4.181302 0.864339
 H 2.802568 4.731794 1.709337
 C 2.303782 -1.671474 -2.216313
 H 2.076511 -0.623833 -2.409787
 C 2.006266 -2.215450 -0.961221
 C 3.642109 0.362045 0.260052
 H 3.695828 0.112400 -0.797213

C 4.601585 1.194451 0.819636
 H 5.401442 1.590655 0.197484
 C 3.503451 1.027081 2.957843
 H 3.440105 1.296162 4.010279
 C 2.534874 0.199121 2.401962
 H 1.702154 -0.152789 3.005478
 C 0.614486 -2.140476 1.626794
 C 1.341259 2.766239 -1.283083
 H 0.926046 2.200115 -2.115249
 C 2.252725 -3.567588 -0.723440
 H 1.996125 -4.012341 0.234215
 C 2.611837 -0.150350 1.052322
 C 3.958470 5.443574 -0.654412
 H 3.671846 6.165064 -1.429486
 H 4.881822 4.956529 -0.995987
 H 4.193422 6.001524 0.257805
 C 4.537189 1.521359 2.171145
 H 5.290505 2.173806 2.608715
 C 0.149232 -0.127731 -0.537543
 P 1.271631 -1.111009 0.281622
 O -0.382108 1.069156 1.752447
 S -0.358289 1.269949 0.292317
 C 2.873170 4.436501 -0.418062
 C 2.327834 3.716287 -1.488968
 H 2.686127 3.907658 -2.500016
 C 2.857854 -2.467337 -3.210169
 H 3.083059 -2.036418 -4.183514
 C 3.109956 -3.813430 -2.964482
 H 3.536701 -4.439415 -3.745734
 C 2.803551 -4.361071 -1.724141
 H 2.984287 -5.416977 -1.533627
 C -0.462278 -3.677943 3.678338
 H -0.884365 -4.280392 4.480650
 C 0.916163 -3.661987 3.475525
 H 1.570750 -4.245872 4.119637
 C -1.296044 -2.915030 2.869547
 H -2.370899 -2.911440 3.038128

C -0.761802 -2.139623 1.845483
 H -1.407878 -1.511115 1.235907
 C -4.499876 0.206445 0.560714
 C -4.950498 0.931933 -0.538504
 C -5.152907 0.239498 1.775978
 C -6.081057 1.721564 -0.476775
 C -6.296077 1.038435 1.850461
 H -4.783459 -0.323063 2.629090
 C -6.750568 1.762152 0.748302
 H -6.420635 2.284425 -1.341924
 H -6.840431 1.100058 2.790415
 H -7.643583 2.376029 0.844926
 B -3.115208 -0.107071 -1.106945
 O -3.380944 -0.484987 0.202919
 O -4.114743 0.709468 -1.592916
 Sn -1.209423 -0.767527 -2.075759
 H -0.997532 -2.456574 -2.276301
 H -0.809960 -0.008498 -3.560299

YSnB¹

E = -2577.45693301
 C 4.247123 1.214870 -0.896997
 H 4.150044 2.042107 -0.197874
 C 3.098094 0.645944 -1.421027
 O 0.895026 1.813580 -2.187882
 C 0.386266 -0.791102 3.729483
 H 1.243744 -1.453312 3.845784
 C 5.487129 0.697840 -1.257483
 H 6.391973 1.136325 -0.837870
 C 0.844326 -3.204075 -0.490712
 H 1.330798 -2.589875 -1.247540
 C 0.486488 -2.619862 0.728806
 C 3.573899 -1.727055 0.973558
 H 3.239343 -2.568834 0.372156
 C 4.919018 -1.601311 1.295338
 H 5.629356 -2.345576 0.941133
 C 4.444786 0.427106 2.507197

H 4.784796 1.274549 3.098971
 C 3.098016 0.311066 2.186053
 H 2.390501 1.073710 2.502090
 C 0.024161 -0.329161 2.459550
 C 3.175354 -0.409978 -2.323688
 H 2.259330 -0.824155 -2.742392
 C -0.180381 -3.380745 1.688005
 H -0.491228 -2.931063 2.627323
 C 2.657768 -0.775152 1.425285
 C 6.928985 -0.970003 -2.477511
 H 6.979312 -1.267089 -3.531407
 H 7.126765 -1.870671 -1.879007
 H 7.741844 -0.262517 -2.282222
 C 5.354054 -0.528145 2.066495
 H 6.408566 -0.432666 2.318848
 C 0.545927 -0.045447 -0.491476
 P 0.903781 -0.863813 0.957190
 O 1.767491 2.214934 0.168099
 S 1.493404 1.291519 -0.945833
 C 5.593481 -0.381222 -2.134107
 C 4.416878 -0.920447 -2.669034
 H 4.480567 -1.750927 -3.371588
 C 0.558173 -4.539802 -0.735371
 H 0.838750 -4.987507 -1.686560
 C -0.102810 -5.297554 0.227223
 H -0.338430 -6.341754 0.030691
 C -0.474490 -4.716370 1.433667
 H -1.005840 -5.301870 2.181209
 C -1.433818 0.459107 4.695691
 H -2.006266 0.762364 5.570387
 C -0.342798 -0.395774 4.843224
 H -0.059213 -0.753043 5.831330
 C -1.782959 0.933322 3.437042
 H -2.629437 1.606462 3.313032
 C -1.046377 0.548894 2.320689
 H -1.287526 0.941611 1.336640
 N -4.207138 0.714913 -0.370440

C -3.927902 2.685443 0.641153
 C -4.786375 1.655529 0.472601
 H -4.078230 3.615030 1.178307
 H -5.800780 1.548315 0.838830
 B -2.886698 1.171806 -0.735286
 C -1.684939 3.361391 -0.060036
 C -1.073960 3.744082 -1.249082
 C -1.245018 3.903545 1.149629
 C -0.026449 4.655393 -1.229236
 H -1.413775 3.313309 -2.187003
 C -0.206738 4.823496 1.160461
 H -1.709430 3.587596 2.081358
 C 0.404419 5.203970 -0.029385
 H 0.462040 4.921648 -2.163385
 H 0.137356 5.232846 2.108288
 H 1.229147 5.913358 -0.016992
 C -4.838154 -0.496944 -0.702556
 C -4.746070 -0.998852 -2.002258
 C -5.556562 -1.213566 0.256654
 C -5.342694 -2.209550 -2.328585
 H -4.216709 -0.420979 -2.758021
 C -6.166082 -2.414887 -0.081348
 H -5.611948 -0.833968 1.274727
 C -6.058224 -2.921948 -1.372244
 H -5.258076 -2.590741 -3.344345
 H -6.719362 -2.966257 0.676718
 H -6.531612 -3.866395 -1.632011
 N -2.764722 2.445852 -0.079888
 Sn -1.312524 -0.216387 -1.570738
 H -1.861109 -1.800434 -1.170508
 H -1.023125 -0.202128 -3.253735

(Y_{Ph})₂Sn

E = -2620.57497065
 P 3.139620 0.218713 -0.044724
 P -3.196663 0.297430 0.020199
 C 1.646447 -0.047985 -0.797252

C 1.287517 -1.377972 -1.291400
 C 1.810406 -2.574774 -0.767252
 H 2.479631 -2.531052 0.089388
 C 1.448299 -3.814898 -1.274550
 H 1.867667 -4.715023 -0.827601
 C 0.531671 -3.916496 -2.315499
 H 0.236293 -4.889652 -2.702317
 C -0.003332 -2.748004 -2.851153
 H -0.714617 -2.803880 -3.674988
 C 0.373321 -1.507683 -2.356098
 H -0.027268 -0.599901 -2.809322
 C 3.399794 -0.320842 1.698017
 C 4.036158 -1.520422 2.025218
 H 4.507287 -2.116377 1.245410
 C 4.076671 -1.961144 3.344092
 H 4.580096 -2.895662 3.584279
 C 3.474500 -1.213864 4.349802
 H 3.506693 -1.559052 5.381395
 C 2.819003 -0.027292 4.030599
 H 2.334233 0.556245 4.810854
 C 2.778325 0.413271 2.714434
 H 2.253747 1.336901 2.467795
 C 3.503991 2.005661 -0.014679
 C 4.329835 2.580223 0.953416
 H 4.722270 1.973621 1.767036
 C 4.647782 3.932131 0.887702
 H 5.286061 4.373252 1.650834
 C 4.149780 4.718061 -0.145949
 H 4.396059 5.777269 -0.192119
 C 3.344009 4.145792 -1.124769
 H 2.960650 4.752972 -1.942386
 C 3.030177 2.793768 -1.066587
 H 2.416295 2.332454 -1.838742
 C 4.549105 -0.499628 -0.956027
 C 4.363914 -0.967103 -2.257412
 H 3.365928 -0.969779 -2.688032
 C 5.453116 -1.422782 -2.991628

H 5.301012 -1.797602 -4.001805
 C 6.729902 -1.397810 -2.440985
 H 7.580346 -1.753346 -3.019930
 C 6.921878 -0.909739 -1.151853
 H 7.921215 -0.875666 -0.722260
 C 5.835351 -0.460776 -0.411635
 H 5.988248 -0.074118 0.595377
 C -1.567268 -0.039055 0.301589
 C -1.147377 -1.319663 0.883717
 C -0.144357 -1.339926 1.869468
 H 0.261287 -0.390267 2.213860
 C 0.323848 -2.523913 2.417977
 H 1.111522 -2.488019 3.169169
 C -0.218409 -3.743582 2.018658
 H 0.141511 -4.676252 2.449186
 C -1.219905 -3.752131 1.053831
 H -1.641157 -4.697326 0.714086
 C -1.665248 -2.564066 0.485657
 H -2.397784 -2.599850 -0.320121
 C -4.273800 -0.238479 1.397242
 C -4.505306 0.599036 2.490344
 H -4.124676 1.617508 2.487460
 C -5.230689 0.142632 3.583607
 H -5.414474 0.808366 4.424694
 C -5.718836 -1.160331 3.603748
 H -6.281509 -1.518755 4.463726
 C -5.487405 -2.002051 2.522405
 H -5.863387 -3.023163 2.533033
 C -4.774104 -1.543478 1.420547
 H -4.610951 -2.203808 0.572185
 C -3.390124 2.097739 -0.190787
 C -4.122665 2.663816 -1.235043
 H -4.620236 2.026323 -1.961142
 C -4.200981 4.046374 -1.365002
 H -4.766327 4.477278 -2.188999
 C -3.552009 4.874561 -0.456503
 H -3.612260 5.955864 -0.565037

C -2.818519 4.318190 0.586360
 H -2.300552 4.959573 1.296496
 C -2.735862 2.938038 0.718403
 H -2.143759 2.497460 1.519153
 C -4.063542 -0.428192 -1.431533
 C -5.456090 -0.418877 -1.558713
 H -6.071461 0.013028 -0.769784
 C -6.054397 -0.966496 -2.686398
 H -7.138489 -0.958446 -2.784355
 C -5.267423 -1.532475 -3.687814
 H -5.739050 -1.965945 -4.567939
 C -3.883531 -1.553151 -3.558757
 H -3.268943 -2.005647 -4.334766
 C -3.282475 -1.001965 -2.430888
 H -2.202217 -1.029327 -2.294695
 Sn 0.001652 1.252808 -0.345756
 H 0.498648 2.374192 0.875468
 H -0.491427 2.209553 -1.692921

Y_{Ph}SnCl

E = -1773.18870127
 P -0.773220 -0.309819 0.109710
 C 0.441587 0.499343 -0.775180
 C 0.362558 1.957928 -0.909743
 C -0.864998 2.652605 -0.905381
 H -1.798882 2.099640 -0.815444
 C -0.928159 4.035481 -1.012086
 H -1.901350 4.524263 -1.000052
 C 0.230841 4.792057 -1.140058
 H 0.181265 5.875079 -1.230021
 C 1.456941 4.133700 -1.135381
 H 2.382555 4.702491 -1.209898
 C 1.521834 2.753903 -1.011054
 H 2.504539 2.287826 -0.947816
 C -1.204261 0.632328 1.611665
 C -2.498131 0.775625 2.113180
 H -3.342433 0.321555 1.601448

C -2.718428 1.527130 3.262298
 H -3.730328 1.639575 3.646581
 C -1.652780 2.140969 3.911160
 H -1.829836 2.731719 4.807959
 C -0.363178 2.013750 3.404598
 H 0.471245 2.507821 3.897810
 C -0.136650 1.270243 2.253994
 H 0.867301 1.194564 1.833975
 C -0.157647 -1.940801 0.612485
 C 0.766311 -2.020089 1.658005
 H 1.018927 -1.134262 2.236241
 C 1.402794 -3.223728 1.931038
 H 2.135541 -3.272943 2.733153
 C 1.116657 -4.352100 1.169034
 H 1.622920 -5.292204 1.379467
 C 0.188561 -4.279591 0.135741
 H -0.032183 -5.160516 -0.463565
 C -0.448224 -3.076656 -0.146392
 H -1.155524 -3.017749 -0.970480
 C -2.331060 -0.676440 -0.766863
 C -2.483070 -0.199087 -2.068111
 H -1.683040 0.397624 -2.506157
 C -3.635190 -0.497333 -2.788934
 H -3.752472 -0.118525 -3.802206
 C -4.629176 -1.284073 -2.217959
 H -5.528037 -1.520657 -2.784216
 C -4.471863 -1.781946 -0.926523
 H -5.242334 -2.412089 -0.486547
 C -3.325130 -1.482619 -0.202300
 H -3.191492 -1.894307 0.797737
 Cl 3.625044 -0.003464 0.846945
 Sn 2.255678 -0.479991 -1.110276
 H 3.134276 0.200317 -2.399102
 H 2.217183 -2.177093 -1.192200

$Y_{Ph}SnHMDS$

E = -2186.97193692

P 2.015452 0.082837 -0.040123
 C 0.396828 -0.311954 -0.358980
 C -0.011035 -1.697045 -0.625916
 C 0.647363 -2.817040 -0.081301
 H 1.499894 -2.670813 0.579116
 C 0.217982 -4.112855 -0.340557
 H 0.753024 -4.950225 0.105222
 C -0.894347 -4.345044 -1.142803
 H -1.237797 -5.359412 -1.334971
 C -1.551220 -3.254208 -1.707417
 H -2.409799 -3.414315 -2.358726
 C -1.110531 -1.961324 -1.465161
 H -1.614185 -1.122185 -1.936604
 C 2.771234 -0.578236 1.503134
 C 4.102407 -0.976009 1.637070
 H 4.784005 -0.910113 0.792912
 C 4.560452 -1.481950 2.849372
 H 5.598208 -1.796050 2.943978
 C 3.696939 -1.594515 3.933842
 H 4.059236 -1.994026 4.879172
 C 2.365585 -1.211319 3.803358
 H 1.680341 -1.312396 4.642565
 C 1.903306 -0.715148 2.591260
 H 0.854303 -0.443898 2.471262
 C 2.099615 1.888425 0.125215
 C 2.084556 2.520994 1.368475
 H 2.144695 1.932809 2.281803
 C 1.978779 3.907243 1.438401
 H 1.955744 4.397602 2.409275
 C 1.899987 4.659950 0.272899
 H 1.814760 5.743339 0.331274
 C 1.928799 4.031412 -0.969651
 H 1.865550 4.621086 -1.881783
 C 2.022976 2.649306 -1.045823
 H 2.021020 2.148728 -2.012720
 C 3.189249 -0.325679 -1.370553
 C 2.818535 -1.220415 -2.375533

H 1.837677 -1.687911 -2.348008
 C 3.700584 -1.499977 -3.413554
 H 3.408622 -2.202741 -4.191232
 C 4.943580 -0.878143 -3.464986
 H 5.628029 -1.095404 -4.282867
 C 5.307135 0.033736 -2.478604
 H 6.271029 0.536704 -2.526236
 C 4.433120 0.310978 -1.434431
 H 4.711088 1.039883 -0.673583
 N -2.945568 0.312113 0.048544
 Si -3.871113 0.788749 -1.353555
 Si -3.571593 -0.657562 1.366781
 C -2.755765 1.710190 -2.563021
 H -2.468304 2.703761 -2.200212
 H -1.832648 1.153392 -2.781658
 H -3.289082 1.844227 -3.513285
 C -4.606940 -0.661543 -2.308246
 H -5.525409 -1.043145 -1.850019
 H -4.859172 -0.332191 -3.325305
 H -3.901616 -1.496861 -2.389602
 C -5.286392 1.921435 -0.849822
 H -5.890976 2.235374 -1.710978
 H -5.953564 1.411736 -0.141231
 H -4.903653 2.822086 -0.352489
 C -5.057061 -1.682411 0.846489
 H -5.404836 -2.263037 1.711369
 H -5.897640 -1.066559 0.502669
 H -4.795335 -2.388184 0.048990
 C -4.112589 0.462086 2.780527
 H -4.512516 -0.112159 3.626866
 H -3.273586 1.066113 3.149056
 H -4.894454 1.153223 2.438169
 C -2.262138 -1.854149 1.993331
 H -1.291404 -1.376191 2.181665
 H -2.591949 -2.308076 2.937605
 H -2.091197 -2.659566 1.267558
 Sn -1.045815 1.090231 0.358915

H -0.959648 2.655579 -0.314198

H -0.938561 1.263530 2.074197

$Y_{Ph}SnC_6F_5$

E = -2041.51632429

P -1.869681 0.220390 0.041877

C -0.378826 0.057907 -0.731644

C 0.586179 1.179910 -0.788661

C 1.073580 1.822999 0.362789

H 0.690892 1.520205 1.337128

C 2.053371 2.806462 0.288375

H 2.413807 3.277283 1.201902

C 2.591873 3.169453 -0.942660

H 3.374324 3.923382 -1.001101

C 2.121910 2.550715 -2.096721

H 2.534132 2.822478 -3.066927

C 1.127136 1.583000 -2.019539

H 0.765528 1.101143 -2.926450

C -1.958125 0.273440 1.878168

C -3.019557 0.865092 2.568647

H -3.826517 1.347371 2.018681

C -3.042627 0.843738 3.958603

H -3.868457 1.308767 4.493835

C -2.008704 0.234669 4.665230

H -2.027208 0.224892 5.753479

C -0.949429 -0.353354 3.981869

H -0.134359 -0.824892 4.527225

C -0.924653 -0.331955 2.591921

H -0.089136 -0.775091 2.052697

C -2.903035 -1.202306 -0.421805

C -3.689968 -1.891049 0.502019

H -3.709779 -1.577121 1.542910

C -4.435268 -2.993113 0.096691

H -5.038311 -3.531976 0.824671

C -4.402731 -3.412325 -1.228612

H -4.983634 -4.278407 -1.539900

C -3.624398 -2.726136 -2.155992

H -3.596631 -3.050252 -3.194373
 C -2.877192 -1.624837 -1.756751
 H -2.258967 -1.083082 -2.471639
 C -2.726453 1.750935 -0.443122
 C -2.285524 2.965070 0.093089
 H -1.504528 2.974578 0.851172
 C -2.844025 4.161347 -0.339584
 H -2.490085 5.102651 0.075939
 C -3.852356 4.154735 -1.297973
 H -4.292048 5.092535 -1.632127
 C -4.300339 2.948730 -1.826652
 H -5.093530 2.939771 -2.571653
 C -3.736617 1.749539 -1.406074
 H -4.088432 0.809734 -1.826619
 C 2.482250 -1.343686 -0.295496
 C 3.799181 -0.557808 1.594021
 C 4.394718 0.121738 -0.637397
 C 4.625039 0.153565 0.731976
 Sn 0.481087 -1.860286 -1.018328
 H 0.613087 -2.383728 -2.639231
 H -0.187685 -3.108464 -0.064479
 C 3.340778 -0.639594 -1.124315
 C 2.746121 -1.289011 1.061750
 F 1.936310 -1.912413 1.928088
 F 3.138806 -0.632017 -2.441765
 F 5.160782 0.827914 -1.451807
 F 5.623727 0.869769 1.217479
 F 4.017545 -0.518868 2.900250

Y_{Ph}SnPy

E = -1560.65390547
 P -1.362034 0.065490 0.002074
 C 0.274563 -0.014709 -0.362775
 C 1.089711 1.227038 -0.311929
 C 1.792060 1.606718 0.842650
 C 2.615314 2.726569 0.858776
 C 2.742642 3.515095 -0.280478

C 2.037230 3.171786 -1.429784
 C 1.227036 2.042886 -1.443763
 C -1.859105 0.230536 1.769766
 C -3.057224 0.826518 2.171444
 H -3.737611 1.235382 1.425757
 C -3.378931 0.905393 3.521901
 H -4.311066 1.375112 3.830714
 C -2.507808 0.390040 4.477711
 H -2.759487 0.457096 5.534598
 C -1.313472 -0.204199 4.082946
 H -0.629872 -0.604713 4.829184
 C -0.989556 -0.279824 2.733063
 H -0.052825 -0.732736 2.408063
 C -2.196661 -1.444341 -0.566140
 C -3.133795 -2.128269 0.210379
 H -3.389046 -1.763655 1.202714
 C -3.731934 -3.284013 -0.279639
 H -4.455684 -3.817513 0.333313
 C -3.401695 -3.761426 -1.543514
 H -3.869390 -4.668728 -1.921328
 C -2.470384 -3.082254 -2.322885
 H -2.206603 -3.454672 -3.310623
 C -1.868627 -1.927520 -1.838049
 H -1.130640 -1.391560 -2.433255
 C -2.186703 1.501025 -0.758282
 C -1.854831 2.776062 -0.287702
 H -1.175789 2.884043 0.557225
 C -2.381691 3.904402 -0.902435
 H -2.111586 4.893079 -0.536873
 C -3.248873 3.770104 -1.982663
 H -3.663143 4.655332 -2.461613
 C -3.587109 2.504319 -2.448894
 H -4.269418 2.396086 -3.289854
 C -3.055431 1.371066 -1.842357
 H -3.321230 0.383146 -2.213341
 C 3.358455 -1.121897 -0.050791
 C 5.224682 -0.508983 1.334374

C 4.944747 0.308994 -0.890185
 C 5.681570 0.284482 0.290746
 N 3.820229 -0.374184 -1.061138
 H 5.774943 -0.563155 2.272978
 H 6.591194 0.874140 0.383972
 H 5.277589 0.916978 -1.734250
 H 1.701323 0.989062 1.735465
 H 3.161215 2.983264 1.765445
 H 3.388179 4.391728 -0.272825
 H 2.128578 3.781627 -2.327442
 H 0.691072 1.761611 -2.348549
 C 4.044484 -1.223175 1.161513
 H 3.650889 -1.842724 1.966654
 Sn 1.348029 -1.847275 -0.407751
 H 1.290158 -2.673154 -1.909498
 H 0.863745 -2.958921 0.819758

Y_{Ph}SnPyr

E = -1576.72065164
 P -1.339012 0.047870 0.016719
 C 0.186691 0.051249 -0.718780
 C 0.937496 1.291094 -0.909335
 C 0.680367 2.478755 -0.195871
 C 1.430708 3.630792 -0.392758
 C 2.492541 3.643669 -1.290382
 C 2.780157 2.478934 -1.998228
 C 2.014825 1.336744 -1.819803
 C -1.433337 0.338195 1.825137
 C -2.636442 0.522113 2.515620
 H -3.582041 0.522519 1.973598
 C -2.628269 0.712527 3.891454
 H -3.565765 0.852818 4.426411
 C -1.418966 0.727739 4.583511
 H -1.413676 0.879637 5.661439
 C -0.221726 0.556588 3.898692
 H 0.724264 0.575993 4.436329
 C -0.223173 0.362987 2.519993

H 0.718986 0.242245 1.979187
 C -2.075383 -1.598904 -0.255439
 C -2.777832 -2.290310 0.732131
 H -2.906564 -1.855285 1.719249
 C -3.291860 -3.555698 0.469278
 H -3.829298 -4.089464 1.250573
 C -3.109117 -4.142725 -0.777287
 H -3.508592 -5.135230 -0.976744
 C -2.405378 -3.462176 -1.765567
 H -2.249748 -3.918790 -2.740904
 C -1.890294 -2.198159 -1.507605
 H -1.316939 -1.670205 -2.268612
 C -2.478907 1.289239 -0.696949
 C -2.813367 2.474319 -0.039409
 H -2.443508 2.665370 0.965526
 C -3.613787 3.422864 -0.667217
 H -3.861970 4.346337 -0.147819
 C -4.087916 3.195626 -1.953565
 H -4.714931 3.938528 -2.442905
 C -3.752987 2.019409 -2.617393
 H -4.116444 1.838362 -3.626912
 C -2.947774 1.075098 -1.995252
 H -2.678300 0.164193 -2.524762
 C 3.225531 -0.903203 0.160856
 C 4.168120 0.577040 1.614789
 C 5.441688 -0.454209 -0.080069
 C 5.395862 0.441546 0.979295
 N 4.368781 -1.121513 -0.491461
 N 3.093767 -0.090932 1.216424
 H 4.046208 1.248049 2.467971
 H 6.271910 1.001279 1.297735
 H 6.373439 -0.636367 -0.621010
 H -0.102806 2.491992 0.559484
 H 1.192113 4.525014 0.181919
 H 3.087771 4.542999 -1.434702
 H 3.605418 2.461580 -2.708939
 H 2.249598 0.446227 -2.404447

Sn 1.356301 -1.728327 -0.596150
H 1.658864 -2.501563 -2.096172
H 0.709453 -2.877675 0.497376

$Y_{Ph}SnB^2$

E = -1719.67372922
P -1.724234 0.099218 0.133038
C -0.396055 -0.016966 -0.891374
C 0.435622 1.202205 -1.084176
C 1.455598 1.562251 -0.187214
C 2.242515 2.690914 -0.389850
C 2.015266 3.509138 -1.491704
C 0.997397 3.184543 -2.383496
C 0.224181 2.046457 -2.183944
C -1.440754 0.138260 1.955451
C -2.339309 0.727638 2.849181
H -3.245997 1.201248 2.474692
C -2.075428 0.717981 4.214165
H -2.777304 1.181035 4.905444
C -0.912109 0.123292 4.695439
H -0.704803 0.121462 5.764027
C -0.012085 -0.460379 3.810250
H 0.902125 -0.920627 4.180308
C -0.274476 -0.450000 2.444774
H 0.438762 -0.891138 1.748728
C -2.844433 -1.306317 -0.130297
C -3.500415 -1.954276 0.916821
H -3.342565 -1.630158 1.942845
C -4.344008 -3.027456 0.650815
H -4.846411 -3.534451 1.472230
C -4.537631 -3.457932 -0.657178
H -5.195062 -4.301174 -0.860713
C -3.886818 -2.813771 -1.705234
H -4.033495 -3.150185 -2.729687
C -3.042937 -1.741310 -1.445083
H -2.518482 -1.232049 -2.252726
C -2.660089 1.636650 -0.144232

C -2.080457 2.847275 0.249635
 H -1.127721 2.847993 0.777731
 C -2.713335 4.049125 -0.040245
 H -2.251866 4.987480 0.260748
 C -3.930694 4.052036 -0.714494
 H -4.427081 4.994590 -0.937818
 C -4.513442 2.850148 -1.101987
 H -5.467720 2.849323 -1.625269
 C -3.879090 1.644254 -0.822908
 H -4.336070 0.706426 -1.132895
 H 1.621936 0.941896 0.692182
 H 3.033688 2.930631 0.319308
 H 2.627272 4.394513 -1.654555
 H 0.807292 3.820969 -3.246562
 H -0.568531 1.788986 -2.884171
 Sn 0.552652 -1.898452 -1.237857
 H 0.474742 -2.383503 -2.884120
 H -0.153376 -3.144490 -0.292727
 C 4.604821 -0.409861 -0.482099
 C 4.210827 -0.705710 0.819013
 C 5.783276 0.256322 -0.755093
 C 4.974885 -0.351972 1.913862
 C 6.563234 0.619871 0.344144
 H 6.075133 0.486367 -1.776005
 C 6.168333 0.322593 1.649354
 H 4.653423 -0.586750 2.925075
 H 7.498967 1.149566 0.178857
 H 6.802787 0.624574 2.479878
 B 2.650896 -1.410552 -0.564949
 O 3.007071 -1.345804 0.777768
 O 3.653236 -0.863628 -1.344841

$Y_{Ph}SnB^1$

E = -1988.86624564
 P 2.004101 -0.634482 0.156958
 C 0.371717 -0.225415 0.365033
 C -0.077397 0.495513 1.555379

C 0.753005 1.364171 2.300215
 H 1.784846 1.516325 1.992441
 C 0.289643 2.053167 3.413224
 H 0.973109 2.709952 3.950367
 C -1.031416 1.928821 3.834121
 H -1.396303 2.479950 4.698356
 C -1.867134 1.060553 3.135057
 H -2.898454 0.914955 3.454841
 C -1.395661 0.347915 2.042024
 H -2.057841 -0.369257 1.560311
 C 3.209421 0.742675 0.003931
 C 4.558104 0.640198 0.349783
 H 4.944490 -0.275574 0.789855
 C 5.413622 1.716890 0.145758
 H 6.463675 1.632165 0.419321
 C 4.927044 2.899239 -0.402391
 H 5.597932 3.741412 -0.562241
 C 3.580084 3.010367 -0.731865
 H 3.192290 3.938033 -1.144243
 C 2.718371 1.939726 -0.523025
 H 1.653130 2.025795 -0.746458
 C 2.199808 -1.570745 -1.384929
 C 2.819432 -1.027257 -2.509300
 H 3.254361 -0.031483 -2.464192
 C 2.866127 -1.754662 -3.693582
 H 3.343571 -1.324955 -4.571861
 C 2.299491 -3.022651 -3.757408
 H 2.334041 -3.587256 -4.687275
 C 1.689130 -3.572069 -2.633501
 H 1.245698 -4.564447 -2.681012
 C 1.640366 -2.850828 -1.448057
 H 1.157367 -3.272272 -0.567368
 C 2.703027 -1.741759 1.435025
 C 2.076536 -1.841787 2.678966
 H 1.190780 -1.247119 2.886750
 C 2.576456 -2.711386 3.641599
 H 2.084936 -2.779571 4.610058

C 3.689628 -3.498710 3.366316
 H 4.073581 -4.183375 4.120329
 C 4.302433 -3.422291 2.119663
 H 5.161131 -4.051188 1.892226
 C 3.810873 -2.548874 1.156373
 H 4.280219 -2.508437 0.173975
 N -4.028419 0.391244 -0.169869
 C -3.729756 2.562954 0.271020
 C -4.568085 1.517569 0.441721
 H -3.860463 3.596604 0.570125
 H -5.548653 1.502272 0.903211
 B -2.750829 0.746795 -0.734339
 N -2.622242 2.149404 -0.456764
 C -1.522621 2.997490 -0.689614
 C -0.976867 3.735195 0.361863
 C -0.989473 3.120942 -1.973290
 C 0.055091 4.631511 0.116068
 H -1.358805 3.580829 1.369445
 C 0.048049 4.014845 -2.210491
 H -1.417822 2.534820 -2.783571
 C 0.556618 4.789801 -1.172445
 H 0.473171 5.205279 0.940791
 H 0.445480 4.120447 -3.218202
 H 1.346688 5.512895 -1.366042
 C -4.592509 -0.888932 -0.032009
 C -4.583850 -1.778912 -1.107398
 C -5.151861 -1.290727 1.183651
 C -5.115366 -3.053276 -0.963329
 H -4.164090 -1.455550 -2.057134
 C -5.696051 -2.562162 1.315501
 H -5.135319 -0.606753 2.030072
 C -5.678074 -3.450367 0.245472
 H -5.098870 -3.738122 -1.808956
 H -6.125271 -2.864427 2.268945
 H -6.100037 -4.447348 0.353011
 Sn -1.017919 -0.594732 -1.240201
 H -1.489215 -2.250019 -1.325800

H -0.273856 -0.259697 -2.757039

(Y_{PhF})₂Sn

E = -3614.39676385

P 3.175888 0.668661 -0.094724

P -3.154590 0.851761 0.062710

C 1.654747 0.303708 -0.756743

C 1.234765 -1.014430 -1.182151

C 1.622912 -2.233524 -0.606589

C 1.112062 -3.460884 -0.998162

C 0.159563 -3.534609 -2.006878

C -0.244258 -2.357183 -2.623502

C 0.305201 -1.149817 -2.228725

C 3.322830 0.777000 1.725057

C 3.539454 -0.367243 2.498346

H 3.765276 -1.315968 2.020225

C 3.454103 -0.302280 3.882829

H 3.617706 -1.202302 4.471172

C 3.132961 0.895236 4.510874

H 3.054260 0.938363 5.595469

C 2.907480 2.035743 3.748831

H 2.651833 2.976422 4.232660

C 3.003925 1.979938 2.364661

H 2.818952 2.877113 1.779106

C 3.716297 2.319241 -0.665664

C 4.806130 2.952728 -0.061576

H 5.288619 2.498826 0.802893

C 5.272991 4.162371 -0.556824

H 6.120718 4.651002 -0.080591

C 4.656448 4.748994 -1.659250

H 5.020668 5.699774 -2.043952

C 3.581813 4.115814 -2.271929

H 3.103397 4.565447 -3.139691

C 3.117666 2.897907 -1.783925

H 2.296377 2.378274 -2.275361

C 4.496624 -0.432545 -0.681646

C 4.372482 -1.004411 -1.949997

H 3.478430 -0.816622 -2.540009
 C 5.393197 -1.799988 -2.455446
 H 5.287733 -2.249822 -3.440584
 C 6.545890 -2.017881 -1.707725
 H 7.342861 -2.643237 -2.105408
 C 6.682318 -1.429738 -0.455140
 H 7.587003 -1.588982 0.128165
 C 5.662653 -0.637006 0.058338
 H 5.777082 -0.178137 1.038048
 C -1.522643 0.447089 0.290411
 C -1.152129 -0.823383 0.896670
 C -0.203630 -0.891731 1.932145
 C 0.197754 -2.088901 2.503551
 C -0.331538 -3.292115 2.050691
 C -1.281331 -3.271711 1.040882
 C -1.656940 -2.061284 0.479892
 C -4.182873 0.218939 1.431057
 C -4.349268 0.963145 2.600845
 H -3.949094 1.971852 2.668427
 C -5.034462 0.422961 3.681778
 H -5.166931 1.014130 4.585744
 C -5.547948 -0.868211 3.609216
 H -6.079712 -1.291704 4.459127
 C -5.381168 -1.615664 2.449094
 H -5.778174 -2.626940 2.387402
 C -4.705840 -1.075736 1.360029
 H -4.583480 -1.662772 0.452731
 C -3.276556 2.670391 0.039510
 C -4.047281 3.362066 -0.896467
 H -4.608692 2.817024 -1.650862
 C -4.082392 4.752060 -0.880028
 H -4.677783 5.283225 -1.619915
 C -3.352626 5.461085 0.067538
 H -3.379454 6.549115 0.073111
 C -2.581531 4.778520 1.002823
 H -2.002038 5.327542 1.742147
 C -2.540639 3.390071 0.988983

H -1.922649 2.849261 1.704577
 C -4.068681 0.308847 -1.426684
 C -5.465185 0.341684 -1.485004
 H -6.040523 0.679240 -0.623390
 C -6.120051 -0.068874 -2.639709
 H -7.207386 -0.046477 -2.683123
 C -5.386117 -0.520648 -3.734416
 H -5.902768 -0.852778 -4.633112
 C -3.997697 -0.559901 -3.675142
 H -3.415555 -0.930311 -4.516194
 C -3.340769 -0.141993 -2.523505
 H -2.258011 -0.187262 -2.459724
 Sn 0.058979 1.706160 -0.404694
 H 0.613078 2.869338 0.733920
 H -0.453004 2.593362 -1.781499
 F 2.471946 -2.228300 0.426235
 F 1.471827 -4.561269 -0.353221
 F -0.355875 -4.700157 -2.365910
 F 0.059504 -4.437571 2.586866
 F -1.765248 -4.407685 0.559587
 F -1.144821 -2.389811 -3.597957
 F -2.512290 -2.107065 -0.547427
 F -0.094296 -0.048917 -2.877770
 F 0.321732 0.237316 2.407523
 F 1.074248 -2.108027 3.498300

Y_{PhF}SnCl

E = -2270.09241554
 P -0.766978 0.826170 0.182752
 C 0.105514 -0.495197 -0.463293
 C 1.559530 -0.480140 -0.464935
 C 2.325464 0.666689 -0.723320
 C 3.710545 0.690663 -0.672370
 C 4.409624 -0.467466 -0.360650
 C 3.698555 -1.634412 -0.106793
 C 2.313170 -1.620444 -0.138976
 C 0.229474 1.647806 1.459752

C 0.344020 3.034251 1.559210
 H -0.179882 3.679432 0.858657
 C 1.152281 3.593910 2.542069
 H 1.241578 4.675888 2.613582
 C 1.853658 2.776390 3.421552
 H 2.489386 3.219206 4.185789
 C 1.755387 1.392596 3.315162
 H 2.315631 0.749468 3.990594
 C 0.952353 0.827253 2.333267
 H 0.891936 -0.254884 2.223931
 C -2.299506 0.214953 0.943266
 C -2.303939 -0.238663 2.263823
 H -1.420631 -0.121836 2.886354
 C -3.435689 -0.849522 2.784364
 H -3.431215 -1.203372 3.812948
 C -4.563316 -1.025611 1.989659
 H -5.442695 -1.521435 2.395488
 C -4.565918 -0.572430 0.676103
 H -5.445925 -0.708767 0.051186
 C -3.442215 0.056913 0.153816
 H -3.451465 0.414726 -0.873951
 C -1.361753 2.106971 -0.971200
 C -0.927614 2.080223 -2.294024
 H -0.212763 1.316951 -2.596784
 C -1.404300 3.019761 -3.201568
 H -1.062279 2.997367 -4.234244
 C -2.317309 3.984068 -2.789550
 H -2.691095 4.718163 -3.500827
 C -2.762714 4.007729 -1.469915
 H -3.485352 4.756021 -1.150517
 C -2.292186 3.067910 -0.562289
 H -2.657565 3.071691 0.464475
 Cl -1.936662 -3.430680 0.625374
 Sn -0.953431 -2.170572 -1.168172
 H 0.071132 -3.215569 -2.027465
 H -2.306606 -1.719046 -2.102735
 F 4.368275 1.809944 -0.933695

F 5.733169 -0.464003 -0.317173
 F 4.347502 -2.744081 0.209029
 F 1.677461 -2.748764 0.179024
 F 1.704546 1.802282 -1.059353

$Y_{PhF}SnHMDS$

E = -2683.88011039
 P -2.132121 -0.393743 -0.114253
 C -0.471343 -0.081544 -0.008687
 C 0.038617 1.278314 -0.160137
 C -0.375310 2.363510 0.619136
 C 0.153625 3.638731 0.485262
 C 1.162202 3.866818 -0.442349
 C 1.603528 2.817906 -1.241294
 C 1.022017 1.565436 -1.116634
 C -3.151062 -0.397486 1.405919
 C -4.548525 -0.378496 1.362895
 H -5.063919 -0.335602 0.403605
 C -5.280144 -0.401459 2.543701
 H -6.367735 -0.382323 2.508616
 C -4.621373 -0.441375 3.770433
 H -5.196509 -0.455981 4.694336
 C -3.231882 -0.450032 3.816464
 H -2.716182 -0.467498 4.774365
 C -2.497401 -0.423204 2.636091
 H -1.408783 -0.398363 2.658688
 C -2.353188 -2.053769 -0.835133
 C -3.292395 -2.978613 -0.376392
 H -3.944393 -2.730948 0.457516
 C -3.381812 -4.232043 -0.973321
 H -4.109182 -4.952543 -0.604767
 C -2.539474 -4.568449 -2.027420
 H -2.610065 -5.552712 -2.486554
 C -1.598467 -3.651612 -2.486333
 H -0.925591 -3.913917 -3.300280
 C -1.502536 -2.401837 -1.890546
 H -0.747564 -1.686015 -2.213609

C -2.950751 0.826723 -1.186522
 C -3.454991 2.007231 -0.633948
 H -3.436051 2.155024 0.443449
 C -3.970331 2.997528 -1.462524
 H -4.354873 3.917431 -1.026799
 C -3.992146 2.813798 -2.840568
 H -4.398280 3.589447 -3.486944
 C -3.493549 1.638255 -3.393379
 H -3.511217 1.490295 -4.471190
 C -2.969266 0.648755 -2.571197
 H -2.578343 -0.266684 -3.009341
 N 2.808780 -0.888747 0.347926
 Si 3.685682 -1.467317 -1.056364
 Si 3.575986 -0.034957 1.671948
 C 2.515907 -2.386964 -2.213364
 H 2.159188 -3.334925 -1.793348
 H 1.645629 -1.772273 -2.475848
 H 3.049956 -2.616747 -3.144843
 C 4.513676 -0.098358 -2.047323
 H 5.466279 0.213612 -1.605834
 H 4.729247 -0.470105 -3.058374
 H 3.874983 0.785547 -2.146367
 C 5.026558 -2.675686 -0.517037
 H 5.576269 -3.081115 -1.376939
 H 5.757494 -2.187845 0.141788
 H 4.591884 -3.517716 0.037525
 C 5.107678 0.892971 1.108621
 H 5.516485 1.452717 1.960436
 H 5.898680 0.228579 0.739925
 H 4.866537 1.611428 0.315389
 C 4.072114 -1.235301 3.032830
 H 4.560973 -0.719929 3.870197
 H 3.197522 -1.766312 3.430015
 H 4.769795 -1.987975 2.642861
 C 2.397482 1.251010 2.378062
 H 1.386446 0.868529 2.572782
 H 2.787670 1.644928 3.325784

H 2.306258 2.091703 1.678977
 Sn 0.882785 -1.555260 0.721359
 H 0.625430 -3.106941 0.067567
 H 0.792734 -1.689793 2.435637
 F 1.404147 0.619970 -1.967972
 F 2.546014 3.034392 -2.149167
 F 1.688573 5.073610 -0.574820
 F -0.272522 4.629961 1.254364
 F -1.288188 2.171250 1.573363

$Y_{PhF}SnC_6F_5$

E = -2538.42233005
 P -2.020513 0.038533 0.313493
 C -0.683644 0.353391 -0.670400
 C 0.349307 1.312579 -0.258382
 C 1.260233 1.056055 0.770137
 C 2.353532 1.868075 1.029093
 C 2.540105 3.019172 0.276679
 C 1.634771 3.336140 -0.729267
 C 0.558358 2.496075 -0.976636
 C -1.942556 -1.278016 1.583666
 C -2.845545 -1.341385 2.649339
 H -3.618293 -0.580600 2.757147
 C -2.747482 -2.368963 3.579475
 H -3.448163 -2.415530 4.410987
 C -1.749344 -3.333406 3.454109
 H -1.673317 -4.133108 4.188464
 C -0.844555 -3.268161 2.400497
 H -0.051329 -4.006156 2.297612
 C -0.942424 -2.238586 1.472104
 H -0.220881 -2.158791 0.665684
 C -3.430850 -0.407103 -0.745762
 C -4.357637 -1.395601 -0.411164
 H -4.253331 -1.952500 0.516769
 C -5.406222 -1.685173 -1.277188
 H -6.120210 -2.463985 -1.017086
 C -5.536974 -0.990869 -2.475200

H -6.357592 -1.223447 -3.151257
 C -4.614590 -0.005288 -2.813685
 H -4.712144 0.536272 -3.752488
 C -3.560898 0.284736 -1.955610
 H -2.818274 1.040401 -2.210492
 C -2.412921 1.520536 1.282033
 C -1.663264 1.760248 2.437595
 H -0.946021 1.015926 2.782089
 C -1.835098 2.945142 3.142147
 H -1.245780 3.131889 4.037518
 C -2.758982 3.887985 2.702410
 H -2.895787 4.814301 3.256992
 C -3.508252 3.649090 1.554829
 H -4.231965 4.385794 1.212185
 C -3.332820 2.470114 0.838767
 H -3.913086 2.288460 -0.063832
 C 1.942057 -1.499451 -1.262690
 C 3.210243 -2.672718 0.453826
 C 3.975228 -0.531250 -0.327412
 C 4.127928 -1.628891 0.509395
 C 2.896845 -0.497537 -1.201386
 C 2.147532 -2.591844 -0.435535
 F 1.268345 -3.598867 -0.421736
 F 2.759006 0.603610 -1.945143
 F 4.821980 0.482684 -0.262338
 F 5.138361 -1.683435 1.355196
 F 3.350687 -3.718623 1.253580
 F -0.258991 2.814528 -1.971229
 F 1.808143 4.438178 -1.442052
 F 3.575131 3.805926 0.509043
 F 3.226862 1.531507 1.966826
 F 1.139880 -0.059177 1.490830
 Sn -0.017491 -1.019540 -2.141897
 H 0.255536 -0.344986 -3.681582
 H -0.964259 -2.432471 -2.227743

Y_{PhF}SnPy

E = -2057.56659845

P -1.749631 0.164256 0.037169

C -0.138340 -0.316410 -0.032298

C 0.976969 0.616576 0.108521

C 1.890310 0.501029 1.164596

C 3.081701 1.207579 1.218253

C 3.363193 2.139859 0.228811

C 2.469138 2.314504 -0.821039

C 1.306209 1.560309 -0.873434

C -2.579140 -0.001683 1.664159

C -3.851087 0.528406 1.903484

H -4.381434 1.052024 1.107915

C -4.432046 0.399313 3.157936

H -5.421680 0.812522 3.343780

C -3.742829 -0.249807 4.180745

H -4.198358 -0.346283 5.164601

C -2.470774 -0.760516 3.950653

H -1.926077 -1.253313 4.753566

C -1.886233 -0.634609 2.693734

H -0.877862 -1.001294 2.503377

C -2.740870 -0.809241 -1.133617

C -3.926040 -1.464742 -0.799576

H -4.317418 -1.407851 0.213218

C -4.600263 -2.210526 -1.761552

H -5.518866 -2.729458 -1.495204

C -4.098708 -2.299225 -3.055025

H -4.628388 -2.885167 -3.803879

C -2.913161 -1.650514 -3.390754

H -2.512771 -1.729086 -4.399380

C -2.229607 -0.914898 -2.432479

H -1.283844 -0.426262 -2.667564

C -1.977641 1.927909 -0.330170

C -1.473359 2.846107 0.595718

H -1.031628 2.491958 1.526565

C -1.533345 4.207340 0.328136

H -1.132254 4.918323 1.047574

C -2.107571 4.658820 -0.856434
 H -2.155939 5.725853 -1.064835
 C -2.621489 3.747759 -1.772485
 H -3.074293 4.099905 -2.697129
 C -2.553247 2.383089 -1.515489
 H -2.945961 1.673882 -2.240673
 C 2.593748 -2.098157 -0.318790
 C 4.808351 -1.962974 0.604144
 C 4.219430 -0.979061 -1.489886
 C 5.179185 -1.223675 -0.511455
 F 0.526883 1.706441 -1.938965
 F 2.751515 3.184337 -1.781324
 F 4.486558 2.840857 0.271682
 F 3.941704 1.009000 2.207249
 F 1.657741 -0.391803 2.130739
 N 2.961558 -1.395698 -1.397762
 H 5.526997 -2.174451 1.394395
 H 6.189652 -0.836687 -0.623876
 H 4.477976 -0.405698 -2.382973
 C 3.496963 -2.414176 0.698639
 H 3.168016 -2.977878 1.570090
 Sn 0.447308 -2.365438 -0.162965
 H -0.210478 -3.153815 -1.530147
 H 0.066469 -3.299066 1.232929

Y_{PhF}SnPyr

E = -2073.62521702
 P -1.737666 0.179459 0.040337
 C -0.139720 -0.315869 -0.153498
 C 0.979937 0.610478 0.029645
 C 1.871357 0.469982 1.102347
 C 3.064161 1.170972 1.194562
 C 3.371663 2.118088 0.227527
 C 2.498664 2.319237 -0.835094
 C 1.331669 1.573266 -0.925827
 C -2.426306 0.163255 1.740323
 C -3.615112 0.826421 2.060981

H -4.152680 1.380996 1.291960
 C -4.103310 0.788033 3.360569
 H -5.027906 1.305638 3.609316
 C -3.403609 0.095107 4.346497
 H -3.784873 0.070452 5.365730
 C -2.214462 -0.553163 4.033493
 H -1.660601 -1.083157 4.805816
 C -1.723444 -0.518413 2.731679
 H -0.779668 -0.999055 2.478192
 C -2.827510 -0.890818 -0.940187
 C -4.007620 -1.445250 -0.441838
 H -4.311642 -1.253057 0.584274
 C -4.789270 -2.258413 -1.255311
 H -5.703853 -2.696083 -0.860384
 C -4.400490 -2.517232 -2.565150
 H -5.014184 -3.155879 -3.197734
 C -3.222587 -1.969505 -3.064952
 H -2.911170 -2.179612 -4.086044
 C -2.433551 -1.163099 -2.255186
 H -1.495387 -0.746333 -2.620644
 C -2.001962 1.905903 -0.461741
 C -1.495289 2.908282 0.370489
 H -1.054702 2.645420 1.331683
 C -1.551257 4.237736 -0.027979
 H -1.147601 5.013989 0.618966
 C -2.124475 4.573921 -1.250422
 H -2.169907 5.615830 -1.561354
 C -2.641563 3.579539 -2.073804
 H -3.094600 3.841823 -3.027752
 C -2.575862 2.246473 -1.686009
 H -2.969889 1.471299 -2.339581
 C 2.594032 -2.095386 -0.368918
 C 4.617495 -2.090292 0.667345
 C 4.288662 -0.951453 -1.372327
 C 5.146135 -1.280507 -0.329481
 F 0.571860 1.752922 -1.997167
 F 2.803818 3.207445 -1.771162

F 4.499047 2.809595 0.304435
 F 3.907206 0.945076 2.192558
 F 1.617926 -0.437917 2.044890
 Sn 0.436784 -2.371006 -0.285170
 H -0.145268 -3.126412 -1.706065
 H -0.011165 -3.328355 1.064297
 N 3.023195 -1.352433 -1.395865
 N 3.352774 -2.498878 0.651529
 H 5.230024 -2.414122 1.511671
 H 6.173767 -0.926929 -0.297683
 H 4.628344 -0.336715 -2.209229

$Y_{PhF}SnB^2$

E = -2216.58280477
 P 2.075255 0.217445 0.020358
 C 0.510148 -0.382255 -0.155044
 C -0.658270 0.475778 -0.314007
 C -1.519663 0.331522 -1.411963
 C -2.712162 1.029882 -1.544140
 C -3.080387 1.945171 -0.568779
 C -2.261583 2.119617 0.540505
 C -1.084929 1.394947 0.657774
 C 3.153804 0.042791 -1.450116
 C 4.427601 0.618813 -1.495188
 H 4.807367 1.169160 -0.634248
 C 5.201789 0.502998 -2.641698
 H 6.191972 0.953448 -2.676415
 C 4.705904 -0.180515 -3.750487
 H 5.313277 -0.267546 -4.649518
 C 3.432961 -0.737173 -3.715016
 H 3.038820 -1.257113 -4.585900
 C 2.653515 -0.622035 -2.567518
 H 1.640870 -1.022947 -2.534280
 C 2.949468 -0.610213 1.384117
 C 4.191482 -1.232176 1.264824
 H 4.722041 -1.222113 0.315923
 C 4.745345 -1.890102 2.359500

H 5.709123 -2.385316 2.259466
 C 4.066682 -1.923053 3.571663
 H 4.502349 -2.440497 4.424356
 C 2.823075 -1.307131 3.692635
 H 2.284798 -1.342612 4.637614
 C 2.259373 -0.662561 2.600874
 H 1.271248 -0.207063 2.666784
 C 2.111995 2.007253 0.318123
 C 1.589199 2.830128 -0.684217
 H 1.227887 2.389975 -1.612954
 C 1.528981 4.203902 -0.493656
 H 1.114399 4.840537 -1.272577
 C 1.999692 4.763295 0.690914
 H 1.952702 5.840351 0.839509
 C 2.531870 3.947683 1.683006
 H 2.903302 4.384475 2.607820
 C 2.585434 2.569777 1.502254
 H 2.991059 1.934068 2.286148
 C -3.747331 -1.042866 1.093405
 C -4.135181 -1.506297 -0.158705
 C -4.531157 -0.179562 1.833424
 C -5.325850 -1.122657 -0.743712
 C -5.736116 0.215557 1.251669
 H -4.203978 0.190579 2.801177
 C -6.122564 -0.243337 -0.009131
 H -5.603812 -1.468182 -1.735269
 H -6.381074 0.909603 1.785762
 H -7.062489 0.100853 -0.434580
 B -2.104305 -2.229460 0.250389
 O -3.130680 -2.276388 -0.673963
 O -2.501413 -1.521897 1.372878
 F -0.383366 1.545963 1.779066
 F -1.214584 -0.555846 -2.359547
 F -3.501498 0.821282 -2.587634
 F -2.639391 2.945016 1.507213
 F -4.216755 2.617006 -0.671992
 Sn 0.096892 -2.495303 -0.132196

H 0.980655 -3.265092 1.117047
H 0.485945 -3.301384 -1.596548

$Y_{PhF}SnB^1$

E = -2485.77711052
P -2.120695 0.829630 0.285035
C -0.484484 0.438925 0.124533
C 0.131180 -0.602155 0.931570
C -0.370729 -1.900668 1.069379
C 0.301141 -2.901813 1.753551
C 1.534614 -2.640663 2.331955
C 2.068846 -1.361421 2.232241
C 1.363557 -0.372521 1.568603
C -3.389118 -0.024713 -0.721064
C -4.754034 0.082169 -0.436629
H -5.088284 0.666914 0.420146
C -5.684234 -0.566614 -1.238736
H -6.746095 -0.484885 -1.014342
C -5.255151 -1.327147 -2.324002
H -5.984253 -1.838300 -2.950080
C -3.897653 -1.444533 -2.600053
H -3.561332 -2.052910 -3.436834
C -2.964039 -0.796266 -1.798512
H -1.895929 -0.905390 -1.980376
C -2.328892 2.597051 -0.117687
C -3.402226 3.093376 -0.860512
H -4.157951 2.417243 -1.250892
C -3.499020 4.455435 -1.122012
H -4.334687 4.832347 -1.708325
C -2.529123 5.330997 -0.646294
H -2.607293 6.396205 -0.855839
C -1.452193 4.842369 0.086059
H -0.681968 5.520239 0.448078
C -1.347896 3.481654 0.345267
H -0.493300 3.083201 0.890582
C -2.687688 0.558010 1.997047
C -3.273414 -0.657752 2.359015

H -3.473565 -1.411140 1.601056
 C -3.591801 -0.909065 3.689148
 H -4.041790 -1.861012 3.963871
 C -3.335633 0.049806 4.662212
 H -3.588599 -0.147741 5.702164
 C -2.753413 1.262577 4.305477
 H -2.552284 2.016557 5.063842
 C -2.424605 1.514616 2.979802
 H -1.964879 2.462127 2.708231
 N 3.733955 -0.099221 -0.781520
 C 3.437025 -2.310008 -0.935106
 C 4.282430 -1.346694 -0.509235
 H 3.582132 -3.383792 -0.935454
 H 5.268787 -1.453447 -0.073181
 B 2.447755 -0.286920 -1.396097
 N 2.310106 -1.719655 -1.496776
 C 1.213970 -2.469256 -1.960578
 C 0.828977 -3.647558 -1.315903
 C 0.496352 -2.041002 -3.079083
 C -0.282001 -4.354774 -1.752919
 H 1.383189 -3.995019 -0.448076
 C -0.603106 -2.765269 -3.522730
 H 0.820362 -1.148990 -3.609563
 C -1.007071 -3.917022 -2.856297
 H -0.586167 -5.250013 -1.214690
 H -1.144844 -2.421757 -4.402487
 H -1.876595 -4.474588 -3.198025
 C 4.354721 1.102512 -0.386220
 C 4.367752 2.197830 -1.249289
 C 4.955129 1.207740 0.869269
 C 4.963398 3.389104 -0.854500
 H 3.917627 2.101616 -2.234948
 C 5.563703 2.395972 1.249956
 H 4.901339 0.366558 1.555478
 C 5.568600 3.492379 0.393089
 H 4.964720 4.238442 -1.534930
 H 6.023281 2.469869 2.233765

H 6.041454 4.423801 0.697532
 Sn 0.763878 1.215815 -1.452898
 H 1.268429 2.829008 -1.155485
 H -0.154423 1.274373 -2.910357
 F -1.495750 -2.240655 0.437954
 F -0.182311 -4.139260 1.765114
 F 2.206052 -3.604666 2.946888
 F 3.249657 -1.098592 2.781146
 F 1.905572 0.844104 1.509145

V^{Sn}

E = -1022.65604664
 C 1.612922 2.479888 0.019864
 C -0.513294 1.350470 -0.217694
 C -1.102309 2.593521 -0.460990
 C -0.358659 3.769372 -0.437093
 C 1.003629 3.714337 -0.179930
 H 2.686200 2.460459 0.208054
 H -2.165693 2.636412 -0.681942
 H -0.851138 4.721789 -0.622990
 H 1.599880 4.624137 -0.143113
 N -1.230564 0.150954 -0.232728
 C -2.606068 0.038197 -0.049707
 C -3.343300 0.884669 0.796203
 C -3.290921 -1.017757 -0.671959
 C -4.701407 0.679917 0.993091
 H -2.833917 1.692274 1.315156
 C -4.647157 -1.224165 -0.458615
 H -2.741668 -1.674483 -1.347940
 C -5.368103 -0.372098 0.370280
 H -5.245444 1.348153 1.659188
 H -5.145764 -2.053594 -0.957677
 H -6.432692 -0.526007 0.532168
 C 0.901592 1.270877 -0.014435
 C 1.514250 -0.051361 0.107701
 P 3.175116 -0.332440 0.169877
 C 4.156400 0.304651 -1.232616

H 3.947887 1.372118 -1.357788
H 5.232028 0.156827 -1.082415
H 3.830737 -0.211958 -2.141596
C 4.056649 0.304527 1.637741
H 5.130521 0.088895 1.591023
H 3.907314 1.386370 1.712454
H 3.618892 -0.159974 2.527521
C 3.494800 -2.116233 0.191214
H 4.571588 -2.312316 0.227293
H 3.021665 -2.561716 1.073373
H 3.079949 -2.573356 -0.714458
Sn 0.026828 -1.502797 -0.096110
H -0.471153 -2.481406 1.218209
H 0.052466 -2.515702 -1.486430

Vl^{Sn}

E = -1571.87088588
C 0.831207 3.074972 0.005755
C 0.351966 1.785886 0.220873
C -0.860571 1.341337 -0.354413
C -1.538913 2.265842 -1.171416
C -1.062004 3.549485 -1.376028
C 0.130353 3.968044 -0.789728
H 1.759764 3.358150 0.497125
H -2.463994 1.948008 -1.647026
H -1.625394 4.229099 -2.013357
H 0.504220 4.977371 -0.945493
N -1.366375 0.057487 -0.181828
S 1.305239 0.723389 1.294463
O 2.561773 1.443389 1.586591
O 0.416969 0.328558 2.388691
C 1.655411 -0.651539 0.337851
C -2.749569 -0.147587 -0.110458
C -3.587006 0.737749 0.587488
C -3.327545 -1.289060 -0.680534
C -4.944222 0.483027 0.701465
H -3.149973 1.617866 1.053506

C -4.687258 -1.548355 -0.545224
 H -2.705676 -1.973281 -1.259170
 C -5.507230 -0.662386 0.140877
 H -5.570822 1.181321 1.254004
 H -5.106625 -2.446022 -0.996323
 H -6.572049 -0.860130 0.241901
 P 3.152755 -0.644054 -0.473996
 C 3.472276 0.830435 -1.480400
 H 4.454039 0.781211 -1.964645
 H 2.681972 0.930253 -2.232048
 H 3.431087 1.694380 -0.808268
 C 3.227375 -2.059387 -1.596831
 H 2.425590 -1.984955 -2.338950
 H 4.195797 -2.081351 -2.107605
 H 3.099214 -2.984929 -1.025699
 C 4.571641 -0.776354 0.640032
 H 4.476994 0.048646 1.354661
 H 4.506047 -1.725335 1.181990
 H 5.521216 -0.711688 0.096764
 Sn -0.144221 -1.655639 0.011041
 H -0.834839 -2.573116 1.253970
 H -0.111442 -2.547620 -1.454173

VII^{Sn}

E = -2333.95836046
 C -0.401063 1.875369 -0.574745
 C 0.400169 1.875392 0.574464
 C 0.768416 3.094449 1.145666
 C 0.382391 4.301208 0.578795
 C -0.382665 4.301184 -0.579623
 C -0.769100 3.094396 -1.146156
 H 1.385453 3.068093 2.039898
 H 0.684848 5.237575 1.043660
 H -0.684890 5.237532 -1.044677
 H -1.386306 3.068059 -2.040278
 S -1.012629 0.423278 -1.509952
 S 1.011633 0.423264 1.509685

O -2.160390 0.991252 -2.244321
 O 0.155602 -0.053021 -2.277031
 O -0.156698 -0.053539 2.276379
 O 2.158957 0.991380 2.244693
 C -1.532443 -0.781158 -0.462855
 C 1.532312 -0.780664 0.462464
 P 2.972537 -0.466304 -0.404227
 P -2.971825 -0.467110 0.405492
 C 3.088568 -1.595698 -1.804488
 H 4.013175 -1.404898 -2.359371
 H 3.078676 -2.633112 -1.455496
 H 2.215342 -1.414338 -2.443223
 C 3.074257 1.196814 -1.109713
 H 3.043328 1.926256 -0.293398
 H 4.003855 1.314696 -1.677613
 H 2.202190 1.329403 -1.759955
 C 4.463072 -0.654304 0.606857
 H 4.534664 -1.693770 0.943584
 H 5.371317 -0.367927 0.064473
 H 4.315912 -0.012806 1.483241
 C -3.085487 -1.595214 1.806962
 H -4.009530 -1.404322 2.362758
 H -3.075542 -2.632976 1.459019
 H -2.211433 -1.412541 2.444257
 C -3.074531 1.196663 1.109286
 H -3.044975 1.925240 0.292128
 H -4.003995 1.314021 1.677504
 H -2.202336 1.331019 1.758913
 C -4.463156 -0.656810 -0.604117
 H -5.371292 -0.371808 -0.060835
 H -4.317639 -0.014875 -1.480465
 H -4.533652 -1.696215 -0.941268
 Sn 0.000252 -2.163154 -0.000806
 H -0.448364 -3.158540 1.311949
 H 0.449618 -3.157867 -1.313761

VIII^{Sn}

E = -1541.94749500

C 0.693377 3.264343 -0.016953

C 0.151402 2.008913 0.201106

C -1.041037 1.539706 -0.350667

C -1.723973 2.418850 -1.194225

C -1.217681 3.694017 -1.430267

C -0.022771 4.121190 -0.845631

H 1.627136 3.568170 0.452528

H -2.663001 2.110659 -1.652931

H -1.766065 4.377807 -2.076176

H 0.345695 5.127220 -1.035758

B -1.336691 0.043743 0.141393

S 0.904314 0.674628 1.088532

O 1.672586 1.097902 2.262459

O -0.460752 -0.046294 1.407757

C 1.698718 -0.322549 0.025674

C -2.815269 -0.462087 0.386319

C -3.795429 0.451571 0.798702

C -3.207331 -1.799025 0.250880

C -5.102259 0.052979 1.059776

H -3.526217 1.500669 0.920977

C -4.509556 -2.210350 0.512253

H -2.472511 -2.538488 -0.069402

C -5.463815 -1.282386 0.916483

H -5.841731 0.786739 1.377471

H -4.782416 -3.258275 0.396942

H -6.486055 -1.598945 1.117583

P 3.329769 -0.661737 0.347323

C 4.395062 0.803489 0.436054

H 5.436452 0.532792 0.643292

H 4.328993 1.347317 -0.511949

H 4.009892 1.436966 1.242756

C 3.960460 -1.702415 -0.985061

H 3.856059 -1.167204 -1.934512

H 5.011585 -1.956483 -0.811744

H 3.360216 -2.617714 -1.030839

C 3.633783 -1.548476 1.899807
H 3.217373 -0.931024 2.703562
H 3.094458 -2.501133 1.871561
H 4.701840 -1.724548 2.071632
Sn 0.125930 -1.246378 -1.247559
H 0.437709 -2.947379 -1.101775
H 0.585193 -0.894422 -2.875794

***IX*^{Sn}**

E = -992.715610931
C 1.638634 2.492562 -0.114545
C -0.513855 1.333555 -0.147442
C -1.120471 2.601662 -0.316076
C -0.402131 3.775375 -0.372856
C 0.994659 3.700994 -0.256229
H 2.725417 2.499256 -0.046156
H -2.203495 2.638305 -0.423210
H -0.897345 4.733703 -0.510673
H 1.588154 4.614670 -0.290728
B -1.362600 0.073511 -0.088049
C -2.907137 -0.035748 0.014988
C -3.660271 0.834756 0.823385
C -3.612011 -1.035514 -0.677279
C -5.041467 0.718816 0.925987
H -3.146470 1.603401 1.398716
C -4.994965 -1.135388 -0.606683
H -3.056961 -1.746527 -1.289754
C -5.714885 -0.259026 0.200943
H -5.596674 1.396964 1.572114
H -5.514399 -1.909229 -1.169504
H -6.797766 -0.345664 0.272977
C 0.936243 1.253209 -0.071237
C 1.593581 -0.012397 0.033425
P 3.272443 -0.222496 0.130290
C 4.266249 0.367326 -1.286678
H 4.090937 1.436269 -1.443136
H 5.337093 0.193099 -1.129468

H 3.931054 -0.166618 -2.182210
 C 4.096938 0.515473 1.583584
 H 5.179182 0.342319 1.564213
 H 3.901343 1.591962 1.612813
 H 3.664274 0.066636 2.483861
 C 3.660515 -1.986716 0.238686
 H 4.742797 -2.138854 0.308708
 H 3.170548 -2.409450 1.122329
 H 3.275827 -2.494953 -0.652398
 Sn 0.145175 -1.608366 -0.049263
 H 0.300889 -2.649845 1.316071
 H 0.455426 -2.640880 -1.397343

3.7.3.2 Reaktionspfad B

Y_2Sn

E = -3797.74178854
 C -4.273828 -2.539955 -0.752835
 H -4.020625 -3.195291 0.077017
 C -3.368765 -1.557571 -1.125262
 C 3.775573 2.081371 -0.970527
 O -0.781524 -1.925683 -1.205658
 C 3.850656 2.235617 -2.352247
 H 2.992234 1.988523 -2.976086
 C -2.640069 2.167601 3.385136
 H -3.673850 1.831674 3.430280
 C -5.484397 -2.641185 -1.429487
 H -6.203013 -3.403543 -1.129493
 C 1.889222 -4.920172 -1.554647
 H 1.042039 -5.435427 -2.001859
 C 1.683959 -3.694446 -0.934140
 H 0.683246 -3.263230 -0.890646
 C -2.177007 2.816015 -1.602596
 H -1.483968 2.025394 -1.889757
 C -2.845815 2.713257 -0.385562
 C -5.319807 0.846208 0.396466
 H -5.304655 1.585395 -0.401366

C -6.494934 0.160881 0.684208
 H -7.397468 0.376905 0.115323
 C 3.161371 -5.478719 -1.610953
 H 3.313965 -6.438187 -2.102041
 C 2.152502 -0.217574 -0.784750
 Sn 0.266957 -0.408238 -2.398050
 O 2.440176 1.520485 1.217308
 S 2.264956 1.477513 -0.244642
 P 2.463040 -1.447665 0.470416
 C 5.023321 2.716473 -2.911507
 H 5.093225 2.831627 -3.992270
 C 4.039218 -1.118293 2.772617
 H 3.154660 -1.405137 3.336448
 C 0.543286 -0.637911 2.305838
 H 0.721169 0.365717 1.946143
 C -5.352423 -1.092978 2.394825
 H -5.358630 -1.860459 3.166294
 C -4.173786 -0.418207 2.106684
 H -3.253555 -0.676108 2.628666
 C 4.047068 -3.593806 -0.400789
 H 4.891357 -3.096948 0.068499
 C -1.910557 2.047243 2.202191
 C -3.657324 -0.687758 -2.171846
 H -2.946105 0.095659 -2.433801
 C -3.706469 3.732604 0.030403
 H -4.208084 3.660067 0.995691
 C -4.155493 0.570223 1.115241
 C 0.106958 -3.220737 3.251526
 H -0.074956 -4.231768 3.609117
 C 1.184380 -1.721123 1.703102
 C 0.964314 -3.018299 2.179556
 H 1.458079 -3.869296 1.717958
 C 2.771022 -3.025641 -0.358870
 C 4.239070 -4.816498 -1.033136
 H 5.234400 -5.254838 -1.064493
 C -7.132873 -1.856040 -3.165755
 H -7.856424 -1.170971 -2.701063

H -7.556521 -2.864609 -3.106802
 H -7.056985 -1.576883 -4.222763
 C -0.516089 -2.137571 3.861976
 H -1.181705 -2.301799 4.707617
 C 6.114614 3.072900 -2.108260
 C -6.514898 -0.802320 1.686952
 H -7.435843 -1.338743 1.908383
 C 6.297816 -0.355577 1.327705
 H 7.174023 -0.049600 0.759516
 C -1.447589 0.203358 -0.031658
 P -2.531347 1.265977 0.671179
 O -1.963537 -2.286877 0.934898
 S -1.833899 -1.357370 -0.203317
 O 1.192293 2.262585 -0.852607
 C -5.803209 -1.775850 -2.477009
 C -4.865486 -0.804633 -2.842907
 H -5.092119 -0.121068 -3.660609
 C -2.385015 3.929562 -2.411315
 H -1.855569 4.012952 -3.358536
 C -3.258688 4.932734 -2.008257
 H -3.421686 5.801172 -2.644343
 C -3.919700 4.835467 -0.785007
 H -4.596520 5.625743 -0.465387
 C 5.116809 -0.655828 0.661521
 H 5.076797 -0.575324 -0.424266
 C -0.295939 -0.848982 3.391907
 H -0.773669 0.006548 3.865617
 C 3.984563 -1.044317 1.381434
 C 6.350207 -0.430513 2.716041
 H 7.273193 -0.188488 3.239464
 C 5.995658 2.934456 -0.724847
 H 6.830433 3.219121 -0.085758
 C 5.221364 -0.808711 3.435165
 H 5.257799 -0.859871 4.521355
 C -0.710704 3.123790 4.476217
 H -0.239061 3.528627 5.370016
 C -2.036580 2.705225 4.519612

H -2.605461 2.789784 5.443965
 C 4.830586 2.440479 -0.147223
 H 4.727979 2.321428 0.928774
 C 7.369029 3.608060 -2.729830
 H 7.185706 4.578182 -3.209833
 H 7.746911 2.932514 -3.507076
 H 8.159098 3.747065 -1.985147
 C 0.009657 3.030841 3.287298
 H 1.047972 3.352399 3.237182
 C -0.592355 2.506027 2.152522
 H -0.034053 2.424511 1.222202
 H 2.918148 -0.380230 -1.554728
 H 1.234136 -1.827384 -2.982524

YSnCl

E = -2361.79594561
 C 2.472728 -1.488662 -0.331437
 C 2.839834 -1.790694 0.975634
 H 2.126600 -2.257000 1.653953
 C -2.307179 2.687894 3.124977
 H -3.162414 3.348549 3.247761
 C -1.962417 2.246922 1.854353
 H -2.568553 2.529775 0.998912
 C -1.586253 2.264200 4.235620
 H -1.867468 2.605619 5.229816
 C -0.266609 -0.962694 0.203381
 Sn -2.375923 -2.390625 0.131921
 O 0.671113 -1.188374 -2.207419
 S 0.803650 -1.801220 -0.879757
 P -0.373389 0.788145 0.061096
 C 4.127998 -1.498158 1.400109
 H 4.420048 -1.726843 2.424070
 C 1.525124 1.805366 -1.698126
 H 0.810025 1.533024 -2.470111
 C -2.063190 0.476749 -2.131077
 H -1.886395 -0.590947 -2.037424
 C -0.168103 0.942031 2.811155

H 0.654718 0.236504 2.701174
 C -2.438645 3.226363 -2.431058
 H -2.579882 4.298248 -2.552022
 C -1.466139 1.368083 -1.243631
 C -1.634607 2.746954 -1.406637
 H -1.130830 3.445010 -0.738908
 C -0.875947 1.387743 1.690547
 C -0.521294 1.384065 4.079489
 H 0.030470 1.029295 4.947202
 C -3.053104 2.333893 -3.305490
 H -3.681454 2.710447 -4.110343
 C 5.062860 -0.926276 0.531044
 C 3.384093 2.447859 0.271963
 H 4.107501 2.697587 1.045460
 O 0.547398 -3.227184 -0.678493
 C 2.160168 1.897872 0.630540
 H 1.938561 1.736649 1.681364
 C -2.855929 0.965579 -3.161854
 H -3.322036 0.267800 -3.853552
 C 1.219692 1.579254 -0.352378
 C 3.678147 2.686424 -1.066617
 H 4.635028 3.124401 -1.344357
 C 4.674679 -0.670122 -0.785574
 H 5.391977 -0.235868 -1.480817
 C 2.748924 2.362921 -2.048405
 H 2.975644 2.541150 -3.097558
 C 3.385928 -0.944696 -1.222484
 H 3.067834 -0.728144 -2.239173
 C 6.439966 -0.572169 1.004377
 H 7.195770 -0.798130 0.243771
 H 6.702879 -1.110737 1.920645
 H 6.511651 0.502932 1.221283
 H -0.076438 -1.253298 1.238842
 H -1.919976 -2.769865 1.817715
 Cl -3.629830 -0.295490 0.790158

YSnHMDS

E = -2775.57104813
 C -2.800649 -2.024351 0.150200
 C -3.093006 -2.588512 -1.089492
 H -2.285192 -2.852012 -1.771065
 C 0.060405 4.336001 -2.410034
 H 0.637373 5.255894 -2.346081
 C -0.074203 3.534790 -1.282157
 H 0.416232 3.826131 -0.357935
 C -0.520468 3.956909 -3.613423
 H -0.406362 4.583465 -4.495621
 C -0.624495 -0.361894 -0.505968
 Sn 1.617392 -1.001374 -1.751353
 O -1.083051 -1.151993 1.936823
 S -1.102670 -1.665394 0.558963
 P -0.965745 1.253583 0.084387
 C -4.415981 -2.819879 -1.428430
 H -4.651683 -3.258144 -2.397450
 C -2.872746 1.366802 2.118684
 H -2.037154 1.176579 2.787232
 C 1.090616 0.910700 1.921488
 H 1.271920 -0.052570 1.456059
 C -1.372757 1.961663 -2.571113
 H -1.924345 1.027134 -2.655786
 C 0.689293 3.426015 3.077322
 H 0.533055 4.403944 3.527543
 C 0.115729 1.769692 1.420685
 C -0.095477 3.023984 2.007376
 H -0.885394 3.677634 1.638771
 C -0.794802 2.342251 -1.354540
 C -1.238385 2.767797 -3.692244
 H -1.686878 2.459371 -4.634085
 C 1.660528 2.564489 3.584173
 H 2.267350 2.872206 4.433561
 C -5.455567 -2.512313 -0.540606
 C -5.024094 1.769279 0.396039
 H -5.862083 1.926290 -0.279779

O -0.332052 -2.855573 0.209437
 C -3.734448 1.694021 -0.114318
 H -3.577694 1.803399 -1.184529
 C 1.851829 1.312991 3.013881
 H 2.604414 0.639115 3.413710
 C -2.650549 1.492678 0.744116
 C -5.240759 1.651083 1.765195
 H -6.251420 1.715771 2.163859
 C -5.127395 -1.978973 0.705404
 H -5.920648 -1.746497 1.414614
 C -4.164644 1.453297 2.623475
 H -4.329231 1.357184 3.694797
 C -3.804551 -1.736800 1.060397
 H -3.541787 -1.328007 2.031936
 C -6.881326 -2.768696 -0.925356
 H -7.054524 -3.836926 -1.108342
 H -7.144280 -2.239064 -1.849779
 H -7.573049 -2.445593 -0.140974
 H -1.088204 -0.508532 -1.485136
 H 1.702593 0.742938 -2.173211
 Si 4.100735 0.596864 -0.169880
 Si 3.414816 -2.293724 0.713415
 C 2.850341 -3.807729 -0.249973
 H 1.762963 -3.840503 -0.377483
 H 3.322044 -3.862822 -1.240018
 H 3.149009 -4.702467 0.314444
 C 5.262607 -2.556522 1.017709
 H 5.634037 -2.018013 1.896304
 H 5.440782 -3.626835 1.188389
 H 5.867179 -2.254036 0.152144
 C 2.558192 -2.345393 2.389467
 H 2.780782 -3.290069 2.903805
 H 2.899943 -1.529759 3.040224
 H 1.468307 -2.273803 2.284643
 C 3.197944 2.259075 -0.172649
 H 3.822557 2.991937 -0.702189
 H 2.243360 2.192860 -0.702635

H 3.019465 2.640609 0.839487
 C 5.146950 0.554105 -1.739449
 H 4.501371 0.602536 -2.627932
 H 5.850307 1.396111 -1.792987
 H 5.724709 -0.378051 -1.794874
 N 3.060308 -0.807056 -0.144098
 C 5.279298 0.682693 1.306926
 H 6.187829 0.090349 1.154436
 H 5.582420 1.727524 1.457790
 H 4.805606 0.336368 2.235001

YSnB¹

E = -2577.44789013
 C 3.372817 -1.376674 -1.231276
 C 2.975199 -2.360951 -2.130810
 H 2.107413 -2.195225 -2.764684
 C -2.887230 0.149802 2.719509
 H -3.915396 0.428112 2.502985
 C -1.869712 0.690232 1.946242
 H -2.118926 1.367057 1.132490
 C -2.594040 -0.749568 3.737575
 H -3.399246 -1.191904 4.320733
 C 1.084038 -0.248020 -0.063469
 Sn -0.662854 -1.667723 -1.128153
 O 3.304719 1.140372 -0.474909
 S 2.452096 0.138759 -1.138549
 P 0.795689 0.983580 1.181280
 C 3.704383 -3.538733 -2.192738
 H 3.397851 -4.317977 -2.889010
 C 2.507361 2.402951 2.909131
 H 1.881295 3.270908 2.718257
 C 0.876739 3.162635 -0.568680
 H 1.440128 2.547154 -1.261000
 C -0.244658 -0.520160 3.265797
 H 0.787498 -0.772405 3.497254
 C -0.602829 4.788191 1.153178
 H -1.185932 5.416410 1.823295

C 0.353162 2.634601 0.613606
 C -0.389633 3.454257 1.473781
 H -0.793953 3.053750 2.400654
 C -0.540044 0.363631 2.226309
 C -1.272614 -1.085268 4.009281
 H -1.037745 -1.786452 4.806964
 C -0.061402 5.316171 -0.013620
 H -0.219221 6.364197 -0.261021
 C 4.828853 -3.739891 -1.384953
 C 4.154672 0.208207 3.374847
 H 4.800097 -0.650826 3.546996
 O 1.958025 0.442667 -2.481957
 C 3.070966 0.092219 2.514913
 H 2.889381 -0.855892 2.011789
 C 0.673917 4.503915 -0.867495
 H 1.086674 4.906659 -1.788166
 C 2.234904 1.187061 2.283724
 C 4.419311 1.421405 4.002405
 H 5.273193 1.514718 4.670436
 C 5.217033 -2.719096 -0.513825
 H 6.104905 -2.851922 0.102691
 C 3.596738 2.516296 3.765591
 H 3.806335 3.470804 4.243930
 C 4.497237 -1.533315 -0.431270
 H 4.806126 -0.720846 0.223093
 C 5.598304 -5.023581 -1.464186
 H 5.914902 -5.232047 -2.493568
 H 4.980304 -5.871335 -1.141160
 H 6.491679 -4.997710 -0.832222
 H 1.367779 -1.136883 0.515549
 H -0.891930 -2.273198 0.536114
 N -3.801874 -0.746464 -0.381326
 C -4.143663 1.379653 -0.978238
 C -4.705345 0.308705 -0.383945
 H -4.620498 2.322545 -1.208967
 H -5.724315 0.200664 -0.030627
 C -2.079002 1.970608 -2.143899

C -0.977995 1.522837 -2.879057
 C -2.424403 3.325769 -2.229867
 C -0.270064 2.389612 -3.699540
 H -0.669678 0.483518 -2.828966
 C -1.730819 4.180531 -3.077232
 H -3.241454 3.724512 -1.636003
 C -0.654485 3.719896 -3.827014
 H 0.592772 2.000737 -4.235591
 H -2.033493 5.224840 -3.138105
 H -0.113524 4.392399 -4.489954
 C -4.125951 -1.995276 0.169499
 C -3.609834 -3.168585 -0.386804
 C -4.988382 -2.101937 1.265884
 C -3.907524 -4.405926 0.165960
 H -2.996785 -3.111002 -1.285101
 C -5.296702 -3.344190 1.805783
 H -5.411759 -1.203531 1.707834
 C -4.750588 -4.503811 1.267707
 H -3.486286 -5.303416 -0.282823
 H -5.967527 -3.402329 2.661357
 H -4.988620 -5.475359 1.695464
 N -2.845672 1.069739 -1.381115
 B -2.547924 -0.299777 -0.974095

(Y^{Ph})₂Sn

E = -2620.58994123
 P 2.839727 -0.477517 0.160229
 P -2.806351 -0.289613 0.057323
 C 1.466714 0.557745 -0.156544
 C 1.716936 2.021163 -0.168164
 C 2.386851 2.643085 -1.229868
 H 2.709976 2.045145 -2.079588
 C 2.616920 4.013924 -1.223936
 H 3.138501 4.474048 -2.061723
 C 2.162415 4.799813 -0.169926
 H 2.326020 5.875672 -0.175999
 C 1.474248 4.199773 0.879889

H 1.086485 4.804429 1.697228
 C 1.265954 2.827856 0.884825
 H 0.726046 2.367805 1.710868
 C 4.040053 -0.581156 -1.188570
 C 5.389844 -0.818646 -0.911938
 H 5.733240 -0.879275 0.118642
 C 6.295620 -0.969193 -1.954675
 H 7.346032 -1.148727 -1.734998
 C 5.861232 -0.885234 -3.273941
 H 6.573867 -0.999547 -4.088653
 C 4.518525 -0.651508 -3.551851
 H 4.173954 -0.581769 -4.581472
 C 3.606230 -0.500966 -2.514375
 H 2.555455 -0.310990 -2.737783
 C 2.191409 -2.134281 0.469171
 C 2.481138 -3.204859 -0.373863
 H 3.175384 -3.077810 -1.201587
 C 1.857132 -4.430921 -0.170080
 H 2.074456 -5.262438 -0.837093
 C 0.953551 -4.591387 0.873815
 H 0.464993 -5.552111 1.026434
 C 0.673886 -3.526364 1.726815
 H -0.031844 -3.642897 2.546580
 C 1.287115 -2.298897 1.522744
 H 1.056180 -1.467911 2.185480
 C 3.819937 0.003061 1.617087
 C 4.339320 1.304779 1.652803
 H 4.192921 1.978256 0.810647
 C 5.045673 1.739993 2.766004
 H 5.440770 2.753486 2.787012
 C 5.244441 0.887364 3.848113
 H 5.797517 1.232953 4.719385
 C 4.740024 -0.407684 3.812838
 H 4.901846 -1.080824 4.652484
 C 4.029730 -0.851816 2.702372
 H 3.645233 -1.868758 2.679886
 C -1.745264 0.742890 -0.751246

C -1.792233 2.184668 -0.517811
 C -1.262132 3.087324 -1.470584
 H -0.822478 2.684851 -2.382734
 C -1.272642 4.457994 -1.279866
 H -0.840455 5.102007 -2.045058
 C -1.823472 5.017931 -0.127260
 H -1.829477 6.095724 0.022879
 C -2.358653 4.161106 0.826691
 H -2.795810 4.565034 1.739659
 C -2.340065 2.783923 0.640375
 H -2.761129 2.153950 1.423168
 C -4.481330 0.438036 0.251667
 C -4.902609 1.324566 -0.744773
 H -4.218711 1.568727 -1.555997
 C -6.165756 1.898642 -0.683295
 H -6.480393 2.592831 -1.460100
 C -7.018326 1.599624 0.374896
 H -8.006514 2.053405 0.425124
 C -6.600989 0.727659 1.374046
 H -7.260622 0.496938 2.208632
 C -5.336261 0.150649 1.315841
 H -5.016949 -0.515955 2.112788
 C -3.103308 -1.858878 -0.828430
 C -2.371506 -3.012476 -0.542434
 H -1.619615 -2.994273 0.240504
 C -2.578465 -4.174779 -1.274624
 H -1.993448 -5.064256 -1.047149
 C -3.513529 -4.194376 -2.303661
 H -3.673816 -5.104591 -2.878881
 C -4.240662 -3.045853 -2.600337
 H -4.971425 -3.053671 -3.406658
 C -4.036639 -1.883090 -1.866529
 H -4.607965 -0.987178 -2.101122
 C -2.369743 -0.850159 1.766507
 C -2.931044 -1.965090 2.397006
 H -3.668690 -2.570821 1.872276
 C -2.545178 -2.312267 3.687233

H -2.984771 -3.184426 4.168445
 C -1.597602 -1.546663 4.362668
 H -1.297907 -1.818337 5.373341
 C -1.037963 -0.432877 3.744451
 H -0.299394 0.170992 4.269282
 C -1.419225 -0.091958 2.450035
 H -0.982393 0.769798 1.946055
 Sn -0.114928 -0.075649 -2.026703
 H -0.164250 -1.713877 -1.310512
 H 0.733107 0.270660 0.606322

Y_{Ph}SnCl

E = -1773.21469715
 P 0.932495 0.046786 -0.023442
 C -0.559368 0.271990 -0.929705
 C -1.322295 1.525459 -0.728636
 C -2.111344 2.019947 -1.776939
 H -2.153641 1.464347 -2.712471
 C -2.854835 3.180735 -1.628583
 H -3.462243 3.536042 -2.459295
 C -2.835298 3.885012 -0.427765
 H -3.423375 4.792894 -0.310763
 C -2.060708 3.407285 0.621036
 H -2.034816 3.940481 1.569655
 C -1.314962 2.244575 0.472844
 H -0.714265 1.901357 1.314139
 C 1.987922 -1.093140 -0.951534
 C 3.070647 -0.632679 -1.702343
 H 3.326394 0.424773 -1.703783
 C 3.827958 -1.532350 -2.444186
 H 4.673531 -1.172617 -3.026643
 C 3.507418 -2.885605 -2.439029
 H 4.102612 -3.586676 -3.020917
 C 2.429994 -3.345646 -1.687762
 H 2.178415 -4.404077 -1.680698
 C 1.670502 -2.455071 -0.940229
 H 0.825247 -2.813655 -0.353311

C 0.726403 -0.700643 1.606921
 C 1.815795 -1.330940 2.220013
 H 2.776685 -1.384105 1.709453
 C 1.663907 -1.908401 3.473064
 H 2.510208 -2.399965 3.948431
 C 0.425722 -1.871722 4.110578
 H 0.306576 -2.334937 5.088237
 C -0.659889 -1.261870 3.493716
 H -1.637611 -1.251544 3.970109
 C -0.516110 -0.673146 2.241983
 H -1.389913 -0.231578 1.761449
 C 1.867039 1.590956 0.183096
 C 1.783685 2.537897 -0.842369
 H 1.140070 2.353278 -1.700781
 C 2.498319 3.724846 -0.750074
 H 2.425270 4.461532 -1.547147
 C 3.288676 3.977036 0.367133
 H 3.841653 4.911351 0.441667
 C 3.361464 3.043384 1.395084
 H 3.969039 3.244999 2.274831
 C 2.651050 1.851410 1.307595
 H 2.698343 1.132851 2.122368
 Cl -3.639775 -0.453969 0.704982
 Sn -2.061451 -1.720314 -0.770284
 H -2.746554 -1.075725 -2.284802
 H -0.300465 0.106445 -1.982044

Y_{Ph}SnHMDS

E = -2186.99803690
 P -2.042763 0.187282 -0.115075
 C -0.395833 -0.239984 -0.534192
 C -0.008252 -1.655300 -0.664537
 C 0.913830 -2.031780 -1.652635
 H 1.333810 -1.262150 -2.297712
 C 1.310724 -3.354588 -1.797238
 H 2.036741 -3.611741 -2.566481
 C 0.796532 -4.344828 -0.965287

H 1.107138 -5.380738 -1.082548
 C -0.103438 -3.985741 0.032368
 H -0.499745 -4.741086 0.708708
 C -0.488284 -2.660636 0.188530
 H -1.165005 -2.398784 0.998575
 C -3.298305 -1.023198 -0.615348
 C -4.531793 -1.110627 0.036575
 H -4.737866 -0.486386 0.903817
 C -5.500434 -1.992946 -0.426726
 H -6.459538 -2.058778 0.082826
 C -5.242140 -2.789184 -1.538092
 H -5.999351 -3.484486 -1.895302
 C -4.018256 -2.698538 -2.193262
 H -3.814509 -3.321558 -3.061376
 C -3.046501 -1.816525 -1.737479
 H -2.086233 -1.749391 -2.244243
 C -2.468202 1.732886 -0.956169
 C -3.715526 1.894844 -1.565009
 H -4.449666 1.093356 -1.539515
 C -4.016382 3.083091 -2.220520
 H -4.987006 3.201708 -2.697611
 C -3.081202 4.110823 -2.272866
 H -3.320023 5.037801 -2.790606
 C -1.840010 3.951952 -1.665131
 H -1.101905 4.750390 -1.703042
 C -1.530453 2.768741 -1.006929
 H -0.563392 2.648266 -0.517178
 C -2.282998 0.452690 1.670661
 C -2.550290 -0.619678 2.527072
 H -2.746695 -1.610067 2.121511
 C -2.579978 -0.426197 3.901578
 H -2.786022 -1.267775 4.559442
 C -2.340874 0.836502 4.433670
 H -2.356853 0.984885 5.511469
 C -2.081817 1.907907 3.587347
 H -1.896150 2.897957 3.997860
 C -2.054422 1.721183 2.210205

H -1.843269 2.566225 1.559703
 N 2.906413 0.298108 -0.049107
 Si 3.982862 -1.037610 0.264046
 Si 3.365822 1.622115 -1.078777
 C 3.163312 -2.334672 1.353583
 H 2.942783 -1.956856 2.359664
 H 2.227823 -2.708514 0.920180
 H 3.847907 -3.187944 1.458893
 C 4.562962 -1.918185 -1.310944
 H 5.551895 -1.572212 -1.634800
 H 4.628462 -2.999862 -1.132334
 H 3.865252 -1.759735 -2.141067
 C 5.522587 -0.462485 1.195955
 H 6.210761 -1.295171 1.396178
 H 6.077768 0.302012 0.636851
 H 5.236545 -0.021625 2.160458
 C 4.868980 1.240812 -2.158176
 H 5.147983 2.155888 -2.698613
 H 5.744644 0.920689 -1.580565
 H 4.656655 0.465902 -2.904111
 C 3.816722 3.155166 -0.078371
 H 4.106940 3.991898 -0.728237
 H 2.976536 3.483791 0.545494
 H 4.663519 2.932844 0.585072
 C 2.002021 2.078735 -2.299412
 H 1.103108 2.445351 -1.793784
 H 2.347175 2.870516 -2.977978
 H 1.721123 1.213026 -2.914454
 H -0.076485 0.383854 -1.372781
 Sn 1.223782 0.527985 1.311952
 H 0.887322 2.228762 0.770803

$Y_{Ph}SnB^1$

E = -1988.87613300
 P -2.058779 0.440284 0.037131
 C -0.367759 0.911134 -0.134987
 C 0.356821 0.930049 1.160743

C 0.579609 -0.242268 1.901447
 H 0.291220 -1.204065 1.482788
 C 1.184195 -0.193468 3.149550
 H 1.339429 -1.116727 3.705584
 C 1.602495 1.021536 3.687343
 H 2.079324 1.056283 4.664860
 C 1.419059 2.185749 2.950073
 H 1.754424 3.142817 3.346842
 C 0.802811 2.140888 1.705073
 H 0.658627 3.060747 1.140409
 C -2.262092 -1.248456 0.645902
 C -2.824698 -1.533272 1.890980
 H -3.206968 -0.734770 2.520533
 C -2.899247 -2.850945 2.330034
 H -3.333035 -3.068730 3.303805
 C -2.422538 -3.881921 1.529071
 H -2.476909 -4.911602 1.877689
 C -1.882193 -3.600756 0.277642
 H -1.512712 -4.403574 -0.354243
 C -1.799068 -2.289702 -0.168474
 H -1.358833 -2.070167 -1.142722
 C -2.901477 0.525282 -1.555611
 C -4.090596 -0.185982 -1.732952
 H -4.472066 -0.817253 -0.931871
 C -4.778955 -0.096557 -2.936341
 H -5.702277 -0.655234 -3.074196
 C -4.281301 0.699103 -3.963502
 H -4.817810 0.764104 -4.908145
 C -3.094144 1.402629 -3.790336
 H -2.695175 2.012341 -4.597837
 C -2.399131 1.318067 -2.589886
 H -1.457259 1.851341 -2.476790
 C -2.963077 1.544143 1.164534
 C -2.498433 1.709804 2.478003
 H -1.651729 1.131231 2.841900
 C -3.120298 2.618003 3.324912
 H -2.751738 2.739522 4.341315

C -4.200377 3.371319 2.875565
 H -4.682305 4.084044 3.541998
 C -4.661166 3.214330 1.573522
 H -5.504187 3.802530 1.216696
 C -4.046082 2.306609 0.718657
 H -4.409238 2.195273 -0.300451
 N 3.543457 0.515591 -0.051196
 C 3.855114 -1.342928 1.152955
 C 4.232270 -0.056755 1.010947
 H 4.242848 -2.088514 1.837376
 H 5.001111 0.480530 1.553674
 B 2.632021 -0.465728 -0.615256
 N 2.907527 -1.653074 0.182880
 C 2.285648 -2.910579 0.153368
 C 1.964915 -3.572198 1.344122
 C 2.004681 -3.542061 -1.062320
 C 1.399873 -4.841395 1.318993
 H 2.160432 -3.077253 2.293080
 C 1.427594 -4.804735 -1.080684
 H 2.268026 -3.040921 -1.989344
 C 1.131803 -5.468219 0.107162
 H 1.164368 -5.340589 2.257419
 H 1.227496 -5.283015 -2.037932
 H 0.696837 -6.465724 0.087088
 C 3.725105 1.864840 -0.399419
 C 3.685560 2.259467 -1.738132
 C 3.967935 2.830040 0.582327
 C 3.857244 3.593499 -2.081743
 H 3.523381 1.506658 -2.502870
 C 4.154435 4.161220 0.230583
 H 3.984879 2.532641 1.627636
 C 4.092754 4.553209 -1.102301
 H 3.817401 3.881921 -3.130596
 H 4.339753 4.899150 1.009516
 H 4.234103 5.596842 -1.376282
 H -0.394047 1.916530 -0.572539
 Sn 0.754491 -0.300322 -2.010981

H 1.059051 1.334148 -2.668730

V^{Sn}

E = -1022.69769888

C 2.192492 2.260159 -0.829242

C -0.057383 1.345891 -0.635071

C -0.550619 2.650525 -0.824859

C 0.307214 3.723751 -1.013289

C 1.687363 3.541617 -1.021911

H 3.271003 2.096455 -0.836602

H -1.626412 2.804130 -0.856682

H -0.111625 4.715798 -1.176157

H 2.359363 4.381344 -1.184235

N -0.853718 0.226843 -0.519542

C -2.105994 0.245078 0.058113

C -2.485248 1.166448 1.057941

C -3.050280 -0.742932 -0.283538

C -3.730064 1.095590 1.667818

H -1.787176 1.945110 1.358822

C -4.288097 -0.811321 0.337225

H -2.795309 -1.465039 -1.058626

C -4.646538 0.108635 1.318734

H -3.983503 1.824765 2.436669

H -4.987312 -1.591683 0.040040

H -5.621068 0.058792 1.799229

C 1.351221 1.164536 -0.637161

P 2.119466 -0.517086 1.317457

C 3.266586 0.643900 2.106908

H 2.903519 1.661446 1.922646

H 3.333495 0.465416 3.185999

H 4.259519 0.539641 1.655819

C 0.575211 -0.382312 2.234493

H 0.763168 -0.541094 3.301846

H 0.151238 0.614955 2.074480

H -0.143890 -1.119884 1.861007

C 2.778825 -2.176160 1.582101

H 2.935276 -2.367969 2.648786

H 2.061628 -2.897981 1.174350
H 3.730428 -2.280045 1.049359
Sn 0.148404 -1.658605 -1.201566
H 0.466564 -0.986559 -2.815686
C 1.881150 -0.222687 -0.403280
H 2.829897 -0.423258 -0.917698

Vl^{Sn}

E = -1571.89629800
C -0.959135 3.458242 0.328653
C -0.623708 2.114008 0.206539
C -1.549107 1.131010 -0.186269
C -2.873286 1.554554 -0.376955
C -3.220678 2.889546 -0.239960
C -2.266694 3.853188 0.089362
H -0.190391 4.162998 0.636645
H -3.615466 0.812294 -0.663768
H -4.252818 3.190526 -0.412651
H -2.546281 4.900449 0.176264
N -1.133173 -0.165729 -0.449019
S 0.924216 1.610069 0.890858
O 1.717417 2.808365 1.166825
O 0.600940 0.711289 2.020808
C -1.783466 -1.231056 0.152014
C -2.318550 -1.109465 1.449682
C -1.867831 -2.488611 -0.470733
C -2.914139 -2.192644 2.078523
H -2.222220 -0.156314 1.965567
C -2.452246 -3.570467 0.175529
H -1.477095 -2.608142 -1.480344
C -2.986434 -3.435082 1.452630
H -3.314720 -2.066622 3.083596
H -2.503583 -4.529935 -0.337503
H -3.450976 -4.282071 1.952672
C 1.825026 0.588347 -0.253358
H 2.581619 1.213628 -0.741383
P 2.593129 -0.722698 0.660794

C 3.509152 -0.177864 2.119588
H 4.205427 0.613957 1.823109
H 2.788033 0.231230 2.832845
H 4.060701 -1.015151 2.561775
C 3.797986 -1.471133 -0.458229
H 4.288292 -2.318046 0.033872
H 3.274185 -1.819955 -1.355624
H 4.552363 -0.730214 -0.743488
C 1.427520 -2.007083 1.132231
H 1.954695 -2.794015 1.682748
H 0.646498 -1.554219 1.750005
H 0.969218 -2.429298 0.230344
H 0.129272 1.267743 -2.545121
Sn 0.427155 -0.388791 -2.003372

VII^{Sn}

E = -2333.95557594
C -0.452990 1.950305 -0.467809
C 0.346646 1.883994 0.675361
C 0.693785 3.068931 1.323702
C 0.297736 4.303378 0.828574
C -0.468833 4.367089 -0.327942
C -0.846045 3.194780 -0.966950
H 1.303092 2.983976 2.220164
H 0.589970 5.214011 1.348100
H -0.781554 5.326265 -0.735186
H -1.465591 3.221656 -1.859368
S -0.982854 0.611285 -1.574879
S 0.935150 0.356691 1.490660
O -2.188390 1.162609 -2.229220
O 0.146476 0.263990 -2.434068
O -0.306373 -0.167530 2.115219
O 1.982931 0.878777 2.390770
C 1.482879 -0.698919 0.339690
P 2.929735 -0.281194 -0.455098
P -2.923396 -0.504639 0.369235
C 3.155846 -1.311507 -1.914786

H 4.079775 -1.027067 -2.430194
 H 3.197089 -2.366570 -1.628280
 H 2.281686 -1.157664 -2.556547
 C 3.015435 1.425916 -1.071583
 H 2.961537 2.116493 -0.223478
 H 3.954316 1.586744 -1.613527
 H 2.159309 1.586938 -1.736322
 C 4.407853 -0.460289 0.584329
 H 4.516110 -1.514026 0.862422
 H 5.317352 -0.107914 0.084055
 H 4.215141 0.119182 1.494497
 C -3.006713 -1.727595 1.683531
 H -3.910397 -1.559957 2.280415
 H -3.015533 -2.735591 1.257631
 H -2.104492 -1.604269 2.293434
 C -2.983547 1.116736 1.146160
 H -3.014846 1.888418 0.371453
 H -3.896856 1.156286 1.750472
 H -2.101141 1.230949 1.782471
 C -4.433021 -0.632251 -0.618761
 H -5.323350 -0.414172 -0.018706
 H -4.334044 0.087214 -1.439751
 H -4.512421 -1.642415 -1.035357
 C -1.522807 -0.815252 -0.680384
 H -1.906173 -1.407572 -1.526254
 Sn 0.133881 -2.462441 0.068343
 H 0.570649 -2.653665 -1.664276

VIII^{Sn}

E = -1541.93264299
 C 0.455093 3.593377 -0.564115
 C 0.422971 2.214766 -0.409742
 C 1.412770 1.473472 0.255827
 C 2.492691 2.217876 0.759198
 C 2.543488 3.599140 0.621927
 C 1.528926 4.295607 -0.033069
 H -0.349891 4.084715 -1.105785

H 3.298724 1.702846 1.279944
 H 3.394737 4.144211 1.026855
 H 1.582415 5.376617 -0.140404
 B 1.243056 -0.040525 0.557524
 S -0.877041 1.308388 -1.174567
 O -1.765497 2.239602 -1.876076
 O -0.245521 0.220376 -1.958670
 C 2.126942 -1.136238 -0.076828
 C 2.874044 -0.873791 -1.239864
 C 2.170602 -2.439745 0.447634
 C 3.627008 -1.866790 -1.850732
 H 2.836898 0.124705 -1.672926
 C 2.938813 -3.432883 -0.145666
 H 1.583894 -2.665139 1.338733
 C 3.664746 -3.145607 -1.298924
 H 4.189657 -1.648687 -2.756802
 H 2.968471 -4.433601 0.281920
 H 4.260631 -3.924060 -1.773311
 C -1.780228 0.445412 0.085350
 H -2.545609 1.118674 0.486800
 P -2.542178 -0.961819 -0.680332
 C -3.263673 -0.595695 -2.297597
 H -3.914433 0.279955 -2.204972
 H -2.447297 -0.346425 -2.982341
 H -3.829764 -1.456627 -2.670343
 C -3.891035 -1.479128 0.399868
 H -4.377804 -2.370048 -0.011423
 H -3.470042 -1.700248 1.387723
 H -4.623247 -0.669564 0.488158
 C -1.421734 -2.356410 -0.870869
 H -1.954017 -3.187429 -1.346675
 H -0.574967 -2.032158 -1.483056
 H -1.063133 -2.656795 0.120430
 H -0.515474 1.278896 2.635845
 Sn -0.556402 -0.401683 2.065913

IX^{Sn}

E = -992.724708637

C 1.616594 2.565400 -0.130360

C -0.501635 1.375827 -0.190252

C -1.146494 2.614613 -0.036442

C -0.440410 3.798902 0.116842

C 0.950470 3.764485 0.092413

H 2.702281 2.584256 -0.204249

H -2.235004 2.633781 -0.010548

H -0.964413 4.741861 0.261371

H 1.523554 4.681898 0.218976

B -1.275758 0.023223 -0.119579

C -2.832524 -0.059361 -0.143440

C -3.641771 0.569749 0.818307

C -3.485646 -0.812505 -1.133631

C -5.027549 0.454020 0.791947

H -3.175364 1.147840 1.616011

C -4.871096 -0.902519 -1.184127

H -2.887816 -1.339262 -1.877310

C -5.649799 -0.273441 -0.216962

H -5.625864 0.941169 1.560769

H -5.347419 -1.481464 -1.974149

H -6.734907 -0.356707 -0.245119

C 0.917269 1.363929 -0.301464

C 1.579632 0.073104 -0.620631

P 3.243294 -0.225489 -0.202267

C 4.554384 0.704009 -1.070007

H 4.504365 1.771370 -0.837554

H 5.541952 0.322870 -0.785100

H 4.417740 0.576347 -2.149681

C 3.500989 0.053393 1.560642

H 4.535703 -0.163054 1.844832

H 3.258789 1.094818 1.798465

H 2.808742 -0.603993 2.100499

C 3.640114 -1.947323 -0.570498

H 4.700421 -2.143017 -0.378190

H 3.010974 -2.592931 0.052786

H 3.414056 -2.149301 -1.623439
 Sn 0.156441 -1.671956 0.406859
 H 1.382708 -0.287367 -1.637703
 H 0.101684 -2.568770 -1.135706

3.7.3.3 Reaktionspfad C

VIII^{Sn}

E = -1541.95645177
 C 0.268081 3.226067 0.822221
 C -0.153189 1.912333 0.705100
 C -1.348336 1.498416 0.129171
 C -2.192653 2.499576 -0.346163
 C -1.815227 3.835160 -0.236587
 C -0.596680 4.201272 0.339533
 H 1.222063 3.479494 1.279606
 H -3.149632 2.237405 -0.795361
 H -2.482745 4.613468 -0.602872
 H -0.326977 5.252473 0.417541
 B -1.439569 -0.108536 0.155172
 S 0.775817 0.494012 1.196667
 O 1.375001 0.575365 2.535170
 O -0.477785 -0.489232 1.234746
 C 1.791835 0.006907 -0.014424
 C -2.832953 -0.844378 0.275456
 C -3.776472 -0.780729 -0.757179
 C -3.180397 -1.552208 1.430690
 C -5.021085 -1.388892 -0.640509
 H -3.527751 -0.252350 -1.678956
 C -4.422568 -2.167125 1.554305
 H -2.459044 -1.616299 2.244261
 C -5.348131 -2.085698 0.519396
 H -5.737784 -1.325317 -1.458111
 H -4.670784 -2.712681 2.463800
 H -6.320746 -2.565950 0.613837
 P 3.102465 -0.929048 0.580672
 C 4.311296 0.042001 1.514876

H 5.132285 -0.588523 1.874448
H 4.700299 0.832790 0.865287
H 3.782818 0.496740 2.358453
C 3.997891 -1.646387 -0.813348
H 4.344632 -0.844059 -1.473074
H 4.857402 -2.217315 -0.445863
H 3.330667 -2.303948 -1.380630
C 2.641717 -2.312081 1.660296
H 2.099826 -1.893609 2.515577
H 1.968739 -2.977479 1.109106
H 3.519825 -2.867502 2.008683
Sn 0.828267 -0.327071 -2.047661
H 0.348497 1.368007 -2.193011
H -0.913663 -0.542064 -0.988618

IX^{Sn}

E = -992.730037309
C 1.641184 2.468184 0.179202
C -0.491482 1.317282 -0.146902
C -1.112391 2.584548 -0.066046
C -0.396804 3.753049 0.092026
C 0.997961 3.685872 0.208170
H 2.720961 2.454109 0.318898
H -2.193248 2.638271 -0.184940
H -0.905023 4.714977 0.114513
H 1.578885 4.597987 0.339522
B -1.353185 0.096675 -0.534182
C -2.899807 -0.032690 -0.351380
C -3.576266 0.543491 0.736652
C -3.673321 -0.746160 -1.279925
C -4.951797 0.422034 0.885865
H -3.002528 1.085724 1.487905
C -5.051389 -0.865439 -1.144553
H -3.177112 -1.214517 -2.129954
C -5.695540 -0.280173 -0.058839
H -5.448571 0.872923 1.743662
H -5.626396 -1.419330 -1.885135

H -6.774290 -0.375572 0.054433
 C 0.937667 1.244313 0.019821
 C 1.568679 -0.049241 0.046389
 P 3.246387 -0.237143 -0.245195
 C 3.828122 0.618062 -1.742072
 H 3.553778 1.676023 -1.687769
 H 4.913034 0.521699 -1.861014
 H 3.318127 0.175821 -2.604216
 C 4.385000 0.295148 1.081821
 H 5.428310 0.099312 0.807584
 H 4.258579 1.361073 1.292016
 H 4.131832 -0.264050 1.989027
 C 3.700272 -1.969142 -0.498974
 H 4.778715 -2.039817 -0.678060
 H 3.439515 -2.557562 0.386591
 H 3.146721 -2.370421 -1.352454
 Sn 0.172262 -1.624176 0.485059
 H -0.853505 -0.663026 -1.375029
 H 0.908686 -2.945895 -0.447218

3.8 Energien der Phenolpräkoordination

3.8.1 Bei Silylenen

Tabelle 3.56. Energien der Phenylpräkoordination am Silylenzentrum.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
V ^{Si}	-1615.89086215	0.435071	0.352456	0.002612	6.874557	-1.051
VI ^{Si}	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–
VII ^{Si}	-2927.14122292	0.488028	0.388889	0.000663	1.743568	-6.182
VIII ^{Si}	-2135.11326429	0.446833	0.357688	0.003330	8.761845	0.836
IX ^{Si}	-1585.88590786	0.433235	0.348114	0.004117	10.833496	2.908

Tabelle 3.57. Energien der Phenylpräkoordination entlang der C^{Ylid}–Si-Einheit.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
V ^{Si}	-1615.89171800	0.435087	0.352579	0.001881	4.950459	-2.975
VI ^{Si}	-2165.07934981	0.447891	0.358799	0.003863	10.165989	2.240
VII ^{Si}	-2927.12121346	0.483198	0.388404	-0.005031	-13.240239	-21.166
VIII ^{Si}	-2135.11433287	0.446627	0.359477	0.004048	10.653308	2.727
IX ^{Si}	-1585.88951218	0.433138	0.348437	0.000843	2.218390	-5.708

Tabelle 3.58. Energien der Phenylpräkoordination entlang der Si–B-Einheit.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
VIII ^{Si}	-2135.09391264	0.447376	0.357676	0.022678	59.540955	51.615
IX ^{Si}	-1585.88789474	0.433518	0.349793	0.00381838	10.025157	2.099

3.8.2 Bei Germynen

Tabelle 3.59. Energien der Phenylpräkoordination am Germynenzentrum.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
V ^{Ge}	-3404.13958251	0.434339	0.350844	0.003646	9.595415	1.670
VI ^{Ge}	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–
VII ^{Ge}	-4715.39303935	0.488131	0.388992	0.005968	15.704323	7.778
VIII ^{Ge}	-3923.37778191	0.446523	0.355616	0.000667	1.755514	-6.170
IX ^{Ge}	-1585.88683398	0.433301	0.349495	0.004571	12.027783	4.102

Tabelle 3.60. Energien der Phenylpräkoordination entlang der C^{Ylid}–Ge-Einheit.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
V ^{Ge}	-3404.14113528	0.434142	0.350194	0.001449	3.812042	-4.114
VI ^{Ge}	-3953.32866297	0.447138	0.358729	0.004681	12.318111	4.392
VII ^{Ge}	-4715.38070458	0.482124	0.384534	-0.003047	-8.019563	-15.945
VIII ^{Ge}	-3923.37873296	0.446326	0.357554	0.001652	4.346752	-3.579
IX ^{Ge}	-3374.15084779	0.432512	0.346331	-0.000187	-0.492124	-8.418

Tabelle 3.61. Energien der Phenylpräkoordination entlang der Ge–B-Einheit.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
VIII ^{Ge}	-3923.35260516	0.446960	0.355842	0.026072	68.453294	60.527
IX ^{Ge}	-3374.14691193	0.432663	0.347076	0.004483	11.797474	3.872

3.8.3 Bei Stannylenen

Tabelle 3.62. Energien der Phenylpräkoordination am Stannylenzentrum.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
V ^{Sn}	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–
VI ^{Sn}	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–
VII ^{Sn}	-2640.77340287	0.487827	0.387481	0.005521	14.527889	6.602
VIII ^{Sn}	-1848.75866193	0.446071	0.354871	0.001078	2.836380	-5.090
IX ^{Sn}	-1299.51972656	0.431924	0.345651	0.003030	7.956565	0.031

Tabelle 3.63. Energien der Phenylpräkoordination entlang der C^{Ylid}–Sn-Einheit.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
V ^{Sn}	-1329.50756795	0.433679	0.348474	0.000088	0.232567	-7.693
VI ^{Sn}	-1878.70646852	0.447574	0.355339	0.000133	0.349848	-7.576
VII ^{Sn}	-2640.78975236	0.487430	0.387391	-0.010881	-28.633992	-36.560
VIII ^{Sn}	-1848.75893407	0.445490	0.354639	0.000575	1.512761	-6.413
IX ^{Sn}	-1299.52451581	0.431533	0.345634	-0.001776	-4.662245	-12.588

Tabelle 3.64. Energien der Phenylpräkoordination entlang der Sn–B-Einheit.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
VIII ^{Sn}	-1848.72208617	0.446464	0.354454	0.037153	97.771205	89.845
IX ^{Sn}	n.b.	n.b.	n.b.	–	–	–

3.9 Koordinaten der Phenolpräkoordination

3.9.1 Bei Silylenen

3.9.1.1 Reaktionspfad A

V^{Si}

E = -1615.89086215

C -0.572452 2.281335 1.669635

C 1.318469 1.118796 0.701855

C 2.082198 1.418164 1.831602
 C 1.512121 2.135772 2.874103
 C 0.186195 2.562937 2.796519
 H -1.599189 2.643392 1.621351
 H 3.119126 1.097115 1.888309
 H 2.109230 2.370419 3.753095
 H -0.253447 3.127106 3.616844
 N 1.746887 0.425626 -0.426373
 C 3.019594 -0.189293 -0.476052
 C 3.897149 0.100214 -1.521137
 C 3.391341 -1.135558 0.485110
 C 5.123900 -0.548780 -1.607473
 H 3.603295 0.840060 -2.262837
 C 4.623124 -1.770295 0.401123
 H 2.696001 -1.374362 1.288937
 C 5.494563 -1.481410 -0.645767
 H 5.797262 -0.316014 -2.430426
 H 4.899187 -2.506631 1.153789
 H 6.457325 -1.984141 -0.711609
 C -0.028403 1.556945 0.598089
 C -0.625916 1.175471 -0.662269
 P -2.268155 1.472409 -1.058793
 C -3.474610 0.823346 0.127238
 H -3.242700 1.193233 1.130268
 H -4.489316 1.128245 -0.152570
 H -3.405264 -0.268881 0.139305
 C -2.669575 3.236886 -1.235640
 H -3.730283 3.387412 -1.466587
 H -2.420262 3.755575 -0.303882
 H -2.049413 3.654097 -2.035823
 C -2.680404 0.707245 -2.641586
 H -3.707858 0.961176 -2.922762
 H -1.985441 1.057048 -3.412097
 H -2.582080 -0.378800 -2.541278
 Si 0.544661 0.316938 -1.769428
 H 0.408806 -1.371599 0.352049
 O -0.064750 -1.666983 1.141689

C -1.294959 -2.092450 0.818951
 C -1.665170 -2.414174 -0.491520
 C -2.230724 -2.231941 1.847410
 C -2.955077 -2.857731 -0.762173
 H -0.931338 -2.320986 -1.291348
 C -3.514632 -2.679502 1.565033
 H -1.925480 -1.977000 2.859481
 C -3.890982 -2.990270 0.259869
 H -3.225558 -3.112505 -1.786080
 H -4.232700 -2.783365 2.376802
 H -4.897556 -3.341620 0.044540

VI^{Si}

Nicht gefunden.

VII^{Si}

E = -2927.14122292
 C -2.182997 -1.384367 -0.666676
 C -2.933585 -0.684991 0.285325
 C -4.269540 -1.011437 0.497026
 C -4.869169 -2.030214 -0.233696
 C -4.128167 -2.726021 -1.179393
 C -2.793738 -2.400681 -1.395193
 H -4.825805 -0.446779 1.240829
 H -5.914008 -2.278247 -0.058526
 H -4.587290 -3.524910 -1.758509
 H -2.194916 -2.929457 -2.133068
 S -0.461003 -1.038061 -1.146372
 S -2.277360 0.644660 1.330578
 O -0.033239 -2.260974 -1.868133
 O -0.556109 0.174379 -1.975331
 O -1.376388 -0.094889 2.337098
 O -3.471496 1.311006 1.852929
 C 0.476664 -0.876893 0.253149
 C -1.095195 1.525809 0.615920
 P -1.425522 2.760877 -0.512663

P 1.525282 -2.219103 0.518462
 C 0.022672 3.138237 -1.504436
 H -0.183189 3.993826 -2.156259
 H 0.864763 3.352795 -0.838311
 H 0.254261 2.239472 -2.084508
 C -2.803809 2.325399 -1.598796
 H -3.669141 2.086182 -0.968521
 H -3.055673 3.154925 -2.268528
 H -2.503383 1.440289 -2.167910
 C -1.942754 4.288076 0.318000
 H -1.116839 4.648444 0.940324
 H -2.242039 5.066078 -0.393851
 H -2.782472 4.028790 0.973239
 C 2.316584 -2.032739 2.132395
 H 2.993769 -2.878293 2.296462
 H 2.877723 -1.096159 2.161785
 H 1.551012 -2.010384 2.915029
 C 0.711515 -3.838557 0.611152
 H 0.242443 -4.045490 -0.353603
 H 1.441177 -4.619005 0.855742
 H -0.057556 -3.792002 1.389828
 C 2.858687 -2.375683 -0.691500
 H 3.503864 -3.234130 -0.472567
 H 2.386965 -2.489870 -1.672305
 H 3.444707 -1.449757 -0.674765
 Si 0.310620 0.534881 1.483991
 H 2.149416 2.011002 1.239689
 O 2.575903 2.333534 0.417248
 C 3.624646 1.546240 0.109318
 C 4.347780 0.861851 1.090175
 C 4.014243 1.442875 -1.227665
 C 5.450737 0.092651 0.733839
 H 4.050253 0.963358 2.132991
 C 5.122540 0.680000 -1.570777
 H 3.432898 1.967191 -1.982331
 C 5.848623 -0.000831 -0.595714
 H 6.009786 -0.428960 1.509122

H 5.418440 0.610752 -2.616077
H 6.715772 -0.596958 -0.870762

VIII^{Si}

E = -2135.11326429
C -1.533397 3.514281 0.968681
C -1.366194 2.165638 0.712017
C -2.284319 1.332468 0.061909
C -3.459901 1.948784 -0.374248
C -3.671037 3.304597 -0.132541
C -2.726636 4.086662 0.536981
H -0.775105 4.090504 1.496066
H -4.225703 1.365090 -0.883198
H -4.600966 3.766240 -0.461433
H -2.926239 5.139323 0.726368
B -1.685503 -0.150873 -0.042066
S 0.070804 1.181047 0.986928
O 0.939094 1.636575 2.076089
O -0.702938 -0.148589 1.209193
C 0.816319 0.931511 -0.522137
Si -0.260403 -0.087649 -1.632896
C -2.593989 -1.436857 -0.050471
C -2.468706 -2.443336 0.914946
C -3.543486 -1.635164 -1.063578
C -3.264012 -3.584357 0.882359
H -1.732604 -2.322758 1.708637
C -4.346158 -2.769618 -1.100270
H -3.645400 -0.889647 -1.853953
C -4.210573 -3.752049 -0.123532
H -3.145962 -4.348991 1.649520
H -5.077274 -2.892391 -1.898572
H -4.834948 -4.643719 -0.149547
P 2.332562 1.689195 -0.777829
C 2.286276 3.478378 -0.488139
H 3.256495 3.945694 -0.689766
H 1.512316 3.924925 -1.121247

H 2.020476 3.631695 0.564539
 C 2.827720 1.407285 -2.486380
 H 2.065692 1.812964 -3.159038
 H 3.800818 1.871807 -2.679198
 H 2.885181 0.325019 -2.646717
 C 3.671752 1.071434 0.264282
 H 3.323566 1.111944 1.302031
 H 3.867514 0.027457 -0.000521
 H 4.582124 1.669280 0.141543
 C 4.165368 -2.744091 -0.313687
 C 4.326422 -2.470658 1.040445
 C 3.222140 -2.080154 1.795453
 C 1.964357 -1.975271 1.216905
 C 1.810134 -2.278506 -0.134485
 C 2.910535 -2.640923 -0.908014
 H 5.019246 -3.046379 -0.917208
 H 5.306088 -2.559045 1.504654
 H 3.338187 -1.855961 2.854136
 H 1.091553 -1.673010 1.787514
 H 2.778154 -2.861044 -1.967177
 O 0.558740 -2.203688 -0.666094
 H 0.513781 -2.696943 -1.492460

IX^{Si}

E = -1585.88590786
 C 1.357973 1.014363 2.211550
 C -0.854327 0.812678 1.238410
 C -1.365529 0.556063 2.509432
 C -0.537122 0.503831 3.631388
 C 0.823543 0.731383 3.468228
 H 2.428993 1.196720 2.139353
 H -2.436686 0.392617 2.626162
 H -0.947433 0.296002 4.617554
 H 1.486194 0.699262 4.332570
 B -1.635275 0.824965 -0.104568
 C -3.120580 0.412049 -0.292569
 C -3.694668 -0.683384 0.376726

C -3.940932 1.127053 -1.180991
 C -5.023366 -1.036754 0.179138
 H -3.071904 -1.281570 1.040423
 C -5.281374 0.803059 -1.354065
 H -3.510844 1.954889 -1.745034
 C -5.824494 -0.284299 -0.676300
 H -5.441239 -1.898879 0.696910
 H -5.900596 1.385556 -2.034480
 H -6.869236 -0.553620 -0.823782
 C 0.538505 1.061789 1.075935
 C 0.966184 1.323473 -0.308549
 P 2.633702 1.504320 -0.706757
 C 3.444385 2.959613 0.033134
 H 3.347468 2.928763 1.122634
 H 4.505313 3.006230 -0.238020
 H 2.929328 3.855285 -0.330158
 C 3.673678 0.085915 -0.257529
 H 4.726554 0.270819 -0.499489
 H 3.572055 -0.136961 0.808473
 H 3.307263 -0.783366 -0.813611
 C 2.876755 1.706440 -2.484498
 H 3.944496 1.841681 -2.690997
 H 2.496695 0.819468 -3.000390
 H 2.305698 2.570938 -2.836627
 Si -0.298027 1.350428 -1.618457
 H -0.949422 -1.510343 -1.725508
 O -0.761151 -1.531319 -0.780631
 C 0.428886 -2.128664 -0.542206
 C 1.211317 -2.653520 -1.570698
 C 0.856132 -2.229280 0.782534
 C 2.396422 -3.317467 -1.270123
 H 0.877589 -2.556525 -2.603740
 C 2.046063 -2.885955 1.066380
 H 0.245578 -1.795448 1.571415
 C 2.819669 -3.440864 0.049114
 H 2.990019 -3.741154 -2.078325
 H 2.369186 -2.967387 2.102716

H 3.744649 -3.963170 0.282955

3.9.1.2 Reaktionspfad B

V^{Si}

E = -1615.89171800

C 1.866734 0.806051 2.077267

C -0.042054 -0.455986 1.271453

C -0.806006 0.025669 2.337066

C -0.239401 0.906612 3.248319

C 1.091916 1.304203 3.116977

H 2.910225 1.112248 2.003142

H -1.842672 -0.282377 2.443159

H -0.840692 1.284049 4.073126

H 1.529201 1.995351 3.834808

N -0.468429 -1.323894 0.276363

C -1.826658 -1.704371 0.156458

C -2.167424 -3.056090 0.095730

C -2.833726 -0.740828 0.040929

C -3.492146 -3.439401 -0.084280

H -1.379980 -3.801069 0.191137

C -4.155461 -1.130224 -0.124731

H -2.569630 0.313482 0.066419

C -4.492047 -2.479749 -0.190203

H -3.742495 -4.497596 -0.134203

H -4.926097 -0.367106 -0.218552

H -5.528919 -2.780821 -0.326255

C 1.324458 -0.084824 1.138310

P 3.539639 -0.395254 -0.540062

C 3.847625 1.353314 -0.928822

H 3.684963 1.962362 -0.033496

H 4.869977 1.506995 -1.292114

H 3.125174 1.666992 -1.691035

C 4.844833 -0.868050 0.632470

H 5.839240 -0.614368 0.247999

H 4.680228 -0.356651 1.586408

H 4.776195 -1.947022 0.806366

C 3.889119 -1.302519 -2.061775
 H 4.917247 -1.108777 -2.385091
 H 3.748562 -2.374231 -1.886881
 H 3.186970 -0.983502 -2.839066
 C 1.942743 -0.715384 -0.013519
 H 0.896643 0.984544 -0.975792
 Si 0.778157 -1.813717 -0.920203
 O 0.438640 1.415299 -1.714380
 C -0.701348 2.001554 -1.279014
 C -1.773043 2.094981 -2.167264
 C -0.828732 2.510862 0.014504
 C -2.966602 2.673509 -1.755573
 H -1.654576 1.686349 -3.167902
 C -2.031058 3.078364 0.419051
 H 0.006377 2.438412 0.709448
 C -3.107536 3.162099 -0.459028
 H -3.800452 2.731145 -2.453158
 H -2.122185 3.452959 1.437054
 H -4.047320 3.605596 -0.137206

VI^{Si}

E = -2165.07934981
 C 0.274147 1.245196 2.683320
 C 0.278976 0.227444 1.734373
 C -0.885483 -0.173976 1.059067
 C -2.069091 0.513417 1.379047
 C -2.077285 1.519192 2.329675
 C -0.908871 1.895150 2.991344
 H 1.216480 1.501114 3.163418
 H -2.986308 0.252651 0.858926
 H -3.012448 2.032607 2.544349
 H -0.923660 2.687058 3.736605
 N -0.873080 -1.169100 0.074694
 S 1.783165 -0.649056 1.460566
 O 2.906931 0.195878 1.925634
 O 1.655274 -1.975505 2.062808
 C -2.123836 -1.815731 -0.170044

C -2.670406 -2.649756 0.806783
 C -2.793446 -1.636430 -1.378854
 C -3.877240 -3.294145 0.573277
 H -2.130703 -2.785421 1.741924
 C -3.996874 -2.294660 -1.612761
 H -2.362458 -0.972959 -2.125729
 C -4.542966 -3.121162 -0.638137
 H -4.296840 -3.945102 1.337982
 H -4.512389 -2.152179 -2.560609
 H -5.486199 -3.632108 -0.820652
 C 1.818906 -0.758222 -0.257203
 Si 0.413668 -1.625313 -1.082057
 O 0.374116 1.272521 -1.841251
 C -0.508896 2.208687 -1.415895
 C -0.244854 3.020034 -0.313289
 C -1.703849 2.358097 -2.118023
 C -1.180840 3.963719 0.089286
 H 0.688371 2.895646 0.233983
 C -2.631635 3.306801 -1.708028
 H -1.887429 1.718154 -2.978059
 C -2.378869 4.112733 -0.601666
 H -0.969856 4.582963 0.959240
 H -3.565106 3.413887 -2.257845
 H -3.109687 4.852177 -0.281719
 H 0.898112 0.925320 -1.095115
 P 3.369738 -0.497740 -0.961221
 C 3.266135 -0.887804 -2.720409
 H 4.228171 -0.690351 -3.204957
 H 2.989031 -1.938760 -2.854238
 H 2.487621 -0.258801 -3.168416
 C 4.675507 -1.501647 -0.218859
 H 5.652552 -1.292298 -0.668116
 H 4.688940 -1.259827 0.850065
 H 4.418062 -2.558893 -0.339735
 C 3.904821 1.225376 -0.847294
 H 3.188338 1.844089 -1.399587
 H 3.885613 1.495735 0.213490

H 4.910427 1.357341 -1.261794

VII^{Si}

E = -2927.12121346

C 2.796486 -0.282000 0.142728

C 2.378161 0.600033 -0.854888

C 3.322577 1.169586 -1.708321

C 4.672815 0.878134 -1.564669

C 5.090275 0.010730 -0.563088

C 4.153663 -0.561814 0.287226

H 2.973083 1.850864 -2.480065

H 5.396049 1.331068 -2.239826

H 6.146202 -0.221999 -0.439920

H 4.448429 -1.248818 1.076642

S 1.708484 -1.050468 1.378193

S 0.665033 1.013780 -1.303077

O 2.512458 -2.187014 1.858821

O 1.407335 0.067016 2.315143

O 0.172362 -0.127119 -2.083264

O 0.809557 2.306773 -2.007791

C 0.254097 -1.482534 0.697568

P -0.064212 2.856074 0.789701

P 0.199218 -2.893394 -0.259451

C -0.762608 2.887240 2.450897

H -0.622127 3.885308 2.881147

H -1.826366 2.632286 2.421186

H -0.241108 2.131706 3.050401

C 1.691807 3.223612 0.997978

H 2.158184 3.305495 0.011520

H 1.819965 4.158373 1.554659

H 2.129768 2.383482 1.551072

C -0.802983 4.216295 -0.141915

H -1.887455 4.065872 -0.179077

H -0.576641 5.183957 0.319828

H -0.397082 4.163853 -1.157011

C -1.304632 -2.946476 -1.244601

H -1.307207 -3.854648 -1.856864

H -2.179492 -2.940170 -0.586340
H -1.325635 -2.044991 -1.864683
C 1.597542 -3.014545 -1.402210
H 2.520556 -3.024950 -0.811351
H 1.532477 -3.929977 -2.000769
H 1.576867 -2.128361 -2.044658
C 0.270913 -4.412531 0.728605
H 0.333652 -5.311816 0.104964
H 1.157452 -4.323125 1.366976
H -0.616175 -4.460770 1.369034
C -0.335281 1.286676 0.078220
H -1.562757 0.762485 -0.457571
Si -0.984612 -0.162574 1.284589
O -2.209210 -0.228641 -0.349695
C -3.558851 -0.191665 -0.311802
C -4.258826 0.626763 -1.200512
C -4.258410 -0.986787 0.597978
C -5.648076 0.640915 -1.177752
H -3.700230 1.231294 -1.912424
C -5.647614 -0.967498 0.606608
H -3.698721 -1.601172 1.301128
C -6.350641 -0.154999 -0.277872
H -6.186942 1.278949 -1.876273
H -6.185757 -1.591700 1.318003
H -7.438292 -0.142563 -0.266376

VIII^{Si}

E = -2135.11433287
C 3.502534 2.362533 0.630421
C 2.278702 1.729767 0.508007
C 1.143707 2.250636 -0.121111
C 1.288341 3.519519 -0.686680
C 2.501519 4.195505 -0.581765
C 3.600338 3.634540 0.074746
H 4.336354 1.891372 1.147144
H 0.444851 3.989719 -1.190867

H 2.595793 5.192173 -1.010368
 H 4.530352 4.193352 0.154926
 B -0.050522 1.197131 -0.051606
 S 1.876780 0.078073 0.962895
 O 2.661064 -0.479479 2.069332
 O 0.365196 0.386385 1.280860
 C 1.780073 -0.852074 -0.446095
 Si 0.325373 -0.327533 -1.513447
 C -1.568695 1.613594 0.007053
 C -2.360898 1.402070 1.141369
 C -2.200446 2.141279 -1.128634
 C -3.724535 1.678182 1.137650
 H -1.900276 0.993123 2.040733
 C -3.557165 2.441815 -1.133424
 H -1.618883 2.293118 -2.039672
 C -4.328952 2.201992 0.000227
 H -4.319822 1.481679 2.028436
 H -4.020354 2.849618 -2.031135
 H -5.396268 2.416702 -0.005835
 P 2.671072 -2.314699 -0.466625
 C 4.443274 -2.109271 -0.158157
 H 4.962929 -3.073803 -0.162226
 H 4.863451 -1.453916 -0.928135
 H 4.554690 -1.632159 0.821674
 C 2.479833 -3.074910 -2.087894
 H 2.870019 -2.391963 -2.849215
 H 3.014300 -4.030380 -2.122305
 H 1.412563 -3.226729 -2.280615
 C 2.095359 -3.514897 0.762223
 H 2.215605 -3.047264 1.746277
 H 1.029255 -3.692735 0.582030
 H 2.653396 -4.457070 0.720232
 C -3.113700 -1.311624 -1.095769
 C -2.374897 -1.642678 0.032626
 C -3.005840 -2.034088 1.208514
 C -4.394063 -2.072010 1.257716
 C -5.146357 -1.734590 0.137916

C -4.500550 -1.359140 -1.035760
H -2.592748 -0.986724 -1.993835
H -2.407232 -2.291735 2.080550
H -4.889282 -2.366744 2.181057
H -6.233007 -1.758800 0.181175
H -5.081004 -1.080413 -1.912946
O -1.001464 -1.584070 -0.026697
H -0.645708 -1.118889 0.755212

IX^{Si}

E = -1585.88951218
C -0.867358 2.975669 -0.796854
C 1.115463 1.655620 -0.321333
C 1.856152 2.526981 -1.122569
C 1.260658 3.608273 -1.771178
C -0.100753 3.822622 -1.596739
H -1.921300 3.212172 -0.660152
H 2.930176 2.370507 -1.220146
H 1.851721 4.283236 -2.386552
H -0.580716 4.673713 -2.079026
B 1.660754 0.491430 0.555434
C 3.082105 -0.117901 0.471196
C 3.787735 -0.232595 -0.740124
C 3.702788 -0.619267 1.628278
C 5.051216 -0.805920 -0.791540
H 3.321352 0.111503 -1.662413
C 4.982166 -1.160004 1.591062
H 3.161681 -0.580038 2.573569
C 5.657369 -1.258009 0.378142
H 5.570555 -0.898830 -1.744064
H 5.447895 -1.525350 2.504905
H 6.652612 -1.698376 0.341496
C -0.286894 1.875576 -0.149336
C -0.957819 0.920034 0.743150
P -2.662514 0.925389 1.008641
C -3.248789 2.286599 2.069060
H -2.964974 3.242005 1.613831

H -4.335119 2.257536 2.212510
H -2.741932 2.204806 3.036387
C -3.732561 1.021793 -0.462686
H -3.494448 1.894020 -1.076148
H -3.577293 0.117410 -1.056591
H -4.781527 1.074670 -0.149936
C -3.188456 -0.604097 1.808966
H -4.268778 -0.575629 1.991105
H -2.935809 -1.438996 1.143783
H -2.640403 -0.736519 2.746869
Si 0.091163 -0.206553 1.739097
O 0.454674 -1.279080 -1.148168
C -0.679191 -2.009736 -1.122134
C -1.795779 -1.683153 -1.889562
C -0.712517 -3.130799 -0.291603
C -2.939799 -2.474053 -1.822452
H -1.759017 -0.810814 -2.541788
C -1.857327 -3.912471 -0.234008
H 0.164477 -3.359110 0.309168
C -2.980376 -3.590088 -0.994574
H -3.804727 -2.214086 -2.431173
H -1.874763 -4.782188 0.420177
H -3.874592 -4.207254 -0.945997
H 0.287001 -0.398431 -1.507593

3.9.1.3 Reaktionspfad C

VIII^{Si}

E = -2135.09391264
C 1.586899 3.185785 0.559032
C 1.105558 1.894736 0.377769
C -0.176848 1.607057 -0.119607
C -0.946568 2.725002 -0.473193
C -0.487840 4.026198 -0.297335
C 0.776238 4.264430 0.229963
H 2.596823 3.321895 0.938645
H -1.931523 2.577522 -0.911748

H -1.125141 4.862517 -0.580487
 H 1.136677 5.281642 0.369132
 B -0.628584 0.101774 -0.317131
 S 2.222985 0.578541 0.827623
 O 3.584984 1.166711 0.891433
 O 1.738611 -0.058599 2.053203
 C 2.197256 -0.545162 -0.511118
 Si 0.705164 -1.064028 -1.369447
 C -1.247484 -0.729762 0.879767
 C -1.260727 -0.254417 2.197680
 C -1.823560 -1.988546 0.644050
 C -1.830468 -0.993494 3.226511
 H -0.800100 0.706725 2.418208
 C -2.403952 -2.730844 1.665857
 H -1.831734 -2.392044 -0.370992
 C -2.409327 -2.232434 2.964147
 H -1.824309 -0.600810 4.242128
 H -2.850565 -3.700215 1.449744
 H -2.860009 -2.808828 3.770524
 P 3.783604 -1.187666 -0.812292
 C 4.926374 -0.021541 -1.591382
 H 5.919356 -0.466755 -1.719781
 H 4.516447 0.267004 -2.565014
 H 4.975301 0.856978 -0.941369
 C 3.658046 -2.597973 -1.931247
 H 3.172372 -2.283067 -2.860547
 H 4.660993 -2.985929 -2.141507
 H 3.040806 -3.375033 -1.469748
 C 4.579567 -1.787025 0.697290
 H 4.681204 -0.934798 1.377049
 H 3.923146 -2.531693 1.159272
 H 5.560518 -2.224458 0.480609
 C -3.298491 0.045493 -1.290693
 C -4.067524 -0.695921 -2.174641
 C -5.433873 -0.814115 -1.944426
 C -6.012644 -0.203961 -0.838010
 C -5.218868 0.527967 0.040062

C -3.853829 0.660755 -0.178142
H -3.602934 -1.179014 -3.033656
H -6.043778 -1.392520 -2.635057
H -7.080268 -0.303083 -0.656264
H -5.662537 0.998393 0.914788
H -3.218676 1.206951 0.513149
O -1.937258 0.184267 -1.515893
H -1.641567 -0.347922 -2.270693

IX^{Si}

E = -1585.88789474
C -1.958882 2.374925 1.178616
C 0.301495 1.699097 0.604009
C 0.781289 2.578972 1.577732
C -0.078886 3.362263 2.344140
C -1.446677 3.265421 2.121136
H -3.039120 2.326711 1.051603
H 1.855277 2.647336 1.746047
H 0.310614 4.041942 3.099053
H -2.135190 3.881882 2.698084
B 1.130414 0.821964 -0.372627
C 2.656838 0.909922 -0.625933
C 3.407998 2.090556 -0.474023
C 3.344772 -0.238445 -1.061781
C 4.773752 2.118234 -0.725477
H 2.904047 3.009750 -0.180485
C 4.716262 -0.227166 -1.277879
H 2.780611 -1.156901 -1.224442
C 5.433397 0.954825 -1.112974
H 5.329882 3.047917 -0.616143
H 5.226494 -1.134814 -1.595855
H 6.506009 0.973074 -1.299914
C -1.107613 1.553896 0.427772
C -1.515134 0.508429 -0.531659
P -3.171691 0.276438 -0.980444
C -4.334013 -0.134680 0.365121
H -4.316914 0.627651 1.148649

H -5.352086 -0.222084 -0.031232
H -4.031281 -1.093120 0.801244
C -3.907783 1.715293 -1.813151
H -4.962804 1.544596 -2.055063
H -3.817068 2.594496 -1.166603
H -3.340305 1.903781 -2.730513
C -3.338234 -1.118871 -2.111297
H -4.395300 -1.259334 -2.363343
H -2.742324 -0.948619 -3.012248
H -2.946260 -2.005669 -1.600602
Si -0.188605 -0.398213 -1.439905
O -1.845602 -2.152085 0.936975
C -0.592313 -2.652722 0.988862
C -0.383917 -4.002712 0.705435
C 0.494817 -1.838820 1.326449
C 0.900413 -4.525333 0.752722
H -1.239574 -4.620406 0.443192
C 1.779682 -2.374321 1.361018
H 0.319134 -0.799543 1.604237
C 1.990434 -3.715990 1.070533
H 1.055325 -5.579299 0.528085
H 2.616659 -1.728273 1.619723
H 2.994513 -4.133291 1.097667
H -1.757936 -1.199140 0.735302

3.9.2 Bei Germylenen

3.9.2.1 Reaktionspfad A

V^{Ge}

E = -3404.13958251
C -0.663679 2.089351 1.967787
C 1.258242 1.038246 0.929816
C 1.995052 1.253264 2.099786
C 1.400481 1.869541 3.190185
C 0.068994 2.283471 3.128203
H -1.694558 2.440802 1.933094
H 3.035810 0.943426 2.146672

H 1.981698 2.035958 4.095095
 H -0.393246 2.768711 3.985687
 N 1.734342 0.446622 -0.228924
 C 3.003173 -0.167175 -0.283625
 C 3.346502 -1.180937 0.619420
 C 3.912739 0.185824 -1.282225
 C 4.576525 -1.816816 0.524915
 H 2.628718 -1.471055 1.385585
 C 5.137921 -0.464497 -1.380216
 H 3.645212 0.978713 -1.977909
 C 5.478253 -1.463645 -0.475713
 H 4.827672 -2.605137 1.232408
 H 5.834666 -0.179746 -2.166647
 H 6.439895 -1.967269 -0.550227
 C -0.095375 1.468722 0.842610
 C -0.697381 1.203734 -0.442741
 P -2.348288 1.509272 -0.792105
 C -3.536260 0.728012 0.333098
 H -3.293914 0.989426 1.367238
 H -4.556489 1.052941 0.099542
 H -3.459709 -0.358786 0.226957
 C -2.789590 3.274191 -0.809383
 H -3.854588 3.419935 -1.023221
 H -2.547810 3.715318 0.163207
 H -2.183182 3.774373 -1.571664
 C -2.766584 0.885295 -2.435431
 H -3.801598 1.144542 -2.681638
 H -2.090705 1.319220 -3.179772
 H -2.650531 -0.203740 -2.436788
 Ge 0.513213 0.434197 -1.707125
 H 0.374672 -1.367393 0.388502
 O -0.089916 -1.758373 1.141820
 C -1.308882 -2.183515 0.780496
 C -2.243027 -2.425580 1.791343
 C -1.670146 -2.410471 -0.552231
 C -3.516013 -2.878318 1.470724
 H -1.944787 -2.244291 2.821208

C -2.949497 -2.859727 -0.861464
H -0.936317 -2.244413 -1.339887
C -3.883744 -3.092879 0.143880
H -4.232577 -3.062272 2.269508
H -3.212251 -3.040166 -1.903029
H -4.881870 -3.448371 -0.101813

***V*^{Ge}**

Nicht beobachtet.

***VII*^{Ge}**

E = -4715.39303935
C 1.447790 -1.574912 0.996895
C 2.461309 -1.232680 0.097194
C 3.672494 -1.921865 0.132955
C 3.884191 -2.936627 1.057004
C 2.881660 -3.267520 1.960534
C 1.670991 -2.588041 1.928066
H 4.446802 -1.629141 -0.571600
H 4.835132 -3.465694 1.069979
H 3.038568 -4.056069 2.694020
H 0.864863 -2.836845 2.614008
S -0.191346 -0.790706 1.115908
S 2.356713 0.076865 -1.162931
O -1.010859 -1.841064 1.764843
O 0.018767 0.445381 1.892793
O 1.567985 -0.506351 -2.287984
O 3.772903 0.404056 -1.403580
C -0.795188 -0.498242 -0.427689
C 1.458908 1.358377 -0.610636
P 2.149181 2.452790 0.493069
P -1.533903 -1.856411 -1.169952
C 0.849117 3.513143 1.144030
H 1.257261 4.218620 1.875316
H 0.394121 4.067214 0.315601
H 0.093071 2.864983 1.599453

C 2.967501 1.649412 1.892995
 H 3.771100 1.017346 1.496924
 H 3.388886 2.392142 2.579699
 H 2.219965 1.028105 2.397410
 C 3.421773 3.505384 -0.254969
 H 2.959077 4.124887 -1.030356
 H 3.925514 4.138727 0.484327
 H 4.137169 2.827283 -0.734625
 C -1.813134 -1.461989 -2.910233
 H -2.297881 -2.307757 -3.409514
 H -2.450133 -0.574334 -2.986709
 H -0.843933 -1.251965 -3.377653
 C -0.464709 -3.318060 -1.168453
 H -0.313997 -3.633383 -0.130572
 H -0.904529 -4.136831 -1.748806
 H 0.496314 -3.009749 -1.598333
 C -3.126089 -2.354937 -0.480050
 H -3.517755 -3.250468 -0.976146
 H -2.968142 -2.534804 0.587908
 H -3.824293 -1.518457 -0.593151
 H -2.263811 2.873174 -0.499520
 O -2.121578 2.381676 0.316801
 C -3.210004 1.603200 0.556797
 C -3.215796 0.809422 1.702476
 C -4.297969 1.587463 -0.313462
 C -4.332091 0.035945 1.985611
 H -2.336582 0.796911 2.339482
 C -5.414070 0.810927 -0.013627
 H -4.276975 2.199226 -1.215855
 C -5.440862 0.037345 1.140750
 H -4.328367 -0.584388 2.879808
 H -6.267016 0.818529 -0.690058
 H -6.313790 -0.567249 1.376849
 Ge -0.320261 1.089429 -1.456324

VIII^{Ge}

E = -3923.37778191

C 0.443274 1.327380 2.786654
 C -0.249190 0.588234 1.844683
 C -1.221690 1.076634 0.966413
 C -1.456472 2.453223 1.025102
 C -0.783102 3.237044 1.959943
 C 0.149914 2.687314 2.845497
 H 1.162903 0.860341 3.456308
 H -2.198934 2.908511 0.371526
 H -1.000358 4.302568 2.017155
 H 0.642329 3.320644 3.580486
 B -1.879971 -0.139026 0.156386
 S -0.087947 -1.128129 1.486745
 O 0.455645 -1.927018 2.588806
 O -1.591843 -1.339239 1.139193
 C 0.678381 -1.319194 -0.017325
 C -3.392575 -0.081870 -0.275757
 C -4.349197 -0.973041 0.224581
 C -3.832263 0.889471 -1.187134
 C -5.683921 -0.894960 -0.161005
 H -4.034966 -1.738842 0.932763
 C -5.164875 0.978866 -1.571243
 H -3.108312 1.585780 -1.614924
 C -6.099447 0.083562 -1.058377
 H -6.407097 -1.601710 0.244562
 H -5.476940 1.745785 -2.279241
 H -7.143821 0.146433 -1.359712
 P 2.183693 -2.142666 -0.006181
 C 3.430801 -1.349932 1.035847
 H 4.378056 -1.900341 1.019967
 H 3.581465 -0.325804 0.676718
 H 3.037609 -1.323568 2.058540
 C 2.833498 -2.199737 -1.684171
 H 3.038507 -1.178170 -2.017373
 H 3.752189 -2.795941 -1.707221
 H 2.076276 -2.640116 -2.341059
 C 2.073336 -3.856452 0.570790
 H 1.634370 -3.835520 1.573766

H 1.403140 -4.406972 -0.097828
H 3.058099 -4.336822 0.594176
C 4.255045 1.562493 -1.829712
C 4.543335 2.018089 -0.548086
C 3.495655 2.380889 0.297485
C 2.177125 2.287613 -0.124451
C 1.898415 1.837287 -1.412082
C 2.936113 1.468443 -2.266263
H 5.061410 1.282183 -2.505171
H 5.575050 2.097820 -0.213058
H 3.704294 2.742852 1.302731
H 1.349406 2.570735 0.517542
H 2.709475 1.119115 -3.273643
O 0.595710 1.770017 -1.782181
H 0.526910 1.480669 -2.699878
Ge -0.469953 -0.701020 -1.462786

***IX*^{Ge}**

E = -1585.88683398
C 1.357973 1.014363 2.211550
C -0.854327 0.812678 1.238410
C -1.365529 0.556063 2.509432
C -0.537122 0.503831 3.631388
C 0.823543 0.731383 3.468228
H 2.428993 1.196720 2.139353
H -2.436686 0.392617 2.626162
H -0.947433 0.296002 4.617554
H 1.486194 0.699262 4.332570
B -1.635275 0.824965 -0.104568
C -3.120580 0.412049 -0.292569
C -3.694668 -0.683384 0.376726
C -3.940932 1.127053 -1.180991
C -5.023366 -1.036754 0.179138
H -3.071904 -1.281570 1.040423
C -5.281374 0.803059 -1.354065
H -3.510844 1.954889 -1.745034
C -5.824494 -0.284299 -0.676300

H -5.441239 -1.898879 0.696910
 H -5.900596 1.385556 -2.034480
 H -6.869236 -0.553620 -0.823782
 C 0.538505 1.061789 1.075935
 C 0.966184 1.323473 -0.308549
 P 2.633702 1.504320 -0.706757
 C 3.444385 2.959613 0.033134
 H 3.347468 2.928763 1.122634
 H 4.505313 3.006230 -0.238020
 H 2.929328 3.855285 -0.330158
 C 3.673678 0.085915 -0.257529
 H 4.726554 0.270819 -0.499489
 H 3.572055 -0.136961 0.808473
 H 3.307263 -0.783366 -0.813611
 C 2.876755 1.706440 -2.484498
 H 3.944496 1.841681 -2.690997
 H 2.496695 0.819468 -3.000390
 H 2.305698 2.570938 -2.836627
 Si -0.298027 1.350428 -1.618457
 H -0.949422 -1.510343 -1.725508
 O -0.761151 -1.531319 -0.780631
 C 0.428886 -2.128664 -0.542206
 C 1.211317 -2.653520 -1.570698
 C 0.856132 -2.229280 0.782534
 C 2.396422 -3.317467 -1.270123
 H 0.877589 -2.556525 -2.603740
 C 2.046063 -2.885955 1.066380
 H 0.245578 -1.795448 1.571415
 C 2.819669 -3.440864 0.049114
 H 2.990019 -3.741154 -2.078325
 H 2.369186 -2.967387 2.102716
 H 3.744649 -3.963170 0.282955

3.9.2.2 Reaktionspfad B

V^{Ge}

E = -3404.14113528

C 1.740409 1.197867 2.066555
 C -0.123581 -0.193450 1.370326
 C -0.907165 0.375879 2.381028
 C -0.377357 1.358802 3.203511
 C 0.944421 1.778631 3.044066
 H 2.775973 1.524171 1.971016
 H -1.935833 0.050862 2.511041
 H -0.998619 1.798995 3.981149
 H 1.356661 2.550306 3.691119
 N -0.539110 -1.162558 0.478217
 C -1.889483 -1.563170 0.384362
 C -2.220344 -2.918127 0.453774
 C -2.906207 -0.626992 0.161830
 C -3.538991 -3.330933 0.296417
 H -1.428680 -3.642474 0.635744
 C -4.221679 -1.044447 0.019080
 H -2.653141 0.427620 0.085744
 C -4.546276 -2.397181 0.083331
 H -3.779125 -4.391398 0.349777
 H -4.997606 -0.302000 -0.159433
 H -5.578577 -2.720658 -0.034753
 C 1.236922 0.201264 1.213591
 P 3.508651 -0.157384 -0.370135
 C 3.758101 1.558043 -0.921019
 H 3.545702 2.243651 -0.094170
 H 4.782993 1.719699 -1.273677
 H 3.044984 1.764519 -1.727363
 C 4.807740 -0.461410 0.865565
 H 5.798841 -0.203860 0.475047
 H 4.604091 0.129877 1.763990
 H 4.779011 -1.521118 1.140064
 C 3.943629 -1.185431 -1.791204
 H 4.971457 -0.975737 -2.105074
 H 3.849073 -2.241907 -1.519322
 H 3.254929 -0.972304 -2.615337
 C 1.913568 -0.501855 0.141451
 H 0.813009 1.025638 -1.023538

Ge 0.782334 -1.789816 -0.740524
 O 0.338109 1.354340 -1.803235
 C -0.805432 1.973925 -1.427277
 C -1.877808 1.972070 -2.319404
 C -0.935688 2.607580 -0.190263
 C -3.074849 2.580957 -1.965639
 H -1.757364 1.467826 -3.275226
 C -2.141226 3.205313 0.157045
 H -0.100924 2.607901 0.508860
 C -3.218391 3.195154 -0.723875
 H -3.909271 2.563877 -2.664728
 H -2.234137 3.677180 1.133559
 H -4.160902 3.662437 -0.446860

Vl^{Ge}

E = -3953.32866297
 C 0.181404 1.797302 2.564939
 C 0.160575 0.685881 1.728212
 C -1.001902 0.266463 1.060986
 C -2.169638 1.010291 1.301057
 C -2.157439 2.106700 2.144161
 C -0.983123 2.516201 2.777422
 H 1.122883 2.065813 3.038964
 H -3.082359 0.723837 0.784585
 H -3.077264 2.669748 2.291163
 H -0.980373 3.385102 3.431334
 N -1.002722 -0.795852 0.159726
 S 1.637075 -0.258747 1.551967
 O 2.751953 0.476401 2.186879
 O 1.406271 -1.627555 2.025018
 C -2.164594 -1.601161 0.118925
 C -2.652177 -2.170463 1.302042
 C -2.821938 -1.876174 -1.082326
 C -3.774890 -2.983462 1.279123
 H -2.123036 -1.971511 2.231730
 C -3.935180 -2.710811 -1.102114
 H -2.460621 -1.422268 -2.002492

C -4.421268 -3.262547 0.076356
 H -4.140677 -3.418152 2.207755
 H -4.433395 -2.915481 -2.048057
 H -5.297943 -3.906751 0.060714
 C 1.852379 -0.255454 -0.168612
 Ge 0.315812 -1.200736 -1.167933
 O 0.450168 0.936438 -1.809746
 C -0.514519 1.861864 -1.633675
 C -1.784121 1.665453 -2.181485
 C -0.262693 3.009880 -0.876571
 C -2.789159 2.597859 -1.957819
 H -1.966847 0.774707 -2.778668
 C -1.273056 3.937943 -0.664602
 H 0.725127 3.151002 -0.441372
 C -2.542860 3.737581 -1.197835
 H -3.777069 2.430061 -2.383751
 H -1.066416 4.822164 -0.064097
 H -3.333577 4.464227 -1.024393
 H 1.249859 0.761089 -0.928413
 P 3.508686 -0.507444 -0.610164
 C 3.562719 -0.891642 -2.373079
 H 4.596730 -0.904806 -2.733145
 H 3.094810 -1.865253 -2.553631
 H 2.990296 -0.124350 -2.908361
 C 4.278392 -1.853339 0.315294
 H 3.693539 -2.766221 0.162943
 H 5.320448 -2.008178 0.014955
 H 4.222447 -1.584433 1.376616
 C 4.519442 0.964657 -0.348749
 H 5.573495 0.766817 -0.572954
 H 4.143682 1.767392 -0.992049
 H 4.390574 1.251149 0.700283

VII^{Ge}

E = -4715.38070458
 C -2.810672 0.734030 -0.375220
 C -2.114640 1.506145 0.558950

C -2.745852 2.607437 1.135624
 C -4.046272 2.947428 0.784067
 C -4.734437 2.180486 -0.145719
 C -4.113261 1.081155 -0.724429
 H -2.192706 3.188494 1.868686
 H -4.519385 3.811297 1.246566
 H -5.754397 2.435386 -0.426470
 H -4.624377 0.461683 -1.457015
 S -2.106799 -0.649060 -1.310048
 S -0.489787 1.145784 1.298200
 O -3.291781 -1.356659 -1.815744
 O -1.210680 0.050109 -2.296079
 O -0.713177 0.003937 2.192545
 O -0.125407 2.431655 1.931421
 C -1.050598 -1.553038 -0.416784
 P 1.491973 2.202235 -0.525793
 P -1.623573 -2.700019 0.705419
 C 2.655081 1.707099 -1.815654
 H 3.168550 2.601318 -2.186323
 H 3.389884 1.007971 -1.396813
 H 2.123788 1.215911 -2.636654
 C 0.253471 3.267232 -1.301333
 H -0.372066 3.693626 -0.509525
 H 0.720083 4.072307 -1.879119
 H -0.368132 2.634313 -1.947369
 C 2.452861 3.226515 0.612141
 H 3.307600 2.640886 0.964930
 H 2.810505 4.121368 0.089786
 H 1.811027 3.493759 1.455571
 C -0.330233 -3.142572 1.870851
 H -0.697520 -3.903560 2.567656
 H 0.538839 -3.515327 1.320165
 H -0.031870 -2.229122 2.394629
 C -3.056285 -2.090976 1.626063
 H -3.833538 -1.824585 0.899831
 H -3.437703 -2.857251 2.309778
 H -2.740596 -1.199670 2.176664

C -2.199914 -4.220031 -0.099982
 H -2.652935 -4.921808 0.609868
 H -2.932507 -3.913796 -0.855928
 H -1.354221 -4.695668 -0.607845
 C 0.726725 0.777986 0.133485
 H 1.442392 -0.188963 0.765059
 O 1.974017 -1.313125 0.818440
 C 3.267522 -1.077917 0.594540
 C 3.938107 -0.082310 1.323783
 C 3.969700 -1.750040 -0.417697
 C 5.259252 0.240753 1.033325
 H 3.399180 0.418195 2.126926
 C 5.290447 -1.424275 -0.695521
 H 3.450938 -2.517600 -0.988336
 C 5.943163 -0.420223 0.017148
 H 5.761501 1.014784 1.612795
 H 5.815830 -1.956241 -1.487417
 H 6.976331 -0.165818 -0.209206
 Ge 0.685192 -0.906855 -1.161132

VIII^{Ge}

E = -3923.37873296
 C 3.496023 2.391291 0.720878
 C 2.267340 1.768031 0.597648
 C 1.138592 2.298077 -0.035818
 C 1.295746 3.565683 -0.602739
 C 2.513986 4.231275 -0.496113
 C 3.606573 3.661611 0.163959
 H 4.325336 1.913381 1.238621
 H 0.456906 4.042401 -1.108761
 H 2.617756 5.226524 -0.925852
 H 4.541509 4.211959 0.244976
 B -0.065392 1.261030 0.033555
 S 1.860812 0.116184 1.051065
 O 2.602319 -0.424421 2.195234
 O 0.336985 0.426980 1.332676
 C 1.825967 -0.829690 -0.341262

C -1.580360 1.685580 0.086343
 C -2.355956 1.527813 1.241243
 C -2.222947 2.190591 -1.053783
 C -3.712036 1.838451 1.255105
 H -1.886507 1.138936 2.144839
 C -3.572721 2.520136 -1.043710
 H -1.655152 2.305718 -1.978852
 C -4.327237 2.336735 0.112029
 H -4.293555 1.687197 2.163611
 H -4.044318 2.907701 -1.945909
 H -5.389136 2.576599 0.119037
 P 2.621364 -2.341863 -0.255085
 C 4.386329 -2.234025 0.136823
 H 4.842317 -3.228336 0.199858
 H 4.885388 -1.641259 -0.636753
 H 4.478424 -1.720699 1.100096
 C 2.471153 -3.158945 -1.853811
 H 2.926386 -2.525667 -2.621888
 H 2.965238 -4.136146 -1.825588
 H 1.408686 -3.277616 -2.090668
 C 1.912548 -3.460963 0.981443
 H 2.023623 -2.973455 1.956819
 H 0.845152 -3.570040 0.758793
 H 2.406065 -4.439369 0.990207
 C -3.145114 -1.487281 -1.004019
 C -2.412596 -1.660486 0.164233
 C -3.056102 -1.898682 1.374873
 C -4.444138 -1.945525 1.414266
 C -5.187951 -1.767618 0.252638
 C -4.532391 -1.542425 -0.953530
 H -2.618319 -1.284241 -1.934087
 H -2.466145 -2.032506 2.280050
 H -4.946661 -2.120972 2.363679
 H -6.274646 -1.799668 0.287977
 H -5.105557 -1.391501 -1.866184
 O -1.043950 -1.606227 0.099403
 H -0.683315 -1.086798 0.843119

Ge 0.328842 -0.286461 -1.519824

IX^{Ge}

E = -3374.15084779

C -1.960638 1.716557 1.586501

C -0.031757 0.245037 1.501870

C 0.624837 1.101330 2.388341

C 0.019982 2.258920 2.872484

C -1.271555 2.559730 2.456810

H -2.974037 1.993548 1.299963

H 1.635190 0.851930 2.709901

H 0.545084 2.915461 3.562903

H -1.761592 3.462901 2.819072

B 0.563576 -1.018942 0.837685

C 2.066378 -1.365004 0.734685

C 3.074252 -0.381136 0.705541

C 2.472693 -2.707803 0.622297

C 4.414264 -0.723865 0.582571

H 2.798603 0.671705 0.738165

C 3.813231 -3.058249 0.537620

H 1.710966 -3.487007 0.604334

C 4.787315 -2.063340 0.513017

H 5.171039 0.057581 0.538597

H 4.101908 -4.105797 0.469830

H 5.838914 -2.332720 0.425766

C -1.369079 0.541108 1.097780

C -1.984393 -0.418429 0.167360

P -3.559925 -0.176861 -0.476194

C -3.747474 1.344355 -1.463319

H -3.046348 1.289790 -2.303737

H -4.769837 1.450292 -1.843632

H -3.491889 2.220701 -0.859682

C -4.021897 -1.506435 -1.607245

H -5.026463 -1.316178 -2.001334

H -3.296948 -1.556168 -2.425444

H -3.997054 -2.462806 -1.075957

C -4.918545 -0.120570 0.739002

H -5.883400 0.059609 0.251381
H -4.942694 -1.082848 1.261548
H -4.731240 0.664219 1.478025
O 0.176835 0.274805 -1.837306
C 1.153771 1.191779 -1.663426
C 2.363859 0.981093 -2.324696
C 0.996442 2.311826 -0.845137
C 3.414798 1.869059 -2.143645
H 2.465927 0.098799 -2.951733
C 2.058332 3.191490 -0.668754
H 0.054286 2.477489 -0.324492
C 3.274107 2.975444 -1.309476
H 4.359536 1.687466 -2.653193
H 1.928300 4.052312 -0.015211
H 4.102830 3.665088 -1.164718
H -0.569476 0.407196 -1.227177
Ge -1.013401 -2.055961 -0.204417

3.9.2.3 Reaktionspfad C

VIII^{Ge}

E = -3923.35260516
C -1.532472 -3.292681 0.266630
C -1.048454 -1.990512 0.251929
C 0.225923 -1.642272 -0.230107
C 0.980359 -2.705036 -0.748893
C 0.516564 -4.016478 -0.743594
C -0.737249 -4.319687 -0.226030
H -2.532902 -3.475562 0.651578
H 1.957932 -2.503536 -1.182226
H 1.142751 -4.808331 -1.151810
H -1.101327 -5.345083 -0.218379
B 0.694367 -0.129825 -0.226061
S -2.145164 -0.740593 0.902421
O -3.495896 -1.352385 0.993857
O -1.578159 -0.232662 2.152557
C -2.215187 0.509200 -0.307944

C 1.356653 0.523386 1.051741
 C 1.403309 -0.135471 2.287521
 C 1.950430 1.793471 0.978085
 C 2.022511 0.438829 3.390222
 H 0.927232 -1.109356 2.384999
 C 2.580780 2.371877 2.073439
 H 1.934618 2.338973 0.031836
 C 2.619532 1.692304 3.286356
 H 2.040823 -0.094867 4.339189
 H 3.040029 3.354986 1.981888
 H 3.109273 2.139851 4.149739
 P -3.828382 1.104872 -0.519332
 C -4.949517 -0.042432 -1.358261
 H -5.960545 0.374090 -1.429974
 H -4.555154 -0.243307 -2.359899
 H -4.951822 -0.967668 -0.774841
 C -3.790001 2.597617 -1.534350
 H -3.325463 2.371780 -2.499509
 H -4.812563 2.960899 -1.685324
 H -3.188207 3.363326 -1.035093
 C -4.622880 1.565819 1.039961
 H -4.670278 0.666597 1.662016
 H -3.995336 2.310981 1.539701
 H -5.628204 1.967173 0.869604
 C 3.351605 0.045599 -1.246959
 C 4.096052 0.910847 -2.034118
 C 5.466224 1.009325 -1.818080
 C 6.072607 0.257172 -0.819154
 C 5.303168 -0.598288 -0.036090
 C 3.934902 -0.713996 -0.243462
 H 3.609396 1.505567 -2.806675
 H 6.056955 1.684494 -2.433459
 H 7.143052 0.341110 -0.646623
 H 5.769063 -1.181518 0.755127
 H 3.318717 -1.358696 0.376525
 O 1.986054 -0.070743 -1.459208
 H 1.681832 0.534750 -2.150606

Ge -0.685579 1.212302 -1.158029

IX^{Ge}

E = -3374.14691193

C -1.382079 -0.187492 2.505199

C 0.830298 -0.300584 1.519568

C 1.342025 0.315557 2.661940

C 0.516989 0.701121 3.718086

C -0.846010 0.446263 3.624301

H -2.454449 -0.374735 2.488905

H 2.414564 0.498279 2.726445

H 0.929756 1.185171 4.600817

H -1.509156 0.735006 4.439310

B 1.637316 -0.702524 0.259524

C 3.114147 -0.321357 -0.029049

C 3.635539 0.947773 0.280644

C 3.978616 -1.238510 -0.650003

C 4.954322 1.278403 -0.004174

H 2.979495 1.692660 0.728657

C 5.309447 -0.927722 -0.902500

H 3.591691 -2.216190 -0.937508

C 5.799207 0.335498 -0.584052

H 5.329944 2.273093 0.231344

H 5.963053 -1.664035 -1.367614

H 6.836212 0.589435 -0.798228

C -0.566462 -0.576788 1.431047

C -1.016251 -1.230629 0.197067

P -2.685698 -1.484603 -0.124484

C -3.531373 -2.642065 1.004663

H -3.430995 -2.297660 2.038424

H -4.594071 -2.739797 0.754448

H -3.039916 -3.617226 0.920798

C -3.700654 0.022362 -0.113566

H -4.756214 -0.206034 -0.300766

H -3.598698 0.540950 0.844141

H -3.315529 0.688310 -0.892999

C -2.949209 -2.194771 -1.764631

H -4.020252 -2.369066 -1.916852
H -2.566102 -1.503265 -2.521086
H -2.394558 -3.133992 -1.851966
H 0.933946 1.106174 -2.020072
C -1.230428 2.238579 -2.201067
C -2.405916 2.977073 -2.107005
C -2.827995 3.475806 -0.879161
C -2.062909 3.222419 0.257382
C -0.883009 2.495102 0.177331
C -0.457618 2.015015 -1.061972
H -0.897697 1.848334 -3.162902
H -2.992647 3.162300 -3.005022
H -3.745422 4.055671 -0.807623
H -2.384588 3.600398 1.226235
H -0.277392 2.297009 1.058767
O 0.721538 1.353479 -1.113883
Ge 0.300048 -1.696977 -1.108601

3.9.3 Bei Stannylene

3.9.3.1 Reaktionspfad A

V^{Sn}

Nicht beobachtet.

VI^{Sn}

Nicht beobachtet.

VII^{Sn}

E = -2640.77340287
C -1.535466 1.710576 0.919515
C -2.566426 1.252471 0.088708
C -3.782016 1.934145 0.068107
C -3.988892 3.052863 0.864830
C -2.974665 3.495825 1.702682
C -1.759282 2.823817 1.728555
H -4.566957 1.552652 -0.579504
H -4.944892 3.571708 0.830220

H -3.124476 4.364410 2.341191
 H -0.947391 3.153617 2.371963
 S 0.126819 0.977730 1.105694
 S -2.502242 -0.197453 -1.020387
 O 0.900879 2.064840 1.757524
 O -0.075061 -0.231834 1.928539
 O -1.728358 0.268505 -2.225946
 O -3.926764 -0.516875 -1.211850
 C 0.772594 0.674794 -0.412249
 C -1.574457 -1.413309 -0.398154
 P -2.170264 -2.360632 0.877552
 P 1.644411 2.000163 -1.047675
 C -0.812278 -3.292266 1.604981
 H -1.170404 -3.928302 2.421211
 H -0.348909 -3.911726 0.829952
 H -0.082026 -2.561322 1.966021
 C -2.972208 -1.418094 2.199806
 H -3.807660 -0.861123 1.759141
 H -3.349604 -2.086366 2.981953
 H -2.232333 -0.720116 2.603910
 C -3.434969 -3.541949 0.330573
 H -2.984984 -4.240361 -0.382745
 H -3.886476 -4.092187 1.164272
 H -4.193821 -2.952015 -0.197186
 C 2.010247 1.657649 -2.787681
 H 2.575407 2.489350 -3.221920
 H 2.602055 0.738819 -2.863807
 H 1.069924 1.524562 -3.334761
 C 0.732285 3.568839 -1.056606
 H 0.531881 3.847798 -0.017399
 H 1.303837 4.360417 -1.554290
 H -0.219587 3.402638 -1.573696
 C 3.243508 2.343102 -0.274768
 H 3.739134 3.206197 -0.734374
 H 3.050677 2.522786 0.787159
 H 3.868283 1.448020 -0.370731
 O 2.233722 -2.314749 0.174954

C 3.284525 -1.561744 0.608394
 C 4.505073 -1.564696 -0.062744
 C 3.111151 -0.781122 1.749685
 C 5.567030 -0.809245 0.428577
 H 4.628317 -2.169652 -0.961800
 C 4.176672 -0.030931 2.225554
 H 2.138586 -0.756421 2.232021
 C 5.410648 -0.043682 1.577735
 H 6.521461 -0.827112 -0.094536
 H 4.031603 0.580995 3.113748
 H 6.240835 0.544740 1.962099
 Sn 0.264091 -1.097989 -1.595331
 H 2.533733 -2.881296 -0.543407

VIII^{Sn}

E = -1848.75866193
 C 0.596326 1.973537 2.385250
 C -0.190429 1.075509 1.684944
 C -1.203544 1.410293 0.776470
 C -1.385808 2.780404 0.546573
 C -0.612529 3.714819 1.228999
 C 0.366848 3.325688 2.150805
 H 1.346906 1.630463 3.095165
 H -2.160859 3.118829 -0.139464
 H -0.785635 4.776390 1.058776
 H 0.938410 4.079061 2.689235
 B -1.948435 0.098788 0.284225
 S -0.069094 -0.679555 1.709601
 O 0.426737 -1.205354 2.986741
 O -1.587888 -0.919473 1.410343
 C 0.708889 -1.256853 0.338373
 C -3.483542 0.081704 -0.051658
 C -4.379802 -0.734521 0.651547
 C -4.017215 0.893278 -1.064761
 C -5.740910 -0.735931 0.363480
 H -3.994951 -1.376035 1.443198
 C -5.376294 0.903574 -1.352451

H -3.347149 1.521755 -1.654288
 C -6.247945 0.085649 -0.637846
 H -6.412754 -1.381376 0.928331
 H -5.759144 1.547127 -2.143711
 H -7.312929 0.086290 -0.864082
 P 2.182603 -2.072820 0.605480
 C 3.439615 -1.069798 1.437327
 H 4.373599 -1.624645 1.580676
 H 3.620223 -0.173589 0.833816
 H 3.033114 -0.776085 2.411938
 C 2.871908 -2.562775 -0.988264
 H 3.095202 -1.661458 -1.566705
 H 3.787130 -3.146934 -0.842205
 H 2.125659 -3.155542 -1.527725
 C 2.045671 -3.593462 1.584678
 H 1.591808 -3.320307 2.542936
 H 1.377266 -4.285719 1.061795
 H 3.023246 -4.063240 1.742739
 C 4.698930 1.371306 -1.518298
 C 4.553520 2.184312 -0.400137
 C 3.274136 2.534021 0.028636
 C 2.149410 2.080520 -0.645828
 C 2.306139 1.269989 -1.765189
 C 3.578104 0.909130 -2.203313
 H 5.690839 1.094253 -1.870160
 H 5.430240 2.547540 0.131130
 H 3.139419 3.170696 0.900686
 H 1.146999 2.355050 -0.331435
 H 3.692425 0.283268 -3.088973
 O 1.177399 0.851265 -2.403032
 H 1.403197 0.381735 -3.213431
 Sn -0.575449 -0.996203 -1.445672

IX^{Sn}

E = -1299.51972656
 C 1.158617 2.554371 1.470633
 C -0.943454 1.574799 0.739562

C -1.581565 2.288266 1.769815
 C -0.889755 3.114083 2.641870
 C 0.491992 3.231567 2.478778
 H 2.231762 2.712740 1.373822
 H -2.663339 2.196992 1.866702
 H -1.406238 3.666518 3.423752
 H 1.061529 3.879191 3.145595
 B -1.698958 0.675242 -0.246186
 C -3.133546 0.123920 -0.050287
 C -3.617821 -0.261721 1.214578
 C -3.993523 -0.064173 -1.147706
 C -4.889528 -0.798141 1.374206
 H -2.971651 -0.151865 2.085095
 C -5.280317 -0.560844 -0.989810
 H -3.635826 0.190596 -2.145402
 C -5.730269 -0.936390 0.273495
 H -5.231780 -1.102827 2.362080
 H -5.930629 -0.675808 -1.855594
 H -6.731399 -1.346030 0.397993
 C 0.481804 1.702787 0.563913
 C 1.127586 0.970257 -0.504375
 P 2.819124 0.842878 -0.623475
 C 3.768688 2.348601 -1.060361
 H 3.595943 3.127489 -0.310827
 H 4.844067 2.146380 -1.131356
 H 3.396955 2.715686 -2.023169
 C 3.655221 0.200017 0.863174
 H 4.745485 0.252025 0.763196
 H 3.338104 0.767970 1.742987
 H 3.343514 -0.840551 0.999892
 C 3.285930 -0.334763 -1.918174
 H 4.377005 -0.411816 -1.982500
 H 2.859400 -1.311954 -1.667624
 H 2.874029 -0.011067 -2.879556
 Sn -0.212429 0.094213 -1.982291
 H 0.368746 -2.896924 -1.423875
 O 0.117697 -2.247622 -0.759189

C 0.831834 -2.432978 0.388819
 C 0.489170 -1.664400 1.497214
 C 1.876935 -3.349157 0.458579
 C 1.187875 -1.834249 2.683543
 H -0.315161 -0.937883 1.413743
 C 2.567247 -3.514434 1.657126
 H 2.141387 -3.942628 -0.417151
 C 2.226240 -2.760006 2.773345
 H 0.916967 -1.229022 3.546289
 H 3.375867 -4.240756 1.711331
 H 2.766876 -2.889951 3.708068

3.9.3.2 Reaktionspfad B

V^{Sn}

E = -1329.50756795
 C 1.621339 1.587521 1.981836
 C -0.208632 0.087189 1.425706
 C -1.001874 0.769155 2.364017
 C -0.504009 1.850137 3.071177
 C 0.812144 2.271360 2.875450
 H 2.654754 1.912796 1.865383
 H -2.023758 0.440023 2.530350
 H -1.142791 2.363167 3.787676
 H 1.209677 3.118765 3.430416
 N -0.644661 -0.985371 0.681506
 C -1.998720 -1.361236 0.628130
 C -3.009179 -0.439399 0.318372
 C -2.352691 -2.702432 0.810587
 C -4.326910 -0.855243 0.197697
 H -2.747801 0.602998 0.153767
 C -3.673656 -3.114907 0.675283
 H -1.573470 -3.418947 1.066541
 C -4.669555 -2.194060 0.372508
 H -5.092026 -0.121947 -0.052240
 H -3.924583 -4.164641 0.818371
 H -5.704208 -2.515573 0.271503

C 1.155335 0.485004 1.238234
 P 3.497118 0.149188 -0.215187
 C 3.626525 1.815395 -0.941217
 H 3.334698 2.564465 -0.198224
 H 4.644312 2.024690 -1.289456
 H 2.921805 1.873994 -1.778652
 C 4.798234 0.080641 1.058882
 H 5.771116 0.380827 0.652918
 H 4.532778 0.736804 1.893498
 H 4.853498 -0.945861 1.436441
 C 4.080509 -0.964608 -1.517949
 H 5.102352 -0.700538 -1.809888
 H 4.063425 -1.996844 -1.151913
 H 3.421434 -0.883716 -2.388804
 C 1.923235 -0.288142 0.278158
 H 0.743254 1.060896 -1.010070
 Sn 0.801908 -1.894849 -0.600721
 O 0.245222 1.215149 -1.829371
 C -0.901906 1.882204 -1.566170
 C -1.963741 1.736583 -2.459404
 C -1.048065 2.699414 -0.443954
 C -3.166696 2.386958 -2.218349
 H -1.830618 1.091144 -3.324371
 C -2.259054 3.339486 -0.209189
 H -0.223474 2.806784 0.259389
 C -3.326028 3.187210 -1.089864
 H -3.992927 2.256949 -2.915242
 H -2.365597 3.957498 0.680502
 H -4.272795 3.687904 -0.899248

Vl^{Sn}

E = -1878.70646852
 C 1.147856 2.992847 -1.560892
 C 1.093490 1.665268 -1.145411
 C 2.229530 0.971440 -0.646402
 C 3.412750 1.742229 -0.564099
 C 3.458516 3.064859 -0.967487

C 2.331869 3.708199 -1.481224
 H 0.234185 3.442569 -1.943729
 H 4.306357 1.276279 -0.157541
 H 4.397496 3.608582 -0.874425
 H 2.378556 4.742079 -1.813610
 N 2.169176 -0.325044 -0.208988
 S -0.502894 0.915602 -1.073705
 O -1.472261 1.841257 -1.654487
 O -0.367339 -0.440888 -1.761459
 C -0.763805 0.414548 0.518034
 C 3.348084 -1.065938 -0.030103
 C 4.300025 -1.205488 -1.052251
 C 3.556173 -1.764461 1.165433
 C 5.413065 -2.013023 -0.875753
 H 4.143237 -0.677523 -1.991015
 C 4.664796 -2.588594 1.331418
 H 2.840145 -1.643013 1.978295
 C 5.601900 -2.713899 0.314460
 H 6.136185 -2.110284 -1.683835
 H 4.799658 -3.124758 2.269107
 H 6.473108 -3.352343 0.443965
 P -0.740143 1.576044 1.778323
 C -1.236133 0.741240 3.300245
 H -1.279840 1.453379 4.131008
 H -2.220195 0.290198 3.132312
 H -0.510244 -0.044933 3.534819
 C -1.931862 2.896209 1.466241
 H -2.921135 2.428707 1.407835
 H -1.907591 3.657884 2.252890
 H -1.704653 3.341905 0.491509
 C 0.857153 2.366274 2.135091
 H 1.615232 1.580614 2.233276
 H 1.151154 3.017071 1.303791
 H 0.801592 2.952101 3.059864
 Sn 0.336727 -1.526289 0.150010
 O -3.544753 -0.081472 1.167470
 C -4.414905 -0.584643 0.268269

C -4.062195 -0.782060 -1.069803
 C -5.701981 -0.911875 0.698480
 C -4.993185 -1.306771 -1.957862
 H -3.066204 -0.509138 -1.412405
 C -6.622966 -1.431856 -0.201158
 H -5.958628 -0.751537 1.743416
 C -6.276543 -1.635907 -1.534005
 H -4.705906 -1.453685 -2.997577
 H -7.624111 -1.683261 0.145714
 H -7.000872 -2.044738 -2.235068
 H -2.644636 0.000557 0.768721

VII^{Sn}

E = -2640.78975236
 C -2.618815 0.940828 0.063458
 C -1.756252 1.450897 1.040498
 C -2.241134 2.370753 1.969764
 C -3.559897 2.803386 1.923367
 C -4.408273 2.321066 0.935335
 C -3.937235 1.392436 0.016639
 H -1.550106 2.753568 2.716138
 H -3.918523 3.521043 2.658656
 H -5.440688 2.660638 0.879097
 H -4.588291 0.976426 -0.747642
 S -2.214049 -0.347538 -1.166114
 S 0.018320 1.075014 1.223530
 O -3.549660 -0.847608 -1.540673
 O -1.412676 0.328356 -2.234525
 O 0.062074 -0.209487 1.994622
 O 0.515028 2.255763 1.968388
 C -1.210922 -1.486514 -0.495984
 P 1.147401 2.424456 -0.982385
 P -1.899245 -2.614614 0.570278
 C 1.606160 2.122632 -2.703706
 H 1.869500 3.067126 -3.191724
 H 2.460803 1.438819 -2.746957
 H 0.747724 1.668101 -3.212984

C -0.246675 3.580280 -1.062224
 H -0.538112 3.844196 -0.039843
 H 0.013800 4.486386 -1.620584
 H -1.073579 3.049872 -1.550023
 C 2.520906 3.327718 -0.222926
 H 3.412143 2.691337 -0.254610
 H 2.713293 4.279201 -0.731915
 H 2.247089 3.495045 0.823780
 C -0.614239 -3.549672 1.423199
 H -1.058752 -4.414717 1.926910
 H 0.142611 -3.881130 0.705761
 H -0.134280 -2.897142 2.158044
 C -2.915758 -1.863963 1.869889
 H -3.755057 -1.341521 1.396942
 H -3.297760 -2.624494 2.560201
 H -2.286971 -1.139612 2.400236
 C -2.983526 -3.816999 -0.248242
 H -3.496469 -4.469822 0.467484
 H -3.706547 -3.233136 -0.829201
 H -2.384182 -4.416189 -0.941995
 C 0.769915 0.928505 -0.249117
 H 1.180854 -1.168124 1.351834
 O 1.805112 -1.704555 0.781559
 C 3.076418 -1.231456 0.888846
 C 3.387661 -0.141966 1.703448
 C 4.070220 -1.846435 0.130373
 C 4.699266 0.313954 1.759047
 H 2.601854 0.349396 2.272300
 C 5.376369 -1.375792 0.192179
 H 3.802159 -2.689440 -0.503009
 C 5.699414 -0.294779 1.006280
 H 4.937038 1.162408 2.398572
 H 6.148116 -1.861874 -0.402101
 H 6.723251 0.069774 1.054839
 Sn 0.739955 -0.968249 -1.422619

VIII^{Sn}

E = -1848.75893407

C 0.311456 1.730087 2.672434

C 0.112612 0.623454 1.861083

C -1.085414 0.279523 1.224751

C -2.156055 1.161226 1.429393

C -2.001564 2.272852 2.247268

C -0.781690 2.564263 2.869755

H 1.270471 1.912871 3.153840

H -3.123203 0.955705 0.974004

H -2.851311 2.932643 2.414158

H -0.692951 3.436150 3.514483

B -0.930014 -1.107273 0.472431

S 1.305211 -0.599086 1.438535

O 2.310234 -0.864470 2.475725

O 0.268454 -1.757473 1.239672

C 1.917570 -0.265916 -0.095773

C -2.133761 -2.103225 0.307052

C -3.293039 -1.719696 -0.385381

C -2.106223 -3.398914 0.839022

C -4.376512 -2.577370 -0.527427

H -3.339584 -0.726344 -0.837452

C -3.183807 -4.267179 0.692764

H -1.219949 -3.724417 1.382361

C -4.326442 -3.860531 0.011951

H -5.263163 -2.248363 -1.068158

H -3.133043 -5.269097 1.117752

H -5.170576 -4.538481 -0.102566

P 3.614045 -0.419377 -0.244359

C 4.558172 0.705864 0.819271

H 5.636938 0.572190 0.681103

H 4.278294 1.737344 0.581093

H 4.283159 0.486295 1.856099

C 4.068924 -0.027212 -1.946262

H 3.741971 0.992228 -2.176405

H 5.152280 -0.113486 -2.083540

H 3.546065 -0.715133 -2.619577

C 4.278483 -2.069434 0.110205
 H 3.989524 -2.315316 1.138141
 H 3.813406 -2.789430 -0.571618
 H 5.368758 -2.105343 0.005431
 C -1.809733 2.400110 -1.746240
 C -0.553170 2.587748 -1.177294
 C -0.293881 3.697522 -0.381866
 C -1.309238 4.615225 -0.140786
 C -2.572231 4.433116 -0.692618
 C -2.815394 3.324104 -1.498541
 H -1.989000 1.520239 -2.361731
 H 0.692905 3.827699 0.058787
 H -1.108865 5.477559 0.492259
 H -3.364086 5.152964 -0.498211
 H -3.800510 3.171825 -1.935236
 O 0.414583 1.663898 -1.440344
 H 1.064862 1.535367 -0.714414
 Sn 0.302662 -0.814452 -1.625419

IX^{Sn}

E = -1299.52451581
 C 2.217657 2.549516 -0.174142
 C 0.104534 1.579677 -0.877011
 C -0.364682 2.882419 -1.113591
 C 0.421513 4.004708 -0.897859
 C 1.718177 3.820308 -0.420778
 H 3.245592 2.466166 0.175775
 H -1.373154 3.005547 -1.507409
 H 0.043378 5.003250 -1.105972
 H 2.360157 4.683936 -0.248136
 B -0.727802 0.323600 -1.178754
 C -2.272607 0.242657 -1.242304
 C -3.089092 1.111301 -0.493241
 C -2.919189 -0.770826 -1.974310
 C -4.470652 0.972924 -0.473860
 H -2.622398 1.883175 0.115304
 C -4.301561 -0.893653 -1.987798

H -2.313317 -1.477722 -2.541538
 C -5.081206 -0.024010 -1.229058
 H -5.075390 1.642874 0.135220
 H -4.774965 -1.679724 -2.573815
 H -6.164889 -0.130701 -1.219003
 C 1.441824 1.388908 -0.387211
 C 1.904194 0.027207 -0.136978
 P 3.459486 -0.313212 0.477347
 C 4.912877 0.141768 -0.536164
 H 4.901616 1.217922 -0.736948
 H 5.854609 -0.127047 -0.043519
 H 4.835344 -0.384183 -1.493957
 C 3.814862 0.411382 2.116112
 H 4.827527 0.158709 2.450727
 H 3.703932 1.499150 2.082859
 H 3.084260 0.014124 2.829278
 C 3.645674 -2.093722 0.744780
 H 4.612326 -2.306968 1.214268
 H 2.831687 -2.443057 1.390103
 H 3.571666 -2.618837 -0.213159
 Sn 0.697581 -1.543568 -1.193668
 C -2.235147 -1.580495 1.992122
 C -3.363755 -1.004985 2.559536
 C -3.327606 0.299134 3.046024
 C -2.148557 1.029874 2.950002
 C -1.013301 0.468941 2.376827
 C -1.056729 -0.842859 1.904940
 H -2.250924 -2.595249 1.601725
 H -4.284819 -1.582015 2.616611
 H -4.215197 0.743887 3.490502
 H -2.108197 2.054261 3.316153
 H -0.093730 1.044600 2.278641
 O 0.036280 -1.423028 1.344040
 H 0.758966 -0.750342 1.174692

3.9.3.3 Reaktionspfad C

VIII^{Sn}

E = -1848.72208617

C -1.425631 3.330705 0.085216

C -0.947065 2.036611 -0.078026

C 0.303765 1.607405 0.411106

C 1.019853 2.573088 1.137915

C 0.554012 3.871120 1.317731

C -0.665919 4.262760 0.780883

H -2.397578 3.581760 -0.332322

H 1.972715 2.303312 1.587461

H 1.155032 4.581945 1.882890

H -1.030671 5.279657 0.911104

B 0.806848 0.122938 0.194605

S -2.022269 0.911486 -0.961411

O -3.303680 1.631908 -1.187761

O -1.305805 0.464344 -2.157398

C -2.340669 -0.408935 0.111559

C 1.526288 -0.334518 -1.133969

C 1.627654 0.506065 -2.251000

C 2.142866 -1.592305 -1.222055

C 2.318024 0.115548 -3.390864

H 1.137294 1.477336 -2.225212

C 2.846879 -1.987963 -2.353009

H 2.084126 -2.278386 -0.373283

C 2.936918 -1.130483 -3.444605

H 2.375912 0.788151 -4.245269

H 3.321397 -2.967523 -2.385370

H 3.482326 -1.434472 -4.336586

P -4.018501 -0.787097 0.190776

C -5.044349 0.452628 1.026077

H -6.099503 0.156534 1.028273

H -4.684972 0.566997 2.054088

H -4.909074 1.393760 0.485767

C -4.248608 -2.314150 1.132683

H -3.835005 -2.193495 2.139213

H -5.317556 -2.545508 1.197522

H -3.720009 -3.135522 0.638633
 C -4.797286 -1.083242 -1.418924
 H -4.676658 -0.169285 -2.008427
 H -4.265400 -1.901536 -1.915309
 H -5.858939 -1.332463 -1.309716
 C 3.481938 -0.098718 1.197773
 C 4.266626 -1.060013 1.815789
 C 5.635322 -1.074130 1.569424
 C 6.199864 -0.143470 0.705589
 C 5.390444 0.806808 0.089842
 C 4.023664 0.840129 0.331853
 H 3.813059 -1.795176 2.480285
 H 6.257588 -1.824212 2.052824
 H 7.268993 -0.161569 0.507377
 H 5.823689 1.531254 -0.596227
 H 3.376087 1.559991 -0.160191
 O 2.115529 -0.067418 1.435593
 H 1.853117 -0.765311 2.048186
 Sn -0.748046 -1.507771 0.983456

IX^{Sn}

Nicht gefunden.

3.10 Energien der Übergangszustände der Phenolaktivierung

3.10.1 Bei Silylenen

Tabelle 3.65. Energien der Übergangszustände der Phenylaktivierung am Silylenzentrum.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
V^{Si}	-1615.84108205	0.428558	0.346757	0.046592	122.609485	114.684
VI^{Si}	-2165.03765807	0.442926	0.355438	0.042105	110.803346	102.877
VII^{Si}	-2927.12149679	0.482668	0.387923	0.019379	50.998290	43.072
VIII^{Si}	-2135.08344927	0.440775	0.354033	0.029429	77.444977	69.519
IX^{Si}	-1585.85963685	0.426798	0.344675	0.026896	70.778938	62.853

Tabelle 3.66. Energien der Übergangszustände der Phenylaktivierung entlang der C^{Ylid}–Si-Einheit.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
V ^{Si}	-1615.86250014	0.429071	0.348587	0.027049	71.180954	63.255
VI ^{Si}	-2165.06210801	0.443048	0.357384	0.019653	51.719252	43.793
VII ^{Si}	-2927.12121346	0.483198	0.388404	0.020142	53.005038	45.079
VIII ^{Si}	-2135.09967690	0.440763	0.352772	0.011981	31.528579	23.603
IX ^{Si}	-1585.87884112	0.427817	0.346803	0.009859	25.945191	18.019

Tabelle 3.67. Energien der Übergangszustände der Phenylaktivierung entlang der Si–B-Einheit.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
VIII ^{Si}	-2135.06325820	0.440853	0.352500	0.048156	126.434599	118.509
IX ^{Si}	-1585.85623114	0.427223	0.347568	0.033180	87.316201	79.390

3.10.2 Bei Germynen

Tabelle 3.68. Energien der Übergangszustände der Phenylaktivierung am Germynzentrum.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
V ^{Ge}	-3404.07242708	0.427676	0.345141	0.064957	170.938770	163.013
VI ^{Ge}	-3953.26932526	0.442556	0.354075	0.059238	155.890191	147.964
VII ^{Ge}	-4715.35079920	0.481943	0.384973	0.044101	116.053953	108.128
VIII ^{Ge}	-3923.34222498	0.440278	0.352957	0.033489	88.129030	80.203
IX ^{Ge}	-1585.86013565	0.426637	0.343873	0.0255982	67.363687	59.438

Tabelle 3.69. Energien der Übergangszustände der Phenylaktivierung entlang der C^{Ylid}–Ge-Bindung.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
V ^{Ge}	-3404.11420025	0.428188	0.345980	0.024117	63.466106	55.540
VI ^{Ge}	-3953.31439801	0.442337	0.354860	0.015053	39.612704	31.687
VII ^{Ge}	-4715.38070458	0.482124	0.384534	0.013826	36.384783	28.459
VIII ^{Ge}	-3923.36338742	0.440558	0.352221	0.011641	30.634675	22.709
IX ^{Ge}	-3374.14018420	0.427114	0.344452	0.008577	22.571817	14.646

Tabelle 3.70. Energien der Übergangszustände der Phenylaktivierung entlang der Ge–B-Bindung.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
VIII ^{Ge}	-3923.31478853	0.439896	0.350195	0.058242	152.914657	144.989
IX ^{Ge}	-3374.11136171	0.426434	0.345044	0.037924	99.799561	91.874

3.10.3 Bei Stannylene

Tabelle 3.71. Energien der Übergangszustände der Phenylaktivierung am Stannylzentrum.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
V ^{Sn}	n.o.	n.o.	n.o.	–	–	–
VI ^{Sn}	n.o.	n.o.	n.o.	–	–	–
VII ^{Sn}	-2640.71103440	0.480778	0.381357	0.061635	162.197745	154.272
VIII ^{Sn}	-1848.71184647	0.439159	0.349940	0.042866	112.804030	104.878
IX ^{Sn}	-1299.46790223	0.425025	0.340360	0.049564	130.129823	122.204

Tabelle 3.72. Energien der Übergangszustände der Phenylaktivierung entlang der C^{Ylid}–Sn-Bindung.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
V ^{Sn}	-1329.48945057	0.427565	0.343667	0.013368	35.178969	27.253
VI ^{Sn}	-1878.68527743	0.441268	0.349096	0.015047	39.596058	31.670
VII ^{Sn}	-2640.76422607	0.481478	0.382018	0.009226	24.278471	16.353
VIII ^{Sn}	-1848.74953999	0.440036	0.350690	0.006007	15.808818	7.883
IX ^{Sn}	-1299.51986875	0.426842	0.342520	-0.000243	-0.637196	-8.563

Tabelle 3.73. Energien der Übergangszustände der Phenylaktivierung entlang der Sn–B-Bindung.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
VIII ^{Sn}	-1848.67221227	0.439117	0.348066	0.080539	211.943435	204.018
IX ^{Sn}	-1299.47606938	0.425552	0.343604	0.044641	117.204092	109.278

3.11 Koordinaten der Übergangszustände der Phenylaktivierung

3.11.1 Bei Silylenen

3.11.1.1 Reaktionspfad A

V^{Si}

E = -1615.84108205

C -0.477035 2.914776 1.014458

C 1.341702 1.459992 0.354426

C 2.211585 2.176910 1.173799
 C 1.731274 3.244591 1.923880
 C 0.388970 3.608208 1.851240
 H -1.522849 3.217853 0.968980
 H 3.260667 1.896506 1.225583
 H 2.412514 3.795211 2.569369
 H 0.014587 4.438890 2.446182
 N 1.693112 0.375002 -0.453341
 C 2.944326 -0.275475 -0.378170
 C 3.685581 -0.488356 -1.540253
 C 3.425612 -0.762899 0.839739
 C 4.889952 -1.181049 -1.487281
 H 3.307321 -0.099767 -2.484092
 C 4.636667 -1.438462 0.889203
 H 2.831810 -0.617865 1.739390
 C 5.373511 -1.652553 -0.272751
 H 5.456807 -1.344132 -2.401984
 H 5.000594 -1.816802 1.842672
 H 6.319107 -2.189087 -0.230231
 C -0.026458 1.835770 0.243547
 C -0.770025 1.018065 -0.700909
 P -2.435226 1.176949 -1.064171
 C -3.529226 0.897190 0.345918
 H -3.230624 1.550466 1.172331
 H -4.574839 1.088999 0.080127
 H -3.403972 -0.143734 0.666905
 C -2.880125 2.803988 -1.739411
 H -3.957644 2.871315 -1.926925
 H -2.582766 3.589190 -1.037263
 H -2.329041 2.953462 -2.673750
 C -2.914357 -0.025271 -2.320863
 H -3.964076 0.124193 -2.594436
 H -2.279705 0.095926 -3.205086
 H -2.783177 -1.032682 -1.910784
 Si 0.323718 -0.224459 -1.362232
 H 0.051686 -1.754242 -1.599466
 O 0.013311 -2.300756 -0.283762

C -1.127185 -2.366113 0.370616
 C -2.275424 -2.978177 -0.172960
 C -1.240269 -1.801159 1.659688
 C -3.458781 -3.055328 0.554511
 H -2.199328 -3.428325 -1.162301
 C -2.417495 -1.903681 2.384623
 H -0.364769 -1.304415 2.074565
 C -3.541311 -2.528753 1.840870
 H -4.324559 -3.549201 0.114102
 H -2.465174 -1.479367 3.387003
 H -4.463445 -2.606442 2.412891

***V*^{Si}**

E = -2165.03765807
 C -0.305362 -2.023239 2.540223
 C -0.546865 -1.544720 1.259125
 C -1.577414 -0.631368 0.983730
 C -2.387064 -0.240676 2.058960
 C -2.159523 -0.732421 3.336206
 C -1.113789 -1.616300 3.591429
 H 0.519823 -2.718146 2.680775
 H -3.188491 0.471680 1.882773
 H -2.802488 -0.402555 4.150168
 H -0.935805 -1.988485 4.597547
 N -1.740746 -0.070180 -0.292361
 S 0.411677 -2.198143 -0.074832
 O 1.619535 -2.839920 0.488000
 O -0.473710 -3.031171 -0.885443
 C 0.894965 -0.781357 -0.931811
 C -3.024837 0.452212 -0.623613
 C -4.090972 -0.427070 -0.818150
 C -3.219423 1.825551 -0.766648
 C -5.343238 0.068441 -1.154867
 H -3.914950 -1.495467 -0.710156
 C -4.473591 2.313257 -1.121128
 H -2.382774 2.497541 -0.582811
 C -5.537071 1.438886 -1.312631

H -6.171681 -0.620656 -1.308039
 H -4.620178 3.385618 -1.235619
 H -6.518209 1.823203 -1.584292
 P 2.513703 -0.804162 -1.517935
 C 3.764568 -0.601261 -0.238333
 H 4.770621 -0.747907 -0.647101
 H 3.669188 0.403469 0.186844
 H 3.550654 -1.347743 0.533044
 C 2.736649 0.546059 -2.694572
 H 2.593759 1.499649 -2.175586
 H 3.751615 0.507261 -3.104386
 H 2.003710 0.457359 -3.503060
 C 2.887022 -2.343815 -2.388821
 H 2.735060 -3.163609 -1.678533
 H 2.182501 -2.458421 -3.218851
 H 3.918325 -2.348716 -2.758691
 Si -0.375074 0.425455 -1.282964
 H -0.002919 1.988944 -1.484224
 O 0.124858 2.259439 -0.204761
 C 1.296276 2.354634 0.439502
 C 1.482730 1.636140 1.630412
 C 2.341136 3.155094 -0.040117
 C 2.669575 1.753507 2.339183
 H 0.671327 1.005465 1.988935
 C 3.534314 3.250458 0.670056
 H 2.188758 3.723455 -0.956532
 C 3.705415 2.557796 1.864938
 H 2.790763 1.200941 3.269408
 H 4.333354 3.884968 0.289503
 H 4.635455 2.644136 2.422442

VII^{Si}

E = -2927.12149679
 C -2.212332 -1.385316 -0.593920
 C -2.925724 -0.637609 0.354523
 C -4.260892 -0.927132 0.616943
 C -4.902726 -1.957645 -0.059584

C -4.202534 -2.702431 -0.997968
 C -2.867994 -2.414117 -1.262723
 H -4.783307 -0.326554 1.357062
 H -5.947066 -2.175692 0.153125
 H -4.693284 -3.511918 -1.534667
 H -2.304006 -2.983460 -1.997795
 S -0.500343 -1.099268 -1.163262
 S -2.216933 0.706480 1.331255
 O -0.131359 -2.352439 -1.856678
 O -0.607421 0.096225 -2.012138
 O -1.238119 -0.032870 2.294821
 O -3.358729 1.392424 1.927102
 C 0.505872 -0.923086 0.185711
 C -1.047955 1.545269 0.544634
 P -1.294605 2.790274 -0.603933
 P 1.577034 -2.246651 0.471507
 C 0.211663 3.046193 -1.535036
 H 0.141764 3.961071 -2.132255
 H 1.039020 3.095343 -0.810359
 H 0.357630 2.163162 -2.165093
 C -2.685943 2.411661 -1.691475
 H -3.571861 2.240044 -1.067422
 H -2.881476 3.237647 -2.383738
 H -2.433130 1.496648 -2.236257
 C -1.726819 4.336303 0.232302
 H -0.877668 4.644795 0.851239
 H -1.979373 5.130182 -0.479741
 H -2.580083 4.128554 0.888340
 C 2.401972 -1.980316 2.053729
 H 3.061406 -2.830674 2.259084
 H 2.995211 -1.062297 2.001820
 H 1.654899 -1.890810 2.849992
 C 0.758065 -3.855507 0.635649
 H 0.255241 -4.086126 -0.306674
 H 1.494500 -4.631481 0.873340
 H 0.017456 -3.788128 1.439833
 C 2.866788 -2.425707 -0.772243

H 3.509469 -3.287064 -0.558781
H 2.368860 -2.548699 -1.739218
H 3.459081 -1.503174 -0.779268
Si 0.309085 0.516090 1.309546
H 1.637154 1.391708 1.592341
O 2.365156 2.151869 0.686114
C 3.415375 1.498885 0.255146
C 4.336600 0.902204 1.146745
C 3.680836 1.349788 -1.126365
C 5.453416 0.214748 0.683953
H 4.168459 1.033082 2.215475
C 4.807834 0.678993 -1.576497
H 2.980563 1.786158 -1.835652
C 5.705639 0.096924 -0.680012
H 6.146651 -0.221568 1.403217
H 4.985929 0.598790 -2.648642
H 6.587679 -0.428833 -1.039280

VIII^{Si}

E = -2135.08344927
C 0.304493 -0.269213 3.023089
C -0.406830 -0.490015 1.856755
C -1.294529 0.405806 1.256554
C -1.442701 1.640475 1.889048
C -0.750095 1.904590 3.069240
C 0.106270 0.961548 3.643783
H 0.976215 -1.021819 3.432283
H -2.112226 2.389920 1.470193
H -0.882637 2.866131 3.562178
H 0.621398 1.190811 4.574218
B -1.910026 -0.230235 -0.089100
S -0.216468 -1.809690 0.705876
O 0.252023 -3.078507 1.260388
O -1.679768 -1.768394 0.177475
C 0.683662 -1.203626 -0.604426
Si -0.372366 0.022410 -1.492286
C -3.392736 0.098680 -0.506099

C -4.418791 -0.848004 -0.422697
 C -3.728621 1.384917 -0.950145
 C -5.728424 -0.524684 -0.764565
 H -4.181377 -1.855663 -0.083534
 C -5.036182 1.717210 -1.285228
 H -2.944536 2.138414 -1.047790
 C -6.043204 0.760464 -1.193532
 H -6.509860 -1.280263 -0.693468
 H -5.270833 2.724404 -1.627078
 H -7.067703 1.015251 -1.459906
 P 2.262100 -1.850752 -0.814953
 C 3.226300 -1.894295 0.714901
 H 4.227801 -2.297595 0.528575
 H 3.300679 -0.872962 1.102229
 H 2.699023 -2.528889 1.435005
 C 3.174525 -0.853122 -2.000650
 H 3.441798 0.102862 -1.537207
 H 4.081272 -1.385079 -2.308586
 H 2.537589 -0.660428 -2.870942
 C 2.230447 -3.556701 -1.417954
 H 1.632110 -4.133600 -0.703679
 H 1.733990 -3.577187 -2.393800
 H 3.237841 -3.980419 -1.498274
 C 3.956652 2.849680 -1.311406
 C 4.407825 2.436832 -0.059990
 C 3.495477 1.902418 0.848043
 C 2.156381 1.756096 0.507305
 C 1.703816 2.164264 -0.753305
 C 2.617368 2.718934 -1.659191
 H 4.655491 3.281382 -2.026143
 H 5.455737 2.545987 0.210915
 H 3.829546 1.597567 1.839412
 H 1.434549 1.344729 1.206928
 H 2.257146 3.046328 -2.632556
 O 0.418153 1.994071 -1.099907
 H 0.292326 1.352995 -2.192007

IX^{Si}

E = -1585.85963685
 C 0.963045 2.813971 0.812981
 C -1.106541 1.663873 0.260137
 C -1.793755 2.585848 1.059844
 C -1.133704 3.600467 1.742798
 C 0.250018 3.693416 1.620521
 H 2.042203 2.940359 0.742013
 H -2.877599 2.509080 1.136750
 H -1.683032 4.306623 2.361413
 H 0.788716 4.474008 2.156996
 B -1.743386 0.502097 -0.527675
 C -3.160302 -0.093536 -0.390004
 C -3.885958 -0.060359 0.815334
 C -3.762984 -0.732129 -1.488612
 C -5.152876 -0.619710 0.912253
 H -3.433418 0.388509 1.697752
 C -5.041968 -1.265580 -1.407664
 H -3.207507 -0.805009 -2.423352
 C -5.738486 -1.212118 -0.203657
 H -5.688865 -0.595635 1.859524
 H -5.491928 -1.741653 -2.277078
 H -6.734895 -1.645072 -0.130638
 C 0.313197 1.793318 0.099247
 C 0.955782 0.850020 -0.816835
 P 2.647597 0.805569 -1.092272
 C 3.344791 2.326642 -1.816823
 H 3.116103 3.186092 -1.179397
 H 4.430579 2.245131 -1.941765
 H 2.870616 2.488331 -2.790685
 C 3.657046 0.459520 0.373911
 H 4.725816 0.539110 0.144703
 H 3.399663 1.153974 1.179587
 H 3.419540 -0.555976 0.709397
 C 3.077213 -0.496210 -2.267126
 H 4.150708 -0.452485 -2.481179
 H 2.825299 -1.466631 -1.827931

H 2.500938 -0.365398 -3.188474
 Si -0.215214 -0.252816 -1.649818
 H 0.195098 -1.839066 -1.731539
 O -0.115536 -2.201972 -0.532078
 C 0.849945 -2.301582 0.384799
 C 1.943305 -3.161496 0.202859
 C 0.775560 -1.549335 1.568383
 C 2.904053 -3.300435 1.199615
 H 1.999597 -3.746265 -0.714067
 C 1.729264 -1.707490 2.563291
 H -0.054487 -0.854923 1.687818
 C 2.800417 -2.583692 2.388703
 H 3.735768 -3.987326 1.049234
 H 1.641599 -1.131338 3.483171
 H 3.547381 -2.703669 3.170553

3.11.1.2 Reaktionspfad B

V^{Si}

E = -1615.86250014
 C 2.102173 0.788462 -2.151222
 C 0.053680 1.112282 -0.906400
 C -0.543450 1.655429 -2.043716
 C 0.184792 1.765506 -3.225358
 C 1.505479 1.338875 -3.284735
 H 3.135682 0.447683 -2.212082
 H -1.570931 2.006299 -1.999787
 H -0.289030 2.197380 -4.104946
 H 2.073200 1.428185 -4.208576
 N -0.532210 1.010845 0.355131
 C -1.899739 1.314049 0.559845
 C -2.268642 2.244094 1.533416
 C -2.898023 0.655579 -0.164871
 C -3.611232 2.504729 1.784974
 H -1.488229 2.756790 2.092303
 C -4.236052 0.931416 0.079328
 H -2.611197 -0.090448 -0.903107

C -4.600383 1.854568 1.056160
 H -3.883406 3.228347 2.551398
 H -5.000893 0.404317 -0.488381
 H -5.650822 2.062828 1.249889
 C 1.395536 0.663168 -0.955888
 P 3.499290 -0.091204 0.733459
 C 4.400833 -1.338573 -0.232672
 H 4.402845 -1.070083 -1.293269
 H 5.434627 -1.431526 0.119308
 H 3.885387 -2.298504 -0.119829
 C 4.464302 1.435169 0.574114
 H 5.526159 1.270490 0.787428
 H 4.346768 1.815106 -0.447037
 H 4.054925 2.178694 1.266080
 C 3.631151 -0.647158 2.446485
 H 4.675389 -0.849665 2.706475
 H 3.217403 0.117467 3.112181
 H 3.033690 -1.559116 2.561450
 C 1.839852 0.073595 0.320612
 H 1.193884 -1.141537 0.466586
 Si 0.467114 0.336064 1.685459
 O 0.288734 -1.749674 1.041552
 C -0.766131 -2.162999 0.314573
 C -1.956597 -2.513869 0.959778
 C -0.704802 -2.223789 -1.082679
 C -3.061508 -2.911572 0.219506
 H -1.995464 -2.455606 2.045170
 C -1.815517 -2.628558 -1.813715
 H 0.216148 -1.937385 -1.588052
 C -3.001272 -2.972197 -1.170660
 H -3.983969 -3.172867 0.735673
 H -1.752623 -2.666355 -2.900103
 H -3.869581 -3.285093 -1.746672

V^{Si}

E = -2165.06210801

C 0.124938 1.501972 2.614273

C 0.162001 0.487959 1.663245
 C -0.974248 0.082205 0.950050
 C -2.184222 0.719723 1.262695
 C -2.231570 1.719605 2.218671
 C -1.079621 2.127142 2.893615
 H 1.049889 1.768969 3.120917
 H -3.079789 0.433936 0.716250
 H -3.181593 2.208675 2.425600
 H -1.126079 2.921328 3.635142
 N -0.899002 -0.868313 -0.074967
 S 1.665093 -0.393471 1.404095
 O 2.766643 0.322900 2.080808
 O 1.468515 -1.795846 1.784781
 C -1.975445 -1.791891 -0.146933
 C -2.295167 -2.551161 0.983461
 C -2.701714 -1.980080 -1.322948
 C -3.335594 -3.467223 0.938035
 H -1.697032 -2.418302 1.882996
 C -3.731512 -2.914548 -1.367869
 H -2.454409 -1.387572 -2.200959
 C -4.058059 -3.655352 -0.238383
 H -3.574479 -4.052658 1.824160
 H -4.289455 -3.052842 -2.292226
 H -4.869527 -4.379436 -0.273410
 C 1.851885 -0.250372 -0.316678
 Si 0.352985 -0.974339 -1.371101
 O 0.380678 1.093820 -1.720822
 C -0.623049 1.974513 -1.492756
 C -0.416521 3.074595 -0.659458
 C -1.876716 1.759842 -2.065159
 C -1.466425 3.942521 -0.390666
 H 0.562202 3.223102 -0.206964
 C -2.920513 2.632643 -1.784509
 H -2.018086 0.903092 -2.720272
 C -2.724333 3.724980 -0.944778
 H -1.300118 4.791395 0.270106
 H -3.898876 2.454556 -2.227607

H -3.545715 4.403846 -0.726239
H 1.223385 0.895095 -0.919987
P 3.505282 -0.480861 -0.793307
C 3.558179 -0.748295 -2.576539
H 4.596041 -0.798890 -2.922383
H 3.031791 -1.676753 -2.821913
H 3.040354 0.081945 -3.070812
C 4.267149 -1.895573 0.030722
H 5.302395 -2.042534 -0.296096
H 4.230818 -1.701630 1.108898
H 3.666235 -2.787096 -0.176198
C 4.528965 0.960099 -0.429487
H 4.160643 1.810340 -1.013309
H 4.403748 1.172472 0.637589
H 5.581039 0.769523 -0.668761

VII^{Si}

E = -2927.12121346
C 2.796486 -0.282000 0.142728
C 2.378161 0.600033 -0.854888
C 3.322577 1.169586 -1.708321
C 4.672815 0.878134 -1.564669
C 5.090275 0.010730 -0.563088
C 4.153663 -0.561814 0.287226
H 2.973083 1.850864 -2.480065
H 5.396049 1.331068 -2.239826
H 6.146202 -0.221999 -0.439920
H 4.448429 -1.248818 1.076642
S 1.708484 -1.050468 1.378193
S 0.665033 1.013780 -1.303077
O 2.512458 -2.187014 1.858821
O 1.407335 0.067016 2.315143
O 0.172362 -0.127119 -2.083264
O 0.809557 2.306773 -2.007791
C 0.254097 -1.482534 0.697568
P -0.064212 2.856074 0.789701
P 0.199218 -2.893394 -0.259451

C -0.762608 2.887240 2.450897
 H -0.622127 3.885308 2.881147
 H -1.826366 2.632286 2.421186
 H -0.241108 2.131706 3.050401
 C 1.691807 3.223612 0.997978
 H 2.158184 3.305495 0.011520
 H 1.819965 4.158373 1.554659
 H 2.129768 2.383482 1.551072
 C -0.802983 4.216295 -0.141915
 H -1.887455 4.065872 -0.179077
 H -0.576641 5.183957 0.319828
 H -0.397082 4.163853 -1.157011
 C -1.304632 -2.946476 -1.244601
 H -1.307207 -3.854648 -1.856864
 H -2.179492 -2.940170 -0.586340
 H -1.325635 -2.044991 -1.864683
 C 1.597542 -3.014545 -1.402210
 H 2.520556 -3.024950 -0.811351
 H 1.532477 -3.929977 -2.000769
 H 1.576867 -2.128361 -2.044658
 C 0.270913 -4.412531 0.728605
 H 0.333652 -5.311816 0.104964
 H 1.157452 -4.323125 1.366976
 H -0.616175 -4.460770 1.369034
 C -0.335281 1.286676 0.078220
 H -1.562757 0.762485 -0.457571
 Si -0.984612 -0.162574 1.284589
 O -2.209210 -0.228641 -0.349695
 C -3.558851 -0.191665 -0.311802
 C -4.258826 0.626763 -1.200512
 C -4.258410 -0.986787 0.597978
 C -5.648076 0.640915 -1.177752
 H -3.700230 1.231294 -1.912424
 C -5.647614 -0.967498 0.606608
 H -3.698721 -1.601172 1.301128
 C -6.350641 -0.154999 -0.277872
 H -6.186942 1.278949 -1.876273

H -6.185757 -1.591700 1.318003
H -7.438292 -0.142563 -0.266376

VIII^{Si}

E = -2135.09967690
C -2.991658 2.385509 -0.944619
C -1.816157 1.680410 -0.740786
C -0.717003 2.114022 0.007889
C -0.859546 3.357735 0.632647
C -2.025995 4.096008 0.459248
C -3.084356 3.627995 -0.327471
H -3.788469 1.991065 -1.573334
H -0.044537 3.757294 1.234883
H -2.114976 5.071955 0.934093
H -3.974085 4.239272 -0.462620
B 0.425852 0.997937 0.015447
S -1.438356 0.045536 -1.260373
O -2.134087 -0.396818 -2.463654
O 0.095710 0.219408 -1.340987
C -1.550580 -0.986193 0.110644
Si -0.285974 -0.316013 1.543291
C 1.955458 1.364280 0.090966
C 2.826292 1.139960 -0.981530
C 2.502545 1.896561 1.267382
C 4.182436 1.430555 -0.883931
H 2.432385 0.710876 -1.901613
C 3.856546 2.194221 1.370046
H 1.856091 2.058331 2.132260
C 4.705361 1.958669 0.292211
H 4.838999 1.234465 -1.730709
H 4.254566 2.603276 2.297994
H 5.768203 2.181917 0.370788
P -3.074581 -1.678046 0.545766
C -4.213654 -0.486200 1.287061
H -5.144939 -0.967558 1.605436
H -3.707578 -0.034674 2.148404
H -4.435058 0.305414 0.562863

C -2.749730 -2.943808 1.785186
 H -2.272579 -2.459540 2.645158
 H -3.680888 -3.435777 2.086252
 H -2.049633 -3.675381 1.368168
 C -3.935170 -2.454473 -0.840466
 H -4.084218 -1.708848 -1.627905
 H -3.297846 -3.247557 -1.245242
 H -4.895308 -2.872692 -0.519019
 C 2.923983 -1.718883 1.117843
 C 1.843170 -2.019515 0.289901
 C 2.056283 -2.377930 -1.038717
 C 3.354260 -2.439037 -1.532876
 C 4.437218 -2.139623 -0.714393
 C 4.214069 -1.774555 0.610463
 H 2.736995 -1.421135 2.147609
 H 1.201734 -2.582618 -1.680159
 H 3.516327 -2.714306 -2.573647
 H 5.450190 -2.178080 -1.109058
 H 5.052655 -1.518916 1.255152
 O 0.579787 -1.958521 0.793029
 H -0.425161 -1.806962 0.123141

IX^{Si}

E = -1585.87884112
 C 0.057744 3.336027 -0.668867
 C 1.650480 1.573941 -0.150737
 C 2.678857 2.414313 -0.601280
 C 2.421038 3.693753 -1.072954
 C 1.101393 4.142362 -1.104760
 H -0.955027 3.732734 -0.720577
 H 3.707125 2.056973 -0.550953
 H 3.230400 4.341164 -1.403937
 H 0.879780 5.143119 -1.474565
 B 1.815876 0.158404 0.439529
 C 3.064651 -0.747360 0.299247
 C 3.884267 -0.725308 -0.844692
 C 3.397061 -1.667117 1.310126

C 4.979186 -1.570603 -0.969021
 H 3.639169 -0.045446 -1.659627
 C 4.509139 -2.492742 1.206246
 H 2.765588 -1.724755 2.196675
 C 5.301185 -2.448846 0.062448
 H 5.588614 -1.544466 -1.871081
 H 4.752832 -3.184457 2.011064
 H 6.165087 -3.105323 -0.029349
 C 0.299927 2.038415 -0.183731
 C -0.712913 1.088455 0.303973
 P -2.321998 1.610089 0.657056
 C -2.434192 3.022490 1.800498
 H -1.834106 3.854986 1.419859
 H -3.470946 3.348355 1.940467
 H -2.013338 2.708201 2.761934
 C -3.312664 2.075843 -0.797250
 H -2.822283 2.871127 -1.365743
 H -3.395167 1.190300 -1.437022
 H -4.314521 2.404521 -0.498358
 C -3.286521 0.298337 1.439376
 H -4.277024 0.687610 1.700760
 H -3.393741 -0.547705 0.751943
 H -2.760947 -0.048903 2.335132
 Si 0.059750 -0.362138 1.363192
 O -0.436638 -1.302302 -0.459828
 C -1.550881 -2.058318 -0.613080
 C -2.419130 -1.787123 -1.673221
 C -1.860875 -3.063853 0.302081
 C -3.597825 -2.513316 -1.805863
 H -2.148521 -1.014911 -2.391397
 C -3.036646 -3.788671 0.152737
 H -1.178895 -3.247877 1.129206
 C -3.914300 -3.514956 -0.893729
 H -4.270593 -2.296595 -2.633981
 H -3.273880 -4.572882 0.869566
 H -4.835273 -4.083859 -1.000538
 H -0.691014 -0.211247 -0.524310

3.11.1.3 Reaktionspfad C

VIII^{Si}

E = -2135.06325820

C 1.747035 -1.625770 2.552564

C 1.181991 -1.106413 1.393520

C -0.139779 -0.638741 1.316108

C -0.860060 -0.674153 2.516600

C -0.316872 -1.181647 3.692866

C 0.984138 -1.671378 3.712913

H 2.777182 -1.973370 2.532317

H -1.877736 -0.287427 2.529405

H -0.916360 -1.193976 4.601746

H 1.410011 -2.074954 4.629441

B -0.788630 -0.066817 -0.040697

S 2.249591 -1.067697 -0.047047

O 3.634694 -1.314098 0.421655

O 1.693228 -1.956390 -1.060817

C 2.216434 0.605003 -0.608587

Si 0.561807 1.169971 -0.895231

C -1.574807 -1.061189 -0.994020

C -1.487791 -2.450480 -0.850052

C -2.373081 -0.572426 -2.039671

C -2.167733 -3.312251 -1.704517

H -0.861465 -2.864379 -0.061146

C -3.061821 -1.425506 -2.892880

H -2.466369 0.505660 -2.183677

C -2.962173 -2.803919 -2.726673

H -2.076898 -4.389281 -1.570719

H -3.678443 -1.015029 -3.691407

H -3.498954 -3.477491 -3.392807

P 3.758818 1.388071 -0.669460

C 4.526568 1.604316 0.951237

H 5.501559 2.095441 0.858730

H 3.860264 2.204992 1.578965

H 4.638459 0.607188 1.387835

C 3.517208 3.034975 -1.368198

H 2.802501 3.589029 -0.750239

H 4.471158 3.572024 -1.403123
H 3.108522 2.942953 -2.379807
C 4.952182 0.528028 -1.716208
H 5.069004 -0.480356 -1.306023
H 4.545047 0.459978 -2.730337
H 5.913917 1.052744 -1.729289
C -2.949462 1.476770 0.404260
C -3.436660 2.771033 0.233539
C -4.796023 3.019554 0.373876
C -5.673684 1.985574 0.682799
C -5.176613 0.697298 0.849661
C -3.819745 0.431730 0.710484
H -2.741677 3.573456 -0.006669
H -5.169931 4.032956 0.239660
H -6.738018 2.182133 0.790421
H -5.852886 -0.122108 1.085737
H -3.433491 -0.577424 0.819837
O -1.606485 1.265739 0.283768
H -0.830268 2.109359 -0.412062

IX^{Si}

E = -1585.85623114
C -1.285923 2.324730 1.334845
C 0.706043 1.092425 0.667796
C 1.343642 1.571651 1.812759
C 0.681057 2.387445 2.727899
C -0.639673 2.754136 2.489079
H -2.302611 2.669142 1.144028
H 2.376512 1.277739 2.001602
H 1.190005 2.732009 3.626521
H -1.164506 3.398163 3.193244
B 1.388688 0.157737 -0.421579
C 2.951985 -0.009921 -0.495683
C 3.770334 1.131157 -0.467368
C 3.597535 -1.249662 -0.594409
C 5.154910 1.041372 -0.534296
H 3.304611 2.114542 -0.393018

C 4.983925 -1.348816 -0.663248
 H 2.999517 -2.159490 -0.615485
 C 5.771237 -0.203376 -0.633248
 H 5.758974 1.947623 -0.510403
 H 5.453073 -2.329221 -0.738280
 H 6.856181 -0.278221 -0.686174
 C -0.626545 1.507111 0.405770
 C -1.175037 1.021198 -0.869659
 P -2.870597 0.791205 -1.070727
 C -3.648185 0.016817 0.371551
 H -3.505013 0.655150 1.248448
 H -4.718503 -0.144258 0.201439
 H -3.147290 -0.939069 0.558735
 C -3.837905 2.301654 -1.389063
 H -4.903224 2.074021 -1.511203
 H -3.709230 3.004692 -0.560005
 H -3.452555 2.771722 -2.300180
 C -3.226879 -0.282703 -2.478286
 H -4.308970 -0.345598 -2.637394
 H -2.739189 0.116822 -3.373746
 H -2.812833 -1.275012 -2.276030
 Si 0.072993 0.407310 -2.029038
 H 0.207517 -1.319028 -1.659941
 C -0.245910 -1.658551 1.655678
 C -1.184295 -2.311840 2.448151
 C -2.096131 -3.204108 1.893084
 C -2.062252 -3.452325 0.523797
 C -1.135614 -2.801502 -0.281298
 C -0.227247 -1.909064 0.288427
 H 0.468941 -0.968274 2.089130
 H -1.193970 -2.118640 3.518954
 H -2.822662 -3.710406 2.524809
 H -2.758177 -4.159380 0.076167
 H -1.090275 -2.993196 -1.352277
 O 0.711606 -1.335987 -0.533410

3.11.2 Bei Germylenen

3.11.2.1 Reaktionspfad A

V^{Ge}

E = -3923.37045268

C -0.618646 2.899490 1.087704

C 1.251573 1.495710 0.450868

C 2.080385 2.237802 1.294681

C 1.556962 3.282626 2.045540

C 0.206439 3.609731 1.949206

H -1.669860 3.178030 1.016347

H 3.136552 1.989896 1.363304

H 2.210708 3.845816 2.708424

H -0.204222 4.424876 2.541567

N 1.674017 0.436505 -0.347056

C 2.936354 -0.177029 -0.233850

C 3.398532 -0.645970 0.999925

C 3.717703 -0.377009 -1.372783

C 4.625195 -1.288747 1.086810

H 2.777143 -0.512134 1.882715

C 4.937693 -1.037301 -1.282359

H 3.357810 -0.002122 -2.329480

C 5.400287 -1.489619 -0.052345

H 4.971544 -1.652229 2.052586

H 5.534016 -1.189156 -2.180154

H 6.358268 -2.000311 0.019736

C -0.126521 1.836154 0.317788

C -0.855471 1.025348 -0.637361

P -2.530666 1.108282 -0.971578

C -3.588721 0.797943 0.459555

H -3.293123 1.457678 1.281719

H -4.643359 0.962769 0.211808

H -3.430681 -0.239300 0.777525

C -3.071901 2.700094 -1.663314

H -4.153673 2.708332 -1.838277

H -2.809163 3.508208 -0.973128

H -2.540005 2.868241 -2.605571

C -2.972876 -0.139275 -2.198366
 H -4.034555 -0.051078 -2.451125
 H -2.367883 -0.001029 -3.100818
 H -2.781783 -1.130876 -1.772332
 Ge 0.294352 -0.227130 -1.379027
 H 0.029682 -1.749083 -1.735398
 O -0.022285 -2.305879 -0.326032
 C -1.085379 -2.351444 0.445273
 C -1.087735 -1.686381 1.692441
 C -2.259951 -3.041318 0.077431
 C -2.175191 -1.771831 2.547805
 H -0.196795 -1.123742 1.968971
 C -3.353227 -3.102997 0.935359
 H -2.271395 -3.560948 -0.880186
 C -3.320827 -2.479955 2.180604
 H -2.134751 -1.268128 3.513076
 H -4.239177 -3.659626 0.630761
 H -4.172494 -2.544792 2.854427

V^{Ge}

E = -3953.26932526
 C -1.173093 2.235282 2.366952
 C -0.847974 1.732418 1.111604
 C 0.480027 1.451420 0.746719
 C 1.475865 1.734379 1.693425
 C 1.151544 2.250593 2.938467
 C -0.173535 2.493542 3.292190
 H -2.221152 2.430547 2.583250
 H 2.511703 1.518938 1.446697
 H 1.950503 2.452696 3.649624
 H -0.422368 2.892855 4.272565
 N 0.806188 0.852841 -0.475807
 S -2.144981 1.595736 -0.089237
 O -3.426017 1.651181 0.645193
 O -1.870676 2.598451 -1.114374
 C -1.972127 0.013663 -0.736862
 C 2.126091 1.059486 -0.982837

C 2.400443 2.246042 -1.664067
 C 3.128585 0.105460 -0.811616
 C 3.671009 2.474847 -2.175619
 H 1.600378 2.973959 -1.784533
 C 4.397263 0.339143 -1.333911
 H 2.919265 -0.806552 -0.256748
 C 4.671596 1.519979 -2.014214
 H 3.879425 3.400486 -2.708774
 H 5.175560 -0.409251 -1.198108
 H 5.665919 1.698650 -2.418868
 P -3.232690 -1.122615 -0.450312
 C -3.361376 -1.573368 1.294009
 H -4.201510 -2.251778 1.479213
 H -2.417574 -2.049066 1.583748
 H -3.494837 -0.642114 1.855113
 C -2.900406 -2.631854 -1.377429
 H -1.931518 -3.036843 -1.060765
 H -3.697271 -3.357587 -1.182334
 H -2.874674 -2.399010 -2.447493
 C -4.856617 -0.529055 -0.971872
 H -5.058068 0.404359 -0.437766
 H -4.825436 -0.328791 -2.047944
 H -5.626181 -1.277430 -0.751562
 Ge -0.259705 -0.374233 -1.356429
 O 0.057958 -2.515400 -0.445484
 H 0.363601 -1.808935 -1.703204
 C 1.068205 -2.577147 0.421566
 C 2.193181 -3.379262 0.171648
 C 1.056945 -1.786274 1.582841
 C 3.275191 -3.366278 1.042639
 H 2.201356 -3.993362 -0.726794
 C 2.144268 -1.776721 2.445352
 H 0.189187 -1.155805 1.775814
 C 3.264771 -2.560556 2.179392
 H 4.143307 -3.987476 0.826376
 H 2.118643 -1.137550 3.326619
 H 4.119756 -2.546199 2.851769

VII^{Ge}

E = -4715.35079920

C -1.945667 -1.540760 -0.751048

C -2.804657 -0.872714 0.133009

C -4.130529 -1.280453 0.250044

C -4.616780 -2.340638 -0.505083

C -3.770229 -3.002519 -1.382737

C -2.445408 -2.600005 -1.504754

H -4.771555 -0.740863 0.942533

H -5.656019 -2.645808 -0.401815

H -4.136852 -3.833519 -1.982031

H -1.767619 -3.101784 -2.190755

S -0.219694 -1.107894 -1.156170

S -2.323724 0.480932 1.239334

O 0.304832 -2.325605 -1.813184

O -0.335732 0.096128 -1.993123

O -1.493819 -0.191394 2.307725

O -3.595653 1.106418 1.615098

C 0.671194 -0.873986 0.261653

C -1.193450 1.476707 0.548205

P -1.606082 2.661656 -0.613850

P 1.715859 -2.165403 0.711214

C -0.156697 3.189504 -1.528721

H -0.369542 4.119705 -2.065499

H 0.676550 3.313849 -0.825371

H 0.099533 2.383734 -2.222625

C -2.855067 2.040262 -1.763081

H -3.728341 1.724484 -1.179607

H -3.150557 2.816102 -2.477778

H -2.420689 1.177928 -2.280334

C -2.352032 4.110083 0.176727

H -1.604604 4.583590 0.822023

H -2.727130 4.833229 -0.556450

H -3.171657 3.740203 0.803950

C 2.453026 -1.751173 2.307309

H 3.098806 -2.574156 2.631788

H 3.052015 -0.840874 2.194687
H 1.667380 -1.580607 3.051113
C 0.855879 -3.742523 0.940923
H 0.407890 -4.019357 -0.018142
H 1.549611 -4.523807 1.270900
H 0.064541 -3.600668 1.684787
C 3.096235 -2.468080 -0.405664
H 3.680057 -3.334692 -0.074876
H 2.682708 -2.639457 -1.403504
H 3.724652 -1.570637 -0.423090
H 1.656755 1.572927 1.750893
O 2.104176 2.143079 0.508961
C 3.145979 1.539171 -0.040624
C 3.114026 1.121916 -1.386947
C 4.320044 1.287272 0.694469
C 4.231417 0.556556 -1.981716
H 2.188114 1.241826 -1.943965
C 5.428284 0.698293 0.092782
H 4.354865 1.604887 1.736079
C 5.401589 0.341278 -1.251930
H 4.183390 0.261028 -3.029113
H 6.329660 0.531513 0.681747
H 6.274641 -0.104369 -1.723919
Ge 0.384627 0.682345 1.313018

VIII^{Ge}

E = -3923.34222498
C -0.357842 0.211277 3.102034
C 0.377206 0.444507 1.953312
C 1.276583 -0.447444 1.365794
C 1.409553 -1.689378 1.986815
C 0.689366 -1.966432 3.147270
C -0.176688 -1.027412 3.712460
H -1.035291 0.960292 3.508008
H 2.088640 -2.434847 1.576773
H 0.808217 -2.934125 3.631289
H -0.713832 -1.265691 4.628030

B 1.941422 0.211029 0.059765
 S 0.206530 1.785890 0.819075
 O -0.225346 3.052343 1.406694
 O 1.681086 1.725041 0.300145
 C -0.697591 1.236939 -0.497210
 C 3.426848 -0.107667 -0.345997
 C 4.435717 0.858076 -0.266420
 C 3.787732 -1.392516 -0.774340
 C 5.752933 0.554011 -0.596328
 H 4.178785 1.864711 0.061188
 C 5.102519 -1.704814 -1.098848
 H 3.019063 -2.161686 -0.868967
 C 6.092088 -0.729623 -1.010695
 H 6.520676 1.323593 -0.527690
 H 5.356737 -2.710956 -1.429222
 H 7.122423 -0.969210 -1.268321
 P -2.274029 1.892168 -0.679502
 C -3.230066 1.916875 0.856054
 H -4.229600 2.329576 0.679874
 H -3.310535 0.889331 1.225126
 H -2.696446 2.536975 1.584008
 C -3.208093 0.927716 -1.874984
 H -3.468411 -0.039953 -1.432234
 H -4.119753 1.469218 -2.150012
 H -2.591156 0.758618 -2.763959
 C -2.235971 3.610051 -1.249537
 H -1.628226 4.168921 -0.528859
 H -1.747624 3.647841 -2.228911
 H -3.241335 4.041510 -1.312897
 C -4.157451 -2.720778 -1.195877
 C -4.537101 -2.298976 0.077023
 C -3.559077 -1.832139 0.953463
 C -2.228254 -1.758712 0.561504
 C -1.841031 -2.172204 -0.723220
 C -2.828221 -2.662000 -1.595035
 H -4.907461 -3.102216 -1.887366
 H -5.578317 -2.351219 0.387853

H -3.835170 -1.523953 1.961895
H -1.458055 -1.403291 1.240236
H -2.525447 -2.995084 -2.586012
O -0.573118 -2.078227 -1.116982
H -0.407886 -1.275790 -2.215565
Ge 0.396216 -0.060121 -1.441813

***IX*^{Ge}**

E = -1585.86013565
C 0.963045 2.813971 0.812981
C -1.106541 1.663873 0.260137
C -1.793755 2.585848 1.059844
C -1.133704 3.600467 1.742798
C 0.250018 3.693416 1.620521
H 2.042203 2.940359 0.742013
H -2.877599 2.509080 1.136750
H -1.683032 4.306623 2.361413
H 0.788716 4.474008 2.156996
B -1.743386 0.502097 -0.527675
C -3.160302 -0.093536 -0.390004
C -3.885958 -0.060359 0.815334
C -3.762984 -0.732129 -1.488612
C -5.152876 -0.619710 0.912253
H -3.433418 0.388509 1.697752
C -5.041968 -1.265580 -1.407664
H -3.207507 -0.805009 -2.423352
C -5.738486 -1.212118 -0.203657
H -5.688865 -0.595635 1.859524
H -5.491928 -1.741653 -2.277078
H -6.734895 -1.645072 -0.130638
C 0.313197 1.793318 0.099247
C 0.955782 0.850020 -0.816835
P 2.647597 0.805569 -1.092272
C 3.344791 2.326642 -1.816823
H 3.116103 3.186092 -1.179397
H 4.430579 2.245131 -1.941765
H 2.870616 2.488331 -2.790685

C 3.657046 0.459520 0.373911
 H 4.725816 0.539110 0.144703
 H 3.399663 1.153974 1.179587
 H 3.419540 -0.555976 0.709397
 C 3.077213 -0.496210 -2.267126
 H 4.150708 -0.452485 -2.481179
 H 2.825299 -1.466631 -1.827931
 H 2.500938 -0.365398 -3.188474
 Si -0.215214 -0.252816 -1.649818
 H 0.195098 -1.839066 -1.731539
 O -0.115536 -2.201972 -0.532078
 C 0.849945 -2.301582 0.384799
 C 1.943305 -3.161496 0.202859
 C 0.775560 -1.549335 1.568383
 C 2.904053 -3.300435 1.199615
 H 1.999597 -3.746265 -0.714067
 C 1.729264 -1.707490 2.563291
 H -0.054487 -0.854923 1.687818
 C 2.800417 -2.583692 2.388703
 H 3.735768 -3.987326 1.049234
 H 1.641599 -1.131338 3.483171
 H 3.547381 -2.703669 3.170553

3.11.2.2 Reaktionspfad B

V^{Ge}

E = -3404.11420025
 C 2.012563 0.717706 -2.347620
 C -0.033283 1.072748 -1.105091
 C -0.649179 1.520385 -2.276243
 C 0.064885 1.568862 -3.469008
 C 1.396903 1.175618 -3.510604
 H 3.054662 0.401817 -2.394725
 H -1.684942 1.848017 -2.246047
 H -0.427147 1.928154 -4.370989
 H 1.957608 1.219067 -4.441956
 N -0.624381 1.062477 0.152470

C -2.003440 1.306730 0.329404
 C -2.427482 2.296677 1.218802
 C -2.963197 0.531348 -0.330433
 C -3.783014 2.500410 1.453748
 H -1.679062 2.905567 1.722847
 C -4.314521 0.749580 -0.103939
 H -2.633393 -0.258175 -1.002232
 C -4.732584 1.732168 0.790392
 H -4.096834 3.272536 2.154117
 H -5.047080 0.130464 -0.618976
 H -5.793378 1.895070 0.970537
 C 1.319295 0.648499 -1.138689
 P 3.468123 -0.085881 0.516692
 C 4.290101 -1.397790 -0.436700
 H 4.279118 -1.158893 -1.504164
 H 5.326380 -1.529554 -0.105034
 H 3.733042 -2.328765 -0.284759
 C 4.501526 1.388854 0.303151
 H 5.558105 1.178387 0.502328
 H 4.384797 1.749083 -0.725189
 H 4.141844 2.168756 0.982495
 C 3.611591 -0.616378 2.238027
 H 4.641785 -0.904948 2.470827
 H 3.293720 0.192772 2.903731
 H 2.941491 -1.472069 2.386123
 C 1.805834 0.130983 0.150739
 H 1.189974 -1.062681 0.403264
 Ge 0.438004 0.505347 1.621244
 O 0.354445 -1.739732 1.037857
 C -0.694200 -2.207016 0.346521
 C -1.875304 -2.554900 1.014615
 C -0.646547 -2.335151 -1.048958
 C -2.974843 -3.016331 0.304348
 H -1.909256 -2.445932 2.096473
 C -1.751963 -2.802276 -1.749825
 H 0.263541 -2.054844 -1.577009
 C -2.924385 -3.144491 -1.081813

H -3.886450 -3.274844 0.841082
H -1.695487 -2.891224 -2.833706
H -3.788435 -3.507515 -1.634325

V^{Ge}

E = -3953.31439801
C 0.181404 1.797302 2.564939
C 0.160575 0.685881 1.728212
C -1.001902 0.266463 1.060986
C -2.169638 1.010291 1.301057
C -2.157439 2.106700 2.144161
C -0.983123 2.516201 2.777422
H 1.122883 2.065813 3.038964
H -3.082359 0.723837 0.784585
H -3.077264 2.669748 2.291163
H -0.980373 3.385102 3.431334
N -1.002722 -0.795852 0.159726
S 1.637075 -0.258747 1.551967
O 2.751953 0.476401 2.186879
O 1.406271 -1.627555 2.025018
C -2.164594 -1.601161 0.118925
C -2.652177 -2.170463 1.302042
C -2.821938 -1.876174 -1.082326
C -3.774890 -2.983462 1.279123
H -2.123036 -1.971511 2.231730
C -3.935180 -2.710811 -1.102114
H -2.460621 -1.422268 -2.002492
C -4.421268 -3.262547 0.076356
H -4.140677 -3.418152 2.207755
H -4.433395 -2.915481 -2.048057
H -5.297943 -3.906751 0.060714
C 1.852379 -0.255454 -0.168612
Ge 0.315812 -1.200736 -1.167933
O 0.450168 0.936438 -1.809746
C -0.514519 1.861864 -1.633675
C -1.784121 1.665453 -2.181485
C -0.262693 3.009880 -0.876571

C -2.789159 2.597859 -1.957819
 H -1.966847 0.774707 -2.778668
 C -1.273056 3.937943 -0.664602
 H 0.725127 3.151002 -0.441372
 C -2.542860 3.737581 -1.197835
 H -3.777069 2.430061 -2.383751
 H -1.066416 4.822164 -0.064097
 H -3.333577 4.464227 -1.024393
 H 1.249859 0.761089 -0.928413
 P 3.508686 -0.507444 -0.610164
 C 3.562719 -0.891642 -2.373079
 H 4.596730 -0.904806 -2.733145
 H 3.094810 -1.865253 -2.553631
 H 2.990296 -0.124350 -2.908361
 C 4.278392 -1.853339 0.315294
 H 3.693539 -2.766221 0.162943
 H 5.320448 -2.008178 0.014955
 H 4.222447 -1.584433 1.376616
 C 4.519442 0.964657 -0.348749
 H 5.573495 0.766817 -0.572954
 H 4.143682 1.767392 -0.992049
 H 4.390574 1.251149 0.700283

VII^{Ge}

E = -4715.38070458
 C -2.810672 0.734030 -0.375220
 C -2.114640 1.506145 0.558950
 C -2.745852 2.607437 1.135624
 C -4.046272 2.947428 0.784067
 C -4.734437 2.180486 -0.145719
 C -4.113261 1.081155 -0.724429
 H -2.192706 3.188494 1.868686
 H -4.519385 3.811297 1.246566
 H -5.754397 2.435386 -0.426470
 H -4.624377 0.461683 -1.457015
 S -2.106799 -0.649060 -1.310048
 S -0.489787 1.145784 1.298200

O -3.291781 -1.356659 -1.815744
 O -1.210680 0.050109 -2.296079
 O -0.713177 0.003937 2.192545
 O -0.125407 2.431655 1.931421
 C -1.050598 -1.553038 -0.416784
 P 1.491973 2.202235 -0.525793
 P -1.623573 -2.700019 0.705419
 C 2.655081 1.707099 -1.815654
 H 3.168550 2.601318 -2.186323
 H 3.389884 1.007971 -1.396813
 H 2.123788 1.215911 -2.636654
 C 0.253471 3.267232 -1.301333
 H -0.372066 3.693626 -0.509525
 H 0.720083 4.072307 -1.879119
 H -0.368132 2.634313 -1.947369
 C 2.452861 3.226515 0.612141
 H 3.307600 2.640886 0.964930
 H 2.810505 4.121368 0.089786
 H 1.811027 3.493759 1.455571
 C -0.330233 -3.142572 1.870851
 H -0.697520 -3.903560 2.567656
 H 0.538839 -3.515327 1.320165
 H -0.031870 -2.229122 2.394629
 C -3.056285 -2.090976 1.626063
 H -3.833538 -1.824585 0.899831
 H -3.437703 -2.857251 2.309778
 H -2.740596 -1.199670 2.176664
 C -2.199914 -4.220031 -0.099982
 H -2.652935 -4.921808 0.609868
 H -2.932507 -3.913796 -0.855928
 H -1.354221 -4.695668 -0.607845
 C 0.726725 0.777986 0.133485
 H 1.442392 -0.188963 0.765059
 O 1.974017 -1.313125 0.818440
 C 3.267522 -1.077917 0.594540
 C 3.938107 -0.082310 1.323783
 C 3.969700 -1.750040 -0.417697

C 5.259252 0.240753 1.033325
H 3.399180 0.418195 2.126926
C 5.290447 -1.424275 -0.695521
H 3.450938 -2.517600 -0.988336
C 5.943163 -0.420223 0.017148
H 5.761501 1.014784 1.612795
H 5.815830 -1.956241 -1.487417
H 6.976331 -0.165818 -0.209206
Ge 0.685192 -0.906855 -1.161132

VIII^{Ge}

E = -3923.36338742
C 2.943463 2.461451 1.026938
C 1.769955 1.751620 0.831770
C 0.655558 2.189325 0.105364
C 0.785016 3.441333 -0.508043
C 1.950687 4.182572 -0.343614
C 3.022464 3.711269 0.422758
H 3.750234 2.064525 1.641261
H -0.041039 3.846084 -1.091461
H 2.027724 5.164349 -0.808403
H 3.911415 4.324818 0.551926
B -0.478753 1.070903 0.106956
S 1.412659 0.110817 1.350360
O 2.103086 -0.309537 2.565178
O -0.125667 0.267325 1.422760
C 1.555204 -0.933341 0.002668
C -2.015667 1.390169 0.027157
C -2.883158 1.107570 1.088883
C -2.576206 1.937933 -1.136018
C -4.247135 1.358833 0.994024
H -2.479635 0.664957 1.998164
C -3.938420 2.195060 -1.236313
H -1.933715 2.147968 -1.993663
C -4.782710 1.903289 -0.168723
H -4.899674 1.117411 1.832043
H -4.346007 2.617097 -2.154180

H -5.851784 2.094974 -0.245526
 P 3.063406 -1.688580 -0.358627
 C 4.331118 -0.546029 -0.956720
 H 5.244609 -1.080545 -1.240084
 H 3.926689 -0.008928 -1.821940
 H 4.562456 0.182842 -0.172380
 C 2.746239 -2.881092 -1.671218
 H 2.440178 -2.334122 -2.569737
 H 3.638955 -3.483357 -1.871176
 H 1.911534 -3.520224 -1.362576
 C 3.775305 -2.576138 1.045815
 H 3.884864 -1.875281 1.879820
 H 3.074669 -3.360225 1.351702
 H 4.741704 -3.020267 0.783097
 C -2.908765 -1.773341 -1.001749
 C -1.802425 -2.055126 -0.197068
 C -1.992662 -2.402562 1.140796
 C -3.279736 -2.475015 1.660670
 C -4.383106 -2.198620 0.861342
 C -4.188214 -1.842343 -0.470540
 H -2.747739 -1.485085 -2.038897
 H -1.124483 -2.594725 1.768073
 H -3.417739 -2.742796 2.707050
 H -5.387936 -2.247754 1.275254
 H -5.042000 -1.604305 -1.102157
 O -0.557511 -1.989354 -0.722945
 H 0.458639 -1.735278 -0.053293
 Ge 0.279941 -0.198731 -1.539159

***IX*^{Ge}**

E = -3374.14018420
 C 2.466731 2.274568 0.687193
 C 0.257295 1.778298 -0.196330
 C -0.101209 3.113510 0.042324
 C 0.794767 4.024715 0.583491
 C 2.080756 3.591196 0.902252
 H 3.484335 1.986216 0.947269

H -1.100786 3.444733 -0.237782
 H 0.508137 5.062037 0.743270
 H 2.800248 4.294151 1.321038
 B -0.631062 0.718953 -0.876047
 C -2.173160 0.739880 -0.993713
 C -2.980553 1.355381 -0.020112
 C -2.827413 0.043819 -2.026889
 C -4.366173 1.280180 -0.075268
 H -2.505830 1.864644 0.816919
 C -4.211956 -0.013768 -2.102338
 H -2.227385 -0.464497 -2.781721
 C -4.985015 0.601092 -1.120488
 H -4.968247 1.746087 0.703128
 H -4.693383 -0.551529 -2.917510
 H -6.071494 0.543420 -1.166195
 C 1.572139 1.334888 0.144664
 C 1.868110 -0.079977 -0.110807
 P 3.453167 -0.738867 0.022294
 C 4.140207 -0.723562 1.708875
 H 3.456084 -1.280279 2.358373
 H 5.129986 -1.193643 1.730920
 H 4.216639 0.299916 2.086980
 C 3.398539 -2.487765 -0.426142
 H 4.349542 -2.974223 -0.183844
 H 2.576380 -2.959978 0.124325
 H 3.184280 -2.580206 -1.495629
 C 4.739387 0.011004 -1.023877
 H 5.714566 -0.465322 -0.871800
 H 4.433355 -0.100034 -2.069820
 H 4.814747 1.080165 -0.799078
 O 0.155037 -1.873963 0.429251
 C -0.986960 -1.645201 1.114023
 C -2.168130 -2.280427 0.724323
 C -1.004731 -0.761224 2.196752
 C -3.347986 -2.033838 1.411948
 H -2.142848 -2.952300 -0.130710
 C -2.191194 -0.529061 2.883102

H -0.084791 -0.254113 2.483852
 C -3.367537 -1.162285 2.498180
 H -4.265642 -2.523876 1.091097
 H -2.193477 0.162128 3.724516
 H -4.295377 -0.972113 3.033222
 H 0.986809 -1.050897 0.536476
 Ge 0.605506 -0.883408 -1.538827

3.11.2.3 Reaktionspfad C

VIII^{Ge}

E = -3923.31478853
 C -1.688250 1.689206 2.582772
 C -1.128583 1.188928 1.412748
 C 0.187885 0.705907 1.329666
 C 0.902478 0.704142 2.534612
 C 0.362601 1.189424 3.721741
 C -0.930897 1.696619 3.747895
 H -2.712179 2.054782 2.566075
 H 1.916130 0.307201 2.541967
 H 0.959366 1.171490 4.632269
 H -1.355575 2.085316 4.671419
 B 0.877761 0.167161 -0.024259
 S -2.203316 1.188040 -0.027260
 O -3.573825 1.494428 0.448550
 O -1.604743 2.051850 -1.039649
 C -2.241526 -0.478442 -0.580034
 C 1.693776 1.177429 -0.928614
 C 1.585086 2.563202 -0.764493
 C 2.540554 0.715808 -1.948140
 C 2.288177 3.447326 -1.576413
 H 0.922196 2.956295 0.004829
 C 3.252291 1.591365 -2.758275
 H 2.652424 -0.358132 -2.107139
 C 3.128983 2.965775 -2.573895
 H 2.178381 4.520732 -1.428611
 H 3.905522 1.201760 -3.537919

H 3.683549 3.656634 -3.206916
 P -3.782138 -1.254792 -0.516079
 C -4.450542 -1.411039 1.156307
 H -5.426943 -1.907954 1.142416
 H -3.744518 -1.984083 1.766191
 H -4.542374 -0.398369 1.560797
 C -3.593090 -2.927777 -1.168163
 H -2.851290 -3.468316 -0.570778
 H -4.552459 -3.454985 -1.132398
 H -3.240471 -2.875511 -2.203415
 C -5.045843 -0.432693 -1.511294
 H -5.129203 0.592227 -1.135321
 H -4.711722 -0.408266 -2.553696
 H -6.008000 -0.951387 -1.435101
 C 2.963131 -1.447380 0.449666
 C 3.395862 -2.762530 0.294241
 C 4.735907 -3.074796 0.482895
 C 5.649199 -2.082823 0.824868
 C 5.206875 -0.773062 0.975839
 C 3.869385 -0.443806 0.788876
 H 2.672783 -3.531078 0.027115
 H 5.066543 -4.104553 0.360332
 H 6.698691 -2.328572 0.970319
 H 5.911480 0.014023 1.237659
 H 3.527366 0.582334 0.887342
 O 1.635720 -1.180403 0.281495
 H 0.854735 -2.048828 -0.442767
 Ge -0.526127 -1.064907 -0.962376

***IX*^{Ge}**

E = -3374.11136171
 C -1.329794 2.081465 -1.776248
 C 0.679276 0.965360 -0.967043
 C 1.313571 1.328568 -2.157903
 C 0.642629 2.025749 -3.159115
 C -0.687409 2.391228 -2.968180
 H -2.352671 2.427867 -1.626567

H 2.350290 1.029415 -2.313637
 H 1.150492 2.275821 -4.089048
 H -1.220117 2.942488 -3.741697
 B 1.384230 0.138567 0.185485
 C 2.945300 -0.013996 0.284350
 C 3.586795 -1.234839 0.535172
 C 3.766784 1.113982 0.123336
 C 4.972366 -1.328218 0.622197
 H 2.985986 -2.134057 0.663775
 C 5.150401 1.029084 0.205022
 H 3.302960 2.082687 -0.065547
 C 5.762615 -0.196466 0.456459
 H 5.438596 -2.293183 0.817945
 H 5.757515 1.924255 0.075735
 H 6.847086 -0.266824 0.523087
 C -0.661545 1.388350 -0.753588
 C -1.211862 1.066086 0.564058
 P -2.899900 0.821768 0.784823
 C -3.911940 2.333005 0.915309
 H -3.801164 2.932026 0.005943
 H -4.970873 2.092432 1.065733
 H -3.542483 2.922586 1.761213
 C -3.654615 -0.141957 -0.553283
 H -4.723878 -0.297657 -0.371712
 H -3.513531 0.383644 -1.502459
 H -3.137990 -1.105718 -0.615832
 C -3.246740 -0.079811 2.311545
 H -4.328898 -0.149721 2.467608
 H -2.807231 -1.078849 2.236893
 H -2.780742 0.438694 3.155991
 H 0.185597 -1.139519 1.646083
 C -1.095619 -2.806206 0.461255
 C -2.001583 -3.583027 -0.250132
 C -2.044529 -3.511484 -1.639588
 C -1.162724 -2.668153 -2.307666
 C -0.245689 -1.888807 -1.609059
 C -0.218797 -1.964538 -0.221750

H -1.042170 -2.859197 1.547546
H -2.673699 -4.249558 0.286956
H -2.755036 -4.116403 -2.198598
H -1.179476 -2.612472 -3.394220
H 0.444738 -1.235186 -2.130362
O 0.704476 -1.266630 0.521546
Ge 0.100841 0.667746 1.882255

3.11.3 Bei Stannylene

3.11.3.1 Reaktionspfad A

V^{Sn}

Nicht beobachtet.

VI^{Sn}

Nicht beobachtet.

VII^{Sn}

E = -2640.71103440
C -1.958027 1.664402 0.730130
C -2.855623 0.938404 -0.067861
C -4.182143 1.353168 -0.160509
C -4.633401 2.470385 0.530769
C -3.749585 3.186909 1.323497
C -2.424737 2.779787 1.423059
H -4.853873 0.771057 -0.785872
H -5.674186 2.775559 0.444075
H -4.085581 4.062894 1.874788
H -1.719931 3.320752 2.048780
S -0.221738 1.253157 1.120990
S -2.453688 -0.488711 -1.121954
O 0.297365 2.487483 1.755938
O -0.321941 0.064773 1.983640
O -1.701008 0.114541 -2.275225
O -3.759250 -1.111594 -1.378890
C 0.673608 1.005343 -0.290615
C -1.326154 -1.490637 -0.424366

P -1.755937 -2.576878 0.819357
 P 1.769684 2.264231 -0.690714
 C -0.287433 -3.084486 1.721228
 H -0.500355 -3.964543 2.336790
 H 0.518817 -3.294382 1.007431
 H 0.017693 -2.237644 2.343220
 C -2.935062 -1.839125 1.972831
 H -3.821287 -1.535835 1.402773
 H -3.222353 -2.553239 2.752236
 H -2.455206 -0.956890 2.408954
 C -2.576799 -4.055300 0.169490
 H -1.872678 -4.600432 -0.467926
 H -2.945426 -4.710277 0.967260
 H -3.408472 -3.701613 -0.451202
 C 2.579726 1.812230 -2.243794
 H 3.256412 2.616314 -2.552200
 H 3.159778 0.895190 -2.086456
 H 1.831770 1.642113 -3.025872
 C 0.979735 3.869049 -0.976561
 H 0.487064 4.161817 -0.044550
 H 1.717149 4.626155 -1.265628
 H 0.227492 3.753619 -1.763988
 C 3.119392 2.544678 0.473544
 H 3.731302 3.397797 0.158536
 H 2.676264 2.729634 1.456270
 H 3.730006 1.635860 0.516523
 O 2.160992 -2.169720 -0.394406
 C 3.166171 -1.554616 0.219192
 C 4.421507 -1.411807 -0.397633
 C 2.999727 -1.018225 1.510676
 C 5.479204 -0.805714 0.273620
 H 4.555752 -1.818879 -1.398983
 C 4.068235 -0.440514 2.179521
 H 2.011026 -1.046727 1.961954
 C 5.318852 -0.329818 1.571472
 H 6.445665 -0.719479 -0.221774
 H 3.915682 -0.049596 3.184695

H 6.152573 0.128463 2.099182
 Sn 0.443743 -0.795317 -1.355001
 H 1.865950 -1.751826 -1.817800

VIII^{Sn}

E = -1848.71184647
 C -0.523769 -1.768509 2.534748
 C 0.266327 -0.916404 1.784609
 C 1.283101 -1.314057 0.913392
 C 1.485595 -2.690043 0.780918
 C 0.705637 -3.581271 1.513830
 C -0.285030 -3.132374 2.391050
 H -1.286572 -1.387580 3.210784
 H 2.269557 -3.067528 0.126755
 H 0.880115 -4.651056 1.414242
 H -0.867290 -3.849533 2.965896
 B 2.025102 -0.030771 0.333742
 S 0.104045 0.842343 1.673402
 O -0.315313 1.451019 2.935370
 O 1.622475 1.073111 1.278159
 C -0.727842 1.290965 0.307732
 C 3.534064 0.002661 -0.083388
 C 4.420637 0.902423 0.520996
 C 4.056151 -0.878409 -1.040964
 C 5.771338 0.919697 0.188237
 H 4.038422 1.597054 1.267633
 C 5.404261 -0.869442 -1.374877
 H 3.388339 -1.573457 -1.552104
 C 6.269152 0.032174 -0.759281
 H 6.440195 1.629381 0.673113
 H 5.783427 -1.563533 -2.123430
 H 7.325624 0.044129 -1.021778
 P -2.258011 2.028109 0.510330
 C -3.481436 0.993683 1.345308
 H -4.437866 1.517192 1.454421
 H -3.617972 0.075290 0.762729
 H -3.089056 0.741478 2.337360

C -2.931675 2.443310 -1.107348
 H -3.094308 1.519362 -1.670451
 H -3.881910 2.974337 -0.983911
 H -2.215731 3.073232 -1.644980
 C -2.188133 3.576707 1.448494
 H -1.739616 3.357682 2.422666
 H -1.541990 4.280544 0.913491
 H -3.187658 4.007918 1.575016
 C -4.642369 -1.431264 -1.494573
 C -4.497020 -2.202717 -0.344037
 C -3.212034 -2.493465 0.114066
 C -2.095944 -2.014203 -0.555174
 C -2.230245 -1.250055 -1.727453
 C -3.529006 -0.958956 -2.181351
 H -5.638213 -1.201624 -1.871602
 H -5.371387 -2.577104 0.183829
 H -3.070174 -3.097423 1.009693
 H -1.092104 -2.252002 -0.213552
 H -3.641015 -0.385532 -3.100503
 O -1.153088 -0.838401 -2.385212
 H -0.909199 0.526271 -2.706246
 Sn 0.445864 0.701374 -1.464066

IX^{Sn}

E = -1299.46790223
 C 0.806257 3.007540 0.851586
 C -1.183016 1.697609 0.352659
 C -1.928215 2.645319 1.085609
 C -1.345150 3.737586 1.699295
 C 0.039507 3.894767 1.583900
 H 1.875794 3.196572 0.783506
 H -3.006581 2.509143 1.155133
 H -1.942245 4.454767 2.257500
 H 0.529069 4.739567 2.068086
 B -1.862927 0.499706 -0.294197
 C -3.262070 -0.094693 -0.037974
 C -3.864948 -0.041674 1.233445

C -3.974036 -0.744701 -1.062145
 C -5.118271 -0.593507 1.462750
 H -3.325678 0.419958 2.058732
 C -5.241558 -1.267299 -0.847575
 H -3.515449 -0.837066 -2.046540
 C -5.815223 -1.195661 0.419034
 H -5.556106 -0.554329 2.458639
 H -5.777486 -1.750609 -1.662430
 H -6.800818 -1.622932 0.596057
 C 0.242047 1.890106 0.187131
 C 1.006006 0.971775 -0.622536
 P 2.706708 1.023141 -0.759153
 C 3.406741 2.519993 -1.541736
 H 3.112568 3.414175 -0.984141
 H 4.500554 2.467173 -1.590603
 H 2.995561 2.599219 -2.553808
 C 3.622448 0.826391 0.797309
 H 4.696169 0.987848 0.648205
 H 3.243829 1.528251 1.546715
 H 3.443659 -0.191619 1.160601
 C 3.313647 -0.324068 -1.800518
 H 4.399763 -0.236607 -1.913030
 H 3.072226 -1.279665 -1.323046
 H 2.834398 -0.280592 -2.783916
 Sn -0.218820 -0.475292 -1.580877
 H 0.653827 -2.063506 -1.721299
 O 0.357061 -2.436159 -0.362212
 C 1.213462 -2.345169 0.650761
 C 0.922049 -1.530403 1.760381
 C 2.417347 -3.069746 0.657384
 C 1.764940 -1.506111 2.861699
 H 0.012042 -0.930841 1.738632
 C 3.267213 -3.020630 1.756966
 H 2.647373 -3.698441 -0.201441
 C 2.945204 -2.249122 2.870724
 H 1.504995 -0.885951 3.718363
 H 4.187282 -3.603597 1.747597

H 3.607490 -2.222502 3.733407

3.11.3.2 Reaktionspfad B

V^{Sn}

E = -1329.48945057

C 1.926261 1.501566 2.109298

C -0.116677 0.305012 1.596785

C -0.732488 0.975778 2.662626

C -0.031907 1.891822 3.436221

C 1.305502 2.156589 3.168213

H 2.974087 1.722965 1.907490

H -1.770622 0.754856 2.896057

H -0.536084 2.390366 4.262216

H 1.864942 2.866602 3.773776

N -0.744903 -0.678702 0.849167

C -2.136023 -0.875207 0.902187

C -3.031721 0.179661 0.680264

C -2.654826 -2.158655 1.105545

C -4.399263 -0.049326 0.661798

H -2.634529 1.175465 0.497627

C -4.026608 -2.385407 1.071000

H -1.965104 -2.979842 1.297373

C -4.907300 -1.332455 0.853765

H -5.074852 0.784061 0.475557

H -4.407652 -3.393340 1.227265

H -5.980853 -1.508750 0.831843

C 1.248354 0.584710 1.298657

P 3.483292 -0.085975 -0.247995

C 4.173468 1.540593 -0.693012

H 4.085250 2.237820 0.144962

H 5.226392 1.453547 -0.984670

H 3.589920 1.935370 -1.532079

C 4.588995 -0.740524 1.036312

H 5.642172 -0.667390 0.742806

H 4.425030 -0.178307 1.962008

H 4.326013 -1.787298 1.221372

C 3.753419 -1.088810 -1.730591
 H 4.787260 -0.997838 -2.079859
 H 3.532856 -2.139896 -1.515817
 H 3.069042 -0.734761 -2.511295
 C 1.810422 -0.091552 0.115555
 H 1.170946 0.414736 -1.040986
 Sn 0.404071 -1.725987 -0.600645
 O 0.388900 0.321304 -1.966734
 C -0.645164 1.178947 -1.935366
 C -1.818903 0.885656 -2.639085
 C -0.581183 2.364240 -1.190559
 C -2.899031 1.756524 -2.597262
 H -1.865955 -0.039496 -3.209952
 C -1.666319 3.231642 -1.160504
 H 0.321772 2.589076 -0.625211
 C -2.832774 2.936247 -1.860359
 H -3.806802 1.507112 -3.144435
 H -1.599226 4.145591 -0.572369
 H -3.681235 3.616508 -1.830723

***VI*^{Sn}**

E = -1878.68527743
 C -1.443248 -2.950798 -1.638495
 C -1.161069 -1.661838 -1.186035
 C -2.169760 -0.743107 -0.778055
 C -3.494270 -1.252689 -0.850750
 C -3.766019 -2.534653 -1.285493
 C -2.748963 -3.404902 -1.691816
 H -0.608065 -3.576042 -1.947742
 H -4.311336 -0.612328 -0.530150
 H -4.801984 -2.870594 -1.305352
 H -2.975466 -4.405561 -2.050225
 N -1.871579 0.481690 -0.281438
 S 0.530036 -1.246818 -0.983496
 O 1.340775 -2.334141 -1.527769
 O 0.764876 0.129519 -1.581621
 C 0.759441 -0.898155 0.674705

C -2.882634 1.436609 -0.112831
 C -3.691931 1.857646 -1.179964
 C -3.045960 2.068942 1.126653
 C -4.629489 2.864050 -1.004625
 H -3.563209 1.385102 -2.152133
 C -3.976808 3.089644 1.294522
 H -2.438182 1.739220 1.969222
 C -4.776854 3.489722 0.232357
 H -5.244358 3.175525 -1.847460
 H -4.081208 3.566495 2.267584
 H -5.508490 4.284164 0.362904
 P 0.295785 -2.068269 1.846326
 C 1.002422 -1.542031 3.420394
 H 0.799590 -2.278548 4.204807
 H 2.081774 -1.408464 3.294380
 H 0.564550 -0.577924 3.699978
 C 0.926619 -3.716222 1.455339
 H 2.013479 -3.660697 1.336477
 H 0.661316 -4.439456 2.234315
 H 0.495215 -4.024954 0.496255
 C -1.487978 -2.251764 2.101751
 H -1.934914 -1.253330 2.165049
 H -1.934676 -2.771306 1.246286
 H -1.686749 -2.816168 3.019901
 Sn 0.184770 1.397669 0.250808
 O 2.543897 0.857231 0.778941
 C 3.696549 0.977355 0.116547
 C 4.098697 0.029431 -0.838149
 C 4.539050 2.069173 0.370417
 C 5.306347 0.176221 -1.507311
 H 3.447496 -0.813149 -1.060733
 C 5.742172 2.207923 -0.309389
 H 4.224541 2.799406 1.113803
 C 6.137898 1.263271 -1.252265
 H 5.596862 -0.569454 -2.246299
 H 6.380473 3.065070 -0.097635
 H 7.080953 1.374436 -1.783463

H 1.885913 -0.257415 0.779475

VII^{Sn}

E = -2640.76422607

C -2.637056 -0.874324 0.392287

C -2.182894 0.051167 1.337054

C -2.991037 0.356492 2.432947

C -4.243698 -0.224119 2.581344

C -4.703281 -1.124278 1.629856

C -3.900224 -1.443966 0.543463

H -2.613753 1.068288 3.162332

H -4.855589 0.030280 3.444440

H -5.684893 -1.583091 1.730538

H -4.225441 -2.157219 -0.209317

S -1.744227 -1.399039 -1.102750

S -0.548960 0.860342 1.411435

O -2.441244 -2.641010 -1.474836

O -1.882009 -0.219978 -2.025957

O 0.404886 -0.170861 1.837049

O -0.786359 1.974245 2.358085

C -0.119857 -1.544427 -0.836879

P -0.894007 3.039600 -0.419476

P 0.465111 -2.867979 0.058544

C -0.579881 3.507366 -2.136157

H -1.008777 4.495994 -2.333669

H 0.500110 3.533637 -2.318761

H -1.038120 2.767381 -2.801766

C -2.688488 2.899466 -0.264019

H -2.937006 2.750198 0.791675

H -3.185217 3.799882 -0.641370

H -2.997762 2.016793 -0.837775

C -0.364158 4.444967 0.587902

H 0.704814 4.611440 0.415228

H -0.928192 5.349457 0.333415

H -0.516157 4.167848 1.635159

C 2.157614 -2.556022 0.575068

H 2.565297 -3.427858 1.097570

H 2.777492 -2.331578 -0.299086
H 2.147667 -1.681478 1.234026
C -0.499187 -3.219456 1.551237
H -1.531012 -3.440485 1.254465
H -0.080371 -4.079676 2.085343
H -0.474518 -2.324120 2.181324
C 0.433819 -4.416032 -0.887146
H 0.721485 -5.282658 -0.280815
H -0.591005 -4.529389 -1.259805
H 1.105931 -4.320693 -1.746505
C -0.078681 1.545638 -0.089930
H 1.279564 1.501917 -0.021815
O 2.353999 1.043977 -0.456944
C 3.392945 0.662315 0.283113
C 3.421689 0.867716 1.670758
C 4.492185 0.040545 -0.326959
C 4.514806 0.446454 2.416479
H 2.562290 1.327572 2.152508
C 5.577785 -0.378846 0.431269
H 4.472134 -0.103568 -1.406142
C 5.598972 -0.182041 1.809155
H 4.514777 0.608463 3.493576
H 6.420288 -0.861551 -0.062659
H 6.450437 -0.510442 2.401346
Sn 0.615350 0.232137 -1.936453

VIII^{Sn}

E = -1848.74953999
C 0.594784 1.643341 2.733937
C 0.173116 0.595739 1.927385
C -1.043979 0.521609 1.240831
C -1.890462 1.629204 1.397002
C -1.513378 2.690275 2.206621
C -0.283495 2.706285 2.878369
H 1.557298 1.616183 3.240946
H -2.856814 1.647979 0.897010
H -2.190325 3.534369 2.325092

H -0.019847 3.549963 3.512368
 B -1.180357 -0.852784 0.466958
 S 1.092477 -0.827500 1.498242
 O 2.018749 -1.356936 2.504069
 O -0.131366 -1.755610 1.217500
 C 1.804238 -0.523126 -0.019480
 C -2.564285 -1.579284 0.303995
 C -3.612194 -0.962987 -0.398153
 C -2.812969 -2.849031 0.840883
 C -4.851545 -1.572903 -0.543006
 H -3.445524 0.015150 -0.854843
 C -4.048929 -3.470664 0.690867
 H -2.018565 -3.352121 1.390916
 C -5.076260 -2.834925 0.001858
 H -5.645762 -1.066785 -1.090416
 H -4.213172 -4.458693 1.119535
 H -6.043932 -3.319852 -0.115063
 P 3.422206 -1.077244 -0.210903
 C 4.604372 -0.295630 0.916171
 H 5.619818 -0.672679 0.751021
 H 4.580086 0.787421 0.755758
 H 4.281241 -0.516930 1.938638
 C 3.924011 -0.653774 -1.890276
 H 3.726682 0.412096 -2.050956
 H 4.985638 -0.872561 -2.047208
 H 3.309190 -1.223444 -2.595594
 C 3.623615 -2.859970 0.010612
 H 3.283762 -3.100415 1.024368
 H 2.986067 -3.378278 -0.713473
 H 4.666676 -3.168660 -0.119800
 C -1.079354 2.602683 -1.774639
 C 0.194300 2.456369 -1.213846
 C 0.713013 3.485840 -0.424765
 C -0.036461 4.633022 -0.196904
 C -1.305894 4.775350 -0.747995
 C -1.820279 3.752670 -1.540240
 H -1.480551 1.797994 -2.391006

H 1.702025 3.367464 0.013728
H 0.377059 5.423579 0.427489
H -1.888243 5.675676 -0.564777
H -2.811539 3.849051 -1.980225
O 0.902026 1.337698 -1.443883
H 1.482756 0.724576 -0.586364
Sn 0.053560 -0.855006 -1.640942

***IX*^{Sn}**

E = -1299.51986875
C 2.318244 2.525269 0.411591
C 0.151207 1.808280 -0.418896
C -0.259349 3.151193 -0.383995
C 0.588260 4.172159 0.021363
C 1.882060 3.843209 0.419846
H 3.342378 2.323469 0.722679
H -1.266962 3.394427 -0.720039
H 0.257117 5.208478 0.017077
H 2.568694 4.627988 0.736063
B -0.733300 0.679695 -0.980976
C -2.280651 0.671472 -1.001671
C -3.026880 1.371774 -0.035662
C -2.998761 -0.120898 -1.916429
C -4.412094 1.286075 0.013426
H -2.500714 1.961833 0.712461
C -4.384236 -0.191271 -1.890007
H -2.447884 -0.696075 -2.661114
C -5.094413 0.509811 -0.918025
H -4.963263 1.820039 0.785733
H -4.914821 -0.805075 -2.616041
H -6.180693 0.442656 -0.882041
C 1.478547 1.470642 0.002649
C 1.860682 0.056698 -0.005800
P 3.428392 -0.485035 0.428051
C 4.839952 0.083674 -0.576365
H 4.898011 1.176644 -0.549323
H 5.785523 -0.340867 -0.219841

H 4.666168 -0.225247 -1.612861
 C 3.904971 -0.125243 2.151328
 H 4.900978 -0.522941 2.377032
 H 3.893069 0.953081 2.334543
 H 3.165503 -0.593733 2.809968
 C 3.469131 -2.290300 0.325726
 H 4.397690 -2.679063 0.757568
 H 2.603140 -2.685720 0.869658
 H 3.385986 -2.598897 -0.721738
 Sn 0.614813 -1.152592 -1.541184
 C -2.147377 -2.104349 1.191032
 C -3.320070 -1.792500 1.864238
 C -3.340342 -0.784169 2.824659
 C -2.171789 -0.080817 3.094879
 C -0.992859 -0.378545 2.421325
 C -0.972003 -1.401165 1.467748
 H -2.123935 -2.885214 0.433641
 H -4.231515 -2.340164 1.630707
 H -4.262265 -0.543091 3.349287
 H -2.174635 0.717869 3.835085
 H -0.079939 0.180683 2.620525
 O 0.161125 -1.701767 0.801138
 H 0.939964 -0.856316 0.747423

3.11.3.3 Reaktionspfad C

VIII^{Sn}

E = -1848.67221227
 C -1.747331 1.786289 2.480088
 C -1.152693 1.292941 1.324260
 C 0.153679 0.774904 1.293787
 C 0.801285 0.720965 2.536810
 C 0.219574 1.190314 3.710651
 C -1.054181 1.741775 3.684019
 H -2.753696 2.193636 2.418489
 H 1.803179 0.299233 2.588340
 H 0.770520 1.127798 4.647612

H -1.513224 2.125883 4.592990
 B 0.995560 0.279155 0.005023
 S -2.188060 1.309291 -0.151762
 O -3.527915 1.772875 0.279198
 O -1.470020 2.064948 -1.176720
 C -2.333962 -0.362335 -0.613213
 C 1.919134 1.291717 -0.768048
 C 1.759836 2.672636 -0.596809
 C 2.902083 0.867463 -1.676459
 C 2.544364 3.586053 -1.293963
 H 0.989206 3.037464 0.080299
 C 3.695221 1.772358 -2.368283
 H 3.047791 -0.199806 -1.850655
 C 3.520470 3.141293 -2.178139
 H 2.390130 4.653811 -1.145196
 H 4.451359 1.410374 -3.063683
 H 4.138251 3.854636 -2.721150
 P -3.820320 -1.110181 -0.196185
 C -4.214971 -1.039238 1.570581
 H -5.155468 -1.558551 1.786185
 H -3.393794 -1.492403 2.135868
 H -4.296101 0.018013 1.842073
 C -3.722397 -2.861957 -0.632043
 H -2.888376 -3.323952 -0.093354
 H -4.656921 -3.370042 -0.370847
 H -3.544807 -2.957820 -1.708397
 C -5.262045 -0.440590 -1.060097
 H -5.295127 0.628975 -0.828686
 H -5.117356 -0.570231 -2.137657
 H -6.185894 -0.935946 -0.740576
 C 2.922500 -1.449932 0.591743
 C 3.291897 -2.777451 0.398356
 C 4.593405 -3.176123 0.675476
 C 5.527382 -2.256089 1.139501
 C 5.146098 -0.931396 1.324631
 C 3.848205 -0.516279 1.052001
 H 2.552286 -3.486380 0.029290

H 4.876812 -4.215891 0.523825
H 6.547108 -2.568742 1.352357
H 5.868564 -0.200044 1.681580
H 3.555580 0.522103 1.175955
O 1.620857 -1.091930 0.348650
H 0.948316 -2.077072 -0.349942
Sn -0.458621 -1.014757 -1.273540

***IX*^{Sn}**

E = -1299.47606938
C 1.436838 0.690088 2.671313
C -0.628644 0.253670 1.454693
C -1.250389 0.018823 2.689939
C -0.551049 0.084650 3.887765
C 0.806361 0.406739 3.872402
H 2.480947 1.002678 2.691670
H -2.301117 -0.269836 2.700918
H -1.052825 -0.132263 4.829174
H 1.367213 0.462875 4.804236
B -1.391663 0.027581 0.102919
C -2.944441 -0.062827 -0.061640
C -3.565456 -1.004055 -0.897345
C -3.786662 0.815804 0.642458
C -4.949126 -1.068620 -1.023418
H -2.948699 -1.703571 -1.459733
C -5.167856 0.751777 0.528131
H -3.337841 1.573903 1.284737
C -5.758864 -0.192965 -0.309080
H -5.398677 -1.811640 -1.681005
H -5.791173 1.447677 1.088139
H -6.842271 -0.242191 -0.404430
C 0.740772 0.658024 1.445632
C 1.300433 1.053049 0.161977
P 2.975474 0.851893 -0.149351
C 4.090356 2.139912 0.511884
H 4.004634 2.179639 1.602312
H 5.133723 1.946704 0.235657

H 3.774098 3.107928 0.108660
 C 3.652544 -0.714193 0.471882
 H 4.727932 -0.785981 0.274158
 H 3.468135 -0.785899 1.548076
 H 3.124343 -1.537041 -0.020726
 C 3.325372 0.857933 -1.924935
 H 4.403479 0.764554 -2.097275
 H 2.790450 0.024438 -2.390336
 H 2.962836 1.790922 -2.369875
 Sn -0.145509 1.684566 -1.301886
 C 0.237731 -2.550903 0.574137
 C 1.103395 -3.626412 0.748130
 C 1.910587 -4.074232 -0.292390
 C 1.842716 -3.442781 -1.530724
 C 0.984888 -2.365931 -1.719925
 C 0.187485 -1.927144 -0.665505
 H -0.392289 -2.204396 1.385839
 H 1.139415 -4.119579 1.717316
 H 2.582462 -4.916394 -0.142124
 H 2.455119 -3.791271 -2.360089
 H 0.909834 -1.868195 -2.685484
 O -0.697168 -0.898013 -0.923663
 H -0.182697 -0.295974 -1.862838

3.12 Energien der Produkte der Phenolaktivierung

3.12.1 Bei Silylenen

Tabelle 3.74. Energien der Produkte der Phenylaktivierung am Silylenzentrum.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
V ^{Si}	-1615.95541074	0.432376	0.353092	-0.061153	-160.927948	-168.854
VI ^{Si}	-2165.15463655	0.447029	0.358073	-0.071974	-189.405460	-197.331
VII ^{Si}	-2927.23442788	0.486974	0.392826	-0.088399	-232.629461	-240.555
VIII ^{Si}	-2135.20117430	0.444622	0.359088	-0.082980	-218.370186	-226.296
IX ^{Si}	-1585.97718445	0.430637	0.350234	-0.084834	-223.247131	-231.173

Tabelle 3.75. Energien der Produkte der Phenylaktivierung am entlang der C^{Ylid}–Si-Einheit.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
V ^{Si}	-1615.91712301	0.433832	0.354461	-0.021587	-56.809204	-64.735
VI ^{Si}	-2165.11660870	0.447510	0.361462	-0.030653	-80.665521	-88.591
VII ^{Si}	-2927.16806522	0.488048	0.393623	-0.021395	-56.301773	-64.228
VIII ^{Si}	-2135.13462731	0.444999	0.358099	-0.017574	-46.247684	-54.174
IX ^{Si}	-1585.94278554	0.432488	0.350243	-0.050506	-132.909164	-140.835

Tabelle 3.76. Energien der Produkte der Phenylaktivierung am entlang der Si–B-Einheit.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
VIII ^{Si}	-2135.14675609	0.444228	0.356903	-0.030939	-81.229034	-89.155
IX ^{Si}	-1585.95026060	0.430044	0.350986	-0.057222	-150.584187	-158.510

3.12.2 Bei Germynlenen

Tabelle 3.77. Energien der Produkte der Phenylaktivierung am Germynlenzentrum.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
V ^{Ge}	-3404.14795825	0.430545	0.349505	-0.006046	-15.910635	-23.837
VI ^{Ge}	-3953.34571228	0.445206	0.354642	-0.016407	-43.175271	-51.101
VII ^{Ge}	-2620.28203911	0.388190	0.307853	-0.033989	-89.445718	-97.372
VIII ^{Ge}	-3923.42013075	0.442875	0.354414	-0.042783	-112.58721	-120.513
IX ^{Ge}	-1585.97664167	0.430472	0.349668	-0.084857	-223.30809	-231.234

Tabelle 3.78. Energien der Produkte der Phenylaktivierung am entlang der C^{Ylid}–Ge-Bindung.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
V ^{Ge}	-3404.15650094	0.432830	0.352192	-0.011888	-31.284749	-39.211
VI ^{Ge}	-3953.35564742	0.446696	0.359035	-0.021936	-57.726160	-65.652
VII ^{Ge}	-4715.41592234	0.487313	0.390243	-0.015614	-41.090467	-49.016
VIII ^{Ge}	-3923.38751983	0.444387	0.355248	-0.009415	-24.777579	-32.703
IX ^{Ge}	-3374.18787417	0.431766	0.347785	-0.035677	-93.887407	-101.813

Tabelle 3.79. Energien der Produkte der Phenylaktivierung am entlang der Ge–B-Bindung.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
VIII ^{Ge}	-3923.39251415	0.443198	0.353935	-0.015744	-41.334588	-49.260
IX ^{Ge}	-3374.20212951	0.429269	0.345654	-0.0520257	-136.909743	-144.836

3.12.3 Bei Stannylene

Tabelle 3.80. Energien der Produkte der Phenylaktivierung am Stannylzentrum.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
V ^{Sn}	-1329.48363273	0.428773	0.345683	0.021184	55.746716	47.821
VI ^{Sn}	-1878.69097650	0.443294	0.353226	0.013481	35.476465	27.551
VII ^{Sn}	-2640.77661450	0.483953	0.385429	0.708229	0.000269	-7.218
VIII ^{Sn}	-1848.77868194	0.441847	0.353700	-0.020064	-52.800617	-60.727
IX ^{Sn}	-1299.54007155	0.427556	0.343707	-0.019258	-50.563179	-58.489

Tabelle 3.81. Energien der Produkte der Phenylaktivierung am entlang der C^{Ylid}-Sn-Bindung.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
V ^{Sn}	-1329.52832617	0.431982	0.349258	-0.019840	-52.209748	-60.136
VI ^{Sn}	-1878.73604993	0.446485	0.356996	-0.027727	-72.965691	-80.892
VII ^{Sn}	-2640.79461493	0.486647	0.389198	-0.013929	-36.656391	-44.582
VIII ^{Sn}	-1848.77287817	0.444210	0.354088	-0.013887	-36.544124	-44.470
IX ^{Sn}	-1299.55838981	0.431518	0.345451	-0.035833	-94.078898	-102.005

Tabelle 3.82. Energien der Produkte der Phenylaktivierung am entlang der Sn-B-Bindung.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]	1M ΔG [kJ/mol]
VIII ^{Sn}	-1848.80905576	0.441764	0.352404	-0.051661	-135.949729	-143.876
IX ^{Sn}	-1299.57385574	0.428127	0.343003	-0.053747	-141.111921	-149.038

3.13 Koordinaten der Produkte der Phenolaktivierung

3.13.1 Bei Silylenen

3.13.1.1 Reaktionspfad A

V^{Si}

E = -1615.95541074

C 0.958920 -2.802720 0.999070

C -1.015612 -1.596128 0.302535

C -1.782966 -2.352482 1.180000

C -1.179536 -3.325379 1.978086

C 0.188591 -3.541849 1.895454

H 2.028309 -3.003704 0.935429

H -2.855808 -2.187572 1.239750

H -1.789883 -3.911582 2.662014

H 0.664492 -4.294973 2.520697
 N -1.500173 -0.589713 -0.551531
 C -2.799546 -0.051933 -0.463480
 C -3.546767 0.143633 -1.628059
 C -3.342491 0.352403 0.761605
 C -4.803013 0.735025 -1.570213
 H -3.130156 -0.178186 -2.580331
 C -4.604803 0.927045 0.815172
 H -2.760575 0.216794 1.670794
 C -5.341631 1.124402 -0.349209
 H -5.368925 0.881960 -2.488434
 H -5.011544 1.236212 1.776464
 H -6.328588 1.580048 -0.303832
 C 0.384735 -1.828436 0.176783
 C 1.038568 -0.988358 -0.820595
 P 2.717461 -0.785121 -0.958832
 C 3.557387 -0.241814 0.559061
 H 3.244167 -0.891404 1.383835
 H 4.647762 -0.277217 0.454684
 H 3.233018 0.780204 0.786869
 C 3.636251 -2.262356 -1.496731
 H 4.709301 -2.054620 -1.578525
 H 3.479589 -3.075933 -0.781390
 H 3.240845 -2.579871 -2.467162
 C 3.072384 0.475113 -2.204940
 H 4.153862 0.594147 -2.326699
 H 2.627003 0.174213 -3.159268
 H 2.633876 1.426719 -1.886364
 Si -0.194155 0.155586 -1.462922
 H -0.514119 0.343640 -2.894340
 O 0.100986 1.780485 -1.046704
 C 0.709277 2.162198 0.097969
 C 1.634718 3.207268 0.039015
 C 0.465841 1.530416 1.322223
 C 2.312560 3.608386 1.184726
 H 1.801166 3.697478 -0.918304
 C 1.147523 1.940746 2.461342

H -0.250567 0.713802 1.375012
 C 2.077533 2.974868 2.401708
 H 3.029541 4.425542 1.124482
 H 0.950395 1.437076 3.405982
 H 2.608874 3.289669 3.297232

Vl^{Si}

E = -2165.15463655
 C 3.503001 1.263985 -1.299697
 C 2.387947 1.001556 -0.515901
 C 1.163569 1.655019 -0.725384
 C 1.108311 2.607084 -1.749584
 C 2.226702 2.883869 -2.523801
 C 3.426799 2.210313 -2.313126
 H 4.422065 0.722783 -1.084337
 H 0.170554 3.126850 -1.931566
 H 2.153622 3.629987 -3.312989
 H 4.297979 2.427491 -2.926998
 N 0.031711 1.355910 0.048814
 S 2.534036 -0.111541 0.862516
 O 3.774081 -0.891344 0.661988
 O 2.401585 0.703822 2.067969
 C 1.184745 -1.154114 0.672902
 C -0.864604 2.414500 0.347372
 C -0.398306 3.553442 1.010653
 C -2.217381 2.311469 0.025039
 C -1.278552 4.573286 1.339422
 H 0.655842 3.609077 1.274909
 C -3.099385 3.329506 0.377352
 H -2.572525 1.438448 -0.518724
 C -2.633448 4.463882 1.029427
 H -0.908484 5.455449 1.858686
 H -4.154029 3.235418 0.125312
 H -3.321480 5.263085 1.297442
 P 1.536611 -2.790117 0.315040
 C 2.420597 -3.036240 -1.245890
 H 2.658899 -4.093266 -1.408746

H 1.798039 -2.658798 -2.063799
H 3.340742 -2.445688 -1.187493
C 0.013269 -3.753738 0.203045
H -0.591466 -3.405332 -0.638315
H 0.270178 -4.810245 0.070445
H -0.566369 -3.633511 1.124299
C 2.548672 -3.585701 1.586106
H 3.462103 -2.990680 1.688851
H 1.998549 -3.567460 2.532647
H 2.790573 -4.618089 1.309227
Si -0.370191 -0.246697 0.652028
H -1.124532 -0.014992 1.900897
O -1.396248 -1.090013 -0.390555
C -2.709024 -1.402106 -0.430590
C -3.144727 -2.191420 -1.497851
C -3.629961 -0.979668 0.531766
C -4.479550 -2.559998 -1.596766
H -2.417494 -2.493607 -2.248828
C -4.964409 -1.354922 0.420381
H -3.302844 -0.356255 1.359615
C -5.398714 -2.145936 -0.637501
H -4.804314 -3.173742 -2.435174
H -5.672642 -1.018664 1.175656
H -6.444669 -2.433567 -0.716391

VII^{Si}

E = -2927.23442788
C -1.903928 -1.145151 -0.961317
C -2.641018 -0.495707 0.035256
C -4.020040 -0.691755 0.098634
C -4.669170 -1.503899 -0.821840
C -3.939020 -2.133037 -1.821764
C -2.564098 -1.951441 -1.887714
H -4.572081 -0.175927 0.880306
H -5.746631 -1.641048 -0.754983
H -4.435575 -2.767905 -2.552864
H -1.967516 -2.444266 -2.651404

S -0.112942 -0.999333 -1.254262
 S -1.982067 0.564877 1.367341
 O 0.207984 -2.247284 -1.974602
 O 0.052980 0.278793 -1.971559
 O -1.444813 -0.378507 2.366326
 O -3.148162 1.392672 1.724970
 C 0.708025 -0.964710 0.217734
 C -0.730787 1.528942 0.780082
 P -1.192197 2.863771 -0.199940
 P 0.926254 -2.482773 0.987349
 C 0.201983 3.510906 -1.132126
 H -0.144575 4.354470 -1.739029
 H 0.995727 3.826186 -0.450353
 H 0.585273 2.702308 -1.762688
 C -2.455541 2.432022 -1.420653
 H -3.347106 2.074965 -0.894686
 H -2.709088 3.307578 -2.028557
 H -2.045482 1.632863 -2.048456
 C -1.891485 4.218127 0.775142
 H -1.118505 4.601056 1.449666
 H -2.269380 5.025678 0.137867
 H -2.700749 3.785711 1.373696
 C 1.412408 -2.227975 2.702738
 H 1.535348 -3.200209 3.191722
 H 2.352579 -1.669830 2.746966
 H 0.620569 -1.648980 3.191842
 C -0.591428 -3.464154 1.041706
 H -0.911320 -3.668834 0.014568
 H -0.427923 -4.406372 1.576224
 H -1.348513 -2.856004 1.550906
 C 2.186084 -3.507828 0.193948
 H 2.275935 -4.488917 0.673875
 H 1.886530 -3.613713 -0.854200
 H 3.142280 -2.974592 0.233539
 Si 0.877455 0.689932 0.965933
 H 1.369476 0.559199 2.358473
 O 2.027354 1.642766 0.170313

C 3.261372 1.174186 -0.149346
 C 4.354575 1.503925 0.651147
 C 3.439086 0.373536 -1.279686
 C 5.621920 1.036363 0.320218
 H 4.192723 2.130476 1.525739
 C 4.709880 -0.089306 -1.598639
 H 2.569301 0.126373 -1.883073
 C 5.805640 0.236626 -0.803002
 H 6.472085 1.300618 0.947056
 H 4.843804 -0.711524 -2.482120
 H 6.798240 -0.127614 -1.060201

VIII^{Si}

E = -2135.20117430
 C -0.273828 0.485785 3.036678
 C 0.420864 0.623128 1.846799
 C 1.315276 -0.306819 1.313475
 C 1.498718 -1.477628 2.049808
 C 0.822601 -1.655958 3.255063
 C -0.048709 -0.684808 3.755055
 H -0.952205 1.258839 3.393003
 H 2.180111 -2.246464 1.688346
 H 0.980756 -2.568734 3.826942
 H -0.551210 -0.844276 4.706852
 B 1.874977 0.205648 -0.114098
 S 0.175045 1.839202 0.591797
 O -0.294722 3.138820 1.067802
 O 1.622666 1.765465 0.024403
 C -0.764442 1.135979 -0.619561
 Si 0.293819 -0.210849 -1.366609
 C 3.361976 -0.121862 -0.525117
 C 4.358207 0.859246 -0.556420
 C 3.733264 -1.434762 -0.845756
 C 5.672035 0.543848 -0.889394
 H 4.093446 1.887804 -0.314499
 C 5.045313 -1.758647 -1.171755
 H 2.974192 -2.219440 -0.851196

C 6.021996 -0.767219 -1.194978
 H 6.429291 1.326703 -0.908370
 H 5.306943 -2.787262 -1.416451
 H 7.049864 -1.015345 -1.454550
 P -2.340061 1.763623 -0.841850
 C -3.305408 1.866986 0.686180
 H -4.305583 2.269271 0.490509
 H -3.383692 0.861332 1.112802
 H -2.772708 2.526217 1.380079
 C -3.258460 0.711105 -1.978734
 H -3.516302 -0.229263 -1.479885
 H -4.172497 1.225104 -2.295284
 H -2.636776 0.494574 -2.854282
 C -2.340316 3.440601 -1.524128
 H -1.742078 4.059530 -0.846259
 H -1.855300 3.421578 -2.505738
 H -3.355074 3.845034 -1.612162
 C -3.762413 -3.077505 -1.240575
 C -4.248995 -2.698863 0.008221
 C -3.403373 -2.036912 0.895272
 C -2.095444 -1.732303 0.535218
 C -1.619563 -2.084461 -0.732234
 C -2.457082 -2.775995 -1.612090
 H -4.407308 -3.611816 -1.936362
 H -5.271349 -2.935718 0.294863
 H -3.761109 -1.762546 1.887020
 H -1.421153 -1.231452 1.225654
 H -2.065469 -3.057396 -2.587065
 O -0.374602 -1.761957 -1.114138
 H 0.307016 -0.080451 -2.852666

IX^{Si}

E = -1585.97718445
 C -0.969725 -2.861668 0.812707
 C 1.067997 -1.648371 0.228684
 C 1.785286 -2.561480 1.026029
 C 1.164976 -3.588274 1.712724

C -0.225591 -3.713649 1.607307
 H -2.045797 -3.017499 0.753555
 H 2.867577 -2.455953 1.087902
 H 1.738072 -4.285700 2.319291
 H -0.736250 -4.507865 2.151724
 B 1.683040 -0.454176 -0.504837
 C 3.131110 0.087692 -0.409618
 C 3.880474 0.049054 0.780160
 C 3.738577 0.679880 -1.531230
 C 5.170879 0.559715 0.841852
 H 3.429663 -0.364043 1.680876
 C 5.040099 1.161633 -1.485784
 H 3.174162 0.755063 -2.460625
 C 5.759280 1.105325 -0.295352
 H 5.722772 0.531806 1.779968
 H 5.491064 1.599029 -2.374926
 H 6.773768 1.498053 -0.250778
 C -0.360302 -1.818740 0.075327
 C -1.059852 -0.916428 -0.806133
 P -2.753477 -0.806491 -0.940339
 C -3.610808 -2.288891 -1.570305
 H -3.434727 -3.142622 -0.909133
 H -4.689586 -2.112028 -1.650901
 H -3.199304 -2.528714 -2.556393
 C -3.627009 -0.382251 0.598329
 H -4.714705 -0.427539 0.471102
 H -3.320165 -1.077636 1.387075
 H -3.324975 0.628641 0.896230
 C -3.180812 0.492755 -2.120767
 H -4.267693 0.547378 -2.240760
 H -2.799862 1.451954 -1.757031
 H -2.712342 0.267251 -3.084629
 Si 0.105143 0.321377 -1.502366
 H 0.123723 0.471508 -2.985147
 O -0.394468 1.908727 -1.058197
 C -0.943744 2.214021 0.130253
 C -1.934629 3.200481 0.171303

C -0.587015 1.559508 1.314946
 C -2.562441 3.515401 1.370836
 H -2.191835 3.713038 -0.753762
 C -1.217774 1.883893 2.509254
 H 0.182521 0.788598 1.293298
 C -2.213615 2.856132 2.546379
 H -3.331658 4.285900 1.385809
 H -0.928957 1.362331 3.420077
 H -2.706929 3.103767 3.483752

3.13.1.2 Reaktionspfad B

V^{Si}

E = -1615.91712301
 C 2.060288 0.518485 1.687218
 C -0.245393 0.079406 1.031285
 C -0.664622 0.608302 2.262471
 C 0.267967 1.130326 3.151921
 C 1.628887 1.125777 2.863916
 H 3.123799 0.472322 1.451404
 H -1.719366 0.633482 2.516624
 H -0.084481 1.561927 4.087675
 H 2.344314 1.570736 3.551345
 N -1.041725 -0.393128 0.005609
 C -2.446351 -0.351585 0.038089
 C -3.164004 -1.459009 -0.435217
 C -3.174331 0.769795 0.461248
 C -4.551567 -1.449703 -0.477668
 H -2.607687 -2.326395 -0.784740
 C -4.563357 0.769119 0.429341
 H -2.644974 1.654324 0.804568
 C -5.262884 -0.338257 -0.038100
 H -5.081358 -2.323783 -0.852778
 H -5.103511 1.653837 0.762603
 H -6.350547 -0.332461 -0.064916
 C 1.146379 -0.026265 0.793948
 P 1.836507 -2.475261 -0.057562

C 3.206061 -2.682470 1.104981
 H 2.972157 -2.130623 2.021920
 H 3.358749 -3.741952 1.339242
 H 4.121499 -2.268918 0.667812
 C 0.391328 -3.234606 0.702516
 H 0.618565 -4.259206 1.014927
 H 0.096742 -2.630666 1.568478
 H -0.429032 -3.227325 -0.024025
 C 2.242647 -3.396033 -1.552548
 H 2.409893 -4.454189 -1.325726
 H 1.402039 -3.279264 -2.247653
 H 3.143429 -2.970876 -2.008580
 C 1.490223 -0.782524 -0.454622
 H 2.349006 -0.379642 -1.008600
 Si -0.184430 -0.778313 -1.625326
 O 0.065856 0.815325 -2.277748
 C 0.604909 1.880169 -1.659229
 C -0.165005 2.688379 -0.817499
 C 1.956952 2.189172 -1.843459
 C 0.420340 3.742331 -0.129491
 H -1.220859 2.455390 -0.708860
 C 2.534771 3.249624 -1.155381
 H 2.537879 1.580297 -2.534181
 C 1.775193 4.023814 -0.283835
 H -0.189038 4.350315 0.537399
 H 3.590354 3.474068 -1.303362
 H 2.231484 4.847710 0.260828

V^{Si}

E = -2165.11660870
 C 1.430456 -1.781723 2.162213
 C 0.577111 -1.036079 1.356899
 C 0.882771 0.260565 0.922532
 C 2.078116 0.822670 1.387088
 C 2.925791 0.098317 2.210463
 C 2.620852 -1.210763 2.585959
 H 1.133549 -2.786737 2.452941

H 2.344902 1.823163 1.054698
 H 3.858746 0.550966 2.540763
 H 3.306023 -1.777946 3.211418
 N 0.081954 0.887482 -0.035606
 S -1.051576 -1.641810 1.087402
 O -1.108597 -3.056419 1.452845
 O -1.975422 -0.708311 1.767953
 C -0.302282 2.218326 0.173893
 C -0.679745 2.645197 1.456389
 C -0.375933 3.134090 -0.884094
 C -1.100814 3.950150 1.670160
 H -0.657640 1.925793 2.272901
 C -0.817901 4.433129 -0.662229
 H -0.080136 2.815833 -1.881710
 C -1.177933 4.853995 0.613684
 H -1.386999 4.259941 2.674099
 H -0.863571 5.129153 -1.498436
 H -1.513523 5.874766 0.783972
 C -1.425711 -1.448825 -0.646368
 Si -0.312284 -0.009404 -1.607284
 O 1.035784 -1.115403 -1.590209
 C 2.334037 -0.787326 -1.506819
 C 3.232151 -1.746275 -1.028702
 C 2.810289 0.485790 -1.842882
 C 4.571917 -1.425992 -0.862828
 H 2.844185 -2.727783 -0.766099
 C 4.154161 0.794787 -1.673558
 H 2.115367 1.235998 -2.219493
 C 5.042518 -0.153005 -1.175989
 H 5.256914 -2.178843 -0.475766
 H 4.507923 1.792148 -1.930402
 H 6.092761 0.095432 -1.038774
 H -1.204558 -2.392805 -1.157993
 P -3.152933 -1.028319 -0.804314
 C -3.572793 -1.302551 -2.536054
 H -4.609063 -1.000945 -2.723304
 H -2.888965 -0.700149 -3.146446

H -3.447555 -2.361249 -2.786327
 C -3.430619 0.709774 -0.439019
 H -4.497934 0.939283 -0.528409
 H -3.070441 0.906867 0.575047
 H -2.855641 1.313146 -1.152603
 C -4.236560 -2.059863 0.201461
 H -4.015929 -3.112245 -0.006578
 H -4.018205 -1.852708 1.253126
 H -5.286086 -1.843333 -0.027046

VII^{Si}

E = -2927.16806522
 C -2.626717 -0.358176 -0.047630
 C -1.898767 -1.040426 -1.023117
 C -2.565382 -1.786463 -1.996513
 C -3.950911 -1.866589 -1.995342
 C -4.678502 -1.205882 -1.013169
 C -4.016393 -0.463976 -0.044323
 H -1.974211 -2.308355 -2.744982
 H -4.457078 -2.448924 -2.762296
 H -5.764876 -1.268683 -0.997018
 H -4.558268 0.065687 0.735534
 S -1.908136 0.591105 1.335292
 S -0.118181 -0.971853 -1.333761
 O -3.059235 1.390152 1.794422
 O -1.399349 -0.489686 2.218252
 O 0.153483 0.283255 -2.034600
 O 0.173461 -2.230118 -2.049490
 C -0.622379 1.490687 0.799272
 P 0.626408 -2.558173 1.066784
 P -1.011180 2.898611 -0.094485
 C 1.041340 -2.336303 2.800277
 H 0.989061 -3.308454 3.304112
 H 2.044217 -1.907544 2.885139
 H 0.321042 -1.626610 3.222457
 C -1.004402 -3.312359 0.972581
 H -1.237304 -3.537077 -0.072599

H -0.976461 -4.239461 1.556118
 H -1.734177 -2.617262 1.398067
 C 1.781141 -3.749551 0.353326
 H 2.802117 -3.365467 0.457592
 H 1.702163 -4.724371 0.846956
 H 1.537769 -3.833686 -0.711919
 C 0.393030 3.547525 -1.010408
 H 0.067511 4.435131 -1.564199
 H 1.206751 3.793745 -0.324235
 H 0.745303 2.759721 -1.682148
 C -2.309176 2.622597 -1.330925
 H -3.218385 2.287748 -0.820471
 H -2.515305 3.547405 -1.881522
 H -1.957809 1.842653 -2.015158
 C -1.643267 4.236633 0.953677
 H -1.975987 5.100393 0.366510
 H -2.475310 3.815025 1.528726
 H -0.853198 4.538154 1.649647
 C 0.800219 -1.013640 0.185023
 H 1.820292 -1.048457 -0.237714
 Si 1.051153 0.717433 1.338011
 O 2.019116 1.487423 0.067300
 C 3.259110 1.052367 -0.198432
 C 3.529609 0.476271 -1.447531
 C 4.288946 1.139549 0.747874
 C 4.807916 0.015879 -1.743698
 H 2.713948 0.403263 -2.164752
 C 5.561568 0.673785 0.440266
 H 4.068831 1.582173 1.717041
 C 5.830699 0.110041 -0.804134
 H 5.005018 -0.421843 -2.721380
 H 6.354729 0.755786 1.182316
 H 6.830235 -0.249382 -1.040469

VIII^{Si}

E = -2135.13462731

C 3.141566 1.900066 1.229458

C 1.930888 1.277662 0.943890
 C 0.953800 1.728344 0.040771
 C 1.299881 2.886435 -0.678245
 C 2.505641 3.527726 -0.435439
 C 3.421790 3.059690 0.523828
 H 3.816253 1.506427 1.988362
 H 0.601369 3.297987 -1.405103
 H 2.742679 4.438125 -0.984057
 H 4.338420 3.612218 0.717005
 B -0.315638 0.784293 0.022852
 S 1.373522 -0.272545 1.479630
 O 1.929762 -0.817207 2.708748
 O -0.136091 -0.001531 1.420473
 C 1.553871 -1.329459 0.025168
 Si 0.088021 -0.835012 -1.344628
 C -1.768107 1.375375 -0.107082
 C -2.687348 1.333403 0.947613
 C -2.193325 1.944978 -1.315551
 C -3.976492 1.831270 0.800312
 H -2.390959 0.877913 1.891052
 C -3.478116 2.454449 -1.465383
 H -1.512718 1.958190 -2.168981
 C -4.378649 2.396167 -0.406074
 H -4.677158 1.768553 1.631715
 H -3.783940 2.886241 -2.417710
 H -5.390228 2.781572 -0.523052
 P 3.149442 -1.391363 -0.725736
 C 3.426820 0.013665 -1.812966
 H 4.353890 -0.140056 -2.376340
 H 2.566813 0.063242 -2.494566
 H 3.489156 0.944334 -1.239602
 C 3.195597 -2.886350 -1.726084
 H 2.376051 -2.819015 -2.451134
 H 4.160062 -2.963508 -2.239900
 H 3.043733 -3.762119 -1.086569
 C 4.498229 -1.472124 0.475283
 H 4.487271 -0.563193 1.084992

H 4.337721 -2.331474 1.134927
H 5.466806 -1.560111 -0.029367
C -3.202289 -1.422318 -1.159843
C -2.247716 -1.898984 -0.253864
C -2.651037 -2.244167 1.038769
C -3.981795 -2.111065 1.415187
C -4.927756 -1.629311 0.516008
C -4.526993 -1.283281 -0.771766
H -2.884077 -1.140722 -2.162463
H -1.896891 -2.596586 1.738865
H -4.280628 -2.378930 2.427817
H -5.967040 -1.516330 0.817684
H -5.252744 -0.890599 -1.481964
O -0.957738 -2.038203 -0.597803
H 1.245840 -2.329772 0.355592

IX^{Si}

E = -1585.94278554
C -1.923694 -3.234103 -0.228224
C -2.287465 -0.841997 0.043109
C -3.644600 -1.112396 0.276607
C -4.137241 -2.409646 0.265223
C -3.271629 -3.472130 0.015808
H -1.274251 -4.081786 -0.440616
H -4.315504 -0.283271 0.498323
H -5.191024 -2.601025 0.460343
H -3.649661 -4.493156 0.003115
B -1.592866 0.558617 0.129948
C -2.337196 1.916210 0.041314
C -3.483658 2.086423 -0.756559
C -1.852950 3.053450 0.713095
C -4.111433 3.320357 -0.877208
H -3.876890 1.234675 -1.310899
C -2.489716 4.283056 0.618309
H -0.957928 2.959624 1.327869
C -3.621658 4.421433 -0.181330
H -4.989597 3.424818 -1.512833

H -2.097667 5.142505 1.159904
 H -4.117285 5.387241 -0.266058
 C -1.422514 -1.930072 -0.233369
 C 0.008819 -1.552642 -0.484226
 P 1.279595 -2.702421 -0.026026
 C 1.006443 -3.285404 1.655091
 H 0.084927 -3.874503 1.698596
 H 1.855866 -3.886881 1.994323
 H 0.894812 -2.391131 2.281943
 C 1.477489 -4.156444 -1.099521
 H 2.345156 -4.744977 -0.780476
 H 0.587137 -4.790739 -1.077778
 H 1.637778 -3.812817 -2.127626
 C 2.878747 -1.874988 -0.089750
 H 3.682245 -2.606082 0.051301
 H 2.997081 -1.372363 -1.056215
 H 2.918765 -1.111993 0.696376
 Si 0.277603 0.149460 0.594772
 O 1.386445 0.937480 -0.520634
 C 2.601590 1.431182 -0.270989
 C 3.475515 1.609141 -1.353069
 C 3.048745 1.764851 1.015148
 C 4.758047 2.099990 -1.151895
 H 3.112519 1.361247 -2.348719
 C 4.338117 2.250661 1.204055
 H 2.369873 1.635934 1.856663
 C 5.203140 2.421500 0.128259
 H 5.418765 2.234936 -2.007263
 H 4.666256 2.506584 2.210750
 H 6.208161 2.808061 0.283125
 H 0.205480 -1.224533 -1.514514

3.13.1.3 Reaktionspfad C

VIII^{Si}

E = -2135.14675609
 C 1.080658 3.399034 0.631161

C 0.771081 2.070609 0.336727
 C -0.520492 1.643745 -0.032172
 C -1.479718 2.668298 -0.099789
 C -1.199013 3.990502 0.216264
 C 0.087677 4.364089 0.585546
 H 2.106577 3.658254 0.881179
 H -2.484490 2.410831 -0.425781
 H -1.990155 4.736166 0.158724
 H 0.323008 5.399658 0.822043
 B -1.017165 0.186693 -0.525013
 S 2.192514 1.007920 0.574305
 O 3.414866 1.794987 0.301559
 O 2.133902 0.420073 1.918327
 C 2.134950 -0.266424 -0.621675
 Si 0.584921 -0.716247 -1.343727
 C -0.999587 -1.057976 0.527532
 C -0.544797 -0.964150 1.852569
 C -1.492950 -2.305998 0.096380
 C -0.583497 -2.061031 2.702325
 H -0.159817 -0.018801 2.223801
 C -1.534221 -3.405574 0.946033
 H -1.878729 -2.397723 -0.920440
 C -1.073869 -3.285452 2.252684
 H -0.232989 -1.958368 3.727938
 H -1.933702 -4.353710 0.590135
 H -1.103600 -4.142318 2.923810
 P 3.695790 -1.001195 -0.795833
 C 4.815950 -0.019573 -1.816584
 H 5.816355 -0.465307 -1.849208
 H 4.402290 0.053207 -2.827779
 H 4.847568 0.978778 -1.367524
 C 3.542174 -2.620710 -1.575238
 H 3.113109 -2.516124 -2.576494
 H 4.535178 -3.076864 -1.652164
 H 2.886602 -3.256099 -0.971151
 C 4.509058 -1.243387 0.797706
 H 4.653100 -0.258216 1.253722

H 3.846711 -1.825359 1.445963
H 5.470911 -1.750101 0.661465
C -3.443804 0.033966 -0.958585
C -4.411593 -0.306042 -1.910558
C -5.736524 -0.476772 -1.536522
C -6.124651 -0.315973 -0.208588
C -5.165208 0.024308 0.738208
C -3.834760 0.201053 0.375472
H -4.092768 -0.427584 -2.943462
H -6.475396 -0.740458 -2.291861
H -7.163635 -0.452824 0.083378
H -5.451589 0.157087 1.780359
H -3.093703 0.471519 1.123926
O -2.183095 0.202885 -1.386721
H 0.732470 -1.983265 -2.123434

IX^{Si}

E = -1585.95026060
C -1.318817 2.486319 1.064706
C 0.707036 1.276094 0.471111
C 1.362260 1.946305 1.508063
C 0.699511 2.847493 2.334717
C -0.649644 3.106723 2.110886
H -2.361985 2.746339 0.886400
H 2.414889 1.728728 1.688908
H 1.226658 3.338551 3.150506
H -1.183354 3.813176 2.745339
B 1.433198 0.202162 -0.443424
C 2.985668 -0.000686 -0.495635
C 3.851915 1.098128 -0.594371
C 3.564529 -1.274923 -0.443683
C 5.230957 0.933242 -0.639617
H 3.431558 2.102915 -0.640603
C 4.944043 -1.447676 -0.482820
H 2.915753 -2.146840 -0.374222
C 5.783677 -0.343304 -0.581810
H 5.879935 1.804233 -0.720109

H 5.367143 -2.450347 -0.437071
 H 6.863935 -0.475554 -0.615070
 C -0.666292 1.571575 0.220442
 C -1.286624 0.900406 -0.929087
 P -2.963897 0.603147 -1.000013
 C -3.642778 -0.036559 0.556285
 H -3.416015 0.669019 1.361724
 H -4.726356 -0.185346 0.489380
 H -3.141495 -0.984131 0.782608
 C -4.017456 2.030587 -1.423148
 H -5.076469 1.748977 -1.453809
 H -3.877098 2.827892 -0.686731
 H -3.705753 2.411198 -2.401698
 C -3.364389 -0.624924 -2.264401
 H -4.450339 -0.751412 -2.328606
 H -2.977092 -0.294474 -3.233588
 H -2.895140 -1.576775 -1.997932
 Si 0.014271 0.098172 -1.880219
 H -0.437143 -0.824082 -2.963473
 C -0.151375 -1.478060 1.721387
 C -1.006411 -2.159791 2.582499
 C -1.867834 -3.143940 2.108208
 C -1.867917 -3.454091 0.750120
 C -1.025486 -2.775728 -0.121092
 C -0.165932 -1.788859 0.364678
 H 0.522199 -0.712067 2.091803
 H -0.992203 -1.915120 3.642964
 H -2.527940 -3.672315 2.792627
 H -2.524821 -4.232798 0.366235
 H -0.998103 -3.011929 -1.183650
 O 0.646257 -1.175032 -0.540774

3.13.2 Bei Germylenen

3.13.2.1 Reaktionspfad A

V^{Ge}

E = -3404.14795825

C 0.989528 -2.819190 1.059302
 C -1.001394 -1.624916 0.380691
 C -1.747359 -2.394535 1.269286
 C -1.129518 -3.360431 2.061784
 C 0.239563 -3.565776 1.964588
 H 2.058808 -3.014100 0.978834
 H -2.821446 -2.242124 1.338311
 H -1.728996 -3.951725 2.750920
 H 0.730094 -4.315365 2.582530
 N -1.533528 -0.639030 -0.462598
 C -2.820567 -0.090650 -0.321485
 C -3.324688 0.297834 0.925832
 C -3.601578 0.132931 -1.459421
 C -4.579393 0.883214 1.025621
 H -2.718099 0.142641 1.815516
 C -4.849384 0.734793 -1.355219
 H -3.216923 -0.176986 -2.429290
 C -5.348742 1.107703 -0.112315
 H -4.953946 1.180123 2.003742
 H -5.440293 0.902620 -2.253922
 H -6.329383 1.571599 -0.029937
 C 0.402009 -1.845505 0.243888
 C 1.076778 -1.018518 -0.749393
 P 2.754352 -0.773850 -0.839457
 C 3.548650 -0.250937 0.708478
 H 3.213349 -0.911464 1.515489
 H 4.641277 -0.286258 0.631953
 H 3.219262 0.767855 0.941591
 C 3.714127 -2.221438 -1.388422
 H 4.783910 -1.989805 -1.445690
 H 3.562101 -3.051455 -0.691042
 H 3.343633 -2.528901 -2.371803
 C 3.110736 0.519219 -2.050563
 H 4.191559 0.673548 -2.131229
 H 2.711922 0.222151 -3.026551
 H 2.631927 1.450815 -1.729216
 Ge -0.186169 0.173084 -1.444895

H -0.554214 0.457123 -2.898616
 O 0.128736 1.905998 -0.927677
 C 0.734158 2.189762 0.238905
 C 0.450647 1.500563 1.425430
 C 1.700778 3.202522 0.260396
 C 1.121195 1.823386 2.598641
 H -0.297626 0.711201 1.422206
 C 2.365356 3.518172 1.439805
 H 1.904223 3.739791 -0.664175
 C 2.084598 2.828257 2.616208
 H 0.887230 1.274885 3.509464
 H 3.109626 4.313092 1.438564
 H 2.605945 3.076283 3.538203

VI^{Ge}

E = -3953.34571228
 C 3.697582 1.317779 -0.916446
 C 2.498427 1.035225 -0.274460
 C 1.303797 1.706143 -0.603520
 C 1.381543 2.686028 -1.604696
 C 2.582759 2.977300 -2.233668
 C 3.748925 2.292288 -1.903218
 H 4.583983 0.767338 -0.607648
 H 0.475095 3.216973 -1.885257
 H 2.602920 3.745672 -3.004562
 H 4.688154 2.521818 -2.401019
 N 0.086717 1.411179 0.010886
 S 2.501229 -0.149356 1.052456
 O 3.793374 -0.859506 0.995118
 O 2.128519 0.585626 2.262025
 C 1.238732 -1.232171 0.644812
 C -0.884743 2.433250 0.135658
 C -0.584627 3.602768 0.842537
 C -2.161021 2.267127 -0.403710
 C -1.550242 4.585177 1.002496
 H 0.409633 3.715319 1.270080
 C -3.132313 3.247423 -0.219875

H -2.380560 1.370895 -0.979653
 C -2.830245 4.409444 0.478525
 H -1.308591 5.490379 1.556650
 H -4.126076 3.101215 -0.639073
 H -3.587244 5.178879 0.615876
 P 1.689455 -2.725201 -0.054485
 C 2.724922 -2.564486 -1.532659
 H 3.027070 -3.545332 -1.916509
 H 2.166203 -2.014870 -2.297556
 H 3.609952 -1.985518 -1.248070
 C 0.229917 -3.661813 -0.546817
 H -0.306370 -3.109796 -1.322575
 H 0.542781 -4.643187 -0.919020
 H -0.437600 -3.789598 0.311655
 C 2.627133 -3.765898 1.088264
 H 3.485464 -3.174641 1.423834
 H 1.992936 -3.998488 1.949900
 H 2.960850 -4.689802 0.602491
 Ge -0.373859 -0.271492 0.663609
 O -1.479129 -1.076197 -0.534654
 H -1.181994 -0.060294 1.939407
 C -2.785519 -1.396928 -0.422640
 C -3.280890 -2.395696 -1.268568
 C -3.663477 -0.769813 0.468043
 C -4.617958 -2.764655 -1.215886
 H -2.599852 -2.865087 -1.975086
 C -5.000027 -1.150838 0.514424
 H -3.306075 0.024042 1.118202
 C -5.487933 -2.148680 -0.321009
 H -4.983597 -3.542043 -1.884770
 H -5.667371 -0.650709 1.214256
 H -6.535283 -2.439182 -0.280692

VII^{Ge}

E = -2620.28203911
 C -1.932726 -1.292285 -0.937995
 C -2.686396 -0.644349 0.048243

C -4.050901 -0.914270 0.148720
 C -4.671842 -1.798267 -0.723747
 C -3.927325 -2.425994 -1.713421
 C -2.566499 -2.170650 -1.816422
 H -4.615635 -0.399078 0.921520
 H -5.738283 -1.992042 -0.627160
 H -4.401165 -3.116509 -2.408271
 H -1.959250 -2.659026 -2.574357
 S -0.157784 -1.062679 -1.283165
 S -2.066034 0.505182 1.324931
 O 0.203906 -2.308693 -1.988009
 O -0.076975 0.208219 -2.026026
 O -1.428690 -0.365738 2.333498
 O -3.276564 1.261198 1.691649
 C 0.709185 -0.969785 0.155266
 C -0.900640 1.535182 0.685396
 P -1.438032 2.792876 -0.351765
 P 1.034470 -2.455447 0.943100
 C -0.078203 3.457244 -1.319499
 H -0.458369 4.259712 -1.960897
 H 0.707409 3.831547 -0.657835
 H 0.336011 2.636807 -1.914733
 C -2.691607 2.240113 -1.532128
 H -3.552753 1.855412 -0.975339
 H -3.005075 3.073460 -2.170601
 H -2.246931 1.439755 -2.133365
 C -2.202710 4.149150 0.570429
 H -1.446981 4.605328 1.218334
 H -2.634181 4.904850 -0.095744
 H -2.979249 3.697489 1.197969
 C 1.563273 -2.122874 2.633103
 H 1.760277 -3.069085 3.147912
 H 2.472123 -1.512788 2.626468
 H 0.756437 -1.576452 3.135823
 C -0.427889 -3.510777 1.075181
 H -0.767971 -3.759636 0.064292
 H -0.203722 -4.428349 1.630183

H -1.199766 -2.924530 1.588571
 C 2.324023 -3.425919 0.130539
 H 2.499051 -4.382254 0.636193
 H 1.989410 -3.585649 -0.900088
 H 3.241964 -2.827637 0.110213
 H 1.394485 0.763854 2.331775
 O 2.002423 1.780034 -0.036299
 C 3.212301 1.240087 -0.316294
 C 3.366296 0.364114 -1.396124
 C 4.317931 1.557192 0.476466
 C 4.614524 -0.180579 -1.671252
 H 2.492293 0.122877 -1.995907
 C 5.563135 1.007720 0.190590
 H 4.181181 2.242831 1.310412
 C 5.717977 0.134363 -0.881191
 H 4.725272 -0.859028 -2.515928
 H 6.419410 1.265860 0.811910
 H 6.693315 -0.293887 -1.103732
 Ge 0.820968 0.767751 0.910326

VIII^{Ge}

E = -3923.42013075
 C -0.311994 0.529992 3.097770
 C 0.401306 0.649454 1.916831
 C 1.310124 -0.285497 1.419482
 C 1.488117 -1.441011 2.179959
 C 0.793709 -1.600010 3.377271
 C -0.090584 -0.623996 3.843124
 H -1.002153 1.304556 3.427294
 H 2.179624 -2.212503 1.844914
 H 0.947175 -2.500620 3.969115
 H -0.607996 -0.767676 4.789418
 B 1.910312 0.214178 0.007880
 S 0.157923 1.846862 0.641528
 O -0.272527 3.163111 1.107958
 O 1.614581 1.743112 0.074069
 C -0.791160 1.154659 -0.553290

C 3.400252 -0.107130 -0.387668
 C 4.378388 0.890825 -0.445174
 C 3.795777 -1.422992 -0.663467
 C 5.699388 0.588686 -0.761939
 H 4.093832 1.921511 -0.237243
 C 5.114535 -1.732990 -0.973878
 H 3.051185 -2.221039 -0.647019
 C 6.073234 -0.724902 -1.024555
 H 6.442720 1.383812 -0.802568
 H 5.395914 -2.763776 -1.184640
 H 7.106452 -0.962728 -1.272102
 P -2.365699 1.784798 -0.764932
 C -3.305829 1.925018 0.776188
 H -4.314102 2.309455 0.586438
 H -3.363271 0.932739 1.235651
 H -2.768116 2.611828 1.438863
 C -3.307163 0.725783 -1.874364
 H -3.545080 -0.215813 -1.368357
 H -4.232194 1.234581 -2.166479
 H -2.707164 0.512515 -2.765467
 C -2.362927 3.452520 -1.471380
 H -1.749504 4.076027 -0.811410
 H -1.893582 3.416569 -2.460090
 H -3.375602 3.864224 -1.549629
 C -3.912101 -2.975552 -1.101151
 C -4.394244 -2.533846 0.129038
 C -3.520070 -1.904997 1.012972
 C -2.189582 -1.696028 0.668125
 C -1.708533 -2.116069 -0.579869
 C -2.583719 -2.771749 -1.455613
 H -4.579574 -3.484548 -1.794957
 H -5.434265 -2.696399 0.403772
 H -3.875382 -1.581854 1.991169
 H -1.494595 -1.222156 1.357730
 H -2.196153 -3.108937 -2.414586
 O -0.437284 -1.911749 -0.933748
 H 0.164759 -0.237587 -2.861004

Ge 0.314517 -0.275676 -1.321731

IX^{Ge}

E = -1585.97664167

C -0.969725 -2.861668 0.812707

C 1.067997 -1.648371 0.228684

C 1.785286 -2.561480 1.026029

C 1.164976 -3.588274 1.712724

C -0.225591 -3.713649 1.607307

H -2.045797 -3.017499 0.753555

H 2.867577 -2.455953 1.087902

H 1.738072 -4.285700 2.319291

H -0.736250 -4.507865 2.151724

B 1.683040 -0.454176 -0.504837

C 3.131110 0.087692 -0.409618

C 3.880474 0.049054 0.780160

C 3.738577 0.679880 -1.531230

C 5.170879 0.559715 0.841852

H 3.429663 -0.364043 1.680876

C 5.040099 1.161633 -1.485784

H 3.174162 0.755063 -2.460625

C 5.759280 1.105325 -0.295352

H 5.722772 0.531806 1.779968

H 5.491064 1.599029 -2.374926

H 6.773768 1.498053 -0.250778

C -0.360302 -1.818740 0.075327

C -1.059852 -0.916428 -0.806133

P -2.753477 -0.806491 -0.940339

C -3.610808 -2.288891 -1.570305

H -3.434727 -3.142622 -0.909133

H -4.689586 -2.112028 -1.650901

H -3.199304 -2.528714 -2.556393

C -3.627009 -0.382251 0.598329

H -4.714705 -0.427539 0.471102

H -3.320165 -1.077636 1.387075

H -3.324975 0.628641 0.896230

C -3.180812 0.492755 -2.120767

H -4.267693 0.547378 -2.240760
H -2.799862 1.451954 -1.757031
H -2.712342 0.267251 -3.084629
Si 0.105143 0.321377 -1.502366
H 0.123723 0.471508 -2.985147
O -0.394468 1.908727 -1.058197
C -0.943744 2.214021 0.130253
C -1.934629 3.200481 0.171303
C -0.587015 1.559508 1.314946
C -2.562441 3.515401 1.370836
H -2.191835 3.713038 -0.753762
C -1.217774 1.883893 2.509254
H 0.182521 0.788598 1.293298
C -2.213615 2.856132 2.546379
H -3.331658 4.285900 1.385809
H -0.928957 1.362331 3.420077
H -2.706929 3.103767 3.483752

3.13.2.2 Reaktionspfad B

V^{Ge}

E = -3404.15650094
C 2.070018 0.740203 1.695814
C -0.248158 0.226813 1.144998
C -0.633237 0.872130 2.333339
C 0.316555 1.483824 3.142500
C 1.669100 1.458145 2.819091
H 3.126805 0.678676 1.434102
H -1.681580 0.916881 2.611175
H -0.015302 2.002703 4.040796
H 2.400322 1.974336 3.436379
N -1.086237 -0.330899 0.205583
C -2.482684 -0.233709 0.247919
C -3.243227 -1.354048 -0.118978
C -3.171380 0.947450 0.565568
C -4.629743 -1.299659 -0.165516
H -2.720298 -2.274261 -0.374143

C -4.558941 0.992725 0.531048
 H -2.609968 1.840205 0.826695
 C -5.299703 -0.127226 0.166778
 H -5.191182 -2.185782 -0.457156
 H -5.066500 1.923561 0.779244
 H -6.386423 -0.084340 0.137514
 C 1.139931 0.102072 0.883573
 P 1.864768 -2.398219 0.268799
 C 3.235416 -2.490433 1.446319
 H 2.998166 -1.852323 2.304612
 H 3.391975 -3.521578 1.782551
 H 4.149113 -2.116472 0.971540
 C 0.429807 -3.100866 1.101924
 H 0.669184 -4.090094 1.505864
 H 0.136098 -2.422470 1.911236
 H -0.401061 -3.169748 0.391348
 C 2.285421 -3.459742 -1.127991
 H 2.489167 -4.482408 -0.793751
 H 1.443692 -3.453852 -1.830155
 H 3.169921 -3.057956 -1.634341
 C 1.498827 -0.763406 -0.288033
 H 2.342789 -0.391482 -0.883940
 Ge -0.249552 -0.885433 -1.517597
 O 0.041090 0.797988 -2.288827
 C 0.649276 1.828709 -1.691136
 C -0.051965 2.682804 -0.830315
 C 2.013198 2.069847 -1.907139
 C 0.605592 3.702870 -0.157876
 H -1.114844 2.503230 -0.689957
 C 2.663391 3.099578 -1.236765
 H 2.544535 1.429900 -2.610088
 C 1.969140 3.914064 -0.347685
 H 0.046982 4.339846 0.526397
 H 3.725443 3.267785 -1.412464
 H 2.482242 4.712302 0.184593

Vl^{Ge}

E = -3953.35564742

C 1.799828 3.135741 1.054022

C 1.193063 1.961611 0.619665

C 0.032267 1.953699 -0.180251

C -0.487814 3.220488 -0.515752

C 0.104835 4.389451 -0.071684

C 1.255928 4.363243 0.715422

H 2.696455 3.051804 1.664191

H -1.372076 3.269060 -1.145539

H -0.334179 5.343568 -0.358843

H 1.718199 5.285503 1.058821

N -0.544663 0.787646 -0.661902

S 1.893364 0.437179 1.141581

O 3.235527 0.695367 1.703786

O 0.923188 -0.177059 2.092951

C 1.987506 -0.495790 -0.271905

C -1.925626 0.826876 -0.982441

C -2.857483 1.223305 -0.015143

C -2.391707 0.418245 -2.233989

C -4.214974 1.193344 -0.290542

H -2.497527 1.531375 0.964003

C -3.757299 0.372696 -2.499420

H -1.675213 0.135008 -3.001896

C -4.675297 0.758754 -1.531854

H -4.922919 1.488453 0.481648

H -4.100529 0.044122 -3.478907

H -5.742541 0.724320 -1.740866

P 3.494986 -1.250490 -0.550980

C 4.841085 -0.095510 -0.909389

H 5.794451 -0.619042 -1.042216

H 4.589312 0.467993 -1.813665

H 4.899556 0.593363 -0.060803

C 3.344524 -2.338239 -1.986054

H 3.032860 -1.754272 -2.858356

H 4.308359 -2.816371 -2.190080

H 2.588006 -3.104907 -1.788606

C 4.079696 -2.275453 0.822782
 H 4.143269 -1.623487 1.700776
 H 3.339667 -3.059722 1.013769
 H 5.057869 -2.720756 0.608819
 C -1.780432 -1.818724 1.081242
 C -2.185479 -1.244060 2.283992
 C -2.719978 -2.332306 0.190168
 C -3.540074 -1.200216 2.594797
 H -1.435296 -0.825933 2.952185
 C -4.069109 -2.270763 0.509446
 H -2.379684 -2.757889 -0.751604
 C -4.487022 -1.711056 1.714054
 H -3.855366 -0.753742 3.536345
 H -4.802099 -2.660063 -0.194576
 H -5.545775 -1.667652 1.960178
 Ge 0.333087 -0.852879 -1.224381
 O -0.462508 -1.880461 0.744043
 H 0.082184 -1.344433 1.388878

VII^{Ge}

E = -4715.41592234
 C 2.659147 -0.598664 0.022859
 C 1.895017 -1.260646 0.985444
 C 2.515242 -2.119542 1.894713
 C 3.885009 -2.335906 1.840421
 C 4.644856 -1.697561 0.868550
 C 4.030639 -0.840662 -0.034757
 H 1.898424 -2.620263 2.636607
 H 4.352794 -3.006335 2.558252
 H 5.718506 -1.865535 0.809836
 H 4.598897 -0.322251 -0.803179
 S 2.007352 0.502500 -1.277430
 S 0.138090 -1.040326 1.365896
 O 3.224756 1.199826 -1.731308
 O 1.358416 -0.459542 -2.208335
 O 0.006268 0.209235 2.114581
 O -0.234087 -2.290952 2.057513

C 0.841457 1.498900 -0.653229
 P -0.852405 -2.488349 -1.018173
 P 1.364088 2.791782 0.333690
 C -1.342365 -2.162044 -2.716376
 H -1.417644 -3.109334 -3.261950
 H -2.303224 -1.637886 -2.728021
 H -0.577866 -1.512774 -3.158375
 C 0.724969 -3.350012 -1.066610
 H 1.006308 -3.645436 -0.051456
 H 0.607067 -4.239044 -1.696061
 H 1.470572 -2.673793 -1.497637
 C -2.056627 -3.614399 -0.282426
 H -3.045474 -3.142169 -0.306478
 H -2.089428 -4.570361 -0.816530
 H -1.758985 -3.761251 0.761895
 C 0.016527 3.495914 1.290529
 H 0.404754 4.322231 1.896111
 H -0.776058 3.840604 0.621462
 H -0.400490 2.698814 1.912611
 C 2.630955 2.302099 1.535327
 H 3.500091 1.917101 0.990780
 H 2.930817 3.160134 2.147405
 H 2.207708 1.513141 2.166499
 C 2.126164 4.134339 -0.618789
 H 2.547300 4.913690 0.026817
 H 2.909293 3.674674 -1.232381
 H 1.369984 4.566583 -1.282733
 C -0.833963 -0.964606 -0.105535
 H -1.836889 -0.879859 0.347785
 O -1.943833 1.707793 0.147891
 C -3.143012 1.192894 0.412166
 C -3.380220 0.585244 1.657844
 C -4.180780 1.195112 -0.535722
 C -4.614915 0.014368 1.942640
 H -2.564951 0.566488 2.378412
 C -5.409804 0.616694 -0.240526
 H -4.003002 1.669300 -1.499270

C -5.637890 0.021666 0.997417
H -4.777583 -0.446237 2.916357
H -6.202739 0.636995 -0.987425
H -6.603415 -0.425529 1.225084
Ge -0.958802 0.900688 -1.294656

VIII^{Ge}

E = -3923.38751983
C 3.179061 2.057410 1.109319
C 1.951655 1.433816 0.913488
C 0.932397 1.852714 0.040710
C 1.256627 2.967496 -0.754373
C 2.481412 3.601464 -0.608083
C 3.438748 3.173270 0.328563
H 3.884698 1.697609 1.856799
H 0.528185 3.354425 -1.464745
H 2.700875 4.477536 -1.216599
H 4.370054 3.722198 0.446998
B -0.339953 0.924137 0.135206
S 1.412418 -0.080278 1.562540
O 1.999672 -0.526431 2.816110
O -0.100445 0.181921 1.528616
C 1.586933 -1.230700 0.217098
C -1.805292 1.475952 0.021091
C -2.723389 1.359499 1.072001
C -2.253628 2.072595 -1.166166
C -4.029136 1.816974 0.943099
H -2.411550 0.878385 1.997470
C -3.556265 2.538908 -1.298210
H -1.577438 2.145628 -2.019972
C -4.452723 2.411199 -0.241477
H -4.726130 1.697462 1.771180
H -3.878248 2.993376 -2.234486
H -5.477525 2.764051 -0.344662
P 3.183608 -1.437449 -0.480196
C 3.552192 -0.154272 -1.687350
H 4.542309 -0.328482 -2.123053

H 2.778037 -0.203137 -2.463023
 H 3.521633 0.834833 -1.217393
 C 3.170424 -3.018364 -1.339484
 H 2.357126 -2.991860 -2.073969
 H 4.130826 -3.182490 -1.839804
 H 2.982404 -3.823619 -0.621821
 C 4.512751 -1.466025 0.745420
 H 4.543386 -0.499256 1.258117
 H 4.291679 -2.238718 1.489301
 H 5.481679 -1.660202 0.272239
 C -3.153888 -1.396929 -1.048212
 C -2.259156 -1.896975 -0.090295
 C -2.762516 -2.266860 1.163788
 C -4.114859 -2.131093 1.448568
 C -4.994846 -1.621889 0.497995
 C -4.501418 -1.253839 -0.750591
 H -2.771266 -1.099699 -2.024706
 H -2.063312 -2.644651 1.906807
 H -4.484940 -2.419089 2.431956
 H -6.051646 -1.506039 0.729354
 H -5.172172 -0.840653 -1.502317
 O -0.954340 -2.031227 -0.334047
 H 1.154292 -2.178635 0.560843
 Ge 0.075138 -0.739490 -1.288597

***IX*^{Ge}**

E = -3374.18787417
 C 2.466731 2.274568 0.687193
 C 0.257295 1.778298 -0.196330
 C -0.101209 3.113510 0.042324
 C 0.794767 4.024715 0.583491
 C 2.080756 3.591196 0.902252
 H 3.484335 1.986216 0.947269
 H -1.100786 3.444733 -0.237782
 H 0.508137 5.062037 0.743270
 H 2.800248 4.294151 1.321038
 B -0.631062 0.718953 -0.876047

C -2.173160 0.739880 -0.993713
 C -2.980553 1.355381 -0.020112
 C -2.827413 0.043819 -2.026889
 C -4.366173 1.280180 -0.075268
 H -2.505830 1.864644 0.816919
 C -4.211956 -0.013768 -2.102338
 H -2.227385 -0.464497 -2.781721
 C -4.985015 0.601092 -1.120488
 H -4.968247 1.746087 0.703128
 H -4.693383 -0.551529 -2.917510
 H -6.071494 0.543420 -1.166195
 C 1.572139 1.334888 0.144664
 C 1.868110 -0.079977 -0.110807
 P 3.453167 -0.738867 0.022294
 C 4.140207 -0.723562 1.708875
 H 3.456084 -1.280279 2.358373
 H 5.129986 -1.193643 1.730920
 H 4.216639 0.299916 2.086980
 C 3.398539 -2.487765 -0.426142
 H 4.349542 -2.974223 -0.183844
 H 2.576380 -2.959978 0.124325
 H 3.184280 -2.580206 -1.495629
 C 4.739387 0.011004 -1.023877
 H 5.714566 -0.465322 -0.871800
 H 4.433355 -0.100034 -2.069820
 H 4.814747 1.080165 -0.799078
 O 0.155037 -1.873963 0.429251
 C -0.986960 -1.645201 1.114023
 C -2.168130 -2.280427 0.724323
 C -1.004731 -0.761224 2.196752
 C -3.347986 -2.033838 1.411948
 H -2.142848 -2.952300 -0.130710
 C -2.191194 -0.529061 2.883102
 H -0.084791 -0.254113 2.483852
 C -3.367537 -1.162285 2.498180
 H -4.265642 -2.523876 1.091097
 H -2.193477 0.162128 3.724516

H -4.295377 -0.972113 3.033222
H 0.986809 -1.050897 0.536476
Ge 0.605506 -0.883408 -1.538827

3.13.2.3 Reaktionspfad C

VIII^{Ge}

E = -3923.39251415
C -1.092792 3.431077 -0.623373
C -0.757095 2.098307 -0.385945
C 0.538747 1.690701 -0.008274
C 1.470517 2.733109 0.124751
C 1.162950 4.061809 -0.136530
C -0.125729 4.418195 -0.512412
H -2.119093 3.675470 -0.885214
H 2.475412 2.484487 0.457524
H 1.933527 4.823402 -0.030086
H -0.384228 5.457203 -0.706003
B 1.088252 0.226595 0.395371
S -2.142921 1.004889 -0.707551
O -3.389040 1.786444 -0.540008
O -1.976559 0.395737 -2.031891
C -2.164927 -0.240078 0.515508
C 1.128438 -0.955148 -0.703969
C 0.755961 -0.787848 -2.044097
C 1.603585 -2.221352 -0.312437
C 0.852617 -1.836638 -2.950502
H 0.386371 0.175862 -2.383129
C 1.701047 -3.273020 -1.214810
H 1.930015 -2.367483 0.719056
C 1.320316 -3.081900 -2.539628
H 0.562128 -1.679425 -3.987871
H 2.081473 -4.239268 -0.887743
H 1.394382 -3.900937 -3.253270
P -3.743405 -0.950649 0.619466
C -4.914733 0.061735 1.550649
H -5.918155 -0.378212 1.535026

H -4.560435 0.154392 2.582570
 H -4.914267 1.049495 1.078395
 C -3.662670 -2.552979 1.444411
 H -3.294890 -2.430797 2.467712
 H -4.666063 -2.992018 1.469554
 H -2.981742 -3.212714 0.897446
 C -4.465140 -1.227513 -1.013314
 H -4.576623 -0.253030 -1.500001
 H -3.768890 -1.828084 -1.606938
 H -5.436168 -1.726952 -0.923041
 C 3.499168 0.077070 0.904760
 C 4.416806 -0.347856 1.870906
 C 5.753192 -0.522517 1.540192
 C 6.199987 -0.280342 0.243795
 C 5.289115 0.145971 -0.716342
 C 3.948740 0.328279 -0.396460
 H 4.052260 -0.533057 2.878902
 H 6.454045 -0.854214 2.304830
 H 7.247480 -0.420908 -0.013960
 H 5.622239 0.342698 -1.734129
 H 3.244182 0.664883 -1.153583
 O 2.222762 0.251736 1.285930
 H -0.862521 -2.019458 2.143381
 Ge -0.578431 -0.710266 1.345282

***IX*^{Ge}**

E = -3374.20212951
 C -1.128067 -1.870114 1.979435
 C 0.747020 -0.544593 1.220665
 C 1.334889 -0.735505 2.477875
 C 0.694564 -1.437470 3.491851
 C -0.551275 -2.000143 3.234493
 H -2.071483 -2.379745 1.787058
 H 2.312279 -0.292721 2.671787
 H 1.161905 -1.548580 4.468197
 H -1.066439 -2.568740 4.007405

B 1.482142 0.417048 0.220209
 C 3.009752 0.311942 -0.089973
 C 3.706572 1.404455 -0.623736
 C 3.728175 -0.864907 0.162014
 C 5.067931 1.329758 -0.890187
 H 3.160281 2.323433 -0.830886
 C 5.088873 -0.948605 -0.103879
 H 3.201110 -1.731137 0.560797
 C 5.761598 0.151361 -0.629300
 H 5.592617 2.189873 -1.303183
 H 5.628258 -1.873494 0.093471
 H 6.828392 0.088767 -0.838957
 C -0.506804 -1.149070 0.943590
 C -1.056049 -1.072387 -0.420345
 P -2.772850 -0.975150 -0.622946
 C -3.639075 -2.579985 -0.668924
 H -3.468799 -3.126858 0.263637
 H -4.716445 -2.445621 -0.821340
 H -3.220378 -3.166817 -1.493728
 C -3.587628 -0.017902 0.682427
 H -4.672613 -0.008690 0.531239
 H -3.352935 -0.436343 1.664633
 H -3.198127 1.004318 0.640571
 C -3.303599 -0.173054 -2.153745
 H -4.395723 -0.081436 -2.139435
 H -2.847147 0.818891 -2.209579
 H -2.984843 -0.760580 -3.017550
 H -0.868496 -1.104354 -3.048620
 C -1.116311 2.621838 -0.934827
 C -2.268256 3.330939 -0.616020
 C -2.616584 3.548087 0.714947
 C -1.804581 3.036227 1.723156
 C -0.652100 2.321662 1.415102
 C -0.296270 2.125741 0.079569
 H -0.812868 2.462161 -1.967319
 H -2.891937 3.728592 -1.415127
 H -3.511155 4.114806 0.963980

H -2.064238 3.199893 2.767483
H -0.010225 1.934841 2.201930
O 0.874508 1.558280 -0.274444
Ge 0.180573 -1.281074 -1.845715

3.13.3 Bei Stannylene

3.13.3.1 Reaktionspfad A

V^{Sn}

E = -1329.48363273
C 0.926257 -2.924643 1.041851
C -1.046710 -1.672045 0.408382
C -1.791070 -2.478708 1.272645
C -1.189046 -3.476599 2.031398
C 0.177925 -3.693818 1.925108
H 1.990702 -3.135093 0.943357
H -2.864575 -2.324418 1.344084
H -1.797202 -4.085695 2.697126
H 0.664024 -4.470385 2.512389
N -1.621186 -0.669120 -0.383021
C -2.889974 -0.117502 -0.148087
C -3.339509 0.211723 1.138708
C -3.714801 0.188724 -1.237188
C -4.574148 0.819229 1.320378
H -2.703885 -0.004337 1.994727
C -4.942129 0.811822 -1.050134
H -3.379103 -0.074904 -2.239385
C -5.383807 1.125547 0.230290
H -4.901052 1.069922 2.328201
H -5.563032 1.042088 -1.914207
H -6.348299 1.606391 0.378468
C 0.358187 -1.907628 0.260480
C 1.108936 -1.091076 -0.691247
P 2.793951 -0.880203 -0.657217
C 3.486227 -0.423821 0.958049
H 3.071586 -1.092678 1.719821
H 4.579884 -0.492118 0.960615

H 3.170994 0.599153 1.191776
 C 3.780836 -2.314074 -1.202797
 H 4.852205 -2.082280 -1.196461
 H 3.594240 -3.167710 -0.543635
 H 3.462749 -2.587358 -2.214329
 C 3.260015 0.449085 -1.792782
 H 4.346370 0.585791 -1.789912
 H 2.934632 0.192293 -2.807333
 H 2.778513 1.380449 -1.472172
 Sn -0.179909 0.284353 -1.512118
 H -0.651246 0.730335 -3.067370
 O 0.313190 2.150556 -0.818918
 C 0.881906 2.298220 0.382952
 C 0.466549 1.572752 1.511036
 C 1.947285 3.199380 0.526899
 C 1.093450 1.752057 2.737335
 H -0.354786 0.864081 1.415110
 C 2.568180 3.372295 1.758369
 H 2.260108 3.768204 -0.347068
 C 2.150118 2.648689 2.872433
 H 0.751501 1.176011 3.595595
 H 3.388558 4.083089 1.847889
 H 2.638037 2.786309 3.834890

Vl^{Sn}

E = -1878.69097650
 C -3.941487 0.659587 0.709247
 C -2.702541 0.648832 0.075568
 C -1.620311 1.443546 0.536188
 C -1.875677 2.226444 1.679149
 C -3.111504 2.231590 2.304754
 C -4.161029 1.449447 1.827771
 H -4.729154 0.039789 0.284792
 H -1.066629 2.832529 2.079097
 H -3.252136 2.852646 3.187852
 H -5.133379 1.460865 2.314138
 N -0.360785 1.433217 -0.042296

S -2.488885 -0.478738 -1.288350
 O -3.770610 -1.136300 -1.529494
 O -1.843742 0.314830 -2.368330
 C -1.230266 -1.526378 -0.802194
 C 0.496344 2.541175 0.078449
 C 0.051021 3.843679 -0.186215
 C 1.843237 2.343677 0.398173
 C 0.936704 4.909209 -0.132211
 H -0.993425 4.002635 -0.446483
 C 2.730955 3.414384 0.426773
 H 2.186283 1.342131 0.650948
 C 2.282769 4.703008 0.166874
 H 0.575549 5.913956 -0.345147
 H 3.775733 3.231886 0.671677
 H 2.973162 5.543151 0.197089
 P -1.397994 -2.538483 0.572527
 C -1.049684 -1.748276 2.168110
 H -1.120977 -2.462677 2.996436
 H -0.033406 -1.339261 2.112448
 H -1.760238 -0.927404 2.322995
 C -0.249205 -3.921819 0.446524
 H 0.758034 -3.497756 0.370187
 H -0.315883 -4.566890 1.329359
 H -0.475515 -4.490102 -0.460670
 C -3.082660 -3.178503 0.670003
 H -3.759573 -2.349507 0.902225
 H -3.367940 -3.581004 -0.306348
 H -3.149562 -3.945430 1.448885
 Sn 0.374800 -0.232225 -1.088212
 H 1.286910 0.197399 -2.426814
 O 1.646984 -1.144003 0.243201
 C 2.980585 -1.246442 0.298159
 C 3.846862 -0.491033 -0.503344
 C 3.539041 -2.151156 1.212469
 C 5.224680 -0.644203 -0.393233
 H 3.440194 0.225752 -1.214704
 C 4.914900 -2.295592 1.315192

H 2.866501 -2.730743 1.842181
 C 5.770948 -1.544899 0.513364
 H 5.876168 -0.045605 -1.027927
 H 5.324480 -3.004453 2.033271
 H 6.849209 -1.660003 0.596423

VII^{Sn}

E = -2640.77661450
 C -2.137643 -1.087311 -1.043454
 C -2.846826 -0.324697 -0.104483
 C -4.239955 -0.389413 -0.087186
 C -4.935099 -1.176729 -0.995192
 C -4.235014 -1.913863 -1.939607
 C -2.847476 -1.864249 -1.959508
 H -4.765166 0.208648 0.652725
 H -6.022258 -1.208571 -0.961081
 H -4.762798 -2.530047 -2.664799
 H -2.278246 -2.440893 -2.683695
 S -0.326486 -1.141135 -1.303446
 S -2.149135 0.735084 1.210962
 O -0.151937 -2.395394 -2.062829
 O -0.004242 0.134448 -1.969416
 O -1.618024 -0.218277 2.216147
 O -3.286309 1.598812 1.568885
 C 0.495265 -1.267248 0.158814
 C -0.847894 1.627496 0.645908
 P -1.134746 2.916705 -0.443587
 P 0.481631 -2.813410 0.891912
 C 0.385612 3.360464 -1.291013
 H 0.201421 4.214657 -1.951277
 H 1.168202 3.595757 -0.563473
 H 0.708721 2.484893 -1.864980
 C -2.352457 2.501915 -1.713777
 H -3.296246 2.243489 -1.220847
 H -2.507340 3.351446 -2.387970
 H -1.971096 1.635315 -2.264757
 C -1.789980 4.380497 0.395358

H -1.035312 4.754594 1.095002
 H -2.074006 5.169428 -0.310242
 H -2.661319 4.042393 0.968251
 C 1.020881 -2.640184 2.604552
 H 1.045599 -3.620971 3.090723
 H 2.019986 -2.192669 2.636796
 H 0.310030 -1.983605 3.120418
 C -1.166697 -3.554751 0.963478
 H -1.516870 -3.720630 -0.060921
 H -1.150565 -4.504230 1.509836
 H -1.824030 -2.830319 1.459842
 C 1.565546 -4.011174 0.081933
 H 1.510086 -4.999393 0.552195
 H 1.246145 -4.058376 -0.964690
 H 2.590938 -3.627379 0.116114
 O 2.404651 1.568950 0.210899
 C 3.502566 0.978443 -0.294785
 C 4.760643 1.308145 0.223919
 C 3.424882 0.058107 -1.349137
 C 5.911302 0.729333 -0.296931
 H 4.809880 2.028655 1.038048
 C 4.582356 -0.519096 -1.857540
 H 2.448408 -0.185540 -1.760201
 C 5.831477 -0.191744 -1.337418
 H 6.881504 1.000108 0.117604
 H 4.503114 -1.230508 -2.678540
 H 6.734008 -0.645032 -1.742424
 Sn 0.888318 0.560230 1.104778
 H 1.435914 0.452707 2.705235

VIII^{Sn}

E = -1848.77868194
 C -0.537196 -1.546495 2.697267
 C 0.281832 -0.754280 1.910332
 C 1.293704 -1.234454 1.077506
 C 1.483537 -2.616993 1.048304
 C 0.680337 -3.444917 1.827635

C -0.319247 -2.919204 2.649946
 H -1.302396 -1.111405 3.337004
 H 2.268278 -3.048100 0.429219
 H 0.840033 -4.521363 1.807045
 H -0.925082 -3.585385 3.260798
 B 2.020344 -0.019307 0.362623
 S 0.120706 0.996784 1.680586
 O -0.200779 1.683436 2.927694
 O 1.622258 1.175272 1.163927
 C -0.761836 1.373491 0.343628
 C 3.507583 -0.016600 -0.124461
 C 4.405814 0.953424 0.335544
 C 3.997569 -0.996710 -0.998806
 C 5.740882 0.942888 -0.056206
 H 4.046054 1.724925 1.014791
 C 5.329357 -1.014729 -1.391255
 H 3.315717 -1.748136 -1.399294
 C 6.207785 -0.042581 -0.918780
 H 6.421071 1.708037 0.314923
 H 5.685223 -1.785039 -2.073629
 H 7.251701 -0.051809 -1.227461
 P -2.363629 1.945277 0.474718
 C -3.559771 0.773705 1.163101
 H -4.562116 1.215417 1.199058
 H -3.572675 -0.134013 0.550253
 H -3.244121 0.516080 2.180673
 C -2.925892 2.387332 -1.178428
 H -2.829666 1.514953 -1.833713
 H -3.967549 2.723285 -1.145572
 H -2.283950 3.188764 -1.559059
 C -2.495627 3.430653 1.502102
 H -2.088105 3.196090 2.490869
 H -1.882849 4.219544 1.054049
 H -3.536598 3.763085 1.583907
 C -4.452056 -1.830700 -1.590258
 C -4.131311 -2.662093 -0.518964
 C -2.811014 -2.709333 -0.080199

C -1.830103 -1.929708 -0.681409
 C -2.143552 -1.076824 -1.753870
 C -3.478564 -1.051671 -2.200710
 H -5.476420 -1.789289 -1.958466
 H -4.895573 -3.272748 -0.043408
 H -2.531714 -3.361641 0.745324
 H -0.800995 -1.985833 -0.331512
 H -3.721194 -0.411632 -3.047407
 O -1.257833 -0.290600 -2.346651
 H 0.363837 1.929228 -2.560287
 Sn 0.372959 0.628915 -1.418865

IX^{Sn}

E = -1299.54007155
 C 0.880278 2.993620 0.823215
 C -1.114937 1.677720 0.301273
 C -1.854657 2.618892 1.061035
 C -1.272769 3.693308 1.693471
 C 0.117646 3.855904 1.576957
 H 1.948036 3.189014 0.744907
 H -2.932900 2.484041 1.129059
 H -1.868360 4.401707 2.264230
 H 0.605809 4.691921 2.077618
 B -1.810486 0.472967 -0.301500
 C -3.248662 -0.054067 -0.089029
 C -3.889937 0.018959 1.161286
 C -3.958685 -0.662382 -1.139068
 C -5.175672 -0.473603 1.346090
 H -3.357254 0.445966 2.009130
 C -5.256057 -1.125481 -0.969748
 H -3.477877 -0.769691 -2.111717
 C -5.867808 -1.034928 0.277574
 H -5.641392 -0.419834 2.328620
 H -5.787046 -1.576133 -1.806351
 H -6.878006 -1.415020 0.419484
 C 0.317704 1.886262 0.126084
 C 1.094917 1.015493 -0.697746

P 2.798484 0.954841 -0.715829
 C 3.655453 2.411549 -1.410046
 H 3.433869 3.305283 -0.818973
 H 4.740062 2.253716 -1.430447
 H 3.286138 2.573785 -2.428194
 C 3.587435 0.671231 0.897166
 H 4.677187 0.764498 0.827283
 H 3.201743 1.395229 1.622266
 H 3.318784 -0.334363 1.240080
 C 3.339467 -0.411461 -1.767230
 H 4.433168 -0.455246 -1.794950
 H 2.940688 -1.351103 -1.369153
 H 2.952933 -0.259228 -2.780993
 Sn -0.152416 -0.513745 -1.494606
 H 0.068280 -0.943345 -3.132127
 O 0.704545 -2.225344 -0.702745
 C 1.215111 -2.245096 0.524964
 C 0.701224 -1.479968 1.585747
 C 2.339344 -3.049339 0.779274
 C 1.286757 -1.522066 2.844280
 H -0.166531 -0.841358 1.415434
 C 2.919657 -3.083764 2.041016
 H 2.732213 -3.651128 -0.038390
 C 2.403429 -2.318290 3.084150
 H 0.865108 -0.915828 3.644522
 H 3.788401 -3.718496 2.211065
 H 2.861117 -2.346800 4.070534

3.13.3.2 Reaktionspfad B

V^{Sn}

E = -1329.52832617
 C 2.071110 1.032817 1.691552
 C -0.230418 0.363099 1.242278
 C -0.608562 1.098511 2.383344
 C 0.323965 1.822129 3.113189
 C 1.668412 1.829814 2.757294

H 3.123194 0.996904 1.406296
 H -1.650721 1.116448 2.686642
 H -0.014398 2.400061 3.972245
 H 2.390264 2.431605 3.304003
 N -1.095933 -0.307237 0.409594
 C -2.487916 -0.214442 0.499975
 C -3.185291 0.988471 0.706418
 C -3.248539 -1.374374 0.281139
 C -4.573324 1.016524 0.703932
 H -2.627435 1.909633 0.851559
 C -4.636686 -1.338646 0.266745
 H -2.723347 -2.315437 0.121781
 C -5.311651 -0.143003 0.485537
 H -5.085045 1.964872 0.860943
 H -5.194620 -2.257149 0.091488
 H -6.399130 -0.112680 0.481175
 C 1.160322 0.278097 0.956454
 P 2.080168 -2.200142 0.614392
 C 3.421011 -2.086953 1.826906
 H 3.117136 -1.387999 2.613788
 H 3.637088 -3.068348 2.264086
 H 4.320278 -1.695784 1.338505
 C 0.678921 -2.923966 1.488352
 H 0.976947 -3.847762 1.995247
 H 0.316329 -2.191664 2.218908
 H -0.130091 -3.126978 0.778377
 C 2.618251 -3.371442 -0.651458
 H 2.897930 -4.331590 -0.205449
 H 1.798985 -3.518778 -1.364393
 H 3.478582 -2.954864 -1.186877
 C 1.606285 -0.674846 -0.118249
 H 2.438865 -0.293895 -0.725681
 Sn -0.278756 -1.040087 -1.515714
 O 0.048818 0.815852 -2.398781
 C 0.594781 1.863533 -1.784963
 C -0.165330 2.696967 -0.949791
 C 1.956454 2.162826 -1.953744

C 0.423992 3.755522 -0.274221
H -1.222351 2.468480 -0.832062
C 2.538308 3.230016 -1.279479
H 2.539784 1.536523 -2.627638
C 1.781262 4.028881 -0.427918
H -0.183295 4.373510 0.385924
H 3.597844 3.440918 -1.422748
H 2.241293 4.857090 0.107054

Vl^{Sn}

E = -1878.73604993
C 3.123781 -1.353708 1.600724
C 2.148360 -1.185118 0.615564
C 0.781651 -1.494176 0.832582
C 0.470734 -1.953969 2.137738
C 1.433155 -2.095384 3.116460
C 2.777949 -1.803703 2.861588
H 4.155321 -1.128106 1.337715
H -0.568784 -2.184060 2.360069
H 1.132016 -2.435893 4.106026
H 3.535159 -1.936813 3.629980
N -0.194442 -1.321123 -0.108036
S 2.700627 -0.540985 -0.931096
O 4.143535 -0.303632 -0.833525
O 2.187771 -1.335509 -2.051765
C 1.810686 0.985746 -1.026577
C -1.285697 -2.202180 -0.121572
C -1.109324 -3.586468 0.044294
C -2.578671 -1.732738 -0.390308
C -2.185302 -4.454685 -0.048138
H -0.108147 -3.970580 0.228914
C -3.650845 -2.612093 -0.502334
H -2.757860 -0.662250 -0.478710
C -3.465054 -3.976541 -0.325864
H -2.019891 -5.523320 0.079540
H -4.642489 -2.214945 -0.711170
H -4.304965 -4.663326 -0.404789

P 1.964830 2.084757 0.362303
 C 1.093292 1.584983 1.854170
 H 0.992506 2.467199 2.496406
 H 0.102951 1.228868 1.561828
 H 1.649258 0.802744 2.379839
 C 1.346762 3.686681 -0.176510
 H 0.299321 3.537223 -0.461077
 H 1.424960 4.408523 0.643222
 H 1.935670 4.036181 -1.031067
 C 3.698839 2.299089 0.829021
 H 4.085283 1.343674 1.197148
 H 4.285452 2.583070 -0.050388
 H 3.784912 3.065723 1.607513
 Sn -0.333199 0.200782 -1.729725
 O -0.973395 1.741884 -0.361678
 C -2.132646 1.991349 0.238485
 C -2.944667 3.054790 -0.190132
 C -2.562982 1.240190 1.347870
 C -4.127900 3.358999 0.469089
 H -2.621392 3.632329 -1.054722
 C -3.749676 1.551612 2.000111
 H -1.957452 0.394066 1.674245
 C -4.540365 2.613284 1.570366
 H -4.738604 4.189234 0.116467
 H -4.061049 0.952032 2.854456
 H -5.468969 2.853046 2.083796
 H 2.229620 1.500823 -1.903789

VII^{Sn}

E = -2640.79461493
 C 2.600148 -0.981824 -0.017202
 C 1.743600 -1.589816 0.904290
 C 2.231659 -2.599249 1.736506
 C 3.551534 -3.019311 1.645278
 C 4.396681 -2.435177 0.711320
 C 3.917317 -1.427292 -0.114094
 H 1.549412 -3.054787 2.449307

H 3.912109 -3.805756 2.304921
 H 5.431057 -2.761435 0.622089
 H 4.554471 -0.943967 -0.850395
 S 2.139097 0.322015 -1.204791
 S 0.033841 -1.145559 1.329440
 O 3.452135 0.798105 -1.674445
 O 1.276720 -0.410136 -2.180326
 O 0.078663 0.066295 2.145166
 O -0.489360 -2.373458 1.962016
 C 1.197253 1.462353 -0.469184
 P -1.227546 -2.330749 -1.056305
 P 1.896846 2.526697 0.657917
 C -1.745746 -1.858470 -2.713533
 H -1.991045 -2.753561 -3.295968
 H -2.620783 -1.202427 -2.650116
 H -0.916025 -1.312913 -3.178894
 C 0.230599 -3.364743 -1.241322
 H 0.520641 -3.758842 -0.262857
 H -0.008129 -4.189000 -1.922210
 H 1.030435 -2.742616 -1.659113
 C -2.544339 -3.315366 -0.314115
 H -3.446793 -2.694759 -0.250885
 H -2.750622 -4.220254 -0.896094
 H -2.220082 -3.566352 0.701737
 C 0.609013 3.366967 1.586422
 H 1.056664 4.058180 2.308469
 H -0.053582 3.903943 0.900821
 H 0.005843 2.597038 2.077525
 C 2.964271 1.708083 1.873718
 H 3.790630 1.219307 1.345659
 H 3.366323 2.437857 2.585450
 H 2.362166 0.956846 2.395514
 C 2.958828 3.780300 -0.113013
 H 3.481415 4.398745 0.625830
 H 3.676188 3.237096 -0.739267
 H 2.343292 4.412739 -0.761502
 C -0.948067 -0.867091 -0.105505

H -1.912317 -0.649721 0.386421
O -1.827082 2.001478 0.443838
C -2.960126 1.390588 0.726097
C -3.153327 0.786869 1.987447
C -3.990848 1.234873 -0.227736
C -4.298204 0.051089 2.261412
H -2.356397 0.880464 2.721168
C -5.130718 0.490395 0.057276
H -3.879137 1.721178 -1.196339
C -5.294890 -0.114962 1.300310
H -4.409557 -0.410644 3.241998
H -5.907238 0.393495 -0.701475
H -6.189474 -0.693083 1.522543
Sn -0.823248 1.238663 -1.325183

VIII^{Sn}

E = -1848.77287817
C -0.284599 1.935907 2.694274
C -0.058483 0.798143 1.924588
C -1.037225 -0.003597 1.317684
C -2.362597 0.401041 1.551651
C -2.630770 1.514579 2.328608
C -1.606178 2.290351 2.895291
H 0.537403 2.499154 3.130964
H -3.184368 -0.168954 1.125788
H -3.666269 1.803241 2.497846
H -1.851793 3.162603 3.496380
B -0.405357 -1.188896 0.495573
S 1.481538 0.122889 1.521816
O 2.555309 0.166274 2.516418
O 1.031888 -1.317043 1.175131
C 1.977640 0.780519 -0.024451
C -1.084554 -2.596058 0.353831
C -2.356463 -2.718939 -0.228916
C -0.462357 -3.776244 0.782415
C -2.981395 -3.952268 -0.363071
H -2.863339 -1.825182 -0.597305

C -1.078739 -5.015740 0.642860
 H 0.523571 -3.716361 1.241905
 C -2.343441 -5.111138 0.072114
 H -3.970067 -4.012405 -0.816312
 H -0.569449 -5.915196 0.987390
 H -2.827636 -6.080077 -0.036880
 P 3.673118 0.518564 -0.365091
 C 4.825435 1.419862 0.697282
 H 5.862914 1.175450 0.442572
 H 4.660438 2.495209 0.568541
 H 4.608059 1.144157 1.733995
 C 3.998668 1.027441 -2.060908
 H 3.741904 2.086854 -2.171304
 H 5.057189 0.878587 -2.301709
 H 3.359394 0.441708 -2.731159
 C 4.019594 -1.238563 -0.186338
 H 3.818065 -1.525735 0.851705
 H 3.347046 -1.797994 -0.846401
 H 5.063428 -1.452746 -0.437890
 C -2.663924 1.217223 -1.581297
 C -1.603394 2.059718 -1.193345
 C -1.936894 3.286356 -0.588018
 C -3.257816 3.619753 -0.336185
 C -4.296053 2.755344 -0.683784
 C -3.984877 1.557353 -1.319424
 H -2.435260 0.278067 -2.090440
 H -1.123125 3.949109 -0.299978
 H -3.484481 4.569075 0.148522
 H -5.331018 3.021463 -0.480074
 H -4.780450 0.876296 -1.619905
 O -0.339155 1.739705 -1.367136
 H 1.598443 1.795893 -0.181659
 Sn 0.368020 -0.274004 -1.634593

IX^{Sn}

E = -1299.55838981

C -1.981791 3.253175 0.380024

C -2.382429 0.867859 0.116295
 C -3.755721 1.145931 0.038121
 C -4.240443 2.447175 0.091977
 C -3.345845 3.499415 0.257080
 H -1.313238 4.097790 0.542289
 H -4.449873 0.319691 -0.112521
 H -5.306628 2.644051 -0.002054
 H -3.711648 4.524108 0.302220
 B -1.782211 -0.528565 -0.211720
 C -2.498683 -1.866583 0.087956
 C -3.432259 -1.981912 1.135491
 C -2.213818 -3.030366 -0.648447
 C -4.047889 -3.191427 1.430527
 H -3.662812 -1.102817 1.736311
 C -2.845572 -4.236236 -0.379151
 H -1.478906 -2.979637 -1.451653
 C -3.761868 -4.319292 0.666229
 H -4.756014 -3.257845 2.254947
 H -2.614492 -5.119114 -0.972494
 H -4.248100 -5.267437 0.890392
 C -1.479591 1.949160 0.319932
 C -0.051882 1.581705 0.434156
 P 1.253395 2.733189 0.359523
 C 1.206962 3.674259 -1.181038
 H 0.256820 4.211960 -1.262316
 H 2.039734 4.383545 -1.227511
 H 1.277577 2.956563 -2.006868
 C 1.357114 3.946275 1.712771
 H 2.239223 4.585579 1.591951
 H 0.458672 4.569830 1.743483
 H 1.433580 3.400663 2.659754
 C 2.813854 1.836965 0.415348
 H 3.649385 2.543585 0.462632
 H 2.830857 1.177986 1.290572
 H 2.908005 1.203757 -0.474647
 Sn 0.261487 -0.163090 -1.267354
 H 0.183394 0.851069 1.217498

O 1.356748 -1.041796 0.364063
 C 2.598552 -1.474645 0.388073
 C 3.236171 -1.649616 1.634735
 C 3.355710 -1.752031 -0.767249
 C 4.554688 -2.072068 1.715006
 H 2.649944 -1.452928 2.531160
 C 4.677578 -2.171502 -0.674304
 H 2.884695 -1.637914 -1.743520
 C 5.293451 -2.334581 0.562531
 H 5.014172 -2.201349 2.694695
 H 5.232823 -2.379431 -1.588620
 H 6.326876 -2.667778 0.628860

3.13.3.3 Reaktionspfad C

VIII^{Sn}

E = -1848.80905576
 C -0.803743 2.789339 -2.653194
 C -0.582705 1.826529 -1.674987
 C 0.612979 1.155314 -1.448466
 C 1.666667 1.505189 -2.303800
 C 1.490811 2.461010 -3.298450
 C 0.263202 3.102327 -3.480922
 H -1.770195 3.280153 -2.746191
 H 2.640823 1.036586 -2.187645
 H 2.327683 2.719704 -3.945215
 H 0.147358 3.850898 -4.262028
 B 0.595444 0.066070 -0.234628
 S -1.816695 1.350772 -0.520518
 O -2.502941 2.540013 -0.001951
 O -2.709816 0.309189 -1.156849
 C -0.867462 0.412915 0.606690
 C 0.513148 -1.458859 -0.746338
 C -0.033496 -1.797557 -1.988316
 C 0.841451 -2.510065 0.121454
 C -0.266894 -3.125612 -2.342786
 H -0.302470 -1.006302 -2.688410

C 0.618935 -3.837349 -0.225244
 H 1.281327 -2.277469 1.092785
 C 0.055117 -4.149414 -1.460423
 H -0.704523 -3.359937 -3.312040
 H 0.884115 -4.634644 0.467846
 H -0.127898 -5.187317 -1.732955
 P -0.626553 1.250352 2.138992
 C 0.328255 2.775682 1.970936
 H 0.441152 3.272507 2.940713
 H 1.302567 2.538285 1.536920
 H -0.234638 3.423622 1.288158
 C 0.169536 0.139723 3.317444
 H 1.157395 -0.144105 2.951087
 H 0.244939 0.640638 4.288845
 H -0.454207 -0.754779 3.423183
 C -2.168953 1.741780 2.940999
 H -2.729483 2.389112 2.260466
 H -2.771016 0.853532 3.152735
 H -1.931708 2.272279 3.870409
 C 2.970362 0.040462 0.678282
 C 3.567323 -0.664435 -0.375083
 C 4.936748 -0.904819 -0.364492
 C 5.739217 -0.459260 0.680097
 C 5.149194 0.240637 1.728403
 C 3.784214 0.488508 1.729266
 H 2.956280 -1.031221 -1.193969
 H 5.380155 -1.455663 -1.192613
 H 6.809373 -0.653483 0.677108
 H 5.758588 0.601702 2.555492
 H 3.320482 1.042708 2.544127
 O 1.663894 0.312662 0.764226
 H -3.574378 -0.491160 1.508288
 Sn -2.481521 -1.431017 0.416192

IX^{Sn}

E = -1299.57385574
 C -1.183574 -0.521018 2.683876

C 0.665998 0.392491 1.427149
 C 1.198568 0.863717 2.635287
 C 0.539432 0.696727 3.846401
 C -0.667699 0.003902 3.859079
 H -2.088928 -1.125680 2.736863
 H 2.145660 1.404322 2.614818
 H 0.961788 1.093883 4.767118
 H -1.196863 -0.156978 4.797447
 B 1.400904 0.821231 0.112359
 C 2.932685 0.618690 -0.117248
 C 3.600692 1.307209 -1.139702
 C 3.682309 -0.252335 0.685901
 C 4.962975 1.137602 -1.350843
 H 3.030497 1.983385 -1.774921
 C 5.044685 -0.428334 0.480519
 H 3.178924 -0.809576 1.475351
 C 5.687144 0.268446 -0.539134
 H 5.464954 1.681613 -2.149345
 H 5.608402 -1.113398 1.111378
 H 6.754849 0.131545 -0.703865
 C -0.544068 -0.351138 1.439421
 C -1.031961 -0.991496 0.208143
 P -2.731471 -1.048850 -0.081455
 C -3.581663 -2.546779 0.525517
 H -3.428060 -2.645567 1.605146
 H -4.656064 -2.521122 0.307866
 H -3.126927 -3.412000 0.030045
 C -3.638756 0.347465 0.638371
 H -4.703418 0.273332 0.391106
 H -3.511971 0.376441 1.723423
 H -3.224380 1.268296 0.215701
 C -3.180306 -0.996479 -1.833535
 H -4.267567 -1.090141 -1.934500
 H -2.849235 -0.040568 -2.248635
 H -2.678085 -1.813758 -2.358762
 Sn 0.382721 -2.162483 -0.883732
 H -0.849315 -2.781567 -2.055578

O 0.768598 1.546097 -0.875862
 C -0.432907 2.161636 -0.844507
 C -0.842081 2.935741 0.242691
 C -1.227780 2.099858 -1.988689
 C -2.028884 3.656292 0.166472
 H -0.217859 2.985455 1.130555
 C -2.414844 2.820134 -2.052350
 H -0.880429 1.500015 -2.826795
 C -2.820872 3.606021 -0.977174
 H -2.332465 4.269315 1.013086
 H -3.021257 2.775890 -2.955623
 H -3.744085 4.178730 -1.032212

3.14 Untersuchungen zur Thermodynamik von Ylidübertragungsreaktionen

3.14.1 Energien der Verbindungen

3.14.1.1 Energien der Elementchloride

Tabelle 3.83. Energien der Elementtetrachloride.

Verbindung	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)
SiCl ₄	-2132.2585233	0.014892	-0.025068
GeCl ₄	-3920.46048120	0.013854	-0.028151
SnCl ₄	-1845.81523715	0.013424	-0.030763
PbCl ₄	-1845.80955068	0.013133	-0.032827

Tabelle 3.84. Energien der Elementdichloride.

Verbindung	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)
SiCl ₂	-1210.9696237	0.007619	-0.024331
GeCl ₂	-2999.23225637	0.007215	-0.026320
SnCl ₂	-924.61673827	0.007050	-0.027793
PbCl ₂	-924.67605273	0.006984	-0.028829

3.14.1.2 Energien der Elementbromide

Tabelle 3.85. Energien der Elementtetrabromide.

Verbindung	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)
SiBr ₄	-10591.11537180	0.013808	-0.031538
GeBr ₄	-12379.33858850	0.013061	-0.029247
SnBr ₄	-10304.71063230	0.012812	-0.036835
PbBr ₄	-10304.71810010	0.012647	-0.036440

Tabelle 3.86. Energien der Elementdibromide.

Verbindung	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)
SiBr ₂	-5440.40159380	0.007231	-0.027382
GeBr ₂	-7228.67181081	0.006926	-0.029247
SnBr ₂	-5154.06389680	0.006801	-0.030754
PbBr ₂	-5154.12597388	0.006777	-0.031674

3.14.1.3 Energien der Elementiodide

Tabelle 3.87. Energien der Elementtetraiodide.

Verbindung	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)
SiI ₄	-335.5536772	0.013200	-0.036241
GeI ₄	-2123.79052707	0.012726	-0.038695
SnI ₄	-49.14535450	0.012565	-0.041198
PbI ₄	-49.19656837	0.012481	-0.042825

Tabelle 3.88. Energien der Elementdiiodide.

Verbindung	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)
SiI ₂	-312.6224880	0.006992	-0.029673
GeI ₂	-2100.89704262	0.006803	-0.031305
SnI ₂	-26.27952616	0.006729	-0.032728
PbI ₂	-26.35806217	0.006704	-0.033579

3.14.1.4 Energien der ylidsubstituierten Tetrelchloride

Tabelle 3.89. Energien der ylidsubstituierten Siliciumchloride.

Verbindung	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)
(^{Me} Y _{SO₂Ph}) ₂ SiCl ₂	-3773.1089894	0.491243	0.388757
Y ₂ SiCl ₂	-5004.2561887	0.894376	0.737343
^{Cy} Y ₂ SiCl ₂	-5026.0095273	1.323563	1.160912
(Y _{Ph}) ₂ SiCl ₂	-3827.0792321	0.807086	0.676916
(Y _{CN}) ₂ SiCl ₂	-3548.9945643	0.636742	0.512382

Tabelle 3.90. Energien der weiteren Y^{Me}-substituierten Elementchloride.

Verbindung	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)
(^{Me} Y _{SO₂Ph}) ₂ GeCl ₂	-5561.31898524	0.490232	0.385490
(^{Me} Y _{SO₂Ph}) ₂ SnCl ₂	-3486.68506764	0.489112	0.380979
(^{Me} Y _{SO₂Ph}) ₂ PbCl ₂	-3773.10898262	0.491242	0.388752

3.14.1.5 Energien der ylidsubstituierten Tetrelbromide

Tabelle 3.91. Energien der ylidsubstituierten Siliciumbromide.

Verbindung	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)
(^{Me} Y _{SO₂Ph}) ₂ SiBr ₂	-8002.5376545	0.490534	0.385451
Y ₂ SiBr ₂	-9233.6834225	0.893974	0.735802
^{Cy} Y ₂ SiBr ₂	-9255.4342630	1.321914	1.159874
(Y _{Ph}) ₂ SiBr ₂	-8056.5103194	0.807682	0.671959
(Y _{CN}) ₂ SiBr ₂	-7778.4298252	0.635876	0.506938

Tabelle 3.92. Energien der weiteren ^{Me}Y_{SO₂Ph}-substituierten Elementbromide.

Verbindung	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)
(^{Me} Y _{SO₂Ph}) ₂ GeBr ₂	-9790.75656049	0.489616	0.381709
(^{Me} Y _{SO₂Ph}) ₂ SnBr ₂	-7716.12818259	0.488832	0.378228
(^{Me} Y _{SO₂Ph}) ₂ PbBr ₂	-7716.12758009	0.488116	0.374724

3.14.1.6 Energien der ylidsubstituierten Tetreliodide

Tabelle 3.93. Energien der ylidsubstituierten Siliciumiodide.

Verbindung	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)
(^{Me} Y _{SO2Ph}) ₂ SiI ₂	-2874.7560946	0.490251	0.382643
Y ₂ SiI ₂	-4105.9045854	0.894506	0.738742
^{Cy} Y ₂ SiI ₂	-4127.6607949	1.322137	1.152434
(Y _{Ph}) ₂ SiI ₂	-2928.7329231	0.807681	0.670960
(Y _{CN}) ₂ SiI ₂	-2650.6525371	0.635673	0.505369

Tabelle 3.94. Energien der weiteren ^{Me}Y_{SO2Ph}-substituierten Elementiodide.

Verbindung	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)
(^{Me} Y _{SO2Ph})GeI ₂	-4662.98243291	0.489450	0.380090
(^{Me} Y _{SO2Ph}) ₂ SnI ₂	-2588.35036628	0.488560	0.374811
(^{Me} Y _{SO2Ph}) ₂ PbI ₂	-2588.36364442	0.488325	0.373798

3.14.1.7 Energien der ylidsubstituierten Tetrylene

Tabelle 3.95. Energien der ylidsubstituierten Silylene.

Verbindung	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)
(^{Me} Y _{SO2Ph}) ₂ Si	-2851.7964578	0.482860	0.384928
Y ₂ Si	-4082.96063973	0.886537	0.734124
^{Cy} Y ₂ Si	-4104.72816978	1.313659	1.153920
(Y _{Ph}) ₂ Si	-2905.76188502	0.799644	0.668877
(Y _{CN}) ₂ Si	-2627.68609979	0.629014	0.507634

Tabelle 3.96. Energien der ylidsubstituierten Germylene.

Verbindung	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)
(^{Me} Y _{SO2Ph}) ₂ Ge	-4640.05438885	0.482095	0.380486
Y ₂ Ge	-5871.2169021	0.885744	0.731721
^{Cy} Y ₂ Ge	-5892.9840704	1.313253	1.151770
(Y _{Ph}) ₂ Ge	-4694.0134492	0.799023	0.666141
(Y _{CN}) ₂ Ge	-4415.94130339	0.628435	0.506732

Tabelle 3.97. Energien der ylidsubstituierten Stannylene.

Verbindung	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)
(^{Me} Y _{SO₂Ph}) ₂ Sn	-2565.44378166	0.481832	0.380141
Y ₂ Sn	-3796.60415200	0.885692	0.731914
^{Cy} Y ₂ Sn	-3818.37212370	1.313265	1.152236
Y ^{Ph} ₂ Sn	-2619.38479815	0.798397	0.665313
Y ^{CN} ₂ Sn	-2341.31743746	0.628009	0.505351

Tabelle 3.98. Energien der ylidsubstituierten Plumbylene.

Verbindung	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)
(^{Me} Y _{SO₂Ph}) ₂ Pb	-2565.49140813	0.481763	0.379043
Y ₂ Pb	-3796.65092300	0.885172	0.732189
^{Cy} Y ₂ Pb	-3818.41797652	1.312842	1.149330
Y ^{Ph} ₂ Pb	-2619.43194000	0.798359	0.664438
Y ^{CN} ₂ Pb	-2341.36631496	0.627805	0.504239

3.14.2 Energiedifferenzen

3.14.2.1 Energien für die Reaktionen von Y^{Me}-substituierten Tetrylenen mit Elementdihalogeniden

Tabelle 3.99. Energien für die Reaktion von ^{Me}Y_{SO₂Ph}-substituierten Tetrylenen mit Elementdichloriden.

^{(MeY_{SO₂Ph})₂E}	ECl ₂ - Edukt	^{(MeY_{SO₂Ph})₂E}	ECl ₂ - Produkt	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]
^{(MeY_{SO₂Ph})₂Si}	SiCl ₂	^{(MeY_{SO₂Ph})₂Si}	SiCl ₂	0.000000	0.000000
	GeCl ₂	^{(MeY_{SO₂Ph})₂Ge}	SiCl ₂	0.002248	5.902544
	SnCl ₂	^{(MeY_{SO₂Ph})₂Sn}	SiCl ₂	-0.001534	-4.028118
	PbCl ₂	^{(MeY_{SO₂Ph})₂Pb}	SiCl ₂	0.010092	26.495837
^{(MeY_{SO₂Ph})₂Ge}	SiCl ₂	^{(MeY_{SO₂Ph})₂Si}	GeCl ₂	-0.002248	-5.902544
	GeCl ₂	^{(MeY_{SO₂Ph})₂Ge}	GeCl ₂	0.000000	0.000000
	SnCl ₂	^{(MeY_{SO₂Ph})₂Sn}	GeCl ₂	-0.003783	-9.931479
	PbCl ₂	^{(MeY_{SO₂Ph})₂Pb}	GeCl ₂	0.007844	20.593293
^{(MeY_{SO₂Ph})₂Sn}	SiCl ₂	^{(MeY_{SO₂Ph})₂Si}	SnCl ₂	0.001534	4.028118
	GeCl ₂	^{(MeY_{SO₂Ph})₂Ge}	SnCl ₂	0.003783	9.931479
	SnCl ₂	^{(MeY_{SO₂Ph})₂Sn}	SnCl ₂	0.000000	0.000000
	PbCl ₂	^{(MeY_{SO₂Ph})₂Pb}	SnCl ₂	0.011626	30.524772
^{(MeY_{SO₂Ph})₂Pb}	SiCl ₂	^{(MeY_{SO₂Ph})₂Si}	PbCl ₂	-0.010092	-26.495837
	GeCl ₂	^{(MeY_{SO₂Ph})₂Ge}	PbCl ₂	-0.007844	-20.593293
	SnCl ₂	^{(MeY_{SO₂Ph})₂Sn}	PbCl ₂	-0.011626	-30.524772
	PbCl ₂	^{(MeY_{SO₂Ph})₂Pb}	PbCl ₂	0.000000	0.000000

Tabelle 3.100. Energien für die Reaktion von $(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{E}$ -substituierten Tetrylenen mit Elementdibromiden.

$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{E}$	ECl_2 - Edukt	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{E}$	ECl_2 - Produkt	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]
$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Si}$	SiBr_2	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Si}$	SiBr_2	0.000000	0.000000
	GeBr_2	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Ge}$	SiBr_2	0.009712	25.498410
	SnBr_2	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Sn}$	SiBr_2	0.013560	35.602226
	PbBr_2	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Pb}$	SiBr_2	0.027833	73.075095
$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Ge}$	SiBr_2	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Si}$	GeBr_2	-0.009712	-25.498410
	GeBr_2	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Ge}$	GeBr_2	0.000000	0.000000
	SnBr_2	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Sn}$	GeBr_2	0.003848	10.102924
	PbBr_2	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Pb}$	GeBr_2	0.018124	47.584667
$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Sn}$	SiBr_2	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Si}$	SnBr_2	-0.013560	-35.602226
	GeBr_2	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Ge}$	SnBr_2	-0.003848	-10.102924
	SnBr_2	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Sn}$	SnBr_2	0.000000	0.000000
	PbBr_2	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Pb}$	SnBr_2	0.014277	37.483607
$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Pb}$	SiBr_2	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Si}$	PbBr_2	-0.027833	-73.075095
	GeBr_2	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Ge}$	PbBr_2	-0.018124	-47.584667
	SnBr_2	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Sn}$	PbBr_2	-0.014277	-37.483607
	PbBr_2	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Pb}$	PbBr_2	0.000000	0.000000

Tabelle 3.101. Energien für die Reaktion von $^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}}$ -substituierten Tetrylenen mit Elementdiiodiden.

$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{E}$	ECl_2 - Edukt	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{E}$	ECl_2 - Produkt	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]
$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Si}$	SiI_2	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Si}$	SiI_2	0.000000	0.000000
	GeI_2	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Ge}$	SiI_2	0.013814	36.268158
	SnI_2	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Sn}$	SiI_2	0.007982	20.957149
	PbI_2	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Pb}$	SiI_2	0.038645	101.46289
$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Ge}$	SiI_2	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Si}$	GeI_2	-0.013814	-36.268657
	GeI_2	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Ge}$	GeI_2	0.000000	0.000000
	SnI_2	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Sn}$	GeI_2	-0.005832	-15.311496
	PbI_2	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Pb}$	GeI_2	0.024831	65.194237
$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Sn}$	SiI_2	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Si}$	SnI_2	-0.007982	-20.957161
	GeI_2	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Ge}$	SnI_2	0.005832	15.311496
	SnI_2	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Sn}$	SnI_2	0.000000	0.000000
	PbI_2	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Pb}$	SnI_2	0.030663	80.505733
$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Pb}$	SiI_2	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Si}$	PbI_2	-0.038645	-101.46289
	GeI_2	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Ge}$	PbI_2	-0.024831	-65.194237
	SnI_2	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Sn}$	PbI_2	-0.030663	-80.505733
	PbI_2	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Pb}$	PbI_2	0.000000	0.000000

3.14.2.2 Energien für die Reaktionen von $^{\text{MeY}}\text{SO}_2\text{Ph}$ -substituierten Tetrylenen mit Elementtetrahalogeniden

Tabelle 3.102. Energien für die Reaktion von $^{\text{MeY}}\text{SO}_2\text{Ph}$ -substituierten Tetrylenen mit Elementtetrachloriden.

$(^{\text{MeY}}\text{SO}_2\text{Ph})_2\text{E}$	ECl_4 - Edukt	$(^{\text{MeY}}\text{SO}_2\text{Ph})_2\text{ECl}_2$	ECl_2 - Produkt	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]
$(^{\text{MeY}}\text{SO}_2\text{Ph})_2\text{Si}$	SiCl_4	$(^{\text{MeY}}\text{SO}_2\text{Ph})_2\text{SiCl}_2$	SiCl_2	-0.019066	-50.057678
	GeCl_4	$(^{\text{MeY}}\text{SO}_2\text{Ph})_2\text{GeCl}_2$	SiCl_2	-0.027288	-71.644854
	SnCl_4	$(^{\text{MeY}}\text{SO}_2\text{Ph})_2\text{SnCl}_2$	SiCl_2	-0.040513	-106.36775
	PbCl_4	$(^{\text{MeY}}\text{SO}_2\text{Ph})_2\text{PbCl}_2$	SiCl_2	–	–
$(^{\text{MeY}}\text{SO}_2\text{Ph})_2\text{Ge}$	SiCl_4	$(^{\text{MeY}}\text{SO}_2\text{Ph})_2\text{SiCl}_2$	GeCl_2	-0.021314	-55.961193
	GeCl_4	$(^{\text{MeY}}\text{SO}_2\text{Ph})_2\text{GeCl}_2$	GeCl_2	-0.029536	-77.547398
	SnCl_4	$(^{\text{MeY}}\text{SO}_2\text{Ph})_2\text{SnCl}_2$	GeCl_2	-0.042761	-112.27029
	PbCl_4	$(^{\text{MeY}}\text{SO}_2\text{Ph})_2\text{PbCl}_2$	GeCl_2	–	–
$(^{\text{MeY}}\text{SO}_2\text{Ph})_2\text{Sn}$	SiCl_4	$(^{\text{MeY}}\text{SO}_2\text{Ph})_2\text{SiCl}_2$	SnCl_2	-0.017532	-46.029560
	GeCl_4	$(^{\text{MeY}}\text{SO}_2\text{Ph})_2\text{GeCl}_2$	SnCl_2	-0.025754	-67.616211
	SnCl_4	$(^{\text{MeY}}\text{SO}_2\text{Ph})_2\text{SnCl}_2$	SnCl_2	-0.038979	-102.33963
	PbCl_4	$(^{\text{MeY}}\text{SO}_2\text{Ph})_2\text{PbCl}_2$	SnCl_2	–	–
$(^{\text{MeY}}\text{SO}_2\text{Ph})_2\text{Pb}$	SiCl_4	$(^{\text{MeY}}\text{SO}_2\text{Ph})_2\text{SiCl}_2$	PbCl_2	-0.029158	-76.553515
	GeCl_4	$(^{\text{MeY}}\text{SO}_2\text{Ph})_2\text{GeCl}_2$	PbCl_2	-0.037380	-98.140691
	SnCl_4	$(^{\text{MeY}}\text{SO}_2\text{Ph})_2\text{SnCl}_2$	PbCl_2	-0.050605	-132.86359
	PbCl_4	$(^{\text{MeY}}\text{SO}_2\text{Ph})_2\text{PbCl}_2$	PbCl_2	–	–

Tabelle 3.103. Energien für die Reaktion von $\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}}_2$ -substituierten Tetrylenen mit Elementtetrabromiden.

$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{E}$	EBr_4	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{ECl}_2$	EBr_2	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]
$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Si}$	SiBr ₄	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{SiBr}_2$	SiBr ₂	-0.022740	-59.703424
	GeBr ₄	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{GeBr}_2$	SiBr ₂	-0.019423	-50.994981
	SnBr ₄	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{SnBr}_2$	SiBr ₂	-0.019934	-52.335299
	PbBr ₄	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{PbBr}_2$	SiBr ₂	-0.015762	-41.383052
$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Ge}$	SiBr ₄	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{SiBr}_2$	GeBr ₂	-0.032449	-85.193458
	GeBr ₄	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{GeBr}_2$	GeBr ₂	-0.029126	-76.470208
	SnBr ₄	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{SnBr}_2$	GeBr ₂	-0.029643	-77.827697
	PbBr ₄	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{PbBr}_2$	GeBr ₂	-0.025474	-66.881987
$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Sn}$	SiBr ₄	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{SiBr}_2$	SnBr ₂	-0.036301	-95.307750
	GeBr ₄	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{GeBr}_2$	SnBr ₂	-0.032981	-86.591983
	SnBr ₄	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{SnBr}_2$	SnBr ₂	-0.033491	-87.930095
	PbBr ₄	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{PbBr}_2$	SnBr ₂	-0.029322	-76.984386
$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Pb}$	SiBr ₄	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{SiBr}_2$	PbBr ₂	-0.050572	-132.77665
	GeBr ₄	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{GeBr}_2$	PbBr ₂	-0.047254	-124.06472
	SnBr ₄	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{SnBr}_2$	PbBr ₂	-0.047768	-125.41423
	PbBr ₄	$(\text{MeY}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{PbBr}_2$	PbBr ₂	-0.043595	-114.45830

Tabelle 3.104. Energien für die Reaktion von $^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}}_2$ -substituierten Tetrylenen mit Elementtetraiodiden.

$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{E}$	EI_4	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{EI}_2$	EI_2	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]
$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Si}$	SiI_4	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{SiI}_2$	SiI_2	-0.0241650	-63.445181
	GeI_4	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{GeI}_2$	SiI_2	-0.0137519	-36.105692
	SnI_4	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{SnI}_2$	SiI_2	-0.0296338	-77.803494
	PbI_4	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{PbI}_2$	SiI_2	0.0089164	23.409929
$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Ge}$	SiI_4	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{SiI}_2$	GeI_2	-0.0379784	-99.712342
	GeI_4	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{GeI}_2$	GeI_2	-0.0275660	-72.374533
	SnI_4	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{SnI}_2$	GeI_2	-0.0434475	-114.07141
	PbI_4	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{PbI}_2$	GeI_2	-0.0048976	-12.858728
$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Sn}$	SiI_4	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{SiI}_2$	SnI_2	-0.0321469	-84.401753
	GeI_4	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{GeI}_2$	SnI_2	-0.0217340	-57.062617
	SnI_4	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{SnI}_2$	SnI_2	-0.0376159	-98.760655
	PbI_4	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{PbI}_2$	SnI_2	0.0009338	2.4516533
$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Pb}$	SiI_4	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{SiI}_2$	PbI_2	-0.0628100	-164.90757
	GeI_4	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{GeI}_2$	PbI_2	-0.0523972	-137.56877
	SnI_4	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{SnI}_2$	PbI_2	-0.0682787	-179.26565
	PbI_4	$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{PbI}_2$	PbI_2	-0.0297287	-78.052635

3.14.2.3 Energien für die Reaktionen von Y*-substituierten Tetrylenen mit Elementdichloriden

Tabelle 3.105. Energien für die Reaktion von Y-substituierten Tetrylenen mit Elementdichloriden.

Y_2E	ECl_2 - Edukt	Y_2E	ECl_2 - Produkt	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]
Y_2Si	$SiCl_2$	Y_2Si	$SiCl_2$	0.000000	0.000000
	$GeCl_2$	Y_2Ge	$SiCl_2$	0.005956	15.637425
	$SnCl_2$	Y_2Sn	$SiCl_2$	0.004854	12.744964
	$PbCl_2$	Y_2Pb	$SiCl_2$	0.018709	49.120558
Y_2Ge	$SiCl_2$	Y_2Si	$GeCl_2$	-0.005956	-15.638344
	$GeCl_2$	Y_2Ge	$GeCl_2$	0.000000	0.000000
	$SnCl_2$	Y_2Sn	$GeCl_2$	-0.001102	-2.8925133
	$PbCl_2$	Y_2Pb	$GeCl_2$	0.012753	33.482214
Y_2Sn	$SiCl_2$	Y_2Si	$SnCl_2$	-0.004854	-12.744964
	$GeCl_2$	Y_2Ge	$SnCl_2$	0.001102	2.8925133
	$SnCl_2$	Y_2Sn	$SnCl_2$	0.000000	0.000000
	$PbCl_2$	Y_2Pb	$SnCl_2$	0.013854	36.374780
Y_2Pb	$SiCl_2$	Y_2Si	$PbCl_2$	-0.018709	-49.120558
	$GeCl_2$	Y_2Ge	$PbCl_2$	-0.012753	-33.482214
	$SnCl_2$	Y_2Sn	$PbCl_2$	-0.013854	-36.374780
	$PbCl_2$	Y_2Pb	$PbCl_2$	0.000000	0.000000

Tabelle 3.106. Energien für die Reaktion von CyY_2 -substituierten Tetrylenen mit Elementdichloriden.

CyY_2E	ECl_2 - Edukt	CyY_2E	ECl_2 - Produkt	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]
CyY_2Si	SiCl_2	CyY_2Si	SiCl_2	0.000000	0.000000
	GeCl_2	CyY_2Ge	SiCl_2	0.006571	17.251425
	SnCl_2	CyY_2Sn	SiCl_2	0.004939	12.966297
	PbCl_2	CyY_2Pb	SiCl_2	0.016531	43.400854
CyY_2Ge	SiCl_2	CyY_2Si	GeCl_2	-0.006571	-17.253027
	GeCl_2	CyY_2Ge	GeCl_2	0.000000	0.000000
	SnCl_2	CyY_2Sn	GeCl_2	-0.001633	-4.2866538
	PbCl_2	CyY_2Pb	GeCl_2	0.009959	26.146567
CyY_2Sn	SiCl_2	CyY_2Si	SnCl_2	-0.004939	-12.966297
	GeCl_2	CyY_2Ge	SnCl_2	0.001633	4.2866538
	SnCl_2	CyY_2Sn	SnCl_2	0.000000	0.000000
	PbCl_2	CyY_2Pb	SnCl_2	0.011591	30.433221
CyY_2Pb	SiCl_2	CyY_2Si	PbCl_2	-0.016531	-43.400854
	GeCl_2	CyY_2Ge	PbCl_2	-0.009959	-26.146567
	SnCl_2	CyY_2Sn	PbCl_2	-0.011591	-30.433221
	PbCl_2	CyY_2Pb	PbCl_2	0.000000	0.000000

Tabelle 3.107. Energien für die Reaktion von Y_{Ph} -substituierten Tetrylenen mit Elementdichloriden.

$(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{E}$	ECl_2 - Edukt	$(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{E}$	ECl_2	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]
$(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{Si}$	SiCl_2	$(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{Si}$	SiCl_2	0.000000	0.000000
	GeCl_2	$(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{Ge}$	SiCl_2	0.0103214	27.099072
	SnCl_2	$(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{Sn}$	SiCl_2	0.0240995	63.273185
	PbCl_2	$(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{Pb}$	SiCl_2	0.0364330	95.654920
$(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{Ge}$	SiCl_2	$(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{Si}$	GeCl_2	-0.0103214	-27.099072
	GeCl_2	$(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{Ge}$	GeCl_2	0.000000	0.000000
	SnCl_2	$(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{Sn}$	GeCl_2	0.0137783	36.174927
	PbCl_2	$(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{Pb}$	GeCl_2	0.0261117	68.556268
$(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{Sn}$	SiCl_2	$(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{Si}$	SnCl_2	-0.0240996	-63.273502
	GeCl_2	$(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{Ge}$	SnCl_2	-36.174927	-36.174927
	SnCl_2	$(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{Sn}$	SnCl_2	0.000000	0.000000
	PbCl_2	$(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{Pb}$	SnCl_2	0.0123334	32.381342
$(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{Pb}$	SiCl_2	$(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{Si}$	PbCl_2	-0.0364330	-95.654920
	GeCl_2	$(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{Ge}$	PbCl_2	-0.0261117	-68.556268
	SnCl_2	$(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{Sn}$	PbCl_2	-0.0123334	-32.381342
	PbCl_2	$(\text{Y}_{\text{Ph}})_2\text{Pb}$	PbCl_2	0.000000	0.000000

Tabelle 3.108. Energien für die Reaktion von Y_{CN} -substituierten Tetrylenen mit Elementdichloriden.

$(Y_{CN})_2E$	ECl_2 - Edukt	$(Y_{CN})_2E$	ECl_2	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]
$(Y_{CN})_2Si$	$SiCl_2$	$(Y_{CN})_2Si$	$SiCl_2$	0.000000	0.000000
	$GeCl_2$	$(Y_{CN})_2Ge$	$SiCl_2$	0.008516	22.358942
	$SnCl_2$	$(Y_{CN})_2Sn$	$SiCl_2$	0.016956	44.517715
	$PbCl_2$	$(Y_{CN})_2Pb$	$SiCl_2$	0.027317	71.720416
$(Y_{CN})_2Ge$	$SiCl_2$	$(Y_{CN})_2Si$	$GeCl_2$	-0.008516	-22.358942
	$GeCl_2$	$(Y_{CN})_2Ge$	$GeCl_2$	0.000000	0.000000
	$SnCl_2$	$(Y_{CN})_2Sn$	$GeCl_2$	0.008440	22.160008
	$PbCl_2$	$(Y_{CN})_2Pb$	$GeCl_2$	0.018801	49.361238
$(Y_{CN})_2Sn$	$SiCl_2$	$(Y_{CN})_2Si$	$SnCl_2$	-0.016956	-44.517715
	$GeCl_2$	$(Y_{CN})_2Ge$	$SnCl_2$	-0.008440	-22.160008
	$SnCl_2$	$(Y_{CN})_2Sn$	$SnCl_2$	0.000000	0.000000
	$PbCl_2$	$(Y_{CN})_2Pb$	$SnCl_2$	0.010360	27.201230
$(Y_{CN})_2Pb$	$SiCl_2$	$(Y_{CN})_2Si$	$PbCl_2$	-0.027317	-71.720416
	$GeCl_2$	$(Y_{CN})_2Ge$	$PbCl_2$	-0.018801	-49.361238
	$SnCl_2$	$(Y_{CN})_2Sn$	$PbCl_2$	-0.010360	-27.201230
	$PbCl_2$	$(Y_{CN})_2Pb$	$PbCl_2$	0.000000	0.000000

3.14.2.4 Energien für die Reaktionen von Y*-substituierten Tetrylenen mit Elementdibromiden

Tabelle 3.109. Energien für die Reaktion von Y-substituierten Tetrylenen mit Elementdibromiden.

Y_2E	EBr_2 - Edukt	Y_2E	EBr_2 - Produkt	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]
Y_2Si	SiBr ₂	Y^{Me}_2Si	SiBr ₂	0.000000	0.000000
	GeBr ₂	Y^{Me}_2Ge	SiBr ₂	0.013420	35.234210
	SnBr ₂	Y^{Me}_2Sn	SiBr ₂	0.019953	52.385892
	PbBr ₂	Y^{Me}_2Pb	SiBr ₂	0.036450	95.699475
Y_2Ge	SiBr ₂	Y^{Me}_2Si	GeBr ₂	-0.013420	-35.234210
	GeBr ₂	Y^{Me}_2Ge	GeBr ₂	0.000000	0.000000
	SnBr ₂	Y^{Me}_2Sn	GeBr ₂	0.006529	17.141890
	PbBr ₂	Y^{Me}_2Pb	GeBr ₂	0.023037	60.484089
Y_2Sn	SiBr ₂	Y^{Me}_2Si	SnBr ₂	-0.019953	-52.385892
	GeBr ₂	Y^{Me}_2Ge	SnBr ₂	-0.006529	-17.141890
	SnBr ₂	Y^{Me}_2Sn	SnBr ₂	0.000000	0.000000
	PbBr ₂	Y^{Me}_2Pb	SnBr ₂	0.016501	43.323376
Y_2Pb	SiBr ₂	Y^{Me}_2Si	PbBr ₂	-0.036450	-95.699475
	GeBr ₂	Y^{Me}_2Ge	PbBr ₂	-0.023037	-60.484089
	SnBr ₂	Y^{Me}_2Sn	PbBr ₂	-0.016505	-43.333562
	PbBr ₂	Y^{Me}_2Pb	PbBr ₂	0.000000	0.000000

Tabelle 3.110. Energien für die Reaktion von ^{Cy}Y-substituierten Tetrylenen mit Elementdibromiden.

^{Cy} Y ₂ E	EBr ₂ - Edukt	^{Cy} Y ₂ E	EBr ₂ - Produkt	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]
^{Cy} Y ₂ Si	SiBr ₂	^{Cy} Y ₂ Si	SiBr ₂	0.000000	0.000000
	GeBr ₂	^{Cy} Y ₂ Ge	SiBr ₂	0.014035	36.848892
	SnBr ₂	^{Cy} Y ₂ Sn	SiBr ₂	0.020033	52.596641
	PbBr ₂	^{Cy} Y ₂ Pb	SiBr ₂	0.034271	89.978511
^{Cy} Y ₂ Ge	SiBr ₂	^{Cy} Y ₂ Si	GeBr ₂	-0.014035	-36.848892
	GeBr ₂	^{Cy} Y ₂ Ge	GeBr ₂	0.000000	0.000000
	SnBr ₂	^{Cy} Y ₂ Sn	GeBr ₂	0.005998	15.747749
	PbBr ₂	^{Cy} Y ₂ Pb	GeBr ₂	0.020244	53.150491
^{Cy} Y ₂ Sn	SiBr ₂	^{Cy} Y ₂ Si	SnBr ₂	-0.020033	-52.596641
	GeBr ₂	^{Cy} Y ₂ Ge	SnBr ₂	-0.005998	-15.747749
	SnBr ₂	^{Cy} Y ₂ Sn	SnBr ₂	0.000000	0.000000
	PbBr ₂	^{Cy} Y ₂ Pb	SnBr ₂	0.014238	37.382552
^{Cy} Y ₂ Pb	SiBr ₂	^{Cy} Y ₂ Si	PbBr ₂	-0.034271	-89.978511
	GeBr ₂	^{Cy} Y ₂ Ge	PbBr ₂	-0.020244	-53.150491
	SnBr ₂	^{Cy} Y ₂ Sn	PbBr ₂	-0.014238	-37.382552
	PbBr ₂	^{Cy} Y ₂ Pb	PbBr ₂	0.000000	0.000000

Tabelle 3.111. Energien für die Reaktion von Y_{Ph} -substituierten Tetrylenen mit Elementdibromiden.

$(Y_{Ph})_2E$	EBr_2 - Edukt	$(Y_{Ph})_2E$	EBr_2 - Produkt	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]
$(Y_{Ph})_2Si$	SiBr ₂	$(Y_{Ph})_2Si$	SiBr ₂	0.000000	0.000000
	GeBr ₂	$(Y_{Ph})_2Ge$	SiBr ₂	0.017785	46.694517
	SnBr ₂	$(Y_{Ph})_2Sn$	SiBr ₂	0.039194	102.90385
	PbBr ₂	$(Y_{Ph})_2Pb$	SiBr ₂	0.054174	142.23384
$(Y_{Ph})_2Ge$	SiBr ₂	$(Y_{Ph})_2Si$	GeBr ₂	-0.017785	-46.694517
	GeBr ₂	$(Y_{Ph})_2Ge$	GeBr ₂	0.000000	0.000000
	SnBr ₂	$(Y_{Ph})_2Sn$	GeBr ₂	0.021409	56.209329
	PbBr ₂	$(Y_{Ph})_2Pb$	GeBr ₂	0.036396	95.558406
$(Y_{Ph})_2Sn$	SiBr ₂	$(Y_{Ph})_2Si$	SnBr ₂	-0.039194	-102.90385
	GeBr ₂	$(Y_{Ph})_2Ge$	SnBr ₂	-0.021409	-56.209329
	SnBr ₂	$(Y_{Ph})_2Sn$	SnBr ₂	0.000000	0.000000
	PbBr ₂	$(Y_{Ph})_2Pb$	SnBr ₂	0.014980	39.330594
$(Y_{Ph})_2Pb$	SiBr ₂	$(Y_{Ph})_2Si$	PbBr ₂	-0.054174	-142.23384
	GeBr ₂	$(Y_{Ph})_2Ge$	PbBr ₂	-0.036396	-95.558406
	SnBr ₂	$(Y_{Ph})_2Sn$	PbBr ₂	-0.014980	-39.3330594
	PbBr ₂	$(Y_{Ph})_2Pb$	PbBr ₂	0.000000	0.000000

Tabelle 3.112. Energien für die Reaktion von Y_{CN} -substituierten Tetrylenen mit Elementdibromiden.

$(Y_{CN})_2E$	EBr_2 - Edukt	$(Y_{CN})_2E$	EBr_2 - Produkt	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]
$(Y_{CN})_2Si$	SiBr ₂	$(Y_{CN})_2Si$	SiBr ₂	0.000000	0.000000
	GeBr ₂	$(Y_{CN})_2Ge$	SiBr ₂	0.015980	41.955490
	SnBr ₂	$(Y_{CN})_2Sn$	SiBr ₂	0.032054	84.158643
	PbBr ₂	$(Y_{CN})_2Pb$	SiBr ₂	0.0450580	118.29978
$(Y_{CN})_2Ge$	SiBr ₂	$(Y_{CN})_2Si$	GeBr ₂	-0.015980	-41.95549
	GeBr ₂	$(Y_{CN})_2Ge$	GeBr ₂	0.000000	0.000000
	SnBr ₂	$(Y_{CN})_2Sn$	GeBr ₂	0.016071	42.194410
	PbBr ₂	$(Y_{CN})_2Pb$	GeBr ₂	0.029086	76.363980
$(Y_{CN})_2Sn$	SiBr ₂	$(Y_{CN})_2Si$	SnBr ₂	-0.032054	-84.145864
	GeBr ₂	$(Y_{CN})_2Ge$	SnBr ₂	-0.016071	-42.194410
	SnBr ₂	$(Y_{CN})_2Sn$	SnBr ₂	0.000000	0.000000
	PbBr ₂	$(Y_{CN})_2Pb$	SnBr ₂	0.013008	34.151401
$(Y_{CN})_2Pb$	SiBr ₂	$(Y_{CN})_2Si$	PbBr ₂	-0.045058	-118.29978
	GeBr ₂	$(Y_{CN})_2Ge$	PbBr ₂	-0.029086	-76.346398
	SnBr ₂	$(Y_{CN})_2Sn$	PbBr ₂	-0.013008	-34.151401
	PbBr ₂	$(Y_{CN})_2Pb$	PbBr ₂	0.000000	0.000000

3.14.2.5 Energien für die Reaktionen von Y*-substituierten Tetrylenen mit Elementdiiodiden

Tabelle 3.113. Energien für die Reaktion von Y-substituierten Tetrylenen mit Elementdiiodiden.

Y_2E	EI_2 - Edukt	Y_2E	EI_2 - Produkt	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]
Y_2Si	SiI_2	Y_2Si	SiI_2	0.000000	0.000000
	GeI_2	Y_2Ge	SiI_2	0.017522	46.004011
	SnI_2	Y_2Sn	SiI_2	0.014371	37.730772
	PbI_2	Y_2Pb	SiI_2	0.047262	124.08683
Y_2Ge	SiI_2	Y_2Si	GeI_2	-0.017522	-46.004011
	GeI_2	Y_2Ge	GeI_2	0.000000	0.000000
	SnI_2	Y_2Sn	GeI_2	-0.003151	-8.2725304
	PbI_2	Y_2Pb	GeI_2	0.029740	78.082816
Y_2Sn	SiI_2	Y_2Si	SnI_2	-0.014371	-37.730772
	GeI_2	Y_2Ge	SnI_2	0.003151	8.2725304
	SnI_2	Y_2Sn	SnI_2	0.000000	0.000000
	PbI_2	Y_2Pb	SnI_2	0.032891	86.355347
Y_2Pb	SiI_2	Y_2Si	PbI_2	-0.047262	-124.08683
	GeI_2	Y_2Ge	PbI_2	-0.029740	-78.082816
	SnI_2	Y_2Sn	PbI_2	-0.032891	-86.355347
	PbI_2	Y_2Pb	PbI_2	0.000000	0.000000

Tabelle 3.114. Energien für die Reaktion von CyY -substituierten Tetrylenen mit Elementdiiodiden.

CyY_2E	El_2 - Edukt	CyY_2E	El_2 - Produkt	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]
CyY_2Si	SiI_2	CyY_2Si	SiI_2	0.000000	0.000000
	GeI_2	CyY_2Ge	SiI_2	0.018137	47.618693
	SnI_2	CyY_2Sn	SiI_2	0.014455	37.952233
	PbI_2	CyY_2Pb	SiI_2	0.045083	118.36586
CyY_2Ge	SiI_2	CyY_2Si	GeI_2	-0.018137	-47.618693
	GeI_2	CyY_2Ge	GeI_2	0.000000	0.000000
	SnI_2	CyY_2Sn	GeI_2	-0.003682	-9.6666709
	PbI_2	CyY_2Pb	GeI_2	0.026946	70.747169
CyY_2Sn	SiI_2	CyY_2Si	SnI_2	-0.014455	-37.952233
	GeI_2	CyY_2Ge	SnI_2	0.003682	9.6666709
	SnI_2	CyY_2Sn	SnI_2	0.000000	0.000000
	PbI_2	CyY_2Pb	SnI_2	0.030628	80.413840
CyY_2Pb	SiI_2	CyY_2Si	PbI_2	-0.045083	-118.36586
	GeI_2	CyY_2Ge	PbI_2	-0.026946	-70.747169
	SnI_2	CyY_2Sn	PbI_2	-0.030628	-80.413840
	PbI_2	CyY_2Pb	PbI_2	0.000000	0.000000

Tabelle 3.115. Energien für die Reaktion von Y_{Ph} -substituierten Tetrylenen mit Elementdiiodiden.

$(Y_{Ph})_2E$	El_2 - Edukt	$(Y_{Ph})_2E$	El_2 - Produkt	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]
$(Y_{Ph})_2Si$	SiI_2	$(Y_{Ph})_2Si$	SiI_2	0.000000	0.000000
	GeI_2	$(Y_{Ph})_2Ge$	SiI_2	0.021887	57.464318
	SnI_2	$(Y_{Ph})_2Sn$	SiI_2	0.033616	88.258887
	PbI_2	$(Y_{Ph})_2Pb$	SiI_2	0.064986	170.62119
$(Y_{Ph})_2Ge$	SiI_2	$(Y_{Ph})_2Si$	GeI_2	-0.021887	-57.464318
	GeI_2	$(Y_{Ph})_2Ge$	GeI_2	0.000000	0.000000
	SnI_2	$(Y_{Ph})_2Sn$	GeI_2	0.011729	30.794910
	PbI_2	$(Y_{Ph})_2Pb$	GeI_2	0.043100	113.158394
$(Y_{Ph})_2Sn$	SiI_2	$(Y_{Ph})_2Si$	SnI_2	-0.033616	-88.258887
	GeI_2	$(Y_{Ph})_2Ge$	SnI_2	-0.0117292	-30.794910
	SnI_2	$(Y_{Ph})_2Sn$	SnI_2	0.000000	0.000000
	PbI_2	$(Y_{Ph})_2Pb$	SnI_2	0.031370	82.362355
$(Y_{Ph})_2Pb$	SiI_2	$(Y_{Ph})_2Si$	PbI_2	-0.064986	-170.62119
	GeI_2	$(Y_{Ph})_2Ge$	PbI_2	-0.043100	-113.158394
	SnI_2	$(Y_{Ph})_2Sn$	PbI_2	-0.031370	-82.362355
	PbI_2	$(Y_{Ph})_2Pb$	PbI_2	0.000000	0.000000

Tabelle 3.116. Energien für die Reaktion von Y_{CN} -substituierten Tetrylenen mit Elementdiodiden.

$(Y_{CN})_2E$	El_2 - Edukt	$(Y_{CN})_2E$	El_2 - Produkt	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]
$(Y_{CN})_2Si$	SiI_2	$(Y_{CN})_2Si$	SiI_2	0.000000	0.000000
	GeI_2	$(Y_{CN})_2Ge$	SiI_2	0.020082	52.725291
	SnI_2	$(Y_{CN})_2Sn$	SiI_2	0.026473	69.503522
	PbI_2	$(Y_{CN})_2Pb$	SiI_2	0.055870	146.68713
$(Y_{CN})_2Ge$	SiI_2	$(Y_{CN})_2Si$	GeI_2	-0.020082	-52.725291
	GeI_2	$(Y_{CN})_2Ge$	GeI_2	0.000000	0.000000
	SnI_2	$(Y_{CN})_2Sn$	GeI_2	0.006391	16.779991
	PbI_2	$(Y_{CN})_2Pb$	GeI_2	0.035788	93.961840
$(Y_{CN})_2Sn$	SiI_2	$(Y_{CN})_2Si$	SnI_2	-0.026473	-69.503522
	GeI_2	$(Y_{CN})_2Ge$	SnI_2	-0.006391	-16.779991
	SnI_2	$(Y_{CN})_2Sn$	SnI_2	0.000000	0.000000
	PbI_2	$(Y_{CN})_2Pb$	SnI_2	0.029397	77.181850
$(Y_{CN})_2Pb$	SiI_2	$(Y_{CN})_2Si$	PbI_2	-0.055870	-146.68713
	GeI_2	$(Y_{CN})_2Ge$	PbI_2	-0.035788	-93.961840
	SnI_2	$(Y_{CN})_2Sn$	PbI_2	-0.029397	-77.181850
	PbI_2	$(Y_{CN})_2Pb$	PbI_2	0.000000	0.000000

3.14.2.6 Energien für die Reaktionen von Y*-substituierten Germylenen mit Silicium-tetrahalogeniden

Tabelle 3.117. Energien für die Reaktion von Y*-substituierten Tetrylenen mit Elementtetrahalogeniden.

YCN ₂ Ge	SiX ₄	Y ^{CN} ₂ Si	EX ₂	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]
Y ₂ Ge	SiCl ₄	Y ₂ SiCl ₂	GeCl ₂	-0.0086496	-22.709630
	SiBr ₄	Y ₂ SiBr ₂	GeBr ₂	-0.0165895	-43.555627
	SiI ₄	Y ₂ SiI ₂	GeI ₂	-0.0190922	-50.126545
^{Cy} Y ₂ Ge	SiCl ₄	^{Cy} Y ₂ SiCl ₂	GeCl ₂	0.0087004	22.842979
	SiBr ₄	^{Cy} Y ₂ SiBr ₂	GeBr ₂	0.0037630	9.8797303
	SiI ₄	^{Cy} Y ₂ SiI ₂	GeI ₂	-0.0144903	-38.044272
(Y _{Ph}) ₂ Ge	SiCl ₄	(Y _{Ph}) ₂ SiCl ₂	GeCl ₂	-0.0299929	-78.746306
	SiBr ₄	(Y _{Ph}) ₂ SiBr ₂	GeBr ₂	-0.0452024	-118.67885
	SiI ₄	(Y _{Ph}) ₂ SiI ₂	GeI ₂	-0.0530849	-139.37443
(Y _{CN}) ₂ Ge	SiCl ₄	(Y _{CN}) ₂ SiCl ₂	GeCl ₂	-0.0175468	-46.069255
	SiBr ₄	(Y _{CN}) ₂ SiBr ₂	GeBr ₂	-0.0374162	-98.236181
	SiI ₄	(Y _{CN}) ₂ SiI ₂	GeI ₂	-0.0459769	-120.71235

3.14.3 Koordinaten der Verbindungen

3.14.3.1 Koordinaten der Elementdihalogenide

SiCl₂

E = -1210.96962367

Si 0.000000 0.000000 0.939590

Cl -0.000000 -1.610441 -0.386890

Cl -0.000000 1.610441 -0.386890

SiBr₂

E = -5440.40159380

Si 0.000000 0.000000 1.183217

Br -0.000000 -1.747839 -0.236643

Br 0.000000 1.747839 -0.236643

SiI₂

E = -312.622488020

Si 0.000000 0.000000 1.375356

I -0.000000 -1.972217 -0.181651

I 0.000000 1.972217 -0.181651

GeCl₂

E = -2999.23225637

Ge 0.000000 0.000000 0.726530

Cl -0.000000 -1.676975 -0.683793

Cl 0.000000 1.676975 -0.683793

GeBr₂

E = -7228.67181081

Ge 0.000000 0.000000 1.024873

Br -0.000000 -1.808713 -0.468513

Br 0.000000 1.808713 -0.468513

GeI₂

E = -2100.89704262

Ge 0.000000 0.000000 1.246162

I 0.000000 -2.011156 -0.376200

I -0.000000 2.011156 -0.376200

SnCl₂

E = -924.616738271

Sn 0.000000 -0.000000 0.637383

Cl 0.000000 -1.820415 -0.937327

Cl 0.000000 1.820415 -0.937327

SnBr₂

E = -5154.06389680

Sn 0.000000 -0.000000 0.976589

Br 0.000000 -1.938027 -0.697563

Br -0.000000 1.938027 -0.697563

SnI₂

E = -26.2795261554

Sn 0.000000 0.000000 1.232744

I 0.000000 -2.170132 -0.581483

I -0.000000 2.170132 -0.581483

PbCl₂

E = -924.676052729

Pb 0.000000 0.000000 0.471678

Cl -0.000000 -1.893006 -1.137577

Cl 0.000000 1.893006 -1.137577

PbBr₂

E = -5154.12597388

Pb 0.000000 0.000000 0.784147

Br -0.000000 -2.011844 -0.918572

Br 0.000000 2.011844 -0.918572

PbI₂

E = -26.3580621683

Pb 0.000000 0.000000 1.036032

I -0.000000 -2.185758 -0.801459

I 0.000000 2.185758 -0.801459

3.14.3.2 Koordinaten der Elementtetrahalogenide

SiCl₄

E = -2132.25852331

Si 0.000023 0.000013 0.000000

Cl 0.676554 0.956894 -1.657204

Cl 0.676554 0.956894 1.657204

Cl -2.029681 -0.000121 0.000000

Cl 0.676554 -1.913677 0.000000

SiBr₄

E = -10591.1153718

Si -0.000024 0.000000 -0.000043

Br 1.177461 -1.794499 -0.473067

Br 1.177438 1.794506 -0.473099

Br -1.846516 -0.000023 -1.192010

Br -0.508374 0.000016 2.138193

SiI₄

E = -335.553677214
 Si 0.000140 0.000031 0.000000
 I 0.000140 -1.416416 -2.002958
 I 0.000140 -1.416416 2.002958
 I 2.002864 1.416748 0.000000
 I -2.003181 1.416075 0.000000

GeCl₄

E = -3920.46048120
 Ge -0.000005 0.000000 -0.000006
 Cl 1.094790 1.734464 -0.552840
 Cl 1.094770 -1.734448 -0.552929
 Cl -0.312854 -0.000052 2.101099
 Cl -1.876697 0.000036 -0.995318

GeBr₄

E = -12379.3385885
 Ge -0.000018 0.000000 -0.000021
 Br 0.902314 -1.864722 -0.961598
 Br 0.902074 1.864815 -0.961642
 Br -2.262142 -0.000149 -0.314248
 Br 0.457770 0.000056 2.237507

GeI₄

E = -2123.79052707
 Ge 0.000037 0.000000 -0.000071
 I -1.335367 2.062840 -0.587035
 I -1.335347 -2.062836 -0.587093
 I 2.165644 0.000029 -1.301275
 I 0.505047 -0.000032 2.475447

SnCl₄

E = -1845.81523715
 Sn 0.000011 0.000000 0.000039
 Cl -0.123593 1.897680 -1.336171

Cl -0.123593 -1.897673 -1.336180
 Cl 2.013303 -0.000003 1.161355
 Cl -1.766151 -0.000004 1.510880

SnBr₄

E = -10304.7106323
 Sn -0.000002 0.000000 0.000004
 Br -1.430696 -2.023192 -0.006008
 Br -1.430586 2.023271 -0.005916
 Br 1.422213 -0.000085 2.029165
 Br 1.439072 0.000007 -2.017246

SnI₄

E = -49.1453544983
 Sn 0.000056 0.000000 -0.000074
 I -1.395867 2.239007 -0.747059
 I -1.395853 -2.238921 -0.747343
 I 2.452630 0.000085 -1.226660
 I 0.339038 -0.000171 2.721131

PbCl₄

E = -1845.80955068
 Pb 0.000006 0.000015 0.000000
 Cl 0.805794 -1.139601 -1.973778
 Cl 0.805794 -1.139601 1.973778
 Cl 0.805794 2.279188 0.000000 Cl -2.417410 -0.000059 0.000000

PbBr₄

E = -10304.7181001
 Pb 0.000000 0.000000 0.000000
 Br 1.485580 1.485580 1.485580
 Br -1.485580 -1.485580 1.485580
 Br -1.485580 1.485580 -1.485580
 Br 1.485580 -1.485580 -1.485580

Pbl₄

E = -49.1965683653

Pb 0.000049 -0.000001 0.000000

I 0.000049 -1.620519 -2.291666

I 0.000049 -1.620519 2.291666

I 2.291601 1.620670 0.000000

I -2.291775 1.620370 0.000000

3.14.3.3 Koordinaten der ylidsubstituierten Tetrelchloride

(^{Me}Y_{SO₂Ph})₂SiCl₂

E = -3773.10898943

O 1.752721 -1.361103 -1.363646

O -1.543283 1.778534 -0.317646

C -1.356378 -0.727373 -0.153598

C 1.397796 0.818012 0.014506

S 2.392132 -0.077141 -1.044158

O 2.837103 0.762638 -2.174287

C 3.914397 -0.479308 -0.183261

P -1.742665 -2.358695 -0.550303

S -2.222929 0.564549 -0.830778

O -2.448623 0.466176 -2.277153

C -3.863113 0.573735 -0.104040

P 1.478779 2.531294 -0.237596

C 4.976396 -0.916959 -0.970913

C 6.174627 -1.263325 -0.361758

C 4.036413 -0.376783 1.195728

C 6.308538 -1.167655 1.021680

C 5.243173 -0.723508 1.796621

C -4.965393 0.726604 -0.935289

C -4.002118 0.455440 1.275444

C -5.277088 0.476665 1.826345

C -6.393319 0.618791 1.003942

C -6.238072 0.745024 -0.372415

H 4.855955 -0.965431 -2.051032

H 7.011299 -1.604080 -0.968788

H 3.192530 -0.024886 1.784752

H 5.348481 -0.645531 2.877026
 H -4.806845 0.819812 -2.007225
 H -3.115953 0.346517 1.898741
 H -5.401374 0.384006 2.903549
 H -7.111025 0.859287 -1.012246
 C 3.199095 3.098653 -0.156057
 H 3.243728 4.183722 -0.302473
 H 3.614464 2.835993 0.822761
 H 3.768914 2.593195 -0.941279
 C 0.838849 3.095311 -1.830216
 H 1.398586 2.566467 -2.606999
 H -0.218402 2.819769 -1.875625
 H 0.962266 4.179695 -1.931013
 C -3.128563 -2.424654 -1.709838
 H -4.011742 -1.948586 -1.271687
 H -2.858011 -1.886644 -2.622337
 H -3.346817 -3.475873 -1.926618
 C -2.285025 -3.293296 0.903449
 H -3.163785 -2.790150 1.322063
 H -2.532708 -4.327561 0.639050
 H -1.479851 -3.280942 1.644189
 C -0.421297 -3.306032 -1.326077
 H -0.108048 -2.778687 -2.231913
 H 0.445487 -3.339901 -0.661649
 H -0.782192 -4.315439 -1.554930
 H 7.250600 -1.436570 1.495846
 H -7.390029 0.631443 1.440975
 C 0.616732 3.468920 1.037477
 H -0.449408 3.231839 1.002210
 H 1.015708 3.209951 2.021995
 H 0.777902 4.533096 0.831033
 Si 0.077772 -0.148214 0.805413
 Cl -0.529703 0.828440 2.560056
 Cl 0.918836 -1.901767 1.619636

Y_2SiCl_2

E = -5004.25618872

C 4.538821 2.220757 0.703402
 H 4.372485 2.137459 1.774500
 C 3.533540 1.828147 -0.167495
 C 5.742126 2.682650 0.183296
 C 3.706091 1.906327 -1.544935
 S 1.990016 1.230863 0.506586
 C -3.533553 -1.828136 -0.167510
 C -3.706095 -1.906318 -1.544963
 S -1.990010 -1.230919 0.506591
 C -4.538879 -2.220620 0.703372
 O 0.961512 2.241216 0.194506
 H -2.898831 -1.601771 -2.208038
 C -4.915257 -2.363080 -2.046945
 C 2.430420 -3.498007 2.285078
 H 3.256559 -3.957744 1.742822
 C 1.800774 -2.357730 1.775504
 C 1.998320 -4.041648 3.487001
 H 6.538138 2.983380 0.863544
 C 5.954707 2.751111 -1.193906
 C -1.208383 4.990545 -1.800449
 H -0.600392 5.869650 -1.597960
 C -1.414950 4.055464 -0.793115
 C -1.757134 4.795566 -3.061712
 H -0.945729 4.189111 0.177204
 C -2.174225 2.914519 -1.052625
 C 2.682510 -2.697706 -2.337098
 H 3.165236 -1.755694 -2.583521
 C 2.174332 -2.914579 -1.052602
 C 2.492543 -3.645419 -3.330804
 C 1.415097 -4.055545 -0.793074
 P 2.350326 -1.631483 0.207874
 C 5.062923 -1.216512 -0.502487
 H 4.772700 -1.382675 -1.533649
 C 6.388359 -0.911651 -0.222415
 C 4.123997 -1.307087 0.528303
 H 7.107082 -0.846417 -1.036781
 C 6.791950 -0.687627 1.089552

H -1.591307 5.530726 -3.847067
 C -2.492451 3.645362 -3.330825
 C -1.556603 0.198841 -0.335601
 P -2.350252 1.631428 0.207856
 C 1.556672 -0.198909 -0.335623
 O -2.281480 -0.949765 1.926890
 O -0.961532 -2.241301 0.194534
 C -1.800765 2.357695 1.775499
 C -4.123933 1.307041 0.528264
 H -5.058266 -2.421460 -3.125416
 C -5.954821 -2.750807 -1.193939
 C -4.532787 1.060434 1.842396
 H -3.804093 1.080323 2.647384
 C -5.860742 0.757906 2.118194
 C -0.759062 1.767807 2.475877
 H -0.272703 0.894578 2.063037
 C -0.319252 2.317828 3.672832
 C 5.860789 -0.757915 2.118239
 H 6.163928 -0.568885 3.146069
 C 4.532836 -1.060447 1.842434
 H 3.804131 -1.080317 2.647413
 C -2.682426 2.697657 -2.337114
 H -3.165183 1.755659 -2.583525
 C 0.758997 -1.767816 2.475750
 H 2.898873 1.601680 -2.208021
 C 4.915214 2.363236 -2.046910
 H 0.945886 -4.189195 0.177251
 C 1.208537 -4.990634 -1.800403
 C -1.998540 4.041656 3.486931
 H -2.484625 4.930351 3.884765
 C -2.430490 3.497974 2.284975
 C -0.940646 3.452412 4.179013
 H -3.256579 3.957679 1.742615
 H -2.888273 3.468359 -4.328605
 C 7.275164 3.194355 -1.748412
 H 7.153991 3.738485 -2.691796
 H 7.921518 2.329233 -1.953960

H 7.810515 3.840919 -1.044800
 H -0.599450 3.888309 5.116448
 C -5.742248 -2.682365 0.183251
 C -7.275291 -3.193904 -1.748529
 H 7.831253 -0.448714 1.307531
 C -6.388284 0.911571 -0.222470
 H -7.106994 0.846289 -1.036843
 C -5.062847 1.216434 -0.502534
 C -6.791890 0.687582 1.089498
 O 2.281471 0.949746 1.926896
 H 5.058231 2.421625 -3.125378
 H 2.888345 -3.468404 -4.328590
 C 1.757261 -4.795641 -3.061677
 H 1.591439 -5.530807 -3.847028
 H 0.600571 -5.869753 -1.597902
 H -4.772614 1.382559 -1.533699
 H 0.523860 1.860202 4.185098
 H -7.831193 0.448666 1.307470
 H -6.538315 -2.982979 0.863484
 H -6.163890 0.568902 3.146026
 C 0.940350 -3.452376 4.178943
 H 0.599034 -3.888253 5.116343
 C 0.319029 -2.317798 3.672661
 H 2.484344 -4.930343 3.884912
 H -4.372558 -2.137321 1.774472
 H -7.812095 -3.837949 -1.043726
 H -7.153873 -3.740692 -2.690354
 H -7.920364 -2.328542 -1.957056
 H -0.524155 -1.860159 4.184796
 H 0.272686 -0.894603 2.062824
 Si 0.000023 -0.000039 -1.300176
 Cl -0.277538 -1.561172 -2.662441
 Cl 0.277571 1.561056 -2.662489

^{cy}Y₂SiCl₂

E = -5026.00952727

O 1.446155 2.488348 1.298915

O -0.549704 -2.424136 -1.026549
 C -1.394887 -0.177078 -0.182394
 C 1.882736 0.195237 0.023409
 S 2.498335 1.651203 0.707650
 O 3.632294 1.345300 1.600255
 C 3.199889 2.656816 -0.602567
 P -2.534381 0.910217 0.605690
 C -3.844260 -0.135605 1.420205
 C -3.560640 2.011601 -0.474155
 C -1.731340 2.022839 1.834756
 S -1.743826 -1.850341 -0.376365
 O -2.227499 -2.534868 0.832629
 C -3.073001 -2.036644 -1.557815
 P 2.768368 -1.272036 0.435749
 C 4.597055 -1.092321 0.630557
 C 2.190872 -1.966326 2.041559
 C 2.430453 -2.529914 -0.851146
 C 3.724367 3.884927 -0.208992
 C 4.317958 4.704972 -1.155006
 C -3.399572 -0.735364 2.756845
 C -5.256393 0.445430 1.549742
 C 3.259191 2.254317 -1.927076
 C -3.020329 3.341529 -0.992227
 C -4.162358 1.213151 -1.627499
 C 5.302893 -0.250632 -0.429985
 C 5.317235 -2.430781 0.811540
 C -4.167329 4.142691 -1.599416
 C -0.817430 1.291565 2.820013
 C -2.766748 2.886056 2.562934
 C 4.394482 4.322200 -2.499244
 C 3.854849 3.089818 -2.866030
 C 5.038931 5.221758 -3.510944
 C -4.354914 -1.838086 3.184191
 C 2.470439 -1.033578 3.220694
 C 0.700798 -2.290977 1.975284
 C -0.181695 2.252789 3.815859
 C 6.738613 0.013057 0.003157

C -1.225018 3.093432 4.535335
 C 3.209826 -2.289536 -2.145229
 C 2.533375 -3.998484 -0.427234
 C -6.220251 -0.643696 2.017107
 C -5.278677 1.996469 -2.304688
 C -4.288406 -2.571724 -1.154628
 C -2.878362 -1.616174 -2.869294
 C -3.937008 -1.676015 -3.760603
 C -5.193979 -2.152244 -3.365993
 C -4.813320 3.376815 -2.747061
 C -2.088278 3.845273 3.533232
 C -5.345559 -2.614877 -2.058271
 C 1.968992 -1.638518 4.526489
 C 2.652247 -3.174735 -3.252499
 C -5.774690 -1.309581 3.309308
 C -6.342831 -2.152038 -4.328372
 C 1.972935 -4.880568 -1.538843
 C 6.757630 -2.175729 1.244946
 C 2.695297 -4.644038 -2.857590
 C 7.492034 -1.286585 0.250413
 C 0.200573 -2.901683 3.275325
 C 0.490215 -1.991970 4.458778
 H -3.936551 -0.969703 0.718367
 H -4.369009 2.277178 0.222243
 H -1.087097 2.673256 1.223000
 H 4.682690 -0.535639 1.568864
 H 2.755942 -2.901249 2.183114
 H 1.372991 -2.354099 -1.075415
 H 3.661808 4.185685 0.834593
 H 4.730954 5.665102 -0.847209
 H -2.384772 -1.132039 2.674136
 H -3.396953 0.053532 3.522468
 H -5.266395 1.285424 2.259045
 H -5.622211 0.828695 0.592216
 H 2.833975 1.296959 -2.223846
 H -2.517473 3.910072 -0.200261
 H -2.273379 3.157417 -1.767910

H -3.357038 0.998030 -2.342079
 H -4.539168 0.237282 -1.294296
 H 5.303680 -0.770407 -1.395757
 H 4.780032 0.694834 -0.575179
 H 4.811773 -3.066777 1.548981
 H 5.321833 -2.986119 -0.136095
 H -4.922086 4.357287 -0.826293
 H -3.796757 5.114016 -1.950874
 H -0.040085 0.762995 2.259763
 H -1.387933 0.543407 3.374663
 H -3.384311 3.448726 1.852012
 H -3.449182 2.237167 3.130555
 H 3.896185 2.775342 -3.907903
 H 6.087654 5.420167 -3.254733
 H 5.014535 4.780885 -4.512746
 H 4.531346 6.193795 -3.557615
 H -4.307573 -2.642327 2.435586
 H -4.017433 -2.273530 4.133394
 H 1.970723 -0.072470 3.036471
 H 3.537284 -0.796322 3.298201
 H 0.466376 -2.953324 1.138066
 H 0.152190 -1.358611 1.781628
 H 0.414679 1.673721 4.534902
 H 0.519864 2.899427 3.278263
 H 6.719004 0.615270 0.923408
 H 7.252153 0.617067 -0.755832
 H -1.870322 2.446748 5.151465
 H -0.741205 3.797190 5.224771
 H 4.270237 -2.534868 -1.992303
 H 3.156661 -1.231616 -2.431074
 H 3.578313 -4.274693 -0.233416
 H 1.978360 -4.184943 0.497561
 H -6.289207 -1.404932 1.224411
 H -7.226269 -0.218055 2.125649
 H -5.666335 1.424855 -3.158888
 H -6.116827 2.103226 -1.597461
 H -4.395049 -2.942752 -0.137450

H -1.908822 -1.221977 -3.168012
 H -3.791847 -1.336529 -4.785505
 H -4.074666 3.263226 -3.554657
 H -5.651535 3.946264 -3.169100
 H -1.458653 4.544887 2.964119
 H -2.849083 4.448692 4.045517
 H -6.305877 -3.019479 -1.741291
 H 2.548685 -2.547932 4.749726
 H 2.160945 -0.938232 5.350041
 H 3.212730 -3.007697 -4.181776
 H 1.612965 -2.877689 -3.447066
 H -5.816626 -0.574712 4.128084
 H -6.469460 -2.115188 3.579942
 H -6.055426 -2.584445 -5.294136
 H -7.194775 -2.718653 -3.939163
 H -6.685596 -1.126824 -4.524520
 H 2.042995 -5.936346 -1.245854
 H 0.905056 -4.649013 -1.657558
 H 6.750490 -1.690226 2.232304
 H 7.284088 -3.131082 1.369159
 H 2.255751 -5.264849 -3.649179
 H 3.744960 -4.963555 -2.758438
 H 7.597034 -1.828007 -0.702694
 H 8.510952 -1.082056 0.604172
 H -0.873202 -3.103951 3.178750
 H 0.691416 -3.874934 3.433432
 H -0.092871 -1.066142 4.348486
 H 0.163075 -2.457480 5.397817
 Si 0.256009 0.334053 -0.854637
 Cl 0.009034 2.370419 -1.263034
 Cl 0.524552 -0.322195 -2.841452

(Y_{Ph})₂SiCl₂

E = -3827.07923209
 P 3.004785 0.199086 0.005618
 P -3.089223 0.273204 0.042591
 C 1.445635 -0.059280 -0.641237

C 1.170716 -1.352907 -1.301747
 C 1.643713 -2.579275 -0.812386
 H 2.201119 -2.597158 0.120211
 C 1.357090 -3.775839 -1.455854
 H 1.732968 -4.709238 -1.039966
 C 0.562390 -3.790961 -2.597025
 H 0.322966 -4.730250 -3.091758
 C 0.079422 -2.585567 -3.098824
 H -0.533549 -2.577534 -3.999883
 C 0.392438 -1.386517 -2.470894
 H 0.057114 -0.439335 -2.892204
 C 3.362599 -0.456497 1.684397
 C 3.919539 -1.725673 1.867094
 H 4.260122 -2.299832 1.007651
 C 4.046418 -2.264212 3.142159
 H 4.486393 -3.251581 3.267892
 C 3.609649 -1.546318 4.250094
 H 3.707496 -1.968700 5.248377
 C 3.041881 -0.287850 4.076443
 H 2.692060 0.277707 4.937873
 C 2.918495 0.255499 2.803344
 H 2.464684 1.235422 2.672656
 C 3.469536 1.955901 0.046198
 C 4.438565 2.434316 0.928012
 H 4.872266 1.775265 1.677716
 C 4.848570 3.760956 0.854707
 H 5.599834 4.132452 1.548891
 C 4.298262 4.609342 -0.099908
 H 4.617081 5.648771 -0.151860
 C 3.341186 4.128543 -0.987891
 H 2.904882 4.788966 -1.734420
 C 2.929954 2.804491 -0.922050
 H 2.173135 2.427320 -1.607344
 C 4.310775 -0.508110 -1.055956
 C 4.051524 -0.787137 -2.398284
 H 3.043929 -0.675759 -2.788043
 C 5.081853 -1.206295 -3.232170

H 4.868394 -1.432645 -4.274804
 C 6.375864 -1.334603 -2.739885
 H 7.179173 -1.664567 -3.396022
 C 6.644458 -1.029995 -1.409323
 H 7.657996 -1.112337 -1.021845
 C 5.617663 -0.614126 -0.571499
 H 5.837224 -0.364639 0.465297
 C -1.443418 -0.115467 0.275552
 C -1.091968 -1.424746 0.865154
 C -0.173348 -1.488109 1.924945
 H 0.209448 -0.555724 2.337686
 C 0.241115 -2.704418 2.450465
 H 0.961268 -2.716621 3.267184
 C -0.274785 -3.897120 1.948561
 H 0.042322 -4.851968 2.364194
 C -1.196481 -3.855193 0.907642
 H -1.593184 -4.780485 0.492564
 C -1.586039 -2.637327 0.363411
 H -2.249315 -2.620469 -0.501729
 C -4.121916 -0.507932 1.330169
 C -4.286002 0.103446 2.574433
 H -3.867906 1.089341 2.758127
 C -4.991580 -0.539040 3.583927
 H -5.118585 -0.049168 4.547232
 C -5.531825 -1.802142 3.364776
 H -6.080587 -2.305740 4.158376
 C -5.369182 -2.418716 2.130154
 H -5.785137 -3.408377 1.952748
 C -4.669991 -1.775282 1.115857
 H -4.552284 -2.262771 0.151346
 C -3.369233 2.067484 0.121959
 C -4.108562 2.757469 -0.839979
 H -4.553017 2.225457 -1.676490
 C -4.251951 4.136225 -0.747909
 H -4.821920 4.669058 -1.506467
 C -3.655164 4.835341 0.296028
 H -3.761479 5.916831 0.357715

C -2.909128 4.153192 1.250241
 H -2.419835 4.694963 2.056908
 C -2.763844 2.774976 1.163104
 H -2.143548 2.245158 1.881367
 C -3.897815 -0.262865 -1.507069
 C -5.288254 -0.257998 -1.660593
 H -5.927041 0.052770 -0.834338
 C -5.853056 -0.657941 -2.864363
 H -6.934952 -0.656188 -2.983186
 C -5.035361 -1.066702 -3.916786
 H -5.481476 -1.383468 -4.857803
 C -3.654221 -1.076992 -3.763160
 H -3.013628 -1.402988 -4.580505
 C -3.085601 -0.675093 -2.558318
 H -2.009197 -0.690652 -2.408503
 Si -0.036788 0.908087 -0.222778
 Cl 0.505637 2.345674 1.250238
 Cl -0.670763 2.159828 -1.810438

$(Y_{CN})_2SiCl_2$

E = -3548.99456433
 C -3.573250 -1.700989 0.910024
 C -4.792053 -1.781715 1.594959
 C -5.111809 -2.931057 2.304276
 H -6.057449 -2.991993 2.839398
 C -4.214330 -3.996515 2.343046
 H -4.463409 -4.893015 2.907923
 C -2.996692 -3.909073 1.679830
 H -2.277891 -4.723712 1.728999
 C -2.670670 -2.762985 0.961497
 H -1.701606 -2.690018 0.473125
 H -5.478891 -0.935801 1.594538
 P -3.098680 -0.206498 -0.000646
 C 1.364124 -0.374263 0.459369
 P 3.019055 -0.157069 0.039143
 C -1.461631 -0.196849 -0.509524
 C 0.990290 -1.615801 0.999916

C -1.180301 -1.092917 -1.560706
 C -3.781578 2.426631 0.542613
 H -3.871188 2.542702 -0.535629
 N 0.669917 -2.646276 1.440729
 C -3.534221 2.128929 3.301846
 H -3.430512 2.014347 4.378731
 N -0.920695 -1.811688 -2.440888
 C -3.484664 1.177806 1.090055
 C -3.947366 3.523210 1.377461
 H -4.171783 4.498289 0.950454
 C -3.819179 3.375310 2.755001
 H -3.943591 4.238112 3.406662
 C -3.364242 1.028064 2.472688
 H -3.116141 0.057882 2.897635
 C -4.173128 -0.073306 -1.463767
 C -3.682988 0.659334 -2.549325
 H -2.677569 1.076371 -2.504184
 C -4.469249 0.831580 -3.681659
 H -4.081242 1.398869 -4.525053
 C -5.738277 0.265943 -3.742381
 H -6.349580 0.394719 -4.633600
 C -6.220819 -0.478602 -2.670885
 H -7.206639 -0.936186 -2.723185
 C 3.450350 1.596680 0.104257
 C -5.441721 -0.651300 -1.533360
 H -5.818982 -1.252918 -0.710689
 C 4.153875 2.229909 -0.919860
 H 4.458215 1.670909 -1.801345
 C 4.437893 3.586430 -0.822955
 H 4.978213 4.082377 -1.626614
 C 4.018540 4.311090 0.287942
 H 4.234947 5.375649 0.354790
 C 3.312532 3.680715 1.307424
 H 2.969825 4.248113 2.170026
 C 3.025919 2.324847 1.218695
 H 2.449487 1.830817 1.998413
 H 4.854948 -4.225920 2.084009

H 3.404421 -2.969611 0.533755
 C 4.126127 -1.035067 1.178075
 C 4.998027 -0.355752 2.029828
 H 5.042294 0.730767 2.016032
 C 5.818209 -1.071060 2.895719
 H 6.499599 -0.537735 3.555506
 C 5.767523 -2.460033 2.917148
 H 6.408252 -3.017225 3.597992
 C 4.899234 -3.139074 2.067647
 C 4.082254 -2.433187 1.194981
 C 3.480432 -0.795909 -1.595364
 C 2.476022 -1.140716 -2.496892
 H 1.429313 -1.044323 -2.220368
 C 2.816427 -1.641323 -3.749456
 H 2.022867 -1.920191 -4.439228
 C 4.152319 -1.792368 -4.100583
 H 4.416403 -2.186355 -5.080403
 C 5.158368 -1.455280 -3.196247
 H 6.204030 -1.587136 -3.467517
 C 4.826068 -0.964076 -1.941368
 H 5.609772 -0.721431 -1.224031
 Si 0.011281 0.741394 -0.021895
 Cl 0.667165 1.873177 -1.660487
 Cl -0.415541 2.183870 1.423678

(^{Me}Y_{SO₂Ph})₂GeCl₂

E = -5561.31898524
 O -1.770653 -1.452424 1.230181
 O 1.496764 1.798882 0.290767
 C 1.443211 -0.713977 0.269619
 C -1.497738 0.754057 -0.066275
 S -2.422987 -0.146629 1.049060
 O -2.736071 0.666618 2.239600
 C -4.027509 -0.475049 0.314188
 P 1.877109 -2.310894 0.733362
 S 2.231843 0.653807 0.882853
 O 2.435170 0.643860 2.335663

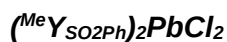
C 3.881754 0.706045 0.182839
 P -1.590106 2.470921 0.139866
 C -5.167146 -0.227782 1.069828
 C -6.416579 -0.499937 0.521199
 C -4.111804 -0.999746 -0.971019
 C -6.515315 -1.017546 -0.765508
 C -5.363833 -1.267891 -1.508901
 C 4.968414 0.888692 1.028450
 C 4.041937 0.582558 -1.194095
 C 5.323662 0.628588 -1.726935
 C 6.425240 0.799272 -0.890101
 C 6.248452 0.930606 0.482946
 H -5.056836 0.178511 2.072453
 H -7.315853 -0.306272 1.102973
 H -3.204959 -1.188687 -1.541196
 H -5.441497 -1.674433 -2.515414
 H 4.792360 0.989531 2.096991
 H 3.167765 0.451867 -1.830453
 H 5.464654 0.533173 -2.801806
 H 7.109580 1.068687 1.134009
 C -3.325007 2.993011 0.089081
 H -3.394453 4.081766 0.191077
 H -3.769837 2.672764 -0.858713
 H -3.854146 2.512284 0.917917
 C -0.936199 3.115853 1.696754
 H -1.464210 2.605733 2.507215
 H 0.129620 2.875156 1.735859
 H -1.090744 4.199684 1.751576
 C 3.174849 -2.267866 1.991065
 H 4.060235 -1.755589 1.600584
 H 2.810271 -1.716761 2.862075
 H 3.433361 -3.297901 2.259318
 C 2.560575 -3.260738 -0.648730
 H 3.437620 -2.725867 -1.029985
 H 2.841197 -4.272949 -0.336116
 H 1.803161 -3.311057 -1.437188
 C 0.538310 -3.292984 1.431180

H 0.129290 -2.760346 2.294663
H -0.266549 -3.381969 0.696921
H 0.918810 -4.281060 1.714637
H -7.493919 -1.226660 -1.193674
H 7.427408 0.831154 -1.313467
C -0.759801 3.363087 -1.185303
H 0.311530 3.148468 -1.140293
H -1.151746 3.042015 -2.154237
H -0.939760 4.433444 -1.034670
Ge -0.043401 -0.215074 -0.796796
Cl 0.632294 0.764590 -2.645348
Cl -0.724340 -2.120035 -1.693121

(^{Me}Y_{SO₂Ph})₂SnCl₂

E = -3486.68506764
O -1.769285 -1.326588 1.185185
O 1.509530 1.707068 0.303172
C 1.579404 -0.780231 0.379148
C -1.649756 0.893172 -0.032078
S -2.514400 -0.052686 1.084990
O -2.831215 0.711801 2.305082
C -4.104676 -0.472690 0.381457
P 1.959890 -2.360486 0.918602
S 2.320969 0.627672 0.940554
O 2.534261 0.686975 2.390510
C 3.951070 0.750353 0.214384
P -1.663087 2.598174 0.217971
C -5.263913 -0.046564 1.015902
C -6.497224 -0.375742 0.460631
C -4.148354 -1.239028 -0.778961
C -6.556865 -1.128425 -0.706573
C -5.383876 -1.561640 -1.322544
C 5.058216 0.858531 1.045467
C 4.073630 0.739245 -1.172066
C 5.341829 0.820738 -1.730469
C 6.465612 0.914588 -0.910292
C 6.324875 0.935478 0.472706

H -5.182763 0.525262 1.937400
 H -7.413849 -0.047479 0.947078
 H -3.224242 -1.577270 -1.244662
 H -5.432396 -2.158416 -2.231203
 H 4.908881 0.884252 2.122472
 H 3.183591 0.667744 -1.796340
 H 5.454796 0.813802 -2.812768
 H 7.202952 1.017801 1.110383
 C -3.364702 3.215263 0.221112
 H -3.382364 4.298108 0.386838
 H -3.838994 2.969208 -0.734296
 H -3.901669 2.711659 1.031951
 C -0.926728 3.156498 1.770624
 H -1.460673 2.654602 2.583164
 H 0.120974 2.839736 1.766389
 H -1.000475 4.245686 1.868883
 C 3.247002 -2.300506 2.184760
 H 4.144722 -1.827915 1.770947
 H 2.891023 -1.693831 3.022344
 H 3.482055 -3.319091 2.511173
 C 2.585258 -3.401273 -0.423148
 H 3.483412 -2.933371 -0.840141
 H 2.812841 -4.414160 -0.071804
 H 1.810844 -3.442519 -1.198105
 C 0.546060 -3.235665 1.610967
 H 0.133861 -2.647967 2.436680
 H -0.229887 -3.303520 0.840251
 H 0.843629 -4.236644 1.943481
 H -7.522547 -1.384450 -1.138514
 H 7.456945 0.975288 -1.355451
 C -0.781086 3.429700 -1.111892
 H 0.273203 3.136714 -1.069134
 H -1.196071 3.130303 -2.078689
 H -0.871888 4.512744 -0.974274
 Sn -0.053555 -0.212837 -0.785304
 Cl 0.683074 0.809432 -2.829448
 Cl -0.726973 -2.326160 -1.747763



E = -3484.54163521

O -1.882932 -1.194000 1.405502

O 1.622239 1.778945 0.458030

C 1.649086 -0.733790 0.520374

C -1.759307 0.957461 0.015776

S -2.640389 0.050411 1.163688

O -3.020801 0.917179 2.294938

C -4.184471 -0.460748 0.424626

P 2.008918 -2.317440 1.058882

S 2.433673 0.672142 1.034487

O 2.724563 0.699147 2.471650

C 4.027115 0.762857 0.224799

P -1.664799 2.663888 0.262600

C -5.370371 0.115386 0.861779

C -6.567497 -0.277202 0.271756

C -4.168270 -1.435537 -0.567771

C -6.566786 -1.237678 -0.733939

C -5.369907 -1.817175 -1.149296

C 5.180086 0.818181 0.997492

C 4.076530 0.782705 -1.166038

C 5.315633 0.842760 -1.789110

C 6.483539 0.884984 -1.029238

C 6.416375 0.874105 0.359481

H -5.341787 0.846140 1.666398

H -7.504912 0.163979 0.605109

H -3.226863 -1.886214 -0.876513

H -5.371618 -2.576077 -1.929138

H 5.089957 0.823647 2.081398

H 3.156056 0.750607 -1.748312

H 5.369687 0.859299 -2.875854

H 7.328634 0.915671 0.951575

C 3.299051 -2.272734 2.323125

H 4.198150 -1.800008 1.913042

H 2.948862 -1.673797 3.168118

H 3.527696 -3.297659 2.634869

C 2.617774 -3.382530 -0.271127

H 3.515940 -2.924725 -0.699908
H 2.843145 -4.390553 0.095412
H 1.838323 -3.432815 -1.039954
C 0.577882 -3.156903 1.764408
H 0.179362 -2.549188 2.582753
H -0.199310 -3.229192 0.994932
H 0.855114 -4.158037 2.113529
C -0.920943 3.205683 1.818757
H -1.482044 2.733410 2.630697
H 0.117573 2.857540 1.827134
H -0.956328 4.297883 1.904668
C -0.711481 3.421410 -1.062381
H 0.329056 3.087081 -0.987548
H -1.114022 3.119194 -2.033684
H -0.756520 4.510108 -0.948544
C -3.325985 3.380810 0.222101
H -3.800512 3.135046 -0.733119
H -3.901445 2.938230 1.041392
H -3.274689 4.467520 0.353216
H 7.451402 0.930371 -1.525031
H -7.505243 -1.542270 -1.193501
Pb -0.070808 -0.202996 -0.673748
Cl 0.734798 0.796878 -2.828241
Cl -0.740362 -2.463318 -1.581946

3.14.3.4 Koordinaten der ylidsubstituierten Tetrelbromide

$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{SiBr}_2$

E = -8002.53765446
O -1.728914 -1.108417 1.727589
O 1.631054 1.810786 0.412435
C 1.347729 -0.691284 0.397307
C -1.334451 0.970781 0.194959
S -2.344856 0.158162 1.307372
O -2.780913 1.083640 2.371942
C -3.864548 -0.294975 0.470876
P 1.680860 -2.306183 0.904439

S 2.254921 0.606309 1.011979
 O 2.448047 0.594496 2.466783
 C 3.908117 0.509177 0.322847
 P -1.334159 2.694885 0.400217
 C -4.843974 -0.899383 1.255442
 C -6.049047 -1.264006 0.671801
 C -4.072717 -0.052980 -0.879100
 C -6.270567 -1.024899 -0.683133
 C -5.285257 -0.421317 -1.455415
 C 4.995307 0.736727 1.157323
 C 4.074179 0.240720 -1.032049
 C 5.360353 0.188933 -1.554708
 C 6.460861 0.407203 -0.728495
 C 6.278970 0.681245 0.623200
 H -4.654811 -1.072086 2.312834
 H -6.821646 -1.735949 1.275886
 H -3.281663 0.408295 -1.466919
 H -5.455589 -0.239387 -2.514771
 H 4.816973 0.942523 2.210230
 H 3.200315 0.073190 -1.659906
 H 5.504904 -0.020874 -2.612721
 H 7.140095 0.852840 1.266222
 C -3.024271 3.348050 0.318849
 H -3.008846 4.434868 0.458763
 H -3.451904 3.107076 -0.660202
 H -3.620731 2.879042 1.106162
 C -0.645237 3.269418 1.969154
 H -1.221568 2.793215 2.767296
 H 0.397598 2.943404 2.012489
 H -0.712753 4.361131 2.039039
 C 3.080434 -2.338859 2.050031
 H 3.973999 -1.926794 1.570460
 H 2.841361 -1.732392 2.927647
 H 3.263912 -3.380420 2.335051
 C 2.180501 -3.359148 -0.482219
 H 3.077114 -2.919700 -0.933595
 H 2.391874 -4.379455 -0.142644

H 1.376791 -3.373057 -1.225034
 C 0.346415 -3.152021 1.771038
 H 0.076078 -2.552067 2.644927
 H -0.539214 -3.204528 1.132832
 H 0.682043 -4.154114 2.062276
 H -7.217071 -1.312227 -1.137172
 H 7.466484 0.362421 -1.142339
 C -0.455284 3.570575 -0.907325
 H 0.598658 3.283577 -0.899327
 H -0.895803 3.329164 -1.878498
 H -0.558415 4.642921 -0.705005
 Si -0.072969 -0.092125 -0.578134
 Br 0.598766 0.802523 -2.547993
 Br -1.106978 -1.967401 -1.350345

Y₂SiBr₂

E = -9233.68342246
 C 4.512888 2.254427 0.918649
 H 4.301650 2.217455 1.984381
 C 3.554787 1.799768 0.023783
 C 5.728591 2.718423 0.431259
 C 3.791919 1.812065 -1.345636
 S 1.993442 1.213093 0.668245
 C -3.554679 -1.799778 0.023498
 C -3.791855 -1.811762 -1.345853
 S -1.993326 -1.213255 0.668083
 C -4.512831 -2.254564 0.918338
 O 0.976031 2.232448 0.348136
 H -3.026752 -1.450957 -2.030021
 C -5.013336 -2.271283 -1.815163
 C 2.403499 -3.503488 2.473046
 H 3.231886 -3.968731 1.939034
 C 1.779824 -2.364733 1.952221
 C 1.962182 -4.038418 3.675421
 H 6.486048 3.069052 1.131355
 C 6.002955 2.726379 -0.936943
 C -1.280262 5.056345 -1.575858

H -0.669059 5.932376 -1.369885
 C -1.441894 4.088903 -0.591187
 C -1.879051 4.898137 -2.819565
 H -0.935731 4.195983 0.363726
 C -2.205834 2.951446 -0.855335
 C 2.762796 -2.771944 -2.125341
 H 3.251682 -1.836563 -2.383246
 C 2.205754 -2.951552 -0.855511
 C 2.617465 -3.751797 -3.095393
 C 1.441633 -4.088896 -0.591378
 P 2.346479 -1.645402 0.386793
 C 5.065660 -1.190612 -0.279680
 H 4.792849 -1.343718 -1.317384
 C 6.382353 -0.869509 0.022340
 C 4.112701 -1.304832 0.735685
 H 7.110968 -0.783866 -0.781290
 C 6.763667 -0.652241 1.341946
 H -1.749917 5.659116 -3.586974
 C -2.617587 3.751596 -3.095245
 C -1.556878 0.215111 -0.178515
 P -2.346454 1.645247 0.386926
 C 1.557013 -0.215163 -0.178561
 O -2.263020 -0.929508 2.092495
 O -0.975905 -2.232575 0.347912
 C -1.779796 2.364497 1.952390
 C -4.112678 1.304652 0.735843
 H -5.205045 -2.277658 -2.887589
 C -6.003007 -2.725883 -0.937320
 C -4.499378 1.063776 2.057836
 H -3.759784 1.099434 2.851949
 C -5.818416 0.744877 2.356096
 C -0.735435 1.768256 2.642258
 H -0.254205 0.896482 2.221615
 C -0.285744 2.309555 3.839584
 C 5.818510 -0.745147 2.355888
 H 6.103269 -0.560288 3.389677
 C 4.499479 -1.064131 2.057684

H 3.759944 -1.099960 2.851845
 C -2.762796 2.771730 -2.125189
 H -3.251507 1.836253 -2.383091
 C 0.735486 -1.768510 2.642140
 H 3.026809 1.451317 -2.029825
 C 5.013268 2.271802 -1.814886
 H 0.935419 -4.195888 0.363517
 C 1.279884 -5.056323 -1.576043
 C -1.962182 4.038063 3.675701
 H -2.443647 4.925311 4.082288
 C -2.403502 3.503195 2.473299
 C -0.900908 3.442178 4.357115
 H -3.231917 3.968441 1.939331
 H -3.052070 3.603030 -4.081475
 C 7.338150 3.173238 -1.451689
 H 7.253427 3.642027 -2.438372
 H 8.021407 2.318318 -1.556006
 H 7.813400 3.887816 -0.770978
 H -0.552567 3.871500 5.294960
 C -5.728556 -2.718291 0.430936
 C -7.338507 -3.172266 -1.451694
 H 7.795860 -0.399343 1.577226
 C -6.382433 0.869673 0.022613
 H -7.111117 0.784247 -0.780977
 C -5.065732 1.190706 -0.279461
 C -6.763663 0.652225 1.342213
 O 2.263090 0.929199 2.092636
 H 5.204911 2.278398 -2.887329
 H 3.052014 -3.603310 -4.081606
 C 1.878737 -4.898218 -2.819732
 H 1.749510 -5.659182 -3.587141
 H 0.668538 -5.932256 -1.370081
 H -4.793007 1.344014 -1.317158
 H 0.559508 1.846189 4.342984
 H -7.795869 0.399416 1.577541
 H -6.485994 -3.068985 1.131031
 H -6.103112 0.559896 3.389881

C 0.900939 -3.442541 4.356893
H 0.552606 -3.871912 5.294718
C 0.285798 -2.309870 3.839441
H 2.443623 -4.925710 4.081941
H -4.301514 -2.217850 1.984063
H -7.807073 -3.898244 -0.778394
H -7.256375 -3.627263 -2.444979
H -8.026427 -2.319356 -1.540831
H -0.559426 -1.846510 4.342891
H 0.254272 -0.896699 2.221559
Si 0.000059 0.000062 -1.151359
Br 0.328702 1.666462 -2.642022
Br -0.328589 -1.666174 -2.642206

^{Cy}Y₂SiBr₂

E = -9255.43426269
O 1.418671 2.228370 1.728763
O -0.546295 -2.291982 -1.289178
C -1.413837 -0.198477 -0.129305
C 1.863616 0.124397 0.163355
S 2.478784 1.464861 1.056758
O 3.581726 1.022823 1.930523
C 3.226171 2.629751 -0.085522
P -2.565406 0.736129 0.827542
C -3.840505 -0.452103 1.497672
C -3.652901 1.954936 -0.046761
C -1.761758 1.666767 2.200837
S -1.745208 -1.833653 -0.560592
O -2.210009 -2.694717 0.538315
C -3.089468 -1.868594 -1.740585
P 2.735549 -1.394768 0.395466
C 4.560765 -1.257648 0.666844
C 2.125310 -2.295919 1.882219
C 2.438288 -2.478780 -1.053360
C 3.697312 3.812118 0.471213
C 4.315893 4.748670 -0.346112
C -3.360388 -1.238419 2.720305

C -5.263095 0.066423 1.737988
C 3.359632 2.383495 -1.445201
C -3.185624 3.370597 -0.370775
C -4.275997 1.322339 -1.288418
C 5.311021 -0.292452 -0.247145
C 5.270986 -2.613021 0.711467
C -4.391652 4.207090 -0.784017
C -0.825969 0.799714 3.045463
C -2.797458 2.389846 3.068889
C 4.466082 4.525860 -1.716895
C 3.976386 3.330598 -2.250287
C 5.123126 5.542708 -2.601605
C -4.281876 -2.418243 2.985434
C 2.401517 -1.550810 3.188615
C 0.634669 -2.593271 1.753304
C -0.192739 1.589802 4.182552
C 6.726791 -0.093859 0.276952
C -1.241077 2.280805 5.039223
C 3.296801 -2.105178 -2.263459
C 2.502065 -3.988240 -0.797959
C -6.193252 -1.106122 2.043924
C -5.452607 2.152417 -1.784345
C -4.282024 -2.495010 -1.404726
C -2.935846 -1.244983 -2.973985
C -4.010955 -1.199416 -3.846298
C -5.245524 -1.768938 -3.509555
C -5.066590 3.607636 -2.011936
C -2.118742 3.179858 4.181820
C -5.356385 -2.430941 -2.286110
C 1.884482 -2.342416 4.384014
C 2.811525 -2.854883 -3.497652
C -5.710950 -1.952390 3.211164
C -6.413915 -1.656477 -4.441232
C 2.006250 -4.728527 -2.035804
C 6.692268 -2.420788 1.232713
C 2.818145 -4.359345 -3.268761
C 7.468511 -1.418548 0.389249

C 0.120091 -3.391217 2.941625
 C 0.405083 -2.675255 4.252711
 H -3.929473 -1.172151 0.678924
 H -4.440449 2.081007 0.709839
 H -1.133643 2.413306 1.689629
 H 4.613239 -0.823640 1.669552
 H 2.677512 -3.248752 1.894102
 H 1.397116 -2.255946 -1.310561
 H 3.572342 3.992786 1.536571
 H 4.688337 5.675723 0.087922
 H -2.338982 -1.591986 2.562770
 H -3.362227 -0.576619 3.598225
 H -5.278648 0.784648 2.570338
 H -5.657773 0.584565 0.858885
 H 2.966922 1.460309 -1.868835
 H -2.655096 3.826485 0.474289
 H -2.480992 3.342614 -1.205223
 H -3.496645 1.259184 -2.059276
 H -4.601091 0.290597 -1.102059
 H 5.353017 -0.681899 -1.271430
 H 4.795898 0.667208 -0.289112
 H 4.736401 -3.329741 1.346932
 H 5.315172 -3.052116 -0.294164
 H -5.112340 4.259504 0.047451
 H -4.076923 5.238258 -0.988850
 H -0.047680 0.384061 2.398962
 H -1.379967 -0.038411 3.472679
 H -3.423384 3.058107 2.464666
 H -3.471902 1.650694 3.524823
 H 4.072382 3.138356 -3.318183
 H 5.504710 6.390924 -2.024059
 H 5.962874 5.104778 -3.155718
 H 4.417075 5.933444 -3.345940
 H -4.229110 -3.095310 2.120299
 H -3.916574 -2.986160 3.850757
 H 1.914635 -0.566772 3.147950
 H 3.469893 -1.341725 3.310923

H 0.406690 -3.120418 0.823636
 H 0.093789 -1.638859 1.695635
 H 0.418341 0.907469 4.790167
 H 0.494804 2.328271 3.756796
 H 6.667127 0.386777 1.264576
 H 7.272517 0.598889 -0.376419
 H -1.874407 1.530186 5.538916
 H -0.762405 2.864248 5.836171
 H 4.344125 -2.376893 -2.073626
 H 3.266916 -1.021217 -2.432288
 H 3.530729 -4.299961 -0.571507
 H 1.887129 -4.271301 0.061556
 H -6.258300 -1.736972 1.143685
 H -7.206677 -0.727593 2.230315
 H -5.856417 1.708910 -2.704656
 H -6.260326 2.102176 -1.036401
 H -4.358229 -3.019489 -0.454757
 H -1.985245 -0.779611 -3.227467
 H -3.896138 -0.701760 -4.808500
 H -4.367415 3.663415 -2.859729
 H -5.948088 4.196924 -2.295963
 H -1.499344 3.970570 3.733714
 H -2.881116 3.682170 4.791607
 H -6.298315 -2.908012 -2.018629
 H 2.458832 -3.277991 4.471987
 H 2.071910 -1.776028 5.305758
 H 3.436047 -2.591957 -4.361614
 H 1.789782 -2.525517 -3.729973
 H -5.755673 -1.354365 4.134480
 H -6.382099 -2.807692 3.362714
 H -6.134883 -1.926714 -5.466605
 H -7.241343 -2.301996 -4.129779
 H -6.788953 -0.624251 -4.471542
 H 2.042928 -5.811626 -1.860088
 H 0.951295 -4.463146 -2.195154
 H 6.643237 -2.061896 2.271691
 H 7.212786 -3.387042 1.259158

H 2.429090 -4.881286 -4.152697
H 3.856048 -4.703879 -3.135493
H 7.613236 -1.836323 -0.619262
H 8.471725 -1.266166 0.808209
H -0.953480 -3.572766 2.808234
H 0.605832 -4.379709 2.952732
H -0.174571 -1.741463 4.284906
H 0.070762 -3.278983 5.106713
Si 0.247709 0.404091 -0.717796
Br 0.579278 0.024069 -2.944948
Br -0.011759 2.641396 -0.904959

(Y_{Ph})₂SiBr₂

E = -8056.51031938
P -3.028528 -0.010185 0.002788
P 3.099215 -0.062985 0.100923
C -1.447044 0.193794 -0.617198
C -1.162189 1.458297 -1.332183
C -1.641168 2.702240 -0.896032
H -2.194184 2.758405 0.037110
C -1.363701 3.871932 -1.590830
H -1.745136 4.819759 -1.214497
C -0.571647 3.842706 -2.733186
H -0.340011 4.760755 -3.269720
C -0.081298 2.619563 -3.182043
H 0.528871 2.576153 -4.083826
C -0.384709 1.446650 -2.502113
H -0.043182 0.485871 -2.885653
C -3.421893 0.751695 1.628610
C -3.969559 2.035009 1.720249
H -4.279526 2.560912 0.819438
C -4.123558 2.650813 2.956760
H -4.554743 3.648529 3.010468
C -3.726198 1.996665 4.117714
H -3.846061 2.479591 5.085688
C -3.169262 0.724328 4.035366
H -2.849700 0.207204 4.937978

C -3.017103 0.104938 2.800753
 H -2.571486 -0.885804 2.743336
 C -3.524159 -1.753096 0.125912
 C -4.491531 -2.180188 1.035246
 H -4.915575 -1.483312 1.755241
 C -4.910980 -3.505858 1.027857
 H -5.659040 -3.838618 1.744772
 C -4.374536 -4.402627 0.110483
 H -4.700059 -5.441264 0.111528
 C -3.423789 -3.971300 -0.809489
 H -2.999057 -4.668984 -1.528202
 C -3.001945 -2.649203 -0.808633
 H -2.248086 -2.309900 -1.516946
 C -4.290309 0.647741 -1.141443
 C -3.984564 0.817339 -2.492446
 H -2.967998 0.657570 -2.839671
 C -4.979154 1.189357 -3.389200
 H -4.728747 1.329983 -4.438664
 C -6.284486 1.379402 -2.950252
 H -7.060426 1.672380 -3.655064
 C -6.600067 1.183129 -1.609495
 H -7.623235 1.313415 -1.262575
 C -5.608838 0.813633 -0.708933
 H -5.866564 0.646869 0.335689
 C 1.436663 0.286281 0.301206
 C 1.064542 1.611958 0.844216
 C 0.145155 1.704784 1.900954
 H -0.227839 0.784933 2.349500
 C -0.282788 2.935780 2.379715
 H -1.005015 2.971326 3.193921
 C 0.222208 4.114242 1.834892
 H -0.105095 5.080439 2.214862
 C 1.145468 4.043394 0.797036
 H 1.533053 4.956542 0.347910
 C 1.545967 2.810094 0.297397
 H 2.207050 2.767424 -0.568460
 C 4.086947 0.779710 1.386107

C 4.257686 0.197364 2.643328
 H 3.873028 -0.799208 2.841103
 C 4.928660 0.882125 3.648700
 H 5.060786 0.414260 4.622180
 C 5.427966 2.158776 3.412331
 H 5.949498 2.695501 4.202569
 C 5.259587 2.746227 2.164370
 H 5.643844 3.745994 1.972759
 C 4.594947 2.060813 1.154475
 H 4.472983 2.526999 0.180203
 C 3.444761 -1.842035 0.221253
 C 4.218549 -2.522012 -0.720953
 H 4.652250 -1.989842 -1.562929
 C 4.406803 -3.893202 -0.604152
 H 5.001604 -4.419084 -1.348317
 C 3.822595 -4.594723 0.445463
 H 3.962989 -5.671102 0.525333
 C 3.047434 -3.922073 1.382847
 H 2.569476 -4.465887 2.194894
 C 2.857493 -2.551006 1.271188
 H 2.217513 -2.030078 1.978395
 C 3.910884 0.467279 -1.448685
 C 5.303174 0.516103 -1.576223
 H 5.937768 0.255328 -0.729800
 C 5.874696 0.904929 -2.780428
 H 6.957877 0.945152 -2.878810
 C 5.061861 1.248479 -3.859510
 H 5.513004 1.556539 -4.801013
 C 3.678768 1.204565 -3.732251
 H 3.041990 1.478367 -4.571292
 C 3.103352 0.814160 -2.526836
 H 2.024512 0.787938 -2.398069
 Si 0.031756 -0.763699 -0.153831
 Br -0.539361 -2.258681 1.503002
 Br 0.705636 -2.194620 -1.812856

(Y_{CN})₂SiBr₂

E = -7778.42982518

C -3.494045 -0.983850 1.594716

C -4.833919 -1.096068 1.983693

C -5.148196 -1.603382 3.236754

H -6.189562 -1.691494 3.540210

C -4.130758 -2.013908 4.096590

H -4.381014 -2.420136 5.074985

C -2.801910 -1.923554 3.700869

H -2.001072 -2.264555 4.353198

C -2.479391 -1.408274 2.449616

H -1.439637 -1.369758 2.134430

H -5.629296 -0.800438 1.299743

P -3.067601 -0.353031 -0.052000

C 1.427872 -0.600635 0.513507

P 3.067630 -0.353022 0.051936

C -1.427871 -0.600579 -0.513661

C 1.122686 -1.647297 1.399253

C -1.122651 -1.646799 -1.399912

C -3.030246 2.128255 -1.219794

H -2.418717 1.631999 -1.971546

N 0.825185 -2.492430 2.144578

C -4.526745 3.397528 0.755159

H -5.099297 3.896573 1.534274

N -0.825038 -2.491560 -2.145614

C -3.508662 1.401948 -0.125896

C -3.305969 3.485240 -1.322064

H -2.920865 4.050319 -2.168163

C -4.053464 4.120104 -0.335081

H -4.259373 5.186153 -0.410521

C -4.255146 2.039047 0.864521

H -4.598674 1.485624 1.734783

C -4.184969 -1.236390 -1.171213

C -5.085123 -0.561996 -1.996083

H -5.138496 0.524119 -1.976534

C -5.917803 -1.283548 -2.844966

H -6.620955 -0.755864 -3.486079

C -5.849823 -2.671439 -2.874755
 H -6.499975 -3.233042 -3.542882
 C -4.951070 -3.344942 -2.052453
 H -4.892201 -4.430812 -2.078482
 C 3.508633 1.401956 0.125898
 C -4.121165 -2.633114 -1.197966
 H -3.417231 -3.161900 -0.557582
 C 4.255369 2.038980 -0.864376
 H 4.599088 1.485492 -1.734524
 C 4.527003 3.397453 -0.755004
 H 5.099753 3.896445 -1.534008
 C 4.053509 4.120088 0.335103
 H 4.259442 5.186131 0.410546
 C 3.305789 3.485289 1.321959
 H 2.920544 4.050414 2.167964
 C 3.030033 2.128312 1.219683
 H 2.418342 1.632103 1.971332
 H 4.892818 -4.430854 2.077778
 H 3.417987 -3.161929 0.556744
 C 4.184964 -1.236377 1.171177
 C 5.084655 -0.561953 1.996533
 H 5.137714 0.524183 1.977296
 C 5.917257 -1.283505 2.845487
 H 6.620048 -0.755810 3.486987
 C 5.849666 -2.671427 2.874859
 H 6.499772 -3.233028 3.543032
 C 4.951379 -3.344959 2.052076
 C 4.121553 -2.633126 1.197514
 C 3.494173 -0.983750 -1.594792
 C 2.479536 -1.407798 -2.449901
 H 1.439754 -1.369107 -2.134843
 C 2.802104 -1.922934 -3.701198
 H 2.001277 -2.263655 -4.353687
 C 4.130985 -2.013520 -4.096757
 H 4.381276 -2.419646 -5.075186
 C 5.148402 -1.603365 -3.236722
 H 6.189787 -1.691652 -3.540058

C 4.834072 -1.096191 -1.983614
H 5.629422 -0.800838 -1.299514
Si -0.000025 0.397553 0.000058
Br 0.668155 1.769384 -1.668804
Br -0.668328 1.768926 1.669236

(^{Me}Y_{SO₂Ph})₂GeBr₂

E = -9790.75656049

O -1.750344 -1.067851 1.738447
O 1.645727 1.781199 0.455309
C 1.420737 -0.722558 0.449474
C -1.384074 1.015901 0.223718
S -2.376876 0.202490 1.342636
O -2.791234 1.124625 2.418753
C -3.910694 -0.242468 0.530240
P 1.710496 -2.334211 0.980147
S 2.296604 0.593154 1.062204
O 2.483171 0.583816 2.517939
C 3.952129 0.537369 0.378207
P -1.335849 2.735373 0.422792
C -4.903481 -0.792088 1.338046
C -6.113843 -1.159313 0.767218
C -4.111734 -0.054024 -0.829412
C -6.327591 -0.975928 -0.597628
C -5.329906 -0.424206 -1.392447
C 5.037963 0.709354 1.227145
C 4.118757 0.353071 -0.990704
C 5.405280 0.329111 -1.513211
C 6.505464 0.490546 -0.673074
C 6.322687 0.681076 0.692464
H -4.720933 -0.918164 2.403134
H -6.896986 -1.588709 1.389185
H -3.313550 0.371810 -1.433918
H -5.495174 -0.283628 -2.458838
H 4.858082 0.856108 2.289608
H 3.245538 0.228090 -1.629537
H 5.550832 0.185329 -2.582038

H 7.183300 0.810273 1.345992
 C -3.013781 3.417684 0.352853
 H -2.981790 4.506661 0.470959
 H -3.461184 3.159585 -0.612913
 H -3.602586 2.971103 1.159244
 C -0.622937 3.306609 1.981925
 H -1.197820 2.839736 2.786980
 H 0.415922 2.966413 2.016682
 H -0.675269 4.399265 2.050413
 C 3.118217 -2.373777 2.114397
 H 4.013201 -1.984608 1.617944
 H 2.896398 -1.746583 2.982152
 H 3.288372 -3.412216 2.418338
 C 2.157995 -3.427842 -0.391750
 H 3.062181 -3.031333 -0.866184
 H 2.336284 -4.448477 -0.034436
 H 1.341627 -3.427788 -1.121587
 C 0.349171 -3.121614 1.859226
 H 0.084137 -2.492897 2.714410
 H -0.529554 -3.165510 1.209295
 H 0.650185 -4.125995 2.178936
 H -7.278475 -1.264751 -1.041446
 H 7.511575 0.467686 -1.087561
 C -0.436992 3.559667 -0.902750
 H 0.608680 3.242044 -0.886727
 H -0.882125 3.304651 -1.868469
 H -0.507014 4.639430 -0.728474
 Ge -0.066850 -0.104537 -0.560236
 Br 0.642441 0.778219 -2.622776
 Br -1.150976 -2.048899 -1.350432

(^{Me}Y_{SO₂Ph})₂SnBr₂

E = -7716.12818259
 O 1.813679 -1.060279 -1.523758
 O -1.549910 1.807041 -0.221048
 C -1.565657 -0.637728 -0.706367
 C 1.617486 1.005465 -0.063232

S 2.500341 0.228926 -1.290819
 O 2.757961 1.133055 -2.426951
 C 4.125563 -0.182747 -0.663236
 P -1.922954 -2.104509 -1.516867
 S -2.312135 0.835229 -1.059139
 O -2.467468 1.134694 -2.487330
 C -3.973576 0.814321 -0.396108
 P 1.599625 2.729397 -0.107936
 C 5.248735 0.288740 -1.330108
 C 6.510755 -0.038931 -0.842727
 C 4.234970 -0.989030 0.464939
 C 6.635169 -0.834499 0.290444
 C 5.498221 -1.310557 0.941225
 C -5.044858 1.089393 -1.235755
 C -4.155548 0.534159 0.954833
 C -5.445751 0.516578 1.466416
 C -6.533595 0.777636 0.634451
 C -6.334494 1.063937 -0.711524
 H 5.116635 0.899124 -2.220426
 H 7.399182 0.325946 -1.354701
 H 3.339229 -1.356768 0.962144
 H 5.596354 -1.938447 1.824535
 H -4.850277 1.320473 -2.280579
 H -3.292943 0.333961 1.589512
 H -5.603823 0.300816 2.521198
 H -7.184933 1.274380 -1.357200
 C 3.295010 3.363797 -0.066004
 H 3.298177 4.458918 -0.097454
 H 3.790233 3.008064 0.843193
 H 3.821983 2.970126 -0.941642
 C 0.834363 3.461251 -1.572693
 H 1.355841 3.057989 -2.446048
 H -0.213626 3.147035 -1.592061
 H 0.908259 4.554513 -1.544402
 C -3.167117 -1.830795 -2.798553
 H -4.079828 -1.429943 -2.344152
 H -2.784338 -1.096152 -3.512624

H -3.387920 -2.781864 -3.294668
 C -2.600543 -3.353031 -0.395522
 H -3.514729 -2.954068 0.057141
 H -2.815789 -4.289737 -0.922235
 H -1.862445 -3.533801 0.394320
 C -0.491630 -2.858151 -2.309230
 H -0.058165 -2.139664 -3.011450
 H 0.268877 -3.065200 -1.548362
 H -0.785367 -3.783997 -2.816825
 H 7.623215 -1.088722 0.669635
 H -7.542903 0.759734 1.041319
 C 0.736998 3.393854 1.324402
 H -0.317358 3.104023 1.265820
 H 1.172024 2.989077 2.242958
 H 0.822314 4.486072 1.310939
 Sn 0.051811 -0.232370 0.560132
 Br -0.758061 0.508879 2.865263
 Br 0.816606 -2.568057 1.302899

(^{Me}Y_{SO₂Ph})₂PbBr₂

E = -7716.12758009
 O -1.904206 -0.921672 1.689194
 O 1.644357 1.882479 0.308875
 C 1.641880 -0.592043 0.782342
 C -1.688938 1.068568 0.091590
 S -2.582044 0.344991 1.348712
 O -2.860715 1.335314 2.406062
 C -4.191178 -0.116515 0.717761
 P 1.947259 -2.045956 1.635136
 S 2.398127 0.883481 1.113375
 O 2.583310 1.152143 2.544764
 C 4.046903 0.845196 0.420374
 P -1.586223 2.791381 0.097707
 C -5.324151 0.504409 1.227306
 C -6.572718 0.147272 0.726557
 C -4.279224 -1.102322 -0.259863
 C -6.675041 -0.823986 -0.262810

C -5.529720 -1.449699 -0.751674
 C 5.137570 1.064906 1.251482
 C 4.201323 0.607306 -0.942248
 C 5.483019 0.575297 -1.473970
 C 6.589794 0.780186 -0.651232
 C 6.418156 1.025350 0.706524
 H -5.213147 1.245884 2.014913
 H -7.468516 0.626177 1.117354
 H -3.378652 -1.591751 -0.626587
 H -5.610944 -2.217158 -1.518811
 H 4.965402 1.267063 2.306157
 H 3.326144 0.449444 -1.571920
 H 5.619413 0.391400 -2.537780
 H 7.283090 1.193101 1.345436
 C -3.248482 3.503053 0.003917
 H -3.195728 4.597474 -0.002075
 H -3.743671 3.141456 -0.902809
 H -3.808064 3.167106 0.882976
 C -0.807472 3.536958 1.548669
 H -1.358430 3.191257 2.428265
 H 0.226203 3.179647 1.592086
 H -0.830751 4.630713 1.479366
 C 3.229513 -1.791193 2.882854
 H 4.143872 -1.429886 2.399634
 H 2.889273 -1.032872 3.593137
 H 3.427869 -2.742884 3.387456
 C 2.541355 -3.365739 0.549363
 H 3.465294 -3.030987 0.066072
 H 2.720469 -4.289264 1.111750
 H 1.780766 -3.544927 -0.219095
 C 0.496380 -2.702779 2.479231
 H 0.104938 -1.937611 3.156610
 H -0.283441 -2.913166 1.738877
 H 0.755197 -3.618034 3.023856
 H -7.652695 -1.100806 -0.652886
 H 7.592047 0.750906 -1.074547
 C -0.669434 3.364908 -1.340388

H 0.371736 3.037393 -1.249079
H -1.101629 2.945328 -2.253635
H -0.709170 4.459446 -1.367370
Pb -0.062822 -0.235687 -0.511817
Br 0.813116 0.453517 -2.920152
Br -0.874187 -2.693401 -1.163000

3.14.3.5 Koordinaten der ylidsubstituierten Tetrel iodide

$(^{Me}Y_{SO_2Ph})_2SiI_2$

E = -2874.75609463
O -1.692112 -0.805940 1.996823
O 1.699259 1.854790 0.322831
C 1.352670 -0.610533 0.674041
C -1.254327 1.119080 0.298040
S -2.264859 0.456947 1.509187
O -2.600673 1.480382 2.518037
C -3.842748 0.039719 0.769916
P 1.658676 -2.141210 1.415042
S 2.269625 0.748433 1.130197
O 2.389972 0.965101 2.577097
C 3.948741 0.519353 0.548442
P -1.188320 2.856649 0.350924
C -4.825043 -0.434843 1.635630
C -6.071909 -0.767740 1.125618
C -4.088898 0.186929 -0.587256
C -6.331867 -0.623537 -0.235971
C -5.343668 -0.146676 -1.089076
C 4.998517 0.897116 1.376795
C 4.172815 0.006210 -0.724490
C 5.480839 -0.141183 -1.169248
C 6.544207 0.226412 -0.347587
C 6.303988 0.745037 0.920924
H -4.605998 -0.533296 2.696724
H -6.847109 -1.140241 1.792505
H -3.293607 0.544266 -1.238729
H -5.543877 -0.039480 -2.153299

H 4.775245 1.291302 2.365438
 H 3.327096 -0.272065 -1.350974
 H 5.670577 -0.541952 -2.163007
 H 7.136667 1.032383 1.559990
 C -2.860664 3.553937 0.266176
 H -2.805531 4.647490 0.312331
 H -3.327934 3.246881 -0.675470
 H -3.446503 3.175814 1.108188
 C -0.436620 3.539917 1.846309
 H -1.021667 3.177551 2.695932
 H 0.587766 3.164720 1.912871
 H -0.444727 4.635212 1.806553
 C 3.034173 -2.013969 2.584504
 H 3.947121 -1.700589 2.068941
 H 2.789268 -1.275205 3.352379
 H 3.187574 -3.001937 3.031901
 C 2.189328 -3.385164 0.210882
 H 3.105137 -3.021561 -0.268465
 H 2.379593 -4.345393 0.703549
 H 1.413044 -3.507448 -0.550148
 C 0.310102 -2.848566 2.378420
 H 0.028702 -2.123998 3.148159
 H -0.568699 -3.006936 1.749310
 H 0.647809 -3.792818 2.821263
 H -7.311123 -0.885753 -0.631946
 H 7.567072 0.106800 -0.699595
 C -0.336469 3.599429 -1.052064
 H 0.712007 3.294475 -1.058061
 H -0.816839 3.294814 -1.985887
 H -0.412093 4.686521 -0.932782
 Si -0.047596 -0.073891 -0.371083
 I 0.728899 0.594970 -2.691254
 I -1.282197 -2.195215 -1.060454

Y₂Sil₂

E = -4105.90458539
 C 4.561638 2.034242 1.237955

H 4.403770 1.751013 2.275259
 C 3.551431 1.807534 0.314895
 C 5.754817 2.602896 0.807108
 C 3.712271 2.150245 -1.022545
 S 2.007940 1.112470 0.887072
 C -3.551589 -1.807502 0.314956
 C -3.712412 -2.150637 -1.022349
 S -2.007967 -1.112594 0.887009
 C -4.561963 -2.033621 1.238014
 O 0.974434 2.122008 0.572402
 H -2.905311 -1.973855 -1.728874
 C -4.911640 -2.707390 -1.436506
 C 2.415553 -3.508873 2.713959
 H 3.201292 -4.016600 2.154947
 C 1.815967 -2.355191 2.197250
 C 1.996811 -4.014210 3.937509
 H 6.552646 2.779521 1.527474
 C 5.953436 2.941066 -0.531439
 C -0.885167 5.207270 -1.000725
 H -0.073966 5.893592 -0.767803
 C -1.089736 4.096287 -0.193695
 C -1.696190 5.429753 -2.106756
 H -0.427443 3.908684 0.645276
 C -2.116092 3.196060 -0.494898
 C 2.941691 -3.432313 -1.596003
 H 3.752889 -2.754547 -1.838757
 C 2.116555 -3.196195 -0.494737
 C 2.729064 -4.544429 -2.398836
 C 1.089921 -4.096228 -0.193897
 P 2.318709 -1.736404 0.566677
 C 4.752643 -0.919031 -0.471132
 H 4.182194 -0.749000 -1.382511
 C 6.105541 -0.615129 -0.437276
 C 4.100651 -1.378465 0.679130
 H 6.599968 -0.255824 -1.337402
 C 6.812695 -0.732042 0.755496
 H -1.527787 6.297467 -2.741900

C -2.727986 4.544051 -2.399381
 C -1.561227 0.283223 -0.017201
 P -2.318531 1.736323 0.566557
 C 1.561371 -0.283382 -0.017252
 O -2.271168 -0.771147 2.297161
 O -0.974532 -2.122173 0.572183
 C -1.815989 2.355136 2.197174
 C -4.100540 1.378611 0.678847
 H -5.041297 -2.973088 -2.485118
 C -5.953876 -2.940589 -0.531208
 C -4.805478 1.458772 1.879265
 H -4.295393 1.748865 2.793504
 C -6.158444 1.136474 1.912486
 C -0.789553 1.736457 2.896471
 H -0.304445 0.872436 2.466291
 C -0.357272 2.253339 4.110370
 C 6.158397 -1.135950 1.912925
 H 6.700435 -1.195059 2.854605
 C 4.805486 -1.458465 1.879613
 H 4.295356 -1.748597 2.793818
 C -2.940764 3.431957 -1.596556
 H -3.751702 2.753998 -1.839650
 C 0.789330 -1.736564 2.896292
 H 2.905288 1.972924 -1.729077
 C 4.911350 2.707189 -1.436779
 H 0.427286 -3.908423 0.644768
 C 0.885535 -5.207256 -1.000915
 C -1.996998 4.014336 3.937245
 H -2.466081 4.909169 4.341531
 C -2.415546 3.508936 2.713660
 C -0.966931 3.386065 4.635348
 H -3.201101 4.016704 2.154428
 H -3.371739 4.716362 -3.259290
 C 7.256098 3.516330 -0.999641
 H 7.099742 4.343512 -1.701852
 H 7.853548 2.758144 -1.524965
 H 7.856227 3.886554 -0.161937

H -0.631946 3.793930 5.587466
 C -5.755244 -2.602068 0.807279
 C -7.256962 -3.515014 -0.999255
 H 7.871300 -0.481081 0.787471
 C -6.105454 0.615525 -0.437680
 H -6.599857 0.256266 -1.337841
 C -4.752507 0.919218 -0.471446
 C -6.812702 0.732614 0.755019
 O 2.271230 0.771009 2.297204
 H 5.041054 2.972480 -2.485492
 H 3.373173 -4.716937 -3.258440
 C 1.697001 -5.429947 -2.106579
 H 1.528734 -6.297678 -2.741734
 H 0.074119 -5.893425 -0.768300
 H -4.182013 0.749054 -1.382772
 H 0.470728 1.771609 4.625423
 H -7.871358 0.481849 0.786910
 H -6.553145 -2.778280 1.527671
 H -6.700551 1.195714 2.854117
 C 0.966522 -3.385999 4.635337
 H 0.631368 -3.793826 5.587411
 C 0.356847 -2.253382 4.110139
 H 2.465920 -4.908948 4.341974
 H -4.404053 -1.750175 2.275253
 H -7.853547 -3.892611 -0.162292
 H -7.101479 -4.336513 -1.708242
 H -7.857759 -2.753968 -1.516625
 H -0.471331 -1.771722 4.624972
 H 0.304208 -0.872651 2.465911
 Si 0.000027 -0.000188 -0.960710
 I 0.259169 1.845109 -2.684333
 I -0.259215 -1.845507 -2.684259

^{cy}**Y₂SiI₂**

E = -4127.66079489
 O -0.095714 -0.680203 -2.003131
 O 0.263417 0.822990 1.466588

C 1.819652 -0.291461 0.105089
 C -1.526673 -0.573456 -0.115639
 S -1.566842 -1.108612 -1.702484
 O -1.891706 -2.500752 -2.029477
 C -2.550965 -0.076193 -2.753806
 P 3.141717 -1.088432 -0.662605
 C 4.278191 -1.620193 0.675380
 C 4.104837 -0.017534 -1.802788
 C 2.489234 -2.451361 -1.688975
 S 1.766562 0.433202 1.624839
 O 2.167379 -0.374914 2.779248
 C 2.543991 2.007680 1.844014
 P -2.535715 -1.197414 1.172686
 C -4.012490 -1.975744 0.407208
 C -1.697190 -2.600603 2.023167
 C -2.942302 0.055257 2.459491
 C -2.968051 -0.578274 -3.980150
 C -3.725708 0.237854 -4.809929
 C 3.692901 -2.794882 1.457542
 C 5.737695 -1.871243 0.306003
 C -2.889100 1.208290 -2.333135
 C 3.374784 0.225089 -3.125149
 C 4.427995 1.293219 -1.084345
 C -4.895469 -1.092027 -0.475031
 C -4.886719 -2.787729 1.365915
 C 4.125150 1.225179 -3.997260
 C 1.439309 -3.333567 -1.022103
 C 3.589719 -3.289883 -2.339371
 C -4.072065 1.536970 -4.426876
 C -3.647827 2.002541 -3.177687
 C -4.881831 2.418479 -5.327597
 C 4.490163 -3.026076 2.730269
 C -1.605003 -3.877359 1.189319
 C -0.307666 -2.183212 2.491974
 C 0.828245 -4.268546 -2.055569
 C -5.791462 -1.981023 -1.325210
 C 1.898035 -5.116828 -2.728980

C -4.256146 0.774874 2.133179
 C -3.000377 -0.536873 3.872535
 C 6.544640 -2.138230 1.574581
 C 5.190012 2.258418 -1.980060
 C 3.867082 2.043249 2.276030
 C 1.827536 3.175233 1.594469
 C 2.483140 4.391149 1.731444
 C 3.825749 4.461644 2.110816
 C 4.415490 2.524809 -3.261623
 C 2.981441 -4.249450 -3.356048
 C 4.502681 3.269999 2.393056
 C -0.922729 -4.986304 1.986820
 C -4.601732 1.819665 3.185279
 C 5.958652 -3.270044 2.408892
 C 4.511699 5.788097 2.232266
 C -3.334911 0.535550 4.901632
 C -5.830642 -3.670086 0.552307
 C -4.651207 1.222967 4.580499
 C -6.660961 -2.865274 -0.440220
 C 0.340868 -3.273528 3.328928
 C 0.433650 -4.571126 2.540496
 H 4.262076 -0.746485 1.345393
 H 5.041043 -0.558949 -2.011379
 H 1.958591 -1.892486 -2.474439
 H -3.519128 -2.688930 -0.271529
 H -2.320895 -2.808734 2.904743
 H -2.123354 0.790421 2.388081
 H -2.712040 -1.595631 -4.265950
 H -4.061089 -0.143422 -5.773199
 H 2.639542 -2.599046 1.683982
 H 3.741183 -3.697058 0.829991
 H 5.811338 -2.732320 -0.373774
 H 6.162487 -1.009230 -0.222251
 H -2.601168 1.590818 -1.351091
 H 3.261053 -0.717261 -3.674758
 H 2.362721 0.598360 -2.914727
 H 3.481033 1.762013 -0.781952

H 4.992610 1.097041 -0.162175
 H -5.519306 -0.443228 0.148002
 H -4.299297 -0.427171 -1.101151
 H -4.286201 -3.409110 2.040978
 H -5.466174 -2.102998 2.001411
 H 5.075680 0.775316 -4.325156
 H 3.542279 1.418826 -4.906333
 H 0.669662 -2.707456 -0.559378
 H 1.897293 -3.928969 -0.223838
 H 4.342891 -2.652363 -2.821835
 H 4.112287 -3.866238 -1.560940
 H -3.913200 3.004049 -2.841769
 H -5.234726 1.878674 -6.212134
 H -5.753456 2.826188 -4.801649
 H -4.286577 3.275374 -5.668693
 H 4.380440 -2.141881 3.375361
 H 4.069195 -3.873628 3.286285
 H -1.054950 -3.664460 0.263037
 H -2.597019 -4.224771 0.879274
 H -0.333009 -1.237319 3.041681
 H 0.310228 -1.997224 1.602317
 H 0.069574 -4.902355 -1.578884
 H 0.291518 -3.667772 -2.801914
 H -5.160244 -2.599473 -1.981862
 H -6.416206 -1.362887 -1.981971
 H 2.358462 -5.782338 -1.982009
 H 1.449423 -5.768516 -3.489255
 H -5.065990 0.032381 2.100882
 H -4.182018 1.256740 1.150555
 H -3.773577 -1.322202 3.908079
 H -2.052032 -1.011207 4.142966
 H 6.559696 -1.217330 2.177446
 H 7.588162 -2.353022 1.312018
 H 5.371213 3.192468 -1.433436
 H 6.177972 1.837905 -2.224978
 H 4.387794 1.123835 2.537113
 H 0.768860 3.152157 1.331806

H 1.918688 5.303606 1.544910
 H 3.465616 3.018093 -3.010717
 H 4.970123 3.213882 -3.910920
 H 2.545645 -3.661706 -4.177717
 H 3.769086 -4.871883 -3.799422
 H 5.538894 3.307631 2.725405
 H -1.579612 -5.268414 2.824071
 H -0.823314 -5.881639 1.359219
 H -5.559445 2.285532 2.921018
 H -3.849920 2.617409 3.138121
 H 6.051951 -4.214317 1.850617
 H 6.540133 -3.397459 3.330595
 H 3.974836 6.445417 2.927176
 H 5.540837 5.680803 2.589667
 H 4.539772 6.303688 1.263869
 H -3.358001 0.082400 5.901468
 H -2.528095 1.282321 4.908496
 H -5.226929 -4.410860 0.005457
 H -6.484620 -4.237974 1.226368
 H -4.865271 2.002773 5.322344
 H -5.469960 0.488087 4.652790
 H -7.362093 -2.225849 0.117279
 H -7.275394 -3.540109 -1.049803
 H 1.332380 -2.934896 3.655246
 H -0.251993 -3.435169 4.242325
 H 1.132862 -4.426591 1.705356
 H 0.851842 -5.375313 3.159828
 Si 0.111426 0.251030 -0.325838
 I -2.205801 3.689888 0.973734
 I 0.399855 2.402295 -1.610703

(Y_{Ph})₂SiI₂

E = -2928.73292311
 P -3.056728 0.184678 -0.043686
 P 3.113593 0.173033 0.156352
 C -1.444772 0.344977 -0.606165
 C -1.141599 1.581351 -1.366132

C -1.636313 2.838448 -0.989941
 H -2.202183 2.930933 -0.068062
 C -1.358024 3.980175 -1.729884
 H -1.752873 4.939526 -1.399432
 C -0.549771 3.909279 -2.858545
 H -0.318394 4.805285 -3.431192
 C -0.043267 2.672237 -3.247484
 H 0.578522 2.595038 -4.138798
 C -0.346554 1.526933 -2.522410
 H 0.006141 0.554668 -2.863661
 C -3.509387 1.069006 1.502119
 C -4.091884 2.339747 1.471902
 H -4.384521 2.782017 0.521756
 C -4.298173 3.050118 2.648645
 H -4.753592 4.037577 2.607316
 C -3.925705 2.501821 3.871152
 H -4.089961 3.057824 4.792251
 C -3.335954 1.242525 3.910083
 H -3.033709 0.807253 4.860577
 C -3.124830 0.532011 2.734609
 H -2.650018 -0.445642 2.773648
 C -3.553902 -1.544370 0.175022
 C -4.474104 -1.944537 1.143174
 H -4.882193 -1.224083 1.848324
 C -4.859421 -3.278125 1.217882
 H -5.565688 -3.592542 1.983709
 C -4.341446 -4.207120 0.321700
 H -4.638461 -5.251933 0.390225
 C -3.448041 -3.800381 -0.664431
 H -3.039489 -4.521762 -1.368899
 C -3.058114 -2.471409 -0.743747
 H -2.343101 -2.151613 -1.499245
 C -4.267452 0.759572 -1.283027
 C -3.905653 0.871700 -2.625719
 H -2.871332 0.722763 -2.921343
 C -4.868876 1.173295 -3.581585
 H -4.575816 1.269103 -4.625005

C -6.196640 1.349524 -3.209129
H -6.947442 1.586852 -3.960525
C -6.566717 1.210018 -1.875088
H -7.607232 1.328948 -1.579583
C -5.607792 0.910783 -0.916069
H -5.906920 0.785674 0.123500
C 1.428452 0.465180 0.308466
C 1.031545 1.805164 0.806532
C 0.104010 1.926080 1.852909
H -0.267861 1.019917 2.329459
C -0.337048 3.169668 2.285627
H -1.069305 3.228674 3.089416
C 0.166073 4.332955 1.707810
H -0.170999 5.308569 2.053502
C 1.097964 4.234577 0.680385
H 1.483449 5.134688 0.204117
C 1.507730 2.987996 0.222946
H 2.172177 2.922676 -0.638433
C 4.024489 1.032622 1.486147
C 4.182071 0.430546 2.735959
H 3.836372 -0.585836 2.901829
C 4.790308 1.121804 3.776225
H 4.911959 0.638758 4.743581
C 5.240409 2.423564 3.582120
H 5.712971 2.964940 4.399495
C 5.085805 3.030106 2.341523
H 5.432089 4.049238 2.182446
C 4.482979 2.339289 1.297217
H 4.371390 2.821302 0.329770
C 3.536313 -1.587900 0.245104
C 4.354294 -2.205647 -0.703148
H 4.781758 -1.631234 -1.520083
C 4.591811 -3.571777 -0.627319
H 5.218619 -4.049966 -1.377212
C 4.012924 -4.329876 0.385440
H 4.188133 -5.403108 0.429423
C 3.201222 -3.717541 1.333203

H 2.728388 -4.303907 2.118309
 C 2.965887 -2.351086 1.264700
 H 2.300305 -1.879138 1.981357
 C 3.936350 0.757771 -1.365840
 C 5.323829 0.918741 -1.440900
 H 5.942752 0.734684 -0.563685
 C 5.910378 1.316534 -2.635120
 H 6.989576 1.444997 -2.692505
 C 5.117874 1.552829 -3.756842
 H 5.580504 1.866709 -4.690765
 C 3.739296 1.392052 -3.683249
 H 3.118771 1.577583 -4.557685
 C 3.148445 0.994884 -2.487857
 H 2.071724 0.875500 -2.402340
 Si 0.024943 -0.602734 -0.099206
 I -0.577565 -2.215878 1.836114
 I 0.734343 -2.297235 -1.892727

(Y_{CN})₂SiI₂

E = -2650.65253710
 C -3.543003 -1.221957 1.513041
 C -4.890859 -1.386989 1.853058
 C -5.228778 -1.928815 3.085173
 H -6.275961 -2.057710 3.351666
 C -4.226822 -2.320910 3.971629
 H -4.495560 -2.753937 4.933473
 C -2.889364 -2.177577 3.623683
 H -2.099425 -2.503139 4.296770
 C -2.543194 -1.627022 2.393894
 H -1.495992 -1.543753 2.115149
 H -5.672432 -1.104178 1.148145
 P -3.085086 -0.539304 -0.102210
 C 1.420135 -0.728197 0.514120
 P 3.084948 -0.539027 0.102822
 C -1.420235 -0.728719 -0.513259
 C 1.070029 -1.765250 1.395259
 C -1.070132 -1.766311 -1.393772

C -3.094411 1.962879 -1.218859
 H -2.459033 1.499054 -1.971151
 N 0.737994 -2.598858 2.138938
 C -4.662008 3.148256 0.752552
 H -5.263324 3.614833 1.529996
 N -0.738165 -2.600357 -2.136996
 C -3.577854 1.199955 -0.152774
 C -3.394347 3.316474 -1.292175
 H -3.000833 3.910721 -2.114080
 C -4.175599 3.909579 -0.305583
 H -4.399447 4.973405 -0.356332
 C -4.364052 1.793704 0.834048
 H -4.714017 1.211236 1.682622
 C -4.130637 -1.434894 -1.279903
 C -4.992420 -0.769238 -2.151471
 H -5.060939 0.315962 -2.132602
 C -5.768938 -1.498768 -3.045442
 H -6.442561 -0.977971 -3.722808
 C -5.683093 -2.885704 -3.073426
 H -6.289482 -3.453471 -3.776556
 C -4.822654 -3.550414 -2.204396
 H -4.749982 -4.635479 -2.228468
 C 3.577666 1.200287 0.152263
 C -4.048934 -2.830639 -1.305040
 H -3.375523 -3.352562 -0.627279
 C 4.363643 1.793602 -0.835000
 H 4.713448 1.210742 -1.683372
 C 4.661565 3.148196 -0.754203
 H 5.262711 3.614426 -1.531987
 C 4.175338 3.910017 0.303668
 H 4.399182 4.973869 0.353856
 C 3.394278 3.317368 1.290674
 H 3.000873 3.911986 2.112363
 C 3.094375 1.963722 1.218053
 H 2.459152 1.500231 1.970677
 H 4.749826 -4.633886 2.231571
 H 3.375325 -3.351887 0.629666

C 4.130565 -1.433860 1.281059
 C 4.992445 -0.767703 2.152144
 H 5.061017 0.317481 2.132598
 C 5.769011 -1.496718 3.046498
 H 6.442719 -0.975534 3.723483
 C 5.683098 -2.883632 3.075357
 H 6.289517 -3.450992 3.778788
 C 4.822551 -3.548839 2.206812
 C 4.048801 -2.829585 1.307070
 C 3.542993 -1.222868 -1.511900
 C 2.543319 -1.629573 -2.392141
 H 1.496089 -1.546582 -2.113409
 C 2.889664 -2.181334 -3.621349
 H 2.099818 -2.508136 -4.293945
 C 4.227158 -2.324225 -3.969318
 H 4.496047 -2.758186 -4.930700
 C 5.228993 -1.930474 -3.083452
 H 6.276218 -2.059008 -3.349955
 C 4.890908 -1.387461 -1.851911
 H 5.672402 -1.103400 -1.147415
 Si -0.000011 0.280196 -0.000202
 I 0.712848 1.809408 -1.876634
 I -0.712689 1.811808 1.874392

(^{Me}Y_{SO₂Ph})₂GeI₂

E = -4662.98243291
 O -1.736517 -0.669757 2.027690
 O 1.722146 1.881022 0.251970
 C 1.412040 -0.562312 0.771471
 C -1.318485 1.176119 0.248135
 S -2.313365 0.574268 1.494628
 O -2.632650 1.644704 2.459438
 C -3.901444 0.128780 0.796014
 P 1.695026 -2.037008 1.616098
 S 2.307568 0.834739 1.126362
 O 2.431237 1.145303 2.556225
 C 3.987926 0.583022 0.557102

P -1.214799 2.907268 0.204964
 C -4.898603 -0.232758 1.698808
 C -6.147574 -0.596861 1.216094
 C -4.136013 0.136119 -0.571280
 C -6.395167 -0.595135 -0.155408
 C -5.393065 -0.227845 -1.045667
 C 5.036976 1.006937 1.363704
 C 4.213782 -0.001419 -0.684577
 C 5.522090 -0.172301 -1.119509
 C 6.584734 0.241086 -0.318785
 C 6.343075 0.829748 0.918358
 H -4.689343 -0.217058 2.766269
 H -6.934467 -0.881270 1.912042
 H -3.333499 0.417540 -1.250303
 H -5.584760 -0.228649 -2.116824
 H 4.812661 1.456622 2.328097
 H 3.369581 -0.317285 -1.295106
 H 5.712798 -0.628369 -2.088947
 H 7.175005 1.152622 1.541257
 C -2.876546 3.624572 0.094020
 H -2.808097 4.718095 0.072057
 H -3.360932 3.263788 -0.819486
 H -3.454064 3.305370 0.966338
 C -0.442431 3.665704 1.652502
 H -1.023854 3.355621 2.525401
 H 0.579005 3.284496 1.731550
 H -0.440399 4.757341 1.553984
 C 3.061598 -1.835689 2.784371
 H 3.977981 -1.560554 2.252653
 H 2.813172 -1.041936 3.494196
 H 3.210185 -2.788910 3.303108
 C 2.212293 -3.367154 0.501801
 H 3.130943 -3.046875 -0.002408
 H 2.391362 -4.294633 1.057473
 H 1.432658 -3.531588 -0.248924
 C 0.318977 -2.656650 2.600222
 H 0.037256 -1.878639 3.315902

H -0.551511 -2.836260 1.963842
H 0.624452 -3.577629 3.110256
H -7.376317 -0.880929 -0.529789
H 7.607974 0.102050 -0.662479
C -0.350238 3.528180 -1.247243
H 0.692754 3.204230 -1.223196
H -0.832524 3.156782 -2.155767
H -0.404019 4.622502 -1.216925
Ge -0.051809 -0.108251 -0.365269
I 0.777276 0.419467 -2.773469
I -1.296220 -2.330098 -0.935415

(^{Me}Y_{SO₂Ph})₂SnI₂

E = -2588.35036628
O -1.839921 -0.417491 1.877421
O 1.633075 1.861436 -0.116292
C 1.549778 -0.343457 1.041480
C -1.534060 1.230981 -0.026880
S -2.460838 0.810361 1.331904
O -2.674752 1.958495 2.232544
C -4.106123 0.355132 0.792803
P 1.854793 -1.525813 2.246445
S 2.331178 1.154875 0.998320
O 2.429969 1.853456 2.285763
C 4.019336 0.911682 0.460215
P -1.441688 2.915895 -0.386947
C -5.186535 0.727974 1.584189
C -6.467361 0.343221 1.202708
C -4.280674 -0.392696 -0.365885
C -6.655692 -0.406908 0.046481
C -5.563963 -0.773201 -0.736822
C 5.054840 1.454975 1.209714
C 4.259728 0.194021 -0.707106
C 5.571285 0.008532 -1.121941
C 6.622888 0.536823 -0.374850
C 6.366189 1.258024 0.786122
H -5.008305 1.320310 2.478407

H -7.321842 0.631996 1.811727
 H -3.421090 -0.661313 -0.975551
 H -5.710910 -1.357421 -1.642916
 H 4.816646 2.019260 2.108339
 H 3.426017 -0.210088 -1.279029
 H 5.773573 -0.548929 -2.034247
 H 7.189071 1.674062 1.364138
 C -3.111577 3.592205 -0.567757
 H -3.070202 4.665345 -0.784613
 H -3.628360 3.062027 -1.374312
 H -3.645480 3.427249 0.374112
 C -0.630300 3.927049 0.871930
 H -1.171279 3.768827 1.809903
 H 0.398956 3.571820 0.978977
 H -0.644671 4.985593 0.587844
 C 3.096762 -0.928134 3.415643
 H 4.029729 -0.709804 2.884711
 H 2.733971 -0.005393 3.877350
 H 3.274867 -1.700100 4.171878
 C 2.507792 -3.060274 1.544428
 H 3.439532 -2.830551 1.016216
 H 2.689531 -3.808337 2.324474
 H 1.779211 -3.450548 0.824682
 C 0.399242 -1.976154 3.206892
 H -0.009384 -1.072001 3.668057
 H -0.369568 -2.374332 2.536163
 H 0.664592 -2.723095 3.963752
 H -7.659629 -0.705104 -0.249713
 H 7.649482 0.385494 -0.702986
 C -0.579265 3.202675 -1.939275
 H 0.462471 2.884537 -1.831349
 H -1.054405 2.630977 -2.742125
 H -0.615364 4.273989 -2.166286
 Sn -0.051462 -0.219646 -0.308818
 I 0.869366 -0.159461 -2.973440
 I -1.075531 -2.853354 -0.477518



E = -2588.36364442

O -1.954681 -0.203187 1.962829

O 1.702953 1.950929 -0.288830

C 1.606364 -0.140227 1.113116

C -1.631399 1.234072 -0.127947

S -2.549134 0.963064 1.277951

O -2.740713 2.220308 2.025642

C -4.199707 0.469191 0.792489

P 1.889413 -1.160612 2.459775

S 2.379465 1.345858 0.889820

O 2.480464 2.163942 2.105960

C 4.069170 1.036127 0.388573

P -1.489436 2.873378 -0.649200

C -5.287404 1.193669 1.262509

C -6.570538 0.803640 0.889651

C -4.367200 -0.643433 -0.025155

C -6.751832 -0.300919 0.065299

C -5.650831 -1.024577 -0.389329

C 5.105937 1.641292 1.087252

C 4.310216 0.207088 -0.702431

C 5.622138 -0.027621 -1.090219

C 6.674628 0.562519 -0.392104

C 6.417855 1.394460 0.692055

H -5.112712 2.046838 1.913702

H -7.431175 1.364261 1.249497

H -3.502099 -1.203531 -0.373983

H -5.792521 -1.892260 -1.030474

H 4.868297 2.292678 1.925054

H 3.476937 -0.245584 -1.237366

H 5.824290 -0.672493 -1.943063

H 7.241149 1.858638 1.231607

C -3.141444 3.566552 -0.916546

H -3.069081 4.608756 -1.246951

H -3.665689 2.965774 -1.666560

H -3.686238 3.518269 0.032077

C -0.661577 4.001990 0.495145

H -1.206391 3.957918 1.442947
 H 0.363538 3.648757 0.642335
 H -0.659268 5.022449 0.094775
 C 3.107197 -0.423474 3.574034
 H 4.044035 -0.250114 3.033560
 H 2.727852 0.538353 3.929477
 H 3.282871 -1.110136 4.409176
 C 2.558168 -2.771116 1.973625
 H 3.499029 -2.607669 1.436969
 H 2.727488 -3.410481 2.847563
 H 1.845080 -3.257541 1.298640
 C 0.413017 -1.494949 3.437931
 H -0.003604 -0.543095 3.781248
 H -0.345958 -1.970807 2.807739
 H 0.660090 -2.145994 4.284277
 H -7.756340 -0.602918 -0.225015
 H 7.701506 0.372440 -0.698472
 C -0.612388 2.966879 -2.217280
 H 0.425794 2.655779 -2.063176
 H -1.087571 2.309439 -2.951609
 H -0.634150 4.004231 -2.569157
 Pb -0.063075 -0.273944 -0.289369
 I 0.924542 -0.477834 -2.984694
 I -1.015379 -2.993596 -0.116783

3.14.3.6 Koordinaten der Tetrylene

$(^{\text{Me}}\text{Y}_{\text{SO}_2\text{Ph}})_2\text{Si}$

E = -2851.79645783
 O 1.411324 -1.538284 0.569019
 O -1.559285 1.752572 0.478919
 C -1.288188 -0.694089 0.027353
 C 1.367957 0.814817 0.143744
 S 2.244247 -0.520230 -0.235056
 O 2.530352 -0.858900 -1.642350
 C 3.832048 -0.569261 0.583397
 P -1.423586 -1.993339 -1.065787

S -2.259792 0.637880 -0.221996
 O -2.659824 0.861732 -1.632473
 C -3.806610 0.448520 0.662720
 P 1.400744 2.217052 -0.818729
 C 4.971605 -0.923290 -0.125094
 C 6.195909 -0.936225 0.538023
 C 3.879751 -0.240588 1.934634
 C 6.261119 -0.608971 1.887561
 C 5.104340 -0.264905 2.586348
 C -5.013515 0.646468 0.006724
 C -3.758693 0.112077 2.012600
 C -4.948078 -0.035456 2.712025
 C -6.168914 0.150142 2.063907
 C -6.201406 0.489574 0.716173
 H 4.881805 -1.183086 -1.177120
 H 7.100673 -1.207478 -0.002551
 H 2.961378 0.035098 2.454990
 H 5.159854 -0.013579 3.643605
 H -5.002435 0.920685 -1.045658
 H -2.792515 -0.040285 2.495135
 H -4.925774 -0.298575 3.767870
 H -7.155507 0.637439 0.213470
 C 3.095508 2.563061 -1.368937
 H 3.125916 3.447043 -2.015579
 H 3.735184 2.718633 -0.493700
 H 3.458514 1.690642 -1.924685
 C 0.427841 2.120473 -2.340414
 H 0.825689 1.281147 -2.922360
 H -0.618161 1.913936 -2.087671
 H 0.500070 3.047455 -2.921296
 C -3.150431 -2.346700 -1.496182
 H -3.711506 -2.562576 -0.580604
 H -3.572835 -1.455583 -1.972141
 H -3.208442 -3.198755 -2.182682
 C -0.757785 -3.516859 -0.361331
 H -1.320776 -3.760231 0.545473
 H -0.844015 -4.332792 -1.087282

H 0.290590 -3.348420 -0.097211
 C -0.585774 -1.743030 -2.653132
 H -1.021675 -0.838070 -3.092037
 H 0.479822 -1.571625 -2.459596
 H -0.717811 -2.595245 -3.330240
 Si 0.087529 -0.156212 1.286232
 H 7.220078 -0.621368 2.402155
 H -7.099200 0.028483 2.615777
 C 0.828008 3.655890 0.100149
 H -0.206174 3.458820 0.400436
 H 1.453392 3.779503 0.989741
 H 0.881107 4.550788 -0.529452

Y₂Si

E = -4082.96063973
 C -4.425165 -2.557985 -0.380552
 H -4.395470 -2.848330 0.666705
 C -3.331163 -1.913870 -0.932643
 C 3.223866 1.929205 -0.890726
 O -0.710318 -2.007647 -0.667189
 C 3.142770 1.625396 -2.247317
 H 2.239652 1.154278 -2.640155
 C -2.700327 2.944338 2.861427
 H -3.690690 3.234250 2.511102
 C -5.538874 -2.798881 -1.180004
 H -6.407106 -3.297862 -0.751507
 C 1.989447 -5.074160 -1.364776
 H 1.852903 -6.110086 -1.061009
 C 2.141560 -4.087932 -0.397627
 H 2.112651 -4.351279 0.657035
 C -2.344844 2.454986 -2.067598
 H -2.456582 1.411878 -2.357352
 C -2.295711 2.793845 -0.712804
 C -5.093393 1.186168 -0.364373
 H -4.791033 1.719292 -1.263216
 C -6.387076 0.692691 -0.250498
 H -7.094319 0.841372 -1.064044

C 1.995416 -4.737621 -2.714388
 H 1.867165 -5.512372 -3.468100
 C 1.482677 -0.137344 -0.121882
 Si -0.058568 -0.193544 -1.280732
 O 2.336417 1.755843 1.544963
 S 1.861980 1.470515 0.177717
 P 2.465423 -1.405791 0.415581
 C 4.216105 1.920344 -3.071490
 H 4.159465 1.680988 -4.133087
 C 4.676688 -0.306530 1.689877
 H 3.996814 -0.142108 2.522592
 C 0.748300 -1.851099 2.503280
 H 0.081799 -1.225278 1.917226
 C -5.867019 -0.186274 1.932735
 H -6.166025 -0.727675 2.828059
 C -4.570244 0.302106 1.825225
 H -3.851849 0.129253 2.624433
 C 2.301912 -2.419669 -2.139625
 H 2.402022 -1.375583 -2.433040
 C -1.909550 2.075242 2.103024
 C -3.322312 -1.518431 -2.267782
 H -2.439151 -1.023268 -2.678511
 C -2.089872 4.118264 -0.330625
 H -2.003502 4.377038 0.721715
 C -4.182816 0.999931 0.677763
 C 2.494247 -3.429520 3.989482
 H 3.177621 -4.039709 4.577202
 C 2.036255 -2.095819 2.036804
 C 2.915575 -2.886759 2.782059
 H 3.927060 -3.070493 2.421540
 C 2.308382 -2.758444 -0.782581
 C 2.150692 -3.410828 -3.101053
 H 2.139947 -3.141793 -4.155190
 C -6.780035 -2.631943 -3.367428
 H -6.516921 -3.126987 -4.310239
 H -7.263130 -1.680876 -3.629152
 H -7.520991 -3.252104 -2.852739

C 1.197892 -3.195716 4.446021
 H 0.871230 -3.630054 5.389346
 C 5.375490 2.521665 -2.562861
 C -6.775958 0.011304 0.898674
 H -7.790434 -0.373378 0.985433
 C 6.389177 -0.658121 -0.479871
 H 7.054754 -0.791292 -1.330376
 C -1.552210 0.124084 -0.080043
 P -2.433237 1.452218 0.490277
 O -2.227050 -2.047896 1.411063
 S -1.941986 -1.470195 0.093397
 O 0.676717 2.212844 -0.329334
 C -5.568323 -2.401570 -2.515524
 C -4.438266 -1.765327 -3.048453
 H -4.439159 -1.460262 -4.094305
 C -2.220914 3.446117 -3.032451
 H -2.252657 3.179138 -4.086692
 C -2.033529 4.770138 -2.650081
 H -1.925395 5.544483 -3.407338
 C -1.964523 5.103880 -1.301622
 H -1.796107 6.136310 -1.002395
 C 5.080466 -1.118070 -0.551479
 H 4.728325 -1.610793 -1.454817
 C 0.324016 -2.410957 3.702297
 H -0.694681 -2.232629 4.039137
 C 4.221120 -0.951897 0.536959
 C 6.845142 -0.029361 0.674532
 H 7.871174 0.330035 0.728780
 C 5.418829 2.832748 -1.205079
 H 6.311238 3.302813 -0.793090
 C 5.988425 0.147552 1.755607
 H 6.339255 0.649536 2.655128
 C -0.948403 3.056661 4.513819
 H -0.571054 3.448729 5.456740
 C -2.217307 3.428106 4.070317
 H -2.829421 4.100404 4.668564
 C 4.349329 2.539368 -0.363513

H 4.379112 2.757217 0.701355
 C 6.542587 2.802556 -3.461513
 H 7.296371 3.418021 -2.959470
 H 6.229439 3.324676 -4.373971
 H 7.030531 1.870259 -3.777376
 C -0.166718 2.189643 3.759614
 H 0.831917 1.904904 4.082191
 C -0.653802 1.687154 2.559355
 H -0.061715 0.996103 1.967751

^{cy}**Y₂Si**

E = -4104.72816978
 O 0.516158 -1.477017 1.568380
 O -0.425929 2.245071 -0.410041
 C -1.483351 0.098650 0.073442
 C 1.652643 0.049676 0.116572
 S 1.853374 -1.431790 0.813050
 O 2.224353 -2.607596 0.008409
 C 3.048675 -1.415103 2.142468
 P -2.617454 -1.181036 0.190973
 C -4.013908 -0.857662 -0.969272
 C -3.378366 -1.318103 1.867210
 C -1.811437 -2.800975 -0.104811
 S -1.737819 1.562021 -0.692997
 O -2.221476 1.534790 -2.084439
 C -2.933555 2.584965 0.162153
 P 2.632591 0.724435 -1.116426
 C 4.383591 0.182429 -0.922325
 C 2.117274 0.201215 -2.804597
 C 2.459328 2.545941 -1.077758
 C 4.075518 -2.344291 2.178931
 C 5.024807 -2.262833 3.195534
 C -3.650592 -1.148200 -2.427074
 C -5.377201 -1.454549 -0.620267
 C 2.942475 -0.420906 3.112317
 C -2.404947 -1.842380 2.922609
 C -3.910919 0.051535 2.283884

C 5.048277 0.808437 0.305342
 C 5.284059 0.352889 -2.148436
 C -3.062285 -1.881028 4.297338
 C -0.893246 -2.788057 -1.322458
 C -2.785538 -3.977033 -0.125437
 C 4.954299 -1.270360 4.171330
 C 3.892996 -0.355127 4.115792
 C 5.980345 -1.176006 5.260072
 C -4.704700 -0.561392 -3.352706
 C 2.338206 -1.300467 -2.996163
 C 0.645167 0.539231 -3.033734
 C -0.163090 -4.114965 -1.465922
 C 6.403028 0.164039 0.565124
 C -1.136847 -5.283907 -1.506155
 C 2.439112 3.145561 0.328696
 C 3.414244 3.313377 -1.990328
 C -6.438307 -0.886409 -1.559170
 C -4.578489 0.009183 3.649915
 C -4.189235 2.804310 -0.386861
 C -2.611206 3.085839 1.421075
 C -3.573525 3.772287 2.143357
 C -4.862716 3.971621 1.631505
 C -3.615040 -0.521815 4.701360
 C -2.029916 -5.293042 -0.272601
 C -5.148652 3.487600 0.354948
 C 1.874583 -1.758572 -4.372695
 C 2.005446 4.602900 0.246105
 C -6.087997 -1.105027 -3.024601
 C -5.896679 4.695950 2.440206
 C 2.986495 4.775295 -2.067118
 C 6.646758 -0.283586 -1.894229
 C 2.906915 5.405434 -0.682741
 C 7.312193 0.287035 -0.649367
 C 0.167998 0.083939 -4.404501
 C 0.416501 -1.401310 -4.620749
 H -4.117893 0.233147 -0.878096
 H -4.212295 -2.031417 1.774782

H -1.153993 -2.897686 0.770608
 H 4.268779 -0.899814 -0.733247
 H 2.744416 0.760492 -3.518272
 H 1.439309 2.668777 -1.465521
 H 4.119882 -3.115065 1.413058
 H 5.838481 -2.986372 3.227830
 H -2.666327 -0.728351 -2.656440
 H -3.601169 -2.236805 -2.576537
 H -5.347083 -2.549989 -0.709744
 H -5.655099 -1.227418 0.415033
 H 2.122489 0.299090 3.058221
 H -2.043214 -2.843308 2.659581
 H -1.519480 -1.190665 2.951723
 H -3.051352 0.731965 2.327059
 H -4.592364 0.468907 1.528611
 H 5.193617 1.882467 0.118556
 H 4.398947 0.725472 1.183116
 H 4.830206 -0.086841 -3.042777
 H 5.418738 1.422111 -2.359073
 H -3.883127 -2.615406 4.283899
 H -2.338218 -2.238149 5.040730
 H -0.186562 -1.956556 -1.219268
 H -1.476966 -2.598623 -2.230456
 H -3.400415 -3.991181 0.785257
 H -3.477691 -3.868038 -0.973198
 H 3.817282 0.422878 4.874643
 H 6.742395 -1.955885 5.162688
 H 6.487826 -0.202980 5.242595
 H 5.517299 -1.277420 6.249962
 H -4.688254 0.533507 -3.244098
 H -4.445219 -0.773010 -4.397902
 H 1.782974 -1.833934 -2.214627
 H 3.389368 -1.575083 -2.846513
 H 0.444511 1.608249 -2.911658
 H 0.056669 0.037035 -2.252647
 H 0.458465 -4.093307 -2.372175
 H 0.531909 -4.229833 -0.624859

H 6.251119 -0.897615 0.806181
 H 6.870029 0.618292 1.448627
 H -1.768269 -5.207807 -2.405717
 H -0.593847 -6.234409 -1.587834
 H 3.435791 3.077477 0.787126
 H 1.748608 2.584385 0.968053
 H 4.436170 3.260082 -1.586507
 H 3.447453 2.874905 -2.996557
 H -6.528251 0.193963 -1.366269
 H -7.416783 -1.326297 -1.326285
 H -4.929513 1.014761 3.917637
 H -5.471541 -0.633923 3.608062
 H -4.399015 2.446597 -1.392759
 H -1.615760 2.905163 1.828631
 H -3.325200 4.159379 3.131202
 H -2.780064 0.186573 4.808846
 H -4.105544 -0.582793 5.681675
 H -1.408342 -5.448830 0.621781
 H -2.740218 -6.129329 -0.311972
 H -6.137275 3.655241 -0.070885
 H 2.502890 -1.286582 -5.144535
 H 2.026187 -2.842293 -4.468055
 H 1.996652 5.048113 1.249426
 H 0.968703 4.626917 -0.119676
 H -6.110361 -2.184335 -3.241512
 H -6.848644 -0.644633 -3.668486
 H -5.555635 5.703369 2.710630
 H -6.839363 4.794250 1.892298
 H -6.106123 4.166437 3.378862
 H 3.679965 5.336356 -2.707286
 H 1.998955 4.829530 -2.548728
 H 6.512860 -1.368959 -1.769954
 H 7.290860 -0.147666 -2.772606
 H 2.556398 6.443009 -0.759418
 H 3.919818 5.451262 -0.252325
 H 7.544447 1.349545 -0.821024
 H 8.271290 -0.214304 -0.465838

H -0.898849 0.322553 -4.500131
H 0.691821 0.658832 -5.184483
H -0.210862 -1.972238 -3.922927
H 0.113716 -1.702246 -5.632339
Si 0.063069 0.525160 1.166817

(Y_{Ph})₂Si

E = -2905.76188502
P 2.954755 0.325352 -0.009650
P -2.934264 0.459325 -0.055550
C 1.487190 -0.465577 -0.423282
C 1.551602 -1.919561 -0.644785
C 2.449795 -2.774469 0.019350
H 3.129582 -2.368268 0.765728
C 2.478726 -4.140739 -0.233878
H 3.188128 -4.768149 0.304236
C 1.603312 -4.708018 -1.151751
H 1.616685 -5.779402 -1.341877
C 0.703496 -3.881360 -1.820565
H 0.001130 -4.306411 -2.535895
C 0.686600 -2.517036 -1.579410
H -0.023823 -1.879896 -2.103735
C 3.526514 -0.006153 1.704858
C 4.809744 -0.430935 2.050236
H 5.571445 -0.557044 1.284975
C 5.115198 -0.721206 3.376794
H 6.116236 -1.060502 3.636353
C 4.147231 -0.585790 4.365074
H 4.389571 -0.815992 5.400858
C 2.862533 -0.170440 4.024676
H 2.096493 -0.076263 4.791980
C 2.550426 0.105005 2.700198
H 1.537160 0.397813 2.418365
C 2.815655 2.135283 -0.118082
C 2.986948 2.982094 0.973874
H 3.185269 2.571755 1.960857
C 2.887023 4.360593 0.804195

H 3.009511 5.018395 1.662541
 C 2.631367 4.893194 -0.452288
 H 2.551088 5.971020 -0.581029
 C 2.485145 4.047593 -1.550415
 H 2.288823 4.462056 -2.537117
 C 2.578993 2.675476 -1.386263
 H 2.448297 2.007473 -2.236101
 C 4.377854 -0.027612 -1.095089
 C 4.266451 -0.936847 -2.147553
 H 3.340889 -1.486899 -2.292095
 C 5.338606 -1.130597 -3.012820
 H 5.246601 -1.845695 -3.827805
 C 6.517342 -0.413828 -2.842318
 H 7.352788 -0.568208 -3.522780
 C 6.623988 0.513527 -1.809570
 H 7.537142 1.092355 -1.685036
 C 5.556932 0.710181 -0.942596
 H 5.631597 1.454097 -0.149675
 C -1.449220 -0.389033 0.136096
 C -1.547224 -1.835327 0.403346
 C -0.736667 -2.421323 1.389200
 H -0.053518 -1.780218 1.944827
 C -0.765681 -3.785706 1.633133
 H -0.107640 -4.208943 2.390455
 C -1.624878 -4.615026 0.915633
 H -1.647378 -5.685633 1.109891
 C -2.442512 -4.057610 -0.059700
 H -3.110998 -4.691783 -0.640753
 C -2.394670 -2.692341 -0.316562
 H -2.999111 -2.280872 -1.124825
 C -4.262166 -0.205643 1.010499
 C -4.324597 0.185952 2.349679
 H -3.644654 0.945498 2.727032
 C -5.257203 -0.383820 3.207256
 H -5.297835 -0.065337 4.246985
 C -6.133824 -1.356735 2.738937
 H -6.862038 -1.805114 3.412146

C -6.076046 -1.755311 1.408861
 H -6.754383 -2.520196 1.036275
 C -5.146137 -1.183892 0.548232
 H -5.111520 -1.504223 -0.489748
 C -2.770942 2.226242 0.370860
 C -3.367396 3.232245 -0.386764
 H -3.913062 2.986388 -1.293575
 C -3.245243 4.564532 -0.001195
 H -3.706124 5.342901 -0.606160
 C -2.531783 4.899095 1.141907
 H -2.434269 5.941821 1.438582
 C -1.932499 3.898183 1.902496
 H -1.357724 4.154791 2.790088
 C -2.045148 2.571256 1.516787
 H -1.545632 1.787019 2.081799
 C -3.676098 0.443969 -1.732574
 C -5.013307 0.777216 -1.971789
 H -5.665804 1.038185 -1.139398
 C -5.511844 0.770414 -3.268452
 H -6.553290 1.029224 -3.450280
 C -4.680607 0.429668 -4.333057
 H -5.074475 0.420888 -5.347766
 C -3.351297 0.096492 -4.099782
 H -2.701052 -0.173285 -4.929559
 C -2.850058 0.102580 -2.801960
 H -1.811771 -0.161474 -2.598269
 Si 0.030041 0.667488 -0.217898

$(Y_{CN})_2Si$

E = -2627.68609979
 C -3.594719 -0.614566 1.660136
 C -4.762413 -0.102083 2.234839
 C -5.172803 -0.547473 3.484479
 H -6.079177 -0.145752 3.933408
 C -4.415676 -1.498185 4.164876
 H -4.735536 -1.843390 5.146433
 C -3.245378 -1.994456 3.601714

H -2.640303 -2.722092 4.138193
 C -2.825361 -1.553313 2.350580
 H -1.889416 -1.922240 1.930845
 H -5.339521 0.660536 1.712173
 P -3.015756 -0.045661 0.035156
 C 1.331927 -0.238310 0.485970
 P 2.978223 -0.050558 0.038022
 C -1.364654 -0.404825 -0.253760
 C 1.034724 -1.325237 1.327957
 C -1.092907 -1.742320 -0.598727
 C -3.746933 2.397850 -1.105739
 H -4.027777 1.823984 -1.986606
 N 0.762112 -2.185109 2.067506
 C -3.020381 3.866167 1.149500
 H -2.732063 4.438970 2.028343
 N -0.837595 -2.823371 -0.953143
 C -3.274566 1.744116 0.031957
 C -3.857989 3.783282 -1.110453
 H -4.230408 4.291917 -1.997239
 C -3.495020 4.515971 0.014824
 H -3.583383 5.600765 0.007729
 C -2.908690 2.481708 1.161601
 H -2.544211 1.968766 2.050168
 C -4.108281 -0.770351 -1.221424
 C -3.586488 -0.925295 -2.508767
 H -2.550453 -0.651391 -2.700800
 C -4.382805 -1.443370 -3.522630
 H -3.970432 -1.568637 -4.521616
 C -5.696237 -1.814581 -3.256068
 H -6.316965 -2.226462 -4.049581
 C -6.213826 -1.674021 -1.972112
 H -7.236850 -1.977424 -1.759126
 C 3.144184 1.417190 -1.002791
 C -5.423017 -1.155859 -0.953773
 H -5.827514 -1.067763 0.051596
 C 3.392227 1.318385 -2.370784
 H 3.530428 0.341582 -2.829568

C 3.457607 2.472235 -3.145342
 H 3.650014 2.394678 -4.213404
 C 3.275108 3.718108 -2.556848
 H 3.326272 4.618739 -3.165851
 C 3.023908 3.817724 -1.190959
 H 2.872479 4.792357 -0.732016
 C 2.955248 2.671075 -0.412985
 H 2.748755 2.741610 0.653874
 H 4.698066 -0.872794 4.585304
 H 3.076795 -1.123772 2.742932
 C 4.168927 0.171291 1.398091
 C 5.299733 0.977948 1.241051
 H 5.466754 1.508654 0.305281
 C 6.209278 1.115225 2.283705
 H 7.085806 1.747484 2.156004
 C 5.995041 0.450014 3.485737
 H 6.706246 0.559314 4.302360
 C 4.869764 -0.352679 3.645145
 C 3.955233 -0.495653 2.608450
 C 3.594491 -1.470820 -0.911210
 C 2.676219 -2.415301 -1.372609
 H 1.615759 -2.319190 -1.142772
 C 3.125895 -3.499245 -2.120814
 H 2.405631 -4.236760 -2.468294
 C 4.477675 -3.637351 -2.411606
 H 4.824626 -4.487287 -2.996662
 C 5.394178 -2.695355 -1.947937
 H 6.453750 -2.807748 -2.169377
 C 4.956634 -1.616205 -1.192711
 H 5.675564 -0.889668 -0.816695
 Si -0.017194 0.877646 -0.159760

$(^{Me}Y_{SO_2Ph})_2Ge$

E = -4640.05438885
 O 1.558386 -1.643751 0.530284
 O -1.558827 1.644720 0.528631
 C -1.389809 -0.772969 0.066706

C 1.390565 0.774006 0.068426
 S 2.277289 -0.581404 -0.267643
 O 2.547305 -0.881274 -1.692347
 C 3.903442 -0.497079 0.481565
 P -1.445693 -2.101880 -0.992630
 S -2.277556 0.581920 -0.268729
 O -2.548744 0.881397 -1.693281
 C -3.903187 0.496606 0.481573
 P 1.445738 2.102388 -0.991662
 C 5.021921 -0.877390 -0.247805
 C 6.275430 -0.809523 0.354179
 C 4.009156 -0.062124 1.798977
 C 6.395397 -0.375304 1.669463
 C 5.262530 -0.004200 2.392285
 C -5.022305 0.876712 -0.246928
 C -4.007881 0.061214 1.798922
 C -5.260843 0.002636 2.393044
 C -6.394329 0.373547 1.671098
 C -6.275391 0.808213 0.355869
 H 4.891818 -1.216817 -1.272617
 H 7.161299 -1.100056 -0.207533
 H 3.112342 0.238979 2.339716
 H 5.359063 0.333980 3.422171
 H -4.893002 1.216490 -1.271725
 H -3.110614 -0.239693 2.339031
 H -5.356553 -0.335890 3.422894
 H -7.161739 1.098592 -0.205167
 C 3.152478 2.474662 -1.484918
 H 3.188168 3.327513 -2.171899
 H 3.748429 2.685356 -0.590593
 H 3.559055 1.585528 -1.980712
 C 0.549152 1.886100 -2.549060
 H 0.983963 1.010388 -3.044547
 H -0.505563 1.685336 -2.325279
 H 0.638543 2.767924 -3.194438
 C -3.152650 -2.474282 -1.485040
 H -3.748338 -2.684170 -0.590346

H -3.559286 -1.585460 -1.981344
H -3.188668 -3.327688 -2.171310
C -0.774804 -3.576482 -0.202067
H -1.362862 -3.797929 0.694177
H -0.808083 -4.424488 -0.894719
H 0.259721 -3.356447 0.085097
C -0.549672 -1.886255 -2.550455
H -0.984388 -1.010413 -3.045819
H 0.505167 -1.685759 -2.326991
H -0.639640 -2.768063 -3.195768
Ge -0.000286 0.000214 1.361873
H 7.377089 -0.323374 2.136601
H -7.375690 0.321115 2.138874
C 0.775056 3.577276 -0.201460
H -0.259610 3.357527 0.085386
H 1.362917 3.798663 0.694923
H 0.808734 4.425182 -0.894208

Y₂Ge

E = -5871.21690208
C -4.486172 -2.520371 -0.330534
H -4.449402 -2.795148 0.720669
C -3.387505 -1.897602 -0.898207
C -5.612082 -2.757126 -1.114234
C -3.391272 -1.524964 -2.239982
S -1.966515 -1.491598 0.111090
C 3.388469 1.896754 -0.899724
C 3.392338 1.523221 -2.241215
S 1.967133 1.491960 0.109527
C 4.487244 2.519584 -0.332256
O -0.789549 -2.147138 -0.565288
Ge 0.000121 -0.000163 -1.362613
H 2.511660 1.043659 -2.671105
C 4.520364 1.762151 -3.007981
C -2.762468 2.867144 2.908679
H -3.786523 3.086676 2.608271
C -1.951039 2.058357 2.107129

C -2.255614 3.381071 4.095352
 H -6.482420 -3.237880 -0.669041
 C -5.652231 -2.377416 -2.454376
 C 2.023943 -5.085909 -1.252315
 H 1.836143 -6.112419 -0.944262
 C 2.142571 -4.089989 -0.290191
 C 2.126222 -4.770471 -2.602721
 H 2.036635 -4.335781 0.763685
 C 2.371271 -2.772112 -0.682084
 C -2.457791 2.452117 -2.042607
 H -2.601400 1.414305 -2.339799
 C -2.371920 2.771626 -0.684306
 C -2.342657 3.451863 -2.999462
 C -2.144329 4.089951 -0.293244
 P -2.489688 1.409782 0.505745
 C -5.168323 1.183816 -0.302893
 H -4.875527 1.717754 -1.204206
 C -6.469663 0.717448 -0.165534
 C -4.239793 0.971132 0.718275
 H -7.190267 0.887305 -0.963045
 C -6.848800 0.036162 0.986834
 H 2.024072 -5.552656 -3.352671
 C 2.342530 -3.453956 -2.996783
 C 1.583451 -0.115324 -0.093229
 P 2.489287 -1.409378 0.506924
 C -1.583067 0.115612 -0.093027
 O 2.322383 1.947541 1.463127
 O 0.790402 2.147068 -0.567768
 C 1.950141 -2.056314 2.108775
 C 4.239463 -0.970990 0.719476
 H 4.528030 1.469448 -4.057468
 C 5.653712 2.374526 -2.455727
 C 4.617819 -0.272400 1.869540
 H 3.886053 -0.076018 2.650277
 C 5.922380 0.188236 2.000760
 C 0.646967 -1.762371 2.497769
 H 0.037003 -1.119709 1.870086

C 0.136813 -2.294214 3.675787
 C -5.922743 -0.187416 2.000128
 H -6.214110 -0.729488 2.897591
 C -4.618244 0.273355 1.868807
 H -3.886573 0.077653 2.649803
 C 2.457915 -2.453617 -2.040579
 H 2.602245 -1.416087 -2.338417
 C -0.647276 1.766445 2.495711
 H -2.510751 -1.045232 -2.670005
 C -4.519028 -1.764835 -3.006790
 H -2.039092 4.336563 0.760513
 C -2.025988 5.085279 -1.256010
 C 2.253947 -3.378057 4.097763
 H 2.882069 -4.002288 4.730642
 C 2.760894 -2.865614 2.910506
 C 0.941277 -3.097232 4.475758
 H 3.784518 -3.086725 2.609778
 H 2.406945 -3.201654 -4.053209
 C -6.877655 -2.600068 -3.289012
 H -6.632994 -3.101740 -4.233356
 H -7.356842 -1.646094 -3.547825
 H -7.616836 -3.211401 -2.761141
 H 0.547122 -3.510638 5.402584
 C 5.613376 2.755352 -1.115869
 C 6.880154 2.594595 -3.289550
 H -7.869194 -0.327706 1.092423
 C 6.469579 -0.718483 -0.164053
 H 7.190350 -0.889212 -0.961228
 C 5.168169 -1.184683 -0.301325
 C 6.848608 -0.036339 0.987848
 O -2.322108 -1.945852 1.465041
 H -4.526653 -1.472671 -4.056432
 H -2.406445 3.198769 -4.055737
 C -2.127432 4.768803 -2.606241
 H -2.025494 5.550523 -3.356704
 H -1.839076 6.112145 -0.948608
 H 4.875463 -1.719316 -1.202253

H -0.895025 -2.082094 3.945490
H 7.869058 0.327397 1.093368
H 6.483717 3.236297 -0.670882
H 6.213670 0.730955 2.897857
C -0.942388 3.102285 4.472901
H -0.548340 3.516868 5.399247
C -0.137231 2.299789 3.673086
H -2.884271 4.004888 4.728108
H 4.450304 2.795226 0.718717
H 7.612089 3.220740 -2.768965
H 6.634781 3.078329 -4.242932
H 7.368814 1.640684 -3.530590
H 0.895024 2.089193 3.942402
H -0.036741 1.124162 1.868224

^{cy}Y₂Ge

E = -5892.98407039
Ge -0.065984 -0.842581 1.073563
O -0.683347 1.277189 1.951242
O 0.474179 -2.098312 -0.825761
C 1.563353 -0.098325 0.071336
C -1.696070 -0.036155 0.136548
S -1.972701 1.240736 1.155528
O -2.457867 2.505534 0.571072
C -3.205022 0.841082 2.394976
P 2.684080 1.148818 0.414656
C 3.946649 1.213035 -0.921498
C 3.605681 0.887721 1.993323
C 1.820236 2.746178 0.645814
S 1.786927 -1.359574 -0.991512
O 2.227054 -1.052734 -2.363137
C 2.994109 -2.549142 -0.411623
P -2.622644 -0.387225 -1.258612
C -4.386591 0.098518 -1.029991
C -2.039587 0.496193 -2.766981
C -2.442517 -2.170513 -1.646950
C -4.264651 1.702637 2.629023

C -5.235947 1.348524 3.563005
C 3.375961 1.796302 -2.215798
C 5.301575 1.841880 -0.600678
C -3.094304 -0.357822 3.095513
C 2.674664 0.969665 3.204975
C 4.316264 -0.463102 1.954121
C -5.111043 -0.808765 -0.032851
C -5.217815 0.240879 -2.307537
C 3.414326 0.649639 4.498814
C 0.770892 3.037789 -0.420444
C 2.763944 3.930703 0.849511
C -5.158009 0.148643 4.267301
C -4.066062 -0.695741 4.021311
C -6.207325 -0.238456 5.265611
C 4.323532 1.515801 -3.370346
C -2.216912 2.008632 -2.626099
C -0.569110 0.175796 -3.024942
C -0.009507 4.290159 -0.049720
C -6.485147 -0.245327 0.302355
C 0.916020 5.482865 0.138251
C -2.498602 -3.095663 -0.431478
C -3.337105 -2.689593 -2.771127
C 6.262109 1.589001 -1.760391
C 5.065876 -0.755661 3.244988
C 4.253116 -2.600799 -0.992552
C 2.689724 -3.343133 0.691621
C 3.671226 -4.155482 1.235400
C 4.964717 -4.191128 0.697851
C 4.122613 -0.695632 4.436943
C 1.974418 5.188987 1.192318
C 5.232248 -3.413739 -0.428977
C -1.696578 2.741970 -3.856480
C -2.050152 -4.493227 -0.838516
C 5.706568 2.087591 -3.088835
C 6.026443 -5.041967 1.327100
C -2.895747 -4.092055 -3.176095
C -6.600130 0.795834 -1.979211

C -2.892307 -5.039653 -1.983867
 C -7.325450 -0.064298 -0.953576
 C -0.042564 0.896056 -4.256436
 C -0.241515 2.399247 -4.145790
 H 4.125756 0.141999 -1.102458
 H 4.352838 1.693940 2.062904
 H 1.254390 2.573670 1.572355
 H -4.288834 1.098957 -0.574310
 H -2.651781 0.130344 -3.607499
 H -1.402106 -2.208048 -1.995235
 H -4.318260 2.635334 2.072478
 H -6.074368 2.020082 3.744533
 H 2.384919 1.375019 -2.414512
 H 3.263469 2.883936 -2.095608
 H 5.187794 2.923101 -0.440934
 H 5.724552 1.428373 0.322282
 H -2.256683 -1.026775 2.894159
 H 2.221721 1.964574 3.281655
 H 1.841482 0.262737 3.066588
 H 3.551821 -1.234960 1.808996
 H 4.990472 -0.532898 1.090147
 H -5.235836 -1.803478 -0.485314
 H -4.512461 -0.946043 0.873956
 H -4.722698 0.892039 -3.035257
 H -5.327427 -0.740672 -2.787926
 H 4.158380 1.438459 4.690724
 H 2.709704 0.677078 5.339631
 H 0.110166 2.168719 -0.516139
 H 1.252176 3.187530 -1.394020
 H 3.502028 3.721303 1.635594
 H 3.329735 4.107078 -0.077352
 H -3.983537 -1.636059 4.565391
 H -6.994815 0.518964 5.334190
 H -6.678478 -1.192501 4.996337
 H -5.774306 -0.366702 6.266024
 H 4.379578 0.426567 -3.514111
 H 3.916864 1.932671 -4.300819

H -1.674044 2.337146 -1.731667
 H -3.264354 2.276689 -2.441614
 H -0.391890 -0.899014 -3.127789
 H 0.003249 0.490575 -2.139588
 H -0.768381 4.494424 -0.815985
 H -0.565631 4.095441 0.875790
 H -6.358754 0.724365 0.804077
 H -6.993749 -0.901673 1.020416
 H 1.413985 5.718534 -0.815845
 H 0.341707 6.375724 0.417474
 H -3.519115 -3.134124 -0.026007
 H -1.854070 -2.710737 0.366082
 H -4.381011 -2.728445 -2.426534
 H -3.314942 -2.020040 -3.640936
 H 6.445548 0.505581 -1.829418
 H 7.233386 2.055660 -1.550627
 H 5.542432 -1.742826 3.175503
 H 5.877488 -0.023751 3.379809
 H 4.451141 -2.011517 -1.885452
 H 1.690516 -3.301953 1.124170
 H 3.434552 -4.774223 2.100405
 H 3.372520 -1.494949 4.339124
 H 4.665291 -0.886148 5.371990
 H 1.483077 5.045706 2.166212
 H 2.659247 6.039560 1.307018
 H 6.223550 -3.449985 -0.879251
 H -2.312719 2.471404 -4.728569
 H -1.815981 3.824554 -3.716369
 H -2.096598 -5.168424 0.025824
 H -0.994437 -4.437279 -1.141009
 H 5.639969 3.186222 -3.058321
 H 6.400727 1.843027 -3.903314
 H 5.674319 -6.068490 1.485754
 H 6.928446 -5.082850 0.708039
 H 6.314258 -4.646169 2.310616
 H -3.547454 -4.476116 -3.971858
 H -1.881768 -4.035535 -3.598984

H -6.486132 1.815899 -1.582138
H -7.193996 0.883468 -2.898298
H -2.531431 -6.030696 -2.288542
H -3.927803 -5.179888 -1.635656
H -7.533927 -1.051427 -1.394748
H -8.299698 0.376894 -0.706200
H 1.018236 0.646013 -4.385721
H -0.565655 0.522161 -5.150710
H 0.384995 2.778176 -3.326076
H 0.097854 2.905677 -5.059113

(Y_{Ph})₂Ge

E = -4694.01344921
P -3.018557 -0.290493 -0.000586
P 3.006926 -0.417890 -0.041197
C -1.542092 0.449278 -0.453584
C -1.563161 1.898297 -0.689589
C -2.462765 2.780525 -0.060504
H -3.169292 2.397894 0.673387
C -2.462205 4.142956 -0.332415
H -3.174948 4.788886 0.178748
C -1.553747 4.683354 -1.234146
H -1.543788 5.751954 -1.439340
C -0.649834 3.832016 -1.865849
H 0.079110 4.235240 -2.567111
C -0.662082 2.471211 -1.606509
H 0.051934 1.816128 -2.103292
C -3.565622 0.083053 1.715207
C -4.832112 0.552946 2.064652
H -5.597584 0.686451 1.304430
C -5.115634 0.879090 3.387695
H -6.103679 1.253023 3.649499
C -4.142322 0.735454 4.369509
H -4.367256 0.993891 5.402541
C -2.873760 0.276075 4.025344
H -2.102571 0.175920 4.786701
C -2.583583 -0.035216 2.703776

H -1.581001 -0.360827 2.420072
 C -2.922258 -2.105224 -0.076903
 C -3.107200 -2.930507 1.029559
 H -3.293050 -2.499449 2.010217
 C -3.042160 -4.313520 0.881639
 H -3.177700 -4.954536 1.750625
 C -2.804169 -4.872097 -0.367310
 H -2.751620 -5.953530 -0.479076
 C -2.639151 -4.048308 -1.478763
 H -2.456180 -4.483235 -2.459196
 C -2.700773 -2.671300 -1.336358
 H -2.561191 -2.020061 -2.197846
 C -4.449322 0.069311 -1.075651
 C -4.325181 0.944741 -2.154886
 H -3.385773 1.463919 -2.323756
 C -5.401499 1.143261 -3.013819
 H -5.299950 1.832389 -3.849787
 C -6.597037 0.463649 -2.810243
 H -7.435766 0.621316 -3.485908
 C -6.716793 -0.430960 -1.750434
 H -7.643743 -0.980979 -1.599843
 C -5.645533 -0.631750 -0.889436
 H -5.731409 -1.350077 -0.074284
 C 1.499744 0.375255 0.162147
 C 1.540542 1.819877 0.433717
 C 0.683795 2.379849 1.396566
 H -0.000621 1.718559 1.926264
 C 0.671855 3.742152 1.651758
 H -0.020665 4.142257 2.390691
 C 1.533089 4.598933 0.969535
 H 1.523044 5.667966 1.173114
 C 2.394159 4.069571 0.016360
 H 3.064866 4.724368 -0.538713
 C 2.387918 2.706099 -0.252618
 H 3.027245 2.318453 -1.045400
 C 4.317631 0.260656 1.039006
 C 4.375080 -0.137504 2.376533

H 3.703644 -0.909157 2.744267
 C 5.291550 0.441251 3.245333
 H 5.328446 0.117148 4.283475
 C 6.156621 1.430725 2.790314
 H 6.871994 1.886436 3.472312
 C 6.103261 1.836662 1.462298
 H 6.772247 2.614689 1.100107
 C 5.189727 1.255861 0.590423
 H 5.158666 1.582349 -0.445806
 C 2.882976 -2.196037 0.354387
 C 3.490322 -3.179566 -0.424997
 H 4.024404 -2.908809 -1.331594
 C 3.395435 -4.519541 -0.060963
 H 3.865160 -5.279402 -0.682437
 C 2.697347 -4.886240 1.082354
 H 2.622071 -5.935259 1.362803
 C 2.084581 -3.909689 1.862493
 H 1.521067 -4.191346 2.749721
 C 2.171119 -2.574071 1.498429
 H 1.662421 -1.808825 2.081371
 C 3.760792 -0.362907 -1.714146
 C 5.102272 -0.679948 -1.951644
 H 5.751344 -0.954032 -1.120683
 C 5.609441 -0.640357 -3.244328
 H 6.653970 -0.887470 -3.424878
 C 4.782942 -0.281458 -4.306804
 H 5.183626 -0.246967 -5.318286
 C 3.450015 0.037830 -4.075194
 H 2.803779 0.323301 -4.902858
 C 2.940365 -0.001821 -2.781121
 H 1.899734 0.253456 -2.577769
 Ge -0.028500 -0.772743 -0.233458

(Y_{CN})₂Ge

E = -4415.94130339
 C 3.564604 -0.910269 -1.570642
 C 4.703721 -0.501927 -2.272367

C 5.055418 -1.141607 -3.453940
 H 5.939235 -0.821007 -4.002224
 C 4.268901 -2.183359 -3.940195
 H 4.543227 -2.680282 -4.869060
 C 3.127045 -2.577732 -3.252033
 H 2.496769 -3.376016 -3.637807
 C 2.766321 -1.942075 -2.068257
 H 1.851176 -2.234848 -1.554089
 H 5.304529 0.329627 -1.904323
 Ge 0.015800 0.980651 0.071495
 P 3.050268 -0.101711 -0.026111
 C -1.366542 -0.313575 -0.441743
 P -3.013376 -0.103872 -0.024317
 C 1.409301 -0.364865 0.371584
 C -1.022778 -1.504097 -1.100327
 C 1.093655 -1.618361 0.919720
 C 3.821356 2.468699 0.745415
 H 4.107258 2.019419 1.694525
 N -0.718720 -2.462886 -1.692475
 C 3.079593 3.617005 -1.683313
 H 2.785583 4.065111 -2.630106
 N 0.803094 -2.623916 1.435342
 C 3.334750 1.666409 -0.286824
 C 3.939550 3.840589 0.558448
 H 4.323101 4.464210 1.363332
 C 3.568403 4.413970 -0.653647
 H 3.661542 5.488902 -0.796625
 C 2.961871 2.244030 -1.503810
 H 2.587167 1.615997 -2.310630
 C 4.186290 -0.659974 1.277850
 C 3.711148 -0.655605 2.592035
 H 2.681133 -0.361470 2.785698
 C 4.545658 -1.044378 3.633085
 H 4.168980 -1.046987 4.653809
 C 5.851402 -1.442726 3.368174
 H 6.501863 -1.752631 4.183954
 C 6.323261 -1.459462 2.059222

H 7.340473 -1.783750 1.849085
 C -3.209461 1.517856 0.750381
 C 5.493694 -1.072870 1.013837
 H 5.862389 -1.108369 -0.008364
 C -3.404471 1.653284 2.124097
 H -3.497574 0.767654 2.749442
 C -3.474419 2.922457 2.689536
 H -3.624860 3.027586 3.761970
 C -3.349061 4.051073 1.887729
 H -3.403196 5.042372 2.333802
 C -3.151882 3.917274 0.515971
 H -3.047270 4.800596 -0.110416
 C -3.079915 2.654325 -0.054123
 H -2.917956 2.543005 -1.125315
 H -4.717855 -1.748576 -4.346778
 H -3.090046 -1.632433 -2.496494
 C -4.211628 -0.145922 -1.396316
 C -5.360546 0.650149 -1.379452
 H -5.540653 1.333163 -0.551015
 C -6.272821 0.581242 -2.426402
 H -7.163496 1.206379 -2.408743
 C -6.044030 -0.281105 -3.492896
 H -6.757754 -0.333600 -4.312946
 C -4.900978 -1.074333 -3.512636
 C -3.983231 -1.011076 -2.471009
 C -3.604893 -1.351776 1.156199
 C -2.671968 -2.204096 1.748447
 H -1.615390 -2.139275 1.491161
 C -3.101367 -3.157650 2.666987
 H -2.369062 -3.824832 3.116526
 C -4.447585 -3.256298 2.996594
 H -4.778987 -4.004124 3.714952
 C -5.378918 -2.406100 2.402703
 H -6.434197 -2.488501 2.655725
 C -4.961688 -1.458826 1.478215
 H -5.692307 -0.806600 1.001685



E = -2565.44378166

O 1.646849 -1.602936 0.521173

O -1.646626 1.602905 0.520225

C -1.481512 -0.835788 0.045746

C 1.481385 0.835528 0.045544

S 2.313088 -0.544357 -0.328748

O 2.482045 -0.861215 -1.766658

C 3.993764 -0.484241 0.297536

P -1.487408 -2.127370 -1.058221

S -2.313069 0.543987 -0.329173

O -2.482085 0.860249 -1.767204

C -3.993710 0.484462 0.297264

P 1.487419 2.126677 -1.058935

C 5.038110 -0.936313 -0.498464

C 6.336178 -0.897736 0.002433

C 4.220081 -0.004775 1.583698

C 6.575405 -0.420294 1.286172

C 5.517281 0.024528 2.076959

C -5.037932 0.936995 -0.498642

C -4.220114 0.005097 1.583444

C -5.517281 -0.023605 2.076839

C -6.575277 0.421700 1.286158

C -6.335961 0.899029 0.002390

H 4.815870 -1.305863 -1.496555

H 7.163753 -1.244644 -0.613619

H 3.381583 0.356323 2.177841

H 5.706442 0.398243 3.081461

H -4.815633 1.306393 -1.496776

H -3.381717 -0.356383 2.177500

H -5.706513 -0.397236 3.081358

H -7.163441 1.246304 -0.613583

C 3.172724 2.579454 -1.562762

H 3.169965 3.408957 -2.278737

H 3.756145 2.847112 -0.675586

H 3.624638 1.695427 -2.028788

C 0.606238 1.834207 -2.611884

H 1.065697 0.956628 -3.079941
H -0.443388 1.613529 -2.382215
H 0.673516 2.699983 -3.281305
C -0.606228 -1.835284 -2.611238
H -1.065787 -0.957882 -3.079540
H 0.443367 -1.614427 -2.381602
H -0.673382 -2.701249 -3.280425
C -3.172644 -2.580506 -1.561946
H -3.624648 -1.696636 -2.028183
H -3.169802 -3.410179 -2.277722
H -3.756044 -2.848004 -0.674709
C -0.724433 -3.572885 -0.298772
H 0.296659 -3.289990 -0.014722
H -1.290207 -3.849905 0.596332
H -0.704025 -4.409178 -1.005751
Sn -0.000144 0.000276 1.540715
H 7.591762 -0.391262 1.674487
H -7.591609 0.393138 1.674574
C 0.724588 3.572580 -0.300050
H -0.296573 3.289913 -0.016025
H 1.290279 3.849818 0.595042
H 0.704369 4.408641 -1.007307

Y_2Sn

E = -3796.60415202
Sn -0.052882 -0.019635 -1.748421
O -1.084867 -2.157203 -0.831607
C -1.728924 0.160684 -0.273968
C 1.725332 -0.244079 -0.353312
O 0.901374 2.051574 -0.795756
S -2.163284 -1.431650 -0.066590
C -3.680449 -1.747378 -0.963375
O -2.435555 -1.888388 1.309064
P -2.471894 1.416004 0.576551
C -4.247410 1.107735 0.822567
C -2.257085 2.927323 -0.401691
C -1.799590 1.751340 2.222986

C 4.003726 1.143970 -2.007469
 H 3.437605 0.282635 -2.357230
 C 3.537752 1.865744 -0.915893
 C 5.202265 1.505171 -2.604942
 S 2.035116 1.367320 -0.071217
 C 4.253220 2.952339 -0.429303
 C -5.948274 -2.516377 -1.018214
 H -6.797914 -2.975985 -0.514502
 C -4.754103 -2.343788 -0.323748
 C -6.082058 -2.099860 -2.341103
 H -4.644347 -2.648793 0.713925
 C -3.780456 -1.337400 -2.290025
 O 2.263637 1.793714 1.323269
 C -4.974286 -1.514236 -2.968469
 C -7.380129 -2.250805 -3.076007
 H 5.573346 0.929283 -3.451915
 C 5.949389 2.585490 -2.126919
 C 7.268521 2.935082 -2.747474
 C 5.449498 3.306726 -1.040186
 P 2.542590 -1.466941 0.487376
 C 2.224011 -3.038023 -0.353742
 C 1.994772 -1.731494 2.197477
 C 4.344423 -1.221252 0.517544
 H -2.924278 -0.871375 -2.778165
 H -5.054888 -1.191883 -4.006139
 H -7.865124 -1.275903 -3.222472
 H -8.079751 -2.889899 -2.527411
 H -7.229129 -2.686000 -4.071329
 C -4.666964 0.383062 1.941219
 C -5.165114 1.423082 -0.182376
 H -3.946360 0.099075 2.704793
 C -6.000067 0.007409 2.063049
 C -6.913640 0.336251 1.068058
 H -7.955601 0.036720 1.164694
 C -6.493359 1.037823 -0.058063
 H -6.322686 -0.553712 2.937907
 H -7.203444 1.287714 -0.843885

H -4.840767 1.972311 -1.063775
 C -1.895223 4.140596 0.181367
 C -2.399380 2.839292 -1.789906
 H -1.747413 4.206728 1.256552
 C -1.694159 5.260183 -0.617337
 H -1.401050 6.202456 -0.158924
 C -1.847076 5.173213 -1.996301
 H -1.679046 6.050124 -2.618693
 C -2.199574 3.961807 -2.582602
 H -2.306445 3.886769 -3.662838
 C -1.870148 2.735226 4.418810
 H -2.395303 3.306296 5.182302
 C -0.587342 2.246061 4.670450
 C -2.478830 2.494772 3.194683
 H -0.114925 2.441847 5.631600
 C 0.086484 1.513813 3.701960
 H 1.091754 1.135345 3.875289
 C -0.525403 1.258904 2.480117
 H -0.016266 0.678803 1.716090
 H -2.650970 1.880366 -2.241368
 H -3.481046 2.873604 2.996786
 H 8.047860 2.228526 -2.429741
 H 7.595805 3.939362 -2.458692
 H 7.221732 2.891185 -3.841903
 H 6.015603 4.155448 -0.657759
 H 3.877361 3.488956 0.438681
 C 2.196936 -4.236187 0.361152
 C 2.022423 -3.048479 -1.734974
 H 2.341314 -4.229861 1.439661
 C 1.965122 -5.434236 -0.303209
 H 1.936224 -6.365726 0.258378
 C 1.756183 -5.440681 -1.678367
 C 1.784991 -4.248084 -2.393176
 H 1.613298 -4.249022 -3.467453
 H 1.562849 -6.379336 -2.194217
 H 2.042920 -2.111849 -2.288265
 C 2.826062 -1.764549 3.316771

C 0.618517 -1.916846 2.342443
 H 3.901409 -1.641049 3.210755
 C 2.268115 -1.962632 4.577339
 H 2.913006 -1.980913 5.454022
 C 0.894839 -2.140125 4.718254
 C 4.870983 -0.135252 1.227351
 C 5.184689 -1.990806 -0.289780
 H -0.026323 -1.896317 1.467866
 C 0.068034 -2.124295 3.597559
 H -1.008698 -2.257929 3.677194
 H 0.468124 -2.292095 5.708204
 H 4.213774 0.491178 1.828333
 C 6.221196 0.173290 1.121533
 H 6.620243 1.027865 1.664112
 C 7.053638 -0.592164 0.310959
 H 8.109633 -0.342553 0.224825
 C 6.534766 -1.674783 -0.390945
 H 7.183107 -2.277321 -1.024212
 H 4.781379 -2.833014 -0.848386

^{cy}Y₂Sn

E = -3818.37212370
 Sn 0.074030 0.711870 1.416159
 O 0.960641 -1.578327 1.864308
 C 1.842314 0.028909 0.194377
 O -0.576970 2.184960 -0.484527
 C -1.708782 0.075543 0.148982
 S 2.185269 -1.382863 0.991458
 P 2.674452 0.560330 -1.199660
 S -1.865560 1.446354 -0.779211
 P -2.804604 -1.231378 0.217705
 O 2.635920 -2.539801 0.193503
 C 3.510710 -1.157538 2.182179
 C 4.463051 0.118679 -1.130415
 C 2.037627 -0.150195 -2.775859
 C 2.401721 2.367220 -1.355823
 O -2.235672 1.290135 -2.197903

C -3.123016 2.541782 -0.123903
 C -1.850624 -2.779679 0.458214
 C -3.880996 -1.257639 -1.273418
 C -3.960989 -1.159012 1.660072
 C 4.566269 -2.055531 2.214364
 C 3.477261 -0.074248 3.056432
 C 5.211833 0.945759 -0.084036
 H 4.422202 -0.925927 -0.776193
 C 5.224913 0.135016 -2.457017
 C 0.559105 0.183148 -2.951791
 H 2.619640 0.315808 -3.587477
 C 2.228222 -1.666582 -2.823979
 C 2.555266 3.168831 -0.063377
 H 1.327052 2.392310 -1.582662
 C 3.151817 3.041936 -2.502334
 C -4.346390 2.654961 -0.767697
 C -2.911918 3.156228 1.107900
 C -2.728648 -4.026894 0.556712
 H -1.362861 -2.605370 1.430912
 C -0.709772 -2.975209 -0.538591
 C -3.098355 -1.652846 -2.523828
 H -4.124963 -0.187844 -1.374846
 C -5.202774 -2.020471 -1.211416
 C -4.796425 0.117465 1.589895
 H -4.624738 -2.034039 1.581371
 C -3.198229 -1.229521 2.983294
 H 4.559827 -2.898407 1.527633
 C 5.607775 -1.853334 3.116939
 H 2.645693 0.629574 3.018096
 C 4.519133 0.115408 3.948235
 C 6.617222 0.400178 0.124843
 H 5.283127 1.983690 -0.441894
 H 4.655201 0.970274 0.859370
 C 6.640998 -0.396415 -2.257442
 H 4.711961 -0.463170 -3.217533
 H 5.272687 1.162691 -2.843385
 C 0.005451 -0.391292 -4.246969

H 0.015177 -0.238242 -2.092169
 H 0.369757 1.260445 -2.925524
 C 1.693158 -2.244745 -4.127929
 H 3.279612 -1.946849 -2.684079
 H 1.697216 -2.106602 -1.971256
 C 2.003757 4.573635 -0.272048
 H 2.026228 2.671360 0.756570
 H 3.611553 3.224985 0.232993
 C 2.619862 4.455904 -2.710340
 H 4.224555 3.090852 -2.261318
 H 3.061413 2.465777 -3.432107
 C -5.384896 3.340419 -0.143627
 H -4.472032 2.202638 -1.749159
 H -1.940267 3.071987 1.593334
 C -3.951414 3.842396 1.714058
 H -3.220826 -4.194470 -0.413443
 H -3.527187 -3.891961 1.298127
 C -1.895297 -5.253926 0.907260
 H -0.089122 -2.071473 -0.561481
 H -1.110160 -3.120500 -1.548675
 C 0.112101 -4.197683 -0.153634
 H -2.128957 -1.146701 -2.527406
 H -2.916126 -2.737546 -2.499423
 C -3.898335 -1.309111 -3.768128
 H -5.010657 -3.101147 -1.157903
 H -5.779987 -1.757342 -0.317450
 C -6.021010 -1.704513 -2.461616
 H -4.106446 0.967855 1.578203
 H -5.364106 0.168209 0.652343
 C -5.727189 0.268174 2.783608
 C -4.124572 -1.054021 4.180822
 H -2.661309 -2.181960 3.070613
 H -2.434687 -0.435420 2.989669
 H 6.440829 -2.555072 3.138926
 C 5.606641 -0.767903 3.990728
 H 4.494692 0.967555 4.626675
 C 7.393566 0.378444 -1.184297

H 6.545829 -0.618936 0.530504
 H 7.144022 0.998597 0.879557
 H 6.580988 -1.455549 -1.964475
 H 7.187783 -0.366855 -3.208905
 H -1.060248 -0.139099 -4.317319
 H 0.500606 0.096963 -5.101063
 C 0.225759 -1.893883 -4.330845
 H 1.832735 -3.333737 -4.132461
 H 2.281887 -1.851260 -4.971745
 H 2.110754 5.159508 0.650200
 H 0.926231 4.492451 -0.475532
 C 2.700284 5.276396 -1.429903
 H 3.172421 4.950346 -3.520051
 H 1.571236 4.393177 -3.036544
 H -6.349954 3.421267 -0.642576
 C -5.213102 3.927915 1.109725
 H -3.787703 4.318013 2.680538
 H -1.480811 -5.124208 1.918150
 H -2.539130 -6.142717 0.942380
 C -0.752352 -5.446402 -0.078379
 H 0.937114 -4.324379 -0.864401
 H 0.586004 -4.009903 0.817993
 H -4.023222 -0.216900 -3.806807
 H -3.335324 -1.592987 -4.667136
 C -5.254633 -2.002793 -3.745047
 H -6.966223 -2.262559 -2.441694
 H -6.289148 -0.636960 -2.440411
 H -6.476794 -0.538353 2.779409
 H -6.279994 1.213239 2.694280
 C -4.941432 0.226181 4.085229
 H -4.809346 -1.914488 4.234353
 H -3.535055 -1.068977 5.106387
 C 6.733729 -0.539635 4.952517
 H 7.548573 1.412682 -1.529157
 H 8.392519 -0.051265 -1.034323
 H -0.137006 -2.287636 -5.289813
 H -0.367190 -2.384252 -3.545276

H 2.268853 6.272971 -1.590625
H 3.759287 5.434392 -1.171473
C -6.345157 4.621882 1.805433
H -1.168355 -5.670325 -1.073783
H -0.147233 -6.316336 0.208018
H -5.854295 -1.712955 -4.617620
H -5.100270 -3.090166 -3.822968
H -4.263703 1.093002 4.120105
H -5.613244 0.317264 4.948569
H 6.371450 -0.504384 5.987809
H 7.234620 0.417222 4.755820
H 7.485581 -1.332481 4.884646
H -6.722850 4.013309 2.638907
H -7.182602 4.806830 1.124856
H -6.028131 5.582722 2.227821

(Y_{Ph})₂Sn

E = -2619.38479815
P 3.163701 0.240127 0.002554
P -3.163835 0.344390 -0.014992
C 1.718834 -0.360411 -0.669916
C 1.629782 -1.791833 -0.949426
C 2.514771 -2.758517 -0.425251
H 3.304113 -2.453200 0.259196
C 2.402114 -4.106702 -0.737060
H 3.110999 -4.813139 -0.306823
C 1.386217 -4.558727 -1.570763
H 1.287005 -5.616807 -1.804089
C 0.490034 -3.628927 -2.093066
H -0.323453 -3.959122 -2.737353
C 0.618234 -2.282013 -1.800297
H -0.089992 -1.569093 -2.222122
C 3.459141 -0.219035 1.759736
C 4.525967 -1.001813 2.202178
H 5.305421 -1.307404 1.507469
C 4.588203 -1.415324 3.530043
H 5.419964 -2.033617 3.862341

C 3.591751 -1.047851 4.426036
 H 3.641817 -1.375183 5.462740
 C 2.520098 -0.272107 3.990212
 H 1.729107 0.008376 4.683005
 C 2.449399 0.126595 2.663080
 H 1.592522 0.704269 2.309472
 C 3.197016 2.060594 -0.021918
 C 3.507697 2.838862 1.091978
 H 3.691659 2.369115 2.055169
 C 3.576727 4.224598 0.974958
 H 3.810667 4.827437 1.850314
 C 3.348625 4.834717 -0.251922
 H 3.402033 5.918315 -0.339581
 C 3.058646 4.058624 -1.371471
 H 2.884469 4.532558 -2.335251
 C 2.987394 2.678413 -1.259689
 H 2.756211 2.062722 -2.127734
 C 4.707877 -0.177419 -0.881185
 C 4.650888 -0.886109 -2.081057
 H 3.691658 -1.248629 -2.443007
 C 5.816551 -1.118141 -2.803920
 H 5.769070 -1.678742 -3.735381
 C 7.035680 -0.634567 -2.341691
 H 7.945137 -0.816822 -2.911371
 C 7.092738 0.093304 -1.156210
 H 8.042866 0.487922 -0.801217
 C 5.931687 0.324969 -0.429934
 H 5.972291 0.910552 0.488599
 C -1.591292 -0.298165 0.166520
 C -1.481968 -1.729183 0.469802
 C -0.472392 -2.192513 1.332892
 H 0.219128 -1.466790 1.758119
 C -0.322792 -3.539085 1.621944
 H 0.486436 -3.856549 2.277759
 C -1.193304 -4.482784 1.081221
 H -1.075263 -5.539692 1.312018
 C -2.203089 -4.053171 0.229062

H -2.885140 -4.775132 -0.218587
 C -2.335034 -2.704917 -0.078841
 H -3.096173 -2.400996 -0.796360
 C -4.372373 -0.338777 1.180114
 C -4.361457 0.127224 2.496868
 H -3.705059 0.945991 2.779488
 C -5.189320 -0.443630 3.454736
 H -5.173668 -0.065504 4.475020
 C -6.032917 -1.494912 3.111270
 H -6.678888 -1.944902 3.862777
 C -6.045676 -1.970400 1.805537
 H -6.697140 -2.797458 1.530400
 C -5.220970 -1.396989 0.844523
 H -5.241339 -1.779025 -0.173001
 C -3.146360 2.153631 0.241922
 C -3.825788 3.040748 -0.593087
 H -4.368406 2.671679 -1.458937
 C -3.793994 4.408289 -0.338333
 H -4.319061 5.090682 -1.003829
 C -3.089172 4.901615 0.752556
 H -3.065296 5.972044 0.948142
 C -2.404412 4.024180 1.587524
 H -1.837220 4.404379 2.434720
 C -2.427103 2.660645 1.330742
 H -1.863251 1.972359 1.957630
 C -4.003883 0.120835 -1.635348
 C -5.368494 0.362500 -1.825203
 H -5.986440 0.678702 -0.985341
 C -5.937667 0.195605 -3.081433
 H -6.999615 0.386106 -3.225381
 C -5.151029 -0.218564 -4.154164
 H -5.600301 -0.352869 -5.136465
 C -3.795883 -0.466885 -3.969003
 H -3.180792 -0.798258 -4.803309
 C -3.224848 -0.297893 -2.711713
 H -2.166728 -0.499331 -2.541936
 Sn 0.028071 1.046915 -0.444041

(Y_{CN})₂Sn

E = -2341.31743746

C -3.525959 -1.213456 1.443081

C -4.620702 -0.959514 2.276493

C -4.852852 -1.769969 3.380437

H -5.701716 -1.569583 4.031566

C -3.990501 -2.828074 3.659469

H -4.170030 -3.456813 4.529854

C -2.893514 -3.070541 2.840652

H -2.199837 -3.877950 3.064673

C -2.654904 -2.264953 1.731925

H -1.771839 -2.441216 1.118939

H -5.279626 -0.115166 2.074087

P -3.145376 -0.177848 -0.003592

C 1.457201 -0.310365 0.419845

P 3.105138 -0.163817 0.008963

C -1.531818 -0.256820 -0.531697

C 1.034581 -1.548059 0.919064

C -1.139806 -1.391286 -1.253002

C -4.050764 2.439180 -0.373331

H -4.363409 2.111029 -1.362981

N 0.670049 -2.561707 1.371897

C -3.238999 3.276815 2.157880

H -2.919699 3.603243 3.145453

N -0.777737 -2.295506 -1.898022

C -3.496000 1.521968 0.519644

C -4.202149 3.768303 0.002814

H -4.639150 4.480529 -0.694108

C -3.795759 4.187104 1.266293

H -3.915130 5.228960 1.557452

C -3.088347 1.944589 1.788541

H -2.666887 1.225931 2.490415

C -4.352522 -0.613727 -1.293985

C -3.965010 -0.444965 -2.625627

H -2.957006 -0.098446 -2.846357

C -4.856063 -0.739470 -3.651137

H -4.546666 -0.614821 -4.686811
 C -6.132021 -1.205344 -3.353723
 H -6.826799 -1.440646 -4.157845
 C -6.517011 -1.385039 -2.028490
 H -7.510580 -1.762089 -1.794372
 C 3.396841 1.532959 -0.550375
 C -5.630111 -1.094710 -0.999351
 H -5.930401 -1.258169 0.032754
 C 3.568197 1.838650 -1.900107
 H 3.601857 1.038648 -2.637178
 C 3.690885 3.166262 -2.298275
 H 3.821696 3.403449 -3.352069
 C 3.643502 4.185254 -1.353749
 H 3.739149 5.222539 -1.669033
 C 3.471852 3.882526 -0.005668
 H 3.430584 4.680302 0.732937
 C 3.345965 2.560105 0.397662
 H 3.204949 2.316903 1.450046
 H 4.700684 -2.515066 4.025053
 H 3.094253 -2.028357 2.217599
 C 4.306203 -0.462486 1.348311
 C 5.499075 0.259166 1.447400
 H 5.724355 1.045462 0.728631
 C 6.399056 -0.018277 2.471036
 H 7.324614 0.549562 2.544752
 C 6.114457 -1.015411 3.397320
 H 6.819174 -1.230792 4.198351
 C 4.927556 -1.735263 3.300905
 C 4.022105 -1.463293 2.282814
 C 3.626253 -1.272710 -1.333943
 C 2.646655 -1.997897 -2.013094
 H 1.596932 -1.920165 -1.731952
 C 3.017951 -2.842629 -3.055327
 H 2.247006 -3.409988 -3.572362
 C 4.353561 -2.958555 -3.420392
 H 4.639987 -3.620411 -4.235934
 C 5.332070 -2.236119 -2.738993

H 6.378880 -2.332955 -3.020699
 C 4.972393 -1.398974 -1.692146
 H 5.739238 -0.847951 -1.149060
 Sn -0.021130 1.247392 -0.018091

(^{Me}Y_{SO₂Ph})₂Pb

E = -2565.49140813
 O -1.766586 1.636112 0.428517
 O 1.767135 -1.635664 0.431791
 C 1.551888 0.823480 -0.073403
 C -1.552289 -0.824029 -0.072104
 S -2.370051 0.564505 -0.446646
 O -2.487906 0.901599 -1.887027
 C -4.081406 0.468289 0.095295
 P 1.524201 2.074127 -1.223095
 S 2.370163 -0.565444 -0.445346
 O 2.488131 -0.905202 -1.885112
 C 4.081553 -0.467515 0.096242
 P -1.524176 -2.076534 -1.219738
 C -5.056159 1.137523 -0.635844
 C -6.378260 1.087663 -0.207340
 C -4.406781 -0.247301 1.241924
 C -6.715126 0.377548 0.940823
 C -5.730022 -0.289799 1.664316
 C 5.056407 -1.138280 -0.633384
 C 4.406878 0.250958 1.241066
 C 5.730165 0.294833 1.663206
 C 6.715353 -0.374029 0.941243
 C 6.378536 -1.087037 -0.205151
 H -4.763202 1.674326 -1.534801
 H -7.150267 1.604022 -0.774968
 H -3.622177 -0.781110 1.775738
 H -5.995405 -0.849760 2.559157
 H 4.763495 -1.677297 -1.531029
 H 3.622179 0.785851 1.773661
 H 5.995502 0.857054 2.556641
 H 7.150614 -1.604575 -0.771610

C -3.195947 -2.541939 -1.758899
 H -3.173953 -3.352907 -2.495466
 H -3.789141 -2.836541 -0.886768
 H -3.650974 -1.650345 -2.207720
 C -0.626706 -1.741828 -2.754779
 H -1.090223 -0.863061 -3.215519
 H 0.418497 -1.517461 -2.507690
 H -0.675923 -2.598329 -3.437670
 C 0.626944 1.736938 -2.757716
 H 1.090580 0.857438 -3.216960
 H -0.418283 1.512865 -2.510391
 H 0.676127 2.592333 -3.441992
 C 3.196207 2.538209 -1.762628
 H 3.651130 1.645638 -2.209621
 H 3.174644 3.347827 -2.500684
 H 3.789222 2.834185 -0.890840
 C 0.742582 3.527847 -0.498437
 H -0.274874 3.238361 -0.207506
 H 1.304067 3.836819 0.388828
 H 0.707207 4.346143 -1.225581
 Pb -0.000234 0.000965 1.500166
 H -7.751458 0.338512 1.271185
 H 7.751712 -0.333926 1.271392
 C -0.742504 -3.528981 -0.492587
 H 0.274839 -3.238970 -0.201781
 H -1.304218 -3.836822 0.394927
 H -0.706784 -4.348280 -1.218587

Y₂Pb

E = -3796.65092299
 Pb 0.218018 -0.062671 -1.988873
 C 1.945017 0.145799 -0.412388
 C -1.619722 -0.252676 -0.425649
 O -0.865304 2.039796 -1.081456
 O 1.662294 -2.197408 -1.283421
 S -1.793585 1.374644 -0.096704
 S 2.514034 -1.418109 -0.319888

P 2.388358 1.278346 0.776314
 C 1.719990 2.872938 0.266134
 C 1.787955 0.927103 2.449754
 C 4.196437 1.417115 0.955638
 O 2.623352 -2.003643 1.035106
 C 4.195449 -1.503826 -0.942633
 O -1.653548 1.818528 1.301892
 C -3.426650 1.929801 -0.587331
 C 4.702899 -0.511159 -1.771226
 C 5.007562 -2.543542 -0.507635
 P -2.585058 -1.417067 0.329155
 C -3.206897 -2.620142 -0.888792
 C -4.051974 -0.709299 1.133948
 C -1.790855 -2.450250 1.601074
 C 6.036675 -0.552658 -2.149760
 C 6.878370 -1.581304 -1.717089
 C 0.677162 0.097103 2.569067
 C 2.403539 1.449112 3.589848
 C 8.329607 -1.586349 -2.092901
 C 6.338666 -2.579127 -0.902604
 C 0.186352 -0.226494 3.827746
 C 0.797061 0.292412 4.963936
 C 1.901804 1.133552 4.846312
 C 0.877785 3.598130 1.104126
 C 0.243103 4.737183 0.622210
 C 0.456529 5.157228 -0.683387
 C 1.308979 4.440782 -1.519178
 C 4.870910 0.354855 1.569295
 C 6.259021 0.315419 1.556929
 C -4.188556 2.687231 0.287881
 C -3.921059 1.582855 -1.839987
 C -5.471502 3.072568 -0.086300
 C -6.002906 2.713830 -1.324591
 C -5.201336 1.971679 -2.200383
 C -7.406753 3.083470 -1.699105
 C -5.298374 -0.730618 0.505480
 C -3.894258 -0.035256 2.349181

C -4.987431 0.585119 2.940232
 C -6.232036 0.550540 2.319157
 C -6.384916 -0.099805 1.099213
 C -2.468072 -2.919295 2.731655
 C -0.451692 -2.786284 1.406069
 C -1.795565 -3.701248 3.664429
 C -0.451763 -4.014115 3.475070
 C 0.220021 -3.557601 2.346240
 C -3.239839 -2.268661 -2.237374
 C -3.692851 -3.865795 -0.484995
 C -4.214235 -4.745453 -1.424858
 C -4.246929 -4.390562 -2.770825
 C -3.757438 -3.154130 -3.176762
 C 6.983011 1.335740 0.947544
 C 6.315974 2.402412 0.354911
 C 4.925651 2.444335 0.355672
 H -3.300601 1.001603 -2.519405
 H -2.846910 -1.298585 -2.534211
 H 4.055507 0.310435 -2.072134
 H 4.595961 -3.295173 0.161537
 H 6.438382 0.238711 -2.781615
 H 0.209482 -0.289819 1.668179
 H 3.279815 2.088994 3.494705
 H 8.876642 -0.806216 -1.545474
 H 8.468250 -1.385084 -3.161889
 H 8.802183 -2.546716 -1.862054
 H 6.978733 -3.390795 -0.558300
 H -0.664045 -0.901036 3.914664
 H 0.416718 0.034794 5.951021
 H 2.380341 1.534753 5.737734
 H 0.671899 3.244599 2.110772
 H -0.440229 5.283730 1.268519
 H -0.053852 6.041826 -1.059904
 H 1.468249 4.764495 -2.545804
 H 4.301456 -0.457875 2.019019
 H 6.776792 -0.523509 2.017603
 H -3.770998 2.945285 1.257910

H -6.077232 3.656210 0.606180
H -5.591387 1.695965 -3.179594
H -8.098327 2.254871 -1.490155
H -7.492220 3.312591 -2.767411
H -7.758317 3.952423 -1.132634
H -5.417297 -1.237588 -0.449992
H -2.913441 0.021728 2.817067
H -4.862387 1.106429 3.887150
H -7.085254 1.041089 2.784176
H -7.354546 -0.116781 0.605418
H -3.514656 -2.666717 2.890552
H 0.085162 -2.424754 0.531752
H -2.321706 -4.059430 4.547497
H 0.075025 -4.611536 4.217121
H 1.275400 -3.763226 2.187774
H -3.653724 -4.151561 0.564538
H -4.589374 -5.716281 -1.107183
H -4.649670 -5.084738 -3.506080
H -3.774270 -2.878160 -4.229300
H 8.071043 1.300197 0.937089
H 6.879311 3.208061 -0.112253
H 4.408799 3.279561 -0.111925
C 1.932181 3.294682 -1.050568
H 2.562193 2.700265 -1.711181

^{cy}Y₂Pb

E = -3818.41797652
O -1.116353 1.180916 2.214911
O 0.673182 -2.009357 -1.076467
C 1.775296 -0.077830 0.069866
C -1.911541 0.003213 0.152150
S -2.290348 1.172239 1.260671
O -2.739166 2.481435 0.745449
C -3.659174 0.641849 2.299605
P 2.843204 1.196691 0.438354
C 3.895846 1.623619 -1.009343
C 4.035507 0.808201 1.801909

C 1.862924 2.615207 1.073201
S 1.931984 -1.177507 -1.164153
O 2.285040 -0.662276 -2.500967
C 3.228471 -2.366496 -0.809992
P -2.700635 -0.182959 -1.348284
C -4.497239 0.227418 -1.249889
C -2.028368 0.871085 -2.700962
C -2.386629 -1.905235 -1.893607
C -4.738801 1.487902 2.499493
C -5.816988 1.052624 3.266858
C 3.081738 2.293084 -2.113618
C 5.200440 2.381955 -0.774504
C -3.642054 -0.625207 2.877659
C 3.309851 0.539760 3.119874
C 4.896672 -0.390575 1.410749
C -5.285064 -0.822446 -0.464988
C -5.196872 0.520591 -2.578679
C 4.273590 0.112744 4.220739
C 0.698604 3.032152 0.175038
C 2.723804 3.815365 1.467129
C -5.830491 -0.216575 3.841638
C -4.719336 -1.046463 3.638287
C -6.996010 -0.692646 4.655624
C 3.866849 2.294361 -3.413624
C -2.205978 2.356725 -2.386070
C -0.552556 0.569906 -2.944117
C -0.130231 4.112853 0.856668
C -6.705121 -0.341720 -0.201819
C 0.721557 5.315023 1.232890
C -2.660959 -2.986376 -0.847667
C -2.986336 -2.298229 -3.241701
C 6.002274 2.411757 -2.074144
C 5.864630 -0.793792 2.512912
C 4.441912 -2.282293 -1.476671
C 3.060260 -3.273994 0.233268
C 4.129161 -4.055820 0.639284
C 5.380584 -3.951419 0.016719

C 5.116858 -1.083774 3.805266
 C 1.881014 4.899842 2.126167
 C 5.510712 -3.068325 -1.054725
 C -1.662630 3.221770 -3.516012
 C -2.036898 -4.299538 -1.303370
 C 5.204937 2.999594 -3.232768
 C 6.542172 -4.765905 0.501063
 C -2.393290 -3.625774 -3.703299
 C -6.630883 0.980317 -2.334520
 C -2.584025 -4.720028 -2.661470
 C -7.420822 -0.023946 -1.506956
 C 0.010026 1.430055 -4.066182
 C -0.198384 2.912563 -3.795553
 H 4.161372 0.618644 -1.375093
 H 4.678634 1.693432 1.923054
 H 1.399907 2.194426 1.981012
 H -4.482649 1.158670 -0.657514
 H -2.604714 0.622582 -3.606495
 H -1.292319 -1.876642 -2.001166
 H -4.721517 2.475250 2.044207
 H -6.668663 1.715137 3.417623
 H 2.127589 1.772113 -2.231335
 H 2.869713 3.331547 -1.818745
 H 4.985118 3.409246 -0.448971
 H 5.800919 1.918831 0.017149
 H -2.795695 -1.289390 2.705694
 H 2.752403 1.427213 3.443558
 H 2.567725 -0.256894 2.952675
 H 4.225809 -1.232833 1.210029
 H 5.438561 -0.199770 0.476025
 H -5.330782 -1.745573 -1.061698
 H -4.773435 -1.070954 0.471420
 H -4.661435 1.287213 -3.148269
 H -5.202648 -0.387205 -3.199488
 H 4.939306 0.955985 4.460990
 H 3.711549 -0.108661 5.137131
 H 0.084879 2.153538 -0.056913

H 1.077761 3.422010 -0.776921
 H 3.539652 3.515759 2.137812
 H 3.193079 4.228954 0.561470
 H -4.706072 -2.041446 4.082106
 H -7.773973 0.074162 4.728196
 H -7.447832 -1.590484 4.214344
 H -6.686878 -0.957707 5.674838
 H 4.018786 1.250493 -3.725803
 H 3.279878 2.777285 -4.206304
 H -1.675156 2.577074 -1.451639
 H -3.255818 2.603606 -2.184048
 H -0.375774 -0.485802 -3.174424
 H -0.006718 0.767472 -2.008472
 H -0.961254 4.403014 0.203534
 H -0.596286 3.685756 1.753527
 H -6.665775 0.558117 0.428387
 H -7.257393 -1.098094 0.371118
 H 1.121476 5.786573 0.320848
 H 0.110173 6.076862 1.733647
 H -3.741658 -3.125110 -0.711157
 H -2.263277 -2.681175 0.127123
 H -4.078425 -2.399233 -3.144841
 H -2.804355 -1.524846 -3.998663
 H 6.296276 1.380748 -2.324357
 H 6.934022 2.973394 -1.926773
 H 6.435869 -1.674363 2.189274
 H 6.595231 0.012116 2.683499
 H 4.535988 -1.598591 -2.317637
 H 2.096273 -3.348515 0.734396
 H 3.997251 -4.760657 1.459675
 H 4.461055 -1.954272 3.649310
 H 5.815554 -1.356652 4.606727
 H 1.483766 4.512966 3.076529
 H 2.513755 5.761626 2.376593
 H 6.467287 -2.993955 -1.570786
 H -2.253840 3.044642 -4.428459
 H -1.790532 4.282570 -3.263496

H -2.222548 -5.084044 -0.557921
H -0.947393 -4.165527 -1.366313
H 5.021273 4.066791 -3.033523
H 5.795804 2.955555 -4.156880
H 6.271286 -5.822592 0.614314
H 7.391154 -4.703586 -0.187337
H 6.884300 -4.415408 1.484549
H -2.839503 -3.924752 -4.660848
H -1.318137 -3.483424 -3.886248
H -6.603877 1.944033 -1.803776
H -7.130407 1.167346 -3.294042
H -2.106507 -5.649624 -2.997489
H -3.658861 -4.940234 -2.563924
H -7.543117 -0.952185 -2.086610
H -8.432322 0.355305 -1.311692
H 1.073643 1.193207 -4.194379
H -0.487289 1.160984 -5.011421
H 0.395520 3.201767 -2.916848
H 0.171122 3.516139 -4.635604
Pb -0.083125 -1.012685 1.222517

(Y_{Ph})₂Pb

E = -2619.43193997
P 3.227544 0.151323 0.037300
P -3.225944 0.246964 0.033487
C 1.779395 -0.416325 -0.647032
C 1.664747 -1.836179 -0.961821
C 2.554876 -2.827391 -0.491842
H 3.370719 -2.549223 0.173079
C 2.415962 -4.165612 -0.834029
H 3.129134 -4.890724 -0.443669
C 1.371608 -4.584673 -1.649805
H 1.253488 -5.635048 -1.907800
C 0.472249 -3.631148 -2.122057
H -0.362882 -3.934750 -2.751554
C 0.622939 -2.294568 -1.795186
H -0.089451 -1.563636 -2.177086

C 3.582422 -0.416887 1.753559
 C 4.712445 -1.147961 2.123206
 H 5.498098 -1.345541 1.397424
 C 4.831645 -1.648915 3.416393
 H 5.713645 -2.224655 3.690672
 C 3.828525 -1.423477 4.351440
 H 3.923394 -1.819874 5.360549
 C 2.694153 -0.702151 3.988514
 H 1.897366 -0.533688 4.710375
 C 2.568452 -0.214820 2.695001
 H 1.664406 0.320228 2.399162
 C 3.228267 1.970274 0.127876
 C 3.396846 2.688534 1.310570
 H 3.526761 2.166149 2.255082
 C 3.394578 4.080580 1.285763
 H 3.518049 4.635439 2.213802
 C 3.235476 4.758477 0.083501
 H 3.232374 5.846790 0.068048
 C 3.089029 4.044647 -1.103190
 H 2.972956 4.572180 -2.047769
 C 3.090328 2.657515 -1.083495
 H 2.973584 2.090494 -2.006150
 C 4.760692 -0.179987 -0.904023
 C 4.694827 -0.875914 -2.110775
 H 3.739727 -1.272606 -2.447308
 C 5.845316 -1.050192 -2.873501
 H 5.791327 -1.601025 -3.810459
 C 7.057283 -0.520545 -2.444128
 H 7.954559 -0.656743 -3.045174
 C 7.122233 0.194691 -1.251216
 H 8.066178 0.624727 -0.921646
 C 5.976684 0.367625 -0.484996
 H 6.022348 0.940414 0.441395
 C -1.654875 -0.381341 0.228198
 C -1.516455 -1.815624 0.487354
 C -0.476572 -2.288548 1.310108
 H 0.217376 -1.565028 1.733398

C -0.302677 -3.638368 1.566654
 H 0.528370 -3.958450 2.193314
 C -1.174660 -4.581773 1.027390
 H -1.037330 -5.641972 1.230670
 C -2.211171 -4.145655 0.211299
 H -2.895464 -4.866124 -0.235458
 C -2.370664 -2.792583 -0.060591
 H -3.156573 -2.485581 -0.749074
 C -4.457838 -0.442791 1.203987
 C -4.470195 0.011127 2.525108
 H -3.820272 0.828359 2.826404
 C -5.313147 -0.568987 3.464157
 H -5.315566 -0.199160 4.487636
 C -6.148544 -1.619191 3.097991
 H -6.805882 -2.076936 3.834826
 C -6.138484 -2.083197 1.788123
 H -6.783767 -2.908957 1.494984
 C -5.299526 -1.499307 0.845831
 H -5.304300 -1.871214 -0.175726
 C -3.209556 2.055688 0.302298
 C -3.853593 2.954294 -0.548836
 H -4.377709 2.593980 -1.429655
 C -3.809420 4.320992 -0.291020
 H -4.306431 5.011545 -0.969570
 C -3.127592 4.803521 0.819354
 H -3.094350 5.873253 1.017306
 C -2.478585 3.915280 1.671211
 H -1.931183 4.286244 2.535451
 C -2.514664 2.552013 1.412120
 H -1.978602 1.854575 2.053472
 C -4.054184 0.037534 -1.597315
 C -5.412367 0.301601 -1.801958
 H -6.033224 0.631464 -0.969376
 C -5.972062 0.138861 -3.063011
 H -7.028887 0.347902 -3.218733
 C -5.182548 -0.295894 -4.125559
 H -5.624505 -0.427447 -5.111564

C -3.834441 -0.569300 -3.925212
H -3.217889 -0.918785 -4.751054
C -3.272659 -0.402931 -2.663170
H -2.220772 -0.625488 -2.480699
Pb 0.023905 1.051567 -0.379375

(Y_{CN})₂Pb

E = -2341.36631496
C -3.526702 -1.314866 1.459500
C -4.616811 -1.060472 2.298956
C -4.828438 -1.854223 3.419021
H -5.673921 -1.653304 4.074428
C -3.949669 -2.895908 3.708797
H -4.112854 -3.511089 4.592017
C -2.857138 -3.138531 2.884153
H -2.149410 -3.931527 3.115627
C -2.639772 -2.349827 1.758941
H -1.760111 -2.526651 1.141361
H -5.288540 -0.228189 2.088668
P -3.167185 -0.297672 -0.006838
C 1.502102 -0.410812 0.473650
P 3.134879 -0.284037 0.019378
C -1.564747 -0.358478 -0.556218
C 1.055034 -1.634536 0.979667
C -1.145462 -1.498122 -1.249155
C -4.096162 2.309162 -0.401963
H -4.407432 1.967188 -1.387437
N 0.668219 -2.636204 1.441913
C -3.289209 3.181768 2.118809
H -2.973310 3.521228 3.103152
N -0.760802 -2.409399 -1.871643
C -3.533446 1.405719 0.500041
C -4.257340 3.641602 -0.040785
H -4.700820 4.342376 -0.745238
C -3.852707 4.078225 1.217223
H -3.979791 5.122373 1.496697
C -3.130203 1.846075 1.764509

H -2.705161 1.137808 2.474820
 C -4.391854 -0.760507 -1.273970
 C -4.019593 -0.613003 -2.612455
 H -3.015457 -0.265611 -2.849062
 C -4.919456 -0.929087 -3.623746
 H -4.621259 -0.820841 -4.664575
 C -6.190085 -1.395583 -3.305331
 H -6.892122 -1.647677 -4.097996
 C -6.560145 -1.554687 -1.973181
 H -7.549351 -1.932541 -1.722327
 C 3.427269 1.413689 -0.542413
 C -5.663984 -1.242955 -0.958400
 H -5.952841 -1.391058 0.079225
 C 3.521077 1.726955 -1.898287
 H 3.505019 0.930775 -2.640258
 C 3.630319 3.056188 -2.295914
 H 3.700430 3.298613 -3.354318
 C 3.646700 4.070003 -1.344720
 H 3.731729 5.108449 -1.659241
 C 3.554331 3.759886 0.009638
 H 3.566016 4.553437 0.753978
 C 3.442778 2.435635 0.412292
 H 3.364993 2.186736 1.469921
 H 4.785638 -2.597258 4.034701
 H 3.137140 -2.095934 2.267015
 C 4.371225 -0.591713 1.325327
 C 5.588549 0.093575 1.371612
 H 5.815171 0.857442 0.629212
 C 6.511560 -0.190435 2.372507
 H 7.456292 0.349010 2.405074
 C 6.225386 -1.158281 3.329091
 H 6.948246 -1.379233 4.112249
 C 5.013702 -1.840994 3.286343
 C 4.084898 -1.561057 2.291356
 C 3.621792 -1.386869 -1.343432
 C 2.623369 -2.116981 -1.988557
 H 1.583493 -2.045656 -1.672053

C 2.961113 -2.958088 -3.045094
H 2.173851 -3.527578 -3.534532
C 4.283181 -3.065438 -3.458459
H 4.544157 -3.723937 -4.285219
C 5.281170 -2.337583 -2.811624
H 6.317615 -2.426996 -3.131659
C 4.954692 -1.504091 -1.751048
H 5.737876 -0.948782 -1.236602
Pb -0.012885 1.214038 -0.013143

3.15 Untersuchungen zu weiteren ylidsubstituierten Tetrelverbindungen

3.15.1 Energien der Verbindungen

Tabelle 3.118. Energien der ylidsubstituierten Elementchloriddimere und verwandter Verbindungen.

Verbindung	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	E(PCM)	$\Delta G(\text{PCM})$ [hartree]	$\Delta G(\text{PCM})$ [kJ/mol]
107a^{Ge}	-8892.24737179	1.323003	1.144771	-8892.25706278	–	–
107b^{Ge}	-8892.27755833	1.323466	1.148761	-8892.28720095	-0.026148	-68.652
107c^{Ge}	-8892.23902140	1.324133	1.145467	-8892.24958397	0.008175	21.462
107d^{Ge}	-8892.25124484	1.323057	1.147097	-8892.26267838	-0.003290	-8.636
107e^{Ge}	-8892.27475103	1.323532	1.149772	-8892.28338626	-0.021322	-55.982
107f^{Ge}	-8892.23700441	1.322967	1.149584	-8892.24574550	0.016130	42.350
107a^{Sn}	-4743.04000668	1.323067	1.146404	-4743.0499451	–	–
107b^{Sn}	-4743.03508401	1.322371	1.143393	-4743.0460768	-0.000857	-2.251
107c^{Sn}	-4743.01448532	1.322765	1.140225	-4743.0251469	0.017762	46.634
107d^{Sn}	-4743.00987714	1.322558	1.142533	-4743.0220339	0.023183	60.867
107e^{Sn}	-4743.04261415	1.323040	1.146776	-4743.0519941	-0.002534	-6.654
107f^{Sn}	-4743.02037103	1.322336	1.143960	-4743.0304069	0.016237	42.630
108	-5084.18770936	0.392157	0.307273	–	–	–
109f	-5548.34833675	0.587108	0.479221	–	–	–
110	-6453.72159711	1.216888	1.054843	–	–	–
111	-6795.91590497	0.895647	0.732740	–	–	–
112⁺	-9845.74258788	1.332986	1.123628	–	–	–

3.15.2 Ergebnisse der NBO-Analysen

Tabelle 3.119. Ergebnisse der NBO-Analysen zu den ylidsubstituierten Elementchloriddimeren und verwandten Verbindungen.

		107a^{Ge}	108	109	110	111	112⁺
WBI	Ge ^A — Ge ^B /Sn	0.8290	1.5281	0.8627	1.6676	0.6452	0.8607
	Ge ^A — C ^{GeA}	0.7068	0.7721/ 0.8070	0.7762/ 0.7762/ 0.7763	—	0.5121/ 0.7631/ 0.7089	0.7645/ 0.7885
	Ge ^B — C ^{Ge2}	0.6305	0.8100/ 0.7813	0.7761/ 0.7763/ 0.7763	—	—	0.7048
	Ge—O	0.1954/ 0.3121	—	—	—	0.0112/ 0.0160/ 0.0086	0.3542/ 0.2859
Natürliche Ladungen	Ge ^A	1.25887	0.78173	1.24444	0.26266	0.92517	1.32014
	Ge ^B /Sn	0.50782	0.84758	1.24454	-0.14200	0.87908	0.65312
	C ^{GeA}	-1.49519	-0.45955/ -0.45885	-0.46437/ -0.46475/ -0.46472	—	-1.23357/ -1.44737/ -0.40469	-1.46075/ -1.48094
	C ^{GeB}	-1.46766	-0.47039/ -0.47018	-0.46481/ -0.46447/ -0.46470	—	—	-1.46819
	O	-0.94562/ -1.01424	—	—	—	-0.92789/ -0.95030/ -0.99573	-0.98459/ -0.98950

3.15.3 Koordinaten der Verbindungen

107a^{Ge}

E = -8892.24737179

O -2.520049 -1.204751 -2.783517

Cl -0.069919 -1.640720 -0.776514

S -3.708240 -0.895268 -1.887462

C -2.986240 0.179395 -0.827966

C -4.130165 -2.433151 -1.083859

O -4.941208 -0.484803 -2.576995

P -3.891894 1.270355 0.150865

C -5.347793 -3.030385 -1.375112

C -3.263403 -2.987003 -0.145353

C -5.609803 0.643801 0.401407

C -3.040029 1.568259 1.742217

C -4.061109 2.912011 -0.668311

C -5.710045 -4.192850 -0.701793

C -3.640591 -4.145329 0.514023

C -5.673827 -0.512949 1.403018

C -6.662025 1.703135 0.742238

C -2.485270 0.301931 2.393264
 C -3.836654 2.417804 2.731727
 C -4.738778 2.729071 -2.028050
 C -2.711173 3.611566 -0.830853
 C -4.869664 -4.765064 0.252842
 C -7.060071 -1.141814 1.400347
 C -8.051579 1.073315 0.764448
 C -1.626993 0.681403 3.593346
 C -2.973653 2.771511 3.937624
 C -4.888258 4.054271 -2.760777
 C -2.857274 4.929450 -1.581975
 C -5.258904 -6.015788 0.981378
 C -8.128728 -0.107606 1.721639
 C -2.407160 1.521015 4.595601
 C -3.541138 4.741026 -2.927946
 O 2.259554 1.004438 2.772260
 Cl 0.096339 1.627987 0.386749
 S 3.539251 0.709291 2.007269
 C 2.918564 -0.240972 0.779023
 C 4.111697 2.291313 1.409007
 O 4.662301 0.181751 2.797116
 P 3.892166 -1.240429 -0.227281
 C 5.323871 2.783528 1.868836
 C 3.361510 2.989657 0.466387
 C 5.629902 -0.618640 -0.270415
 C 3.162169 -1.348637 -1.902874
 C 3.979968 -2.964785 0.418283
 C 5.802444 3.987276 1.360476
 C 3.854197 4.186171 -0.028131
 C 5.784573 0.632893 -1.139897
 C 6.695908 -1.656951 -0.632828
 C 2.631824 -0.015347 -2.432575
 C 4.042541 -2.070335 -2.922935
 C 4.536012 -2.949621 1.844149
 C 2.613581 -3.649409 0.385078
 C 5.082960 4.702837 0.404083
 C 7.175383 1.229283 -0.975108

C 8.090283 -1.054138 -0.492191
 C 1.889143 -0.247448 -3.742131
 C 3.285466 -2.271440 -4.230479
 C 4.600529 -4.351955 2.433495
 C 2.675318 -5.046461 0.988748
 C 5.598345 5.997196 -0.148763
 C 8.251254 0.211436 -1.322100
 C 2.763114 -0.948118 -4.772140
 C 3.236057 -5.024171 2.402408
 H -6.001868 -2.569835 -2.111355
 H -2.309897 -2.504800 0.063024
 H -5.857425 0.243612 -0.593650
 H -2.157853 2.143690 1.427591
 H -4.702679 3.527181 -0.018194
 H -6.668724 -4.661624 -0.919939
 H -2.968144 -4.579068 1.253261
 H -4.907896 -1.264275 1.182881
 H -5.461220 -0.128210 2.410569
 H -6.446027 2.148532 1.722960
 H -6.647935 2.520651 0.013260
 H -1.905518 -0.263565 1.652224
 H -3.302007 -0.353309 2.722601
 H -4.715262 1.854346 3.077330
 H -4.214940 3.331613 2.253130
 H -4.130911 2.039307 -2.628868
 H -5.711289 2.232397 -1.922834
 H -2.235817 3.788393 0.140866
 H -2.029642 2.948887 -1.386869
 H -7.252951 -1.577285 0.409380
 H -7.092879 -1.972818 2.116521
 H -8.298816 0.731735 -0.251871
 H -8.797837 1.833789 1.028200
 H -1.227300 -0.223500 4.067613
 H -0.758054 1.258028 3.243550
 H -2.143945 3.413972 3.607512
 H -3.560020 3.358441 4.656573
 H -5.359219 3.883525 -3.736974

H -5.566881 4.713050 -2.196658
 H -1.869062 5.389118 -1.709708
 H -3.448814 5.627710 -0.969669
 H -5.204216 -5.875810 2.068160
 H -4.581989 -6.843071 0.731010
 H -6.277471 -6.327807 0.729357
 H -7.985293 0.252145 2.752348
 H -9.127938 -0.560385 1.687232
 H -1.767109 1.795589 5.443531
 H -3.235482 0.924166 5.009262
 H -3.658998 5.706550 -3.436522
 H -2.901173 4.121393 -3.574004
 H 5.882451 2.212495 2.606368
 H 2.409548 2.586446 0.123766
 H 5.796712 -0.326328 0.778538
 H 2.269233 -1.964754 -1.726897
 H 4.668816 -3.515984 -0.240944
 H 6.757897 4.375082 1.711403
 H 3.274495 4.733340 -0.770687
 H 5.015866 1.373688 -0.897769
 H 5.639188 0.359240 -2.194326
 H 6.549220 -2.001663 -1.665526
 H 6.617837 -2.540700 0.009431
 H 1.969006 0.437141 -1.683680
 H 3.455774 0.691781 -2.596745
 H 4.942911 -1.472935 -3.124801
 H 4.386898 -3.036895 -2.529613
 H 3.886438 -2.315637 2.462537
 H 5.521035 -2.467717 1.881033
 H 2.219883 -3.705440 -0.635959
 H 1.895441 -3.039482 0.954897
 H 7.301774 1.559091 0.065933
 H 7.270446 2.127449 -1.598726
 H 8.265536 -0.816103 0.567734
 H 8.844952 -1.799929 -0.773296
 H 1.511124 0.706285 -4.130688
 H 1.007193 -0.871180 -3.537248

H 2.437472 -2.949472 -4.053388
H 3.935239 -2.764743 -4.965056
H 4.983358 -4.301062 3.460545
H 5.319316 -4.959240 1.861401
H 1.673929 -5.494972 0.974380
H 3.311571 -5.684307 0.355723
H 5.651104 5.967930 -1.244294
H 4.934834 6.830358 0.117232
H 6.597678 6.228518 0.233547
H 8.177343 -0.044163 -2.390537
H 9.250990 0.639337 -1.173638
H 2.202633 -1.113427 -5.701039
H 3.616221 -0.301736 -5.032684
H 3.297311 -6.042303 2.807986
H 2.547174 -4.466660 3.054750
Ge -1.214155 0.253522 -1.794980
Ge 1.043617 -0.331796 1.509628

107b^{Ge}

E = -8892.27755833
Ge 1.424570 -1.188913 -1.882166
C 2.329112 -0.413636 -0.212640
Cl 0.887098 0.819050 -2.967611
Ge -0.665246 -1.032402 -0.544628
P 3.899451 -1.043859 0.164383
C 4.773273 -1.278303 -1.434592
C 3.834327 -2.703068 0.959111
C 4.846305 0.038735 1.313870
O 1.837250 0.214322 2.348540
S 1.545830 0.501685 0.932775
O 0.041471 0.454439 0.615265
C 1.859983 2.252540 0.765487
S -3.205517 -1.389487 -1.610775
O -3.934376 -0.791422 -2.735945
O -2.065942 -2.320472 -1.905626
C -2.449527 -0.319245 -0.538906
C -4.418461 -2.390910 -0.763673

Cl -0.532435 -2.594134 1.083120
 P -3.114940 1.192721 -0.029346
 C -2.465174 1.629942 1.623910
 C -2.706247 2.613468 -1.123777
 C -4.955599 1.043198 -0.052952
 C 2.273982 5.001523 0.558412
 C 2.477073 6.480720 0.429765
 C 4.709631 -0.084044 -2.389863
 C 6.203404 -1.797413 -1.298568
 C 5.244158 -0.495973 -3.755761
 C 6.662377 -1.042118 -3.658083
 C 6.749872 -2.193846 -2.665864
 C 5.324369 1.328840 0.646446
 C 5.997760 -0.615034 2.080939
 C 5.822001 2.307965 1.699427
 C 6.948885 1.691086 2.516752
 C 6.532033 0.359564 3.127315
 C 3.098431 -2.622277 2.298380
 C 3.165849 -3.747334 0.064602
 C 3.123000 -5.107572 0.751424
 C 2.423630 -5.030521 2.100239
 C 3.070553 -3.978630 2.988972
 C -7.328333 -4.812491 1.247269
 C -5.475317 0.292538 1.175218
 C -5.717468 2.355975 -0.247440
 C -7.218162 2.096888 -0.331303
 C -7.738316 1.329499 0.874789
 C -6.969881 0.029637 1.059420
 C -2.399630 0.479581 2.627188
 C -3.063981 2.892609 2.240764
 C -2.220504 3.310570 3.441473
 C -2.081066 2.180644 4.454303
 C -1.547229 0.905054 3.814364
 C -1.270168 3.116764 -0.985226
 C -3.004415 2.230314 -2.574717
 C -2.759535 3.401449 -3.514629
 C -1.336379 3.919979 -3.377604

C -1.027783 4.285840 -1.933496
 H 4.169088 -2.073113 -1.900554
 H 4.881487 -2.999254 1.132940
 H 4.075886 0.306215 2.052293
 H -1.421417 1.857421 1.373348
 H -3.384461 3.423627 -0.813355
 H -5.141071 0.422924 -0.944069
 H 1.695378 6.927847 -0.198627
 H 2.448330 6.978005 1.404497
 H 3.439147 6.711227 -0.043651
 H 5.315983 0.742566 -1.999596
 H 3.682670 0.291451 -2.479191
 H 6.252281 -2.650354 -0.609167
 H 6.837499 -1.006335 -0.871725
 H 5.206463 0.359022 -4.442128
 H 4.578611 -1.263020 -4.179431
 H 7.337045 -0.235436 -3.331333
 H 7.020022 -1.363717 -4.644555
 H 7.786286 -2.541609 -2.567735
 H 6.168274 -3.047138 -3.045840
 H 4.526855 1.774602 0.043654
 H 6.151321 1.092568 -0.039183
 H 6.804010 -0.892630 1.387523
 H 5.672405 -1.536165 2.575955
 H 4.983378 2.578558 2.358457
 H 6.155308 3.237602 1.220635
 H 7.279084 2.381559 3.303384
 H 7.818212 1.529894 1.860558
 H 5.743521 0.534782 3.874360
 H 7.373778 -0.096468 3.664113
 H 2.071820 -2.288444 2.105223
 H 3.539330 -1.860453 2.952828
 H 3.679702 -3.836226 -0.900643
 H 2.137159 -3.418268 -0.144458
 H 4.152249 -5.474531 0.890633
 H 2.619528 -5.830145 0.096922
 H 2.432732 -6.011866 2.592146

H 1.370200 -4.761240 1.940418
 H 4.097893 -4.287948 3.240298
 H 2.528582 -3.892831 3.939248
 H -6.971786 -5.843897 1.364054
 H -7.526481 -4.426497 2.255355
 H -8.278249 -4.843538 0.704110
 H -5.294231 0.906341 2.068782
 H -4.924853 -0.643912 1.314631
 H -5.390789 2.860638 -1.162791
 H -5.505143 3.038202 0.589127
 H -7.422223 1.516004 -1.243300
 H -7.750206 3.050226 -0.444316
 H -8.812501 1.132134 0.766126
 H -7.625134 1.950422 1.777121
 H -7.151604 -0.632256 0.201628
 H -7.321076 -0.509970 1.948351
 H -1.975159 -0.412692 2.154879
 H -3.406706 0.214948 2.974906
 H -4.097817 2.703416 2.565373
 H -3.105097 3.710028 1.507668
 H -2.653639 4.201578 3.914632
 H -1.222432 3.601242 3.079334
 H -3.068989 1.974881 4.895554
 H -1.433800 2.495982 5.283224
 H -1.505772 0.095028 4.553312
 H -0.514241 1.051924 3.466640
 H -0.579645 2.298196 -1.224736
 H -1.053921 3.432492 0.044441
 H -4.027695 1.848251 -2.682805
 H -2.350042 1.391896 -2.848890
 H -3.471381 4.211260 -3.286830
 H -2.959789 3.090005 -4.547481
 H -1.176109 4.785800 -4.033699
 H -0.637511 3.136433 -3.701456
 H -1.660602 5.134604 -1.626933
 H 0.011410 4.621477 -1.835911
 C -5.670842 -2.561023 -1.333634

C -6.611508 -3.351120 -0.678734
 C -6.314208 -3.969374 0.534963
 C -5.034263 -3.790150 1.076953
 C -4.083348 -3.014279 0.435271
 C 1.924397 4.422111 1.780297
 C 2.421227 4.166100 -0.553922
 C 1.723609 3.051352 1.894419
 C 2.208628 2.798171 -0.463421
 H -5.893116 -2.071052 -2.278637
 H -3.088335 -2.880805 0.857614
 H -4.779293 -4.273415 2.019384
 H -7.598191 -3.486087 -1.120005
 H 1.816004 5.054402 2.660503
 H 2.699720 4.596531 -1.515048
 H 1.473132 2.593733 2.848672
 H 2.298036 2.153061 -1.336035

¹⁰⁷Ge

E = -8892.23902140
 O -1.864137 1.103499 2.775056
 Cl 0.890903 2.673749 0.747677
 S -3.088132 1.040179 1.949488
 C -2.774357 -0.200290 0.801424
 C -3.200988 2.616917 1.112117
 O -4.379438 0.903608 2.642886
 P -4.075746 -0.888461 -0.139510
 C -4.065207 3.571868 1.632427
 C -2.386743 2.914295 0.026294
 C -5.367798 0.394322 -0.443313
 C -3.436527 -1.570108 -1.715802
 C -4.935183 -2.286060 0.701128
 C -4.114322 4.833098 1.049521
 C -2.449805 4.173719 -0.548425
 C -4.961881 1.343253 -1.571872
 C -6.794838 -0.108312 -0.672330
 C -2.423643 -0.695431 -2.454528
 C -4.511465 -2.106922 -2.661337

C -5.437144 -1.865073 2.082088
 C -4.084522 -3.550095 0.810121
 C -3.311407 5.154823 -0.046233
 C -5.896926 2.541499 -1.619343
 C -7.750309 1.080145 -0.751367
 C -1.759693 -1.515504 -3.551790
 C -3.849396 -2.902539 -3.783547
 C -6.220487 -2.987170 2.748045
 C -4.861039 -4.672256 1.489006
 C -3.359724 6.516189 -0.671734
 C -7.337181 2.088917 -1.814422
 C -2.794417 -2.081593 -4.514188
 C -5.384509 -4.253427 2.854372
 O 1.315576 -1.082443 -2.360382
 Cl -0.824940 -2.686776 -0.060736
 S 2.681639 -1.036095 -1.799220
 C 2.635416 0.208925 -0.612562
 C 2.952041 -2.602542 -0.981591
 O 3.803502 -0.914875 -2.744666
 P 4.114561 0.867696 0.042030
 C 3.672962 -3.572477 -1.666837
 C 2.405741 -2.873905 0.267291
 C 5.461622 -0.395847 0.022110
 C 3.812889 1.492373 1.735895
 C 4.747146 2.298887 -0.931210
 C 3.850956 -4.823152 -1.087433
 C 2.596765 -4.123568 0.835525
 C 5.339408 -1.375762 1.190109
 C 6.891873 0.144824 -0.057290
 C 2.990868 0.571951 2.640209
 C 5.054718 2.029932 2.446936
 C 4.924037 1.906997 -2.398418
 C 3.877853 3.549213 -0.815485
 C 3.318800 -5.119079 0.168880
 C 6.299550 -2.541570 1.009450
 C 7.876201 -1.012682 -0.207424
 C 2.573730 1.337777 3.888672

C 4.636064 2.774207 3.711354
 C 5.512194 3.053635 -3.208031
 C 4.459964 4.694786 -1.635052
 C 3.503367 -6.469958 0.791499
 C 7.733727 -2.044437 0.902502
 C 3.783928 1.900453 4.622476
 C 4.655203 4.304983 -3.092384
 H -4.693848 3.311170 2.480570
 H -1.730982 2.149164 -0.382751
 H -5.374742 0.958348 0.501356
 H -2.863387 -2.433606 -1.356702
 H -5.800875 -2.505769 0.056002
 H -4.793093 5.583414 1.452896
 H -1.811098 4.401244 -1.400630
 H -3.924526 1.666008 -1.452741
 H -5.020570 0.805507 -2.528382
 H -6.843919 -0.690166 -1.604225
 H -7.115723 -0.772293 0.137052
 H -1.664566 -0.319077 -1.760387
 H -2.918967 0.178643 -2.896588
 H -5.085130 -1.275208 -3.094634
 H -5.229885 -2.742403 -2.125645
 H -4.569971 -1.596062 2.698663
 H -6.034717 -0.947886 2.028856
 H -3.740930 -3.884940 -0.175517
 H -3.178119 -3.320085 1.385943
 H -5.799812 3.104761 -0.680084
 H -5.591855 3.222395 -2.424404
 H -7.767457 1.576515 0.230403
 H -8.771138 0.721999 -0.937100
 H -1.020424 -0.901650 -4.079091
 H -1.187533 -2.325853 -3.078886
 H -3.374835 -3.794713 -3.348209
 H -4.613779 -3.264245 -4.483781
 H -6.556896 -2.660835 3.740174
 H -7.129958 -3.197979 2.163390
 H -4.221075 -5.559718 1.574623

H -5.709429 -4.961354 0.849066
 H -3.554830 6.452243 -1.749479
 H -2.401728 7.038248 -0.549676
 H -4.140220 7.137940 -0.221544
 H -7.435909 1.626007 -2.808575
 H -8.018740 2.949198 -1.804336
 H -2.309276 -2.694547 -5.284691
 H -3.289919 -1.252624 -5.044259
 H -5.966162 -5.065951 3.308813
 H -4.532426 -4.064184 3.524339
 H 4.095314 -3.330436 -2.639239
 H 1.859726 -2.099075 0.800624
 H 5.268958 -0.942286 -0.912838
 H 3.161745 2.351354 1.530146
 H 5.733898 2.521995 -0.495750
 H 4.419154 -5.584557 -1.620118
 H 2.170212 -4.332001 1.815527
 H 4.312802 -1.736037 1.288159
 H 5.585511 -0.852247 2.124493
 H 7.127064 0.718841 0.850922
 H 7.011228 0.825849 -0.906143
 H 2.103130 0.209891 2.107707
 H 3.576867 -0.309638 2.929095
 H 5.727025 1.203344 2.717388
 H 5.625759 2.699707 1.789401
 H 3.942435 1.626988 -2.802313
 H 5.534965 1.002653 -2.499002
 H 3.768147 3.861801 0.229642
 H 2.864969 3.315130 -1.169977
 H 6.022312 -3.092232 0.099239
 H 6.192523 -3.245637 1.844642
 H 7.694643 -1.498648 -1.177660
 H 8.901396 -0.622124 -0.241780
 H 1.991140 0.683490 4.548686
 H 1.899369 2.151886 3.586685
 H 4.059289 3.665118 3.421367
 H 5.525776 3.135853 4.243019

H 5.612242 2.748144 -4.257090
H 6.529754 3.273449 -2.848238
H 3.806040 5.572180 -1.552330
H 5.430464 4.988638 -1.205565
H 3.899811 -6.388101 1.810987
H 2.545787 -7.002495 0.861612
H 4.189934 -7.091463 0.207725
H 8.028759 -1.588473 1.860300
H 8.422992 -2.881369 0.732189
H 3.466592 2.472466 5.503661
H 4.399092 1.067610 4.998267
H 5.101859 5.134585 -3.655494
H 3.672783 4.109246 -3.547732
Ge -0.927336 -0.701662 1.085484
Ge 0.793529 0.779938 -0.538806

107d^{Ge}

E = -8892.25124484
O -1.025235 0.825184 2.076610
Cl 0.084704 1.047458 -2.701297
S -2.489546 0.944170 1.617143
C -2.541089 -0.361124 0.591356
C -2.591651 2.490492 0.736376
O -3.476976 1.060900 2.698195
P -3.962254 -1.171361 0.075046
C -3.118933 3.609801 1.367736
C -2.183152 2.541617 -0.590361
C -5.405004 -0.033557 0.184423
C -3.652090 -1.841909 -1.598917
C -4.358926 -2.612426 1.152699
C -3.231484 4.794821 0.647768
C -2.307549 3.727199 -1.295754
C -5.432391 1.000304 -0.942941
C -6.777424 -0.692278 0.332710
C -3.056049 -0.825945 -2.571629
C -4.843992 -2.579489 -2.205499
C -4.430530 -2.142337 2.607323

C -3.348110 -3.749213 0.991475
 C -2.830199 4.874543 -0.688493
 C -6.468849 2.074042 -0.646855
 C -7.838111 0.372470 0.598351
 C -2.660452 -1.511329 -3.871535
 C -4.443891 -3.246174 -3.517546
 C -4.729359 -3.295436 3.554718
 C -3.639498 -4.890093 1.959034
 C -2.932302 6.157205 -1.455541
 C -7.849153 1.457564 -0.469519
 C -3.840542 -2.244252 -4.493644
 C -3.703183 -4.407883 3.400435
 O 2.607066 -0.846683 -3.221048
 Cl 0.193771 -2.299727 -1.674857
 S 3.524541 -0.357048 -2.193763
 C 2.603169 -0.002940 -0.790010
 C 4.558594 -1.744379 -1.733256
 O 4.468589 0.723483 -2.540038
 P 3.217251 0.999567 0.482402
 C 5.922212 -1.696373 -1.970348
 C 3.973592 -2.861511 -1.141650
 C 5.064529 0.998750 0.531424
 C 2.480336 0.461269 2.078859
 C 2.697167 2.761721 0.290720
 C 6.719385 -2.768012 -1.575101
 C 4.779840 -3.917455 -0.750581
 C 5.652997 -0.229757 1.231099
 C 5.682257 2.285580 1.087924
 C 2.605043 -1.032791 2.387300
 C 2.919142 1.320397 3.265771
 C 3.041933 3.223841 -1.127417
 C 1.214042 2.975778 0.594625
 C 6.166897 -3.886280 -0.953165
 C 7.169319 -0.253511 1.092426
 C 7.203247 2.242667 0.984093
 C 1.825037 -1.377635 3.650658
 C 2.117033 0.957331 4.509421

C 2.609879 4.662673 -1.370599
 C 0.807668 4.421538 0.344965
 C 7.023195 -5.038896 -0.521498
 C 7.791019 1.013077 1.658480
 C 2.255206 -0.522981 4.833744
 C 1.126895 4.840094 -1.081260
 H -3.450884 3.536964 2.400499
 H -1.790896 1.651435 -1.073976
 H -5.191431 0.498213 1.125554
 H -2.848153 -2.570759 -1.400471
 H -5.347821 -2.980203 0.837990
 H -3.646615 5.677072 1.132973
 H -1.986111 3.755098 -2.335963
 H -4.443262 1.445286 -1.087100
 H -5.696159 0.495272 -1.883802
 H -7.026251 -1.247414 -0.583521
 H -6.782001 -1.415753 1.155166
 H -2.182798 -0.349487 -2.117045
 H -3.781770 -0.032351 -2.787707
 H -5.652102 -1.857637 -2.398934
 H -5.247197 -3.325120 -1.505926
 H -3.467025 -1.686366 2.873218
 H -5.168749 -1.338032 2.724236
 H -3.354203 -4.130857 -0.036602
 H -2.334676 -3.360961 1.178839
 H -6.174613 2.609604 0.268375
 H -6.476348 2.817381 -1.454016
 H -7.632820 0.830981 1.577252
 H -8.825281 -0.100552 0.677104
 H -2.245595 -0.766436 -4.561181
 H -1.845554 -2.218297 -3.663913
 H -3.704719 -4.032604 -3.303374
 H -5.314483 -3.746829 -3.960669
 H -4.748625 -2.926433 4.587756
 H -5.734316 -3.693925 3.345806
 H -2.877884 -5.671537 1.844179
 H -4.602210 -5.351167 1.688951

H -3.443895 6.008456 -2.414016
 H -1.932398 6.549299 -1.684497
 H -3.473603 6.923853 -0.892187
 H -8.170729 1.019242 -1.426832
 H -8.588494 2.228538 -0.218002
 H -3.534413 -2.754393 -5.415708
 H -4.614041 -1.515498 -4.783698
 H -3.934902 -5.243518 4.073032
 H -2.714253 -4.028641 3.698965
 H 6.343907 -0.812592 -2.444771
 H 2.896203 -2.883913 -0.982735
 H 5.322240 0.943760 -0.536102
 H 1.408606 0.663035 1.912780
 H 3.278654 3.344424 1.020394
 H 7.794346 -2.730327 -1.748497
 H 4.328477 -4.788725 -0.276924
 H 5.216589 -1.152867 0.832213
 H 5.405045 -0.190152 2.301199
 H 5.388207 2.424356 2.138886
 H 5.316743 3.157640 0.536493
 H 2.247517 -1.620164 1.531633
 H 3.655532 -1.306003 2.533252
 H 3.987941 1.150949 3.463292
 H 2.805365 2.388074 3.038142
 H 2.531107 2.561333 -1.839256
 H 4.111676 3.093227 -1.333811
 H 0.966335 2.695147 1.624328
 H 0.606939 2.327784 -0.056523
 H 7.430440 -0.346538 0.029449
 H 7.570807 -1.145575 1.590119
 H 7.481187 2.236756 -0.080339
 H 7.625716 3.161063 1.411788
 H 1.942644 -2.445280 3.876302
 H 0.752883 -1.215663 3.466241
 H 1.057432 1.192430 4.329433
 H 2.442328 1.573991 5.357180
 H 2.839093 4.940586 -2.406994

H 3.191691 5.341483 -0.727064
H -0.259821 4.541642 0.565426
H 1.347923 5.075103 1.048178
H 6.868066 -5.275912 0.538552
H 6.780295 -5.945678 -1.090970
H 8.086950 -4.826149 -0.669425
H 7.597187 1.062643 2.741368
H 8.881827 0.996331 1.538049
H 1.662259 -0.776005 5.721927
H 3.304666 -0.743007 5.085730
H 0.816261 5.878636 -1.259828
H 0.553663 4.205241 -1.773115
Ge -0.680222 -1.016249 1.012927
Ge 0.709020 -0.204919 -0.946502

107e^{Ge}

E = -8892.27475103
O 0.645431 -0.301974 -2.005708
O -0.556956 -0.212121 2.175070
C -1.612884 0.254399 0.032746
C 1.689081 0.397669 0.059346
S 1.950386 0.393364 -1.586947
O 2.277572 1.658668 -2.260410
C 3.231403 -0.731291 -2.091803
P -2.722956 0.650619 -1.220355
C -4.097677 1.616438 -0.473899
C -3.464222 -0.852082 -1.987379
C -1.878228 1.533297 -2.581853
S -1.868228 0.375954 1.684283
O -2.274683 1.688348 2.208073
C -3.125605 -0.727540 2.315540
P 2.568823 1.307637 1.224720
C 4.325671 1.402559 0.701073
C 1.950670 3.031545 1.392026
C 2.347450 0.530388 2.866378
C 4.135640 -0.356050 -3.075815
C 5.126598 -1.256687 -3.452816

C -3.711017 3.067356 -0.180423
 C -5.459077 1.543028 -1.164129
 C 3.293851 -1.984575 -1.494895
 C -2.452195 -1.575945 -2.874972
 C -3.974041 -1.775964 -0.882672
 C 5.033697 0.053310 0.838022
 C 5.178295 2.503427 1.333352
 C -2.993099 -2.899275 -3.401025
 C -0.971617 2.669379 -2.118994
 C -2.839430 1.977220 -3.684265
 C 5.217344 -2.520866 -2.866824
 C 4.283791 -2.869484 -1.883292
 C 6.280331 -3.492715 -3.280427
 C -4.755628 3.707695 0.720056
 C 2.154381 3.833511 0.105621
 C 0.466746 3.007696 1.751822
 C -0.216053 3.254897 -3.303059
 C 6.378525 0.092826 0.128071
 C -1.168539 3.716197 -4.396988
 C 2.421003 -0.992389 2.847839
 C 3.219676 1.108365 3.979955
 C -6.512017 2.205057 -0.279283
 C -4.552388 -3.067066 -1.440921
 C -4.371251 -0.217422 2.661069
 C -2.879546 -2.094033 2.389059
 C -3.903985 -2.953793 2.750052
 C -5.183446 -2.471368 3.050636
 C -3.515639 -3.791361 -2.286242
 C -2.067709 2.575855 -4.854123
 C -5.392656 -1.091853 3.015909
 C 1.590261 5.243113 0.238216
 C 1.949940 -1.542543 4.184514
 C -6.139737 3.634743 0.090174
 C -6.287042 -3.417913 3.413408
 C 2.765462 0.549245 5.325738
 C 6.538854 2.554692 0.643482
 C 2.770824 -0.974745 5.334344

C 7.252051 1.208951 0.685737
 C -0.107210 4.409235 1.886667
 C 0.117490 5.222493 0.621831
 H -4.215120 1.111612 0.494783
 H -4.307569 -0.510710 -2.606937
 H -1.208596 0.758065 -2.982037
 H 4.227245 1.631613 -0.375005
 H 2.527531 3.492459 2.210633
 H 1.300004 0.773577 3.089785
 H 4.057115 0.629885 -3.526635
 H 5.844799 -0.971161 -4.220254
 H -2.722092 3.109133 0.287557
 H -3.660056 3.622734 -1.128224
 H -5.417428 2.048028 -2.139747
 H -5.748679 0.503469 -1.354991
 H 2.596877 -2.265761 -0.708790
 H -2.159352 -0.943809 -3.721653
 H -1.530602 -1.768342 -2.306405
 H -3.118146 -2.028205 -0.243006
 H -4.700689 -1.264460 -0.233702
 H 5.196033 -0.150253 1.906526
 H 4.407851 -0.757508 0.453584
 H 4.689688 3.481618 1.266253
 H 5.316957 2.292307 2.402509
 H -3.802870 -2.699727 -4.120621
 H -2.192557 -3.411096 -3.948587
 H -0.279359 2.289114 -1.358469
 H -1.565686 3.459803 -1.646920
 H -3.458258 1.136890 -4.027536
 H -3.528314 2.736331 -3.284846
 H 4.320565 -3.848841 -1.408790
 H 6.977829 -3.047492 -3.997214
 H 6.856115 -3.842207 -2.414503
 H 5.836178 -4.381076 -3.747858
 H -4.746292 3.184067 1.688059
 H -4.481658 4.749433 0.929680
 H 1.651828 3.307154 -0.715265

H 3.212923 3.875684 -0.178659
 H 0.271633 2.441972 2.667979
 H -0.064948 2.473603 0.950895
 H 0.418289 4.083158 -2.959575
 H 0.469439 2.494336 -3.696575
 H 6.207352 0.248287 -0.947215
 H 6.881307 -0.877886 0.224341
 H -1.795390 4.539148 -4.018313
 H -0.606980 4.120608 -5.248808
 H 3.447175 -1.328921 2.651275
 H 1.809886 -1.401706 2.041542
 H 4.268892 0.826013 3.808948
 H 3.183262 2.205978 3.994018
 H -6.616017 1.608692 0.640526
 H -7.489022 2.177886 -0.778575
 H -4.888365 -3.701539 -0.610094
 H -5.443706 -2.845305 -2.048676
 H -4.525750 0.858808 2.663762
 H -1.892190 -2.481483 2.152283
 H -3.706142 -4.023829 2.795986
 H -2.670102 -4.088081 -1.648550
 H -3.932867 -4.717009 -2.702823
 H -1.450104 1.789221 -5.312307
 H -2.768110 2.916766 -5.627547
 H -6.370917 -0.692375 3.280052
 H 2.158218 5.794035 1.004260
 H 1.735189 5.784924 -0.705737
 H 2.002487 -2.637853 4.162225
 H 0.889779 -1.277665 4.311078
 H -6.151926 4.255153 -0.819260
 H -6.894685 4.059982 0.763895
 H -6.010455 -4.036234 4.276485
 H -7.210338 -2.884252 3.660189
 H -6.504117 -4.104134 2.584701
 H 3.404229 0.942773 6.127236
 H 1.746461 0.910204 5.530543
 H 6.388939 2.854322 -0.404816

H 7.160984 3.333008 1.103804
H 2.398847 -1.346612 6.297860
H 3.809477 -1.329543 5.245118
H 7.509497 0.973317 1.729933
H 8.201721 1.266770 0.138577
H -1.175869 4.330346 2.122268
H 0.367564 4.919229 2.739427
H -0.457641 4.768884 -0.197956
H -0.262589 6.245190 0.743822
Ge -0.241531 -3.348172 0.125406
Ge 0.085647 -0.745282 0.021247
Cl 0.390922 -3.670277 -2.037951
Cl 1.768705 -3.893961 1.090280

107F^{Ge}

E = -8892.23700441
O 1.080834 -2.054890 1.293130
C -1.469384 -0.493561 0.375672
C 1.757192 -0.134864 -0.056407
S 2.255452 -1.652925 0.394948
O 2.649027 -2.636763 -0.624468
C 3.630431 -1.665119 1.550455
P -2.237482 -2.013702 0.181373
C -3.876227 -1.815329 -0.645297
C -2.631803 -2.686831 1.850441
C -1.213391 -3.281140 -0.664893
S -1.655063 0.875897 -0.500507
O -1.192387 0.940436 -1.898266
C -3.310548 1.543691 -0.545748
P 2.591333 0.793414 -1.251519
C 4.403946 0.712780 -0.889220
C 2.498226 0.261985 -3.017795
C 1.908154 2.492502 -1.255008
C 4.687318 -2.540890 1.346405
C 5.732750 -2.571465 2.264695
C -3.790554 -1.465266 -2.133178
C -4.937276 -2.892741 -0.404357

C 3.602599 -0.831419 2.664830
 C -1.395181 -3.016809 2.684505
 C -3.533109 -1.718488 2.619790
 C 4.764119 1.475649 0.384696
 C 5.397286 1.058899 -1.998348
 C -1.792978 -3.601123 4.033605
 C -0.511287 -2.730866 -1.908136
 C -1.985761 -4.566084 -0.961392
 C 5.733980 -1.741580 3.385755
 C 4.649908 -0.873790 3.570733
 C 6.870370 -1.755328 4.362607
 C -5.142781 -0.960544 -2.621406
 C 2.995323 -1.160455 -3.259403
 C 1.138020 0.458557 -3.679274
 C 0.348443 -3.809677 -2.558223
 C 6.158975 1.093160 0.853425
 C -0.425285 -5.088853 -2.839190
 C 1.919926 3.216762 0.090048
 C 2.495875 3.394965 -2.342870
 C -6.289689 -2.391691 -0.903979
 C -3.925838 -2.285367 3.978498
 C -3.626722 2.393985 -1.597463
 C -4.204206 1.337174 0.498298
 C -5.430116 1.985753 0.482457
 C -5.768594 2.857859 -0.554770
 C -2.701040 -2.652918 4.802385
 C -1.072913 -5.620734 -1.570508
 C -4.852644 3.042460 -1.594105
 C 3.098192 -1.443955 -4.752937
 C 1.100009 4.496887 -0.007161
 C -6.237398 -1.987673 -2.370720
 C -7.062133 3.611409 -0.530414
 C 1.696233 4.689722 -2.438595
 C 6.815374 0.718708 -1.545297
 C 1.630837 5.410819 -1.100835
 C 7.184769 1.393142 -0.230963
 C 1.236526 0.191686 -5.175406

C 1.772079 -1.202703 -5.461832
 H -4.243579 -0.915426 -0.137134
 H -3.182804 -3.622243 1.664558
 H -0.423442 -3.496044 0.068809
 H 4.526096 -0.364344 -0.678162
 H 3.207282 0.953770 -3.500351
 H 0.852039 2.288745 -1.494984
 H 4.672437 -3.192083 0.476114
 H 6.563276 -3.258412 2.107443
 H -3.011722 -0.717399 -2.321357
 H -3.507407 -2.363885 -2.701311
 H -4.674586 -3.818434 -0.931426
 H -5.013552 -3.145631 0.659228
 H 2.765566 -0.148121 2.816170
 H -0.721916 -3.697425 2.154191
 H -0.821691 -2.094631 2.851941
 H -2.978635 -0.777082 2.754527
 H -4.435956 -1.476874 2.043564
 H 4.747641 2.551595 0.161700
 H 4.013793 1.301619 1.163881
 H 5.176539 0.512062 -2.921209
 H 5.328470 2.130054 -2.237220
 H -2.312342 -4.559693 3.877252
 H -0.890378 -3.826882 4.614918
 H 0.105276 -1.870977 -1.615916
 H -1.248837 -2.355500 -2.630937
 H -2.471843 -4.953037 -0.055569
 H -2.785517 -4.347031 -1.682818
 H 4.628016 -0.220427 4.441896
 H 7.549462 -2.593810 4.177700
 H 7.456380 -0.829009 4.293774
 H 6.507815 -1.829154 5.394908
 H -5.384305 -0.026016 -2.091135
 H -5.084814 -0.708768 -3.687788
 H 2.296917 -1.858495 -2.788444
 H 3.959662 -1.341260 -2.767851
 H 0.742462 1.463477 -3.501838

H 0.412349 -0.219976 -3.218043
 H 0.781908 -3.421043 -3.487337
 H 1.192844 -4.025214 -1.891976
 H 6.171527 0.021003 1.096830
 H 6.406319 1.628000 1.779515
 H -1.210273 -4.893552 -3.587019
 H 0.239131 -5.844871 -3.276979
 H 2.948929 3.478237 0.365171
 H 1.528174 2.575430 0.884608
 H 3.541623 3.629767 -2.089986
 H 2.507738 2.901793 -3.321216
 H -6.589056 -1.520882 -0.300314
 H -7.054388 -3.162358 -0.742545
 H -4.548224 -1.557845 4.514954
 H -4.549442 -3.180853 3.830788
 H -2.905895 2.538799 -2.397490
 H -3.930739 0.678146 1.317971
 H -6.130104 1.826366 1.301017
 H -2.141570 -1.736621 5.042487
 H -3.002320 -3.096563 5.759993
 H -0.291502 -5.888605 -0.844079
 H -1.643320 -6.536164 -1.774969
 H -5.102718 3.715602 -2.412687
 H 3.869477 -0.792780 -5.194575
 H 3.435928 -2.476488 -4.911711
 H 1.100831 5.004371 0.963180
 H 0.051966 4.236773 -0.207051
 H -6.042380 -2.881407 -2.983427
 H -7.211760 -1.597992 -2.692138
 H -6.927781 4.572244 -0.014859
 H -7.421811 3.830121 -1.541516
 H -7.842080 3.059313 0.004774
 H 2.130423 5.336752 -3.212409
 H 0.675675 4.444377 -2.769352
 H 6.886780 -0.372819 -1.421853
 H 7.531808 0.989850 -2.331571
 H 1.007957 6.310694 -1.184605

H 2.641828 5.756013 -0.831285
H 7.234361 2.481932 -0.386185
H 8.187804 1.079328 0.085963
H 0.252160 0.328344 -5.641441
H 1.903515 0.939464 -5.633529
H 1.037852 -1.942244 -5.109896
H 1.879780 -1.362667 -6.542693
Ge 0.284816 -0.036111 1.421180
Ge -1.768491 2.510524 2.239308
O -0.870610 1.914212 0.358043
Cl 0.136462 3.369293 3.068770
Cl -2.602958 4.365934 1.254957

107a^{Sn}

E = -4743.04000668
C 2.439702 -0.335417 -0.143913
Cl 1.306450 1.097698 -3.236980
P 3.995379 -0.877901 0.390616
C 5.060661 -0.978328 -1.109647
C 3.948193 -2.584616 1.085159
C 4.772121 0.185506 1.680675
O 1.694023 0.109441 2.373340
S 1.499041 0.485862 0.960505
O 0.050489 0.439720 0.503042
C 1.803101 2.248703 0.931621
S -3.653883 -1.428622 -1.502159
O -4.513020 -0.881687 -2.561346
O -2.582895 -2.410682 -1.911611
C -2.757180 -0.328164 -0.593860
C -4.753915 -2.350573 -0.441387
Cl -0.609824 -2.795551 1.041695
P -3.322786 1.224969 -0.109039
C -2.513488 1.690862 1.464117
C -2.886861 2.540227 -1.322180
C -5.164318 1.215953 0.014716
C 2.261132 4.999249 0.912813
C 2.516402 6.476007 0.889781

C 5.034776 0.259191 -2.011703
 C 6.497825 -1.430435 -0.856885
 C 5.707470 -0.063896 -3.339612
 C 7.134572 -0.553372 -3.132602
 C 7.187371 -1.741215 -2.181165
 C 5.239475 1.534492 1.130519
 C 5.888314 -0.469430 2.498972
 C 5.638431 2.459591 2.271956
 C 6.731310 1.830421 3.124203
 C 6.312233 0.458525 3.633647
 C 3.100925 -2.618493 2.358952
 C 3.393523 -3.593713 0.079567
 C 3.356931 -4.997758 0.671520
 C 2.547332 -5.034342 1.958557
 C 3.072424 -4.016761 2.960464
 C -7.426341 -4.428707 2.185800
 C -5.653273 0.527470 1.292206
 C -5.821378 2.590072 -0.142502
 C -7.341095 2.467475 -0.110149
 C -7.831834 1.764463 1.146498
 C -7.170524 0.402868 1.293408
 C -2.433500 0.568122 2.499016
 C -2.995241 3.006089 2.073334
 C -2.061769 3.413354 3.208511
 C -1.947898 2.312605 4.254846
 C -1.511112 0.993012 3.633308
 C -1.381939 2.805840 -1.361683
 C -3.408965 2.143625 -2.704067
 C -3.055864 3.187783 -3.752983
 C -1.553693 3.419535 -3.801768
 C -1.020885 3.823448 -2.436163
 H 4.566053 -1.783553 -1.678067
 H 4.989372 -2.853203 1.325272
 H 3.928826 0.368709 2.362548
 H -1.481142 1.846238 1.125668
 H -3.396040 3.456938 -0.986203
 H -5.464881 0.600138 -0.848205

H 1.760938 6.998279 0.289463
 H 2.503256 6.902627 1.897825
 H 3.492423 6.701014 0.440734
 H 5.570125 1.084521 -1.527323
 H 4.010076 0.616796 -2.174329
 H 6.529783 -2.306917 -0.197108
 H 7.045151 -0.625687 -0.344762
 H 5.691458 0.819719 -3.989293
 H 5.119969 -0.838780 -3.856385
 H 7.737633 0.267508 -2.714497
 H 7.594811 -0.816561 -4.093449
 H 8.226582 -2.043911 -1.999666
 H 6.687575 -2.604179 -2.646576
 H 4.464138 1.992953 0.506079
 H 6.116654 1.373143 0.487359
 H 6.754453 -0.680226 1.856719
 H 5.562109 -1.427576 2.916770
 H 4.754053 2.663178 2.892700
 H 5.966589 3.427192 1.871232
 H 6.990157 2.485762 3.965678
 H 7.645150 1.727065 2.518666
 H 5.466295 0.572368 4.327934
 H 7.125562 -0.004805 4.206772
 H 2.082046 -2.305572 2.100924
 H 3.455199 -1.885475 3.093760
 H 3.975238 -3.599399 -0.851494
 H 2.366149 -3.290528 -0.173897
 H 4.387406 -5.331632 0.870776
 H 2.939749 -5.694158 -0.066833
 H 2.559919 -6.043969 2.389160
 H 1.499890 -4.796056 1.727003
 H 4.087076 -4.302806 3.281512
 H 2.448264 -4.011486 3.862786
 H -7.145460 -5.485662 2.280270
 H -7.393957 -3.998121 3.194565
 H -8.461284 -4.386049 1.831583
 H -5.349227 1.129574 2.159959

H -5.183597 -0.455255 1.408004
 H -5.518888 3.060138 -1.084123
 H -5.489083 3.255716 0.667074
 H -7.666383 1.896930 -0.993050
 H -7.792542 3.463918 -0.199769
 H -8.924573 1.663920 1.125087
 H -7.592582 2.382572 2.025793
 H -7.476810 -0.246060 0.461289
 H -7.499874 -0.096514 2.213631
 H -2.053297 -0.346246 2.030021
 H -3.430435 0.337641 2.897452
 H -4.015828 2.889862 2.466773
 H -3.036512 3.799521 1.314132
 H -2.411307 4.348646 3.665249
 H -1.065762 3.619569 2.788022
 H -2.926730 2.180250 4.742554
 H -1.248075 2.614268 5.045444
 H -1.471080 0.203165 4.393825
 H -0.491624 1.080683 3.234562
 H -0.847982 1.867976 -1.569109
 H -1.023525 3.159597 -0.387273
 H -4.491322 1.961542 -2.680360
 H -2.962788 1.179162 -2.979404
 H -3.569489 4.134015 -3.519219
 H -3.429805 2.862958 -4.732189
 H -1.304128 4.183462 -4.549664
 H -1.050010 2.493680 -4.113717
 H -1.430765 4.807090 -2.156015
 H 0.070064 3.930447 -2.472151
 C -6.091311 -2.464014 -0.786669
 C -6.955573 -3.141163 0.069413
 C -6.496665 -3.706070 1.258333
 C -5.134214 -3.591237 1.567479
 C -4.259212 -2.923030 0.727849
 C 2.105540 4.309810 2.115455
 C 2.177156 4.274781 -0.282959
 C 1.877779 2.936618 2.134748

C 1.949025 2.907572 -0.284395
H -6.439205 -2.013631 -1.713400
H -3.202768 -2.833617 0.979110
H -4.753645 -4.034650 2.486817
H -8.009627 -3.227311 -0.191492
H 2.166975 4.855151 3.056370
H 2.292002 4.793697 -1.234066
H 1.764143 2.392948 3.069657
H 1.878778 2.351364 -1.219861
Sn -0.813982 -1.176713 -0.807428
Sn 1.790642 -1.146525 -2.179837

107b^{Sn}

E = -4743.03508401
O 2.511100 0.903519 -2.936627
Cl -0.066273 1.578660 -0.755737
S 3.723342 0.698742 -2.058609
C 3.105025 -0.269160 -0.837408
C 4.132134 2.316371 -1.421528
O 4.947019 0.239878 -2.738810
P 4.111948 -1.135306 0.248923
C 5.358768 2.882396 -1.732650
C 3.236120 2.962338 -0.573814
C 5.821607 -0.434057 0.327040
C 3.331374 -1.202052 1.904677
C 4.306310 -2.891523 -0.287529
C 5.706192 4.102504 -1.159343
C 3.597560 4.176016 -0.013996
C 5.904774 0.839670 1.174830
C 6.914420 -1.425365 0.739826
C 2.752879 0.135177 2.368363
C 4.194669 -1.868155 2.975718
C 4.855822 -2.921076 -1.715308
C 2.988763 -3.660945 -0.196687
C 4.840358 4.763080 -0.288636
C 7.281737 1.477698 1.050594
C 8.291151 -0.776123 0.642536

C 1.984356 -0.063694 3.668688
 C 3.410141 -2.033896 4.271526
 C 5.000363 -4.345074 -2.232825
 C 3.128318 -5.078217 -0.737300
 C 5.214807 6.074018 0.334456
 C 8.376949 0.504506 1.458823
 C 2.849221 -0.701305 4.746375
 C 3.676255 -5.090489 -2.156173
 O -2.510821 -0.903381 2.936643
 Cl 0.066389 -1.578318 0.755418
 S -3.723138 -0.698687 2.058713
 C -3.105015 0.269252 0.837442
 C -4.131892 -2.316333 1.421650
 O -4.946798 -0.239907 2.738998
 P -4.112128 1.135212 -0.248846
 C -5.358584 -2.882310 1.732633
 C -3.235796 -2.962354 0.574062
 C -5.821685 0.433701 -0.326906
 C -3.331503 1.201999 -1.904558
 C -4.306730 2.891423 0.287573
 C -5.705984 -4.102413 1.159302
 C -3.597211 -4.176028 0.014221
 C -5.904726 -0.839872 -1.174931
 C -6.914669 1.424926 -0.739441
 C -2.752939 -0.135202 -2.368248
 C -4.194769 1.868130 -2.975598
 C -4.855896 2.920881 1.715487
 C -2.989374 3.661125 0.196327
 C -4.840068 -4.763039 0.288714
 C -7.281587 -1.478124 -1.050735
 C -8.291306 0.775473 -0.642240
 C -1.984440 0.063692 -3.668585
 C -3.410263 2.033852 -4.271421
 C -5.000539 4.344843 2.233069
 C -3.129018 5.078337 0.737078
 C -5.214486 -6.073979 -0.334392
 C -8.376958 -0.505022 -1.458752

C -2.849348 0.701256 -4.746264
 C -3.676560 5.090452 2.156105
 H 6.031643 2.352063 -2.402479
 H 2.272472 2.506338 -0.353598
 H 6.005472 -0.155829 -0.722228
 H 2.458718 -1.845161 1.720827
 H 5.030579 -3.360061 0.395988
 H 6.673703 4.546832 -1.389821
 H 2.902456 4.681477 0.655575
 H 5.124548 1.552467 0.887497
 H 5.728878 0.585147 2.229408
 H 6.743635 -1.767842 1.769916
 H 6.894357 -2.315906 0.103200
 H 2.102478 0.536491 1.579218
 H 3.549793 0.873553 2.523673
 H 5.080387 -1.248945 3.176135
 H 4.564632 -2.842695 2.627884
 H 4.167446 -2.359559 -2.361551
 H 5.808106 -2.379830 -1.783195
 H 2.619639 -3.694266 0.834931
 H 2.218726 -3.127608 -0.775708
 H 7.438384 1.789524 0.008252
 H 7.322276 2.391408 1.657346
 H 8.497718 -0.545607 -0.413351
 H 9.059438 -1.492177 0.961690
 H 1.574213 0.894387 4.011905
 H 1.124725 -0.721281 3.471657
 H 2.579907 -2.735533 4.102094
 H 4.050928 -2.484020 5.040795
 H 5.374147 -4.325534 -3.264222
 H 5.755428 -4.880606 -1.636471
 H 2.156403 -5.585535 -0.690541
 H 3.807590 -5.645218 -0.082170
 H 5.125854 6.034513 1.427304
 H 4.551753 6.877806 -0.011455
 H 6.242810 6.357823 0.087199
 H 8.268667 0.262377 2.527510

H 9.366463 0.965067 1.343230
 H 2.270249 -0.838932 5.668308
 H 3.682006 -0.025623 4.997617
 H 3.790691 -6.121803 -2.513878
 H 2.951843 -4.604417 -2.827351
 H -6.031524 -2.351939 2.402366
 H -2.272099 -2.506399 0.353966
 H -6.005417 0.155270 0.722333
 H -2.458831 1.845046 -1.720557
 H -5.031278 3.359781 -0.395767
 H -6.673541 -4.546699 1.389665
 H -2.902040 -4.681527 -0.655253
 H -5.124372 -1.552605 -0.887790
 H -5.728938 -0.585105 -2.229470
 H -6.743959 1.767662 -1.769462
 H -6.894722 2.315324 -0.102613
 H -2.102485 -0.536440 -1.579106
 H -3.549791 -0.873645 -2.523536
 H -5.080508 1.248933 -3.175991
 H -4.564709 2.842678 -2.627763
 H -4.167285 2.359466 2.361566
 H -5.808077 2.379477 1.783588
 H -2.620697 3.694630 -0.835446
 H -2.218982 3.127899 0.774981
 H -7.438141 -1.790147 -0.008438
 H -7.322017 -2.391738 -1.657638
 H -8.497811 0.544735 0.413610
 H -9.059699 1.491482 -0.961237
 H -1.574258 -0.894377 -4.011789
 H -1.124838 0.721320 -3.471578
 H -2.580026 2.735489 -4.102009
 H -4.051064 2.483970 -5.040683
 H -5.374067 4.325220 3.264556
 H -5.755829 4.880278 1.636912
 H -2.157206 5.585828 0.690064
 H -3.808578 5.645256 0.082175
 H -5.125231 -6.034559 -1.427218

H -4.551611 -6.877812 0.011757
H -6.242585 -6.357661 -0.087392
H -8.268752 -0.262691 -2.527400
H -9.366400 -0.965746 -1.343201
H -2.270406 0.838869 -5.668218
H -3.682133 0.025558 -4.997464
H -3.791044 6.121732 2.513893
H -2.951896 4.604448 2.827060
Sn -1.100075 0.624079 1.724311
Sn 1.100170 -0.623770 -1.724566

107c^{Sn}

E = -4743.01448532
O -2.656956 1.407322 2.939542
Cl 1.537975 3.143683 0.764776
S -3.664304 1.411437 1.827757
C -3.190669 0.059525 0.914873
C -3.324028 2.925836 0.943152
O -5.091976 1.486604 2.164331
P -4.244401 -0.719828 -0.210970
C -4.369367 3.758788 0.575985
C -2.006748 3.272535 0.663576
C -5.174530 0.556016 -1.164990
C -3.262926 -1.827301 -1.303778
C -5.518737 -1.832710 0.529462
C -4.088244 4.931903 -0.119750
C -1.740509 4.440908 -0.028912
C -4.247086 1.301720 -2.128678
C -6.445913 0.081393 -1.872798
C -1.921101 -1.294002 -1.799259
C -4.073522 -2.416884 -2.460770
C -6.451204 -1.086551 1.482685
C -4.914559 -3.047027 1.234473
C -2.778874 5.285932 -0.442700
C -4.971689 2.457846 -2.804161
C -7.151424 1.252682 -2.548391
C -1.142881 -2.407635 -2.485639

C -3.286115 -3.520834 -3.156967
C -7.553618 -2.002526 1.995048
C -6.005072 -3.959576 1.783354
C -2.475750 6.543025 -1.200332
C -6.230470 1.983476 -3.514120
C -1.932455 -3.016268 -3.633819
C -6.966433 -3.216912 2.698290
O 1.649955 -0.399117 -2.805188
Cl -1.394150 -2.878058 1.439213
S 2.921594 -0.756061 -2.110507
C 2.961489 0.297669 -0.775479
C 2.687975 -2.432437 -1.533822
O 4.151237 -0.797241 -2.915618
P 4.405504 0.501745 0.167458
C 3.469740 -3.438276 -2.083059
C 1.714185 -2.727655 -0.584847
C 5.452355 -1.022181 0.149509
C 3.920420 0.985056 1.865056
C 5.483315 1.855808 -0.464710
C 3.287877 -4.750006 -1.655071
C 1.548180 -4.035561 -0.161916
C 4.911980 -2.102169 1.090101
C 6.943999 -0.789457 0.408422
C 2.804279 0.149397 2.490484
C 5.082290 1.183852 2.836805
C 5.826827 1.609029 -1.934148
C 4.873895 3.243507 -0.281416
C 2.337067 -5.067929 -0.685985
C 5.686656 -3.401812 0.923967
C 7.721053 -2.095586 0.276221
C 2.300938 0.832550 3.753851
C 4.575468 1.848784 4.113428
C 6.756913 2.686786 -2.472190
C 5.795231 4.322889 -0.836501
C 2.153448 -6.475584 -0.205763
C 7.170019 -3.187147 1.181180
C 3.434698 1.060879 4.744300

C 6.151454 4.070863 -2.293717
 H -5.386727 3.486954 0.848866
 H -1.181003 2.652933 1.006455
 H -5.480431 1.257499 -0.370845
 H -3.011215 -2.643201 -0.611954
 H -6.105603 -2.185609 -0.334021
 H -4.906616 5.588956 -0.411824
 H -0.701768 4.701569 -0.226535
 H -3.352465 1.655389 -1.599372
 H -3.903412 0.602924 -2.904504
 H -6.196495 -0.673166 -2.630449
 H -7.128993 -0.397323 -1.162432
 H -1.334717 -0.908412 -0.958875
 H -2.054210 -0.446365 -2.484201
 H -4.296466 -1.625399 -3.190638
 H -5.038237 -2.806345 -2.111265
 H -5.860443 -0.711554 2.325772
 H -6.873736 -0.190551 1.012114
 H -4.266868 -3.621931 0.564051
 H -4.265257 -2.697847 2.048962
 H -5.240484 3.204336 -2.045282
 H -4.292720 2.959411 -3.505380
 H -7.495438 1.955253 -1.774232
 H -8.050680 0.893270 -3.064854
 H -0.177362 -2.019985 -2.828976
 H -0.930767 -3.185649 -1.737618
 H -3.137148 -4.351272 -2.450609
 H -3.872446 -3.921489 -3.994132
 H -8.210239 -1.443220 2.673354
 H -8.181983 -2.333894 1.153001
 H -5.542412 -4.803747 2.310301
 H -6.569030 -4.390465 0.941152
 H -2.006109 6.316911 -2.166454
 H -1.774370 7.178904 -0.645949
 H -3.382387 7.125189 -1.394378
 H -5.954214 1.304249 -4.335620
 H -6.754547 2.830610 -3.974773

H -1.362379 -3.830880 -4.098120
 H -2.083123 -2.257177 -4.416978
 H -7.762612 -3.888391 3.045082
 H -6.424963 -2.881742 3.595441
 H 4.213395 -3.179355 -2.833060
 H 1.091166 -1.941295 -0.158426
 H 5.347299 -1.378778 -0.886974
 H 3.471832 1.971120 1.675714
 H 6.403402 1.799687 0.137292
 H 3.902750 -5.541583 -2.081592
 H 0.783773 -4.247294 0.583446
 H 3.842250 -2.265091 0.923196
 H 5.025522 -1.757792 2.127602
 H 7.087738 -0.375252 1.417141
 H 7.353695 -0.059230 -0.296963
 H 1.981034 0.025195 1.778595
 H 3.159471 -0.859619 2.733746
 H 5.533831 0.212500 3.086700
 H 5.874400 1.794931 2.382981
 H 4.892588 1.600714 -2.510301
 H 6.256840 0.610738 -2.081428
 H 4.663895 3.447493 0.775062
 H 3.902720 3.279781 -0.792831
 H 5.538892 -3.778190 -0.097509
 H 5.278032 -4.164761 1.598834
 H 7.664613 -2.431787 -0.770011
 H 8.782592 -1.914213 0.488019
 H 1.504266 0.229772 4.208446
 H 1.846840 1.793911 3.473015
 H 4.223249 2.861341 3.866913
 H 5.402332 1.967979 4.825410
 H 6.972130 2.491215 -3.530182
 H 7.721572 2.638772 -1.942803
 H 5.319854 5.304671 -0.717278
 H 6.719434 4.350138 -0.238289
 H 2.406967 -6.563730 0.858638
 H 1.109473 -6.795409 -0.311023

H 2.783741 -7.176913 -0.761929
H 7.318753 -2.897161 2.232895
H 7.727819 -4.120855 1.034551
H 3.065120 1.581214 5.636875
H 3.817015 0.086889 5.087997
H 6.838050 4.844647 -2.660651
H 5.239982 4.144219 -2.905841
Sn 1.002241 1.209313 -0.803257
Sn -1.239871 -0.358634 1.744674

107d^{Sn}

E = -4743.00987714
O -1.414014 0.667113 2.453522
Cl 0.195483 1.218206 -2.739365
S -2.782631 0.892712 1.813835
C -2.840639 -0.369826 0.726277
C -2.630751 2.461627 0.980888
O -3.903382 1.063792 2.750608
P -4.264268 -0.934479 -0.042527
C -3.236519 3.590309 1.512827
C -1.909480 2.528913 -0.205617
C -5.571037 0.365242 -0.057409
C -3.797391 -1.550353 -1.703505
C -4.991951 -2.366364 0.863174
C -3.115293 4.800278 0.835085
C -1.796498 3.737845 -0.869241
C -5.317157 1.464345 -1.091544
C -7.014086 -0.132843 -0.163713
C -2.995896 -0.543231 -2.528215
C -4.955134 -2.142648 -2.504424
C -5.267980 -1.958355 2.311938
C -4.086837 -3.596961 0.808488
C -2.398528 4.895591 -0.359385
C -6.266827 2.631591 -0.863651
C -7.983008 1.029968 0.031091
C -2.491208 -1.187247 -3.811508
C -4.441920 -2.770852 -3.795936

C -5.844796 -3.112981 3.118570
 C -4.657962 -4.745181 1.631319
 C -2.272997 6.197012 -1.091657
 C -7.715768 2.172225 -0.938905
 C -3.638428 -1.774223 -4.621088
 C -4.929794 -4.327492 3.068729
 O 2.576645 -1.121607 -2.930701
 Cl -0.026005 -2.533168 -1.452555
 S 3.666957 -0.683628 -2.045220
 C 2.892928 -0.069237 -0.658906
 C 4.512254 -2.173297 -1.530379
 O 4.728764 0.193103 -2.573367
 P 3.596628 1.073409 0.413218
 C 5.889524 -2.265052 -1.646012
 C 3.764951 -3.229697 -1.014830
 C 5.418342 0.830298 0.528420
 C 2.727976 0.927119 2.030699
 C 3.326702 2.830026 -0.098225
 C 6.534546 -3.416718 -1.201273
 C 4.420946 -4.367845 -0.577197
 C 5.786716 -0.373837 1.397670
 C 6.224392 2.066535 0.930244
 C 2.620865 -0.484415 2.608239
 C 3.230912 1.915260 3.083175
 C 3.756280 2.988792 -1.557974
 C 1.882186 3.293772 0.093907
 C 5.816370 -4.478979 -0.655159
 C 7.280172 -0.658762 1.318203
 C 7.719586 1.768512 0.883592
 C 1.703442 -0.477632 3.825864
 C 2.315723 1.906118 4.301702
 C 3.554904 4.413276 -2.052514
 C 1.695542 4.720335 -0.409292
 C 6.506630 -5.721037 -0.176838
 C 8.090605 0.560611 1.730736
 C 2.186675 0.505573 4.883040
 C 2.110786 4.854523 -1.866235

H -3.804534 3.506052 2.436201
 H -1.464468 1.632077 -0.625603
 H -5.444892 0.808206 0.943833
 H -3.091683 -2.360514 -1.451743
 H -5.941542 -2.611237 0.363193
 H -3.592791 5.690578 1.242213
 H -1.232218 3.768102 -1.800946
 H -4.275277 1.798149 -1.061889
 H -5.492899 1.054974 -2.096855
 H -7.178652 -0.591984 -1.149328
 H -7.224745 -0.903673 0.585260
 H -2.159692 -0.162854 -1.933534
 H -3.618025 0.322874 -2.783521
 H -5.667655 -1.341420 -2.752708
 H -5.508252 -2.885443 -1.913060
 H -4.324609 -1.622099 2.763680
 H -5.930939 -1.084781 2.355147
 H -3.932526 -3.924277 -0.226814
 H -3.095700 -3.327337 1.206972
 H -6.064081 3.069993 0.124763
 H -6.070463 3.420405 -1.600808
 H -7.880387 1.399825 1.062308
 H -9.015502 0.671708 -0.069998
 H -1.933825 -0.443222 -4.392262
 H -1.771069 -1.976014 -3.555188
 H -3.802202 -3.629342 -3.542170
 H -5.285208 -3.168349 -4.375587
 H -6.006377 -2.792912 4.155481
 H -6.833545 -3.384642 2.717459
 H -3.969970 -5.599329 1.598283
 H -5.597311 -5.083653 1.167695
 H -2.714506 6.129388 -2.094000
 H -1.218863 6.471524 -1.227734
 H -2.770070 7.011919 -0.555936
 H -7.932079 1.834149 -1.964049
 H -8.398213 3.007818 -0.737721
 H -3.258812 -2.257099 -5.530366

H -4.306297 -0.964121 -4.954861
H -5.363594 -5.162238 3.633825
H -3.976342 -4.079170 3.559230
H 6.438831 -1.432824 -2.081445
H 2.679170 -3.153433 -0.967490
H 5.671391 0.591111 -0.516548
H 1.697636 1.221430 1.759413
H 3.971395 3.447039 0.545918
H 7.618380 -3.491072 -1.283905
H 3.840747 -5.195297 -0.169992
H 5.203495 -1.254444 1.100467
H 5.530784 -0.150834 2.443809
H 5.943295 2.387460 1.944424
H 6.006379 2.903722 0.258404
H 2.259635 -1.179981 1.840144
H 3.610125 -0.849515 2.907256
H 4.247391 1.623881 3.388490
H 3.305274 2.929280 2.669841
H 3.157401 2.300792 -2.170184
H 4.795329 2.665929 -1.698395
H 1.579115 3.236132 1.146298
H 1.208602 2.634875 -0.475108
H 7.537213 -0.940677 0.287632
H 7.526457 -1.523744 1.947111
H 8.005663 1.577154 -0.161376
H 8.282260 2.654940 1.203398
H 1.630034 -1.491028 4.240635
H 0.687659 -0.185972 3.521412
H 1.319583 2.264289 4.000941
H 2.691193 2.608084 5.057204
H 3.845689 4.476121 -3.108416
H 4.220177 5.096957 -1.501558
H 0.650149 5.019931 -0.267041
H 2.302207 5.400738 0.208885
H 6.250531 -5.942242 0.867044
H 6.205931 -6.593546 -0.771519
H 7.595285 -5.627553 -0.246227

H 7.895173 0.785470 2.790886
H 9.165650 0.355011 1.650218
H 1.500789 0.511073 5.739289
H 3.166013 0.179451 5.266972
H 1.972282 5.887419 -2.212091
H 1.460754 4.217084 -2.484176
Sn -0.927229 -1.333592 1.313476
Sn 0.782079 -0.199671 -0.815576

$^{107}\text{e}^{\text{Sn}}$

E = -4743.04261415
O 0.728651 -0.018356 -2.120828
O -0.709008 -0.022512 2.261505
C -1.755476 0.445822 0.083495
C 1.789752 0.611742 0.004700
S 2.006970 0.669727 -1.647617
O 2.336517 1.968734 -2.254720
C 3.310557 -0.425656 -2.167858
P -2.835828 0.853231 -1.181325
C -4.275173 1.757094 -0.475324
C -3.499708 -0.658126 -2.005889
C -1.960002 1.779021 -2.493862
S -2.002879 0.572224 1.728597
O -2.411780 1.881310 2.257069
C -3.261810 -0.552537 2.320009
P 2.667518 1.467498 1.198481
C 4.428260 1.655003 0.710869
C 2.007359 3.161663 1.483258
C 2.415331 0.554800 2.764203
C 4.338992 0.043966 -2.970658
C 5.369967 -0.824970 -3.318057
C -3.949788 3.216675 -0.150375
C -5.600776 1.641839 -1.226922
C 3.287785 -1.744517 -1.727002
C -2.457575 -1.350451 -2.884780
C -4.011360 -1.619388 -0.934871
C 5.180182 0.323400 0.755037

C 5.216441 2.730313 1.460977
 C -2.992300 -2.650647 -3.472061
 C -1.071840 2.905896 -1.972719
 C -2.889074 2.238310 -3.617323
 C 5.381061 -2.148647 -2.876825
 C 4.320178 -2.594629 -2.077479
 C 6.491829 -3.082616 -3.250644
 C -5.063913 3.825962 0.687001
 C 2.176349 4.020479 0.228870
 C 0.531121 3.091461 1.873111
 C -0.298944 3.542173 -3.119238
 C 6.558771 0.472567 0.128005
 C -1.227764 4.022214 -4.224799
 C 2.671273 -0.949421 2.686097
 C 3.095904 1.148036 3.995321
 C -6.716797 2.272330 -0.398928
 C -4.578639 -2.894584 -1.537715
 C -4.499648 -0.062481 2.712841
 C -3.022601 -1.922630 2.292706
 C -4.040726 -2.802194 2.618235
 C -5.312108 -2.335648 2.976920
 C -3.532019 -3.583474 -2.399734
 C -2.089933 2.880336 -4.744555
 C -5.518135 -0.956752 3.029098
 C 1.589694 5.411457 0.427386
 C 2.094927 -1.624883 3.921312
 C -6.407361 3.713870 -0.019595
 C -6.408703 -3.301381 3.309397
 C 2.560331 0.466662 5.251770
 C 6.610824 2.876532 0.859648
 C 2.714200 -1.048521 5.188180
 C 7.363829 1.553134 0.836198
 C -0.075472 4.474670 2.055154
 C 0.121379 5.340775 0.820563
 H -4.411800 1.234740 0.482778
 H -4.335060 -0.329897 -2.642911
 H -1.270172 1.018566 -2.889860

H 4.340281 1.965005 -0.345805
 H 2.589996 3.599278 2.309693
 H 1.327890 0.671640 2.887865
 H 4.322094 1.077443 -3.308092
 H 6.185092 -0.464178 -3.944169
 H -2.994387 3.278397 0.379792
 H -3.853030 3.780985 -1.089065
 H -5.527965 2.144805 -2.201923
 H -5.848399 0.593028 -1.426788
 H 2.487990 -2.115649 -1.092138
 H -2.130113 -0.692769 -3.697943
 H -1.555814 -1.575665 -2.295635
 H -3.153129 -1.881960 -0.301809
 H -4.740156 -1.135119 -0.267075
 H 5.300726 0.026867 1.807188
 H 4.604581 -0.469209 0.263993
 H 4.700063 3.696080 1.434272
 H 5.301489 2.447608 2.520011
 H -3.792047 -2.419440 -4.193147
 H -2.186340 -3.144167 -4.027390
 H -0.384310 2.499586 -1.220230
 H -1.678848 3.670894 -1.474080
 H -3.482592 1.397200 -4.001958
 H -3.604240 2.975462 -3.223224
 H 4.292178 -3.620271 -1.712914
 H 7.283070 -2.567149 -3.804659
 H 6.940008 -3.541021 -2.360413
 H 6.119125 -3.902676 -3.878036
 H -5.100401 3.303340 1.654961
 H -4.831381 4.874553 0.911310
 H 1.673140 3.517698 -0.607078
 H 3.230922 4.093549 -0.065111
 H 0.374779 2.501725 2.783030
 H -0.005466 2.561361 1.073058
 H 0.311375 4.369953 -2.733560
 H 0.410977 2.807047 -3.517516
 H 6.442092 0.731340 -0.933972

H 7.087086 -0.488852 0.156190
 H -1.881912 4.820583 -3.839421
 H -0.648891 4.464201 -5.045737
 H 3.748396 -1.152659 2.635622
 H 2.249535 -1.386017 1.776017
 H 4.182348 0.985545 3.923716
 H 2.937465 2.232483 4.059754
 H -6.847461 1.676869 0.518041
 H -7.666040 2.211908 -0.946520
 H -4.918260 -3.559308 -0.732272
 H -5.466371 -2.656860 -2.144139
 H -4.649135 1.013062 2.775865
 H -2.044216 -2.295952 1.997983
 H -3.848763 -3.874078 2.588634
 H -2.692118 -3.903326 -1.765488
 H -3.939799 -4.494919 -2.854846
 H -1.442905 2.117669 -5.202459
 H -2.770482 3.230632 -5.531439
 H -6.492072 -0.573430 3.330494
 H 2.153710 5.939099 1.212591
 H 1.715008 5.997133 -0.492850
 H 2.263713 -2.706551 3.854308
 H 1.005559 -1.468482 3.932461
 H -6.385331 4.329195 -0.932267
 H -7.210242 4.121114 0.608248
 H -6.141455 -3.918345 4.176820
 H -7.344871 -2.783179 3.539815
 H -6.597094 -3.987862 2.474307
 H 3.066788 0.867856 6.139325
 H 1.494662 0.718602 5.357131
 H 6.511095 3.255249 -0.168873
 H 7.177949 3.633655 1.416353
 H 2.270832 -1.508816 6.080610
 H 3.785698 -1.301664 5.208693
 H 7.563418 1.234092 1.870910
 H 8.343047 1.682358 0.357576
 H -1.140295 4.358123 2.291197

H 0.391069 4.966641 2.923016
H -0.447418 4.907570 -0.014135
H -0.282548 6.348097 0.986430
Cl 0.332076 -3.736824 -2.276285
Cl 2.257850 -3.987686 0.849819
Sn 0.081351 -0.706219 0.062205
Sn -0.125719 -3.736453 0.163808

107f^{Sn}

E = -4743.02037103
O 1.845390 -2.157509 1.590039
C -1.381497 -0.732288 0.370241
C 2.170390 -0.304905 -0.025047
S 2.863641 -1.696901 0.565310
O 3.341150 -2.706702 -0.397353
C 4.318917 -1.335396 1.553815
P -2.292341 -2.162492 0.542877
C -3.459035 -2.347300 -0.865383
C -3.343016 -2.255909 2.060261
C -1.064580 -3.518272 0.700015
S -1.899651 0.799425 0.167060
O -0.668783 1.610391 -0.075398
C -3.046650 1.139065 -1.158085
P 2.719865 0.495222 -1.433730
C 4.554871 0.386858 -1.581853
C 2.053551 -0.208414 -3.008702
C 2.088832 2.214126 -1.389239
C 5.479439 -2.068686 1.357149
C 6.610225 -1.771697 2.113621
C -2.806041 -2.226692 -2.240440
C -4.433420 -3.522636 -0.841016
C 4.273089 -0.327188 2.512270
C -2.480019 -1.941936 3.284685
C -4.546137 -1.314712 1.987726
C 5.245229 1.331365 -0.597310
C 5.147643 0.549364 -2.981507
C -3.294825 -1.951741 4.570881

C -0.161517 -3.635679 -0.529826
 C -1.667978 -4.864207 1.104138
 C 6.596591 -0.753082 3.065165
 C 5.405522 -0.039743 3.255451
 C 7.819827 -0.415242 3.862858
 C -3.873864 -1.982240 -3.294939
 C 2.351103 -1.702369 -3.106032
 C 0.556223 0.059660 -3.122344
 C 0.899086 -4.708707 -0.325149
 C 6.741895 1.063712 -0.551801
 C 0.270356 -6.049386 0.017434
 C 2.288801 2.988943 -0.085566
 C 2.492894 3.054011 -2.600248
 C -5.511292 -3.303441 -1.899290
 C -5.349958 -1.335687 3.282357
 C -2.542664 1.471252 -2.408351
 C -4.415274 1.149672 -0.920623
 C -5.282621 1.462308 -1.960322
 C -4.803501 1.782962 -3.231631
 C -4.476763 -0.998207 4.480943
 C -0.587588 -5.926694 1.267331
 C -3.419531 1.783658 -3.435034
 C 1.760696 -2.312580 -4.368682
 C 1.478847 4.278657 -0.132814
 C -4.911247 -3.098677 -3.285522
 C -5.737658 2.129530 -4.350210
 C 1.683593 4.346124 -2.633330
 C 6.654460 0.310262 -2.946639
 C 1.842460 5.130482 -1.339004
 C 7.357690 1.206504 -1.936539
 C -0.053088 -0.591655 -4.357120
 C 0.258662 -2.077637 -4.425842
 H -4.057839 -1.432373 -0.729049
 H -3.710313 -3.291189 2.129699
 H -0.418685 -3.163868 1.519715
 H 4.748556 -0.650338 -1.259241
 H 2.568277 0.317086 -3.827714

H 1.006834 2.030751 -1.441857
 H 5.482100 -2.859435 0.610902
 H 7.524154 -2.343467 1.956964
 H -2.053948 -1.430047 -2.235457
 H -2.281986 -3.161718 -2.475715
 H -3.891320 -4.453508 -1.059242
 H -4.891800 -3.647401 0.148411
 H 3.358197 0.247241 2.658263
 H -1.645062 -2.651661 3.360108
 H -2.036132 -0.945359 3.143060
 H -4.174013 -0.296758 1.814872
 H -5.197528 -1.580244 1.145029
 H 5.077532 2.366238 -0.929921
 H 4.798971 1.240336 0.398995
 H 4.687125 -0.151900 -3.686125
 H 4.940553 1.562030 -3.357596
 H -3.662761 -2.971280 4.764116
 H -2.647714 -1.687822 5.416665
 H 0.299956 -2.659304 -0.730689
 H -0.766725 -3.901249 -1.406750
 H -2.229233 -4.770085 2.041996
 H -2.384135 -5.195189 0.338361
 H 5.369125 0.755918 3.998510
 H 8.636066 -1.116669 3.662469
 H 8.178743 0.594746 3.624842
 H 7.610524 -0.435055 4.939571
 H -4.358080 -1.016855 -3.090416
 H -3.410979 -1.897507 -4.287094
 H 1.923211 -2.197707 -2.227579
 H 3.429465 -1.895836 -3.043260
 H 0.385004 1.141046 -3.169500
 H 0.060931 -0.306574 -2.205926
 H 1.526105 -4.777093 -1.222494
 H 1.567559 -4.396102 0.484774
 H 6.910451 0.046819 -0.169537
 H 7.223112 1.747747 0.159172
 H -0.354732 -6.397319 -0.820734

H 1.046883 -6.811026 0.163646
 H 3.351081 3.219342 0.069081
 H 1.963042 2.391116 0.773666
 H 3.564927 3.296685 -2.536867
 H 2.352122 2.495580 -3.535780
 H -6.098727 -2.414260 -1.622658
 H -6.210558 -4.149457 -1.906072
 H -6.189253 -0.632501 3.205299
 H -5.791545 -2.334667 3.422338
 H -1.469853 1.521819 -2.550511
 H -4.797143 0.941355 0.074954
 H -6.355223 1.477514 -1.773351
 H -4.102831 0.031391 4.375606
 H -5.065930 -1.026891 5.406369
 H 0.055196 -5.652149 2.116600
 H -1.053859 -6.887266 1.522528
 H -3.020373 2.056308 -4.411048
 H 2.235524 -1.869688 -5.258266
 H 1.984671 -3.386655 -4.396511
 H 1.624190 4.835683 0.800090
 H 0.412079 4.020782 -0.163232
 H -4.430810 -4.035434 -3.607609
 H -5.706069 -2.892990 -4.014017
 H -6.780600 2.127930 -4.018269
 H -5.512651 3.123058 -4.757287
 H -5.644592 1.413979 -5.177379
 H 1.981164 4.952475 -3.499141
 H 0.620673 4.095137 -2.770234
 H 6.834282 -0.742470 -2.680819
 H 7.076746 0.454233 -3.949621
 H 1.217339 6.031951 -1.366187
 H 2.886246 5.473613 -1.253248
 H 7.271457 2.254682 -2.262455
 H 8.430899 0.977752 -1.909064
 H -1.138011 -0.417152 -4.366024
 H 0.347140 -0.099127 -5.256894
 H -0.209577 -2.582076 -3.568610

H -0.174287 -2.521134 -5.332107
 O -2.672413 1.363037 1.379420
 Cl -0.253154 3.283398 2.722653
 Cl -2.476964 4.352734 -0.147962
 Sn -2.663022 3.465302 2.155705
 Sn 0.596271 -0.019680 1.554466

108

E = -5084.18770936
 Ge -1.045619 -0.162993 0.600251
 Ge 1.001678 0.182284 -0.431078
 C -2.379036 1.216259 0.173842
 C -2.698867 2.196432 1.119481
 C -3.010610 1.264461 -1.075301
 C -3.622818 3.196021 0.828808
 H -2.218336 2.183512 2.097928
 C -3.931780 2.264151 -1.368716
 H -2.776610 0.514745 -1.830371
 C -4.239610 3.231589 -0.416762
 H -3.860757 3.949464 1.577817
 H -4.409176 2.290529 -2.346877
 H -4.960076 4.014328 -0.647262
 C 1.838232 1.923876 -0.175337
 C 3.206172 2.108644 -0.411227
 C 1.060337 3.042687 0.153791
 C 3.782956 3.370351 -0.303251
 H 3.831084 1.259086 -0.684564
 C 1.636992 4.300610 0.266519
 H -0.009358 2.929963 0.326627
 C 3.001127 4.467617 0.039785
 H 4.848443 3.495647 -0.488662
 H 1.018818 5.156682 0.531324
 H 3.452619 5.454217 0.127268
 C 2.355861 -1.212546 -0.195381
 C 3.377484 -1.097442 0.755277
 C 2.301264 -2.369512 -0.981326
 C 4.314536 -2.112141 0.917043

H 3.439162 -0.207421 1.380739
 C 3.240307 -3.383550 -0.823469
 H 1.509767 -2.483474 -1.722333
 C 4.248200 -3.255698 0.126698
 H 5.099208 -2.010994 1.664942
 H 3.184749 -4.276225 -1.444142
 H 4.983161 -4.048795 0.252369
 C -1.831981 -1.922305 0.282020
 C -3.188370 -2.082604 -0.021251
 C -1.037091 -3.067907 0.421753
 C -3.729494 -3.351763 -0.203384
 H -3.831925 -1.209130 -0.117347
 C -1.575485 -4.334199 0.232668
 H 0.016544 -2.969464 0.681731
 C -2.924188 -4.479039 -0.082564
 H -4.786567 -3.459621 -0.441024
 H -0.941391 -5.213081 0.336994
 H -3.348045 -5.471224 -0.227000

109

E = -5548.34833675
 Ge -0.016496 -0.004372 -1.213789
 Ge 0.018520 0.003773 1.213843
 C -1.835324 -0.078156 1.810532
 C -2.733129 0.910078 1.386030
 C -2.325818 -1.153847 2.555212
 C -4.085183 0.823534 1.699728
 H -2.376268 1.753829 0.794631
 C -3.679347 -1.242775 2.867366
 H -1.645365 -1.934574 2.893506
 C -4.561004 -0.256374 2.438370
 H -4.770026 1.599032 1.360805
 H -4.046925 -2.087436 3.447812
 H -5.620145 -0.328119 2.679682
 C 1.030281 -1.562553 1.783943
 C 2.217452 -1.447898 2.511575
 C 0.619546 -2.834965 1.365279

C 2.977589 -2.574699 2.812788
 H 2.555945 -0.467871 2.845971
 C 1.376714 -3.961526 1.668315
 H -0.297593 -2.949542 0.786532
 C 2.559889 -3.832071 2.390091
 H 3.900889 -2.469396 3.380181
 H 1.044441 -4.942884 1.333950
 H 3.155991 -4.712672 2.623227
 C 0.880863 1.660001 1.774656
 C 2.177272 1.944189 1.325325
 C 0.206863 2.623718 2.528923
 C 2.782386 3.159519 1.626125
 H 2.720599 1.213192 0.725457
 C 0.810706 3.842015 2.827730
 H -0.803229 2.423921 2.885418
 C 2.097955 4.112133 2.375814
 H 3.789987 3.365323 1.268813
 H 0.272677 4.583629 3.415974
 H 2.569290 5.065709 2.607539
 C -1.030676 1.561610 -1.780935
 C -2.221540 1.448464 -2.502445
 C -0.615049 2.833499 -1.365203
 C -2.981772 2.576503 -2.799165
 H -2.563133 0.468477 -2.834185
 C -1.372261 3.961128 -1.663789
 H 0.306182 2.946822 -0.792738
 C -2.559853 3.833293 -2.378480
 H -3.908633 2.472496 -3.360964
 H -1.036255 4.942071 -1.331947
 H -3.155999 4.714772 -2.608174
 C 1.835765 0.079335 -1.815578
 C 2.737359 -0.904937 -1.389428
 C 2.320297 1.150854 -2.569719
 C 4.087626 -0.818073 -1.710999
 H 2.384716 -1.745690 -0.791545
 C 3.671997 1.240141 -2.889582
 H 1.635992 1.928134 -2.908738

C 4.557471 0.257988 -2.459213
 H 4.775624 -1.590236 -1.370897
 H 4.035139 2.081962 -3.476947
 H 5.615047 0.329972 -2.707210
 C -0.881036 -1.659951 -1.772887
 C -0.207349 -2.625794 -2.524829
 C -2.177149 -1.942841 -1.322049
 C -0.810982 -3.845077 -2.819507
 H 0.802325 -2.426977 -2.882846
 C -2.782021 -3.159393 -1.618693
 H -2.720647 -1.209517 -0.725099
 C -2.097624 -4.114397 -2.365436
 H -0.272854 -4.588371 -3.405553
 H -3.789508 -3.363867 -1.260320
 H -2.568533 -5.069118 -2.593264

110

E = -6453.72159711
 Ge 0.521738 0.000122 0.000007
 B -0.171512 1.903007 -0.121027
 B -0.170788 -1.903074 0.120494
 Ge 2.835980 0.000851 0.001293
 N 0.795031 -2.967177 -0.023497
 C 0.180952 -4.175775 0.279423
 C 2.192717 -2.879316 -0.236631
 N -1.380928 -2.583047 0.507332
 C -1.110479 -3.945240 0.598307
 C -2.657186 -2.076493 0.868654
 N 0.794069 2.967352 0.022689
 C 0.179525 4.175812 -0.279894
 C 2.191707 2.880042 0.236264
 N -1.381988 2.582650 -0.507393
 C -1.111916 3.944915 -0.598474
 C -2.658072 2.075644 -0.868733
 H 0.714190 -5.117632 0.228234
 H -1.875608 -4.654017 0.888480
 C 2.693172 -2.782434 -1.555156

C 3.062069 -2.941209 0.874819
 C 4.074166 -2.828206 -1.738815
 C 1.739247 -2.685005 -2.725683
 C 4.938676 -2.959887 -0.658411
 H 4.481450 -2.761797 -2.744399
 C 4.438733 -3.001503 0.631989
 H 6.012833 -3.004473 -0.826615
 H 5.124141 -3.071561 1.473848
 C 2.533659 -2.993384 2.294027
 C 2.302740 -1.885523 -3.890310
 C 1.284604 -4.074098 -3.172870
 H 0.857519 -2.144696 -2.360501
 H 2.634649 -0.894935 -3.559328
 H 1.532445 -1.747015 -4.658411
 H 3.148424 -2.391334 -4.373678
 H 2.134653 -4.664020 -3.539965
 H 0.550830 -3.995027 -3.984908
 H 0.817276 -4.626892 -2.350709
 C 3.307420 -2.071795 3.230966
 C 2.537486 -4.423543 2.833616
 H 1.495336 -2.639655 2.263474
 H 1.934779 -5.095115 2.214655
 H 2.131567 -4.450464 3.852559
 H 3.560741 -4.820677 2.867056
 H 4.324952 -2.438738 3.416777
 H 2.802271 -2.008510 4.202472
 H 3.381644 -1.061123 2.813804
 C -3.785136 -2.420104 0.099300
 C -2.779176 -1.303016 2.038597
 C -5.030809 -1.939417 0.503226
 C -3.705269 -3.355240 -1.093076
 C -5.168399 -1.169356 1.646693
 H -5.912232 -2.188366 -0.085431
 C -4.050713 -0.870701 2.411308
 H -6.150197 -0.811085 1.950759
 H -4.169092 -0.303363 3.332147
 C -1.597514 -1.026067 2.946323

C -4.306136 -4.718536 -0.746082
 C -4.383016 -2.789939 -2.334891
 H -2.646811 -3.500248 -1.337511
 H -5.459920 -2.643946 -2.181793
 H -4.261918 -3.477083 -3.181563
 H -3.947697 -1.827853 -2.607321
 H -3.842343 -5.163865 0.141034
 H -4.186952 -5.420169 -1.581290
 H -5.380101 -4.623806 -0.537978
 C -1.534779 0.422192 3.414960
 C -1.591786 -2.005358 4.118810
 H -0.683420 -1.206334 2.372746
 H -2.495308 -1.892535 4.732861
 H -0.719862 -1.835701 4.763969
 H -1.554992 -3.042258 3.762784
 H -1.560884 1.112710 2.562151
 H -0.602334 0.599041 3.964342
 H -2.363278 0.678648 4.088109
 H 0.712473 5.117825 -0.228629
 H -1.877302 4.653485 -0.888474
 C 3.061444 2.941453 -0.874955
 C 2.691784 2.784184 1.555005
 C 4.072698 2.830976 1.739125
 C 1.737586 2.686761 2.725299
 C 4.937480 2.962502 0.658940
 H 4.479657 2.765473 2.744905
 C 4.437966 3.002754 -0.631680
 H 6.011548 3.007975 0.827481
 H 5.123639 3.072517 -1.473335
 C 2.533426 2.991660 -2.294371
 C 2.300975 1.887333 3.890035
 C 1.282778 4.075829 3.172380
 H 0.855954 2.146400 2.359965
 H 2.633226 0.896847 3.559051
 H 1.530535 1.748556 4.657939
 H 3.146420 2.393337 4.373624
 H 0.548960 3.996724 3.984375

H 0.815439 4.628510 2.350145
 H 2.132732 4.665879 3.539493
 C 2.534997 4.421228 -2.835536
 C 3.309000 2.070406 -3.230154
 H 1.495684 2.636232 -2.263694
 H 4.325650 2.439368 -3.416800
 H 2.803781 2.004513 -4.201444
 H 3.385621 1.060533 -2.811473
 H 1.930805 5.092456 -2.217678
 H 2.129443 4.446194 -3.854684
 H 3.557574 4.820101 -2.869026
 C -3.786173 2.418812 -0.099378
 C -2.779749 1.302078 -2.038655
 C -5.031625 1.937487 -0.503219
 C -3.706737 3.354120 1.092901
 C -5.168874 1.167226 -1.646594
 H -5.913160 2.186077 0.085425
 C -4.051086 0.869071 -2.411241
 H -6.150509 0.808430 -1.950571
 H -4.169257 0.301604 -3.332020
 C -1.598006 1.025950 -2.946533
 C -4.384134 2.788520 2.334780
 C -4.308409 4.717047 0.745866
 H -2.648343 3.499725 1.337264
 H -3.844767 5.162753 -0.141140
 H -4.189810 5.418692 1.581144
 H -5.382278 4.621649 0.537583
 H -5.461038 2.642349 2.181843
 H -4.263029 3.475529 3.181559
 H -3.948603 1.826455 2.606930
 C -1.592756 2.005808 -4.118555
 C -1.534660 -0.422057 -3.415800
 H -0.683971 1.206335 -2.372892
 H -2.363103 -0.678697 -4.088939
 H -1.560290 -1.112901 -2.563231
 H -0.602204 -0.598226 -3.965384
 H -0.721018 1.836570 -4.764078

H -1.555982 3.042551 -3.762063
H -2.496447 1.893176 -4.732377

111

E = -6795.91590497
Sn 0.556281 -1.207666 -3.210118
Cl -0.900340 0.691268 -4.003883
Ge 0.344192 -0.031170 -0.725959
Cl 2.701910 0.211036 -3.214540
O -2.409225 -1.648505 -1.837846
S -2.130869 -1.862275 -0.418171
C -1.490638 -0.366285 0.270176
O -1.184902 -2.901182 -0.006723
C -3.663782 -2.248149 0.392712
P -2.421503 1.163754 0.186690
C -1.370937 2.326997 -0.669866
C -3.978077 1.061485 -0.719451
C -2.828079 1.700751 1.862296
C 1.630678 -0.101581 0.696889
C -0.092018 1.872499 -0.995919
P 2.959523 -1.181914 0.817892
S 1.459084 0.953962 2.024800
C 0.751119 2.744982 -1.693049
O 0.053240 0.946114 2.493280
C -1.831500 3.595817 -1.044678
O 2.524586 0.641805 2.997133
C 2.930411 -2.283105 2.268129
C 2.890771 -2.384234 -0.538175
C 4.567424 -0.349141 0.803796
C 1.741577 2.637755 1.504479
C -0.971562 4.445961 -1.718169
C 0.319513 4.017264 -2.033585
C -3.922222 0.905577 -2.109196
C -5.206417 1.142053 -0.059090
C -5.108334 0.802728 -2.824512
C -6.334934 0.871926 -2.168616
C -6.384584 1.050077 -0.789320

C -3.184748 0.743481 2.812627
 C -3.538881 1.140068 4.094866
 C -2.830441 3.053835 2.199710
 C -3.534351 2.489043 4.433975
 C -3.181029 3.443563 3.486722
 C -3.617710 -2.782571 1.679243
 C -4.868464 -2.064330 -0.267992
 C -4.805129 -3.090738 2.322035
 C -6.040388 -2.896606 1.689294
 C -7.315144 -3.250177 2.392958
 C -6.049705 -2.388812 0.390080
 C 1.850462 -2.269986 3.147508
 C 3.954449 -3.218302 2.432095
 C 1.802010 -3.186541 4.191768
 C 2.827004 -4.110378 4.362214
 C 3.905122 -4.126279 3.481705
 C 1.790259 -3.248114 -0.515184
 C 3.867511 -2.532472 -1.520999
 C 1.658339 -4.236217 -1.480543
 C 2.635630 -4.382535 -2.461635
 C 3.734740 -3.532852 -2.479356
 C 5.339189 -0.232579 1.960178
 C 4.942234 0.329201 -0.361637
 C 6.502266 0.528810 1.938465
 C 6.894536 1.174980 0.770932
 C 6.113004 1.076791 -0.377232
 C 2.967144 2.988711 0.956810
 C 0.739297 3.582045 1.675657
 C 3.167224 4.294051 0.530250
 C 2.163870 5.258558 0.657073
 C 2.356556 6.648384 0.131484
 C 0.955895 4.885103 1.251753
 H -1.190321 -0.541747 1.308235
 H -1.310056 5.435473 -2.018606
 H -2.855670 3.901870 -0.833160
 H 0.987881 4.681090 -2.579738
 H 1.736505 2.401833 -2.000995

H -2.965033 0.850387 -2.630573
 H -5.065204 0.670002 -3.903265
 H -7.342807 1.114118 -0.277955
 H -7.259354 0.795415 -2.738433
 H -5.244375 1.269444 1.020303
 H -3.184727 -0.312926 2.554006
 H -3.809520 0.389631 4.834450
 H -3.168811 4.498637 3.751596
 H -3.801042 2.797308 5.442851
 H -2.534766 3.802606 1.468981
 H -2.654759 -2.963176 2.153502
 H -4.777901 -3.505203 3.328917
 H -8.192083 -2.946621 1.812782
 H -7.372245 -2.768889 3.376961
 H -7.381942 -4.332934 2.561176
 H -6.999772 -2.239750 -0.120582
 H -4.874052 -1.667065 -1.280970
 H 1.056003 -1.538501 3.019627
 H 0.959425 -3.172823 4.880226
 H 2.786131 -4.823828 5.183264
 H 4.706000 -4.851886 3.609175
 H 4.789495 -3.239389 1.731890
 H 1.020758 -3.139505 0.244747
 H 0.780991 -4.878788 -1.463803
 H 2.533718 -5.155117 -3.221300
 H 4.495080 -3.637028 -3.250161
 H 4.730009 -1.874914 -1.552935
 H 5.010389 -0.707058 2.881449
 H 7.097642 0.627160 2.843874
 H 7.806012 1.770011 0.759643
 H 6.404530 1.596399 -1.287848
 H 4.301646 0.298968 -1.244439
 H 3.751100 2.243510 0.853444
 H 4.122516 4.569292 0.085387
 H 1.917619 7.397652 0.800347
 H 1.865092 6.760115 -0.845759
 H 3.416662 6.886567 -0.004459

H 0.165734 5.626155 1.369957

H -0.197660 3.271585 2.128401

112⁺

E = -9845.74258788

C 2.133766 -1.111100 -0.416770

S 1.961377 -0.731511 1.211811

Ge 0.808222 -0.794499 -1.879885

P 3.695356 -1.700885 -0.873057

O 0.571430 -0.090055 1.373886

C 1.808862 -2.187285 2.214406

S -1.835158 -2.356150 -0.570888

Ge -0.571381 0.353901 -0.179473

P -3.466525 -0.630832 1.098157

O 3.032156 0.077866 1.809945

C 2.475905 -2.250204 3.428693

H 3.116824 -1.427043 3.733802

S -1.346171 2.706132 1.614087

P 0.026033 3.320083 -0.996368

O -0.479660 -2.366228 -1.266769

C 2.319407 -3.387440 4.213893

H 2.846913 -3.455866 5.164002

O -1.996964 -3.459719 0.381301

C 1.500139 -4.442868 3.807575

O -1.729068 1.443086 2.279926

C 0.836344 -4.338713 2.578078

H 0.179135 -5.139759 2.244220

O -2.316942 3.798594 1.524100

C 0.991408 -3.222340 1.774694

H 0.471922 -3.149818 0.822968

C 1.315802 -5.655765 4.666838

H 0.282165 -5.719986 5.030973

H 1.512914 -6.575601 4.103221

H 1.978335 -5.638962 5.537658

C 4.790990 -0.416247 -1.531570

C 4.213547 0.720412 -2.097638

H 3.134774 0.857212 -2.050012

C 5.015119 1.676954 -2.707395
 H 4.560392 2.562666 -3.146073
 C 6.395562 1.511410 -2.738329
 H 7.023666 2.264686 -3.209687
 C 6.977315 0.384844 -2.163261
 H 8.057523 0.257250 -2.183646
 C 6.179132 -0.582637 -1.564912
 H 6.636025 -1.465997 -1.121566
 C 3.472098 -2.924191 -2.188408
 C 4.403655 -3.054014 -3.218957
 H 5.259295 -2.385467 -3.275916
 C 4.227058 -4.032780 -4.189732
 H 4.950638 -4.128528 -4.996329
 C 3.125721 -4.880147 -4.134472
 H 2.988430 -5.642092 -4.899100
 C 2.194655 -4.750113 -3.108177
 H 1.325918 -5.403467 -3.068385
 C 2.361783 -3.773870 -2.134408
 H 1.622865 -3.655920 -1.343291
 C 4.575785 -2.521478 0.481079
 C 5.367254 -1.780066 1.362649
 H 5.511064 -0.714727 1.201256
 C 5.952211 -2.406062 2.456233
 H 6.572015 -1.828621 3.138808
 C 5.742661 -3.762863 2.680150
 H 6.201865 -4.248443 3.538929
 C 4.946924 -4.500636 1.809029
 H 4.780621 -5.561289 1.983346
 C 4.364715 -3.884617 0.709421
 H 3.745833 -4.465251 0.029121
 C -2.077676 -0.808266 0.063040
 C -2.992795 -2.633964 -1.889694
 C -3.185643 -1.636099 -2.838017
 H -2.618355 -0.708789 -2.770506
 C -4.107099 -1.841675 -3.851803
 H -4.268104 -1.065774 -4.599283
 C -4.840270 -3.032316 -3.931459

C -4.605040 -4.021663 -2.975240
 H -5.162472 -4.955725 -3.024064
 C -3.684877 -3.832981 -1.951181
 H -3.514263 -4.588431 -1.188277
 C -5.875893 -3.224363 -4.996422
 H -5.622623 -2.676214 -5.910032
 H -6.853090 -2.855017 -4.655111
 H -5.999683 -4.281993 -5.251130
 C -4.786020 -1.799527 0.616177
 C -4.833484 -3.066724 1.205749
 H -4.091299 -3.349255 1.946914
 C -5.817771 -3.972393 0.829727
 H -5.850758 -4.953720 1.298337
 C -6.754357 -3.627324 -0.138071
 H -7.526323 -4.337889 -0.427217
 C -6.705697 -2.371160 -0.733746
 H -7.437531 -2.094048 -1.489672
 C -5.729504 -1.458221 -0.357567
 H -5.714729 -0.475124 -0.818999
 C -4.195161 1.005786 0.869162
 C -4.732164 1.728607 1.932362
 H -4.617610 1.368504 2.951284
 C -5.366412 2.938944 1.688581
 H -5.766338 3.513101 2.520891
 C -5.470281 3.427776 0.391620
 H -5.970575 4.376487 0.208137
 C -4.926911 2.711109 -0.669027
 H -5.005831 3.092948 -1.685664
 C -4.273213 1.508167 -0.431298
 H -3.835210 0.938913 -1.250453
 C -3.141139 -1.042247 2.825092
 C -1.836836 -1.368114 3.187072
 H -1.042556 -1.287428 2.453244
 C -1.562748 -1.785387 4.482854
 H -0.540738 -2.045624 4.753362
 C -2.588843 -1.867418 5.418038
 H -2.375154 -2.190475 6.435127

C -3.894850 -1.545089 5.055800
 H -4.698166 -1.618762 5.785734
 C -4.177977 -1.143103 3.756660
 H -5.205861 -0.929054 3.466477
 C -0.775365 2.225001 0.059728
 C 0.057179 3.344798 2.499661
 C 0.881472 2.477159 3.204517
 H 0.599412 1.433089 3.304797
 C 2.072194 2.961686 3.728103
 H 2.733870 2.280336 4.260807
 C 2.448409 4.297605 3.560672
 C 1.569222 5.158168 2.895906
 H 1.827167 6.211290 2.791843
 C 0.371725 4.693118 2.370457
 H -0.327325 5.358131 1.869222
 C 3.776362 4.789201 4.048459
 H 3.726467 5.833058 4.376644
 H 4.152061 4.183043 4.879320
 H 4.519720 4.737692 3.239677
 C -0.085685 2.586800 -2.659749
 C 1.018561 2.498977 -3.508021
 H 1.978078 2.905492 -3.201088
 C 0.902586 1.872790 -4.745393
 H 1.773468 1.795993 -5.392523
 C -0.313489 1.334555 -5.143782
 H -0.400851 0.837984 -6.107613
 C -1.419807 1.423873 -4.302947
 H -2.374307 1.004522 -4.614718
 C -1.309581 2.042078 -3.064959
 H -2.163808 2.083165 -2.391502
 C -0.796299 4.934517 -0.988985
 C -0.146748 6.142546 -0.729819
 H 0.912489 6.163003 -0.491893
 C -0.869748 7.330112 -0.730855
 H -0.360940 8.269260 -0.524679
 C -2.237068 7.316977 -0.982638
 H -2.798525 8.249023 -0.981289

C -2.890755 6.110248 -1.211738
H -3.966558 6.091801 -1.373199
C -2.175786 4.923127 -1.206206
H -2.692209 3.973858 -1.313113
C 1.797094 3.584265 -0.689145
C 2.409362 2.766763 0.257466
H 1.829966 2.007802 0.771035
C 3.754892 2.931313 0.567109
H 4.199176 2.278052 1.314029
C 4.496354 3.913626 -0.074988
H 5.548008 4.051874 0.168984
C 2.558916 4.547838 -1.365912
H 2.104589 5.173350 -2.132634
C 3.901042 4.713281 -1.050450
H 4.486738 5.470572 -1.567971

4 Untersuchungen zu Phospheniumkationen

4.1 Energien der Verbindungen

Tabelle 4.1. Energien der Verbindungen.

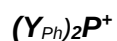
	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	ΔG [hartree]	ΔG [kJ/mol]
$(Y_{Ph})_2P^+$	-2957.52275614	0.802216	0.673697	–	–
$^3(Y_{Ph})_2P^+$	-2957.46350122	0.801013	0.671928	0.057486	150.929283
$Y_{Ph}(Ph)P^+$	-1881.51980999	0.499651	0.408128	–	–
$^3Y_{Ph}(Ph)P^+$	-1881.47716491	0.498333	0.409037	0.043554	114.351237
$Y_{Ph}(Cy)P^+$	-1885.14597216	0.570444	0.476616	–	–
$^3Y_{Ph}(Cy)P^+$	-1885.08917626	0.569155	0.475138	0.055318	145.237146
NHP	-608.62326436	0.133493	0.093455	–	–
3NHP	-608.52783290	0.131419	0.087334	0.089310	234.484613

4.2 Natürliche Ladungen und Wiberg Bond Indices

Tabelle 4.2. Natürliche Ladungen und Wiberg Bond Indices.

		$(Y_{Ph})_2P^+$	$Y_{Ph}(Ph)P^+$	$Y_{Ph}(Cy)P^+$	NHP⁺
WBI	$C^{Ylid}-P^{III}$ oder N–P	1.3058/ 1.3069	1.6173/ (1.0031)	1.6808/ (0.9274)	1.0201/ 1.0202
Natürliche Ladungen	P^{III}	0.75766	0.82837	0.83949	1.12327
	C^{Ylid}	-0.91140/ -0.91922	-0.80653	-0.80197	–
	P^{IV}	1.59873/ 1.58992	1.59573	1.59680	–

4.3 Koordinaten der Verbindungen



E = -2957.52275614

P -0.025380 -0.439366 -0.068975

P -2.913641 -0.332729 0.008344

P 2.878412 -0.485862 -0.020260

C -1.420402 0.565871 -0.231666

C -1.514555 2.020040 -0.470107

C -2.366273 2.857105 0.264390

H -2.976377 2.446347 1.064391

C -2.426268 4.220955 0.002667

H -3.092146 4.849988 0.590199
 C -1.634118 4.782258 -0.991601
 H -1.675809 5.851111 -1.189566
 C -0.787333 3.963371 -1.733837
 H -0.160499 4.390473 -2.514012
 C -0.735485 2.601010 -1.481901
 H -0.072762 1.963172 -2.064740
 C -3.662858 0.049919 1.617488
 C -5.036083 0.226334 1.790138
 H -5.712085 0.157961 0.941358
 C -5.540892 0.510768 3.054804
 H -6.611050 0.654332 3.186869
 C -4.682905 0.617942 4.143581
 H -5.082932 0.843257 5.129975
 C -3.311214 0.449294 3.971751
 H -2.638339 0.544473 4.821269
 C -2.799207 0.173083 2.711471
 H -1.724423 0.066240 2.564399
 C -2.577113 -2.111130 -0.003383
 C -2.612065 -2.879976 1.158810
 H -2.887940 -2.429282 2.109099
 C -2.293903 -4.233152 1.098429
 H -2.325502 -4.834355 2.004615
 C -1.940080 -4.813656 -0.113309
 H -1.689119 -5.871629 -0.156230
 C -1.917201 -4.047631 -1.276860
 H -1.648973 -4.504476 -2.226886
 C -2.239100 -2.700322 -1.226410
 H -2.219897 -2.098462 -2.133902
 C -4.161575 -0.079401 -1.275928
 C -4.092032 0.970645 -2.194117
 H -3.275115 1.684524 -2.156414
 C -5.076085 1.097385 -3.168774
 H -5.018284 1.915612 -3.883131
 C -6.124385 0.186850 -3.233313
 H -6.890576 0.292847 -3.998547
 C -6.190516 -0.866587 -2.325624

H -7.002840 -1.587917 -2.381225
 C -5.210978 -1.004565 -1.352178
 H -5.254185 -1.841829 -0.656578
 C 1.417043 0.486071 0.131238
 C 1.587753 1.935866 0.349675
 C 0.883592 2.573052 1.379251
 H 0.227550 1.979021 2.013937
 C 0.991864 3.941785 1.576378
 H 0.424278 4.417724 2.373481
 C 1.822204 4.705407 0.760293
 H 1.907800 5.778402 0.917998
 C 2.537422 4.087523 -0.258577
 H 3.183225 4.675930 -0.907593
 C 2.415257 2.718808 -0.465317
 H 2.943787 2.254010 -1.296380
 C 4.190149 0.118038 1.074529
 C 4.306858 -0.372056 2.377718
 H 3.662892 -1.174867 2.725675
 C 5.264808 0.153194 3.235708
 H 5.353761 -0.238364 4.246588
 C 6.109491 1.169299 2.802191
 H 6.858553 1.578842 3.476661
 C 6.002497 1.655623 1.503956
 H 6.664898 2.446217 1.158718
 C 5.049005 1.133080 0.640105
 H 4.981228 1.512774 -0.375783
 C 2.524134 -2.218547 0.381592
 C 2.928522 -3.251366 -0.464328
 H 3.453145 -3.030874 -1.390464
 C 2.647484 -4.572455 -0.129810
 H 2.961736 -5.373075 -0.795744
 C 1.967229 -4.866835 1.044939
 H 1.750312 -5.901441 1.303090
 C 1.559678 -3.838423 1.890966
 H 1.017569 -4.065100 2.806412
 C 1.829275 -2.519730 1.559993
 H 1.479165 -1.714669 2.203296

C 3.574405 -0.468195 -1.694403
 C 4.904082 -0.836807 -1.925135
 H 5.553342 -1.097918 -1.090813
 C 5.396915 -0.862446 -3.223431
 H 6.431534 -1.146292 -3.403465
 C 4.569939 -0.521096 -4.290712
 H 4.961589 -0.537064 -5.305727
 C 3.247612 -0.155086 -4.062853
 H 2.603962 0.115400 -4.897003
 C 2.747401 -0.128850 -2.766035
 H 1.715700 0.164740 -2.575163

$^3(Y_{Ph})_2P^+$

E = -2957.46350122
 P -0.031094 -0.907325 -0.585560
 P -2.886615 -0.363712 -0.010763
 P 2.890922 -0.426859 -0.160892
 C -1.411192 0.250588 -0.765286
 C -1.283824 1.567438 -1.346088
 C -1.942543 2.695536 -0.812455
 H -2.599995 2.575252 0.046408
 C -1.706230 3.960292 -1.319335
 H -2.200830 4.819265 -0.870855
 C -0.825091 4.140319 -2.386195
 H -0.645428 5.137155 -2.783015
 C -0.179306 3.038201 -2.939061
 H 0.501108 3.169326 -3.778206
 C -0.395796 1.770631 -2.422824
 H 0.108928 0.907280 -2.849042
 C -2.718854 -0.335321 1.784985
 C -3.097184 0.793558 2.517058
 H -3.636928 1.607248 2.035663
 C -2.776181 0.882266 3.865681
 H -3.081750 1.756178 4.436848
 C -2.057764 -0.139526 4.480681
 H -1.803243 -0.064054 5.535772
 C -1.669629 -1.258655 3.750593

H -1.115531 -2.059873 4.234887
 C -1.995969 -1.363594 2.403304
 H -1.680172 -2.232124 1.828617
 C -3.140934 -2.084698 -0.504131
 C -3.917251 -2.920769 0.303360
 H -4.289647 -2.567773 1.263785
 C -4.212378 -4.209434 -0.120969
 H -4.811663 -4.861927 0.510135
 C -3.744089 -4.662266 -1.350909
 H -3.976110 -5.672804 -1.680609
 C -2.983166 -3.825612 -2.160743
 H -2.619756 -4.179166 -3.123013
 C -2.682059 -2.535181 -1.743941
 H -2.082371 -1.882542 -2.375177
 C -4.393491 0.496889 -0.506947
 C -4.491445 1.018975 -1.800662
 H -3.635447 0.994604 -2.470597
 C -5.689288 1.574836 -2.229611
 H -5.761268 1.987088 -3.233514
 C -6.791799 1.603093 -1.381145
 H -7.727622 2.041445 -1.721393
 C -6.703112 1.062986 -0.102570
 H -7.568239 1.071654 0.556660
 C -5.509170 0.504088 0.335899
 H -5.452514 0.068424 1.331441
 C 1.270166 0.269095 -0.159987
 C 1.053744 1.535915 0.555193
 C 0.211147 1.585427 1.675485
 H -0.233058 0.662120 2.040610
 C -0.046234 2.788598 2.320840
 H -0.698172 2.800450 3.191613
 C 0.530455 3.967922 1.863503
 H 0.325060 4.910678 2.366271
 C 1.377031 3.933056 0.758003
 H 1.824268 4.851707 0.383342
 C 1.638085 2.733409 0.114356
 H 2.261305 2.721911 -0.776801

C 4.057072 0.707194 0.621915
 C 4.154758 0.745318 2.014223
 H 3.609921 0.027874 2.623602
 C 4.953566 1.703657 2.624378
 H 5.028241 1.731659 3.709064
 C 5.656836 2.621497 1.851108
 H 6.282919 3.369851 2.332516
 C 5.564944 2.582069 0.463704
 H 6.116742 3.297781 -0.141690
 C 4.764007 1.630291 -0.153885
 H 4.686118 1.610202 -1.239135
 C 2.850424 -1.962953 0.806961
 C 3.611041 -3.082364 0.466578
 H 4.237445 -3.074240 -0.422025
 C 3.554593 -4.223116 1.259284
 H 4.144969 -5.095832 0.989138
 C 2.743953 -4.250418 2.388802
 H 2.703641 -5.145250 3.006415
 C 1.977873 -3.138375 2.725015
 H 1.339590 -3.162298 3.605682
 C 2.019739 -1.998306 1.933829
 H 1.398734 -1.138062 2.181090
 C 3.546619 -0.814011 -1.799572
 C 4.918405 -1.051051 -1.951466
 H 5.586285 -0.980289 -1.094040
 C 5.432022 -1.360604 -3.204181
 H 6.498285 -1.541639 -3.320854
 C 4.584722 -1.431754 -4.306394
 H 4.990340 -1.672000 -5.287014
 C 3.222938 -1.192635 -4.157123
 H 2.561427 -1.246667 -5.018951
 C 2.700224 -0.883239 -2.906935
 H 1.633927 -0.709749 -2.779315

$Y_{Ph}(Ph)P^+$

E = -1881.51980999

P 1.110613 0.237679 -0.013516

P -1.552762 1.557494 0.059160
 C -0.687028 0.108897 0.004865
 C -1.184030 -1.285855 -0.055127
 C -1.706784 -1.777658 -1.254688
 H -1.766532 -1.120900 -2.120119
 C -2.141100 -3.094256 -1.342447
 H -2.545253 -3.466367 -2.281462
 C -2.058654 -3.934046 -0.236327
 H -2.399317 -4.964771 -0.307070
 C -1.544830 -3.450252 0.963232
 H -1.487339 -4.099728 1.834245
 C -1.106444 -2.134163 1.056190
 H -0.711077 -1.758405 1.997397
 C -3.312853 1.166777 0.114647
 C -4.115429 2.196639 -0.404807
 H -3.647113 3.099021 -0.798432
 C -5.498422 2.076198 -0.425901
 H -6.107093 2.874215 -0.845038
 C -6.098569 0.940251 0.105302
 H -7.182641 0.846377 0.102031
 C -5.315274 -0.072106 0.657136
 H -5.788843 -0.950890 1.089500
 C -3.933001 0.031604 0.660521
 H -3.342022 -0.764507 1.100910
 C 1.626844 1.925580 -0.360039
 C 1.170316 2.562442 -1.522344
 H 0.489432 2.049482 -2.199680
 C 1.585619 3.854069 -1.807581
 H 1.231167 4.348866 -2.708913
 C 2.450015 4.516131 -0.938319
 H 2.770662 5.531139 -1.163249
 C 2.903361 3.886047 0.214455
 H 3.577936 4.404262 0.891999
 C 2.496447 2.589286 0.507818
 H 2.854680 2.099607 1.410271
 C 1.746257 -0.238289 1.603934
 C 1.085029 0.225544 2.746412

H 0.171094 0.810287 2.650279
 C 1.595276 -0.068249 4.003149
 H 1.081778 0.289572 4.892688
 C 2.760571 -0.822103 4.122410
 H 3.155892 -1.055011 5.108900
 C 3.420825 -1.278197 2.986541
 H 4.332045 -1.864261 3.082285
 C 2.919781 -0.986549 1.722721
 H 3.440624 -1.340491 0.835793
 C 1.802305 -0.877836 -1.250704
 C 2.487040 -0.377946 -2.362422
 H 2.637577 0.690972 -2.486482
 C 2.995805 -1.255537 -3.312782
 H 3.529523 -0.862162 -4.174872
 C 2.829544 -2.626742 -3.158096
 H 3.229032 -3.309853 -3.904736
 C 2.163086 -3.128210 -2.043423
 H 2.041896 -4.201220 -1.913956
 C 1.651354 -2.262540 -1.087953
 H 1.143762 -2.666416 -0.215166

$^3Y_{Ph}(Ph)P^+$

E = -1881.47716491
 P 0.663935 0.573960 0.096888
 P -1.280305 -0.282882 -2.044099
 C 0.099487 -0.759529 -0.957683
 C 0.758863 -2.029426 -1.028890
 C 0.085392 -3.126429 -1.625426
 H -0.920722 -2.978488 -2.016689
 C 0.676957 -4.371755 -1.702921
 H 0.135524 -5.198834 -2.156506
 C 1.966764 -4.568208 -1.206231
 H 2.434206 -5.548095 -1.273971
 C 2.659693 -3.501286 -0.632625
 H 3.671192 -3.647117 -0.260264
 C 2.071447 -2.254235 -0.539902
 H 2.639146 -1.434538 -0.105441

C -2.717646 -0.633901 -1.013228
 C -3.897334 0.062309 -1.325658
 H -3.914095 0.738261 -2.180090
 C -5.030096 -0.085110 -0.537187
 H -5.934436 0.468505 -0.781040
 C -5.010344 -0.941601 0.559953
 H -5.900104 -1.058848 1.175044
 C -3.855491 -1.662884 0.860994
 H -3.848091 -2.349370 1.705394
 C -2.717273 -1.511328 0.084345
 H -1.823126 -2.089431 0.312758
 C -0.757485 1.630266 0.431981
 C -1.110655 2.615119 -0.498463
 H -0.466984 2.824908 -1.350475
 C -2.292559 3.324826 -0.331101
 H -2.564890 4.094635 -1.049511
 C -3.124581 3.048203 0.749561
 H -4.053008 3.601683 0.873688
 C -2.772924 2.070207 1.674424
 H -3.423198 1.856077 2.519333
 C -1.587263 1.362187 1.522773
 H -1.316785 0.600649 2.250142
 C 1.299158 -0.066800 1.659153
 C 0.658771 -1.154996 2.262185
 H -0.193077 -1.627023 1.776401
 C 1.123915 -1.640843 3.476186
 H 0.628129 -2.488386 3.943873
 C 2.227203 -1.050571 4.086818
 H 2.592599 -1.437267 5.035753
 C 2.867858 0.026339 3.484072
 H 3.733858 0.482650 3.958094
 C 2.409045 0.521625 2.269036
 H 2.924054 1.354705 1.796574
 C 1.918356 1.574697 -0.716610
 C 2.174326 2.869166 -0.247354
 H 1.595030 3.280172 0.578467
 C 3.162542 3.633658 -0.851296

H 3.363839 4.639801 -0.490467
 C 3.887492 3.115530 -1.922079
 H 4.657942 3.720060 -2.395993
 C 3.624461 1.834536 -2.395345
 H 4.183881 1.437638 -3.239284
 C 2.638724 1.058616 -1.796530
 H 2.423854 0.061195 -2.175359

$Y_{Ph}(\text{Cy})P^+$

E = -1885.14575903
 P 1.226241 0.281500 -0.044528
 P -1.559030 1.375073 0.032164
 C -0.556133 0.021777 -0.001005
 C -0.959837 -1.402886 0.080575
 C -1.267482 -2.110448 -1.085915
 H -1.222271 -1.602976 -2.047760
 C -1.608524 -3.455773 -1.020726
 H -1.847176 -3.996006 -1.934362
 C -1.638788 -4.110676 0.206421
 H -1.903624 -5.164637 0.255758
 C -1.334707 -3.413400 1.371455
 H -1.364240 -3.919374 2.334156
 C -0.996303 -2.066109 1.312411
 H -0.758810 -1.521886 2.224321
 C 1.604935 1.955106 -0.577182
 C 1.059141 2.438462 -1.774101
 H 0.388165 1.816520 -2.364348
 C 1.373526 3.718683 -2.204612
 H 0.949855 4.095871 -3.132559
 C 2.224909 4.519530 -1.446580
 H 2.465845 5.524821 -1.785663
 C 2.765924 4.041031 -0.258907
 H 3.429172 4.668462 0.331942
 C 2.460601 2.757922 0.180183
 H 2.885222 2.386328 1.109980
 C 1.881101 0.031649 1.616067
 C 1.175060 0.549317 2.707046

H 0.214635 1.039392 2.554771
 C 1.702328 0.433971 3.985811
 H 1.153346 0.834332 4.835104
 C 2.929948 -0.194543 4.178753
 H 3.338953 -0.287332 5.182629
 C 3.635591 -0.703288 3.093569
 H 4.595970 -1.190578 3.245752
 C 3.117498 -0.590624 1.808476
 H 3.674529 -0.985261 0.961702
 C 2.007264 -0.912047 -1.144265
 C 2.635345 -0.499208 -2.322321
 H 2.685635 0.554942 -2.582892
 C 3.214367 -1.444094 -3.161762
 H 3.704965 -1.120852 -4.076965
 C 3.172721 -2.793021 -2.828635
 H 3.628128 -3.528812 -3.488144
 C 2.558493 -3.204965 -1.648702
 H 2.532967 -4.259339 -1.383331
 C 1.976523 -2.271865 -0.803366
 H 1.504438 -2.600471 0.120832
 C -3.256439 0.656848 0.172982
 C -4.113344 1.549248 1.077188
 C -3.875221 0.533087 -1.226803
 H -3.185402 -0.346573 0.614357
 C -5.546059 1.035353 1.148617
 H -4.111888 2.576563 0.680527
 H -3.677508 1.603627 2.083801
 C -5.311179 0.028654 -1.140383
 H -3.861145 1.517122 -1.721585
 H -3.270385 -0.141289 -1.845991
 C -6.161853 0.910359 -0.237430
 H -6.146085 1.701551 1.780417
 H -5.550574 0.051332 1.640970
 H -5.742645 -0.025330 -2.147540
 H -5.302749 -0.999047 -0.747740
 H -7.180725 0.511001 -0.167277
 H -6.251197 1.911013 -0.686556

$^3Y_{Ph}(Cy)P^+$

E = -1885.08917626

P 0.998947 0.386171 -0.015327

C -0.137785 -0.798272 0.672028

P -1.414047 0.008111 1.689724

C -0.093560 -2.229690 0.500020

C 0.389945 -2.852540 -0.673857

H 0.752088 -2.248931 -1.500462

C 0.358413 -4.229884 -0.810134

H 0.719500 -4.684476 -1.730079

C -0.141517 -5.031687 0.213996

H -0.156533 -6.113670 0.103289

C -0.633534 -4.439138 1.376668

H -1.028072 -5.057804 2.179685

C -0.620990 -3.063667 1.515588

H -1.000598 -2.607431 2.428888

C -2.842267 0.001102 0.473614

H -2.449060 -0.267083 -0.515206

C -3.485511 1.384968 0.399242

H -3.808249 1.688955 1.406918

H -2.747837 2.126782 0.069229

C -4.685400 1.369701 -0.540161

H -5.150141 2.363357 -0.564219

H -4.333423 1.165114 -1.563333

C -5.699446 0.310013 -0.133319

H -6.122865 0.572499 0.847683

H -6.539525 0.294374 -0.838259

C -5.055112 -1.066296 -0.049766

H -4.722142 -1.376831 -1.051649

H -5.783667 -1.816510 0.281776

C -3.856606 -1.068733 0.894799

H -4.195190 -0.863298 1.921511

H -3.382657 -2.058952 0.909399

C 2.284752 -0.309673 -1.069279

C 3.189923 -1.194851 -0.470664

H 3.101170 -1.441545 0.586785

C 4.201641 -1.759537 -1.231643

H 4.903971 -2.449843 -0.770042
 C 4.319795 -1.438583 -2.582684
 H 5.116916 -1.881105 -3.176305
 C 3.430154 -0.548176 -3.172467
 H 3.532406 -0.288498 -4.223676
 C 2.407386 0.020380 -2.419712
 H 1.720648 0.723462 -2.884530
 C 1.899743 1.215760 1.311358
 C 2.860623 2.162850 0.933724
 H 3.025394 2.391402 -0.118965
 C 3.611789 2.806725 1.905657
 H 4.353368 3.546740 1.613412
 C 3.422296 2.496909 3.250819
 H 4.016190 2.999919 4.010979
 C 2.485602 1.540593 3.623839
 H 2.346939 1.290170 4.672996
 C 1.720784 0.895703 2.657523
 H 0.995776 0.143720 2.958574
 C 0.031363 1.592915 -0.942246
 C -0.020812 2.940665 -0.581436
 H 0.546632 3.305751 0.271099
 C -0.816729 3.816173 -1.313327
 H -0.859748 4.865903 -1.032235
 C -1.558342 3.351449 -2.393552
 H -2.180011 4.040430 -2.961301
 C -1.514709 2.004360 -2.748440
 H -2.100780 1.640806 -3.589527
 C -0.725529 1.123108 -2.023804
 H -0.702157 0.066485 -2.292683

NHP

E = -608.623264361
 C -0.683744 1.331733 -0.000013
 C 0.683665 1.331779 0.000008
 N -1.180148 0.067211 -0.000029
 H -1.343480 2.194026 -0.000012
 H 1.343412 2.194060 0.000022

C -2.616101 -0.215684 0.000017
H -2.774615 -1.297173 0.000370
H -3.075948 0.213158 0.895348
H -3.075893 0.212561 -0.895630
C 2.616071 -0.215634 -0.000001
H 3.075914 0.213018 -0.895422
H 3.075883 0.212809 0.895540
H 2.774606 -1.297125 -0.000116
N 1.180119 0.067257 0.000013
P 0.000065 -1.131986 -0.000004

³NHP

E = -608.527832901
C -0.700156 1.325837 -0.000008
C 0.700081 1.325841 -0.000193
N -1.244105 0.106187 0.000413
H -1.319845 2.220436 -0.000184
H 1.319850 2.220377 -0.000134
C -2.662177 -0.190686 0.000041
H -2.933004 -0.769103 0.892260
H -3.227687 0.745009 0.000287
H -2.932743 -0.768562 -0.892625
C 2.662182 -0.190606 0.000280
H 3.227528 0.745185 -0.000569
H 2.932784 -0.767788 0.893371
H 2.933101 -0.769581 -0.891543
N 1.244028 0.106114 -0.000305
P 0.000064 -1.197627 -0.000156

5 Untersuchungen zu elektronischen Eigenschaften und dem katalytischen Einsatz von YPhos-Liganden

5.1 Untersuchungen zu YPhos–Goldkomplexen

5.1.1 Energien der Verbindungen

Tabelle 5.1. Energien der Verbindungen.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)
89–Cl	-2938.80062099	0.508515	0.403160
89–tht⁺	-3034.06297137	0.628362	0.514295
XXX•AuCl	-2717.50760938	0.745193	0.633164
XXX•AuCl	-2832.20697585	0.780535	0.659855
XXX•AuCl	-3055.06939653	0.753695	0.630856
XXX•AuCl	-2756.88652887	0.773994	0.657008
XXX•AuCl	-2835.64667582	0.832989	0.710372
[XXX•AuNCMe]⁺	-2389.69194590	0.794523	0.673080
[XXX•AuNCMe]⁺	-2504.39591860	0.830178	0.700257
[XXX•AuNCMe]⁺	-2727.25237835	0.802935	0.670785
[XXX•AuNCMe]⁺	-2429.07131589	0.823478	0.695022
[XXX•AuNCMe]⁺	-2507.84207199	0.882124	0.749889

5.1.2 Natürliche Ladungen und Analyse der Bindungskritischen Punkte

Tabelle 5.2. Natürliche Ladungen am Gold und die Bindungskritischen Punkte zwischen dem Goldzentrum und der C^{lipo}–C^{orto}-Bindung.

	Natürliche Ladung am Au	Bond critical point analysis	
		ρ [e/Bohr^3]	Ellipticity
89–Cl	–	0.01369531052	0.245348
89–tht⁺	–	0.01629255395	0.221986
90a	0.28188	0.01378	2.419956
90b	0.26238	0.01371	1.016016
90c	0.28082	0.01126	2.389292
90d	0.29036	0.01527	2.733992
90e	0.28482	0.01529	1.856583
107a⁺	0.36107	0.01618	1.870019
107b⁺	0.34916	0.01483	1.529117
107c⁺	0.35522	0.01176	2.584028
107d⁺	0.35910	0.01475	0.330991
107e⁺	0.36123	0.01695	2.348932

5.1.3 Ausgewählte Au–C-Abstände

Tabelle 5.3. Au–C^{ipso}- und Au–C^{ortho}-Abstände.

	Au–C ^{ipso}	Au–C ^{ortho}
90a	3.23378	3.24389
90b	3.19467	3.29720
90c	3.36099	3.36903
90d	3.20700	3.13049
90e	3.24099	3.10633
107a⁺	3.12357	3.15290
107b⁺	3.15457	3.21119
107c⁺	3.34987	3.29529
107d⁺	3.13810	3.35415
107e⁺	3.12686	3.08247

5.1.4 Koordinaten der Verbindungen

89–Cl

E = -2938.80062099

Au -2.406587 0.319763 -0.152032

P -0.443630 1.288478 -0.732687

Cl -0.369041 1.737719 -2.819874

P 0.899176 -1.263748 0.092416

C 0.982413 0.402962 -0.338630

C -0.436275 -2.116802 -0.771201

C 2.472970 -2.067435 -0.313134

C 0.662278 -1.557960 1.870020

C -0.192802 2.955294 -0.051852

C 2.303217 1.082799 -0.277439

C 3.081182 1.239953 -1.429308

C 2.785570 1.598632 0.931052

C 4.308834 1.890346 -1.372760

C 4.779544 2.390961 -0.162762

C 4.014665 2.244417 0.990479

C -0.850489 3.275730 1.137512

C 0.709084 3.860835 -0.612640

C -0.594415 4.488096 1.768968

C 0.313367 5.383589 1.214058

C 0.960317 5.069827 0.022219

C 3.589983 -1.804596 0.486043
C 2.605492 -2.858635 -1.454434
C 4.829857 -2.321316 0.135946
C 4.960354 -3.107789 -1.004849
C 3.849124 -3.379271 -1.795202
C 1.043949 -2.765368 2.462234
C 0.037907 -0.572325 2.634254
C 0.792041 -2.983126 3.810792
C 0.159499 -2.001070 4.568976
C -0.215997 -0.797578 3.982331
C -1.304901 -2.982244 -0.104613
C -0.635202 -1.825404 -2.126706
C -2.375024 -3.544463 -0.789004
C -2.576858 -3.249731 -2.131826
C -1.704119 -2.397095 -2.802059
H 2.703243 0.850846 -2.372973
H 4.902268 2.006110 -2.277975
H 5.741150 2.899194 -0.119378
H 4.373343 2.641931 1.938223
H 2.174017 1.494956 1.826901
H -1.573727 2.577110 1.559874
H -1.115027 4.736093 2.691822
H 0.510907 6.333593 1.707097
H 1.666786 5.771322 -0.417005
H 1.210726 3.614587 -1.545755
H 3.489674 -1.189125 1.378140
H 5.697684 -2.107095 0.756036
H 5.932966 -3.513086 -1.277095
H 3.947922 -4.000041 -2.683250
H 1.738280 -3.071700 -2.075649
H 1.540157 -3.531888 1.868528
H 1.090202 -3.922095 4.272759
H -0.038723 -2.175560 5.624692
H -0.710041 -0.029948 4.573853
H -0.243660 0.370071 2.166305
H -1.176991 -3.180983 0.956332
H -3.073012 -4.187621 -0.259204

H -3.431671 -3.671635 -2.655997
H -1.871423 -2.152517 -3.848643
H 0.015742 -1.114816 -2.633309
Cl -4.357252 -0.701680 0.561136

89-tht⁺

E = -3034.06297137
Au -1.769464 0.536559 -0.755872
P 0.359789 1.392334 -0.922995
S -3.943844 -0.425019 -0.456617
Cl 0.792407 1.905831 -2.920626
C -4.833599 0.927278 0.415483
C -3.706329 -1.416414 1.091521
P 1.061542 -1.312202 0.105478
C 1.537004 0.288464 -0.332073
C -0.078270 -2.021218 -1.121563
C 2.510059 -2.375395 0.235593
C 0.219564 -1.408618 1.720318
C 0.576656 2.988387 -0.101179
C 2.915735 0.760802 -0.034464
C 3.854907 0.902144 -1.061439
C 3.286526 1.112979 1.268199
C 5.130548 1.385337 -0.791048
C 5.488440 1.724334 0.510021
C 4.564614 1.584590 1.541116
C -0.367046 3.379345 0.851733
C 1.708467 3.775434 -0.327398
C -0.174388 4.544540 1.584587
C 0.957369 5.322139 1.364466
C 1.893785 4.938222 0.408567
C 3.262776 -2.367273 1.413351
C 2.934602 -3.121432 -0.865758
C 4.436336 -3.105950 1.484707
C 4.857578 -3.851693 0.388080
C 4.107682 -3.861146 -0.783737
C 0.018932 -2.635661 2.362124
C -0.245841 -0.233794 2.315423

C -0.681439 -2.686908 3.561566
C -1.166573 -1.514681 4.137532
C -0.939479 -0.288644 3.520464
C -1.099135 -2.909192 -0.767573
C 0.071808 -1.637755 -2.460265
C -1.977698 -3.380120 -1.736386
C -1.842108 -2.974478 -3.060828
C -0.811451 -2.112599 -3.422456
C -4.470622 -0.683750 2.186046
C -4.414320 0.802188 1.866540
H 3.572320 0.635766 -2.078204
H 5.850578 1.493061 -1.599833
H 6.488119 2.099063 0.720279
H 4.838204 1.853494 2.559450
H 2.553386 1.024224 2.069960
H -1.258899 2.771711 1.012533
H -0.914213 4.851188 2.321025
H 1.107092 6.236674 1.934464
H 2.776003 5.549742 0.232623
H 2.438900 3.478101 -1.077046
H 2.934846 -1.781351 2.270106
H 5.024903 -3.097628 2.399291
H 5.776465 -4.431202 0.447746
H 4.436568 -4.447718 -1.638589
H 2.350085 -3.129961 -1.783628
H 0.422486 -3.551172 1.930749
H -0.835933 -3.642871 4.057347
H -1.702916 -1.557770 5.083542
H -1.288421 0.631909 3.984526
H -0.044657 0.725056 1.840454
H -1.224076 -3.224192 0.264515
H -2.772957 -4.067721 -1.455264
H -2.538431 -3.336402 -3.814271
H -0.697776 -1.796867 -4.457078
H 0.857669 -0.938861 -2.740228
H -4.079163 -2.425816 0.895864
H -2.633214 -1.466354 1.296396

H -4.037690 -0.918543 3.164763
H -5.516213 -1.016333 2.200860
H -5.070697 1.392719 2.516364
H -3.388274 1.180806 1.988447
H -4.571419 1.876562 -0.059442
H -5.904939 0.744911 0.277805

90a

E = -2717.50760938
Au -1.703843 -1.351576 0.522718
Cl -2.204272 -3.571235 1.054351
P 1.596798 -0.535354 -0.293324
C 0.588720 0.839061 -0.598991
P -1.083916 0.775150 -0.003195
C 1.188936 2.170707 -0.860095
C 0.707577 2.971358 -1.909444
H -0.056236 2.568352 -2.569558
C 1.200988 4.250397 -2.135211
H 0.797039 4.844584 -2.953276
C 3.299003 0.397886 -2.281852
H 2.400551 0.827546 -2.717178
C 2.735760 3.977091 -0.314231
H 3.536713 4.358305 0.316934
C 2.218450 4.764089 -1.337273
H 2.609154 5.763666 -1.516340
C 3.226373 -0.271754 -1.056828
C 2.221077 2.708767 -0.076825
H 2.612661 2.123062 0.750364
C 4.515974 0.516452 -2.938626
H 4.565072 1.047768 -3.886766
C 5.666178 -0.041343 -2.388597
H 6.619430 0.055440 -2.904672
C 1.916305 -0.974543 1.456700
C 4.377676 -0.851806 -0.520623
H 4.328797 -1.404325 0.414896
C 5.593829 -0.731049 -1.184205
H 6.487061 -1.181830 -0.756594

C 2.803142 -0.190728 2.204516
H 3.433427 0.544505 1.707511
C 2.896078 -0.344422 3.580741
H 3.589488 0.273926 4.147340
C 2.100659 -1.284001 4.231782
H 2.163323 -1.396107 5.312480
C 1.235736 -2.084552 3.495662
H 0.614335 -2.828751 3.989163
C 1.145164 -1.937922 2.114825
H 0.453873 -2.574707 1.566133
C 1.017229 -2.074625 -1.067981
C 1.564024 -3.303419 -0.692771
H 2.315637 -3.354762 0.092793
C 1.131959 -4.469085 -1.310619
H 1.541890 -5.427498 -0.999732
C 0.170463 -4.412968 -2.314390
H -0.178583 -5.330649 -2.783136
C -0.341917 -3.186249 -2.719625
H -1.089220 -3.137530 -3.508746
C 0.083494 -2.018229 -2.100981
H -0.317409 -1.053019 -2.393103
C -1.267024 1.880446 1.481996
H -2.251067 1.606719 1.894260
C -0.207383 1.515108 2.517257
H -0.244998 0.439170 2.734273
H 0.781669 1.711974 2.082221
C -0.359180 2.326584 3.795171
H -1.307002 2.059010 4.286816
H 0.441555 2.059964 4.497905
C -0.346153 3.819728 3.501928
H -0.480887 4.397249 4.425823
H 0.638772 4.099244 3.096611
C -1.420111 4.181880 2.486080
H -1.393786 5.256362 2.262574
H -2.411100 3.977144 2.920238
C -1.262927 3.383174 1.196290
H -2.067982 3.647948 0.499277

H -0.320455 3.666001 0.709297
C -2.260312 1.502453 -1.232629
H -1.945969 2.543723 -1.397716
C -3.682618 1.503498 -0.668203
H -3.959943 0.466633 -0.420743
H -3.729097 2.069563 0.270025
C -4.677349 2.078963 -1.669086
H -4.447727 3.142951 -1.834417
H -5.690417 2.041522 -1.248525
C -4.623462 1.341453 -2.998859
H -4.953254 0.302375 -2.848267
H -5.322657 1.790244 -3.716102
C -3.209764 1.337448 -3.562191
H -2.912526 2.368978 -3.807494
H -3.169474 0.770409 -4.501295
C -2.218893 0.756574 -2.562282
H -1.200998 0.776023 -2.973512
H -2.462807 -0.301209 -2.373845

90b

E = -2832.20697585
Au 2.546823 0.441297 -0.551888
P 0.492069 1.194841 0.091433
Cl 4.645606 -0.248218 -1.287728
P -0.494730 -1.737531 0.184245
C -0.746110 -0.043625 0.324775
C 1.204299 -2.251916 0.520569
C -0.885485 -2.447695 -1.453832
C -1.565244 -2.648933 1.351023
C -0.053270 2.434387 -1.193392
C 0.585587 2.244561 1.619187
O -6.082776 1.819281 0.670827
C -4.834565 1.329316 0.528905
C -6.961529 1.738014 -0.414576
C -2.168422 0.389289 0.408026
C -3.042823 0.258119 -0.676778
C -2.687279 0.977847 1.572650

C -4.358734 0.710485 -0.628991
C -3.986056 1.451404 1.633858
C 1.796405 -1.830793 1.716591
C 1.932339 -3.041695 -0.370394
C 3.249580 -3.376637 -0.079807
C 3.840834 -2.937152 1.097269
C 3.109100 -2.174711 2.002744
C -0.297720 -1.812824 -2.552160
C -1.706117 -3.557209 -1.654706
C -0.534430 -2.276780 -3.838418
C -1.372004 -3.372404 -4.037148
C -1.953261 -4.011014 -2.947837
C -1.010927 -3.434755 2.365043
C -2.959785 -2.548877 1.257421
C -3.773563 -3.198025 2.176846
C -3.212554 -3.962216 3.194700
C -1.831310 -4.084268 3.281310
C 0.953309 1.414016 2.842823
C 1.568782 3.401740 1.443417
C 1.031794 2.268661 4.100336
C 2.016848 3.415201 3.924279
C 1.662350 4.252833 2.704600
C -0.280087 1.743479 -2.534646
C -1.219499 3.348449 -0.808369
C -1.546575 4.325468 -1.932139
C -1.834055 3.593737 -3.234436
C -0.647043 2.730450 -3.634401
H -2.683669 -0.213544 -1.590323
H -4.996406 0.587542 -1.499825
H -4.379044 1.915972 2.535208
H -2.045987 1.057869 2.448213
H -7.160436 0.694378 -0.701980
H -6.573489 2.274515 -1.293573
H -7.898825 2.203558 -0.098718
H 1.485799 -3.375256 -1.302855
H 3.824302 -3.961618 -0.793451
H 4.880805 -3.178138 1.304828

H 3.569567 -1.827693 2.925280
H 1.224554 -1.220729 2.409392
H 0.360993 -0.960875 -2.384782
H -0.063842 -1.783442 -4.686496
H -1.566623 -3.732196 -5.045715
H -2.601143 -4.871722 -3.102162
H -2.152139 -4.070410 -0.805987
H -3.417247 -1.968785 0.461195
H -4.854444 -3.104664 2.093429
H -3.852729 -4.468761 3.914432
H -1.383026 -4.692004 4.064749
H 0.066757 -3.549819 2.441737
H -0.425029 2.654782 1.770005
H 1.931331 0.940903 2.660207
H 0.223890 0.602820 2.970457
H 0.033630 2.677061 4.322785
H 1.312079 1.646642 4.960585
H 3.029286 3.002824 3.796621
H 2.045968 4.041394 4.825397
H 2.399668 5.052869 2.559199
H 0.694329 4.748738 2.875812
H 2.558698 2.984481 1.199181
H 1.281101 4.033109 0.594055
H 0.842664 3.065306 -1.306162
H -2.113281 2.754870 -0.583591
H -0.979487 3.907665 0.104349
H -2.400847 4.950611 -1.641220
H -0.696184 5.008454 -2.083398
H -2.720779 2.954257 -3.099645
H -2.078289 4.306624 -4.032794
H 0.217424 3.379887 -3.839997
H -0.856107 2.187941 -4.565848
H -1.081730 1.000774 -2.425201
H 0.629073 1.191598 -2.810658

90c

E = -3055.07208032

Au 2.435137 -0.759504 -0.672448
P 0.463029 -1.182489 0.386499
Cl 4.409964 -0.177106 -1.773506
P -0.014767 1.754041 -0.082263
C -0.667992 0.178360 0.208206
C 1.209972 2.279066 1.168909
C 0.804051 1.999793 -1.683429
C -1.356120 2.977865 0.019980
C -0.368327 -2.639547 -0.398562
C 0.704315 -1.689467 2.164349
F -6.864470 -1.151444 1.207627
C -6.344660 -0.918038 -0.002756
F -7.042735 0.080079 -0.555591
F -6.587458 -2.010001 -0.741150
C -2.111796 -0.074608 0.156833
C -2.929331 0.443240 -0.865658
C -2.739326 -0.880128 1.125500
C -4.291928 0.200208 -0.901780
C -4.885756 -0.601747 0.070415
C -4.098546 -1.147321 1.081278
C 0.510061 1.105747 -2.713356
C 1.701265 3.048046 -1.905781
C 2.309839 3.183804 -3.146403
C 2.023013 2.282327 -4.166959
C 1.117811 1.248963 -3.953825
C 2.578302 2.052685 0.991769
C 0.756602 2.800630 2.384830
C 1.649510 3.054290 3.416976
C 3.005180 2.783944 3.250418
C 3.466984 2.292391 2.035186
C -1.444744 4.019492 -0.903732
C -2.307865 2.880830 1.042275
C -2.468435 4.956133 -0.802322
C -3.407173 4.858498 0.217157
C -3.325058 3.819346 1.139876
C 0.520310 -0.522601 3.127751
C 2.087290 -2.306420 2.386997

C 0.669140 -0.972241 4.574487
C 2.022125 -1.630362 4.808113
C 2.257045 -2.771245 3.827742
C -0.651879 -2.356442 -1.872466
C 0.452208 -3.918340 -0.228545
C -1.293811 -3.550724 -2.565611
C -0.449443 -4.805765 -2.408463
C -0.198038 -5.100547 -0.937995
H -2.474243 1.048391 -1.648813
H -4.901429 0.625981 -1.695740
H -4.560026 -1.763789 1.849612
H -2.141508 -1.286761 1.939873
H 1.937569 3.746801 -1.105207
H 3.023360 3.987763 -3.313117
H 2.517543 2.380665 -5.131011
H 0.901184 0.537376 -4.747402
H -0.170920 0.280163 -2.517190
H -0.300010 3.003345 2.535662
H 1.283134 3.459284 4.358075
H 3.702444 2.969496 4.065166
H 4.525735 2.092608 1.884318
H 2.967570 1.686004 0.044044
H -0.721567 4.097609 -1.711725
H -2.532303 5.762681 -1.529712
H -4.210021 5.589385 0.290919
H -4.064475 3.731011 1.932905
H -2.264542 2.052451 1.746594
H -0.068160 -2.450779 2.369859
H -0.444898 -0.025809 2.962677
H 1.294333 0.225431 2.908043
H 0.539410 -0.113475 5.246318
H -0.133426 -1.685246 4.819376
H 2.811757 -0.875312 4.673395
H 2.104286 -1.987684 5.842766
H 1.542980 -3.583678 4.033853
H 3.259302 -3.196628 3.966233
H 2.277838 -3.127816 1.686929

H 2.840233 -1.537382 2.154491
H -1.328002 -2.770782 0.123025
H 0.299166 -2.103981 -2.369056
H -1.306268 -1.481163 -1.960331
H -2.290335 -3.724682 -2.131986
H -1.453348 -3.320358 -3.626873
H -0.936051 -5.661563 -2.893615
H 0.514651 -4.661523 -2.919478
H 0.433357 -5.990873 -0.822631
H -1.156100 -5.331825 -0.447625
H 1.462417 -3.750244 -0.634874
H 0.573452 -4.155135 0.835337

90d

E = -2756.88652887
Au 1.714419 -1.299115 -0.499485
P 0.961198 0.790818 0.027926
Cl 2.287253 -3.503786 -1.041777
P -1.667949 -0.638564 0.098178
C -0.805579 0.844854 0.135509
C -1.352612 -1.704110 -1.344572
C -3.453335 -0.277916 0.080133
C -1.355384 -1.719017 1.547588
C 1.759415 1.323422 1.610312
C 1.391675 2.067302 -1.258778
C -1.446508 2.177603 0.302324
C -2.175222 2.829095 -0.717593
C -1.264283 2.862507 1.517633
C -2.644369 4.127773 -0.491752
C -2.493237 2.173961 -2.026397
C -2.426885 4.794367 0.705022
H -3.194095 4.627437 -1.289121
C -1.734992 4.150209 1.725300
H -2.800453 5.807381 0.842357
H -1.566412 4.645871 2.679613
H -0.741065 2.347967 2.319914
C -1.909284 -1.347360 2.777278

C -0.437615 -2.772933 1.508000
H -3.513565 1.765560 -2.019381
H -1.818025 1.340672 -2.233039
H -2.436103 2.891489 -2.853203
C -0.064006 -3.420082 2.682226
H 0.014078 -3.094006 0.571913
C -0.608182 -3.034866 3.900763
H 0.664886 -4.226193 2.630466
C -1.541874 -2.002363 3.944351
H -0.310751 -3.540478 4.817520
H -1.982641 -1.701755 4.892849
H -2.626685 -0.532383 2.831067
C -1.727483 -3.050540 -1.336337
C -0.715584 -1.175574 -2.469203
C -1.437137 -3.860401 -2.426197
H -2.227126 -3.472478 -0.466081
C -0.784889 -3.331067 -3.534649
H -1.708456 -4.913531 -2.403187
C -0.435850 -1.986303 -3.561073
H -0.539314 -3.973201 -4.377788
H 0.082634 -1.571044 -4.422332
H -0.403824 -0.132972 -2.463959
C -4.290177 -0.898067 -0.851804
C -4.001382 0.653246 0.970865
C -5.646360 -0.593959 -0.890922
H -3.882906 -1.612412 -1.561979
C -6.181746 0.333400 -0.005117
H -6.284160 -1.082415 -1.624756
C -5.356169 0.954432 0.926129
H -7.242244 0.575059 -0.041656
H -5.764333 1.687258 1.618878
H -3.367795 1.171291 1.684872
C 3.283686 1.251909 1.517687
C 1.254337 0.437558 2.747454
H 1.459270 2.365824 1.797099
C 1.908656 0.793938 4.073874
H 0.162716 0.501857 2.822673

H 1.474445 -0.613570 2.497938
C 3.426420 0.731024 3.976083
H 1.605123 1.811209 4.367418
H 1.543180 0.119844 4.859798
C 3.938101 1.613008 2.845870
H 3.730502 -0.309295 3.785268
H 3.887375 1.021980 4.928958
H 5.029152 1.530792 2.757379
H 3.722562 2.666854 3.080893
H 3.657995 1.908053 0.722175
H 3.566032 0.226219 1.231924
C 2.580965 1.670580 -2.133428
C 1.547711 3.493475 -0.727675
H 0.489502 2.051709 -1.893055
C 1.737743 4.477532 -1.875679
H 0.679478 3.780042 -0.123560
H 2.425017 3.541430 -0.065995
C 2.921798 4.091488 -2.750511
H 1.863966 5.493470 -1.479474
H 0.820925 4.493760 -2.485141
C 2.780148 2.666953 -3.268654
H 3.028543 4.794895 -3.586548
H 3.846923 4.169552 -2.158649
H 3.655779 2.383844 -3.866904
H 1.911570 2.614720 -3.943615
H 3.491854 1.622383 -1.518242
H 2.432234 0.657460 -2.529689

90e

E = -2835.64667582
Au 2.255102 0.566528 -0.556513
P 0.121938 1.168660 0.002594
Cl 4.420396 -0.181313 -1.031934
P -0.313249 -1.796161 0.103822
C -0.979554 -0.215532 0.174521
C -1.697991 -2.975798 0.040796
C 0.742032 -2.192923 -1.331165

C 0.734080 -2.232491 1.544945
C 0.257823 2.154005 1.560926
C -0.697617 2.251247 -1.268655
C -2.447533 0.072077 0.231482
C -3.263494 0.037039 -0.923882
C -3.050242 0.494829 1.442701
C -4.346474 1.007353 1.440309
C -2.369971 0.333291 2.771599
C -5.109456 1.087823 0.279131
H -4.779116 1.340832 2.384360
C -4.556905 0.557118 -0.881375
C -6.474724 1.706524 0.281737
H -5.152979 0.543563 -1.794689
C -2.820838 -0.578772 -2.218018
H -3.083344 -0.047359 3.513083
H -1.977039 1.275982 3.172205
H -1.530667 -0.362936 2.701733
H -7.130713 1.238444 -0.460773
H -6.419829 2.776472 0.036883
H -6.952827 1.623112 1.264101
H -2.962174 0.108660 -3.062168
H -3.415772 -1.477790 -2.428189
H -1.775645 -0.882636 -2.191581
C 0.122898 -2.556817 2.760950
C 2.119546 -2.045720 1.511826
C 2.867804 -2.138926 2.681040
H 2.633231 -1.814401 0.580780
C 2.248647 -2.434495 3.889211
H 3.942048 -1.972532 2.634180
C 0.874773 -2.658429 3.923735
H 2.835532 -2.501832 4.803268
H 0.384260 -2.912096 4.861440
H -0.948147 -2.733618 2.807198
C 1.554029 -3.330245 -1.313417
C 0.742889 -1.368745 -2.458414
C 1.547024 -1.671896 -3.549236
H 0.137287 -0.465309 -2.462769

C 2.362991 -2.796075 -3.519152
H 1.555588 -1.010263 -4.412410
C 2.364280 -3.625559 -2.402265
H 3.011595 -3.020556 -4.363242
H 3.008391 -4.501717 -2.373188
H 1.566730 -3.976980 -0.437625
C -1.770190 -3.950406 -0.957711
C -2.741132 -2.874541 0.968614
C -2.861979 -4.810062 -1.019851
H -0.978201 -4.035518 -1.697156
C -3.890836 -4.705476 -0.091471
H -2.907044 -5.562811 -1.804241
C -3.827532 -3.735852 0.903640
H -4.745385 -5.377181 -0.145643
H -4.632397 -3.639779 1.629170
H -2.717971 -2.105961 1.734684
C 0.915403 1.292762 2.640326
C 1.080033 3.428766 1.369406
H -0.764071 2.429288 1.862917
C 1.028486 2.041359 3.959507
H 0.382370 0.345466 2.768351
H 1.924305 1.023447 2.288596
C 1.812789 3.334068 3.783435
H 0.019503 2.271071 4.337917
H 1.504530 1.399171 4.712065
C 1.213158 4.195813 2.680840
H 1.855446 3.894476 4.726512
H 2.851781 3.085996 3.519146
H 1.821294 5.096429 2.525073
H 0.216341 4.543801 2.993436
H 2.078081 3.144826 0.998496
H 0.637726 4.077036 0.604813
C 0.277424 3.010293 -2.168822
C -1.788764 3.181507 -0.732001
H -1.195170 1.495207 -1.896592
C -2.533204 3.842989 -1.884866
H -2.494020 2.639110 -0.093380

H -1.330692 3.961364 -0.106834
C -1.580376 4.597771 -2.800971
H -3.308451 4.515179 -1.494246
H -3.059299 3.062490 -2.457293
C -0.468294 3.690791 -3.310746
H -1.133945 5.434700 -2.241960
H -2.126083 5.043905 -3.642685
H -0.905985 2.915614 -3.959207
H 0.235347 4.256614 -3.934980
H 0.822038 3.762910 -1.580476
H 1.039416 2.323272 -2.559883

107a⁺

E = -2389.69194590

Au -2.072379 0.353388 0.494667
P 0.863141 -1.482100 -0.284381
C 1.097022 0.204619 -0.579143
P -0.079693 1.376657 0.023825
C 2.476925 0.715386 -0.820469
C 2.730788 1.594290 -1.884629
H 1.926767 1.835458 -2.575928
C 3.992073 2.141521 -2.085882
H 4.155242 2.826592 -2.915683
C 2.566506 -1.956611 -2.430149
H 2.307794 -0.951877 -2.751583
C 4.825761 0.906360 -0.204990
H 5.642607 0.625729 0.457191
C 5.047175 1.802210 -1.245059
H 6.036016 2.226442 -1.404642
C 2.069365 -2.455397 -1.223514
C 3.556794 0.380377 0.007312
H 3.391774 -0.284919 0.850705
C 3.395498 -2.746352 -3.216176
H 3.789246 -2.348838 -4.148957
C 3.720545 -4.037574 -2.813920
H 4.372822 -4.651992 -3.431031
C 0.971913 -2.056050 1.451227

C 2.376088 -3.762593 -0.834398
H 1.967618 -4.174208 0.086379
C 3.204375 -4.547235 -1.627191
H 3.445198 -5.561441 -1.316306
C 2.224674 -2.316003 2.018459
H 3.112340 -2.347487 1.389710
C 2.347830 -2.547066 3.382711
H 3.328470 -2.749046 3.808164
C 1.222067 -2.525718 4.200361
H 1.320029 -2.705688 5.268794
C -0.029305 -2.283522 3.644809
H -0.914979 -2.273663 4.276816
C -0.153780 -2.048689 2.280652
H -1.139198 -1.850925 1.862555
C -0.740318 -2.107022 -0.894104
C -1.281724 -3.296570 -0.400717
H -0.791849 -3.828802 0.411634
C -2.446986 -3.814143 -0.956241
H -2.857574 -4.745656 -0.571315
C -3.069792 -3.157918 -2.014210
H -3.973574 -3.572821 -2.457314
C -2.516979 -1.988231 -2.528230
H -2.986719 -1.482982 -3.369617
C -1.352580 -1.468352 -1.975946
H -0.905637 -0.560812 -2.372688
C 0.548729 2.277221 1.518898
H -0.333722 2.813604 1.902213
C 0.985506 1.270411 2.579271
H 0.152848 0.594711 2.813686
H 1.786785 0.643587 2.163666
C 1.486945 1.955708 3.842660
H 0.650846 2.480667 4.329186
H 1.835878 1.197619 4.555761
C 2.591528 2.953769 3.528135
H 2.931078 3.452197 4.444364
H 3.461745 2.416305 3.120865
C 2.117151 3.977880 2.508443

H 2.916668 4.691766 2.275146
H 1.291198 4.564238 2.939439
C 1.644785 3.306002 1.224007
H 1.280694 4.065830 0.521423
H 2.498584 2.814375 0.741312
C -0.393779 2.705786 -1.216980
H 0.580216 3.189137 -1.383874
C -1.369689 3.750769 -0.672891
H -2.321768 3.250818 -0.429270
H -0.997063 4.185261 0.262436
C -1.617255 4.854640 -1.694424
H -0.681122 5.410485 -1.853441
H -2.340051 5.575358 -1.292611
C -2.101657 4.292579 -3.022601
H -3.091174 3.831176 -2.881370
H -2.237732 5.099720 -3.752544
C -1.135633 3.246662 -3.560158
H -0.174939 3.726289 -3.801481
H -1.511309 2.817096 -4.497282
C -0.895210 2.140085 -2.541823
H -0.181208 1.402632 -2.931254
H -1.838612 1.599301 -2.356882
C -4.841459 -1.287367 0.834251
C -6.039411 -2.094254 0.861313
H -6.241591 -2.428165 1.884668
H -6.890033 -1.506423 0.499587
H -5.901453 -2.967872 0.214726
N -3.884551 -0.650922 0.801753

107b⁺

E = -2504.39591860
Au -2.419634 -0.594673 -0.372225
P -0.280556 -1.280534 0.068590
P 0.518130 1.729008 0.199962
C 0.857415 0.042640 0.203636
C -1.199281 2.137876 0.625386
C 0.802282 2.576297 -1.389188

C 1.598127 2.598382 1.378387
C 0.189971 -2.476831 -1.276158
C -0.238718 -2.339588 1.586926
O 6.337270 -1.366571 0.305435
C 5.051126 -0.995950 0.215666
C 7.169259 -1.215463 -0.813698
C 2.312303 -0.295408 0.215178
C 3.114862 -0.108269 -0.914591
C 2.933142 -0.819392 1.360405
C 4.465416 -0.444394 -0.927144
C 4.269406 -1.174435 1.363627
C -1.737447 1.648774 1.821696
C -1.983579 2.946149 -0.200552
C -3.289855 3.255796 0.167634
C -3.818264 2.767518 1.357236
C -3.040141 1.962964 2.186058
C 0.420205 1.903535 -2.551383
C 1.310300 3.874147 -1.474159
C 0.551213 2.517089 -3.790671
C 1.070329 3.806475 -3.873710
C 1.447263 4.482660 -2.717799
C 1.109955 3.143475 2.568279
C 2.969794 2.671581 1.103162
C 3.835554 3.254890 2.018262
C 3.345079 3.780331 3.209401
C 1.982467 3.730668 3.478130
C -0.567414 -1.544676 2.844970
C -1.155843 -3.556236 1.464506
C -0.488703 -2.416262 4.091204
C -1.406597 -3.624130 3.973785
C -1.097737 -4.423685 2.717084
C 0.296262 -1.773577 -2.624982
C 1.427221 -3.333286 -0.990260
C 1.680487 -4.311909 -2.131794
C 1.810246 -3.592399 -3.465711
C 0.570096 -2.759093 -3.753309
H 2.673843 0.321064 -1.812892

H 5.048042 -0.279921 -1.828849
H 4.745967 -1.585053 2.250477
H 2.347688 -0.937829 2.270352
H 7.254163 -0.161294 -1.115563
H 6.804987 -1.801517 -1.670036
H 8.156102 -1.583466 -0.523437
H -1.577392 3.336142 -1.130296
H -3.890256 3.893880 -0.477810
H -4.835354 3.023206 1.648934
H -3.446084 1.582414 3.120966
H -1.128363 1.019501 2.463419
H 0.025192 0.892537 -2.471695
H 0.254383 1.987283 -4.693583
H 1.183158 4.285828 -4.844025
H 1.852152 5.490357 -2.783465
H 1.601302 4.409725 -0.573023
H 3.364718 2.275822 0.170611
H 4.899551 3.299882 1.796503
H 4.025420 4.237804 3.924701
H 1.590756 4.155984 4.399622
H 0.046537 3.127982 2.789741
H 0.804213 -2.685052 1.660228
H -1.590296 -1.145211 2.747343
H 0.109366 -0.683426 2.928590
H 0.548942 -2.756376 4.227597
H -0.739945 -1.823050 4.979493
H -2.451972 -3.280534 3.937436
H -1.320503 -4.260707 4.862787
H -1.791018 -5.267866 2.615439
H -0.090551 -4.858421 2.802046
H -2.188050 -3.202276 1.304840
H -0.893905 -4.159503 0.587326
H -0.681179 -3.149326 -1.323397
H 2.306621 -2.690513 -0.861562
H 1.304319 -3.888209 -0.052504
H 2.582834 -4.898300 -1.918896
H 0.848178 -5.030364 -2.186907

H 2.691370 -2.933145 -3.435995
H 1.984756 -4.311622 -4.275373
H -0.297279 -3.426199 -3.870958
H 0.677259 -2.217716 -4.701936
H 1.113274 -1.042055 -2.575751
H -0.627752 -1.209739 -2.822638
C -5.459420 0.277119 -1.074337
C -6.815746 0.667505 -1.384702
H -7.518483 -0.010724 -0.888627
H -6.994625 1.690482 -1.036550
H -6.975348 0.621696 -2.467433
N -4.380526 -0.033262 -0.827152

107c⁺

E = -2727.25237835
Au 2.366200 -0.806282 -0.454767
P 0.323031 -1.137978 0.534963
P -0.122950 1.794107 -0.028660
C -0.768640 0.207281 0.195891
C 0.956328 2.341955 1.338509
C 0.887219 2.000006 -1.531343
C -1.479780 2.987679 -0.114636
C -0.407902 -2.637077 -0.262113
C 0.476744 -1.572592 2.335772
F -7.021008 -1.162425 0.646640
C -6.390236 -0.982028 -0.515610
F -7.031460 -0.021565 -1.185161
F -6.532386 -2.110851 -1.218528
C -2.206392 -0.070454 0.018951
C -2.917015 0.383791 -1.104674
C -2.915856 -0.825241 0.967650
C -4.267723 0.119337 -1.262728
C -4.945211 -0.639099 -0.311725
C -4.262373 -1.115319 0.803293
C 0.699742 1.089100 -2.573578
C 1.809159 3.040795 -1.675412
C 2.541603 3.158533 -2.851655

C 2.353779 2.244784 -3.886517
C 1.430510 1.212630 -3.749617
C 2.321795 2.042629 1.351565
C 0.382922 2.942108 2.463603
C 1.152611 3.199879 3.590665
C 2.501506 2.858110 3.611878
C 3.086860 2.288741 2.486200
C -1.496744 4.000244 -1.074813
C -2.525139 2.890373 0.812527
C -2.549658 4.909120 -1.103287
C -3.583357 4.811541 -0.179563
C -3.569571 3.802057 0.779221
C 0.165777 -0.406071 3.267489
C 1.858637 -2.137048 2.670629
C 0.203520 -0.856346 4.721902
C 1.556718 -1.459349 5.074124
C 1.925201 -2.590211 4.123719
C -0.568311 -2.424590 -1.766770
C 0.396434 -3.901827 0.039955
C -1.161689 -3.652521 -2.444754
C -0.344144 -4.901166 -2.152227
C -0.206658 -5.117946 -0.653257
H -2.393873 0.960789 -1.866438
H -4.801476 0.494807 -2.132769
H -4.794687 -1.694272 1.554540
H -2.399096 -1.176990 1.860167
H 1.956499 3.757489 -0.869027
H 3.254372 3.973055 -2.964245
H 2.920959 2.347416 -4.810087
H 1.277059 0.502056 -4.559103
H -0.010206 0.273813 -2.441765
H -0.670465 3.207869 2.467808
H 0.693981 3.668024 4.458864
H 3.099389 3.050452 4.500213
H 4.146431 2.041208 2.486226
H 2.797801 1.619477 0.469756
H -0.697852 4.078613 -1.808376

H -2.561716 5.694112 -1.856135
H -4.407203 5.521532 -0.208956
H -4.382013 3.717553 1.497374
H -2.531330 2.085915 1.545214
H -0.280709 -2.359559 2.493624
H -0.799999 0.051278 3.015931
H 0.926963 0.370949 3.119122
H -0.020172 -0.006430 5.378943
H -0.588471 -1.600763 4.894545
H 2.324358 -0.672686 5.010761
H 1.560990 -1.815136 6.111613
H 1.232625 -3.432923 4.269089
H 2.928522 -2.972477 4.349467
H 2.131030 -2.955700 1.993227
H 2.598371 -1.337824 2.498963
H -1.408200 -2.747564 0.181361
H 0.423321 -2.205584 -2.198524
H -1.203291 -1.550694 -1.953327
H -2.191238 -3.795653 -2.084855
H -1.234185 -3.478570 -3.525595
H -0.801535 -5.778795 -2.624734
H 0.657162 -4.794097 -2.597602
H 0.407078 -6.002343 -0.442278
H -1.199205 -5.319079 -0.223441
H 1.434810 -3.757641 -0.302218
H 0.441863 -4.081890 1.120609
C 5.082249 -0.231334 -2.130977
C 6.241330 0.069495 -2.939345
H 7.070981 0.383680 -2.296879
H 6.539826 -0.821057 -3.503110
H 5.999154 0.876665 -3.639217
N 4.157230 -0.470132 -1.490979

107d⁺

E = -2429.07131589
Au 2.087714 -0.621560 -0.076788
P 0.603205 1.124749 0.076991

P -1.546873 -1.036569 -0.041330
C -1.082452 0.614486 0.102173
C -0.519420 -1.898427 -1.268485
C -3.268632 -1.170403 -0.596955
C -1.486629 -2.119102 1.432219
C 0.996816 2.095969 1.601034
C 0.871143 2.259847 -1.369410
C -2.161623 1.610890 0.405489
C -2.947653 2.188897 -0.617744
C -2.446379 1.952128 1.734259
C -3.968807 3.073593 -0.264721
C -2.725218 1.876166 -2.066853
C -4.230803 3.402662 1.059519
H -4.576178 3.512955 -1.054717
C -3.462407 2.838740 2.069183
H -5.034776 4.095705 1.299023
H -3.655973 3.078421 3.112739
H -1.864148 1.486419 2.525225
C -2.489774 -3.052408 1.705917
C -0.373053 -2.044727 2.271633
H -2.795476 0.800908 -2.264010
H -1.732885 2.199566 -2.401480
H -3.467344 2.381604 -2.692455
C -0.262074 -2.885450 3.371470
H 0.410695 -1.321047 2.059180
C -1.269023 -3.807061 3.645072
H 0.608440 -2.816169 4.020848
C -2.379331 -3.889211 2.812089
H -1.188733 -4.460964 4.511036
H -3.167830 -4.608445 3.023400
H -3.360032 -3.129587 1.058588
C -0.052132 -3.198602 -1.069503
C -0.204685 -1.218692 -2.451368
C 0.744971 -3.802527 -2.037566
H -0.301396 -3.734426 -0.156367
C 1.073776 -3.116665 -3.201806
H 1.105201 -4.817471 -1.880742

C 0.591235 -1.826282 -3.412960
H 1.696507 -3.592050 -3.957226
H 0.835262 -1.293948 -4.329892
H -0.584996 -0.209295 -2.600163
C -3.586790 -1.763620 -1.820857
C -4.290610 -0.669000 0.217454
C -4.912642 -1.835134 -2.234607
H -2.803572 -2.170662 -2.456255
C -5.923162 -1.319006 -1.431684
H -5.154388 -2.297734 -3.189000
C -5.611074 -0.740612 -0.204732
H -6.959261 -1.373011 -1.759471
H -6.399604 -0.341261 0.429172
H -4.057550 -0.218706 1.180016
C 2.374215 2.758941 1.561581
C 0.894197 1.216613 2.845383
H 0.220065 2.876590 1.648879
C 1.131944 2.017916 4.117381
H -0.073263 0.705239 2.881694
H 1.660146 0.426092 2.767832
C 2.489450 2.703932 4.084303
H 0.338270 2.773321 4.219228
H 1.050526 1.361003 4.992535
C 2.637966 3.557243 2.834196
H 3.279857 1.937756 4.096138
H 2.635814 3.314177 4.983842
H 3.638912 4.004117 2.788050
H 1.926395 4.395221 2.879411
H 2.472579 3.418411 0.694674
H 3.139404 1.973171 1.447054
C 2.296895 2.278268 -1.923106
C 0.319171 3.673093 -1.166411
H 0.250754 1.767876 -2.132613
C 0.396529 4.468654 -2.464740
H -0.712128 3.636477 -0.796152
H 0.905334 4.192287 -0.396263
C 1.815715 4.499281 -3.013711

H 0.022335 5.486504 -2.300014
H -0.272847 4.009130 -3.208773
C 2.360391 3.091648 -3.210748
H 1.849070 5.056434 -3.957960
H 2.463906 5.043442 -2.309976
H 3.392731 3.124774 -3.580915
H 1.767830 2.580313 -3.985236
H 2.991697 2.703264 -1.186617
H 2.635640 1.249046 -2.108236
C 4.268956 -2.998487 -0.362166
C 5.250007 -4.047679 -0.520363
H 6.118469 -3.661315 -1.064904
H 5.572037 -4.404883 0.463776
H 4.813513 -4.880716 -1.081760
N 3.490369 -2.161890 -0.236995

107e⁺

E = -2507.84207199
Au -2.225472 -0.664213 -0.339191
P -0.035831 -1.206036 0.066738
P 0.462741 1.819476 0.079769
C 1.031360 0.198545 0.119976
C 1.805158 2.886785 -0.502269
C -0.931848 2.087708 -1.067692
C -0.128931 2.560287 1.643750
C -0.059964 -2.200261 1.626208
C 0.683913 -2.311533 -1.241098
C 2.502992 -0.100027 0.166520
C 3.275484 -0.178487 -1.016999
C 3.144237 -0.388853 1.394030
C 4.446048 -0.887999 1.399270
C 2.503779 -0.105391 2.722807
C 5.170813 -1.083054 0.226796
H 4.915091 -1.115916 2.356624
C 4.574439 -0.681347 -0.964490
C 6.543777 -1.681783 0.247466
H 5.142119 -0.754813 -1.892437

C 2.795174 0.314149 -2.350699
H 3.259384 0.250505 3.432093
H 2.051500 -0.997323 3.173495
H 1.721648 0.656537 2.643602
H 7.177806 -1.263345 -0.541777
H 6.496386 -2.767047 0.083073
H 7.039409 -1.520482 1.210584
H 2.980809 -0.421004 -3.143409
H 3.335975 1.230965 -2.623130
H 1.733231 0.559046 -2.340583
C 0.479488 3.662658 2.245618
C -1.229909 1.961739 2.264608
C -1.708124 2.447078 3.472910
H -1.718626 1.110264 1.789972
C -1.085826 3.536759 4.078121
H -2.566223 1.974008 3.946267
C 0.002441 4.142858 3.462717
H -1.454569 3.915638 5.029030
H 0.484580 5.000081 3.927795
H 1.320558 4.157379 1.766574
C -1.903254 3.056871 -0.810195
C -0.971668 1.379851 -2.276045
C -1.966994 1.639024 -3.209571
H -0.224132 0.614545 -2.474132
C -2.935239 2.604659 -2.944227
H -1.985234 1.086018 -4.146252
C -2.903293 3.309256 -1.745492
H -3.708970 2.814784 -3.680425
H -3.650672 4.072802 -1.538957
H -1.879044 3.620307 0.119390
C 1.677600 3.621470 -1.683145
C 3.012627 2.916741 0.205271
C 2.754293 4.359259 -2.162283
H 0.743229 3.614655 -2.238946
C 3.959363 4.366886 -1.469437
H 2.649810 4.927207 -3.084129
C 4.085144 3.650941 -0.282064

H 4.802964 4.938293 -1.851137
H 5.023831 3.660928 0.267238
H 3.119646 2.358680 1.132765
C -0.645673 -1.388411 2.778037
C -0.859405 -3.496340 1.477694
H 0.992610 -2.445520 1.838625
C -0.606018 -2.169791 4.083435
H -0.133176 -0.427978 2.877939
H -1.695861 -1.158986 2.529343
C -1.355617 -3.487673 3.952476
H 0.442775 -2.366890 4.354445
H -1.026278 -1.564009 4.896229
C -0.839604 -4.300292 2.773728
H -1.280814 -4.068816 4.879724
H -2.425808 -3.276852 3.803476
H -1.429946 -5.216896 2.650642
H 0.193129 -4.621711 2.975731
H -1.898840 -3.234380 1.218701
H -0.482471 -4.110817 0.654840
C -0.338125 -3.077260 -2.082332
C 1.803900 -3.236167 -0.750050
H 1.147169 -1.567382 -1.904191
C 2.492266 -3.893072 -1.939037
H 2.533612 -2.688085 -0.143736
H 1.382945 -4.020324 -0.106536
C 1.496369 -4.659172 -2.798240
H 3.290347 -4.558193 -1.586492
H 2.982926 -3.112555 -2.541449
C 0.352375 -3.764093 -3.256004
H 1.087639 -5.497010 -2.213032
H 1.998479 -5.105159 -3.665648
H 0.748381 -2.991547 -3.933160
H -0.379376 -4.340244 -3.836229
H -0.854821 -3.825216 -1.464236
H -1.114632 -2.390378 -2.447778
C -5.294644 0.128042 -0.873192
C -6.661349 0.519594 -1.131328

H -7.115811 -0.174477 -1.846581
H -7.234572 0.500983 -0.198150
H -6.681504 1.532415 -1.547702
N -4.207615 -0.183202 -0.668964

5.2 Untersuchungen zur FERINGA-Kopplung

5.2.1 KeYPhos-medierte Ethyl–Phenyl-Kopplung

5.2.1.1 Energien der Strukturen

Tabelle 5.4. Energien der Strukturen der joYPhos medierten *iso*-Propyl–Phenyl-Kopplung

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	E(PCM)	$\Delta G(\text{PCM})$ [hartree]	$\Delta G(\text{PCM})$ [kJ/mol]
X	-2379.19037193	1.062452	0.936657	-2379.19381583	–	–
TS_{X→XI}	-2379.17537424	1.060726	0.935238	-2379.17793731	0.014460	37.963470
XI	-2379.24334984	1.063360	0.937726	-2379.24537173	-0.050487	-132.553356
XII	-2379.18854924	1.061417	0.936195	-2379.19200924	0.001345	3.530221
TS_{XII→XIII}	-2379.17417095	1.058409	0.935723	-2379.17749819	0.015384	40.389747
XIII	-2379.17897869	1.059693	0.935123	-2379.18196618	0.010316	27.083739
TS_{XIII→XIV}	-2379.17026521	1.058796	0.935356	-2379.17344486	0.019070	50.068206

5.2.1.2 Koordinaten der Strukturen

X

E = -2379.19037193

Pd 1.266325 0.483564 -1.349596

P -2.070342 0.082505 0.122499

P 0.793345 0.214498 0.997700

C -0.934555 0.195810 1.404014

C -1.376256 0.476201 2.825959

H -0.797455 1.295975 3.276538

H -1.264542 -0.389109 3.499993

H -2.425524 0.789272 2.898322

C -3.747341 -0.228934 0.823168

H -3.906604 0.666960 1.443214

C -4.867860 -0.259001 -0.217561

H -4.757666 -1.155397 -0.845209

H -4.806383 0.604321 -0.891162

C -6.230086 -0.280885 0.467765

H -6.371108 0.671753 1.001389

H -7.026893 -0.335053 -0.285100
C -6.350207 -1.431907 1.456768
H -6.327876 -2.384229 0.904992
H -7.320252 -1.393600 1.968685
C -5.209943 -1.419184 2.466187
H -5.288316 -2.278775 3.143867
H -5.284920 -0.518530 3.095052
C -3.857949 -1.432151 1.763707
H -3.037319 -1.436362 2.487530
H -3.772127 -2.360974 1.189952
C -1.626589 -1.193196 -1.141970
H -0.521526 -1.114044 -1.147618
C -2.099691 -0.961910 -2.578096
H -1.856799 0.045208 -2.928415
H -3.194813 -1.060643 -2.632280
C -1.438614 -1.975044 -3.507056
H -1.775263 -1.810455 -4.538575
H -0.353212 -1.788139 -3.499806
C -1.719639 -3.407608 -3.077951
H -2.794794 -3.614237 -3.196728
H -1.194380 -4.113324 -3.734086
C -1.328395 -3.638917 -1.625599
H -0.236346 -3.567566 -1.521134
H -1.603261 -4.653393 -1.308992
C -1.982450 -2.615256 -0.707536
H -3.073429 -2.744720 -0.762003
H -1.688180 -2.782677 0.333488
C -2.313300 1.648977 -0.867153
H -2.993737 1.428528 -1.702491
C -2.925126 2.746016 0.003563
H -3.941274 2.468010 0.310954
H -2.327008 2.831835 0.924959
C -2.970492 4.092819 -0.709276
H -3.374803 4.855402 -0.031131
H -3.672181 4.025918 -1.554811
C -1.603841 4.508830 -1.231226
H -1.669769 5.471412 -1.753914

H -0.920091 4.657725 -0.381523
C -1.032819 3.438540 -2.148764
H -0.030558 3.713545 -2.500810
H -1.665695 3.345295 -3.044250
C -0.967283 2.100327 -1.428102
H -0.272447 2.193988 -0.580560
H -0.574260 1.335710 -2.123377
C 1.544481 1.630095 1.945226
H 1.372561 1.437648 3.015654
C 3.049803 1.716551 1.702300
H 3.204911 1.924426 0.632860
H 3.544462 0.757137 1.899515
C 3.677505 2.825977 2.537192
H 3.570595 2.577481 3.604545
H 4.755815 2.884923 2.338922
C 3.014657 4.169764 2.263302
H 3.232406 4.469489 1.226516
H 3.441675 4.949164 2.907958
C 1.504303 4.093067 2.445780
H 1.271280 3.909455 3.505877
H 1.037727 5.052980 2.186089
C 0.909068 2.972598 1.603155
H -0.181946 2.924137 1.718815
H 1.107370 3.187874 0.541060
C 1.646324 -1.255420 1.767934
H 2.622675 -1.290555 1.258203
C 0.883749 -2.517524 1.387022
H -0.106981 -2.478297 1.866126
H 0.709480 -2.529209 0.303807
C 1.620730 -3.773798 1.825445
H 2.573414 -3.835257 1.278594
H 1.043131 -4.667837 1.553337
C 1.890376 -3.749306 3.323470
H 2.459406 -4.637263 3.629138
H 0.930985 -3.793205 3.862582
C 2.629433 -2.481062 3.727231
H 2.786027 -2.456685 4.814075

H 3.629481 -2.486757 3.267332
C 1.892437 -1.223847 3.274482
H 2.475433 -0.340299 3.560928
H 0.930412 -1.150289 3.803525
C 2.795813 -0.768551 -1.378214
C 4.088399 -0.373587 -1.020973
C 2.578509 -2.121170 -1.660304
C 5.114252 -1.308898 -0.894978
H 4.306859 0.675336 -0.830946
C 3.601826 -3.057487 -1.532488
H 1.592835 -2.455336 -1.981468
C 4.874637 -2.657435 -1.137410
H 6.110561 -0.976101 -0.605273
H 3.400612 -4.106755 -1.747076
H 5.675268 -3.387522 -1.034112
C 2.784156 1.865753 -3.533891
H 2.497583 2.811354 -3.051359
H 3.742958 1.560053 -3.095582
H 2.974353 2.094961 -4.595227
C 1.730994 0.788407 -3.350116
H 0.779220 1.093245 -3.819875
H 2.040153 -0.142837 -3.841121

TS_{X→XI}

E = -2379.17537424
Pd -1.399811 -0.265800 1.187310
P 2.255348 0.498577 -0.083238
P -0.525733 -0.384361 -1.002283
C 1.146108 0.106379 -1.326959
C 1.528029 0.410807 -2.761744
H 1.023133 1.303167 -3.168628
H 1.273685 -0.421582 -3.438123
H 2.602404 0.594898 -2.891842
C 3.968974 0.122461 -0.670697
H 4.142401 0.886166 -1.445079
C 5.071310 0.283472 0.374682
H 4.959175 -0.504956 1.132559

H 4.989762 1.243340 0.900320
C 6.444079 0.143477 -0.273507
H 6.586840 0.963979 -0.993290
H 7.230374 0.253783 0.484409
C 6.579793 -1.191961 -0.992432
H 6.549667 -2.002651 -0.248208
H 7.556714 -1.262650 -1.487680
C 5.454652 -1.399415 -1.997394
H 5.537290 -2.388095 -2.466682
H 5.550587 -0.661778 -2.809197
C 4.085093 -1.244448 -1.348139
H 3.284606 -1.378320 -2.081904
H 3.945295 -2.034590 -0.598288
C 1.888146 -0.354178 1.502308
H 0.817236 -0.090441 1.626315
C 2.613556 0.147633 2.753427
H 2.591453 1.239749 2.827795
H 3.671406 -0.141599 2.715086
C 1.978207 -0.466883 3.996925
H 2.505249 -0.118833 4.894604
H 0.943396 -0.103834 4.083477
C 1.974900 -1.988429 3.938177
H 3.013868 -2.351248 3.980335
H 1.466470 -2.401287 4.819009
C 1.322351 -2.495017 2.659771
H 0.251827 -2.234406 2.660089
H 1.378173 -3.589752 2.605091
C 1.963867 -1.874857 1.426709
H 3.018846 -2.183101 1.366644
H 1.472207 -2.223346 0.513839
C 2.311499 2.297762 0.398285
H 3.144925 2.456509 1.100167
C 2.542949 3.153927 -0.849313
H 3.529289 2.943308 -1.283088
H 1.800283 2.870575 -1.609004
C 2.413877 4.643707 -0.560828
H 2.566197 5.214133 -1.486205

H 3.212223 4.952547 0.131554
C 1.062203 4.968012 0.055795
H 0.980377 6.042929 0.262044
H 0.266689 4.724677 -0.665283
C 0.851437 4.162664 1.328170
H -0.136727 4.369553 1.759346
H 1.591506 4.479068 2.079775
C 0.990538 2.666413 1.080654
H 0.164538 2.314390 0.447762
H 0.877546 2.129081 2.029518
C -1.546109 0.704003 -2.135142
H -1.103695 0.590679 -3.138834
C -3.015104 0.294880 -2.223354
H -3.453073 0.292977 -1.216231
H -3.106552 -0.726841 -2.610813
C -3.810637 1.239894 -3.117876
H -3.452601 1.147885 -4.155663
H -4.866498 0.938413 -3.122381
C -3.675029 2.687744 -2.671155
H -4.118246 2.793269 -1.670280
H -4.237739 3.352788 -3.339807
C -2.211423 3.097904 -2.612424
H -1.784612 3.073006 -3.627448
H -2.111677 4.133662 -2.258600
C -1.418360 2.161583 -1.712095
H -0.359191 2.447962 -1.696869
H -1.784800 2.249188 -0.676368
C -0.819042 -2.038831 -1.850847
H -1.168186 -1.799670 -2.869387
C -1.927488 -2.807978 -1.130844
H -1.582060 -3.023524 -0.105982
H -2.817702 -2.180371 -1.008120
C -2.271185 -4.105048 -1.850754
H -2.699850 -3.865728 -2.836525
H -3.048798 -4.650835 -1.299638
C -1.038872 -4.979148 -2.039211
H -1.290730 -5.887180 -2.603056

H -0.683625 -5.314324 -1.052164
C 0.080017 -4.212792 -2.732269
H 0.976365 -4.841388 -2.822106
H -0.231106 -3.966279 -3.759309
C 0.413746 -2.923624 -1.990017
H 1.226140 -2.384022 -2.489644
H 0.788438 -3.182681 -0.989710
C -3.359509 0.107102 1.437298
C -3.804898 1.432250 1.319696
C -4.256647 -0.923292 1.129663
C -5.077655 1.713243 0.835481
H -3.140586 2.250923 1.594381
C -5.528246 -0.636821 0.640221
H -3.943755 -1.960665 1.238827
C -5.943657 0.681435 0.479621
H -5.395623 2.750378 0.734142
H -6.197652 -1.455229 0.377698
H -6.937629 0.903833 0.096823
C -2.652104 -1.533636 3.750051
H -3.734271 -1.671381 3.642870
H -2.162141 -2.387967 3.265189
C -2.198832 -0.217909 3.162151
H -2.731655 0.632172 3.592568
H -2.420012 -1.588229 4.824077
H -1.121886 -0.041544 3.369141

XI

E = -2379.24334984
Pd 1.671560 -0.205351 -0.785756
P -2.087466 0.612458 0.020215
P 0.484828 -0.505207 1.190374
C -1.153744 0.135662 1.373481
C -1.672236 0.470765 2.757393
H -1.110054 1.283281 3.247536
H -1.628349 -0.386335 3.447078
H -2.720262 0.800608 2.746533
C -3.876273 0.285342 0.363112

H -4.154784 1.051710 1.103296
C -4.795432 0.460438 -0.844475
H -4.559914 -0.318371 -1.583623
H -4.626578 1.425868 -1.338784
C -6.256307 0.316935 -0.434189
H -6.516894 1.130002 0.260640
H -6.906671 0.435548 -1.310541
C -6.507624 -1.025339 0.239439
H -6.349982 -1.829162 -0.496136
H -7.553818 -1.102021 0.562609
C -5.567295 -1.238929 1.417921
H -5.727416 -2.229954 1.861747
H -5.800190 -0.505430 2.205421
C -4.107291 -1.080416 1.012327
H -3.444549 -1.210009 1.873514
H -3.835168 -1.871673 0.299888
C -1.537836 -0.204918 -1.521120
H -0.443622 -0.002057 -1.450351
C -2.018359 0.363680 -2.856084
H -1.980434 1.458160 -2.874438
H -3.064800 0.084477 -3.038959
C -1.150378 -0.204343 -3.974956
H -1.470872 0.196633 -4.945266
H -0.115310 0.134563 -3.816655
C -1.178968 -1.726914 -3.991589
H -2.191158 -2.062429 -4.267227
H -0.504412 -2.110671 -4.768934
C -0.809539 -2.309361 -2.634408
H 0.241181 -2.072226 -2.400663
H -0.894235 -3.403893 -2.647695
C -1.665290 -1.724732 -1.519963
H -2.718160 -2.014818 -1.661412
H -1.344836 -2.122386 -0.552124
C -2.018245 2.431408 -0.378458
H -2.749901 2.651860 -1.171952
C -2.373838 3.244535 0.869127
H -3.399837 3.030346 1.195626

H -1.710886 2.926526 1.686417
C -2.202004 4.741703 0.651491
H -2.452861 5.281866 1.573642
H -2.913119 5.084984 -0.115638
C -0.785391 5.066723 0.205280
H -0.668086 6.145949 0.042875
H -0.082145 4.788907 1.005983
C -0.434739 4.292921 -1.055440
H 0.597118 4.507451 -1.362433
H -1.080301 4.634284 -1.879802
C -0.610527 2.792362 -0.862080
H 0.112959 2.421547 -0.122454
H -0.362935 2.267870 -1.792931
C 1.492881 0.389806 2.484214
H 1.011916 0.221084 3.462504
C 2.924632 -0.141910 2.535939
H 3.353504 -0.043746 1.525342
H 2.939235 -1.212739 2.776455
C 3.781890 0.625393 3.535442
H 3.393611 0.461494 4.552873
H 4.807839 0.232893 3.528129
C 3.781759 2.117135 3.233804
H 4.258776 2.281776 2.255371
H 4.381983 2.662753 3.974102
C 2.360949 2.660865 3.185120
H 1.907557 2.585561 4.185853
H 2.366060 3.728750 2.926070
C 1.514486 1.885520 2.185248
H 0.491321 2.282045 2.149170
H 1.933913 2.013580 1.173430
C 0.528862 -2.261409 1.894180
H 1.038525 -2.191190 2.868202
C 1.370405 -3.148924 0.976555
H 0.890364 -3.161957 -0.016798
H 2.355899 -2.690252 0.812527
C 1.501852 -4.570152 1.503976
H 2.066651 -4.554665 2.449236

H 2.084775 -5.183232 0.803410
C 0.134026 -5.191194 1.749337
H 0.235640 -6.203958 2.161541
H -0.389699 -5.297395 0.786303
C -0.701238 -4.318953 2.676034
H -1.695915 -4.760287 2.826292
H -0.222739 -4.288235 3.667383
C -0.835870 -2.896205 2.143901
H -1.421031 -2.288037 2.841378
H -1.414653 -2.912164 1.210202
C 3.290032 -0.184642 -2.339811
C 2.582850 1.037473 -2.448998
C 4.373789 -0.224089 -1.425607
C 2.988371 2.172976 -1.718847
H 1.813933 1.144199 -3.213106
C 4.787586 0.911377 -0.742967
H 4.930078 -1.151525 -1.306157
C 4.101280 2.119843 -0.894276
H 2.434378 3.101854 -1.837739
H 5.646075 0.852934 -0.076227
H 4.425694 3.006764 -0.353761
C 3.112004 -2.708109 -2.715003
H 4.118752 -2.945510 -2.351335
H 2.424503 -2.797671 -1.864805
C 3.039017 -1.312537 -3.314493
H 3.764865 -1.229143 -4.138825
H 2.847030 -3.467173 -3.460210
H 2.050772 -1.159140 -3.768977

XII

E = -2379.18854924
Pd -1.484331 0.548213 1.518369
P 2.145723 -0.097915 -0.203756
P -0.873263 0.313845 -0.776107
C 0.811405 0.084149 -1.263339
C 1.121679 0.148261 -2.748253
H 0.762207 1.082538 -3.210603

H 0.666413 -0.679878 -3.314297
H 2.197080 0.107928 -2.964461
C 3.367924 -1.270572 -0.961656
H 3.794281 -0.686577 -1.792172
C 4.532893 -1.683961 -0.063336
H 4.148685 -2.314897 0.750403
H 5.005848 -0.812383 0.406791
C 5.560068 -2.486765 -0.853363
H 5.992213 -1.846821 -1.637930
H 6.390373 -2.780286 -0.198146
C 4.923416 -3.713335 -1.491577
H 4.589403 -4.397250 -0.696224
H 5.663872 -4.265569 -2.084326
C 3.728527 -3.329014 -2.352884
H 3.248109 -4.225176 -2.765836
H 4.077993 -2.739630 -3.214790
C 2.708224 -2.506460 -1.575218
H 1.879341 -2.211420 -2.224155
H 2.267101 -3.120870 -0.778732
C 1.705478 -0.623917 1.503327
H 0.886648 0.075704 1.748654
C 2.793876 -0.457019 2.570207
H 3.255559 0.534372 2.534410
H 3.600394 -1.180070 2.399530
C 2.207509 -0.704204 3.956076
H 2.986148 -0.570543 4.718100
H 1.434149 0.052390 4.159699
C 1.588709 -2.090097 4.054686
H 2.381917 -2.846444 3.947260
H 1.145592 -2.242413 5.047088
C 0.542279 -2.291181 2.970284
H -0.295663 -1.597879 3.138430
H 0.125751 -3.305435 3.016954
C 1.107412 -2.027086 1.580606
H 1.887855 -2.769463 1.355337
H 0.326359 -2.134811 0.820947
C 3.143286 1.457004 0.057421

H 4.063475 1.190506 0.600441
C 3.522180 2.080929 -1.287615
H 4.148032 1.395916 -1.874154
H 2.600891 2.238530 -1.866680
C 4.234087 3.416800 -1.120199
H 4.480904 3.831345 -2.106086
H 5.190818 3.259331 -0.598881
C 3.381819 4.393416 -0.325143
H 3.905126 5.349755 -0.198226
H 2.461630 4.611548 -0.888966
C 3.013671 3.802965 1.026775
H 2.362542 4.488737 1.584528
H 3.927637 3.684013 1.629106
C 2.327125 2.450316 0.886203
H 1.355059 2.574501 0.391866
H 2.111963 2.048622 1.882337
C -1.471912 1.870674 -1.615391
H -1.423391 1.705180 -2.702061
C -2.921136 2.155260 -1.223926
H -2.954520 2.296340 -0.131375
H -3.563767 1.289320 -1.429609
C -3.452128 3.404252 -1.914655
H -3.477182 3.235501 -3.002549
H -4.488091 3.597064 -1.606094
C -2.573670 4.610712 -1.611930
H -2.638049 4.837822 -0.536370
H -2.941225 5.500349 -2.140080
C -1.120106 4.338061 -1.975111
H -1.037230 4.216329 -3.066149
H -0.489002 5.197665 -1.710292
C -0.601098 3.076296 -1.297074
H 0.435542 2.875433 -1.596417
H -0.591463 3.225775 -0.204363
C -1.918967 -0.977041 -1.658654
H -2.851174 -0.982650 -1.073780
C -1.283471 -2.354327 -1.502517
H -0.311278 -2.364084 -2.017511

H -1.075992 -2.540862 -0.443575
C -2.175582 -3.459777 -2.049241
H -3.087920 -3.511124 -1.436752
H -1.674014 -4.432055 -1.949243
C -2.556178 -3.199862 -3.498567
H -3.226862 -3.986284 -3.869467
H -1.651599 -3.239054 -4.126010
C -3.206124 -1.832516 -3.644524
H -3.467628 -1.637364 -4.693322
H -4.150123 -1.822632 -3.078292
C -2.306175 -0.719535 -3.116794
H -2.831419 0.236910 -3.217123
H -1.409029 -0.649066 -3.747495
C -3.007487 -0.753304 1.453468
C -4.292956 -0.281248 1.151084
C -2.848409 -2.137035 1.586778
C -5.359861 -1.154650 0.950737
H -4.470299 0.789462 1.057984
C -3.914218 -3.014125 1.392000
H -1.873800 -2.551899 1.834692
C -5.175446 -2.529138 1.062768
H -6.344194 -0.754904 0.707787
H -3.752653 -4.087079 1.494770
H -6.007108 -3.213541 0.904705
C -1.829792 1.102860 3.452830
H -0.357094 2.032101 2.086872
H -1.569148 0.332897 4.184036
H -2.831098 1.500505 3.631703
C -0.766806 2.116996 3.169694
H -1.108766 3.157748 3.197612
H 0.145916 2.014855 3.769681

TS_{xII→xIII}

E = -2379.17417095

Pd -1.464187 0.517381 1.530654

P 2.145958 -0.110865 -0.192062

P -0.880134 0.416700 -0.727428

C 0.799724 0.170012 -1.214797
C 1.093178 0.312626 -2.698489
H 0.768914 1.287066 -3.099891
H 0.600261 -0.460754 -3.308229
H 2.163729 0.242291 -2.928954
C 3.320071 -1.271498 -1.041794
H 3.754079 -0.652907 -1.842405
C 4.483560 -1.771235 -0.185888
H 4.090914 -2.433333 0.598373
H 4.990438 -0.941819 0.323444
C 5.474212 -2.560799 -1.034062
H 5.918226 -1.891598 -1.786952
H 6.301830 -2.918061 -0.407732
C 4.789761 -3.727170 -1.732682
H 4.441264 -4.444169 -0.973479
H 5.504875 -4.268705 -2.365112
C 3.599571 -3.254684 -2.555454
H 3.085995 -4.109037 -3.014551
H 3.959410 -2.626853 -3.385389
C 2.614914 -2.448002 -1.717958
H 1.789348 -2.089063 -2.337800
H 2.162738 -3.094529 -0.953974
C 1.716916 -0.729295 1.484169
H 0.919466 -0.023904 1.774884
C 2.820916 -0.646532 2.544537
H 3.295969 0.339184 2.563109
H 3.614928 -1.369460 2.321891
C 2.246582 -0.966398 3.920570
H 3.037680 -0.898874 4.678515
H 1.495563 -0.205341 4.182963
C 1.595766 -2.340913 3.943336
H 2.369841 -3.106933 3.780210
H 1.161313 -2.543657 4.930631
C 0.533643 -2.456519 2.861512
H -0.291073 -1.761057 3.078428
H 0.097453 -3.463437 2.854195
C 1.089385 -2.122002 1.483496

H 1.849375 -2.868102 1.206824
H 0.296997 -2.169130 0.728790
C 3.196351 1.393862 0.137122
H 4.108833 1.067207 0.660239
C 3.592997 2.073162 -1.176004
H 4.187017 1.397208 -1.804484
H 2.675456 2.300937 -1.737573
C 4.361115 3.367365 -0.941395
H 4.617675 3.825686 -1.905231
H 5.314353 3.141035 -0.439371
C 3.557434 4.332889 -0.084376
H 4.121247 5.258504 0.088707
H 2.641552 4.618032 -0.625373
C 3.174461 3.682699 1.235615
H 2.559834 4.364073 1.838300
H 4.086330 3.486270 1.820763
C 2.422227 2.376790 1.016854
H 1.464400 2.578675 0.522653
H 2.169359 1.929275 1.984948
C -1.432357 2.038253 -1.464394
H -1.401411 1.915013 -2.557189
C -2.869864 2.342875 -1.047065
H -2.891418 2.434958 0.051041
H -3.535473 1.503533 -1.287353
C -3.373475 3.633508 -1.679054
H -3.418275 3.508544 -2.772226
H -4.399286 3.842780 -1.348100
C -2.456336 4.801768 -1.343320
H -2.498114 4.988311 -0.258921
H -2.806495 5.721153 -1.830798
C -1.016605 4.502859 -1.739913
H -0.954175 4.419548 -2.836004
H -0.358242 5.334926 -1.454482
C -0.521956 3.204730 -1.113538
H 0.504297 2.987165 -1.436935
H -0.492819 3.312340 -0.018151
C -1.945630 -0.789341 -1.698839

H -2.874668 -0.821470 -1.112011
C -1.335094 -2.185450 -1.641834
H -0.374036 -2.182623 -2.176380
H -1.112035 -2.442691 -0.601031
C -2.262514 -3.232930 -2.240959
H -3.165690 -3.300737 -1.616651
H -1.783756 -4.221226 -2.210651
C -2.656882 -2.872352 -3.664916
H -3.352967 -3.616618 -4.073998
H -1.762624 -2.894453 -4.307859
C -3.273935 -1.482998 -3.715558
H -3.543910 -1.215979 -4.746216
H -4.209843 -1.486271 -3.136131
C -2.341105 -0.425819 -3.132153
H -2.847471 0.545529 -3.162159
H -1.452017 -0.333708 -3.771305
C -2.994344 -0.865854 1.357597
C -4.285758 -0.395456 1.068196
C -2.846447 -2.255331 1.451540
C -5.357475 -1.258869 0.850201
H -4.466708 0.678522 0.999447
C -3.912259 -3.129467 1.239939
H -1.872016 -2.681903 1.684692
C -5.174706 -2.636173 0.928654
H -6.342335 -0.852367 0.619977
H -3.751445 -4.205088 1.314405
H -6.007886 -3.315862 0.757475
C -1.994454 0.775836 3.578828
H -0.371563 1.705652 1.700241
H -1.749278 -0.137343 4.119382
H -3.040319 1.075124 3.615391
C -0.993855 1.731146 3.314493
H -1.268193 2.778975 3.195220
H 0.013402 1.582725 3.704856

XIII

E = -2379.17897869

Pd -1.463547 0.482004 1.546428
P 2.147867 -0.121579 -0.178857
P -0.879693 0.483251 -0.691674
C 0.796066 0.216649 -1.177479
C 1.085601 0.409067 -2.656947
H 0.770941 1.400541 -3.022668
H 0.585759 -0.337253 -3.294071
H 2.155249 0.338308 -2.890353
C 3.290442 -1.275263 -1.082665
H 3.729338 -0.636410 -1.864297
C 4.452589 -1.825000 -0.256125
H 4.055258 -2.512815 0.503254
H 4.975269 -1.024611 0.282484
C 5.425785 -2.593110 -1.142443
H 5.872251 -1.901057 -1.872893
H 6.253842 -2.985115 -0.537836
C 4.719969 -3.722754 -1.879152
H 4.369217 -4.464212 -1.144900
H 5.421935 -4.248418 -2.539132
C 3.528297 -3.203936 -2.671554
H 2.998976 -4.033597 -3.157325
H 3.888622 -2.550001 -3.480880
C 2.562411 -2.415977 -1.794988
H 1.736386 -2.022832 -2.392967
H 2.108519 -3.084451 -1.051095
C 1.726504 -0.790299 1.478546
H 0.958225 -0.071171 1.809700
C 2.850869 -0.781135 2.520552
H 3.350267 0.191523 2.569878
H 3.621741 -1.514130 2.255686
C 2.293234 -1.142781 3.892741
H 3.100830 -1.134015 4.636099
H 1.573787 -0.370308 4.203586
C 1.600206 -2.496636 3.869630
H 2.346984 -3.278080 3.659254
H 1.177586 -2.728729 4.855639
C 0.515985 -2.536895 2.803899

H -0.283458 -1.826650 3.063738
H 0.049390 -3.529428 2.765157
C 1.056651 -2.162110 1.430423
H 1.787449 -2.919162 1.108298
H 0.249256 -2.152268 0.689664
C 3.237962 1.345934 0.180860
H 4.151154 0.974702 0.672308
C 3.629284 2.062024 -1.114430
H 4.183025 1.391901 -1.784567
H 2.708017 2.345212 -1.643727
C 4.450536 3.316546 -0.846243
H 4.701261 3.805316 -1.796615
H 5.406295 3.033999 -0.378623
C 3.705345 4.274436 0.070426
H 4.309625 5.169081 0.268361
H 2.789635 4.618017 -0.435897
C 3.325118 3.583332 1.370340
H 2.751904 4.261739 2.015479
H 4.240597 3.324968 1.925201
C 2.514809 2.320452 1.111548
H 1.560376 2.583303 0.641219
H 2.251534 1.844412 2.062640
C -1.386783 2.150814 -1.351145
H -1.361032 2.063617 -2.447529
C -2.815216 2.482452 -0.924752
H -2.838930 2.531690 0.176015
H -3.503229 1.673703 -1.204503
C -3.276993 3.810893 -1.509494
H -3.329028 3.724758 -2.606131
H -4.294604 4.041750 -1.167691
C -2.321447 4.937402 -1.139204
H -2.351898 5.088440 -0.049053
H -2.645091 5.882954 -1.593866
C -0.893980 4.606159 -1.553646
H -0.839609 4.554173 -2.652204
H -0.208648 5.408208 -1.246876
C -0.438816 3.276137 -0.966439

H 0.578851 3.035081 -1.299950
H -0.403935 3.349737 0.130603
C -1.958148 -0.653815 -1.729008
H -2.889883 -0.700618 -1.149282
C -1.370025 -2.060859 -1.738778
H -0.410377 -2.048688 -2.274836
H -1.148313 -2.371400 -0.711963
C -2.315400 -3.061780 -2.387178
H -3.220426 -3.143435 -1.767330
H -1.854236 -4.058692 -2.404538
C -2.701116 -2.625497 -3.792223
H -3.409014 -3.336960 -4.237749
H -1.806426 -2.631287 -4.434907
C -3.295223 -1.225333 -3.775670
H -3.560603 -0.904464 -4.792029
H -4.231061 -1.241495 -3.196260
C -2.346237 -0.211874 -3.142288
H -2.839706 0.766459 -3.121893
H -1.456881 -0.099488 -3.777518
C -3.024542 -0.892413 1.278589
C -4.307598 -0.416511 0.965668
C -2.874290 -2.282989 1.339096
C -5.369159 -1.275848 0.689508
H -4.490730 0.659039 0.927345
C -3.930010 -3.153842 1.070165
H -1.905403 -2.712289 1.592643
C -5.183641 -2.654494 0.733718
H -6.348194 -0.865726 0.441637
H -3.768420 -4.230767 1.119196
H -6.008915 -3.331008 0.517756
C -2.288618 0.392061 3.582161
H -3.327681 0.703745 3.498370
H -0.292790 1.573575 1.506636
C -1.263917 1.318015 3.583923
H -0.273952 1.056878 3.954311
H -2.134023 -0.624672 3.938397
H -1.471319 2.384283 3.516039

TS_{XIII→XIV}

E = -2379.17026521

Pd -1.504362 0.470567 1.494907

P 2.180507 -0.102508 -0.141117

P -0.834344 0.479526 -0.721795

C 0.852711 0.233061 -1.172402

C 1.175237 0.440228 -2.642883

H 0.856591 1.430050 -3.009378

H 0.702234 -0.308368 -3.297433

H 2.251323 0.385258 -2.849307

C 3.356409 -1.236502 -1.025895

H 3.807373 -0.586418 -1.791162

C 4.504592 -1.779164 -0.175073

H 4.098528 -2.472260 0.574667

H 5.007539 -0.975004 0.376676

C 5.505080 -2.534788 -1.042238

H 5.964779 -1.834176 -1.756137

H 6.320471 -2.925227 -0.419668

C 4.827209 -3.663762 -1.805775

H 4.462044 -4.413350 -1.086928

H 5.550614 -4.179356 -2.450378

C 3.653555 -3.147178 -2.625994

H 3.144998 -3.976473 -3.134084

H 4.030279 -2.482139 -3.418629

C 2.657798 -2.377319 -1.767096

H 1.842578 -1.986450 -2.381525

H 2.193144 -3.058845 -1.042460

C 1.709356 -0.799283 1.489697

H 0.902404 -0.107431 1.792832

C 2.784930 -0.763069 2.580781

H 3.247534 0.225086 2.661896

H 3.592070 -1.467061 2.343051

C 2.174388 -1.156013 3.921435

H 2.941446 -1.119415 4.705797

H 1.407841 -0.414861 4.194712

C 1.539563 -2.537022 3.855980

H 2.326601 -3.285878 3.676026

H 1.080253 -2.795289 4.818960
C 0.509162 -2.609267 2.739776
H -0.326882 -1.934182 2.969599
H 0.083923 -3.618506 2.667945
C 1.096763 -2.195753 1.397705
H 1.871010 -2.920053 1.104385
H 0.326148 -2.211869 0.619033
C 3.245872 1.370427 0.265791
H 4.140295 1.002866 0.793455
C 3.684122 2.093429 -1.010455
H 4.273807 1.431465 -1.657589
H 2.782791 2.368365 -1.577378
C 4.479952 3.356204 -0.705824
H 4.765181 3.849226 -1.644241
H 5.418238 3.082504 -0.199137
C 3.687526 4.304405 0.180645
H 4.273559 5.205220 0.404047
H 2.789532 4.638784 -0.362268
C 3.262246 3.606102 1.462404
H 2.655489 4.276421 2.084906
H 4.157413 3.356877 2.053559
C 2.476618 2.335650 1.168296
H 1.537870 2.587711 0.662879
H 2.177982 1.855038 2.105974
C -1.350755 2.146285 -1.377481
H -1.293122 2.070397 -2.473631
C -2.796691 2.447387 -0.989180
H -2.854479 2.477651 0.111347
H -3.462505 1.633130 -1.303646
C -3.264521 3.777476 -1.564955
H -3.283511 3.708985 -2.663899
H -4.295564 3.984737 -1.249164
C -2.339709 4.913259 -1.148931
H -2.401868 5.044193 -0.057514
H -2.667545 5.861129 -1.595728
C -0.896407 4.613172 -1.530824
H -0.813269 4.580760 -2.628419

H -0.233343 5.421617 -1.193586
C -0.432256 3.281929 -0.953189
H 0.596428 3.063439 -1.268482
H -0.423029 3.335019 0.145359
C -1.889456 -0.659512 -1.778531
H -2.838755 -0.685249 -1.226256
C -1.319990 -2.073156 -1.743348
H -0.339236 -2.082722 -2.241403
H -1.145447 -2.366869 -0.702497
C -2.255688 -3.073367 -2.406970
H -3.181096 -3.134260 -1.815113
H -1.807061 -4.075968 -2.392890
C -2.591283 -2.656252 -3.830613
H -3.293111 -3.366997 -4.286744
H -1.676694 -2.683201 -4.444069
C -3.168681 -1.249179 -3.856448
H -3.397494 -0.942692 -4.886042
H -4.122860 -1.244628 -3.307616
C -2.227405 -0.236670 -3.210100
H -2.708124 0.748270 -3.221338
H -1.317767 -0.146871 -3.818918
C -3.063771 -0.907407 1.206361
C -4.351612 -0.459445 0.863508
C -2.910407 -2.295965 1.322850
C -5.409528 -1.334791 0.626666
H -4.543087 0.612135 0.768968
C -3.961999 -3.184977 1.097437
H -1.938690 -2.713454 1.586132
C -5.218268 -2.708830 0.739228
H -6.389456 -0.941856 0.355036
H -3.794461 -4.257713 1.195859
H -6.040219 -3.398943 0.555625
C -2.681243 1.192191 3.279242
H -2.708387 2.269404 3.117168
H -0.329987 1.571635 1.624565
C -1.561217 0.588786 3.769609
H -1.594001 -0.451955 4.090349

H -3.624359 0.655237 3.211121

H -0.679913 1.164073 4.041480

5.2.2 KeYPhos-medierte *iso*-Propyl–Phenyl-Kopplung

5.2.2.1 Energien der Strukturen

Tabelle 5.5. Energien der Strukturen der joYPhos medierten *iso*-Propyl–Phenyl-Kopplung.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	E(PCM)	$\Delta G(\text{PCM})$ [hartree]	$\Delta G(\text{PCM})$ [kJ/mol]
X^a	-2418.56952516	1.091994	0.964608	-2418.57282595	–	–
X^c	-2418.56933787	1.092626	0.966653	-2418.57261804	0.002253	5.915015
TS_{X→XI}^a	-2418.55460333	1.091589	0.965737	-2418.55707757	0.016877	44.311561
TS_{X→XI}^c	-2418.54977165	1.090958	0.964510	-2418.55224184	0.020486	53.786282
XI	-2418.62169911	1.093404	0.961071	-2418.62394764	-0.054659	-143.506391
XII^a	-2418.56951429	1.091212	0.963728	-2418.57269902	-0.000753	-1.977185
XII^c	-2418.56922937	1.092449	0.965562	-2418.57216357	0.001616	4.243806
TS_{XII→XIII}^a	-2418.55552325	1.087879	0.961040	-2418.55862752	0.010630	27.910194
TS_{XII→XIII}^c	-2418.55067571	1.088685	0.962640	-2418.55360348	0.017254	45.301611
XIII^a	-2418.56117218	1.088969	0.960147	-2418.56402100	0.004344	11.405041
XIII^c	-2418.56147244	1.089876	0.964226	-2418.56419405	0.008250	21.660112
TS_{XIII→XIV}^a (CW)	-2418.55627211	1.088331	0.961679	-2418.55931360	0.010583	27.786585
XIII→XIV^a (CW)	-2418.55671471	1.089494	0.961709	-2418.55975015	0.010177	26.719188
TS_{XIII→XIV}^a (CW)	-2418.55450232	1.088719	0.963405	-2418.55745827	0.014165	37.189367
TS_{XIII→XIV}^a (CCW)	-2418.55410580	1.088760	0.964287	-2418.55687348	0.015631	41.040424
XIII→XIV^a (CCW)	-2418.55549924	1.089255	0.960745	-2418.55836296	0.010600	27.830274
TS_{XIII→XIV}^a (CCW)	-2418.55306247	1.088055	0.958884	-2418.55608602	0.011016	28.922324
TS_{XIII→XIV}^c (CW)	-2418.55220055	1.088658	0.963371	-2418.55513948	0.016449	43.188083
TS_{XIII→XIV}^c (CCW)	-2418.55282867	1.088392	0.961965	-2418.55604929	0.014134	37.107924
XIV^a	-2418.55924735	1.089568	0.962147	-2418.56225470	0.008110	21.293461
XIV^c	-2418.56089341	1.089721	0.962596	-2418.56388609	0.006928	18.189096
TS_{XIV→XV}^a	-2418.55328707	1.088093	0.961542	-2418.55660525	0.013155	34.537665
TS_{XIV→XV}^c	-2418.55646009	1.088144	0.962322	-2418.55992145	0.010619	27.878872

Untersuchungen zu elektronischen Eigenschaften und dem katalytischen Einsatz von
YPhos-Liganden

XV^a	-2418.56722395	1.091940	0.964308	-2418.57063986	0.001886	4.951929
XV^c	-2418.56977627	1.091815	0.965849	-2418.57330079	0.000766	2.011553
TS_{XV→XVI^a}	-2418.55550338	1.091583	0.965019	-2418.55807761	0.015159	39.800847
TS_{XV→XVI^c}	-2418.54942803	1.091318	0.963179	-2418.55202408	0.019373	50.863470
XVI	-2418.62253532	1.094259	0.966628	-2418.62477864	-0.049933	-131.098278

5.2.2.2 Koordinaten der Strukturen

X^a

E = -2418.56952516

Pd 1.330726 0.551289 -1.161504

P -2.138661 0.097747 0.087044

P 0.674208 0.124242 1.117865

C -1.072683 0.127465 1.430984

C -1.585308 0.369922 2.836078

H -1.018383 1.163906 3.344047

H -1.524701 -0.518818 3.485531

H -2.631507 0.699818 2.862833

C -3.855151 -0.209840 0.686318

H -4.031004 0.663753 1.333326

C -4.924228 -0.178318 -0.406571

H -4.799984 -1.051466 -1.063558

H -4.815687 0.710073 -1.040835

C -6.317987 -0.202695 0.212216

H -6.468716 0.729699 0.777936

H -7.078604 -0.211517 -0.578981

C -6.503776 -1.391076 1.145605

H -6.469816 -2.320120 0.556032

H -7.496681 -1.356614 1.611926

C -5.413585 -1.439821 2.207695

H -5.538087 -2.324909 2.844413

H -5.504942 -0.564561 2.869409

C -4.029270 -1.447362 1.571262

H -3.245208 -1.493127 2.333115

H -3.928116 -2.353961 0.965059

C -1.648711 -1.126638 -1.209606

H -0.544240 -1.058933 -1.162504

C -2.059944 -0.827916 -2.652816

H -1.796121 0.190918 -2.949284
H -3.152441 -0.914264 -2.755625
C -1.370310 -1.806827 -3.596809
H -1.657649 -1.591929 -4.633971
H -0.284580 -1.635144 -3.532048
C -1.684798 -3.253021 -3.245283
H -2.755926 -3.440462 -3.419101
H -1.139133 -3.935423 -3.909355
C -1.358731 -3.552789 -1.789158
H -0.271321 -3.499816 -1.635869
H -1.657924 -4.576545 -1.529785
C -2.040659 -2.561659 -0.855675
H -3.129606 -2.672078 -0.965664
H -1.797531 -2.779182 0.189128
C -2.298149 1.709153 -0.844513
H -2.946309 1.541861 -1.717067
C -2.920411 2.786550 0.042410
H -3.957577 2.524907 0.288428
H -2.366303 2.816789 0.994161
C -2.893185 4.162324 -0.614002
H -3.306298 4.908662 0.076763
H -3.556072 4.152202 -1.492791
C -1.491904 4.557096 -1.055223
H -1.505169 5.543462 -1.535789
H -0.843677 4.646445 -0.170015
C -0.911368 3.510863 -1.994354
H 0.114166 3.768015 -2.289023
H -1.505327 3.476807 -2.920253
C -0.917580 2.141994 -1.331790
H -0.254880 2.180176 -0.452603
H -0.519103 1.390334 -2.035889
C 1.395704 1.487960 2.162066
H 1.153352 1.262683 3.212228
C 2.914411 1.555455 2.016877
H 3.139125 1.797932 0.967116
H 3.380880 0.581565 2.210776
C 3.505730 2.624299 2.927995

H 3.326644 2.342394 3.977240
H 4.595356 2.669217 2.800502
C 2.884831 3.989082 2.659443
H 3.173023 4.318784 1.649267
H 3.283222 4.738201 3.356207
C 1.365115 3.934623 2.743529
H 1.061561 3.720680 3.779826
H 0.931710 4.910903 2.487222
C 0.807675 2.853767 1.826994
H -0.289290 2.823583 1.868187
H 1.080859 3.099146 0.787980
C 1.458643 -1.390997 1.870423
H 2.463744 -1.417024 1.419341
C 0.707171 -2.624334 1.387412
H -0.309092 -2.594801 1.810349
H 0.596562 -2.584805 0.296569
C 1.405809 -3.907819 1.809259
H 2.388448 -3.954751 1.316532
H 0.837649 -4.781883 1.462607
C 1.586132 -3.955116 3.320239
H 2.128999 -4.862180 3.617283
H 0.595870 -4.014046 3.798674
C 2.309235 -2.714747 3.826932
H 2.398891 -2.742380 4.921262
H 3.335585 -2.710117 3.429201
C 1.611628 -1.430190 3.388980
H 2.182642 -0.566887 3.751182
H 0.619173 -1.370660 3.860554
C 2.818460 -0.750222 -1.155070
C 4.101678 -0.444203 -0.694553
C 2.557120 -2.071077 -1.536277
C 5.076989 -1.434141 -0.579371
H 4.355378 0.576607 -0.416229
C 3.528690 -3.061279 -1.420169
H 1.578314 -2.335380 -1.935314
C 4.794083 -2.749493 -0.931143
H 6.068051 -1.169959 -0.211447

H 3.294006 -4.083207 -1.717083
H 5.555090 -3.521966 -0.837117
C 3.014673 2.283915 -2.810995
H 2.642055 3.054210 -2.120228
H 3.946225 1.886565 -2.385294
H 3.285407 2.794307 -3.752499
C 2.504971 0.156862 -4.045047
H 3.457442 -0.286380 -3.728469
H 1.797738 -0.671364 -4.184112
C 2.004998 1.172701 -3.038764
H 1.076035 1.618630 -3.439100
H 2.671141 0.619600 -5.032937

X^c

E = -2418.56933787

Pd -1.326613 0.641179 1.186048
P 2.094174 0.072369 -0.170985
P -0.751302 -0.011325 -1.075509
C 0.978683 -0.034302 -1.468864
C 1.433044 0.058696 -2.910811
H 0.838941 0.790548 -3.477812
H 1.356531 -0.894738 -3.459101
H 2.474567 0.389488 -3.012909
C 3.789135 -0.302877 -0.792409
H 3.941670 0.499755 -1.530514
C 4.892664 -0.160633 0.256836
H 4.794755 -0.964921 1.000412
H 4.798996 0.784786 0.805318
C 6.265561 -0.241849 -0.402475
H 6.392334 0.631677 -1.060565
H 7.052039 -0.172146 0.359908
C 6.427140 -1.514820 -1.222115
H 6.418754 -2.382198 -0.544278
H 7.403712 -1.522922 -1.722865
C 5.302439 -1.670745 -2.237035
H 5.412036 -2.613354 -2.788225
H 5.365511 -0.864006 -2.983695

C 3.940517 -1.621708 -1.555529
H 3.130941 -1.745696 -2.281234
H 3.868406 -2.464998 -0.860700
C 1.652385 -1.011363 1.260621
H 0.546958 -0.972626 1.229166
C 2.078624 -0.542330 2.652245
H 1.767561 0.489397 2.841734
H 3.176168 -0.564248 2.737279
C 1.456280 -1.443946 3.712988
H 1.753780 -1.104486 4.713409
H 0.362483 -1.331430 3.657422
C 1.824452 -2.905538 3.509627
H 2.908255 -3.030742 3.659013
H 1.332596 -3.532207 4.264440
C 1.457775 -3.371145 2.108261
H 0.364267 -3.366907 1.992605
H 1.781934 -4.407365 1.946950
C 2.074269 -2.466287 1.050504
H 3.168868 -2.537558 1.129562
H 1.800251 -2.800905 0.044885
C 2.285000 1.779460 0.566045
H 2.937318 1.711378 1.448681
C 2.912503 2.729601 -0.454623
H 3.943493 2.426220 -0.675383
H 2.347458 2.647055 -1.397543
C 2.911434 4.177903 0.019457
H 3.331826 4.822124 -0.763584
H 3.579218 4.270111 0.889642
C 1.518955 4.645259 0.410788
H 1.546114 5.684364 0.762195
H 0.867071 4.628356 -0.476160
C 0.930887 3.734783 1.477110
H -0.087886 4.045539 1.738537
H 1.527050 3.810423 2.399223
C 0.911455 2.291956 0.995344
H 0.251691 2.225923 0.120375
H 0.502779 1.642244 1.794364

C -1.535877 1.226447 -2.226296
H -1.342061 0.881986 -3.253977
C -3.046736 1.296120 -2.013746
H -3.223737 1.665755 -0.992245
H -3.505468 0.300515 -2.060259
C -3.699844 2.236638 -3.018973
H -3.568255 1.827836 -4.032900
H -4.782427 2.286682 -2.842670
C -3.087727 3.629720 -2.952898
H -3.332199 4.080154 -1.978456
H -3.530219 4.282637 -3.716641
C -1.572884 3.580008 -3.104709
H -1.316254 3.240792 -4.120049
H -1.143766 4.585145 -2.994470
C -0.953023 2.628279 -2.089625
H 0.141041 2.603927 -2.184217
H -1.177772 3.000309 -1.077035
C -1.548544 -1.603644 -1.638567
H -2.530462 -1.601280 -1.138907
C -0.750740 -2.775033 -1.080395
H 0.245782 -2.766449 -1.548987
H -0.594105 -2.634341 -0.003565
C -1.437892 -4.104945 -1.350757
H -2.396112 -4.125429 -0.810540
H -0.834150 -4.932127 -0.952903
C -1.686548 -4.295083 -2.840385
H -2.220106 -5.236492 -3.026881
H -0.718733 -4.377182 -3.359615
C -2.463212 -3.121094 -3.419793
H -2.606610 -3.250644 -4.501008
H -3.468218 -3.099356 -2.971281
C -1.774849 -1.788931 -3.137506
H -2.383335 -0.974719 -3.548799
H -0.808811 -1.755792 -3.663205
C -2.788043 -0.684058 1.353350
C -4.092413 -0.425467 0.922801
C -2.496623 -1.970232 1.820616

C -5.056100 -1.432617 0.907832
H -4.370373 0.570230 0.583759
C -3.458573 -2.977636 1.807673
H -1.499955 -2.197814 2.195806
C -4.742636 -2.717162 1.339210
H -6.062189 -1.206615 0.555610
H -3.199412 -3.973132 2.167370
H -5.494689 -3.503829 1.323693
C -0.954794 1.693836 4.003622
H -0.348441 0.814940 4.255504
H -0.273126 2.476934 3.642695
C -2.889529 2.591960 2.662384
H -2.303287 3.359601 2.134187
H -3.741044 2.334730 2.019943
H -3.298811 3.077869 3.566335
C -2.056655 1.369088 3.006725
H -2.712010 0.618054 3.462797
H -1.377770 2.073397 4.950402

***TS_{X→X'}*^a**

E = -2418.55460333
Pd 1.425213 0.092012 1.230746
P -2.069653 -0.629425 -0.419400
P 0.370684 1.222042 -0.550954
C -1.197214 0.651833 -1.160723
C -3.862409 -0.451261 -0.845265
H -3.896202 -0.689896 -1.919158
C -4.792563 -1.439331 -0.142476
H -4.821118 -1.205180 0.931052
H -4.422385 -2.468521 -0.231672
C -6.205182 -1.333799 -0.706522
H -6.192564 -1.640780 -1.763580
H -6.870282 -2.035543 -0.186803
C -6.740538 0.087586 -0.599457
H -6.855882 0.347172 0.464218
H -7.741723 0.153384 -1.044429
C -5.797092 1.087866 -1.254129

H -6.173992 2.110690 -1.126006
H -5.764549 0.902567 -2.339014
C -4.386727 0.977704 -0.688317
H -3.709124 1.688359 -1.172330
H -4.402920 1.246474 0.375480
C -1.847304 -0.707480 1.402106
H -0.745453 -0.592494 1.473255
C -2.204262 -2.015778 2.112565
H -1.784470 -2.887729 1.602039
H -3.293968 -2.153579 2.123851
C -1.686763 -1.972011 3.547961
H -1.949031 -2.903065 4.066902
H -0.588501 -1.928704 3.522331
C -2.219667 -0.769132 4.313815
H -3.307118 -0.879730 4.447454
H -1.785515 -0.737989 5.321550
C -1.943530 0.530370 3.571102
H -0.858036 0.714305 3.532251
H -2.386302 1.381732 4.103995
C -2.475597 0.466765 2.147065
H -3.567566 0.332348 2.179210
H -2.281245 1.399361 1.613090
C -1.640969 -2.347215 -0.993852
H -2.328386 -3.056119 -0.506191
C -1.808072 -2.461591 -2.510792
H -2.851552 -2.284453 -2.801720
H -1.210388 -1.671201 -2.987578
C -1.355258 -3.818298 -3.034886
H -1.467225 -3.850473 -4.126412
H -2.015438 -4.600904 -2.630218
C 0.080377 -4.117350 -2.632186
H 0.385410 -5.105401 -3.000173
H 0.750874 -3.384147 -3.106425
C 0.241292 -4.034640 -1.122238
H 1.284292 -4.222374 -0.837035
H -0.358034 -4.828371 -0.649285
C -0.202751 -2.678845 -0.589017

H 0.457478 -1.892179 -0.975108
H -0.078196 -2.643681 0.500757
C 1.487092 1.245173 -2.048108
H 0.963932 1.800139 -2.842599
C 2.813073 1.946976 -1.763234
H 3.279801 1.466065 -0.891850
H 2.644023 2.997058 -1.494599
C 3.762813 1.877421 -2.953353
H 3.341804 2.459686 -3.788368
H 4.717490 2.353855 -2.692970
C 3.990281 0.443887 -3.408168
H 4.486769 -0.114344 -2.600777
H 4.663106 0.416714 -4.275710
C 2.666374 -0.231432 -3.732605
H 2.197735 0.273825 -4.591969
H 2.828791 -1.275408 -4.034179
C 1.726202 -0.179061 -2.537410
H 0.765314 -0.650960 -2.779976
H 2.164529 -0.757041 -1.710111
C 0.287368 3.050637 -0.156167
H 1.322159 3.267530 0.154869
C -0.603395 3.320882 1.048366
H -1.643784 3.103142 0.761813
H -0.342672 2.633824 1.866985
C -0.503541 4.769604 1.508250
H 0.519229 4.962090 1.866848
H -1.170994 4.944507 2.362922
C -0.828987 5.732033 0.374019
H -0.708625 6.772445 0.703865
H -1.888324 5.613863 0.097459
C 0.033931 5.455210 -0.849355
H -0.241826 6.127226 -1.673139
H 1.086018 5.673275 -0.608849
C -0.081590 4.000322 -1.292539
H 0.546495 3.825635 -2.175261
H -1.119782 3.802762 -1.596263
C 3.246703 -0.768371 1.031291

C 3.310329 -2.005941 0.378528
C 4.387293 0.044767 1.002601
C 4.452716 -2.397004 -0.313493
H 2.448552 -2.669555 0.401378
C 5.531127 -0.347876 0.314425
H 4.378365 1.006175 1.512953
C 5.572178 -1.570947 -0.348864
H 4.466247 -3.358109 -0.826605
H 6.398268 0.311315 0.296908
H 6.468137 -1.878198 -0.884728
C 2.288861 -0.843383 2.955493
H 1.457976 -2.799813 2.502861
H 1.306840 -0.408361 3.261659
C 2.213840 -2.340029 3.151413
H 3.173570 -2.825684 2.937844
H 1.943517 -2.577487 4.192371
C 3.349298 -0.175931 3.799623
H 3.139911 -0.338888 4.868498
H 4.348999 -0.576812 3.593212
H 3.377741 0.906925 3.632044
C -1.616942 1.040599 -2.569430
H -2.590490 0.620766 -2.851870
H -1.706052 2.127448 -2.701033
H -0.913679 0.691128 -3.343191

TS_{X→X^f}

E = -2418.54977165
Pd 1.427021 0.309071 1.108175
P -2.220663 -0.490107 -0.139225
P 0.527033 0.482557 -1.043054
C -1.143040 -0.021033 -1.384105
C -1.503737 -0.287674 -2.831418
H -1.003944 -1.175999 -3.253367
H -1.220498 0.561105 -3.475511
H -2.576694 -0.446144 -2.992105
C -3.949588 -0.345603 -0.777324
H -3.965993 -1.107870 -1.571738

C -5.042979 -0.723067 0.221108
H -5.089657 0.040932 1.011324
H -4.818176 -1.676593 0.715159
C -6.395257 -0.805789 -0.479568
H -6.369136 -1.637633 -1.200137
H -7.180641 -1.049723 0.247443
C -6.730945 0.485100 -1.214200
H -6.875221 1.290129 -0.477199
H -7.683566 0.381492 -1.749410
C -5.617856 0.888269 -2.172740
H -5.857144 1.843751 -2.656780
H -5.537905 0.142238 -2.978671
C -4.281838 0.990198 -1.447785
H -3.478780 1.293027 -2.127889
H -4.354713 1.777325 -0.689076
C -1.992228 0.507805 1.392036
H -0.884474 0.550998 1.461551
C -2.515533 -0.069199 2.707833
H -2.147163 -1.086750 2.876717
H -3.612545 -0.134911 2.675401
C -2.093188 0.819143 3.876519
H -2.503278 0.418491 4.812572
H -0.999620 0.773113 3.973121
C -2.507316 2.271952 3.691856
H -3.605481 2.345229 3.725421
H -2.130624 2.880032 4.524372
C -2.018759 2.820070 2.358484
H -0.918479 2.855103 2.343696
H -2.367633 3.850502 2.213193
C -2.497010 1.937502 1.217402
H -3.597254 1.924824 1.222925
H -2.183857 2.328503 0.244875
C -2.111930 -2.258814 0.436036
H -2.853849 -2.415594 1.234067
C -2.417249 -3.206322 -0.725700
H -3.466699 -3.107036 -1.032797
H -1.806191 -2.907120 -1.592073

C -2.129485 -4.662257 -0.379223
H -2.319384 -5.294674 -1.256184
H -2.833495 -4.992011 0.400383
C -0.707008 -4.852226 0.124715
H -0.526589 -5.905755 0.374097
H 0.001439 -4.592155 -0.676843
C -0.447306 -3.961225 1.329201
H 0.587611 -4.073075 1.679428
H -1.095413 -4.277367 2.161573
C -0.710735 -2.500497 0.995956
H 0.022069 -2.160544 0.255558
H -0.534428 -1.874158 1.876384
C 1.542554 -0.535562 -2.246939
H 1.084840 -0.365069 -3.235211
C 3.008583 -0.118678 -2.337617
H 3.466792 -0.181975 -1.341391
H 3.090726 0.925341 -2.661392
C 3.785242 -0.999734 -3.311071
H 3.405829 -0.835368 -4.332228
H 4.840869 -0.697353 -3.316545
C 3.659184 -2.475609 -2.965537
H 4.127535 -2.652167 -1.986539
H 4.203782 -3.090847 -3.694236
C 2.197208 -2.889569 -2.897902
H 1.743293 -2.794875 -3.896957
H 2.105551 -3.947232 -2.613521
C 1.430554 -2.017791 -1.913844
H 0.373462 -2.310614 -1.882583
H 1.833792 -2.170933 -0.900263
C 0.782832 2.182489 -1.803951
H 1.065849 2.013333 -2.856836
C 1.928245 2.914371 -1.101338
H 1.635236 3.066075 -0.049402
H 2.828896 2.291663 -1.060717
C 2.221205 4.256184 -1.760113
H 2.584514 4.082437 -2.785057
H 3.032052 4.771395 -1.227780

C 0.977296 5.132970 -1.809585
H 1.187582 6.074925 -2.333464
H 0.692219 5.405656 -0.781439
C -0.187821 4.404105 -2.466189
H -1.090756 5.029439 -2.445506
H 0.044589 4.228206 -3.527931
C -0.456956 3.066190 -1.787589
H -1.310600 2.552629 -2.247101
H -0.734643 3.253135 -0.739728
C 3.372812 -0.160875 1.355802
C 3.732638 -1.503074 1.157597
C 4.321956 0.830527 1.057234
C 4.972408 -1.833850 0.619132
H 3.024699 -2.295170 1.401569
C 5.557002 0.491859 0.517296
H 4.076678 1.878909 1.223140
C 5.890231 -0.841438 0.285709
H 5.219496 -2.881812 0.451445
H 6.266009 1.280777 0.268344
H 6.856666 -1.103572 -0.139627
C 2.014413 1.594171 3.529417
H 2.693662 2.329157 3.081574
H 0.991489 1.877895 3.250827
C 1.502559 -0.913099 3.695717
H 0.439193 -0.780916 3.462192
H 1.802277 -1.903633 3.332887
H 1.594476 -0.926307 4.794687
C 2.374985 0.179932 3.106348
H 3.392937 -0.005250 3.452716
H 2.095077 1.697299 4.624773

XI

E = -2418.62169911
Pd 1.628883 -0.236647 -0.608734
P -2.172567 0.440221 -0.221158
P 0.402003 -0.084030 1.341612
C -1.322059 0.332145 1.268729

C -1.999275 0.932648 2.488514
H -2.049784 0.239626 3.340234
H -3.034001 1.238792 2.286389
H -1.494334 1.841726 2.855338
C -3.970823 0.125650 0.084734
H -4.314950 1.023397 0.620858
C -4.811349 0.010014 -1.186652
H -4.513171 -0.897412 -1.730444
H -4.630542 0.855404 -1.862499
C -6.293456 -0.086542 -0.843963
H -6.612854 0.851312 -0.364098
H -6.886075 -0.183469 -1.762905
C -6.568298 -1.253429 0.094325
H -6.349864 -2.195123 -0.432524
H -7.632408 -1.287562 0.361482
C -5.704931 -1.173485 1.346396
H -5.881554 -2.044950 1.989941
H -5.997548 -0.289444 1.933966
C -4.224128 -1.072465 1.001605
H -3.613062 -0.995207 1.906636
H -3.905324 -1.992570 0.494753
C -1.527092 -0.698120 -1.499690
H -0.434251 -0.508303 -1.377039
C -1.870454 -0.435248 -2.966362
H -1.787143 0.623061 -3.231539
H -2.909400 -0.728083 -3.173004
C -0.930485 -1.259158 -3.842518
H -1.149229 -1.084469 -4.904018
H 0.097150 -0.906588 -3.666902
C -1.006362 -2.746338 -3.521774
H -1.996889 -3.126309 -3.817182
H -0.271335 -3.300346 -4.121295
C -0.792969 -3.012892 -2.038074
H 0.238146 -2.746839 -1.756910
H -0.919016 -4.080725 -1.816394
C -1.737424 -2.176052 -1.187588
H -2.779305 -2.456315 -1.409746

H -1.570842 -2.364213 -0.125100
C -2.147961 2.108579 -1.051211
H -2.815656 2.070062 -1.926399
C -2.651326 3.187756 -0.089903
H -3.692969 2.997384 0.199301
H -2.055488 3.135844 0.833155
C -2.531872 4.585397 -0.683831
H -2.883601 5.329186 0.042955
H -3.195517 4.665715 -1.558629
C -1.103046 4.884585 -1.110406
H -1.034743 5.887516 -1.551388
H -0.452970 4.887088 -0.221826
C -0.605679 3.832911 -2.089799
H 0.438411 4.029475 -2.366952
H -1.192091 3.898766 -3.019765
C -0.724415 2.429023 -1.512348
H -0.053293 2.322741 -0.651899
H -0.366697 1.692944 -2.241708
C 1.198938 1.250298 2.385110
H 0.649727 1.318622 3.337354
C 2.661631 0.924850 2.684989
H 3.174398 0.753824 1.724159
H 2.742642 -0.009646 3.253759
C 3.353811 2.046079 3.451467
H 2.899835 2.137320 4.450707
H 4.409688 1.790530 3.613857
C 3.233803 3.379209 2.728302
H 3.768822 3.314850 1.768218
H 3.717288 4.178157 3.306083
C 1.774557 3.714912 2.458059
H 1.251873 3.863761 3.415820
H 1.690705 4.662128 1.907282
C 1.098432 2.597003 1.678117
H 0.044729 2.837828 1.487853
H 1.583127 2.496236 0.692828
C 0.667324 -1.577463 2.445075
H 1.760637 -1.707252 2.397722

C 0.048016 -2.827144 1.835423
H -1.047093 -2.708817 1.840675
H 0.357244 -2.913827 0.784419
C 0.424549 -4.082789 2.610342
H 1.510028 -4.244984 2.523163
H -0.058041 -4.963380 2.164990
C 0.052457 -3.958620 4.081244
H 0.368099 -4.851661 4.636959
H -1.043936 -3.907573 4.170686
C 0.657442 -2.704154 4.695958
H 0.352572 -2.605686 5.746591
H 1.754849 -2.794738 4.697561
C 0.264673 -1.455587 3.912474
H 0.717977 -0.568758 4.373129
H -0.824687 -1.323759 3.975389
C 3.375734 -0.746296 -1.959775
C 2.692098 0.380052 -2.477604
C 4.421452 -0.506022 -1.035107
C 3.053375 1.684174 -2.076336
H 1.977435 0.249572 -3.289512
C 4.804996 0.782925 -0.694520
H 4.967195 -1.353052 -0.623739
C 4.120221 1.885753 -1.213245
H 2.513285 2.533402 -2.490706
H 5.633856 0.932427 -0.005084
H 4.414308 2.895602 -0.934721
C 4.210383 -2.415398 -3.621849
H 4.212409 -1.646399 -4.403332
H 5.212829 -2.437711 -3.174414
H 4.030880 -3.387714 -4.097926
C 3.108105 -3.225402 -1.504298
H 4.086074 -3.368506 -1.026983
H 2.384767 -2.977841 -0.717117
C 3.155123 -2.123800 -2.556484
H 2.173266 -2.095377 -3.051952
H 2.822943 -4.182134 -1.958758

XII^a

E = -2418.56951429

Pd -1.536805 0.623754 1.267123

P 2.237551 -0.053120 -0.122802

P -0.749509 0.107401 -0.924696

C 0.972243 -0.088585 -1.277636

C 1.378667 -0.198469 -2.736297

H 1.007681 0.647860 -3.338072

H 1.001524 -1.115846 -3.215523

H 2.466930 -0.207094 -2.880064

C 3.563141 -1.245146 -0.637675

H 4.018426 -0.752637 -1.511076

C 4.680609 -1.473605 0.379112

H 4.269096 -2.010594 1.245284

H 5.080815 -0.523359 0.755027

C 5.794395 -2.318584 -0.229101

H 6.251282 -1.765902 -1.064324

H 6.589420 -2.478677 0.510615

C 5.258094 -3.650494 -0.734458

H 4.900003 -4.240216 0.123383

H 6.061505 -4.236112 -1.199402

C 4.110050 -3.446690 -1.713053

H 3.699469 -4.413557 -2.030890

H 4.491989 -2.957965 -2.622813

C 3.003316 -2.584370 -1.118558

H 2.208352 -2.421966 -1.851185

H 2.536765 -3.110707 -0.274806

C 1.704347 -0.367409 1.609912

H 0.844014 0.318594 1.704277

C 2.710536 -0.003900 2.708242

H 3.136150 0.993468 2.562035

H 3.553286 -0.705294 2.692246

C 2.041000 -0.084812 4.075876

H 2.759748 0.190669 4.858409

H 1.225789 0.653782 4.122563

C 1.472814 -1.472488 4.329754

H 2.301239 -2.196431 4.378524

H 0.969768 -1.508798 5.304472
C 0.511327 -1.871860 3.221896
H -0.364140 -1.204787 3.239545
H 0.134101 -2.889452 3.384797
C 1.156949 -1.773418 1.845379
H 1.977801 -2.502635 1.771824
H 0.431344 -2.019088 1.063327
C 3.140492 1.575996 -0.012386
H 4.033815 1.434446 0.615919
C 3.579548 2.041105 -1.402817
H 4.277539 1.323420 -1.853075
H 2.693903 2.068671 -2.053822
C 4.211207 3.426691 -1.371266
H 4.503682 3.723657 -2.386658
H 5.136917 3.393928 -0.776383
C 3.259928 4.447444 -0.766401
H 3.725364 5.440961 -0.737557
H 2.369676 4.536217 -1.408292
C 2.831870 4.017139 0.627426
H 2.111897 4.730637 1.049253
H 3.708174 4.029459 1.293944
C 2.223072 2.620903 0.625077
H 1.283571 2.625608 0.057971
H 1.957961 2.339771 1.650036
C -1.364255 1.507386 -1.997532
H -1.244327 1.201853 -3.047741
C -2.844892 1.770571 -1.726686
H -2.949438 2.056449 -0.666998
H -3.437438 0.853871 -1.843926
C -3.384845 2.887085 -2.610457
H -3.338417 2.571147 -3.664312
H -4.444311 3.069375 -2.386925
C -2.575954 4.165092 -2.431704
H -2.713592 4.533320 -1.403035
H -2.947898 4.955359 -3.097017
C -1.093399 3.916990 -2.675120
H -0.940049 3.651545 -3.732499

H -0.515158 4.834543 -2.498724
C -0.565849 2.786765 -1.800566
H 0.495308 2.599288 -2.008567
H -0.632970 3.084583 -0.740897
C -1.674117 -1.342818 -1.687887
H -2.638660 -1.327997 -1.158234
C -0.982747 -2.651851 -1.321886
H 0.017623 -2.672777 -1.779211
H -0.829416 -2.692549 -0.238288
C -1.785957 -3.865330 -1.768276
H -2.730179 -3.889393 -1.204351
H -1.245074 -4.787839 -1.516585
C -2.090093 -3.811985 -3.257408
H -2.697905 -4.675247 -3.559397
H -1.148217 -3.879133 -3.824732
C -2.795862 -2.512585 -3.613208
H -3.002540 -2.465933 -4.690974
H -3.771803 -2.484569 -3.104639
C -1.985443 -1.292999 -3.185467
H -2.551043 -0.388265 -3.435059
H -1.056812 -1.250609 -3.771533
C -2.983817 -0.770629 1.290757
C -4.267492 -0.420708 0.848260
C -2.764633 -2.114477 1.614065
C -5.272888 -1.373657 0.698347
H -4.493263 0.618602 0.607765
C -3.769108 -3.070900 1.474212
H -1.789363 -2.436307 1.972952
C -5.027414 -2.708500 1.004921
H -6.256345 -1.068272 0.341399
H -3.561752 -4.109828 1.730411
H -5.810254 -3.455872 0.887955
C -1.006724 2.445300 2.689393
H -0.527438 2.219555 1.655642
H -1.360012 3.474534 2.548442
H -0.137236 2.442198 3.357625
C -3.493826 2.008618 3.159093

H -3.779939 2.573861 2.260697
H -4.213425 1.189822 3.269505
C -2.089077 1.474229 3.052353
H -1.823824 0.825625 3.893961
H -3.618576 2.681850 4.023195

XII^c

E = -2418.56922937
Pd 1.683649 0.552851 -1.163166
P -2.110374 0.003574 0.082657
P 0.742703 0.428446 1.054696
C -1.007763 0.346479 1.350264
C -1.536951 0.804871 2.696868
H -1.184649 1.811886 2.969600
H -1.247752 0.139603 3.524390
H -2.631250 0.865616 2.726733
C -3.714046 -0.545076 0.821819
H -4.025864 0.357229 1.368967
C -4.822122 -0.839598 -0.190130
H -4.581747 -1.757887 -0.744744
H -4.901374 -0.036545 -0.933357
C -6.157427 -1.016306 0.525347
H -6.443327 -0.055987 0.981878
H -6.943157 -1.260206 -0.201266
C -6.081743 -2.083501 1.608489
H -5.908724 -3.062876 1.136403
H -7.041628 -2.159350 2.135298
C -4.951928 -1.802355 2.591022
H -4.888309 -2.601828 3.340184
H -5.167962 -0.874414 3.143117
C -3.618859 -1.658971 1.866864
H -2.803661 -1.456048 2.569621
H -3.381174 -2.611028 1.380724
C -1.471572 -1.244751 -1.119757
H -0.385654 -1.028837 -1.138737
C -2.001084 -1.139891 -2.551952
H -1.847379 -0.137518 -2.963060

H -3.086932 -1.321511 -2.559401
C -1.303360 -2.154314 -3.451892
H -1.702000 -2.079719 -4.471912
H -0.240212 -1.882949 -3.515905
C -1.433003 -3.578314 -2.931726
H -2.488744 -3.887036 -2.986904
H -0.874182 -4.270083 -3.575150
C -0.959127 -3.686242 -1.489643
H 0.123706 -3.513065 -1.433574
H -1.132358 -4.699188 -1.103568
C -1.672349 -2.673438 -0.607929
H -2.747384 -2.903349 -0.618860
H -1.336555 -2.757250 0.428846
C -2.631642 1.464894 -0.959982
H -3.274318 1.103074 -1.775970
C -3.410316 2.473462 -0.113099
H -4.362962 2.041805 0.218628
H -2.824942 2.690497 0.795851
C -3.688721 3.771376 -0.861504
H -4.209432 4.475121 -0.199174
H -4.376111 3.562950 -1.695690
C -2.414810 4.391088 -1.412351
H -2.641744 5.314239 -1.960793
H -1.756782 4.674726 -0.575956
C -1.684437 3.399594 -2.304059
H -0.750008 3.834262 -2.680820
H -2.302768 3.174475 -3.186608
C -1.382967 2.114060 -1.547899
H -0.709048 2.338991 -0.712358
H -0.838994 1.407376 -2.189958
C 1.332633 1.968559 1.924781
H 1.042950 1.892293 2.984194
C 2.855208 2.086606 1.845460
H 3.144442 2.101759 0.781176
H 3.338639 1.202797 2.280214
C 3.357644 3.349512 2.534594
H 3.144727 3.280213 3.612612

H 4.448978 3.422180 2.438159
C 2.689633 4.596694 1.972594
H 2.990420 4.721943 0.920636
H 3.036328 5.492632 2.504031
C 1.173043 4.484952 2.043314
H 0.857660 4.460899 3.097748
H 0.699917 5.370163 1.597082
C 0.685079 3.222143 1.346740
H -0.409405 3.143368 1.395683
H 0.944826 3.282821 0.277338
C 1.599533 -0.906661 2.031994
H 2.637015 -0.850349 1.671929
C 1.054830 -2.264810 1.610744
H 0.016394 -2.338885 1.969335
H 1.026625 -2.332082 0.515170
C 1.884421 -3.400589 2.191110
H 2.894836 -3.355297 1.758870
H 1.462526 -4.369968 1.893253
C 1.962849 -3.298044 3.708381
H 2.604463 -4.089708 4.117706
H 0.959102 -3.461787 4.131436
C 2.464973 -1.928981 4.148484
H 2.474781 -1.858221 5.244627
H 3.507854 -1.804315 3.818473
C 1.624895 -0.801714 3.554149
H 2.023741 0.167157 3.880656
H 0.599778 -0.869112 3.945922
C 2.848723 -1.073918 -1.176590
C 4.033889 -1.063236 -0.427943
C 2.541229 -2.246457 -1.873473
C 4.855584 -2.186209 -0.353655
H 4.323496 -0.163700 0.116320
C 3.351227 -3.377928 -1.789799
H 1.651206 -2.286438 -2.498525
C 4.513259 -3.355318 -1.026151
H 5.769889 -2.145524 0.238068
H 3.072484 -4.280692 -2.333179

H 5.150268 -4.235732 -0.963063
C 1.760081 0.380629 -4.155384
H 2.018417 -0.683583 -4.204146
H 0.665415 0.455664 -4.078813
C 2.020841 2.479196 -2.723631
H 1.323541 2.549800 -1.835174
H 2.853942 3.143714 -2.471159
H 1.437087 2.926420 -3.541874
C 2.449519 1.057557 -2.995285
H 3.535774 0.944627 -3.048932
H 2.045254 0.830015 -5.122018

TS_{XII→XIII}^a

E = -2418.55552325
Pd -1.518466 0.571425 1.297997
P 2.232549 -0.077157 -0.104505
P -0.765095 0.269549 -0.891497
C 0.952766 0.042997 -1.237786
C 1.345652 0.051202 -2.705392
H 1.001995 0.960393 -3.226037
H 0.937612 -0.806164 -3.263320
H 2.432159 0.021176 -2.855894
C 3.507720 -1.259930 -0.755095
H 3.969676 -0.700590 -1.583138
C 4.630028 -1.617943 0.218350
H 4.214044 -2.229459 1.031294
H 5.060076 -0.721611 0.682721
C 5.714078 -2.424049 -0.487240
H 6.175406 -1.801372 -1.269088
H 6.513323 -2.678130 0.220954
C 5.136984 -3.684375 -1.116510
H 4.775198 -4.349355 -0.317252
H 5.918883 -4.239197 -1.650796
C 3.981558 -3.355517 -2.051526
H 3.542359 -4.275525 -2.457915
H 4.363400 -2.787139 -2.913838
C 2.905334 -2.531041 -1.355696

H 2.103397 -2.278221 -2.054175
H 2.439728 -3.128014 -0.560031
C 1.711327 -0.546670 1.594252
H 0.878669 0.155914 1.766211
C 2.745237 -0.329525 2.705365
H 3.188854 0.669983 2.659340
H 3.571953 -1.041197 2.596767
C 2.102106 -0.544688 4.071130
H 2.847746 -0.387126 4.861120
H 1.318819 0.212925 4.225480
C 1.486169 -1.930903 4.181547
H 2.287336 -2.684682 4.130724
H 1.000927 -2.058572 5.157677
C 0.491736 -2.174129 3.057379
H -0.360137 -1.485062 3.162199
H 0.079749 -3.189315 3.119144
C 1.119557 -1.951617 1.687730
H 1.912020 -2.697510 1.525190
H 0.374211 -2.089785 0.897139
C 3.204281 1.496435 0.139030
H 4.094292 1.258996 0.742677
C 3.654974 2.062402 -1.209954
H 4.308719 1.354113 -1.734994
H 2.764850 2.196313 -1.841420
C 4.361905 3.403336 -1.061826
H 4.657775 3.777208 -2.050533
H 5.291712 3.265269 -0.488841
C 3.476198 4.412841 -0.348643
H 3.996474 5.372553 -0.235115
H 2.584491 4.608634 -0.964560
C 3.038511 3.876200 1.005150
H 2.366914 4.587086 1.504003
H 3.920589 3.772195 1.656023
C 2.345130 2.526665 0.873231
H 1.412730 2.642954 0.308210
H 2.050480 2.164263 1.864849
C -1.313254 1.791094 -1.821121

H -1.197960 1.568072 -2.892281
C -2.786176 2.080959 -1.538054
H -2.895150 2.263282 -0.456127
H -3.406833 1.202130 -1.755903
C -3.277842 3.295717 -2.313905
H -3.240208 3.076681 -3.392423
H -4.330356 3.497193 -2.074530
C -2.420383 4.519054 -2.019594
H -2.542883 4.795209 -0.960685
H -2.761706 5.381240 -2.607512
C -0.948981 4.236100 -2.291360
H -0.808551 4.059196 -3.368963
H -0.335291 5.111728 -2.038398
C -0.464205 3.015959 -1.518496
H 0.587764 2.804995 -1.750139
H -0.515672 3.221916 -0.438095
C -1.717836 -1.066135 -1.807025
H -2.687114 -1.070082 -1.288970
C -1.076555 -2.426614 -1.556252
H -0.075965 -2.446459 -2.012593
H -0.931449 -2.566152 -0.479633
C -1.926085 -3.562201 -2.108793
H -2.871923 -3.597628 -1.548311
H -1.423973 -4.524615 -1.940025
C -2.221234 -3.364081 -3.587570
H -2.863200 -4.170907 -3.965414
H -1.280691 -3.420051 -4.158388
C -2.871549 -2.010320 -3.828530
H -3.071530 -1.861024 -4.898195
H -3.847457 -1.987014 -3.319768
C -2.014384 -0.866312 -3.295013
H -2.543669 0.078456 -3.463021
H -1.083306 -0.809246 -3.875310
C -2.986191 -0.885630 1.160777
C -4.258615 -0.513253 0.696671
C -2.803251 -2.246772 1.436374
C -5.276243 -1.442198 0.489311

H -4.468572 0.536609 0.482920
C -3.815497 -3.186227 1.240425
H -1.841719 -2.599526 1.806428
C -5.057691 -2.790497 0.756129
H -6.246289 -1.110221 0.119021
H -3.628116 -4.236710 1.463595
H -5.848038 -3.521968 0.595530
C -1.145710 1.942355 2.983118
H -0.471609 1.800133 1.413624
H -1.359745 2.993624 2.784044
H -0.170666 1.771072 3.439749
C -3.639535 1.548690 3.322778
H -3.827535 2.324619 2.569512
H -4.340703 0.728868 3.138192
C -2.217006 1.069904 3.273208
H -1.992383 0.198469 3.891305
H -3.874518 1.977036 4.308735

TS_{XII→XIII}^c

E = -2418.55067571
Pd 1.747208 0.580975 -1.215566
P -2.082065 -0.036579 0.043852
P 0.800538 0.609041 0.931251
C -0.948162 0.483551 1.219044
C -1.454024 0.952037 2.572799
H -1.044374 1.931826 2.856075
H -1.209528 0.263054 3.396834
H -2.542483 1.082463 2.598324
C -3.606617 -0.627732 0.914189
H -3.931949 0.297854 1.411430
C -4.763987 -1.047377 0.005840
H -4.529090 -2.004653 -0.480362
H -4.921774 -0.319740 -0.799366
C -6.042608 -1.195548 0.824800
H -6.330324 -0.204721 1.209796
H -6.865795 -1.527915 0.179235
C -5.861136 -2.154518 1.993797

H -5.690802 -3.169143 1.602084
H -6.781011 -2.203873 2.590522
C -4.676613 -1.757785 2.865839
H -4.537398 -2.485616 3.675363
H -4.882298 -0.789713 3.348602
C -3.402620 -1.648045 2.036972
H -2.545765 -1.371045 2.659529
H -3.177388 -2.633381 1.616238
C -1.417825 -1.348010 -1.078616
H -0.337701 -1.115196 -1.127119
C -1.974692 -1.361117 -2.502980
H -1.832812 -0.392565 -2.992571
H -3.060385 -1.544180 -2.471781
C -1.296325 -2.446462 -3.332391
H -1.709374 -2.447232 -4.349451
H -0.230998 -2.193253 -3.431338
C -1.432942 -3.824351 -2.701083
H -2.494189 -4.118842 -2.710326
H -0.898759 -4.572589 -3.300648
C -0.928097 -3.828492 -1.265644
H 0.158972 -3.685282 -1.243097
H -1.120305 -4.801775 -0.795565
C -1.596049 -2.733779 -0.449243
H -2.670414 -2.955896 -0.399488
H -1.220293 -2.734692 0.577270
C -2.781788 1.294926 -1.067292
H -3.409223 0.809041 -1.829330
C -3.632383 2.287318 -0.271544
H -4.515472 1.795581 0.154352
H -3.031666 2.656583 0.576416
C -4.091233 3.464301 -1.125062
H -4.665907 4.166375 -0.506927
H -4.782424 3.094123 -1.897874
C -2.926119 4.171302 -1.798840
H -3.288415 4.994912 -2.427459
H -2.281297 4.622368 -1.028897
C -2.105523 3.185577 -2.615925

H -1.238245 3.686064 -3.067135
H -2.714566 2.801937 -3.449167
C -1.633149 2.030227 -1.746877
H -0.979027 2.416131 -0.955891
H -1.010099 1.336477 -2.324574
C 1.317427 2.230611 1.687852
H 1.088189 2.162903 2.761803
C 2.823831 2.440054 1.536714
H 3.062672 2.460543 0.461188
H 3.378862 1.590130 1.955275
C 3.273962 3.739724 2.192360
H 3.115682 3.668546 3.279724
H 4.352480 3.883454 2.044780
C 2.498145 4.932781 1.651256
H 2.741847 5.065366 0.585589
H 2.808563 5.855883 2.158237
C 0.996321 4.723704 1.792675
H 0.733318 4.692143 2.861410
H 0.448549 5.573384 1.363320
C 0.555825 3.425943 1.127348
H -0.526540 3.274999 1.236874
H 0.752084 3.489990 0.046646
C 1.670096 -0.619930 2.034989
H 2.692170 -0.636099 1.632479
C 1.074000 -2.000815 1.794587
H 0.046384 -2.005192 2.192496
H 1.005629 -2.188874 0.715342
C 1.897079 -3.088120 2.468372
H 2.889550 -3.122895 1.995428
H 1.437567 -4.071279 2.299250
C 2.039384 -2.815389 3.959368
H 2.673733 -3.575575 4.434340
H 1.049227 -2.894739 4.435578
C 2.600492 -1.423163 4.215986
H 2.662886 -1.226878 5.294945
H 3.630095 -1.374541 3.829584
C 1.770493 -0.339110 3.532609

H 2.226701 0.640012 3.724039
H 0.767315 -0.312117 3.980866
C 2.846989 -1.179101 -1.032806
C 4.073199 -1.127936 -0.349052
C 2.507887 -2.418886 -1.586939
C 4.892772 -2.246081 -0.204125
H 4.405057 -0.183956 0.090756
C 3.306615 -3.551984 -1.436547
H 1.587353 -2.511702 -2.162625
C 4.507056 -3.471825 -0.738992
H 5.837317 -2.159872 0.333268
H 2.990995 -4.500213 -1.872524
H 5.138635 -4.350777 -0.620707
C 1.994165 -0.171034 -4.197105
H 2.212441 -1.216809 -3.956510
H 0.904492 -0.048354 -4.244068
C 2.014860 1.998890 -2.880077
H 1.091625 2.033250 -1.362746
H 2.638699 2.828647 -2.549319
H 1.100278 2.299752 -3.393143
C 2.604027 0.762327 -3.193141
H 3.679084 0.662169 -3.041063
H 2.394571 0.023347 -5.203411

XIII^a

E = -2418.56117218
Pd -1.507159 0.500334 1.327472
P 2.238561 -0.098429 -0.094873
P -0.758453 0.425570 -0.853011
C 0.952640 0.167651 -1.197081
C 1.342535 0.281227 -2.661933
H 1.032278 1.241754 -3.105615
H 0.905537 -0.512952 -3.286799
H 2.426933 0.225480 -2.816889
C 3.442133 -1.289056 -0.864201
H 3.918626 -0.687757 -1.653616
C 4.563375 -1.790039 0.045482

H 4.132274 -2.446396 0.814370
H 5.053688 -0.961660 0.572225
C 5.584720 -2.590746 -0.755071
H 6.062101 -1.929284 -1.494276
H 6.384410 -2.945870 -0.092267
C 4.925012 -3.760480 -1.471473
H 4.544168 -4.470239 -0.721069
H 5.662894 -4.309233 -2.070694
C 3.770001 -3.290478 -2.344133
H 3.269702 -4.146820 -2.814117
H 4.164779 -2.672860 -3.165820
C 2.758390 -2.469744 -1.553717
H 1.959678 -2.115102 -2.209345
H 2.274456 -3.105475 -0.800030
C 1.730765 -0.672486 1.575242
H 0.947777 0.062072 1.827786
C 2.813337 -0.601555 2.659615
H 3.302436 0.377333 2.679514
H 3.599725 -1.338195 2.459129
C 2.213367 -0.900651 4.028644
H 2.998742 -0.856492 4.794224
H 1.487290 -0.114649 4.284417
C 1.520727 -2.254437 4.048270
H 2.273346 -3.044847 3.902211
H 1.064030 -2.438027 5.029289
C 0.474572 -2.347766 2.948497
H -0.331791 -1.624158 3.144198
H 0.006671 -3.340334 2.945491
C 1.065031 -2.047463 1.576780
H 1.808551 -2.818941 1.326122
H 0.285631 -2.082907 0.807253
C 3.288901 1.402776 0.244493
H 4.177622 1.073057 0.805657
C 3.744884 2.054925 -1.063202
H 4.344926 1.358577 -1.663155
H 2.852443 2.295461 -1.658476
C 4.532124 3.335485 -0.817624

H 4.833200 3.774994 -1.777387
H 5.461483 3.095954 -0.278285
C 3.718448 4.329032 -0.003197
H 4.295347 5.244817 0.179131
H 2.829775 4.626044 -0.581941
C 3.271629 3.704775 1.309413
H 2.649924 4.407210 1.879585
H 4.156386 3.496632 1.931181
C 2.499003 2.412890 1.078530
H 1.566203 2.628517 0.544232
H 2.194460 1.985045 2.040267
C -1.244748 2.049585 -1.626757
H -1.126309 1.917543 -2.712610
C -2.712255 2.353507 -1.333403
H -2.833356 2.426018 -0.239921
H -3.351199 1.520036 -1.653081
C -3.159776 3.652431 -1.990716
H -3.122543 3.535390 -3.085065
H -4.207017 3.863307 -1.736702
C -2.266038 4.814673 -1.580608
H -2.383182 4.993205 -0.500517
H -2.578624 5.738427 -2.085093
C -0.803443 4.512070 -1.877576
H -0.666460 4.427780 -2.966926
H -0.163951 5.342355 -1.547936
C -0.358521 3.214658 -1.214152
H 0.686515 2.990897 -1.465437
H -0.405069 3.324837 -0.120633
C -1.737336 -0.777679 -1.907693
H -2.717853 -0.780080 -1.414437
C -1.165447 -2.182239 -1.752912
H -0.164535 -2.218112 -2.206635
H -1.035857 -2.406836 -0.688133
C -2.067275 -3.226475 -2.394535
H -3.020828 -3.251741 -1.846700
H -1.620475 -4.224916 -2.293611
C -2.329859 -2.902622 -3.857538

H -3.008216 -3.642946 -4.302061
H -1.385102 -2.967536 -4.420435
C -2.903596 -1.501344 -4.006085
H -3.078045 -1.264394 -5.064325
H -3.885178 -1.463273 -3.509216
C -1.996538 -0.445853 -3.379259
H -2.475504 0.535211 -3.478952
H -1.056687 -0.393073 -3.945061
C -3.005118 -0.940982 1.028351
C -4.246434 -0.569889 0.486520
C -2.838499 -2.303348 1.308526
C -5.250700 -1.498545 0.219144
H -4.441599 0.479805 0.258282
C -3.836266 -3.243843 1.051456
H -1.900339 -2.655310 1.737132
C -5.049071 -2.846902 0.498663
H -6.196880 -1.166115 -0.208104
H -3.661223 -4.294848 1.281884
H -5.829322 -3.577768 0.292525
C -1.333619 1.307184 3.381922
H -0.352042 1.607889 1.312414
H -1.384655 2.394693 3.353373
H -0.399057 0.886941 3.749535
C -3.857729 1.152116 3.338508
H -3.854330 2.142054 2.866660
H -4.570636 0.516042 2.806022
C -2.487108 0.548513 3.353370
H -2.429745 -0.493528 3.671322
H -4.221987 1.271564 4.369123

XIII^c

E = -2418.56147244
Pd -1.494843 0.513658 1.364079
P 2.229755 -0.111282 -0.136718
P -0.758857 0.465181 -0.831870
C 0.946701 0.225854 -1.222152
C 1.331679 0.435409 -2.676638

H 1.041540 1.429882 -3.053996
H 0.877241 -0.305230 -3.353246
H 2.414941 0.366169 -2.838240
C 3.442792 -1.252628 -0.958920
H 3.945718 -0.609489 -1.697196
C 4.530147 -1.810169 -0.039993
H 4.068627 -2.488205 0.691204
H 5.015886 -1.010777 0.533849
C 5.564124 -2.592567 -0.842288
H 6.079190 -1.906825 -1.532437
H 6.333418 -2.994153 -0.170114
C 4.909800 -3.713640 -1.637343
H 4.486304 -4.449733 -0.936766
H 5.659795 -4.249044 -2.233594
C 3.799110 -3.178784 -2.529902
H 3.305025 -4.000656 -3.063681
H 4.237131 -2.526698 -3.301499
C 2.769404 -2.383742 -1.736759
H 2.002654 -1.979908 -2.402803
H 2.246385 -3.051054 -1.039312
C 1.671439 -0.808270 1.463172
H 0.840663 -0.122300 1.709055
C 2.660556 -0.764316 2.631201
H 3.133929 0.217239 2.729975
H 3.470890 -1.487711 2.473554
C 1.929507 -1.115590 3.922705
H 2.623255 -1.070171 4.772145
H 1.154197 -0.355343 4.106729
C 1.277834 -2.488243 3.836225
H 2.065318 -3.254255 3.760865
H 0.721291 -2.706218 4.757440
C 0.358316 -2.586632 2.628575
H -0.492389 -1.904363 2.758497
H -0.061433 -3.597332 2.544130
C 1.067370 -2.205487 1.338171
H 1.861998 -2.935990 1.125583
H 0.367304 -2.231572 0.496134

C 3.282275 1.354772 0.323847
H 4.141623 0.978547 0.901530
C 3.799805 2.073433 -0.924467
H 4.409000 1.403150 -1.544184
H 2.933790 2.367860 -1.535600
C 4.607068 3.316011 -0.569194
H 4.950394 3.810162 -1.487327
H 5.512340 3.014728 -0.019916
C 3.796840 4.277411 0.286800
H 4.398221 5.155905 0.554047
H 2.941798 4.648718 -0.299204
C 3.278923 3.579572 1.534513
H 2.655356 4.261342 2.127285
H 4.130228 3.299782 2.174622
C 2.478732 2.333477 1.180484
H 1.585746 2.616687 0.611974
H 2.104455 1.855505 2.092354
C -1.247291 2.121379 -1.535194
H -1.148158 2.025545 -2.626485
C -2.704968 2.435365 -1.207356
H -2.799408 2.501691 -0.111497
H -3.361418 1.610765 -1.514330
C -3.148594 3.746570 -1.842249
H -3.125601 3.643999 -2.938502
H -4.190446 3.964801 -1.572746
C -2.238124 4.893838 -1.425643
H -2.345236 5.059901 -0.342471
H -2.544494 5.827524 -1.915492
C -0.780639 4.580786 -1.737214
H -0.651172 4.515312 -2.828767
H -0.130675 5.398295 -1.396537
C -0.344252 3.265888 -1.102529
H 0.696402 3.036909 -1.366064
H -0.382292 3.352877 -0.006553
C -1.768297 -0.687754 -1.924664
H -2.735288 -0.732892 -1.404628
C -1.174099 -2.091651 -1.887444

H -0.172487 -2.074203 -2.341056
H -1.038390 -2.399380 -0.845356
C -2.055703 -3.103127 -2.606198
H -3.003504 -3.197176 -2.056076
H -1.581424 -4.093873 -2.588605
C -2.343551 -2.671518 -4.035530
H -3.007880 -3.391960 -4.530924
H -1.404730 -2.664477 -4.611763
C -2.955431 -1.279471 -4.059578
H -3.154571 -0.960554 -5.091553
H -3.928468 -1.307779 -3.545565
C -2.063782 -0.255451 -3.363492
H -2.567420 0.717488 -3.381137
H -1.133966 -0.135903 -3.936169
C -3.063792 -0.835042 1.012281
C -4.319196 -0.323492 0.644910
C -2.951020 -2.231267 1.040369
C -5.386182 -1.148496 0.294905
H -4.476639 0.757019 0.623561
C -4.012376 -3.069432 0.697539
H -2.006862 -2.694512 1.325726
C -5.235752 -2.532045 0.312708
H -6.341542 -0.708014 0.009402
H -3.877723 -4.150855 0.725577
H -6.064530 -3.182652 0.038474
C -2.381636 -0.626686 4.217290
H -2.726762 -1.525661 3.694205
H -1.343597 -0.778636 4.534625
C -1.571855 1.595266 3.295789
H -0.302818 1.577938 1.380537
H -1.838956 2.606558 2.995259
H -0.626712 1.494898 3.829370
C -2.524142 0.597167 3.366332
H -3.542889 0.839245 3.062263
H -2.993323 -0.517835 5.124204

TS_{XIII→XIV}^a (CW)

E = -2418.55627211

Pd -1.528583 0.505357 1.300391

P 2.248183 -0.037574 -0.090580

P -0.766309 0.248591 -0.867497

C 0.953505 0.057730 -1.210762

C 1.334463 0.077560 -2.681709

H 0.967961 0.979144 -3.199823

H 0.946357 -0.789250 -3.239003

H 2.420623 0.074439 -2.835730

C 3.536293 -1.197467 -0.759870

H 3.981379 -0.627701 -1.589790

C 4.674878 -1.536134 0.202210

H 4.280320 -2.154132 1.020706

H 5.093537 -0.632009 0.661690

C 5.766638 -2.321315 -0.515340

H 6.210776 -1.687853 -1.298501

H 6.575975 -2.564088 0.185351

C 5.207040 -3.589005 -1.145556

H 4.862171 -4.263382 -0.346667

H 5.994828 -4.128036 -1.687363

C 4.039733 -3.276346 -2.071324

H 3.615181 -4.202034 -2.480468

H 4.405446 -2.695716 -2.932495

C 2.953401 -2.476688 -1.362442

H 2.141690 -2.234667 -2.053395

H 2.505504 -3.088311 -0.568207

C 1.745804 -0.534889 1.602493

H 0.886526 0.137797 1.777959

C 2.766148 -0.283173 2.717757

H 3.164858 0.735195 2.680682

H 3.623834 -0.958392 2.609537

C 2.118744 -0.532892 4.075472

H 2.845356 -0.342055 4.875866

H 1.297469 0.186096 4.216370

C 1.571614 -1.949119 4.174713

H 2.409786 -2.661870 4.128037

H 1.084905 -2.106034 5.146048
C 0.599808 -2.237594 3.041064
H -0.285256 -1.595218 3.145555
H 0.241266 -3.273752 3.090924
C 1.221700 -1.967962 1.678131
H 2.049724 -2.673188 1.513419
H 0.488773 -2.136630 0.881403
C 3.199839 1.547508 0.140579
H 4.094870 1.317547 0.740191
C 3.639688 2.114080 -1.212105
H 4.291426 1.408974 -1.743846
H 2.744048 2.247094 -1.836107
C 4.344818 3.456513 -1.067892
H 4.632471 3.831857 -2.058564
H 5.279350 3.319019 -0.502423
C 3.463235 4.463544 -0.346178
H 3.983013 5.424011 -0.235846
H 2.566272 4.657881 -0.955079
C 3.035448 3.922953 1.009230
H 2.367154 4.632225 1.514635
H 3.922267 3.817137 1.653647
C 2.339439 2.575383 0.875592
H 1.406619 2.693367 0.313454
H 2.035666 2.210369 1.862422
C -1.349361 1.766154 -1.780406
H -1.217231 1.545589 -2.850247
C -2.832381 2.014319 -1.516278
H -2.959324 2.175153 -0.434162
H -3.427804 1.124307 -1.758150
C -3.345138 3.229425 -2.278123
H -3.293998 3.027754 -3.359442
H -4.404263 3.401992 -2.044779
C -2.518524 4.467759 -1.959299
H -2.649855 4.722570 -0.896009
H -2.879119 5.331140 -2.533822
C -1.040750 4.222422 -2.231128
H -0.895115 4.060236 -3.310532

H -0.448411 5.109556 -1.968165
C -0.529790 3.008435 -1.466087
H 0.526207 2.821886 -1.700679
H -0.585254 3.200122 -0.384270
C -1.692626 -1.097907 -1.793016
H -2.668675 -1.106253 -1.288671
C -1.044131 -2.450784 -1.523167
H -0.037822 -2.466229 -1.967300
H -0.911612 -2.579234 -0.443388
C -1.880048 -3.596463 -2.075399
H -2.831496 -3.633931 -1.524274
H -1.373754 -4.554236 -1.893687
C -2.160760 -3.411897 -3.558851
H -2.793496 -4.225788 -3.937051
H -1.213749 -3.466596 -4.118951
C -2.816970 -2.064360 -3.818648
H -3.005897 -1.925651 -4.891713
H -3.798737 -2.043063 -3.321216
C -1.972772 -0.910016 -3.286108
H -2.506356 0.030097 -3.466890
H -1.036811 -0.852253 -3.857704
C -2.998728 -0.983870 1.146245
C -4.288221 -0.662834 0.687323
C -2.782443 -2.330136 1.471748
C -5.288839 -1.621103 0.537573
H -4.525839 0.371923 0.427179
C -3.775648 -3.300200 1.333500
H -1.805616 -2.648925 1.835593
C -5.034790 -2.951775 0.857084
H -6.272478 -1.327343 0.170660
H -3.560339 -4.336706 1.593958
H -5.811063 -3.706470 0.741331
C -2.842915 1.427111 2.933672
H -0.423220 1.683439 1.336970
H -3.730230 0.797570 2.859505
C -1.731633 0.898152 3.526654
H -0.891652 1.529473 3.809435

C -3.020902 2.873538 2.609115
H -3.498885 3.005273 1.631123
H -3.681076 3.343348 3.352886
H -2.062188 3.402929 2.599255
H -1.759464 -0.113126 3.928983

xiii→*xiv*^a (CW)

E = -2418.55671471

Pd -1.524886 0.504259 1.282115
P 2.248534 -0.061018 -0.099654
P -0.759280 0.245202 -0.881062
C 0.956899 0.036104 -1.223712
C 1.340016 0.031325 -2.694262
H 0.975298 0.924610 -3.227783
H 0.951144 -0.843651 -3.238164
H 2.426417 0.024221 -2.846634
C 3.521501 -1.248048 -0.748997
H 3.977991 -0.697648 -1.585926
C 4.650164 -1.590947 0.222983
H 4.240812 -2.190798 1.047711
H 5.081190 -0.687327 0.671942
C 5.731724 -2.405062 -0.477266
H 6.188422 -1.792331 -1.269627
H 6.534784 -2.648833 0.230261
C 5.153277 -3.674223 -1.087233
H 4.795104 -4.328731 -0.277746
H 5.933511 -4.235550 -1.617195
C 3.993940 -3.358573 -2.021939
H 3.554701 -4.284171 -2.415492
H 4.371980 -2.800190 -2.892434
C 2.919189 -2.527349 -1.331879
H 2.114727 -2.283794 -2.030688
H 2.457109 -3.115926 -0.528143
C 1.740012 -0.520777 1.602276
H 0.897890 0.176321 1.767380
C 2.770353 -0.273127 2.709741
H 3.201154 0.730779 2.647809

H 3.605871 -0.977501 2.616736
C 2.119395 -0.470803 4.074077
H 2.853701 -0.283422 4.868260
H 1.321281 0.276430 4.199702
C 1.530912 -1.867445 4.207257
H 2.348472 -2.604701 4.178940
H 1.039597 -1.986513 5.181608
C 0.551506 -2.157053 3.080376
H -0.317552 -1.489741 3.170086
H 0.166663 -3.182108 3.156367
C 1.180709 -1.938419 1.710843
H 1.991684 -2.667620 1.565079
H 0.444310 -2.109842 0.917681
C 3.218293 1.516393 0.107038
H 4.116966 1.283425 0.700023
C 3.651167 2.064865 -1.255241
H 4.287852 1.346310 -1.787417
H 2.750814 2.204013 -1.870978
C 4.374074 3.399684 -1.130049
H 4.658331 3.761748 -2.126626
H 5.311317 3.256521 -0.570513
C 3.509956 4.424289 -0.411781
H 4.041765 5.379621 -0.315014
H 2.610847 4.623200 -1.016002
C 3.086206 3.902551 0.952167
H 2.429369 4.624322 1.454896
H 3.976650 3.794200 1.591146
C 2.375185 2.560842 0.839340
H 1.437774 2.681733 0.285449
H 2.077907 2.210585 1.833327
C -1.339253 1.770264 -1.785528
H -1.210501 1.556397 -2.857298
C -2.821453 2.020927 -1.514977
H -2.947407 2.171446 -0.430407
H -3.420142 1.135553 -1.765382
C -3.332854 3.244733 -2.263763
H -3.284916 3.053742 -3.347138

H -4.390865 3.417672 -2.025896
C -2.501943 4.477409 -1.935097
H -2.627899 4.720889 -0.868252
H -2.862743 5.348288 -2.497987
C -1.026192 4.230675 -2.215612
H -0.885790 4.078423 -3.297116
H -0.430065 5.113433 -1.946667
C -0.515986 3.008138 -1.463837
H 0.538874 2.821846 -1.703466
H -0.567175 3.190457 -0.379812
C -1.700682 -1.092032 -1.800602
H -2.678360 -1.080255 -1.299502
C -1.075749 -2.452344 -1.513895
H -0.070678 -2.491682 -1.959458
H -0.943702 -2.569038 -0.432507
C -1.934595 -3.587938 -2.051372
H -2.886595 -3.598747 -1.499767
H -1.448393 -4.553689 -1.857567
C -2.210539 -3.416151 -3.537470
H -2.859634 -4.221538 -3.906024
H -1.264263 -3.497924 -4.095510
C -2.838450 -2.058818 -3.816742
H -3.021385 -1.930638 -4.892153
H -3.821137 -2.011354 -3.322958
C -1.972933 -0.914745 -3.296076
H -2.487416 0.033855 -3.488575
H -1.034623 -0.881886 -3.865666
C -3.002433 -0.977816 1.141330
C -4.291704 -0.654880 0.684797
C -2.799275 -2.317359 1.503304
C -5.306150 -1.604624 0.574847
H -4.518898 0.372950 0.390855
C -3.805003 -3.278582 1.403745
H -1.822584 -2.636716 1.867441
C -5.065384 -2.927889 0.931397
H -6.289762 -1.309495 0.208965
H -3.599610 -4.309786 1.691781

H -5.852289 -3.675652 0.846522
C -2.800296 1.631336 2.801272
H -0.413491 1.678276 1.343157
H -3.781092 1.247053 2.513269
C -1.970336 0.788609 3.485783
H -1.060477 1.163778 3.952741
C -2.590084 3.101826 2.647303
H -2.761838 3.421808 1.612413
H -3.306965 3.646451 3.278995
H -1.572579 3.391765 2.927970
H -2.304629 -0.211772 3.755152

TS_{XIII→XIV}^a (CW)

E = -2418.55450232
Pd -1.484246 0.620673 1.262659
P 2.211860 -0.140238 -0.144213
P -0.797012 0.191668 -0.892708
C 0.907226 -0.077401 -1.254580
C 1.267712 -0.165793 -2.727668
H 0.928471 0.714124 -3.299099
H 0.839592 -1.050557 -3.224639
H 2.351194 -0.221726 -2.892358
C 3.448477 -1.396724 -0.728205
H 3.917891 -0.914760 -1.599496
C 4.566996 -1.706848 0.266596
H 4.138912 -2.226925 1.134604
H 5.030335 -0.787526 0.646287
C 5.618183 -2.609195 -0.368489
H 6.096897 -2.074275 -1.203077
H 6.411769 -2.828651 0.357425
C 4.993515 -3.897942 -0.884361
H 4.608601 -4.475956 -0.030135
H 5.753073 -4.526457 -1.366775
C 3.850087 -3.608733 -1.846601
H 3.378283 -4.543549 -2.175315
H 4.252510 -3.129385 -2.752552
C 2.803575 -2.690996 -1.226299

H 2.015195 -2.466633 -1.949754
H 2.311290 -3.203496 -0.388991
C 1.705383 -0.485580 1.583770
H 0.872973 0.233293 1.699709
C 2.727556 -0.176286 2.681886
H 3.193430 0.804064 2.544452
H 3.540129 -0.913690 2.667157
C 2.037888 -0.233846 4.040313
H 2.754642 0.006370 4.836301
H 1.258617 0.543857 4.072381
C 1.409941 -1.599205 4.282098
H 2.212057 -2.350510 4.351981
H 0.886487 -1.616010 5.246951
C 0.458599 -1.981425 3.157818
H -0.413098 -1.311254 3.163498
H 0.069716 -2.995991 3.312638
C 1.121736 -1.882313 1.790255
H 1.924206 -2.631845 1.717893
H 0.397936 -2.103414 0.998101
C 3.225300 1.418877 -0.033236
H 4.113595 1.194880 0.578455
C 3.684195 1.874736 -1.420599
H 4.290529 1.102853 -1.911734
H 2.792588 2.021058 -2.047782
C 4.467574 3.179883 -1.356267
H 4.772768 3.479880 -2.367156
H 5.394862 3.018535 -0.785228
C 3.653306 4.280153 -0.693049
H 4.236068 5.208414 -0.632908
H 2.773036 4.501793 -1.316257
C 3.188309 3.846085 0.688195
H 2.560486 4.621947 1.145486
H 4.064123 3.726921 1.345176
C 2.416568 2.534820 0.629132
H 1.497521 2.669370 0.048202
H 2.084379 2.249707 1.633241
C -1.354322 1.664859 -1.890165

H -1.278943 1.360672 -2.944944
C -2.812648 1.998603 -1.582574
H -2.879113 2.270053 -0.516435
H -3.452675 1.114992 -1.706299
C -3.313042 3.155863 -2.436618
H -3.314185 2.851893 -3.495031
H -4.354209 3.392948 -2.180609
C -2.428563 4.383610 -2.267252
H -2.511081 4.743217 -1.229651
H -2.777403 5.203051 -2.909418
C -0.971321 4.055434 -2.563592
H -0.870707 3.792044 -3.628009
H -0.337718 4.938159 -2.401565
C -0.476752 2.893585 -1.710864
H 0.562658 2.646033 -1.962089
H -0.486766 3.181032 -0.648994
C -1.790685 -1.180885 -1.704608
H -2.746915 -1.137556 -1.164434
C -1.160123 -2.531625 -1.384989
H -0.169817 -2.591226 -1.859520
H -0.992602 -2.606254 -0.305200
C -2.033242 -3.687982 -1.850288
H -2.968383 -3.678507 -1.270859
H -1.538384 -4.644454 -1.633526
C -2.355042 -3.575237 -3.332532
H -3.012048 -4.395991 -3.649504
H -1.426118 -3.675497 -3.916095
C -2.996793 -2.231375 -3.641941
H -3.216141 -2.144074 -4.714606
H -3.962492 -2.167452 -3.117518
C -2.119352 -1.065632 -3.194996
H -2.646861 -0.128062 -3.404764
H -1.201510 -1.049477 -3.798494
C -3.008309 -0.820203 1.255319
C -4.293766 -0.383677 0.893187
C -2.886287 -2.180547 1.570798
C -5.383728 -1.250112 0.821331

H -4.457950 0.668255 0.646082
C -3.967839 -3.058548 1.505499
H -1.919104 -2.583549 1.872192
C -5.223699 -2.598981 1.121910
H -6.362432 -0.869359 0.528757
H -3.826477 -4.110936 1.752644
H -6.069155 -3.282698 1.064895
C -2.264560 2.140575 2.782900
H -0.350789 1.746870 1.101526
H -3.227387 2.330175 2.298989
C -2.113674 0.943975 3.429424
H -1.242576 0.775313 4.064014
C -1.392523 3.339483 2.993109
H -1.257090 3.910177 2.069204
H -1.863055 4.005483 3.731925
H -0.403721 3.051451 3.366447
H -2.932448 0.235713 3.513110

TS_{XIII→XIV}^a (CCW)

E = -2418.55410580
Pd -1.481796 0.448714 1.341539
P 2.229319 -0.123536 -0.098739
P -0.729812 0.533817 -0.835635
C 0.977103 0.277085 -1.197981
C 1.392069 0.533027 -2.636807
H 1.126093 1.546157 -2.981153
H 0.934949 -0.172915 -3.347880
H 2.476320 0.449165 -2.783413
C 3.435071 -1.259219 -0.941142
H 3.956979 -0.597870 -1.649563
C 4.503673 -1.864836 -0.031023
H 4.025027 -2.564274 0.668297
H 4.992597 -1.093952 0.577995
C 5.537600 -2.630261 -0.849262
H 6.069606 -1.926574 -1.507789
H 6.293566 -3.066159 -0.183373
C 4.878403 -3.712828 -1.692104

H 4.436860 -4.468010 -1.023717
H 5.628317 -4.236456 -2.298829
C 3.785709 -3.131130 -2.577493
H 3.287621 -3.926373 -3.146709
H 4.241622 -2.457498 -3.319678
C 2.756380 -2.351146 -1.768829
H 2.004709 -1.911295 -2.429117
H 2.213805 -3.035948 -1.103802
C 1.637253 -0.860129 1.475508
H 0.823448 -0.160261 1.743738
C 2.633803 -0.878151 2.639187
H 3.114246 0.094839 2.779165
H 3.437884 -1.598001 2.441253
C 1.917733 -1.284639 3.922263
H 2.626655 -1.288650 4.760330
H 1.157746 -0.524318 4.159434
C 1.251549 -2.645345 3.779804
H 2.031675 -3.411599 3.650006
H 0.711612 -2.906772 4.699235
C 0.310930 -2.678185 2.584749
H -0.541348 -2.006000 2.760104
H -0.111062 -3.683134 2.455844
C 1.005402 -2.240767 1.302204
H 1.785514 -2.972827 1.045884
H 0.292591 -2.220752 0.470521
C 3.302667 1.305459 0.425898
H 4.147374 0.893813 1.000754
C 3.851994 2.057171 -0.789127
H 4.455593 1.397019 -1.425000
H 3.001253 2.392726 -1.400270
C 4.680324 3.268283 -0.378059
H 5.048050 3.787013 -1.272897
H 5.570426 2.927934 0.173195
C 3.877399 4.215986 0.499629
H 4.492805 5.071290 0.807188
H 3.039715 4.626043 -0.085539
C 3.325260 3.485611 1.713801

H 2.706557 4.159395 2.320662
H 4.160583 3.166164 2.356507
C 2.505497 2.269399 1.304758
H 1.625939 2.588814 0.734714
H 2.107973 1.767182 2.193391
C -1.182001 2.228016 -1.466746
H -1.079025 2.175962 -2.560666
C -2.635447 2.554292 -1.130766
H -2.732372 2.574132 -0.033211
H -3.305784 1.756576 -1.477775
C -3.051399 3.900723 -1.708646
H -3.027452 3.845607 -2.808290
H -4.089594 4.127366 -1.431950
C -2.120005 5.011102 -1.240923
H -2.226602 5.132037 -0.151794
H -2.407472 5.970683 -1.690572
C -0.668037 4.683669 -1.562935
H -0.536802 4.662133 -2.656058
H -0.003659 5.473395 -1.186406
C -0.259756 3.335439 -0.982237
H 0.777849 3.097881 -1.250061
H -0.303173 3.376221 0.115825
C -1.734813 -0.551733 -1.997327
H -2.706744 -0.615254 -1.488861
C -1.151571 -1.960222 -2.022829
H -0.153962 -1.930562 -2.483903
H -1.009810 -2.313315 -0.996099
C -2.046597 -2.928800 -2.781787
H -2.996518 -3.031466 -2.236715
H -1.587402 -3.926505 -2.805298
C -2.322651 -2.432868 -4.192845
H -2.996399 -3.121029 -4.720405
H -1.381309 -2.417611 -4.764803
C -2.912170 -1.031008 -4.163521
H -3.096896 -0.666603 -5.183063
H -3.890400 -1.065553 -3.659962
C -2.012969 -0.049833 -3.416749

H -2.505002 0.929119 -3.394132
H -1.076623 0.083894 -3.976094
C -2.996339 -0.935588 0.922517
C -4.251810 -0.396851 0.592979
C -2.900791 -2.332790 0.892151
C -5.339308 -1.195306 0.243924
H -4.393047 0.686822 0.605630
C -3.981008 -3.145734 0.547288
H -1.956625 -2.818122 1.138510
C -5.207687 -2.580707 0.215525
H -6.294598 -0.733560 -0.006481
H -3.860025 -4.229151 0.533127
H -6.051842 -3.211530 -0.058250
C -2.093430 0.224706 3.589704
H -0.348720 1.584451 1.433494
H -1.161499 -0.193325 3.979716
C -2.071146 1.545798 3.228845
H -3.000611 2.060386 2.977516
C -3.322459 -0.572554 3.878429
H -3.215302 -1.616444 3.566976
H -3.504194 -0.559302 4.963387
H -4.201609 -0.163658 3.371957
H -1.206573 2.172507 3.419875

xiii→*xiv*^a (CCW)

E = -2418.55549924
Pd -1.518286 0.428297 1.315342
P 2.261088 -0.121757 -0.087954
P -0.696421 0.532195 -0.840212
C 1.014001 0.285301 -1.190636
C 1.442638 0.559244 -2.622189
H 1.174391 1.574727 -2.957983
H 0.998336 -0.142113 -3.345640
H 2.529109 0.483511 -2.756806
C 3.469640 -1.256135 -0.927258
H 4.005446 -0.594370 -1.625057
C 4.520122 -1.877373 -0.006712

H 4.024374 -2.576141 0.681292
H 5.007792 -1.115163 0.614146
C 5.556913 -2.649347 -0.814902
H 6.103630 -1.948664 -1.464492
H 6.300442 -3.094933 -0.141461
C 4.897046 -3.722629 -1.669054
H 4.440186 -4.475389 -1.008267
H 5.648703 -4.251884 -2.268704
C 3.820725 -3.127319 -2.565354
H 3.321040 -3.915894 -3.142411
H 4.292308 -2.456734 -3.300453
C 2.790142 -2.338059 -1.767307
H 2.051817 -1.888289 -2.436000
H 2.231098 -3.017877 -1.110363
C 1.655190 -0.861222 1.476075
H 0.853133 -0.147754 1.742628
C 2.641659 -0.903128 2.647837
H 3.151224 0.055059 2.787550
H 3.424426 -1.648689 2.460356
C 1.901298 -1.283059 3.925450
H 2.600674 -1.304239 4.771261
H 1.159368 -0.501441 4.150397
C 1.197500 -2.624197 3.779365
H 1.955069 -3.414749 3.662224
H 0.637199 -2.865403 4.692129
C 0.272443 -2.631186 2.572218
H -0.548378 -1.916904 2.731605
H -0.192313 -3.617545 2.446981
C 0.997074 -2.227846 1.296030
H 1.763566 -2.980139 1.056732
H 0.298073 -2.196618 0.452990
C 3.329785 1.304466 0.450998
H 4.180028 0.888569 1.014759
C 3.868429 2.073414 -0.758126
H 4.468938 1.422743 -1.406832
H 3.012649 2.413984 -1.359007
C 4.693645 3.283249 -0.338126

H 5.055363 3.812898 -1.229015
H 5.587376 2.941854 0.206591
C 3.887926 4.217082 0.551683
H 4.498186 5.074169 0.864535
H 3.044541 4.625975 -0.026151
C 3.347064 3.471323 1.761635
H 2.727131 4.134852 2.378397
H 4.188595 3.152420 2.396535
C 2.533480 2.252174 1.348512
H 1.642439 2.568096 0.794586
H 2.151942 1.738098 2.237047
C -1.148067 2.237048 -1.443760
H -1.024264 2.211036 -2.536660
C -2.609240 2.549736 -1.128560
H -2.729622 2.537181 -0.033095
H -3.270183 1.760886 -1.511997
C -3.017376 3.911784 -1.674348
H -2.969575 3.890632 -2.774392
H -4.062092 4.126762 -1.413290
C -2.099986 5.009751 -1.152806
H -2.228305 5.095034 -0.062616
H -2.382404 5.982396 -1.576865
C -0.641003 4.697296 -1.457215
H -0.489724 4.710947 -2.547909
H 0.013500 5.476757 -1.043744
C -0.237731 3.332828 -0.912592
H 0.803664 3.106033 -1.174971
H -0.295242 3.336477 0.185702
C -1.690821 -0.533228 -2.027436
H -2.673619 -0.581588 -1.538392
C -1.130064 -1.950633 -2.041928
H -0.120888 -1.936385 -2.478670
H -1.018600 -2.306912 -1.012276
C -2.023681 -2.903731 -2.822009
H -2.986137 -2.993456 -2.296633
H -1.579559 -3.908337 -2.839059
C -2.263670 -2.400289 -4.237124

H -2.936615 -3.077277 -4.779922
H -1.310654 -2.398061 -4.789614
C -2.832430 -0.989577 -4.216993
H -2.991044 -0.621063 -5.239438
H -3.821071 -1.009833 -3.733408
C -1.932666 -0.024078 -3.450760
H -2.408914 0.962909 -3.434824
H -0.984092 0.095316 -3.991953
C -3.074130 -0.887684 0.848368
C -4.333361 -0.349125 0.536845
C -2.984417 -2.286576 0.835908
C -5.430814 -1.149188 0.221351
H -4.471241 0.735164 0.532708
C -4.073211 -3.100743 0.525960
H -2.036678 -2.771002 1.074276
C -5.304648 -2.534919 0.211337
H -6.389369 -0.688077 -0.017548
H -3.957379 -4.184813 0.526993
H -6.156620 -3.166303 -0.035704
C -2.128488 0.297625 3.583335
H -0.346829 1.512886 1.588424
H -1.118305 0.305575 4.001208
C -2.590616 1.453251 3.022170
H -3.635959 1.526930 2.717934
C -2.989049 -0.867911 3.944107
H -2.535443 -1.822267 3.655394
H -3.129537 -0.885273 5.034692
H -3.968529 -0.807442 3.460640
H -2.012930 2.372587 3.053765

TS_{XIII→XIV}^a (CCW)

E = -2418.55306247

Pd -1.601781 0.583983 1.318541
P 2.244262 -0.095499 -0.126766
P -0.770921 0.377572 -0.833731
C 0.938175 0.141798 -1.208317
C 1.306060 0.259448 -2.678289

H 0.976704 1.213720 -3.120901
H 0.875099 -0.543733 -3.295568
H 2.389505 0.220186 -2.845069
C 3.461351 -1.264433 -0.907651
H 3.921046 -0.654029 -1.700125
C 4.598302 -1.745246 -0.006496
H 4.185294 -2.412472 0.762893
H 5.075054 -0.908968 0.520173
C 5.630026 -2.522992 -0.816157
H 6.088837 -1.850111 -1.556816
H 6.441368 -2.863800 -0.160006
C 4.989061 -3.704129 -1.531041
H 4.629113 -4.423774 -0.779723
H 5.733423 -4.235753 -2.137664
C 3.817370 -3.256377 -2.393278
H 3.331104 -4.122164 -2.860734
H 4.192421 -2.629348 -3.217071
C 2.795614 -2.458054 -1.592762
H 1.983208 -2.120011 -2.240522
H 2.332816 -3.104947 -0.835442
C 1.749274 -0.681308 1.537975
H 0.954077 0.040500 1.796862
C 2.831086 -0.607795 2.621365
H 3.323949 0.369437 2.639191
H 3.614421 -1.348580 2.423152
C 2.222004 -0.899517 3.986678
H 3.001280 -0.858885 4.758765
H 1.504123 -0.102832 4.228728
C 1.520137 -2.250298 4.010319
H 2.274240 -3.045110 3.900598
H 1.038742 -2.413589 4.983589
C 0.499376 -2.370846 2.887852
H -0.321476 -1.660426 3.056223
H 0.048505 -3.371548 2.884097
C 1.110895 -2.068211 1.528059
H 1.874802 -2.824393 1.292226
H 0.348329 -2.121691 0.743688

C 3.271569 1.423324 0.202264
H 4.175281 1.108468 0.748026
C 3.693530 2.085589 -1.111957
H 4.299781 1.402655 -1.721104
H 2.786970 2.305594 -1.693638
C 4.455160 3.383788 -0.878785
H 4.730719 3.829721 -1.843263
H 5.398261 3.165655 -0.354373
C 3.632134 4.358502 -0.051045
H 4.190420 5.287757 0.120989
H 2.726794 4.633936 -0.614430
C 3.223469 3.724252 1.269084
H 2.596289 4.412296 1.850715
H 4.124269 3.536904 1.874334
C 2.476173 2.415137 1.052787
H 1.525307 2.608513 0.542190
H 2.202069 1.979587 2.019925
C -1.273881 1.981158 -1.645833
H -1.136252 1.822630 -2.726063
C -2.748082 2.286774 -1.392048
H -2.892048 2.405483 -0.306015
H -3.377724 1.438273 -1.689079
C -3.185189 3.557918 -2.108135
H -3.117162 3.402303 -3.196228
H -4.240185 3.771191 -1.890564
C -2.309137 4.739277 -1.714356
H -2.456740 4.953557 -0.644474
H -2.613083 5.643545 -2.257992
C -0.837209 4.436609 -1.961310
H -0.670438 4.320724 -3.043662
H -0.211650 5.280861 -1.640198
C -0.401850 3.162468 -1.248429
H 0.648577 2.936400 -1.472654
H -0.470297 3.300920 -0.159262
C -1.749648 -0.855018 -1.860629
H -2.728423 -0.853394 -1.363784
C -1.168003 -2.252768 -1.684615

H -0.161759 -2.285252 -2.127547
H -1.046828 -2.462785 -0.616191
C -2.054789 -3.316317 -2.316115
H -3.008953 -3.347575 -1.769543
H -1.594544 -4.307252 -2.202202
C -2.322115 -3.014919 -3.782759
H -2.991134 -3.769760 -4.216894
H -1.377208 -3.074220 -4.345999
C -2.913871 -1.623134 -3.946387
H -3.095649 -1.401323 -5.006659
H -3.893477 -1.590043 -3.445234
C -2.015016 -0.550441 -3.337680
H -2.501440 0.424878 -3.453263
H -1.077315 -0.500281 -3.906697
C -3.126759 -0.826876 1.019144
C -4.391036 -0.497914 0.503040
C -2.917470 -2.179584 1.320834
C -5.372022 -1.458725 0.267713
H -4.624243 0.543151 0.269630
C -3.894502 -3.151279 1.100770
H -1.959548 -2.500735 1.729961
C -5.126608 -2.797046 0.562571
H -6.336245 -1.160208 -0.144022
H -3.686343 -4.193137 1.345044
H -5.889613 -3.552459 0.381855
C -1.904267 1.372532 3.491982
H -0.375072 1.624522 1.444593
H -1.275477 2.260910 3.500399
C -3.080186 1.399117 2.793532
H -3.841016 0.638778 2.952117
C -1.600983 0.322444 4.512937
H -0.534377 0.083160 4.549250
H -1.881007 0.684314 5.513059
H -2.159475 -0.599765 4.314005
H -3.383021 2.288045 2.239979

TS_{XIII→XIV}^c (CW)

E = -2418.55220120

Pd -1.521599 0.454813 1.305727

P 2.253836 -0.116375 -0.067579

P -0.714593 0.502242 -0.849991

C 0.997916 0.236612 -1.179613

C 1.418116 0.441024 -2.625862

H 1.129396 1.432329 -3.012376

H 0.985157 -0.305528 -3.309518

H 2.504865 0.380659 -2.761970

C 3.470901 -1.255439 -0.889601

H 3.970006 -0.603474 -1.622642

C 4.566503 -1.818668 0.015350

H 4.115123 -2.516824 0.733894

H 5.046872 -1.025826 0.602557

C 5.604994 -2.573952 -0.807165

H 6.108209 -1.869044 -1.486697

H 6.382652 -2.979165 -0.146877

C 4.959629 -3.687628 -1.619798

H 4.550997 -4.442814 -0.930824

H 5.712353 -4.201343 -2.231518

C 3.835119 -3.151008 -2.493934

H 3.346724 -3.969705 -3.037730

H 4.258224 -2.480147 -3.257748

C 2.802921 -2.382549 -1.678196

H 2.022492 -1.979474 -2.328307

H 2.297623 -3.068132 -0.985415

C 1.685065 -0.820726 1.529698

H 0.866706 -0.127111 1.794141

C 2.706362 -0.801557 2.672737

H 3.167508 0.183835 2.787845

H 3.521944 -1.505188 2.465458

C 2.034140 -1.206822 3.979312

H 2.766383 -1.185731 4.796864

H 1.262823 -0.462710 4.228726

C 1.394237 -2.582529 3.868069

H 2.184341 -3.334610 3.717354

H 0.888259 -2.848418 4.805341
C 0.417476 -2.635697 2.703679
H -0.424645 -1.958146 2.900713
H -0.009349 -3.641550 2.600904
C 1.067744 -2.212006 1.394038
H 1.849321 -2.938741 1.127684
H 0.330170 -2.214412 0.583426
C 3.304804 1.345750 0.413555
H 4.163776 0.968318 0.990629
C 3.824165 2.074920 -0.828088
H 4.450129 1.414191 -1.441524
H 2.961077 2.357312 -1.448206
C 4.605291 3.332036 -0.466604
H 4.948847 3.830231 -1.382470
H 5.510015 3.050538 0.093968
C 3.764920 4.277862 0.377193
H 4.339730 5.174958 0.641003
H 2.901710 4.618929 -0.215820
C 3.261342 3.572904 1.626556
H 2.621968 4.242114 2.216834
H 4.118411 3.314362 2.267997
C 2.488019 2.309593 1.274857
H 1.585343 2.572853 0.712863
H 2.128408 1.823254 2.188227
C -1.157374 2.179229 -1.533446
H -1.021042 2.103315 -2.622650
C -2.622608 2.503036 -1.252797
H -2.765047 2.517748 -0.159547
H -3.274884 1.706093 -1.632881
C -3.023688 3.848142 -1.844929
H -2.967539 3.789939 -2.943157
H -4.070347 4.071870 -1.599501
C -2.109800 4.963393 -1.355758
H -2.243337 5.086408 -0.269832
H -2.390243 5.920546 -1.814852
C -0.649902 4.639401 -1.642173
H -0.493744 4.610390 -2.731862

H 0.003762 5.433643 -1.256156
C -0.251960 3.297468 -1.041327
H 0.791725 3.060145 -1.284497
H -0.319035 3.347888 0.055257
C -1.698580 -0.615293 -1.988926
H -2.689768 -0.611563 -1.517743
C -1.174348 -2.042699 -1.888695
H -0.163125 -2.090148 -2.319875
H -1.080617 -2.319334 -0.832484
C -2.096407 -3.024990 -2.596330
H -3.061210 -3.042259 -2.067461
H -1.685902 -4.041913 -2.533496
C -2.318219 -2.625451 -4.047309
H -3.012058 -3.320589 -4.538453
H -1.364898 -2.697357 -4.594695
C -2.841196 -1.199779 -4.141604
H -2.984565 -0.908523 -5.190927
H -3.831545 -1.150941 -3.663496
C -1.913283 -0.205865 -3.447714
H -2.357195 0.794633 -3.510969
H -0.960142 -0.159421 -3.991150
C -3.046967 -0.932035 0.907111
C -4.269247 -0.510555 0.354581
C -2.931687 -2.308649 1.146194
C -5.303083 -1.395229 0.055240
H -4.426741 0.550037 0.145139
C -3.960011 -3.207778 0.859695
H -2.008419 -2.710449 1.563141
C -5.153655 -2.755932 0.308307
H -6.231570 -1.020178 -0.375928
H -3.822547 -4.269951 1.063438
H -5.957247 -3.453743 0.078264
C -3.988092 0.346229 3.518265
H -4.732099 0.456755 2.725075
H -3.799597 -0.723409 3.654200
H -4.422953 0.749272 4.444907
C -1.485083 0.682497 3.593503

H -1.355629 -0.306589 4.034342
H -0.351299 1.554531 1.441201
C -2.731744 1.093201 3.219902
H -2.849406 2.137381 2.916087
H -0.656763 1.377831 3.686057

TS_{XIII→XIV}^c (CCW)

E = -2418.55282867

Pd -1.535923 0.575173 1.329351
P 2.169819 -0.127927 -0.183902
P -0.835887 0.401092 -0.856213
C 0.857367 0.121985 -1.257366
C 1.194628 0.207867 -2.736964
H 0.873040 1.161880 -3.185820
H 0.730394 -0.595117 -3.330496
H 2.272057 0.143136 -2.931036
C 3.351747 -1.321240 -0.985373
H 3.783799 -0.717917 -1.798242
C 4.524856 -1.799624 -0.130332
H 4.146626 -2.462158 0.660981
H 5.025111 -0.960229 0.368849
C 5.521925 -2.580072 -0.980338
H 5.953126 -1.907050 -1.737302
H 6.357412 -2.923008 -0.356402
C 4.852359 -3.758782 -1.672401
H 4.519605 -4.479465 -0.909623
H 5.572752 -4.290263 -2.307408
C 3.649682 -3.307649 -2.488935
H 3.146513 -4.171569 -2.941671
H 3.993395 -2.676616 -3.323314
C 2.659072 -2.514556 -1.645506
H 1.819440 -2.175905 -2.257262
H 2.229770 -3.167272 -0.874078
C 1.703936 -0.699516 1.502695
H 0.905706 0.013371 1.778100
C 2.825925 -0.605038 2.545915
H 3.231836 0.410080 2.601350

H 3.659515 -1.256006 2.259391
C 2.341209 -1.029701 3.928608
H 3.180506 -0.992629 4.635172
H 1.599141 -0.306038 4.292304
C 1.711551 -2.412848 3.910729
H 2.478133 -3.160706 3.654557
H 1.340012 -2.677150 4.909092
C 0.590200 -2.472404 2.886933
H -0.208280 -1.771847 3.174119
H 0.135701 -3.470867 2.863558
C 1.087321 -2.096766 1.498918
H 1.842884 -2.830870 1.182833
H 0.271316 -2.137037 0.769541
C 3.227307 1.374414 0.120893
H 4.116421 1.053142 0.686416
C 3.679229 1.999075 -1.201601
H 4.285357 1.293621 -1.784432
H 2.784913 2.219182 -1.802483
C 4.459486 3.289577 -0.986889
H 4.753901 3.709864 -1.957294
H 5.392652 3.066215 -0.447132
C 3.645399 4.296296 -0.189456
H 4.219038 5.218457 -0.030260
H 2.751853 4.576363 -0.769057
C 3.208803 3.697528 1.138495
H 2.587370 4.409085 1.697573
H 4.098025 3.505420 1.759211
C 2.438668 2.399836 0.936662
H 1.502651 2.601246 0.403278
H 2.133918 1.990579 1.906642
C -1.345462 1.999958 -1.667966
H -1.272656 1.822035 -2.751496
C -2.798585 2.327192 -1.329237
H -2.872844 2.454428 -0.236802
H -3.455811 1.484525 -1.581250
C -3.264045 3.597008 -2.029636
H -3.269598 3.428342 -3.117900

H -4.299563 3.827521 -1.746161
C -2.348489 4.770568 -1.709116
H -2.423603 5.000479 -0.635014
H -2.675040 5.671847 -2.244550
C -0.899652 4.443921 -2.045816
H -0.803981 4.309670 -3.134650
H -0.244055 5.283925 -1.778246
C -0.437484 3.175287 -1.339941
H 0.596942 2.933775 -1.617759
H -0.445395 3.331778 -0.251597
C -1.876747 -0.826250 -1.821055
H -2.834342 -0.792917 -1.284218
C -1.320118 -2.232420 -1.636014
H -0.339553 -2.302067 -2.130054
H -1.150469 -2.416752 -0.569749
C -2.267381 -3.284803 -2.192974
H -3.195281 -3.268057 -1.601617
H -1.834768 -4.286886 -2.069401
C -2.589402 -3.016921 -3.655401
H -3.300200 -3.761253 -4.038227
H -1.671796 -3.124221 -4.255460
C -3.143438 -1.611793 -3.838392
H -3.356787 -1.414545 -4.897641
H -4.103243 -1.534454 -3.304991
C -2.193515 -0.548948 -3.292442
H -2.659609 0.436019 -3.412260
H -1.276852 -0.536247 -3.897163
C -3.011493 -0.919236 1.195214
C -4.302209 -0.567661 0.760786
C -2.826249 -2.270359 1.519442
C -5.331872 -1.498300 0.637144
H -4.516476 0.471910 0.499233
C -3.848946 -3.213523 1.410324
H -1.851233 -2.616105 1.860433
C -5.108693 -2.833496 0.961251
H -6.314195 -1.179285 0.288157
H -3.655899 -4.254099 1.672192

H -5.908195 -3.566873 0.868516
C -0.537692 1.763277 4.128057
H 0.430390 1.334697 3.850469
H -0.575588 2.782988 3.731890
H -0.575194 1.806202 5.226412
C -2.780143 1.473540 3.002657
H -2.830280 2.542702 2.794091
H -0.441642 1.759202 1.332765
C -1.680197 0.946590 3.613581
H -1.735522 -0.093127 3.946939
H -3.692903 0.895410 2.886114

XIV^a

E = -2418.56089341
Pd -1.491626 0.607974 1.305445
P 2.205399 -0.105120 -0.151958
P -0.821042 0.195587 -0.863475
C 0.884798 -0.044823 -1.243536
C 1.228572 -0.114494 -2.721803
H 0.874132 0.768418 -3.279267
H 0.801206 -0.997410 -3.222508
H 2.310096 -0.159140 -2.901606
C 3.448113 -1.340263 -0.769905
H 3.894720 -0.840688 -1.643230
C 4.590430 -1.649087 0.197718
H 4.187600 -2.190344 1.064954
H 5.047745 -0.729254 0.583379
C 5.641941 -2.524937 -0.472967
H 6.094686 -1.969922 -1.308921
H 6.453870 -2.742717 0.232888
C 5.026503 -3.815462 -0.995377
H 4.668637 -4.412127 -0.142218
H 5.785232 -4.424724 -1.503109
C 3.858744 -3.529665 -1.928944
H 3.393783 -4.466571 -2.261396
H 4.234684 -3.031345 -2.836034
C 2.812084 -2.636599 -1.273861

H 2.006335 -2.413356 -1.977975
H 2.343913 -3.168266 -0.434615
C 1.737591 -0.470685 1.585254
H 0.901544 0.235963 1.729945
C 2.789136 -0.166360 2.657803
H 3.225833 0.828694 2.529933
H 3.618354 -0.881480 2.593241
C 2.158450 -0.276827 4.041661
H 2.905559 -0.045584 4.811920
H 1.364856 0.480802 4.134908
C 1.564286 -1.658794 4.267965
H 2.376919 -2.401957 4.269142
H 1.089772 -1.716324 5.256060
C 0.562978 -2.006563 3.177595
H -0.300542 -1.328177 3.241149
H 0.172091 -3.022000 3.320860
C 1.167842 -1.873896 1.786139
H 1.967711 -2.619615 1.664745
H 0.412461 -2.079256 1.019495
C 3.202777 1.464703 -0.041186
H 4.102594 1.246028 0.555313
C 3.635904 1.941769 -1.429558
H 4.245321 1.183329 -1.937461
H 2.733954 2.083257 -2.042869
C 4.403302 3.256252 -1.361166
H 4.690193 3.571687 -2.372690
H 5.340645 3.100513 -0.805201
C 3.584717 4.338576 -0.674035
H 4.156739 5.273265 -0.610996
H 2.693269 4.556522 -1.282475
C 3.144301 3.883311 0.708414
H 2.513255 4.646110 1.182922
H 4.030260 3.767676 1.352184
C 2.388919 2.562703 0.644313
H 1.461767 2.692372 0.074869
H 2.074924 2.261631 1.649832
C -1.405689 1.672801 -1.840280

H -1.337012 1.386061 -2.900302
C -2.865210 1.980889 -1.511529
H -2.927013 2.219828 -0.437248
H -3.493893 1.092742 -1.657434
C -3.389950 3.156343 -2.325165
H -3.400962 2.884612 -3.392235
H -4.430464 3.372414 -2.048813
C -2.517900 4.388855 -2.129804
H -2.584740 4.710997 -1.078501
H -2.887789 5.225403 -2.737118
C -1.063416 4.086381 -2.463507
H -0.980540 3.851649 -3.536098
H -0.436079 4.971429 -2.290173
C -0.541447 2.909439 -1.649070
H 0.497211 2.680932 -1.920663
H -0.539097 3.175616 -0.581608
C -1.794842 -1.185028 -1.684575
H -2.744604 -1.173337 -1.132211
C -1.131394 -2.527994 -1.399336
H -0.151227 -2.561105 -1.896492
H -0.938654 -2.617741 -0.324783
C -1.992652 -3.692497 -1.866490
H -2.916657 -3.708026 -1.269830
H -1.477180 -4.643277 -1.673918
C -2.343889 -3.562678 -3.340671
H -2.992690 -4.389746 -3.658171
H -1.424584 -3.637949 -3.942951
C -3.014168 -2.225616 -3.617413
H -3.254531 -2.125674 -4.684478
H -3.970885 -2.186492 -3.074340
C -2.148877 -1.051883 -3.167667
H -2.695132 -0.120370 -3.354706
H -1.241308 -1.011227 -3.785512
C -2.968121 -0.878533 1.289488
C -4.264924 -0.536385 0.872530
C -2.757017 -2.224285 1.613574
C -5.279671 -1.483446 0.749180

H -4.496803 0.502018 0.626626
C -3.765148 -3.181514 1.499950
H -1.775976 -2.551068 1.956101
C -5.032363 -2.817996 1.057080
H -6.270253 -1.176373 0.413401
H -3.555226 -4.220527 1.754531
H -5.820287 -3.563304 0.961544
C -2.110026 3.369704 2.596219
H -1.425722 3.904530 1.929591
H -3.065622 3.246459 2.073695
H -2.288222 4.004885 3.476270
C -2.343545 0.948012 3.308540
H -3.423354 0.992339 3.177629
H -0.363829 1.724202 1.086497
C -1.550455 2.043885 3.026980
H -0.541074 2.067829 3.439490
H -1.974607 0.128587 3.922729

XIV^c

E = -2418.55924735
Pd -1.540033 0.685842 1.339692
P 2.175339 -0.173294 -0.189468
P -0.850496 0.314138 -0.833978
C 0.836375 -0.002865 -1.244633
C 1.146431 -0.026874 -2.732631
H 0.817447 0.891974 -3.245176
H 0.672332 -0.870281 -3.258176
H 2.220242 -0.106731 -2.940470
C 3.332804 -1.435848 -0.916443
H 3.745781 -0.905849 -1.788572
C 4.525630 -1.853521 -0.057309
H 4.164828 -2.456571 0.787403
H 5.040682 -0.983442 0.368775
C 5.495859 -2.702498 -0.871717
H 5.902342 -2.096040 -1.695641
H 6.350915 -2.995407 -0.248818
C 4.802328 -3.932749 -1.439583

H 4.495296 -4.585101 -0.607672
H 5.499918 -4.518806 -2.051614
C 3.572999 -3.547795 -2.250515
H 3.051567 -4.445103 -2.607552
H 3.889861 -2.995445 -3.148826
C 2.614045 -2.675110 -1.450003
H 1.759301 -2.382625 -2.064486
H 2.202979 -3.251452 -0.609910
C 1.745483 -0.585312 1.549506
H 1.008752 0.198773 1.797907
C 2.909001 -0.490502 2.544670
H 3.432158 0.468124 2.464482
H 3.649580 -1.267815 2.327825
C 2.414863 -0.683207 3.973266
H 3.267466 -0.650410 4.664071
H 1.765216 0.159067 4.241888
C 1.649681 -1.988557 4.134252
H 2.343890 -2.831817 3.994210
H 1.257594 -2.077796 5.155689
C 0.522745 -2.101455 3.118325
H -0.238363 -1.328045 3.307955
H 0.012954 -3.067960 3.219027
C 1.032597 -1.927515 1.694713
H 1.731314 -2.743720 1.456438
H 0.206180 -1.986878 0.978765
C 3.252148 1.341870 -0.040569
H 4.173973 1.050857 0.487283
C 3.624924 1.881083 -1.423611
H 4.193678 1.136822 -1.995925
H 2.697372 2.066893 -1.983439
C 4.416534 3.179653 -1.336405
H 4.653027 3.537175 -2.346933
H 5.379952 2.988246 -0.839232
C 3.649881 4.237298 -0.557533
H 4.229927 5.166867 -0.493260
H 2.721818 4.481149 -1.098121
C 3.298226 3.725736 0.830168

H 2.712554 4.472957 1.381360
H 4.225032 3.570704 1.404343
C 2.519952 2.418948 0.761035
H 1.548016 2.590102 0.282513
H 2.293762 2.069154 1.774712
C -1.346863 1.855972 -1.758895
H -1.279852 1.598364 -2.826534
C -2.792343 2.235965 -1.445871
H -2.862338 2.457067 -0.368511
H -3.465027 1.387025 -1.624391
C -3.234917 3.451286 -2.250373
H -3.242558 3.193063 -3.320908
H -4.266244 3.723274 -1.989364
C -2.298906 4.631292 -2.025745
H -2.372068 4.950955 -0.974666
H -2.608516 5.490725 -2.634927
C -0.855248 4.253275 -2.329210
H -0.758929 4.029609 -3.403108
H -0.185311 5.100518 -2.127661
C -0.418191 3.036998 -1.522599
H 0.611585 2.754313 -1.775876
H -0.424271 3.282870 -0.450473
C -1.899490 -0.973948 -1.710897
H -2.847027 -0.923534 -1.158849
C -1.324992 -2.365862 -1.472382
H -0.355536 -2.450251 -1.984174
H -1.126880 -2.501931 -0.403616
C -2.269924 -3.453395 -1.962647
H -3.186801 -3.421349 -1.355658
H -1.821215 -4.443309 -1.802894
C -2.624034 -3.256173 -3.428656
H -3.333209 -4.025303 -3.762348
H -1.717763 -3.379728 -4.042643
C -3.199007 -1.867198 -3.661675
H -3.439510 -1.720367 -4.723300
H -4.146460 -1.775683 -3.108643
C -2.248621 -0.771238 -3.187446

H -2.727256 0.201908 -3.345218
H -1.344812 -0.779175 -3.811488
C -3.051752 -0.769041 1.258589
C -4.330401 -0.419310 0.795549
C -2.868208 -2.110292 1.615858
C -5.353190 -1.355638 0.659600
H -4.541140 0.617263 0.523872
C -3.885364 -3.056778 1.492019
H -1.903127 -2.440138 1.998227
C -5.133571 -2.686395 1.003454
H -6.328755 -1.043094 0.287001
H -3.697467 -4.092528 1.775369
H -5.928479 -3.423195 0.900080
C -1.591456 2.015904 3.158491
H -0.371675 1.773023 1.188359
H -1.802262 2.997473 2.732470
C -2.621173 1.098143 3.215351
H -2.547632 0.218077 3.854151
C -0.386436 1.937546 4.046718
H 0.529206 2.261682 3.541132
H -0.530180 2.585282 4.923639
H -0.238222 0.916561 4.413363
H -3.621242 1.346218 2.867348

TS_{XIV→XV}^a

E = -2418.55328707
Pd -1.530198 0.720157 1.331024
P 2.152211 -0.183266 -0.210381
P -0.869990 0.221301 -0.852744
C 0.816242 -0.088007 -1.277806
C 1.123344 -0.186319 -2.762466
H 0.771803 0.696140 -3.321849
H 0.663304 -1.066377 -3.238732
H 2.197910 -0.255754 -2.972311
C 3.345813 -1.447884 -0.866428
H 3.750471 -0.950682 -1.761658
C 4.541303 -1.782903 0.024490

H 4.189167 -2.342811 0.902130
H 5.029527 -0.874983 0.400362
C 5.541635 -2.651244 -0.730357
H 5.943028 -2.081284 -1.582351
H 6.396088 -2.887160 -0.082918
C 4.886445 -3.928450 -1.236919
H 4.584268 -4.541503 -0.373924
H 5.606695 -4.529406 -1.806778
C 3.659123 -3.620499 -2.083115
H 3.166277 -4.549191 -2.397936
H 3.973857 -3.108419 -3.005704
C 2.666719 -2.732936 -1.341689
H 1.811879 -2.496571 -1.980406
H 2.260795 -3.275696 -0.477420
C 1.715618 -0.519332 1.545730
H 0.931999 0.236311 1.735904
C 2.852599 -0.305432 2.553402
H 3.309401 0.683242 2.442988
H 3.649710 -1.036005 2.376312
C 2.355614 -0.478665 3.984388
H 3.193444 -0.348932 4.681617
H 1.634598 0.317633 4.215296
C 1.686921 -1.827922 4.190133
H 2.436446 -2.625792 4.070484
H 1.303597 -1.912799 5.215035
C 0.568285 -2.034324 3.181652
H -0.227221 -1.291048 3.348148
H 0.106088 -3.020416 3.315459
C 1.071764 -1.888272 1.752500
H 1.811551 -2.676898 1.548920
H 0.252240 -2.018674 1.038586
C 3.185345 1.365803 -0.120074
H 4.101396 1.135313 0.446156
C 3.574329 1.846886 -1.519494
H 4.185585 1.096666 -2.037717
H 2.655553 1.968752 -2.111066
C 4.314133 3.178036 -1.479383

H 4.566118 3.492637 -2.500359
H 5.269333 3.049771 -0.947318
C 3.486889 4.244559 -0.778040
H 4.030884 5.197295 -0.746601
H 2.567294 4.425743 -1.356179
C 3.113385 3.792797 0.624808
H 2.481756 4.543879 1.117893
H 4.027341 3.707626 1.233021
C 2.391923 2.452449 0.605244
H 1.427019 2.556421 0.093496
H 2.154467 2.145219 1.629013
C -1.417849 1.690310 -1.866042
H -1.365175 1.380850 -2.920392
C -2.864845 2.055262 -1.538943
H -2.913140 2.334770 -0.473925
H -3.523674 1.183840 -1.648032
C -3.355328 3.215592 -2.394774
H -3.376376 2.903831 -3.450707
H -4.388210 3.474485 -2.126758
C -2.446338 4.428247 -2.246919
H -2.509685 4.798202 -1.211614
H -2.787991 5.248730 -2.891614
C -0.998906 4.071769 -2.558386
H -0.915312 3.800390 -3.622165
H -0.347198 4.943732 -2.408947
C -0.515996 2.904370 -1.706743
H 0.516168 2.637300 -1.967365
H -0.507486 3.201357 -0.646638
C -1.916210 -1.137328 -1.623040
H -2.854873 -1.069939 -1.055424
C -1.309156 -2.501181 -1.313497
H -0.337924 -2.589138 -1.821956
H -1.108439 -2.574570 -0.239642
C -2.226477 -3.638641 -1.739188
H -3.141063 -3.599527 -1.129196
H -1.749517 -4.605638 -1.528815
C -2.594369 -3.531635 -3.210944

H -3.283584 -4.337119 -3.497382
H -1.688638 -3.662678 -3.824170
C -3.209148 -2.173559 -3.512532
H -3.460353 -2.089550 -4.578527
H -4.155386 -2.078649 -2.958119
C -2.286022 -1.029052 -3.104526
H -2.791256 -0.079115 -3.312352
H -1.385842 -1.047183 -3.734294
C -2.979377 -0.759508 1.400157
C -4.275145 -0.401151 0.990282
C -2.798522 -2.095497 1.777457
C -5.316458 -1.324415 0.925617
H -4.483074 0.630397 0.699165
C -3.834193 -3.028232 1.723442
H -1.822317 -2.435201 2.117409
C -5.099591 -2.650423 1.288139
H -6.304056 -1.004798 0.592864
H -3.646645 -4.060379 2.019915
H -5.908630 -3.377447 1.239495
C -2.248938 1.421175 3.207324
H -0.555745 2.022101 1.298044
H -1.928910 0.753821 4.008941
H -3.324947 1.526767 3.085635
C -0.117757 2.785668 3.505217
H 0.416094 1.884545 3.823140
H 0.563955 3.394069 2.901986
C -1.380815 2.440094 2.763068
H -1.853073 3.293855 2.272506
H -0.371470 3.356655 4.408637

TS_{XIV→XV}^c

E = -2418.55646009
Pd -1.478269 0.628304 1.316595
P 2.189215 -0.125496 -0.181130
P -0.841611 0.115396 -0.861326
C 0.861552 -0.119113 -1.266092
C 1.191551 -0.229424 -2.744717

H 0.816258 0.630876 -3.323531
H 0.769848 -1.133338 -3.211787
H 2.271120 -0.264428 -2.938543
C 3.454188 -1.343717 -0.781308
H 3.879190 -0.855016 -1.671669
C 4.612574 -1.606344 0.180473
H 4.228946 -2.138876 1.061915
H 5.052616 -0.668753 0.543116
C 5.676106 -2.472980 -0.483544
H 6.107190 -1.925848 -1.335969
H 6.500376 -2.657721 0.217395
C 5.084031 -3.787814 -0.971395
H 4.751353 -4.374574 -0.101367
H 5.850280 -4.389796 -1.476479
C 3.897551 -3.549400 -1.894785
H 3.449864 -4.503914 -2.199633
H 4.249338 -3.063211 -2.817979
C 2.840092 -2.665717 -1.244682
H 2.017374 -2.478755 -1.939790
H 2.399008 -3.187194 -0.384439
C 1.743938 -0.457302 1.570022
H 0.903128 0.243546 1.708950
C 2.803139 -0.119665 2.625197
H 3.235839 0.873118 2.467668
H 3.634394 -0.833055 2.571487
C 2.185775 -0.198044 4.017418
H 2.938559 0.057248 4.774408
H 1.388164 0.556962 4.099580
C 1.600233 -1.576415 4.284215
H 2.416266 -2.315737 4.296462
H 1.135282 -1.610378 5.277842
C 0.589799 -1.954193 3.212389
H -0.274886 -1.275570 3.267480
H 0.202750 -2.966395 3.385158
C 1.183576 -1.857017 1.812894
H 1.987528 -2.600665 1.704062
H 0.423961 -2.085566 1.057733

C 3.141876 1.477036 -0.105279
H 4.056236 1.303901 0.483607
C 3.536681 1.938953 -1.510027
H 4.189745 1.203101 -1.996659
H 2.624878 2.004034 -2.121218
C 4.217675 3.301568 -1.493465
H 4.475888 3.598919 -2.518040
H 5.166908 3.229067 -0.940659
C 3.332200 4.349861 -0.837552
H 3.834373 5.325652 -0.821775
H 2.417592 4.475915 -1.437960
C 2.949341 3.919775 0.569541
H 2.273378 4.653808 1.028416
H 3.852269 3.892369 1.199132
C 2.286711 2.549076 0.571726
H 1.335038 2.598597 0.030121
H 2.030856 2.263609 1.598606
C -1.457598 1.548366 -1.886192
H -1.394013 1.238791 -2.940048
C -2.916801 1.849120 -1.548449
H -2.966233 2.119285 -0.480865
H -3.539250 0.951142 -1.655480
C -3.464065 2.996717 -2.386422
H -3.478407 2.699850 -3.446680
H -4.505511 3.205149 -2.107855
C -2.608027 4.245563 -2.225193
H -2.673922 4.591159 -1.181134
H -2.992425 5.062878 -2.849413
C -1.151010 3.955972 -2.559060
H -1.068554 3.701365 -3.627015
H -0.534537 4.852480 -2.405311
C -0.610858 2.801237 -1.725360
H 0.431131 2.583984 -1.993176
H -0.612274 3.088945 -0.662644
C -1.823179 -1.302297 -1.604502
H -2.766246 -1.265839 -1.039907
C -1.153235 -2.630110 -1.267820

H -0.171588 -2.677198 -1.762005
H -0.962331 -2.676185 -0.190454
C -2.007375 -3.818259 -1.686221
H -2.928342 -3.818437 -1.084617
H -1.483230 -4.756728 -1.459640
C -2.367861 -3.749051 -3.162192
H -3.011348 -4.593288 -3.443227
H -1.451251 -3.840199 -3.766404
C -3.050498 -2.429017 -3.486511
H -3.298264 -2.372769 -4.555090
H -4.004168 -2.375712 -2.939390
C -2.190328 -1.233392 -3.088746
H -2.742353 -0.312748 -3.309619
H -1.286643 -1.212690 -3.713538
C -2.975118 -0.799487 1.394836
C -4.277444 -0.438773 1.011640
C -2.781780 -2.143939 1.739222
C -5.314699 -1.366858 0.941468
H -4.495627 0.597393 0.747833
C -3.812221 -3.081407 1.677088
H -1.797381 -2.485726 2.056143
C -5.085677 -2.699892 1.268123
H -6.309076 -1.045349 0.631332
H -3.615208 -4.119399 1.945894
H -5.891437 -3.430092 1.212723
C -1.494065 3.661867 2.304596
H -0.712632 4.123664 1.690268
H -2.415974 3.632227 1.712424
H -1.670772 4.310305 3.173734
C -2.057357 1.357834 3.235521
H -3.117959 1.604503 3.189426
H -0.382324 1.811714 1.246358
C -1.101888 2.282872 2.768869
H -0.103657 2.222509 3.209180
H -1.777845 0.615455 3.981674

XV^a

E = -2418.56722395

Pd -1.521629 0.802723 1.282018

P 2.144859 -0.187561 -0.224328

P -0.871556 0.035772 -0.884128

C 0.818964 -0.264286 -1.307049

C 1.136633 -0.510373 -2.771015

H 0.754819 0.294205 -3.421020

H 0.705744 -1.451814 -3.147525

H 2.213459 -0.566489 -2.975382

C 3.401223 -1.456207 -0.732954

H 3.790783 -1.040750 -1.675415

C 4.600531 -1.636213 0.196458

H 4.263579 -2.110799 1.128674

H 5.043112 -0.670651 0.472131

C 5.646730 -2.535822 -0.452070

H 6.033111 -2.044050 -1.357997

H 6.502794 -2.662115 0.223255

C 5.054024 -3.888344 -0.822097

H 4.769400 -4.417940 0.100095

H 5.806736 -4.513961 -1.318725

C 3.823875 -3.729882 -1.704868

H 3.377398 -4.708884 -1.920915

H 4.125706 -3.305836 -2.675165

C 2.784529 -2.814871 -1.069166

H 1.924928 -2.688445 -1.732841

H 2.396844 -3.279163 -0.152424

C 1.703856 -0.356279 1.556223

H 0.882046 0.375781 1.665377

C 2.809701 0.019061 2.550312

H 3.232263 1.005354 2.333791

H 3.637341 -0.695564 2.474919

C 2.280578 -0.006467 3.980184

H 3.088473 0.254267 4.676043

H 1.508510 0.768230 4.091739

C 1.677122 -1.356441 4.331990

H 2.467386 -2.123273 4.317021

H 1.276009 -1.341642 5.353371
C 0.590121 -1.727443 3.336859
H -0.235221 -1.002228 3.407572
H 0.166069 -2.711646 3.573215
C 1.114758 -1.720014 1.907555
H 1.890258 -2.493458 1.801781
H 0.314766 -1.962212 1.201241
C 3.102099 1.412415 -0.281681
H 4.019431 1.289123 0.314671
C 3.487213 1.759366 -1.721216
H 4.147715 0.991710 -2.144811
H 2.573663 1.761228 -2.333193
C 4.152710 3.125629 -1.822521
H 4.404049 3.338832 -2.869483
H 5.104382 3.110884 -1.269365
C 3.256690 4.214494 -1.253184
H 3.747448 5.193857 -1.320436
H 2.339542 4.280810 -1.858679
C 2.885037 3.901337 0.187603
H 2.203281 4.664783 0.585267
H 3.791853 3.940192 0.810813
C 2.244145 2.526128 0.319875
H 1.276371 2.513784 -0.197910
H 2.026763 2.325785 1.374403
C -1.487038 1.359794 -2.051164
H -1.425140 0.958349 -3.073624
C -2.944051 1.705390 -1.746501
H -2.992652 2.090163 -0.714984
H -3.574685 0.806896 -1.756371
C -3.480391 2.758007 -2.707729
H -3.491002 2.346070 -3.728922
H -4.521938 3.002194 -2.460311
C -2.618897 4.013480 -2.680015
H -2.698188 4.478496 -1.684909
H -2.990610 4.754575 -3.399814
C -1.158216 3.685219 -2.958540
H -1.060662 3.319219 -3.992256

H -0.539918 4.590991 -2.890499
C -0.634815 2.618590 -2.005147
H 0.408467 2.369738 -2.237663
H -0.644189 3.014104 -0.975960
C -1.893340 -1.434418 -1.466249
H -2.827362 -1.331634 -0.893031
C -1.234511 -2.735487 -1.020464
H -0.260975 -2.837368 -1.522974
H -1.027004 -2.689616 0.053470
C -2.104979 -3.948400 -1.317340
H -3.018535 -3.883578 -0.707929
H -1.586601 -4.867202 -1.010796
C -2.484821 -4.012543 -2.788335
H -3.140733 -4.871742 -2.981757
H -1.577529 -4.169504 -3.392989
C -3.157316 -2.719684 -3.223356
H -3.417986 -2.757739 -4.289687
H -4.103635 -2.605492 -2.672616
C -2.278851 -1.503736 -2.945899
H -2.819773 -0.601221 -3.251228
H -1.379634 -1.554969 -3.575578
C -2.986347 -0.541747 1.533156
C -4.286342 -0.190108 1.140755
C -2.781771 -1.857087 1.963111
C -5.322593 -1.121493 1.138076
H -4.499511 0.828607 0.818634
C -3.817430 -2.790124 1.968942
H -1.795770 -2.177830 2.289722
C -5.092968 -2.431501 1.546386
H -6.318550 -0.817154 0.816905
H -3.620118 -3.808830 2.302418
H -5.900527 -3.161478 1.544137
C -2.008782 1.864158 2.955684
H -0.544756 2.490927 1.453572
H -1.657327 1.402317 3.885045
H -3.065137 2.133527 3.021425
C 0.005751 3.437241 3.286830

H 0.618447 2.615941 3.675881
H 0.669949 4.134896 2.761821
C -1.099424 2.910487 2.385243
H -1.666688 3.739102 1.943346
H -0.425608 3.961949 4.147333

XV^c

E = -2418.56977627

Pd -1.511100 0.641226 1.320741
P 2.193785 -0.116636 -0.193185
P -0.827726 0.012014 -0.870162
C 0.877227 -0.200045 -1.287189
C 1.220408 -0.378471 -2.755476
H 0.822196 0.437553 -3.381095
H 0.824872 -1.317911 -3.173152
H 2.301581 -0.393671 -2.944857
C 3.490558 -1.340316 -0.706883
H 3.913146 -0.893304 -1.620355
C 4.645949 -1.529073 0.275098
H 4.264988 -2.019086 1.182046
H 5.067440 -0.565287 0.587925
C 5.728646 -2.413158 -0.333356
H 6.156010 -1.907197 -1.212656
H 6.551212 -2.543529 0.381659
C 5.162740 -3.763530 -0.749542
H 4.834428 -4.306182 0.150244
H 5.942564 -4.379372 -1.215584
C 3.978557 -3.597901 -1.691538
H 3.548456 -4.575476 -1.944115
H 4.328153 -3.159014 -2.638927
C 2.902401 -2.696366 -1.099085
H 2.081400 -2.562585 -1.808402
H 2.463595 -3.175308 -0.213101
C 1.737596 -0.344249 1.573600
H 0.891603 0.357891 1.672719
C 2.792079 0.059454 2.610595
H 3.232157 1.037114 2.391973

H 3.619237 -0.660354 2.605636
C 2.168431 0.070169 4.001913
H 2.915850 0.380919 4.743275
H 1.364273 0.822179 4.029703
C 1.593424 -1.293019 4.355072
H 2.415749 -2.022683 4.419462
H 1.122780 -1.266228 5.346127
C 0.590596 -1.745895 3.305692
H -0.279914 -1.072447 3.318073
H 0.214004 -2.749920 3.539067
C 1.184279 -1.729159 1.902366
H 1.993838 -2.471816 1.835568
H 0.425281 -2.005904 1.163151
C 3.108027 1.510594 -0.202073
H 4.032116 1.388956 0.384558
C 3.476103 1.910129 -1.632730
H 4.141627 1.165307 -2.088080
H 2.556740 1.919700 -2.235539
C 4.121329 3.288345 -1.695083
H 4.363276 3.537513 -2.736286
H 5.076299 3.270817 -1.147757
C 3.212043 4.345132 -1.087637
H 3.687649 5.333495 -1.125766
H 2.290994 4.416687 -1.686661
C 2.852406 3.980336 0.343765
H 2.161244 4.719508 0.769911
H 3.761713 4.013104 0.963730
C 2.233147 2.591560 0.435451
H 1.264819 2.580538 -0.080643
H 2.020857 2.359143 1.484621
C -1.487770 1.379727 -1.959741
H -1.400269 1.048991 -3.005713
C -2.959602 1.643882 -1.645105
H -3.028246 1.951165 -0.588688
H -3.553573 0.724044 -1.722996
C -3.534263 2.743247 -2.528116
H -3.520044 2.413136 -3.578531

H -4.586935 2.922873 -2.272638
C -2.726735 4.027151 -2.392108
H -2.827265 4.404044 -1.361935
H -3.126656 4.809496 -3.050446
C -1.253412 3.781666 -2.687122
H -1.138093 3.502159 -3.745701
H -0.672624 4.703501 -2.544485
C -0.689876 2.666918 -1.815389
H 0.363685 2.480988 -2.059244
H -0.720649 2.982971 -0.758959
C -1.785793 -1.461380 -1.534621
H -2.730778 -1.415361 -0.972098
C -1.088658 -2.757264 -1.134338
H -0.107832 -2.807528 -1.630213
H -0.891122 -2.748279 -0.057069
C -1.917995 -3.982668 -1.491344
H -2.839229 -3.971268 -0.890141
H -1.374874 -4.897676 -1.218157
C -2.280034 -3.995794 -2.968483
H -2.907043 -4.865625 -3.205303
H -1.361676 -4.100282 -3.567775
C -2.987208 -2.707088 -3.359562
H -3.233593 -2.709794 -4.429948
H -3.943187 -2.644413 -2.817338
C -2.150097 -1.477459 -3.020783
H -2.714625 -0.578451 -3.292879
H -1.242761 -1.474446 -3.640758
C -2.979331 -0.715876 1.468785
C -4.282219 -0.376975 1.076649
C -2.749642 -2.045267 1.842136
C -5.296951 -1.330543 1.021571
H -4.515110 0.649658 0.796421
C -3.762764 -3.001148 1.794367
H -1.758732 -2.356257 2.166147
C -5.041831 -2.652041 1.373587
H -6.296398 -1.034880 0.702988
H -3.546035 -4.029224 2.084275

H -5.832584 -3.398913 1.329361
C -1.490326 3.943829 2.031342
H -0.720734 4.531169 1.514652
H -2.317064 3.783202 1.327834
H -1.871437 4.540595 2.868491
C -1.957291 1.638319 3.049817
H -2.986190 2.005288 3.097530
H -0.400785 2.161797 1.595648
C -0.951321 2.611858 2.524097
H -0.090660 2.748351 3.195002
H -1.676367 1.102988 3.960731

TS_{XV→XVI}^a

E = -2418.55550338
Pd -1.429775 -0.180551 -1.224580
P 2.029629 -0.476501 0.617415
P -0.368123 1.382457 0.200497
C 1.181565 0.976002 0.967678
C 1.595955 1.725531 2.223685
H 0.866575 1.629900 3.044699
H 1.730183 2.802402 2.052827
H 2.545746 1.363472 2.636781
C 3.821188 -0.232450 1.013349
H 3.836767 -0.178726 2.112521
C 4.730022 -1.394062 0.612853
H 4.776122 -1.452901 -0.483796
H 4.329728 -2.353577 0.963837
C 6.139075 -1.179190 1.153774
H 6.106750 -1.195858 2.253979
H 6.788793 -2.009820 0.849145
C 6.716515 0.149577 0.685384
H 6.850750 0.116269 -0.406836
H 7.714320 0.305420 1.115252
C 5.795456 1.310278 1.036375
H 6.203201 2.253355 0.650392
H 5.745777 1.418488 2.130996
C 4.388480 1.090806 0.494251

H 3.727584 1.921250 0.762307
H 4.423625 1.069002 -0.602351
C 1.826264 -1.034873 -1.119458
H 0.727994 -0.920681 -1.237732
C 2.156210 -2.492826 -1.448026
H 1.712290 -3.186671 -0.727855
H 3.242326 -2.652304 -1.409451
C 1.645014 -2.820058 -2.847835
H 1.874945 -3.863998 -3.097126
H 0.549317 -2.733644 -2.843061
C 2.214208 -1.881711 -3.902429
H 3.298652 -2.051601 -3.990326
H 1.783925 -2.111311 -4.885943
C 1.968896 -0.424499 -3.537691
H 0.887895 -0.212739 -3.561949
H 2.435933 0.242835 -4.273427
C 2.491089 -0.118031 -2.141744
H 3.579023 -0.283943 -2.121784
H 2.319991 0.927693 -1.878078
C 1.547415 -1.967620 1.623052
H 2.220900 -2.797354 1.357265
C 1.692673 -1.672150 3.117652
H 2.737805 -1.452039 3.370718
H 1.115467 -0.765663 3.350958
C 1.191107 -2.822819 3.980760
H 1.287575 -2.559542 5.042068
H 1.832209 -3.702890 3.817974
C -0.247394 -3.183353 3.644130
H -0.586934 -4.025894 4.260215
H -0.901999 -2.332175 3.887029
C -0.384792 -3.510739 2.165572
H -1.428558 -3.744073 1.919185
H 0.197667 -4.417449 1.938678
C 0.105547 -2.362190 1.293908
H -0.535171 -1.483733 1.440317
H -0.004791 -2.621150 0.233008
C -1.500741 1.829909 1.617016

H -0.975737 2.576324 2.233627
C -2.814082 2.441553 1.133901
H -3.284102 1.742592 0.427305
H -2.627325 3.372239 0.583832
C -3.770424 2.720173 2.287468
H -3.343524 3.505434 2.931391
H -4.715809 3.119108 1.896062
C -4.024043 1.473187 3.120862
H -4.527324 0.720632 2.495885
H -4.700683 1.698464 3.955999
C -2.713176 0.894121 3.631856
H -2.240500 1.610337 4.322499
H -2.894682 -0.023055 4.208979
C -1.765765 0.600284 2.478133
H -0.814454 0.199456 2.850773
H -2.209455 -0.176644 1.838140
C -0.247364 3.032334 -0.676664
H -1.274662 3.171691 -1.050536
C 0.660775 2.947039 -1.895299
H 1.693400 2.798968 -1.543917
H 0.394054 2.066642 -2.498208
C 0.596603 4.215352 -2.736166
H -0.418365 4.321373 -3.148777
H 1.275478 4.136571 -3.596067
C 0.933299 5.444769 -1.903626
H 0.840381 6.357484 -2.507002
H 1.986829 5.385898 -1.588564
C 0.051687 5.530264 -0.665272
H 0.333959 6.396888 -0.052475
H -0.992450 5.694235 -0.973749
C 0.128315 4.250671 0.161953
H -0.515832 4.336620 1.046170
H 1.157343 4.124912 0.528671
C -3.289435 -0.870764 -0.850946
C -3.413474 -1.849865 0.142771
C -4.405325 -0.068699 -1.128396
C -4.588258 -1.980117 0.877877

H -2.573277 -2.510175 0.350167
C -5.579794 -0.203362 -0.395633
H -4.348768 0.677630 -1.919632
C -5.678538 -1.156536 0.615118
H -4.649985 -2.735263 1.660852
H -6.428021 0.442124 -0.620340
H -6.599371 -1.261771 1.185374
C -2.334294 -1.514665 -2.605604
H -1.440252 -3.288424 -1.780043
H -1.446144 -1.149163 -3.173770
H -3.212361 -1.203427 -3.177701
C -2.095634 -3.736097 -3.787720
H -1.168065 -3.435610 -4.292734
H -2.067158 -4.825449 -3.658091
C -2.267091 -3.019522 -2.455363
H -3.179051 -3.382104 -1.964890
H -2.925821 -3.502777 -4.466688

TS_{XV→XVI}^c

E = -2418.54942803
Pd -1.426955 0.258674 1.124805
P 2.307736 0.072706 -0.098124
P -0.596178 0.015862 -1.035860
C 1.147091 -0.050699 -1.359996
C 1.642426 0.111383 -2.786374
H 1.260598 1.026340 -3.268435
H 1.358531 -0.727327 -3.438857
H 2.735413 0.187032 -2.848984
C 3.894166 -0.690636 -0.658164
H 4.260681 0.001431 -1.431920
C 4.971470 -0.769422 0.423028
H 4.649255 -1.480277 1.197310
H 5.108311 0.198872 0.920959
C 6.290550 -1.249801 -0.171497
H 6.651988 -0.500494 -0.892401
H 7.053632 -1.318381 0.614562
C 6.127162 -2.590084 -0.875373

H 5.874632 -3.358239 -0.128277
H 7.076423 -2.900830 -1.330376
C 5.023661 -2.536123 -1.923319
H 4.886839 -3.521391 -2.387061
H 5.321814 -1.850969 -2.732027
C 3.707760 -2.055657 -1.324357
H 2.923050 -2.006155 -2.085790
H 3.364022 -2.781828 -0.576752
C 1.747887 -0.677760 1.477575
H 0.708765 -0.284332 1.520894
C 2.438924 -0.261056 2.777322
H 2.603013 0.818980 2.834751
H 3.429779 -0.731338 2.845874
C 1.581147 -0.711138 3.956901
H 2.056441 -0.419029 4.902207
H 0.619353 -0.176863 3.909128
C 1.326137 -2.212605 3.932558
H 2.277308 -2.739282 4.107519
H 0.658811 -2.497596 4.756380
C 0.747833 -2.662206 2.597880
H -0.256256 -2.228503 2.464877
H 0.629869 -3.753220 2.575435
C 1.615180 -2.196984 1.436764
H 2.614240 -2.652829 1.519248
H 1.190844 -2.514087 0.481241
C 2.779488 1.807696 0.392325
H 3.578237 1.757706 1.148143
C 3.297119 2.576541 -0.825002
H 4.230634 2.130332 -1.191866
H 2.563303 2.479660 -1.639129
C 3.521142 4.052520 -0.521942
H 3.864845 4.568912 -1.427584
H 4.329300 4.151591 0.219097
C 2.260870 4.705730 0.023833
H 2.442167 5.765294 0.245499
H 1.473974 4.676509 -0.745274
C 1.775138 3.975576 1.266641

H 0.843940 4.421625 1.640429
H 2.520892 4.092324 2.068382
C 1.551349 2.494630 0.993529
H 0.716624 2.371417 0.293580
H 1.234404 1.992656 1.915250
C -1.279819 1.327659 -2.175771
H -0.990823 1.059718 -3.204272
C -2.803077 1.403173 -2.099954
H -3.079141 1.623086 -1.057921
H -3.262964 0.435917 -2.335027
C -3.359411 2.483105 -3.020047
H -3.147791 2.211704 -4.066068
H -4.452684 2.528196 -2.926926
C -2.743858 3.843245 -2.722582
H -3.047078 4.160826 -1.712680
H -3.127959 4.602452 -3.416637
C -1.224583 3.778240 -2.784408
H -0.910605 3.562062 -3.817277
H -0.785078 4.750832 -2.522726
C -0.686695 2.694594 -1.860623
H 0.408180 2.649092 -1.909768
H -0.944442 2.947514 -0.818676
C -1.462815 -1.506769 -1.700642
H -2.499630 -1.355305 -1.353300
C -0.945575 -2.757751 -1.003664
H 0.108763 -2.905017 -1.288223
H -0.970405 -2.600712 0.083258
C -1.756639 -3.990428 -1.378384
H -2.781023 -3.867065 -0.996816
H -1.342678 -4.880597 -0.885113
C -1.801607 -4.189250 -2.886526
H -2.424812 -5.056097 -3.143745
H -0.787492 -4.414916 -3.252201
C -2.313519 -2.937911 -3.585689
H -2.314542 -3.078083 -4.675128
H -3.359761 -2.762568 -3.291380
C -1.484763 -1.712637 -3.213140

H -1.882803 -0.828724 -3.726530
H -0.456346 -1.852131 -3.576338
C -3.245551 -0.519306 1.523610
C -4.363916 0.123684 0.966580
C -3.302074 -1.912452 1.686496
C -5.453758 -0.610003 0.514692
H -4.372626 1.208052 0.873352
C -4.399297 -2.639792 1.235290
H -2.468886 -2.435519 2.153443
C -5.478699 -1.997894 0.636191
H -6.296835 -0.087913 0.063276
H -4.404460 -3.723087 1.351657
H -6.334706 -2.568520 0.282130
C -2.588782 2.889617 2.630541
H -2.225719 3.884162 2.917066
H -2.462144 2.778549 1.544020
C -2.372032 0.379877 3.099520
H -3.383302 0.308419 3.504522
H -0.768449 1.859621 3.132199
C -1.841083 1.790236 3.369811
H -1.909190 1.972313 4.456257
H -1.780367 -0.396636 3.603147
H -3.665009 2.850307 2.843321

XVI

E = -2418.62253532
Pd 1.516570 0.147038 1.018184
P -2.188801 -0.513439 -0.152553
P 0.443960 0.825662 -0.909642
C -1.250644 0.420671 -1.248241
C -1.800901 0.606916 -2.651478
H -1.187197 0.107883 -3.419310
H -1.877890 1.662206 -2.951550
H -2.807738 0.185727 -2.769074
C -3.981528 -0.155934 -0.434405
H -4.194551 -0.620211 -1.409643
C -4.920315 -0.799500 0.585604

H -4.757211 -0.330125 1.566158
H -4.704087 -1.868340 0.708123
C -6.374960 -0.596070 0.177420
H -6.559205 -1.126968 -0.769173
H -7.041259 -1.049127 0.922946
C -6.698912 0.881007 -0.000353
H -6.620774 1.384220 0.975715
H -7.737620 1.007595 -0.331860
C -5.739994 1.545732 -0.978923
H -5.957089 2.618661 -1.059073
H -5.893080 1.122120 -1.983671
C -4.287601 1.337427 -0.568233
H -3.605298 1.804856 -1.284994
H -4.108386 1.833905 0.394352
C -1.739590 -0.233225 1.600699
H -0.628498 -0.273930 1.519189
C -2.160303 -1.270954 2.642986
H -1.988870 -2.296894 2.303815
H -3.236397 -1.186934 2.849641
C -1.380765 -1.017974 3.930734
H -1.658875 -1.757587 4.692833
H -0.309385 -1.164964 3.721029
C -1.603207 0.394568 4.455688
H -2.652877 0.495125 4.773518
H -0.991601 0.568880 5.350739
C -1.303924 1.442091 3.391934
H -0.230272 1.426105 3.146900
H -1.532308 2.448423 3.766623
C -2.077298 1.164197 2.111048
H -3.157537 1.230164 2.314876
H -1.844693 1.909258 1.346705
C -2.060611 -2.361805 -0.353799
H -2.783412 -2.840336 0.325501
C -2.391429 -2.759297 -1.793910
H -3.436522 -2.519842 -2.030274
H -1.772029 -2.154425 -2.472103
C -2.133050 -4.237067 -2.061490

H -2.346361 -4.465212 -3.113908
H -2.832595 -4.841402 -1.463556
C -0.707283 -4.628991 -1.703542
H -0.544668 -5.698257 -1.890913
H -0.004757 -4.084592 -2.353869
C -0.410411 -4.285357 -0.252345
H 0.622605 -4.548210 0.008764
H -1.059146 -4.888089 0.402559
C -0.645526 -2.806788 0.021636
H 0.069147 -2.205542 -0.554327
H -0.429722 -2.581478 1.071679
C 1.404983 0.312479 -2.428867
H 0.963667 0.819701 -3.301009
C 2.873286 0.722717 -2.320042
H 3.283560 0.299974 -1.386565
H 2.964495 1.811984 -2.225752
C 3.687467 0.247355 -3.518088
H 3.338765 0.772092 -4.421365
H 4.742138 0.524740 -3.387247
C 3.555464 -1.253199 -3.734982
H 4.000537 -1.782066 -2.878503
H 4.121420 -1.565499 -4.622701
C 2.093077 -1.656353 -3.860674
H 1.669147 -1.210455 -4.773939
H 2.001220 -2.745672 -3.974982
C 1.294273 -1.189394 -2.652439
H 0.239551 -1.474989 -2.747729
H 1.673732 -1.695395 -1.753747
C 0.698049 2.686658 -0.983965
H 1.769899 2.775891 -0.743146
C -0.060762 3.385819 0.135142
H -1.140454 3.281367 -0.056518
H 0.149536 2.877050 1.086495
C 0.298670 4.862870 0.225988
H 1.358413 4.954734 0.511664
H -0.281480 5.347885 1.022878
C 0.074617 5.570988 -1.102658

H 0.376286 6.624832 -1.035923
H -1.002369 5.569363 -1.332417
C 0.821998 4.870760 -2.228653
H 0.625735 5.368237 -3.188063
H 1.905362 4.955228 -2.050254
C 0.448826 3.393916 -2.313299
H 1.013531 2.917230 -3.124209
H -0.615209 3.308902 -2.575330
C 3.838505 -0.878435 2.181716
C 4.822250 -0.245447 1.426952
C 2.821656 -0.088859 2.778307
C 4.816807 1.142452 1.242367
H 5.617807 -0.845639 0.986982
C 2.785330 1.305516 2.541786
H 2.172225 -0.535902 3.531981
C 3.801176 1.913594 1.779193
H 5.609130 1.612088 0.662510
H 2.076861 1.930789 3.082015
H 3.786698 2.991995 1.632222
C 3.459195 -3.014400 -0.058011
H 2.804611 -3.548869 -0.757462
H 3.503354 -1.967238 -0.381502
C 3.830620 -2.367957 2.377896
H 4.857418 -2.752665 2.308307
H 1.935050 -2.683370 1.419723
C 2.949052 -3.108693 1.367108
H 2.869901 -4.162648 1.669958
H 3.475393 -2.593717 3.392304
H 4.466912 -3.441873 -0.151446

5.2.3 KeyPhos-medierte sec-Butyl–Phenyl-Kopplung

5.2.3.1 Energien der Strukturen

Tabelle 5.6. Energien der Strukturen der keYPhos medierten sec-Butyl–Phenyl-Kopplung.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	E(PCM)	$\Delta G(\text{PCM})$ [hartree]	$\Delta G(\text{PCM})$ [kJ/mol]
X^a	-2457.94787680	1.122477	0.992735	-2457.95115171	0.001974	5.183525
X^a	-2457.94777558	1.121973	0.990642	-2457.95103301	–	–

Untersuchungen zu elektronischen Eigenschaften und dem katalytischen Einsatz von
YPhos-Liganden

X^c	-2457.94759064	1.122946	0.993134	-2457.95085037	0.002675	7.022267
X^d	-2457.94752497	1.122745	0.992256	-2457.95075182	0.001895	4.975821
TS_{X→XI^a}	-2457.93279473	1.121219	0.991028	-2457.93531087	0.016108	42.291922
TS_{X→XI^b}	-2457.93340010	1.121445	0.992741	-2457.93588677	0.017245	45.277378
TS_{X→XI^c}	-2457.92868152	1.120772	0.989018	-2457.93118672	0.018222	47.842622
TS_{X→XI^d}	-2457.92889513	1.120595	0.989235	-2457.93142869	0.018197	47.777064
XI^{a,d}	-2458.00107712	1.123455	0.991178	-2458.00330264	-0.051734	-135.826646
XI^{b,c}	-2458.00039181	1.124039	0.992541	-2458.00263229	-0.049700	-130.488085
XII^a	-2457.94857094	1.121415	0.991024	-2457.95175354	-0.000339	-0.888811
XII^c	-2457.94839703	1.120950	0.988202	-2457.95151732	-0.002924	-7.677776
TS_{XII→XIII^a}	-2457.93445401	1.118090	0.988218	-2457.93756669	0.011042	28.991611
TS_{XII→XIII^b}	-2457.93474187	1.118312	0.989871	-2457.93776369	0.012498	32.814339
XIII^a	-2457.93974206	1.119062	0.986877	-2457.94261888	0.004649	12.206291
XIII^c	-2457.94042892	1.120091	0.990930	-2457.94316513	0.008156	21.413263
TS_{XIII→XIV^a} (CW)	-2457.93486568	1.118757	0.988797	-2457.93792729	0.011261	29.565020
XIII→XIV^a (CW)	-2457.93545992	1.119890	0.989727	-2457.93850685	0.011611	30.485101
TS_{XIII→XIV^a} (CW)	-2457.93337370	1.118346	0.989168	-2457.93633172	0.013227	34.728250
TS_{XIII→XIV^a} (CCW)	-2457.93284351	1.119057	0.991371	-2457.93561784	0.016144	42.386518
XIII→XIV^a (CCW)	-2457.93413225	1.119653	0.989283	-2457.93700612	0.012668	33.259545
TS_{XIII→XIV^a} (CCW)	-2457.93180788	1.118637	0.989108	-2457.93484780	0.014651	38.466752
TS_{XIII→XIV^c} (CW)	-2457.93063939	1.118609	0.989141	-2457.93359672	0.015935	41.838104
TS_{XIII→XIV^c} (CCW)	-2457.93224881	1.118809	0.990604	-2457.93551260	0.015482	40.649067
XIV^a	-2457.93841347	1.119687	0.989190	-2457.94139881	0.008182	21.482366
XIV^c	-2457.93977853	1.119712	0.989411	-2457.94275569	0.007046	18.500113
TS_{XIV→XV^a}	-2457.93266762	1.118096	0.988428	-2457.93596100	0.012858	33.758705
TS_{XIV→XV^c}	-2457.93570211	1.117838	0.987928	-2457.93913504	0.009184	24.112513
XV^a	-2457.94652069	1.121435	0.989590	-2457.94988261	0.000098	0.258349
XV^c	-2457.94905634	1.121903	0.993088	-2457.95257165	0.000907	2.382274
TS_{XV→XVI^a}	-2457.93336908	1.121571	0.990347	-2457.93594229	0.014796	38.846163
TS_{XV→XVI^c}	-2457.92853795	1.121456	0.990822	-2457.93108726	0.020126	52.840157
XVI	-2458.00147667	1.124442	0.993550	-2458.00373411	-0.049793	-130.731784

5.2.3.2 Koordinaten der Strukturen

XI^a

E = -2457.94787680

Pd -1.370450 0.755930 0.754300

P 2.201558 0.114597 -0.046124

P -0.513447 -0.260018 -1.256247

C 1.253706 -0.269720 -1.423473

C 1.880132 -0.390590 -2.798021

H 1.356148 0.228389 -3.541320

H 1.876638 -1.419771 -3.192644

H 2.924051 -0.054120 -2.826678

C 3.967906 -0.280840 -0.397914

H 4.189264 0.389509 -1.243042

C 4.934934 0.085523 0.728632

H 4.762577 -0.580352 1.586878

H 4.759583 1.108244 1.084448

C 6.378658 -0.056021 0.257537

H 6.568098 0.692357 -0.527403

H 7.065543 0.177982 1.080977

C 6.661736 -1.445766 -0.296000

H 6.586934 -2.180294 0.520547

H 7.691748 -1.503238 -0.670523

C 5.671145 -1.821026 -1.389945

H 5.862688 -2.840849 -1.747129

H 5.810008 -1.156081 -2.256465

C 4.236088 -1.705570 -0.891273

H 3.523143 -1.987055 -1.672120

H 4.093903 -2.415500 -0.069425

C 1.621011 -0.722681 1.496986

H 0.523677 -0.713170 1.347045

C 1.902370 -0.024421 2.828945

H 1.596912 1.025383 2.811075

H 2.983295 -0.035225 3.036397

C 1.150730 -0.734985 3.949509

H 1.343212 -0.233196 4.906370

H 0.071919 -0.631822 3.754642
C 1.517891 -2.208800 4.036216
H 2.573450 -2.299695 4.336552
H 0.929221 -2.703875 4.819016
C 1.320395 -2.907365 2.698746
H 0.249036 -2.939160 2.453751
H 1.655791 -3.951011 2.755106
C 2.063740 -2.183744 1.584283
H 3.140916 -2.218519 1.804656
H 1.913850 -2.687112 0.624133
C 2.253650 1.925532 0.409127
H 2.826551 2.032512 1.341735
C 2.930982 2.741024 -0.691279
H 3.990837 2.466890 -0.770759
H 2.463256 2.482466 -1.654784
C 2.818679 4.242305 -0.450064
H 3.275635 4.785346 -1.287411
H 3.402215 4.504940 0.445619
C 1.376582 4.682459 -0.248038
H 1.328039 5.763216 -0.064709
H 0.806162 4.492934 -1.170270
C 0.737875 3.914294 0.898937
H -0.314090 4.198669 1.029828
H 1.250533 4.163518 1.840353
C 0.828069 2.417356 0.647053
H 0.243846 2.184129 -0.257357
H 0.384750 1.872291 1.499296
C -1.169533 0.729399 -2.691235
H -0.823620 0.238858 -3.614322
C -2.696621 0.755819 -2.696908
H -3.025327 1.267430 -1.779732
H -3.117505 -0.256096 -2.648403
C -3.227787 1.500244 -3.915787
H -2.941487 0.951503 -4.826499
H -4.325434 1.520448 -3.897862
C -2.673530 2.917018 -3.984438
H -3.066273 3.494315 -3.133156

H -3.023417 3.425362 -4.892476
C -1.151509 2.922445 -3.921470
H -0.744630 2.450714 -4.829079
H -0.772113 3.953245 -3.909501
C -0.652664 2.163203 -2.699048
H 0.443896 2.179526 -2.640731
H -1.027001 2.667598 -1.793410
C -1.204113 -1.954550 -1.613676
H -2.245417 -1.892059 -1.258500
C -0.483669 -2.973411 -0.741192
H 0.565220 -3.027528 -1.071741
H -0.469849 -2.623699 0.298625
C -1.127944 -4.347843 -0.837209
H -2.149897 -4.288819 -0.433787
H -0.583435 -5.068206 -0.211458
C -1.172852 -4.825265 -2.282210
H -1.678447 -5.797396 -2.353226
H -0.143506 -4.982727 -2.640855
C -1.859821 -3.803998 -3.178696
H -1.850008 -4.142103 -4.223657
H -2.917910 -3.723565 -2.886123
C -1.217524 -2.424317 -3.066121
H -1.760041 -1.717982 -3.706041
H -0.186365 -2.465724 -3.447699
C -2.836575 -0.549501 0.996242
C -4.080501 -0.430052 0.371023
C -2.589908 -1.704459 1.746901
C -5.028951 -1.448067 0.460473
H -4.324365 0.464609 -0.198228
C -3.534583 -2.723000 1.836409
H -1.643618 -1.813834 2.276180
C -4.758871 -2.604133 1.184884
H -5.989246 -1.331656 -0.041181
H -3.311203 -3.614525 2.421944
H -5.498848 -3.399558 1.251257
C -3.206571 2.813875 1.694476
H -2.778770 3.345728 0.832123

H -4.094759 2.275537 1.336542
H -3.559639 3.585733 2.398980
C -2.765321 1.125485 3.537228
H -3.712974 0.638192 3.267100
H -2.089739 0.303730 3.815970
C -2.210465 1.852117 2.321761
H -1.324606 2.426481 2.654356
C -2.977948 2.016804 4.755684
H -3.693953 2.823265 4.553303
H -3.363786 1.445934 5.610205
H -2.036318 2.488426 5.070157

XI^b

E = -2457.94777558
Pd -1.371482 -0.634859 -0.825397
P 2.205823 -0.199079 0.066253
P -0.513120 0.361089 1.189811
C 1.245599 0.268499 1.409199
C 1.838360 0.376940 2.799614
H 1.256575 -0.195273 3.537425
H 1.885335 1.411726 3.176241
H 2.858795 -0.020753 2.865253
C 3.983090 0.086645 0.466649
H 4.134144 -0.582381 1.328270
C 4.957682 -0.361291 -0.623334
H 4.855408 0.299179 -1.496821
H 4.726727 -1.376479 -0.968454
C 6.392681 -0.305996 -0.109761
H 6.509051 -1.051582 0.691890
H 7.087115 -0.598345 -0.907836
C 6.749597 1.071586 0.431181
H 6.747895 1.795310 -0.398344
H 7.769407 1.068203 0.836743
C 5.753279 1.529190 1.487982
H 6.000549 2.540261 1.835663
H 5.822097 0.871346 2.368206
C 4.329280 1.498983 0.946877

H 3.613385 1.839271 1.701208
H 4.258495 2.202683 0.110584
C 1.726268 0.651211 -1.504599
H 0.626288 0.710457 -1.389778
C 2.005178 -0.079802 -2.819429
H 1.636068 -1.108863 -2.799678
H 3.090510 -0.137405 -2.993456
C 1.332426 0.660756 -3.970589
H 1.523331 0.136230 -4.915481
H 0.243743 0.625876 -3.808112
C 1.791956 2.108314 -4.061512
H 2.859823 2.130510 -4.329506
H 1.259245 2.628547 -4.867737
C 1.596764 2.834485 -2.738586
H 0.522270 2.934069 -2.528066
H 1.996690 3.855099 -2.795860
C 2.260047 2.081381 -1.593496
H 3.343580 2.047151 -1.780170
H 2.112463 2.605500 -0.643999
C 2.155321 -2.015868 -0.365770
H 2.751083 -2.170051 -1.277237
C 2.741479 -2.859901 0.764721
H 3.812247 -2.649192 0.882179
H 2.254773 -2.564722 1.707963
C 2.547944 -4.353825 0.528920
H 2.940471 -4.916249 1.385923
H 3.147377 -4.658077 -0.342780
C 1.090573 -4.709911 0.275716
H 0.985823 -5.786939 0.093879
H 0.498800 -4.483485 1.175854
C 0.539887 -3.912091 -0.896219
H -0.521563 -4.135389 -1.064808
H 1.070308 -4.196949 -1.817512
C 0.711173 -2.421349 -0.648794
H 0.112653 -2.144886 0.234342
H 0.331037 -1.857712 -1.518892
C -1.268185 -0.564430 2.619193

H -0.926868 -0.075474 3.544822
C -2.793550 -0.510138 2.573839
H -3.118099 -1.019036 1.653643
H -3.157735 0.521794 2.495868
C -3.403777 -1.204626 3.785071
H -3.120879 -0.654908 4.696245
H -4.499743 -1.168974 3.728986
C -2.926328 -2.646756 3.896869
H -3.319428 -3.219149 3.042397
H -3.333040 -3.119076 4.800683
C -1.405611 -2.731800 3.886858
H -1.005066 -2.264116 4.799362
H -1.080306 -3.780810 3.905931
C -0.828812 -2.023196 2.668489
H 0.266455 -2.098267 2.644843
H -1.202366 -2.524826 1.760901
C -1.117020 2.097552 1.495587
H -2.150584 2.081960 1.113716
C -0.320685 3.056555 0.621375
H 0.720536 3.063067 0.979366
H -0.298611 2.683106 -0.409986
C -0.893122 4.464887 0.669995
H -1.905542 4.450564 0.239218
H -0.294428 5.141027 0.044375
C -0.950802 4.977027 2.102659
H -1.405738 5.975741 2.138819
H 0.075697 5.088450 2.485906
C -1.714310 4.014151 3.001738
H -1.713910 4.375180 4.039046
H -2.767126 3.982912 2.682071
C -1.143767 2.600218 2.936620
H -1.740698 1.938513 3.575821
H -0.122510 2.595835 3.346119
C -2.756034 0.742280 -1.137180
C -4.024870 0.694032 -0.553292
C -2.432011 1.865939 -1.905626
C -4.922308 1.751072 -0.698616

H -4.328666 -0.175454 0.026064
C -3.325621 2.924104 -2.049795
H -1.464897 1.919339 -2.404870
C -4.575142 2.876291 -1.438717
H -5.903463 1.689910 -0.228502
H -3.042157 3.790386 -2.647122
H -5.275144 3.702505 -1.548523
C -3.229434 -2.672400 -1.701981
H -2.804488 -3.041710 -0.753104
H -4.124664 -2.098214 -1.418946
C -2.811781 -1.026031 -3.591023
H -3.731182 -0.482233 -3.338707
H -2.110074 -0.287604 -3.999908
C -2.238452 -1.730632 -2.377661
H -1.365745 -2.325392 -2.708605
H -3.055022 -1.727409 -4.405316
C -3.645024 -3.877003 -2.541688
H -4.343786 -4.527046 -1.999237
H -4.136060 -3.570631 -3.473268
H -2.770671 -4.483606 -2.816770

XI^c

E = -2457.94759064
Pd -1.376027 -0.907177 -0.700731
P 2.133144 -0.019681 0.185132
P -0.653331 0.531931 1.105468
C 1.095121 0.623229 1.388980
C 1.625348 1.068621 2.736121
H 1.046301 0.634132 3.564433
H 1.600078 2.161533 2.879451
H 2.662989 0.758518 2.914062
C 3.869122 0.486012 0.547297
H 4.040153 0.019718 1.529807
C 4.909749 -0.095090 -0.411104
H 4.793726 0.370551 -1.400640
H 4.760238 -1.172416 -0.553441
C 6.317815 0.166797 0.112857

H 6.455252 -0.395739 1.049282
H 7.059925 -0.223995 -0.595087
C 6.558939 1.646882 0.376757
H 6.539109 2.190431 -0.580349
H 7.560722 1.799356 0.798306
C 5.495049 2.229913 1.297502
H 5.660385 3.305268 1.440983
H 5.575434 1.766585 2.293075
C 4.097700 1.987776 0.740321
H 3.332073 2.416488 1.394085
H 4.011723 2.504505 -0.221268
C 1.645204 0.459103 -1.532907
H 0.541949 0.481677 -1.448475
C 1.990062 -0.520589 -2.654762
H 1.644489 -1.532499 -2.423655
H 3.082136 -0.579085 -2.781757
C 1.338212 -0.064999 -3.955696
H 1.577448 -0.770896 -4.761293
H 0.246068 -0.103462 -3.821741
C 1.750987 1.348121 -4.338482
H 2.828390 1.361607 -4.565635
H 1.236420 1.661203 -5.255852
C 1.468521 2.326270 -3.207651
H 0.382738 2.413914 -3.057752
H 1.827151 3.330939 -3.466252
C 2.115214 1.864943 -1.909161
H 3.205687 1.851287 -2.050964
H 1.903981 2.568242 -1.097370
C 2.238782 -1.886392 0.147208
H 2.844986 -2.186614 -0.719805
C 2.899216 -2.400201 1.427438
H 3.948052 -2.081279 1.469945
H 2.391046 -1.937713 2.289398
C 2.836671 -3.917628 1.548709
H 3.285048 -4.229873 2.500740
H 3.451465 -4.366273 0.753455
C 1.413200 -4.436280 1.428176

H 1.393876 -5.530629 1.505790
H 0.812973 -4.049276 2.265987
C 0.789178 -3.982006 0.118050
H -0.250402 -4.322978 0.041585
H 1.329457 -4.435035 -0.727100
C 0.832447 -2.465602 0.001072
H 0.219996 -2.038085 0.806133
H 0.399242 -2.159399 -0.971212
C -1.407142 -0.138776 2.671966
H -1.148511 0.559897 3.482756
C -2.928927 -0.215172 2.563552
H -3.171715 -0.933855 1.765855
H -3.358063 0.744312 2.248945
C -3.550401 -0.677522 3.875919
H -3.352920 0.076753 4.653433
H -4.641943 -0.741627 3.775905
C -2.979485 -2.018627 4.317301
H -3.287623 -2.791494 3.596254
H -3.397208 -2.315384 5.288297
C -1.457953 -1.982630 4.378331
H -1.138316 -1.296917 5.177986
H -1.061559 -2.973010 4.640280
C -0.869930 -1.513217 3.054109
H 0.227969 -1.504506 3.087035
H -1.160118 -2.229174 2.268298
C -1.376774 2.252433 1.046139
H -2.382647 2.103292 0.621741
C -0.578148 3.086012 0.052488
H 0.440792 3.213406 0.450391
H -0.480879 2.538665 -0.893295
C -1.216118 4.446955 -0.181410
H -2.200584 4.300996 -0.650511
H -0.613455 5.032496 -0.889176
C -1.380852 5.201757 1.130174
H -1.879293 6.165674 0.962439
H -0.385110 5.432927 1.540112
C -2.155869 4.373197 2.144990

H -2.237849 4.911377 3.098943
H -3.183638 4.227203 1.778914
C -1.519366 3.004395 2.367566
H -2.127522 2.436539 3.081617
H -0.528172 3.129662 2.828694
C -2.799612 0.324448 -1.315166
C -4.083929 0.334858 -0.763518
C -2.489277 1.302341 -2.266579
C -5.005522 1.322219 -1.109463
H -4.378427 -0.427891 -0.045547
C -3.408853 2.288948 -2.614259
H -1.510391 1.303583 -2.743664
C -4.670440 2.311613 -2.027627
H -5.995785 1.313870 -0.654837
H -3.134466 3.044584 -3.349998
H -5.389396 3.084147 -2.294018
C -1.186150 -2.965426 -2.907474
H -0.468312 -2.236719 -3.309957
H -0.599225 -3.652515 -2.278408
C -3.079800 -3.187138 -1.220599
H -2.479070 -3.713591 -0.462831
H -3.869969 -2.644047 -0.686821
H -3.580462 -3.965604 -1.821106
C -2.234306 -2.244127 -2.062119
H -2.893694 -1.696131 -2.747247
C -1.768231 -3.754824 -4.076767
H -0.982720 -4.249550 -4.663154
H -2.462702 -4.532457 -3.735896
H -2.323967 -3.092829 -4.753358

XI^d

E = -2457.94752497
Pd -1.397000 -0.666408 -0.856318
P 2.172492 -0.194347 0.115791
P -0.563230 0.414156 1.141172
C 1.186403 0.327522 1.417630
C 1.747565 0.511155 2.812463

H 1.135013 -0.003138 3.567817
H 1.807380 1.566100 3.127362
H 2.757595 0.097288 2.927397
C 3.942758 0.115419 0.530254
H 4.079870 -0.514032 1.423130
C 4.931625 -0.381730 -0.525282
H 4.845497 0.241875 -1.427033
H 4.700042 -1.408848 -0.832758
C 6.358733 -0.311678 0.007731
H 6.459153 -1.024978 0.840392
H 7.064383 -0.638332 -0.766861
C 6.713084 1.085226 0.498775
H 6.727605 1.775015 -0.359071
H 7.726403 1.094312 0.920225
C 5.702536 1.589290 1.520530
H 5.950111 2.612103 1.831785
H 5.753689 0.966534 2.427088
C 4.287123 1.545003 0.957767
H 3.561012 1.917788 1.686701
H 4.234681 2.215867 0.093884
C 1.720174 0.587720 -1.497855
H 0.622839 0.683308 -1.394015
C 1.981407 -0.220364 -2.769172
H 1.558685 -1.227081 -2.699308
H 3.064846 -0.340531 -2.923783
C 1.360247 0.490839 -3.966816
H 1.537948 -0.090482 -4.880612
H 0.269286 0.515900 -3.819977
C 1.882283 1.911126 -4.123607
H 2.955952 1.877524 -4.365885
H 1.388903 2.408306 -4.968460
C 1.685286 2.711067 -2.844505
H 0.610842 2.858243 -2.663004
H 2.122260 3.713142 -2.943368
C 2.298802 1.995089 -1.649411
H 3.384333 1.920186 -1.809116
H 2.146771 2.570942 -0.730941

C 2.135669 -2.033225 -0.218588
H 2.715588 -2.235784 -1.130760
C 2.755716 -2.794269 0.954240
H 3.825226 -2.563960 1.036034
H 2.282163 -2.441632 1.885121
C 2.580627 -4.302683 0.829671
H 3.003856 -4.796938 1.713696
H 3.161027 -4.660532 -0.034475
C 1.122644 -4.689072 0.642811
H 1.022263 -5.777018 0.541404
H 0.552262 -4.401168 1.539376
C 0.534838 -3.982344 -0.568357
H -0.526440 -4.230781 -0.688803
H 1.042113 -4.328259 -1.481905
C 0.689451 -2.474590 -0.435918
H 0.112901 -2.139879 0.436685
H 0.278394 -1.981434 -1.338346
C -1.370901 -0.438654 2.587757
H -1.065178 0.102398 3.496712
C -2.893564 -0.383609 2.478184
H -3.184392 -0.948311 1.578894
H -3.248192 0.642610 2.320561
C -3.555517 -0.998209 3.705168
H -3.306395 -0.392493 4.590328
H -4.648200 -0.963803 3.603027
C -3.089233 -2.431026 3.926499
H -3.450780 -3.055593 3.094981
H -3.532912 -2.844738 4.841588
C -1.569467 -2.519340 3.982251
H -1.203522 -1.994461 4.878045
H -1.250120 -3.565592 4.082171
C -0.939953 -1.892359 2.745023
H 0.155397 -1.971256 2.772679
H -1.278331 -2.451463 1.857694
C -1.156114 2.170449 1.362535
H -2.171051 2.162793 0.933996
C -0.301074 3.089983 0.500619

H 0.724505 3.082200 0.901621
H -0.244026 2.690964 -0.519751
C -0.840887 4.512106 0.489107
H -1.833789 4.510779 0.015035
H -0.198950 5.157245 -0.126310
C -0.949550 5.062955 1.904090
H -1.379059 6.073474 1.894353
H 0.060846 5.157904 2.331952
C -1.778984 4.142504 2.788382
H -1.820010 4.529850 3.815345
H -2.815483 4.127512 2.418121
C -1.240919 2.714631 2.786763
H -1.885885 2.085882 3.412059
H -0.241940 2.696710 3.247820
C -2.719135 0.751356 -1.261305
C -4.001453 0.775738 -0.705665
C -2.329845 1.836321 -2.054532
C -4.843660 1.870938 -0.892346
H -4.357305 -0.062315 -0.109656
C -3.170154 2.930857 -2.243166
H -1.351067 1.835221 -2.531907
C -4.429833 2.959594 -1.652532
H -5.833994 1.868925 -0.437790
H -2.835344 3.766272 -2.857620
H -5.086923 3.815553 -1.794764
C -1.394986 -2.364197 -3.351988
H -0.714815 -1.626449 -3.795603
H -0.778908 -3.140717 -2.876124
C -3.267217 -2.722089 -1.659418
H -2.656121 -3.389016 -1.027725
H -3.921838 -2.177593 -0.963424
C -2.372097 -1.718805 -2.379042
H -3.013490 -1.033254 -2.947483
C -4.139479 -3.579302 -2.573467
H -3.537504 -4.222524 -3.227366
H -4.807278 -4.231862 -1.996233
H -4.764782 -2.947264 -3.217921

H -1.912201 -2.855703 -4.192387

TS_{X→X'}^a

E = -2457.93279473

Pd 1.454093 0.099844 1.015795

P -2.156551 -0.645967 -0.368155

P 0.245194 1.240144 -0.658491

C -1.355432 0.653451 -1.156653

C -1.882109 1.049767 -2.526968

H -1.969797 2.137669 -2.648371

H -2.879831 0.641282 -2.730971

H -1.247110 0.695785 -3.355917

C -3.978964 -0.477016 -0.649543

H -4.096898 -0.699831 -1.720901

C -4.842972 -1.482506 0.110536

H -4.783734 -1.266870 1.186699

H -4.476251 -2.507525 -0.027057

C -6.297992 -1.377472 -0.332934

H -6.371317 -1.667781 -1.392227

H -6.913948 -2.091692 0.228673

C -6.830300 0.038442 -0.159356

H -6.857762 0.281401 0.914107

H -7.865534 0.104102 -0.518092

C -5.950278 1.054336 -0.875230

H -6.321054 2.072679 -0.701602

H -6.006591 0.884255 -1.961628

C -4.497430 0.946035 -0.429560

H -3.866075 1.667616 -0.958107

H -4.427086 1.200530 0.635567

C -1.790327 -0.746104 1.428579

H -0.687420 -0.619663 1.412409

C -2.078712 -2.066510 2.147737

H -1.697094 -2.928686 1.592637

H -3.162986 -2.212846 2.246192

C -1.445413 -2.036570 3.536456

H -1.655145 -2.977132 4.062081

H -0.353564 -1.980772 3.421271

C -1.924069 -0.849505 4.360415
H -2.995680 -0.972678 4.581906
H -1.407956 -0.827211 5.329008
C -1.721518 0.461979 3.615181
H -0.644466 0.656622 3.490226
H -2.126622 1.302168 4.193827
C -2.367487 0.411093 2.238465
H -3.451963 0.264467 2.357062
H -2.226519 1.352645 1.703993
C -1.758016 -2.350858 -1.000203
H -2.400307 -3.074191 -0.473654
C -2.035702 -2.442733 -2.502505
H -3.100235 -2.276586 -2.712003
H -1.486101 -1.635273 -3.007440
C -1.603899 -3.782778 -3.084830
H -1.794848 -3.795683 -4.165743
H -2.221974 -4.582852 -2.649025
C -0.139056 -4.068182 -2.792951
H 0.151672 -5.043996 -3.202837
H 0.486242 -3.315796 -3.297831
C 0.127846 -4.013708 -1.297456
H 1.190351 -4.194787 -1.091359
H -0.428438 -4.823307 -0.799450
C -0.290364 -2.673324 -0.707628
H 0.333487 -1.872808 -1.125572
H -0.087091 -2.657609 0.370855
C 1.240574 1.306113 -2.237596
H 0.642161 1.853937 -2.982320
C 2.565386 2.041744 -2.050111
H 3.111151 1.567562 -1.221867
H 2.390171 3.085091 -1.760716
C 3.420793 2.008460 -3.311368
H 2.920456 2.587752 -4.103579
H 4.380222 2.507977 -3.120980
C 3.648501 0.586527 -3.800775
H 4.221886 0.032311 -3.043308
H 4.250049 0.586905 -4.719585

C 2.321049 -0.120868 -4.027228
H 1.772152 0.380847 -4.839907
H 2.486258 -1.156751 -4.353934
C 1.478163 -0.106679 -2.760205
H 0.513607 -0.602076 -2.931333
H 1.995487 -0.680965 -1.976914
C 0.163368 3.061549 -0.230982
H 1.218330 3.296850 -0.016569
C -0.613047 3.304621 1.055539
H -1.672703 3.074431 0.866345
H -0.265733 2.613884 1.838011
C -0.491407 4.750690 1.519246
H 0.558288 4.956449 1.779116
H -1.075297 4.906750 2.436459
C -0.940464 5.718330 0.432517
H -0.804059 6.757375 0.760443
H -2.019936 5.585920 0.259708
C -0.197577 5.466989 -0.872389
H -0.564548 6.140652 -1.658377
H 0.869263 5.701732 -0.734427
C -0.331510 4.013790 -1.315840
H 0.208515 3.856988 -2.258206
H -1.391368 3.799499 -1.516284
C 3.241997 -0.780784 0.644942
C 3.229060 -2.031537 0.015234
C 4.377671 0.021465 0.476425
C 4.284577 -2.444394 -0.791956
H 2.375478 -2.691257 0.148348
C 5.437461 -0.393898 -0.324419
H 4.431367 0.992298 0.965684
C 5.397577 -1.628156 -0.967029
H 4.235504 -3.415336 -1.284053
H 6.301670 0.257678 -0.448466
H 6.227024 -1.951407 -1.592966
C 2.419455 -2.316942 2.872633
H 1.627559 -2.781644 2.272435
H 3.366496 -2.798420 2.600357

H 2.208543 -2.558463 3.925048
C 3.600290 -0.111673 3.381514
H 4.562710 -0.554559 3.090603
H 3.632136 0.934422 3.048786
C 2.471635 -0.821206 2.657799
H 1.518614 -0.385983 3.049786
C 3.459965 -0.139983 4.898718
H 3.478713 -1.163817 5.291892
H 4.277885 0.409833 5.380355
H 2.515738 0.320461 5.219455

$TS_{X \rightarrow XI}^b$

E = -2457.93340010

Pd -1.455773 -0.124741 -1.097446
P 2.110411 -0.511139 0.607277
P -0.232321 1.426518 0.197438
C 1.340967 0.997077 0.901136
C 1.851493 1.799873 2.087590
H 1.946465 2.870284 1.863040
H 2.843110 1.471954 2.424249
H 1.202616 1.726609 2.976327
C 3.932275 -0.309144 0.860663
H 4.030554 -0.175203 1.948763
C 4.771963 -1.529530 0.484684
H 4.731568 -1.671166 -0.604691
H 4.370312 -2.445041 0.937301
C 6.224263 -1.325541 0.901889
H 6.275183 -1.258545 1.999469
H 6.823478 -2.199541 0.615574
C 6.804374 -0.057302 0.290774
H 6.854257 -0.177464 -0.802441
H 7.836182 0.094300 0.632988
C 5.948113 1.159079 0.617046
H 6.353527 2.054973 0.129537
H 5.985634 1.351415 1.700552
C 4.498073 0.949562 0.199734
H 3.884068 1.820902 0.449314

H 4.447264 0.842830 -0.891521
C 1.761755 -1.191298 -1.059444
H 0.661505 -1.047410 -1.102279
C 2.024440 -2.680117 -1.298068
H 1.647297 -3.303819 -0.482382
H 3.104776 -2.868087 -1.362502
C 1.359320 -3.094472 -2.606707
H 1.523331 -4.163832 -2.792303
H 0.273490 -2.956916 -2.499803
C 1.856896 -2.268458 -3.784745
H 2.917711 -2.502610 -3.964760
H 1.318741 -2.549507 -4.699831
C 1.716543 -0.775403 -3.521571
H 0.649646 -0.505430 -3.475514
H 2.149946 -0.195900 -4.346913
C 2.367702 -0.382808 -2.203019
H 3.448120 -0.587128 -2.257618
H 2.251462 0.686534 -2.014086
C 1.641409 -1.895282 1.760494
H 2.274623 -2.767897 1.535454
C 1.878279 -1.473759 3.212855
H 2.943980 -1.280407 3.391165
H 1.353932 -0.524311 3.389958
C 1.372337 -2.513170 4.204380
H 1.538649 -2.158160 5.229727
H 1.959941 -3.437728 4.094618
C -0.098005 -2.823863 3.972990
H -0.449898 -3.578784 4.687804
H -0.694407 -1.916209 4.153632
C -0.325199 -3.292055 2.544499
H -1.390494 -3.490366 2.371805
H 0.201081 -4.246842 2.388397
C 0.172791 -2.265702 1.535432
H -0.436439 -1.355414 1.603462
H 0.013824 -2.636415 0.515078
C -1.247281 2.013158 1.652517
H -0.633214 2.740527 2.206361

C -2.542138 2.705761 1.235028
H -3.106413 2.024832 0.582447
H -2.325506 3.606005 0.646592
C -3.394394 3.087324 2.441216
H -2.869463 3.862413 3.021822
H -4.335499 3.540164 2.101166
C -3.673340 1.893686 3.342808
H -4.274353 1.156333 2.791099
H -4.267106 2.201556 4.213849
C -2.373660 1.236677 3.781705
H -1.800093 1.939017 4.407158
H -2.577504 0.355571 4.405550
C -1.539974 0.834626 2.574807
H -0.595371 0.377208 2.895092
H -2.083499 0.069616 1.998657
C -0.088751 3.011173 -0.787982
H -1.136022 3.202781 -1.072961
C 0.689605 2.797396 -2.079167
H 1.740736 2.601714 -1.817793
H 0.313516 1.903557 -2.599151
C 0.620426 4.019512 -2.985298
H -0.422103 4.170827 -3.304547
H 1.204445 3.849155 -3.899872
C 1.113529 5.266854 -2.264808
H 1.016668 6.149752 -2.910427
H 2.187830 5.154509 -2.050577
C 0.368634 5.478854 -0.953575
H 0.766479 6.355066 -0.424212
H -0.688772 5.698364 -1.167944
C 0.447512 4.242096 -0.063994
H -0.094126 4.416577 0.874742
H 1.499228 4.062226 0.202542
C -3.230120 -0.873554 -0.476525
C -3.206947 -1.945495 0.424440
C -4.346839 -0.029049 -0.456211
C -4.227229 -2.128114 1.352715
H -2.375671 -2.645296 0.407087

C -5.372613 -0.216784 0.465613
H -4.410021 0.800957 -1.157452
C -5.316652 -1.262556 1.382065
H -4.170412 -2.959328 2.055181
H -6.220504 0.467270 0.469470
H -6.117639 -1.406859 2.104441
C -2.610220 -2.869160 -2.376337
H -1.850573 -3.216050 -1.661580
H -3.577515 -3.174185 -1.954600
C -3.645321 -0.725318 -3.294576
H -4.639952 -1.007523 -2.927918
H -3.577423 0.368780 -3.277769
C -2.546445 -1.356184 -2.469653
H -1.571992 -1.100436 -2.955609
C -2.391483 -3.570648 -3.711664
H -2.393385 -4.660876 -3.589780
H -3.176682 -3.320635 -4.434994
H -1.429702 -3.287398 -4.160937
H -3.575728 -1.036120 -4.347348

TS_{x→xf}

E = -2457.92868152

Pd -1.430172 -0.586064 0.772254
P 2.272873 0.510432 0.056163
P -0.443431 0.043059 -1.252459
C 1.246431 0.588858 -1.312200
C 1.678512 1.379132 -2.530720
H 1.197794 2.369069 -2.605320
H 1.431629 0.845156 -3.463264
H 2.757608 1.570243 -2.566224
C 4.027561 0.557258 -0.524066
H 4.099455 1.565511 -0.960524
C 5.079434 0.477991 0.581395
H 5.071493 -0.532638 1.015828
H 4.851967 1.175038 1.397676
C 6.465386 0.771799 0.016172
H 6.492077 1.817215 -0.327695

H 7.219968 0.686620 0.808787
C 6.808041 -0.148871 -1.147437
H 6.898701 -1.180505 -0.773850
H 7.787577 0.115645 -1.566008
C 5.734208 -0.108159 -2.226914
H 5.975378 -0.812355 -3.033414
H 5.710118 0.893078 -2.684536
C 4.362577 -0.428668 -1.646641
H 3.587183 -0.413577 -2.419540
H 4.380241 -1.449825 -1.249696
C 1.955063 -0.985400 1.083667
H 0.844579 -1.013723 1.091504
C 2.426594 -0.969750 2.538423
H 2.067524 -0.081411 3.068995
H 3.524928 -0.932629 2.573889
C 1.936388 -2.221414 3.264332
H 2.309870 -2.220006 4.296513
H 0.840324 -2.180181 3.332127
C 2.334144 -3.508079 2.555475
H 3.428158 -3.625137 2.598891
H 1.908731 -4.373621 3.079609
C 1.898807 -3.492661 1.097162
H 0.800191 -3.486202 1.029936
H 2.239012 -4.400721 0.583041
C 2.441892 -2.258437 0.396160
H 3.540657 -2.286117 0.444152
H 2.165862 -2.240453 -0.662117
C 2.168445 1.933748 1.253992
H 2.874881 1.753588 2.078869
C 2.543526 3.238115 0.547665
H 3.603850 3.226794 0.263172
H 1.966925 3.307925 -0.388453
C 2.266169 4.465220 1.407682
H 2.508254 5.374458 0.842221
H 2.938477 4.452703 2.279452
C 0.825214 4.499679 1.893024
H 0.651453 5.387277 2.514834

H 0.150921 4.584478 1.026884
C 0.493743 3.230012 2.661496
H -0.554205 3.237032 2.990042
H 1.107603 3.187301 3.574824
C 0.746808 1.994240 1.811237
H 0.043848 1.983183 0.970581
H 0.518478 1.089022 2.382591
C -1.393690 1.468398 -2.013442
H -0.898115 1.673956 -2.976527
C -2.859073 1.152475 -2.302886
H -3.355478 0.849484 -1.370806
H -2.940087 0.308199 -2.997190
C -3.586013 2.353740 -2.898979
H -3.164470 2.577497 -3.891928
H -4.643000 2.101485 -3.056871
C -3.462082 3.586373 -2.016565
H -3.970677 3.391260 -1.061480
H -3.969319 4.444414 -2.477635
C -2.000778 3.908448 -1.744080
H -1.505917 4.189565 -2.687064
H -1.912181 4.776322 -1.075609
C -1.282771 2.710497 -1.138583
H -0.225575 2.945038 -0.960525
H -1.726878 2.476425 -0.158104
C -0.689028 -1.234841 -2.610525
H -0.935669 -0.672877 -3.527229
C -1.863893 -2.154019 -2.269407
H -1.606947 -2.698980 -1.346092
H -2.759736 -1.574271 -2.020079
C -2.147956 -3.140118 -3.395041
H -2.476658 -2.583731 -4.286708
H -2.979999 -3.801836 -3.119159
C -0.910978 -3.958027 -3.740670
H -1.112983 -4.627038 -4.587786
H -0.661374 -4.605606 -2.885617
C 0.281224 -3.059121 -4.041375
H 1.177072 -3.664393 -4.236005

H 0.084582 -2.489299 -4.962719
C 0.541057 -2.084565 -2.898696
H 1.414474 -1.453760 -3.105246
H 0.782043 -2.661602 -1.993976
C -3.376004 -0.187768 1.122329
C -3.702544 1.139456 1.440388
C -4.332090 -0.960693 0.443174
C -4.914660 1.689755 1.035081
H -2.988523 1.757471 1.984821
C -5.539535 -0.403002 0.039625
H -4.113334 -2.000473 0.202550
C -5.838193 0.928236 0.324047
H -5.134970 2.730268 1.272124
H -6.253781 -1.015112 -0.510144
H -6.782795 1.363027 0.004167
C -2.099931 -2.679112 2.496010
H -2.785729 -3.122972 1.761965
H -1.090862 -2.812176 2.078078
C -1.590498 -0.409267 3.623993
H -0.516622 -0.493022 3.416892
H -1.850099 0.655919 3.602575
H -1.752159 -0.756911 4.656651
C -2.439290 -1.198657 2.643004
H -3.470318 -1.149384 3.001392
C -2.198090 -3.453571 3.806672
H -2.041005 -4.527149 3.645300
H -1.447058 -3.116070 4.532222
H -3.185821 -3.324698 4.268865

TS_{X→XI^d}

E = -2457.92889513
Pd 1.429423 0.001626 1.009237
P -2.246107 -0.401385 -0.320076
P 0.458389 0.876415 -0.928228
C -1.217388 0.482016 -1.365411
C -1.628502 0.716316 -2.804938
H -1.137489 0.033600 -3.519030

H -1.373476 1.738172 -3.130927
H -2.705481 0.602607 -2.976630
C -3.997254 -0.066266 -0.809231
H -4.040710 -0.505630 -1.817757
C -5.056882 -0.780037 0.028617
H -5.081444 -0.336742 1.035140
H -4.813431 -1.842395 0.156114
C -6.429986 -0.633384 -0.619213
H -6.423666 -1.164205 -1.583643
H -7.192019 -1.124174 -0.000080
C -6.791800 0.827538 -0.851683
H -6.915524 1.325595 0.122308
H -7.760307 0.902659 -1.362592
C -5.710400 1.552582 -1.642319
H -5.967305 2.613243 -1.758384
H -5.653977 1.132749 -2.658732
C -4.352050 1.414604 -0.966404
H -3.571413 1.942096 -1.524568
H -4.400132 1.891525 0.018988
C -1.964498 0.001326 1.455969
H -0.855259 0.030933 1.504816
C -2.445683 -1.013070 2.494520
H -2.061103 -2.016555 2.284025
H -3.542306 -1.085753 2.463760
C -2.003924 -0.590337 3.894150
H -2.388133 -1.304509 4.633892
H -0.907918 -0.648030 3.949069
C -2.435883 0.826053 4.245091
H -3.533735 0.865244 4.320543
H -2.047065 1.105291 5.232802
C -1.979976 1.818495 3.185060
H -0.880830 1.871603 3.164049
H -2.338251 2.828578 3.421601
C -2.478085 1.393833 1.813480
H -3.577661 1.368047 1.835745
H -2.188159 2.109457 1.038272
C -2.118141 -2.259059 -0.403981

H -2.826948 -2.694776 0.316720
C -2.478761 -2.738181 -1.811416
H -3.539997 -2.548051 -2.018409
H -1.903900 -2.146848 -2.541773
C -2.185108 -4.219153 -2.014584
H -2.420108 -4.503921 -3.048373
H -2.853143 -4.810385 -1.369328
C -0.741376 -4.557242 -1.677175
H -0.553253 -5.628333 -1.825716
H -0.071243 -4.021035 -2.366648
C -0.420632 -4.148017 -0.247804
H 0.629771 -4.361182 -0.007495
H -1.028630 -4.749239 0.446266
C -0.695479 -2.668007 -0.024249
H 0.006474 -2.074739 -0.620777
H -0.482041 -2.397880 1.014894
C 1.444028 0.348576 -2.433508
H 0.952659 0.832980 -3.293354
C 2.901051 0.805378 -2.412834
H 3.389835 0.418205 -1.508371
H 2.959648 1.898932 -2.364384
C 3.660372 0.324271 -3.645046
H 3.246343 0.812880 -4.541455
H 4.710386 0.637698 -3.573995
C 3.568252 -1.184426 -3.813220
H 4.068196 -1.667225 -2.961171
H 4.100461 -1.505988 -4.718449
C 2.115368 -1.632674 -3.855680
H 1.631228 -1.219625 -4.754627
H 2.048460 -2.726347 -3.941154
C 1.363250 -1.161153 -2.619286
H 0.311921 -1.472078 -2.667444
H 1.796165 -1.636967 -1.725083
C 0.667295 2.738493 -1.078202
H 0.922589 2.938929 -2.132667
C 1.822132 3.218033 -0.196278
H 1.555149 3.004971 0.851874

H 2.730973 2.635360 -0.384521
C 2.080753 4.708022 -0.377120
H 2.418610 4.891881 -1.408988
H 2.898833 5.034311 0.279029
C 0.824754 5.525447 -0.106284
H 1.008702 6.591877 -0.292969
H 0.564757 5.436671 0.960114
C -0.349493 5.031321 -0.941382
H -1.258868 5.595748 -0.693878
H -0.145089 5.222504 -2.006265
C -0.583392 3.538877 -0.740465
H -1.442715 3.189523 -1.325932
H -0.834871 3.360629 0.315481
C 3.383201 -0.496104 1.037716
C 3.744186 -1.688613 0.391752
C 4.319377 0.550084 1.069384
C 4.971860 -1.803252 -0.253468
H 3.045728 -2.525390 0.369168
C 5.542263 0.428834 0.420021
H 4.073664 1.479103 1.582591
C 5.876112 -0.744641 -0.253574
H 5.219717 -2.730493 -0.769400
H 6.240947 1.264705 0.435437
H 6.832942 -0.835861 -0.763277
C 2.069683 0.419133 3.700635
H 2.710867 1.277936 3.469048
H 1.028397 0.744538 3.579904
C 1.561325 -2.019904 3.016967
H 0.507878 -1.797607 2.795970
H 1.869306 -2.775033 2.280964
C 2.419498 -0.775687 2.827805
H 3.445373 -1.061525 3.072281
C 1.659361 -2.618513 4.416197
H 2.702723 -2.837096 4.678827
H 1.262726 -1.935045 5.177491
H 1.092769 -3.555152 4.487986
H 2.219161 0.185718 4.767099

XI^{a,d}

E = -2458.00107712

Pd 1.564278 -0.052048 -0.564454

P -2.287377 0.235947 -0.305002

P 0.296685 0.365886 1.320639

C -1.462231 0.557394 1.168743

C -2.223320 1.335919 2.227686

H -2.187446 0.862372 3.219014

H -3.288073 1.446864 1.983683

H -1.847006 2.364142 2.360018

C -4.046706 -0.200315 0.066395

H -4.500132 0.748533 0.391788

C -4.837117 -0.687753 -1.147746

H -4.423526 -1.650944 -1.479350

H -4.736997 0.004961 -1.992914

C -6.306915 -0.877787 -0.790701

H -6.742025 0.099604 -0.531442

H -6.861603 -1.243142 -1.664712

C -6.473127 -1.831983 0.384113

H -6.138133 -2.835678 0.080030

H -7.533214 -1.927319 0.652421

C -5.655236 -1.379396 1.586382

H -5.749151 -2.101631 2.407556

H -6.058456 -0.426612 1.963233

C -4.187539 -1.189649 1.224917

H -3.609157 -0.848422 2.089456

H -3.758524 -2.156512 0.931511

C -1.488795 -1.084067 -1.285964

H -0.426831 -0.751087 -1.197540

C -1.796443 -1.204899 -2.778560

H -1.825151 -0.232691 -3.280128

H -2.784292 -1.663308 -2.928156

C -0.727000 -2.083970 -3.423658

H -0.915738 -2.185322 -4.500319

H 0.243223 -1.575418 -3.315645

C -0.639523 -3.455970 -2.767386

H -1.558396 -4.020880 -2.989223

H 0.189857 -4.030445 -3.203227
C -0.472357 -3.346422 -1.258363
H 0.500120 -2.883821 -1.028483
H -0.472476 -4.341856 -0.795216
C -1.550770 -2.466152 -0.645689
H -2.541851 -2.913244 -0.822831
H -1.418441 -2.387955 0.435076
C -2.420019 1.662722 -1.495935
H -3.047624 1.347822 -2.344580
C -3.073991 2.866657 -0.814515
H -4.100176 2.628986 -0.505563
H -2.514163 3.092448 0.105229
C -3.082125 4.097876 -1.711626
H -3.538828 4.942363 -1.179243
H -3.717382 3.902199 -2.589311
C -1.678970 4.452974 -2.179033
H -1.703146 5.331982 -2.836114
H -1.066202 4.729237 -1.307090
C -1.035476 3.270888 -2.886931
H -0.008428 3.515836 -3.188531
H -1.590344 3.058614 -3.814334
C -1.024377 2.030266 -2.004623
H -0.377140 2.199612 -1.136012
H -0.562983 1.192922 -2.541237
C 0.915096 1.973358 2.053991
H 0.335676 2.182834 2.966984
C 2.395456 1.883383 2.421585
H 2.948227 1.561752 1.523546
H 2.559992 1.112209 3.183927
C 2.945824 3.213254 2.923967
H 2.459872 3.469817 3.878401
H 4.018316 3.114970 3.140011
C 2.704094 4.336501 1.926976
H 3.266490 4.123919 1.004552
H 3.085852 5.289460 2.316875
C 1.224576 4.444366 1.589190
H 0.665780 4.739256 2.491104

H 1.053707 5.234651 0.844993
C 0.690569 3.116858 1.070975
H -0.377340 3.194517 0.829514
H 1.208849 2.858500 0.132674
C 0.713575 -0.819254 2.712192
H 1.815335 -0.811306 2.693020
C 0.280147 -2.239406 2.378566
H -0.820496 -2.273546 2.374282
H 0.615339 -2.496460 1.364538
C 0.810440 -3.244138 3.392486
H 1.909764 -3.266213 3.333468
H 0.464990 -4.256456 3.141926
C 0.389606 -2.873340 4.807837
H 0.813640 -3.578225 5.535361
H -0.704931 -2.962070 4.890049
C 0.796320 -1.445747 5.147041
H 0.451312 -1.177788 6.154823
H 1.895159 -1.377296 5.165932
C 0.256889 -0.453165 4.121557
H 0.570279 0.564614 4.386421
H -0.841896 -0.466284 4.155982
C 3.475163 -0.707144 -1.668987
C 2.681360 0.153165 -2.465364
C 4.446688 -0.112010 -0.829903
C 2.842629 1.554103 -2.380422
H 2.039894 -0.267356 -3.238847
C 4.642901 1.261115 -0.809463
H 5.082795 -0.752523 -0.221722
C 3.833685 2.102408 -1.578110
H 2.216989 2.196988 -2.996860
H 5.418918 1.684368 -0.174378
H 3.974503 3.180882 -1.545432
C 4.622513 -2.622310 -2.775897
H 4.633557 -2.048946 -3.710238
H 5.574927 -2.437087 -2.261504
H 4.577774 -3.686564 -3.035253
C 3.392026 -2.989767 -0.577598

H 4.320767 -2.823429 -0.012458
H 2.589243 -2.551576 0.033684
C 3.447175 -2.207196 -1.892152
H 2.515648 -2.427790 -2.438494
C 3.164427 -4.481947 -0.746334
H 4.011178 -4.979347 -1.234734
H 3.017611 -4.968337 0.225560
H 2.270985 -4.682169 -1.353032

$\chi^{b,c}$

E = -2458.00039181

Pd 1.616842 -0.217359 -0.227556
P -2.256334 -0.054412 -0.496682
P 0.148154 1.015645 1.057756
C -1.586073 1.003787 0.680877
C -2.460533 2.158378 1.139187
H -2.547075 2.228574 2.232846
H -3.487777 2.083717 0.759010
H -2.093971 3.138574 0.791612
C -4.039828 -0.348270 -0.097786
H -4.530367 0.609745 -0.328540
C -4.709791 -1.416952 -0.960715
H -4.262696 -2.394095 -0.729601
H -4.533946 -1.234806 -2.028518
C -6.205447 -1.479365 -0.672001
H -6.668522 -0.526212 -0.970167
H -6.674446 -2.258798 -1.286476
C -6.473548 -1.730978 0.805491
H -6.104464 -2.733862 1.070207
H -7.553274 -1.736108 1.003042
C -5.774443 -0.698447 1.679559
H -5.938504 -0.921234 2.741742
H -6.218620 0.292614 1.498109
C -4.280795 -0.634485 1.385622
H -3.790095 0.123663 2.004223
H -3.816993 -1.593675 1.650836
C -1.356335 -1.642123 -0.630196

H -0.309109 -1.256803 -0.642124
C -1.541147 -2.494517 -1.886461
H -1.526822 -1.897298 -2.803203
H -2.514243 -3.004548 -1.860918
C -0.427409 -3.537113 -1.936434
H -0.530403 -4.160622 -2.834102
H 0.533106 -3.007305 -2.025599
C -0.401383 -4.406212 -0.685693
H -1.307233 -5.032167 -0.666037
H 0.451029 -5.098234 -0.723217
C -0.349594 -3.565409 0.582644
H 0.608952 -3.025699 0.632887
H -0.401934 -4.206661 1.472225
C -1.466198 -2.531847 0.603437
H -2.441719 -3.043322 0.605394
H -1.415983 -1.926287 1.510300
C -2.286836 0.591484 -2.243882
H -2.838659 -0.127881 -2.869563
C -2.997182 1.945685 -2.299650
H -4.044132 1.850283 -1.983357
H -2.513072 2.620815 -1.578867
C -2.935617 2.567678 -3.688995
H -3.435246 3.545143 -3.681075
H -3.497544 1.935695 -4.393963
C -1.499613 2.702450 -4.172918
H -1.472613 3.134276 -5.181779
H -0.961077 3.403402 -3.516609
C -0.795673 1.354701 -4.146414
H 0.251578 1.461992 -4.458622
H -1.271345 0.682799 -4.878091
C -0.853079 0.722559 -2.762869
H -0.285709 1.334561 -2.051615
H -0.341763 -0.246912 -2.772422
C 0.680741 2.805308 0.929420
H 0.013786 3.410965 1.563065
C 2.118306 2.993806 1.411694
H 2.760558 2.302400 0.841635

H 2.213252 2.711016 2.467309
C 2.602628 4.426959 1.225771
H 2.020493 5.094833 1.879974
H 3.648921 4.512419 1.549004
C 2.451317 4.888570 -0.215962
H 3.105731 4.278111 -0.857282
H 2.783068 5.929553 -0.326386
C 1.012600 4.727473 -0.684490
H 0.362757 5.399316 -0.102242
H 0.911735 5.030936 -1.735800
C 0.544559 3.290109 -0.509468
H -0.494915 3.176285 -0.842536
H 1.154892 2.628343 -1.146227
C 0.421861 0.713303 2.888283
H 1.519811 0.762618 2.968392
C 0.014261 -0.700736 3.276462
H -1.079036 -0.786022 3.173868
H 0.461141 -1.416701 2.572480
C 0.413290 -1.033856 4.707894
H 1.511734 -1.034380 4.782823
H 0.083352 -2.048816 4.968029
C -0.156225 -0.020429 5.690599
H 0.172193 -0.246424 6.713842
H -1.254562 -0.099986 5.691314
C 0.236398 1.398470 5.303778
H -0.209426 2.123471 5.998095
H 1.327987 1.509809 5.396212
C -0.174577 1.718727 3.869703
H 0.126406 2.742929 3.615286
H -1.270787 1.682904 3.797013
C 3.532920 -1.242280 -0.838568
C 2.838150 -0.839890 -2.004847
C 4.435748 -0.313317 -0.265128
C 3.058675 0.435225 -2.567021
H 2.234443 -1.565888 -2.548579
C 4.684897 0.915293 -0.859618
H 4.982219 -0.594039 0.633078

C 3.996632 1.295505 -2.015483
H 2.514402 0.718151 -3.466155
H 5.409466 1.592082 -0.410573
H 4.185544 2.264274 -2.473366
C 4.647222 -3.470144 -0.995885
H 4.642239 -3.291472 -2.080037
H 5.592332 -3.043794 -0.626642
C 3.436494 -2.810936 1.144594
H 4.400140 -2.550593 1.602181
H 2.674565 -2.136747 1.556322
C 3.484882 -2.684779 -0.374338
H 2.551528 -3.109736 -0.774095
C 4.608439 -4.964469 -0.727818
H 5.414245 -5.483592 -1.260116
H 4.720779 -5.193354 0.338535
H 3.656986 -5.401528 -1.060500
H 3.192518 -3.834142 1.451353

XII^a

E = -2457.94857094
Pd 1.602734 -0.682871 0.888811
P -2.327017 -0.076959 -0.021692
P 0.577265 0.281149 -1.037572
C -1.180198 0.379381 -1.210265
C -1.726882 0.808560 -2.560071
H -1.340519 0.186173 -3.384268
H -1.476545 1.852198 -2.808359
H -2.820415 0.735880 -2.623781
C -3.792974 1.055637 -0.121011
H -4.286427 0.749828 -1.056804
C -4.820739 0.898413 0.999009
H -4.373605 1.241500 1.942528
H -5.097926 -0.153552 1.143446
C -6.057620 1.742373 0.715005
H -6.545505 1.371527 -0.199456
H -6.786523 1.624321 1.527169
C -5.689881 3.208662 0.535461

H -5.300195 3.598662 1.488343
H -6.582623 3.802049 0.299861
C -4.631737 3.383803 -0.544851
H -4.339844 4.438335 -0.629686
H -5.059183 3.101165 -1.519415
C -3.401000 2.525730 -0.278996
H -2.672479 2.639523 -1.086160
H -2.898706 2.871408 0.634648
C -1.664398 -0.144809 1.692925
H -0.738919 -0.729856 1.547554
C -2.519670 -0.880469 2.731013
H -2.865900 -1.851906 2.365287
H -3.419786 -0.296639 2.957397
C -1.726430 -1.065191 4.020371
H -2.334633 -1.605890 4.756956
H -0.846654 -1.694506 3.814834
C -1.263709 0.271413 4.579845
H -2.145090 0.862370 4.874280
H -0.670865 0.121013 5.491086
C -0.458186 1.038633 3.543753
H 0.469850 0.489182 3.323756
H -0.158598 2.019504 3.934195
C -1.228733 1.212415 2.241175
H -2.117067 1.836751 2.421098
H -0.613915 1.727852 1.496321
C -3.070913 -1.770021 -0.271188
H -3.909298 -1.886402 0.433331
C -3.597170 -1.919822 -1.700447
H -4.393177 -1.191500 -1.902677
H -2.777210 -1.690876 -2.396357
C -4.101727 -3.329279 -1.980935
H -4.462112 -3.394722 -3.015629
H -4.966487 -3.544273 -1.334519
C -3.013216 -4.360066 -1.725304
H -3.386539 -5.373698 -1.919491
H -2.183383 -4.190880 -2.428958
C -2.493827 -4.245549 -0.301095

H -1.678367 -4.959881 -0.127450
H -3.298770 -4.516863 0.399432
C -2.010551 -2.835369 0.011892
H -1.131817 -2.598574 -0.601214
H -1.675008 -2.790423 1.053565
C 1.205729 -0.732994 -2.474850
H 0.962026 -0.189547 -3.399992
C 2.722377 -0.895932 -2.383526
H 2.949376 -1.424673 -1.443013
H 3.220924 0.078620 -2.301392
C 3.271546 -1.691780 -3.559991
H 3.100075 -1.129368 -4.491046
H 4.358975 -1.809614 -3.463719
C 2.595804 -3.052645 -3.661903
H 2.859674 -3.649233 -2.774691
H 2.970397 -3.607399 -4.532198
C 1.081214 -2.910957 -3.731420
H 0.808122 -2.407049 -4.671390
H 0.602631 -3.899667 -3.759250
C 0.542046 -2.098767 -2.560890
H -0.545990 -1.979592 -2.641228
H 0.732817 -2.643416 -1.621236
C 1.305214 1.963715 -1.459199
H 2.314668 1.911705 -1.023710
C 0.551069 3.058175 -0.711742
H -0.489098 3.089373 -1.069250
H 0.506507 2.806156 0.353107
C 1.205035 4.421984 -0.883991
H 2.194833 4.400762 -0.404334
H 0.618060 5.189208 -0.360778
C 1.366093 4.780020 -2.353268
H 1.869685 5.749771 -2.462020
H 0.371298 4.891129 -2.813157
C 2.136901 3.693558 -3.087005
H 2.241665 3.943521 -4.151422
H 3.156426 3.637812 -2.675464
C 1.472059 2.328983 -2.935820

H 2.080886 1.580472 -3.455105
H 0.496966 2.342598 -3.442257
C 2.933812 0.797255 1.166344
C 4.193719 0.695699 0.559186
C 2.646026 1.988332 1.842239
C 5.106867 1.747364 0.591632
H 4.474100 -0.222956 0.043364
C 3.559170 3.040765 1.885894
H 1.687123 2.113794 2.340216
C 4.792044 2.931384 1.251247
H 6.073135 1.637655 0.099560
H 3.299568 3.956011 2.417788
H 5.502886 3.755422 1.278150
C 1.355100 -2.847714 1.818899
H 0.761321 -2.411971 0.920101
H 1.780516 -3.759100 1.379522
H 0.555054 -3.116570 2.518968
C 3.831298 -2.293368 2.229879
H 4.047116 -2.572979 1.186236
H 4.455729 -1.414979 2.436609
C 2.380237 -1.893048 2.352303
H 2.141160 -1.510288 3.351497
C 4.234849 -3.435133 3.156161
H 3.650948 -4.343647 2.955007
H 5.295758 -3.692559 3.043420
H 4.067532 -3.165053 4.207078

XII^c

E = -2457.94839703
Pd -1.627953 0.945878 0.666373
P 2.304799 -0.076840 -0.026580
P -0.595720 -0.346585 -1.066701
C 1.151762 -0.602309 -1.179013
C 1.691146 -1.246777 -2.443163
H 1.358880 -0.723290 -3.354690
H 1.380322 -2.298195 -2.551539
H 2.788038 -1.249347 -2.489184

C 3.692677 -1.303346 0.056013
H 4.223347 -1.152658 -0.897130
C 4.706935 -1.071469 1.175587
H 4.219255 -1.261021 2.142061
H 5.052979 -0.030183 1.193776
C 5.888088 -2.024674 1.034438
H 6.418019 -1.805828 0.094726
H 6.607495 -1.852504 1.845398
C 5.424587 -3.474735 1.030012
H 4.991193 -3.714396 2.013187
H 6.279160 -4.150100 0.895153
C 4.377195 -3.716251 -0.047963
H 4.015716 -4.751687 -0.007514
H 4.840300 -3.587974 -1.038637
C 3.203686 -2.752584 0.076307
H 2.481493 -2.921473 -0.726800
H 2.666157 -2.944046 1.014733
C 1.608388 0.238835 1.642935
H 0.722409 0.851286 1.394600
C 2.477096 1.047587 2.612189
H 2.915115 1.931192 2.138531
H 3.317238 0.434804 2.961249
C 1.643368 1.465988 3.817588
H 2.254541 2.061164 4.508266
H 0.827597 2.120835 3.474575
C 1.053320 0.257301 4.529037
H 1.871328 -0.332146 4.971754
H 0.415279 0.578790 5.362653
C 0.261503 -0.614591 3.566251
H -0.621883 -0.061472 3.215607
H -0.111193 -1.512221 4.075967
C 1.079342 -1.009443 2.344403
H 1.925019 -1.642817 2.652648
H 0.470249 -1.594267 1.648167
C 3.159415 1.524929 -0.455819
H 3.988576 1.676879 0.252685
C 3.723999 1.465237 -1.876908

H 4.478404 0.672544 -1.964307
H 2.906677 1.198036 -2.562463
C 4.320653 2.797126 -2.312829
H 4.704878 2.713682 -3.337599
H 5.184344 3.037388 -1.673899
C 3.294921 3.915604 -2.213643
H 3.736855 4.873396 -2.516779
H 2.471352 3.714057 -2.915869
C 2.738959 4.007559 -0.801536
H 1.966690 4.785449 -0.739222
H 3.544293 4.314083 -0.116120
C 2.161718 2.678078 -0.333121
H 1.281003 2.420465 -0.935138
H 1.804325 2.781673 0.697172
C -1.113896 0.504298 -2.647911
H -0.879045 -0.173614 -3.482100
C -2.618391 0.770448 -2.641206
H -2.839952 1.437452 -1.792369
H -3.183248 -0.150567 -2.448082
C -3.075309 1.426987 -3.936788
H -2.910172 0.731861 -4.774745
H -4.155321 1.622201 -3.903013
C -2.309375 2.717785 -4.194678
H -2.563433 3.446227 -3.408872
H -2.617732 3.168139 -5.147368
C -0.805743 2.477680 -4.180559
H -0.534689 1.833867 -5.031475
H -0.263383 3.422805 -4.321716
C -0.359376 1.802963 -2.889821
H 0.720399 1.607842 -2.909379
H -0.543363 2.481503 -2.040003
C -1.446365 -2.010313 -1.286601
H -2.463991 -1.819512 -0.914134
C -0.816620 -3.040185 -0.355379
H 0.233520 -3.196268 -0.646204
H -0.802766 -2.642494 0.664794
C -1.569683 -4.362990 -0.370770

H -2.573193 -4.200547 0.050136
H -1.067924 -5.089041 0.283403
C -1.699013 -4.913142 -1.782437
H -2.273194 -5.849175 -1.781977
H -0.698256 -5.160439 -2.170757
C -2.350640 -3.888199 -2.697989
H -2.432563 -4.278740 -3.721323
H -3.378157 -3.699997 -2.350577
C -1.585055 -2.568726 -2.704592
H -2.111170 -1.858630 -3.352445
H -0.595825 -2.726642 -3.155526
C -3.101296 -0.360899 1.065150
C -4.332194 -0.246114 0.403209
C -2.938242 -1.454786 1.923513
C -5.337138 -1.198384 0.562204
H -4.515564 0.599116 -0.259404
C -3.941917 -2.407767 2.089528
H -2.006400 -1.584902 2.470094
C -5.145454 -2.290629 1.402284
H -6.278872 -1.081910 0.026108
H -3.776564 -3.251629 2.759250
H -5.928130 -3.036990 1.526503
C -2.520421 2.178007 3.355938
H -3.181928 1.326514 3.565446
H -1.528865 1.889179 3.733901
C -1.333360 3.220109 1.318503
H -0.624427 3.565316 2.082922
H -0.653152 2.625953 0.590968
C -2.456372 2.386486 1.860845
H -3.435425 2.664396 1.453113
H -1.641944 4.066977 0.694872
C -3.005912 3.405987 4.118147
H -3.046869 3.223340 5.199660
H -2.344086 4.266870 3.951259
H -4.012033 3.698364 3.790958

TS_{XII→XIII}^a

E = -2457.93445401

Pd -1.581481 -0.676110 -0.907769

P 2.325991 -0.037032 -0.026542

P -0.592475 0.080171 1.067484

C 1.162456 0.229603 1.202984

C 1.702041 0.539344 2.589018

H 1.365327 -0.190714 3.343707

H 1.400160 1.533634 2.953705

H 2.798314 0.521210 2.633172

C 3.727344 1.160619 0.199379

H 4.239172 0.783527 1.098290

C 4.763484 1.185880 -0.923846

H 4.299952 1.607891 -1.826592

H 5.099217 0.173688 -1.182591

C 5.952173 2.058679 -0.537493

H 6.458003 1.614377 0.333448

H 6.687712 2.071367 -1.352188

C 5.505642 3.473681 -0.198008

H 5.097215 3.946710 -1.104280

H 6.364423 4.083791 0.110001

C 4.437020 3.468578 0.886030

H 4.087614 4.489490 1.086318

H 4.876714 3.101320 1.826359

C 3.255772 2.580617 0.514947

H 2.520230 2.564705 1.323133

H 2.738563 2.999093 -0.359033

C 1.667467 0.042767 -1.740606

H 0.782002 -0.609991 -1.660483

C 2.573695 -0.527293 -2.838313

H 2.959543 -1.516899 -2.574841

H 3.448004 0.118840 -2.979875

C 1.814685 -0.607079 -4.158225

H 2.468891 -1.017659 -4.938175

H 0.976145 -1.311883 -4.050964

C 1.275402 0.753942 -4.569705

H 2.121565 1.427450 -4.777085

H 0.705166 0.674592 -5.504124
C 0.412102 1.350914 -3.469546
H -0.486468 0.731075 -3.328159
H 0.058845 2.349639 -3.755645
C 1.154484 1.424266 -2.141426
H 2.001978 2.119876 -2.235219
H 0.497146 1.814538 -1.357050
C 3.168126 -1.699212 0.051336
H 4.005027 -1.692541 -0.664620
C 3.718325 -1.961064 1.455421
H 4.466572 -1.206877 1.731420
H 2.891925 -1.862304 2.173957
C 4.318994 -3.354932 1.583271
H 4.692616 -3.505070 2.604408
H 5.190350 -3.440231 0.915915
C 3.300692 -4.424807 1.221076
H 3.743535 -5.425458 1.305903
H 2.467155 -4.386927 1.939856
C 2.760037 -4.194042 -0.181185
H 1.995369 -4.941867 -0.428759
H 3.574331 -4.328405 -0.910155
C 2.173195 -2.796710 -0.329701
H 1.298328 -2.690953 0.322835
H 1.801574 -2.658824 -1.351646
C -1.142097 -1.118345 2.386880
H -0.904462 -0.654379 3.355722
C -2.652004 -1.335502 2.306328
H -2.881716 -1.763771 1.316539
H -3.187826 -0.378250 2.347967
C -3.141010 -2.277226 3.398659
H -2.979536 -1.807276 4.381358
H -4.223353 -2.436641 3.304860
C -2.400174 -3.606676 3.349859
H -2.648134 -4.119642 2.407566
H -2.735778 -4.266331 4.160871
C -0.893137 -3.398857 3.419594
H -0.631664 -2.979556 4.403498

H -0.367838 -4.360887 3.343039
C -0.410828 -2.450339 2.329277
H 0.671046 -2.284091 2.412229
H -0.586627 -2.905951 1.342491
C -1.357566 1.675487 1.698810
H -2.370953 1.642001 1.274891
C -0.654146 2.874390 1.072118
H 0.383535 2.915651 1.434178
H -0.600740 2.739092 -0.013453
C -1.370922 4.178508 1.391335
H -2.362590 4.159748 0.915547
H -0.826589 5.025087 0.951036
C -1.532026 4.368001 2.891912
H -2.080595 5.294356 3.108198
H -0.538264 4.478373 3.354330
C -2.240914 3.173410 3.511657
H -2.342035 3.303162 4.597660
H -3.262259 3.113649 3.105471
C -1.516997 1.864686 3.209340
H -2.086751 1.037600 3.647883
H -0.538213 1.867672 3.708633
C -2.921370 0.901046 -1.020522
C -4.163503 0.775931 -0.376469
C -2.669586 2.129761 -1.644081
C -5.085652 1.819368 -0.330088
H -4.425237 -0.165358 0.111057
C -3.586879 3.179966 -1.611683
H -1.727597 2.289136 -2.166840
C -4.799104 3.034210 -0.945795
H -6.034684 1.681581 0.188237
H -3.348089 4.121267 -2.107010
H -5.514861 3.854018 -0.912878
C -1.485125 -2.446013 -2.216416
H -0.553288 -2.491828 -2.780213
H -0.633872 -1.982890 -0.792915
C -3.966581 -1.919033 -2.437146
H -4.100160 -2.412237 -1.462808

H -4.555022 -0.995459 -2.392150
C -2.514234 -1.570991 -2.626032
H -2.299060 -0.906843 -3.466387
C -4.502183 -2.816293 -3.547067
H -3.960857 -3.770434 -3.586747
H -5.566724 -3.038559 -3.401836
H -4.394042 -2.335977 -4.528043
H -1.754598 -3.387698 -1.734980

TS_{XII→XIII}^c

E = -2457.93474187
Pd 1.592649 0.625408 -1.000633
P -2.307712 -0.100275 0.004814
P 0.586269 0.275261 1.087597
C -1.155605 0.034304 1.265667
C -1.699506 0.036439 2.683781
H -1.421331 0.946912 3.239791
H -1.346192 -0.819637 3.279929
H -2.795738 -0.003535 2.717635
C -3.631549 -1.296933 0.513755
H -4.191096 -0.748068 1.286904
C -4.631706 -1.670578 -0.580320
H -4.114734 -2.257853 -1.351911
H -5.032115 -0.777794 -1.077443
C -5.764302 -2.514709 -0.006251
H -6.327734 -1.913453 0.723713
H -6.471771 -2.782496 -0.801661
C -5.226650 -3.765466 0.674848
H -4.756056 -4.411072 -0.082573
H -6.048558 -4.347707 1.110850
C -4.196832 -3.413829 1.739146
H -3.782553 -4.324981 2.189285
H -4.691658 -2.862628 2.553843
C -3.070846 -2.556445 1.175443
H -2.363297 -2.286924 1.963758
H -2.499218 -3.136070 0.438496
C -1.587923 -0.573987 -1.613787

H -0.730050 0.119194 -1.672993
C -2.456949 -0.342691 -2.853829
H -2.918226 0.649582 -2.853855
H -3.279629 -1.068354 -2.880347
C -1.607830 -0.516857 -4.107845
H -2.217366 -0.336655 -5.002768
H -0.815899 0.248217 -4.107330
C -0.973069 -1.898935 -4.161419
H -1.767497 -2.652459 -4.278117
H -0.327970 -1.989077 -5.045394
C -0.178632 -2.191097 -2.897545
H 0.687305 -1.516909 -2.844804
H 0.222268 -3.212473 -2.922027
C -1.008720 -1.986629 -1.638808
H -1.827664 -2.721146 -1.613278
H -0.395424 -2.150516 -0.746667
C -3.254650 1.464426 -0.354931
H -4.061760 1.222149 -1.064050
C -3.871958 2.026809 0.927932
H -4.585780 1.316306 1.364367
H -3.068883 2.161197 1.667162
C -4.556404 3.367322 0.694402
H -4.975660 3.738624 1.638457
H -5.405961 3.229340 0.008012
C -3.589220 4.379635 0.100973
H -4.092191 5.339452 -0.073436
H -2.781839 4.573898 0.824328
C -2.985620 3.847702 -1.189273
H -2.256896 4.560054 -1.597736
H -3.779536 3.746678 -1.945590
C -2.313974 2.497653 -0.976666
H -1.456878 2.611507 -0.302490
H -1.899201 2.137262 -1.924892
C 1.023084 1.791770 2.084744
H 0.793147 1.555110 3.134129
C 2.515695 2.094287 1.970603
H 2.739860 2.301897 0.911671

H 3.116430 1.214414 2.234830
C 2.908761 3.294639 2.821236
H 2.750590 3.053394 3.883998
H 3.980193 3.505871 2.706860
C 2.081860 4.519708 2.455209
H 2.323058 4.818002 1.422998
H 2.347659 5.371415 3.095116
C 0.590749 4.225284 2.550837
H 0.328835 4.028204 3.601926
H 0.004615 5.102799 2.244739
C 0.204661 3.016583 1.707329
H -0.865071 2.796425 1.816549
H 0.375250 3.240823 0.642809
C 1.461720 -1.055421 2.087001
H 2.482189 -1.032918 1.679177
C 0.879359 -2.423534 1.750806
H -0.169257 -2.462840 2.081556
H 0.869894 -2.553643 0.663561
C 1.674265 -3.553306 2.389731
H 2.679641 -3.571245 1.943414
H 1.208692 -4.520278 2.155125
C 1.792876 -3.366413 3.894292
H 2.396741 -4.169317 4.337595
H 0.793060 -3.438758 4.351121
C 2.393342 -2.007300 4.219267
H 2.467512 -1.865845 5.305966
H 3.420743 -1.967057 3.826155
C 1.586713 -0.869153 3.601238
H 2.080332 0.080551 3.836681
H 0.595787 -0.830581 4.073517
C 3.088135 -0.777665 -0.700692
C 4.304744 -0.361248 -0.135591
C 2.976993 -2.143848 -0.991821
C 5.334710 -1.254817 0.151600
H 4.459067 0.693729 0.097484
C 4.001516 -3.048076 -0.711863
H 2.062460 -2.530871 -1.439547

C 5.185790 -2.609568 -0.129764
H 6.260707 -0.889512 0.595844
H 3.868645 -4.104401 -0.946241
H 5.985937 -3.312957 0.094861
C 2.599056 0.200519 -3.923524
H 2.985044 -0.762802 -3.563692
H 1.563675 0.021620 -4.244372
C 1.565862 2.136899 -2.607389
H 0.712524 2.119555 -3.288516
H 0.544690 1.832208 -1.288778
C 2.607243 1.200119 -2.797536
H 3.602150 1.488272 -2.450220
H 1.794288 3.126412 -2.212366
C 3.425744 0.667589 -5.115535
H 3.419682 -0.076632 -5.921553
H 3.041250 1.611393 -5.523196
H 4.470963 0.834331 -4.826133

XIII^a

E = -2457.93974206
Pd -1.566523 -0.603825 -0.965104
P 2.334395 0.031941 -0.076887
P -0.575753 -0.169426 1.073423
C 1.171279 0.056465 1.182890
C 1.716623 0.198330 2.594827
H 1.405737 -0.632992 3.248817
H 1.396475 1.128086 3.090396
H 2.812798 0.199367 2.627859
C 3.670308 1.258269 0.330835
H 4.186683 0.786011 1.180516
C 4.726087 1.487810 -0.749971
H 4.265823 2.022063 -1.592738
H 5.109897 0.539233 -1.145878
C 5.868426 2.338575 -0.206264
H 6.371625 1.790515 0.605091
H 6.621860 2.498034 -0.988477
C 5.356563 3.671359 0.321825

H 4.953023 4.257159 -0.518354
H 6.181934 4.260388 0.741919
C 4.261343 3.469625 1.359739
H 3.863699 4.437089 1.692002
H 4.691416 2.988302 2.251817
C 3.129230 2.598674 0.828558
H 2.372985 2.438853 1.601131
H 2.619627 3.117567 0.005541
C 1.664753 0.325469 -1.762906
H 0.834000 -0.398899 -1.794638
C 2.616670 0.003939 -2.921488
H 3.070548 -0.985788 -2.810010
H 3.442229 0.724387 -2.944164
C 1.876800 0.081003 -4.252076
H 2.569377 -0.141641 -5.074044
H 1.101878 -0.699493 -4.280210
C 1.229939 1.443231 -4.449924
H 2.019249 2.206516 -4.532986
H 0.671848 1.469660 -5.394655
C 0.317653 1.789051 -3.283349
H -0.529015 1.085952 -3.256558
H -0.113715 2.789301 -3.415728
C 1.047973 1.710552 -1.948903
H 1.838648 2.475339 -1.923747
H 0.360801 1.923862 -1.122407
C 3.274510 -1.570005 -0.236922
H 4.110084 -1.402192 -0.934476
C 3.841269 -2.003207 1.117391
H 4.535423 -1.250652 1.513265
H 3.009459 -2.071661 1.833154
C 4.538043 -3.355518 1.038552
H 4.918897 -3.633966 2.029706
H 5.415059 -3.276562 0.377799
C 3.599367 -4.425625 0.503285
H 4.112748 -5.393635 0.439175
H 2.764047 -4.557677 1.208817
C 3.045279 -4.019469 -0.853142

H 2.337398 -4.772565 -1.222959
H 3.868194 -3.979983 -1.583888
C 2.357623 -2.662323 -0.789197
H 1.480185 -2.723207 -0.135091
H 1.969798 -2.394968 -1.778615
C -1.023931 -1.595263 2.186899
H -0.783652 -1.270139 3.210162
C -2.522177 -1.880021 2.109318
H -2.765465 -2.149745 1.068292
H -3.100386 -0.973205 2.329682
C -2.927142 -3.011978 3.044728
H -2.766786 -2.694338 4.086871
H -4.000988 -3.218444 2.945136
C -2.114070 -4.270608 2.774232
H -2.353912 -4.642483 1.766084
H -2.393257 -5.068054 3.475409
C -0.620472 -3.985674 2.855126
H -0.361562 -3.705760 3.888155
H -0.042544 -4.891322 2.624977
C -0.220051 -2.857020 1.913718
H 0.851750 -2.638635 2.005229
H -0.392899 -3.167697 0.872733
C -1.388473 1.258853 1.976290
H -2.416480 1.224947 1.593419
C -0.789646 2.578612 1.503243
H 0.254857 2.644954 1.840768
H -0.767160 2.596770 0.407790
C -1.583522 3.768305 2.023001
H -2.589254 3.740311 1.578074
H -1.119086 4.706783 1.690973
C -1.696971 3.734129 3.539643
H -2.299900 4.577473 3.901697
H -0.695470 3.853612 3.982698
C -2.295116 2.415608 4.007050
H -2.360999 2.387006 5.103079
H -3.325573 2.337235 3.627702
C -1.496110 1.217100 3.502156

H -1.993484 0.297825 3.832557
H -0.502235 1.219527 3.969360
C -2.975137 0.942537 -0.785929
C -4.157599 0.742896 -0.055036
C -2.798686 2.218929 -1.335263
C -5.095042 1.756105 0.136809
H -4.358261 -0.235143 0.386745
C -3.730618 3.241549 -1.156167
H -1.904904 2.436266 -1.919801
C -4.884187 3.017316 -0.412590
H -5.996430 1.558114 0.716967
H -3.550174 4.221366 -1.598591
H -5.612506 3.813405 -0.266847
C -1.637491 -1.782298 -2.835567
H -0.732849 -1.493065 -3.367725
H -0.452371 -1.746954 -0.861503
C -4.136977 -1.492621 -2.582281
H -4.082242 -2.350931 -1.897889
H -4.733996 -0.724976 -2.078449
C -2.752657 -0.966575 -2.832070
H -2.698470 -0.007439 -3.350826
C -4.825468 -1.904845 -3.878789
H -4.274229 -2.705353 -4.387833
H -5.844379 -2.263069 -3.687830
H -4.896542 -1.058269 -4.573484
H -1.727617 -2.841618 -2.598072

XIII^c

E = -2457.94042892
Pd 1.550748 -0.359244 1.161744
P -2.307916 0.129904 -0.023856
P 0.582440 -0.630980 -0.926477
C -1.152434 -0.405771 -1.170730
C -1.692579 -0.830226 -2.525558
H -1.456024 -1.879471 -2.767819
H -1.303469 -0.218624 -3.354637
H -2.785913 -0.755672 -2.583959

C -3.595884 1.155117 -0.883052
H -4.177639 0.416645 -1.455771
C -4.574643 1.868018 0.050179
H -4.033709 2.641845 0.612206
H -4.996293 1.176719 0.790788
C -5.688305 2.537183 -0.747228
H -6.277099 1.763676 -1.263819
H -6.378886 3.051797 -0.066668
C -5.121597 3.510636 -1.771174
H -4.622914 4.337053 -1.241729
H -5.930567 3.962692 -2.359285
C -4.115443 2.825071 -2.684571
H -3.680423 3.546525 -3.387958
H -4.636046 2.071356 -3.295584
C -3.007324 2.140527 -1.893503
H -2.318262 1.624504 -2.567305
H -2.409544 2.896227 -1.367277
C -1.573708 1.057146 1.375959
H -0.728829 0.395966 1.639476
C -2.429261 1.225652 2.634787
H -2.904659 0.287218 2.936149
H -3.240381 1.942213 2.452274
C -1.554950 1.748267 3.769831
H -2.151053 1.855794 4.685263
H -0.775117 1.001271 3.986294
C -0.897454 3.070275 3.400734
H -1.677281 3.840374 3.293982
H -0.237237 3.408121 4.210611
C -0.118173 2.954288 2.099651
H 0.733124 2.275117 2.242015
H 0.302207 3.927026 1.813429
C -0.971331 2.400124 0.968832
H -1.776672 3.111410 0.732040
H -0.368848 2.276915 0.062441
C -3.314799 -1.217052 0.777612
H -4.103836 -0.731764 1.373605
C -3.970500 -2.115164 -0.274187

H -4.640867 -1.539085 -0.924725
H -3.179226 -2.524004 -0.919834
C -4.740612 -3.265504 0.363257
H -5.184424 -3.893477 -0.420142
H -5.579128 -2.858707 0.949253
C -3.847499 -4.094202 1.273677
H -4.420845 -4.904460 1.742269
H -3.062331 -4.573993 0.668926
C -3.194814 -3.215673 2.329217
H -2.514974 -3.806468 2.956767
H -3.970939 -2.816186 3.000642
C -2.430107 -2.062795 1.693340
H -1.606100 -2.456717 1.088134
H -1.956396 -1.452218 2.469857
C 0.969188 -2.391667 -1.403950
H 0.757688 -2.464509 -2.481020
C 2.447230 -2.701484 -1.178482
H 2.655313 -2.597788 -0.101348
H 3.083282 -1.959411 -1.678491
C 2.796390 -4.111515 -1.636434
H 2.660719 -4.181833 -2.727062
H 3.856358 -4.321582 -1.441366
C 1.912786 -5.146291 -0.952621
H 2.129255 -5.143737 0.126942
H 2.148802 -6.155499 -1.315063
C 0.437028 -4.834581 -1.162472
H 0.195057 -4.936508 -2.231848
H -0.189393 -5.564599 -0.631851
C 0.096028 -3.421960 -0.704910
H -0.962230 -3.200334 -0.892951
H 0.249795 -3.337919 0.381072
C 1.481436 0.306415 -2.288513
H 2.496612 0.414227 -1.882052
C 0.902466 1.710709 -2.424450
H -0.139237 1.642227 -2.770172
H 0.871788 2.187402 -1.439147
C 1.715085 2.570907 -3.381805

H 2.714042 2.730137 -2.949814
H 1.252518 3.562409 -3.480670
C 1.854538 1.906111 -4.742328
H 2.471288 2.520420 -5.411680
H 0.862510 1.828453 -5.214899
C 2.449924 0.514167 -4.598203
H 2.540821 0.027305 -5.578525
H 3.470235 0.601739 -4.194327
C 1.625747 -0.361271 -3.658840
H 2.117498 -1.336020 -3.566326
H 0.641352 -0.549799 -4.108771
C 3.088425 0.869350 0.435241
C 4.293286 0.272656 0.029874
C 2.989900 2.253732 0.243602
C 5.323443 1.002161 -0.560366
H 4.438829 -0.800431 0.171501
C 4.015293 2.997410 -0.340948
H 2.084816 2.780420 0.544846
C 5.186604 2.373331 -0.756153
H 6.239621 0.496979 -0.866385
H 3.892974 4.071914 -0.478321
H 5.986686 2.949069 -1.218485
C 2.765013 1.177267 3.691151
H 3.023794 1.957341 2.963901
H 1.747440 1.391233 4.044896
C 1.819687 -1.132861 3.218137
H 0.353377 -1.370287 1.472449
H 2.034379 -2.187815 3.058871
H 0.941999 -0.915999 3.827129
C 2.788166 -0.166723 3.021903
H 3.767374 -0.485939 2.661118
C 3.737807 1.234803 4.863038
H 3.722768 2.222107 5.340323
H 3.490518 0.485498 5.625416
H 4.765410 1.043366 4.529697

TS_{XIII→XIV}^a (CW)

E = -2457.93486568

Pd -1.572292 0.475568 1.039556

P 2.335469 0.141330 -0.014906

P -0.623719 -0.083246 -0.995040

C 1.127263 -0.121790 -1.202728

C 1.615113 -0.324400 -2.627454

H 1.194269 0.417049 -3.326504

H 1.366445 -1.318535 -3.030475

H 2.703874 -0.225241 -2.717842

C 3.784942 -0.962309 -0.382344

H 4.226799 -0.507790 -1.282236

C 4.880694 -0.985066 0.683326

H 4.493550 -1.478491 1.585636

H 5.172284 0.030792 0.978619

C 6.094552 -1.763305 0.187633

H 6.527863 -1.241132 -0.679230

H 6.871719 -1.778276 0.962703

C 5.712355 -3.180884 -0.213913

H 5.379251 -3.728746 0.680985

H 6.587588 -3.719605 -0.599192

C 4.590396 -3.178250 -1.242627

H 4.291399 -4.205330 -1.488095

H 4.958310 -2.730168 -2.178759

C 3.380638 -2.388047 -0.758911

H 2.602566 -2.370759 -1.526326

H 2.938392 -2.889231 0.112000

C 1.760550 -0.095820 1.711320

H 0.821930 0.488221 1.706589

C 2.658968 0.477192 2.812593

H 2.943901 1.513135 2.605510

H 3.592049 -0.095954 2.879450

C 1.942935 0.401088 4.156721

H 2.583261 0.819623 4.944030

H 1.040753 1.030078 4.115997

C 1.545500 -1.028638 4.492451

H 2.456372 -1.632857 4.626404

H 1.006906 -1.063324 5.448335
C 0.698220 -1.631552 3.382923
H -0.254876 -1.089222 3.315227
H 0.448031 -2.676114 3.608618
C 1.390913 -1.543590 2.030321
H 2.300881 -2.161384 2.051005
H 0.745058 -1.943851 1.240923
C 3.092827 1.843065 -0.032967
H 3.954931 1.833251 0.652836
C 3.580249 2.205743 -1.438165
H 4.344536 1.499450 -1.786969
H 2.729981 2.118193 -2.130182
C 4.126411 3.626375 -1.503473
H 4.454813 3.850065 -2.526795
H 5.019929 3.702954 -0.864920
C 3.088032 4.635678 -1.039220
H 3.494868 5.654449 -1.077322
H 2.230158 4.612504 -1.729477
C 2.606471 4.299259 0.363251
H 1.826808 5.002741 0.683189
H 3.441762 4.416732 1.071340
C 2.070165 2.876376 0.440190
H 1.181190 2.779863 -0.192904
H 1.723788 2.660505 1.456435
C -1.300409 1.158536 -2.210294
H -1.061912 0.765783 -3.210067
C -2.817961 1.261012 -2.079525
H -3.045628 1.595501 -1.055408
H -3.286862 0.273838 -2.183289
C -3.406069 2.246193 -3.080848
H -3.249277 1.864257 -4.101690
H -4.492734 2.322260 -2.941724
C -2.752788 3.615449 -2.951460
H -2.991797 4.034065 -1.961145
H -3.165413 4.312155 -3.692985
C -1.240498 3.513768 -3.094674
H -0.997123 3.181556 -4.115973

H -0.774589 4.500893 -2.970443
C -0.652830 2.529822 -2.091406
H 0.432041 2.438175 -2.232430
H -0.809185 2.903280 -1.068539
C -1.326474 -1.677948 -1.695282
H -2.332597 -1.708090 -1.255007
C -0.561906 -2.870957 -1.133769
H 0.472001 -2.848486 -1.508932
H -0.502132 -2.781461 -0.043695
C -1.226003 -4.189694 -1.502494
H -2.209037 -4.236966 -1.010728
H -0.637855 -5.030608 -1.110523
C -1.405414 -4.316882 -3.007553
H -1.915877 -5.256198 -3.258382
H -0.416155 -4.360479 -3.490231
C -2.178027 -3.128487 -3.559599
H -2.293861 -3.213428 -4.648522
H -3.193253 -3.133471 -3.134142
C -1.506669 -1.803321 -3.210283
H -2.121744 -0.983347 -3.598408
H -0.540011 -1.739645 -3.727586
C -2.861712 -1.179535 1.095831
C -4.140295 -1.104785 0.516169
C -2.527419 -2.407493 1.683849
C -5.018094 -2.186884 0.498805
H -4.468059 -0.171267 0.051585
C -3.397727 -3.497989 1.680906
H -1.551923 -2.535349 2.153264
C -4.647577 -3.396122 1.079944
H -5.997291 -2.085147 0.030510
H -3.092629 -4.435613 2.146023
H -5.327567 -4.246453 1.069295
C -1.983649 1.256856 3.128977
H -0.602406 1.760546 0.908565
H -1.242722 2.030008 3.322951
H -1.931745 0.348215 3.726589
C -3.403335 2.853677 1.767823

H -2.480311 3.443436 1.698343
H -3.755802 2.704900 0.737744
C -3.093702 1.521287 2.377133
H -3.905805 0.792636 2.386074
C -4.469515 3.604976 2.558807
H -4.133099 3.806133 3.583071
H -4.704876 4.564920 2.084460
H -5.399701 3.026819 2.622502

xiii→*xiv*^a (CW)

E = -2457.93545992

Pd -1.563229 0.450200 1.045601
P 2.331350 0.117418 -0.036682
P -0.631363 -0.099019 -0.994742
C 1.115878 -0.148911 -1.217098
C 1.595715 -0.374632 -2.641097
H 1.162815 0.348921 -3.351290
H 1.353139 -1.378235 -3.024059
H 2.682864 -0.266952 -2.741105
C 3.768111 -1.004373 -0.395389
H 4.211772 -0.567519 -1.303262
C 4.865731 -1.025888 0.668164
H 4.473610 -1.504180 1.576517
H 5.169247 -0.009941 0.950886
C 6.069189 -1.824874 0.180630
H 6.505699 -1.320909 -0.695350
H 6.848588 -1.837238 0.953493
C 5.669004 -3.243876 -0.197887
H 5.333303 -3.774050 0.706630
H 6.536298 -3.798621 -0.578351
C 4.542917 -3.244114 -1.222118
H 4.230293 -4.271301 -1.449480
H 4.912553 -2.816117 -2.166918
C 3.344894 -2.430868 -0.747613
H 2.564371 -2.416664 -1.512490
H 2.898945 -2.910949 0.133555
C 1.764635 -0.085921 1.696268

H 0.841097 0.521965 1.688960
C 2.684107 0.482529 2.782806
H 3.005430 1.502563 2.551646
H 3.596314 -0.121279 2.863865
C 1.966716 0.461725 4.127869
H 2.619329 0.879610 4.905376
H 1.084281 1.117056 4.070619
C 1.527400 -0.947238 4.497076
H 2.420803 -1.573145 4.648079
H 0.986291 -0.943539 5.452126
C 0.665135 -1.554419 3.401286
H -0.275543 -0.990665 3.321908
H 0.389917 -2.586697 3.652767
C 1.359054 -1.516860 2.045989
H 2.253625 -2.156617 2.079740
H 0.701725 -1.918870 1.266750
C 3.100184 1.813578 -0.082856
H 3.975804 1.803692 0.585530
C 3.562433 2.159147 -1.500770
H 4.312422 1.441966 -1.858682
H 2.697421 2.073560 -2.174311
C 4.118448 3.574472 -1.590559
H 4.430176 3.785112 -2.621830
H 5.023531 3.651557 -0.968585
C 3.094652 4.595263 -1.119093
H 3.506295 5.611204 -1.176232
H 2.224183 4.569091 -1.793349
C 2.637140 4.277672 0.295721
H 1.867661 4.989420 0.622017
H 3.486219 4.398601 0.986617
C 2.094237 2.858966 0.400725
H 1.190136 2.760413 -0.210310
H 1.769992 2.658225 1.427200
C -1.325076 1.153703 -2.190700
H -1.096434 0.772597 -3.197495
C -2.842093 1.251060 -2.041921
H -3.062221 1.575310 -1.011780

H -3.309392 0.263792 -2.150999
C -3.443278 2.242332 -3.029716
H -3.296258 1.867588 -4.054639
H -4.528562 2.314493 -2.878630
C -2.792569 3.612657 -2.899211
H -3.024097 4.026657 -1.905114
H -3.213895 4.312033 -3.633262
C -1.281417 3.516471 -3.055533
H -1.045281 3.192454 -4.081106
H -0.817415 4.504032 -2.927737
C -0.682993 2.526773 -2.064302
H 0.401344 2.442883 -2.213028
H -0.834871 2.891013 -1.036742
C -1.351821 -1.685402 -1.689690
H -2.357840 -1.700768 -1.248382
C -0.602986 -2.884753 -1.120851
H 0.429573 -2.881500 -1.500549
H -0.537342 -2.787139 -0.031546
C -1.290492 -4.194786 -1.477344
H -2.272916 -4.220959 -0.982463
H -0.716341 -5.042981 -1.080427
C -1.475074 -4.330201 -2.981281
H -2.002165 -5.262433 -3.224015
H -0.487402 -4.395061 -3.464831
C -2.227674 -3.133264 -3.542946
H -2.344704 -3.225210 -4.631175
H -3.242978 -3.118173 -3.117904
C -1.534754 -1.816519 -3.203561
H -2.136960 -0.988850 -3.596046
H -0.567697 -1.771553 -3.721908
C -2.858738 -1.198017 1.119142
C -4.140410 -1.122060 0.548020
C -2.536009 -2.414348 1.738318
C -5.034557 -2.191234 0.571697
H -4.457166 -0.201034 0.052457
C -3.420876 -3.491812 1.774609
H -1.557774 -2.541501 2.202690

C -4.675992 -3.388011 1.184201
H -6.016468 -2.088996 0.109232
H -3.124390 -4.420568 2.262532
H -5.368420 -4.228067 1.204974
C -2.206571 1.080296 3.124125
H -0.591790 1.737968 0.935673
H -1.374126 1.626523 3.566651
H -2.472773 0.119221 3.560667
C -2.953051 3.131952 1.822975
H -1.971501 3.528617 2.110713
H -2.998089 3.196739 0.726715
C -3.042799 1.693942 2.233557
H -3.965174 1.173351 1.963934
C -4.077889 3.962971 2.429817
H -4.034814 3.949100 3.525669
H -4.014038 5.007050 2.101702
H -5.062256 3.579931 2.132435

TS_{XIII→XIV}^a (CW)

E = -2457.93337370

Pd -1.542807 0.653121 0.968139
P 2.274216 -0.059146 -0.087278
P -0.703241 -0.205935 -0.995708
C 1.034573 -0.388375 -1.224894
C 1.482636 -0.793516 -2.618612
H 1.103492 -0.112368 -3.398602
H 1.156943 -1.807896 -2.898009
H 2.574539 -0.785249 -2.727946
C 3.640697 -1.298289 -0.302502
H 4.116982 -0.998307 -1.248511
C 4.724157 -1.258413 0.775127
H 4.292764 -1.595566 1.727787
H 5.089078 -0.236481 0.938173
C 5.879331 -2.183848 0.411186
H 6.357513 -1.818791 -0.510722
H 6.647245 -2.150472 1.194844
C 5.393029 -3.610644 0.199280

H 5.011957 -4.004259 1.154144
H 6.227203 -4.261123 -0.093444
C 4.282628 -3.664876 -0.840570
H 3.907943 -4.690654 -0.949825
H 4.691449 -3.377987 -1.821908
C 3.132472 -2.727891 -0.492619
H 2.366585 -2.756665 -1.272187
H 2.642441 -3.070182 0.428499
C 1.702050 -0.023960 1.654258
H 0.809218 0.622414 1.563047
C 2.633334 0.632307 2.678143
H 3.023717 1.590620 2.322574
H 3.503535 -0.008286 2.869475
C 1.876681 0.836721 3.985986
H 2.526793 1.324458 4.723901
H 1.036678 1.524999 3.802176
C 1.348000 -0.482955 4.530239
H 2.202667 -1.119830 4.807133
H 0.775653 -0.316405 5.452134
C 0.493555 -1.207089 3.500601
H -0.427526 -0.636445 3.312869
H 0.178377 -2.185982 3.883868
C 1.222662 -1.378311 2.174520
H 2.085499 -2.046452 2.316574
H 0.565116 -1.848472 1.434915
C 3.148320 1.567567 -0.327626
H 4.018105 1.579082 0.348394
C 3.642419 1.715272 -1.768940
H 4.332381 0.904935 -2.037108
H 2.776094 1.625933 -2.440719
C 4.317423 3.061334 -2.000097
H 4.649861 3.135701 -3.043643
H 5.223995 3.123580 -1.378628
C 3.387565 4.213005 -1.650107
H 3.894046 5.175720 -1.796952
H 2.527489 4.202948 -2.337469
C 2.883872 4.082755 -0.221001

H 2.174791 4.887633 0.012729
H 3.729675 4.201319 0.474286
C 2.219383 2.733061 0.014875
H 1.325865 2.643653 -0.612930
H 1.855947 2.668807 1.046260
C -1.331821 0.931655 -2.332160
H -1.176127 0.397433 -3.281329
C -2.827416 1.185603 -2.154935
H -2.971209 1.690674 -1.185884
H -3.380940 0.239889 -2.083568
C -3.382738 2.057803 -3.272640
H -3.304648 1.516777 -4.228587
H -4.451997 2.247240 -3.109609
C -2.617233 3.370289 -3.373759
H -2.782212 3.952007 -2.453283
H -3.003284 3.980360 -4.201001
C -1.124063 3.123736 -3.542903
H -0.947906 2.629714 -4.511088
H -0.578596 4.076712 -3.577474
C -0.573978 2.246809 -2.424922
H 0.494439 2.047919 -2.579751
H -0.662501 2.772658 -1.462502
C -1.532912 -1.818474 -1.486900
H -2.518390 -1.736956 -1.006782
C -0.811999 -2.988504 -0.827021
H 0.205091 -3.066590 -1.237915
H -0.700767 -2.785922 0.243612
C -1.557873 -4.299676 -1.027848
H -2.522053 -4.240840 -0.501462
H -0.998209 -5.125636 -0.568226
C -1.802834 -4.574070 -2.503566
H -2.369935 -5.505089 -2.635361
H -0.837058 -4.721871 -3.012405
C -2.536049 -3.409525 -3.151770
H -2.701037 -3.601806 -4.220488
H -3.531830 -3.314292 -2.692417
C -1.786193 -2.092733 -2.971061

H -2.378573 -1.286617 -3.419015
H -0.840838 -2.133147 -3.529204
C -2.936261 -0.886111 1.267219
C -4.235547 -0.673253 0.776716
C -2.712565 -2.115169 1.903057
C -5.242152 -1.631663 0.888085
H -4.477584 0.269063 0.278524
C -3.709902 -3.082435 2.023902
H -1.729497 -2.342158 2.316078
C -4.981181 -2.848647 1.509519
H -6.234853 -1.426366 0.487019
H -3.489998 -4.027683 2.520625
H -5.761043 -3.603332 1.597825
C -2.318144 1.446556 2.954320
H -0.499341 1.806425 0.570951
H -1.469060 1.537424 3.633573
H -3.073796 0.706809 3.201423
C -1.793333 3.713641 1.927833
H -0.791981 3.583920 2.358795
H -1.644223 3.987889 0.876455
C -2.537959 2.411423 2.007910
H -3.490937 2.379516 1.469579
C -2.546057 4.825668 2.650015
H -2.667131 4.595499 3.715589
H -2.012190 5.779950 2.567052
H -3.548865 4.968475 2.227447

TS_{XIII→XIV}^a (CCW)

E = -2457.93284351

Pd -1.531285 0.290333 1.134740
P 2.303515 -0.154713 0.015509
P -0.545208 0.721364 -0.905351
C 1.186382 0.467496 -1.125172
C 1.759766 0.946644 -2.447835
H 1.545415 2.010658 -2.641773
H 1.374143 0.383557 -3.312292
H 2.852371 0.855201 -2.491234

C 3.581437 -1.165497 -0.876654
H 4.179092 -0.408600 -1.407352
C 4.542389 -1.936162 0.028198
H 3.987711 -2.733850 0.541348
H 4.962025 -1.289777 0.809061
C 5.659074 -2.572864 -0.790654
H 6.259376 -1.779189 -1.261352
H 6.338420 -3.127314 -0.130359
C 5.094455 -3.488157 -1.867500
H 4.584368 -4.336088 -1.384999
H 5.904797 -3.916769 -2.471078
C 4.102186 -2.748542 -2.754061
H 3.666993 -3.430153 -3.496030
H 4.635161 -1.970731 -3.322763
C 2.992525 -2.091987 -1.940924
H 2.316911 -1.534234 -2.595004
H 2.380073 -2.866057 -1.459986
C 1.532853 -1.130467 1.366939
H 0.706944 -0.459882 1.668530
C 2.397205 -1.383861 2.606527
H 2.875992 -0.466942 2.963361
H 3.205748 -2.086921 2.370312
C 1.539697 -1.979836 3.717326
H 2.154001 -2.154476 4.610114
H 0.772363 -1.244996 4.005229
C 0.869212 -3.270562 3.270163
H 1.645389 -4.030761 3.090614
H 0.227849 -3.666476 4.068413
C 0.063635 -3.064717 1.996233
H -0.793295 -2.405229 2.195888
H -0.356159 -4.017991 1.650326
C 0.900038 -2.436756 0.889489
H 1.691029 -3.140531 0.590600
H 0.281907 -2.246615 0.005129
C 3.330088 1.127912 0.893831
H 4.099441 0.597708 1.477057
C 4.022398 2.059089 -0.104597

H 4.686340 1.498478 -0.775032
H 3.250565 2.520295 -0.738291
C 4.813794 3.154850 0.599031
H 5.285518 3.808363 -0.146250
H 5.632624 2.696587 1.174807
C 3.930014 3.961808 1.537592
H 4.518413 4.730500 2.055046
H 3.168543 4.494083 0.946729
C 3.236251 3.050588 2.538229
H 2.562510 3.628835 3.183789
H 3.990539 2.598007 3.200881
C 2.451932 1.950321 1.836500
H 1.645299 2.391142 1.240427
H 1.952248 1.314773 2.575614
C -0.895636 2.513900 -1.276712
H -0.677246 2.645648 -2.346755
C -2.371035 2.830180 -1.039739
H -2.584610 2.667265 0.029028
H -3.014516 2.127275 -1.585661
C -2.699212 4.269178 -1.415367
H -2.557817 4.401857 -2.499444
H -3.757026 4.482187 -1.211887
C -1.804266 5.248848 -0.668252
H -2.024799 5.184681 0.408531
H -2.025121 6.281053 -0.970548
C -0.331934 4.930112 -0.891821
H -0.084853 5.091515 -1.952704
H 0.301813 5.619602 -0.317506
C -0.011150 3.488815 -0.515715
H 1.045078 3.264423 -0.712943
H -0.171294 3.343238 0.562462
C -1.434128 -0.113258 -2.337358
H -2.456194 -0.231188 -1.952016
C -0.873728 -1.515376 -2.549520
H 0.167870 -1.441492 -2.893707
H -0.847947 -2.045667 -1.591927
C -1.698597 -2.306494 -3.554103

H -2.702757 -2.468473 -3.135157
H -1.256148 -3.300607 -3.705068
C -1.814257 -1.565217 -4.877147
H -2.439123 -2.128108 -5.583197
H -0.817109 -1.484306 -5.338258
C -2.380314 -0.169852 -4.662998
H -2.448912 0.371408 -5.616269
H -3.407230 -0.256722 -4.276228
C -1.550567 0.635845 -3.667387
H -2.027228 1.612099 -3.523749
H -0.557765 0.832900 -4.095290
C -3.007426 -0.956293 0.324720
C -4.209450 -0.325981 -0.040066
C -2.929975 -2.329825 0.061432
C -5.262483 -1.014680 -0.639065
H -4.334834 0.743628 0.146161
C -3.976499 -3.033715 -0.535256
H -2.027332 -2.882846 0.320377
C -5.149383 -2.378365 -0.894284
H -6.176394 -0.484122 -0.906950
H -3.870858 -4.102071 -0.725176
H -5.966712 -2.923401 -1.363744
C -2.285108 1.068786 3.113693
H -0.403369 1.362158 1.531183
H -3.177857 1.647374 2.867646
H -1.439166 1.626322 3.501473
C -3.630245 -1.089707 3.263274
H -4.414525 -0.564248 2.706628
H -3.486218 -2.046472 2.747380
C -2.361430 -0.295340 3.223768
H -1.484597 -0.805825 3.633098
C -4.069985 -1.339295 4.702156
H -4.272126 -0.397485 5.227315
H -4.982585 -1.946451 4.730899
H -3.297775 -1.874239 5.270664

xiii→*xiv*^a (CCW)

E = -2457.93413225

Pd 1.562429 0.170519 -1.144919

P -2.328067 -0.161020 0.004010

P 0.521991 0.820109 0.814118

C -1.209663 0.595338 1.059344

C -1.788724 1.228058 2.313337

H -1.571939 2.307080 2.381516

H -1.412059 0.769174 3.240716

H -2.882003 1.145812 2.358335

C -3.587194 -1.082511 1.012729

H -4.200712 -0.280687 1.451164

C -4.533797 -1.979035 0.214496

H -3.963603 -2.821435 -0.201261

H -4.970624 -1.442019 -0.637044

C -5.632515 -2.533715 1.113932

H -6.247750 -1.700455 1.486799

H -6.302587 -3.179952 0.532294

C -5.044322 -3.296367 2.292989

H -4.518863 -4.187482 1.916492

H -5.843709 -3.662528 2.949959

C -4.064089 -2.432761 3.074121

H -3.611364 -3.008247 3.891672

H -4.610491 -1.601222 3.545756

C -2.973533 -1.860237 2.177380

H -2.305956 -1.213825 2.752800

H -2.348583 -2.675296 1.788542

C -1.547897 -1.266272 -1.231083

H -0.736719 -0.614713 -1.607859

C -2.406167 -1.676265 -2.431888

H -2.916621 -0.818817 -2.880764

H -3.189623 -2.377398 -2.117893

C -1.529444 -2.357858 -3.476889

H -2.136704 -2.646209 -4.344673

H -0.785122 -1.633071 -3.840670

C -0.815128 -3.570081 -2.897190

H -1.562855 -4.335264 -2.636292

H -0.157473 -4.024412 -3.649938
C -0.021433 -3.197926 -1.654270
H 0.793545 -2.512485 -1.928493
H 0.451419 -4.086265 -1.216218
C -0.885811 -2.497529 -0.616018
H -1.658189 -3.192229 -0.253379
H -0.281760 -2.201736 0.248667
C -3.376273 1.005705 -0.998024
H -4.151962 0.404986 -1.499459
C -4.057267 2.038011 -0.095956
H -4.692487 1.552208 0.655742
H -3.276380 2.581929 0.455354
C -4.883569 3.033615 -0.899292
H -5.350843 3.760458 -0.222230
H -5.705899 2.501242 -1.401656
C -4.030982 3.741775 -1.940860
H -4.640782 4.439153 -2.529698
H -3.267455 4.347851 -1.429025
C -3.341375 2.733860 -2.847403
H -2.688296 3.245586 -3.566168
H -4.101056 2.201965 -3.441466
C -2.527540 1.724999 -2.047453
H -1.709268 2.233367 -1.525135
H -2.039425 1.015569 -2.724255
C 0.871492 2.645529 0.960832
H 0.631747 2.914328 2.000541
C 2.351678 2.930419 0.715162
H 2.590663 2.619269 -0.314773
H 2.982630 2.313688 1.368849
C 2.672227 4.408672 0.891358
H 2.505824 4.693144 1.942140
H 3.734830 4.592719 0.684463
C 1.795885 5.270735 -0.007061
H 2.038250 5.052820 -1.058775
H 2.013033 6.335745 0.148538
C 0.318980 4.986125 0.231175
H 0.053104 5.297428 1.253458

H -0.302533 5.586531 -0.447116
C 0.000737 3.506075 0.059023
H -1.057724 3.312263 0.276017
H 0.171084 3.205715 -0.985224
C 1.413761 0.170936 2.335952
H 2.445319 0.052929 1.976810
C 0.899805 -1.222812 2.676953
H -0.153797 -1.155506 2.984749
H 0.922874 -1.845891 1.776253
C 1.724509 -1.878127 3.775175
H 2.742775 -2.049904 3.395836
H 1.309317 -2.865286 4.019913
C 1.787790 -1.001046 5.016193
H 2.412361 -1.468420 5.789011
H 0.778325 -0.904574 5.446550
C 2.317323 0.382254 4.669872
H 2.350825 1.019602 5.563747
H 3.353993 0.288695 4.311732
C 1.482686 1.055024 3.583758
H 1.931362 2.026430 3.346251
H 0.477740 1.262642 3.975364
C 3.104748 -0.870531 -0.189585
C 4.306625 -0.192943 0.072484
C 3.059455 -2.214918 0.205536
C 5.389674 -0.807391 0.699699
H 4.409769 0.855882 -0.216728
C 4.134914 -2.845130 0.830413
H 2.158596 -2.803235 0.024847
C 5.307534 -2.141304 1.086600
H 6.302596 -0.241566 0.886518
H 4.054649 -3.892548 1.122156
H 6.148271 -2.627724 1.578624
C 2.774294 0.739131 -2.965530
H 0.395763 1.072056 -1.816617
H 3.784002 0.940806 -2.604077
H 2.185191 1.586951 -3.303694
C 3.310633 -1.727981 -3.163364

H 4.224771 -1.452440 -2.625096
H 2.856108 -2.538052 -2.579519
C 2.390300 -0.547633 -3.212856
H 1.429884 -0.706870 -3.711851
C 3.636498 -2.230755 -4.565199
H 4.137882 -1.457559 -5.160261
H 4.296825 -3.104695 -4.521386
H 2.728339 -2.526999 -5.106683

TS_{XIII→XIV}^a (CCW)

E = -2457.93180551

Pd 1.649330 -1.004597 0.678035
P -2.302608 0.103071 -0.029031
P 0.660031 0.203917 -1.036734
C -1.076194 0.502905 -1.155294
C -1.547405 1.103541 -2.469465
H -1.230306 0.510315 -3.342821
H -1.180367 2.128841 -2.631016
H -2.640748 1.160525 -2.537984
C -3.602904 1.430298 -0.063039
H -4.103200 1.265400 -1.029620
C -4.681964 1.330004 1.014695
H -4.231406 1.554088 1.991711
H -5.092605 0.314538 1.079313
C -5.794293 2.338866 0.752864
H -6.287859 2.092393 -0.199758
H -6.563421 2.259444 1.532033
C -5.243852 3.756681 0.688048
H -4.849898 4.032386 1.678353
H -6.046970 4.470585 0.464370
C -4.127386 3.868569 -0.340805
H -3.704001 4.881143 -0.339680
H -4.544575 3.708193 -1.347129
C -3.024765 2.845456 -0.096575
H -2.253644 2.922440 -0.867200
H -2.525094 3.061284 0.857363
C -1.691719 -0.173350 1.676406

H -0.860299 -0.878576 1.497130
C -2.677700 -0.836329 2.644088
H -3.147008 -1.722380 2.204971
H -3.489821 -0.142097 2.889229
C -1.961742 -1.220856 3.932399
H -2.671911 -1.683715 4.629891
H -1.209853 -1.988726 3.700592
C -1.288809 -0.018545 4.580610
H -2.066679 0.676768 4.932600
H -0.727347 -0.330016 5.471454
C -0.372971 0.708689 3.605877
H 0.479952 0.066404 3.348029
H 0.046583 1.608987 4.073056
C -1.091119 1.076282 2.315953
H -1.891248 1.799941 2.533920
H -0.399371 1.557288 1.616061
C -3.267700 -1.438464 -0.435903
H -4.132118 -1.485699 0.245281
C -3.777784 -1.392089 -1.878701
H -4.446059 -0.535162 -2.033750
H -2.915778 -1.243641 -2.544687
C -4.489166 -2.679218 -2.275250
H -4.828684 -2.608579 -3.316770
H -5.393394 -2.802185 -1.659390
C -3.582680 -3.885389 -2.085513
H -4.104712 -4.809666 -2.364795
H -2.717367 -3.795152 -2.760897
C -3.087608 -3.959332 -0.649788
H -2.402816 -4.807451 -0.520152
H -3.942983 -4.144422 0.018769
C -2.387223 -2.672577 -0.234735
H -1.477039 -2.536241 -0.830276
H -2.045082 -2.752769 0.802867
C 1.135748 -0.763192 -2.560801
H 0.921247 -0.101195 -3.413082
C 2.628793 -1.081764 -2.566605
H 2.848676 -1.712777 -1.690367

H 3.222260 -0.167932 -2.434595
C 3.037524 -1.812331 -3.838946
H 2.892203 -1.144649 -4.702595
H 4.108523 -2.053081 -3.809695
C 2.211228 -3.075982 -4.036659
H 2.436061 -3.781789 -3.222018
H 2.492670 -3.579022 -4.971201
C 0.720797 -2.763845 -4.025433
H 0.477521 -2.138860 -4.898894
H 0.133589 -3.686438 -4.131542
C 0.313959 -2.028392 -2.754751
H -0.753084 -1.773177 -2.783673
H 0.459834 -2.681066 -1.881316
C 1.536739 1.833663 -1.369658
H 2.546840 1.643807 -0.984531
C 0.934494 2.938017 -0.508499
H -0.100257 3.126102 -0.830710
H 0.880494 2.600245 0.532355
C 1.750447 4.220809 -0.584788
H 2.738076 4.034672 -0.137373
H 1.274658 5.006211 0.018181
C 1.926442 4.682381 -2.023305
H 2.546466 5.587714 -2.065473
H 0.944890 4.956220 -2.441789
C 2.539305 3.577777 -2.870377
H 2.655033 3.906658 -3.911941
H 3.550686 3.358426 -2.494951
C 1.708910 2.298613 -2.818488
H 2.209357 1.529329 -3.417269
H 0.736025 2.480059 -3.294177
C 3.140460 0.434589 1.005173
C 4.363904 0.435502 0.315420
C 2.946946 1.478172 1.920580
C 5.319063 1.433133 0.495616
H 4.583179 -0.364727 -0.394636
C 3.899633 2.478361 2.119480
H 2.020083 1.530207 2.492454

C 5.088804 2.467391 1.398808
H 6.250968 1.401187 -0.069076
H 3.705647 3.275563 2.837331
H 5.831352 3.250207 1.544731
C 3.236812 -2.377071 1.459041
H 0.444563 -2.026333 0.353014
H 4.006422 -1.758918 1.915212
H 3.499450 -2.879520 0.527908
C 1.903417 -2.309916 3.585011
H 2.421814 -1.357830 3.763460
H 0.837843 -2.127641 3.762351
C 2.114831 -2.726881 2.160111
H 1.488842 -3.538109 1.791033
C 2.396859 -3.370086 4.564396
H 3.473222 -3.543154 4.446867
H 2.213309 -3.064215 5.601347
H 1.887372 -4.328571 4.403254

TS_{XIII→XIV}^c (CW)

E = -2457.93063939
Pd 1.569269 -0.534681 0.970655
P -2.354935 0.053363 0.108056
P 0.520725 -0.330045 -1.070664
C -1.224790 -0.099347 -1.171837
C -1.801286 -0.125639 -2.577832
H -1.527282 -1.040931 -3.127832
H -1.473158 0.725849 -3.193889
H -2.897814 -0.099056 -2.584716
C -3.684129 1.243231 -0.414653
H -4.242963 0.676618 -1.175029
C -4.689717 1.634813 0.668122
H -4.181656 2.245542 1.427260
H -5.084829 0.750854 1.184579
C -5.828678 2.453937 0.070326
H -6.384833 1.828986 -0.645202
H -6.540357 2.735037 0.857363
C -5.301742 3.691884 -0.641630

H -4.838250 4.361047 0.099564
H -6.128346 4.255090 -1.093526
C -4.266980 3.322379 -1.694804
H -3.860532 4.225278 -2.168168
H -4.755051 2.745118 -2.495454
C -3.133933 2.491173 -1.106436
H -2.421685 2.208741 -1.885485
H -2.570502 3.096337 -0.384171
C -1.629006 0.559471 1.716721
H -0.767066 -0.127294 1.793331
C -2.514860 0.342050 2.948892
H -2.928448 -0.670394 2.976778
H -3.370635 1.027974 2.927844
C -1.714360 0.601529 4.219785
H -2.349998 0.438164 5.099719
H -0.896620 -0.132187 4.281828
C -1.134595 2.007875 4.230347
H -1.959651 2.736274 4.266520
H -0.537115 2.171056 5.136739
C -0.293878 2.257512 2.988056
H 0.584305 1.597571 3.002326
H 0.089222 3.285914 2.978527
C -1.071502 1.982124 1.708685
H -1.898971 2.702336 1.628014
H -0.428687 2.124461 0.832509
C -3.307043 -1.500142 0.495328
H -4.102555 -1.238408 1.210888
C -3.948418 -2.075969 -0.769711
H -4.654157 -1.362835 -1.214806
H -3.155528 -2.241674 -1.513524
C -4.655498 -3.397858 -0.499071
H -5.091948 -3.781783 -1.430276
H -5.495040 -3.227490 0.192413
C -3.702445 -4.415806 0.107599
H -4.223114 -5.360729 0.309624
H -2.907504 -4.642801 -0.620100
C -3.071236 -3.866111 1.377070

H -2.352379 -4.583876 1.793152
H -3.852679 -3.729141 2.140905
C -2.373058 -2.538047 1.118759
H -1.535201 -2.687250 0.428768
H -1.921622 -2.164712 2.044538
C 0.935192 -1.880828 -2.019064
H 0.674014 -1.669626 -3.066895
C 2.433450 -2.165638 -1.944089
H 2.699284 -2.314945 -0.884494
H 3.010620 -1.295134 -2.281586
C 2.812294 -3.400579 -2.751124
H 2.629242 -3.204042 -3.819079
H 3.887386 -3.601123 -2.652482
C 2.000110 -4.613465 -2.319207
H 2.259902 -4.867723 -1.279937
H 2.260301 -5.488807 -2.928823
C 0.506477 -4.328762 -2.401778
H 0.227998 -4.167663 -3.454938
H -0.070676 -5.197983 -2.057860
C 0.129977 -3.096965 -1.588182
H -0.942258 -2.882965 -1.686692
H 0.319529 -3.284997 -0.521265
C 1.336399 0.969996 -2.146059
H 2.375071 0.944887 -1.793120
C 0.792294 2.348436 -1.791174
H -0.261684 2.414513 -2.100068
H 0.811810 2.474888 -0.702761
C 1.606775 3.451846 -2.450333
H 2.624170 3.432093 -2.031454
H 1.184113 4.434841 -2.202051
C 1.672578 3.262426 -3.958475
H 2.290845 4.043801 -4.420040
H 0.662198 3.372436 -4.383512
C 2.213111 1.883701 -4.308124
H 2.242479 1.744131 -5.397217
H 3.252297 1.807591 -3.953038
C 1.392608 0.770285 -3.662236

H 1.848812 -0.194954 -3.912056
H 0.385173 0.762100 -4.099237
C 2.994273 0.964994 0.604841
C 4.157679 0.689894 -0.135129
C 2.860958 2.285627 1.056239
C 5.119712 1.659458 -0.410220
H 4.326115 -0.320097 -0.515912
C 3.818028 3.267462 0.796162
H 1.979449 2.576528 1.626893
C 4.955175 2.960240 0.057523
H 6.004382 1.397376 -0.991031
H 3.668778 4.280956 1.169209
H 5.703200 3.723216 -0.152094
C 4.266892 -0.627377 2.890291
H 4.883851 -0.600516 1.986206
H 4.035694 0.417703 3.129052
C 1.795527 -1.065806 3.191988
H 1.698471 -0.147935 3.773407
H 0.453742 -1.692857 1.080547
C 2.997479 -1.372878 2.621848
H 3.108922 -2.366555 2.176744
H 1.000308 -1.798413 3.287689
C 5.049115 -1.279156 4.026552
H 5.993757 -0.750353 4.199991
H 4.477142 -1.268808 4.962643
H 5.291301 -2.325480 3.799426

TS_{XIII→XIV}^c (CCW)

E = -2457.93224881

Pd 1.545750 -0.906547 0.940939
P -2.172099 0.237398 -0.207463
P 0.822992 -0.027308 -1.058175
C -0.874570 0.366623 -1.320292
C -1.229700 0.778763 -2.739599
H -0.906398 0.033975 -3.485029
H -0.778138 1.739111 -3.033805
H -2.309659 0.893225 -2.892062

C -3.367395 1.619617 -0.557483
H -3.798886 1.317726 -1.523943
C -4.540235 1.772181 0.410732
H -4.164776 2.137839 1.377074
H -5.029425 0.808825 0.602210
C -5.550170 2.778426 -0.130051
H -5.978936 2.389096 -1.066246
H -6.385414 2.885524 0.574110
C -4.897571 4.127947 -0.394471
H -4.567706 4.559509 0.563062
H -5.627639 4.830790 -0.815987
C -3.694858 3.987579 -1.317095
H -3.204266 4.958965 -1.459361
H -4.036414 3.663727 -2.312574
C -2.690847 2.972788 -0.784734
H -1.849006 2.866210 -1.473346
H -2.267057 3.338907 0.159494
C -1.685393 0.224954 1.569107
H -0.873928 -0.524935 1.585280
C -2.792812 -0.227465 2.531918
H -3.171368 -1.218139 2.260953
H -3.646429 0.456548 2.468149
C -2.310265 -0.254588 3.979323
H -3.148336 -0.525504 4.634508
H -1.557783 -1.045443 4.099844
C -1.700652 1.071225 4.403180
H -2.477428 1.851715 4.397539
H -1.329222 1.008895 5.434133
C -0.583683 1.467332 3.452154
H 0.220404 0.717640 3.497292
H -0.136134 2.423661 3.750742
C -1.084653 1.555207 2.018405
H -1.849622 2.343000 1.959552
H -0.273460 1.838914 1.339162
C -3.222188 -1.288906 -0.401870
H -4.099553 -1.180690 0.255114
C -3.700234 -1.443403 -1.847660

H -4.322584 -0.591631 -2.150840
H -2.818102 -1.441008 -2.504399
C -4.470531 -2.740776 -2.058931
H -4.782965 -2.818651 -3.108387
H -5.393509 -2.718145 -1.459246
C -3.637783 -3.947281 -1.654699
H -4.205437 -4.875275 -1.800938
H -2.754433 -4.010775 -2.309345
C -3.177765 -3.818029 -0.211211
H -2.543449 -4.668601 0.070245
H -4.055332 -3.849599 0.453489
C -2.415004 -2.519798 0.012171
H -1.491510 -2.525918 -0.577250
H -2.088464 -2.451786 1.055882
C 1.319022 -1.265707 -2.360348
H 1.237859 -0.737989 -3.322509
C 2.773275 -1.690454 -2.164141
H 2.857010 -2.171495 -1.175875
H 3.433596 -0.813773 -2.131234
C 3.224886 -2.658609 -3.250130
H 3.222619 -2.138909 -4.221044
H 4.261243 -2.973144 -3.069008
C 2.304895 -3.869257 -3.328475
H 2.386588 -4.442775 -2.392225
H 2.622102 -4.542745 -4.135578
C 0.855855 -3.444382 -3.524456
H 0.752771 -2.955463 -4.505811
H 0.196931 -4.323268 -3.545117
C 0.407696 -2.481238 -2.432433
H -0.627925 -2.159194 -2.603117
H 0.425539 -2.991169 -1.458505
C 1.855868 1.451377 -1.571868
H 2.819150 1.239636 -1.088527
C 1.309977 2.717169 -0.922769
H 0.325069 2.950316 -1.354611
H 1.152423 2.536782 0.146118
C 2.259582 3.891553 -1.109828

H 3.193209 3.675734 -0.568656
H 1.835899 4.797078 -0.654753
C 2.565068 4.124862 -2.581957
H 3.278026 4.951202 -2.703120
H 1.642524 4.430117 -3.100898
C 3.105581 2.858898 -3.229669
H 3.305363 3.024805 -4.296907
H 4.070599 2.604287 -2.765330
C 2.152836 1.679288 -3.055736
H 2.608545 0.788894 -3.504218
H 1.228515 1.873272 -3.616479
C 3.010989 0.558325 1.306195
C 4.298507 0.378869 0.769187
C 2.827843 1.717572 2.072641
C 5.327414 1.298266 0.963988
H 4.510681 -0.508566 0.166799
C 3.849576 2.644151 2.284533
H 1.855201 1.923944 2.517588
C 5.106323 2.442413 1.725231
H 6.307408 1.119685 0.520986
H 3.658320 3.532968 2.886250
H 5.905230 3.165263 1.882979
C 0.518118 -2.859181 3.237021
H -0.412293 -2.345003 2.967926
H 0.587104 -3.719885 2.560174
C 2.779134 -2.296719 2.247503
H 0.465062 -2.040659 0.558818
H 3.704291 -1.728868 2.304397
H 2.805759 -3.254594 1.727253
C 1.687075 -1.951973 2.988809
H 1.763357 -1.066423 3.626507
C 0.448293 -3.309842 4.690376
H -0.412455 -3.968153 4.857544
H 1.353776 -3.854933 4.983369
H 0.346325 -2.451555 5.367677

XIV^a

E = -2457.93841347

Pd 1.552349 -1.061882 0.847623

P -2.182792 0.294633 -0.158943

P 0.841251 0.182900 -0.963420

C -0.854377 0.614505 -1.192583

C -1.180048 1.262670 -2.528387

H -0.845820 0.652764 -3.383797

H -0.719553 2.255656 -2.647622

H -2.256495 1.408483 -2.678374

C -3.372982 1.720380 -0.282161

H -3.783935 1.597684 -1.296056

C -4.565563 1.706490 0.672913

H -4.209214 1.910616 1.692118

H -5.053807 0.724313 0.695624

C -5.566318 2.790872 0.289538

H -5.966731 2.574799 -0.712891

H -6.421385 2.771677 0.977604

C -4.910722 4.164655 0.290811

H -4.612602 4.416599 1.320165

H -5.629312 4.933718 -0.020419

C -3.679789 4.189909 -0.604326

H -3.185166 5.168135 -0.549947

H -3.990713 4.057771 -1.652333

C -2.690600 3.088074 -0.242891

H -1.833365 3.104896 -0.920392

H -2.288265 3.268545 0.763317

C -1.743152 -0.058484 1.591452

H -0.995062 -0.863961 1.488177

C -2.900813 -0.577822 2.453970

H -3.405952 -1.426766 1.980973

H -3.656178 0.205572 2.574163

C -2.410941 -0.984732 3.838574

H -3.265697 -1.302922 4.449587

H -1.756510 -1.859639 3.742938

C -1.656684 0.143872 4.526730

H -2.358277 0.963609 4.746806

H -1.264035 -0.194561 5.494361
C -0.532488 0.677891 3.651350
H 0.234851 -0.098317 3.502184
H -0.029294 1.518343 4.145965
C -1.045946 1.109138 2.284980
H -1.755360 1.941267 2.409568
H -0.223788 1.472495 1.659616
C -3.233060 -1.161502 -0.662121
H -4.154291 -1.138408 -0.058942
C -3.610481 -1.069193 -2.142779
H -4.192653 -0.160716 -2.344477
H -2.685283 -0.986280 -2.730543
C -4.385628 -2.293333 -2.612444
H -4.625048 -2.193038 -3.679003
H -5.347654 -2.343805 -2.079582
C -3.600541 -3.570216 -2.355452
H -4.169372 -4.447795 -2.688593
H -2.674327 -3.549899 -2.950928
C -3.243066 -3.688913 -0.882330
H -2.644728 -4.591277 -0.700881
H -4.166764 -3.803971 -0.293920
C -2.479843 -2.465159 -0.394060
H -1.510803 -2.404384 -0.904222
H -2.247852 -2.573909 0.671788
C 1.350438 -0.817759 -2.452367
H 1.274318 -0.136397 -3.312754
C 2.802090 -1.274555 -2.326493
H 2.878337 -1.929208 -1.443229
H 3.462889 -0.420875 -2.126697
C 3.257335 -2.030701 -3.567929
H 3.256408 -1.345136 -4.429788
H 4.293472 -2.372640 -3.444514
C 2.338459 -3.208739 -3.862611
H 2.422213 -3.941025 -3.044655
H 2.655780 -3.726190 -4.777570
C 0.887972 -2.759316 -3.978469
H 0.781838 -2.105658 -4.858248

H 0.230810 -3.622502 -4.152563
C 0.439410 -2.002380 -2.734614
H -0.596272 -1.656208 -2.844648
H 0.456670 -2.676513 -1.865560
C 1.861515 1.740175 -1.219375
H 2.813650 1.484120 -0.735927
C 1.260675 2.896466 -0.427675
H 0.286240 3.164122 -0.861008
H 1.066460 2.575181 0.601619
C 2.179178 4.110120 -0.423911
H 3.100945 3.851003 0.117459
H 1.710700 4.935653 0.129116
C 2.527456 4.543925 -1.839778
H 3.217920 5.397644 -1.823761
H 1.614757 4.890088 -2.350380
C 3.129824 3.388137 -2.623772
H 3.366633 3.697724 -3.650662
H 4.082293 3.096491 -2.155064
C 2.204964 2.174532 -2.646747
H 2.702170 1.364262 -3.191823
H 1.296651 2.420496 -3.213593
C 3.050270 0.308481 1.377545
C 4.328784 0.183487 0.810746
C 2.859087 1.392477 2.242902
C 5.344062 1.104887 1.057504
H 4.544693 -0.656098 0.146626
C 3.869090 2.318279 2.504826
H 1.893346 1.534296 2.726834
C 5.116631 2.185571 1.904758
H 6.319629 0.976069 0.588574
H 3.675946 3.152746 3.179171
H 5.905300 2.909823 2.101946
C 2.625688 -2.206281 2.390130
H 0.396125 -1.993963 0.246985
H 2.529622 -1.670139 3.334469
H 3.635078 -2.284854 1.992796
C 0.386726 -3.317502 2.767117

H 0.220533 -2.478848 3.454158
H -0.503194 -3.381333 2.128003
C 1.604209 -3.019236 1.937805
H 1.829952 -3.745359 1.154714
C 0.543784 -4.608528 3.560740
H 1.402373 -4.552117 4.240701
H -0.350983 -4.816179 4.160268
H 0.704611 -5.466052 2.895068

XIV^c

E = -2457.93977853
Pd -1.551770 0.614103 1.034776
P 2.267875 0.004902 -0.101794
P -0.725951 -0.182384 -0.966616
C 1.013555 -0.313291 -1.226631
C 1.445603 -0.662827 -2.640571
H 1.035272 0.033897 -3.390338
H 1.137976 -1.674978 -2.947448
H 2.534509 -0.624924 -2.770595
C 3.655476 -1.197404 -0.387995
H 4.101278 -0.853308 -1.333783
C 4.766555 -1.173428 0.661479
H 4.368978 -1.556260 1.611659
H 5.114266 -0.150465 0.852946
C 5.931079 -2.058398 0.232183
H 6.375613 -1.648735 -0.687828
H 6.719338 -2.036450 0.995776
C 5.470091 -3.486950 -0.020014
H 5.123783 -3.923993 0.929182
H 6.309793 -4.107240 -0.358829
C 4.333347 -3.527474 -1.031495
H 3.977705 -4.556548 -1.169494
H 4.709266 -3.195325 -2.011715
C 3.173198 -2.629939 -0.618787
H 2.388743 -2.646218 -1.379650
H 2.714095 -3.017721 0.300402
C 1.738466 -0.023580 1.656231

H 0.833481 0.607766 1.614148
C 2.695221 0.611379 2.671254
H 3.040415 1.596991 2.344359
H 3.591836 -0.009040 2.791743
C 2.001762 0.732708 4.024047
H 2.679682 1.199619 4.750246
H 1.136065 1.405661 3.923278
C 1.529103 -0.623357 4.526012
H 2.406921 -1.260488 4.716176
H 1.008589 -0.517482 5.486561
C 0.626664 -1.298185 3.505010
H -0.300137 -0.716816 3.391024
H 0.327323 -2.295148 3.852692
C 1.292171 -1.402548 2.139164
H 2.163534 -2.070550 2.209738
H 0.602265 -1.842904 1.410734
C 3.104016 1.656938 -0.306456
H 3.984915 1.666858 0.354840
C 3.568441 1.863577 -1.750231
H 4.272017 1.079068 -2.056948
H 2.692587 1.776027 -2.409711
C 4.207750 3.232339 -1.948092
H 4.519471 3.348791 -2.994156
H 5.123646 3.295884 -1.340608
C 3.257818 4.349415 -1.544263
H 3.738829 5.328266 -1.667965
H 2.385762 4.341192 -2.216392
C 2.783470 4.160765 -0.111685
H 2.060558 4.940740 0.160908
H 3.638645 4.276052 0.572495
C 2.154981 2.788342 0.089863
H 1.254719 2.698693 -0.528523
H 1.811946 2.681173 1.124915
C -1.398367 0.981032 -2.259492
H -1.246986 0.482925 -3.228594
C -2.895912 1.195855 -2.049087
H -3.035864 1.653498 -1.055986

H -3.426396 0.235246 -2.013535
C -3.489497 2.104533 -3.117095
H -3.419278 1.608106 -4.097526
H -4.558876 2.264259 -2.925648
C -2.752126 3.435380 -3.174019
H -2.905510 3.970039 -2.223217
H -3.168729 4.075425 -3.962858
C -1.259409 3.224448 -3.388173
H -1.097284 2.773150 -4.379375
H -0.731530 4.187865 -3.395813
C -0.669129 2.314275 -2.318587
H 0.399728 2.143791 -2.501434
H -0.748886 2.803668 -1.336533
C -1.514364 -1.802652 -1.498805
H -2.488130 -1.777446 -0.990256
C -0.735732 -2.974844 -0.911439
H 0.268101 -3.003127 -1.358818
H -0.593453 -2.814550 0.162818
C -1.446946 -4.299851 -1.144849
H -2.395180 -4.293718 -0.587503
H -0.847486 -5.125574 -0.737871
C -1.730218 -4.521100 -2.622659
H -2.273000 -5.463286 -2.775826
H -0.777251 -4.617581 -3.166781
C -2.518354 -3.354486 -3.198511
H -2.712142 -3.507840 -4.268703
H -3.500878 -3.308602 -2.704189
C -1.802191 -2.023957 -2.985704
H -2.430509 -1.218920 -3.383621
H -0.872580 -2.013204 -3.571299
C -2.875526 -0.987899 1.297920
C -4.176318 -0.877539 0.779934
C -2.550882 -2.208723 1.902066
C -5.086200 -1.931851 0.826507
H -4.494881 0.057973 0.315136
C -3.454046 -3.270006 1.960920
H -1.560981 -2.353337 2.333250

C -4.726171 -3.141140 1.413883
H -6.083272 -1.806947 0.403993
H -3.157384 -4.206761 2.433061
H -5.431761 -3.969438 1.452508
C -2.476028 3.517932 1.645261
H -1.775780 3.924799 0.905318
H -3.337439 3.140333 1.077670
C -2.548708 1.299182 2.872008
H -3.618092 1.214362 2.684889
H -0.526004 1.765284 0.604954
C -1.829224 2.372905 2.380498
H -0.856417 2.590239 2.825542
H -2.158800 0.675618 3.674400
C -2.922867 4.621988 2.596258
H -3.374625 5.457792 2.048384
H -3.661817 4.248915 3.315618
H -2.075070 5.019101 3.169283

TS_{XIV→XV}^a

E = -2457.93266762

Pd 1.535492 0.962013 -0.974482
P -2.152050 -0.306981 0.206788
P 0.865068 -0.139687 0.970184
C -0.827907 -0.545403 1.267359
C -1.151692 -1.077608 2.653163
H -0.807604 -0.400808 3.452511
H -0.695034 -2.059801 2.852605
H -2.228337 -1.204318 2.821370
C -3.361978 -1.697769 0.446145
H -3.780873 -1.480288 1.440819
C -4.542056 -1.742630 -0.523613
H -4.175254 -2.022754 -1.521159
H -5.017353 -0.758677 -0.623197
C -5.562895 -2.782232 -0.074809
H -5.978415 -2.481914 0.899370
H -6.405156 -2.807987 -0.778272
C -4.926363 -4.159492 0.047514

H -4.610795 -4.497364 -0.951572
H -5.661826 -4.891935 0.404261
C -3.714464 -4.126846 0.967972
H -3.234390 -5.113007 1.006591
H -4.044368 -3.902300 1.994231
C -2.701107 -3.074044 0.535002
H -1.856789 -3.045786 1.228490
H -2.282943 -3.345703 -0.443466
C -1.702019 -0.115045 -1.568782
H -0.899677 0.643895 -1.526073
C -2.822479 0.413285 -2.474418
H -3.250328 1.342580 -2.084814
H -3.643133 -0.311493 -2.514389
C -2.319069 0.643111 -3.895684
H -3.148677 0.989620 -4.525490
H -1.575267 1.452084 -3.891115
C -1.683971 -0.607952 -4.480041
H -2.453290 -1.387979 -4.591543
H -1.297478 -0.406025 -5.487221
C -0.576447 -1.119798 -3.573883
H 0.234731 -0.377035 -3.519898
H -0.133705 -2.035776 -3.984873
C -1.087243 -1.379938 -2.163913
H -1.846964 -2.175079 -2.198056
H -0.276865 -1.731827 -1.517544
C -3.175533 1.206698 0.573718
H -4.083762 1.166080 -0.048002
C -3.582150 1.246499 2.048320
H -4.206908 0.382055 2.307774
H -2.671423 1.172138 2.660044
C -4.312390 2.535094 2.404509
H -4.575949 2.529009 3.470046
H -5.261280 2.583169 1.848387
C -3.469506 3.755423 2.067159
H -4.007997 4.678394 2.317781
H -2.557425 3.745700 2.684087
C -3.078731 3.744104 0.597760

H -2.435768 4.602561 0.361475
H -3.984598 3.855546 -0.018285
C -2.365652 2.453383 0.219485
H -1.406676 2.388131 0.748161
H -2.116499 2.466976 -0.846360
C 1.411359 0.961209 2.375482
H 1.352323 0.354969 3.291637
C 2.860776 1.400872 2.175880
H 2.915414 1.977022 1.237921
H 3.517183 0.532649 2.030938
C 3.348533 2.261688 3.334121
H 3.365479 1.656240 4.253762
H 4.382639 2.585356 3.156449
C 2.441268 3.466697 3.542841
H 2.508357 4.121894 2.660262
H 2.781869 4.063182 4.399432
C 0.992553 3.037777 3.732612
H 0.904757 2.467680 4.670452
H 0.342071 3.916569 3.841957
C 0.512684 2.171411 2.574912
H -0.521719 1.843693 2.739913
H 0.511468 2.766002 1.648402
C 1.893695 -1.675008 1.310954
H 2.837026 -1.454160 0.791949
C 1.274439 -2.878487 0.608884
H 0.300597 -3.104159 1.067324
H 1.076635 -2.625473 -0.437905
C 2.178833 -4.100350 0.677696
H 3.097115 -3.890697 0.109461
H 1.694282 -4.955849 0.187640
C 2.538508 -4.439702 2.115807
H 3.218617 -5.301090 2.152295
H 1.627717 -4.737657 2.659192
C 3.164165 -3.239497 2.810199
H 3.409543 -3.479622 3.853575
H 4.114865 -2.994816 2.312128
C 2.256170 -2.013958 2.758648

H 2.772161 -1.174333 3.238013
H 1.352546 -2.205230 3.353759
C 2.960704 -0.456396 -1.480797
C 4.258343 -0.245239 -0.983394
C 2.770743 -1.620324 -2.234917
C 5.293103 -1.153742 -1.195614
H 4.472301 0.652092 -0.399200
C 3.799656 -2.534937 -2.459692
H 1.792726 -1.838938 -2.658402
C 5.067299 -2.311457 -1.934099
H 6.282395 -0.954113 -0.783696
H 3.604822 -3.432334 -3.047152
H 5.871108 -3.026061 -2.103546
C 2.223288 2.146223 -2.602997
H 0.591605 2.213411 -0.544959
H 1.849875 1.737918 -3.543913
H 3.306044 2.189533 -2.508179
C 0.126989 3.590889 -2.410873
H -0.470653 2.784072 -2.852719
H -0.476302 4.012425 -1.597208
C 1.404991 3.013777 -1.849465
H 1.923235 3.684918 -1.159831
C 0.403666 4.662577 -3.455469
H 0.964484 4.250943 -4.303014
H -0.529742 5.091289 -3.839956
H 0.998627 5.482811 -3.033965

TS_{XIV→XV}^b

E = -2457.93570211

Pd -1.533714 0.626952 1.078770
P 2.244795 -0.060467 -0.147986
P -0.763160 -0.228552 -0.941660
C 0.969352 -0.380492 -1.248263
C 1.369683 -0.743363 -2.667919
H 0.949939 -0.046989 -3.412825
H 1.042829 -1.753731 -2.960154
H 2.455716 -0.719571 -2.823432

C 3.630344 -1.253714 -0.466137
H 4.050669 -0.909561 -1.423668
C 4.765511 -1.222542 0.556627
H 4.391395 -1.609647 1.514705
H 5.110423 -0.197311 0.741442
C 5.924509 -2.100412 0.099076
H 6.343267 -1.688780 -0.832065
H 6.731549 -2.073144 0.842599
C 5.465924 -3.532143 -0.140007
H 5.148719 -3.970658 0.818627
H 6.300201 -4.147152 -0.501088
C 4.302064 -3.582022 -1.119969
H 3.948900 -4.613578 -1.245028
H 4.648717 -3.250727 -2.111177
C 3.148673 -2.689812 -0.677861
H 2.340871 -2.714918 -1.414033
H 2.720480 -3.075054 0.257336
C 1.753709 -0.090200 1.621944
H 0.852802 0.546429 1.600477
C 2.734563 0.535697 2.619566
H 3.090142 1.514976 2.284386
H 3.623461 -0.097642 2.727944
C 2.064711 0.669362 3.983156
H 2.759917 1.129900 4.696947
H 1.205510 1.352599 3.895189
C 1.582110 -0.679109 4.496199
H 2.454422 -1.326973 4.675068
H 1.077580 -0.563200 5.464011
C 0.655074 -1.343664 3.490564
H -0.264289 -0.747526 3.388118
H 0.345730 -2.334777 3.845808
C 1.301338 -1.462540 2.116344
H 2.168520 -2.137336 2.177477
H 0.598591 -1.899083 1.398585
C 3.058293 1.605113 -0.360508
H 3.956119 1.630265 0.276686
C 3.476273 1.820461 -1.816998

H 4.208263 1.065451 -2.131500
H 2.590233 1.684818 -2.453987
C 4.042611 3.215364 -2.049708
H 4.319977 3.330919 -3.105437
H 4.969706 3.335079 -1.468267
C 3.047001 4.287918 -1.635770
H 3.466667 5.288987 -1.798051
H 2.151956 4.214158 -2.273235
C 2.639726 4.105017 -0.182377
H 1.887420 4.851498 0.105927
H 3.513925 4.278173 0.464320
C 2.089855 2.707794 0.069601
H 1.162466 2.569610 -0.498186
H 1.812258 2.603890 1.124952
C -1.454057 0.921340 -2.238779
H -1.321487 0.423391 -3.210825
C -2.945973 1.147501 -2.000898
H -3.061641 1.612395 -1.007991
H -3.485026 0.192685 -1.945738
C -3.553368 2.057420 -3.059936
H -3.499711 1.561208 -4.041463
H -4.619095 2.220794 -2.852111
C -2.812705 3.386117 -3.126710
H -2.950907 3.920161 -2.173063
H -3.238161 4.028678 -3.908717
C -1.323717 3.171167 -3.361411
H -1.175445 2.723596 -4.356339
H -0.792274 4.132872 -3.371507
C -0.723060 2.253283 -2.304624
H 0.343763 2.083902 -2.499522
H -0.792900 2.739193 -1.319146
C -1.589654 -1.845136 -1.421534
H -2.555418 -1.787303 -0.898792
C -0.825155 -3.017055 -0.815595
H 0.176415 -3.069835 -1.267417
H -0.675504 -2.836779 0.254201
C -1.558438 -4.335846 -1.013811

H -2.500501 -4.302683 -0.446858
H -0.967555 -5.161731 -0.594829
C -1.861228 -4.585092 -2.483183
H -2.419453 -5.522203 -2.609722
H -0.915702 -4.707710 -3.034990
C -2.638028 -3.419412 -3.076126
H -2.844810 -3.592800 -4.140830
H -3.614863 -3.348328 -2.573741
C -1.899138 -2.096223 -2.899004
H -2.517788 -1.289534 -3.308547
H -0.975376 -2.113739 -3.493684
C -2.911414 -0.887302 1.392161
C -4.221278 -0.719624 0.913491
C -2.626068 -2.119660 1.995136
C -5.177913 -1.729322 0.998331
H -4.509638 0.224675 0.448679
C -3.575687 -3.136414 2.090054
H -1.631185 -2.309122 2.396320
C -4.857530 -2.950579 1.583181
H -6.180998 -1.559549 0.606744
H -3.308386 -4.083198 2.559792
H -5.599911 -3.744214 1.650406
C -1.833694 3.778172 1.466679
H -1.046733 4.128266 0.785085
H -2.691217 3.512359 0.833444
C -2.266027 1.649679 2.801936
H -3.338235 1.792401 2.665383
H -0.534943 1.862509 0.803472
C -1.359320 2.542945 2.197548
H -0.382608 2.654401 2.676466
H -1.975644 1.087975 3.688357
C -2.217592 4.893350 2.428820
H -2.542816 5.789298 1.886623
H -3.035139 4.580128 3.088910
H -1.369541 5.177843 3.065037

XV^a

E = -2457.93486568

Pd -1.572292 0.475568 1.039556

P 2.335469 0.141330 -0.014906

P -0.623719 -0.083246 -0.995040

C 1.127263 -0.121790 -1.202728

C 1.615113 -0.324400 -2.627454

H 1.194269 0.417049 -3.326504

H 1.366445 -1.318535 -3.030475

H 2.703874 -0.225241 -2.717842

C 3.784942 -0.962309 -0.382344

H 4.226799 -0.507790 -1.282236

C 4.880694 -0.985066 0.683326

H 4.493550 -1.478491 1.585636

H 5.172284 0.030792 0.978619

C 6.094552 -1.763305 0.187633

H 6.527863 -1.241132 -0.679230

H 6.871719 -1.778276 0.962703

C 5.712355 -3.180884 -0.213913

H 5.379251 -3.728746 0.680985

H 6.587588 -3.719605 -0.599192

C 4.590396 -3.178250 -1.242627

H 4.291399 -4.205330 -1.488095

H 4.958310 -2.730168 -2.178759

C 3.380638 -2.388047 -0.758911

H 2.602566 -2.370759 -1.526326

H 2.938392 -2.889231 0.112000

C 1.760550 -0.095820 1.711320

H 0.821930 0.488221 1.706589

C 2.658968 0.477192 2.812593

H 2.943901 1.513135 2.605510

H 3.592049 -0.095954 2.879450

C 1.942935 0.401088 4.156721

H 2.583261 0.819623 4.944030

H 1.040753 1.030078 4.115997

C 1.545500 -1.028638 4.492451

H 2.456372 -1.632857 4.626404

H 1.006906 -1.063324 5.448335
C 0.698220 -1.631552 3.382923
H -0.254876 -1.089222 3.315227
H 0.448031 -2.676114 3.608618
C 1.390913 -1.543590 2.030321
H 2.300881 -2.161384 2.051005
H 0.745058 -1.943851 1.240923
C 3.092827 1.843065 -0.032967
H 3.954931 1.833251 0.652836
C 3.580249 2.205743 -1.438165
H 4.344536 1.499450 -1.786969
H 2.729981 2.118193 -2.130182
C 4.126411 3.626375 -1.503473
H 4.454813 3.850065 -2.526795
H 5.019929 3.702954 -0.864920
C 3.088032 4.635678 -1.039220
H 3.494868 5.654449 -1.077322
H 2.230158 4.612504 -1.729477
C 2.606471 4.299259 0.363251
H 1.826808 5.002741 0.683189
H 3.441762 4.416732 1.071340
C 2.070165 2.876376 0.440190
H 1.181190 2.779863 -0.192904
H 1.723788 2.660505 1.456435
C -1.300409 1.158536 -2.210294
H -1.061912 0.765783 -3.210067
C -2.817961 1.261012 -2.079525
H -3.045628 1.595501 -1.055408
H -3.286862 0.273838 -2.183289
C -3.406069 2.246193 -3.080848
H -3.249277 1.864257 -4.101690
H -4.492734 2.322260 -2.941724
C -2.752788 3.615449 -2.951460
H -2.991797 4.034065 -1.961145
H -3.165413 4.312155 -3.692985
C -1.240498 3.513768 -3.094674
H -0.997123 3.181556 -4.115973

H -0.774589 4.500893 -2.970443
C -0.652830 2.529822 -2.091406
H 0.432041 2.438175 -2.232430
H -0.809185 2.903280 -1.068539
C -1.326474 -1.677948 -1.695282
H -2.332597 -1.708090 -1.255007
C -0.561906 -2.870957 -1.133769
H 0.472001 -2.848486 -1.508932
H -0.502132 -2.781461 -0.043695
C -1.226003 -4.189694 -1.502494
H -2.209037 -4.236966 -1.010728
H -0.637855 -5.030608 -1.110523
C -1.405414 -4.316882 -3.007553
H -1.915877 -5.256198 -3.258382
H -0.416155 -4.360479 -3.490231
C -2.178027 -3.128487 -3.559599
H -2.293861 -3.213428 -4.648522
H -3.193253 -3.133471 -3.134142
C -1.506669 -1.803321 -3.210283
H -2.121744 -0.983347 -3.598408
H -0.540011 -1.739645 -3.727586
C -2.861712 -1.179535 1.095831
C -4.140295 -1.104785 0.516169
C -2.527419 -2.407493 1.683849
C -5.018094 -2.186884 0.498805
H -4.468059 -0.171267 0.051585
C -3.397727 -3.497989 1.680906
H -1.551923 -2.535349 2.153264
C -4.647577 -3.396122 1.079944
H -5.997291 -2.085147 0.030510
H -3.092629 -4.435613 2.146023
H -5.327567 -4.246453 1.069295
C -1.983649 1.256856 3.128977
H -0.602406 1.760546 0.908565
H -1.242722 2.030008 3.322951
H -1.931745 0.348215 3.726589
C -3.403335 2.853677 1.767823

H -2.480311 3.443436 1.698343
H -3.755802 2.704900 0.737744
C -3.093702 1.521287 2.377133
H -3.905805 0.792636 2.386074
C -4.469515 3.604976 2.558807
H -4.133099 3.806133 3.583071
H -4.704876 4.564920 2.084460
H -5.399701 3.026819 2.622502

XV^b

E = -2457.94905634

Pd -1.567652 0.593563 1.107223
P 2.248575 -0.025391 -0.167512
P -0.741433 -0.333694 -0.921863
C 0.991423 -0.433214 -1.258621
C 1.406924 -0.819022 -2.667007
H 0.955062 -0.164433 -3.430787
H 1.121288 -1.850780 -2.926447
H 2.490928 -0.755052 -2.827914
C 3.682115 -1.172724 -0.434771
H 4.093271 -0.843594 -1.401916
C 4.809966 -1.067842 0.590597
H 4.444423 -1.436991 1.559043
H 5.117704 -0.025598 0.743437
C 6.001333 -1.919701 0.167496
H 6.409511 -1.526265 -0.776117
H 6.803494 -1.837923 0.912283
C 5.594120 -3.374005 -0.022381
H 5.287393 -3.789188 0.949947
H 6.451043 -3.971920 -0.358196
C 4.438004 -3.498562 -1.004641
H 4.120580 -4.545302 -1.094220
H 4.778468 -3.191230 -2.005648
C 3.252126 -2.630973 -0.600353
H 2.450752 -2.708594 -1.339941
H 2.830032 -2.997621 0.345292
C 1.747466 0.000178 1.601728

H 0.830911 0.614025 1.560033
C 2.713176 0.682199 2.577825
H 3.056695 1.652640 2.206766
H 3.610612 0.066318 2.710471
C 2.039610 0.854436 3.935070
H 2.724148 1.359117 4.629013
H 1.163752 1.512088 3.821448
C 1.590909 -0.484901 4.499592
H 2.478873 -1.103973 4.702206
H 1.082933 -0.344633 5.462244
C 0.679072 -1.206713 3.520154
H -0.252771 -0.633623 3.398239
H 0.393490 -2.191446 3.911405
C 1.325020 -1.361561 2.148926
H 2.207951 -2.013676 2.229644
H 0.629816 -1.837879 1.449814
C 2.992214 1.665845 -0.435097
H 3.897658 1.745958 0.186570
C 3.378606 1.856305 -1.903515
H 4.138004 1.123772 -2.206439
H 2.490933 1.662766 -2.522660
C 3.877746 3.267186 -2.186612
H 4.137852 3.361909 -3.248733
H 4.804213 3.448777 -1.620448
C 2.836298 4.303762 -1.794577
H 3.205362 5.318084 -1.993152
H 1.939426 4.168092 -2.418744
C 2.456091 4.150376 -0.330659
H 1.670733 4.867454 -0.056569
H 3.328716 4.390974 0.296125
C 1.984584 2.737008 -0.014139
H 1.044527 2.533058 -0.541919
H 1.755288 2.663621 1.054446
C -1.490172 0.749696 -2.248463
H -1.336093 0.251534 -3.217466
C -2.990101 0.918216 -2.010402
H -3.122720 1.396057 -1.025846

H -3.491914 -0.055170 -1.934900
C -3.635587 1.785899 -3.082368
H -3.554954 1.282162 -4.058230
H -4.708513 1.902200 -2.879944
C -2.957555 3.147056 -3.160095
H -3.126466 3.684062 -2.213153
H -3.407448 3.761101 -3.951272
C -1.458858 2.999828 -3.384416
H -1.283644 2.553545 -4.375467
H -0.971946 3.984790 -3.397018
C -0.821970 2.114100 -2.321424
H 0.251837 1.992371 -2.511655
H -0.916918 2.604166 -1.338181
C -1.522558 -1.991420 -1.338708
H -2.486556 -1.949562 -0.809147
C -0.714567 -3.120828 -0.708536
H 0.284326 -3.150788 -1.168940
H -0.559494 -2.909794 0.354921
C -1.403503 -4.469020 -0.865751
H -2.342835 -4.452610 -0.293415
H -0.782157 -5.262685 -0.428885
C -1.708322 -4.769582 -2.325201
H -2.235701 -5.728018 -2.420628
H -0.762980 -4.876529 -2.880473
C -2.526805 -3.647046 -2.944503
H -2.732887 -3.856046 -4.002934
H -3.503157 -3.594684 -2.438729
C -1.830340 -2.296848 -2.806229
H -2.472785 -1.521546 -3.238539
H -0.906308 -2.302462 -3.401048
C -2.907169 -0.857842 1.455230
C -4.220693 -0.720961 0.984002
C -2.567727 -2.075994 2.055874
C -5.138633 -1.765685 1.072419
H -4.538317 0.215366 0.526594
C -3.483955 -3.121742 2.152008
H -1.564244 -2.228320 2.447824

C -4.773668 -2.976952 1.651267
H -6.148892 -1.628553 0.687203
H -3.182497 -4.059642 2.618326
H -5.488493 -3.795141 1.719547
C -1.810312 3.977365 1.235565
H -1.038764 4.440204 0.602295
H -2.589679 3.615157 0.548689
C -2.179544 1.835851 2.612677
H -3.234769 2.114527 2.539329
H -0.608851 2.220471 1.125932
C -1.217197 2.774221 1.958968
H -0.391426 3.077845 2.620268
H -1.920580 1.497857 3.619143
C -2.387798 5.013003 2.183256
H -2.821042 5.858897 1.636661
H -3.175263 4.576709 2.809426
H -1.614691 5.409643 2.854375

TS_{XV→XVI}^a

E = -2457.93336908
Pd -1.463066 -0.340017 -0.945329
P 2.111537 -0.355253 0.697464
P -0.151041 1.491256 -0.223284
C 1.422872 1.212219 0.551017
C 2.009452 2.305257 1.429856
H 1.358335 2.575452 2.277449
H 2.202630 3.235947 0.879250
H 2.966902 2.016311 1.880919
C 3.945018 -0.183063 0.883176
H 4.060869 0.258940 1.884406
C 4.718811 -1.500885 0.888425
H 4.665531 -1.953082 -0.112062
H 4.274188 -2.222250 1.585599
C 6.181819 -1.257166 1.241856
H 6.241945 -0.875420 2.272609
H 6.734113 -2.205694 1.228933
C 6.822780 -0.253517 0.293055

H 6.861297 -0.690169 -0.716851
H 7.862616 -0.060504 0.586619
C 6.031237 1.046529 0.241070
H 6.479206 1.739200 -0.482909
H 6.083779 1.545177 1.221362
C 4.570258 0.796925 -0.111914
H 4.002726 1.732794 -0.134259
H 4.510424 0.378056 -1.124370
C 1.707481 -1.460953 -0.711077
H 0.616536 -1.274229 -0.804090
C 1.885006 -2.967972 -0.510526
H 1.450603 -3.311217 0.433096
H 2.953545 -3.220228 -0.474664
C 1.227420 -3.710283 -1.669606
H 1.346227 -4.793485 -1.537768
H 0.147641 -3.508106 -1.639257
C 1.778225 -3.273420 -3.019441
H 2.832683 -3.581218 -3.096686
H 1.245278 -3.786682 -3.830441
C 1.688934 -1.763726 -3.191395
H 0.631596 -1.457004 -3.234823
H 2.144580 -1.454441 -4.140870
C 2.354849 -1.043270 -2.028156
H 3.422453 -1.310472 -2.005482
H 2.296446 0.040206 -2.151344
C 1.599143 -1.338099 2.193789
H 2.175289 -2.276392 2.205442
C 1.903249 -0.555419 3.473436
H 2.982060 -0.380272 3.574079
H 1.430317 0.434486 3.397434
C 1.384797 -1.265270 4.717579
H 1.597683 -0.657589 5.606628
H 1.931706 -2.211763 4.848288
C -0.103303 -1.559242 4.609982
H -0.456734 -2.086868 5.505205
H -0.659412 -0.610220 4.564083
C -0.398741 -2.370058 3.358105

H -1.476140 -2.558989 3.268453
H 0.083540 -3.356587 3.441891
C 0.105708 -1.663458 2.106803
H -0.444299 -0.725432 1.962881
H -0.121255 -2.265605 1.217338
C -1.110217 2.525580 1.001449
H -0.472518 3.378386 1.282596
C -2.408456 3.069069 0.408344
H -2.993320 2.223793 0.018481
H -2.197708 3.729279 -0.442125
C -3.234437 3.825987 1.442135
H -2.692811 4.736605 1.743691
H -4.176923 4.160994 0.988688
C -3.509187 2.977101 2.674134
H -4.122064 2.111000 2.383711
H -4.090378 3.545977 3.412150
C -2.207124 2.478810 3.282621
H -1.620594 3.336776 3.647661
H -2.406611 1.842307 4.155776
C -1.393447 1.706398 2.255423
H -0.446952 1.361649 2.690666
H -1.953301 0.807523 1.957201
C 0.023123 2.704889 -1.637625
H -1.019593 2.813987 -1.977639
C 0.806601 2.099567 -2.793970
H 1.851704 1.973863 -2.471781
H 0.416178 1.097318 -3.024239
C 0.767171 2.989966 -4.028980
H -0.269456 3.050830 -4.394103
H 1.357045 2.542035 -4.840115
C 1.273589 4.391031 -3.714327
H 1.197199 5.037190 -4.598843
H 2.343790 4.336056 -3.460696
C 0.518700 4.999617 -2.540433
H 0.923309 5.991252 -2.297078
H -0.533260 5.154458 -2.826222
C 0.570432 4.092492 -1.315131

H 0.020182 4.552290 -0.484455
H 1.615994 3.994177 -0.989334
C -3.327222 -0.657494 -0.235106
C -3.429634 -1.230338 1.038727
C -4.398651 0.121274 -0.694689
C -4.532810 -0.982094 1.850133
H -2.629257 -1.872469 1.401294
C -5.502606 0.364255 0.115632
H -4.362274 0.550427 -1.695109
C -5.576095 -0.181877 1.394851
H -4.576548 -1.423002 2.845518
H -6.315752 0.984591 -0.259356
H -6.442203 0.007384 2.025902
C -2.610515 -1.948523 -1.722462
H -1.811883 -3.412438 -0.370423
H -1.749439 -1.900905 -2.431545
H -3.505845 -1.735382 -2.310027
C -2.639466 -4.478230 -2.052604
H -1.718569 -4.435536 -2.653535
H -2.583418 -5.416811 -1.482463
C -2.659716 -3.311516 -1.065029
H -3.562419 -3.389653 -0.444182
C -3.843249 -4.525049 -2.979045
H -3.889491 -3.642196 -3.628276
H -3.814765 -5.408263 -3.628380
H -4.780173 -4.561694 -2.407544

TS_{XV→XVI}^b

E = -2457.92853795
Pd 1.415063 -0.284116 0.940947
P -2.397684 -0.176537 -0.050323
P 0.435049 0.279392 -1.093991
C -1.325736 0.269831 -1.317253
C -1.896474 0.336583 -2.723105
H -1.474749 -0.432639 -3.390531
H -1.723252 1.305688 -3.214054
H -2.981837 0.175287 -2.746745

C -4.065496 0.546495 -0.379489
H -4.434545 -0.021722 -1.247288
C -5.069923 0.343575 0.754548
H -4.744380 0.927540 1.627183
H -5.106086 -0.705954 1.072782
C -6.455907 0.817327 0.332852
H -6.813984 0.186198 -0.494919
H -7.166532 0.680556 1.158187
C -6.431430 2.272400 -0.114956
H -6.180846 2.908154 0.748188
H -7.428075 2.585790 -0.451362
C -5.400712 2.498012 -1.212989
H -5.361760 3.559262 -1.490072
H -5.707245 1.951740 -2.118495
C -4.017499 2.020352 -0.788696
H -3.286426 2.172690 -1.588828
H -3.671821 2.622156 0.061426
C -1.795590 0.310446 1.610710
H -0.734424 -0.010793 1.530175
C -2.381819 -0.383901 2.841418
H -2.487463 -1.463824 2.701858
H -3.388645 0.003853 3.049232
C -1.476257 -0.106997 4.038363
H -1.874155 -0.599564 4.934970
H -0.492187 -0.560027 3.840499
C -1.305877 1.386570 4.285412
H -2.270951 1.806424 4.609566
H -0.602120 1.556679 5.110706
C -0.843179 2.116282 3.031739
H 0.173618 1.786433 2.764874
H -0.790831 3.197805 3.211568
C -1.754059 1.816620 1.849459
H -2.770590 2.180243 2.066481
H -1.408237 2.332457 0.950578
C -2.713819 -2.004890 0.125629
H -3.474598 -2.159675 0.906121
C -3.231580 -2.581668 -1.193157

H -4.213087 -2.155700 -1.439141
H -2.548730 -2.277407 -2.000269
C -3.328541 -4.101958 -1.158980
H -3.672920 -4.473108 -2.132966
H -4.092935 -4.399096 -0.424478
C -1.999647 -4.738689 -0.780365
H -2.093589 -5.831774 -0.748261
H -1.252746 -4.511033 -1.556121
C -1.512004 -4.204191 0.556899
H -0.535213 -4.634683 0.814340
H -2.210068 -4.518675 1.348358
C -1.408583 -2.685599 0.545634
H -0.622565 -2.375805 -0.153571
H -1.080051 -2.330921 1.529557
C 1.132420 -0.744690 -2.491825
H 0.760381 -0.316610 -3.435963
C 2.658908 -0.711141 -2.508072
H 3.014200 -1.103857 -1.543897
H 3.036062 0.316491 -2.572524
C 3.227918 -1.549369 -3.646227
H 2.929229 -1.104343 -4.608162
H 4.325453 -1.522217 -3.619950
C 2.730036 -2.986309 -3.583453
H 3.122034 -3.461663 -2.670715
H 3.118267 -3.568559 -4.429569
C 1.208875 -3.034933 -3.551463
H 0.812382 -2.656892 -4.506469
H 0.857322 -4.071833 -3.457455
C 0.657600 -2.189249 -2.411859
H -0.438589 -2.223619 -2.397050
H 0.998477 -2.609457 -1.451129
C 1.155105 1.959829 -1.508524
H 2.218708 1.830679 -1.242362
C 0.596909 3.025109 -0.574914
H -0.480496 3.137751 -0.777089
H 0.699139 2.683408 0.463908
C 1.298817 4.363204 -0.761724

H 2.350519 4.253715 -0.458096
H 0.857085 5.118665 -0.097472
C 1.238322 4.826300 -2.210313
H 1.784404 5.770615 -2.337091
H 0.190904 5.033173 -2.480815
C 1.790756 3.760739 -3.145949
H 1.715535 4.088879 -4.191508
H 2.862589 3.618917 -2.938416
C 1.072310 2.428360 -2.959085
H 1.498933 1.682214 -3.640536
H 0.016621 2.546754 -3.242447
C 3.185894 0.575880 1.386945
C 4.295528 0.160205 0.631384
C 3.156344 1.908162 1.829395
C 5.290888 1.061642 0.272240
H 4.366689 -0.873298 0.299646
C 4.158129 2.803414 1.469023
H 2.328736 2.252450 2.447897
C 5.228835 2.391715 0.680635
H 6.126301 0.716994 -0.336387
H 4.095190 3.837297 1.806911
H 6.010280 3.094035 0.398216
C 2.927221 -3.044446 1.940004
H 2.499493 -4.056772 1.965246
H 2.814749 -2.692213 0.901748
C 2.484670 -0.661257 2.816528
H 3.497893 -0.546940 3.204687
H 1.032402 -2.269533 2.594641
C 2.096079 -2.141458 2.847055
H 2.192220 -2.497454 3.888850
H 1.840565 -0.047649 3.461282
C 4.398906 -3.112974 2.311583
H 4.946893 -3.791775 1.646936
H 4.882575 -2.130844 2.247405
H 4.529504 -3.478544 3.338998

XVI

E = -2458.00147667

Pd 1.394269 -0.384339 -1.028419

P -2.205762 0.689858 0.166421

P 0.255721 -0.962026 0.891318

C -1.375852 -0.362678 1.240723

C -1.963208 -0.531508 2.631223

H -1.273864 -0.195049 3.422431

H -2.231626 -1.571003 2.872707

H -2.878367 0.057277 2.777404

C -4.028986 0.493250 0.418071

H -4.209323 0.938418 1.408515

C -4.895104 1.257451 -0.582723

H -4.765942 0.813167 -1.579668

H -4.582298 2.306253 -0.662187

C -6.366386 1.171334 -0.192907

H -6.511936 1.679299 0.772827

H -6.981083 1.711744 -0.924436

C -6.824016 -0.276158 -0.076588

H -6.779153 -0.746347 -1.071056

H -7.873947 -0.321209 0.240362

C -5.941000 -1.061377 0.883817

H -6.254448 -2.112634 0.920340

H -6.068284 -0.663938 1.902744

C -4.470486 -0.969796 0.495392

H -3.843361 -1.520723 1.203014

H -4.322689 -1.447587 -0.481815

C -1.766004 0.437767 -1.593700

H -0.656840 0.367012 -1.505742

C -2.077764 1.554804 -2.591343

H -1.817179 2.544843 -2.206208

H -3.154536 1.578776 -2.809282

C -1.311339 1.287396 -3.883783

H -1.509964 2.083456 -4.613154

H -0.233190 1.322753 -3.660678

C -1.661981 -0.072417 -4.473904

H -2.712766 -0.056496 -4.803325

H -1.059978 -0.264977 -5.371756
C -1.477134 -1.190898 -3.457307
H -0.409421 -1.292637 -3.206212
H -1.800174 -2.151758 -3.878817
C -2.230660 -0.897420 -2.167938
H -3.310714 -0.851523 -2.377796
H -2.074260 -1.694784 -1.437938
C -1.910245 2.507566 0.443721
H -2.586192 3.074402 -0.215694
C -2.211488 2.873764 1.898203
H -3.266571 2.686133 2.136680
H -1.621300 2.213356 2.550183
C -1.866588 4.324396 2.208976
H -2.069637 4.536058 3.266844
H -2.525182 4.986803 1.626250
C -0.417249 4.635887 1.867176
H -0.189687 5.688643 2.078883
H 0.244890 4.035590 2.510552
C -0.128894 4.306251 0.410529
H 0.921837 4.508284 0.165432
H -0.728990 4.966458 -0.235223
C -0.460892 2.853992 0.094767
H 0.199826 2.187533 0.663598
H -0.248779 2.641983 -0.958581
C 1.285028 -0.595303 2.408205
H 0.803309 -1.069933 3.277107
C 2.693079 -1.170777 2.254937
H 3.128896 -0.773430 1.321986
H 2.653460 -2.260296 2.131425
C 3.586761 -0.822188 3.438951
H 3.201057 -1.318163 4.343434
H 4.597335 -1.219907 3.274741
C 3.638194 0.679180 3.679691
H 4.115123 1.165628 2.814898
H 4.263340 0.910091 4.552465
C 2.237056 1.247356 3.856820
H 1.791007 0.834503 4.775056

H 2.276862 2.337113 3.993375
C 1.353334 0.903088 2.666044
H 0.341444 1.305340 2.801448
H 1.761371 1.381530 1.765096
C 0.271031 -2.843053 0.940140
H 1.312647 -3.072946 0.662263
C -0.614954 -3.413664 -0.158639
H -1.659923 -3.137549 0.056462
H -0.348475 -2.941355 -1.114809
C -0.498301 -4.928754 -0.260883
H 0.522581 -5.188190 -0.582155
H -1.174795 -5.309906 -1.037987
C -0.786470 -5.600409 1.073955
H -0.662480 -6.688704 0.994918
H -1.839441 -5.425352 1.344779
C 0.107372 -5.037357 2.169259
H -0.123899 -5.506836 3.134950
H 1.155600 -5.288754 1.944136
C -0.027095 -3.521618 2.274802
H 0.640985 -3.148113 3.060682
H -1.051075 -3.275172 2.587874
C 3.785456 0.424555 -2.227005
C 4.721861 -0.290623 -1.485122
C 2.695451 -0.274783 -2.805751
C 4.599276 -1.672324 -1.297569
H 5.573235 0.237889 -1.057896
C 2.541524 -1.660170 -2.564861
H 2.075259 0.226025 -3.550234
C 3.512350 -2.353135 -1.816985
H 5.357005 -2.208324 -0.729127
H 1.770906 -2.221487 -3.090125
H 3.407497 -3.425998 -1.667249
C 3.606540 2.554932 0.050545
H 2.901684 3.069448 0.718251
H 3.543874 1.490820 0.321047
C 3.903074 1.909145 -2.422965
H 4.961190 2.200131 -2.401392

H 2.066657 2.400934 -1.432596
C 3.119437 2.718203 -1.382449
H 3.147446 3.782114 -1.663480
H 3.529075 2.170343 -3.421791
C 5.008635 3.078861 0.310964
H 5.280849 2.973191 1.368127
H 5.766255 2.540452 -0.272276
H 5.093344 4.142768 0.051679

5.2.4 KeyPhos-medierte *tert*-Butyl–Phenyl–Kopplung

5.2.4.1 Energien der Strukturen

Tabelle 5.7. Energien der Strukturen der keYPhos medierte *tert*-Butyl–Phenyl–Kopplung.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	E(PCM)	$\Delta G(\text{PCM})$ [hartree]	$\Delta G(\text{PCM})$ [kJ/mol]
X^a	-2457.94788589	1.122083	0.994779	-2457.95112398	–	–
X^c	-2457.94788621	1.122087	0.994792	-2457.95112457	0.032582	0.000012
TS_{X→XI}^a	-2457.92546364	1.119927	0.990089	-2457.92792694	0.018507	48.590234
TS_{X→XI}^c	-2457.92652133	1.119182	0.988731	-2457.92886725	0.016209	42.556021
XI	-2458.00346310	1.122818	0.992389	-2458.00559809	-0.056864	-149.296721
XII	-2457.95164893	1.120631	0.990164	-2457.95465175	-0.008143	-21.378843
TS_{XII→XIII}	-2457.93776900	1.117547	0.989177	-2457.94065266	0.004869	12.784400
XIII	-2457.94247526	1.118556	0.988431	-2457.94543406	-0.000658	-1.727789
TS_{XIII→XIV} (CW)	-2457.93820604	1.117893	0.989531	-2457.94102626	0.004850	12.732940
XIII→XIV (CW)	-2457.94039725	1.118977	0.989490	-2457.94331124	0.002524	6.626079
TS_{XIII→XIV} (CW)	-2457.93978772	1.117727	0.988875	-2457.94274706	0.002473	6.492651
TS_{XIII→XIV} (CCW)	-2457.93500238	1.118030	0.988273	-2457.93785219	0.006766	17.763582
XIII→XIV (CCW)	-2457.93804605	1.118806	0.987590	-2457.94085689	0.003078	8.081525
TS_{XIII→XIV} (CCW)	-2457.93474599	1.117931	0.988593	-2457.93776620	0.007172	18.829508
XIV	-2457.94303614	1.119077	0.990044	-2457.94569160	0.000697	1.830971
TS_{XIV→XV}	-2457.93683200	1.117205	0.987967	-2457.94013639	0.004176	10.963012
XV	-2457.95008950	1.121120	0.990913	-2457.95352018	-0.006262	-16.441406
TS_{XV→XVI}	-2457.93683102	1.120642	0.991616	-2457.93940787	0.008553	22.456190
XVI	-2458.00221740	1.123581	0.992101	-2458.00434992	-0.055904	-146.775794

5.2.4.2 Koordinaten der Strukturen

X^a

E = -2457.94788589

Pd 1.368324 0.637023 -1.067959

P -2.170637 0.068926 0.106398

P 0.628440 -0.020808 1.166005

C -1.122985 -0.064076 1.455347

C -3.890934 -0.359138 0.610459
H -4.105158 0.410783 1.367776
C -4.925703 -0.193592 -0.503780
H -4.760545 -0.964134 -1.270952
H -4.815303 0.775004 -1.006584
C -6.337288 -0.326943 0.057762
H -6.526370 0.517087 0.739001
H -7.072574 -0.241567 -0.752608
C -6.526060 -1.634394 0.814922
H -6.454610 -2.473812 0.106288
H -7.533338 -1.680351 1.248258
C -5.468342 -1.810097 1.896511
H -5.594873 -2.775521 2.402706
H -5.597467 -1.034554 2.667303
C -4.065486 -1.709589 1.310258
H -3.303318 -1.846957 2.083663
H -3.930079 -2.523211 0.589988
C -1.622156 -0.950726 -1.333262
H -0.521214 -0.909294 -1.221698
C -1.947697 -0.427266 -2.731533
H -1.653985 0.619965 -2.846688
H -3.033595 -0.473562 -2.908526
C -1.211373 -1.265294 -3.770718
H -1.420879 -0.885266 -4.778799
H -0.129400 -1.136352 -3.605882
C -1.572051 -2.739723 -3.666860
H -2.634817 -2.869502 -3.924319
H -1.001879 -3.325769 -4.398855
C -1.332346 -3.268597 -2.260201
H -0.254272 -3.270649 -2.045920
H -1.664814 -4.311470 -2.177972
C -2.042032 -2.416716 -1.216914
H -3.126877 -2.493769 -1.380439
H -1.839479 -2.792941 -0.209053
C -2.348514 1.803978 -0.567043
H -2.931374 1.769800 -1.498816
C -3.066236 2.693221 0.449278

H -4.106908 2.368918 0.573469
H -2.574008 2.567745 1.427989
C -3.046416 4.163676 0.051307
H -3.542699 4.762310 0.826053
H -3.636865 4.294118 -0.868501
C -1.631609 4.663405 -0.189816
H -1.641030 5.719509 -0.487345
H -1.061275 4.605413 0.749690
C -0.937583 3.818421 -1.246690
H 0.100262 4.147880 -1.384112
H -1.439213 3.952165 -2.217024
C -0.951868 2.348315 -0.855681
H -0.362536 2.224433 0.058905
H -0.476084 1.746203 -1.652689
C 1.328460 1.193766 2.395017
H 1.083260 0.809123 3.396740
C 2.847247 1.289558 2.271313
H 3.077129 1.700934 1.276311
H 3.315040 0.297573 2.304696
C 3.429857 2.196568 3.348151
H 3.248702 1.744556 4.335745
H 4.519627 2.267870 3.234671
C 2.800884 3.583103 3.304584
H 3.092022 4.076840 2.364529
H 3.190422 4.209538 4.117733
C 1.280927 3.507309 3.369464
H 0.974012 3.121918 4.353878
H 0.843197 4.510594 3.277609
C 0.732220 2.591666 2.282768
H -0.364943 2.547601 2.317094
H 1.004905 3.010062 1.300808
C 1.378113 -1.626773 1.765587
H 2.385562 -1.641654 1.322092
C 0.592098 -2.783366 1.160677
H -0.431648 -2.755826 1.566026
H 0.504239 -2.638991 0.076642
C 1.235163 -4.126981 1.468547

H 2.222241 -4.167357 0.984636
H 0.637978 -4.941322 1.035868
C 1.395653 -4.321803 2.969368
H 1.896086 -5.275142 3.184838
H 0.399078 -4.380470 3.434577
C 2.166953 -3.165316 3.589112
H 2.252263 -3.297557 4.676121
H 3.193592 -3.165653 3.192000
C 1.523418 -1.818096 3.274245
H 2.131106 -1.019239 3.715577
H 0.534683 -1.761982 3.753400
C 2.816787 -0.706247 -1.071723
C 4.070530 -0.465034 -0.504653
C 2.554275 -1.987114 -1.566741
C 5.014869 -1.485122 -0.396902
H 4.325419 0.526063 -0.136440
C 3.496081 -3.006913 -1.459863
H 1.600618 -2.194896 -2.049945
C 4.730125 -2.763969 -0.863761
H 5.983226 -1.273381 0.055559
H 3.262183 -3.998065 -1.847624
H 5.466854 -3.560288 -0.776230
C 3.142440 2.470807 -2.426538
H 2.646339 3.208435 -1.778207
H 3.996522 2.060703 -1.873210
H 3.551099 3.026222 -3.292176
C 2.928332 0.392546 -3.780123
H 3.833530 -0.008507 -3.312934
H 2.298275 -0.463563 -4.058184
C 2.193164 1.371572 -2.879875
H 3.230914 0.895928 -4.716248
C 1.055274 1.981188 -3.693816
H 0.308290 1.233425 -3.990706
H 0.541291 2.796850 -3.173835
H 1.455245 2.416773 -4.628167
C -1.658624 -0.038126 2.871748
H -2.706877 0.283005 2.928188

H -1.607067 -1.015556 3.379779

H -1.103180 0.669423 3.504959

X^c

E = -2457.94788621

Pd 1.367938 0.637484 -1.067935

P -2.170496 0.069121 0.106719

P 0.628867 -0.021394 1.165821

C -1.122568 -0.064561 1.455399

C -3.890807 -0.358902 0.610865

H -4.105019 0.410941 1.368250

C -4.925527 -0.193235 -0.503402

H -4.760232 -0.963558 -1.270760

H -4.815183 0.775496 -1.005956

C -6.337146 -0.326829 0.057989

H -6.526384 0.517059 0.739360

H -7.072354 -0.241383 -0.752443

C -6.525853 -1.634420 0.814918

H -6.454187 -2.473725 0.106173

H -7.533186 -1.680575 1.248108

C -5.468250 -1.810106 1.896618

H -5.594738 -2.775579 2.402729

H -5.597560 -1.034631 2.667449

C -4.065332 -1.709414 1.310548

H -3.303261 -1.846700 2.084056

H -3.929735 -2.523005 0.590286

C -1.622400 -0.950167 -1.333325

H -0.521425 -0.908834 -1.221974

C -1.948203 -0.426317 -2.731401

H -1.654261 0.620870 -2.846381

H -3.034163 -0.472320 -2.908095

C -1.212295 -1.264232 -3.770979

H -1.422042 -0.883936 -4.778911

H -0.130271 -1.135465 -3.606395

C -1.573121 -2.738636 -3.667390

H -2.635965 -2.868240 -3.924612

H -1.003198 -3.324546 -4.399691

C -1.333110 -3.267902 -2.260945
H -0.254985 -3.270207 -2.046941
H -1.665744 -4.310738 -2.178895
C -2.042372 -2.416159 -1.217263
H -3.127275 -2.493025 -1.380517
H -1.839621 -2.792671 -0.209555
C -2.348224 1.804435 -0.566088
H -2.931276 1.770681 -1.497757
C -3.065647 2.693447 0.450687
H -4.106336 2.369234 0.574891
H -2.573319 2.567544 1.429286
C -3.045768 4.164049 0.053269
H -3.541708 4.762462 0.828407
H -3.636504 4.294917 -0.866293
C -1.630989 4.663677 -0.188180
H -1.640385 5.719866 -0.485414
H -1.060324 4.605361 0.751105
C -0.937428 3.818930 -1.245536
H 0.100309 4.148509 -1.383376
H -1.439530 3.952834 -2.215611
C -0.951584 2.348715 -0.854889
H -0.362028 2.224561 0.059533
H -0.476035 1.746852 -1.652249
C 1.329064 1.192590 2.395282
H 1.083723 0.807699 3.396869
C 2.847889 1.288166 2.271810
H 3.077984 1.699934 1.277030
H 3.315515 0.296091 2.304876
C 3.430477 2.194669 3.349089
H 3.249038 1.742350 4.336491
H 4.520284 2.265787 3.235849
C 2.801796 3.581348 3.305877
H 3.093225 4.075348 2.366050
H 3.191295 4.207425 4.119320
C 1.281810 3.505845 3.370434
H 0.974622 3.120225 4.354674
H 0.844308 4.509247 3.278795

C 0.733108 2.590639 2.283374
H -0.364066 2.546780 2.317523
H 1.005999 3.009263 1.301568
C 1.378349 -1.627698 1.764689
H 2.385742 -1.642693 1.321057
C 0.592020 -2.783996 1.159585
H -0.431585 -2.756421 1.565276
H 0.503840 -2.639267 0.075626
C 1.235008 -4.127777 1.466862
H 2.221987 -4.168097 0.982746
H 0.637650 -4.941904 1.034016
C 1.395723 -4.323137 2.967590
H 1.896141 -5.276573 3.182663
H 0.399207 -4.381921 3.432908
C 2.167173 -3.166918 3.587653
H 2.252560 -3.299532 4.674611
H 3.193780 -3.167213 3.190462
C 1.523765 -1.819525 3.273279
H 2.131562 -1.020897 3.714873
H 0.535046 -1.763467 3.752467
C 1.054786 1.982596 -3.693695
H 0.307634 1.235093 -3.990846
H 0.540946 2.798199 -3.173471
C 3.141982 2.471494 -2.426227
H 2.646146 3.209038 -1.777602
H 3.996038 2.061022 -1.873121
H 3.550693 3.027093 -3.291723
C 2.192483 1.372563 -2.879868
H 1.454866 2.418371 -4.627885
C 2.927671 0.393721 -3.780295
H 3.832588 -0.007748 -3.312951
H 2.297601 -0.462120 -4.059083
H 3.230779 0.897441 -4.716059
C -1.658059 -0.038579 2.871833
H -2.706390 0.282230 2.928352
H -1.606205 -1.015912 3.380004
H -1.102814 0.669157 3.505003

C 2.816306 -0.705900 -1.072309
C 4.070165 -0.464767 -0.505444
C 2.553769 -1.986659 -1.567551
C 5.014540 -1.484851 -0.398022
H 4.325160 0.526290 -0.137175
C 3.495599 -3.006475 -1.460993
H 1.600045 -2.194372 -2.050686
C 4.729731 -2.763640 -0.865028
H 5.982983 -1.273139 0.054281
H 3.261620 -3.997553 -1.848910
H 5.466471 -3.559980 -0.777713

TS_{X→X'}^a

E = -2457.92546364
Pd -1.433805 -0.196813 1.010490
P 2.286960 0.451147 -0.076486
P -0.463654 -0.354073 -1.098683
C 1.253757 0.038039 -1.384301
C 1.679052 0.439819 -2.786949
H 1.366214 -0.301879 -3.532926
H 2.765972 0.533562 -2.896456
H 1.259281 1.404666 -3.119101
C 4.040172 0.312754 -0.649385
H 4.093095 1.104809 -1.411901
C 5.097677 0.647270 0.402182
H 5.114736 -0.142232 1.167740
H 4.860485 1.584496 0.920795
C 6.474320 0.749077 -0.247160
H 6.477064 1.609273 -0.934215
H 7.234715 0.959497 0.516003
C 6.830642 -0.512815 -1.021449
H 6.945030 -1.348036 -0.313335
H 7.802430 -0.392650 -1.517308
C 5.751190 -0.870248 -2.035049
H 6.004566 -1.805724 -2.550039
H 5.702368 -0.090711 -2.811234
C 4.390298 -0.995907 -1.362021

H 3.608040 -1.264247 -2.079968
H 4.434955 -1.814138 -0.634762
C 1.994360 -0.607972 1.404767
H 0.887914 -0.698995 1.397845
C 2.413219 -0.047432 2.765373
H 1.996370 0.950055 2.936146
H 3.507348 0.061921 2.798387
C 1.956790 -0.977459 3.886992
H 2.293015 -0.582268 4.854272
H 0.857977 -0.975632 3.917429
C 2.440543 -2.407365 3.697211
H 3.536714 -2.437887 3.796440
H 2.039122 -3.050869 4.490525
C 2.054544 -2.939529 2.324484
H 0.959370 -3.013232 2.244586
H 2.448892 -3.953178 2.177302
C 2.568777 -2.013280 1.233889
H 3.664589 -1.959020 1.312118
H 2.338724 -2.397332 0.235472
C 2.195103 2.199208 0.569110
H 2.893005 2.289595 1.415793
C 2.599970 3.197756 -0.517038
H 3.652793 3.060295 -0.795169
H 2.005358 2.993343 -1.421037
C 2.383078 4.641875 -0.079736
H 2.648977 5.320386 -0.900696
H 3.071186 4.871419 0.748519
C 0.954139 4.887188 0.380124
H 0.830016 5.928139 0.705364
H 0.268114 4.738989 -0.468073
C 0.581628 3.924797 1.496987
H -0.460748 4.074110 1.808422
H 1.205336 4.133133 2.380431
C 0.776270 2.481020 1.059221
H 0.075576 2.248654 0.250020
H 0.503704 1.800038 1.871574
C -1.371905 0.679244 -2.364799

H -0.842911 0.554907 -3.322412
C -2.825430 0.257083 -2.569226
H -3.342867 0.261346 -1.601720
H -2.877515 -0.770054 -2.949735
C -3.554844 1.180342 -3.539306
H -3.121667 1.067643 -4.545970
H -4.606289 0.872542 -3.613611
C -3.459061 2.639304 -3.119538
H -3.978961 2.769352 -2.159096
H -3.969996 3.284249 -3.846867
C -2.006024 3.057718 -2.956430
H -1.497830 3.005330 -3.932129
H -1.937332 4.103179 -2.625091
C -1.291052 2.150120 -1.966581
H -0.238990 2.446649 -1.863101
H -1.752033 2.259352 -0.971517
C -0.837814 -2.082004 -1.692809
H -1.939371 -2.103889 -1.683477
C -0.371835 -3.123442 -0.683352
H 0.725091 -3.093601 -0.628744
H -0.749601 -2.857642 0.315189
C -0.813954 -4.525853 -1.078156
H -1.913315 -4.577352 -1.046533
H -0.446682 -5.260658 -0.348861
C -0.335075 -4.881262 -2.479412
H -0.690048 -5.879583 -2.767832
H 0.765155 -4.929823 -2.480096
C -0.785185 -3.840629 -3.495513
H -0.400040 -4.087493 -4.494078
H -1.883285 -3.861044 -3.571670
C -0.342640 -2.438808 -3.089408
H -0.691945 -1.703536 -3.827482
H 0.757344 -2.392612 -3.087508
C -3.431228 0.005080 1.064567
C -3.940233 1.301401 0.886280
C -4.205035 -1.076880 0.615767
C -5.153530 1.507516 0.238141

H -3.371489 2.158985 1.246640
 C -5.417165 -0.863497 -0.032751
 H -3.841102 -2.095400 0.749539
 C -5.898201 0.428467 -0.232767
 H -5.519173 2.524149 0.096122
 H -5.988609 -1.718164 -0.393578
 H -6.845925 0.592188 -0.741461
 C -1.637001 0.759141 3.557467
 H -0.588663 0.624949 3.258194
 H -1.945439 1.771826 3.267798
 H -1.661762 0.711674 4.661208
 C -3.940113 -0.110089 3.606518
 H -4.337489 0.896956 3.442186
 H -4.674200 -0.825676 3.221699
 C -2.569305 -0.295404 2.974657
 H -3.844452 -0.265762 4.694233
 C -2.097110 -1.715864 3.244372
 H -2.766636 -2.448846 2.778177
 H -1.080215 -1.911421 2.876988
 H -2.099347 -1.914652 4.330823

TS_{X→X'}^c

E = -2457.92652133
 Pd 1.416420 0.420471 0.939351
 P -2.298597 -0.483963 -0.041493
 P 0.414998 0.364765 -1.166593
 C -1.279521 -0.138600 -1.372986
 C -4.054106 -0.408072 -0.616356
 H -4.087400 -1.233355 -1.344476
 C -5.104557 -0.718717 0.449200
 H -5.141510 0.107771 1.174285
 H -4.845022 -1.623106 1.013206
 C -6.476900 -0.886051 -0.195587
 H -6.455879 -1.777092 -0.841759
 H -7.233119 -1.080466 0.575909
 C -6.864799 0.328945 -1.027687
 H -7.005456 1.191752 -0.358502

H -7.830728 0.159322 -1.520501
C -5.791536 0.671229 -2.053109
H -6.067654 1.576984 -2.607940
H -5.718574 -0.138939 -2.795262
C -4.437675 0.861936 -1.381099
H -3.661811 1.128534 -2.106497
H -4.510497 1.705230 -0.685776
C -2.010790 0.665600 1.369964
H -0.902378 0.726436 1.379185
C -2.466548 0.224314 2.760971
H -2.073452 -0.764804 3.019204
H -3.562766 0.140016 2.782042
C -2.013433 1.236746 3.812257
H -2.380146 0.931291 4.800724
H -0.916271 1.215176 3.870097
C -2.458626 2.657341 3.494403
H -3.555565 2.720488 3.566218
H -2.058469 3.353633 4.242517
C -2.034149 3.067784 2.091818
H -0.936437 3.116288 2.027184
H -2.406342 4.072574 1.854123
C -2.546513 2.064028 1.072557
H -3.644409 2.039010 1.135219
H -2.287909 2.355362 0.050311
C -2.160447 -2.189061 0.698955
H -2.862191 -2.262772 1.543980
C -2.524173 -3.242653 -0.349403
H -3.587575 -3.168538 -0.612243
H -1.957311 -3.031084 -1.269988
C -2.220564 -4.660620 0.119505
H -2.453060 -5.372018 -0.683566
H -2.886359 -4.911537 0.959681
C -0.775806 -4.809726 0.570714
H -0.584755 -5.835695 0.910613
H -0.105929 -4.630977 -0.284382
C -0.459326 -3.809528 1.671423
H 0.589963 -3.893759 1.984745

H -1.069793 -4.040681 2.558409
C -0.735022 -2.385455 1.212769
H -0.035380 -2.120476 0.411971
H -0.519835 -1.681474 2.022232
C 1.340541 -0.775699 -2.332268
H 0.819246 -0.688711 -3.299314
C 2.800885 -0.396483 -2.561874
H 3.328497 -0.380081 -1.599415
H 2.872949 0.612367 -2.984404
C 3.494430 -1.376356 -3.503068
H 3.042857 -1.300004 -4.505076
H 4.549968 -1.094108 -3.612707
C 3.378218 -2.811450 -3.013084
H 3.913891 -2.904446 -2.057329
H 3.862271 -3.500940 -3.717650
C 1.920379 -3.191635 -2.804525
H 1.397831 -3.183082 -3.774091
H 1.837559 -4.216314 -2.415733
C 1.233501 -2.218793 -1.856677
H 0.177363 -2.487698 -1.729664
H 1.701792 -2.285976 -0.862137
C 0.639182 1.986985 -2.089845
H 0.835558 1.724732 -3.143480
C 1.845021 2.751968 -1.540750
H 1.637308 2.991997 -0.484902
H 2.739047 2.119479 -1.519904
C 2.100603 4.033147 -2.324286
H 2.377680 3.774777 -3.358264
H 2.958029 4.572493 -1.899774
C 0.867381 4.925914 -2.342086
H 1.045451 5.821564 -2.952042
H 0.669377 5.280724 -1.318542
C -0.354916 4.169778 -2.845781
H -1.246190 4.810463 -2.801728
H -0.210899 3.909616 -3.905880
C -0.584094 2.892246 -2.046957
H -1.477361 2.359509 -2.396799

H -0.774216 3.162164 -0.997227
C 3.359066 -0.074051 1.073148
C 3.670125 -1.440301 1.016528
C 4.307112 0.842286 0.592873
C 4.862043 -1.875130 0.444220
H 2.962078 -2.173069 1.404834
C 5.495870 0.402251 0.021932
H 4.099600 1.910929 0.647182
C 5.779385 -0.959451 -0.064619
H 5.072854 -2.942943 0.391562
H 6.206737 1.131574 -0.365198
H 6.709055 -1.302055 -0.514184
C 2.057867 1.971115 3.091120
H 2.749571 2.652307 2.580041
H 1.048129 2.168249 2.704325
C 1.540384 -0.466077 3.578719
H 0.500532 -0.329413 3.257763
H 1.830050 -1.501462 3.358526
H 1.560305 -0.346916 4.676801
C 2.496652 0.522444 2.931406
H 2.055759 2.246578 4.161207
C 3.860356 0.361737 3.585183
H 4.246230 -0.658988 3.493273
H 4.607136 1.040773 3.161564
H 3.757231 0.594064 4.658491
C -1.714738 -0.516592 -2.774696
H -1.256604 -1.450129 -3.142860
H -2.797129 -0.656855 -2.875347
H -1.441427 0.268295 -3.499247

XI

E = -2458.00346310
Pd 1.451299 0.141071 -0.772044
P -2.332106 0.379938 0.019988
P 0.338150 -0.682663 1.068802
C -1.399417 -0.369327 1.254042
C -4.092759 -0.169909 0.175568

H -4.459379 0.346416 1.076266
C -4.989032 0.256106 -0.986444
H -4.669653 -0.274603 -1.894425
H -4.888927 1.328633 -1.196091
C -6.443404 -0.097579 -0.699709
H -6.789056 0.478970 0.172026
H -7.077268 0.203901 -1.543733
C -6.601895 -1.585510 -0.418014
H -6.358281 -2.149754 -1.331451
H -7.646789 -1.820918 -0.177925
C -5.680035 -2.038617 0.706261
H -5.770863 -3.121103 0.863623
H -5.993482 -1.560989 1.647544
C -4.227619 -1.673275 0.425798
H -3.578074 -1.981258 1.251398
H -3.876449 -2.221245 -0.459080
C -1.697452 0.048514 -1.664259
H -0.617044 0.268967 -1.499865
C -2.164309 0.938401 -2.817520
H -2.194207 1.997219 -2.543047
H -3.184644 0.665401 -3.119432
C -1.223065 0.734628 -4.001808
H -1.527001 1.372581 -4.841906
H -0.214181 1.059468 -3.703004
C -1.173228 -0.725247 -4.434043
H -2.156152 -1.009634 -4.841466
H -0.450999 -0.855748 -5.250760
C -0.832114 -1.644454 -3.268994
H 0.196381 -1.443825 -2.926556
H -0.864441 -2.695468 -3.584399
C -1.765576 -1.413888 -2.088949
H -2.798155 -1.666494 -2.377619
H -1.494404 -2.059331 -1.250989
C -2.431708 2.238988 0.097599
H -3.167534 2.580909 -0.647656
C -2.891132 2.682906 1.488483
H -3.901530 2.310365 1.702075

H -2.226255 2.226759 2.235281
C -2.852941 4.196540 1.651770
H -3.172860 4.468228 2.666173
H -3.576874 4.657081 0.961834
C -1.464092 4.743428 1.360305
H -1.446878 5.835011 1.474994
H -0.753614 4.337560 2.097204
C -1.017513 4.343320 -0.036882
H -0.001521 4.707106 -0.236423
H -1.673816 4.827541 -0.777164
C -1.059947 2.834043 -0.231044
H -0.310456 2.354641 0.410614
H -0.754182 2.586153 -1.252941
C 1.135029 0.056325 2.595051
H 0.603893 -0.323382 3.482145
C 2.610601 -0.321444 2.714362
H 3.109523 -0.046350 1.771366
H 2.726862 -1.406359 2.828188
C 3.292183 0.380978 3.883395
H 2.857287 0.018451 4.827947
H 4.356782 0.111474 3.910243
C 3.125854 1.891353 3.808783
H 3.635183 2.264509 2.906746
H 3.607889 2.376856 4.667710
C 1.653066 2.263470 3.732333
H 1.153728 1.965350 4.667477
H 1.531932 3.352495 3.648170
C 0.982189 1.573176 2.554401
H -0.082537 1.834410 2.509049
H 1.434350 1.932397 1.614093
C 0.703388 -2.497694 1.342496
H 1.804824 -2.513899 1.331066
C 0.245532 -3.356437 0.171429
H -0.855470 -3.362389 0.154248
H 0.581927 -2.902596 -0.772498
C 0.751921 -4.787847 0.298217
H 1.851038 -4.784751 0.232080

H 0.391766 -5.395472 -0.543045
C 0.329234 -5.410165 1.622220
H 0.738501 -6.424473 1.720408
H -0.766945 -5.514778 1.634092
C 0.754463 -4.545119 2.800981
H 0.404197 -4.984403 3.744808
H 1.853951 -4.522819 2.857002
C 0.236197 -3.118230 2.654963
H 0.551637 -2.511848 3.514082
H -0.863078 -3.136648 2.664261
C 3.621033 0.509988 -1.531462
C 2.624984 1.059711 -2.382623
C 4.154259 1.358819 -0.531639
C 2.158731 2.378118 -2.169315
H 2.302686 0.529898 -3.276464
C 3.726086 2.665302 -0.370746
H 4.945557 0.980503 0.112913
C 2.709351 3.179459 -1.182021
H 1.393538 2.778962 -2.832364
H 4.177333 3.288515 0.398992
H 2.361696 4.201643 -1.049103
C 5.694951 -0.566475 -2.378923
H 5.639203 0.024407 -3.301569
H 6.310380 -0.010515 -1.661383
H 6.207676 -1.509921 -2.607040
C 4.405398 -1.656779 -0.527089
H 4.976660 -1.136498 0.250218
H 3.403967 -1.859450 -0.126915
C 4.294271 -0.837022 -1.815396
H 4.909170 -2.610830 -0.728239
C 3.498740 -1.663969 -2.822954
H 2.472054 -1.818685 -2.461349
H 3.450491 -1.184751 -3.808030
H 3.970510 -2.644837 -2.956597
C -2.028719 -0.427953 2.635960
H -3.094559 -0.164006 2.622373
H -1.968475 -1.423903 3.095310

H -1.565985 0.272954 3.351207

XII

E = -2457.95164893

Pd -1.597785 0.652612 1.052397

P 2.324163 -0.027180 -0.082462

P -0.620466 -0.009705 -1.033641

C 1.122852 -0.179223 -1.293634

C 3.727336 -1.179469 -0.458749

H 4.211473 -0.713939 -1.331411

C 4.788275 -1.291995 0.635554

H 4.348483 -1.798087 1.506323

H 5.117728 -0.302505 0.977156

C 5.977117 -2.112051 0.148791

H 6.460423 -1.585425 -0.688377

H 6.729580 -2.190197 0.944111

C 5.536794 -3.495747 -0.308518

H 5.152749 -4.053609 0.559373

H 6.394818 -4.065440 -0.687802

C 4.445391 -3.406684 -1.366045

H 4.103301 -4.409958 -1.650401

H 4.860944 -2.950839 -2.278122

C 3.262504 -2.571202 -0.891944

H 2.507962 -2.492651 -1.679377

H 2.771266 -3.072647 -0.047348

C 1.702456 -0.287370 1.625855

H 0.796685 0.345995 1.625978

C 2.604285 0.184279 2.771436

H 3.000430 1.189774 2.600101

H 3.472811 -0.479621 2.860465

C 1.827277 0.150893 4.082589

H 2.465264 0.499309 4.905012

H 0.987124 0.858702 4.015192

C 1.287899 -1.241701 4.374952

H 2.133438 -1.922785 4.558616

H 0.689647 -1.233335 5.295452

C 0.458812 -1.763214 3.211319

H -0.442748 -1.143432 3.099995
H 0.115947 -2.786887 3.408619
C 1.225645 -1.711832 1.897681
H 2.094576 -2.385093 1.950242
H 0.597572 -2.055466 1.070233
C 3.146772 1.645436 -0.002596
H 4.002439 1.578527 0.687283
C 3.653561 2.059737 -1.385858
H 4.411769 1.355103 -1.751357
H 2.811745 2.009670 -2.091660
C 4.218624 3.474115 -1.389846
H 4.561446 3.733509 -2.399769
H 5.105246 3.515543 -0.738621
C 3.186497 4.477392 -0.899081
H 3.605392 5.491810 -0.893290
H 2.336628 4.493053 -1.598841
C 2.688806 4.097460 0.486405
H 1.911991 4.796043 0.823982
H 3.518856 4.185625 1.204418
C 2.144779 2.675136 0.521720
H 1.242521 2.605001 -0.098950
H 1.830118 2.433042 1.542686
C -1.209870 1.289825 -2.241715
H -1.000140 0.919199 -3.256340
C -2.715136 1.509901 -2.103276
H -2.914586 1.856058 -1.075778
H -3.264017 0.565466 -2.209202
C -3.223823 2.546508 -3.096204
H -3.084466 2.167866 -4.120807
H -4.303381 2.698452 -2.965186
C -2.478128 3.864878 -2.941065
H -2.705965 4.289509 -1.950822
H -2.826697 4.597228 -3.681099
C -0.973773 3.661329 -3.059348
H -0.732617 3.335822 -4.083038
H -0.442431 4.610211 -2.902366
C -0.474037 2.610643 -2.076157

H 0.604969 2.451160 -2.196501
H -0.628171 2.973080 -1.045849
C -1.473121 -1.533287 -1.730267
H -2.479661 -1.471497 -1.290461
C -0.820603 -2.792383 -1.171026
H 0.223165 -2.844577 -1.518066
H -0.785692 -2.722792 -0.078508
C -1.573624 -4.053640 -1.570518
H -2.564944 -4.035797 -1.093667
H -1.054168 -4.940581 -1.182763
C -1.743422 -4.148175 -3.078705
H -2.318017 -5.044479 -3.347672
H -0.754535 -4.257233 -3.551680
C -2.420414 -2.898283 -3.619981
H -2.533436 -2.959792 -4.710809
H -3.436692 -2.831933 -3.202036
C -1.651740 -1.634720 -3.246498
H -2.192768 -0.763459 -3.632862
H -0.675939 -1.643804 -3.750812
C -3.050645 -0.743847 1.064902
C -4.287953 -0.472365 0.463742
C -2.862235 -2.034459 1.574374
C -5.274900 -1.448861 0.346104
H -4.493202 0.523245 0.070493
C -3.848055 -3.014308 1.465984
H -1.923968 -2.298267 2.058156
C -5.058419 -2.730513 0.842252
H -6.221209 -1.203310 -0.135694
H -3.663116 -4.009896 1.869241
H -5.826663 -3.496348 0.750761
C -1.208009 2.567503 2.389027
H -0.608327 2.252966 1.447869
H -1.475483 3.601967 2.138007
H -0.448972 2.564282 3.180534
C -3.729313 2.295520 2.358099
H -3.755612 2.748342 1.357467
H -4.523757 1.542015 2.400790

C -2.385811 1.674059 2.662479
H -3.979641 3.084838 3.088505
C -2.370876 0.953631 3.990175
H -1.381254 0.545198 4.227015
H -2.656786 1.627731 4.817175
H -3.080593 0.117474 3.983085
C 1.611167 -0.364376 -2.719186
H 1.306146 -1.329349 -3.154012
H 1.235031 0.420647 -3.395661
H 2.704993 -0.326533 -2.805368

TS_{XII→XIII}

E = -2457.93776900

Pd -1.565395 0.612427 1.099820
P 2.311867 -0.051428 -0.054719
P -0.644617 0.178820 -1.010452
C 1.094403 -0.017746 -1.259164
C 3.650529 -1.226692 -0.576707
H 4.146233 -0.696862 -1.404677
C 4.722471 -1.509629 0.475569
H 4.272745 -2.082309 1.298702
H 5.110965 -0.580427 0.911498
C 5.857939 -2.331786 -0.124070
H 6.353960 -1.741469 -0.909775
H 6.618696 -2.533550 0.641077
C 5.339447 -3.633486 -0.718881
H 4.940923 -4.263187 0.091410
H 6.160754 -4.199978 -1.176239
C 4.237134 -3.374087 -1.736147
H 3.838250 -4.321391 -2.120808
H 4.660821 -2.841619 -2.601825
C 3.108001 -2.537814 -1.146709
H 2.345407 -2.336014 -1.903393
H 2.606014 -3.104886 -0.351777
C 1.696906 -0.467865 1.622912
H 0.820518 0.199222 1.700065
C 2.630695 -0.151178 2.795631

H 3.049657 0.857292 2.726253
H 3.482774 -0.842209 2.797311
C 1.873863 -0.304624 4.109977
H 2.535337 -0.067723 4.953302
H 1.056295 0.432242 4.136377
C 1.295883 -1.704306 4.258593
H 2.123164 -2.425543 4.347510
H 0.715671 -1.781663 5.187499
C 0.429938 -2.071035 3.063208
H -0.457432 -1.423465 3.041465
H 0.062446 -3.101146 3.154197
C 1.170114 -1.895996 1.745287
H 2.011000 -2.604055 1.699038
H 0.508089 -2.120688 0.902482
C 3.224673 1.557720 0.178331
H 4.075894 1.373113 0.852391
C 3.753622 2.074623 -1.161762
H 4.462957 1.363708 -1.604658
H 2.907179 2.151193 -1.859681
C 4.410627 3.442453 -1.029550
H 4.764330 3.780055 -2.012300
H 5.301654 3.359199 -0.388425
C 3.450277 4.455851 -0.426924
H 3.935163 5.435130 -0.324312
H 2.598309 4.596165 -1.110534
C 2.934827 3.968355 0.918013
H 2.211128 4.680391 1.335823
H 3.772195 3.920863 1.631496
C 2.289101 2.594009 0.802490
H 1.396394 2.657011 0.169303
H 1.933647 2.267546 1.786592
C -1.173767 1.634311 -2.053470
H -0.982540 1.358834 -3.101268
C -2.668648 1.898719 -1.887117
H -2.859277 2.130394 -0.825981
H -3.250821 0.993990 -2.104427
C -3.133012 3.060456 -2.755762

H -3.016337 2.789126 -3.816595
H -4.203851 3.245693 -2.598664
C -2.325940 4.319267 -2.468342
H -2.525189 4.644027 -1.435126
H -2.647212 5.141994 -3.120558
C -0.833975 4.061528 -2.628465
H -0.618387 3.833765 -3.683874
H -0.258018 4.964327 -2.382278
C -0.374578 2.895210 -1.762989
H 0.694509 2.699536 -1.915925
H -0.500316 3.154663 -0.700262
C -1.517476 -1.225068 -1.902357
H -2.521926 -1.206323 -1.457229
C -0.885152 -2.555970 -1.511766
H 0.151182 -2.587642 -1.880569
H -0.832512 -2.621666 -0.419580
C -1.673142 -3.739521 -2.054571
H -2.659933 -3.756846 -1.568559
H -1.173422 -4.680018 -1.785232
C -1.854298 -3.641126 -3.561413
H -2.452198 -4.483054 -3.934936
H -0.871101 -3.713781 -4.052995
C -2.504308 -2.318495 -3.938150
H -2.624770 -2.241770 -5.027206
H -3.516192 -2.281807 -3.506322
C -1.705547 -1.127014 -3.418173
H -2.233903 -0.204537 -3.685156
H -0.735484 -1.090002 -3.931912
C -3.023131 -0.857159 0.940278
C -4.256555 -0.560303 0.337440
C -2.844788 -2.184311 1.354824
C -5.240156 -1.526749 0.137131
H -4.462041 0.459334 0.006867
C -3.822626 -3.160857 1.165940
H -1.911928 -2.482911 1.831384
C -5.025946 -2.839276 0.547415
H -6.180462 -1.252182 -0.341239

H -3.637910 -4.182199 1.499408
H -5.789605 -3.599673 0.392157
C -1.390117 2.165078 2.648044
H -0.507632 1.823745 1.242483
H -1.558869 3.175575 2.273520
H -0.500024 2.069082 3.272330
C -3.888361 1.861079 2.616109
H -3.901797 2.479691 1.710076
H -4.597503 1.039460 2.471229
C -2.507910 1.337072 2.918133
H -4.254994 2.475739 3.453706
C -2.448618 0.344059 4.049755
H -1.417305 0.088397 4.316093
H -2.928234 0.764944 4.947938
H -2.976578 -0.582755 3.794696
C 1.567068 -0.073930 -2.701535
H 1.217814 -0.973757 -3.231968
H 1.225421 0.794010 -3.289251
H 2.660816 -0.075458 -2.790664

XIII

E = -2457.94247526
Pd -1.562155 0.697392 1.118629
P 2.238045 -0.136854 -0.146087
P -0.787769 0.004639 -0.935725
C 0.929187 -0.254132 -1.246409
C 3.497834 -1.428850 -0.599092
H 3.907391 -1.042662 -1.545260
C 4.682104 -1.596662 0.351867
H 4.328216 -2.056208 1.285103
H 5.125035 -0.629346 0.620051
C 5.733663 -2.512738 -0.264262
H 6.131205 -2.043567 -1.177340
H 6.581918 -2.624917 0.423356
C 5.140770 -3.872138 -0.607282
H 4.845970 -4.378203 0.324858
H 5.895824 -4.512050 -1.081716

C 3.919503 -3.730824 -1.504888
H 3.469325 -4.712832 -1.698639
H 4.232849 -3.335100 -2.483495
C 2.878672 -2.792464 -0.906448
H 2.029820 -2.679739 -1.585218
H 2.474867 -3.228278 0.017788
C 1.776991 -0.247168 1.629722
H 0.992198 0.525580 1.708117
C 2.898692 0.099657 2.617056
H 3.379194 1.051158 2.366372
H 3.682318 -0.664405 2.575653
C 2.363885 0.157265 4.043061
H 3.188056 0.371400 4.735900
H 1.661957 0.997090 4.128796
C 1.661875 -1.135150 4.432545
H 2.403141 -1.948450 4.473270
H 1.239204 -1.051226 5.442119
C 0.578549 -1.500583 3.429062
H -0.222583 -0.744136 3.447058
H 0.110023 -2.454504 3.701962
C 1.129143 -1.575834 2.011468
H 1.876455 -2.381709 1.952236
H 0.331624 -1.816743 1.300707
C 3.213183 1.449013 -0.257565
H 4.136801 1.318196 0.327991
C 3.588432 1.752380 -1.710093
H 4.214381 0.954041 -2.129463
H 2.665968 1.774950 -2.307312
C 4.298688 3.092526 -1.849975
H 4.539160 3.275443 -2.905256
H 5.258676 3.056242 -1.312325
C 3.449666 4.222228 -1.288268
H 3.970349 5.183490 -1.385976
H 2.522904 4.304006 -1.877682
C 3.093927 3.948850 0.164398
H 2.450580 4.744857 0.561741
H 4.013416 3.960407 0.770238

C 2.397946 2.604060 0.325499
H 1.428478 2.622833 -0.187186
H 2.171561 2.429734 1.383342
C -1.363617 1.335387 -2.111643
H -1.245628 0.920223 -3.123788
C -2.840878 1.650504 -1.886215
H -2.957045 2.010624 -0.851473
H -3.448509 0.739076 -1.957067
C -3.344971 2.712649 -2.854564
H -3.305636 2.317756 -3.881762
H -4.399523 2.939954 -2.649461
C -2.499494 3.975957 -2.770265
H -2.612570 4.415357 -1.766382
H -2.856926 4.729673 -3.484119
C -1.028980 3.663289 -3.010545
H -0.900305 3.303773 -4.043336
H -0.420962 4.574113 -2.920837
C -0.525836 2.602716 -2.040189
H 0.526141 2.361606 -2.239525
H -0.571235 2.995774 -1.013426
C -1.719103 -1.485058 -1.594812
H -2.686184 -1.405103 -1.080595
C -1.062720 -2.769333 -1.100516
H -0.073759 -2.873526 -1.569445
H -0.890740 -2.701085 -0.020597
C -1.917319 -3.989719 -1.410615
H -2.854229 -3.916646 -0.838882
H -1.410352 -4.902373 -1.068848
C -2.234122 -4.077428 -2.895812
H -2.880089 -4.940872 -3.103241
H -1.301600 -4.243024 -3.458452
C -2.890116 -2.794551 -3.384233
H -3.103544 -2.853898 -4.460050
H -3.859658 -2.673844 -2.877013
C -2.029416 -1.568749 -3.091127
H -2.563622 -0.673499 -3.429206
H -1.105853 -1.623348 -3.683077

C -2.981891 -0.838209 1.270200
C -4.267196 -0.646310 0.737972
C -2.735170 -2.085967 1.855739
C -5.236150 -1.647514 0.754572
H -4.526032 0.314390 0.287229
C -3.697895 -3.095051 1.885987
H -1.761590 -2.291650 2.299489
C -4.953498 -2.884680 1.326364
H -6.218800 -1.459107 0.321848
H -3.461453 -4.054610 2.346216
H -5.705772 -3.671609 1.342969
C -1.831461 2.435755 2.570061
H -0.441955 1.799634 0.808401
C -2.646441 1.373324 2.917161
H -2.363160 0.694930 3.721556
C -0.595927 2.730729 3.376016
H 0.200893 3.166970 2.764479
H -0.842218 3.451266 4.170931
H -0.212788 1.823670 3.853077
H -3.692417 1.346717 2.619675
C -2.386348 3.596429 1.785969
H -3.254281 3.299999 1.187366
H -2.705471 4.390000 2.479189
H -1.635692 4.023496 1.111657
C 1.292567 -0.525349 -2.697259
H 0.894550 -1.482241 -3.069274
H 0.920414 0.259281 -3.376638
H 2.375975 -0.563554 -2.862999

TS_{XIII→XIV} (CW)

E = -2457.93820604
Pd -1.528581 0.450972 1.112160
P 2.317675 -0.053079 -0.016864
P -0.635712 0.298825 -0.993103
C 1.100360 0.084856 -1.216265
C 3.629194 -1.214363 -0.638375
H 4.119731 -0.632519 -1.433469

C 4.718205 -1.584368 0.368356
H 4.281310 -2.215678 1.154606
H 5.123269 -0.693857 0.865193
C 5.835879 -2.364075 -0.315308
H 6.322524 -1.716574 -1.060834
H 6.608600 -2.631162 0.417169
C 5.296724 -3.610909 -1.002295
H 4.908192 -4.300999 -0.237592
H 6.105373 -4.144092 -1.518566
C 4.177595 -3.265384 -1.974639
H 3.765957 -4.177078 -2.426197
H 4.587969 -2.666896 -2.802846
C 3.065407 -2.474776 -1.296675
H 2.285539 -2.211246 -2.015700
H 2.580349 -3.102471 -0.537918
C 1.717324 -0.582688 1.636301
H 0.850774 0.086884 1.781784
C 2.687719 -0.357301 2.801695
H 3.073515 0.666438 2.813986
H 3.558408 -1.017237 2.705186
C 1.996422 -0.657914 4.126723
H 2.694167 -0.486740 4.956725
H 1.163404 0.047957 4.264737
C 1.460823 -2.080952 4.159026
H 2.306026 -2.785291 4.111941
H 0.945568 -2.277173 5.108268
C 0.526658 -2.330598 2.985934
H -0.360364 -1.690942 3.085626
H 0.166330 -3.367262 2.988416
C 1.189026 -2.016617 1.651883
H 2.020598 -2.718067 1.490952
H 0.478230 -2.158801 0.829666
C 3.269624 1.514641 0.312032
H 4.117781 1.262572 0.967956
C 3.810743 2.105021 -0.992661
H 4.493972 1.404533 -1.489837
H 2.964660 2.260248 -1.677827

C 4.515609 3.436564 -0.767601
H 4.877404 3.830739 -1.726145
H 5.405695 3.276268 -0.139861
C 3.594478 4.437498 -0.087847
H 4.114892 5.389032 0.081268
H 2.745666 4.656282 -0.754697
C 3.065364 3.872478 1.221065
H 2.369196 4.578070 1.692954
H 3.902529 3.742946 1.924810
C 2.368380 2.535868 1.006855
H 1.480434 2.676639 0.381201
H 1.990152 2.151830 1.960492
C -1.129200 1.853219 -1.898141
H -0.924642 1.656773 -2.961489
C -2.624292 2.117112 -1.735977
H -2.832113 2.239527 -0.660907
H -3.209677 1.247609 -2.061552
C -3.064411 3.365482 -2.489742
H -2.940856 3.198231 -3.571060
H -4.134707 3.547627 -2.324596
C -2.244698 4.579036 -2.074427
H -2.443453 4.800836 -1.014205
H -2.553571 5.466418 -2.642463
C -0.755899 4.317401 -2.255777
H -0.541398 4.184142 -3.327609
H -0.168856 5.186157 -1.927561
C -0.316042 3.073453 -1.494854
H 0.750648 2.875956 -1.662499
H -0.442415 3.236515 -0.414369
C -1.512232 -0.998744 -2.017800
H -2.525405 -0.973707 -1.596950
C -0.947233 -2.377127 -1.697972
H 0.080060 -2.448811 -2.086800
H -0.884950 -2.498356 -0.610579
C -1.818200 -3.476602 -2.287745
H -2.800558 -3.442836 -1.792626
H -1.388295 -4.462779 -2.066183

C -1.994730 -3.294264 -3.788077
H -2.654466 -4.070885 -4.197353
H -1.020125 -3.418855 -4.286287
C -2.543891 -1.911319 -4.107654
H -2.647686 -1.777980 -5.193003
H -3.555019 -1.821845 -3.681739
C -1.668693 -0.803392 -3.527055
H -2.128723 0.166316 -3.751559
H -0.693148 -0.810735 -4.030759
C -2.946007 -1.074841 0.856366
C -4.159075 -0.824655 0.190753
C -2.777085 -2.382301 1.334761
C -5.136912 -1.801647 0.015609
H -4.355124 0.172782 -0.211129
C -3.747465 -3.372142 1.172911
H -1.855456 -2.655594 1.847875
C -4.936308 -3.087225 0.510448
H -6.061216 -1.557884 -0.508757
H -3.568932 -4.374346 1.563274
H -5.695642 -3.856385 0.378381
C -2.892342 1.355790 2.901406
H -0.437314 1.638991 1.177723
C -1.693306 0.889203 3.363560
H -0.839927 1.551254 3.482973
C -3.052996 2.772930 2.433955
H -3.614013 2.809166 1.491541
H -3.635189 3.342789 3.173245
H -2.086759 3.262605 2.280175
H -1.649484 -0.083308 3.852459
C -4.164732 0.601213 3.133100
H -3.982970 -0.455008 3.348806
H -4.684651 1.057897 3.988551
H -4.834788 0.658149 2.269800
C 1.576651 0.121132 -2.659290
H 1.223236 -0.737252 -3.251418
H 1.246198 1.029964 -3.188537
H 2.670221 0.117455 -2.743510

xiii→*xiv* (CW)

E = -2457.94039725

Pd -1.524765 0.467307 1.112454

P 2.309478 -0.054873 -0.058082

P -0.666416 0.189315 -0.991096

C 1.065242 -0.018662 -1.237388

C 3.611953 -1.258471 -0.614697

H 4.082436 -0.742616 -1.465714

C 4.724177 -1.549251 0.392488

H 4.304722 -2.117067 1.234693

H 5.139711 -0.623070 0.809151

C 5.825573 -2.382942 -0.253093

H 6.292299 -1.799197 -1.061351

H 6.616861 -2.589582 0.479101

C 5.270300 -3.681513 -0.821007

H 4.902255 -4.305589 0.007848

H 6.065798 -4.256439 -1.312291

C 4.126366 -3.415376 -1.789369

H 3.702626 -4.360397 -2.152556

H 4.515750 -2.889346 -2.674907

C 3.032198 -2.567351 -1.152888

H 2.236616 -2.362778 -1.873590

H 2.563446 -3.127126 -0.332791

C 1.755327 -0.443159 1.649622

H 0.901604 0.249035 1.763645

C 2.766370 -0.133910 2.760568

H 3.177379 0.875432 2.665884

H 3.617256 -0.823216 2.702300

C 2.110136 -0.292906 4.126830

H 2.836230 -0.062072 4.917124

H 1.298183 0.444186 4.222261

C 1.546965 -1.694037 4.306746

H 2.377699 -2.416916 4.307217

H 1.052546 -1.788503 5.282225

C 0.578502 -2.035990 3.185666

H -0.297431 -1.375204 3.248142

H 0.204647 -3.061759 3.296624

C 1.209760 -1.861649 1.810467
H 2.028510 -2.587281 1.695000
H 0.474528 -2.070633 1.024650
C 3.257128 1.540292 0.116200
H 4.134405 1.342631 0.752348
C 3.738262 2.036131 -1.249773
H 4.404854 1.303826 -1.723400
H 2.862991 2.136792 -1.907702
C 4.440569 3.384379 -1.152576
H 4.759908 3.708492 -2.151585
H 5.356585 3.276417 -0.551538
C 3.538376 4.427617 -0.511850
H 4.056484 5.392222 -0.434789
H 2.661679 4.591327 -1.158096
C 3.067203 3.958434 0.855602
H 2.383665 4.692743 1.301510
H 3.933033 3.887807 1.532522
C 2.375501 2.604521 0.771783
H 1.459077 2.691446 0.177952
H 2.044405 2.291746 1.767870
C -1.210394 1.681509 -1.971666
H -1.032989 1.429041 -3.028122
C -2.704049 1.935420 -1.779895
H -2.882517 2.115002 -0.706350
H -3.286209 1.041747 -2.039256
C -3.184140 3.135237 -2.586346
H -3.088904 2.911932 -3.660309
H -4.251914 3.311380 -2.399855
C -2.371198 4.380252 -2.260471
H -2.542731 4.655614 -1.207732
H -2.709863 5.232209 -2.864546
C -0.884810 4.128983 -2.471159
H -0.698990 3.941638 -3.540189
H -0.301182 5.021434 -2.206506
C -0.406019 2.933378 -1.658239
H 0.658806 2.743241 -1.843781
H -0.506231 3.152953 -0.584566

C -1.548898 -1.181434 -1.904957
H -2.555093 -1.130181 -1.469950
C -0.969565 -2.528043 -1.489513
H 0.050429 -2.624420 -1.891900
H -0.885803 -2.564067 -0.397085
C -1.845042 -3.673428 -1.975615
H -2.817356 -3.606674 -1.464253
H -1.404817 -4.637807 -1.688278
C -2.050947 -3.607035 -3.481950
H -2.714173 -4.415240 -3.817855
H -1.085102 -3.766328 -3.987348
C -2.612878 -2.254987 -3.898099
H -2.736739 -2.207333 -4.988473
H -3.616736 -2.136567 -3.462177
C -1.733317 -1.101724 -3.421152
H -2.202870 -0.153310 -3.709212
H -0.767173 -1.143012 -3.941119
C -2.932128 -1.096499 1.005716
C -4.152464 -0.934528 0.327058
C -2.741441 -2.347948 1.610899
C -5.114900 -1.939953 0.254496
H -4.366862 0.013451 -0.171846
C -3.692687 -3.367099 1.548336
H -1.815163 -2.552348 2.147761
C -4.888847 -3.168657 0.867963
H -6.045825 -1.762994 -0.284715
H -3.494186 -4.323542 2.032558
H -5.634665 -3.960241 0.814743
C -4.161165 1.704110 2.357667
H -4.354636 2.019193 1.324027
H -4.526783 0.682146 2.479076
H -4.737457 2.375623 3.010445
C -2.028240 0.810051 3.310784
H -2.537459 -0.114895 3.576379
H -0.431818 1.651673 1.107349
C -2.705746 1.825288 2.692854
H -1.044294 0.991396 3.741236

C -2.139167 3.210823 2.576612
H -2.695779 3.885824 3.243693
H -1.077399 3.239605 2.835702
H -2.250677 3.595492 1.555164
C 1.509126 -0.095668 -2.688996
H 1.156908 -1.005839 -3.198855
H 1.150407 0.760095 -3.284186
H 2.600402 -0.089215 -2.798569

TS_{XIII→XIV} (CW)

E = -2457.93978772

Pd -1.512448 0.535828 1.112112
P 2.284865 -0.057312 -0.084280
P -0.703934 0.102695 -0.989865
C 1.027970 -0.101958 -1.249633
C 3.601882 -1.267564 -0.588199
H 4.057679 -0.791498 -1.469750
C 4.724949 -1.482622 0.426058
H 4.320526 -2.006648 1.303230
H 5.128165 -0.527381 0.785320
C 5.835747 -2.334650 -0.178164
H 6.288919 -1.790632 -1.021110
H 6.634192 -2.486862 0.559594
C 5.298370 -3.671920 -0.667891
H 4.944066 -4.253342 0.197174
H 6.100414 -4.261577 -1.130194
C 4.145955 -3.478664 -1.643500
H 3.735505 -4.449074 -1.950680
H 4.523134 -2.997470 -2.559293
C 3.041041 -2.613099 -1.050180
H 2.240493 -2.460493 -1.778434
H 2.582893 -3.133964 -0.199207
C 1.745600 -0.370812 1.642317
H 0.874013 0.304681 1.721930
C 2.741542 0.020780 2.739627
H 3.131266 1.032465 2.593007
H 3.607697 -0.652211 2.726424

C 2.071805 -0.077135 4.105233
H 2.780993 0.214865 4.890604
H 1.242728 0.646146 4.147129
C 1.538315 -1.479122 4.358879
H 2.386613 -2.179160 4.413645
H 1.032640 -1.528370 5.331983
C 0.594572 -1.914045 3.248276
H -0.305118 -1.283802 3.263541
H 0.255057 -2.944807 3.411842
C 1.236780 -1.793076 1.872886
H 2.076542 -2.500212 1.802759
H 0.517313 -2.061236 1.090800
C 3.210501 1.557660 0.003313
H 4.088605 1.407576 0.651176
C 3.688536 1.984954 -1.386829
H 4.369870 1.239356 -1.816593
H 2.814335 2.033467 -2.052277
C 4.368085 3.348177 -1.362690
H 4.684394 3.622144 -2.377552
H 5.284495 3.288120 -0.755577
C 3.448335 4.410587 -0.781186
H 3.950880 5.386142 -0.757488
H 2.569984 4.523868 -1.435956
C 2.982693 4.009863 0.609675
H 2.286788 4.756331 1.014380
H 3.848345 3.989552 1.290204
C 2.311920 2.643275 0.597351
H 1.397603 2.684362 -0.004622
H 1.979896 2.379416 1.607447
C -1.269795 1.511175 -2.073819
H -1.099433 1.180873 -3.109479
C -2.763483 1.764243 -1.886970
H -2.933547 2.019932 -0.828788
H -3.338366 0.847362 -2.070982
C -3.262816 2.894875 -2.777210
H -3.176677 2.590605 -3.831932
H -4.330137 3.076096 -2.593118

C -2.457854 4.168177 -2.557187
H -2.622106 4.523816 -1.527810
H -2.809691 4.967223 -3.222926
C -0.971077 3.914291 -2.762779
H -0.793542 3.646301 -3.815942
H -0.393704 4.829818 -2.574172
C -0.472552 2.789244 -1.865333
H 0.591938 2.593393 -2.048007
H -0.562333 3.089524 -0.810712
C -1.585737 -1.340381 -1.795764
H -2.584306 -1.285797 -1.342024
C -0.962367 -2.649325 -1.326226
H 0.059331 -2.728778 -1.727323
H -0.873411 -2.634794 -0.234106
C -1.794564 -3.848138 -1.757382
H -2.767162 -3.800851 -1.244772
H -1.313217 -4.780150 -1.431442
C -2.012428 -3.856050 -3.263062
H -2.643118 -4.705092 -3.558357
H -1.044446 -3.995183 -3.770249
C -2.634404 -2.547180 -3.726887
H -2.773783 -2.549465 -4.816400
H -3.636594 -2.450678 -3.281867
C -1.795960 -1.341235 -3.311598
H -2.306315 -0.426576 -3.635640
H -0.835384 -1.367689 -3.843018
C -2.933048 -1.017405 1.111586
C -4.186121 -0.803231 0.511333
C -2.739894 -2.287456 1.675165
C -5.175460 -1.784597 0.465870
H -4.401526 0.161720 0.046850
C -3.718881 -3.280494 1.639136
H -1.790222 -2.528239 2.153236
C -4.945116 -3.035259 1.030312
H -6.130365 -1.571208 -0.015032
H -3.518561 -4.254729 2.085674
H -5.711713 -3.807816 0.997018

C -3.845122 2.253395 2.205028
H -3.853424 2.682420 1.194940
H -4.408523 1.316932 2.192092
H -4.359243 2.971057 2.861200
C -2.068676 0.879366 3.298069
H -2.784839 0.078782 3.466755
H -0.434319 1.717567 0.971810
C -2.441067 2.049361 2.692313
H -1.116340 0.823064 3.824067
C -1.605331 3.294167 2.789263
H -2.050451 3.963428 3.541375
H -0.575100 3.069764 3.080699
H -1.583097 3.835842 1.837457
C 1.458159 -0.247874 -2.699812
H 1.110965 -1.185879 -3.160538
H 1.086059 0.574044 -3.333322
H 2.548396 -0.237031 -2.819999

TS_{XIII→XIV} (CCW)

E = -2457.93500238
Pd -1.590116 0.564561 1.116995
P 2.299850 -0.078741 -0.040332
P -0.648548 0.363716 -0.973184
C 1.084492 0.144027 -1.225658
C 3.599527 -1.216633 -0.729116
H 4.093940 -0.589517 -1.486520
C 4.687436 -1.655340 0.251037
H 4.248940 -2.337270 0.993027
H 5.094685 -0.801246 0.806409
C 5.803169 -2.390438 -0.482326
H 6.289864 -1.697396 -1.185684
H 6.576412 -2.704986 0.230492
C 5.260716 -3.590035 -1.246274
H 4.871629 -4.326405 -0.526326
H 6.067228 -4.091237 -1.796760
C 4.141392 -3.180490 -2.193406
H 3.726512 -4.060504 -2.701335

H 4.553201 -2.532346 -2.982602
C 3.031217 -2.429949 -1.467499
H 2.255601 -2.117042 -2.171343
H 2.540483 -3.102826 -0.752363
C 1.677754 -0.698919 1.572767
H 0.820439 -0.026598 1.761048
C 2.652919 -0.579195 2.749710
H 3.039719 0.439770 2.849247
H 3.521814 -1.227384 2.586071
C 1.976190 -0.993124 4.051417
H 2.694956 -0.924170 4.878298
H 1.171412 -0.280670 4.276594
C 1.392636 -2.395562 3.965268
H 2.212106 -3.123139 3.856636
H 0.873384 -2.650742 4.898352
C 0.450052 -2.520844 2.778419
H -0.417637 -1.863311 2.925573
H 0.057904 -3.542800 2.698512
C 1.130743 -2.121889 1.478970
H 1.956959 -2.819489 1.277694
H 0.432688 -2.194106 0.638583
C 3.276948 1.447911 0.390256
H 4.110929 1.138177 1.039753
C 3.847976 2.110240 -0.865816
H 4.521338 1.429095 -1.401702
H 3.014458 2.331918 -1.548526
C 4.584192 3.403910 -0.539744
H 4.966810 3.855672 -1.464179
H 5.463199 3.173603 0.081840
C 3.685895 4.380845 0.203309
H 4.235242 5.298771 0.449289
H 2.854942 4.678543 -0.454955
C 3.119374 3.738866 1.459842
H 2.436237 4.429137 1.971644
H 3.940448 3.533027 2.164379
C 2.388757 2.442581 1.137984
H 1.518574 2.653813 0.506159

H 1.980158 2.002998 2.054560
C -1.114284 1.950028 -1.839496
H -0.914315 1.772787 -2.906851
C -2.602987 2.247595 -1.675287
H -2.807808 2.387477 -0.601948
H -3.209132 1.387645 -1.988136
C -3.009293 3.499192 -2.442167
H -2.879444 3.321212 -3.521185
H -4.076400 3.707574 -2.288187
C -2.165833 4.696455 -2.026164
H -2.374480 4.932086 -0.971012
H -2.445837 5.586247 -2.605379
C -0.680187 4.401499 -2.184029
H -0.452180 4.263081 -3.252440
H -0.079956 5.257856 -1.847376
C -0.276611 3.147464 -1.418451
H 0.787090 2.926312 -1.574617
H -0.411530 3.310924 -0.339233
C -1.550466 -0.890072 -2.042950
H -2.557686 -0.891142 -1.605961
C -0.969558 -2.280163 -1.814216
H 0.064923 -2.307681 -2.188535
H -0.921330 -2.477029 -0.737869
C -1.804687 -3.358475 -2.489768
H -2.791799 -3.391555 -2.004938
H -1.345023 -4.344007 -2.334354
C -1.979207 -3.076416 -3.974023
H -2.612791 -3.841874 -4.441457
H -0.999468 -3.133644 -4.474416
C -2.570372 -1.691933 -4.191478
H -2.684099 -1.482707 -5.263730
H -3.580983 -1.662391 -3.756028
C -1.723033 -0.604383 -3.537015
H -2.210533 0.364344 -3.695005
H -0.750032 -0.550604 -4.043279
C -3.050731 -0.901951 0.785925
C -4.267916 -0.523039 0.193737

C -2.913155 -2.265656 1.080001
C -5.277752 -1.438165 -0.095045
H -4.440969 0.527086 -0.054229
C -3.917670 -3.194341 0.802988
H -1.992418 -2.632422 1.534107
C -5.106509 -2.786143 0.208312
H -6.204554 -1.097492 -0.557224
H -3.765331 -4.245805 1.047769
H -5.890783 -3.507857 -0.014429
C -2.654248 0.899918 3.276542
H -0.428860 1.668619 1.190355
C -2.454756 2.063512 2.579391
H -3.267582 2.496817 1.995313
C -4.003843 0.259490 3.392168
H -3.944371 -0.832931 3.345425
H -4.431379 0.532664 4.369046
H -4.686951 0.591550 2.607122
H -1.612327 2.712594 2.798274
C -1.644300 0.449766 4.290916
H -0.675512 0.935924 4.137689
H -2.000324 0.695563 5.302615
H -1.505460 -0.636864 4.262402
C 1.557492 0.261018 -2.665039
H 1.189586 -0.554513 -3.307203
H 1.241529 1.205168 -3.137678
H 2.650849 0.244230 -2.752229

xiii→*xiv* (**CCW**)

E = -2457.93804605
Pd -1.588856 0.597295 1.078444
P 2.306401 -0.140156 -0.053396
P -0.635563 0.320563 -1.000662
C 1.088217 0.036867 -1.243784
C 3.560103 -1.369752 -0.661507
H 4.072513 -0.821679 -1.467258
C 4.635122 -1.780479 0.343790
H 4.172985 -2.394753 1.128904

H 5.076625 -0.907908 0.841136
C 5.715660 -2.609931 -0.339653
H 6.219701 -1.992352 -1.098840
H 6.484646 -2.898063 0.388760
C 5.118342 -3.843833 -1.001743
H 4.713128 -4.506376 -0.221508
H 5.897499 -4.416899 -1.520616
C 4.001219 -3.468106 -1.965323
H 3.543559 -4.369356 -2.392955
H 4.426308 -2.905542 -2.811037
C 2.933140 -2.612600 -1.294250
H 2.163610 -2.324575 -2.015139
H 2.420982 -3.199109 -0.518983
C 1.679487 -0.592961 1.608356
H 0.906399 0.181690 1.764895
C 2.697300 -0.493482 2.750293
H 3.251757 0.450048 2.723204
H 3.439902 -1.294319 2.660787
C 1.991500 -0.636094 4.091973
H 2.725847 -0.584402 4.906393
H 1.317006 0.219823 4.226749
C 1.202449 -1.935773 4.173501
H 1.908999 -2.780199 4.185191
H 0.646998 -1.986848 5.119518
C 0.254478 -2.100570 2.993803
H -0.541821 -1.341458 3.038671
H -0.246730 -3.075660 3.042156
C 0.970840 -1.944269 1.659571
H 1.706939 -2.753498 1.538381
H 0.258612 -2.024754 0.831364
C 3.333532 1.385954 0.247037
H 4.201771 1.094379 0.858918
C 3.837668 1.961147 -1.079323
H 4.468249 1.234914 -1.608636
H 2.968873 2.152032 -1.725150
C 4.603036 3.263335 -0.884687
H 4.936619 3.645700 -1.858096

H 5.513244 3.068698 -0.296710
C 3.749600 4.295559 -0.164769
H 4.310611 5.227639 -0.018716
H 2.880408 4.546062 -0.792825
C 3.261706 3.748178 1.167372
H 2.614349 4.477597 1.671289
H 4.126705 3.589604 1.830403
C 2.509347 2.435309 0.994776
H 1.584375 2.604039 0.430844
H 2.187939 2.063088 1.973756
C -1.065522 1.893787 -1.908332
H -0.871588 1.685955 -2.971336
C -2.546550 2.229353 -1.746465
H -2.744570 2.392301 -0.675021
H -3.173687 1.378658 -2.043192
C -2.925479 3.477064 -2.533544
H -2.803158 3.278280 -3.609819
H -3.986929 3.713018 -2.380149
C -2.052888 4.661020 -2.139916
H -2.251819 4.918185 -1.087937
H -2.314561 5.547623 -2.732466
C -0.575349 4.328639 -2.298471
H -0.355352 4.167342 -3.365383
H 0.046346 5.176263 -1.978593
C -0.198241 3.078787 -1.513297
H 0.859040 2.830109 -1.671085
H -0.323511 3.261878 -0.436024
C -1.567100 -0.942703 -2.033214
H -2.573686 -0.909318 -1.595666
C -1.016051 -2.338668 -1.766582
H 0.009642 -2.404274 -2.157793
H -0.948781 -2.504268 -0.685730
C -1.887030 -3.414941 -2.398342
H -2.870842 -3.404283 -1.905821
H -1.454052 -4.407613 -2.214322
C -2.063466 -3.176111 -3.890227
H -2.721435 -3.937949 -4.329000

H -1.088740 -3.278281 -4.393226
C -2.616064 -1.783101 -4.151740
H -2.726702 -1.606450 -5.230164
H -3.624546 -1.711336 -3.716420
C -1.738085 -0.697746 -3.534732
H -2.201922 0.277723 -3.720130
H -0.766486 -0.683378 -4.046198
C -3.082637 -0.833825 0.768817
C -4.326808 -0.451532 0.240724
C -2.947183 -2.190870 1.094561
C -5.366403 -1.359044 0.042646
H -4.500367 0.591729 -0.034507
C -3.978859 -3.110471 0.908836
H -2.006534 -2.554942 1.509335
C -5.196651 -2.699331 0.376392
H -6.314504 -1.017492 -0.373293
H -3.828292 -4.156280 1.177637
H -6.003989 -3.414015 0.224864
C -1.333255 1.413592 4.178260
H -0.736668 0.524571 4.406786
H -0.684658 2.163969 3.716678
C -2.931119 1.924537 2.327482
H -0.441651 1.728483 1.241731
H -3.897215 1.765280 1.850088
H -2.447720 2.887685 2.178963
C -2.501327 1.068019 3.302612
H -1.701808 1.798713 5.140749
C -3.337595 -0.083706 3.773935
H -3.672305 0.116597 4.802372
H -4.210942 -0.246476 3.137940
H -2.760832 -1.016646 3.795109
C 1.557768 0.052690 -2.689233
H 1.166111 -0.790556 -3.279117
H 1.263931 0.974277 -3.218057
H 2.649889 0.002059 -2.777805

TS_{XIII→XIV} (CCW)

E = -2457.93474599

Pd -1.619650 0.788735 1.026982

P 2.257289 -0.132105 -0.119956

P -0.755653 0.017206 -0.962405

C 0.967153 -0.251084 -1.240343

C 3.535647 -1.409412 -0.561380

H 3.967054 -1.010083 -1.492013

C 4.695225 -1.575748 0.420142

H 4.319902 -2.041010 1.342327

H 5.124508 -0.606664 0.703925

C 5.769970 -2.480273 -0.173030

H 6.191593 -1.999290 -1.069002

H 6.598130 -2.594073 0.538424

C 5.197333 -3.839790 -0.548146

H 4.877727 -4.358130 0.368958

H 5.971150 -4.469205 -1.006122

C 4.002907 -3.696800 -1.480882

H 3.567060 -4.679822 -1.700560

H 4.342237 -3.285815 -2.444433

C 2.937087 -2.775102 -0.900583

H 2.105465 -2.662737 -1.600506

H 2.513665 -3.226934 0.006436

C 1.758844 -0.281930 1.640119

H 0.934481 0.450457 1.704046

C 2.831910 0.107073 2.663596

H 3.268611 1.085872 2.440650

H 3.655951 -0.614767 2.637083

C 2.246916 0.118629 4.070260

H 3.031534 0.371763 4.795031

H 1.497221 0.919471 4.135866

C 1.604097 -1.214691 4.425301

H 2.389355 -1.984067 4.488318

H 1.141714 -1.162759 5.419626

C 0.578116 -1.633099 3.382200

H -0.265529 -0.929190 3.388079

H 0.161438 -2.619024 3.625072

C 1.173622 -1.649842 1.982402
H 1.965575 -2.412229 1.932740
H 0.413726 -1.923144 1.242786
C 3.220076 1.462560 -0.192344
H 4.121784 1.339470 0.428185
C 3.648176 1.770799 -1.629471
H 4.297484 0.979187 -2.025157
H 2.749062 1.785477 -2.262063
C 4.352952 3.116690 -1.740225
H 4.630226 3.304285 -2.785645
H 5.293240 3.084548 -1.168515
C 3.477923 4.239848 -1.205985
H 3.997314 5.203888 -1.280954
H 2.573269 4.319322 -1.829110
C 3.068869 3.958892 0.231281
H 2.406569 4.749911 0.606713
H 3.964564 3.971872 0.871931
C 2.372439 2.610858 0.357355
H 1.428182 2.627786 -0.199205
H 2.090985 2.432709 1.401468
C -1.289638 1.323982 -2.184356
H -1.130986 0.883581 -3.180308
C -2.774337 1.647824 -2.036009
H -2.937667 2.050825 -1.023544
H -3.380150 0.734645 -2.097634
C -3.228655 2.667198 -3.072935
H -3.140165 2.225937 -4.078033
H -4.291499 2.903558 -2.930351
C -2.386282 3.933843 -3.005860
H -2.554719 4.424839 -2.034698
H -2.703074 4.649571 -3.775913
C -0.904492 3.614145 -3.149188
H -0.718249 3.213864 -4.158021
H -0.302790 4.529533 -3.063025
C -0.453688 2.592926 -2.112839
H 0.606273 2.344692 -2.251574
H -0.548675 3.019782 -1.103335

C -1.678794 -1.480604 -1.620075
H -2.663201 -1.378175 -1.144761
C -1.054832 -2.758898 -1.072027
H -0.043862 -2.876703 -1.489490
H -0.936739 -2.670027 0.013486
C -1.902325 -3.981519 -1.393492
H -2.860609 -3.893676 -0.860288
H -1.413588 -4.889455 -1.014660
C -2.163433 -4.097107 -2.887373
H -2.805518 -4.961689 -3.101993
H -1.211431 -4.277443 -3.411541
C -2.794042 -2.820756 -3.423589
H -2.970143 -2.900024 -4.504856
H -3.779843 -2.684064 -2.953035
C -1.934875 -1.595334 -3.125036
H -2.448896 -0.703775 -3.501723
H -0.991612 -1.670567 -3.682106
C -3.105922 -0.689034 1.127945
C -4.376103 -0.541948 0.546596
C -2.865886 -1.904984 1.783081
C -5.333465 -1.553514 0.583000
H -4.633581 0.392031 0.042337
C -3.818900 -2.922631 1.837928
H -1.901639 -2.079497 2.261071
C -5.057241 -2.756227 1.227557
H -6.303333 -1.400538 0.109241
H -3.587553 -3.854360 2.354601
H -5.801564 -3.550250 1.260155
C -1.232509 3.570079 2.655828
H -0.144441 3.454765 2.701735
H -1.488509 4.015179 1.690017
H -1.526725 4.269619 3.453936
C -3.117851 1.958713 2.233521
H -3.521944 2.625458 1.470675
H -0.407722 1.822738 0.833171
C -1.941684 2.260827 2.869806
H -3.789998 1.201541 2.626803

C -1.556811 1.510186 4.111563
H -1.821472 2.104377 4.999194
H -2.068805 0.543945 4.175420
H -0.476662 1.339345 4.155424
C 1.356880 -0.520472 -2.684658
H 0.970804 -1.479521 -3.063610
H 0.994632 0.262254 -3.370965
H 2.443485 -0.553385 -2.829853

XIV

E = -2457.94303614
Pd -1.520349 0.587047 1.144800
P 2.300692 -0.067159 -0.054445
P -0.661064 0.300843 -0.982019
C 1.072773 0.083455 -1.240560
C 3.604947 -1.235844 -0.674797
H 4.112531 -0.657525 -1.461715
C 4.671827 -1.620069 0.350458
H 4.211257 -2.240866 1.131412
H 5.082221 -0.734580 0.851864
C 5.788329 -2.420471 -0.310337
H 6.298575 -1.784527 -1.049978
H 6.543559 -2.697167 0.436635
C 5.239820 -3.660854 -1.001473
H 4.824923 -4.340292 -0.241109
H 6.048046 -4.210765 -1.500521
C 4.145716 -3.299384 -1.996079
H 3.727141 -4.205175 -2.453074
H 4.582813 -2.710978 -2.817785
C 3.033788 -2.487155 -1.343381
H 2.276854 -2.209782 -2.081551
H 2.518720 -3.103891 -0.595415
C 1.687030 -0.602492 1.589005
H 0.819006 0.067354 1.719878
C 2.621907 -0.385338 2.782776
H 3.035226 0.627891 2.797391
H 3.477115 -1.070644 2.727484

C 1.864551 -0.649138 4.079864
H 2.526174 -0.484269 4.940058
H 1.046222 0.082109 4.168047
C 1.284726 -2.055543 4.110593
H 2.110056 -2.784216 4.131195
H 0.709878 -2.212008 5.032983
C 0.410905 -2.313339 2.892906
H -0.470505 -1.659328 2.930149
H 0.035489 -3.344750 2.896703
C 1.147320 -2.031267 1.592584
H 1.979230 -2.742314 1.481817
H 0.478817 -2.175376 0.737055
C 3.270580 1.486333 0.285279
H 4.108250 1.216387 0.947690
C 3.834948 2.075188 -1.010158
H 4.498335 1.361073 -1.514360
H 2.996470 2.264850 -1.696633
C 4.583520 3.378626 -0.761018
H 4.961659 3.776929 -1.711486
H 5.465978 3.174978 -0.135095
C 3.699120 4.401417 -0.064868
H 4.258986 5.324911 0.131472
H 2.868473 4.674495 -0.733966
C 3.131558 3.831991 1.226248
H 2.456368 4.554746 1.702471
H 3.953101 3.656857 1.938384
C 2.389075 2.525969 0.977231
H 1.522899 2.710624 0.331779
H 1.977169 2.140934 1.916936
C -1.155891 1.841108 -1.909222
H -0.983306 1.621398 -2.973217
C -2.641403 2.133245 -1.711148
H -2.813432 2.313065 -0.636976
H -3.248169 1.255806 -1.969142
C -3.084157 3.349253 -2.513959
H -2.988699 3.127713 -3.588452
H -4.147375 3.555486 -2.332910

C -2.238438 4.569346 -2.176092
H -2.416408 4.848462 -1.125940
H -2.544041 5.431403 -2.783542
C -0.755696 4.279374 -2.367421
H -0.558635 4.096654 -3.435248
H -0.153332 5.153933 -2.086108
C -0.318547 3.062224 -1.561798
H 0.743098 2.844082 -1.735554
H -0.427474 3.272723 -0.487614
C -1.557533 -1.016237 -1.979738
H -2.556029 -1.028223 -1.522854
C -0.933269 -2.382404 -1.717292
H 0.096113 -2.393101 -2.104787
H -0.862489 -2.545001 -0.636430
C -1.742973 -3.506213 -2.348385
H -2.721914 -3.556584 -1.849282
H -1.248814 -4.471075 -2.170478
C -1.946961 -3.274802 -3.837501
H -2.560955 -4.074447 -4.272686
H -0.972972 -3.314257 -4.350673
C -2.587559 -1.917788 -4.085251
H -2.726456 -1.744521 -5.160926
H -3.590934 -1.908387 -3.632417
C -1.766253 -0.783930 -3.478544
H -2.289494 0.162535 -3.655536
H -0.804273 -0.711775 -4.004014
C -3.017737 -0.858097 0.878654
C -4.232978 -0.493506 0.274938
C -2.861775 -2.221924 1.162242
C -5.220161 -1.424092 -0.042447
H -4.421427 0.554964 0.037798
C -3.843156 -3.165544 0.855922
H -1.942858 -2.576968 1.627932
C -5.028006 -2.772705 0.243551
H -6.145265 -1.093703 -0.515133
H -3.674419 -4.216570 1.091151
H -5.793841 -3.506159 -0.003444

C -2.525488 -0.181781 4.070513
H -2.957588 -1.086889 3.628118
H -1.491059 -0.390915 4.362716
C -1.539100 1.843700 2.962405
H -0.344066 1.658316 1.051413
H -1.692475 2.862438 2.609677
H -0.604885 1.664701 3.493353
C -2.615455 0.989166 3.132831
H -3.092629 0.042564 4.986588
C -4.011089 1.470111 2.847391
H -4.423505 1.942253 3.752088
H -4.031856 2.208358 2.037286
H -4.671432 0.641994 2.573532
C 1.534533 0.129799 -2.687204
H 1.160744 -0.714860 -3.287101
H 1.215539 1.050547 -3.202842
H 2.627533 0.106628 -2.781216

TS_{XIV→XV}

E = -2457.93683200

Pd -1.542671 0.649285 1.182214
P 2.208487 -0.114874 -0.183715
P -0.813290 -0.019218 -0.930097
C 0.902352 -0.239293 -1.285344
C 3.510893 -1.350055 -0.666356
H 3.914734 -0.922284 -1.597086
C 4.689829 -1.500552 0.294114
H 4.339920 -1.983279 1.217441
H 5.100975 -0.524272 0.580534
C 5.775895 -2.373318 -0.325358
H 6.173707 -1.871938 -1.221035
H 6.616421 -2.476861 0.373018
C 5.228672 -3.740581 -0.709846
H 4.931788 -4.276851 0.204581
H 6.010420 -4.347134 -1.184830
C 4.020225 -3.612254 -1.626463
H 3.604217 -4.601775 -1.855069

H 4.338685 -3.180151 -2.587899
C 2.940490 -2.723845 -1.020562
H 2.098877 -2.618900 -1.709821
H 2.536584 -3.199267 -0.116746
C 1.746383 -0.294760 1.589081
H 0.894961 0.404637 1.678955
C 2.823507 0.126281 2.597041
H 3.199070 1.133470 2.389820
H 3.686054 -0.545958 2.526700
C 2.286107 0.066549 4.023032
H 3.079241 0.351290 4.726458
H 1.485830 0.810818 4.139699
C 1.733682 -1.308704 4.360105
H 2.555359 -2.041836 4.350434
H 1.321608 -1.316818 5.377310
C 0.675762 -1.724532 3.351153
H -0.188235 -1.044789 3.413551
H 0.298781 -2.729374 3.579620
C 1.215630 -1.686036 1.928378
H 2.027864 -2.421947 1.831230
H 0.435807 -1.965017 1.212280
C 3.122718 1.508431 -0.245369
H 4.033730 1.412333 0.366067
C 3.520580 1.855560 -1.681499
H 4.202681 1.100953 -2.094076
H 2.614977 1.836569 -2.304823
C 4.158035 3.235629 -1.779852
H 4.418821 3.449595 -2.824394
H 5.102403 3.243303 -1.214149
C 3.232107 4.308299 -1.227262
H 3.702917 5.297510 -1.293939
H 2.320872 4.350940 -1.844098
C 2.848197 3.992170 0.209642
H 2.146591 4.743049 0.597288
H 3.745905 4.048900 0.844757
C 2.229391 2.606491 0.330830
H 1.275050 2.575866 -0.209357

H 1.984326 2.401717 1.377814
C -1.445294 1.289605 -2.102386
H -1.346138 0.879985 -3.118506
C -2.921362 1.573304 -1.830720
H -3.007922 1.944227 -0.797182
H -3.512365 0.648634 -1.865122
C -3.481044 2.613587 -2.791603
H -3.460056 2.211968 -3.816680
H -4.534888 2.816003 -2.558728
C -2.666497 3.899020 -2.737968
H -2.770420 4.345083 -1.736157
H -3.058949 4.636821 -3.450063
C -1.193142 3.625412 -3.007915
H -1.075926 3.268446 -4.042821
H -0.608668 4.552803 -2.931786
C -0.638987 2.577662 -2.051050
H 0.414567 2.366413 -2.274948
H -0.670144 2.969326 -1.022674
C -1.734408 -1.528920 -1.566366
H -2.687624 -1.477271 -1.021352
C -1.030144 -2.800915 -1.107163
H -0.046087 -2.865670 -1.593757
H -0.843010 -2.745176 -0.029799
C -1.849499 -4.044727 -1.419802
H -2.776591 -4.012595 -0.828537
H -1.304849 -4.944244 -1.101904
C -2.194068 -4.122057 -2.899121
H -2.814066 -5.004287 -3.106825
H -1.268371 -4.246306 -3.483253
C -2.903630 -2.855154 -3.351964
H -3.137238 -2.903743 -4.424150
H -3.866201 -2.776540 -2.823759
C -2.079641 -1.605548 -3.055579
H -2.651271 -0.724976 -3.369711
H -1.167032 -1.618911 -3.667348
C -2.877211 -0.918550 1.395971
C -4.188785 -0.683127 0.948135

C -2.617977 -2.198812 1.899552
C -5.170981 -1.670978 0.969081
H -4.456430 0.300597 0.556526
C -3.593899 -3.195049 1.931255
H -1.626133 -2.444563 2.273417
C -4.876208 -2.940091 1.458068
H -6.173120 -1.446776 0.603395
H -3.345708 -4.180723 2.325326
H -5.638304 -3.717466 1.476749
C -2.271669 1.493157 2.991728
H -0.679984 2.021225 1.029156
H -1.822873 0.981030 3.843779
H -3.357880 1.445473 2.933173
C -0.337162 3.111892 3.047392
H 0.307012 2.304875 3.408630
H 0.245680 3.740141 2.364693
C -1.583586 2.572321 2.387482
H -0.625024 3.728191 3.911137
C -2.403878 3.619536 1.670257
H -2.738797 4.374287 2.396667
H -1.825008 4.133660 0.894422
H -3.290943 3.179589 1.203204
C 1.259235 -0.472084 -2.743569
H 0.868072 -1.425125 -3.133092
H 0.871021 0.322289 -3.402323
H 2.341914 -0.494721 -2.919760

XV

E = -2457.95008950
Pd -1.544318 0.713646 1.158653
P 2.206640 -0.121040 -0.207623
P -0.805154 -0.223859 -0.906717
C 0.910268 -0.417562 -1.288474
C 3.578097 -1.314202 -0.582371
H 3.946482 -0.956947 -1.556695
C 4.770795 -1.295878 0.372623
H 4.459465 -1.708897 1.342304

H 5.119961 -0.272536 0.559616
C 5.904944 -2.154537 -0.175034
H 6.262810 -1.719119 -1.120633
H 6.756153 -2.137638 0.517802
C 5.441761 -3.584416 -0.417216
H 5.188688 -4.046253 0.549522
H 6.256048 -4.184449 -0.843260
C 4.218652 -3.623910 -1.322950
H 3.865083 -4.655559 -1.446037
H 4.499282 -3.270442 -2.327272
C 3.090489 -2.749133 -0.790215
H 2.235137 -2.765867 -1.471198
H 2.728869 -3.155152 0.164152
C 1.751445 -0.161613 1.576649
H 0.870591 0.506060 1.607411
C 2.801947 0.396549 2.544301
H 3.150635 1.387947 2.237752
H 3.684526 -0.253218 2.552442
C 2.242882 0.466370 3.961362
H 3.010789 0.857493 4.641238
H 1.409711 1.183248 3.984092
C 1.740136 -0.887999 4.434721
H 2.589363 -1.585097 4.509827
H 1.313636 -0.806319 5.442580
C 0.711568 -1.443330 3.463238
H -0.171130 -0.785407 3.447743
H 0.362579 -2.431610 3.788665
C 1.269481 -1.530447 2.049323
H 2.109270 -2.241289 2.032304
H 0.510902 -1.907025 1.356689
C 3.019170 1.546171 -0.408025
H 3.936738 1.560772 0.200468
C 3.388328 1.793317 -1.872162
H 4.120235 1.053245 -2.220990
H 2.485495 1.656047 -2.484896
C 3.929322 3.199394 -2.096487
H 4.173008 3.337817 -3.157716

H 4.871886 3.321607 -1.541014
C 2.932660 4.250730 -1.633486
H 3.335019 5.259918 -1.788909
H 2.020732 4.178829 -2.246080
C 2.572947 4.038807 -0.171498
H 1.818400 4.769022 0.150576
H 3.464064 4.219018 0.449521
C 2.058623 2.628693 0.085448
H 1.101262 2.481944 -0.430983
H 1.849317 2.507209 1.153503
C -1.515608 0.925396 -2.198189
H -1.396839 0.438859 -3.177870
C -3.003904 1.163111 -1.945926
H -3.108555 1.637340 -0.956813
H -3.551745 0.214586 -1.875848
C -3.612544 2.067140 -3.009766
H -3.564431 1.561853 -3.987021
H -4.676908 2.236671 -2.799738
C -2.868748 3.393630 -3.091175
H -3.010874 3.941822 -2.146858
H -3.289978 4.026083 -3.883672
C -1.378594 3.176824 -3.316868
H -1.224230 2.726974 -4.309781
H -0.846831 4.138339 -3.325782
C -0.782901 2.257021 -2.258865
H 0.283935 2.086086 -2.451275
H -0.854330 2.744091 -1.272019
C -1.693506 -1.822888 -1.349910
H -2.644570 -1.739320 -0.801984
C -0.942328 -3.016003 -0.768683
H 0.046988 -3.086095 -1.245686
H -0.762083 -2.849605 0.298103
C -1.706578 -4.319287 -0.954416
H -2.634520 -4.269419 -0.365555
H -1.122745 -5.158141 -0.551555
C -2.050310 -4.558476 -2.416156
H -2.631763 -5.482898 -2.531018

H -1.121256 -4.700055 -2.990795
C -2.814290 -3.373446 -2.986257
H -3.048844 -3.537164 -4.046743
H -3.777994 -3.282738 -2.461938
C -2.041043 -2.068992 -2.820181
H -2.644992 -1.247791 -3.221446
H -1.127319 -2.109344 -3.429358
C -2.927652 -0.688871 1.517846
C -4.242030 -0.463781 1.084256
C -2.641497 -1.940916 2.072956
C -5.214299 -1.458636 1.163001
H -4.517239 0.503457 0.665153
C -3.613203 -2.936556 2.160041
H -1.640220 -2.161070 2.435477
C -4.903867 -2.705669 1.695889
H -6.223822 -1.253749 0.807191
H -3.353870 -3.903603 2.590691
H -5.661226 -3.485174 1.757389
C -2.153123 1.939619 2.675269
H -0.641725 2.429398 1.194967
H -1.811996 1.623278 3.666341
H -3.227073 2.145145 2.670185
C -0.251233 3.626342 2.894191
H 0.354235 2.874953 3.412400
H 0.425050 4.276390 2.324237
C -1.294052 2.969175 1.998773
H -0.748396 4.238474 3.657189
C -2.086434 3.990586 1.194099
H -2.638443 4.657676 1.868628
H -1.432442 4.607981 0.564278
H -2.811875 3.489407 0.542585
C 1.271735 -0.774631 -2.719036
H 0.932651 -1.783227 -3.004586
H 0.830199 -0.074755 -3.447495
H 2.352366 -0.752468 -2.909300

TS_{XV→XVI}

E = -2457.93683102

Pd -1.386887 -0.548099 -0.900308

P 2.315366 -0.231914 0.441544

P -0.394164 1.181811 0.353278

C 1.297086 1.078117 0.884011

C 4.075861 0.338481 0.485001

H 4.279767 0.458468 1.560433

C 5.095586 -0.664228 -0.053140

H 4.951250 -0.774107 -1.137270

H 4.950386 -1.658467 0.388183

C 6.514864 -0.169860 0.203645

H 6.687173 -0.122341 1.289817

H 7.241075 -0.889715 -0.195486

C 6.738786 1.207558 -0.405423

H 6.674765 1.128314 -1.501632

H 7.751536 1.565380 -0.179645

C 5.697556 2.206585 0.081244

H 5.843322 3.179666 -0.405018

H 5.831716 2.375993 1.160899

C 4.280703 1.706124 -0.169757

H 3.537578 2.420970 0.197616

H 4.111788 1.620073 -1.251123

C 1.905011 -0.944922 -1.201500

H 0.805386 -1.065167 -1.102978

C 2.469419 -2.324540 -1.550174

H 2.352667 -3.039533 -0.730077

H 3.546680 -2.248794 -1.747788

C 1.767655 -2.852476 -2.798321

H 2.163757 -3.842091 -3.060114

H 0.701378 -2.994314 -2.566713

C 1.903568 -1.896951 -3.976387

H 2.959333 -1.859444 -4.287173

H 1.340292 -2.276280 -4.838810

C 1.443338 -0.491636 -3.613970

H 0.358234 -0.490431 -3.423072

H 1.615175 0.198079 -4.450315

C 2.148388 0.012164 -2.363598
H 3.230568 0.074133 -2.555547
H 1.808273 1.015461 -2.099614
C 2.281060 -1.704101 1.579936
H 3.064069 -2.411790 1.264422
C 2.557258 -1.265267 3.019675
H 3.566129 -0.841902 3.110393
H 1.855429 -0.459841 3.277923
C 2.384733 -2.408820 4.011099
H 2.572738 -2.046756 5.030161
H 3.140845 -3.183439 3.810236
C 0.997271 -3.023019 3.905364
H 0.885800 -3.848788 4.619758
H 0.244795 -2.267092 4.178561
C 0.733667 -3.502976 2.486876
H -0.278880 -3.917478 2.397723
H 1.427934 -4.324259 2.249780
C 0.913091 -2.382062 1.472241
H 0.133533 -1.621713 1.614677
H 0.751660 -2.773740 0.463424
C -1.359107 1.507680 1.921991
H -0.829273 2.303213 2.469118
C -2.788488 1.983373 1.666107
H -3.299180 1.267278 1.010755
H -2.785197 2.943028 1.136182
C -3.578493 2.138017 2.960830
H -3.151238 2.962994 3.552951
H -4.612160 2.423756 2.724685
C -3.558443 0.867010 3.796642
H -4.070766 0.066688 3.242761
H -4.115258 1.011665 4.732052
C -2.128665 0.434532 4.083188
H -1.633889 1.198540 4.703252
H -2.112517 -0.497297 4.665492
C -1.347452 0.253901 2.790190
H -0.308912 -0.029376 3.005326
H -1.785671 -0.572817 2.206335

C -0.707838 2.777593 -0.567553
H -1.800175 2.737509 -0.713784
C -0.080629 2.783325 -1.954841
H 1.013632 2.827008 -1.841512
H -0.317749 1.843609 -2.474678
C -0.544551 3.985317 -2.768023
H -1.628308 3.901309 -2.942259
H -0.068898 3.982386 -3.758136
C -0.250584 5.291522 -2.041959
H -0.632004 6.146425 -2.615961
H 0.840507 5.424540 -1.974295
C -0.834434 5.287707 -0.635768
H -0.571593 6.215144 -0.109346
H -1.933465 5.265239 -0.697775
C -0.359027 4.074745 0.156606
H -0.783292 4.093443 1.168613
H 0.733904 4.128613 0.268929
C -3.395751 -0.593914 -0.867267
C -4.044302 -1.195032 0.219415
C -4.056594 0.450028 -1.535267
C -5.280264 -0.728732 0.660661
H -3.568240 -2.019266 0.747210
C -5.284876 0.918648 -1.083817
H -3.590544 0.913245 -2.404077
C -5.903213 0.338077 0.022206
H -5.753717 -1.201819 1.520294
H -5.764802 1.747247 -1.603315
H -6.865913 0.705190 0.371958
C -2.432871 -1.945675 -2.138529
H -1.418158 -1.945164 -2.598904
H -3.118071 -1.617174 -2.923582
C -2.802407 -4.321557 -2.826979
H -1.812465 -4.398619 -3.298966
H -3.094432 -5.328362 -2.500377
C -2.769616 -3.344526 -1.654317
H -3.779366 -3.317927 -1.219671
H -3.513785 -3.998514 -3.596747

C -1.805372 -3.826347 -0.579708
H -0.786321 -3.902202 -0.984921
H -1.763822 -3.124638 0.263045
H -2.085584 -4.816901 -0.199065
C 1.765008 1.944528 2.042058
H 2.832765 1.815801 2.261690
H 1.620992 3.016293 1.851792
H 1.243979 1.724628 2.989025

XVI

E = -2458.00221740
Pd -1.392115 0.359506 -1.010124
P 2.282970 -0.623492 0.053503
P -0.333123 0.584899 1.032130
C 1.333966 0.044692 1.320224
C 4.072159 -0.448690 0.489753
H 4.200037 -1.132380 1.342730
C 5.035816 -0.911093 -0.602654
H 4.952782 -0.235700 -1.466198
H 4.775782 -1.914584 -0.962109
C 6.472449 -0.893667 -0.091892
H 6.573662 -1.638455 0.712444
H 7.158607 -1.204007 -0.890598
C 6.860285 0.478494 0.441945
H 6.865986 1.198789 -0.390683
H 7.882859 0.457716 0.840427
C 5.880406 0.957908 1.504601
H 6.149620 1.965103 1.847838
H 5.946951 0.300913 2.385746
C 4.449473 0.950082 0.982194
H 3.743970 1.286586 1.748987
H 4.367066 1.664858 0.154580
C 1.928968 0.142442 -1.573509
H 0.817233 0.196018 -1.519046
C 2.285034 -0.633697 -2.841992
H 1.982902 -1.683288 -2.784684
H 3.373817 -0.627876 -2.997816

C 1.597329 0.027488 -4.033557
H 1.829260 -0.520231 -4.956218
H 0.508332 -0.047781 -3.884920
C 1.989512 1.492597 -4.173634
H 3.056721 1.552193 -4.438804
H 1.439695 1.956793 -5.003289
C 1.755792 2.262055 -2.880830
H 0.677802 2.317237 -2.669676
H 2.113687 3.295399 -2.978006
C 2.432446 1.577704 -1.702106
H 3.521394 1.569639 -1.865900
H 2.248092 2.128446 -0.776562
C 2.081562 -2.449289 -0.250208
H 2.780143 -2.745690 -1.048082
C 2.412223 -3.239422 1.017802
H 3.461675 -3.092278 1.303665
H 1.803496 -2.841769 1.844079
C 2.137478 -4.729358 0.856247
H 2.349377 -5.250199 1.799177
H 2.831506 -5.143707 0.108795
C 0.708809 -4.990890 0.405201
H 0.539443 -6.067334 0.272385
H 0.012619 -4.657592 1.190890
C 0.406953 -4.234457 -0.879451
H -0.628316 -4.406958 -1.197609
H 1.049233 -4.619838 -1.686979
C 0.650282 -2.741892 -0.704656
H -0.038834 -2.340631 0.047462
H 0.406347 -2.202233 -1.627629
C -1.339919 -0.203379 2.397171
H -0.844776 0.026312 3.353768
C -2.765381 0.343772 2.449741
H -3.218249 0.228776 1.450967
H -2.759711 1.420635 2.656254
C -3.610665 -0.361977 3.505293
H -3.214176 -0.115560 4.502676
H -4.638872 0.023578 3.479167

C -3.605314 -1.874493 3.334559
H -4.109030 -2.137613 2.392175
H -4.182256 -2.352633 4.137265
C -2.181870 -2.411265 3.302965
H -1.708672 -2.246050 4.283394
H -2.182076 -3.497562 3.137108
C -1.361188 -1.717359 2.225762
H -0.334187 -2.104222 2.211851
H -1.790934 -1.940415 1.236597
C -0.526147 2.393035 1.490500
H -1.596172 2.560199 1.281734
C 0.247582 3.295073 0.539992
H 1.323196 3.158709 0.730166
H 0.056936 2.983963 -0.495946
C -0.119916 4.758631 0.742149
H -1.180431 4.896530 0.477600
H 0.457401 5.396652 0.058918
C 0.104582 5.189076 2.185625
H -0.211866 6.230222 2.333915
H 1.183971 5.158660 2.401576
C -0.618453 4.267721 3.159088
H -0.402460 4.561179 4.195357
H -1.705625 4.379659 3.024411
C -0.242926 2.806183 2.931533
H -0.780523 2.168261 3.644496
H 0.829967 2.675488 3.135218
C -4.043914 0.323133 -1.854075
C -4.459981 1.489805 -1.214482
C -2.883756 0.375378 -2.670368
C -3.751941 2.688907 -1.344937
H -5.368096 1.463847 -0.613069
C -2.152765 1.578611 -2.779572
H -2.650039 -0.465638 -3.322583
C -2.595206 2.734656 -2.106257
H -4.107634 3.585005 -0.839989
H -1.341033 1.653444 -3.500419
H -2.036549 3.663121 -2.210734

C -4.844320 -0.941961 -1.729102
H -4.926705 -1.429477 -2.712702
H -5.865444 -0.671805 -1.430954
C -5.392420 -2.974224 -0.359241
H -5.706050 -3.546911 -1.243152
H -5.034396 -3.692429 0.389217
C -4.307338 -1.968848 -0.718360
H -4.038826 -1.408306 0.188912
H -6.282120 -2.478325 0.048846
C -3.054119 -2.677057 -1.205893
H -3.240493 -3.202924 -2.153499
H -2.222131 -1.970869 -1.354080
H -2.720369 -3.419706 -0.470549
C 1.807347 -0.165918 2.747429
H 1.748719 0.750340 3.351387
H 1.227423 -0.931634 3.290344
H 2.851440 -0.499074 2.803194

5.2.5 JoYPhos-medierte Ethyl–Phenyl-Kopplung

5.2.5.1 Energien der Strukturen

Tabelle 5.8. Energien der Strukturen der joYPhos medierten Ethyl–Phenyl-Kopplung.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	E(PCM)	$\Delta G(\text{PCM})$ [hartree]	$\Delta G(\text{PCM})$ [kJ/mol]
X	-2571.26817584	1.120226	0.989366	-2571.27203360	–	–
TS_{X→XI}	-2571.25295492	1.118500	0.987174	-2571.25616189	0.013680	35.916079
XI	-2571.31901015	1.121435	0.988320	-2571.32178331	-0.050796	-133.364137
XII	-2571.26625186	1.119611	0.989398	-2571.27039541	0.001670	4.385084
TS_{XII→XIII}	-2571.25110649	1.115847	0.986373	-2571.25518982	0.013851	36.365223
XIII	-2571.25569224	1.117703	0.988933	-2571.25939338	0.012207	32.050056
TS_{XIII→XIV}	-2571.24652378	1.116747	0.988555	-2571.25019135	0.021031	55.217547

5.2.5.2 Koordinaten der Strukturen

X

E = -2571.26817584

Pd -1.700877 -0.964967 1.131844

P 1.818230 -0.624881 0.010973

P -0.742178 0.946685 -0.003829

C 1.017712 0.875713 -0.296358

C 3.576477 -0.482532 -0.534354

H 3.940629 0.324265 0.117429
C 4.446247 -1.710853 -0.262528
H 4.159836 -2.519527 -0.951300
H 4.300256 -2.095445 0.753927
C 5.917924 -1.363226 -0.468097
H 6.213487 -0.628759 0.296852
H 6.538641 -2.252768 -0.299834
C 6.181843 -0.781858 -1.850483
H 6.012762 -1.564370 -2.606232
H 7.234984 -0.486409 -1.941956
C 5.263277 0.395558 -2.147008
H 5.430144 0.764301 -3.166969
H 5.492844 1.233998 -1.471647
C 3.801792 0.004902 -1.969574
H 3.146560 0.845823 -2.208069
H 3.564184 -0.797177 -2.677189
C 0.966616 -2.033795 -0.832475
H -0.097558 -1.787092 -0.651651
C 1.209094 -3.443352 -0.290700
H 1.029580 -3.501648 0.787449
H 2.258802 -3.730763 -0.450978
C 0.288933 -4.434730 -0.997153
H 0.467860 -5.446985 -0.612446
H -0.749843 -4.184473 -0.736721
C 0.454645 -4.399353 -2.509216
H 1.462852 -4.755365 -2.772419
H -0.252506 -5.090674 -2.985052
C 0.269751 -2.988632 -3.048575
H -0.771553 -2.668912 -2.897041
H 0.449039 -2.961281 -4.131108
C 1.203602 -2.016204 -2.342475
H 2.238579 -2.330300 -2.539824
H 1.094297 -0.998378 -2.732701
C 1.962170 -1.186049 1.783151
H 2.464779 -2.164164 1.748315
C 2.803022 -0.233757 2.629565
H 3.804438 -0.103670 2.199681

H 2.316138 0.751252 2.618740
C 2.919972 -0.713059 4.071285
H 3.515118 0.003123 4.652132
H 3.470243 -1.666136 4.092563
C 1.550072 -0.908627 4.701941
H 1.647736 -1.275154 5.731556
H 1.037998 0.064119 4.762414
C 0.706124 -1.864999 3.874095
H -0.296849 -1.974211 4.302890
H 1.164015 -2.865718 3.888834
C 0.594694 -1.391431 2.431092
H 0.059238 -0.420698 2.422118
H 0.009203 -2.128160 1.854345
C -1.025379 2.440453 1.063898
H -0.736045 3.318539 0.463544
C -2.498881 2.549785 1.456388
H -2.748481 1.663780 2.061642
H -3.156289 2.506017 0.579468
C -2.762243 3.812503 2.265729
H -2.557822 4.693196 1.637402
H -3.822430 3.869161 2.545780
C -1.882001 3.861776 3.507608
H -2.178761 3.047005 4.186240
H -2.042054 4.798211 4.058026
C -0.410480 3.697015 3.151329
H -0.074055 4.568425 2.569403
H 0.203786 3.675682 4.061682
C -0.173351 2.437327 2.327887
H 0.886109 2.341157 2.069458
H -0.442027 1.556201 2.933157
C -1.745596 1.369283 -1.527240
H -2.743247 1.016353 -1.225048
C -1.312234 0.484494 -2.689170
H -0.295087 0.763570 -3.003488
H -1.252997 -0.556087 -2.345054
C -2.264572 0.599795 -3.870178
H -3.243182 0.194669 -3.574507

H -1.906848 -0.015931 -4.706758
C -2.428960 2.049733 -4.302451
H -3.141021 2.124751 -5.134874
H -1.466284 2.428807 -4.681128
C -2.881918 2.916137 -3.135606
H -2.992241 3.962100 -3.451724
H -3.877436 2.579833 -2.806744
C -1.916074 2.825813 -1.957605
H -2.297617 3.433486 -1.129451
H -0.955549 3.271762 -2.240861
C -3.351897 -1.047823 0.048439
C -4.478953 -0.261419 0.309070
C -3.369620 -1.864456 -1.087382
C -5.563440 -0.253558 -0.566112
H -4.515764 0.360048 1.201663
C -4.455590 -1.861336 -1.960143
H -2.519210 -2.511977 -1.303015
C -5.554789 -1.046042 -1.709900
H -6.425594 0.375520 -0.346556
H -4.438485 -2.499684 -2.843108
H -6.402379 -1.038230 -2.392683
C -2.350943 -3.859290 1.762815
H -2.737381 -4.021467 0.747496
H -1.273913 -4.082950 1.737497
C -2.636137 -2.447782 2.236709
H -3.716857 -2.276994 2.296899
H -2.816044 -4.623517 2.406707
H -2.229922 -2.279660 3.248934
C 1.796031 2.105173 -0.588490
C 1.570450 2.826096 -1.773616
C 2.790000 2.613232 0.264968
C 2.272742 3.983812 -2.080593
H 0.851018 2.432488 -2.484522
C 3.517277 3.757549 -0.047875
H 2.995049 2.098109 1.200461
C 3.257718 4.458344 -1.219527
H 2.063062 4.507261 -3.012187

H 4.281861 4.111139 0.642248

H 3.817026 5.360017 -1.460613

TS_{X→XI}

E = -2571.25295492

Pd 1.732839 -1.150321 -0.372430

P -1.986409 -0.316712 -0.467329

P 0.649060 0.614171 0.740998

C -1.108670 0.856224 0.460557

C -3.800053 -0.096231 -0.177986

H -4.004553 0.862374 -0.672922

C -4.682232 -1.143665 -0.859716

H -4.546579 -2.117604 -0.367444

H -4.400311 -1.281053 -1.910956

C -6.148632 -0.731517 -0.773826

H -6.291032 0.185492 -1.366034

H -6.780663 -1.500769 -1.236179

C -6.583944 -0.472821 0.661975

H -6.555013 -1.420246 1.222211

H -7.626812 -0.131263 0.685893

C -5.671739 0.535386 1.347317

H -5.973577 0.677110 2.392783

H -5.768259 1.517799 0.860140

C -4.215679 0.092172 1.283760

H -3.567036 0.822274 1.777410

H -4.110127 -0.852276 1.829794

C -1.461427 -2.020139 0.031524

H -0.375248 -1.871082 0.204107

C -1.606752 -3.153956 -0.983563

H -1.150870 -2.894081 -1.943805

H -2.672737 -3.345202 -1.179113

C -0.940138 -4.420878 -0.452687

H -1.066396 -5.236407 -1.176316

H 0.141904 -4.236316 -0.375081

C -1.468783 -4.829397 0.913545

H -2.526221 -5.122869 0.824134

H -0.930791 -5.712951 1.280113

C -1.354351 -3.680571 1.904264
H -0.291542 -3.444438 2.071582
H -1.772162 -3.963517 2.878951
C -2.060172 -2.441820 1.372626
H -3.125667 -2.676048 1.234473
H -2.003804 -1.615171 2.086408
C -1.854867 -0.351244 -2.330852
H -2.397578 -1.262260 -2.626672
C -2.504442 0.830945 -3.047871
H -3.550431 0.962984 -2.742164
H -1.966680 1.748858 -2.772104
C -2.426093 0.662042 -4.561349
H -2.902967 1.518297 -5.055542
H -3.001968 -0.228949 -4.855471
C -0.985164 0.510178 -5.025550
H -0.944152 0.361449 -6.112251
H -0.441015 1.443682 -4.816128
C -0.300408 -0.637464 -4.299273
H 0.756558 -0.704263 -4.588797
H -0.766860 -1.588828 -4.599939
C -0.405022 -0.483086 -2.788484
H 0.143692 0.408132 -2.462405
H 0.096585 -1.320900 -2.289606
C 1.374394 2.271782 0.283983
H 0.788949 3.022899 0.836978
C 2.844155 2.433298 0.666224
H 3.431317 1.617957 0.218101
H 2.964725 2.355048 1.753262
C 3.400384 3.776167 0.202849
H 2.899874 4.585493 0.757167
H 4.467507 3.836898 0.454290
C 3.192161 3.994276 -1.288004
H 3.768389 3.239080 -1.843108
H 3.580786 4.975623 -1.591147
C 1.720963 3.861916 -1.650021
H 1.146910 4.662506 -1.158834
H 1.574781 3.990908 -2.731217

C 1.175772 2.511803 -1.209111
H 0.109034 2.428331 -1.456244
H 1.702404 1.712118 -1.754047
C 1.018427 0.514514 2.577785
H 1.081636 1.548352 2.956446
C 2.364989 -0.172667 2.818500
H 2.291827 -1.200863 2.427521
H 3.163312 0.299472 2.237740
C 2.714057 -0.204153 4.300804
H 2.842178 0.827227 4.664597
H 3.678902 -0.706907 4.450415
C 1.624953 -0.893541 5.110923
H 1.861192 -0.865050 6.182872
H 1.590136 -1.957122 4.827819
C 0.261038 -0.269784 4.846796
H -0.522328 -0.817851 5.387480
H 0.247230 0.759046 5.238832
C -0.053424 -0.236805 3.356807
H -1.048172 0.188134 3.171168
H -0.081968 -1.268616 2.975633
C 3.670187 -0.949616 -0.886333
C 3.948121 -0.176821 -2.024897
C 4.632427 -1.003245 0.128654
C 5.114753 0.574730 -2.105625
H 3.232411 -0.150563 -2.846681
C 5.799876 -0.248580 0.042864
H 4.449795 -1.609390 1.014522
C 6.044536 0.552301 -1.067872
H 5.298978 1.184982 -2.989147
H 6.520909 -0.284259 0.858720
H 6.956125 1.142845 -1.132307
C 3.231806 -3.831165 -0.353291
H 4.273165 -3.657017 -0.057771
H 2.627357 -3.858382 0.562786
C 2.744875 -2.773496 -1.315209
H 3.336762 -2.745830 -2.231756
H 3.186767 -4.832030 -0.808198

H 1.699171 -2.972207 -1.636785
C -1.723736 2.155798 0.790956
C -1.508470 2.763090 2.045830
C -2.534029 2.879756 -0.102893
C -2.079058 3.981795 2.384884
H -0.884544 2.257943 2.776002
C -3.129880 4.087418 0.242137
H -2.684564 2.496135 -1.106556
C -2.909146 4.652997 1.491809
H -1.880624 4.405799 3.368176
H -3.753900 4.600819 -0.488130
H -3.363854 5.603838 1.761317

XI

E = -2571.31901015
Pd 1.947903 -0.689351 0.692999
P -1.794160 -0.859028 -0.066352
P 0.599860 1.052853 0.010133
C -1.138431 0.730079 -0.263683
C -3.626507 -0.724206 0.145738
H -3.883616 0.125086 -0.505084
C -4.478261 -1.914815 -0.300234
H -4.257995 -2.787657 0.332832
H -4.251563 -2.206943 -1.330153
C -5.961004 -1.562735 -0.205435
H -6.175132 -0.767497 -0.935506
H -6.567658 -2.427852 -0.503063
C -6.362534 -1.084636 1.182685
H -6.273670 -1.921578 1.892366
H -7.417842 -0.782962 1.189960
C -5.472176 0.056315 1.654818
H -5.732856 0.347850 2.680445
H -5.631424 0.943626 1.022931
C -4.008496 -0.350058 1.579352
H -3.350038 0.433362 1.969570
H -3.855415 -1.230877 2.219403
C -1.031014 -1.796923 1.313913

H 0.026780 -1.809008 0.967695
C -1.477904 -3.246834 1.482081
H -1.560173 -3.769123 0.522079
H -2.478073 -3.274392 1.943043
C -0.478447 -3.969223 2.381849
H -0.779612 -5.015387 2.523432
H 0.495835 -3.987756 1.866714
C -0.321588 -3.273872 3.728716
H -1.265705 -3.367652 4.288018
H 0.443729 -3.782586 4.329791
C 0.015359 -1.796789 3.569464
H 1.012866 -1.680242 3.115565
H 0.054866 -1.305001 4.550222
C -0.994017 -1.098488 2.669110
H -1.980660 -1.134145 3.146321
H -0.734868 -0.046975 2.531698
C -1.606718 -2.022826 -1.506980
H -2.266698 -2.880499 -1.308536
C -2.079468 -1.327358 -2.782933
H -3.123829 -1.000710 -2.685513
H -1.495737 -0.408112 -2.909059
C -1.906130 -2.208712 -4.011891
H -2.231046 -1.665507 -4.908776
H -2.560519 -3.090244 -3.926643
C -0.462338 -2.667763 -4.154987
H -0.349058 -3.313411 -5.035498
H 0.181333 -1.791426 -4.325084
C -0.001683 -3.393881 -2.900279
H 1.050053 -3.695459 -2.992032
H -0.583369 -4.322991 -2.791895
C -0.177819 -2.544024 -1.648599
H 0.520385 -1.697433 -1.662609
H 0.102309 -3.134479 -0.768580
C 1.358842 1.713607 -1.572163
H 0.719424 2.526537 -1.947426
C 2.764662 2.266148 -1.330429
H 3.365533 1.469388 -0.863159

H 2.743814 3.101848 -0.621426
C 3.425820 2.726969 -2.625174
H 2.869920 3.588777 -3.026273
H 4.442942 3.085883 -2.416865
C 3.455559 1.623895 -3.672405
H 4.092215 0.802572 -3.309377
H 3.908127 1.987046 -4.604687
C 2.056051 1.083081 -3.922892
H 1.433084 1.873491 -4.370472
H 2.083834 0.258760 -4.649160
C 1.424527 0.612274 -2.621811
H 0.421021 0.210421 -2.800123
H 2.021430 -0.216527 -2.205021
C 0.761119 2.577111 1.089400
H 1.852848 2.646475 1.220577
C 0.175098 2.345001 2.475949
H -0.907538 2.164815 2.382357
H 0.613218 1.430874 2.899790
C 0.424270 3.523343 3.408689
H 1.505613 3.600913 3.602353
H -0.052604 3.341747 4.381407
C -0.066096 4.831747 2.806004
H 0.147902 5.670913 3.481281
H -1.160786 4.790950 2.693692
C 0.562869 5.065216 1.440408
H 0.196136 6.002892 1.001953
H 1.651796 5.180848 1.560061
C 0.278889 3.901947 0.497272
H 0.755233 4.088116 -0.472671
H -0.799269 3.853986 0.306110
C 4.209493 -1.174078 1.155747
C 3.357640 -2.307910 1.149512
C 4.848719 -0.821671 -0.053064
C 3.116689 -2.999707 -0.060562
H 3.002595 -2.724754 2.092551
C 4.652261 -1.547466 -1.216787
H 5.535259 0.024550 -0.053390

C 3.767807 -2.631130 -1.229547
H 2.460921 -3.868945 -0.052498
H 5.183026 -1.267721 -2.124740
H 3.599938 -3.191428 -2.147062
C 4.171109 0.975066 2.523309
H 4.533393 1.546075 1.658725
H 3.076002 1.050015 2.519742
C 4.595004 -0.485236 2.442968
H 5.686269 -0.557262 2.560433
H 4.558883 1.450637 3.432702
H 4.157509 -1.038588 3.283860
C -2.016556 1.808636 -0.808160
C -2.940758 2.487889 0.004547
C -1.925727 2.237375 -2.141756
C -3.733785 3.519698 -0.483008
H -3.010568 2.213567 1.053967
C -2.701453 3.282404 -2.633463
H -1.224894 1.736476 -2.805291
C -3.615445 3.927113 -1.808233
H -4.435789 4.020363 0.182205
H -2.594554 3.588243 -3.673051
H -4.227106 4.741357 -2.192167

XII

E = -2571.26625186
Pd 1.917190 -1.556629 -0.444388
P -2.008371 -0.455240 0.105217
P 0.874123 0.604008 -0.315779
C -0.878784 0.840954 -0.040035
C -3.432750 0.105064 1.145407
H -3.513762 1.164130 0.858507
C -4.807013 -0.520854 0.896925
H -4.795740 -1.584784 1.173643
H -5.080457 -0.472050 -0.161862
C -5.868246 0.214439 1.712470
H -5.948721 1.243661 1.331042
H -6.848446 -0.252925 1.552458

C -5.536316 0.258977 3.197242
H -5.576974 -0.761741 3.607722
H -6.293602 0.840607 3.738232
C -4.146198 0.831225 3.436992
H -3.898759 0.807730 4.505955
H -4.119710 1.887886 3.128685
C -3.108212 0.055646 2.639932
H -2.092404 0.422954 2.830909
H -3.125305 -0.993003 2.970065
C -1.303183 -2.032510 0.744554
H -0.583303 -2.300685 -0.045643
C -2.344472 -3.151400 0.836648
H -2.946727 -3.221859 -0.076364
H -3.042145 -2.925390 1.656711
C -1.667577 -4.487763 1.115401
H -2.422582 -5.281346 1.187250
H -1.024359 -4.744737 0.259474
C -0.825537 -4.428592 2.380372
H -1.490902 -4.282317 3.245533
H -0.311444 -5.384539 2.542800
C 0.178663 -3.287765 2.320212
H 0.919206 -3.479525 1.528189
H 0.740263 -3.228213 3.260813
C -0.494278 -1.949835 2.037697
H -1.144681 -1.690484 2.880320
H 0.254878 -1.158070 1.950231
C -2.826516 -0.983058 -1.484507
H -3.689025 -1.611150 -1.219818
C -3.329497 0.262206 -2.214191
H -4.039948 0.818683 -1.587291
H -2.479059 0.937464 -2.365437
C -3.948684 -0.073138 -3.563057
H -4.277500 0.848127 -4.060753
H -4.850310 -0.687247 -3.414115
C -2.960343 -0.832319 -4.435540
H -3.410770 -1.080677 -5.405050
H -2.095484 -0.185514 -4.649268

C -2.484218 -2.095476 -3.734344
H -1.748053 -2.627274 -4.351210
H -3.338311 -2.779551 -3.612539
C -1.885624 -1.802520 -2.363535
H -0.943170 -1.250405 -2.474789
H -1.633035 -2.750827 -1.872960
C 1.354188 1.406893 -1.932725
H 1.058496 2.464220 -1.881101
C 2.865715 1.335600 -2.147859
H 3.153448 0.272950 -2.183989
H 3.410139 1.768057 -1.299738
C 3.271589 2.019354 -3.447519
H 3.035221 3.092646 -3.380441
H 4.358312 1.948939 -3.587644
C 2.543162 1.416458 -4.640870
H 2.871247 0.373360 -4.769604
H 2.811719 1.943620 -5.565752
C 1.035094 1.437175 -4.432285
H 0.684488 2.481039 -4.416539
H 0.522041 0.949663 -5.272929
C 0.650241 0.766906 -3.120517
H -0.436078 0.794286 -2.977438
H 0.930399 -0.299523 -3.157976
C 1.772654 1.704493 0.903450
H 2.811378 1.348662 0.826273
C 1.313275 1.397357 2.325425
H 0.245405 1.635591 2.420993
H 1.415990 0.323843 2.512670
C 2.115918 2.170640 3.362137
H 3.155927 1.811310 3.343063
H 1.730266 1.958308 4.368688
C 2.092233 3.665295 3.081447
H 2.689163 4.208350 3.826286
H 1.059311 4.037628 3.172096
C 2.600342 3.951625 1.676650
H 2.581566 5.030134 1.470042
H 3.652627 3.635341 1.605092

C 1.780988 3.210019 0.625667
H 2.201200 3.415080 -0.366150
H 0.759813 3.611040 0.620869
C 3.442068 -1.164055 0.799759
C 4.631137 -0.590701 0.328528
C 3.346839 -1.398475 2.176156
C 5.655719 -0.224325 1.199123
H 4.768229 -0.417195 -0.737392
C 4.369323 -1.035405 3.050702
H 2.453321 -1.866115 2.584593
C 5.527821 -0.436128 2.568017
H 6.563546 0.227910 0.800342
H 4.256006 -1.222792 4.118314
H 6.326503 -0.147951 3.249268
C 2.672467 -3.394424 -0.895861
H 0.862861 -2.516153 -1.800617
H 2.686727 -4.086519 -0.050257
H 3.644711 -3.354668 -1.392550
C 1.483776 -3.490920 -1.800021
H 1.722352 -3.603512 -2.864334
H 0.745966 -4.248093 -1.507238
C -1.378401 2.251945 -0.011680
C -1.389010 3.049984 -1.167923
C -1.769522 2.886468 1.180541
C -1.723608 4.398886 -1.132966
H -1.117142 2.600279 -2.118598
C -2.124303 4.229771 1.222068
H -1.763200 2.317962 2.105535
C -2.090314 5.000710 0.065159
H -1.701772 4.981324 -2.052628
H -2.409756 4.680058 2.171527
H -2.350740 6.056845 0.096619

TS_{xII→xIII}

E = -2571.25110649
Pd 1.844445 -1.364593 -0.917823
P -1.999340 -0.461373 0.027677

P 0.905594 0.660984 -0.214186
C -0.830720 0.800852 0.188172
C -3.366978 -0.153098 1.240437
H -3.417787 0.945379 1.249116
C -4.773014 -0.649237 0.892372
H -4.795861 -1.748285 0.875664
H -5.079357 -0.311321 -0.102502
C -5.777680 -0.126081 1.916141
H -5.828003 0.969628 1.825563
H -6.780430 -0.503158 1.677026
C -5.398967 -0.490167 3.344145
H -5.467453 -1.581777 3.469487
H -6.115035 -0.051762 4.050920
C -3.980263 -0.044717 3.670461
H -3.700286 -0.360663 4.683513
H -3.921824 1.054647 3.653787
C -2.998468 -0.608869 2.654148
H -1.964240 -0.335167 2.895363
H -3.044547 -1.706481 2.695049
C -1.341986 -2.170437 0.213090
H -0.668968 -2.246547 -0.653830
C -2.423394 -3.244711 0.069810
H -3.064343 -3.060609 -0.800115
H -3.078075 -3.223094 0.953525
C -1.785875 -4.624359 -0.040047
H -2.565337 -5.391095 -0.137580
H -1.188547 -4.666862 -0.964440
C -0.890241 -4.915294 1.153905
H -1.512554 -4.977094 2.060171
H -0.408053 -5.894849 1.041765
C 0.154928 -3.825387 1.337907
H 0.852492 -3.828947 0.486207
H 0.758751 -4.026906 2.231230
C -0.474475 -2.441402 1.441589
H -1.075313 -2.390646 2.356320
H 0.302521 -1.674747 1.521704
C -2.908259 -0.526909 -1.596334

H -3.780004 -1.179304 -1.444740
C -3.402988 0.877540 -1.940985
H -4.016828 1.287627 -1.127205
H -2.530811 1.537900 -2.012091
C -4.163873 0.904277 -3.258571
H -4.484188 1.929596 -3.483897
H -5.081805 0.303269 -3.165681
C -3.309399 0.347981 -4.388033
H -3.867448 0.352081 -5.333132
H -2.437598 1.003840 -4.537055
C -2.828095 -1.057973 -4.061216
H -2.186496 -1.442644 -4.864674
H -3.697384 -1.731860 -4.008399
C -2.076499 -1.107795 -2.736143
H -1.140969 -0.541270 -2.815777
H -1.789935 -2.144464 -2.516519
C 1.326416 1.846517 -1.593049
H 1.056563 2.850497 -1.236534
C 2.825295 1.828648 -1.889417
H 3.096508 0.813477 -2.221194
H 3.410278 2.020007 -0.981860
C 3.185705 2.837405 -2.973174
H 2.980569 3.853249 -2.601292
H 4.262517 2.795816 -3.183584
C 2.385997 2.597506 -4.246351
H 2.678432 1.626345 -4.674786
H 2.626441 3.356420 -5.002445
C 0.890624 2.580127 -3.960964
H 0.570678 3.582591 -3.635754
H 0.326071 2.355342 -4.876310
C 0.551939 1.570010 -2.873175
H -0.525004 1.566383 -2.669478
H 0.803091 0.556166 -3.220801
C 1.857870 1.411491 1.204983
H 2.886645 1.091309 0.985834
C 1.470791 0.735365 2.515909
H 0.423221 0.966497 2.749151

H 1.538568 -0.350602 2.396144
C 2.373177 1.180487 3.657657
H 3.394860 0.823819 3.456740
H 2.055381 0.705630 4.595878
C 2.379689 2.695532 3.797882
H 3.048906 3.005940 4.611404
H 1.369727 3.039987 4.071745
C 2.789503 3.355639 2.489788
H 2.783334 4.449355 2.589913
H 3.825119 3.066772 2.252382
C 1.877622 2.936316 1.340875
H 2.232886 3.402246 0.413696
H 0.869255 3.328839 1.521611
C 3.420084 -1.339740 0.433854
C 4.605923 -0.643019 0.154097
C 3.377375 -2.022064 1.657153
C 5.668552 -0.597213 1.055047
H 4.711661 -0.110789 -0.791668
C 4.433645 -1.986325 2.566036
H 2.489724 -2.595661 1.922470
C 5.586124 -1.265189 2.272609
H 6.568627 -0.037141 0.801276
H 4.353293 -2.524594 3.510531
H 6.413044 -1.230862 2.980083
C 1.554964 -2.880806 -2.492953
H 0.664101 -3.490317 -2.330570
H 0.695290 -1.442164 -2.054505
C 2.713597 -3.129219 -1.732548
H 3.693896 -2.872734 -2.130420
H 2.709583 -3.893712 -0.957400
H 1.646103 -2.494801 -3.507858
C -1.294263 2.159786 0.619638
C -1.343965 3.238142 -0.279206
C -1.616661 2.454643 1.956046
C -1.650227 4.530719 0.131640
H -1.127462 3.057915 -1.328122
C -1.943579 3.739383 2.372908

H -1.579690 1.659353 2.693784
C -1.948573 4.791839 1.463737
H -1.660407 5.337881 -0.598995
H -2.175882 3.920484 3.421182
H -2.186744 5.802571 1.789243

XIII

E = -2571.25569224
Pd 1.799398 -1.283432 -1.044734
P -1.995459 -0.466487 -0.013065
P 0.915493 0.674637 -0.185374
C -0.813315 0.768705 0.249696
C -3.341359 -0.249292 1.245613
H -3.381573 0.844623 1.349048
C -4.758259 -0.701416 0.881859
H -4.793094 -1.794460 0.771151
H -5.078445 -0.276127 -0.074177
C -5.740913 -0.260352 1.964060
H -5.782616 0.839457 1.969226
H -6.750834 -0.607537 1.710298
C -5.342247 -0.749254 3.348629
H -5.417657 -1.847119 3.380540
H -6.042687 -0.368512 4.102891
C -3.914800 -0.342997 3.686683
H -3.620301 -0.745328 4.664402
H -3.848206 0.753461 3.761880
C -2.954598 -0.825920 2.609471
H -1.914479 -0.580553 2.855741
H -3.009352 -1.922699 2.558792
C -1.360168 -2.194130 0.022524
H -0.708720 -2.212390 -0.864079
C -2.460556 -3.239204 -0.177925
H -3.113557 -2.980625 -1.019712
H -3.098910 -3.277596 0.717083
C -1.843429 -4.613700 -0.406283
H -2.634514 -5.362200 -0.543786
H -1.267330 -4.592149 -1.344618

C -0.925695 -5.005883 0.741256
H -1.528173 -5.128683 1.654676
H -0.460349 -5.980105 0.543731
C 0.139448 -3.946447 0.983804
H 0.815634 -3.894513 0.117058
H 0.760892 -4.223429 1.844396
C -0.469845 -2.567682 1.207481
H -1.049629 -2.582735 2.136904
H 0.317507 -1.816583 1.329899
C -2.935586 -0.377236 -1.617235
H -3.811340 -1.031035 -1.497041
C -3.423832 1.056178 -1.825489
H -4.005078 1.403601 -0.960258
H -2.546247 1.711385 -1.871858
C -4.228165 1.199521 -3.109425
H -4.540425 2.243731 -3.239392
H -5.151545 0.604497 -3.032863
C -3.421741 0.725990 -4.309896
H -4.011301 0.816291 -5.231299
H -2.543953 1.379436 -4.434143
C -2.952239 -0.708161 -4.115028
H -2.348161 -1.036056 -4.970907
H -3.829726 -1.372726 -4.080629
C -2.149326 -0.867764 -2.829604
H -1.214317 -0.300537 -2.903476
H -1.857546 -1.918021 -2.702543
C 1.320209 1.960441 -1.473492
H 1.063060 2.929180 -1.022210
C 2.813621 1.965178 -1.794497
H 3.073154 0.986247 -2.228347
H 3.413706 2.065397 -0.882032
C 3.159489 3.076492 -2.778358
H 2.969824 4.049930 -2.300027
H 4.231422 3.050914 -3.014652
C 2.331986 2.973755 -4.052504
H 2.609974 2.051959 -4.586352
H 2.561815 3.807091 -4.729406

C 0.842030 2.930939 -3.740815
H 0.532711 3.894298 -3.305371
H 0.259238 2.805151 -4.663643
C 0.522497 1.810410 -2.760818
H -0.550943 1.778458 -2.540241
H 0.770198 0.840532 -3.216315
C 1.881702 1.310197 1.279978
H 2.907206 1.004197 1.028880
C 1.495377 0.535129 2.535583
H 0.450761 0.754424 2.789562
H 1.553325 -0.538599 2.329677
C 2.401232 0.884938 3.707188
H 3.421775 0.542285 3.479011
H 2.081795 0.339279 4.605480
C 2.413039 2.384359 3.964958
H 3.083373 2.628402 4.799859
H 1.404314 2.710524 4.264593
C 2.826207 3.141525 2.711675
H 2.827276 4.224169 2.896281
H 3.859779 2.865097 2.451605
C 1.911684 2.819842 1.533548
H 2.273097 3.353087 0.645952
H 0.906389 3.205311 1.743360
C 3.413243 -1.370871 0.300646
C 4.596122 -0.657807 0.053945
C 3.383724 -2.132518 1.476310
C 5.668595 -0.669577 0.944224
H 4.692892 -0.067563 -0.858082
C 4.449704 -2.155730 2.374385
H 2.499369 -2.725763 1.711303
C 5.598669 -1.415417 2.116562
H 6.566151 -0.093973 0.717792
H 4.379986 -2.754995 3.282262
H 6.433054 -1.426979 2.815917
C 2.877675 -3.041072 -1.799380
H 3.850885 -2.683065 -2.129405
H 0.547146 -1.005132 -1.992002

C 1.751704 -2.870873 -2.581537
H 0.854486 -3.464368 -2.404546
H 2.897291 -3.761180 -0.983701
H 1.811851 -2.392950 -3.557405
C -1.265450 2.088644 0.801219
C -1.322195 3.237655 -0.004900
C -1.571869 2.273777 2.160818
C -1.618535 4.493127 0.514058
H -1.120077 3.143762 -1.067607
C -1.887903 3.521006 2.685952
H -1.533002 1.420255 2.830020
C -1.899017 4.644896 1.866673
H -1.634795 5.357337 -0.147965
H -2.107736 3.615663 3.748186
H -2.129040 5.626108 2.277266

TS_{XIII→XIV}

E = -2571.24652378
Pd 1.868692 1.045735 1.200266
P -2.020864 0.505081 0.098134
P 0.862541 -0.715437 0.077622
C -0.867262 -0.701004 -0.354711
C -3.389503 0.484929 -1.156379
H -3.451663 -0.584944 -1.402598
C -4.792813 0.907944 -0.712696
H -4.806564 1.978880 -0.464875
H -5.106144 0.370895 0.187739
C -5.799355 0.621050 -1.824602
H -5.858384 -0.468682 -1.967314
H -6.799519 0.947091 -1.511093
C -5.415714 1.275054 -3.143925
H -5.477014 2.369004 -3.036644
H -6.133112 0.999827 -3.927588
C -3.999304 0.898904 -3.554351
H -3.714246 1.419504 -4.477571
H -3.947025 -0.179704 -3.769227
C -3.017563 1.230298 -2.440262

H -1.984777 1.010614 -2.734622
H -3.060678 2.311629 -2.246421
C -1.336752 2.202411 0.287766
H -0.653854 2.077048 1.143761
C -2.403206 3.233258 0.666107
H -3.024696 2.882127 1.498090
H -3.078615 3.391571 -0.187765
C -1.752465 4.561468 1.033007
H -2.524277 5.296003 1.297263
H -1.134385 4.417518 1.932683
C -0.881382 5.079933 -0.100719
H -1.521019 5.315191 -0.965625
H -0.393646 6.019706 0.188787
C 0.155802 4.045556 -0.510668
H 0.859328 3.881951 0.317204
H 0.750070 4.413919 -1.356291
C -0.481622 2.710725 -0.873126
H -1.092448 2.845785 -1.771804
H 0.289213 1.972982 -1.118086
C -2.941919 0.212928 1.687793
H -3.802920 0.896665 1.672786
C -3.461468 -1.224706 1.702058
H -4.059389 -1.436940 0.805117
H -2.598874 -1.898976 1.646486
C -4.255628 -1.526656 2.964662
H -4.592382 -2.571312 2.953021
H -5.164586 -0.905373 2.983901
C -3.425055 -1.242937 4.207787
H -4.007228 -1.445953 5.115905
H -2.563108 -1.928045 4.228611
C -2.921205 0.192857 4.206284
H -2.299188 0.383943 5.090365
H -3.782267 0.875811 4.278124
C -2.129308 0.511992 2.943988
H -1.205354 -0.076174 2.922495
H -1.813233 1.562331 2.959052
C 1.237742 -2.183566 1.167838

H 0.935937 -3.067816 0.588512
C 2.734089 -2.295254 1.455996
H 3.051398 -1.387092 1.994176
H 3.311862 -2.319604 0.524601
C 3.046150 -3.531471 2.291642
H 2.812489 -4.430372 1.700266
H 4.121311 -3.575551 2.510116
C 2.238518 -3.558607 3.581598
H 2.553309 -2.719103 4.220552
H 2.447211 -4.476203 4.147217
C 0.748602 -3.429103 3.297039
H 0.405024 -4.318511 2.745309
H 0.177514 -3.405087 4.235276
C 0.458214 -2.181567 2.474539
H -0.615125 -2.090656 2.271347
H 0.738056 -1.285581 3.047250
C 1.817111 -1.161087 -1.458056
H 2.847924 -0.957568 -1.137669
C 1.521787 -0.168499 -2.576721
H 0.487365 -0.303034 -2.921420
H 1.601027 0.851553 -2.186273
C 2.495183 -0.348162 -3.732479
H 3.504048 -0.085432 -3.378558
H 2.255752 0.353995 -4.542451
C 2.484685 -1.781335 -4.244931
H 3.211626 -1.906109 -5.058600
H 1.494481 -2.005941 -4.672133
C 2.772515 -2.766338 -3.120627
H 2.742344 -3.798255 -3.495499
H 3.794957 -2.596129 -2.749078
C 1.789092 -2.604750 -1.964973
H 2.057655 -3.304275 -1.163759
H 0.784829 -2.887040 -2.303401
C 3.461561 1.304033 -0.149533
C 4.610880 0.497215 -0.166309
C 3.450494 2.372461 -1.057723
C 5.668423 0.721840 -1.046131

H 4.691256 -0.342608 0.526226
 C 4.500758 2.610761 -1.944691
 H 2.591120 3.043165 -1.090557
 C 5.617056 1.781579 -1.946442
 H 6.538536 0.065385 -1.026977
 H 4.443852 3.448947 -2.639405
 H 6.438881 1.961129 -2.637746
 C 2.272234 2.816213 2.570517
 H 2.359776 3.666109 1.894225
 H 0.626671 0.810649 2.196077
 C 3.306345 1.933787 2.691268
 H 3.309286 1.181119 3.479705
 H 1.443974 2.827583 3.273960
 H 4.231992 2.072853 2.138841
 C -1.348241 -1.914966 -1.092438
 C -1.442667 -3.166776 -0.462763
 C -1.651062 -1.888195 -2.464783
 C -1.777820 -4.322281 -1.160016
 H -1.241350 -3.234662 0.602387
 C -2.008265 -3.033568 -3.165979
 H -1.574392 -0.947751 -3.001057
 C -2.061023 -4.263990 -2.519259
 H -1.823883 -5.273541 -0.632391
 H -2.225980 -2.965128 -4.230662
 H -2.323566 -5.166093 -3.068438

5.2.6 JoYPhos-medierte *iso*-Propyl–Phenyl-Kopplung

5.2.6.1 Energien der Strukturen

Tabelle 5.9. Energien der Strukturen der joYPhos medierten *iso*-Propyl–Phenyl-Kopplung.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	E(PCM)	$\Delta G(\text{PCM})$ [hartree]	$\Delta G(\text{PCM})$ [kJ/mol]
X^a	-2610.64598350	1.149816	1.016335	-2610.64971414	–	–
X^c	-2610.64533858	1.150305	1.016925	-2610.64904435	0.001260	3.307579
TS_{X→XI}^a	-2610.62982498	1.148351	1.013444	-2610.63284517	0.013978	36.699160
TS_{X→XI}^c	-2610.62870341	1.148583	1.015543	-2610.63188795	0.017034	44.723266
XI	-2610.69857672	1.151084	1.015046	-2610.70119439	-0.052769	-138.545666
XII^a	-2610.64733238	1.149156	1.015674	-2610.65122626	-0.002173	-5.705527

Untersuchungen zu elektronischen Eigenschaften und dem katalytischen Einsatz von
YPhos-Liganden

XII^c	-2610.64606177	1.149149	1.014995	-2610.64987791	-0.001504	-3.948148
TS_{XII→XIII}^a	-2610.63294688	1.145745	1.012762	-2610.63674803	0.009393	24.661610
TS_{XII→XIII}^c	-2610.63155053	1.145751	1.012840	-2610.63529498	0.010924	28.681382
XIII^a	-2610.63836648	1.147227	1.014188	-2610.64187992	0.005687	14.931796
XIII^c	-2610.63656814	1.147573	1.015129	-2610.63996262	0.008546	22.436263
TS_{XIII→XIV}^a (CW)	-2610.63271606	1.145873	1.013771	-2610.63625128	0.010899	28.614957
XIII→XIV^a (CW)	-2610.63369265	1.147183	1.012828	-2610.63729698	0.008910	23.393625
TS_{XIII→XIV}^a (CW)	-2610.62996300	1.146145	1.013600	-2610.63366877	0.013310	34.946376
TS_{XIII→XIV}^a (CCW)	-2610.62904724	1.146273	1.014107	-2610.63259446	0.014892	39.098106
XIII→XIV^a (CCW)	-2610.63140208	1.147170	1.014146	-2610.63484958	0.012676	33.279683
TS_{XIII→XIV}^a (CCW)	-2610.62904606	1.146237	1.014546	-2610.63248353	0.015442	40.541947
TS_{XIII→XIV}^c (CW)	-2610.62840421	1.146241	1.015087	-2610.63188375	0.016582	43.537065
TS_{XIII→XIV}^c (CCW)	-2610.63018580	1.146188	1.013987	-2610.63382715	0.013539	35.546618
XIII→XIV^c (CCW)	-2610.63173619	1.147302	1.013466	-2610.63542473	0.011420	29.984286
TS_{XIII→XIV}^c (CCW)	-2610.62939784	1.146083	1.014668	-2610.63310079	0.014946	39.241642
XIV^a	-2610.63697637	1.147684	1.015502	-2610.64061434	0.008267	21.704483
XIV^c	-2610.63765911	1.146999	1.013369	-2610.64142995	0.005318	13.962908
TS_{XIV→XV}^a	-2610.63184347	1.145582	1.012452	-2610.63583336	0.009998	26.249171
TS_{XIV→XV}^c	-2610.63365672	1.145731	1.012670	-2610.63785315	0.008196	21.518572
XV^a	-2610.64614183	1.149834	1.016055	-2610.65025451	-0.000820	-2.153881
XV^c	-2610.64723369	1.149583	1.016663	-2610.65145182	-0.001410	-3.701115
TS_{XV→XVI}^a	-2610.63081504	1.148472	1.012780	-2610.63381378	0.012345	32.412743
TS_{XV→XVI}^c	-2610.62482726	1.148723	1.013229	-2610.62779071	0.018817	49.405162
XVI	-2610.69800625	1.151855	1.015924	-2610.70089256	-0.051589	-135.448022

5.2.6.2 Koordinaten der Strukturen

X^a

E = -2610.64598350

Pd -1.736908 -1.033905 0.721509

P 1.892787 -0.698866 -0.035317
P -0.588894 1.001190 0.051542
C 1.185967 0.876150 -0.126778
C 3.687108 -0.589705 -0.452436
H 4.073025 0.041458 0.361053
C 4.434043 -1.923175 -0.390826
H 4.105415 -2.561477 -1.224480
H 4.208600 -2.469651 0.533034
C 5.938513 -1.690294 -0.491485
H 6.268788 -1.138677 0.402082
H 6.466641 -2.652386 -0.474927
C 6.310733 -0.896935 -1.736617
H 6.094802 -1.506007 -2.627960
H 7.390251 -0.699088 -1.751257
C 5.523179 0.402629 -1.823672
H 5.766329 0.937501 -2.750449
H 5.808787 1.069958 -0.996140
C 4.024103 0.141470 -1.755901
H 3.467844 1.078539 -1.833458
H 3.734216 -0.474936 -2.614296
C 1.016297 -1.888467 -1.147751
H -0.037259 -1.581381 -0.997641
C 1.102699 -3.380552 -0.820176
H 0.869772 -3.585553 0.228634
H 2.126788 -3.744129 -0.991852
C 0.125283 -4.152927 -1.700372
H 0.176350 -5.223746 -1.465556
H -0.895321 -3.825441 -1.447059
C 0.388161 -3.918497 -3.180605
H 1.367980 -4.346792 -3.443359
H -0.355087 -4.448967 -3.789349
C 0.388909 -2.433730 -3.515338
H -0.623764 -2.026527 -3.382731
H 0.649988 -2.276375 -4.569798
C 1.355700 -1.668275 -2.621691
H 2.373840 -2.039296 -2.810555
H 1.351434 -0.598369 -2.857814

C 1.878227 -1.564421 1.616172
H 2.307337 -2.561793 1.439733
C 2.715484 -0.859580 2.679168
H 3.756550 -0.745021 2.350345
H 2.307966 0.150175 2.824851
C 2.668894 -1.602886 4.009004
H 3.271345 -1.067516 4.753926
H 3.131747 -2.594060 3.886827
C 1.238238 -1.771185 4.498591
H 1.217421 -2.323292 5.446569
H 0.808632 -0.778640 4.704330
C 0.386405 -2.475747 3.453712
H -0.657312 -2.549552 3.782692
H 0.747652 -3.506942 3.320822
C 0.449046 -1.747566 2.118436
H -0.002457 -0.746617 2.238207
H -0.134698 -2.314661 1.371464
C -0.875024 2.284344 1.365046
H -0.483145 3.234602 0.966774
C -2.364897 2.429662 1.672184
H -2.713200 1.468848 2.083824
H -2.953677 2.594822 0.761966
C -2.612487 3.540492 2.684829
H -2.307904 4.502784 2.245143
H -3.685804 3.623217 2.901166
C -1.829995 3.300789 3.969329
H -2.229886 2.403437 4.466707
H -1.973315 4.133897 4.669934
C -0.348684 3.088603 3.686213
H 0.089851 4.020148 3.297762
H 0.189013 2.855305 4.615173
C -0.135693 1.980638 2.662695
H 0.931374 1.832745 2.467388
H -0.526458 1.036900 3.076162
C -1.434705 1.766475 -1.433640
H -2.471052 1.427362 -1.286445
C -0.937005 1.085942 -2.702808

H 0.120383 1.343569 -2.867174
H -0.967634 -0.001918 -2.559702
C -1.760927 1.483192 -3.918590
H -2.781960 1.094370 -3.794589
H -1.350936 1.013923 -4.823366
C -1.814925 2.995837 -4.075327
H -2.436928 3.271319 -4.937184
H -0.803200 3.377320 -4.286825
C -2.341576 3.653518 -2.807438
H -2.375811 4.744954 -2.924421
H -3.377714 3.322158 -2.637397
C -1.498822 3.285530 -1.589481
H -1.932662 3.748791 -0.696218
H -0.497926 3.719093 -1.697522
C -3.319380 -0.742102 -0.426216
C -4.403837 0.049433 -0.037933
C -3.325312 -1.272948 -1.721310
C -5.439232 0.333839 -0.927452
H -4.449311 0.459511 0.969057
C -4.359700 -0.992114 -2.609958
H -2.511999 -1.922580 -2.044605
C -5.419310 -0.177591 -2.220690
H -6.269715 0.959711 -0.602080
H -4.336076 -1.414204 -3.614333
H -6.227064 0.046005 -2.915062
C -3.566453 -2.105130 2.729736
H -2.931482 -1.509140 3.401065
H -4.396113 -1.460733 2.408742
H -4.007489 -2.917744 3.333964
C -3.673191 -3.518763 0.656573
H -4.568449 -2.985154 0.314197
H -3.143572 -3.862446 -0.241480
C -2.802282 -2.642278 1.532616
H -1.964452 -3.262252 1.896988
H -4.013743 -4.413514 1.204901
C 2.046147 2.085235 -0.105176
C 1.957556 3.048827 -1.124821

C 2.994756 2.336151 0.900527
C 2.744674 4.192880 -1.130865
H 1.279207 2.861713 -1.951125
C 3.806205 3.465745 0.887650
H 3.097262 1.626309 1.716950
C 3.680658 4.410068 -0.123825
H 2.640377 4.910542 -1.943234
H 4.530570 3.613806 1.687162
H 4.305137 5.301085 -0.130740

X^c

E = -2610.64533858
Pd -1.744611 -1.212856 0.545072
P 1.868721 -0.610192 -0.137081
P -0.669620 0.951707 0.190031
C 1.107776 0.933687 0.001303
C 3.655330 -0.380991 -0.537595
H 4.015549 0.150981 0.354930
C 4.446472 -1.686115 -0.644131
H 4.146546 -2.218775 -1.558933
H 4.230126 -2.357665 0.195529
C 5.942707 -1.393029 -0.690570
H 6.244268 -0.957670 0.274651
H 6.503838 -2.330427 -0.796749
C 6.299940 -0.425703 -1.810413
H 6.114131 -0.914408 -2.779289
H 7.372063 -0.192325 -1.782236
C 5.468953 0.847726 -1.732052
H 5.704494 1.511790 -2.573283
H 5.722262 1.404424 -0.816801
C 3.978690 0.530991 -1.725110
H 3.390101 1.450824 -1.682236
H 3.722538 0.029310 -2.664614
C 1.022791 -1.653531 -1.409999
H -0.036458 -1.376656 -1.248697
C 1.114574 -3.172876 -1.266687
H 0.809660 -3.501906 -0.268144

H 2.154560 -3.504280 -1.408335
C 0.210808 -3.844144 -2.296082
H 0.275027 -4.934930 -2.193404
H -0.830172 -3.569657 -2.066355
C 0.540991 -3.416287 -3.717732
H 1.549747 -3.771816 -3.979465
H -0.148996 -3.888977 -4.428262
C 0.494456 -1.901709 -3.854584
H -0.537542 -1.551652 -3.707229
H 0.785122 -1.594293 -4.867376
C 1.401532 -1.234659 -2.830336
H 2.436507 -1.547541 -3.030087
H 1.368664 -0.143135 -2.923566
C 1.911774 -1.693427 1.381718
H 2.315470 -2.663692 1.056648
C 2.813586 -1.134351 2.480298
H 3.839985 -1.000415 2.116994
H 2.436489 -0.141402 2.761795
C 2.818168 -2.021547 3.718480
H 3.468385 -1.581900 4.485611
H 3.253197 -2.999852 3.463138
C 1.410323 -2.220446 4.255660
H 1.419907 -2.874321 5.136702
H 1.009409 -1.250249 4.587606
C 0.502804 -2.793356 3.179041
H -0.523138 -2.900656 3.548999
H 0.844801 -3.804795 2.911636
C 0.505464 -1.917219 1.933321
H 0.076550 -0.936076 2.182416
H -0.124093 -2.400029 1.157753
C -1.007679 2.033542 1.663039
H -0.655712 3.042301 1.391404
C -2.502125 2.081767 1.980028
H -2.812091 1.067395 2.278222
H -3.098921 2.327047 1.093515
C -2.789777 3.060052 3.111986
H -2.524588 4.076785 2.783239

H -3.864613 3.075967 3.335935
C -1.993638 2.708546 4.361867
H -2.358971 1.747888 4.757036
H -2.164468 3.453290 5.150320
C -0.505839 2.582011 4.059180
H -0.100653 3.565800 3.778288
H 0.040978 2.264975 4.957508
C -0.258062 1.602970 2.918455
H 0.813461 1.504978 2.711456
H -0.624594 0.609834 3.223116
C -1.542805 1.887447 -1.180062
H -2.565852 1.491486 -1.094621
C -1.012796 1.419779 -2.530805
H 0.037612 1.727141 -2.642349
H -1.011197 0.322542 -2.554377
C -1.836421 1.970986 -3.685343
H -2.846051 1.538162 -3.636887
H -1.402057 1.655138 -4.643729
C -1.936915 3.487682 -3.614581
H -2.555051 3.871127 -4.437062
H -0.935166 3.927031 -3.746861
C -2.503032 3.929321 -2.272582
H -2.573936 5.024199 -2.224425
H -3.529215 3.542470 -2.173764
C -1.664478 3.409789 -1.108491
H -2.129603 3.715806 -0.164853
H -0.679717 3.890419 -1.127233
C -3.319208 -0.807675 -0.584038
C -4.434806 -0.122113 -0.093111
C -3.296921 -1.134195 -1.944558
C -5.466237 0.271479 -0.944214
H -4.505054 0.121301 0.965317
C -4.329687 -0.746216 -2.794933
H -2.458992 -1.696931 -2.354308
C -5.415492 -0.029204 -2.301455
H -6.318182 0.816358 -0.538527
H -4.282209 -1.006173 -3.852103

H -6.220557 0.279574 -2.965625
 C -2.052007 -4.202697 0.950412
 H -1.640587 -4.375286 -0.051779
 H -1.214625 -4.221965 1.660721
 C -3.442596 -2.667705 2.402308
 H -2.664793 -2.477993 3.157106
 H -4.113897 -1.799497 2.404095
 H -4.026874 -3.532629 2.764146
 C -2.863726 -2.918925 1.020990
 H -3.694920 -3.017101 0.314228
 H -2.678284 -5.078310 1.195484
 C 1.917444 2.166971 0.165021
 C 1.783755 3.234414 -0.740022
 C 2.858928 2.344564 1.192444
 C 2.520225 4.405073 -0.619025
 H 1.110939 3.113176 -1.582311
 C 3.620963 3.503314 1.305419
 H 2.996347 1.552794 1.924069
 C 3.450541 4.548598 0.405859
 H 2.381097 5.203389 -1.346469
 H 4.342384 3.592212 2.116277
 H 4.036722 5.460560 0.498977

$TS_{X \rightarrow XI^A}$

E = -2610.62982498
 Pd -1.743592 -0.996830 -0.595293
 P 1.965993 -0.727374 0.265226
 P -0.517596 0.976557 -0.253175
 C 1.232389 0.828219 0.080970
 C 3.801661 -0.513492 0.201483
 H 3.945707 0.436113 0.740074
 C 4.663174 -1.570715 0.896980
 H 4.566617 -2.532246 0.371623
 H 4.341237 -1.742484 1.928284
 C 6.124695 -1.128672 0.904911
 H 6.210495 -0.226225 1.529035
 H 6.741968 -1.898120 1.386418

C 6.650268 -0.821945 -0.490279
H 6.689882 -1.754965 -1.073311
H 7.680575 -0.447849 -0.434174
C 5.753915 0.172668 -1.214267
H 6.108141 0.332250 -2.240843
H 5.791383 1.151088 -0.711416
C 4.315043 -0.320110 -1.226760
H 3.665282 0.357649 -1.787473
H 4.279559 -1.290422 -1.743410
C 1.393506 -1.946614 -0.991086
H 0.318378 -2.010469 -0.730089
C 1.962038 -3.359208 -0.875206
H 1.952217 -3.720663 0.159659
H 3.013955 -3.357517 -1.200605
C 1.154130 -4.305955 -1.759102
H 1.567445 -5.321119 -1.699721
H 0.129059 -4.363230 -1.360684
C 1.105089 -3.835333 -3.207083
H 2.116003 -3.902061 -3.638686
H 0.470630 -4.506193 -3.800678
C 0.615318 -2.397138 -3.316880
H -0.439104 -2.332652 -3.004556
H 0.650791 -2.058931 -4.360578
C 1.442608 -1.470068 -2.438116
H 2.477318 -1.465896 -2.801318
H 1.077517 -0.443330 -2.494180
C 1.691673 -1.640944 1.865585
H 2.379344 -2.499778 1.849008
C 2.068986 -0.744210 3.044120
H 3.114421 -0.418097 2.966965
H 1.472199 0.172021 2.985968
C 1.817721 -1.422950 4.383478
H 2.072774 -0.736652 5.201301
H 2.486088 -2.292087 4.485437
C 0.372489 -1.884877 4.499986
H 0.203009 -2.379529 5.464971
H -0.291695 -1.007470 4.476849

C 0.013327 -2.817870 3.353671
H -1.038190 -3.128043 3.420257
H 0.614723 -3.736642 3.437897
C 0.265378 -2.175031 1.995888
H -0.445674 -1.353417 1.832592
H 0.056466 -2.906793 1.205326
C -1.271538 1.973202 1.140618
H -0.616823 2.845656 1.296120
C -2.686031 2.472458 0.838824
H -3.332380 1.610864 0.623488
H -2.702103 3.106838 -0.053924
C -3.259806 3.258297 2.013697
H -2.671875 4.179280 2.153803
H -4.284836 3.574292 1.778631
C -3.239474 2.451968 3.303594
H -3.915388 1.591483 3.194108
H -3.621971 3.051862 4.140168
C -1.837676 1.942081 3.602247
H -1.171674 2.795195 3.807922
H -1.836759 1.319544 4.508014
C -1.291746 1.151810 2.422709
H -0.286414 0.778083 2.638772
H -1.923205 0.266216 2.251072
C -0.824203 2.148102 -1.678089
H -1.924829 2.119162 -1.739477
C -0.305137 1.605641 -3.002879
H 0.795085 1.570430 -2.967482
H -0.656299 0.572831 -3.137487
C -0.746111 2.471369 -4.176549
H -1.841309 2.411001 -4.270928
H -0.331279 2.077357 -5.114197
C -0.341858 3.925796 -3.982274
H -0.700149 4.539978 -4.819088
H 0.756990 3.998476 -3.990214
C -0.863230 4.464968 -2.657772
H -0.540721 5.504537 -2.512230
H -1.964251 4.479900 -2.681011

C -0.397527 3.603192 -1.489656
H -0.784327 4.008678 -0.547487
H 0.694937 3.656584 -1.419083
C -3.719847 -0.931082 -0.217190
C -4.154353 -1.010479 1.112327
C -4.509582 -0.212616 -1.126297
C -5.306831 -0.350419 1.529067
H -3.573258 -1.577367 1.838392
C -5.656871 0.452002 -0.705510
H -4.208891 -0.149907 -2.170650
C -6.060687 0.393058 0.625915
H -5.613745 -0.415114 2.572480
H -6.238827 1.024901 -1.426528
H -6.959020 0.912375 0.953556
C -2.908012 -2.772623 -0.952816
H -2.623051 -3.563607 1.049266
H -1.857344 -3.000114 -1.248709
C -3.265880 -3.714869 0.172951
H -4.306646 -3.589634 0.495463
C 2.051551 2.042157 0.385041
C 2.844973 2.650482 -0.601300
C 2.056228 2.644075 1.652430
C 3.623482 3.770360 -0.333997
H 2.822332 2.240379 -1.608567
C 2.822895 3.772680 1.926940
H 1.437098 2.216459 2.437575
C 3.619639 4.336110 0.937332
H 4.227044 4.210454 -1.126321
H 2.798368 4.210778 2.923423
H 4.225427 5.214643 1.151336
H -3.142898 -4.760680 -0.150133
C -3.761880 -2.941867 -2.188035
H -3.663711 -3.964417 -2.585298
H -4.824014 -2.768016 -1.976513
H -3.461894 -2.248845 -2.983203

TS_{X→Xl^f}

E = -2610.62870341

Pd 1.792321 -1.131295 0.014931

P -1.996836 -0.372262 -0.443577

P 0.589184 0.743712 0.718720

C -1.161416 0.916194 0.355626

C -3.818566 -0.084418 -0.308326

H -3.961248 0.800815 -0.942804

C -4.689480 -1.196023 -0.896014

H -4.624951 -2.090015 -0.258633

H -4.341440 -1.493568 -1.892921

C -6.142273 -0.737086 -0.975892

H -6.210096 0.090940 -1.698128

H -6.768910 -1.546700 -1.371971

C -6.664647 -0.268252 0.375129

H -6.710070 -1.128982 1.060267

H -7.692967 0.102655 0.276071

C -5.763518 0.799024 0.981160

H -6.129300 1.091144 1.973689

H -5.790595 1.707714 0.360333

C -4.323739 0.311886 1.081837

H -3.684749 1.083598 1.520185

H -4.289239 -0.552872 1.754446

C -1.537626 -1.990657 0.327437

H -0.448780 -1.852268 0.492331

C -1.721416 -3.264095 -0.499703

H -1.228141 -3.185292 -1.473868

H -2.790689 -3.426626 -0.700738

C -1.148697 -4.468459 0.244585

H -1.317931 -5.379786 -0.343344

H -0.058727 -4.344427 0.316540

C -1.716978 -4.621272 1.647143

H -2.788083 -4.867907 1.583967

H -1.234325 -5.462247 2.161277

C -1.551864 -3.334952 2.442435

H -0.480653 -3.127476 2.594004

H -1.997438 -3.434722 3.440479

C -2.184947 -2.168459 1.699448
H -3.254922 -2.382930 1.563863
H -2.115081 -1.240082 2.273252
C -1.743333 -0.686392 -2.264392
H -2.298275 -1.616289 -2.462809
C -2.296080 0.389833 -3.195826
H -3.355110 0.594801 -2.991239
H -1.744415 1.324169 -3.022050
C -2.118750 -0.013207 -4.655789
H -2.521227 0.771170 -5.309706
H -2.711313 -0.919608 -4.854066
C -0.656907 -0.282913 -4.981905
H -0.548518 -0.599839 -6.027142
H -0.087899 0.653439 -4.877469
C -0.072035 -1.324935 -4.040109
H 0.997549 -1.470342 -4.242144
H -0.557383 -2.296822 -4.222311
C -0.270325 -0.928281 -2.584257
H 0.290491 -0.011699 -2.366791
H 0.159354 -1.685920 -1.919771
C 1.280981 2.337061 0.030763
H 0.655542 3.137135 0.456834
C 2.732020 2.613249 0.409456
H 3.360561 1.778419 0.067810
H 2.837896 2.673831 1.498903
C 3.233606 3.913934 -0.209217
H 2.677679 4.759248 0.225864
H 4.289053 4.063410 0.054524
C 3.057084 3.926289 -1.719549
H 3.690895 3.140967 -2.157555
H 3.398661 4.881621 -2.140034
C 1.606478 3.661674 -2.094106
H 0.975119 4.487404 -1.731459
H 1.488038 3.634486 -3.186109
C 1.116740 2.355419 -1.485211
H 0.064177 2.181876 -1.744528
H 1.701022 1.519067 -1.899991

C 0.897935 0.942976 2.559936
H 0.897346 2.023495 2.780138
C 2.263049 0.366547 2.948597
H 2.250963 -0.710725 2.714232
H 3.064844 0.786227 2.333038
C 2.549798 0.569127 4.431013
H 2.610035 1.647395 4.645901
H 3.531199 0.147371 4.686094
C 1.462696 -0.058247 5.292479
H 1.650547 0.133883 6.357155
H 1.492882 -1.151361 5.162969
C 0.082969 0.446984 4.893087
H -0.695768 -0.062097 5.476955
H 0.002531 1.517976 5.135874
C -0.169765 0.257659 3.403078
H -1.172569 0.607457 3.127726
H -0.143108 -0.817692 3.166511
C 3.678751 -0.912302 -0.671203
C 3.776218 -0.438643 -1.988400
C 4.702564 -0.580026 0.230900
C 4.825142 0.393822 -2.367675
H 3.004940 -0.696871 -2.714626
C 5.750936 0.244774 -0.157488
H 4.661810 -0.953511 1.253648
C 5.816703 0.746351 -1.456354
H 4.862662 0.775766 -3.387495
H 6.522306 0.506240 0.566118
H 6.635196 1.397453 -1.755952
C 2.946707 -3.502181 0.889662
H 3.599814 -3.019151 1.626261
H 1.921457 -3.459656 1.282429
C 2.250063 -3.485885 -1.578955
H 1.181412 -3.515386 -1.334066
H 2.362600 -2.943650 -2.525691
H 2.569091 -4.525928 -1.758280
C 3.088393 -2.858286 -0.481154
H 4.132584 -2.966398 -0.778121

H 3.234590 -4.566018 0.843248
C -1.785899 2.250772 0.464734
C -1.678727 3.007860 1.649625
C -2.492321 2.861476 -0.586885
C -2.251130 4.265834 1.776121
H -1.142557 2.589622 2.495546
C -3.090949 4.109525 -0.455999
H -2.557195 2.351326 -1.542825
C -2.975658 4.826716 0.728338
H -2.139561 4.809107 2.713356
H -3.632324 4.532405 -1.301150
H -3.431993 5.808982 0.830899

XI

E = -2610.69857672
Pd 1.899850 -0.604471 0.471746
P -1.876978 -0.905827 0.001455
P 0.434688 1.105298 -0.038156
C -1.303869 0.716046 -0.191191
C -3.690853 -0.852955 0.357198
H -4.029478 0.004358 -0.243778
C -4.529738 -2.062247 -0.061745
H -4.229598 -2.943956 0.524190
H -4.372173 -2.314451 -1.114863
C -6.012675 -1.771138 0.156282
H -6.311020 -0.963459 -0.529226
H -6.608444 -2.649937 -0.122663
C -6.323502 -1.350527 1.585648
H -6.149939 -2.204140 2.258897
H -7.385466 -1.090542 1.682535
C -5.441898 -0.190214 2.026369
H -5.633683 0.060103 3.077759
H -5.681648 0.708677 1.437746
C -3.974282 -0.536429 1.827167
H -3.317370 0.260811 2.191250
H -3.740427 -1.428677 2.425756
C -0.973062 -1.854514 1.285759

H 0.053008 -1.818201 0.856290
C -1.357161 -3.324269 1.439366
H -1.498449 -3.818563 0.471546
H -2.315754 -3.402360 1.976484
C -0.266906 -4.039837 2.232424
H -0.524128 -5.099048 2.363368
H 0.662261 -4.011756 1.640535
C -0.023652 -3.380797 3.584731
H -0.915581 -3.524952 4.214551
H 0.804162 -3.880469 4.105169
C 0.250920 -1.888424 3.448952
H 1.204354 -1.723130 2.920929
H 0.354025 -1.426458 4.439531
C -0.850103 -1.197609 2.656381
H -1.794139 -1.280795 3.208548
H -0.635530 -0.134313 2.534109
C -1.757161 -2.017529 -1.487057
H -2.367938 -2.905785 -1.266954
C -2.352983 -1.302238 -2.698840
H -3.396783 -1.016443 -2.509579
H -1.811773 -0.359579 -2.839602
C -2.247048 -2.138593 -3.966110
H -2.660763 -1.580990 -4.816385
H -2.861021 -3.046481 -3.859499
C -0.803554 -2.537414 -4.235716
H -0.736383 -3.150838 -5.143574
H -0.207108 -1.632022 -4.425235
C -0.219747 -3.283381 -3.045357
H 0.831609 -3.541371 -3.228495
H -0.757601 -4.236851 -2.923024
C -0.326067 -2.479009 -1.756254
H 0.338016 -1.606388 -1.798567
H 0.045514 -3.083656 -0.920804
C 1.041099 1.847765 -1.650337
H 0.336293 2.636192 -1.953903
C 2.431773 2.466566 -1.496551
H 3.103687 1.694962 -1.086884

H 2.418112 3.289468 -0.772772
C 2.976535 2.982560 -2.824292
H 2.353756 3.824074 -3.165799
H 3.987934 3.386219 -2.679897
C 2.982622 1.903238 -3.896235
H 3.680108 1.105439 -3.598472
H 3.351212 2.306272 -4.848891
C 1.594723 1.303263 -4.061450
H 0.906912 2.073533 -4.444544
H 1.607727 0.497013 -4.808085
C 1.079587 0.775373 -2.731463
H 0.083967 0.333198 -2.848570
H 1.740044 -0.035453 -2.379561
C 0.623685 2.595224 1.081667
H 1.717686 2.721188 1.105611
C 0.195606 2.282300 2.509279
H -0.882530 2.055117 2.518679
H 0.715284 1.374713 2.847180
C 0.488386 3.436694 3.459557
H 1.579551 3.558767 3.544247
H 0.124236 3.197210 4.467828
C -0.118907 4.741497 2.965530
H 0.129950 5.564642 3.648542
H -1.216618 4.653933 2.967772
C 0.349300 5.054629 1.551878
H -0.104387 5.988239 1.193400
H 1.438427 5.219444 1.560598
C 0.018177 3.912619 0.597862
H 0.373799 4.154965 -0.410978
H -1.070832 3.816048 0.524694
C 4.141932 -1.053272 0.726190
C 3.362216 -2.237554 0.745639
C 4.664309 -0.631855 -0.519320
C 3.091030 -2.928030 -0.458382
H 3.096946 -2.692229 1.700672
C 4.433592 -1.347480 -1.682106
H 5.289493 0.259562 -0.553059

C 3.632446 -2.495468 -1.658602
H 2.493057 -3.837503 -0.424342
H 4.871520 -1.009527 -2.619377
H 3.442591 -3.050232 -2.575217
C 6.101937 -0.709447 2.241365
H 6.307787 -1.785921 2.208744
H 6.713129 -0.230333 1.465221
H 6.435353 -0.326155 3.213862
C 4.322562 1.074306 2.090276
H 4.789137 1.615991 1.256737
H 3.241564 1.250174 2.033492
C 4.618201 -0.419608 2.020778
H 4.054844 -0.904901 2.830726
H 4.705512 1.504000 3.024447
C -2.265324 1.769070 -0.637007
C -3.149389 2.388503 0.263342
C -2.300033 2.230534 -1.962131
C -4.024486 3.392149 -0.134131
H -3.119358 2.089920 1.308094
C -3.159362 3.247879 -2.365120
H -1.632035 1.778257 -2.691132
C -4.032550 3.831158 -1.454571
H -4.691741 3.846253 0.596995
H -3.149917 3.580354 -3.401976
H -4.709676 4.623161 -1.768845

XII^a

E = -2610.64733238
Pd -1.982458 -1.353711 -0.050582
P 2.054498 -0.542948 -0.201636
P -0.735649 0.640729 0.431129
C 1.042140 0.771186 0.272585
C 3.568241 0.132139 -1.023646
H 3.732649 1.061590 -0.458486
C 4.867171 -0.671567 -0.929999
H 4.769710 -1.617378 -1.481978
H 5.098203 -0.933171 0.107585

C 6.025655 0.143689 -1.500382
H 6.185258 1.020303 -0.854360
H 6.950564 -0.445783 -1.456762
C 5.762607 0.615894 -2.923225
H 5.725519 -0.257069 -3.592980
H 6.593075 1.241079 -3.275252
C 4.443309 1.368905 -3.022070
H 4.240621 1.656555 -4.061603
H 4.502256 2.302125 -2.440838
C 3.304612 0.517866 -2.480597
H 2.336301 1.023726 -2.580454
H 3.237645 -0.400308 -3.081633
C 1.235066 -1.809169 -1.260079
H 0.458096 -2.204230 -0.585481
C 2.169883 -2.963054 -1.633093
H 2.727512 -3.331757 -0.764634
H 2.916563 -2.601117 -2.355509
C 1.380624 -4.103221 -2.264143
H 2.058689 -4.922558 -2.535956
H 0.684415 -4.509558 -1.514126
C 0.596275 -3.628259 -3.477305
H 1.305158 -3.330815 -4.265721
H -0.001401 -4.450012 -3.892125
C -0.294445 -2.444358 -3.131601
H -1.083151 -2.756260 -2.428542
H -0.808343 -2.083651 -4.031244
C 0.493598 -1.304353 -2.496733
H 1.201347 -0.904826 -3.231433
H -0.177281 -0.488054 -2.214246
C 2.747258 -1.562855 1.197191
H 3.561937 -2.176753 0.787577
C 3.323940 -0.622158 2.254622
H 4.113947 0.008338 1.823689
H 2.532322 0.069497 2.566270
C 3.840297 -1.374687 3.472393
H 4.227004 -0.662776 4.212796
H 4.688026 -2.013648 3.180293

C 2.744145 -2.238254 4.078243
H 3.120842 -2.785749 4.951666
H 1.932142 -1.589956 4.442157
C 2.191512 -3.207296 3.044253
H 1.378752 -3.808952 3.471753
H 2.984767 -3.915827 2.759591
C 1.693980 -2.492608 1.793406
H 0.801112 -1.899167 2.029433
H 1.382337 -3.240910 1.054103
C -1.225137 1.007493 2.197141
H -0.841801 2.006154 2.450103
C -2.746317 1.018077 2.348626
H -3.121227 0.017810 2.077861
H -3.212633 1.716578 1.643396
C -3.157651 1.346343 3.778283
H -2.831443 2.369056 4.023128
H -4.252045 1.339759 3.867002
C -2.539591 0.369223 4.768900
H -2.955939 -0.633900 4.587519
H -2.810624 0.637257 5.798518
C -1.026398 0.311116 4.611837
H -0.593325 1.281619 4.900457
H -0.595700 -0.436298 5.292597
C -0.633474 0.001776 3.173897
H 0.457089 -0.030959 3.069961
H -1.000766 -1.002471 2.902701
C -1.473777 2.116833 -0.452397
H -2.541961 1.855490 -0.501237
C -0.973274 2.170633 -1.892556
H 0.114644 2.320692 -1.893019
H -1.159666 1.205676 -2.374689
C -1.652668 3.275284 -2.689507
H -2.720008 3.028940 -2.795163
H -1.238113 3.312725 -3.706225
C -1.510930 4.624274 -2.001115
H -2.019156 5.408293 -2.578220
H -0.445822 4.902824 -1.959560

C -2.061741 4.560371 -0.584793
H -1.958196 5.532544 -0.084398
H -3.140089 4.342161 -0.629481
C -1.364713 3.480192 0.235524
H -1.815363 3.442675 1.234494
H -0.313897 3.762141 0.377382
C -3.402929 -0.484101 -1.180651
C -4.558173 0.050541 -0.594034
C -3.263042 -0.331550 -2.564903
C -5.504826 0.743404 -1.346049
H -4.732153 -0.070479 0.474868
C -4.208513 0.356244 -3.323755
H -2.394962 -0.749744 -3.070646
C -5.331695 0.907828 -2.716577
H -6.386329 1.154970 -0.854747
H -4.062492 0.461837 -4.398642
H -6.068819 1.450220 -3.306090
C -1.786190 -3.586155 0.758071
H -1.084738 -2.705265 1.023815
H -2.044133 -3.968392 1.754517
H -1.117486 -4.293088 0.252925
C -4.316309 -3.180791 0.613567
H -4.304391 -2.637441 1.569093
H -5.074389 -2.708270 -0.020444
C -2.966745 -3.151867 -0.056786
H -2.989092 -3.590974 -1.059046
H -4.651114 -4.209606 0.825379
C 1.667288 2.079599 0.643660
C 1.693645 2.530049 1.974340
C 2.170621 2.970744 -0.320388
C 2.149593 3.797868 2.317076
H 1.336762 1.869088 2.759177
C 2.646165 4.232908 0.014902
H 2.157928 2.677383 -1.365669
C 2.626146 4.661632 1.337712
H 2.135999 4.109259 3.360319
H 3.016216 4.892424 -0.768557

H 2.981583 5.655543 1.602353

XII^c

E = -2610.64606177

Pd -2.021730 -1.276092 0.386232

P 2.036017 -0.590504 -0.126619

P -0.715977 0.750770 0.314352

C 1.056659 0.816510 0.065499

C 3.544428 -0.150203 -1.103691

H 3.743846 0.875439 -0.758535

C 4.823709 -0.954291 -0.859672

H 4.687606 -1.992301 -1.196279

H 5.070503 -0.997506 0.205778

C 5.991269 -0.315247 -1.608293

H 6.186513 0.674079 -1.167418

H 6.901149 -0.909001 -1.451984

C 5.712649 -0.150949 -3.095561

H 5.643029 -1.145563 -3.562309

H 6.550465 0.362496 -3.584324

C 4.408948 0.597434 -3.335476

H 4.192054 0.658783 -4.409565

H 4.499548 1.632377 -2.970846

C 3.262664 -0.086734 -2.606095

H 2.304098 0.407559 -2.804127

H 3.167057 -1.113276 -2.988560

C 1.153038 -2.024418 -0.868374

H 0.370126 -2.220921 -0.116475

C 2.019438 -3.279691 -0.988643

H 2.578472 -3.479065 -0.067243

H 2.765802 -3.127409 -1.783051

C 1.152561 -4.482627 -1.341320

H 1.775162 -5.382565 -1.427344

H 0.449056 -4.665805 -0.513660

C 0.370529 -4.244302 -2.624148

H 1.077650 -4.174986 -3.465444

H -0.282451 -5.100343 -2.837911

C -0.444381 -2.962228 -2.544548

H -1.232197 -3.064306 -1.784018
H -0.955541 -2.777641 -3.497757
C 0.414133 -1.759616 -2.178199
H 1.126842 -1.566119 -2.987228
H -0.207297 -0.866428 -2.072447
C 2.741830 -1.301433 1.444605
H 3.523215 -2.020171 1.159152
C 3.378382 -0.173337 2.255783
H 4.172155 0.320602 1.678883
H 2.616554 0.596586 2.426607
C 3.910481 -0.659682 3.596050
H 4.339825 0.182635 4.153494
H 4.730546 -1.375338 3.430034
C 2.810292 -1.333178 4.402873
H 3.199508 -1.690586 5.364794
H 2.029067 -0.593825 4.637170
C 2.197059 -2.483441 3.619288
H 1.381398 -2.948914 4.187950
H 2.959640 -3.264492 3.475331
C 1.680242 -2.038465 2.256443
H 0.816107 -1.373227 2.381573
H 1.318607 -2.915731 1.706158
C -1.121993 1.539800 1.960306
H -0.702912 2.555818 1.950476
C -2.632917 1.640950 2.167126
H -3.044621 0.619547 2.168398
H -3.116978 2.161964 1.332521
C -2.964442 2.325287 3.487391
H -2.599705 3.363793 3.458160
H -4.052906 2.382073 3.620195
C -2.324258 1.598915 4.662405
H -2.776596 0.599140 4.753167
H -2.535273 2.122645 5.604008
C -0.823084 1.444913 4.460937
H -0.349481 2.438922 4.483788
H -0.379381 0.870248 5.285874
C -0.510063 0.779642 3.127647

H 0.572872 0.683904 2.990150
H -0.915475 -0.246368 3.125178
C -1.485398 1.996203 -0.855559
H -2.557983 1.758563 -0.784587
C -1.070489 1.699825 -2.292979
H 0.019080 1.807262 -2.386486
H -1.308438 0.657609 -2.526613
C -1.774743 2.609763 -3.289547
H -2.850397 2.376839 -3.279195
H -1.418767 2.396763 -4.306817
C -1.572341 4.077102 -2.944849
H -2.099481 4.719555 -3.662750
H -0.502170 4.326498 -3.023967
C -2.043340 4.359497 -1.526628
H -1.895830 5.417685 -1.272329
H -3.125924 4.168397 -1.463920
C -1.318181 3.479652 -0.513945
H -1.711465 3.689595 0.487686
H -0.256995 3.757111 -0.496987
C -3.498844 -0.667080 -0.835023
C -4.627939 -0.006052 -0.331963
C -3.429710 -0.844119 -2.222089
C -5.617434 0.492396 -1.177371
H -4.745936 0.131226 0.741839
C -4.416660 -0.348669 -3.072426
H -2.584083 -1.371138 -2.659383
C -5.513890 0.331769 -2.555235
H -6.478372 1.007923 -0.752147
H -4.323267 -0.495458 -4.148340
H -6.284326 0.723110 -3.217310
C -3.436534 -3.984487 -0.121483
H -4.141263 -3.578416 -0.856518
H -2.551741 -4.331954 -0.670327
C -1.897800 -3.211249 1.792675
H -1.104112 -2.376550 1.721433
H -2.112820 -3.224979 2.868212
H -1.335965 -4.113056 1.516796

C -3.083276 -2.946361 0.912283
H -3.965918 -2.617531 1.471763
H -3.903680 -4.873498 0.333303
C 1.711597 2.161285 0.108666
C 1.808989 2.894703 1.302754
C 2.180063 2.802633 -1.051559
C 2.301028 4.194744 1.333880
H 1.480549 2.434024 2.230161
C 2.691787 4.094716 -1.027080
H 2.110475 2.283981 -2.002972
C 2.743566 4.806307 0.166719
H 2.343026 4.730346 2.280919
H 3.033570 4.554254 -1.953223
H 3.127816 5.824243 0.187333

TS_{XII→XIII}^a

E = -2610.63294688

Pd -1.917366 -1.335505 0.358124
P 2.051733 -0.558697 -0.121886
P -0.764999 0.702712 0.355162
C 0.997807 0.795983 0.074347
C 3.502080 -0.031976 -1.147132
H 3.642472 1.008943 -0.821406
C 4.843430 -0.737331 -0.931715
H 4.776911 -1.788193 -1.247044
H 5.124797 -0.741465 0.126084
C 5.937334 -0.027703 -1.726717
H 6.072809 0.981143 -1.308171
H 6.892734 -0.550667 -1.590367
C 5.601208 0.088960 -3.206479
H 5.585812 -0.916626 -3.654363
H 6.385469 0.649556 -3.731033
C 4.242268 0.742264 -3.415073
H 3.988502 0.772211 -4.482405
H 4.274107 1.786498 -3.067444
C 3.168311 -0.006665 -2.640285
H 2.172692 0.421336 -2.809960

H 3.126952 -1.040866 -3.010949
C 1.273333 -2.069087 -0.829357
H 0.551756 -2.338032 -0.043973
C 2.264140 -3.226377 -0.982845
H 2.872553 -3.360625 -0.081036
H 2.961817 -3.000550 -1.802688
C 1.524586 -4.518768 -1.304946
H 2.241286 -5.342053 -1.421136
H 0.882159 -4.783128 -0.450376
C 0.669510 -4.368455 -2.553194
H 1.329270 -4.214310 -3.421144
H 0.110794 -5.292653 -2.748978
C -0.281540 -3.187099 -2.432365
H -1.019039 -3.380372 -1.637618
H -0.853444 -3.067156 -3.360550
C 0.453605 -1.891857 -2.106946
H 1.103605 -1.630023 -2.949128
H -0.258594 -1.070295 -1.979559
C 2.855084 -1.185716 1.437907
H 3.682265 -1.842843 1.133774
C 3.430684 0.005961 2.202384
H 4.141652 0.563626 1.577185
H 2.611673 0.704017 2.410930
C 4.077096 -0.413322 3.514389
H 4.456980 0.471134 4.041709
H 4.948804 -1.054004 3.309480
C 3.085855 -1.173186 4.382999
H 3.553982 -1.481951 5.326452
H 2.253780 -0.503046 4.650111
C 2.536275 -2.382337 3.641074
H 1.801899 -2.914557 4.259648
H 3.357301 -3.091953 3.454223
C 1.899556 -1.992888 2.312335
H 0.997442 -1.395139 2.490560
H 1.568417 -2.898204 1.787227
C -1.181372 1.441058 2.019080
H -0.815333 2.477281 2.005644

C -2.694411 1.470536 2.233763
H -3.065025 0.432592 2.211107
H -3.198235 1.992972 1.411835
C -3.053388 2.116436 3.566423
H -2.750152 3.174695 3.546338
H -4.142262 2.108482 3.707404
C -2.361497 1.418382 4.728829
H -2.750195 0.391636 4.812786
H -2.597891 1.919420 5.676728
C -0.855352 1.359527 4.514443
H -0.444785 2.381276 4.536618
H -0.369856 0.811598 5.333751
C -0.516539 0.713148 3.178088
H 0.569364 0.676340 3.031082
H -0.862918 -0.331826 3.177336
C -1.563293 1.938302 -0.792700
H -2.625777 1.667423 -0.713327
C -1.156179 1.654096 -2.234432
H -0.083137 1.853648 -2.354344
H -1.309693 0.591984 -2.451295
C -1.959298 2.498771 -3.212973
H -3.014485 2.190250 -3.159264
H -1.628387 2.301055 -4.241641
C -1.842501 3.980637 -2.887287
H -2.442517 4.578826 -3.586007
H -0.796161 4.299926 -3.017383
C -2.267335 4.253345 -1.451895
H -2.170105 5.321728 -1.216461
H -3.333436 4.001722 -1.340347
C -1.452306 3.428417 -0.460395
H -1.815868 3.627036 0.555255
H -0.407895 3.762643 -0.489847
C -3.382223 -0.753936 -0.997354
C -4.517463 -0.039038 -0.583683
C -3.315088 -1.064978 -2.362376
C -5.506266 0.369382 -1.477407
H -4.642551 0.214641 0.469987

C -4.298635 -0.667667 -3.267051
H -2.465485 -1.630230 -2.743878
C -5.400000 0.060526 -2.829718
H -6.366582 0.930955 -1.112982
H -4.201260 -0.927831 -4.321154
H -6.169086 0.377425 -3.532267
C -1.824035 -3.292236 1.367649
H -0.869304 -1.880195 1.462311
H -1.886690 -3.286557 2.456905
H -0.996940 -3.886582 0.975184
C -4.351942 -2.993434 1.259764
H -4.272521 -2.424186 2.194594
H -5.042624 -2.459389 0.599238
C -3.009177 -3.169096 0.610839
H -3.019734 -3.629485 -0.378715
H -4.801998 -3.968370 1.499704
C 1.589759 2.172807 0.099012
C 1.656970 2.920009 1.286631
C 2.022199 2.827701 -1.067569
C 2.083392 4.243173 1.305929
H 1.358487 2.450822 2.219554
C 2.469654 4.143488 -1.055402
H 1.975347 2.300055 -2.015065
C 2.489711 4.866880 0.132179
H 2.102845 4.787176 2.248864
H 2.784602 4.611528 -1.986739
H 2.822434 5.902943 0.142964

TS_{XII→XIII}^c

E = -2610.63155053
Pd -1.943239 -1.235898 0.642759
P 2.027501 -0.576064 -0.092142
P -0.760541 0.761472 0.282465
C 0.996851 0.808379 -0.044267
C 3.479213 -0.196273 -1.181163
H 3.643979 0.871537 -0.974419
C 4.805002 -0.907804 -0.897768

H 4.706995 -1.984645 -1.097369
H 5.096559 -0.806689 0.152101
C 5.910955 -0.317279 -1.770003
H 6.074424 0.726995 -1.463265
H 6.853681 -0.846824 -1.580966
C 5.569108 -0.352270 -3.252467
H 5.529403 -1.399422 -3.589913
H 6.362165 0.131627 -3.836758
C 4.222999 0.303959 -3.524302
H 3.961885 0.222007 -4.587144
H 4.277914 1.379075 -3.293289
C 3.139671 -0.332710 -2.666926
H 2.152293 0.091498 -2.883554
H 3.078498 -1.401806 -2.916608
C 1.192483 -2.125618 -0.623908
H 0.449177 -2.265470 0.177482
C 2.116850 -3.344567 -0.634234
H 2.708875 -3.413173 0.285792
H 2.833235 -3.251542 -1.464528
C 1.300600 -4.618192 -0.820325
H 1.964446 -5.492430 -0.828579
H 0.633401 -4.739843 0.047692
C 0.469738 -4.562141 -2.093246
H 1.147725 -4.552962 -2.960891
H -0.143743 -5.467334 -2.189686
C -0.407640 -3.319757 -2.129235
H -1.171390 -3.376201 -1.341704
H -0.950295 -3.267365 -3.081434
C 0.397114 -2.043976 -1.925920
H 1.069773 -1.908149 -2.779165
H -0.267269 -1.175671 -1.896047
C 2.841218 -1.046909 1.514498
H 3.639988 -1.760610 1.265994
C 3.472160 0.198523 2.136852
H 4.175232 0.673141 1.438703
H 2.678330 0.936771 2.302174
C 4.155348 -0.113112 3.460755

H 4.576317 0.805812 3.888639
H 5.003497 -0.792983 3.285124
C 3.182953 -0.762403 4.434721
H 3.685409 -1.000586 5.381019
H 2.383151 -0.045504 4.677267
C 2.565938 -2.014433 3.829590
H 1.841168 -2.461308 4.522580
H 3.355331 -2.766959 3.677487
C 1.888424 -1.723150 2.496092
H 1.022385 -1.069271 2.653341
H 1.493369 -2.655438 2.072717
C -1.117319 1.733932 1.836963
H -0.728318 2.747134 1.663529
C -2.620236 1.835974 2.093225
H -3.010828 0.818078 2.251717
H -3.146350 2.231149 1.216204
C -2.913528 2.695361 3.316867
H -2.584735 3.727286 3.118420
H -3.996152 2.743323 3.493512
C -2.196566 2.168003 4.551834
H -2.610897 1.181517 4.811822
H -2.382068 2.820568 5.415093
C -0.701609 2.023989 4.300655
H -0.260667 3.021872 4.149272
H -0.202808 1.593977 5.180128
C -0.430868 1.167421 3.070946
H 0.646777 1.072348 2.894422
H -0.805798 0.146872 3.243290
C -1.591350 1.839901 -0.997796
H -2.652861 1.594396 -0.848733
C -1.236446 1.363958 -2.402224
H -0.159903 1.499901 -2.573162
H -1.439252 0.291309 -2.478303
C -2.036300 2.104417 -3.464493
H -3.098038 1.836311 -3.353306
H -1.732628 1.768218 -4.465243
C -1.875191 3.611173 -3.331480

H -2.472122 4.132771 -4.091499
H -0.823513 3.883067 -3.515138
C -2.268913 4.070416 -1.935781
H -2.146493 5.157344 -1.836644
H -3.337609 3.857839 -1.777519
C -1.452370 3.358805 -0.861643
H -1.796336 3.690174 0.125424
H -0.403263 3.667465 -0.946630
C -3.470620 -0.819455 -0.704113
C -4.590497 -0.066828 -0.315456
C -3.463596 -1.270386 -2.031405
C -5.619699 0.246670 -1.201700
H -4.670982 0.295506 0.710049
C -4.486158 -0.964636 -2.928841
H -2.631266 -1.874675 -2.390524
C -5.569960 -0.195280 -2.520022
H -6.467942 0.838721 -0.857797
H -4.432072 -1.328362 -3.955061
H -6.369752 0.049805 -3.216987
C -3.274712 -4.047397 0.313438
H -3.680647 -3.694094 -0.641810
H -2.321457 -4.552655 0.116958
C -1.992381 -2.834095 2.157673
H -0.850345 -1.624258 1.765417
H -2.110578 -2.406164 3.153041
H -1.214069 -3.597557 2.092433
C -3.107340 -2.924760 1.296569
H -4.035624 -2.464522 1.639011
H -3.969232 -4.803079 0.708442
C 1.606247 2.167784 -0.207161
C 1.735730 3.051389 0.876835
C 2.002512 2.665629 -1.460914
C 2.188975 4.356369 0.717666
H 1.464717 2.707151 1.870651
C 2.475717 3.961711 -1.627091
H 1.907713 2.027161 -2.333554
C 2.559439 4.822736 -0.538052

H 2.257653 5.010292 1.585493
H 2.761514 4.305465 -2.619977
H 2.913243 5.843823 -0.666468

XIII^a

E = -2610.63836648
Pd -1.855600 -1.269316 0.597756
P 2.035518 -0.565021 -0.063528
P -0.783613 0.751424 0.298724
C 0.966627 0.795086 -0.045667
C 3.459579 -0.156413 -1.181311
H 3.586499 0.921083 -1.003423
C 4.818715 -0.802995 -0.900193
H 4.766215 -1.888329 -1.066130
H 5.121370 -0.656436 0.141291
C 5.884420 -0.191245 -1.807076
H 6.008616 0.867290 -1.532416
H 6.851573 -0.675387 -1.619702
C 5.520594 -0.282307 -3.281896
H 5.515650 -1.339503 -3.589021
H 6.284951 0.214330 -3.893147
C 4.146401 0.315057 -3.548610
H 3.872284 0.196218 -4.604681
H 4.165166 1.397024 -3.345620
C 3.101242 -0.339771 -2.657874
H 2.095164 0.044012 -2.865397
H 3.074173 -1.415064 -2.884395
C 1.279228 -2.171095 -0.555646
H 0.579054 -2.353357 0.273249
C 2.290959 -3.319813 -0.584092
H 2.911886 -3.332914 0.319209
H 2.974500 -3.186040 -1.435371
C 1.569764 -4.653781 -0.733295
H 2.299292 -5.473583 -0.759641
H 0.945018 -4.821287 0.157852
C 0.694826 -4.673030 -1.976805
H 1.339495 -4.614346 -2.867512

H 0.152566 -5.624572 -2.049205
C -0.278574 -3.503701 -1.988316
H -1.007189 -3.614194 -1.170544
H -0.858457 -3.506435 -2.919516
C 0.433297 -2.165352 -1.829251
H 1.062179 -1.992898 -2.709326
H -0.295075 -1.348709 -1.787361
C 2.892355 -0.958861 1.541394
H 3.723577 -1.632702 1.288788
C 3.472402 0.330321 2.122709
H 4.119720 0.835306 1.392506
H 2.643416 1.022977 2.309092
C 4.219470 0.077844 3.424369
H 4.600930 1.025618 3.825620
H 5.099082 -0.554370 3.226551
C 3.320605 -0.612887 4.439644
H 3.867884 -0.807602 5.370935
H 2.488466 0.060020 4.699811
C 2.756329 -1.906695 3.871456
H 2.087066 -2.387095 4.596900
H 3.582633 -2.613036 3.694958
C 2.009916 -1.668609 2.564337
H 1.118572 -1.058989 2.752200
H 1.645459 -2.623950 2.165799
C -1.157212 1.704889 1.857899
H -0.800797 2.728861 1.677665
C -2.662284 1.762503 2.114870
H -3.026463 0.731666 2.256098
H -3.194136 2.160349 1.242389
C -2.981238 2.600766 3.347123
H -2.693761 3.645770 3.153074
H -4.064151 2.606048 3.528438
C -2.238383 2.097316 4.576658
H -2.610288 1.093692 4.834513
H -2.447121 2.739133 5.442657
C -0.740044 2.015366 4.317675
H -0.341041 3.030243 4.162408

H -0.219288 1.607011 5.194655
C -0.445996 1.164445 3.089794
H 0.633192 1.103337 2.905941
H -0.785432 0.133650 3.267191
C -1.619756 1.812991 -0.984970
H -2.676864 1.554906 -0.834559
C -1.259959 1.327079 -2.384641
H -0.195792 1.518321 -2.574310
H -1.405301 0.243169 -2.439470
C -2.113717 2.014568 -3.440056
H -3.161032 1.707856 -3.297084
H -1.822338 1.673235 -4.442626
C -2.004268 3.528826 -3.335337
H -2.640015 4.015811 -4.086805
H -0.968571 3.834082 -3.553917
C -2.374839 4.003342 -1.937676
H -2.281297 5.095098 -1.862870
H -3.432698 3.764038 -1.747840
C -1.512753 3.335689 -0.870112
H -1.843009 3.673489 0.119933
H -0.474604 3.670208 -0.985356
C -3.378126 -0.908934 -0.810593
C -4.491202 -0.107908 -0.511026
C -3.347915 -1.456057 -2.100753
C -5.497376 0.150411 -1.441344
H -4.586927 0.334959 0.481533
C -4.346694 -1.209188 -3.041911
H -2.515776 -2.096519 -2.392873
C -5.429248 -0.398299 -2.717809
H -6.340656 0.783346 -1.164584
H -4.276900 -1.653872 -4.034732
H -6.211678 -0.200197 -3.448569
C -1.934056 -3.225738 1.632875
H -0.638466 -1.326882 1.625142
H -1.909566 -3.069859 2.710597
H -1.094233 -3.781810 1.217383
C -4.426768 -2.793187 1.591709

H -4.283327 -2.238016 2.526393
H -5.077842 -2.207031 0.936293
C -3.117210 -3.098051 0.931464
H -3.175932 -3.531366 -0.068170
H -4.950336 -3.729595 1.832936
C 1.545568 2.165295 -0.237932
C 1.651446 3.071525 0.829995
C 1.931143 2.650373 -1.499846
C 2.071614 4.384481 0.647958
H 1.389023 2.737569 1.829573
C 2.371754 3.954651 -1.688989
H 1.854412 1.994559 -2.361046
C 2.431668 4.837228 -0.615734
H 2.122661 5.055369 1.503941
H 2.650300 4.287459 -2.687620
H 2.759504 5.864507 -0.762397

XIII^c

E = -2610.63656814
Pd 1.895091 1.213588 0.723455
P -2.024395 0.595389 -0.063677
P 0.771139 -0.757986 0.262420
C -0.981780 -0.783587 -0.077612
C -3.453807 0.254745 -1.196338
H -3.614095 -0.822596 -1.044637
C -4.791718 0.940046 -0.905598
H -4.700331 2.026347 -1.049265
H -5.103471 0.783313 0.131591
C -5.874188 0.384103 -1.828430
H -6.034374 -0.675293 -1.576667
H -6.825379 0.895983 -1.633204
C -5.502866 0.494572 -3.300059
H -5.464911 1.557320 -3.584809
H -6.279938 0.034286 -3.923611
C -4.146198 -0.137797 -3.575906
H -3.864489 -0.002446 -4.627986
H -4.197582 -1.223219 -3.398494

C -3.085993 0.464951 -2.666525
H -2.089645 0.060836 -2.882167
H -3.030811 1.545172 -2.863082
C -1.201501 2.176353 -0.511702
H -0.476873 2.287935 0.310801
C -2.135236 3.387547 -0.485930
H -2.751257 3.405428 0.420872
H -2.828589 3.336118 -1.339119
C -1.317745 4.670737 -0.582560
H -1.983040 5.543749 -0.564583
H -0.675245 4.746742 0.308793
C -0.451044 4.682598 -1.832968
H -1.104289 4.719547 -2.718699
H 0.162743 5.592277 -1.863791
C 0.429868 3.444469 -1.913316
H 1.172033 3.455766 -1.103335
H 0.998097 3.445359 -2.852043
C -0.378359 2.160277 -1.799306
H -1.031322 2.070851 -2.673834
H 0.287359 1.291743 -1.800612
C -2.877763 0.968023 1.546596
H -3.681743 1.680026 1.309888
C -3.504567 -0.320829 2.079405
H -4.163791 -0.778635 1.329125
H -2.698865 -1.045982 2.245094
C -4.252023 -0.091240 3.384937
H -4.665519 -1.040225 3.749964
H -5.110085 0.574923 3.204708
C -3.338777 0.534469 4.428714
H -3.885448 0.713788 5.363445
H -2.529848 -0.173326 4.668928
C -2.729650 1.828468 3.908969
H -2.051198 2.262157 4.655051
H -3.531549 2.566600 3.751010
C -1.980056 1.609879 2.600253
H -1.113730 0.961658 2.774633
H -1.575511 2.563137 2.237477

C 1.122994 -1.785097 1.779256
H 0.747156 -2.791621 1.547826
C 2.623617 -1.887593 2.047155
H 2.999787 -0.878562 2.279141
H 3.166267 -2.216213 1.152600
C 2.906438 -2.825201 3.214633
H 2.591647 -3.844143 2.940508
H 3.986488 -2.875343 3.405965
C 2.164325 -2.390073 4.470890
H 2.567184 -1.421859 4.806232
H 2.340916 -3.100598 5.289100
C 0.672139 -2.236453 4.207059
H 0.238588 -3.223618 3.981260
H 0.158870 -1.869827 5.106561
C 0.417093 -1.296652 3.036023
H -0.658223 -1.186287 2.851300
H 0.789645 -0.291330 3.280950
C 1.601497 -1.786421 -1.061565
H 2.662513 -1.534158 -0.922317
C 1.214506 -1.279112 -2.446868
H 0.138101 -1.426825 -2.600741
H 1.397188 -0.201676 -2.500246
C 2.000100 -1.982948 -3.544093
H 3.061727 -1.709344 -3.448528
H 1.672007 -1.623502 -4.528950
C 1.854933 -3.494129 -3.447556
H 2.440351 -3.990096 -4.233214
H 0.802055 -3.771366 -3.615777
C 2.282789 -3.984351 -2.072931
H 2.174136 -5.074707 -1.998968
H 3.352109 -3.763616 -1.931031
C 1.481090 -3.310640 -0.963850
H 1.849969 -3.664574 0.006156
H 0.433714 -3.628733 -1.036078
C 3.455095 0.849576 -0.635232
C 4.591230 0.121132 -0.249014
C 3.426408 1.282571 -1.967842

C 5.617780 -0.185353 -1.140784
H 4.688530 -0.224975 0.781433
C 4.446710 0.985874 -2.871287
H 2.578610 1.867242 -2.325619
C 5.547685 0.240585 -2.463594
H 6.479539 -0.758482 -0.798457
H 4.376979 1.336363 -3.901170
H 6.345327 0.001955 -3.165207
C 3.452388 3.988467 0.288221
H 3.738376 3.598188 -0.694827
H 2.536201 4.580310 0.181881
C 2.233910 2.834614 2.191091
H 0.639441 1.271672 1.700764
H 2.323870 2.291729 3.130096
H 1.431567 3.571918 2.145974
C 3.284942 2.893508 1.295751
H 4.188465 2.328999 1.528614
H 4.250050 4.669780 0.616211
C -1.582829 -2.139449 -0.301181
C -1.705026 -3.070682 0.743570
C -1.979970 -2.585958 -1.573876
C -2.147618 -4.371233 0.528860
H -1.437144 -2.768175 1.751448
C -2.441995 -3.877750 -1.795706
H -1.896848 -1.909341 -2.418219
C -2.515140 -4.786457 -0.745499
H -2.209978 -5.062091 1.368056
H -2.728096 -4.179683 -2.802000
H -2.859848 -5.804190 -0.917781

TS_{XIII→XIV}^a (CW)

E = -2610.63271606
Pd -1.886072 -1.380356 0.189177
P 2.063834 -0.526521 -0.159660
P -0.786090 0.642898 0.396303
C 0.972149 0.781702 0.137170
C 3.531981 0.157450 -1.068507

H 3.625575 1.157782 -0.621529
C 4.889430 -0.526976 -0.884546
H 4.870254 -1.534209 -1.324492
H 5.134520 -0.649363 0.174843
C 5.986894 0.305225 -1.544285
H 6.070719 1.260580 -1.004234
H 6.954032 -0.201222 -1.429844
C 5.704505 0.587492 -3.012597
H 5.742995 -0.357189 -3.576598
H 6.487096 1.231753 -3.433369
C 4.331414 1.216833 -3.198310
H 4.116063 1.365123 -4.264273
H 4.310874 2.212561 -2.728942
C 3.257517 0.346858 -2.562183
H 2.255838 0.760656 -2.725611
H 3.269024 -0.637257 -3.052144
C 1.346314 -1.954811 -1.072558
H 0.601374 -2.334012 -0.354387
C 2.371177 -3.060808 -1.337034
H 2.928600 -3.317482 -0.428659
H 3.110271 -2.708505 -2.071803
C 1.682749 -4.303079 -1.888612
H 2.425456 -5.088405 -2.080374
H 0.996790 -4.699038 -1.123936
C 0.899905 -3.982487 -3.152430
H 1.603936 -3.678864 -3.942854
H 0.385265 -4.878421 -3.522996
C -0.096141 -2.859020 -2.908017
H -0.859674 -3.194882 -2.193161
H -0.626530 -2.608464 -3.835361
C 0.574866 -1.611981 -2.347277
H 1.246808 -1.201321 -3.108045
H -0.172541 -0.841784 -2.130396
C 2.856323 -1.302824 1.334366
H 3.707100 -1.888281 0.956584
C 3.390769 -0.197798 2.245347
H 4.059152 0.479127 1.695759

H 2.542825 0.420522 2.562339
C 4.087663 -0.765467 3.473757
H 4.436645 0.053067 4.116493
H 4.985138 -1.322072 3.161792
C 3.160458 -1.695346 4.242782
H 3.673396 -2.115193 5.117693
H 2.307452 -1.114846 4.627888
C 2.640957 -2.806748 3.342833
H 1.950645 -3.458354 3.894204
H 3.485311 -3.441215 3.030497
C 1.943975 -2.250304 2.107356
H 1.034923 -1.713915 2.400952
H 1.609010 -3.074493 1.465739
C -1.222837 1.200666 2.124619
H -0.837961 2.226465 2.214250
C -2.735885 1.241765 2.329165
H -3.129039 0.226071 2.169961
H -3.217353 1.878825 1.577990
C -3.098843 1.724146 3.728737
H -2.785409 2.773818 3.839076
H -4.189258 1.711849 3.858168
C -2.424267 0.886088 4.805524
H -2.815677 -0.142356 4.759196
H -2.671598 1.269750 5.804049
C -0.916535 0.848165 4.600179
H -0.504863 1.860397 4.738825
H -0.439388 0.211454 5.357798
C -0.573929 0.347093 3.204699
H 0.511916 0.318285 3.055822
H -0.925791 -0.688503 3.087278
C -1.607908 1.966252 -0.622600
H -2.664771 1.679893 -0.533925
C -1.252615 1.803711 -2.095760
H -0.193254 2.053456 -2.246714
H -1.381106 0.755568 -2.385710
C -2.136779 2.685090 -2.965984
H -3.173753 2.324836 -2.880696

H -1.855584 2.579541 -4.022489
C -2.059032 4.142521 -2.534082
H -2.725060 4.763505 -3.147991
H -1.037014 4.516507 -2.704412
C -2.401398 4.296225 -1.058707
H -2.319752 5.347766 -0.752219
H -3.451366 4.003540 -0.902628
C -1.506252 3.427250 -0.179380
H -1.810133 3.539699 0.868724
H -0.473438 3.789805 -0.245777
C -3.389054 -0.703216 -1.116539
C -4.525349 0.010632 -0.702475
C -3.329917 -1.021049 -2.481355
C -5.525560 0.403420 -1.590717
H -4.641356 0.278969 0.349603
C -4.321708 -0.635143 -3.383040
H -2.477302 -1.581415 -2.866812
C -5.426649 0.084934 -2.941660
H -6.387700 0.961215 -1.224603
H -4.228468 -0.897685 -4.436998
H -6.203276 0.391012 -3.640734
C -3.454889 -2.927178 0.799983
H -0.715078 -1.854859 1.182843
H -4.301802 -2.652102 0.171790
C -2.408501 -3.586245 0.216201
H -1.644077 -4.079037 0.812982
C -3.645882 -2.783699 2.274353
H -4.045576 -1.794491 2.526854
H -4.377860 -3.523301 2.630690
H -2.705632 -2.928897 2.818376
H -2.450265 -3.830355 -0.844178
C 1.534636 2.162549 0.297355
C 1.611578 2.784091 1.554236
C 1.941326 2.937693 -0.802533
C 2.029548 4.102258 1.702811
H 1.330385 2.217755 2.437716
C 2.381048 4.248289 -0.662241

H 1.882492 2.508125 -1.797374
C 2.415828 4.845224 0.593645
H 2.059386 4.547420 2.695978
H 2.678462 4.812360 -1.544856
H 2.743650 5.876799 0.706439

xiii→*xiv*^a (CW)

E = -2610.63369265
Pd -1.877570 -1.389062 0.004689
P 2.060731 -0.490609 -0.239975
P -0.784701 0.591576 0.475851
C 0.969584 0.769773 0.221711
C 3.512797 0.296297 -1.088325
H 3.614286 1.241119 -0.535225
C 4.873111 -0.401530 -1.003503
H 4.846762 -1.355069 -1.549887
H 5.136113 -0.637713 0.032127
C 5.958937 0.499883 -1.586872
H 6.052546 1.390224 -0.946626
H 6.927851 -0.014371 -1.545892
C 5.650603 0.941533 -3.010015
H 5.678377 0.064712 -3.675155
H 6.426011 1.629179 -3.371189
C 4.274781 1.585828 -3.101063
H 4.041036 1.851379 -4.140025
H 4.263285 2.523334 -2.523681
C 3.211491 0.649640 -2.546377
H 2.207294 1.078217 -2.644104
H 3.212526 -0.274322 -3.142094
C 1.331172 -1.809805 -1.294167
H 0.599281 -2.265420 -0.607615
C 2.346925 -2.882404 -1.694940
H 2.926111 -3.230280 -0.831593
H 3.068278 -2.457292 -2.408674
C 1.638737 -4.061584 -2.351486
H 2.371872 -4.826325 -2.639186
H 0.969416 -4.528909 -1.612548

C 0.825917 -3.614111 -3.556402
H 1.511659 -3.236803 -4.331017
H 0.296307 -4.467023 -4.000157
C -0.156448 -2.516025 -3.178239
H -0.909245 -2.916365 -2.484665
H -0.702027 -2.171932 -4.065778
C 0.537701 -1.334843 -2.511736
H 1.199669 -0.857767 -3.242248
H -0.196899 -0.582572 -2.205916
C 2.875270 -1.424909 1.147140
H 3.723756 -1.960452 0.697572
C 3.418105 -0.420440 2.163571
H 4.074802 0.315068 1.678706
H 2.572994 0.155565 2.558363
C 4.136278 -1.111256 3.313122
H 4.492257 -0.364270 4.034345
H 5.030565 -1.627467 2.930522
C 3.222583 -2.121523 3.991718
H 3.748585 -2.629643 4.810252
H 2.373602 -1.588652 4.447932
C 2.693743 -3.134711 2.986862
H 2.013262 -3.843533 3.476451
H 3.536035 -3.729509 2.599786
C 1.978469 -2.458260 1.823518
H 1.065283 -1.967623 2.177623
H 1.646664 -3.214141 1.100976
C -1.219787 0.915227 2.263404
H -0.861777 1.932189 2.478730
C -2.732095 0.890096 2.479263
H -3.101720 -0.113587 2.213877
H -3.237653 1.591328 1.805059
C -3.092891 1.206264 3.926005
H -2.799773 2.243444 4.150721
H -4.181482 1.156068 4.060975
C -2.391132 0.266933 4.896455
H -2.763714 -0.757468 4.737909
H -2.635943 0.529666 5.933943

C -0.885032 0.281702 4.677076
H -0.490763 1.278500 4.930348
H -0.389601 -0.429676 5.352010
C -0.543218 -0.045199 3.229968
H 0.541940 -0.029959 3.074099
H -0.872608 -1.067737 2.992548
C -1.623213 2.029227 -0.358808
H -2.676694 1.720173 -0.308185
C -1.267145 2.067924 -1.840363
H -0.211981 2.351263 -1.955172
H -1.379731 1.066122 -2.267986
C -2.163228 3.045917 -2.586223
H -3.196522 2.667416 -2.547037
H -1.884067 3.082806 -3.647891
C -2.097750 4.434760 -1.966688
H -2.770587 5.124937 -2.493028
H -1.079435 4.837092 -2.087199
C -2.438787 4.389740 -0.483798
H -2.365333 5.392293 -0.041288
H -3.486062 4.070252 -0.367375
C -1.535963 3.419780 0.273619
H -1.842615 3.389806 1.326552
H -0.505815 3.796469 0.258375
C -3.386986 -0.562860 -1.203764
C -4.533430 0.053715 -0.676743
C -3.342312 -0.672653 -2.601765
C -5.556344 0.548485 -1.485127
H -4.639501 0.163806 0.404476
C -4.356107 -0.183330 -3.424961
H -2.483186 -1.148136 -3.076680
C -5.470511 0.436066 -2.869056
H -6.425310 1.024430 -1.030324
H -4.272836 -0.284928 -4.507187
H -6.264315 0.822754 -3.506174
C -3.348881 -3.000856 0.653523
H -0.726947 -2.015044 0.943281
H -4.285077 -2.481594 0.438020

C -2.633918 -3.481553 -0.407921
H -1.795499 -4.160497 -0.255307
C -3.091587 -3.347883 2.083029
H -3.110763 -2.453448 2.717837
H -3.878532 -4.022550 2.450299
H -2.117588 -3.832268 2.207385
H -3.015045 -3.366035 -1.421500
C 1.524571 2.124691 0.542725
C 1.592071 2.595615 1.864101
C 1.924938 3.026987 -0.457923
C 1.993966 3.891911 2.167135
H 1.315579 1.926223 2.673908
C 2.348775 4.317192 -0.163725
H 1.872390 2.715805 -1.496400
C 2.373279 4.763798 1.153388
H 2.016306 4.218507 3.205526
H 2.641378 4.984042 -0.973237
H 2.688072 5.779051 1.386806

TS_{XIII→XIV}^a (CW)

E = -2610.62996300
Pd -1.842485 -1.409837 -0.119830
P 2.016684 -0.413447 -0.308877
P -0.832107 0.554543 0.515509
C 0.920040 0.785768 0.283584
C 3.467177 0.468028 -1.058775
H 3.563457 1.345662 -0.402959
C 4.828395 -0.232616 -1.053490
H 4.801043 -1.118633 -1.704069
H 5.093167 -0.583845 -0.051474
C 5.912808 0.729731 -1.533424
H 6.005465 1.543046 -0.797714
H 6.882436 0.215489 -1.550374
C 5.603489 1.327124 -2.898318
H 5.634298 0.530396 -3.657429
H 6.376899 2.053244 -3.179627
C 4.225561 1.973063 -2.918054

H 3.990759 2.349795 -3.921824
H 4.210727 2.841835 -2.241856
C 3.166230 0.977149 -2.470207
H 2.159125 1.406873 -2.524905
H 3.175608 0.122569 -3.161767
C 1.290556 -1.604748 -1.508772
H 0.547672 -2.123194 -0.880137
C 2.290898 -2.645460 -2.015320
H 2.875102 -3.079736 -1.195668
H 3.009643 -2.165148 -2.696424
C 1.553596 -3.748427 -2.765487
H 2.267793 -4.498066 -3.130335
H 0.885794 -4.267925 -2.060334
C 0.735017 -3.183465 -3.916989
H 1.421727 -2.761531 -4.667343
H 0.180650 -3.985081 -4.421994
C -0.217223 -2.094430 -3.443501
H -0.988625 -2.525233 -2.789441
H -0.748112 -1.657872 -4.298738
C 0.510600 -0.998441 -2.675684
H 1.187785 -0.477673 -3.361167
H -0.200920 -0.256397 -2.299718
C 2.832204 -1.500421 0.964146
H 3.679680 -1.979526 0.452518
C 3.376902 -0.621716 2.090596
H 4.035247 0.163997 1.695230
H 2.532184 -0.093336 2.548023
C 4.095006 -1.442529 3.153036
H 4.446600 -0.784379 3.958054
H 4.992393 -1.905418 2.713740
C 3.187319 -2.531303 3.706112
H 3.716635 -3.129548 4.458913
H 2.334511 -2.061678 4.221139
C 2.664659 -3.419370 2.586717
H 1.989783 -4.187528 2.986576
H 3.509631 -3.955547 2.126826
C 1.940206 -2.606079 1.521306

H 1.037532 -2.156786 1.949598
H 1.592053 -3.267082 0.717683
C -1.258293 0.700721 2.326321
H -0.927959 1.705480 2.626605
C -2.765364 0.604300 2.557759
H -3.093916 -0.401319 2.250275
H -3.312873 1.311609 1.923144
C -3.108690 0.832460 4.025090
H -2.842752 1.865228 4.298851
H -4.192155 0.740756 4.177865
C -2.360775 -0.135952 4.931615
H -2.717084 -1.158795 4.733340
H -2.584156 0.072254 5.986225
C -0.859809 -0.081715 4.679310
H -0.474356 0.904662 4.982248
H -0.338531 -0.823383 5.300126
C -0.546549 -0.314492 3.207908
H 0.534135 -0.282652 3.027640
H -0.874866 -1.322380 2.914555
C -1.698209 2.054552 -0.179139
H -2.747159 1.723635 -0.190416
C -1.299715 2.262773 -1.635923
H -0.234644 2.524275 -1.688133
H -1.424788 1.321193 -2.179871
C -2.140580 3.347705 -2.292835
H -3.183918 3.000417 -2.343166
H -1.812578 3.501986 -3.329764
C -2.072292 4.649821 -1.508753
H -2.699545 5.418496 -1.979553
H -1.039143 5.031674 -1.527072
C -2.493539 4.431331 -0.063154
H -2.432351 5.370145 0.503500
H -3.549038 4.118757 -0.041471
C -1.642183 3.362151 0.615052
H -2.008186 3.209562 1.637668
H -0.610634 3.725505 0.702221
C -3.400839 -0.533740 -1.227336

C -4.585955 -0.164034 -0.570408
C -3.374565 -0.311446 -2.611940
C -5.662978 0.415671 -1.240711
H -4.680693 -0.322666 0.505822
C -4.442356 0.266868 -3.296738
H -2.489508 -0.588708 -3.185578
C -5.593887 0.641226 -2.611411
H -6.560691 0.692874 -0.687695
H -4.372820 0.428420 -4.372672
H -6.429464 1.096801 -3.140439
C -2.734599 -3.381741 0.611431
H -0.633230 -1.932515 0.779500
H -3.593150 -2.954818 1.138223
C -2.776278 -3.385287 -0.756709
H -2.027721 -3.945672 -1.319290
C -1.818683 -4.229711 1.439110
H -1.498484 -3.714317 2.350490
H -2.346536 -5.145706 1.743781
H -0.924002 -4.517437 0.876074
H -3.647164 -3.034278 -1.301933
C 1.464205 2.104176 0.745479
C 1.533632 2.431452 2.109619
C 1.852951 3.113164 -0.153023
C 1.922201 3.692258 2.549088
H 1.267674 1.677530 2.844768
C 2.261765 4.369759 0.276916
H 1.805466 2.914669 -1.218998
C 2.285620 4.673192 1.634108
H 1.945706 3.905044 3.616610
H 2.544391 5.122550 -0.457296
H 2.588604 5.661519 1.974278

TS_{XIII→XIV}^a (CCW)

E = -2610.62904606
Pd -1.881780 -1.135862 0.760300
P 2.021960 -0.638164 -0.024698
P -0.737024 0.797084 0.236492

C 1.011635 0.761697 -0.115655
C 3.454621 -0.391779 -1.178988
H 3.633102 0.689640 -1.088739
C 4.782384 -1.080636 -0.851770
H 4.674419 -2.171615 -0.935890
H 5.098384 -0.872327 0.174926
C 5.872077 -0.592527 -1.804135
H 6.048644 0.476486 -1.610712
H 6.815572 -1.107401 -1.581355
C 5.497595 -0.777661 -3.267394
H 5.443302 -1.853678 -3.493658
H 6.280793 -0.363893 -3.915415
C 4.150377 -0.140729 -3.576670
H 3.865180 -0.328798 -4.619671
H 4.218682 0.951795 -3.458600
C 3.082234 -0.676955 -2.635336
H 2.092072 -0.270171 -2.872877
H 3.011358 -1.765306 -2.773117
C 1.166010 -2.228428 -0.378005
H 0.440055 -2.278760 0.450942
C 2.086910 -3.446319 -0.282015
H 2.696757 -3.422739 0.628499
H 2.786429 -3.444316 -1.131728
C 1.261471 -4.727161 -0.319915
H 1.921035 -5.601832 -0.249235
H 0.610123 -4.753329 0.567632
C 0.409728 -4.799198 -1.578360
H 1.074475 -4.882281 -2.452306
H -0.206859 -5.707373 -1.572310
C -0.464588 -3.563375 -1.733965
H -1.227408 -3.533732 -0.942762
H -1.011456 -3.607187 -2.684095
C 0.349241 -2.277366 -1.670295
H 1.010240 -2.237716 -2.542261
H -0.310853 -1.406016 -1.725057
C 2.875929 -0.930956 1.602337
H 3.667316 -1.668721 1.405583

C 3.526520 0.375548 2.057811
H 4.191618 0.777143 1.281135
H 2.734597 1.123671 2.182411
C 4.274101 0.208016 3.372855
H 4.705045 1.169062 3.681867
H 5.120148 -0.481897 3.228683
C 3.354765 -0.341536 4.453716
H 3.902673 -0.476464 5.395189
H 2.558910 0.392404 4.656028
C 2.721735 -1.652248 4.010492
H 2.038765 -2.030743 4.782121
H 3.510250 -2.412096 3.892889
C 1.971100 -1.495037 2.693758
H 1.116464 -0.823251 2.831217
H 1.547992 -2.459728 2.386839
C -1.066848 1.906664 1.699228
H -0.684127 2.895464 1.409072
C -2.565040 2.035561 1.969398
H -2.946938 1.042318 2.254593
H -3.109843 2.323310 1.061998
C -2.833956 3.033978 3.088895
H -2.514941 4.035271 2.760157
H -3.912409 3.100979 3.284177
C -2.085950 2.660717 4.361560
H -2.491381 1.713497 4.749564
H -2.253801 3.414147 5.142389
C -0.596535 2.485282 4.096316
H -0.159348 3.456628 3.815623
H -0.078962 2.163772 5.010511
C -0.356555 1.481860 2.976160
H 0.716313 1.351821 2.790638
H -0.735824 0.494731 3.276519
C -1.556284 1.767704 -1.135122
H -2.620260 1.543441 -0.971947
C -1.192369 1.171223 -2.490662
H -0.118821 1.308993 -2.671186
H -1.376361 0.093033 -2.471937

C -1.996413 1.806872 -3.615173
H -3.057653 1.549076 -3.478523
H -1.693085 1.381008 -4.581282
C -1.834225 3.319226 -3.619937
H -2.433125 3.771141 -4.421861
H -0.782804 3.571765 -3.830654
C -2.223073 3.904745 -2.270555
H -2.096529 4.995714 -2.271203
H -3.292249 3.711776 -2.091968
C -1.408969 3.292004 -1.134766
H -1.753257 3.713714 -0.182745
H -0.357847 3.586056 -1.246611
C -3.401263 -0.866154 -0.663363
C -4.530151 -0.114411 -0.297375
C -3.406942 -1.378181 -1.968159
C -5.587505 0.124029 -1.174201
H -4.596995 0.304651 0.708832
C -4.456572 -1.150147 -2.857803
H -2.564724 -1.976038 -2.316721
C -5.554659 -0.391662 -2.466097
H -6.442239 0.715686 -0.845656
H -4.413438 -1.565656 -3.864830
H -6.375678 -0.207557 -3.157186
C -2.929543 -3.159012 1.304317
H -0.681525 -1.139276 1.815974
H -2.133313 -3.853309 1.021125
C -2.716185 -2.407002 2.429209
H -3.528227 -1.812561 2.852407
C -4.260351 -3.413609 0.677423
H -4.192277 -3.487702 -0.412234
H -4.653788 -4.367799 1.058249
H -4.977248 -2.620933 0.911078
H -1.852814 -2.570137 3.065776
C 1.636400 2.089668 -0.423497
C 1.776866 3.081635 0.561321
C 2.035853 2.449543 -1.722538
C 2.240186 4.358733 0.265066

H 1.507077 2.845985 1.586357
C 2.518633 3.716919 -2.025214
H 1.937073 1.723474 -2.522918
C 2.610508 4.687650 -1.033470
H 2.316579 5.099380 1.059443
H 2.805930 3.951220 -3.049029
H 2.971489 5.686805 -1.269392

$x_{III} \rightarrow x_{IV}^a$ (CCW)

E = -2610.63140208
Pd -1.919708 -1.097438 0.774935
P 2.050807 -0.640128 -0.006119
P -0.714053 0.797833 0.213051
C 1.036818 0.754518 -0.127151
C 3.470188 -0.431625 -1.181488
H 3.654957 0.651107 -1.127854
C 4.797485 -1.116778 -0.846210
H 4.681094 -2.209396 -0.885515
H 5.127630 -0.870000 0.167587
C 5.877253 -0.674470 -1.831376
H 6.065241 0.399575 -1.681549
H 6.819762 -1.188568 -1.602713
C 5.479984 -0.911755 -3.281081
H 5.411843 -1.995039 -3.465094
H 6.257841 -0.531316 -3.955428
C 4.134814 -0.273070 -3.596262
H 3.833940 -0.496402 -4.627845
H 4.215799 0.822314 -3.519800
C 3.074263 -0.763058 -2.621783
H 2.084925 -0.352792 -2.858648
H 2.988291 -1.854635 -2.720266
C 1.188623 -2.235384 -0.299289
H 0.476955 -2.252682 0.543310
C 2.104516 -3.455090 -0.179517
H 2.738852 -3.400382 0.712694
H 2.781170 -3.491559 -1.046772
C 1.270279 -4.730478 -0.143975

H 1.926056 -5.607046 -0.062283
H 0.647255 -4.718040 0.763864
C 0.375723 -4.842428 -1.369514
H 1.007262 -4.966954 -2.262923
H -0.250092 -5.742051 -1.305567
C -0.489759 -3.602595 -1.539603
H -1.201715 -3.527181 -0.705210
H -1.090116 -3.680142 -2.454790
C 0.343880 -2.328749 -1.569987
H 0.983742 -2.344625 -2.458918
H -0.303239 -1.449909 -1.654636
C 2.912586 -0.886870 1.623558
H 3.706694 -1.626624 1.446103
C 3.558873 0.433184 2.043831
H 4.226914 0.812184 1.258064
H 2.765447 1.183412 2.143329
C 4.299750 0.305528 3.367031
H 4.729775 1.275367 3.648703
H 5.145953 -0.389104 3.248768
C 3.373659 -0.210061 4.458897
H 3.915888 -0.315297 5.407465
H 2.576769 0.529646 4.633663
C 2.744538 -1.534625 4.053168
H 2.055634 -1.888797 4.830990
H 3.535200 -2.296597 3.967624
C 2.004684 -1.425238 2.725587
H 1.138462 -0.762793 2.831825
H 1.595766 -2.404187 2.447049
C -1.053710 1.930132 1.656658
H -0.667144 2.914949 1.357910
C -2.553652 2.065056 1.914670
H -2.941310 1.074678 2.202109
H -3.090517 2.348612 1.001123
C -2.828471 3.068704 3.027908
H -2.501996 4.067767 2.699684
H -3.908401 3.140827 3.213031
C -2.093553 2.695096 4.308169

H -2.504161 1.748621 4.692652
H -2.267742 3.449178 5.086993
C -0.602184 2.518059 4.056636
H -0.162642 3.489153 3.778611
H -0.092552 2.198075 4.975858
C -0.350661 1.513690 2.940177
H 0.724192 1.392062 2.761274
H -0.724338 0.523204 3.237010
C -1.521058 1.747422 -1.180749
H -2.586862 1.533839 -1.015051
C -1.157387 1.119476 -2.521962
H -0.082289 1.246703 -2.702265
H -1.346506 0.042518 -2.480328
C -1.954701 1.735146 -3.662374
H -3.017541 1.484449 -3.524463
H -1.649620 1.288568 -4.618548
C -1.786487 3.246633 -3.697895
H -2.381670 3.683781 -4.510690
H -0.733585 3.490339 -3.911500
C -2.175560 3.862339 -2.362051
H -2.044446 4.952489 -2.385967
H -3.245818 3.677666 -2.181180
C -1.365216 3.270329 -1.212706
H -1.707894 3.713328 -0.269806
H -0.312960 3.557226 -1.330471
C -3.454451 -0.790772 -0.616073
C -4.605150 -0.065701 -0.268356
C -3.445273 -1.341790 -1.905585
C -5.669696 0.115429 -1.151043
H -4.684143 0.380930 0.725358
C -4.501320 -1.172873 -2.799668
H -2.585831 -1.929044 -2.233549
C -5.621174 -0.435765 -2.427411
H -6.542156 0.690002 -0.839272
H -4.448338 -1.618075 -3.793409
H -6.447793 -0.296333 -3.122269
C -2.937060 -3.098172 1.466830

H -0.744952 -1.278168 1.865846
H -2.024669 -3.656707 1.692047
C -3.271126 -2.064810 2.294989
H -4.241579 -1.577631 2.189268
C -3.863457 -3.704856 0.465670
H -3.377367 -3.863282 -0.503366
H -4.196197 -4.687037 0.831359
H -4.740012 -3.072453 0.297117
H -2.694868 -1.844833 3.189896
C 1.662420 2.076680 -0.457287
C 1.791980 3.089532 0.507506
C 2.072292 2.409751 -1.760298
C 2.254930 4.361163 0.188461
H 1.514086 2.874455 1.534922
C 2.554742 3.671809 -2.085356
H 1.981863 1.666343 -2.545912
C 2.635713 4.663464 -1.113545
H 2.322842 5.118602 0.967619
H 2.850385 3.885293 -3.111345
H 2.996514 5.658260 -1.367467

TS_{XIII→XIV}^a (CCW)

E = -2610.62904724

Pd -1.944118 -1.151061 0.744465
P 2.044847 -0.602427 -0.045727
P -0.746420 0.772332 0.248647
C 1.004743 0.776798 -0.097413
C 3.484928 -0.285219 -1.173597
H 3.641510 0.795240 -1.040876
C 4.821538 -0.961699 -0.856016
H 4.735615 -2.050160 -0.986349
H 5.120262 -0.790395 0.182544
C 5.913916 -0.414457 -1.772607
H 6.066226 0.649123 -1.533918
H 6.864518 -0.919320 -1.557191
C 5.563108 -0.547759 -3.247343
H 5.535415 -1.614624 -3.517517

H 6.345659 -0.091402 -3.866950
C 4.206419 0.071984 -3.549760
H 3.938817 -0.081244 -4.603098
H 4.248286 1.160274 -3.388160
C 3.138207 -0.522993 -2.644679
H 2.143423 -0.128745 -2.881908
H 3.092481 -1.606806 -2.823652
C 1.213649 -2.184638 -0.469885
H 0.475899 -2.274064 0.345532
C 2.143299 -3.397999 -0.413390
H 2.737938 -3.409757 0.507509
H 2.856525 -3.352233 -1.250546
C 1.330073 -4.682543 -0.521468
H 1.995887 -5.554437 -0.481974
H 0.666814 -4.753667 0.354601
C 0.494528 -4.703189 -1.792859
H 1.168812 -4.744658 -2.662408
H -0.117736 -5.613776 -1.833571
C -0.385212 -3.466436 -1.900596
H -1.143807 -3.475843 -1.107596
H -0.932360 -3.471276 -2.851833
C 0.416524 -2.180285 -1.773967
H 1.087099 -2.095382 -2.634984
H -0.249618 -1.312310 -1.798140
C 2.885713 -0.946316 1.576868
H 3.688857 -1.665508 1.359302
C 3.512870 0.350140 2.090444
H 4.182720 0.789742 1.338762
H 2.709057 1.082280 2.232433
C 4.244765 0.143462 3.408621
H 4.659392 1.097594 3.758740
H 5.101261 -0.530474 3.251058
C 3.317525 -0.456707 4.455133
H 3.854275 -0.620474 5.398495
H 2.510277 0.259752 4.673998
C 2.707292 -1.757725 3.954698
H 2.017647 -2.172174 4.701487

H 3.507507 -2.502927 3.822766
C 1.974574 -1.564909 2.632581
H 1.103537 -0.916622 2.778596
H 1.574305 -2.525091 2.284529
C -1.085949 1.837306 1.744895
H -0.687427 2.830419 1.493006
C -2.584713 1.982249 2.004799
H -2.995697 0.984598 2.227036
H -3.108494 2.336118 1.108932
C -2.852221 2.923654 3.173139
H -2.514416 3.936010 2.902124
H -3.932132 2.996617 3.358083
C -2.125590 2.473559 4.432691
H -2.543478 1.509808 4.762730
H -2.297280 3.184172 5.251879
C -0.634933 2.301252 4.174316
H -0.189856 3.283059 3.947279
H -0.127954 1.931167 5.076045
C -0.388159 1.354177 3.007970
H 0.686238 1.237473 2.823073
H -0.765917 0.351533 3.255240
C -1.580137 1.774968 -1.087072
H -2.640525 1.559814 -0.895461
C -1.272175 1.191232 -2.461210
H -0.204510 1.323248 -2.684185
H -1.466103 0.113928 -2.445497
C -2.123570 1.842862 -3.541412
H -3.177197 1.580060 -3.360284
H -1.864045 1.430914 -4.526056
C -1.965393 3.355935 -3.533390
H -2.603185 3.815560 -4.300208
H -0.926420 3.614583 -3.792444
C -2.289740 3.925906 -2.160224
H -2.161728 5.016702 -2.154618
H -3.349720 3.731963 -1.933889
C -1.423525 3.297893 -1.072215
H -1.717782 3.708485 -0.098665

H -0.378748 3.590094 -1.231871
C -3.486435 -0.815880 -0.646859
C -4.597387 0.003918 -0.387061
C -3.475454 -1.446675 -1.899746
C -5.614187 0.204061 -1.319200
H -4.678789 0.513643 0.575154
C -4.488580 -1.263201 -2.841106
H -2.644302 -2.098990 -2.167001
C -5.564135 -0.428941 -2.557574
H -6.452521 0.856858 -1.075248
H -4.432519 -1.772183 -3.803523
H -6.355604 -0.276964 -3.289701
C -2.696293 -3.157164 1.715086
H -0.735011 -1.361884 1.783610
H -1.884661 -3.366631 2.411164
C -3.537634 -2.116621 1.991862
H -4.473660 -1.996396 1.450020
C -3.002883 -4.208295 0.696191
H -2.094885 -4.689032 0.318874
H -3.612389 -5.000371 1.155199
H -3.562567 -3.792833 -0.150057
H -3.404678 -1.519553 2.893548
C 1.608546 2.123065 -0.363678
C 1.751985 3.082448 0.652077
C 1.991019 2.527495 -1.654597
C 2.206686 4.370931 0.393177
H 1.493077 2.811108 1.671500
C 2.466918 3.805673 -1.919829
H 1.882823 1.827789 -2.476942
C 2.565166 4.743095 -0.896981
H 2.286842 5.086015 1.210289
H 2.742703 4.075456 -2.938067
H 2.920922 5.750760 -1.102824

TS_{XIII→XIV}^c (CW)

E = -2610.62840421

Pd -1.887699 -1.118876 0.769191

P 2.040495 -0.615874 -0.008952
P -0.740490 0.802915 0.227484
C 1.003877 0.762114 -0.141172
C 3.477760 -0.353311 -1.156499
H 3.622811 0.734512 -1.088543
C 4.824561 -0.991461 -0.803719
H 4.755429 -2.086744 -0.867372
H 5.123736 -0.752747 0.221429
C 5.906276 -0.485335 -1.755862
H 6.044218 0.592903 -1.583355
H 6.864512 -0.962869 -1.513613
C 5.552642 -0.713571 -3.218166
H 5.535792 -1.795356 -3.421773
H 6.328147 -0.287972 -3.867794
C 4.188599 -0.127608 -3.552599
H 3.919666 -0.345881 -4.594063
H 4.219890 0.968714 -3.455961
C 3.128464 -0.678089 -2.610544
H 2.130646 -0.303073 -2.865307
H 3.087882 -1.770286 -2.729250
C 1.236699 -2.238078 -0.344677
H 0.516245 -2.312494 0.485251
C 2.212354 -3.413072 -0.243853
H 2.806209 -3.364883 0.676258
H 2.924131 -3.371877 -1.081798
C 1.456568 -4.734820 -0.302687
H 2.160927 -5.573436 -0.227638
H 0.791333 -4.802591 0.572328
C 0.629665 -4.837538 -1.574845
H 1.308101 -4.861175 -2.441872
H 0.069393 -5.781295 -1.594014
C -0.316571 -3.654114 -1.708845
H -1.064239 -3.687127 -0.904911
H -0.873604 -3.714674 -2.652186
C 0.416874 -2.321328 -1.632882
H 1.065497 -2.228464 -2.509790
H -0.296158 -1.491281 -1.671056

C 2.890395 -0.865330 1.627977
H 3.701415 -1.584085 1.441204
C 3.508021 0.460093 2.073444
H 4.163363 0.871941 1.293860
H 2.698706 1.189952 2.191912
C 4.258078 0.319714 3.390314
H 4.665366 1.292864 3.693546
H 5.120792 -0.350332 3.251131
C 3.351585 -0.245186 4.474320
H 3.902225 -0.360347 5.416836
H 2.537978 0.470400 4.671703
C 2.750915 -1.574046 4.040024
H 2.076870 -1.963505 4.814024
H 3.557898 -2.315179 3.928254
C 1.997815 -1.444515 2.721680
H 1.124983 -0.795613 2.853696
H 1.601391 -2.422336 2.420140
C -1.062410 1.937682 1.674584
H -0.664825 2.918184 1.375871
C -2.559290 2.094991 1.936555
H -2.972432 1.104744 2.189511
H -3.082711 2.426079 1.031973
C -2.821502 3.075528 3.073949
H -2.490189 4.078651 2.763622
H -3.900388 3.150935 3.263722
C -2.083947 2.676958 4.344386
H -2.494337 1.724678 4.714404
H -2.253420 3.418114 5.136501
C -0.594626 2.501834 4.080910
H -0.155663 3.475249 3.810375
H -0.078276 2.170083 4.992186
C -0.356628 1.508196 2.952475
H 0.715853 1.379871 2.764712
H -0.735566 0.518482 3.245261
C -1.575951 1.734872 -1.151224
H -2.634510 1.542137 -0.931620
C -1.297316 1.062596 -2.490683

H -0.238497 1.193484 -2.752748
H -1.476703 -0.013786 -2.398487
C -2.189273 1.635215 -3.582514
H -3.232927 1.374274 -3.348900
H -1.958163 1.162793 -4.546765
C -2.043266 3.147257 -3.678026
H -2.713411 3.552596 -4.447907
H -1.017234 3.392865 -3.994894
C -2.317074 3.809221 -2.334879
H -2.189554 4.897627 -2.408708
H -3.368107 3.633598 -2.057522
C -1.413038 3.253933 -1.237590
H -1.673037 3.728360 -0.283182
H -0.373534 3.530171 -1.451374
C -3.422600 -0.895499 -0.649337
C -4.492733 0.002016 -0.500532
C -3.449663 -1.684884 -1.808687
C -5.517221 0.111093 -1.439634
H -4.539450 0.642950 0.381990
C -4.466011 -1.588566 -2.759194
H -2.650875 -2.404428 -1.989206
C -5.509395 -0.686728 -2.579558
H -6.326807 0.823446 -1.279106
H -4.441017 -2.222500 -3.645827
H -6.305653 -0.606070 -3.317846
C -4.698473 -2.758444 1.369823
H -5.280656 -1.844006 1.227611
H -4.609055 -3.251714 0.397015
H -5.261686 -3.415212 2.049294
C -2.226971 -3.190951 1.697524
H -2.237545 -3.930839 0.896323
H -0.658193 -1.161855 1.798205
C -3.362458 -2.483740 1.974622
H -3.360609 -1.860227 2.873426
H -1.390042 -3.223212 2.388088
C 1.611260 2.087069 -0.494188
C 1.769451 3.099786 0.465640

C 1.980749 2.417787 -1.809471
C 2.227820 4.369801 0.132471
H 1.520040 2.884885 1.500689
C 2.460085 3.677182 -2.148828
H 1.860393 1.674642 -2.591099
C 2.574511 4.668461 -1.179746
H 2.320267 5.128049 0.908319
H 2.725924 3.889645 -3.183149
H 2.933479 5.661166 -1.444329

TS_{XIII→XIV}^c (CCW)

E = -2610.63018580
Pd -1.935762 -1.272158 0.530478
P 2.040312 -0.578035 -0.097271
P -0.765578 0.720376 0.297190
C 0.994480 0.792826 0.008483
C 3.498840 -0.123181 -1.149725
H 3.653907 0.931505 -0.878597
C 4.828227 -0.839758 -0.897762
H 4.740815 -1.903132 -1.164059
H 5.109900 -0.800754 0.158896
C 5.936961 -0.187185 -1.720981
H 6.088904 0.836839 -1.347292
H 6.882360 -0.720201 -1.556584
C 5.609595 -0.130597 -3.206013
H 5.583396 -1.154313 -3.610069
H 6.403374 0.396994 -3.750175
C 4.259571 0.528890 -3.449017
H 4.009259 0.512297 -4.517502
H 4.301373 1.587603 -3.149423
C 3.175563 -0.172171 -2.644260
H 2.184583 0.251587 -2.844810
H 3.132302 -1.224519 -2.959856
C 1.217749 -2.093331 -0.729347
H 0.462368 -2.276782 0.054284
C 2.140137 -3.311182 -0.800201
H 2.721036 -3.434928 0.121279

H 2.866016 -3.172229 -1.616035
C 1.319275 -4.567753 -1.066624
H 1.978995 -5.443260 -1.124608
H 0.648393 -4.735882 -0.210734
C 0.492751 -4.436306 -2.337576
H 1.172918 -4.391444 -3.202431
H -0.129659 -5.329373 -2.481205
C -0.370734 -3.183213 -2.319195
H -1.142831 -3.264726 -1.541867
H -0.902400 -3.075960 -3.273048
C 0.449262 -1.932995 -2.040766
H 1.141329 -1.771046 -2.873575
H -0.199659 -1.054363 -1.985288
C 2.849154 -1.121806 1.486243
H 3.657647 -1.810135 1.199579
C 3.463284 0.098580 2.172574
H 4.150902 0.626775 1.497985
H 2.656415 0.809687 2.386920
C 4.164008 -0.274941 3.471001
H 4.570601 0.626156 3.948024
H 5.023795 -0.926356 3.249633
C 3.212540 -0.999080 4.412273
H 3.726827 -1.280637 5.340202
H 2.399922 -0.313393 4.699194
C 2.614234 -2.225236 3.738741
H 1.907022 -2.727962 4.411222
H 3.416814 -2.950684 3.532319
C 1.912967 -1.863803 2.435284
H 1.041859 -1.232435 2.643039
H 1.516261 -2.769721 1.960510
C -1.160878 1.591225 1.901166
H -0.783728 2.616186 1.776065
C -2.667248 1.667014 2.144944
H -3.043731 0.640973 2.276248
H -3.193728 2.074778 1.273570
C -2.977204 2.489740 3.389501
H -2.657034 3.529803 3.221572

H -4.061358 2.522845 3.560575
C -2.262853 1.934134 4.614008
H -2.671407 0.937934 4.844211
H -2.459160 2.561600 5.493391
C -0.764840 1.806403 4.370110
H -0.328834 2.811112 4.251496
H -0.271262 1.354257 5.241327
C -0.480250 0.984921 3.119623
H 0.599245 0.898584 2.948181
H -0.851319 -0.041198 3.254783
C -1.577716 1.876520 -0.930830
H -2.639765 1.608336 -0.832020
C -1.170035 1.507902 -2.353333
H -0.090521 1.665409 -2.475353
H -1.355721 0.442002 -2.514484
C -1.937734 2.315874 -3.389711
H -3.000252 2.033246 -3.339558
H -1.592213 2.054515 -4.399194
C -1.796994 3.809902 -3.142833
H -2.370563 4.380967 -3.885035
H -0.742011 4.102560 -3.265757
C -2.248036 4.162125 -1.733597
H -2.143319 5.240054 -1.551194
H -3.319067 3.927930 -1.631725
C -1.463478 3.383709 -0.682054
H -1.850229 3.640380 0.311294
H -0.415867 3.708448 -0.703977
C -3.449247 -0.787926 -0.845278
C -4.610935 -0.153223 -0.375384
C -3.418493 -1.072246 -2.217734
C -5.659272 0.207670 -1.220770
H -4.708562 0.078053 0.687944
C -4.460192 -0.721225 -3.075651
H -2.553080 -1.579018 -2.644949
C -5.585714 -0.069379 -2.582098
H -6.538200 0.707458 -0.813188
H -4.389671 -0.955886 -4.137944

H -6.399063 0.212160 -3.248971
C -2.531327 -4.426913 0.576722
H -2.374759 -4.556977 -0.498694
H -1.560108 -4.477554 1.083224
H -3.135804 -5.282240 0.912489
C -3.062468 -2.452704 2.051128
H -2.371046 -2.801867 2.814752
H -0.775228 -1.548043 1.598473
C -3.246982 -3.151340 0.887186
H -4.114195 -2.913431 0.273030
H -3.774738 -1.683866 2.351925
C 1.591456 2.166255 -0.062133
C 1.690706 2.988058 1.072894
C 2.009000 2.738561 -1.276588
C 2.132993 4.304230 0.997162
H 1.405146 2.584892 2.039902
C 2.470740 4.046468 -1.359704
H 1.942116 2.149876 -2.185806
C 2.522429 4.845285 -0.222339
H 2.177912 4.907912 1.902144
H 2.773512 4.448380 -2.325339
H 2.867153 5.875573 -0.285346

xiii→*xiv*^c (CCW)

E = -2610.63173619
Pd -1.907500 -1.240676 0.664566
P 2.026290 -0.510851 -0.086955
P -0.802233 0.757419 0.296228
C 0.939166 0.832309 -0.072850
C 3.431666 -0.090570 -1.225736
H 3.537372 0.990745 -1.056051
C 4.807496 -0.704302 -0.950800
H 4.780453 -1.791361 -1.110380
H 5.113500 -0.545266 0.087730
C 5.852624 -0.073625 -1.868297
H 5.953905 0.989475 -1.601985
H 6.831984 -0.533872 -1.684098

C 5.480787 -0.184027 -3.339708
H 5.496319 -1.243513 -3.638585
H 6.229791 0.324049 -3.960491
C 4.092417 0.382039 -3.600482
H 3.813461 0.250782 -4.653833
H 4.089582 1.465428 -3.404239
C 3.066086 -0.287476 -2.698776
H 2.053351 0.080953 -2.900208
H 3.052863 -1.364011 -2.921349
C 1.278762 -2.128810 -0.554521
H 0.597223 -2.326439 0.289356
C 2.328176 -3.243360 -0.613923
H 2.946648 -3.259207 0.291133
H 3.007902 -3.053998 -1.457455
C 1.671098 -4.603109 -0.811671
H 2.441736 -5.381830 -0.879783
H 1.069770 -4.841536 0.077618
C 0.783972 -4.617166 -2.046641
H 1.415083 -4.499082 -2.941154
H 0.282897 -5.588538 -2.147819
C -0.238480 -3.490892 -2.009341
H -0.952293 -3.656309 -1.188671
H -0.829274 -3.488709 -2.933653
C 0.417807 -2.129473 -1.817823
H 1.027230 -1.904960 -2.699476
H -0.344911 -1.347117 -1.748079
C 2.907003 -0.875912 1.510803
H 3.747668 -1.537545 1.256873
C 3.468752 0.430538 2.071566
H 4.104151 0.936054 1.331264
H 2.629153 1.111625 2.252137
C 4.225470 0.209896 3.373188
H 4.593846 1.169621 3.757982
H 5.113913 -0.411790 3.181393
C 3.340863 -0.478666 4.402068
H 3.894379 -0.650941 5.334159
H 2.499663 0.185265 4.655449

C 2.795324 -1.790018 3.855748
H 2.135247 -2.268832 4.590659
H 3.633112 -2.485650 3.690549
C 2.042606 -1.589586 2.545871
H 1.132269 -1.004356 2.719381
H 1.703263 -2.560152 2.162376
C -1.175507 1.732419 1.844638
H -0.831028 2.756204 1.640504
C -2.678962 1.784420 2.115508
H -3.036517 0.754932 2.279888
H -3.222494 2.164121 1.242213
C -2.990822 2.643240 3.335422
H -2.711331 3.686195 3.119639
H -4.072007 2.645702 3.527154
C -2.232592 2.166683 4.566139
H -2.593352 1.164344 4.844144
H -2.438881 2.821205 5.423228
C -0.736306 2.093562 4.293624
H -0.349042 3.109660 4.117153
H -0.203255 1.705944 5.172657
C -0.445210 1.223412 3.078633
H 0.632660 1.174759 2.884410
H -0.767004 0.190714 3.274101
C -1.688240 1.780884 -0.984187
H -2.734863 1.509084 -0.790333
C -1.376804 1.273814 -2.387284
H -0.331015 1.501429 -2.634836
H -1.484427 0.184660 -2.413212
C -2.312802 1.903397 -3.408785
H -3.337168 1.559242 -3.197235
H -2.066718 1.548234 -4.418611
C -2.253983 3.423245 -3.346773
H -2.955105 3.866888 -4.066298
H -1.247327 3.758470 -3.642877
C -2.548139 3.926064 -1.940640
H -2.477870 5.021423 -1.900797
H -3.585794 3.667672 -1.678090

C -1.606282 3.307268 -0.911375
H -1.881316 3.666330 0.087925
H -0.583913 3.657171 -1.099468
C -3.419853 -0.956759 -0.772619
C -4.563872 -0.190779 -0.493500
C -3.398913 -1.584777 -2.026343
C -5.607437 -0.042351 -1.406247
H -4.649137 0.319413 0.468879
C -4.434550 -1.449125 -2.950540
H -2.542018 -2.197587 -2.306087
C -5.546424 -0.671189 -2.645860
H -6.472924 0.567745 -1.147042
H -4.370339 -1.952785 -3.915277
H -6.357105 -0.558768 -3.364002
C -1.659714 -4.242343 1.691480
H -0.808472 -4.323977 1.007800
H -1.287125 -3.875863 2.653688
H -2.060454 -5.257262 1.828103
C -3.382988 -2.410898 1.897136
H -3.116016 -2.253324 2.941864
H -0.767639 -1.435508 1.783916
C -2.723115 -3.343449 1.148721
H -3.132409 -3.590840 0.165754
H -4.306223 -1.959828 1.539481
C 1.487186 2.211417 -0.288602
C 1.595070 3.132015 0.766497
C 1.840775 2.687558 -1.563140
C 1.990688 4.449293 0.561475
H 1.355729 2.806061 1.774512
C 2.258297 3.995993 -1.774995
H 1.756488 2.020202 -2.414775
C 2.323304 4.891965 -0.713178
H 2.045028 5.131333 1.408398
H 2.513807 4.321354 -2.782214
H 2.633103 5.922189 -0.877397

TS_{XIII→XIV}^c (CCW)

E = -2610.62939784

Pd -1.874061 -1.417946 0.297808

P 2.017224 -0.425435 -0.228763

P -0.846772 0.640312 0.444788

C 0.892430 0.844075 0.107580

C 3.416004 0.301318 -1.211408

H 3.495463 1.308066 -0.776224

C 4.804137 -0.333410 -1.087568

H 4.799937 -1.344880 -1.518262

H 5.104091 -0.437006 -0.040383

C 5.838784 0.530970 -1.804871

H 5.914717 1.492900 -1.275449

H 6.827469 0.059417 -1.733686

C 5.477075 0.791720 -3.259690

H 5.522270 -0.155272 -3.819307

H 6.215484 1.459824 -3.721137

C 4.075222 1.370970 -3.383411

H 3.804281 1.503501 -4.438694

H 4.041694 2.368925 -2.919510

C 3.064542 0.468578 -2.691442

H 2.041842 0.844962 -2.809781

H 3.088848 -0.518557 -3.174937

C 1.309101 -1.887688 -1.095157

H 0.607934 -2.283203 -0.342312

C 2.354708 -2.965168 -1.392241

H 2.964120 -3.189794 -0.509185

H 3.045137 -2.602936 -2.168539

C 1.675382 -4.235277 -1.888902

H 2.427644 -5.006820 -2.098124

H 1.033605 -4.631353 -1.086363

C 0.829570 -3.959456 -3.122212

H 1.490953 -3.654647 -3.948101

H 0.322635 -4.875039 -3.453287

C -0.183862 -2.856004 -2.858004

H -0.916383 -3.196823 -2.113244

H -0.752105 -2.633298 -3.769726

C 0.474738 -1.584342 -2.339897
H 1.103672 -1.166448 -3.132656
H -0.284109 -0.831845 -2.101513
C 2.908901 -1.156790 1.232040
H 3.762676 -1.713067 0.818690
C 3.443054 -0.021402 2.105064
H 4.060270 0.671697 1.517133
H 2.588751 0.570167 2.453894
C 4.215427 -0.546809 3.306471
H 4.561957 0.292303 3.923404
H 5.118154 -1.074158 2.960676
C 3.358723 -1.499908 4.127255
H 3.924955 -1.887933 4.983764
H 2.501913 -0.946607 4.542615
C 2.843905 -2.643132 3.265286
H 2.204164 -3.313063 3.854421
H 3.698035 -3.248795 2.923807
C 2.072603 -2.131913 2.054800
H 1.152793 -1.632847 2.380004
H 1.752221 -2.978817 1.435773
C -1.228349 1.178792 2.190482
H -0.907401 2.228396 2.253532
C -2.728875 1.122838 2.472407
H -3.059320 0.076302 2.370245
H -3.291018 1.697614 1.726900
C -3.045956 1.634802 3.872735
H -2.793395 2.705124 3.927471
H -4.124521 1.561074 4.064871
C -2.262898 0.881240 4.938916
H -2.598807 -0.167096 4.957022
H -2.473609 1.293221 5.934598
C -0.768675 0.914259 4.648359
H -0.403982 1.950264 4.732893
H -0.217481 0.328299 5.396695
C -0.475688 0.388038 3.250323
H 0.600276 0.410475 3.041847
H -0.778525 -0.666672 3.180060

C -1.758025 1.935719 -0.535254
H -2.798424 1.601760 -0.420979
C -1.434483 1.803828 -2.018876
H -0.390979 2.098769 -2.192874
H -1.525971 0.754500 -2.317910
C -2.373804 2.658677 -2.856816
H -3.394384 2.260597 -2.747533
H -2.116966 2.573044 -3.921312
C -2.337917 4.113584 -2.411650
H -3.038900 4.716732 -3.004024
H -1.333620 4.525499 -2.599279
C -2.654042 4.238071 -0.927945
H -2.605815 5.288391 -0.610397
H -3.688551 3.903771 -0.753658
C -1.708392 3.394875 -0.076886
H -1.999696 3.481766 0.977179
H -0.692536 3.800634 -0.156058
C -3.439676 -0.796271 -0.965316
C -4.596684 -0.151036 -0.498715
C -3.402538 -1.064433 -2.341435
C -5.636279 0.224563 -1.348140
H -4.698400 0.072964 0.564668
C -4.435785 -0.698260 -3.204067
H -2.535051 -1.568256 -2.768287
C -5.560288 -0.045397 -2.711226
H -6.512825 0.729379 -0.941511
H -4.358527 -0.922350 -4.268175
H -6.369141 0.245935 -3.379398
C -1.221907 -4.365922 1.479507
H -0.175907 -4.276529 1.167967
H -1.318257 -3.928349 2.478191
H -1.455120 -5.439305 1.543439
C -3.317909 -3.079502 0.822245
H -3.575633 -2.893648 1.866445
H -0.635307 -1.752631 1.255946
C -2.149823 -3.714188 0.501654
H -2.026718 -4.021517 -0.539841

H -4.105420 -2.938489 0.088615
C 1.407852 2.246385 0.239253
C 1.505725 2.878367 1.489687
C 1.742546 3.030745 -0.878228
C 1.874681 4.213098 1.616939
H 1.280125 2.307183 2.385665
C 2.132423 4.359211 -0.760031
H 1.666259 2.593581 -1.868614
C 2.188457 4.964794 0.490858
H 1.922680 4.664873 2.606385
H 2.373953 4.929560 -1.655564
H 2.477066 6.009708 0.586659

XIV^a

E = -2610.63697637
Pd 1.874902 1.434240 0.451761
P -2.009518 0.427527 -0.173482
P 0.872620 -0.650790 0.390576
C -0.869356 -0.850375 0.055997
C -3.385093 -0.217921 -1.240277
H -3.454826 -1.262631 -0.904453
C -4.784263 0.381336 -1.073912
H -4.791039 1.431489 -1.398190
H -5.098279 0.371806 -0.025605
C -5.795348 -0.418742 -1.892068
H -5.864007 -1.431556 -1.466783
H -6.792074 0.029192 -1.788196
C -5.408134 -0.521533 -3.360035
H -5.454822 0.478648 -3.817753
H -6.131623 -1.144276 -3.901564
C -3.998400 -1.072277 -3.519836
H -3.709850 -1.093689 -4.578530
H -3.963268 -2.112403 -3.160582
C -3.007134 -0.237028 -2.723039
H -1.978940 -0.593723 -2.857559
H -3.029341 0.792422 -3.107761
C -1.323920 1.982414 -0.883812

H -0.660623 2.341620 -0.080834
C -2.406946 3.037390 -1.125548
H -3.053838 3.157833 -0.248218
H -3.054064 2.709862 -1.952227
C -1.776866 4.375843 -1.488568
H -2.562603 5.116250 -1.687382
H -1.212963 4.746026 -0.620891
C -0.848507 4.248656 -2.687462
H -1.448901 4.005549 -3.577916
H -0.361968 5.210070 -2.897230
C 0.193295 3.157349 -2.483756
H 0.891795 3.436707 -1.679884
H 0.799727 3.046726 -3.391144
C -0.444844 1.822079 -2.123879
H -1.040118 1.472445 -2.974340
H 0.326435 1.068236 -1.937437
C -2.923190 0.998629 1.344452
H -3.786280 1.577921 0.986457
C -3.438000 -0.224666 2.102248
H -4.050119 -0.862248 1.449357
H -2.574800 -0.837701 2.386287
C -4.210434 0.166974 3.353727
H -4.542243 -0.734671 3.884465
H -5.121946 0.714322 3.067257
C -3.361054 1.043806 4.262139
H -3.926240 1.335289 5.156741
H -2.493661 0.463986 4.614429
C -2.869057 2.276088 3.517433
H -2.235230 2.892863 4.167832
H -3.734566 2.899829 3.244290
C -2.100100 1.903837 2.255508
H -1.166134 1.394635 2.522621
H -1.807920 2.815403 1.719376
C 1.269938 -1.358119 2.070363
H 0.964448 -2.413066 2.026610
C 2.770172 -1.311966 2.355775
H 3.083395 -0.255952 2.385822

H 3.340943 -1.778718 1.543921
C 3.094335 -1.985851 3.684007
H 2.851755 -3.057359 3.610255
H 4.172127 -1.925306 3.884840
C 2.304958 -1.370447 4.831596
H 2.634754 -0.329875 4.974964
H 2.517775 -1.896804 5.771361
C 0.810378 -1.376196 4.539557
H 0.449913 -2.416519 4.503765
H 0.257986 -0.883317 5.351394
C 0.512708 -0.694192 3.211212
H -0.563833 -0.695690 3.003234
H 0.812133 0.362506 3.263355
C 1.779049 -1.843329 -0.723695
H 2.819158 -1.504471 -0.620724
C 1.391848 -1.599911 -2.178684
H 0.335968 -1.861925 -2.322738
H 1.488852 -0.533368 -2.405436
C 2.264464 -2.407191 -3.128796
H 3.298635 -2.037693 -3.057236
H 1.944655 -2.240578 -4.166416
C 2.227083 -3.889105 -2.786214
H 2.873496 -4.460175 -3.465945
H 1.203435 -4.270305 -2.929881
C 2.641467 -4.117093 -1.340232
H 2.607073 -5.186360 -1.091743
H 3.687488 -3.797478 -1.213595
C 1.758705 -3.333877 -0.373087
H 2.120286 -3.494872 0.649731
H 0.739587 -3.736900 -0.411825
C 3.410004 0.938323 -0.899482
C 4.573215 0.288095 -0.458780
C 3.355838 1.245772 -2.264968
C 5.601805 -0.067420 -1.329710
H 4.687482 0.042467 0.598323
C 4.378134 0.899540 -3.147655
H 2.487432 1.767871 -2.665115

C 5.507457 0.232606 -2.685022
H 6.483948 -0.579611 -0.945338
H 4.289234 1.151947 -4.204390
H 6.307509 -0.042919 -3.370191
C 2.136097 3.406814 1.505765
H 0.657713 1.619633 1.470288
H 2.288180 3.108299 2.544056
C 3.173764 3.202053 0.617097
H 3.185396 3.703678 -0.350852
C 1.051520 4.417297 1.277727
H 0.096034 4.108350 1.713790
H 1.334206 5.373534 1.741463
H 0.900052 4.602328 0.209412
H 4.123271 2.783444 0.942085
C -1.368527 -2.265354 0.071242
C -1.437400 -3.006666 1.262321
C -1.710719 -2.955944 -1.104716
C -1.778565 -4.354653 1.277516
H -1.208627 -2.513362 2.202162
C -2.072247 -4.297727 -1.098247
H -1.662820 -2.433191 -2.054387
C -2.094206 -5.012332 0.094653
H -1.802274 -4.891396 2.224482
H -2.318607 -4.791353 -2.037001
H -2.359396 -6.067741 0.102307

XIV^c

E = -2610.63765911
Pd -1.822825 1.448513 0.181794
P 2.016227 0.361170 0.298170
P -0.867871 -0.518237 -0.533063
C 0.881455 -0.789640 -0.320074
C 3.431265 -0.585109 1.034724
H 3.499936 -1.453344 0.363670
C 4.818836 0.061249 1.047987
H 4.823788 0.940604 1.707415
H 5.103220 0.411480 0.050585

C 5.859833 -0.949046 1.525494
H 5.927486 -1.757163 0.781394
H 6.848793 -0.473850 1.557652
C 5.513430 -1.549100 2.880432
H 5.563812 -0.761981 3.648505
H 6.257233 -2.305227 3.162467
C 4.113466 -2.146424 2.877473
H 3.855066 -2.528878 3.873221
H 4.077101 -3.004749 2.188933
C 3.094307 -1.108046 2.433057
H 2.071849 -1.503915 2.464576
H 3.121459 -0.267586 3.140872
C 1.358506 1.569166 1.523774
H 0.666753 2.160373 0.905505
C 2.435786 2.514687 2.060952
H 3.061801 2.914813 1.254881
H 3.105548 1.963278 2.736979
C 1.790056 3.661544 2.828677
H 2.564018 4.334048 3.220814
H 1.182350 4.257871 2.130154
C 0.906093 3.145607 3.953607
H 1.538149 2.645881 4.704048
H 0.415407 3.981280 4.468966
C -0.129424 2.157723 3.435749
H -0.832468 2.674001 2.763811
H -0.727929 1.763804 4.266470
C 0.514895 1.008834 2.668468
H 1.134480 0.423068 3.356741
H -0.251871 0.336003 2.270185
C 2.868016 1.444720 -0.955009
H 3.739625 1.874583 -0.441002
C 3.368998 0.574783 -2.107410
H 3.999914 -0.243991 -1.734563
H 2.502570 0.089330 -2.571341
C 4.109402 1.394319 -3.155160
H 4.430490 0.743970 -3.978965
H 5.026289 1.813644 -2.712486

C 3.237430 2.528286 -3.673757
H 3.781310 3.124602 -4.417590
H 2.363337 2.102835 -4.191320
C 2.758990 3.409433 -2.529369
H 2.109367 4.210993 -2.904742
H 3.627780 3.903807 -2.067242
C 2.016695 2.601647 -1.471533
H 1.088212 2.202712 -1.896123
H 1.715901 3.259598 -0.646048
C -1.312791 -0.579511 -2.343735
H -1.007050 -1.574428 -2.697509
C -2.820511 -0.439759 -2.547485
H -3.125041 0.548094 -2.165516
H -3.370710 -1.180251 -1.954627
C -3.191298 -0.561349 -4.020812
H -2.954131 -1.579037 -4.367667
H -4.274577 -0.435256 -4.148026
C -2.434903 0.448151 -4.873530
H -2.759100 1.463862 -4.597654
H -2.682907 0.319227 -5.935260
C -0.932075 0.336375 -4.654505
H -0.580301 -0.639034 -5.025955
H -0.400162 1.101570 -5.236468
C -0.589436 0.468024 -3.177518
H 0.492851 0.397551 -3.018154
H -0.887940 1.465193 -2.821013
C -1.748084 -2.025164 0.119601
H -2.790758 -1.678093 0.159535
C -1.328733 -2.289839 1.561687
H -0.271433 -2.583461 1.583829
H -1.413776 -1.363112 2.138809
C -2.186470 -3.374873 2.196073
H -3.220338 -3.005597 2.273522
H -1.847330 -3.571959 3.222120
C -2.159926 -4.651402 1.367892
H -2.798161 -5.420768 1.822537
H -1.135800 -5.057250 1.358363

C -2.596067 -4.376888 -0.063951
H -2.564108 -5.298249 -0.660875
H -3.644217 -4.039849 -0.060364
C -1.729363 -3.305563 -0.718961
H -2.103446 -3.110095 -1.731485
H -0.707465 -3.688714 -0.830665
C -3.391543 0.549418 1.249061
C -4.573039 0.127459 0.620663
C -3.317657 0.333310 2.631972
C -5.601128 -0.504215 1.319150
H -4.704667 0.288274 -0.450095
C -4.338134 -0.295382 3.343871
H -2.432239 0.656582 3.180571
C -5.486517 -0.726128 2.687715
H -6.499021 -0.822858 0.789410
H -4.233192 -0.451505 4.417635
H -6.285683 -1.220918 3.237279
C -2.005741 4.107197 -1.462578
H -1.071644 3.963814 -2.016788
H -2.794047 3.546907 -1.978845
H -2.264897 5.174964 -1.510649
C -2.943999 3.250656 0.739687
H -3.937395 3.144994 0.305196
H -0.561127 1.904188 -0.676299
C -1.874755 3.671809 -0.030234
H -0.985284 4.032569 0.492341
H -2.906725 3.284124 1.826535
C 1.393217 -2.104465 -0.829072
C 1.436312 -2.388056 -2.204098
C 1.771221 -3.151147 0.029910
C 1.790495 -3.641589 -2.690628
H 1.176951 -1.604075 -2.909730
C 2.145428 -4.401599 -0.447048
H 1.742685 -2.987892 1.102489
C 2.144166 -4.660154 -1.813653
H 1.794624 -3.819191 -3.764800
H 2.420832 -5.184451 0.257861

H 2.420335 -5.643023 -2.190462

TS_{xIV→xV}^a

E = -2610.63184347

Pd -1.940853 -1.465990 0.229165

P 2.027123 -0.403125 -0.214007

P -0.852922 0.605402 0.440159

C 0.897351 0.845063 0.165477

C 3.415342 0.340361 -1.191894

H 3.495151 1.338407 -0.736874

C 4.806037 -0.290833 -1.087032

H 4.804174 -1.297025 -1.529090

H 5.111452 -0.404746 -0.042041

C 5.830795 0.585948 -1.803308

H 5.908544 1.542319 -1.264211

H 6.821926 0.117457 -1.747935

C 5.452478 0.861273 -3.251468

H 5.490323 -0.080238 -3.820850

H 6.186322 1.533076 -3.714760

C 4.050154 1.444082 -3.354183

H 3.769089 1.590788 -4.404888

H 4.024691 2.436421 -2.877907

C 3.044166 0.535123 -2.663721

H 2.020633 0.918329 -2.758895

H 3.055389 -0.443026 -3.165472

C 1.323937 -1.862929 -1.089799

H 0.649805 -2.294925 -0.332569

C 2.402014 -2.896254 -1.432635

H 3.043931 -3.112201 -0.570458

H 3.055774 -2.484844 -2.215267

C 1.773688 -4.186108 -1.943025

H 2.561007 -4.901440 -2.214232

H 1.202873 -4.648879 -1.125861

C 0.855255 -3.927783 -3.127661

H 1.462524 -3.591205 -3.982267

H 0.367710 -4.859114 -3.443639

C -0.184704 -2.861900 -2.811544

H -0.884531 -3.224565 -2.041872
H -0.790497 -2.655755 -3.702350
C 0.456323 -1.572488 -2.313475
H 1.060263 -1.139811 -3.118812
H -0.313306 -0.838764 -2.056246
C 2.909469 -1.161661 1.241347
H 3.774820 -1.711561 0.844827
C 3.412596 -0.041921 2.151147
H 4.081897 0.635121 1.602366
H 2.552220 0.569494 2.446094
C 4.093357 -0.580288 3.401147
H 4.418228 0.254095 4.035877
H 5.003553 -1.132078 3.119389
C 3.159229 -1.506399 4.165695
H 3.650527 -1.895310 5.066768
H 2.283395 -0.933236 4.507816
C 2.694435 -2.649930 3.277309
H 2.002113 -3.306462 3.820636
H 3.563920 -3.269895 3.008745
C 2.027648 -2.146212 2.003193
H 1.074185 -1.658207 2.243872
H 1.781403 -3.000819 1.361889
C -1.279982 1.112465 2.186929
H -0.968420 2.161127 2.291203
C -2.787286 1.037687 2.426168
H -3.105998 -0.008329 2.289587
H -3.334046 1.623741 1.677756
C -3.147883 1.506928 3.830478
H -2.897114 2.574581 3.928284
H -4.231621 1.427307 3.987889
C -2.396955 0.716117 4.892842
H -2.732716 -0.332131 4.863045
H -2.637471 1.091595 5.896157
C -0.894778 0.760020 4.649759
H -0.534939 1.792214 4.784828
H -0.365412 0.146805 5.392081
C -0.552954 0.291464 3.241828

H 0.529657 0.331290 3.073489
H -0.842998 -0.763854 3.124351
C -1.733857 1.930430 -0.536967
H -2.777762 1.589640 -0.491986
C -1.323581 1.858943 -2.004109
H -0.264439 2.131881 -2.098456
H -1.419174 0.827202 -2.357373
C -2.179328 2.776205 -2.865570
H -3.215195 2.404650 -2.853083
H -1.844409 2.732067 -3.910880
C -2.144150 4.207339 -2.350327
H -2.780385 4.856475 -2.966697
H -1.118030 4.599444 -2.434852
C -2.576921 4.265787 -0.892777
H -2.541780 5.298386 -0.520137
H -3.625680 3.938931 -0.817731
C -1.709169 3.369205 -0.014728
H -2.078702 3.412837 1.017023
H -0.687167 3.766655 0.001805
C -3.412455 -0.785129 -1.067925
C -4.580971 -0.187191 -0.570045
C -3.335182 -0.923670 -2.459986
C -5.591932 0.279041 -1.408614
H -4.712972 -0.071414 0.506497
C -4.340636 -0.465240 -3.310157
H -2.461915 -1.396913 -2.906776
C -5.475100 0.147113 -2.788666
H -6.478608 0.745509 -0.979152
H -4.234068 -0.586772 -4.388183
H -6.261603 0.509994 -3.448367
C -1.998896 -3.464532 1.244210
H -0.916192 -2.125306 1.305306
H -2.197913 -3.319543 2.307788
C -3.079539 -3.249884 0.362659
H -3.089122 -3.752545 -0.605382
C -0.961252 -4.511824 0.942671
H -0.014059 -4.330046 1.460788

H -1.335088 -5.495434 1.257749
H -0.762562 -4.563862 -0.132579
H -4.054108 -2.955092 0.747220
C 1.405518 2.241994 0.362286
C 1.448965 2.835890 1.634629
C 1.778347 3.065277 -0.714792
C 1.795302 4.169842 1.818388
H 1.195496 2.235565 2.503408
C 2.145625 4.394190 -0.539620
H 1.748632 2.660101 -1.721247
C 2.142489 4.961444 0.730077
H 1.798393 4.589875 2.822880
H 2.415973 4.994571 -1.406853
H 2.412152 6.006449 0.869689

TS_{XIV→XV}^c

E = -2610.63365672
Pd -1.871681 -1.394672 -0.435139
P 2.024870 -0.316269 -0.344844
P -0.858068 0.445899 0.577624
C 0.900878 0.730653 0.447035
C 3.467809 0.699402 -0.910812
H 3.547350 1.449515 -0.110689
C 4.838551 0.026009 -1.013793
H 4.829813 -0.736091 -1.805992
H 5.100574 -0.487669 -0.083440
C 5.910587 1.071704 -1.313335
H 5.987451 1.748224 -0.448632
H 6.888096 0.582092 -1.411479
C 5.597974 1.889626 -2.558113
H 5.641973 1.234687 -3.441924
H 6.363063 2.662292 -2.706802
C 4.212046 2.513506 -2.475728
H 3.977255 3.055312 -3.400821
H 4.183699 3.252137 -1.659695
C 3.163207 1.443410 -2.212799
H 2.150937 1.864811 -2.192831

H 3.181251 0.723406 -3.043414
C 1.339460 -1.296601 -1.744212
H 0.616258 -1.944837 -1.228223
C 2.378567 -2.197101 -2.417167
H 2.975957 -2.746281 -1.680042
H 3.081369 -1.579067 -2.995326
C 1.689966 -3.177967 -3.358608
H 2.436379 -3.821088 -3.842584
H 1.041816 -3.842335 -2.765224
C 0.850236 -2.450695 -4.397264
H 1.517727 -1.869870 -5.052675
H 0.331670 -3.170961 -5.042967
C -0.148068 -1.510445 -3.739187
H -0.888715 -2.091545 -3.168277
H -0.710907 -0.959823 -4.502887
C 0.531451 -0.529987 -2.790788
H 1.181150 0.135586 -3.369944
H -0.215311 0.097188 -2.294055
C 2.831226 -1.609976 0.726666
H 3.693549 -1.993001 0.162421
C 3.340500 -0.948919 2.007316
H 4.019027 -0.116397 1.775449
H 2.484705 -0.495564 2.521327
C 4.013335 -1.951069 2.934636
H 4.345538 -1.446508 3.850983
H 4.919069 -2.348634 2.450959
C 3.073601 -3.101189 3.265789
H 3.569586 -3.829118 3.920572
H 2.211138 -2.711602 3.828592
C 2.578507 -3.778178 1.996495
H 1.873752 -4.584983 2.238726
H 3.430419 -4.253423 1.485796
C 1.914678 -2.787150 1.048351
H 0.993548 -2.401212 1.501175
H 1.612533 -3.305569 0.129024
C -1.333162 0.247699 2.373160
H -1.027190 1.170310 2.886497

C -2.846271 0.091132 2.519963
H -3.147217 -0.819865 1.977542
H -3.379409 0.920903 2.040548
C -3.253372 -0.029528 3.983066
H -3.011586 0.909418 4.504728
H -4.341068 -0.157129 4.061723
C -2.531609 -1.183524 4.664727
H -2.856485 -2.130062 4.204210
H -2.807985 -1.241453 5.725673
C -1.022926 -1.053507 4.508302
H -0.675817 -0.161692 5.053329
H -0.512160 -1.913971 4.962068
C -0.635999 -0.928204 3.041366
H 0.450699 -0.835918 2.932681
H -0.922133 -1.848471 2.509762
C -1.712784 2.047346 0.147786
H -2.759395 1.726414 0.042701
C -1.270044 2.521230 -1.232624
H -0.203907 2.781876 -1.203159
H -1.377630 1.699026 -1.947507
C -2.088638 3.715447 -1.700941
H -3.130233 3.391425 -1.847533
H -1.727354 4.058690 -2.679920
C -2.044469 4.847145 -0.685056
H -2.652546 5.696156 -1.024813
H -1.010142 5.215923 -0.595642
C -2.517527 4.364945 0.678324
H -2.478094 5.180943 1.412384
H -3.572609 4.059357 0.603069
C -1.688395 3.183735 1.173102
H -2.088830 2.842369 2.135585
H -0.662041 3.521172 1.363082
C -3.399914 -0.327053 -1.344872
C -4.591662 -0.021830 -0.668949
C -3.307055 0.128395 -2.667370
C -5.609893 0.724460 -1.260214
H -4.739055 -0.368603 0.354168

C -4.318362 0.873489 -3.271626
H -2.413462 -0.092925 -3.250411
C -5.476171 1.184246 -2.566321
H -6.515826 0.945450 -0.695599
H -4.198308 1.215259 -4.299803
H -6.267828 1.769522 -3.031352
C -1.689435 -3.616232 -0.332611
H -0.817385 -3.963033 -0.894361
H -0.730293 -2.288178 0.266273
C -2.800308 -3.195603 -1.091461
H -3.799075 -3.238798 -0.657112
C -1.851397 -4.252695 1.023718
H -2.148761 -5.303955 0.908752
H -0.920632 -4.224595 1.602469
H -2.627618 -3.743185 1.606550
H -2.759915 -3.214040 -2.179236
C 1.421881 1.940243 1.162616
C 1.444176 2.009148 2.565358
C 1.827366 3.100600 0.480155
C 1.804322 3.168406 3.243485
H 1.161896 1.130724 3.138474
C 2.207920 4.257789 1.148945
H 1.813620 3.104168 -0.605228
C 2.185528 4.304129 2.538819
H 1.791081 3.179677 4.332127
H 2.504321 5.135480 0.576721
H 2.466085 5.213764 3.066193

XV^a

E = -2610.64614183
Pd -1.980524 -1.451305 -0.007171
P 2.014930 -0.382508 -0.226475
P -0.839233 0.610908 0.460676
C 0.922318 0.856929 0.269167
C 3.480146 0.413125 -1.032260
H 3.572136 1.341423 -0.449358
C 4.836868 -0.289681 -0.941104

H 4.821671 -1.226340 -1.515732
H 5.076371 -0.557357 0.092846
C 5.933407 0.626867 -1.478539
H 6.015255 1.499977 -0.813513
H 6.901651 0.111678 -1.434617
C 5.649128 1.105330 -2.895123
H 5.686200 0.245370 -3.581541
H 6.432030 1.799626 -3.225984
C 4.276809 1.756529 -2.994049
H 4.063036 2.050262 -4.029675
H 4.257951 2.678614 -2.392594
C 3.199510 0.811453 -2.483149
H 2.199687 1.251279 -2.579298
H 3.199496 -0.093464 -3.107649
C 1.294744 -1.683753 -1.318678
H 0.573445 -2.190326 -0.656034
C 2.351467 -2.702677 -1.758265
H 2.933421 -3.071557 -0.905362
H 3.064064 -2.205292 -2.431693
C 1.718495 -3.875827 -2.495594
H 2.502306 -4.565384 -2.834771
H 1.091473 -4.442310 -1.792925
C 0.868718 -3.407331 -3.665783
H 1.522736 -2.952585 -4.426065
H 0.379778 -4.262855 -4.149085
C -0.163737 -2.383128 -3.220213
H -0.885358 -2.848372 -2.528788
H -0.742522 -2.032395 -4.083488
C 0.483250 -1.196498 -2.516306
H 1.124465 -0.662135 -3.226519
H -0.281352 -0.493066 -2.175772
C 2.776525 -1.385024 1.149353
H 3.630522 -1.931477 0.724669
C 3.288523 -0.439694 2.234977
H 4.037020 0.253189 1.826213
H 2.453406 0.189912 2.563270
C 3.849479 -1.192774 3.433036

H 4.186369 -0.479195 4.195868
H 4.738452 -1.765436 3.126418
C 2.811687 -2.144843 4.009044
H 3.222488 -2.690956 4.867820
H 1.957483 -1.563199 4.388298
C 2.327680 -3.117829 2.944858
H 1.555072 -3.784853 3.350267
H 3.167153 -3.763298 2.643411
C 1.787681 -2.401168 1.713402
H 0.853546 -1.879067 1.961005
H 1.534274 -3.146099 0.949950
C -1.312704 0.946364 2.237563
H -0.969603 1.960378 2.487125
C -2.829022 0.890633 2.422024
H -3.168616 -0.122320 2.152947
H -3.339187 1.575367 1.734203
C -3.221895 1.194902 3.862517
H -2.935274 2.230219 4.103958
H -4.312699 1.140396 3.975518
C -2.539903 0.243620 4.836110
H -2.915373 -0.776535 4.660956
H -2.799716 0.497465 5.872196
C -1.029679 0.253107 4.645349
H -0.633622 1.241194 4.927529
H -0.550973 -0.476193 5.313604
C -0.655798 -0.034826 3.197619
H 0.432335 -0.017536 3.069098
H -0.982517 -1.054133 2.931305
C -1.690709 2.036712 -0.399833
H -2.741443 1.710179 -0.411402
C -1.248711 2.114380 -1.857628
H -0.175748 2.346323 -1.900303
H -1.380973 1.134662 -2.327536
C -2.042438 3.157190 -2.631859
H -3.091111 2.828067 -2.690098
H -1.675950 3.216448 -3.665815
C -1.974799 4.519572 -1.958622

H -2.566836 5.256892 -2.517121
H -0.933520 4.879205 -1.967352
C -2.455031 4.429241 -0.518007
H -2.399784 5.411196 -0.029141
H -3.515770 4.133739 -0.512141
C -1.646124 3.409263 0.276771
H -2.046220 3.349853 1.295994
H -0.612646 3.765433 0.368097
C -3.428749 -0.685689 -1.167346
C -4.594581 -0.164311 -0.588782
C -3.315726 -0.605860 -2.559447
C -5.578117 0.449532 -1.361847
H -4.744381 -0.228084 0.487716
C -4.298110 0.004252 -3.337407
H -2.440958 -1.019327 -3.055641
C -5.432766 0.544547 -2.742051
H -6.467561 0.853073 -0.878395
H -4.171638 0.057118 -4.418581
H -6.199643 1.024702 -3.347352
C -2.893322 -3.270581 0.001095
H -1.103359 -2.774107 1.153085
H -2.844238 -3.786035 -0.964044
H -3.915916 -3.243780 0.384087
C -0.949315 -4.831997 0.589518
H -0.505029 -4.659143 -0.398481
H -0.135841 -5.001830 1.305819
C -1.832064 -3.660852 0.984652
H -2.237148 -3.793121 1.996239
H -1.542819 -5.751547 0.525777
C 1.465947 2.201310 0.642187
C 1.505098 2.634909 1.977691
C 1.877106 3.136492 -0.323906
C 1.889905 3.925192 2.325173
H 1.216184 1.942268 2.763262
C 2.282023 4.421893 0.015230
H 1.847135 2.856408 -1.372320
C 2.279019 4.830283 1.344737

H 1.889941 4.221466 3.372898
H 2.582487 5.114517 -0.769441
H 2.579558 5.841107 1.613391

XV^c

E = -2610.63697637

Pd 1.874902 1.434240 0.451761
P -2.009518 0.427527 -0.173482
P 0.872620 -0.650790 0.390576
C -0.869356 -0.850375 0.055997
C -3.385093 -0.217921 -1.240277
H -3.454826 -1.262631 -0.904453
C -4.784263 0.381336 -1.073912
H -4.791039 1.431489 -1.398190
H -5.098279 0.371806 -0.025605
C -5.795348 -0.418742 -1.892068
H -5.864007 -1.431556 -1.466783
H -6.792074 0.029192 -1.788196
C -5.408134 -0.521533 -3.360035
H -5.454822 0.478648 -3.817753
H -6.131623 -1.144276 -3.901564
C -3.998400 -1.072277 -3.519836
H -3.709850 -1.093689 -4.578530
H -3.963268 -2.112403 -3.160582
C -3.007134 -0.237028 -2.723039
H -1.978940 -0.593723 -2.857559
H -3.029341 0.792422 -3.107761
C -1.323920 1.982414 -0.883812
H -0.660623 2.341620 -0.080834
C -2.406946 3.037390 -1.125548
H -3.053838 3.157833 -0.248218
H -3.054064 2.709862 -1.952227
C -1.776866 4.375843 -1.488568
H -2.562603 5.116250 -1.687382
H -1.212963 4.746026 -0.620891
C -0.848507 4.248656 -2.687462
H -1.448901 4.005549 -3.577916

H -0.361968 5.210070 -2.897230
C 0.193295 3.157349 -2.483756
H 0.891795 3.436707 -1.679884
H 0.799727 3.046726 -3.391144
C -0.444844 1.822079 -2.123879
H -1.040118 1.472445 -2.974340
H 0.326435 1.068236 -1.937437
C -2.923190 0.998629 1.344452
H -3.786280 1.577921 0.986457
C -3.438000 -0.224666 2.102248
H -4.050119 -0.862248 1.449357
H -2.574800 -0.837701 2.386287
C -4.210434 0.166974 3.353727
H -4.542243 -0.734671 3.884465
H -5.121946 0.714322 3.067257
C -3.361054 1.043806 4.262139
H -3.926240 1.335289 5.156741
H -2.493661 0.463986 4.614429
C -2.869057 2.276088 3.517433
H -2.235230 2.892863 4.167832
H -3.734566 2.899829 3.244290
C -2.100100 1.903837 2.255508
H -1.166134 1.394635 2.522621
H -1.807920 2.815403 1.719376
C 1.269938 -1.358119 2.070363
H 0.964448 -2.413066 2.026610
C 2.770172 -1.311966 2.355775
H 3.083395 -0.255952 2.385822
H 3.340943 -1.778718 1.543921
C 3.094335 -1.985851 3.684007
H 2.851755 -3.057359 3.610255
H 4.172127 -1.925306 3.884840
C 2.304958 -1.370447 4.831596
H 2.634754 -0.329875 4.974964
H 2.517775 -1.896804 5.771361
C 0.810378 -1.376196 4.539557
H 0.449913 -2.416519 4.503765

H 0.257986 -0.883317 5.351394
C 0.512708 -0.694192 3.211212
H -0.563833 -0.695690 3.003234
H 0.812133 0.362506 3.263355
C 1.779049 -1.843329 -0.723695
H 2.819158 -1.504471 -0.620724
C 1.391848 -1.599911 -2.178684
H 0.335968 -1.861925 -2.322738
H 1.488852 -0.533368 -2.405436
C 2.264464 -2.407191 -3.128796
H 3.298635 -2.037693 -3.057236
H 1.944655 -2.240578 -4.166416
C 2.227083 -3.889105 -2.786214
H 2.873496 -4.460175 -3.465945
H 1.203435 -4.270305 -2.929881
C 2.641467 -4.117093 -1.340232
H 2.607073 -5.186360 -1.091743
H 3.687488 -3.797478 -1.213595
C 1.758705 -3.333877 -0.373087
H 2.120286 -3.494872 0.649731
H 0.739587 -3.736900 -0.411825
C 3.410004 0.938323 -0.899482
C 4.573215 0.288095 -0.458780
C 3.355838 1.245772 -2.264968
C 5.601805 -0.067420 -1.329710
H 4.687482 0.042467 0.598323
C 4.378134 0.899540 -3.147655
H 2.487432 1.767871 -2.665115
C 5.507457 0.232606 -2.685022
H 6.483948 -0.579611 -0.945338
H 4.289234 1.151947 -4.204390
H 6.307509 -0.042919 -3.370191
C 2.136097 3.406814 1.505765
H 0.657713 1.619633 1.470288
H 2.288180 3.108299 2.544056
C 3.173764 3.202053 0.617097
H 3.185396 3.703678 -0.350852

C 1.051520 4.417297 1.277727
H 0.096034 4.108350 1.713790
H 1.334206 5.373534 1.741463
H 0.900052 4.602328 0.209412
H 4.123271 2.783444 0.942085
C -1.368527 -2.265354 0.071242
C -1.437400 -3.006666 1.262321
C -1.710719 -2.955944 -1.104716
C -1.778565 -4.354653 1.277516
H -1.208627 -2.513362 2.202162
C -2.072247 -4.297727 -1.098247
H -1.662820 -2.433191 -2.054387
C -2.094206 -5.012332 0.094653
H -1.802274 -4.891396 2.224482
H -2.318607 -4.791353 -2.037001
H -2.359396 -6.067741 0.102307

TS_{XV→XVI}^a

E = -2610.63081504
Pd -1.814494 0.752366 0.858179
P 1.839697 0.824158 -0.334561
P -0.438455 -1.099830 0.343467
C 1.260542 -0.790659 -0.120045
C 3.686717 0.781369 -0.415380
H 3.873105 -0.141739 -0.986715
C 4.386108 1.929379 -1.148571
H 4.242923 2.866235 -0.589687
H 3.966766 2.092014 -2.145523
C 5.876988 1.628780 -1.285810
H 5.994167 0.751294 -1.939744
H 6.377769 2.462841 -1.794240
C 6.543312 1.345673 0.053125
H 6.546782 2.267206 0.655396
H 7.594992 1.069847 -0.096956
C 5.804537 0.259188 0.821675
H 6.254732 0.116573 1.812534
H 5.890648 -0.703020 0.294351

C 4.332763 0.616850 0.961493
H 3.795234 -0.122532 1.561453
H 4.254718 1.574642 1.496217
C 1.247257 1.962547 0.984139
H 0.149845 1.887186 0.827876
C 1.615771 3.436241 0.839866
H 1.466253 3.798971 -0.183481
H 2.684582 3.568329 1.071484
C 0.769212 4.258892 1.807392
H 1.025569 5.323031 1.725187
H -0.285170 4.166383 1.503817
C 0.921753 3.785393 3.247700
H 1.948411 3.996524 3.585406
H 0.256162 4.359114 3.905714
C 0.654881 2.292114 3.385907
H -0.405578 2.077081 3.183747
H 0.847390 1.962433 4.415060
C 1.507840 1.493561 2.412084
H 2.563371 1.640761 2.668210
H 1.303853 0.424020 2.489981
C 1.362778 1.716808 -1.896311
H 1.952849 2.645565 -1.911303
C 1.747824 0.878656 -3.115066
H 2.825580 0.670867 -3.121696
H 1.262485 -0.099321 -3.029919
C 1.324522 1.539405 -4.419936
H 1.588636 0.892361 -5.266392
H 1.887752 2.475846 -4.555444
C -0.165913 1.846723 -4.422390
H -0.457073 2.330784 -5.363422
H -0.731299 0.904034 -4.366745
C -0.534734 2.723701 -3.235719
H -1.614368 2.924045 -3.220824
H -0.038617 3.701058 -3.343663
C -0.118118 2.091659 -1.914277
H -0.720365 1.193913 -1.721398
H -0.346144 2.780795 -1.092120

C -1.204305 -2.141134 -1.009533
H -0.508058 -2.975398 -1.192108
C -2.569629 -2.714773 -0.629066
H -3.255521 -1.882229 -0.419695
H -2.512468 -3.312706 0.287413
C -3.141395 -3.572840 -1.752837
H -2.497334 -4.454594 -1.898107
H -4.129940 -3.951941 -1.461565
C -3.238114 -2.800192 -3.059811
H -3.970497 -1.989184 -2.936349
H -3.612357 -3.446926 -3.864638
C -1.892873 -2.196601 -3.435791
H -1.177345 -3.003321 -3.661592
H -1.982242 -1.593624 -4.350357
C -1.345807 -1.345363 -2.299109
H -0.382400 -0.906130 -2.572997
H -2.031017 -0.505522 -2.110486
C -0.512397 -2.322736 1.760418
H -1.597621 -2.370278 1.947851
C 0.120550 -1.760568 3.026360
H 1.201743 -1.637564 2.858429
H -0.289433 -0.760185 3.224393
C -0.104083 -2.670301 4.226992
H -1.180138 -2.697498 4.457897
H 0.393592 -2.255241 5.113850
C 0.382907 -4.085510 3.952015
H 0.184274 -4.736060 4.814076
H 1.475749 -4.071380 3.816680
C -0.264736 -4.647395 2.694596
H 0.109225 -5.659034 2.488130
H -1.349406 -4.743581 2.859760
C -0.018895 -3.744115 1.490990
H -0.508026 -4.167073 0.606008
H 1.054474 -3.725797 1.268986
C -3.757225 0.691551 0.341654
C -4.060921 0.903581 -1.009080
C -4.635277 -0.095726 1.102720

C -5.163194 0.287846 -1.597147
H -3.411648 1.535289 -1.615282
C -5.734162 -0.707385 0.511787
H -4.441400 -0.245568 2.163768
C -6.001133 -0.528323 -0.844470
H -5.363320 0.446779 -2.656277
H -6.389423 -1.332082 1.117570
H -6.861808 -1.008950 -1.305127
C -3.090026 2.385383 1.366525
H -2.236168 3.614522 -0.178777
H -2.266119 2.524600 2.100471
H -4.002845 2.296130 1.960403
C -3.369320 4.887332 1.143059
H -2.551861 5.099223 1.844917
H -3.429804 5.726422 0.438370
C -3.157481 3.563737 0.420166
H -3.973423 3.412366 -0.298439
H -4.300631 4.871658 1.723662
C 2.161172 -1.926385 -0.488859
C 3.071968 -2.459517 0.437843
C 2.131495 -2.528804 -1.755678
C 3.926056 -3.507043 0.113904
H 3.082180 -2.051469 1.446005
C 2.974034 -3.586267 -2.085912
H 1.425156 -2.160082 -2.495704
C 3.883907 -4.074739 -1.155826
H 4.619326 -3.889819 0.861294
H 2.919444 -4.027428 -3.079849
H 4.548293 -4.897168 -1.414263

TS_{XV→XVI}^b

E = -2610.62482726
Pd -1.787010 -1.070830 0.464802
P 1.958552 -0.660924 -0.073186
P -0.601334 0.923495 0.152018
C 1.173535 0.881183 -0.056684
C 3.723735 -0.414563 -0.559238

H 4.095484 0.226537 0.253336
C 4.570671 -1.688096 -0.561980
H 4.255676 -2.331993 -1.396949
H 4.427818 -2.269317 0.356518
C 6.047982 -1.339578 -0.715241
H 6.371348 -0.786087 0.179751
H 6.647358 -2.258779 -0.744781
C 6.309947 -0.490460 -1.950880
H 6.105287 -1.092296 -2.849825
H 7.370056 -0.210188 -2.000966
C 5.423344 0.747320 -1.973012
H 5.588286 1.320590 -2.894142
H 5.690365 1.415009 -1.139596
C 3.952351 0.369238 -1.854976
H 3.321361 1.260940 -1.886891
H 3.678397 -0.248895 -2.717174
C 1.101452 -1.832773 -1.216126
H 0.041076 -1.595019 -0.990056
C 1.286263 -3.333997 -0.988096
H 1.125322 -3.612160 0.057105
H 2.316507 -3.629082 -1.238454
C 0.302836 -4.108180 -1.861196
H 0.426798 -5.186846 -1.699923
H -0.718456 -3.856425 -1.533840
C 0.456433 -3.766939 -3.335644
H 1.440070 -4.117095 -3.685408
H -0.293357 -4.302955 -3.931786
C 0.350150 -2.266365 -3.566551
H -0.669954 -1.930271 -3.330221
H 0.522439 -2.025166 -4.623478
C 1.337905 -1.508321 -2.689935
H 2.356972 -1.818122 -2.965422
H 1.270203 -0.428219 -2.857889
C 2.087735 -1.634276 1.512492
H 2.573207 -2.580915 1.231374
C 2.951111 -0.950716 2.569669
H 3.948730 -0.715981 2.176935

H 2.476040 0.003224 2.837246
C 3.077387 -1.805256 3.825010
H 3.693099 -1.284096 4.569397
H 3.609357 -2.736454 3.576520
C 1.711156 -2.143276 4.401474
H 1.813628 -2.782112 5.288011
H 1.223091 -1.215512 4.737686
C 0.833361 -2.814445 3.356070
H -0.165379 -3.015790 3.763694
H 1.264573 -3.792144 3.089925
C 0.716601 -1.959229 2.100859
H 0.209317 -1.015592 2.342839
H 0.078406 -2.461212 1.357986
C -0.930341 2.105095 1.547619
H -0.559809 3.093357 1.229130
C -2.427821 2.188344 1.845925
H -2.758983 1.184143 2.155334
H -3.009771 2.425470 0.947243
C -2.717819 3.191691 2.954894
H -2.435271 4.199131 2.612344
H -3.795607 3.225227 3.162994
C -1.943636 2.853952 4.222078
H -2.320888 1.901506 4.626254
H -2.121035 3.611868 4.996535
C -0.453351 2.714186 3.940771
H -0.041475 3.691211 3.645989
H 0.081369 2.413307 4.851984
C -0.195387 1.711973 2.823304
H 0.878083 1.613608 2.627551
H -0.558712 0.721077 3.140204
C -1.505867 1.755239 -1.270742
H -2.527738 1.372196 -1.114549
C -1.028522 1.172338 -2.594863
H 0.022379 1.454472 -2.760869
H -1.049087 0.076571 -2.526079
C -1.878463 1.642581 -3.766797
H -2.889358 1.225439 -3.659173

H -1.472583 1.248265 -4.708603
C -1.969831 3.160817 -3.814808
H -2.612822 3.480876 -4.645484
H -0.971565 3.582915 -4.012915
C -2.489912 3.709942 -2.494299
H -2.558946 4.805481 -2.530647
H -3.511719 3.333641 -2.328549
C -1.607863 3.279353 -1.326551
H -2.020676 3.676522 -0.392539
H -0.617989 3.737264 -1.435310
C -3.541359 -1.177302 -0.521287
C -4.538556 -0.244584 -0.181871
C -3.468796 -1.594617 -1.863802
C -5.381378 0.282905 -1.154297
H -4.642097 0.088657 0.847723
C -4.317854 -1.064694 -2.827464
H -2.733123 -2.345769 -2.150879
C -5.279056 -0.116517 -2.484417
H -6.129825 1.019743 -0.864133
H -4.222208 -1.394382 -3.861591
H -5.943082 0.297682 -3.240091
C -4.063316 -1.781510 2.924071
H -4.088319 -1.961352 4.005506
H -3.681082 -0.766346 2.759716
C -3.218289 -2.717931 0.689460
H -4.212754 -3.004771 0.342842
H -2.159097 -2.709410 2.588438
C -3.188903 -2.801752 2.215126
H -3.515364 -3.816198 2.500335
H -2.524385 -3.432898 0.220978
H -5.095988 -1.811698 2.553567
C 1.978981 2.125990 0.019832
C 1.850871 3.125971 -0.960031
C 2.906755 2.380881 1.043744
C 2.579587 4.307000 -0.911422
H 1.188043 2.940526 -1.799638
C 3.660019 3.549783 1.086072

H 3.039766 1.641331 1.828840
C 3.494942 4.528335 0.113620
H 2.446043 5.051863 -1.694553
H 4.370203 3.700050 1.897856
H 4.073782 5.449033 0.150091

XVI

E = -2610.69800625
Pd -2.002508 -0.108388 -0.911537
P 1.724556 -1.059752 0.082591
P -0.339884 1.216131 -0.016985
C 1.314252 0.605487 0.294955
C 3.550018 -1.202712 -0.183659
H 3.941205 -0.393784 0.451622
C 4.236028 -2.495868 0.263683
H 3.884706 -3.338460 -0.349943
H 3.992726 -2.739139 1.302457
C 5.750976 -2.356199 0.133865
H 6.091296 -1.589377 0.846207
H 6.236935 -3.294025 0.432783
C 6.183284 -1.957862 -1.270081
H 5.957818 -2.781652 -1.964769
H 7.270433 -1.811262 -1.305764
C 5.455147 -0.706041 -1.739022
H 5.731971 -0.464637 -2.773360
H 5.755509 0.154488 -1.121479
C 3.950039 -0.896393 -1.628381
H 3.402564 -0.027208 -2.011344
H 3.657619 -1.748777 -2.258589
C 0.785794 -1.899158 -1.256242
H -0.255176 -1.780193 -0.891132
C 1.079781 -3.391729 -1.402754
H 1.093160 -3.904256 -0.433951
H 2.080135 -3.525139 -1.843534
C 0.038578 -4.033879 -2.313958
H 0.248245 -5.105180 -2.430471
H -0.945612 -3.957918 -1.825269

C -0.019516 -3.349084 -3.672627
H 0.928519 -3.528911 -4.203404
H -0.808921 -3.797094 -4.290430
C -0.235766 -1.849084 -3.530186
H -1.226664 -1.652403 -3.092393
H -0.223484 -1.362311 -4.514130
C 0.812314 -1.219859 -2.622706
H 1.797707 -1.331863 -3.088961
H 0.626352 -0.150927 -2.499544
C 1.416976 -2.150920 1.560578
H 1.932436 -3.105956 1.383007
C 2.023058 -1.483164 2.794513
H 3.105124 -1.342013 2.667570
H 1.603040 -0.473909 2.878657
C 1.727483 -2.256198 4.070951
H 2.168737 -1.736857 4.931446
H 2.206233 -3.246698 4.023837
C 0.228029 -2.428184 4.257261
H 0.013246 -2.989206 5.175939
H -0.236121 -1.438178 4.380712
C -0.387676 -3.129941 3.056469
H -1.475529 -3.209836 3.177352
H -0.004412 -4.161638 3.013517
C -0.073803 -2.428657 1.739429
H -0.621530 -1.479739 1.670675
H -0.443558 -3.043315 0.909909
C -1.055833 1.952159 1.550723
H -0.344272 2.690253 1.948195
C -2.381370 2.653466 1.249682
H -3.047398 1.924226 0.760894
H -2.239378 3.469985 0.531954
C -3.039985 3.196346 2.512469
H -2.410828 3.994491 2.936706
H -4.002041 3.662177 2.259442
C -3.236056 2.108844 3.558298
H -3.947639 1.362961 3.171224
H -3.682265 2.525002 4.471298

C -1.917124 1.416969 3.869455
H -1.230638 2.136737 4.342358
H -2.066645 0.605656 4.595556
C -1.281960 0.872005 2.598849
H -0.336458 0.364585 2.823039
H -1.946948 0.109744 2.158588
C -0.168516 2.779213 -1.051412
H -1.217022 3.011562 -1.296892
C 0.529802 2.465983 -2.370279
H 1.528926 2.054380 -2.160107
H -0.033630 1.676457 -2.884414
C 0.652311 3.683713 -3.277035
H -0.352024 3.983031 -3.615301
H 1.218313 3.421367 -4.181238
C 1.297874 4.857587 -2.557399
H 1.367601 5.728115 -3.223235
H 2.328998 4.590808 -2.276701
C 0.514557 5.201098 -1.299997
H 0.970806 6.053666 -0.779525
H -0.501822 5.516065 -1.585112
C 0.432153 4.005068 -0.358271
H -0.165971 4.274102 0.520462
H 1.438906 3.779992 0.010889
C -4.599365 -1.065997 -0.604509
C -5.276049 0.074333 -0.184554
C -3.816377 -0.998273 -1.786685
C -5.192553 1.273854 -0.902778
H -5.895593 0.021458 0.709981
C -3.674320 0.231249 -2.468103
H -3.457426 -1.921839 -2.243236
C -4.384496 1.362420 -2.022486
H -5.750159 2.144638 -0.563146
H -3.153798 0.265522 -3.423387
H -4.303087 2.297469 -2.573188
C -4.730427 -2.378331 0.114252
H -2.700769 -2.985596 -0.247664
H -5.200563 -3.109570 -0.562249

H -5.415628 -2.263416 0.964665
C -3.526186 -4.322895 1.228646
H -3.976764 -5.038373 0.528128
H -2.548751 -4.722580 1.523911
C -3.400639 -2.947427 0.600426
H -2.953408 -2.233785 1.306865
H -4.159646 -4.299513 2.124985
C 2.331631 1.543737 0.854882
C 3.389592 2.048823 0.078314
C 2.227471 2.043696 2.163374
C 4.279126 2.996725 0.570142
H 3.489736 1.713169 -0.950069
C 3.100359 3.006736 2.656662
H 1.431656 1.671457 2.803455
C 4.133742 3.490971 1.862419
H 5.078948 3.366480 -0.069833
H 2.974058 3.376535 3.673015
H 4.819012 4.244374 2.246067

5.2.7 JoYPhos-medierte sec-Butyl–Phenyl-Kopplung

5.2.7.1 Energien der Strukturen

Tabelle 5.10. Energien der Strukturen der joYPhos medierten sec-Butyl–Phenyl-Kopplung.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	E(PCM)	$\Delta G(\text{PCM})$ [hartree]	$\Delta G(\text{PCM})$ [kJ/mol]
X^a	-2650.02431314	1.179482	1.041805	-2650.02800533	–	–
X^a	-2650.02439101	1.180086	1.044205	-2650.02805325	0.002352	6.175386
X^c	-2650.02343779	1.180216	1.043210	-2650.02713017	0.002280	5.986560
X^d	-2650.02338585	1.180203	1.042663	-2650.02702979	0.001834	4.813959
TS_{X→XI}^a	-2650.00917561	1.178815	1.043012	-2650.01219444	0.017018	44.680470
TS_{X→XI}^b	-2650.01020605	1.178985	1.043203	-2650.01315692	0.016246	42.654949
TS_{X→XI}^c	-2650.00770923	1.178770	1.042198	-2650.01087682	0.017522	46.002725
TS_{X→XI}^d	-2650.00786766	1.178634	1.040865	-2650.01110150	0.015964	41.913036
XI^{a,d}	-2650.07787001	1.180793	1.041945	-2650.08048740	-0.052342	-137.424105
XI^{b,c}	-2650.07610354	1.181327	1.042932	-2650.07880448	-0.049672	-130.414230
XII^a	-2650.02633911	1.179239	1.042651	-2650.03021712	-0.001366	-3.585882
XII^c	-2650.02525391	1.179453	1.042445	-2650.02903030	-0.000385	-1.010739
TS_{XII→XIII}^a	-2650.01184812	1.175661	1.038708	-2650.01567522	0.009233	24.241530

Untersuchungen zu elektronischen Eigenschaften und dem katalytischen Einsatz von
YPhos-Liganden

TS_{XII→XIII}^b	-2650.01042097	1.175709	1.038847	-2650.01416656	0.010881	28.567462
XIII^a	-2650.01705656	1.177598	1.041507	-2650.02056870	0.007139	18.742473
XIII^c	-2650.01533232	1.177421	1.040482	-2650.01872654	0.007956	20.887927
TS_{XIII→XIV}^a (CW)	-2650.01128873	1.176106	1.040458	-2650.01485982	0.011799	30.976988
XIII→XIV^a (CW)	-2650.01248679	1.177207	1.040647	-2650.01608670	0.010761	28.252034
TS_{XIII→XIV}^a (CW)	-2650.00902532	1.176555	1.041459	-2650.01271985	0.014939	39.223605
TS_{XIII→XIV}^a (CCW)	-2650.00763304	1.176230	1.040850	-2650.01111290	0.015937	41.843722
XIII→XIV^a (CCW)	-2650.01009079	1.177265	1.040608	-2650.01356032	0.013248	34.782650
TS_{XIII→XIV}^a (CCW)	-2650.00748348	1.176510	1.040349	-2650.01104698	0.015502	40.701420
TS_{XIII→XIV}^c (CW)	-2650.00683110	1.176386	1.041832	-2650.01031175	0.017721	46.525383
TS_{XIII→XIV}^c (CCW)	-2650.00763304	1.176230	1.040850	-2650.01111290	0.015937	41.843722
XIII→XIV^c (CCW)	-2650.01084482	1.177514	1.041001	-2650.01454445	0.012657	33.230638
TS_{XIII→XIV}^c (CCW)	-2650.00748348	1.176510	1.040349	-2650.01104698	0.015502	40.701420
XIV^a	-2650.01983553	1.177196	1.039434	-2650.01983553	0.005799	15.224749
XIV^c	-2650.01674577	1.177189	1.039690	-2650.02052614	0.005364	14.083681
TS_{XIV→XV}^a	-2650.01130747	1.175878	1.038726	-2650.01530839	0.009618	25.251901
TS_{XIV→XV}^c	-2650.01285900	1.175896	1.040169	-2650.01704256	0.009327	24.487435
XV^a	-2650.02524387	1.179403	1.041472	-2650.02930212	-0.001630	-4.279014
XV^c	-2650.02664920	1.179744	1.043953	-2650.03084948	-0.000696	-1.827742
TS_{XV→XVI}^a	-2650.00882673	1.179115	1.041068	-2650.01183658	0.015432	40.516060
TS_{XV→XVI}^c	-2650.00432176	1.178886	1.041914	-2650.00726030	0.020854	54.752256
XVI	-2650.07800350	1.182147	1.044897	-2650.08083844	-0.049741	-130.595284

5.2.7.2 Koordinaten der Strukturen

X^a

E = -2650.02431314

Pd -1.787597 -0.798036 0.541696

P 1.878084 -0.846739 -0.110164

P -0.366989 1.137481 0.158980

C 1.381580 0.806008 -0.011036
C 3.684132 -0.924520 -0.479696
H 4.120026 -0.452686 0.412805
C 4.249668 -2.342971 -0.570658
H 3.871468 -2.825504 -1.484235
H 3.922581 -2.963237 0.272599
C 5.774119 -2.301467 -0.611386
H 6.140196 -1.909532 0.349976
H 6.172504 -3.320154 -0.703025
C 6.290259 -1.421465 -1.741270
H 6.029659 -1.885510 -2.705038
H 7.386079 -1.367702 -1.710068
C 5.680399 -0.027774 -1.682611
H 6.022920 0.577163 -2.531645
H 6.021025 0.491843 -0.773913
C 4.158462 -0.093037 -1.675550
H 3.731894 0.912474 -1.645845
H 3.820790 -0.556912 -2.609149
C 0.890727 -1.761038 -1.378920
H -0.118494 -1.339222 -1.204240
C 0.771955 -3.280637 -1.246741
H 0.483559 -3.584676 -0.236345
H 1.744028 -3.753215 -1.452091
C -0.272025 -3.795776 -2.232326
H -0.372037 -4.884504 -2.137081
H -1.246995 -3.366189 -1.953073
C 0.065679 -3.414233 -3.665921
H 0.988731 -3.933269 -3.967747
H -0.721216 -3.759357 -4.348624
C 0.270779 -1.912600 -3.805891
H -0.683816 -1.394276 -3.636122
H 0.582986 -1.659404 -4.827275
C 1.300191 -1.401408 -2.806808
H 2.267554 -1.875485 -3.029016
H 1.439935 -0.318643 -2.900828
C 1.698975 -1.902268 1.415968
H 2.000644 -2.917332 1.118454

C 2.585332 -1.454840 2.574488
H 3.642710 -1.439196 2.279954
H 2.308088 -0.426344 2.843373
C 2.399055 -2.348183 3.795401
H 3.039953 -1.995721 4.613627
H 2.734876 -3.367967 3.552786
C 0.943065 -2.388055 4.235271
H 0.820329 -3.048684 5.102690
H 0.637687 -1.381971 4.561709
C 0.042765 -2.835692 3.093757
H -1.012147 -2.813246 3.393091
H 0.272978 -3.879881 2.832631
C 0.242631 -1.956999 1.867250
H -0.080159 -0.929150 2.110635
H -0.383479 -2.342357 1.042613
C -0.528731 2.270568 1.623080
H -0.009271 3.205109 1.355061
C -1.998606 2.565019 1.920322
H -2.475549 1.613091 2.203519
H -2.532448 2.911304 1.027270
C -2.141398 3.567319 3.058251
H -1.706139 4.529637 2.747423
H -3.202929 3.757965 3.264281
C -1.437265 3.075590 4.315759
H -1.961481 2.182539 4.690201
H -1.498635 3.828381 5.112629
C 0.015115 2.712829 4.034120
H 0.577912 3.621566 3.772468
H 0.488748 2.302702 4.936334
C 0.124561 1.719029 2.884482
H 1.171482 1.463117 2.691123
H -0.392437 0.788766 3.170071
C -1.063954 2.191321 -1.222680
H -2.139352 1.976556 -1.130936
C -0.625202 1.620678 -2.565651
H 0.460776 1.753536 -2.684563
H -0.801679 0.537292 -2.568244

C -1.356524 2.279051 -3.726187
H -2.422638 2.016984 -3.664819
H -0.986894 1.880987 -4.681079
C -1.208126 3.792898 -3.681831
H -1.765249 4.258194 -4.505656
H -0.149907 4.060671 -3.831235
C -1.678454 4.344562 -2.343256
H -1.566752 5.436725 -2.315132
H -2.753201 4.134568 -2.228384
C -0.924320 3.712562 -1.176839
H -1.317661 4.109738 -0.234219
H 0.127597 4.018278 -1.216883
C -3.291955 -0.153608 -0.569724
C -4.277836 0.711260 -0.086615
C -3.329918 -0.497013 -1.926005
C -5.244571 1.245338 -0.937642
H -4.299150 0.982815 0.966925
C -4.296082 0.032961 -2.777122
H -2.596274 -1.195224 -2.329188
C -5.254625 0.916391 -2.288991
H -5.997881 1.922593 -0.536213
H -4.298236 -0.247674 -3.830084
H -6.008603 1.334533 -2.953282
C -3.784453 -1.857166 2.373853
H -3.088067 -1.416896 3.102220
H -4.524117 -1.084515 2.124256
H -4.324868 -2.662914 2.898560
C -4.007916 -2.988149 0.113173
H -4.837897 -2.301496 -0.105084
H -3.484253 -3.118271 -0.844844
C -3.070757 -2.344739 1.123534
H -2.329676 -3.112117 1.413441
C -4.563016 -4.337503 0.554810
H -5.146919 -4.257189 1.480367
H -5.221466 -4.771165 -0.208823
H -3.753371 -5.056941 0.741532
C 2.388732 1.880613 0.172396

C 2.459591 2.960599 -0.724606
C 3.327089 1.883476 1.217992
C 3.388764 3.982300 -0.578800
H 1.790060 2.964829 -1.578864
C 4.278667 2.888657 1.355837
H 3.307777 1.075385 1.944465
C 4.311072 3.952997 0.463185
H 3.405785 4.797916 -1.300136
H 4.988945 2.844387 2.180084
H 5.046330 4.747308 0.574616

XI^b

E = -2650.02439101
Pd -1.772686 -0.963178 0.124365
P 1.916068 -0.750020 -0.256602
P -0.422087 1.037446 0.370203
C 1.345730 0.805176 0.237845
C 3.743095 -0.686288 -0.508656
H 4.107119 -0.459744 0.503988
C 4.364532 -2.018228 -0.932637
H 4.057169 -2.248765 -1.963554
H 4.012132 -2.846019 -0.305596
C 5.886176 -1.937719 -0.862395
H 6.182637 -1.806153 0.189579
H 6.325387 -2.888100 -1.192079
C 6.433301 -0.780785 -1.686477
H 6.243093 -0.978386 -2.752701
H 7.523121 -0.716092 -1.573324
C 5.772569 0.535406 -1.301883
H 6.140707 1.350255 -1.937974
H 6.042985 0.802017 -0.268685
C 4.255540 0.441991 -1.409146
H 3.792952 1.395314 -1.142555
H 3.987816 0.236195 -2.451571
C 1.044383 -1.320857 -1.784929
H 0.009625 -0.987808 -1.570936
C 0.982557 -2.823438 -2.066193

H 0.653928 -3.392744 -1.192052
H 1.982950 -3.198734 -2.328170
C 0.014928 -3.085884 -3.215912
H -0.043291 -4.163084 -3.417528
H -0.991486 -2.772599 -2.895414
C 0.413503 -2.328656 -4.473919
H 1.372336 -2.724955 -4.842863
H -0.320134 -2.500015 -5.271930
C 0.562953 -0.839012 -4.199795
H -0.420567 -0.410504 -3.959853
H 0.918371 -0.315375 -5.096610
C 1.514344 -0.583252 -3.038310
H 2.512433 -0.952813 -3.316142
H 1.609917 0.489365 -2.834906
C 1.689913 -2.175251 0.923814
H 2.053265 -3.067980 0.393808
C 2.483130 -2.025554 2.218325
H 3.555196 -1.908316 2.013273
H 2.147557 -1.110030 2.724449
C 2.259636 -3.212475 3.148497
H 2.831985 -3.070615 4.074107
H 2.654685 -4.123607 2.673740
C 0.782255 -3.405644 3.457455
H 0.635958 -4.274777 4.111030
H 0.412683 -2.530253 4.013283
C -0.025002 -3.560744 2.177512
H -1.096843 -3.646426 2.395579
H 0.267215 -4.492849 1.670224
C 0.212519 -2.385292 1.240088
H -0.169633 -1.466509 1.719401
H -0.342746 -2.555829 0.300831
C -0.716900 1.732071 2.069435
H -0.228035 2.719701 2.092718
C -2.212171 1.891749 2.342269
H -2.660169 0.885195 2.331688
H -2.714446 2.449914 1.543057
C -2.458549 2.546227 3.695678

H -2.052008 3.569269 3.680412
H -3.536867 2.642686 3.878899
C -1.798751 1.756214 4.818138
H -2.299820 0.779700 4.907575
H -1.936492 2.264981 5.781282
C -0.318797 1.527425 4.541014
H 0.214256 2.489804 4.566562
H 0.126187 0.904334 5.328586
C -0.105167 0.883125 3.177269
H 0.960903 0.720514 2.988245
H -0.593156 -0.104750 3.172803
C -1.085254 2.404321 -0.723567
H -2.153396 2.142567 -0.760416
C -0.554607 2.230425 -2.141307
H 0.528397 2.425425 -2.157354
H -0.680670 1.183069 -2.444310
C -1.260190 3.153771 -3.123917
H -2.314461 2.849945 -3.197223
H -0.827461 3.040374 -4.127287
C -1.186082 4.603828 -2.667924
H -1.724874 5.255063 -3.368758
H -0.135916 4.936792 -2.677994
C -1.745101 4.758676 -1.260657
H -1.686799 5.805854 -0.934929
H -2.812941 4.489868 -1.269001
C -1.017869 3.860452 -0.264251
H -1.473048 3.975964 0.725854
H 0.019529 4.199001 -0.160388
C -3.235649 -0.093242 -0.882833
C -4.290172 0.579757 -0.258687
C -3.182789 -0.073965 -2.281232
C -5.237147 1.279246 -1.005618
H -4.381750 0.566405 0.825711
C -4.128367 0.622708 -3.028916
H -2.393266 -0.616245 -2.801308
C -5.157537 1.312009 -2.393918
H -6.046048 1.800193 -0.494117

H -4.059175 0.625646 -4.116442
H -5.896323 1.859443 -2.976274
C -3.756487 -2.537395 1.526523
H -3.078195 -2.146165 2.303588
H -4.550807 -1.782856 1.423822
C -3.910181 -3.005982 -0.966193
H -4.746884 -2.302309 -1.060996
H -3.364915 -2.980270 -1.918449
C -3.011767 -2.647300 0.200602
H -2.251313 -3.444088 0.294837
H -4.336546 -4.016728 -0.864274
C -4.359847 -3.845037 2.031204
H -4.865889 -3.711470 2.996034
H -5.095837 -4.249849 1.326176
H -3.581586 -4.609651 2.166149
C 2.293711 1.821101 0.758038
C 2.359628 3.099872 0.178303
C 3.177096 1.579133 1.823420
C 3.230873 4.077194 0.640359
H 1.734970 3.305292 -0.684904
C 4.072592 2.543577 2.274536
H 3.158510 0.608701 2.312825
C 4.099899 3.805324 1.692938
H 3.245957 5.053345 0.157910
H 4.742038 2.307815 3.100445
H 4.790760 4.565572 2.051652

X^c

E = -2650.02343779
Pd -1.833952 -0.913760 0.393139
P 1.849371 -0.743242 -0.194160
P -0.467235 1.103178 0.269937
C 1.295634 0.865924 0.098690
C 3.660470 -0.712137 -0.546849
H 4.064351 -0.328665 0.401327
C 4.277397 -2.091573 -0.785340
H 3.933462 -2.479163 -1.756019

H 3.954135 -2.813698 -0.025895
C 5.799708 -1.995835 -0.783662
H 6.131400 -1.708882 0.226144
H 6.236399 -2.982587 -0.984815
C 6.307464 -0.970990 -1.788380
H 6.084416 -1.325857 -2.806417
H 7.399766 -0.885252 -1.723147
C 5.647182 0.385331 -1.582642
H 5.988123 1.097372 -2.344795
H 5.947138 0.804503 -0.609962
C 4.128808 0.268345 -1.626737
H 3.663459 1.247993 -1.493708
H 3.833892 -0.095563 -2.616966
C 0.908294 -1.526335 -1.581192
H -0.111416 -1.137119 -1.398433
C 0.808883 -3.051734 -1.606343
H 0.452957 -3.448097 -0.650135
H 1.801725 -3.492549 -1.783056
C -0.154596 -3.488033 -2.705621
H -0.228348 -4.582875 -2.723940
H -1.157292 -3.112059 -2.450735
C 0.250487 -2.952475 -4.070424
H 1.210271 -3.403315 -4.367127
H -0.481832 -3.252871 -4.830577
C 0.399088 -1.438472 -4.040015
H -0.582340 -0.976041 -3.859522
H 0.745030 -1.063277 -5.011768
C 1.364971 -1.008426 -2.944849
H 2.354882 -1.429734 -3.172211
H 1.474213 0.081720 -2.918547
C 1.708525 -1.975073 1.200734
H 1.999185 -2.949732 0.781663
C 2.639202 -1.650061 2.367514
H 3.684513 -1.609535 2.037075
H 2.379106 -0.651544 2.745334
C 2.498863 -2.653599 3.504718
H 3.174334 -2.379279 4.325104

H 2.819259 -3.646713 3.154579
C 1.061815 -2.730774 3.993286
H 0.965049 -3.469151 4.799116
H 0.772385 -1.758377 4.420848
C 0.123439 -3.070480 2.846772
H -0.917749 -3.085978 3.187548
H 0.344901 -4.083658 2.477958
C 0.268828 -2.077744 1.700937
H -0.043682 -1.081294 2.047231
H -0.393937 -2.394010 0.869884
C -0.694790 2.060544 1.846804
H -0.206744 3.036204 1.688109
C -2.176788 2.274049 2.153305
H -2.625663 1.284033 2.333602
H -2.713715 2.692429 1.293550
C -2.360201 3.152617 3.384471
H -1.956710 4.154979 3.173265
H -3.428698 3.286444 3.599176
C -1.646388 2.564812 4.594902
H -2.142517 1.623158 4.877169
H -1.738073 3.235082 5.459663
C -0.181113 2.277767 4.293538
H 0.354297 3.224471 4.126155
H 0.299265 1.796594 5.156226
C -0.036323 1.403551 3.054396
H 1.017980 1.189588 2.846870
H -0.534356 0.439677 3.245375
C -1.180150 2.283665 -0.999267
H -2.248079 2.022115 -0.957115
C -0.695199 1.888244 -2.389291
H 0.387503 2.067661 -2.467675
H -0.834565 0.807752 -2.523207
C -1.424721 2.654437 -3.482961
H -2.482161 2.353137 -3.479398
H -1.021333 2.382751 -4.468070
C -1.330050 4.156670 -3.259383
H -1.883458 4.697096 -4.038663

H -0.278543 4.473776 -3.347495
C -1.850938 4.531933 -1.879313
H -1.779880 5.616408 -1.721281
H -2.919766 4.274041 -1.819162
C -1.101112 3.793768 -0.774171
H -1.532693 4.062906 0.196418
H -0.061760 4.140433 -0.747350
C -3.314706 -0.194915 -0.707726
C -4.341011 0.582762 -0.162409
C -3.305850 -0.389898 -2.093377
C -5.293703 1.188915 -0.979598
H -4.401913 0.730498 0.914203
C -4.261374 0.210160 -2.910616
H -2.540166 -1.017065 -2.548867
C -5.254253 1.014188 -2.359116
H -6.075318 1.800771 -0.530158
H -4.226017 0.047903 -3.987600
H -5.997895 1.488157 -2.997038
C -2.571964 -3.850177 0.483317
H -2.049794 -3.859334 -0.483747
H -1.803978 -4.055919 1.243662
C -3.728325 -2.257868 2.116006
H -2.928807 -2.262201 2.871957
H -4.242506 -1.291598 2.197385
H -4.454678 -3.029994 2.421054
C -3.195541 -2.474869 0.708724
H -4.031768 -2.380238 0.005431
C -3.580036 -4.996088 0.490623
H -3.095046 -5.962188 0.298630
H -4.099232 -5.075431 1.453607
H -4.344378 -4.846115 -0.282769
C 2.256089 1.956611 0.400038
C 2.282324 3.120077 -0.388348
C 3.189668 1.900914 1.448383
C 3.162065 4.164580 -0.138974
H 1.617452 3.175137 -1.243678
C 4.093399 2.931317 1.688822

H 3.206894 1.026470 2.093596
C 4.080498 4.077215 0.902912
H 3.144214 5.045175 -0.779354
H 4.802359 2.840186 2.510359
H 4.778437 4.889257 1.096361

X^d

E = -2650.02338585
Pd -1.813025 -0.998250 0.079598
P 1.886997 -0.715244 -0.253153
P -0.474331 1.018179 0.380448
C 1.298433 0.821338 0.271486
C 3.714595 -0.622486 -0.493199
H 4.060871 -0.401547 0.526852
C 4.358365 -1.942516 -0.920766
H 4.073334 -2.165423 -1.959728
H 4.001716 -2.780896 -0.310373
C 5.877291 -1.846678 -0.817752
H 6.149748 -1.729389 0.242489
H 6.334437 -2.786479 -1.153352
C 6.429045 -0.670005 -1.610461
H 6.264995 -0.852190 -2.683766
H 7.515285 -0.595284 -1.471841
C 5.745176 0.632913 -1.220278
H 6.119873 1.461742 -1.834109
H 5.987836 0.885270 -0.176634
C 4.232253 0.524636 -1.366445
H 3.751718 1.468056 -1.095908
H 3.994205 0.332850 -2.418329
C 1.032352 -1.259532 -1.801598
H 0.000459 -0.904924 -1.616550
C 0.946236 -2.760712 -2.078527
H 0.533758 -3.304765 -1.222888
H 1.951360 -3.169981 -2.261686
C 0.054558 -3.011419 -3.290325
H -0.011102 -4.088792 -3.488786
H -0.963769 -2.677204 -3.039045

C 0.537668 -2.264348 -4.523739
H 1.518218 -2.661811 -4.828744
H -0.143686 -2.438133 -5.366301
C 0.668681 -0.775100 -4.240824
H -0.326983 -0.349623 -4.048694
H 1.068322 -0.247344 -5.116315
C 1.562203 -0.526574 -3.033759
H 2.569043 -0.902416 -3.266255
H 1.656156 0.545245 -2.824760
C 1.686927 -2.164100 0.906507
H 2.009089 -3.053487 0.345337
C 2.552057 -2.038682 2.158375
H 3.612417 -1.937921 1.895845
H 2.259408 -1.120834 2.686723
C 2.366042 -3.221628 3.099896
H 2.996435 -3.089422 3.988530
H 2.714412 -4.139902 2.602962
C 0.907070 -3.383906 3.493762
H 0.777807 -4.248692 4.156584
H 0.585670 -2.498869 4.064323
C 0.032338 -3.526205 2.258995
H -1.025063 -3.601982 2.536507
H 0.284900 -4.461495 1.736447
C 0.225341 -2.352762 1.306765
H -0.115417 -1.430039 1.798250
H -0.389579 -2.525307 0.400479
C -0.805969 1.687977 2.082805
H -0.324118 2.678536 2.123619
C -2.306315 1.838134 2.333102
H -2.749293 0.829281 2.314859
H -2.799840 2.394770 1.527440
C -2.573378 2.492239 3.683063
H -2.174889 3.518481 3.669282
H -3.654363 2.580792 3.854295
C -1.920183 1.711311 4.816032
H -2.417174 0.732785 4.905689
H -2.070760 2.224580 5.774869

C -0.436047 1.487033 4.556349
H 0.094176 2.450911 4.583103
H 0.001708 0.868439 5.351483
C -0.209380 0.836724 3.197585
H 0.857523 0.663690 3.018905
H -0.705886 -0.146559 3.193601
C -1.127288 2.399225 -0.704941
H -2.192671 2.133855 -0.774994
C -0.556957 2.256999 -2.111652
H 0.526912 2.444405 -2.092396
H -0.679865 1.218320 -2.444340
C -1.226999 3.207842 -3.092920
H -2.280376 2.913344 -3.205907
H -0.764026 3.114863 -4.084846
C -1.158460 4.646001 -2.600443
H -1.668128 5.317996 -3.303480
H -0.106242 4.971047 -2.566126
C -1.765305 4.770139 -1.210301
H -1.713886 5.808816 -0.857291
H -2.833400 4.507553 -1.262716
C -1.077479 3.845150 -0.210658
H -1.570881 3.937262 0.763338
H -0.044926 4.179417 -0.057234
C -3.235933 -0.106713 -0.969753
C -4.305857 0.560648 -0.365483
C -3.138133 -0.059392 -2.364885
C -5.215749 1.293538 -1.125834
H -4.435236 0.521648 0.714598
C -4.049837 0.668226 -3.126297
H -2.335757 -0.594351 -2.871592
C -5.088066 1.359723 -2.509419
H -6.033183 1.815022 -0.628680
H -3.944763 0.694668 -4.210599
H -5.798095 1.933083 -3.102468
C -2.499158 -3.909933 -0.370518
H -1.996308 -3.823627 -1.341636
H -1.753825 -4.255915 0.358822

C -3.797063 -2.631365 1.422770
H -3.021335 -2.756689 2.196394
H -4.252542 -1.650306 1.621141
C -3.162569 -2.601646 0.036818
H -3.955443 -2.392733 -0.691732
C -4.861276 -3.708366 1.618234
H -4.441299 -4.718287 1.532050
H -5.333045 -3.632405 2.606379
H -5.652179 -3.614841 0.862238
H -3.232055 -4.727093 -0.470779
C 2.227519 1.845723 0.811248
C 2.292281 3.126966 0.236269
C 3.094894 1.610608 1.891062
C 3.144910 4.111993 0.716387
H 1.682054 3.330027 -0.637480
C 3.971871 2.582969 2.361449
H 3.080357 0.638743 2.376847
C 3.996909 3.846611 1.784270
H 3.158748 5.089312 0.236272
H 4.628740 2.351155 3.198491
H 4.673168 4.612904 2.157675

$TS_{X \rightarrow XI^a}$

E = -2650.00917561

Pd -1.756358 0.843973 0.242175
P 1.987628 0.738588 -0.349785
P -0.392073 -1.060164 0.316121
C 1.357947 -0.824344 0.042005
C 3.822930 0.695392 -0.123269
H 4.076829 -0.322268 -0.457565
C 4.665065 1.670989 -0.949458
H 4.454351 2.704229 -0.636520
H 4.423499 1.609893 -2.014798
C 6.149670 1.365935 -0.764205
H 6.355326 0.372123 -1.190066
H 6.749512 2.080816 -1.342163
C 6.570651 1.378211 0.698216

H 6.487913 2.404148 1.088938
H 7.626995 1.095394 0.791841
C 5.690835 0.460078 1.534652
H 5.964519 0.527113 2.595505
H 5.846231 -0.587245 1.233644
C 4.223290 0.813999 1.348668
H 3.579545 0.193232 1.978841
H 4.066903 1.854304 1.669401
C 1.235708 2.105108 0.631720
H 0.189889 2.065421 0.269574
C 1.755102 3.508720 0.325476
H 1.824979 3.691185 -0.753313
H 2.772554 3.617764 0.731940
C 0.836588 4.545893 0.966696
H 1.213959 5.557031 0.766514
H -0.153305 4.482294 0.487564
C 0.681622 4.320943 2.464917
H 1.649480 4.505028 2.956829
H -0.022313 5.050605 2.886233
C 0.230277 2.899585 2.773206
H -0.788665 2.736792 2.387605
H 0.180303 2.739114 3.857958
C 1.162595 1.877922 2.137026
H 2.158165 1.976490 2.585690
H 0.820251 0.860614 2.331995
C 1.780599 1.344729 -2.099999
H 2.422034 2.233584 -2.194361
C 2.285315 0.278414 -3.071320
H 3.334138 0.027102 -2.864552
H 1.722536 -0.643800 -2.891596
C 2.109717 0.697762 -4.524016
H 2.458389 -0.104330 -5.187313
H 2.743513 1.573608 -4.733084
C 0.658013 1.046071 -4.818225
H 0.540374 1.356011 -5.864525
H 0.035927 0.147723 -4.686035
C 0.167619 2.139673 -3.881705

H -0.888463 2.370948 -4.074019
H 0.730490 3.064036 -4.085721
C 0.343979 1.759743 -2.416714
H -0.337092 0.937649 -2.155924
H 0.040544 2.606118 -1.787565
C -1.017127 -2.308235 -0.932273
H -0.299101 -3.143269 -0.945369
C -2.401617 -2.860268 -0.583533
H -3.105739 -2.023749 -0.476525
H -2.387599 -3.381681 0.379467
C -2.908450 -3.822276 -1.653517
H -2.268376 -4.718749 -1.665282
H -3.918500 -4.163120 -1.390045
C -2.907743 -3.193743 -3.038726
H -3.629052 -2.363617 -3.053954
H -3.243129 -3.919245 -3.791800
C -1.528676 -2.654048 -3.385240
H -0.814892 -3.489734 -3.460337
H -1.539729 -2.163346 -4.368570
C -1.053389 -1.678883 -2.319043
H -0.064178 -1.282181 -2.569437
H -1.735761 -0.814473 -2.283075
C -0.680269 -2.023550 1.892313
H -1.781138 -2.081963 1.908657
C -0.272880 -1.250744 3.139566
H 0.819596 -1.109377 3.132967
H -0.727237 -0.250709 3.112408
C -0.686144 -1.978319 4.413617
H -1.785526 -2.004718 4.465640
H -0.347023 -1.417755 5.295253
C -0.153188 -3.403461 4.447835
H -0.493965 -3.919487 5.355273
H 0.946597 -3.376865 4.498260
C -0.572171 -4.170668 3.202217
H -0.160281 -5.188458 3.220324
H -1.668367 -4.276991 3.193096
C -0.125927 -3.447242 1.937092

H -0.430610 -4.017209 1.051740
H 0.969249 -3.412495 1.914866
C -3.737182 0.575555 -0.020563
C -4.229015 0.329751 -1.309478
C -4.427656 0.016354 1.063855
C -5.339556 -0.484782 -1.509223
H -3.725140 0.760751 -2.172795
C -5.532418 -0.805001 0.860739
H -4.081243 0.200985 2.079223
C -5.993744 -1.065312 -0.426800
H -5.691009 -0.672013 -2.523373
H -6.035235 -1.247718 1.719799
H -6.859043 -1.706097 -0.583955
C -3.585550 3.214545 -1.011579
H -3.028329 2.896481 -1.901401
H -4.640394 2.957658 -1.167044
H -3.510937 4.311055 -0.961237
C -3.728726 2.956861 1.530974
H -4.799626 2.723097 1.452120
H -3.341518 2.325368 2.343052
C -3.026728 2.578124 0.240273
H -1.972286 2.933976 0.333012
C -3.540066 4.418463 1.917746
H -3.956721 5.098719 1.165118
H -4.031809 4.644007 2.872048
H -2.473975 4.662251 2.027949
C 2.278392 -2.000795 -0.023152
C 3.084793 -2.357807 1.070156
C 2.363829 -2.819528 -1.159253
C 3.948853 -3.445171 1.024347
H 3.001830 -1.776707 1.985748
C 3.215179 -3.919284 -1.209530
H 1.740867 -2.586331 -2.019673
C 4.020768 -4.232262 -0.121093
H 4.558857 -3.687477 1.893239
H 3.251018 -4.531620 -2.109132
H 4.692600 -5.087624 -0.160730

TS_{X→X'}^b

E = -2650.01020605

Pd -1.932617 0.348162 0.967968

P 1.700722 0.959163 -0.501842

P -0.214676 -1.217408 0.538845

C 1.383056 -0.684463 -0.062775

C 3.537437 1.191000 -0.577202

H 3.871884 0.222612 -0.979105

C 4.085423 2.273085 -1.511811

H 3.801243 3.268757 -1.142409

H 3.670770 2.181352 -2.519984

C 5.606250 2.167650 -1.595527

H 5.862596 1.210766 -2.075118

H 5.996819 2.957198 -2.250516

C 6.271429 2.233499 -0.228261

H 6.122600 3.237859 0.197414

H 7.355954 2.095966 -0.325847

C 5.681486 1.202615 0.723583

H 6.127126 1.301636 1.721820

H 5.918103 0.187160 0.370472

C 4.170237 1.356161 0.806296

H 3.735877 0.650213 1.521089

H 3.938267 2.363366 1.181925

C 0.921373 2.204718 0.610336

H -0.155618 2.024464 0.429475

C 1.237370 3.655138 0.242734

H 1.070725 3.845410 -0.824217

H 2.302162 3.854218 0.436388

C 0.393970 4.616015 1.074739

H 0.654578 5.652446 0.824055

H -0.664350 4.486817 0.804661

C 0.560346 4.367695 2.567102

H 1.591955 4.614274 2.863069

H -0.094936 5.038855 3.137947

C 0.273215 2.914824 2.915212

H -0.782860 2.691950 2.705144

H 0.423769 2.735407 3.987662

C 1.138635 1.965575 2.100382
H 2.189817 2.122592 2.368001
H 0.903422 0.925518 2.334701
C 1.136845 1.511921 -2.186489
H 1.612709 2.486065 -2.372309
C 1.623024 0.522383 -3.244122
H 2.716756 0.426086 -3.217075
H 1.234584 -0.468863 -2.988469
C 1.149257 0.898849 -4.640833
H 1.497874 0.151662 -5.365513
H 1.602922 1.857373 -4.937484
C -0.366322 1.024628 -4.683384
H -0.701752 1.308513 -5.689187
H -0.819335 0.045235 -4.467341
C -0.850383 2.037454 -3.657545
H -1.945671 2.102156 -3.669792
H -0.474237 3.034912 -3.934397
C -0.376391 1.699554 -2.249323
H -0.874282 0.789037 -1.888962
H -0.688590 2.498104 -1.563484
C -0.868092 -2.521982 -0.631824
H -0.048189 -3.235705 -0.804376
C -2.058470 -3.287222 -0.055028
H -2.849059 -2.563462 0.186938
H -1.791204 -3.789663 0.881229
C -2.587120 -4.323257 -1.042335
H -1.819489 -5.099291 -1.189713
H -3.461702 -4.831436 -0.614165
C -2.938270 -3.706231 -2.388273
H -3.777131 -3.007625 -2.257729
H -3.275369 -4.481302 -3.089484
C -1.753961 -2.941142 -2.958533
H -0.936780 -3.644008 -3.187627
H -2.028277 -2.457946 -3.906304
C -1.261680 -1.898809 -1.965631
H -0.412707 -1.344088 -2.378364
H -2.059581 -1.160983 -1.787823

C 0.031198 -2.263547 2.077677
H -1.008098 -2.502811 2.354984
C 0.606548 -1.444548 3.226856
H 1.611236 -1.089633 2.948086
H -0.014289 -0.550649 3.378880
C 0.680105 -2.243009 4.522457
H -0.343467 -2.463698 4.862517
H 1.145135 -1.636988 5.311715
C 1.432075 -3.552277 4.336922
H 1.444409 -4.124636 5.273961
H 2.482856 -3.335611 4.088711
C 0.816710 -4.372289 3.212441
H 1.371200 -5.309395 3.070483
H -0.210182 -4.656075 3.492084
C 0.787356 -3.581672 1.909342
H 0.338959 -4.189070 1.114368
H 1.817309 -3.380425 1.595706
C -3.634373 0.444247 -0.120951
C -3.638344 1.157408 -1.324692
C -4.554316 -0.603686 0.018385
C -4.471051 0.788427 -2.377906
H -2.974564 2.008525 -1.450640
C -5.390114 -0.969884 -1.031516
H -4.607435 -1.155642 0.954923
C -5.346260 -0.284042 -2.242344
H -4.437324 1.350798 -3.310775
H -6.078600 -1.804108 -0.901542
H -5.998015 -0.572990 -3.064470
C -3.384413 3.101912 0.992096
H -2.465597 3.186305 0.392026
H -4.214997 3.201684 0.280128
C -4.752168 1.369986 2.271799
H -5.581756 1.419057 1.556215
H -4.731868 0.359219 2.694158
C -3.430898 1.725293 1.629454
H -2.657693 1.684852 2.433495
C -3.429846 4.253255 1.989365

H -3.383984 5.221290 1.474681
H -4.351731 4.240862 2.583035
H -2.586018 4.211422 2.690709
H -4.979604 2.059012 3.098955
C 2.428331 -1.710324 -0.374496
C 3.511487 -1.941550 0.490775
C 2.365915 -2.515378 -1.522186
C 4.485004 -2.894879 0.217321
H 3.567053 -1.373413 1.415879
C 3.326502 -3.484009 -1.796577
H 1.538955 -2.379571 -2.214172
C 4.397999 -3.673784 -0.932530
H 5.308027 -3.040348 0.915415
H 3.237168 -4.089291 -2.697216
H 5.154557 -4.425884 -1.148114

TS_{X→X^f}

E = -2650.00770923

Pd -1.805861 0.863726 -0.108960
P 2.029562 0.422545 -0.470832
P -0.458526 -0.833883 0.759157
C 1.305396 -0.869978 0.425953
C 3.866894 0.330034 -0.283752
H 4.112023 -0.585236 -0.839382
C 4.634682 1.473042 -0.949506
H 4.465592 2.404636 -0.389939
H 4.281185 1.650821 -1.972826
C 6.127773 1.161337 -0.968416
H 6.296785 0.286746 -1.615216
H 6.678289 1.995094 -1.423163
C 6.661537 0.864892 0.426201
H 6.600808 1.780233 1.035140
H 7.724720 0.596568 0.376502
C 5.860173 -0.236501 1.106901
H 6.229284 -0.404921 2.126525
H 5.996889 -1.185765 0.566474
C 4.375197 0.101993 1.142657

H 3.809275 -0.696319 1.631677
H 4.232702 1.008943 1.741417
C 1.398516 2.050010 0.144477
H 0.322611 1.822697 0.296382
C 1.485440 3.260909 -0.786100
H 1.030725 3.052016 -1.759910
H 2.539660 3.508928 -0.977923
C 0.779981 4.464273 -0.163256
H 0.887834 5.335486 -0.822198
H -0.296448 4.247256 -0.111958
C 1.280334 4.785520 1.236829
H 2.324534 5.130288 1.183537
H 0.700946 5.614184 1.663719
C 1.210404 3.558532 2.133600
H 0.159211 3.257505 2.269061
H 1.605364 3.783679 3.132528
C 1.981198 2.404706 1.510754
H 3.028715 2.714422 1.383528
H 1.983974 1.524499 2.159655
C 1.785585 0.550595 -2.314998
H 2.252197 1.509333 -2.588888
C 2.458885 -0.544294 -3.138850
H 3.529068 -0.621965 -2.906516
H 1.999430 -1.509832 -2.885258
C 2.269602 -0.294874 -4.631092
H 2.760096 -1.090655 -5.206392
H 2.772339 0.645021 -4.906527
C 0.794334 -0.204690 -4.993645
H 0.673741 0.002406 -6.064758
H 0.319405 -1.179989 -4.807413
C 0.092173 0.855508 -4.158402
H -0.982657 0.873499 -4.382542
H 0.482094 1.850185 -4.426483
C 0.302231 0.617081 -2.670082
H -0.170822 -0.325559 -2.371138
H -0.210420 1.387714 -2.084047
C -0.995921 -2.535796 0.206636

H -0.310167 -3.239317 0.704448
C -2.423768 -2.899634 0.600347
H -3.114931 -2.150699 0.187311
H -2.536904 -2.877990 1.690477
C -2.811252 -4.283889 0.091396
H -2.194191 -5.041874 0.598937
H -3.854294 -4.495946 0.361478
C -2.616132 -4.407658 -1.411489
H -3.304894 -3.714740 -1.917344
H -2.875503 -5.418915 -1.752391
C -1.186541 -4.059816 -1.798393
H -0.496453 -4.798279 -1.362100
H -1.056175 -4.116261 -2.887894
C -0.810851 -2.670781 -1.301344
H 0.227604 -2.434494 -1.569089
H -1.455766 -1.924093 -1.790730
C -0.782511 -0.902569 2.607859
H -0.694576 -1.956760 2.919442
C -2.199543 -0.416429 2.928740
H -2.274028 0.636088 2.608567
H -2.949378 -0.950561 2.337199
C -2.499702 -0.525300 4.418319
H -2.473322 -1.584485 4.718190
H -3.518428 -0.170577 4.624428
C -1.488083 0.259055 5.242117
H -1.680719 0.135123 6.316022
H -1.608671 1.332001 5.025631
C -0.062182 -0.154030 4.903347
H 0.657781 0.465000 5.455563
H 0.104788 -1.191707 5.231620
C 0.204004 -0.060296 3.406413
H 1.239347 -0.339401 3.173540
H 0.086646 0.986250 3.084741
C -3.662789 0.432964 -0.774718
C -3.704050 -0.159841 -2.045599
C -4.666667 0.095466 0.147487
C -4.675648 -1.106687 -2.356688

H -2.945401 0.094184 -2.786461
C -5.638185 -0.844604 -0.172918
H -4.669347 0.557463 1.134379
C -5.645952 -1.460538 -1.423421
H -4.667868 -1.577955 -3.339119
H -6.394338 -1.105888 0.566651
H -6.403926 -2.201281 -1.669209
C -3.121317 3.197439 0.572443
H -3.731726 2.679619 1.324725
H -2.091175 3.175965 0.963054
C -2.452716 3.010902 -1.919201
H -1.391920 3.169547 -1.689510
H -2.510374 2.349056 -2.791734
H -2.867653 3.983261 -2.227589
C -3.226880 2.434622 -0.747448
H -4.282713 2.441560 -1.028132
C -3.579151 4.648771 0.466703
H -3.581031 5.136271 1.449322
H -2.921428 5.232254 -0.189917
H -4.596360 4.713004 0.058017
C 2.053406 -2.122130 0.658922
C 1.985460 -2.787226 1.900633
C 2.848220 -2.742833 -0.321547
C 2.676734 -3.965321 2.146133
H 1.383682 -2.358722 2.695685
C 3.564365 -3.908237 -0.071786
H 2.889906 -2.310306 -1.316157
C 3.486043 -4.533307 1.166473
H 2.590915 -4.438296 3.123348
H 4.170230 -4.341928 -0.866181
H 4.035295 -5.451767 1.362266

TS_{X→X^d}

E = -2650.00786766

Pd -1.814331 0.862989 0.267753

P 2.005717 0.517914 -0.372955

P -0.455399 -1.010038 0.576765

C 1.292833 -0.965003 0.166359
C 3.846841 0.359071 -0.304624
H 4.046852 -0.367619 -1.103636
C 4.617243 1.630702 -0.662678
H 4.495328 2.373666 0.138811
H 4.228272 2.089638 -1.580292
C 6.099728 1.313685 -0.834967
H 6.218797 0.652210 -1.706817
H 6.654473 2.232730 -1.064354
C 6.681099 0.630838 0.395754
H 6.670791 1.340376 1.237640
H 7.733498 0.371008 0.223215
C 5.877673 -0.603931 0.779892
H 6.282905 -1.055954 1.694055
H 5.965009 -1.366864 -0.008871
C 4.406211 -0.263766 0.977822
H 3.837431 -1.156186 1.254357
H 4.315257 0.444686 1.809211
C 1.435992 1.918124 0.695589
H 0.364450 1.664714 0.836665
C 1.502771 3.335935 0.124906
H 0.993082 3.403349 -0.841649
H 2.551318 3.617714 -0.051600
C 0.859051 4.329662 1.089639
H 0.947385 5.346062 0.684669
H -0.217013 4.111574 1.145681
C 1.445339 4.257348 2.491211
H 2.493551 4.593259 2.468377
H 0.913009 4.946027 3.159720
C 1.393920 2.834839 3.028285
H 0.344903 2.519330 3.144837
H 1.852053 2.778178 4.024012
C 2.096695 1.883141 2.072614
H 3.144450 2.201921 1.973625
H 2.108853 0.860574 2.459908
C 1.687626 1.150972 -2.097658
H 2.161224 2.144516 -2.118939

C 2.302957 0.320580 -3.221350
H 3.379864 0.171397 -3.068437
H 1.833586 -0.673016 -3.223632
C 2.057439 0.974981 -4.576621
H 2.507200 0.365502 -5.371018
H 2.567839 1.950042 -4.604018
C 0.570675 1.174656 -4.833020
H 0.410532 1.672269 -5.798143
H 0.083824 0.190037 -4.903324
C -0.074941 1.966603 -3.705687
H -1.157752 2.053865 -3.866525
H 0.322778 2.993840 -3.705372
C 0.192330 1.322976 -2.352776
H -0.284479 0.336958 -2.306188
H -0.281671 1.903156 -1.553689
C -1.041295 -2.490328 -0.400486
H -0.348140 -3.306626 -0.143408
C -2.458939 -2.944681 -0.069349
H -3.154409 -2.108825 -0.232390
H -2.532881 -3.225229 0.987841
C -2.879915 -4.133911 -0.926712
H -2.256036 -5.004017 -0.668619
H -3.916102 -4.409369 -0.689376
C -2.735569 -3.841783 -2.412210
H -3.433443 -3.036636 -2.685959
H -3.016484 -4.721336 -3.006861
C -1.316394 -3.401955 -2.738973
H -0.619002 -4.231736 -2.546590
H -1.223558 -3.156814 -3.805984
C -0.911407 -2.203660 -1.892633
H 0.118873 -1.901735 -2.122003
H -1.566181 -1.351474 -2.133376
C -0.696202 -1.585293 2.347593
H -0.606103 -2.684306 2.353300
C -2.088942 -1.209050 2.863732
H -2.168558 -0.109519 2.844287
H -2.875371 -1.566904 2.191766

C -2.310535 -1.719393 4.282218
H -2.281135 -2.820122 4.280726
H -3.312714 -1.437245 4.631692
C -1.247899 -1.186951 5.233409
H -1.386361 -1.599635 6.241494
H -1.366053 -0.095924 5.324258
C 0.152892 -1.489261 4.718962
H 0.908769 -1.042483 5.378910
H 0.323619 -2.576791 4.743165
C 0.340900 -0.991327 3.292201
H 1.358724 -1.195253 2.936909
H 0.221457 0.103365 3.273131
C -3.700515 0.632711 -0.412487
C -3.805096 0.412539 -1.794296
C -4.667827 0.056189 0.426326
C -4.802397 -0.411212 -2.308346
H -3.076585 0.860633 -2.470842
C -5.665402 -0.758293 -0.095050
H -4.621411 0.228310 1.501240
C -5.736001 -1.006801 -1.464790
H -4.844170 -0.594100 -3.381728
H -6.392036 -1.211930 0.578155
H -6.514003 -1.650506 -1.869747
C -3.112228 2.908951 1.619771
H -3.681247 2.212626 2.247335
H -2.072461 2.893783 1.974630
C -2.475739 3.434171 -0.828300
H -1.404895 3.441955 -0.580695
H -2.551538 2.997967 -1.833828
C -3.241530 2.549482 0.146445
H -4.298636 2.638200 -0.114826
C -2.985219 4.870974 -0.871983
H -4.055063 4.900944 -1.116168
H -2.851008 5.378492 0.091331
H -2.452584 5.458189 -1.630236
H -3.511191 3.917245 1.815537
C 2.023180 -2.240048 0.011909

C 1.997391 -3.216994 1.028428
 C 2.757629 -2.578529 -1.138933
 C 2.670043 -4.425111 0.909599
 H 1.445226 -3.014682 1.940426
 C 3.456104 -3.775766 -1.251449
 H 2.765296 -1.891601 -1.979325
 C 3.419022 -4.713842 -0.227498
 H 2.618032 -5.145099 1.725019
 H 4.014684 -3.982906 -2.163204
 H 3.953987 -5.656942 -0.316782

XI^{a,d}

E = -2650.07787001
 Pd 1.853936 -0.604090 -0.195961
 P -1.946870 -0.923578 -0.191831
 P 0.332752 1.098029 0.088282
 C -1.410819 0.700962 0.066241
 C -3.690075 -1.076930 0.404563
 H -4.116892 -0.091103 0.165874
 C -4.574070 -2.132380 -0.263931
 H -4.185701 -3.137496 -0.040287
 H -4.569764 -2.028088 -1.353241
 C -6.011176 -2.004745 0.236413
 H -6.411688 -1.038037 -0.104641
 H -6.635750 -2.779453 -0.227013
 C -6.112517 -2.077747 1.753448
 H -5.838323 -3.091161 2.084855
 H -7.150288 -1.917446 2.072903
 C -5.181584 -1.074861 2.420519
 H -5.219234 -1.183243 3.512167
 H -5.508136 -0.048566 2.192477
 C -3.757395 -1.263938 1.921784
 H -3.057156 -0.594357 2.432501
 H -3.435779 -2.288232 2.159132
 C -0.866188 -2.183469 0.589361
 H 0.088474 -1.958493 0.062389
 C -1.213799 -3.645467 0.322504

H -1.487180 -3.822272 -0.724215
H -2.085986 -3.935393 0.929892
C -0.015931 -4.514428 0.698340
H -0.246950 -5.574354 0.529665
H 0.815552 -4.262154 0.021138
C 0.424065 -4.290467 2.140514
H -0.361205 -4.668588 2.813718
H 1.324436 -4.881125 2.355973
C 0.663791 -2.816279 2.440646
H 1.523974 -2.443653 1.859575
H 0.912999 -2.676421 3.500736
C -0.552329 -1.980882 2.067374
H -1.402185 -2.290402 2.688088
H -0.376010 -0.921722 2.260968
C -2.036343 -1.496713 -1.960904
H -2.599011 -2.442212 -1.960294
C -2.809305 -0.466340 -2.783408
H -3.819577 -0.321691 -2.377200
H -2.309224 0.503350 -2.675748
C -2.874146 -0.842719 -4.256883
H -3.412259 -0.066588 -4.816399
H -3.455043 -1.770935 -4.373252
C -1.479589 -1.048629 -4.830046
H -1.536536 -1.333468 -5.888612
H -0.928072 -0.097078 -4.791679
C -0.720664 -2.101477 -4.036372
H 0.297334 -2.222658 -4.430931
H -1.220997 -3.074456 -4.163509
C -0.653269 -1.761766 -2.552916
H -0.018320 -0.880723 -2.394621
H -0.157185 -2.578927 -2.015049
C 0.713696 2.339313 -1.265191
H 0.010282 3.180658 -1.176992
C 2.143335 2.865253 -1.124041
H 2.821071 1.995958 -1.111931
H 2.280698 3.382007 -0.167191
C 2.523338 3.807011 -2.261344

H 1.905272 4.716406 -2.200216
H 3.565418 4.133194 -2.141287
C 2.322518 3.160555 -3.623688
H 3.014332 2.309402 -3.721579
H 2.572449 3.865275 -4.427911
C 0.895977 2.652860 -3.771028
H 0.200813 3.507071 -3.761778
H 0.761501 2.151784 -4.739885
C 0.549749 1.699594 -2.637214
H -0.468731 1.311642 -2.749976
H 1.221840 0.826976 -2.680473
C 0.674530 2.166083 1.596384
H 1.771635 2.266795 1.562960
C 0.347530 1.424485 2.886389
H -0.729410 1.195363 2.904824
H 0.875120 0.462305 2.890808
C 0.728213 2.223857 4.125493
H 1.824520 2.323390 4.161736
H 0.436491 1.675213 5.031342
C 0.104910 3.611415 4.111701
H 0.409274 4.180497 5.000227
H -0.991176 3.516836 4.159297
C 0.483507 4.355032 2.839709
H 0.023678 5.352156 2.823565
H 1.573551 4.513411 2.826792
C 0.072611 3.572457 1.597437
H 0.379023 4.123080 0.700291
H -1.021387 3.508735 1.561939
C 4.243466 -1.215314 0.067199
C 3.401990 -2.072644 -0.684127
C 4.894453 -0.166563 -0.603476
C 3.150660 -1.791858 -2.046322
H 3.039752 -2.999574 -0.237903
C 4.710457 0.046126 -1.965624
H 5.568702 0.481200 -0.044698
C 3.818721 -0.746780 -2.684971
H 2.499948 -2.451610 -2.617702

H 5.241940 0.855380 -2.463123
H 3.643548 -0.557925 -3.742502
C 5.992865 -1.841047 1.754300
H 6.314433 -2.664347 1.105778
H 6.631344 -0.975355 1.534751
H 6.179689 -2.139013 2.792624
C 4.030147 -0.358822 2.421265
H 4.637435 0.537696 2.223790
H 3.011502 -0.103756 2.090139
C 4.521145 -1.504029 1.527779
H 3.926426 -2.392564 1.789247
C 4.024637 -0.673164 3.905921
H 5.031325 -0.859306 4.300230
H 3.597647 0.157656 4.480702
H 3.417048 -1.564187 4.115105
C -2.419588 1.799314 0.141805
C -3.156226 2.047758 1.312924
C -2.635972 2.680399 -0.929743
C -4.059266 3.099839 1.407554
H -2.987209 1.413179 2.178739
C -3.523926 3.747192 -0.837572
H -2.087588 2.522391 -1.855199
C -4.245766 3.961383 0.330996
H -4.607194 3.257683 2.335418
H -3.656563 4.411344 -1.690273
H -4.944253 4.792897 0.403837

XI^{b,c}

E = -2650.07610354
Pd 1.991940 0.079626 0.134894
P -1.655729 -1.169567 -0.436382
P 0.017600 1.245276 0.445494
C -1.560658 0.458997 0.138562
C -3.362167 -1.816073 -0.127361
H -3.989110 -0.925932 -0.288927
C -3.879345 -2.915681 -1.058699
H -3.288671 -3.832614 -0.912507

H -3.773511 -2.637492 -2.111356
C -5.353277 -3.193214 -0.772188
H -5.931681 -2.295151 -1.037272
H -5.713302 -3.997533 -1.426827
C -5.612947 -3.539942 0.686887
H -5.146582 -4.510678 0.915276
H -6.689342 -3.664606 0.861798
C -5.032930 -2.485576 1.619229
H -5.168733 -2.783341 2.666972
H -5.567304 -1.531986 1.489123
C -3.557121 -2.271380 1.320455
H -3.101426 -1.565314 2.021708
H -3.030119 -3.226904 1.455642
C -0.378405 -2.258886 0.297412
H 0.535538 -1.708921 -0.020260
C -0.286402 -3.681403 -0.246186
H -0.369996 -3.713983 -1.338535
H -1.117634 -4.284777 0.152508
C 1.044231 -4.290445 0.188913
H 1.133028 -5.319810 -0.182207
H 1.854951 -3.713930 -0.284437
C 1.223350 -4.253102 1.701768
H 0.496281 -4.939676 2.163111
H 2.218428 -4.631945 1.972672
C 1.011964 -2.854259 2.266261
H 1.802084 -2.176730 1.911663
H 1.076646 -2.870126 3.362235
C -0.322247 -2.277440 1.821274
H -1.132467 -2.894218 2.227827
H -0.458176 -1.264474 2.205070
C -1.436313 -1.422739 -2.265503
H -1.731661 -2.461766 -2.475190
C -2.382672 -0.483366 -3.013435
H -3.423283 -0.648334 -2.703766
H -2.149259 0.545172 -2.715050
C -2.245882 -0.616194 -4.522841
H -2.916777 0.094426 -5.022797

H -2.568578 -1.622144 -4.833500
C -0.805324 -0.394092 -4.959407
H -0.709984 -0.507548 -6.047046
H -0.511809 0.640677 -4.724880
C 0.130251 -1.353995 -4.239794
H 1.169697 -1.176672 -4.545117
H -0.109217 -2.384875 -4.545009
C 0.009169 -1.238225 -2.725171
H 0.375007 -0.260624 -2.388652
H 0.665663 -1.974561 -2.244131
C 0.156600 2.760725 -0.650400
H -0.755380 3.361394 -0.515415
C 1.370970 3.609985 -0.271087
H 2.264633 2.968218 -0.338694
H 1.307757 3.950141 0.768888
C 1.526431 4.818518 -1.187589
H 0.668942 5.494180 -1.042956
H 2.420981 5.389399 -0.903841
C 1.598953 4.411351 -2.651506
H 2.512653 3.818623 -2.811576
H 1.678581 5.296212 -3.296927
C 0.393710 3.566249 -3.036164
H -0.519365 4.178496 -2.968237
H 0.470956 3.236588 -4.081783
C 0.268164 2.361526 -2.115577
H -0.588982 1.742446 -2.401638
H 1.162077 1.726415 -2.224196
C -0.052981 2.083451 2.125526
H 0.977554 2.455849 2.239659
C -0.272498 1.068304 3.240181
H -1.249495 0.582431 3.093324
H 0.488932 0.280470 3.160595
C -0.220204 1.706045 4.622703
H 0.803022 2.065745 4.812575
H -0.431743 0.951772 5.392711
C -1.184714 2.877095 4.737545
H -1.116383 3.336979 5.732443

H -2.217220 2.508895 4.632020
C -0.911244 3.903908 3.649281
H -1.613620 4.744633 3.725718
H 0.096328 4.324217 3.795960
C -1.000599 3.276710 2.262749
H -0.777147 4.035345 1.503670
H -2.033326 2.956365 2.083620
C 4.114009 -0.572904 -0.035331
C 3.506577 -0.983760 -1.247181
C 4.624351 0.749817 0.012505
C 3.504627 -0.142894 -2.375282
H 3.170481 -2.015479 -1.350275
C 4.641297 1.560821 -1.115505
H 5.078747 1.108073 0.934114
C 4.098349 1.109401 -2.321007
H 3.056556 -0.499615 -3.300439
H 5.077515 2.556098 -1.053029
H 4.122138 1.742782 -3.205343
C 5.837679 -2.156928 0.825036
H 5.908074 -2.497526 -0.217205
H 6.567822 -1.339363 0.923168
C 4.246525 -1.019247 2.453086
H 5.035469 -0.298014 2.703806
H 3.280654 -0.503593 2.533663
C 4.431845 -1.583180 1.048389
H 3.720668 -2.413227 0.918814
C 6.202569 -3.298345 1.758081
H 7.180179 -3.723085 1.501248
H 6.252164 -2.973660 2.804145
H 5.463501 -4.109129 1.699183
H 4.274256 -1.812687 3.208087
C -2.818200 1.257500 0.253403
C -3.673708 1.120258 1.359990
C -3.183897 2.219302 -0.701563
C -4.829025 1.879598 1.500092
H -3.400661 0.419201 2.143869
C -4.328897 2.997459 -0.560491

H -2.548718 2.360094 -1.572809
C -5.162926 2.828177 0.538619
H -5.462323 1.741307 2.375174
H -4.572906 3.737027 -1.321559
H -6.061600 3.432399 0.647453

XII^a

E = -2650.02633911
Pd -2.050983 -0.970705 -0.169378
P 2.060983 -0.739084 -0.227058
P -0.545220 0.787073 0.466920
C 1.235633 0.669758 0.330610
C 3.673330 -0.230315 -0.978131
H 3.953294 0.624927 -0.345381
C 4.842785 -1.215744 -0.924408
H 4.625787 -2.096860 -1.544963
H 5.008785 -1.579555 0.094597
C 6.118489 -0.536452 -1.417309
H 6.384156 0.261408 -0.707318
H 6.949561 -1.253358 -1.403018
C 5.959904 0.066233 -2.805983
H 5.816433 -0.743774 -3.537645
H 6.878737 0.589577 -3.099767
C 4.762980 1.004751 -2.869163
H 4.628589 1.389976 -3.887988
H 4.938815 1.877304 -2.221097
C 3.502306 0.289494 -2.407099
H 2.618658 0.934909 -2.483578
H 3.319896 -0.564976 -3.074481
C 1.097359 -1.798706 -1.386729
H 0.260573 -2.132060 -0.752697
C 1.872603 -3.040238 -1.836576
H 2.355510 -3.545746 -0.992521
H 2.677398 -2.733211 -2.520880
C 0.948275 -4.010668 -2.561394
H 1.513410 -4.893716 -2.886662
H 0.186332 -4.370761 -1.852607

C 0.263523 -3.343111 -3.743685
H 1.023725 -3.087082 -4.498079
H -0.430943 -4.041456 -4.228029
C -0.465593 -2.078205 -3.316686
H -1.302783 -2.333361 -2.647888
H -0.907985 -1.584276 -4.190667
C 0.455240 -1.106517 -2.587507
H 1.224344 -0.750617 -3.282025
H -0.106820 -0.231568 -2.248799
C 2.570852 -1.944898 1.101291
H 3.300074 -2.637686 0.657713
C 3.249106 -1.175931 2.234623
H 4.131801 -0.636454 1.864334
H 2.556731 -0.401729 2.585758
C 3.621709 -2.080882 3.400286
H 4.087045 -1.487080 4.197424
H 4.377011 -2.812441 3.073809
C 2.399078 -2.819540 3.924026
H 2.672434 -3.476676 4.759467
H 1.678444 -2.089509 4.323572
C 1.740843 -3.621987 2.812576
H 0.840082 -4.129845 3.181421
H 2.432225 -4.414677 2.487143
C 1.382016 -2.754611 1.612015
H 0.577046 -2.057217 1.878922
H 0.985385 -3.395878 0.815219
C -1.005684 1.101963 2.250073
H -0.484725 2.014608 2.572319
C -2.511023 1.325002 2.393896
H -3.023415 0.410914 2.053031
H -2.859428 2.130578 1.736343
C -2.891476 1.614012 3.840635
H -2.424641 2.560328 4.155007
H -3.976515 1.760454 3.923361
C -2.435342 0.495099 4.767101
H -2.990118 -0.422930 4.518233
H -2.678906 0.732688 5.810954

C -0.944483 0.227459 4.612924
H -0.378995 1.103713 4.966707
H -0.636465 -0.617195 5.244769
C -0.581689 -0.042097 3.159367
H 0.493439 -0.228204 3.057064
H -1.088993 -0.961516 2.821219
C -1.048892 2.409523 -0.317883
H -2.143271 2.312683 -0.381932
C -0.534756 2.475848 -1.752268
H 0.563648 2.467353 -1.744535
H -0.855108 1.578137 -2.290068
C -1.043609 3.711057 -2.481468
H -2.134566 3.626179 -2.599406
H -0.621597 3.748350 -3.495118
C -0.714306 4.982640 -1.714874
H -1.101543 5.864307 -2.242820
H 0.379493 5.102522 -1.659913
C -1.276741 4.915103 -0.303047
H -1.037014 5.830904 0.253778
H -2.375004 4.858023 -0.357859
C -0.748092 3.698805 0.450704
H -1.205867 3.667564 1.446777
H 0.331239 3.817436 0.606865
C -3.312074 0.165494 -1.250555
C -4.383716 0.830123 -0.638341
C -3.137638 0.370175 -2.624080
C -5.212713 1.691713 -1.353874
H -4.584067 0.678533 0.421944
C -3.966351 1.226780 -3.346843
H -2.333072 -0.140955 -3.149051
C -5.004217 1.901826 -2.713248
H -6.030255 2.199961 -0.842872
H -3.795750 1.367121 -4.414096
H -5.649604 2.575528 -3.274185
C -2.176554 -3.258508 0.471634
H -1.594267 -4.014544 -0.068328
H -1.369663 -2.500142 0.809241

C -4.631185 -2.514674 0.314276
H -4.535049 -2.061319 1.313697
H -5.244382 -1.818614 -0.271533
C -3.267091 -2.611926 -0.327812
H -3.323363 -2.969197 -1.362042
C -5.351066 -3.853805 0.429587
H -4.778526 -4.569627 1.035001
H -6.338756 -3.743463 0.895031
H -5.497726 -4.306007 -0.559946
H -2.506874 -3.667042 1.436052
C 2.034498 1.846907 0.796344
C 2.103630 2.196236 2.155356
C 2.675019 2.720575 -0.100005
C 2.730035 3.359170 2.589035
H 1.643984 1.540884 2.889793
C 3.320474 3.875313 0.326010
H 2.637065 2.503962 -1.163260
C 3.340597 4.210627 1.675584
H 2.744333 3.597003 3.651456
H 3.793361 4.527184 -0.406903
H 3.830055 5.122689 2.011462

XII^c

E = -2650.02525391
Pd -2.104753 -0.871335 0.326887
P 2.002876 -0.804082 -0.145803
P -0.508059 0.936329 0.340537
C 1.254035 0.731904 0.092347
C 3.577461 -0.571249 -1.091529
H 3.927489 0.398234 -0.705994
C 4.710324 -1.574830 -0.861640
H 4.419230 -2.565172 -1.240723
H 4.927365 -1.695811 0.204043
C 5.978149 -1.102368 -1.569299
H 6.317346 -0.171451 -1.090122
H 6.780340 -1.836925 -1.421775
C 5.757502 -0.846579 -3.053222

H 5.541154 -1.801588 -3.556332
H 6.674653 -0.455596 -3.511943
C 4.592563 0.105801 -3.283040
H 4.408115 0.236671 -4.356979
H 4.838402 1.100538 -2.880336
C 3.338981 -0.412949 -2.594678
H 2.474698 0.232987 -2.788518
H 3.090656 -1.398109 -3.015599
C 0.912909 -2.051140 -0.947734
H 0.092826 -2.140575 -0.214312
C 1.564174 -3.427028 -1.098827
H 2.059555 -3.746666 -0.174866
H 2.344667 -3.373421 -1.873052
C 0.520027 -4.457170 -1.512528
H 0.986145 -5.445690 -1.614585
H -0.228796 -4.543838 -0.708935
C -0.173581 -4.052354 -2.804398
H 0.560503 -4.071626 -3.624986
H -0.950506 -4.782380 -3.065910
C -0.772144 -2.658295 -2.694343
H -1.589778 -2.660339 -1.959929
H -1.216077 -2.358295 -3.652000
C 0.255995 -1.623909 -2.258508
H 1.009807 -1.513692 -3.045356
H -0.219637 -0.648796 -2.125730
C 2.569450 -1.673151 1.402299
H 3.229004 -2.497358 1.095288
C 3.369604 -0.689983 2.256275
H 4.234886 -0.305029 1.699470
H 2.736786 0.182891 2.455980
C 3.809623 -1.303814 3.577437
H 4.362486 -0.561288 4.166999
H 4.507798 -2.133134 3.384961
C 2.611384 -1.824763 4.356753
H 2.932588 -2.276599 5.303960
H 1.956162 -0.980252 4.619944
C 1.827795 -2.832022 3.528900

H 0.944670 -3.182514 4.079017
H 2.457072 -3.718791 3.355785
C 1.397682 -2.259903 2.183345
H 0.650692 -1.469861 2.332028
H 0.904788 -3.046665 1.599332
C -0.794024 1.722145 2.013115
H -0.219895 2.659173 2.038656
C -2.271378 2.052073 2.223245
H -2.838800 1.109014 2.183093
H -2.661318 2.675801 1.410104
C -2.500243 2.728648 3.569235
H -1.978916 3.698419 3.579308
H -3.567507 2.948578 3.704122
C -1.987091 1.869081 4.716401
H -2.588744 0.948437 4.769640
H -2.120564 2.384138 5.676772
C -0.526723 1.492636 4.509231
H 0.094778 2.399904 4.567776
H -0.181456 0.826887 5.312440
C -0.314885 0.835014 3.152572
H 0.740054 0.575549 3.010369
H -0.875829 -0.114067 3.114674
C -1.070369 2.323905 -0.785303
H -2.166872 2.255563 -0.715686
C -0.708442 2.005447 -2.232330
H 0.384172 1.936481 -2.327738
H -1.113188 1.022700 -2.492642
C -1.255252 3.044007 -3.201305
H -2.354413 2.987398 -3.194845
H -0.936286 2.804819 -4.224992
C -0.819447 4.448798 -2.815900
H -1.234251 5.188303 -3.513799
H 0.277118 4.524506 -2.890225
C -1.242745 4.763394 -1.389105
H -0.928489 5.776874 -1.105759
H -2.342173 4.746748 -1.330270
C -0.671614 3.751397 -0.401240

H -1.032325 3.992136 0.605800
H 0.419853 3.856043 -0.373995
C -3.459015 -0.004010 -0.881611
C -4.468406 0.812864 -0.352828
C -3.422283 -0.149707 -2.273488
C -5.368694 1.485358 -1.176959
H -4.560672 0.936629 0.725132
C -4.320711 0.519637 -3.102798
H -2.671597 -0.790094 -2.732116
C -5.295375 1.349671 -2.559437
H -6.136227 2.117972 -0.731451
H -4.254035 0.390873 -4.182987
H -5.995967 1.876429 -3.204998
C -3.827920 -3.365673 -0.309118
H -4.369025 -2.816851 -1.091648
H -2.938971 -3.793075 -0.796261
C -2.295193 -2.830304 1.685631
H -1.858855 -3.803389 1.422321
H -1.384671 -2.121098 1.640288
C -3.398011 -2.395557 0.766184
H -4.262034 -1.976541 1.295192
H -2.542551 -2.813409 2.753654
C -4.698960 -4.500510 0.218136
H -4.996985 -5.189277 -0.582710
H -4.171379 -5.087204 0.982550
H -5.614872 -4.109517 0.679586
C 2.111181 1.955366 0.178779
C 2.324304 2.622739 1.396268
C 2.674153 2.553572 -0.962204
C 3.019139 3.824982 1.468154
H 1.925117 2.189881 2.309293
C 3.386783 3.745010 -0.897442
H 2.519479 2.086238 -1.929937
C 3.554049 4.396903 0.319734
H 3.146969 4.314284 2.432401
H 3.796615 4.175778 -1.809697
H 4.097472 5.338269 0.372614

TS_{XII→XIII}^a

E = -2650.01184812

Pd -1.977421 -1.022947 0.067029

P 2.069691 -0.721546 -0.196772

P -0.573608 0.808434 0.456844

C 1.194843 0.708353 0.221386

C 3.621088 -0.221666 -1.078137

H 3.879423 0.716937 -0.566713

C 4.848958 -1.128788 -0.964713

H 4.661078 -2.088765 -1.466020

H 5.078827 -1.357627 0.080737

C 6.060875 -0.444986 -1.594038

H 6.306277 0.446381 -0.996938

H 6.933231 -1.108446 -1.533293

C 5.811584 -0.024658 -3.035323

H 5.687501 -0.923916 -3.658195

H 6.684887 0.508738 -3.431937

C 4.559092 0.832357 -3.152154

H 4.360430 1.083866 -4.201819

H 4.708647 1.785036 -2.620817

C 3.362974 0.110720 -2.549509

H 2.440648 0.693256 -2.662418

H 3.204950 -0.826707 -3.101648

C 1.136242 -1.961102 -1.188049

H 0.354301 -2.272835 -0.480371

C 1.979542 -3.190928 -1.536628

H 2.525181 -3.567701 -0.663843

H 2.736346 -2.912940 -2.284694

C 1.098814 -4.293122 -2.110873

H 1.710888 -5.168203 -2.364940

H 0.390179 -4.623006 -1.335020

C 0.326830 -3.804036 -3.326010

H 1.039358 -3.579108 -4.134766

H -0.332889 -4.594960 -3.705299

C -0.475018 -2.552258 -3.002869

H -1.264436 -2.793096 -2.273887

H -0.986656 -2.188997 -3.902451

C 0.397803 -1.445378 -2.422642
H 1.108250 -1.112308 -3.187292
H -0.216157 -0.580441 -2.151239
C 2.713057 -1.725701 1.235333
H 3.462583 -2.419863 0.829370
C 3.401319 -0.787893 2.226548
H 4.209096 -0.226765 1.736475
H 2.671971 -0.034731 2.546598
C 3.923735 -1.530835 3.447824
H 4.388028 -0.821110 4.144527
H 4.715313 -2.232622 3.142487
C 2.803968 -2.301555 4.131497
H 3.184409 -2.841200 5.008200
H 2.051039 -1.589124 4.503500
C 2.142674 -3.264977 3.158022
H 1.318824 -3.802833 3.645021
H 2.875871 -4.028411 2.854448
C 1.623071 -2.547769 1.918166
H 0.797986 -1.879671 2.192996
H 1.202163 -3.283829 1.221149
C -0.951846 1.288433 2.221404
H -0.451640 2.250406 2.401571
C -2.454191 1.485805 2.420569
H -2.958571 0.530336 2.201375
H -2.853098 2.214486 1.704828
C -2.772362 1.921521 3.845807
H -2.332426 2.914880 4.024565
H -3.857182 2.035828 3.970989
C -2.219997 0.937532 4.867584
H -2.742456 -0.025325 4.756700
H -2.422896 1.286287 5.888674
C -0.727865 0.715076 4.663165
H -0.187813 1.650852 4.876839
H -0.348137 -0.032259 5.373452
C -0.430738 0.280121 3.234769
H 0.644980 0.122527 3.093441
H -0.912799 -0.690236 3.039673

C -1.163183 2.320780 -0.459868
H -2.253825 2.187397 -0.432389
C -0.762853 2.234347 -1.928462
H 0.328856 2.319399 -2.013289
H -1.039293 1.251082 -2.322466
C -1.441608 3.322740 -2.747014
H -2.527000 3.139694 -2.739009
H -1.122353 3.261684 -3.796308
C -1.150400 4.703124 -2.177078
H -1.665303 5.478814 -2.759544
H -0.071859 4.910800 -2.261625
C -1.555881 4.781927 -0.712108
H -1.327541 5.774671 -0.301426
H -2.646689 4.652795 -0.635833
C -0.866794 3.704911 0.121176
H -1.217392 3.773781 1.158410
H 0.212158 3.901472 0.141607
C -3.304395 -0.024414 -1.184022
C -4.342968 0.766289 -0.667585
C -3.243401 -0.123798 -2.580799
C -5.244376 1.440632 -1.489882
H -4.460575 0.866773 0.412330
C -4.140760 0.540786 -3.415684
H -2.467467 -0.733626 -3.042515
C -5.145968 1.334595 -2.873515
H -6.030622 2.050633 -1.044881
H -4.051680 0.437727 -4.497222
H -5.847412 1.858945 -3.520440
C -2.170937 -3.124151 0.700075
H -1.047096 -1.883926 1.068489
H -2.281721 -3.300737 1.771300
H -1.406161 -3.742433 0.226592
C -4.636675 -2.493674 0.602055
H -4.490887 -2.071071 1.606937
H -5.193244 -1.740845 0.031517
C -3.295526 -2.710997 -0.046070
H -3.325842 -2.984676 -1.103174

C -5.454701 -3.776650 0.695602
H -4.940160 -4.536554 1.297913
H -6.435241 -3.592039 1.151701
H -5.627089 -4.206373 -0.299449
C 1.960849 1.966729 0.497483
C 2.087012 2.478786 1.799362
C 2.514347 2.749535 -0.530731
C 2.686661 3.706667 2.056538
H 1.696301 1.900184 2.631525
C 3.134214 3.968088 -0.281697
H 2.427165 2.406671 -1.556845
C 3.212588 4.462897 1.015729
H 2.747427 4.070226 3.081028
H 3.539432 4.543672 -1.112448
H 3.681550 5.424837 1.213244

TS_{XII→XIII}^c

E = -2650.01042097

Pd -2.021017 -0.888725 0.501261
P 2.010142 -0.790207 -0.131273
P -0.544351 0.930272 0.325200
C 1.207712 0.730862 0.024744
C 3.531923 -0.562868 -1.165199
H 3.862309 0.443667 -0.868490
C 4.714385 -1.504923 -0.923316
H 4.444158 -2.531062 -1.212510
H 4.990629 -1.537378 0.134917
C 5.925846 -1.039634 -1.728069
H 6.250850 -0.065159 -1.332944
H 6.762816 -1.732170 -1.570660
C 5.624543 -0.898465 -3.213106
H 5.423824 -1.894154 -3.637650
H 6.502152 -0.506875 -3.743167
C 4.411679 -0.009592 -3.448817
H 4.169920 0.036726 -4.518355
H 4.634974 1.020173 -3.129459
C 3.216353 -0.525616 -2.662145

H 2.315714 0.067621 -2.859201
H 2.992129 -1.548542 -2.997366
C 0.947785 -2.129872 -0.803324
H 0.164150 -2.194075 -0.030788
C 1.639660 -3.490937 -0.887017
H 2.189509 -3.725924 0.031632
H 2.378723 -3.476121 -1.702877
C 0.605344 -4.575944 -1.164752
H 1.092507 -5.558176 -1.218298
H -0.095593 -4.618180 -0.315404
C -0.168138 -4.289462 -2.443126
H 0.521374 -4.359100 -3.298879
H -0.938049 -5.055526 -2.603295
C -0.796904 -2.904147 -2.416461
H -1.583208 -2.861495 -1.650640
H -1.288315 -2.693837 -3.374737
C 0.223728 -1.817207 -2.112044
H 0.937774 -1.757081 -2.940020
H -0.268181 -0.843035 -2.036800
C 2.696776 -1.515558 1.439404
H 3.374764 -2.328712 1.142408
C 3.505585 -0.442105 2.167973
H 4.291388 -0.033752 1.517941
H 2.837033 0.399733 2.385201
C 4.099907 -0.964520 3.468021
H 4.653329 -0.162980 3.973968
H 4.831463 -1.756624 3.244872
C 3.014242 -1.523205 4.376063
H 3.450440 -1.914921 5.303943
H 2.335224 -0.707680 4.669778
C 2.216855 -2.605901 3.663976
H 1.414186 -2.982783 4.311213
H 2.877531 -3.462306 3.457380
C 1.625057 -2.102227 2.353117
H 0.874958 -1.329228 2.556360
H 1.092268 -2.919813 1.850815
C -0.786085 1.814045 1.952729

H -0.247774 2.768648 1.869260
C -2.262880 2.115305 2.203819
H -2.799640 1.156011 2.276024
H -2.709603 2.650067 1.357116
C -2.451430 2.907109 3.491992
H -1.970125 3.891393 3.382949
H -3.518565 3.100941 3.663022
C -1.845847 2.180460 4.685085
H -2.406704 1.248864 4.858254
H -1.951223 2.781218 5.598015
C -0.383896 1.836240 4.435763
H 0.203053 2.766084 4.372633
H 0.027207 1.265833 5.280045
C -0.217461 1.052559 3.140748
H 0.837793 0.813035 2.966536
H -0.743416 0.089105 3.223364
C -1.168865 2.228937 -0.867189
H -2.259548 2.131902 -0.762322
C -0.837926 1.837024 -2.303262
H 0.252192 1.817281 -2.434117
H -1.199700 0.821199 -2.489640
C -1.469741 2.789441 -3.308692
H -2.563764 2.682439 -3.253921
H -1.178740 2.503868 -4.328767
C -1.085890 4.233660 -3.024127
H -1.562751 4.910140 -3.745909
H 0.002039 4.353809 -3.149656
C -1.465397 4.615583 -1.601959
H -1.185788 5.656755 -1.392248
H -2.559593 4.555343 -1.494994
C -0.810609 3.690318 -0.581576
H -1.142207 3.978261 0.422960
H 0.275731 3.840903 -0.607508
C -3.441958 -0.121139 -0.806556
C -4.461893 0.720104 -0.333536
C -3.462097 -0.399820 -2.180013
C -5.419221 1.276658 -1.180044

H -4.519247 0.958159 0.729295
C -4.413545 0.149988 -3.038682
H -2.708046 -1.060071 -2.607008
C -5.395999 1.000359 -2.543494
H -6.190311 1.928935 -0.769860
H -4.383080 -0.086777 -4.102340
H -6.139344 1.435286 -3.209642
C -3.738726 -3.440191 -0.103756
H -4.017116 -2.916845 -1.028230
H -2.830782 -4.016901 -0.329638
C -2.340605 -2.594335 1.858507
H -1.677124 -3.451960 1.724985
H -1.021963 -1.524883 1.596517
C -3.432367 -2.439178 0.978006
H -4.297734 -1.885875 1.349546
H -2.417581 -2.247777 2.888851
C -4.857745 -4.393718 0.297015
H -5.074078 -5.112480 -0.502970
H -4.596135 -4.960289 1.199937
H -5.783678 -3.844109 0.508001
C 2.024101 1.986540 -0.015503
C 2.259946 2.750825 1.139273
C 2.525775 2.513400 -1.218501
C 2.912761 3.977723 1.093358
H 1.913561 2.375301 2.097768
C 3.196503 3.729253 -1.271907
H 2.357997 1.967140 -2.141292
C 3.382727 4.478491 -0.115016
H 3.058809 4.542670 2.012582
H 3.558062 4.101313 -2.229253
H 3.892252 5.439275 -0.154546

XIII^a

E = -2650.01705656
Pd -1.920656 -1.033640 0.250814
P 2.061235 -0.735248 -0.149752
P -0.585630 0.842748 0.416073

C 1.170984 0.722095 0.127047
C 3.580383 -0.299681 -1.121572
H 3.831188 0.692487 -0.719725
C 4.832775 -1.163487 -0.949403
H 4.656011 -2.174579 -1.342713
H 5.096623 -1.276576 0.106783
C 6.011039 -0.522803 -1.680157
H 6.249351 0.431264 -1.185883
H 6.900670 -1.157078 -1.574597
C 5.715597 -0.260885 -3.149796
H 5.598119 -1.222695 -3.672404
H 6.565218 0.247319 -3.623487
C 4.439823 0.551628 -3.319489
H 4.207933 0.688033 -4.383526
H 4.579793 1.557372 -2.893873
C 3.278107 -0.129738 -2.611830
H 2.338561 0.416130 -2.759167
H 3.131198 -1.123332 -3.058494
C 1.135227 -2.090014 -0.986156
H 0.375433 -2.340044 -0.231199
C 1.990816 -3.336372 -1.228228
H 2.559338 -3.615786 -0.333556
H 2.726998 -3.128991 -2.018700
C 1.111347 -4.501565 -1.665296
H 1.728902 -5.391508 -1.843098
H 0.425998 -4.757278 -0.842227
C 0.304920 -4.150282 -2.905682
H 0.995753 -4.002972 -3.750332
H -0.352086 -4.984070 -3.184685
C -0.506494 -2.880000 -2.698144
H -1.283073 -3.051447 -1.936825
H -1.034424 -2.616020 -3.622779
C 0.364770 -1.711752 -2.251434
H 1.055970 -1.456615 -3.062052
H -0.251053 -0.826355 -2.061522
C 2.776741 -1.561596 1.356804
H 3.527744 -2.274766 0.987646

C 3.485648 -0.510622 2.210804
H 4.231696 0.038172 1.619744
H 2.745294 0.237865 2.516624
C 4.122921 -1.124973 3.448920
H 4.600399 -0.341088 4.050848
H 4.923881 -1.816667 3.144676
C 3.090546 -1.881138 4.272531
H 3.558365 -2.335699 5.155276
H 2.338380 -1.169668 4.647862
C 2.396716 -2.941643 3.430340
H 1.633427 -3.464721 4.020893
H 3.133954 -3.702842 3.130512
C 1.758143 -2.341000 2.183828
H 0.942252 -1.668450 2.472482
H 1.297780 -3.135532 1.582743
C -0.912946 1.494327 2.133083
H -0.417918 2.474556 2.182054
C -2.408280 1.705003 2.365731
H -2.912349 0.728733 2.276312
H -2.839169 2.347137 1.588286
C -2.673781 2.303540 3.742300
H -2.242547 3.315890 3.781130
H -3.754152 2.420947 3.899182
C -2.064124 1.457329 4.851246
H -2.576117 0.483162 4.881940
H -2.229667 1.927441 5.829526
C -0.578663 1.225217 4.611008
H -0.043181 2.185039 4.683500
H -0.159117 0.574944 5.390856
C -0.339847 0.616754 3.236070
H 0.729463 0.445411 3.064782
H -0.820579 -0.370926 3.183502
C -1.217781 2.246900 -0.631636
H -2.304967 2.106901 -0.556160
C -0.860809 2.011992 -2.095326
H 0.225384 2.105166 -2.224533
H -1.130319 0.988033 -2.374494

C -1.584766 2.998833 -2.999194
H -2.665705 2.802419 -2.934537
H -1.298883 2.832830 -4.046683
C -1.297848 4.434814 -2.585514
H -1.843898 5.139071 -3.227318
H -0.226132 4.646306 -2.727801
C -1.656865 4.661411 -1.123771
H -1.431570 5.694592 -0.826960
H -2.742447 4.527213 -0.997749
C -0.924481 3.687042 -0.205141
H -1.245777 3.858974 0.829671
H 0.151197 3.898974 -0.238678
C -3.309461 -0.187295 -1.087227
C -4.317643 0.688020 -0.653944
C -3.294939 -0.471373 -2.459716
C -5.238654 1.259471 -1.531178
H -4.396696 0.937631 0.405268
C -4.209380 0.090334 -3.349974
H -2.543974 -1.152908 -2.858989
C -5.188360 0.964628 -2.889749
H -6.001633 1.937527 -1.148536
H -4.155453 -0.158103 -4.410007
H -5.904823 1.407356 -3.579768
C -2.293829 -3.128148 0.856924
H -0.775622 -1.463599 1.271272
H -2.311982 -3.195940 1.944162
H -1.511406 -3.703187 0.362496
C -4.709019 -2.372367 0.843903
H -4.504660 -1.996343 1.856233
H -5.209930 -1.562438 0.302497
C -3.409701 -2.697435 0.163915
H -3.476675 -2.917250 -0.903547
C -5.629233 -3.585885 0.915272
H -5.172142 -4.402103 1.488637
H -6.583537 -3.329996 1.391481
H -5.852250 -3.970338 -0.088091
C 1.925047 2.013976 0.237242

C 2.090524 2.660769 1.472944
C 2.429451 2.690961 -0.886808
C 2.678346 3.916536 1.578441
H 1.741072 2.166337 2.374611
C 3.037111 3.936900 -0.789548
H 2.314343 2.240461 -1.867418
C 3.152969 4.566328 0.445313
H 2.770295 4.385889 2.556525
H 3.403508 4.426939 -1.690225
H 3.612247 5.549805 0.523531

XIII^c

E = -2650.01533232
Pd -1.972301 -0.865411 0.616302
P 2.009113 -0.815188 -0.093056
P -0.547983 0.934465 0.296135
C 1.194338 0.708224 -0.024766
C 3.500394 -0.628818 -1.180046
H 3.823928 0.397056 -0.951038
C 4.706213 -1.536111 -0.921979
H 4.447304 -2.581417 -1.144595
H 5.014275 -1.502991 0.127620
C 5.884418 -1.096723 -1.788866
H 6.203598 -0.096488 -1.458685
H 6.738067 -1.765652 -1.619385
C 5.536193 -1.043722 -3.269356
H 5.339950 -2.064569 -3.631701
H 6.390590 -0.668821 -3.847277
C 4.301695 -0.188270 -3.516176
H 4.027511 -0.204603 -4.578775
H 4.516953 0.860772 -3.260256
C 3.139626 -0.679066 -2.665951
H 2.222743 -0.111813 -2.865702
H 2.924284 -1.722020 -2.938749
C 0.958827 -2.212523 -0.660387
H 0.202238 -2.255365 0.139679
C 1.682162 -3.559564 -0.697237

H 2.265524 -3.733055 0.214584
H 2.394637 -3.571906 -1.536197
C 0.667124 -4.681732 -0.884890
H 1.178359 -5.652855 -0.909780
H -0.002045 -4.700587 -0.010096
C -0.158072 -4.477789 -2.146972
H 0.501956 -4.573727 -3.023202
H -0.913485 -5.268821 -2.241157
C -0.819305 -3.107370 -2.167140
H -1.575622 -3.041136 -1.373264
H -1.352817 -2.959439 -3.114612
C 0.187338 -1.985498 -1.959945
H 0.871730 -1.958317 -2.814450
H -0.322792 -1.018504 -1.922600
C 2.753750 -1.425441 1.498809
H 3.439689 -2.240021 1.224361
C 3.563713 -0.293220 2.130790
H 4.305613 0.103420 1.424368
H 2.879818 0.538762 2.337293
C 4.232383 -0.729716 3.426388
H 4.782910 0.112730 3.864546
H 4.977311 -1.511132 3.209640
C 3.205865 -1.271397 4.410428
H 3.694260 -1.600410 5.336680
H 2.514487 -0.461123 4.690612
C 2.410848 -2.411298 3.790830
H 1.653442 -2.780314 4.494521
H 3.087821 -3.256504 3.590389
C 1.738791 -1.983743 2.491805
H 0.985777 -1.215573 2.701034
H 1.193043 -2.830034 2.056085
C -0.767521 1.905312 1.873870
H -0.237191 2.854560 1.713393
C -2.239814 2.219081 2.134463
H -2.767616 1.265963 2.296464
H -2.710375 2.681935 1.258617
C -2.398490 3.111941 3.359208

H -1.927451 4.086267 3.156130
H -3.461743 3.314283 3.544100
C -1.755051 2.488794 4.590739
H -2.307636 1.574904 4.858463
H -1.836210 3.164765 5.452119
C -0.299525 2.123912 4.330631
H 0.285096 3.044360 4.174527
H 0.134127 1.625072 5.208194
C -0.171159 1.233050 3.102267
H 0.876763 0.965928 2.921372
H -0.701929 0.285833 3.276741
C -1.185740 2.159428 -0.966144
H -2.275789 2.063851 -0.854829
C -0.848853 1.683257 -2.375656
H 0.240977 1.672547 -2.503833
H -1.192078 0.652084 -2.499683
C -1.490550 2.562825 -3.438662
H -2.583582 2.451506 -3.376461
H -1.197203 2.215732 -4.438797
C -1.117045 4.024266 -3.245590
H -1.600157 4.651610 -4.006502
H -0.030302 4.144318 -3.380927
C -1.497361 4.491907 -1.848858
H -1.224767 5.546071 -1.705430
H -2.591001 4.431028 -1.736891
C -0.836095 3.638075 -0.771295
H -1.170503 3.986291 0.213310
H 0.249200 3.794146 -0.806956
C -3.433032 -0.179524 -0.727940
C -4.456684 0.678587 -0.295935
C -3.444932 -0.513525 -2.088808
C -5.411680 1.197123 -1.168859
H -4.519939 0.958871 0.756900
C -4.394652 -0.004581 -2.974210
H -2.686066 -1.189220 -2.483600
C -5.381728 0.862995 -2.519316
H -6.186007 1.864441 -0.790169

H -4.358967 -0.285636 -4.026862
H -6.123495 1.266983 -3.206338
C -3.885228 -3.364975 -0.010699
H -4.001162 -2.866387 -0.981250
H -3.030033 -4.048765 -0.098939
C -2.582643 -2.491083 1.985300
H -0.762173 -1.178381 1.601323
H -2.625460 -1.990333 2.950835
H -1.894614 -3.334739 1.920201
C -3.596781 -2.348924 1.056634
H -4.425496 -1.680561 1.296251
C -5.147485 -4.159597 0.301433
H -5.352736 -4.898055 -0.482925
H -5.059307 -4.693835 1.255771
H -6.019748 -3.497640 0.369621
C 2.003533 1.965001 -0.148748
C 2.247372 2.792741 0.959699
C 2.491293 2.428657 -1.383266
C 2.890729 4.019708 0.841125
H 1.915399 2.467444 1.940999
C 3.152587 3.644577 -1.509325
H 2.322144 1.832047 -2.273971
C 3.344157 4.457622 -0.397450
H 3.042404 4.633883 1.727247
H 3.502883 3.965485 -2.489100
H 3.846038 5.418314 -0.494768

TS_{XIII→XIV}^a (CW)

E = -2650.01128931
Pd -1.924199 -0.981962 -0.538116
P 2.107914 -0.562144 -0.373783
P -0.642874 0.550946 0.626629
C 1.135312 0.576083 0.492508
C 3.699917 0.280893 -0.824362
H 3.863852 0.933629 0.045129
C 4.963322 -0.572109 -0.969112
H 4.871984 -1.243026 -1.835168

H 5.118722 -1.207581 -0.091925
C 6.184185 0.329717 -1.138336
H 6.327018 0.898997 -0.207258
H 7.083863 -0.286115 -1.265932
C 6.036995 1.303410 -2.298396
H 6.019168 0.739771 -3.243907
H 6.909181 1.967642 -2.350015
C 4.751776 2.110064 -2.181366
H 4.629250 2.768714 -3.050723
H 4.798796 2.760603 -1.294284
C 3.552780 1.182686 -2.051893
H 2.612338 1.744160 -2.013278
H 3.499247 0.551710 -2.950575
C 1.313811 -1.286602 -1.867361
H 0.483284 -1.860249 -1.425023
C 2.226266 -2.259418 -2.618498
H 2.692532 -2.980855 -1.937297
H 3.045317 -1.700928 -3.095694
C 1.439551 -2.998073 -3.694518
H 2.100075 -3.690283 -4.232744
H 0.666927 -3.614216 -3.209129
C 0.777832 -2.026057 -4.659436
H 1.559582 -1.482904 -5.213040
H 0.189005 -2.570778 -5.408735
C -0.097050 -1.027322 -3.917088
H -0.938697 -1.553432 -3.446081
H -0.533934 -0.305592 -4.618697
C 0.675506 -0.287907 -2.833096
H 1.441407 0.333973 -3.308242
H 0.010657 0.385921 -2.283043
C 2.705256 -2.045747 0.578167
H 3.517813 -2.482617 -0.020377
C 3.281557 -1.581579 1.916119
H 4.057800 -0.818174 1.767899
H 2.482262 -1.082406 2.476209
C 3.819208 -2.745537 2.736361
H 4.199828 -2.379260 3.698590

H 4.675996 -3.198310 2.213411
C 2.744510 -3.801507 2.949496
H 3.141834 -4.645793 3.527562
H 1.927995 -3.368211 3.548190
C 2.186145 -4.280573 1.617736
H 1.392856 -5.022560 1.776864
H 2.983545 -4.793113 1.056914
C 1.646317 -3.124514 0.785009
H 0.774269 -2.682651 1.279510
H 1.282810 -3.499394 -0.179601
C -1.139179 0.277819 2.406049
H -0.655587 1.083259 2.976851
C -2.649635 0.403553 2.596118
H -3.137154 -0.363283 1.975207
H -3.013917 1.371343 2.231667
C -3.045801 0.214750 4.056076
H -2.630204 1.043060 4.650585
H -4.137298 0.277622 4.159077
C -2.532818 -1.105821 4.613038
H -3.029207 -1.935858 4.086099
H -2.798711 -1.205852 5.673578
C -1.028074 -1.230536 4.419653
H -0.518754 -0.461633 5.021979
H -0.670618 -2.201969 4.787875
C -0.655569 -1.056487 2.954856
H 0.427925 -1.146581 2.815143
H -1.109055 -1.862589 2.359241
C -1.252431 2.288107 0.351025
H -2.336404 2.124054 0.277872
C -0.812147 2.799655 -1.015524
H 0.274993 2.959944 -1.013196
H -1.023747 2.038689 -1.773825
C -1.539957 4.087810 -1.371316
H -2.611380 3.859320 -1.481461
H -1.198210 4.459945 -2.346608
C -1.346149 5.147124 -0.295785
H -1.901978 6.060099 -0.548011

H -0.282337 5.429786 -0.253365
C -1.773690 4.625898 1.069187
H -1.607631 5.388673 1.841790
H -2.856248 4.425300 1.052416
C -1.035380 3.342211 1.438846
H -1.399033 2.983105 2.409528
H 0.030962 3.562984 1.567304
C -3.258251 0.409210 -1.377766
C -4.346218 0.959641 -0.681016
C -3.138860 0.787874 -2.722937
C -5.243302 1.846003 -1.275371
H -4.506238 0.696557 0.366622
C -4.028003 1.673207 -3.332728
H -2.319073 0.390972 -3.322904
C -5.086198 2.211723 -2.608755
H -6.070519 2.252480 -0.693180
H -3.890414 1.944649 -4.379557
H -5.782192 2.904995 -3.078346
C -2.673135 -2.856337 -1.572822
H -2.677744 -2.565594 -2.622235
H -0.881462 -2.008892 0.126607
C -3.938343 -2.989903 0.618548
H -3.019866 -3.448786 1.008366
H -4.192757 -2.167257 1.300694
C -3.673430 -2.428297 -0.744398
H -4.454669 -1.794338 -1.164926
C -5.081778 -3.999866 0.605949
H -4.844147 -4.857161 -0.035310
H -5.282735 -4.376475 1.615799
H -6.006912 -3.548064 0.227332
H -2.000387 -3.659400 -1.279148
C 1.821836 1.636823 1.300169
C 1.874108 1.574782 2.702003
C 2.379398 2.784131 0.709699
C 2.410944 2.603958 3.468085
H 1.477496 0.696238 3.203257
C 2.937824 3.807981 1.465127

H 2.346255 2.886854 -0.370226
C 2.945377 3.730296 2.853938
H 2.416680 2.518883 4.553514
H 3.350794 4.681747 0.963507
H 3.366431 4.537431 3.450255

x_{III}→x_{IV}^a (CW)

E = -2650.01248679
Pd -1.927519 -0.914699 -0.626166
P 2.100997 -0.519138 -0.408544
P -0.648307 0.516792 0.663457
C 1.128143 0.553104 0.537724
C 3.682718 0.360768 -0.817513
H 3.851636 0.957498 0.090430
C 4.949894 -0.472390 -1.027716
H 4.853402 -1.091359 -1.931047
H 5.119245 -1.157475 -0.191159
C 6.162280 0.447289 -1.157567
H 6.312839 0.961710 -0.196288
H 7.064612 -0.152818 -1.332475
C 5.993347 1.486681 -2.256112
H 5.965590 0.979640 -3.232916
H 6.860863 2.158546 -2.280293
C 4.705356 2.276750 -2.074224
H 4.567389 2.985426 -2.900873
H 4.761447 2.873610 -1.150671
C 3.513553 1.335382 -1.984895
H 2.569572 1.886439 -1.899286
H 3.452028 0.759674 -2.919380
C 1.302335 -1.160506 -1.936794
H 0.480397 -1.765644 -1.520595
C 2.220114 -2.083427 -2.742357
H 2.708792 -2.826628 -2.101771
H 3.022260 -1.489663 -3.205825
C 1.429438 -2.786698 -3.838762
H 2.091677 -3.445863 -4.415019
H 0.671860 -3.433586 -3.369822

C 0.742258 -1.783216 -4.751866
H 1.509662 -1.208770 -5.293816
H 0.147761 -2.302557 -5.514569
C -0.132243 -0.824923 -3.957170
H -0.966558 -1.376692 -3.501024
H -0.580523 -0.078056 -4.624291
C 0.647898 -0.124221 -2.851103
H 1.405954 0.520856 -3.308311
H -0.014106 0.523803 -2.266978
C 2.709923 -2.053784 0.449241
H 3.524692 -2.449744 -0.173985
C 3.285224 -1.666721 1.811628
H 4.057395 -0.891899 1.707441
H 2.484227 -1.205959 2.401366
C 3.828814 -2.875444 2.559791
H 4.211216 -2.566142 3.541097
H 4.685168 -3.294099 2.008469
C 2.757032 -3.944918 2.712850
H 3.158222 -4.820924 3.238720
H 1.941630 -3.550206 3.339041
C 2.195460 -4.346943 1.356929
H 1.402851 -5.097268 1.475004
H 2.992030 -4.826364 0.766433
C 1.654174 -3.146406 0.590782
H 0.778078 -2.735748 1.104682
H 1.295368 -3.467387 -0.394725
C -1.166782 0.101600 2.409998
H -0.707265 0.868182 3.050211
C -2.683178 0.192828 2.576276
H -3.149810 -0.532317 1.890162
H -3.052376 1.180565 2.275930
C -3.105223 -0.107597 4.009695
H -2.710208 0.677657 4.672650
H -4.199070 -0.063965 4.095652
C -2.587131 -1.461027 4.474767
H -3.062084 -2.253095 3.874451
H -2.874375 -1.646736 5.518011

C -1.077197 -1.554322 4.305898
H -0.591142 -0.829094 4.977472
H -0.715566 -2.547441 4.605831
C -0.674045 -1.263200 2.867479
H 0.413969 -1.326198 2.747943
H -1.099745 -2.028328 2.201343
C -1.259386 2.268726 0.517430
H -2.342348 2.109723 0.421472
C -0.808093 2.884017 -0.802045
H 0.277118 3.053532 -0.774324
H -1.003952 2.179662 -1.617506
C -1.542986 4.190170 -1.065983
H -2.612039 3.963521 -1.201586
H -1.196681 4.637692 -2.007356
C -1.363291 5.165794 0.088546
H -1.922266 6.092501 -0.098114
H -0.301365 5.449639 0.160071
C -1.797427 4.541612 1.407552
H -1.639979 5.244890 2.236364
H -2.878911 4.338500 1.368134
C -1.055801 3.236656 1.684489
H -1.426475 2.802666 2.621432
H 0.008584 3.451364 1.838660
C -3.247242 0.537465 -1.381868
C -4.347589 1.026624 -0.659309
C -3.118006 1.015960 -2.694368
C -5.246863 1.946616 -1.197465
H -4.514190 0.689468 0.365924
C -4.007430 1.936293 -3.247821
H -2.288591 0.670609 -3.312930
C -5.078301 2.411204 -2.497890
H -6.083985 2.302356 -0.596501
H -3.861079 2.285625 -4.270079
H -5.775297 3.131775 -2.922785
C -2.903050 -2.512641 -1.894635
H -0.922179 -2.027367 -0.037735
H -2.163785 -3.299633 -2.041191

H -3.206565 -1.932860 -2.765128
C -3.489254 -3.388499 0.415791
H -2.560912 -3.963402 0.306955
H -3.390236 -2.820943 1.351810
C -3.611533 -2.429253 -0.728019
H -4.469733 -1.753306 -0.701955
C -4.696942 -4.314390 0.510077
H -4.800235 -4.924557 -0.395378
H -4.604450 -4.992295 1.366683
H -5.626956 -3.745466 0.633872
C 1.808505 1.556216 1.419693
C 1.838161 1.405502 2.815618
C 2.376005 2.737700 0.911817
C 2.362416 2.383687 3.653642
H 1.433267 0.497512 3.253788
C 2.922248 3.711012 1.739518
H 2.359592 2.909067 -0.159834
C 2.906798 3.546072 3.120602
H 2.350420 2.230274 4.731488
H 3.343267 4.614343 1.300915
H 3.317865 4.313629 3.773440

TS_{XIII→XIV}^a (CW)

E = -2650.00902532

Pd -1.937262 -0.991862 -0.471016
P 2.020836 -0.502931 -0.384756
P -0.711711 0.631948 0.601632
C 1.064520 0.668707 0.455406
C 3.596917 0.322647 -0.913358
H 3.784789 1.011383 -0.076791
C 4.855775 -0.535722 -1.063626
H 4.735848 -1.241123 -1.898417
H 5.040850 -1.135362 -0.167163
C 6.069699 0.357727 -1.309637
H 6.242350 0.964525 -0.407760
H 6.965330 -0.263146 -1.441114
C 5.884130 1.283177 -2.503303

H 5.837560 0.681282 -3.423899
H 6.753057 1.945162 -2.609510
C 4.601711 2.093395 -2.379264
H 4.450358 2.714711 -3.271243
H 4.676486 2.781073 -1.522667
C 3.409645 1.170824 -2.173185
H 2.467368 1.729999 -2.131445
H 3.333135 0.500214 -3.040942
C 1.190288 -1.295397 -1.822550
H 0.366211 -1.835813 -1.327477
C 2.062635 -2.323240 -2.545894
H 2.554897 -3.003675 -1.841237
H 2.861994 -1.805044 -3.096940
C 1.213893 -3.121030 -3.529464
H 1.836898 -3.859090 -4.051245
H 0.460709 -3.690500 -2.962576
C 0.515486 -2.208621 -4.526898
H 1.276579 -1.726355 -5.159988
H -0.120732 -2.795611 -5.201878
C -0.301867 -1.134113 -3.824648
H -1.146563 -1.589563 -3.288288
H -0.739417 -0.450629 -4.562933
C 0.537378 -0.346027 -2.827799
H 1.300957 0.214210 -3.377632
H -0.082427 0.385673 -2.300307
C 2.647588 -1.936801 0.623307
H 3.439708 -2.406746 0.022282
C 3.267881 -1.393391 1.910536
H 4.033360 -0.636781 1.690879
H 2.485608 -0.865989 2.469281
C 3.843601 -2.505038 2.775627
H 4.255460 -2.082479 3.701174
H 4.684535 -2.981954 2.248450
C 2.785317 -3.553173 3.087351
H 3.208906 -4.360409 3.698673
H 1.986853 -3.089890 3.688208
C 2.182994 -4.111461 1.806321

H 1.401504 -4.847564 2.036247
H 2.963060 -4.649998 1.245602
C 1.602667 -3.005805 0.932701
H 0.753163 -2.539033 1.442919
H 1.196404 -3.432095 0.006496
C -1.203202 0.426937 2.390175
H -0.771328 1.289746 2.917422
C -2.721298 0.472666 2.558089
H -3.148831 -0.389931 2.022316
H -3.148676 1.365962 2.086464
C -3.111534 0.408727 4.029970
H -2.739977 1.311402 4.539279
H -4.204762 0.423493 4.131508
C -2.531727 -0.825657 4.707694
H -2.995897 -1.723919 4.271452
H -2.783728 -0.833241 5.776291
C -1.023711 -0.907327 4.510581
H -0.540750 -0.071606 5.041211
H -0.627233 -1.829708 4.956921
C -0.663211 -0.841776 3.033128
H 0.421749 -0.909420 2.891688
H -1.092960 -1.707844 2.508955
C -1.342714 2.354177 0.249104
H -2.423057 2.181854 0.132576
C -0.831111 2.826989 -1.107357
H 0.261370 2.924579 -1.069140
H -1.056075 2.066219 -1.861083
C -1.458857 4.151670 -1.516051
H -2.536248 3.996723 -1.679135
H -1.042199 4.483255 -2.476842
C -1.252019 5.212593 -0.445793
H -1.722564 6.159450 -0.742401
H -0.174563 5.415673 -0.337778
C -1.803064 4.739450 0.890846
H -1.649250 5.502774 1.665327
H -2.891160 4.598479 0.799257
C -1.163224 3.425094 1.328481

H -1.621333 3.101409 2.271097
H -0.100203 3.596708 1.538910
C -3.319824 0.311424 -1.370949
C -4.489012 0.661314 -0.675655
C -3.185341 0.857969 -2.655495
C -5.446758 1.522796 -1.210340
H -4.665921 0.258580 0.323985
C -4.133176 1.720331 -3.204234
H -2.307591 0.615117 -3.255022
C -5.269599 2.064562 -2.479151
H -6.336043 1.772282 -0.631144
H -3.981251 2.128087 -4.203860
H -6.011396 2.740986 -2.900808
C -3.093587 -2.633853 -1.532454
H -0.847127 -1.862300 0.303930
H -2.396039 -3.170863 -2.177761
H -3.880809 -2.064145 -2.017113
C -2.377010 -4.036321 0.464086
H -1.483406 -4.272053 -0.128637
H -2.018023 -3.718816 1.450988
C -3.121186 -2.907376 -0.190722
H -3.946933 -2.486596 0.392243
C -3.260321 -5.270230 0.611223
H -3.595089 -5.636686 -0.366843
H -2.720621 -6.082838 1.112176
H -4.156468 -5.050714 1.205553
C 1.752771 1.762697 1.215250
C 1.792139 1.765892 2.619470
C 2.313875 2.883952 0.579331
C 2.314420 2.832197 3.343077
H 1.393254 0.911156 3.157679
C 2.855496 3.946193 1.293153
H 2.297348 2.937260 -0.504527
C 2.846553 3.933979 2.683883
H 2.308657 2.796517 4.431254
H 3.269333 4.798098 0.755913
H 3.254019 4.771510 3.246732

TS_{XIII→XIV}^a (CCW)

E = -2650.00763304

Pd -1.943950 -0.843200 0.585074

P 2.007078 -0.843133 -0.081925

P -0.517724 0.949571 0.303956

C 1.217023 0.693641 -0.024362

C 3.498485 -0.684881 -1.174738

H 3.831133 0.340090 -0.954906

C 4.697794 -1.598813 -0.908828

H 4.432569 -2.644010 -1.123884

H 5.005519 -1.560040 0.140580

C 5.879733 -1.174100 -1.777917

H 6.205345 -0.173421 -1.455450

H 6.728661 -1.847422 -1.602203

C 5.533165 -1.130652 -3.259059

H 5.329713 -2.152947 -3.613285

H 6.390661 -0.766669 -3.839366

C 4.305266 -0.268078 -3.513446

H 4.031699 -0.290392 -4.576097

H 4.528376 0.781180 -3.265334

C 3.138624 -0.743504 -2.660581

H 2.226844 -0.170018 -2.865629

H 2.915522 -1.786620 -2.926579

C 0.938418 -2.237104 -0.631402

H 0.181949 -2.264387 0.171100

C 1.660178 -3.585843 -0.651218

H 2.233686 -3.753000 0.267743

H 2.381472 -3.603370 -1.482503

C 0.650328 -4.711322 -0.843443

H 1.164576 -5.681113 -0.852646

H -0.030541 -4.725376 0.022113

C -0.154543 -4.519919 -2.120148

H 0.522032 -4.616040 -2.983603

H -0.902935 -5.316210 -2.224441

C -0.822945 -3.153340 -2.161232

H -1.604222 -3.086889 -1.390642

H -1.330771 -3.012598 -3.123570

C 0.174204 -2.023421 -1.938922
H 0.867135 -1.996458 -2.786233
H -0.342468 -1.059170 -1.913438
C 2.752382 -1.443760 1.513544
H 3.429397 -2.267855 1.245520
C 3.576195 -0.312501 2.129333
H 4.317557 0.070903 1.415113
H 2.901105 0.527556 2.331787
C 4.248506 -0.742874 3.425158
H 4.809736 0.098472 3.851714
H 4.984669 -1.533430 3.211512
C 3.223002 -1.265130 4.420781
H 3.714227 -1.590464 5.346860
H 2.541736 -0.445334 4.697878
C 2.412462 -2.402441 3.816892
H 1.655697 -2.756688 4.528888
H 3.079456 -3.256634 3.620876
C 1.737007 -1.980458 2.517843
H 0.992959 -1.202383 2.721441
H 1.179541 -2.824834 2.093590
C -0.731467 1.924663 1.880038
H -0.201016 2.872877 1.713492
C -2.204483 2.239648 2.136690
H -2.733199 1.286589 2.297463
H -2.671385 2.703289 1.259248
C -2.367403 3.134469 3.359466
H -1.898659 4.109555 3.154782
H -3.431542 3.334531 3.541838
C -1.724050 2.516614 4.593538
H -2.273386 1.601206 4.862669
H -1.809156 3.194631 5.452942
C -0.266849 2.156781 4.336031
H 0.314003 3.079071 4.176754
H 0.168062 1.663324 5.215984
C -0.134937 1.260103 3.112225
H 0.913776 0.994181 2.933912
H -0.663554 0.312777 3.289925

C -1.144325 2.176498 -0.959316
H -2.234515 2.090974 -0.842091
C -0.821476 1.689625 -2.367988
H 0.266518 1.689481 -2.510781
H -1.157354 0.654577 -2.478427
C -1.486737 2.557484 -3.425786
H -2.577990 2.443406 -3.339587
H -1.213566 2.202894 -4.428968
C -1.110337 4.020925 -3.252279
H -1.609990 4.642321 -4.007391
H -0.026853 4.139404 -3.412688
C -1.458729 4.502061 -1.851530
H -1.177434 5.555916 -1.723159
H -2.550107 4.448557 -1.716284
C -0.780922 3.653338 -0.779848
H -1.093439 4.011778 0.208423
H 0.304796 3.800901 -0.838573
C -3.360646 -0.198816 -0.825943
C -4.381832 0.663934 -0.393903
C -3.393939 -0.550999 -2.182146
C -5.362505 1.153892 -1.255231
H -4.423357 0.969971 0.653584
C -4.367769 -0.070784 -3.057265
H -2.635117 -1.222200 -2.584167
C -5.358817 0.790552 -2.598388
H -6.134450 1.822791 -0.874103
H -4.349215 -0.369827 -4.105515
H -6.120176 1.171101 -3.277416
C -2.982793 -2.163944 2.086407
H -2.173734 -2.519054 2.716266
H -0.791893 -1.129262 1.653524
C -4.600049 -2.746534 0.209213
H -5.166358 -1.858882 0.513666
H -4.478687 -2.665238 -0.877156
C -3.258208 -2.740284 0.873533
H -2.561688 -3.509973 0.525950
C -5.371631 -4.017294 0.549671

H -5.555492 -4.096609 1.628402
H -6.341456 -4.032637 0.038276
H -4.820692 -4.916007 0.242414
H -3.720781 -1.514996 2.562437
C 2.039815 1.939582 -0.163166
C 2.290609 2.778054 0.935625
C 2.531325 2.384371 -1.403053
C 2.945141 3.997594 0.802825
H 1.955388 2.467071 1.920413
C 3.203934 3.592516 -1.543055
H 2.355268 1.779291 -2.286654
C 3.402974 4.416651 -0.440656
H 3.102114 4.620793 1.681692
H 3.556893 3.898963 -2.526491
H 3.913689 5.371473 -0.549131

xiii→*xiv*^a (CCW)

E = -2650.01009079

Pd -1.979179 -0.789627 0.646977
P 2.035309 -0.836643 -0.050683
P -0.504182 0.956432 0.269706
C 1.229520 0.693003 -0.058084
C 3.494143 -0.732138 -1.190841
H 3.826258 0.305877 -1.044649
C 4.706972 -1.621201 -0.903803
H 4.441574 -2.679869 -1.036490
H 5.048112 -1.507573 0.129945
C 5.856514 -1.254127 -1.839949
H 6.187915 -0.232592 -1.599154
H 6.714416 -1.911362 -1.647716
C 5.458614 -1.314382 -3.307527
H 5.244937 -2.358880 -3.582078
H 6.294612 -0.992245 -3.941463
C 4.221027 -0.470935 -3.578766
H 3.912067 -0.565272 -4.627682
H 4.451007 0.592603 -3.410534
C 3.084500 -0.886223 -2.656814

H 2.166420 -0.323968 -2.866480
H 2.849961 -1.943520 -2.846333
C 0.963989 -2.263025 -0.487994
H 0.236233 -2.245111 0.340734
C 1.692977 -3.607963 -0.457008
H 2.305718 -3.717110 0.445205
H 2.379048 -3.672515 -1.315204
C 0.684565 -4.748537 -0.537324
H 1.206548 -5.714101 -0.519812
H 0.048025 -4.718806 0.360717
C -0.187466 -4.632707 -1.778522
H 0.440264 -4.776472 -2.671725
H -0.937420 -5.434250 -1.795246
C -0.861978 -3.271205 -1.856260
H -1.573903 -3.160681 -1.026031
H -1.446895 -3.187916 -2.780910
C 0.146276 -2.133265 -1.773093
H 0.798714 -2.173434 -2.651956
H -0.365072 -1.165734 -1.795725
C 2.818393 -1.339726 1.559352
H 3.504001 -2.167400 1.326299
C 3.635059 -0.165466 2.098718
H 4.366228 0.180302 1.354893
H 2.953342 0.678712 2.256455
C 4.321646 -0.509633 3.412550
H 4.878942 0.361075 3.781520
H 5.062872 -1.305975 3.242284
C 3.307937 -0.977354 4.446704
H 3.808813 -1.239076 5.387708
H 2.620857 -0.148194 4.677287
C 2.505696 -2.158889 3.921930
H 1.756287 -2.474373 4.659415
H 3.181546 -3.016690 3.778874
C 1.818831 -1.833571 2.601260
H 1.053084 -1.065111 2.754832
H 1.281444 -2.716968 2.235089
C -0.713300 1.995074 1.806279

H -0.187669 2.938229 1.600230
C -2.185866 2.315415 2.059868
H -2.712812 1.367647 2.254108
H -2.657543 2.749039 1.169657
C -2.346007 3.247234 3.254788
H -1.877953 4.216021 3.020662
H -3.409825 3.452126 3.433756
C -1.699083 2.664998 4.504050
H -2.244526 1.754837 4.797929
H -1.785456 3.365040 5.345497
C -0.240683 2.305359 4.253243
H 0.333752 3.226699 4.067145
H 0.199462 1.839795 5.145778
C -0.102894 1.376118 3.054724
H 0.949441 1.124916 2.876954
H -0.614157 0.424281 3.258458
C -1.139251 2.129926 -1.039882
H -2.227880 2.053360 -0.905717
C -0.837841 1.581826 -2.430382
H 0.247816 1.573090 -2.589850
H -1.175698 0.542679 -2.490196
C -1.519026 2.405189 -3.513930
H -2.608854 2.293030 -3.407920
H -1.259135 2.010403 -4.505571
C -1.143969 3.875889 -3.406597
H -1.656586 4.463538 -4.179814
H -0.063349 3.989753 -3.588276
C -1.471787 4.414806 -2.022315
H -1.191264 5.473690 -1.943098
H -2.560667 4.364786 -1.866935
C -0.773355 3.612623 -0.928689
H -1.068585 4.011331 0.049279
H 0.310497 3.759037 -1.013834
C -3.418898 -0.149914 -0.732619
C -4.464615 0.701465 -0.342086
C -3.451548 -0.587716 -2.064451
C -5.467825 1.105148 -1.222792

H -4.507128 1.070531 0.685079
C -4.447994 -0.197105 -2.957071
H -2.674249 -1.261899 -2.427926
C -5.462612 0.659273 -2.540573
H -6.258700 1.771030 -0.876885
H -4.430878 -0.561742 -3.984340
H -6.241985 0.972046 -3.233620
C -3.488329 -1.677644 2.061468
H -0.868364 -1.227574 1.732121
H -4.379298 -1.052567 1.983615
H -2.912951 -1.617276 2.981658
C -4.257962 -3.061772 0.087179
H -5.010837 -2.272317 -0.018980
H -3.756587 -3.126488 -0.886847
C -3.275491 -2.669339 1.146517
H -2.461150 -3.374999 1.336064
C -4.915408 -4.398360 0.411630
H -5.465701 -4.352340 1.359448
H -5.622045 -4.685815 -0.375603
H -4.171395 -5.200965 0.500114
C 2.041553 1.935689 -0.269500
C 2.295424 2.836008 0.778691
C 2.518239 2.314123 -1.536978
C 2.939449 4.050687 0.571397
H 1.971250 2.577758 1.782450
C 3.180051 3.517035 -1.750913
H 2.338315 1.659086 -2.383531
C 3.382750 4.402811 -0.697963
H 3.099698 4.723384 1.412357
H 3.521596 3.770721 -2.753221
H 3.885150 5.353706 -0.864286

$TS_{XIII \rightarrow XIV}^a$ (CCW)

E = -2650.00748348

Pd 2.012419 0.840778 0.557849

P -2.030234 0.805560 -0.104998

P 0.532885 -0.931513 0.313037

C -1.209848 -0.712418 -0.005756
C -3.532953 0.587427 -1.171756
H -3.850100 -0.433278 -0.912472
C -4.738643 1.497311 -0.921156
H -4.486755 2.537098 -1.175794
H -5.031897 1.492103 0.133017
C -5.927637 1.030264 -1.758230
H -6.237689 0.038199 -1.396213
H -6.781456 1.700341 -1.594133
C -5.601439 0.938205 -3.241788
H -5.415807 1.949630 -3.634872
H -6.462439 0.543541 -3.796303
C -4.366364 0.082237 -3.483430
H -4.107620 0.071267 -4.549981
H -4.572013 -0.960622 -3.196193
C -3.194472 0.600780 -2.663752
H -2.278659 0.032271 -2.863262
H -2.987892 1.637372 -2.966458
C -0.980771 2.181577 -0.718838
H -0.211096 2.237527 0.069945
C -1.702086 3.528824 -0.780293
H -2.264296 3.730808 0.138793
H -2.433778 3.515427 -1.602784
C -0.692686 4.644511 -1.025990
H -1.205384 5.614153 -1.070887
H -0.005503 4.691482 -0.166662
C 0.104318 4.400634 -2.298978
H -0.574123 4.470026 -3.163503
H 0.858100 5.187546 -2.434500
C 0.763866 3.029494 -2.290758
H 1.534535 2.987097 -1.509793
H 1.278793 2.850659 -3.243155
C -0.237323 1.915418 -2.027243
H -0.939542 1.864783 -2.865583
H 0.272160 0.948411 -1.975401
C -2.760712 1.457148 1.475965
H -3.451210 2.262708 1.186518

C -3.562359 0.339636 2.144252
H -4.312735 -0.073858 1.456601
H -2.875489 -0.486943 2.361851
C -4.215342 0.805310 3.437554
H -4.761130 -0.026793 3.900778
H -4.962325 1.582432 3.212444
C -3.176575 1.367785 4.396478
H -3.653572 1.718036 5.320952
H -2.482426 0.563660 4.686947
C -2.389540 2.493577 3.741610
H -1.622433 2.876911 4.426928
H -3.069911 3.334578 3.534459
C -1.734954 2.042340 2.441576
H -0.968664 1.287981 2.650261
H -1.203733 2.883615 1.979849
C 0.760721 -1.853659 1.921344
H 0.215133 -2.799832 1.796169
C 2.229933 -2.186052 2.177902
H 2.786867 -1.240668 2.275126
H 2.670856 -2.714029 1.323971
C 2.392133 -3.013602 3.447560
H 1.902965 -3.989614 3.304290
H 3.454958 -3.223262 3.626987
C 1.776333 -2.316821 4.653059
H 2.339526 -1.393494 4.859720
H 1.867715 -2.944343 5.549374
C 0.319694 -1.957438 4.394542
H -0.270241 -2.882211 4.292859
H -0.100738 -1.412970 5.251214
C 0.179399 -1.127843 3.125809
H -0.871275 -0.874876 2.941444
H 0.707176 -0.170658 3.245688
C 1.168671 -2.195601 -0.904994
H 2.255270 -2.114019 -0.760372
C 0.893730 -1.743337 -2.334611
H -0.189706 -1.747017 -2.516502
H 1.235847 -0.711178 -2.458536

C 1.602497 -2.635624 -3.343372
H 2.688870 -2.508856 -3.218497
H 1.365964 -2.310698 -4.365679
C 1.232189 -4.097782 -3.145516
H 1.769698 -4.733350 -3.861870
H 0.158196 -4.232057 -3.350320
C 1.523153 -4.540231 -1.718941
H 1.241248 -5.591982 -1.575473
H 2.607629 -4.477356 -1.539140
C 0.796803 -3.666606 -0.700228
H 1.064786 -3.997828 0.310373
H -0.284500 -3.818544 -0.802972
C 3.450624 0.114663 -0.795588
C 4.449062 -0.803616 -0.429817
C 3.486497 0.552846 -2.127869
C 5.401886 -1.273137 -1.332458
H 4.489966 -1.176694 0.595635
C 4.437546 0.099688 -3.041863
H 2.743245 1.268379 -2.479062
C 5.399981 -0.824289 -2.649594
H 6.152182 -1.992523 -1.003785
H 4.421677 0.467673 -4.067925
H 6.141869 -1.186806 -3.359328
C 3.726333 1.687879 1.721779
H 3.459991 1.291923 2.701059
H 0.887283 1.350113 1.588194
C 3.666112 3.595935 0.078314
H 4.107115 2.911319 -0.657783
H 2.854814 4.132567 -0.427789
C 3.112191 2.803078 1.224552
H 2.338488 3.281696 1.826088
C 4.707569 4.608983 0.546655
H 5.560931 4.104563 1.015139
H 5.084266 5.200568 -0.296249
H 4.287326 5.305017 1.283648
H 4.632556 1.301425 1.257817
C -2.015357 -1.973521 -0.097612

C -2.261038 -2.774301 1.029756
C -2.499755 -2.464839 -1.322500
C -2.907632 -4.002014 0.938355
H -1.929714 -2.425913 2.003681
C -3.165906 -3.680469 -1.421051
H -2.321947 -1.890232 -2.225957
C -3.362266 -4.466082 -0.290246
H -3.061864 -4.595725 1.837887
H -3.514970 -4.023987 -2.393570
H -3.867899 -5.426801 -0.365565

TS_{XIII→XIV}^c (CW)

E = -2650.00683110

Pd -1.931290 -0.972738 0.356951
P 2.067938 -0.771790 -0.124509
P -0.548866 0.870133 0.379995
C 1.200718 0.711377 0.074320
C 3.604371 -0.399364 -1.100150
H 3.862272 0.605775 -0.736301
C 4.843662 -1.270854 -0.876397
H 4.661022 -2.292429 -1.239224
H 5.089766 -1.352056 0.186627
C 6.042149 -0.669015 -1.606922
H 6.281825 0.299392 -1.142050
H 6.922478 -1.308523 -1.462011
C 5.777377 -0.456436 -3.090203
H 5.661318 -1.435095 -3.580858
H 6.640300 0.027847 -3.564965
C 4.512112 0.359488 -3.312480
H 4.300424 0.458488 -4.384869
H 4.651680 1.379024 -2.920940
C 3.331712 -0.285822 -2.601904
H 2.401549 0.262081 -2.789963
H 3.184692 -1.294888 -3.012912
C 1.116891 -2.136471 -0.914485
H 0.336876 -2.335717 -0.162759
C 1.944813 -3.410906 -1.096665

H 2.473500 -3.682126 -0.175414
H 2.714536 -3.243377 -1.864569
C 1.050647 -4.563411 -1.537627
H 1.648865 -5.475107 -1.664000
H 0.321836 -4.772746 -0.738928
C 0.309265 -4.222701 -2.821022
H 1.040102 -4.104024 -3.636085
H -0.350802 -5.049202 -3.114541
C -0.486185 -2.935448 -2.666842
H -1.287219 -3.083723 -1.930190
H -0.979487 -2.674447 -3.611539
C 0.384796 -1.773626 -2.206887
H 1.099915 -1.535599 -3.001024
H -0.226956 -0.879765 -2.046609
C 2.766284 -1.546487 1.417078
H 3.504243 -2.285893 1.073770
C 3.493385 -0.474750 2.229130
H 4.243648 0.043882 1.616841
H 2.763413 0.293207 2.510477
C 4.128657 -1.052407 3.486058
H 4.617071 -0.253172 4.058374
H 4.921120 -1.762608 3.202773
C 3.092442 -1.769018 4.339984
H 3.560169 -2.197473 5.235773
H 2.349405 -1.036917 4.693470
C 2.383017 -2.849365 3.537409
H 1.618541 -3.345015 4.149771
H 3.110510 -3.627371 3.257274
C 1.741654 -2.279264 2.278421
H 0.939923 -1.584818 2.552493
H 1.259872 -3.082926 1.707382
C -0.838236 1.619665 2.064998
H -0.317746 2.588015 2.050935
C -2.323098 1.882938 2.309878
H -2.854915 0.917879 2.277551
H -2.750432 2.497109 1.508520
C -2.549482 2.558666 3.657566

H -2.093435 3.560588 3.635143
H -3.623794 2.711441 3.825544
C -1.940546 1.758295 4.800379
H -2.474260 0.799675 4.891864
H -2.078314 2.283965 5.754411
C -0.465497 1.478043 4.548286
H 0.093004 2.427440 4.559325
H -0.046883 0.861216 5.355370
C -0.266543 0.789770 3.205197
H 0.795129 0.583966 3.025178
H -0.769849 -0.187807 3.212635
C -1.187868 2.222834 -0.728134
H -2.272963 2.110593 -0.602048
C -0.900123 1.891496 -2.187995
H 0.181724 1.948007 -2.370345
H -1.208319 0.860255 -2.390219
C -1.645655 2.836798 -3.118590
H -2.725615 2.659156 -3.000139
H -1.404629 2.605860 -4.164993
C -1.323571 4.290402 -2.802584
H -1.888263 4.963607 -3.461382
H -0.256706 4.477219 -3.003604
C -1.614491 4.609646 -1.342935
H -1.362670 5.655093 -1.119466
H -2.695090 4.500553 -1.161815
C -0.854769 3.680104 -0.400570
H -1.127184 3.916952 0.635468
H 0.220785 3.872851 -0.492897
C -3.344695 -0.200717 -0.995532
C -4.321969 0.745519 -0.645881
C -3.376992 -0.642429 -2.326520
C -5.264254 1.222524 -1.555845
H -4.360143 1.128474 0.375806
C -4.311479 -0.175562 -3.250723
H -2.647276 -1.376877 -2.667463
C -5.264286 0.763132 -2.869284
H -6.003590 1.957222 -1.236043

H -4.293717 -0.548044 -4.275204
H -5.996666 1.132285 -3.585486
C -4.926304 -2.367460 0.448220
H -5.355529 -1.364144 0.539470
H -4.802839 -2.546004 -0.626452
C -2.533099 -3.159419 0.682307
H -0.776086 -1.425877 1.371282
H -1.739334 -3.481814 1.349247
H -2.591375 -3.648415 -0.291116
C -3.591054 -2.414450 1.122315
H -3.569275 -2.067549 2.160289
C -5.877553 -3.392806 1.057637
H -6.864659 -3.335330 0.583971
H -5.498708 -4.414484 0.930151
H -6.015466 -3.223962 2.133564
C 1.971734 1.997318 0.103544
C 2.182441 2.699375 1.301268
C 2.455295 2.608946 -1.065988
C 2.799023 3.945698 1.329132
H 1.846857 2.256851 2.234830
C 3.091541 3.844118 -1.046283
H 2.300938 2.114127 -2.019329
C 3.256366 4.528618 0.153337
H 2.927642 4.460104 2.280061
H 3.441854 4.282619 -1.979359
H 3.739067 5.503817 0.171362

TS_{XIII→XIV}^c (CCW)

E = -2650.00879439
Pd -2.031914 -0.924897 0.375901
P 2.012047 -0.754566 -0.148232
P -0.587437 0.893191 0.349422
C 1.170674 0.736573 0.081245
C 3.548840 -0.410733 -1.129703
H 3.841497 0.579613 -0.750830
C 4.758345 -1.328662 -0.932744
H 4.533343 -2.337298 -1.308648

H 5.012002 -1.435218 0.126297
C 5.969849 -0.759378 -1.667779
H 6.249946 0.191705 -1.189912
H 6.827868 -1.432696 -1.543775
C 5.696883 -0.512261 -3.144349
H 5.541356 -1.477737 -3.649935
H 6.571351 -0.050526 -3.620439
C 4.458500 0.350745 -3.339878
H 4.239299 0.474046 -4.408214
H 4.637517 1.358600 -2.934272
C 3.264790 -0.265754 -2.626213
H 2.349250 0.312555 -2.796838
H 3.083117 -1.264831 -3.047960
C 1.000781 -2.065764 -0.942717
H 0.208681 -2.221218 -0.190000
C 1.746271 -3.387442 -1.133564
H 2.279480 -3.687824 -0.223920
H 2.506097 -3.267282 -1.920898
C 0.766557 -4.480986 -1.543755
H 1.300298 -5.429279 -1.688646
H 0.056467 -4.643096 -0.718830
C 0.000329 -4.101341 -2.802647
H 0.703084 -4.061232 -3.649497
H -0.735546 -4.878019 -3.049287
C -0.681994 -2.748674 -2.658320
H -1.477794 -2.803933 -1.903111
H -1.168855 -2.467316 -3.600586
C 0.294569 -1.661931 -2.236573
H 1.023084 -1.509217 -3.039576
H -0.229450 -0.713010 -2.091653
C 2.693737 -1.566383 1.379812
H 3.403651 -2.330384 1.030457
C 3.456280 -0.523835 2.197680
H 4.229418 -0.033682 1.590321
H 2.753111 0.270332 2.475693
C 4.062192 -1.124683 3.458082
H 4.577897 -0.344278 4.032432

H 4.828108 -1.865278 3.179726
C 2.994008 -1.799541 4.306399
H 3.439231 -2.244965 5.205391
H 2.277791 -1.038791 4.654581
C 2.248433 -2.852423 3.500076
H 1.460628 -3.316813 4.107392
H 2.946928 -3.658903 3.226745
C 1.638626 -2.261492 2.235188
H 0.860130 -1.537559 2.500572
H 1.130248 -3.047110 1.662651
C -0.882316 1.653946 2.028808
H -0.353219 2.617469 2.007388
C -2.363536 1.933161 2.277025
H -2.893829 0.968958 2.306059
H -2.808420 2.500444 1.450613
C -2.563333 2.668062 3.597224
H -2.086665 3.658492 3.532046
H -3.632301 2.849402 3.770957
C -1.959963 1.894607 4.762127
H -2.518395 0.954894 4.894005
H -2.072534 2.457314 5.698208
C -0.495476 1.563630 4.507454
H 0.090704 2.496198 4.488052
H -0.089819 0.958351 5.329783
C -0.322274 0.834100 3.182127
H 0.732996 0.597394 3.002744
H -0.849756 -0.130040 3.215375
C -1.200926 2.265151 -0.765164
H -2.292236 2.151452 -0.691597
C -0.834638 1.965165 -2.214811
H 0.258123 1.962464 -2.322679
H -1.182066 0.959338 -2.468699
C -1.453701 2.970050 -3.175220
H -2.547649 2.851027 -3.152403
H -1.136940 2.749287 -4.203650
C -1.089325 4.396419 -2.794292
H -1.554923 5.112884 -3.484109

H 0.000173 4.531872 -2.886364
C -1.506013 4.688440 -1.360613
H -1.241518 5.717277 -1.081939
H -2.601881 4.613343 -1.284730
C -0.867870 3.709608 -0.379682
H -1.231789 3.930825 0.630840
H 0.216271 3.874041 -0.364528
C -3.439417 -0.100974 -0.950467
C -4.499865 0.651311 -0.419180
C -3.437758 -0.259694 -2.343416
C -5.476088 1.238491 -1.222964
H -4.572618 0.795373 0.661312
C -4.408692 0.318323 -3.160758
H -2.652070 -0.846918 -2.819349
C -5.431067 1.080152 -2.604321
H -6.276097 1.822137 -0.767157
H -4.363430 0.174521 -4.240471
H -6.188009 1.538159 -3.238986
C -3.042242 -3.953953 0.114908
H -2.869395 -3.955915 -0.967790
H -2.067281 -4.118409 0.594814
C -3.334445 -2.076265 1.770109
H -0.941263 -1.461200 1.416707
H -3.943390 -1.254171 2.147556
H -2.708335 -2.591213 2.495670
C -3.585713 -2.622259 0.538320
H -4.408248 -2.219488 -0.051762
C -3.997639 -5.091874 0.462926
H -3.602409 -6.056767 0.123051
H -4.160048 -5.152471 1.545780
H -4.975932 -4.945250 -0.011094
C 1.960667 2.008914 0.152733
C 2.157104 2.688334 1.366198
C 2.478211 2.633784 -0.995496
C 2.786387 3.926954 1.427487
H 1.798358 2.235799 2.285831
C 3.126074 3.862055 -0.942282

H 2.342401 2.155835 -1.960324
C 3.272289 4.525638 0.271247
H 2.901538 4.423207 2.389731
H 3.501244 4.311115 -1.860573
H 3.763695 5.495628 0.315342

xiii→*xiv*^c (CCW)

E = -2650.01084482

Pd 1.990634 1.022047 0.417500
P -2.011943 0.584200 -0.173992
P 0.683538 -0.886368 0.407701
C -1.064482 -0.841379 0.065251
C -3.482500 0.117889 -1.207458
H -3.688698 -0.901013 -0.848830
C -4.784199 0.905440 -1.031985
H -4.657239 1.937904 -1.386672
H -5.073565 0.966834 0.021627
C -5.911427 0.228157 -1.808544
H -6.105781 -0.755040 -1.353675
H -6.836552 0.808700 -1.698880
C -5.574019 0.037211 -3.279978
H -5.498734 1.022693 -3.764968
H -6.385323 -0.497872 -3.789887
C -4.253201 -0.699135 -3.450991
H -3.994020 -0.784943 -4.514043
H -4.346471 -1.725463 -3.063380
C -3.142523 0.016221 -2.696233
H -2.175183 -0.478417 -2.841947
H -3.035969 1.030252 -3.107678
C -1.119078 2.009691 -0.926498
H -0.396654 2.276625 -0.137808
C -2.051998 3.200363 -1.170260
H -2.634363 3.441842 -0.273324
H -2.776303 2.935813 -1.954184
C -1.271552 4.428357 -1.621507
H -1.965135 5.255329 -1.821505
H -0.622531 4.762680 -0.799218

C -0.424420 4.129733 -2.848384
H -1.089335 3.915945 -3.699642
H 0.165637 5.011361 -3.130316
C 0.484038 2.931889 -2.615234
H 1.228792 3.170361 -1.841351
H 1.049839 2.705119 -3.527280
C -0.297634 1.699562 -2.177963
H -0.949898 1.386237 -2.999906
H 0.385466 0.867987 -1.976623
C -2.806910 1.313386 1.342176
H -3.581352 2.005867 0.981908
C -3.484445 0.193954 2.132489
H -4.190595 -0.362545 1.500983
H -2.715556 -0.531343 2.422899
C -4.175999 0.721103 3.381523
H -4.630581 -0.110427 3.935379
H -5.000484 1.390389 3.090193
C -3.196450 1.482719 4.262515
H -3.703229 1.874824 5.153750
H -2.421467 0.788448 4.623016
C -2.534532 2.610862 3.485359
H -1.807414 3.138808 4.115940
H -3.300303 3.351742 3.206434
C -1.844613 2.101850 2.225691
H -0.996291 1.461518 2.492854
H -1.415859 2.947207 1.672895
C 0.990155 -1.613847 2.099913
H 0.538054 -2.615769 2.079321
C 2.485740 -1.773451 2.371099
H 2.949003 -0.773594 2.347874
H 2.969344 -2.355940 1.577814
C 2.733970 -2.430716 3.723911
H 2.346980 -3.461208 3.696909
H 3.813081 -2.510153 3.910872
C 2.052545 -1.670565 4.853252
H 2.518186 -0.677603 4.949801
H 2.209515 -2.183071 5.811505

C 0.566263 -1.492299 4.575575
H 0.074164 -2.477868 4.581462
H 0.093296 -0.903486 5.373479
C 0.342676 -0.822668 3.226970
H -0.727538 -0.692535 3.028384
H 0.775464 0.187671 3.237207
C 1.433515 -2.198059 -0.681630
H 2.506205 -2.009381 -0.537336
C 1.147869 -1.900325 -2.148965
H 0.078490 -2.050731 -2.350875
H 1.370203 -0.848593 -2.355925
C 1.989117 -2.786949 -3.055302
H 3.048467 -2.523821 -2.910460
H 1.757825 -2.580317 -4.108986
C 1.773476 -4.260049 -2.738702
H 2.407630 -4.889790 -3.376958
H 0.730721 -4.530485 -2.968824
C 2.045948 -4.550307 -1.269353
H 1.864235 -5.610266 -1.046211
H 3.110411 -4.362685 -1.059227
C 1.196246 -3.673567 -0.353395
H 1.455636 -3.887325 0.690841
H 0.139424 -3.940722 -0.474707
C 3.435033 0.344311 -0.956013
C 4.496746 -0.486038 -0.560135
C 3.454854 0.761930 -2.294648
C 5.498941 -0.891492 -1.440511
H 4.547100 -0.840628 0.472039
C 4.449849 0.367129 -3.188600
H 2.662580 1.411793 -2.666507
C 5.478612 -0.467831 -2.765693
H 6.300059 -1.542023 -1.089075
H 4.419153 0.712661 -4.222135
H 6.257066 -0.782056 -3.459128
C 1.985070 4.156923 0.903134
H 1.073798 4.065693 0.299608
H 1.678493 3.977675 1.941520

C 3.603662 2.272286 1.374846
H 0.900397 1.522048 1.490198
H 4.479195 1.701073 1.073616
H 3.373488 2.320109 2.439099
C 2.964201 3.097987 0.494839
H 3.343499 3.145490 -0.530175
C 2.559810 5.558535 0.737877
H 1.826040 6.321391 1.024321
H 3.452746 5.697258 1.359359
H 2.849536 5.749025 -0.303460
C -1.753419 -2.173157 0.092987
C -1.933593 -2.881666 1.291957
C -2.178576 -2.822336 -1.079151
C -2.465621 -4.166250 1.319274
H -1.641933 -2.413104 2.227400
C -2.731728 -4.096992 -1.060057
H -2.043074 -2.324197 -2.033763
C -2.867054 -4.784742 0.141266
H -2.572366 -4.682864 2.271709
H -3.038950 -4.562831 -1.995071
H -3.283739 -5.789919 0.158841

TS_{XIV→XIV^c} (CCW)

E = -2650.00863877

Pd -1.946896 -1.180926 0.059718
P 2.018408 -0.435332 -0.288152
P -0.764278 0.745661 0.517109
C 0.991021 0.857943 0.223497
C 3.488268 0.310632 -1.144926
H 3.639800 1.233078 -0.565793
C 4.819555 -0.445487 -1.107128
H 4.744761 -1.378066 -1.684438
H 5.090635 -0.727199 -0.085241
C 5.932507 0.429480 -1.679664
H 6.073190 1.293506 -1.012560
H 6.879645 -0.125317 -1.671797
C 5.620679 0.930081 -3.082273

H 5.602578 0.075409 -3.775970
H 6.417788 1.597607 -3.433795
C 4.271044 1.631701 -3.129164
H 4.031742 1.939778 -4.155037
H 4.306646 2.549771 -2.522318
C 3.179333 0.721539 -2.586327
H 2.192187 1.192884 -2.654798
H 3.134780 -0.182383 -3.210564
C 1.213713 -1.695108 -1.363527
H 0.470149 -2.138408 -0.681850
C 2.179231 -2.797401 -1.805538
H 2.747780 -3.197513 -0.957931
H 2.914276 -2.380867 -2.510165
C 1.418061 -3.922756 -2.494988
H 2.115606 -4.709498 -2.810309
H 0.731062 -4.384882 -1.768968
C 0.622180 -3.401609 -3.681466
H 1.321872 -3.028162 -4.445284
H 0.055922 -4.215863 -4.151823
C -0.311980 -2.275791 -3.263900
H -1.081652 -2.666885 -2.584315
H -0.844606 -1.877693 -4.136602
C 0.428908 -1.148769 -2.556748
H 1.102265 -0.667516 -3.273422
H -0.276490 -0.384094 -2.215240
C 2.822803 -1.438655 1.057107
H 3.636183 -1.998731 0.573859
C 3.432405 -0.486168 2.085666
H 4.112736 0.230064 1.605000
H 2.623689 0.118397 2.512449
C 4.141872 -1.238477 3.202063
H 4.545394 -0.527026 3.934039
H 5.004347 -1.783153 2.787257
C 3.199124 -2.225639 3.874816
H 3.719321 -2.776785 4.668818
H 2.383371 -1.669148 4.362301
C 2.607098 -3.188664 2.856237

H 1.906402 -3.880741 3.341283
H 3.414736 -3.807802 2.435046
C 1.898029 -2.449558 1.728066
H 1.016148 -1.928878 2.117599
H 1.520559 -3.170851 0.992876
C -1.135908 1.046769 2.321290
H -0.739698 2.047898 2.543382
C -2.641804 1.063920 2.578688
H -3.046224 0.072061 2.318560
H -3.144810 1.783372 1.921846
C -2.948931 1.385645 4.036680
H -2.619703 2.413883 4.252780
H -4.033697 1.366044 4.205679
C -2.245085 0.425482 4.985518
H -2.657806 -0.585438 4.844469
H -2.444255 0.700583 6.029619
C -0.746993 0.387265 4.715835
H -0.308400 1.368661 4.956548
H -0.255681 -0.342905 5.373574
C -0.465713 0.052381 3.257686
H 0.613046 0.021863 3.064641
H -0.845498 -0.953695 3.028362
C -1.554953 2.241089 -0.263322
H -2.620089 1.976708 -0.208488
C -1.214379 2.312250 -1.747388
H -0.149531 2.553035 -1.866091
H -1.375066 1.330978 -2.205793
C -2.074006 3.352838 -2.450197
H -3.122818 3.020735 -2.408445
H -1.806308 3.410612 -3.513896
C -1.938624 4.716845 -1.788437
H -2.584086 5.453434 -2.285322
H -0.904034 5.076067 -1.906881
C -2.267803 4.638647 -0.304505
H -2.145857 5.621809 0.169692
H -3.327003 4.361710 -0.187281
C -1.401515 3.606091 0.411416

H -1.700529 3.555865 1.465632
H -0.356435 3.938989 0.397199
C -3.435851 -0.257873 -1.107051
C -4.547046 0.400974 -0.555956
C -3.394346 -0.319282 -2.507529
C -5.537984 0.982121 -1.345560
H -4.650652 0.470648 0.528327
C -4.379757 0.253935 -3.311659
H -2.561285 -0.821954 -2.999583
C -5.458207 0.914136 -2.733229
H -6.379400 1.489390 -0.873097
H -4.300913 0.186141 -4.396874
H -6.229064 1.366547 -3.355061
C -1.534260 -4.314111 0.763461
H -0.483083 -4.192532 0.474078
H -1.605412 -3.985581 1.807656
C -3.521070 -2.778863 0.328896
H -0.755996 -1.751327 0.966069
H -4.295297 -2.467530 -0.365418
H -3.765672 -2.740672 1.392102
C -2.399282 -3.437117 -0.095714
H -2.297261 -3.595501 -1.173044
C -1.930525 -5.780330 0.632024
H -1.280233 -6.420660 1.240134
H -2.965795 -5.941739 0.956188
H -1.854316 -6.121605 -0.408619
C 1.610956 2.180210 0.564526
C 1.730536 2.613406 1.895201
C 2.027654 3.090422 -0.422134
C 2.195926 3.882745 2.220836
H 1.443841 1.936903 2.695198
C 2.513759 4.353321 -0.106217
H 1.938918 2.809571 -1.466632
C 2.588511 4.764089 1.220537
H 2.256963 4.180349 3.266357
H 2.816245 5.027635 -0.905849
H 2.952417 5.758497 1.471605

XIV^a

E = -2650.01617721
Pd -1.955721 -1.219891 0.147453
P 2.006843 -0.436460 -0.257457
P -0.789172 0.750004 0.490254
C 0.968140 0.866071 0.201975
C 3.453684 0.281222 -1.173645
H 3.600435 1.234314 -0.645499
C 4.796564 -0.452332 -1.114548
H 4.728503 -1.417281 -1.636460
H 5.085460 -0.670849 -0.081834
C 5.887008 0.404829 -1.753349
H 6.025246 1.307285 -1.138661
H 6.842484 -0.135029 -1.730407
C 5.544606 0.820563 -3.176538
H 5.524830 -0.072672 -3.819784
H 6.327258 1.475669 -3.580033
C 4.186096 1.503849 -3.239044
H 3.926278 1.752256 -4.276032
H 4.222392 2.454479 -2.684760
C 3.114057 0.613330 -2.628392
H 2.120060 1.070404 -2.701306
H 3.067062 -0.321536 -3.204680
C 1.214945 -1.769020 -1.252015
H 0.505691 -2.213593 -0.536002
C 2.215187 -2.848381 -1.675723
H 2.826388 -3.184461 -0.829585
H 2.908648 -2.428286 -2.418613
C 1.490507 -4.037885 -2.292590
H 2.220121 -4.791033 -2.617460
H 0.874041 -4.515629 -1.518065
C 0.610178 -3.610755 -3.457724
H 1.253232 -3.255336 -4.277883
H 0.054888 -4.471498 -3.852443
C -0.347114 -2.494573 -3.063477
H -1.086919 -2.862448 -2.335992
H -0.918034 -2.165114 -3.940375

C 0.384278 -1.307950 -2.449464
H 1.028347 -0.855762 -3.211453
H -0.330037 -0.540981 -2.134196
C 2.839304 -1.354550 1.130946
H 3.659759 -1.926405 0.674476
C 3.436343 -0.340695 2.106456
H 4.106695 0.357299 1.586277
H 2.620016 0.275394 2.500952
C 4.155385 -1.021701 3.261616
H 4.549974 -0.266146 3.953108
H 5.024436 -1.578129 2.877346
C 3.223679 -1.980995 3.987967
H 3.749055 -2.481131 4.811704
H 2.400696 -1.407968 4.443008
C 2.644953 -3.006693 3.024293
H 1.952570 -3.679568 3.546833
H 3.461005 -3.638071 2.639300
C 1.929527 -2.342733 1.853945
H 1.036080 -1.816094 2.210568
H 1.572646 -3.110729 1.156289
C -1.162714 1.156621 2.273076
H -0.774752 2.172439 2.433132
C -2.667854 1.177360 2.533777
H -3.062145 0.164630 2.351703
H -3.181630 1.838844 1.825955
C -2.970907 1.602978 3.965702
H -2.646573 2.645948 4.105066
H -4.054656 1.589531 4.141607
C -2.257373 0.716700 4.977377
H -2.667434 -0.302970 4.912187
H -2.451762 1.065737 6.000060
C -0.760353 0.663036 4.703690
H -0.322792 1.659599 4.873511
H -0.264519 -0.018646 5.408396
C -0.484258 0.229009 3.270536
H 0.593874 0.186278 3.075833
H -0.863063 -0.791494 3.115192

C -1.579284 2.198964 -0.380063
H -2.644298 1.931052 -0.342859
C -1.192134 2.201064 -1.855089
H -0.119142 2.411435 -1.949421
H -1.359769 1.204038 -2.274734
C -1.997911 3.228600 -2.636415
H -3.055923 2.925662 -2.627444
H -1.683296 3.233474 -3.688855
C -1.858485 4.615873 -2.027326
H -2.459722 5.346050 -2.585343
H -0.809994 4.944514 -2.107053
C -2.262776 4.603944 -0.560460
H -2.150462 5.603970 -0.120431
H -3.330381 4.345007 -0.486071
C -1.446712 3.592718 0.239546
H -1.799340 3.590643 1.278094
H -0.399164 3.916681 0.264899
C -3.415590 -0.359873 -1.100862
C -4.530603 0.292807 -0.552658
C -3.362493 -0.418755 -2.499413
C -5.513296 0.881202 -1.347106
H -4.642635 0.353049 0.531154
C -4.339724 0.161734 -3.307151
H -2.530780 -0.927658 -2.985500
C -5.420884 0.822644 -2.734092
H -6.358196 1.385758 -0.878239
H -4.253161 0.097639 -4.391904
H -6.185378 1.280193 -3.359912
C -3.379992 -2.882682 -0.043513
H -4.312561 -2.467311 0.330783
H -0.781793 -1.684999 1.124702
C -2.385316 -3.317333 0.812337
H -3.388032 -3.196473 -1.088004
C 1.577856 2.207547 0.484380
C 1.684711 2.703951 1.794030
C 1.995143 3.075564 -0.539906
C 2.134246 3.991814 2.063770

H 1.399647 2.063228 2.623158
C 2.464942 4.357187 -0.279738
H 1.920671 2.746386 -1.571196
C 2.524254 4.830681 1.026590
H 2.184451 4.337725 3.094898
H 2.767272 4.996104 -1.107983
H 2.874984 5.839847 1.233593
C -1.370225 -4.354862 0.418664
H -1.192652 -4.288822 -0.661524
H -0.409944 -4.149200 0.907284
C -1.836243 -5.761159 0.775569
H -1.085990 -6.510382 0.494471
H -2.015464 -5.857973 1.853924
H -2.772802 -6.008821 0.261595
H -2.551982 -3.213874 1.886519

XIV^c

E = -2650.01674577
Pd -1.905745 -1.084724 -0.437181
P 2.018714 -0.425626 -0.345496
P -0.770801 0.630652 0.591453
C 1.002457 0.735415 0.438021
C 3.551862 0.456452 -0.904589
H 3.698294 1.193676 -0.102114
C 4.857947 -0.335372 -1.007552
H 4.783570 -1.092127 -1.801144
H 5.072046 -0.871783 -0.077725
C 6.019216 0.611375 -1.303306
H 6.155035 1.276888 -0.437301
H 6.949235 0.036597 -1.401241
C 5.782344 1.456146 -2.546794
H 5.767580 0.801398 -3.431737
H 6.613811 2.157230 -2.693927
C 4.458083 2.201905 -2.463165
H 4.273723 2.765464 -3.386728
H 4.496608 2.937636 -1.645003
C 3.316981 1.229660 -2.204363

H 2.346257 1.739833 -2.184192
H 3.271779 0.514436 -3.037842
C 1.267266 -1.338436 -1.758330
H 0.496520 -1.937082 -1.251371
C 2.246022 -2.304542 -2.429929
H 2.797727 -2.898801 -1.692286
H 2.993969 -1.734183 -2.999936
C 1.497456 -3.230993 -3.380294
H 2.201468 -3.917851 -3.867767
H 0.805988 -3.856365 -2.793857
C 0.710504 -2.443044 -4.416191
H 1.416454 -1.906955 -5.069374
H 0.143695 -3.123211 -5.064891
C -0.221365 -1.437099 -3.756118
H -0.997810 -1.968583 -3.184425
H -0.746675 -0.848630 -4.518484
C 0.525771 -0.508413 -2.805792
H 1.227278 0.104586 -3.382901
H -0.171226 0.176410 -2.311638
C 2.708342 -1.785997 0.724419
H 3.536723 -2.228839 0.153116
C 3.279295 -1.174316 2.003506
H 4.007484 -0.385379 1.769675
H 2.463877 -0.672433 2.537208
C 3.898632 -2.231352 2.906674
H 4.273318 -1.763774 3.826293
H 4.771534 -2.677007 2.404743
C 2.892341 -3.325726 3.231947
H 3.348481 -4.091948 3.871862
H 2.060969 -2.890037 3.808191
C 2.341116 -3.951493 1.959050
H 1.596117 -4.721578 2.198696
H 3.157194 -4.463030 1.425128
C 1.718498 -2.903235 1.045412
H 0.835559 -2.471453 1.530213
H 1.357843 -3.378687 0.123871
C -1.250953 0.455430 2.385595

H -0.850330 1.343331 2.895317
C -2.769423 0.449180 2.555309
H -3.168184 -0.429586 2.023117
H -3.225052 1.327107 2.081697
C -3.158313 0.380474 4.027483
H -2.822015 1.300033 4.531063
H -4.251444 0.354612 4.127293
C -2.533282 -0.825601 4.715379
H -2.958047 -1.744587 4.281913
H -2.789803 -0.836870 5.782843
C -1.022583 -0.846159 4.524788
H -0.576598 0.014877 5.047149
H -0.589118 -1.746434 4.981681
C -0.662839 -0.782233 3.047400
H 0.424056 -0.806573 2.906892
H -1.058618 -1.672919 2.536753
C -1.467612 2.308632 0.178882
H -2.540249 2.089217 0.074593
C -0.982478 2.748113 -1.198683
H 0.101795 2.914071 -1.165023
H -1.158343 1.941114 -1.917767
C -1.690332 4.014416 -1.657931
H -2.757407 3.788322 -1.804086
H -1.300936 4.330302 -2.635285
C -1.539624 5.130137 -0.634118
H -2.068797 6.033516 -0.965548
H -0.475654 5.402284 -0.546956
C -2.049259 4.685113 0.728931
H -1.930913 5.489438 1.467356
H -3.128431 4.479039 0.657403
C -1.331598 3.428837 1.212967
H -1.758118 3.119256 2.175070
H -0.277026 3.666913 1.399534
C -3.349173 0.132096 -1.354966
C -4.496109 0.567235 -0.673770
C -3.218279 0.565307 -2.681525
C -5.434657 1.412435 -1.264207

H -4.670911 0.245798 0.353717
C -4.149066 1.409310 -3.285482
H -2.357384 0.245070 -3.269523
C -5.262409 1.845606 -2.574977
H -6.307792 1.732731 -0.695511
H -4.001094 1.729555 -4.316945
H -5.991208 2.507811 -3.039569
C -2.339939 -3.959457 0.731986
H -1.390284 -3.951825 1.282737
H -3.048417 -3.374309 1.334367
C -3.176602 -2.654703 -1.286449
H -4.159191 -2.537752 -0.830006
H -0.719543 -1.792831 0.351443
C -2.151792 -3.288298 -0.604367
H -1.295071 -3.639873 -1.186970
H -3.138962 -2.511041 -2.364304
C -2.838815 -5.391731 0.584590
H -2.949379 -5.876147 1.562414
H -3.811738 -5.420967 0.079424
H -2.140531 -5.995475 -0.009361
C 1.642328 1.888461 1.152552
C 1.682993 1.946024 2.555420
C 2.152362 3.008391 0.473000
C 2.159388 3.060616 3.236912
H 1.322466 1.095048 3.126089
C 2.648331 4.119238 1.144683
H 2.132565 3.019492 -0.612065
C 2.642281 4.158654 2.534973
H 2.156883 3.065947 4.325660
H 3.023938 4.967546 0.574682
H 3.014166 5.033503 3.064715

TS_{XIV→XV}^a

E = -2650.01130747

Pd -2.023640 -1.196720 0.020675

P 2.025126 -0.429324 -0.270646

P -0.766634 0.727287 0.509492

C 0.999626 0.851578 0.264501
C 3.486946 0.309667 -1.139073
H 3.645326 1.230469 -0.558997
C 4.816217 -0.449430 -1.109452
H 4.735461 -1.385388 -1.679994
H 5.092790 -0.725099 -0.086964
C 5.925121 0.419848 -1.697935
H 6.075214 1.287499 -1.037657
H 6.871131 -0.136893 -1.698013
C 5.597826 0.912949 -3.099963
H 5.565897 0.053752 -3.787589
H 6.394288 1.573254 -3.466213
C 4.252089 1.623205 -3.135077
H 4.003409 1.928516 -4.159502
H 4.301864 2.543893 -2.533250
C 3.160185 0.723192 -2.575828
H 2.175176 1.202707 -2.628463
H 3.097318 -0.179764 -3.199757
C 1.212800 -1.697798 -1.331190
H 0.492671 -2.164452 -0.639828
C 2.206014 -2.766479 -1.799167
H 2.810785 -3.147653 -0.967940
H 2.907139 -2.313775 -2.515200
C 1.483022 -3.919975 -2.481340
H 2.213613 -4.657700 -2.837864
H 0.858591 -4.436495 -1.738731
C 0.614255 -3.430088 -3.629647
H 1.265150 -3.036048 -4.425589
H 0.057642 -4.266355 -4.072078
C -0.340150 -2.331223 -3.183510
H -1.082736 -2.732543 -2.475868
H -0.908783 -1.958367 -4.044167
C 0.393751 -1.177038 -2.511834
H 1.045802 -0.693455 -3.247665
H -0.318589 -0.421806 -2.165866
C 2.819378 -1.442359 1.076702
H 3.639141 -2.010302 0.614641

C 3.407372 -0.498115 2.124241
H 4.141326 0.180794 1.668256
H 2.601379 0.145201 2.495152
C 4.022158 -1.252285 3.294519
H 4.411935 -0.539383 4.032402
H 4.883307 -1.842142 2.944026
C 3.000885 -2.182469 3.931970
H 3.445615 -2.726926 4.774813
H 2.175410 -1.582887 4.346185
C 2.447764 -3.155888 2.902607
H 1.692565 -3.811857 3.355333
H 3.262225 -3.811971 2.558020
C 1.845574 -2.435674 1.702445
H 0.934083 -1.901647 2.000702
H 1.535806 -3.176191 0.955567
C -1.166874 1.033772 2.308536
H -0.769973 2.029691 2.550017
C -2.677715 1.055528 2.536383
H -3.081965 0.067928 2.260934
H -3.164743 1.780719 1.873658
C -3.013819 1.363167 3.990700
H -2.676733 2.383852 4.229215
H -4.102142 1.354256 4.135908
C -2.342812 0.379335 4.939035
H -2.763433 -0.624245 4.770643
H -2.562525 0.637899 5.983224
C -0.839566 0.329998 4.703591
H -0.397450 1.302022 4.973444
H -0.370419 -0.417310 5.358423
C -0.522320 0.023639 3.246064
H 0.561601 -0.005197 3.084348
H -0.897547 -0.979160 2.990777
C -1.525673 2.238214 -0.280608
H -2.594597 1.982896 -0.274742
C -1.117740 2.326852 -1.747193
H -0.041921 2.535592 -1.812560
H -1.285166 1.359004 -2.230496

C -1.906860 3.405942 -2.474316
H -2.966627 3.109749 -2.495957
H -1.579680 3.472742 -3.520838
C -1.766321 4.753069 -1.780873
H -2.357538 5.519197 -2.300119
H -0.715263 5.079463 -1.830220
C -2.185413 4.655965 -0.321276
H -2.069299 5.626672 0.179353
H -3.255718 4.402105 -0.272565
C -1.384973 3.590718 0.422177
H -1.743912 3.530215 1.456842
H -0.334594 3.902441 0.472669
C -3.408837 -0.233862 -1.191518
C -4.524819 0.406407 -0.629828
C -3.328047 -0.218645 -2.590200
C -5.481273 1.053000 -1.410831
H -4.657263 0.411571 0.452984
C -4.279432 0.421060 -3.383625
H -2.494648 -0.713642 -3.086709
C -5.361677 1.067898 -2.796828
H -6.327597 1.545446 -0.931800
H -4.171673 0.414202 -4.468335
H -6.105901 1.571564 -3.411585
C -3.305667 -2.881062 -0.106652
H -1.076326 -2.067711 1.011081
H -3.317399 -3.250218 -1.133527
H -4.268789 -2.563083 0.287679
C -1.311738 -4.377846 0.346987
H -1.056540 -4.235590 -0.710271
H -0.373595 -4.294425 0.909346
C -2.271864 -3.289919 0.762068
H -2.492067 -3.271948 1.832184
C -1.912809 -5.761509 0.548970
H -2.828424 -5.882631 -0.041999
H -1.208124 -6.546632 0.249456
H -2.173324 -5.931445 1.601412
C 1.621047 2.164047 0.637459

C 1.704061 2.586738 1.974666
C 2.071764 3.081277 -0.328001
C 2.163320 3.851727 2.324179
H 1.391941 1.906071 2.761381
C 2.551619 4.340260 0.012329
H 2.014041 2.810176 -1.377280
C 2.587496 4.740718 1.343642
H 2.194247 4.140197 3.373594
H 2.879870 5.019519 -0.772842
H 2.946011 5.732105 1.613589

TS_{XIV→XV}^c

E = -2650.01285900

Pd -1.951449 -1.024526 -0.574558
P 2.036353 -0.399865 -0.374133
P -0.756645 0.587404 0.612265
C 1.024212 0.687781 0.509406
C 3.592069 0.496530 -0.833565
H 3.744467 1.151809 0.036353
C 4.879526 -0.314860 -0.998131
H 4.795988 -0.989208 -1.862386
H 5.068445 -0.944167 -0.122797
C 6.067091 0.626439 -1.187934
H 6.206707 1.200983 -0.259647
H 6.984460 0.040837 -1.330702
C 5.867921 1.593751 -2.345879
H 5.852750 1.028872 -3.290685
H 6.716813 2.286147 -2.412571
C 4.559115 2.358536 -2.208212
H 4.400976 3.011592 -3.075977
H 4.600107 3.011918 -1.322926
C 3.393476 1.392679 -2.058043
H 2.434129 1.920932 -2.003564
H 3.345795 0.758773 -2.955005
C 1.264931 -1.157194 -1.864269
H 0.463275 -1.762243 -1.415976
C 2.201219 -2.104999 -2.618823

H 2.720573 -2.788790 -1.937183
H 2.979066 -1.520850 -3.132766
C 1.414321 -2.903136 -3.651675
H 2.086079 -3.580824 -4.194329
H 0.685214 -3.539707 -3.125593
C 0.678996 -1.986136 -4.616723
H 1.418407 -1.429164 -5.212995
H 0.087233 -2.575475 -5.328866
C -0.209977 -1.000804 -3.873079
H -1.021876 -1.541689 -3.362802
H -0.692722 -0.316896 -4.581850
C 0.567963 -0.203633 -2.833474
H 1.300090 0.430477 -3.345417
H -0.104396 0.459320 -2.279997
C 2.678793 -1.873699 0.567884
H 3.500423 -2.293626 -0.029989
C 3.242374 -1.402316 1.908275
H 4.010651 -0.630882 1.760759
H 2.435547 -0.910407 2.464318
C 3.790275 -2.559119 2.731940
H 4.164703 -2.187236 3.694314
H 4.652814 -3.004109 2.211975
C 2.726431 -3.626003 2.945953
H 3.131717 -4.465020 3.525952
H 1.904751 -3.200997 3.543224
C 2.175522 -4.115425 1.614980
H 1.383864 -4.859754 1.774810
H 2.976293 -4.628134 1.059690
C 1.634465 -2.967775 0.771406
H 0.758210 -2.529515 1.263288
H 1.283956 -3.355039 -0.194208
C -1.270549 0.270820 2.379966
H -0.872300 1.101144 2.980178
C -2.793294 0.265241 2.510554
H -3.184899 -0.549645 1.880007
H -3.228336 1.191507 2.116396
C -3.226809 0.046593 3.954783

H -2.893006 0.899609 4.565646
H -4.322706 0.028375 4.019869
C -2.638777 -1.237867 4.521913
H -3.057670 -2.095955 3.972720
H -2.930897 -1.367009 5.572329
C -1.123215 -1.255251 4.379255
H -0.689183 -0.461972 5.007909
H -0.711461 -2.204926 4.747787
C -0.710237 -1.031802 2.931354
H 0.380988 -1.045770 2.831801
H -1.087081 -1.861028 2.313744
C -1.430023 2.305211 0.339362
H -2.503636 2.107892 0.204819
C -0.929186 2.863293 -0.988573
H 0.157159 3.012843 -0.933966
H -1.111103 2.129161 -1.780063
C -1.622197 4.172313 -1.337841
H -2.689180 3.968197 -1.514236
H -1.220733 4.571133 -2.279386
C -1.475932 5.191427 -0.217478
H -1.997502 6.123706 -0.472113
H -0.411614 5.448791 -0.096228
C -2.001175 4.628475 1.094918
H -1.885352 5.361982 1.904137
H -3.080832 4.436770 0.995491
C -1.295396 3.328945 1.469337
H -1.730926 2.939011 2.397456
H -0.240730 3.542062 1.683594
C -3.340344 0.286028 -1.388656
C -4.498420 0.667473 -0.693129
C -3.178662 0.839814 -2.666335
C -5.417170 1.573023 -1.221928
H -4.697641 0.254671 0.296229
C -4.090410 1.743915 -3.208366
H -2.307808 0.569908 -3.262634
C -5.215028 2.123501 -2.483483
H -6.299418 1.847657 -0.643509

H -3.918091 2.156081 -4.202748
H -5.929127 2.832493 -2.899315
C -2.256581 -3.990094 0.603323
H -1.321870 -4.056348 1.176994
H -2.955356 -3.409638 1.221597
C -3.063006 -2.641892 -1.404542
H -4.063692 -2.615370 -0.972553
H -0.918973 -2.087693 0.048960
C -2.009674 -3.244289 -0.687998
H -1.172924 -3.632030 -1.277847
H -3.018277 -2.561631 -2.489254
C -2.809738 -5.386016 0.355328
H -2.969790 -5.921917 1.298541
H -3.767277 -5.341383 -0.176936
H -2.119870 -5.983170 -0.254889
C 1.665358 1.761246 1.336025
C 1.681159 1.695339 2.738915
C 2.199855 2.929731 0.765775
C 2.157366 2.740202 3.523172
H 1.300490 0.802594 3.226600
C 2.696086 3.971264 1.540451
H 2.196928 3.036296 -0.314401
C 2.665309 3.889168 2.928519
H 2.134722 2.650789 4.608035
H 3.090541 4.861665 1.053391
H 3.036768 4.709786 3.539162

XV^a

E = -2650.02524387
Pd 2.093941 1.076078 -0.121816
P -2.000587 0.509065 -0.252612
P 0.711749 -0.794479 0.484858
C -1.070082 -0.824366 0.324996
C -3.565835 -0.142216 -0.997117
H -3.772909 -1.005594 -0.347358
C -4.816511 0.739384 -0.958113
H -4.681172 1.621734 -1.599353

H -5.009473 1.110654 0.053414
C -6.029958 -0.059400 -1.428609
H -6.221321 -0.863142 -0.701506
H -6.920645 0.582082 -1.423217
C -5.824924 -0.673315 -2.806093
H -5.754574 0.131538 -3.553950
H -6.695856 -1.280038 -3.085053
C -4.551553 -1.505834 -2.856560
H -4.387840 -1.899263 -3.867952
H -4.649073 -2.376439 -2.189655
C -3.354880 -0.676334 -2.415511
H -2.421338 -1.247947 -2.480685
H -3.244457 0.174635 -3.103010
C -1.126267 1.627224 -1.431081
H -0.328845 2.064497 -0.806732
C -2.031073 2.760114 -1.927455
H -2.540738 3.262043 -1.096604
H -2.817997 2.332276 -2.565362
C -1.242473 3.780198 -2.739476
H -1.919509 4.560376 -3.110744
H -0.523090 4.283128 -2.077517
C -0.495428 3.122522 -3.888333
H -1.224994 2.726922 -4.612118
H 0.105461 3.865459 -4.428278
C 0.382536 1.984441 -3.391528
H 1.181893 2.378000 -2.743308
H 0.881461 1.496813 -4.238106
C -0.416072 0.954363 -2.602733
H -1.141540 0.475264 -3.269610
H 0.244619 0.169781 -2.225051
C -2.610860 1.689302 1.055227
H -3.388797 2.316400 0.597097
C -3.233098 0.889241 2.198488
H -4.069962 0.277587 1.833959
H -2.485180 0.176485 2.565042
C -3.678624 1.782881 3.347251
H -4.099157 1.169086 4.154101

H -4.487197 2.447888 3.006383
C -2.518723 2.623507 3.860432
H -2.845420 3.271288 4.683942
H -1.744860 1.958725 4.273939
C -1.920829 3.455981 2.736711
H -1.063622 4.039257 3.098687
H -2.670677 4.186376 2.395383
C -1.490787 2.597862 1.553400
H -0.633802 1.971521 1.835355
H -1.144546 3.251746 0.744253
C 1.168027 -1.069544 2.276454
H 0.705460 -2.014106 2.595734
C 2.682425 -1.191054 2.446254
H 3.140284 -0.247294 2.109672
H 3.094060 -1.975847 1.800336
C 3.055784 -1.448235 3.900982
H 2.647027 -2.422051 4.212282
H 4.146505 -1.522323 4.003141
C 2.510817 -0.358243 4.813731
H 3.007074 0.593688 4.568791
H 2.752567 -0.574437 5.862656
C 1.008280 -0.191604 4.634196
H 0.496950 -1.102205 4.983725
H 0.633895 0.633463 5.256067
C 0.652341 0.046647 3.173257
H -0.430985 0.158227 3.052130
H 1.099979 0.997435 2.838653
C 1.360319 -2.372130 -0.284330
H 2.443610 -2.183270 -0.332105
C 0.877442 -2.491728 -1.726280
H -0.217483 -2.580794 -1.735864
H 1.125526 -1.573580 -2.267603
C 1.506370 -3.681578 -2.437268
H 2.587452 -3.500766 -2.535934
H 1.108636 -3.761241 -3.458242
C 1.276555 -4.973451 -1.668411
H 1.751520 -5.819739 -2.182462

H 0.197005 -5.190431 -1.634163
C 1.801881 -4.848740 -0.246250
H 1.631109 -5.778553 0.312802
H 2.892001 -4.696903 -0.279425
C 1.155031 -3.678234 0.487491
H 1.586284 -3.603463 1.492865
H 0.086457 -3.887124 0.621516
C 3.420064 0.055692 -1.231209
C 4.528860 -0.548085 -0.621144
C 3.270981 -0.129511 -2.609814
C 5.418119 -1.337928 -1.346963
H 4.707258 -0.409818 0.443980
C 4.159603 -0.915760 -3.341097
H 2.441253 0.339825 -3.132498
C 5.234893 -1.533580 -2.712025
H 6.263967 -1.800446 -0.838721
H 4.006065 -1.045657 -4.412221
H 5.927972 -2.151347 -3.280387
C 3.221403 2.766576 -0.239601
H 1.406937 2.562204 0.963926
H 3.191759 3.232057 -1.231227
H 4.249329 2.637930 0.105617
C 1.527249 4.608721 0.355144
H 1.024918 4.435820 -0.607684
H 0.733764 4.830646 1.082854
C 2.251880 3.328705 0.755374
H 2.701053 3.432676 1.752621
C 2.460657 5.800676 0.239757
H 3.248008 5.612431 -0.499903
H 1.920398 6.705634 -0.062774
H 2.952768 6.010525 1.198333
C -1.776284 -2.057143 0.798025
C -1.842801 -2.388603 2.161548
C -2.326039 -2.995291 -0.093383
C -2.383758 -3.590026 2.605460
H -1.450149 -1.686957 2.892025
C -2.886675 -4.190062 0.342131

H -2.283047 -2.795326 -1.159511
C -2.907837 -4.502359 1.697222
H -2.399549 -3.810119 3.671671
H -3.291286 -4.890137 -0.387180
H -3.330788 -5.444234 2.041079

XV^c

E = -2650.02664920
Pd -2.051976 -0.875301 -0.664147
P 2.028667 -0.527163 -0.358354
P -0.682042 0.649101 0.576817
C 1.106472 0.623514 0.538017
C 3.656108 0.229945 -0.810308
H 3.860104 0.859319 0.068682
C 4.865537 -0.692678 -0.978761
H 4.724733 -1.347381 -1.850634
H 4.991569 -1.346040 -0.109660
C 6.134094 0.138850 -1.155385
H 6.322030 0.689304 -0.221067
H 6.995337 -0.525660 -1.302106
C 6.026413 1.131286 -2.304229
H 5.962400 0.579120 -3.254501
H 6.934866 1.744250 -2.362911
C 4.792349 2.011156 -2.161857
H 4.697408 2.684520 -3.023256
H 4.890504 2.649306 -1.270030
C 3.542614 1.154607 -2.024103
H 2.635167 1.767982 -1.963687
H 3.439714 0.537830 -2.928474
C 1.183456 -1.212853 -1.844192
H 0.324520 -1.739164 -1.397603
C 2.033588 -2.246444 -2.587441
H 2.486954 -2.970076 -1.900567
H 2.863049 -1.731934 -3.094993
C 1.190084 -2.974867 -3.626243
H 1.804405 -3.713915 -4.156680
H 0.398772 -3.538693 -3.107673

C 0.556695 -1.998475 -4.605188
H 1.353195 -1.518690 -5.195143
H -0.080062 -2.533339 -5.321408
C -0.243948 -0.928691 -3.878438
H -1.114910 -1.382097 -3.380131
H -0.643076 -0.202721 -4.597637
C 0.590127 -0.204958 -2.827461
H 1.387216 0.357320 -3.326331
H -0.025825 0.517595 -2.284296
C 2.524565 -2.059278 0.581044
H 3.307362 -2.564200 -0.002398
C 3.109300 -1.639425 1.929007
H 3.974427 -0.976855 1.787930
H 2.359169 -1.036782 2.454560
C 3.482702 -2.837482 2.789353
H 3.878716 -2.494331 3.753696
H 4.291491 -3.404422 2.302852
C 2.281749 -3.748805 2.995188
H 2.554403 -4.616145 3.609881
H 1.504779 -3.202282 3.551918
C 1.716055 -4.203583 1.658251
H 0.831647 -4.836969 1.806903
H 2.463471 -4.830610 1.147894
C 1.357530 -3.027152 0.758197
H 0.509549 -2.475521 1.183730
H 1.024005 -3.407352 -0.215591
C -1.266363 0.376577 2.331732
H -0.818717 1.160968 2.958129
C -2.787672 0.493887 2.419159
H -3.224954 -0.288949 1.778688
H -3.138221 1.449515 2.010630
C -3.276625 0.311121 3.850348
H -2.882085 1.127392 4.475109
H -4.370986 0.391728 3.888524
C -2.822784 -1.025398 4.421251
H -3.310093 -1.837544 3.859341
H -3.146165 -1.131891 5.465030

C -1.312950 -1.185223 4.310037
H -0.820306 -0.445827 4.960671
H -1.001895 -2.174690 4.672973
C -0.838941 -0.978171 2.877768
H 0.249811 -1.087378 2.812847
H -1.267641 -1.764733 2.234549
C -1.213194 2.420364 0.296250
H -2.293929 2.317832 0.114411
C -0.603225 2.949684 -0.997908
H 0.490284 2.973058 -0.900219
H -0.832907 2.257626 -1.814320
C -1.125627 4.336496 -1.344961
H -2.199510 4.261937 -1.573714
H -0.636224 4.703882 -2.257329
C -0.918902 5.310479 -0.194888
H -1.315305 6.301948 -0.451536
H 0.160426 5.438751 -0.015038
C -1.572983 4.785387 1.073917
H -1.421025 5.485553 1.906344
H -2.660304 4.716688 0.914496
C -1.033508 3.409523 1.450909
H -1.555518 3.052855 2.346983
H 0.025521 3.503145 1.722592
C -3.298987 0.495961 -1.440038
C -4.449836 0.903373 -0.750501
C -3.031203 1.128316 -2.659888
C -5.264351 1.925947 -1.233492
H -4.722358 0.422455 0.187608
C -3.843105 2.149768 -3.148819
H -2.164395 0.829884 -3.245535
C -4.961127 2.562952 -2.432426
H -6.146131 2.223688 -0.666389
H -3.595951 2.626462 -4.097238
H -5.594863 3.363972 -2.809011
C -2.681935 -3.963945 0.667498
H -1.841890 -4.273011 1.306752
H -3.263788 -3.240475 1.257319

C -3.140777 -2.456025 -1.357992
H -4.166701 -2.472442 -0.978809
H -1.311586 -2.548503 -0.152821
C -2.149635 -3.247700 -0.567773
H -1.542765 -3.923386 -1.189737
H -3.111229 -2.579631 -2.443254
C -3.541571 -5.167673 0.326013
H -3.929298 -5.653042 1.229355
H -4.397733 -4.874880 -0.293680
H -2.968350 -5.916676 -0.235938
C 1.818834 1.621091 1.397155
C 1.783409 1.541357 2.799432
C 2.475402 2.741392 0.858192
C 2.326938 2.531103 3.610433
H 1.307591 0.682499 3.264240
C 3.038591 3.726404 1.660867
H 2.517011 2.857989 -0.220463
C 2.956027 3.634774 3.046082
H 2.261591 2.433908 4.692922
H 3.527930 4.581541 1.197198
H 3.380746 4.412272 3.678017

TS_{XV→XVI}^a

E = -2650.00882673

Pd -1.857259 0.394792 0.757103
P 1.766825 1.011399 -0.414099
P -0.150712 -1.214033 0.447060
C 1.478186 -0.649200 -0.027864
C 3.594425 1.291531 -0.473925
H 3.955669 0.358864 -0.935602
C 4.102237 2.456813 -1.328001
H 3.786624 3.409884 -0.878321
H 3.685559 2.434158 -2.338893
C 5.625367 2.407561 -1.423504
H 5.908635 1.496993 -1.973027
H 5.986658 3.254710 -2.020801
C 6.297169 2.395640 -0.057800

H 6.126567 3.364858 0.435633
H 7.384078 2.292265 -0.169942
C 5.738106 1.289332 0.825678
H 6.181703 1.338237 1.828503
H 6.001941 0.304343 0.411405
C 4.223548 1.397086 0.916706
H 3.808274 0.645868 1.593876
H 3.966493 2.379323 1.339398
C 0.946130 2.166090 0.760654
H -0.117244 1.889152 0.601006
C 1.073251 3.655142 0.449976
H 0.893169 3.870137 -0.609497
H 2.099658 3.987122 0.671910
C 0.082050 4.435086 1.308227
H 0.167287 5.510080 1.103260
H -0.936046 4.140168 1.010997
C 0.273431 4.160237 2.794041
H 1.244945 4.570965 3.110474
H -0.490710 4.689876 3.377800
C 0.244120 2.668764 3.102872
H -0.763633 2.266143 2.919849
H 0.459470 2.493384 4.164841
C 1.236913 1.908823 2.235826
H 2.250126 2.245352 2.484308
H 1.196709 0.836186 2.434975
C 1.186416 1.628482 -2.071288
H 1.602211 2.640871 -2.184729
C 1.750838 0.747007 -3.185159
H 2.848022 0.736166 -3.156556
H 1.444038 -0.287159 -2.997584
C 1.257900 1.177277 -4.560237
H 1.657003 0.499770 -5.326148
H 1.652163 2.178614 -4.793480
C -0.262454 1.213343 -4.613132
H -0.605194 1.533961 -5.605273
H -0.655785 0.197046 -4.458391
C -0.814186 2.133419 -3.535183

H -1.912008 2.143135 -3.557192
H -0.490686 3.165433 -3.743256
C -0.336287 1.727314 -2.147340
H -0.774994 0.760736 -1.866921
H -0.709943 2.445703 -1.407368
C -0.676457 -2.510273 -0.796180
H 0.159184 -3.224296 -0.873072
C -1.935516 -3.269225 -0.376870
H -2.760749 -2.550086 -0.279214
H -1.811774 -3.742155 0.604036
C -2.308185 -4.331564 -1.405648
H -1.515060 -5.095199 -1.440586
H -3.224744 -4.847300 -1.089807
C -2.492071 -3.732717 -2.792113
H -3.358639 -3.055757 -2.771661
H -2.718910 -4.517992 -3.525581
C -1.260076 -2.944042 -3.211620
H -0.407879 -3.631032 -3.336547
H -1.421720 -2.466343 -4.188199
C -0.908841 -1.893998 -2.167838
H -0.027834 -1.323538 -2.473999
H -1.735976 -1.173869 -2.084076
C -0.039488 -2.280054 1.984336
H -1.102622 -2.500496 2.174131
C 0.458488 -1.483540 3.183434
H 1.499154 -1.175212 2.998705
H -0.135444 -0.563572 3.279034
C 0.391813 -2.290310 4.473586
H -0.663003 -2.493845 4.714224
H 0.792696 -1.700110 5.308702
C 1.136665 -3.610442 4.342950
H 1.055715 -4.192643 5.270470
H 2.208749 -3.407397 4.193826
C 0.614088 -4.410988 3.158930
H 1.168029 -5.353588 3.056331
H -0.436214 -4.685245 3.345202
C 0.702198 -3.611170 1.863632

H 0.300914 -4.206687 1.035546
H 1.756391 -3.426902 1.626574
C -3.718308 -0.006260 0.104072
C -3.930906 0.103092 -1.275827
C -4.538372 -0.880370 0.833296
C -4.876543 -0.692467 -1.917279
H -3.331604 0.801913 -1.859212
C -5.484159 -1.669959 0.189924
H -4.418965 -0.955512 1.913147
C -5.653335 -1.589486 -1.190916
H -5.003224 -0.609661 -2.996239
H -6.095492 -2.356619 0.774141
H -6.393366 -2.209705 -1.692637
C -3.413807 1.808791 1.104192
H -2.771640 3.042105 -0.532259
H -2.649724 2.141865 1.841475
H -4.305457 1.564232 1.683957
C -4.058859 4.246142 0.704255
H -3.251324 4.594038 1.366153
H -4.128085 4.990625 -0.102069
C -3.668731 2.901590 0.088740
H -4.463332 2.585737 -0.601437
C -5.367939 4.221169 1.475609
H -5.314789 3.555405 2.345538
H -5.634460 5.219283 1.843421
H -6.192608 3.868395 0.842183
C 2.578401 -1.635797 -0.259405
C 3.543668 -1.890430 0.728481
C 2.691900 -2.369927 -1.449709
C 4.578786 -2.796992 0.532415
H 3.454204 -1.378121 1.683588
C 3.717278 -3.289374 -1.650848
H 1.952905 -2.217488 -2.232627
C 4.673009 -3.500813 -0.664258
H 5.308101 -2.963611 1.323662
H 3.769414 -3.840394 -2.588487
H 5.479449 -4.214490 -0.822062

TS_{XV→XVI}^c

E = -2650.00432176

Pd -1.767509 -0.952232 -0.112008

P 2.029490 -0.696710 -0.299345

P -0.430083 0.869339 0.492756

C 1.347023 0.759010 0.340382

C 3.834952 -0.420788 -0.576382

H 4.188031 -0.201424 0.441963

C 4.602013 -1.645690 -1.075827

H 4.304586 -1.861152 -2.113323

H 4.363407 -2.538750 -0.486419

C 6.104684 -1.387947 -1.017547

H 6.399959 -1.280490 0.037534

H 6.648196 -2.259778 -1.404277

C 6.500478 -0.130496 -1.778674

H 6.321943 -0.290477 -2.853243

H 7.576415 0.056738 -1.668259

C 5.692746 1.075089 -1.318591

H 5.953152 1.960405 -1.912496

H 5.941528 1.317519 -0.274118

C 4.197650 0.802407 -1.423909

H 3.622545 1.677574 -1.112258

H 3.949961 0.612737 -2.474165

C 1.174924 -1.207513 -1.855030

H 0.119381 -1.001751 -1.580039

C 1.253834 -2.674364 -2.280312

H 1.011792 -3.351969 -1.456530

H 2.277671 -2.919667 -2.600548

C 0.281568 -2.926322 -3.429717

H 0.332473 -3.978005 -3.740007

H -0.741242 -2.757559 -3.057249

C 0.542986 -2.006526 -4.613302

H 1.523471 -2.252083 -5.050165

H -0.200153 -2.179927 -5.402345

C 0.539122 -0.546173 -4.185887

H -0.471248 -0.262963 -3.856602

H 0.786630 0.105123 -5.034148

C 1.518091 -0.311639 -3.043654
H 2.530542 -0.558293 -3.396527
H 1.527372 0.740055 -2.738166
C 1.992641 -2.246479 0.736958
H 2.438142 -3.029786 0.105391
C 2.823837 -2.125168 2.011202
H 3.858722 -1.839276 1.783622
H 2.393937 -1.321529 2.624951
C 2.810210 -3.419241 2.815583
H 3.404539 -3.294903 3.729980
H 3.299169 -4.213653 2.231039
C 1.389307 -3.844041 3.153344
H 1.391322 -4.791022 3.708140
H 0.937051 -3.091882 3.817982
C 0.546767 -3.963494 1.892808
H -0.488550 -4.227210 2.143803
H 0.935389 -4.784398 1.270137
C 0.568113 -2.669643 1.088644
H 0.101911 -1.864905 1.672968
H -0.046081 -2.776472 0.182352
C -0.770835 1.382669 2.245821
H -0.319171 2.378637 2.384756
C -2.276207 1.459983 2.503165
H -2.689828 0.450302 2.347936
H -2.780702 2.101795 1.770777
C -2.574583 1.926976 3.922197
H -2.209336 2.958101 4.046608
H -3.659441 1.959388 4.089910
C -1.905577 1.026944 4.952549
H -2.365747 0.027582 4.904399
H -2.085341 1.403042 5.968384
C -0.411774 0.895017 4.686736
H 0.077210 1.868259 4.844427
H 0.044100 0.198104 5.403163
C -0.144681 0.433564 3.260042
H 0.931089 0.338647 3.075575
H -0.587021 -0.565630 3.118174

C -1.184391 2.297182 -0.469037
H -2.239040 1.978743 -0.502232
C -0.686355 2.269012 -1.908421
H 0.388385 2.505596 -1.928947
H -0.787772 1.247060 -2.297441
C -1.443315 3.249011 -2.793239
H -2.486864 2.914848 -2.878590
H -1.025179 3.240271 -3.809249
C -1.414605 4.655350 -2.212628
H -1.990098 5.344512 -2.844894
H -0.378059 5.028867 -2.208004
C -1.953033 4.662113 -0.789050
H -1.931758 5.678089 -0.372300
H -3.009059 4.350041 -0.805573
C -1.168588 3.711537 0.110433
H -1.600631 3.723886 1.117488
H -0.143159 4.083017 0.219722
C -3.454097 -0.506734 -1.126475
C -4.393248 0.310938 -0.471666
C -3.337027 -0.371329 -2.523223
C -5.142109 1.246844 -1.178488
H -4.521908 0.234197 0.605280
C -4.089658 0.564708 -3.221060
H -2.644769 -1.014872 -3.065879
C -4.998302 1.385365 -2.555905
H -5.846933 1.878563 -0.638708
H -3.960562 0.655939 -4.299105
H -5.588039 2.117098 -3.103922
C -4.342050 -2.462689 1.727917
H -4.275598 -3.010041 2.678756
H -3.985988 -1.444632 1.942605
C -3.295561 -2.427468 -0.632280
H -4.260442 -2.491255 -1.137415
H -2.393226 -3.178789 1.194963
C -3.387827 -3.110389 0.731752
H -3.708488 -4.154107 0.564292
H -2.584019 -2.939147 -1.299599

C -5.790507 -2.426212 1.271832
H -6.438961 -1.985203 2.038523
H -5.914692 -1.832702 0.358130
H -6.163904 -3.438229 1.064917
C 2.224415 1.794727 0.942710
C 2.223678 3.108518 0.442578
C 3.096076 1.542798 2.015159
C 3.018030 4.108608 0.986914
H 1.607594 3.325852 -0.424428
C 3.914944 2.532576 2.550172
H 3.131799 0.543410 2.440923
C 3.874834 3.827231 2.047116
H 2.982779 5.111633 0.564262
H 4.578035 2.288663 3.378877
H 4.505543 4.605899 2.471360

XVI

E = -2650.07800350
Pd -1.777927 -0.146953 -1.049645
P 1.857957 -1.040740 0.044168
P -0.254813 1.170023 0.069020
C 1.408410 0.594747 0.382256
C 3.705071 -1.151176 0.010513
H 4.000403 -0.411945 0.770392
C 4.339830 -2.487449 0.405329
H 4.086429 -3.254787 -0.341124
H 3.959996 -2.845667 1.366602
C 5.856142 -2.338741 0.502157
H 6.085126 -1.652235 1.331349
H 6.307266 -3.304183 0.765685
C 6.472686 -1.796105 -0.778729
H 6.358930 -2.543727 -1.578826
H 7.551807 -1.644721 -0.647237
C 5.796238 -0.503579 -1.214040
H 6.207065 -0.158595 -2.171676
H 5.995517 0.291569 -0.479233
C 4.292569 -0.702696 -1.329286

H 3.795891 0.202038 -1.693306
H 4.095986 -1.486658 -2.075149
C 1.121443 -1.717279 -1.499729
H 0.040195 -1.640691 -1.257918
C 1.446651 -3.180157 -1.796386
H 1.340289 -3.812700 -0.907539
H 2.496272 -3.264787 -2.119148
C 0.534477 -3.693085 -2.906940
H 0.768931 -4.741228 -3.134253
H -0.504408 -3.674954 -2.540468
C 0.638336 -2.837458 -4.162220
H 1.648270 -2.947208 -4.587402
H -0.060442 -3.199661 -4.927693
C 0.382873 -1.368771 -3.853835
H -0.656585 -1.236455 -3.517823
H 0.505008 -0.757686 -4.757848
C 1.305670 -0.866770 -2.751989
H 2.341658 -0.919324 -3.106671
H 1.094710 0.176897 -2.511527
C 1.370864 -2.314210 1.313490
H 1.924083 -3.232622 1.067887
C 1.801933 -1.841395 2.701309
H 2.888810 -1.688745 2.739647
H 1.364491 -0.852933 2.878882
C 1.361748 -2.798926 3.800622
H 1.649868 -2.396277 4.780356
H 1.895467 -3.755445 3.687853
C -0.137193 -3.057757 3.744221
H -0.434678 -3.761911 4.531926
H -0.679803 -2.120185 3.941341
C -0.536250 -3.587278 2.375896
H -1.618059 -3.765541 2.324505
H -0.053381 -4.563937 2.214420
C -0.121683 -2.635809 1.261466
H -0.697052 -1.701394 1.324717
H -0.380454 -3.078430 0.292425
C -1.027245 1.766942 1.667746

H -0.353716 2.510261 2.119923
C -2.382436 2.422664 1.392220
H -3.015037 1.691812 0.858005
H -2.275394 3.281979 0.720130
C -3.069725 2.870558 2.677026
H -2.473760 3.669800 3.144657
H -4.048313 3.310850 2.442700
C -3.226266 1.724039 3.664513
H -3.911546 0.974759 3.239589
H -3.687234 2.076039 4.596951
C -1.883875 1.063772 3.943265
H -1.228405 1.776545 4.467879
H -2.009125 0.203114 4.615473
C -1.216691 0.621215 2.648846
H -0.256085 0.138882 2.853185
H -1.842139 -0.139001 2.162450
C -0.154425 2.812924 -0.844061
H -1.215395 3.012000 -1.064209
C 0.539250 2.648723 -2.190042
H 1.573486 2.310444 -2.023380
H 0.030499 1.853380 -2.750952
C 0.543914 3.936735 -3.003152
H -0.490794 4.183611 -3.288558
H 1.096905 3.787480 -3.940511
C 1.127507 5.097708 -2.212455
H 1.105399 6.020520 -2.807391
H 2.186475 4.891204 -1.991643
C 0.374486 5.282089 -0.904132
H 0.797166 6.116197 -0.328287
H -0.669801 5.553431 -1.126157
C 0.398109 4.008494 -0.066115
H -0.179338 4.168565 0.851951
H 1.429249 3.808504 0.247958
C -4.449125 -1.077000 -1.325852
C -5.176466 0.062584 -0.997801
C -3.413852 -0.971371 -2.289896
C -4.900989 1.298616 -1.596133

H -5.986739 -0.016086 -0.273946
C -3.105173 0.286716 -2.858457
H -2.974652 -1.882694 -2.699548
C -3.868637 1.417933 -2.508491
H -5.498739 2.169285 -1.332970
H -2.399985 0.353482 -3.685003
H -3.649296 2.376446 -2.974994
C -4.003836 -1.739358 1.691856
H -3.217082 -1.942737 2.432143
H -3.818469 -0.714954 1.336696
C -4.730668 -2.404964 -0.683011
H -5.783645 -2.449906 -0.376713
H -2.782000 -2.638648 0.175836
C -3.825392 -2.694461 0.520093
H -3.997008 -3.728630 0.855750
H -4.588946 -3.201145 -1.425956
C -5.358043 -1.815734 2.376286
H -5.407233 -1.132598 3.232901
H -6.178707 -1.544865 1.700256
H -5.562395 -2.828874 2.747805
C 2.386098 1.498653 1.058229
C 3.418142 2.134076 0.346462
C 2.285537 1.810941 2.423098
C 4.303176 3.014034 0.958056
H 3.501537 1.953618 -0.721883
C 3.155301 2.704783 3.039575
H 1.499895 1.342223 3.010245
C 4.174274 3.308381 2.311819
H 5.087123 3.486599 0.368062
H 3.037874 2.924575 4.099584
H 4.858650 4.004459 2.793114

5.2.8 JoYPhos-medierte *tert*-Butyl–Phenyl-Kopplung

5.2.8.1 Energien der Strukturen

Tabelle 5.11. Energien der Strukturen der joYPhos medierten *tert*-Butyl–Phenyl-Kopplung.

	E(SCF)	Corr(H)	Corr(G)	E(PCM)	$\Delta G(\text{PCM})$ [hartree]	$\Delta G(\text{PCM})$ [kJ/mol]
X^a	-2650.02224086	1.179639	1.044665	-2650.02591391	–	–
X^c	-2650.02224135	1.179639	1.044690	-2650.02591418	0.000025	0.064929
TS_{X→XI}^a	-2650.00132642	1.178146	1.042426	-2650.00409657	0.019578	51.402932
TS_{X→XI}^c	-2650.00546241	1.177038	1.040153	-2650.00849108	0.012911	0.012911
XI	-2650.08035998	1.180461	1.044054	-2650.08293809	-0.057635	-151.321165
XII	-2650.02894700	1.178555	1.041588	-2650.03262723	-0.009790	-25.704485
TS_{XII→XIII}	-2650.01399839	1.175276	1.039645	-2650.01759600	0.003298	8.658663
XIII	-2650.02047999	1.176866	1.042019	-2650.02415095	-0.000883	-2.318422
TS_{XIII→XIV} (CW)	-2650.01461697	1.175180	1.039358	-2650.01800680	0.002600	6.826589
XIII→XIV (CW)	-2650.01743310	1.176745	1.041295	-2650.02095510	0.001589	4.171421
TS_{XIII→XIV} (CW)	-2650.01628677	1.175297	1.040789	-2650.01988348	0.002154	5.656456
TS_{XIII→XIV} (CCW)	-2650.01141838	1.175821	1.041822	-2650.01487827	0.008193	21.509776
XIII→XIV (CCW)	-2650.01564460	1.176424	1.039811	-2650.01912114	0.001939	5.090241
TS_{XIII→XIV} (CCW)	-2650.01205116	1.175517	1.041203	-2650.01563042	0.006821	17.909822
XIV	-2650.02047999	1.176866	1.042019	-2650.02415095	-0.000883	-2.318422
TS_{XIV→XV}	-2650.01563923	1.175540	1.042111	-2650.01967290	0.003687	9.680245
XV	-2650.02909733	1.179242	1.044897	-2650.03318781	-0.007042	-18.488508
TS_{XV→XVI}	-2650.01319127	1.178455	1.043555	-2650.01612158	0.008682	22.795457
XVI	-2650.07801585	1.181079	1.044881	-2650.08075389	-0.054624	-143.415259

5.2.8.2 Koordinaten der Strukturen

X^a

E = -2650.02224086

Pd -1.801257 -1.049683 0.501887

P 1.890986 -0.734544 -0.144125

P -0.512172 1.033556 0.208202

C 1.259241 0.864674 0.010535

C 3.680078 -0.657633 -0.580416
H 4.102930 -0.157258 0.303577
C 4.349055 -2.028231 -0.701269
H 3.982817 -2.531230 -1.608578
H 4.090464 -2.679387 0.142399
C 5.863998 -1.869219 -0.781690
H 6.224731 -1.462292 0.175612
H 6.337681 -2.852403 -0.899028
C 6.279555 -0.937067 -1.911706
H 6.030609 -1.408651 -2.874882
H 7.368382 -0.798630 -1.907574
C 5.565559 0.404511 -1.820286
H 5.839852 1.043185 -2.669405
H 5.885777 0.939355 -0.912969
C 4.053932 0.219133 -1.778816
H 3.548684 1.186610 -1.726471
H 3.732800 -0.262017 -2.709146
C 0.928206 -1.697994 -1.394443
H -0.094554 -1.311147 -1.221916
C 0.858041 -3.215637 -1.233207
H 0.562106 -3.498589 -0.218462
H 1.848063 -3.662343 -1.413218
C -0.158715 -3.785316 -2.217074
H -0.224594 -4.874560 -2.099703
H -1.149828 -3.381758 -1.954155
C 0.174074 -3.418232 -3.655284
H 1.121815 -3.900188 -3.941633
H -0.591713 -3.810297 -4.336609
C 0.310866 -1.911509 -3.818903
H -0.666756 -1.435108 -3.656467
H 0.611624 -1.659206 -4.843928
C 1.315642 -1.338339 -2.828649
H 2.305241 -1.763479 -3.050732
H 1.397976 -0.250959 -2.937356
C 1.872069 -1.810315 1.383867
H 2.149321 -2.825210 1.063924
C 2.865962 -1.343996 2.445539

H 3.891336 -1.349628 2.056534
H 2.624213 -0.305296 2.708167
C 2.788589 -2.186451 3.711655
H 3.517636 -1.818369 4.444833
H 3.074477 -3.223696 3.479504
C 1.384282 -2.165875 4.291504
H 1.328214 -2.779934 5.199007
H 1.131996 -1.136886 4.590878
C 0.376913 -2.650779 3.261625
H -0.644150 -2.593108 3.657991
H 0.565681 -3.711897 3.039959
C 0.465482 -1.841264 1.974774
H 0.164652 -0.807204 2.177038
H -0.232587 -2.274348 1.229637
C -0.744240 2.131689 1.691634
H -0.287037 3.097832 1.421916
C -2.225954 2.338002 2.002353
H -2.641265 1.363664 2.305219
H -2.790539 2.639604 1.112445
C -2.412711 3.350294 3.125638
H -2.045720 4.331431 2.786743
H -3.480381 3.477776 3.348103
C -1.656797 2.933238 4.380302
H -2.120757 2.021720 4.788159
H -1.747928 3.702141 5.158726
C -0.190545 2.646116 4.081209
H 0.317402 3.577276 3.788334
H 0.319037 2.283702 4.984267
C -0.050594 1.631410 2.953351
H 1.003586 1.408497 2.751667
H -0.529073 0.691124 3.269388
C -1.274467 2.078815 -1.150706
H -2.335461 1.798059 -1.082722
C -0.781986 1.575954 -2.503450
H 0.299438 1.751879 -2.593076
H -0.913357 0.487355 -2.546849
C -1.508580 2.243914 -3.661266

H -2.564054 1.937091 -3.641938
H -1.094570 1.895606 -4.617399
C -1.427327 3.759850 -3.559424
H -1.972951 4.231172 -4.387512
H -0.376855 4.077980 -3.657495
C -1.972539 4.238152 -2.221634
H -1.918529 5.332760 -2.150741
H -3.038611 3.970643 -2.155564
C -1.229026 3.604305 -1.049690
H -1.685207 3.940854 -0.112246
H -0.197883 3.974441 -1.030987
C -3.300591 -0.404365 -0.609908
C -4.321183 0.391130 -0.081405
C -3.315314 -0.668138 -1.982748
C -5.301508 0.939522 -0.906707
H -4.360517 0.592684 0.986940
C -4.296717 -0.124426 -2.807712
H -2.554883 -1.314815 -2.419207
C -5.290375 0.692009 -2.275649
H -6.082651 1.562321 -0.471812
H -4.283317 -0.342439 -3.875250
H -6.055698 1.120383 -2.920074
C -3.666733 -2.315627 2.287310
H -2.905932 -2.044769 3.034297
H -4.343481 -1.458942 2.175961
H -4.258390 -3.146156 2.717114
C -4.152437 -3.094670 -0.025127
H -4.910904 -2.313755 -0.137325
H -3.753665 -3.309863 -1.025612
C -3.052978 -2.714103 0.953317
H -4.664108 -4.007604 0.328958
C -2.171189 -3.946904 1.132176
H -1.657003 -4.227596 0.204393
H -1.422829 -3.837470 1.922441
H -2.796061 -4.811994 1.420864
C 2.174671 2.025401 0.172626
C 2.156887 3.089762 -0.746325

C 3.113834 2.129877 1.212137
C 2.994372 4.190521 -0.623949
H 1.491489 3.023112 -1.600250
C 3.975671 3.216207 1.328133
H 3.171318 1.338301 1.953380
C 3.915394 4.262673 0.416583
H 2.940643 4.988821 -1.362649
H 4.688841 3.247472 2.150441
H 4.579420 5.119470 0.511200

X^c

E = -2650.02224135
Pd -1.801330 -1.049371 0.502118
P 1.890786 -0.734797 -0.144377
P -0.512102 1.033637 0.208096
C 1.259279 0.864479 0.010374
C 3.679879 -0.657906 -0.580580
H 4.102617 -0.157391 0.303391
C 4.348997 -2.028449 -0.701163
H 3.982945 -2.531648 -1.608432
H 4.090384 -2.679503 0.142581
C 5.863936 -1.869238 -0.781414
H 6.224488 -1.462166 0.175894
H 6.337776 -2.852371 -0.898581
C 6.279542 -0.937148 -1.911468
H 6.030803 -1.408855 -2.874637
H 7.368351 -0.798592 -1.907173
C 5.565382 0.404365 -1.820298
H 5.839730 1.042971 -2.669451
H 5.885404 0.939357 -0.912998
C 4.053766 0.218804 -1.779014
H 3.548365 1.186221 -1.726826
H 3.732825 -0.262474 -2.709338
C 0.927876 -1.698075 -1.394724
H -0.094848 -1.311171 -1.222137
C 0.857593 -3.215713 -1.233519
H 0.561576 -3.498633 -0.218787

H 1.847581 -3.662522 -1.413499
C -0.159206 -3.785301 -2.217377
H -0.225071 -4.874552 -2.100039
H -1.150307 -3.381752 -1.954401
C 0.173527 -3.418168 -3.655589
H 1.121213 -3.900175 -3.942034
H -0.592336 -3.810170 -4.336869
C 0.310441 -1.911444 -3.819174
H -0.667130 -1.434944 -3.656716
H 0.611210 -1.659129 -4.844190
C 1.315303 -1.338416 -2.828931
H 2.304839 -1.763686 -3.051058
H 1.397784 -0.251041 -2.937598
C 1.871819 -1.810683 1.383537
H 2.148971 -2.825588 1.063547
C 2.865775 -1.344500 2.445228
H 3.891141 -1.350170 2.056211
H 2.624078 -0.305805 2.707897
C 2.788330 -2.186929 3.711375
H 3.517415 -1.818906 4.444544
H 3.074093 -3.224222 3.479280
C 1.384006 -2.166158 4.291186
H 1.327809 -2.780152 5.198723
H 1.131802 -1.137114 4.590463
C 0.376639 -2.651033 3.261306
H -0.644419 -2.593396 3.657689
H 0.565427 -3.712132 3.039573
C 0.465251 -1.841482 1.974477
H 0.164536 -0.807394 2.176740
H -0.232888 -2.274511 1.229389
C -0.743817 2.131809 1.691564
H -0.286286 3.097812 1.421920
C -2.225453 2.338645 2.002310
H -2.641086 1.364443 2.305148
H -2.789962 2.640493 1.112437
C -2.411820 3.350950 3.125651
H -2.044489 4.331975 2.786800

H -3.479440 3.478802 3.348143
C -1.656045 2.933551 4.380285
H -2.120336 2.022181 4.788099
H -1.746899 3.702449 5.158745
C -0.189896 2.645908 4.081177
H 0.318403 3.576897 3.788370
H 0.319545 2.283248 4.984217
C -0.050334 1.631220 2.953261
H 1.003763 1.407911 2.751554
H -0.529189 0.691108 3.269253
C -1.274238 2.078960 -1.150810
H -2.335310 1.798481 -1.082701
C -0.782008 1.575897 -2.503572
H 0.299448 1.751655 -2.593362
H -0.913507 0.487310 -2.546851
C -1.508646 2.243846 -3.661362
H -2.564173 1.937235 -3.641812
H -1.094871 1.895337 -4.617523
C -1.427081 3.759778 -3.559718
H -1.972779 4.231110 -4.387752
H -0.376569 4.077689 -3.658031
C -1.971945 4.238356 -2.221893
H -1.917646 5.332960 -2.151147
H -3.038072 3.971128 -2.155605
C -1.228387 3.604470 -1.049996
H -1.684292 3.941276 -0.112514
H -0.197135 3.974327 -1.031562
C -3.300637 -0.403949 -0.609649
C -4.321186 0.391583 -0.081115
C -3.315579 -0.667968 -1.982433
C -5.301646 0.939821 -0.906351
H -4.360450 0.593203 0.987221
C -4.297148 -0.124433 -2.807332
H -2.555193 -1.314681 -2.418913
C -5.290731 0.692074 -2.275256
H -6.082758 1.562636 -0.471423
H -4.283904 -0.342638 -3.874832

H -6.056189 1.120294 -2.919622
 C -2.171623 -3.946895 1.131594
 H -1.658152 -4.227527 0.203402
 H -1.422704 -3.837939 1.921387
 C -3.665837 -2.315330 2.288098
 H -2.904498 -2.044682 3.034620
 H -4.342468 -1.458476 2.177248
 H -4.257393 -3.145756 2.718244
 C -3.053086 -2.713769 0.953648
 H -2.796628 -4.811808 1.420451
 C -4.153314 -3.093778 -0.024146
 H -4.911641 -2.312627 -0.135632
 H -3.755273 -3.308805 -1.024950
 H -4.664999 -4.006669 0.330019
 C 2.174893 2.025031 0.172606
 C 2.157515 3.089327 -0.746413
 C 3.113795 2.129437 1.212360
 C 2.995144 4.189958 -0.623896
 H 1.492343 3.022721 -1.600524
 C 3.975771 3.215643 1.328514
 H 3.170931 1.337941 1.953723
 C 3.915901 4.262055 0.416876
 H 2.941720 4.988209 -1.362678
 H 4.688707 3.246863 2.151032
 H 4.580016 5.118774 0.511618

$TS_{X \rightarrow X'}^a$

E = -2650.00132642
 Pd -1.922040 -0.494644 -0.945519
 P 1.806069 -0.907242 0.381266
 P -0.346539 1.146298 -0.398478
 C 1.314687 0.729804 0.116673
 C 3.656493 -0.935531 0.506523
 H 3.859244 0.002081 1.046785
 C 4.303055 -2.065159 1.314445
 H 4.157643 -3.025772 0.800435
 H 3.847965 -2.167161 2.303712

C 5.795664 -1.794140 1.486642
H 5.916577 -0.887340 2.098625
H 6.257829 -2.613753 2.051996
C 6.508408 -1.597000 0.156672
H 6.497384 -2.545465 -0.402261
H 7.564253 -1.348090 0.323817
C 5.827866 -0.523265 -0.680007
H 6.313136 -0.434752 -1.660634
H 5.928176 0.456322 -0.188111
C 4.349333 -0.836683 -0.854120
H 3.859146 -0.091574 -1.486524
H 4.251040 -1.801981 -1.371797
C 1.214266 -2.084553 -0.909383
H 0.122008 -2.068411 -0.744043
C 1.715376 -3.517062 -0.724168
H 1.528591 -3.875930 0.295355
H 2.804920 -3.542188 -0.873957
C 1.057899 -4.458022 -1.728480
H 1.464482 -5.470577 -1.608463
H -0.015640 -4.527094 -1.501673
C 1.240036 -3.975559 -3.160867
H 2.308422 -4.021697 -3.423814
H 0.720108 -4.646602 -3.856702
C 0.748885 -2.544362 -3.326443
H -0.337179 -2.506986 -3.160064
H 0.917376 -2.194709 -4.353365
C 1.431574 -1.607523 -2.341152
H 2.501617 -1.565913 -2.574621
H 1.046110 -0.591367 -2.438638
C 1.273037 -1.727488 1.964016
H 1.842551 -2.666573 2.029216
C 1.651828 -0.847458 3.154681
H 2.730009 -0.640837 3.163103
H 1.168365 0.126413 3.028067
C 1.211043 -1.455270 4.478567
H 1.475196 -0.780910 5.303494
H 1.760832 -2.393259 4.653401

C -0.283122 -1.741716 4.473815
H -0.592495 -2.190892 5.426346
H -0.835633 -0.794451 4.379660
C -0.651945 -2.651708 3.312651
H -1.733885 -2.834039 3.298753
H -0.170351 -3.631682 3.457493
C -0.214828 -2.071340 1.973026
H -0.801624 -1.172135 1.741475
H -0.445467 -2.788062 1.173237
C -1.057200 2.266091 0.923230
H -0.270834 2.999183 1.161695
C -2.305004 3.027680 0.479393
H -3.068847 2.296213 0.183292
H -2.102577 3.649674 -0.399199
C -2.841615 3.913388 1.600265
H -2.105393 4.704981 1.811574
H -3.755185 4.423111 1.265322
C -3.110559 3.128112 2.875744
H -3.922805 2.410307 2.692968
H -3.452458 3.799598 3.674740
C -1.872881 2.358291 3.310087
H -1.079062 3.067105 3.596278
H -2.089803 1.752579 4.200695
C -1.373448 1.468129 2.182317
H -0.485220 0.911655 2.496541
H -2.142675 0.718153 1.940234
C -0.284721 2.355887 -1.831389
H -1.359094 2.524340 -2.010700
C 0.266702 1.724732 -3.103288
H 1.329544 1.479899 -2.951417
H -0.254523 0.776183 -3.296152
C 0.119433 2.650860 -4.304173
H -0.951957 2.783614 -4.519957
H 0.560493 2.186016 -5.196316
C 0.746478 4.013144 -4.045267
H 0.594369 4.676318 -4.907175
H 1.835285 3.893632 -3.931822

C 0.184013 4.639747 -2.777213
H 0.662309 5.608865 -2.582536
H -0.889173 4.843774 -2.918324
C 0.369209 3.714353 -1.580136
H -0.031975 4.184203 -0.674527
H 1.440802 3.577448 -1.401190
C -3.628631 -0.804721 0.093030
C -3.571520 -1.624407 1.228191
C -4.576412 0.230726 0.082290
C -4.374649 -1.372050 2.337387
H -2.874380 -2.458240 1.258088
C -5.381325 0.476776 1.187666
H -4.676277 0.859076 -0.802327
C -5.280248 -0.315962 2.329332
H -4.289239 -2.010897 3.216415
H -6.092872 1.301371 1.158677
H -5.909016 -0.119657 3.195352
C -2.804796 -3.207060 -1.490621
H -1.715815 -3.102042 -1.538620
H -3.062248 -3.637763 -0.516452
H -3.102831 -3.940413 -2.259330
C -5.028909 -2.137749 -1.652364
H -5.337314 -2.567042 -0.693209
H -5.604572 -1.220358 -1.811930
C -3.529277 -1.893991 -1.720461
H -5.299183 -2.847266 -2.452096
C -3.223939 -1.293470 -3.092559
H -3.751229 -0.343553 -3.240021
H -2.153954 -1.119150 -3.283689
H -3.573715 -1.990962 -3.874987
C 2.264167 1.816590 0.515397
C 3.250175 2.280080 -0.370978
C 2.216406 2.433746 1.774707
C 4.157430 3.270672 -0.014707
H 3.278853 1.863270 -1.375110
C 3.111450 3.436516 2.136675
H 1.453393 2.120543 2.483338

C 4.095074 3.852827 1.247682
H 4.908718 3.598416 -0.731601
H 3.039849 3.890530 3.123714
H 4.801076 4.631012 1.531553

TS_{X→Xl^c}

E = -2650.00546241
Pd 1.784725 -0.971591 0.070629
P -2.057017 -0.468116 -0.427091
P 0.463728 0.852135 0.681108
C -1.299413 0.891394 0.328213
C -3.892890 -0.285288 -0.298594
H -4.084486 0.569920 -0.961031
C -4.693883 -1.465151 -0.852137
H -4.581800 -2.330735 -0.182855
H -4.322847 -1.777703 -1.835957
C -6.170209 -1.094578 -0.954583
H -6.280993 -0.296088 -1.704273
H -6.746029 -1.951872 -1.326749
C -6.728206 -0.613273 0.377712
H -6.729298 -1.452864 1.090041
H -7.775318 -0.305335 0.261255
C -5.893991 0.522791 0.953776
H -6.282230 0.824038 1.934975
H -5.969827 1.408492 0.304504
C -4.428912 0.123548 1.076240
H -3.839149 0.944437 1.493299
H -4.348576 -0.716367 1.775774
C -1.501738 -2.031164 0.395704
H -0.424820 -1.821017 0.561319
C -1.605674 -3.339043 -0.390570
H -1.107143 -3.263553 -1.362517
H -2.662239 -3.565606 -0.596317
C -0.978777 -4.488114 0.396885
H -1.094198 -5.424578 -0.163900
H 0.102607 -4.306632 0.476375
C -1.554200 -4.626606 1.797956

H -2.610824 -4.928887 1.732752
H -1.035352 -5.425717 2.342638
C -1.462182 -3.309463 2.553248
H -0.404423 -3.042860 2.706444
H -1.910816 -3.400449 3.550740
C -2.147780 -2.200950 1.769586
H -3.204015 -2.474721 1.633695
H -2.130349 -1.253038 2.314836
C -1.790272 -0.823710 -2.238716
H -2.278086 -1.796748 -2.403456
C -2.421047 0.178856 -3.202354
H -3.491961 0.313021 -3.001539
H -1.939256 1.156324 -3.061833
C -2.216014 -0.257498 -4.649159
H -2.675427 0.473750 -5.326706
H -2.740982 -1.210695 -4.816079
C -0.738756 -0.430247 -4.971438
H -0.608543 -0.770591 -6.006771
H -0.239275 0.547784 -4.897719
C -0.078971 -1.397577 -4.000016
H 0.998295 -1.469812 -4.200332
H -0.492275 -2.407288 -4.151542
C -0.304879 -0.971893 -2.556519
H 0.191712 -0.013414 -2.367341
H 0.174530 -1.677239 -1.870616
C 1.028885 2.468081 -0.068454
H 0.338807 3.229383 0.327364
C 2.450952 2.883180 0.294169
H 3.149493 2.090261 -0.007317
H 2.547616 3.004580 1.379467
C 2.841112 4.192347 -0.384604
H 2.218190 5.007093 0.016796
H 3.881143 4.439855 -0.133660
C 2.660627 4.126048 -1.893177
H 3.355408 3.377578 -2.302327
H 2.921832 5.087655 -2.354956
C 1.235702 3.728088 -2.247423

H 0.539148 4.512503 -1.913499
H 1.116036 3.646829 -3.336624
C 0.859771 2.412019 -1.582996
H -0.175779 2.141915 -1.826755
H 1.509201 1.611242 -1.969917
C 0.757367 1.136456 2.513273
H 0.656036 2.218035 2.702214
C 2.170189 0.701626 2.912222
H 2.261366 -0.376938 2.701764
H 2.927020 1.182347 2.285624
C 2.438122 0.962161 4.388897
H 2.394095 2.045353 4.581828
H 3.456119 0.642477 4.648911
C 1.417757 0.250310 5.265744
H 1.588078 0.478856 6.326154
H 1.551032 -0.837220 5.155720
C -0.003671 0.616364 4.861604
H -0.730776 0.048374 5.457630
H -0.182965 1.679643 5.084730
C -0.242292 0.377090 3.376349
H -1.272195 0.634575 3.099980
H -0.124574 -0.696594 3.157708
C 3.654022 -0.589868 -0.562794
C 3.756723 -0.155109 -1.892040
C 4.615217 -0.146094 0.357087
C 4.749842 0.744381 -2.270125
H 3.035301 -0.503887 -2.632340
C 5.609875 0.745338 -0.027510
H 4.572012 -0.491752 1.389944
C 5.679115 1.205240 -1.341227
H 4.794232 1.091157 -3.302181
H 6.334807 1.090653 0.708873
H 6.454507 1.907755 -1.639541
C 3.000172 -3.191098 1.079577
H 3.640456 -2.674951 1.806100
H 1.958680 -3.082126 1.416897
C 2.327269 -3.303740 -1.366427

H 1.267648 -3.265827 -1.086481
H 2.441049 -2.819620 -2.344803
H 2.588401 -4.369093 -1.495727
C 3.239605 -2.667550 -0.330195
H 3.247895 -4.266639 1.128599
C 4.677642 -2.972407 -0.720615
H 4.925425 -2.589964 -1.716648
H 5.399574 -2.553706 -0.012686
H 4.806740 -4.067667 -0.731701
C -2.010091 2.185589 0.406692
C -1.964877 2.965693 1.580121
C -2.740334 2.733932 -0.662675
C -2.612129 4.189469 1.678860
H -1.419069 2.592472 2.440574
C -3.413643 3.946553 -0.559755
H -2.765172 2.202878 -1.609352
C -3.354511 4.689216 0.612808
H -2.545949 4.753138 2.608306
H -3.969970 4.321877 -1.417545
H -3.869231 5.644357 0.692895

XI

E = -2650.08035998
Pd 1.854833 -0.569831 0.403156
P -1.931393 -0.918525 -0.026592
P 0.359225 1.124266 -0.037695
C -1.376982 0.714079 -0.171531
C -3.736552 -0.893895 0.381770
H -4.093902 -0.011998 -0.170399
C -4.586347 -2.083397 -0.071542
H -4.273524 -2.992176 0.463699
H -4.456217 -2.285336 -1.139111
C -6.063037 -1.803896 0.198196
H -6.378869 -0.964128 -0.439256
H -6.666134 -2.668695 -0.107461
C -6.335901 -1.453627 1.653950
H -6.142752 -2.338140 2.280345

H -7.395191 -1.201499 1.792014
C -5.444551 -0.313199 2.125390
H -5.608508 -0.112831 3.192079
H -5.701848 0.611471 1.586080
C -3.981927 -0.644235 1.871206
H -3.318627 0.140038 2.251723
H -3.727204 -1.560408 2.423506
C -0.994135 -1.923527 1.193026
H 0.019326 -1.896052 0.737711
C -1.418949 -3.386700 1.304018
H -1.575737 -3.845073 0.320811
H -2.379660 -3.451192 1.838710
C -0.356484 -4.165734 2.074056
H -0.654108 -5.218012 2.170665
H 0.574987 -4.154688 1.486082
C -0.089960 -3.557652 3.444675
H -0.989281 -3.677243 4.069009
H 0.713732 -4.106627 3.952910
C 0.251954 -2.077524 3.342385
H 1.206003 -1.947424 2.807976
H 0.389235 -1.643991 4.341626
C -0.824327 -1.315813 2.581641
H -1.763474 -1.370831 3.144482
H -0.561978 -0.260620 2.486443
C -1.852095 -1.963913 -1.564872
H -2.457791 -2.860960 -1.368241
C -2.481187 -1.195908 -2.726516
H -3.518677 -0.918529 -2.494759
H -1.943514 -0.247853 -2.841813
C -2.412724 -1.976443 -4.031317
H -2.849234 -1.382221 -4.844584
H -3.025032 -2.887793 -3.946925
C -0.978137 -2.364215 -4.358402
H -0.937683 -2.937642 -5.293581
H -0.385245 -1.452056 -4.525091
C -0.363031 -3.162003 -3.218820
H 0.680929 -3.414665 -3.444345

H -0.900894 -4.118445 -3.122456
C -0.429788 -2.415263 -1.892587
H 0.236971 -1.543511 -1.911803
H -0.040081 -3.059512 -1.095728
C 0.933135 1.914964 -1.637601
H 0.230442 2.721039 -1.896136
C 2.334473 2.510031 -1.491308
H 3.006522 1.706833 -1.150859
H 2.356970 3.287998 -0.719118
C 2.847353 3.087341 -2.805789
H 2.218854 3.943872 -3.095460
H 3.863356 3.481932 -2.668704
C 2.824954 2.052377 -3.920692
H 3.527849 1.242462 -3.670822
H 3.172194 2.491835 -4.865212
C 1.432142 1.460916 -4.077734
H 0.738507 2.246332 -4.417055
H 1.427468 0.683726 -4.854666
C 0.941579 0.883936 -2.758486
H -0.058218 0.450685 -2.871991
H 1.604813 0.057668 -2.450984
C 0.523867 2.591207 1.121181
H 1.616546 2.714984 1.187215
C 0.043310 2.233741 2.522226
H -1.024881 1.969286 2.477044
H 0.577897 1.336299 2.861212
C 0.255371 3.367586 3.517135
H 1.336451 3.515946 3.664980
H -0.155857 3.089253 4.496928
C -0.358018 4.669760 3.026113
H -0.174687 5.478175 3.746410
H -1.450856 4.553464 2.955835
C 0.190626 5.035209 1.654946
H -0.255264 5.972864 1.297320
H 1.274186 5.215756 1.737385
C -0.063034 3.921117 0.645552
H 0.360159 4.200592 -0.326702

H -1.143557 3.821508 0.493962
C 4.139014 -0.996679 0.442461
C 3.356699 -2.167442 0.629015
C 4.536511 -0.693302 -0.882407
C 2.959633 -2.942610 -0.485107
H 3.170964 -2.558019 1.627083
C 4.180759 -1.489365 -1.957275
H 5.167378 0.176364 -1.056639
C 3.373875 -2.615934 -1.765556
H 2.362935 -3.837672 -0.316477
H 4.524648 -1.228828 -2.956516
H 3.084285 -3.236840 -2.610615
C 6.252907 -0.596526 1.684817
H 6.386536 -1.675921 1.828309
H 6.773853 -0.313735 0.762041
H 6.737745 -0.077263 2.521677
C 4.611686 1.276763 1.409888
H 5.081186 1.621845 0.481669
H 3.548002 1.541947 1.365956
C 4.764548 -0.232616 1.614456
H 5.080318 1.819499 2.240536
C 4.095261 -0.589638 2.940082
H 3.014751 -0.392908 2.885200
H 4.242212 -1.642191 3.210334
H 4.518635 0.019018 3.748098
C -2.355719 1.777353 -0.549648
C -3.228264 2.347400 0.393636
C -2.409173 2.307546 -1.848387
C -4.105909 3.372719 0.062376
H -3.187194 1.994033 1.420530
C -3.270401 3.347225 -2.184237
H -1.752938 1.893036 -2.609685
C -4.128793 3.883756 -1.231650
H -4.762621 3.787481 0.825707
H -3.274134 3.734578 -3.201913
H -4.806652 4.693985 -1.493471

XII

E = -2650.02894700
Pd -2.035459 -1.123301 0.130265
P 2.084270 -0.654572 -0.166953
P -0.595793 0.792673 0.371238
C 1.184366 0.774973 0.182278
C 3.657851 -0.184436 -1.022409
H 3.899369 0.771708 -0.534312
C 4.877601 -1.091524 -0.840878
H 4.700162 -2.064618 -1.321092
H 5.071997 -1.292312 0.217132
C 6.113019 -0.431932 -1.449099
H 6.341793 0.476699 -0.871753
H 6.979967 -1.095980 -1.338169
C 5.914464 -0.056191 -2.910516
H 5.810290 -0.974415 -3.508857
H 6.801985 0.463786 -3.293120
C 4.668214 0.797480 -3.097564
H 4.505501 1.014019 -4.161106
H 4.800867 1.767271 -2.593411
C 3.451171 0.096962 -2.512326
H 2.534643 0.675209 -2.678508
H 3.312577 -0.860634 -3.034885
C 1.151674 -1.918683 -1.126983
H 0.328604 -2.170610 -0.437643
C 1.959400 -3.191834 -1.389057
H 2.455394 -3.551684 -0.480280
H 2.755417 -2.970251 -2.115719
C 1.059702 -4.282919 -1.956301
H 1.644806 -5.192814 -2.142394
H 0.301605 -4.546039 -1.201700
C 0.364060 -3.818817 -3.226459
H 1.120289 -3.657135 -4.010381
H -0.309363 -4.600278 -3.601420
C -0.402000 -2.526482 -2.989476
H -1.228100 -2.707556 -2.286727
H -0.859857 -2.177847 -3.923689

C 0.483388 -1.431482 -2.410694
H 1.237888 -1.150041 -3.152947
H -0.108923 -0.538052 -2.195743
C 2.682935 -1.614367 1.314324
H 3.431821 -2.335733 0.957492
C 3.351787 -0.650947 2.294180
H 4.194882 -0.133136 1.816537
H 2.630354 0.134689 2.548287
C 3.802345 -1.350564 3.568509
H 4.257437 -0.622045 4.251705
H 4.585866 -2.085921 3.328526
C 2.635051 -2.059692 4.239162
H 2.966249 -2.571188 5.151963
H 1.889743 -1.312697 4.552765
C 1.986209 -3.048926 3.283405
H 1.123559 -3.536307 3.756355
H 2.706790 -3.849087 3.053603
C 1.549141 -2.387223 1.982097
H 0.722196 -1.691677 2.173896
H 1.157672 -3.154700 1.303207
C -1.015745 1.370994 2.100404
H -0.535315 2.348731 2.246697
C -2.524332 1.541695 2.275311
H -2.999210 0.561319 2.108263
H -2.939884 2.213920 1.515471
C -2.867720 2.043238 3.672528
H -2.443630 3.050057 3.809541
H -3.955631 2.147620 3.778347
C -2.316994 1.114721 4.745901
H -2.826531 0.141264 4.671945
H -2.537141 1.506166 5.747733
C -0.819889 0.902455 4.570391
H -0.293898 1.852874 4.751508
H -0.440246 0.189871 5.315828
C -0.495141 0.416611 3.164756
H 0.584471 0.272384 3.045871
H -0.960456 -0.570550 3.004204

C -1.248436 2.229658 -0.633841
H -2.334988 2.056812 -0.607098
C -0.826612 2.092340 -2.092926
H 0.268901 2.149810 -2.162579
H -1.118364 1.102667 -2.458585
C -1.466820 3.159187 -2.970083
H -2.553398 2.985280 -2.996549
H -1.109427 3.058433 -4.004005
C -1.190356 4.557612 -2.439482
H -1.674737 5.313781 -3.071644
H -0.107745 4.756812 -2.482791
C -1.659833 4.684637 -0.998229
H -1.456091 5.692286 -0.611748
H -2.752038 4.548855 -0.964049
C -0.996266 3.643314 -0.103070
H -1.385994 3.746709 0.916629
H 0.079070 3.853007 -0.048730
C -3.405803 -0.262094 -1.072444
C -4.473594 0.475966 -0.543774
C -3.316110 -0.337071 -2.467851
C -5.383813 1.137689 -1.365735
H -4.606852 0.543143 0.535509
C -4.225253 0.318907 -3.296297
H -2.516036 -0.912245 -2.929368
C -5.261355 1.068717 -2.749688
H -6.196719 1.709255 -0.918120
H -4.118673 0.243416 -4.378342
H -5.969923 1.585818 -3.394355
C -2.037482 -3.226486 1.238467
H -1.225494 -2.410944 1.329106
H -2.244510 -3.442789 2.295207
H -1.505442 -4.071573 0.785477
C -4.440252 -2.418343 1.294480
H -4.180386 -1.742438 2.120795
H -5.204827 -1.920491 0.687593
C -3.234985 -2.770125 0.452073
H -4.898752 -3.321786 1.733499

C -3.593968 -3.620427 -0.742809
H -2.709472 -3.910034 -1.322726
H -4.104118 -4.549685 -0.433187
H -4.269772 -3.079143 -1.415582
C 1.916674 2.057511 0.421487
C 2.021034 2.618624 1.704960
C 2.460147 2.813754 -0.631727
C 2.595360 3.866284 1.921169
H 1.632613 2.063068 2.554099
C 3.053718 4.052873 -0.422676
H 2.385114 2.431336 -1.645171
C 3.114662 4.594364 0.857025
H 2.641467 4.268312 2.931997
H 3.453079 4.606904 -1.270789
H 3.564175 5.571449 1.022926

TS_{XII→XIII}

E = -2650.01399839
Pd -1.962218 -1.149365 0.293373
P 2.082093 -0.639932 -0.151212
P -0.640096 0.789193 0.361495
C 1.130728 0.776097 0.117096
C 3.603541 -0.156497 -1.094170
H 3.814846 0.842180 -0.684447
C 4.875772 -0.985781 -0.899797
H 4.733777 -1.998603 -1.303355
H 5.120251 -1.099737 0.160836
C 6.051156 -0.308204 -1.601147
H 6.251825 0.648859 -1.096095
H 6.955813 -0.917977 -1.480022
C 5.780449 -0.045146 -3.075398
H 5.704442 -1.006507 -3.606404
H 6.624381 0.492123 -3.526641
C 4.484080 0.728460 -3.269427
H 4.271524 0.862828 -4.337740
H 4.582170 1.736064 -2.836446
C 3.328918 0.008187 -2.590433

H 2.376756 0.524796 -2.758695
H 3.223271 -0.988984 -3.041378
C 1.196858 -2.012635 -0.996943
H 0.418394 -2.266142 -0.260978
C 2.068843 -3.251326 -1.214278
H 2.616328 -3.525968 -0.305152
H 2.824440 -3.034860 -1.984233
C 1.211966 -4.424224 -1.675662
H 1.841180 -5.309857 -1.832966
H 0.502903 -4.682027 -0.873084
C 0.439256 -4.080489 -2.939674
H 1.152584 -3.927698 -3.764502
H -0.202305 -4.920191 -3.236688
C -0.389035 -2.818725 -2.751584
H -1.176373 -2.997003 -2.005433
H -0.901967 -2.557361 -3.685519
C 0.455673 -1.643188 -2.280745
H 1.163858 -1.373537 -3.071308
H -0.176799 -0.769040 -2.100719
C 2.790855 -1.451159 1.367155
H 3.563488 -2.151197 1.018056
C 3.455494 -0.383461 2.235887
H 4.209972 0.173703 1.663795
H 2.693099 0.354290 2.513409
C 4.065650 -0.978335 3.496835
H 4.513240 -0.182772 4.106284
H 4.885522 -1.659886 3.221662
C 3.021338 -1.743711 4.296206
H 3.470239 -2.186077 5.194791
H 2.249274 -1.040869 4.646119
C 2.367266 -2.820568 3.442923
H 1.592281 -3.347843 4.014393
H 3.122891 -3.575258 3.174443
C 1.762092 -2.243248 2.168870
H 0.926209 -1.580301 2.421803
H 1.337915 -3.053687 1.562143
C -1.020426 1.460596 2.063702

H -0.567153 2.460748 2.113641
C -2.526463 1.606951 2.277254
H -2.984825 0.607886 2.194380
H -2.979401 2.216698 1.486592
C -2.836867 2.202830 3.645063
H -2.443688 3.230398 3.687655
H -3.923310 2.280517 3.783760
C -2.215185 1.381248 4.765667
H -2.690415 0.388108 4.787755
H -2.415114 1.843800 5.741110
C -0.718197 1.206833 4.551029
H -0.222430 2.186853 4.633390
H -0.286722 0.572835 5.337809
C -0.428028 0.612804 3.179598
H 0.651207 0.493102 3.029290
H -0.862304 -0.396895 3.118151
C -1.338879 2.145383 -0.714081
H -2.418963 1.950813 -0.647269
C -0.953642 1.916925 -2.171673
H 0.134009 2.024859 -2.282716
H -1.203718 0.888946 -2.453099
C -1.676475 2.884845 -3.097593
H -2.753679 2.661225 -3.065087
H -1.355334 2.723395 -4.135632
C -1.443030 4.329223 -2.681358
H -1.988282 5.015459 -3.343045
H -0.373712 4.571222 -2.789088
C -1.855906 4.545137 -1.232921
H -1.677766 5.586024 -0.931065
H -2.939164 4.371059 -1.140152
C -1.115080 3.599639 -0.292185
H -1.469416 3.763882 0.732693
H -0.047742 3.851980 -0.298031
C -3.393212 -0.374148 -1.002294
C -4.464697 0.415706 -0.557454
C -3.342469 -0.617283 -2.382764
C -5.410219 0.950552 -1.431362

H -4.574504 0.627524 0.507078
C -4.281736 -0.091740 -3.268846
H -2.542472 -1.234277 -2.791042
C -5.321276 0.703371 -2.797475
H -6.222774 1.563280 -1.040582
H -4.197968 -0.303398 -4.334953
H -6.055831 1.119883 -3.484820
C -2.071490 -3.057432 1.377758
H -0.908181 -1.810461 1.311094
H -2.052924 -2.954549 2.463557
H -1.375468 -3.805274 0.991785
C -4.484971 -2.350635 1.454988
H -4.199767 -1.681600 2.276244
H -5.176961 -1.807391 0.802799
C -3.284137 -2.833232 0.682429
H -5.032189 -3.204617 1.885173
C -3.612282 -3.650930 -0.538263
H -2.711761 -4.035436 -1.028921
H -4.231381 -4.516917 -0.254493
H -4.176727 -3.064041 -1.271738
C 1.824676 2.098667 0.238936
C 1.947289 2.754622 1.474867
C 2.312018 2.794213 -0.881369
C 2.481027 4.034088 1.583221
H 1.606719 2.248885 2.373820
C 2.865591 4.064819 -0.780723
H 2.225304 2.336922 -1.861908
C 2.941589 4.700673 0.453961
H 2.541551 4.509456 2.560891
H 3.220794 4.568326 -1.678474
H 3.358593 5.702572 0.535155

XIII

E = -2650.02047999
Pd -1.911649 -1.268738 -0.211506
P 2.044254 -0.413399 -0.291127
P -0.795265 0.607936 0.531720

C 0.971781 0.778978 0.354971
C 3.516580 0.470707 -0.995611
H 3.627864 1.310741 -0.294817
C 4.865414 -0.253274 -1.017805
H 4.828136 -1.108748 -1.706954
H 5.118358 -0.652596 -0.030649
C 5.968441 0.710751 -1.449332
H 6.072811 1.488207 -0.677289
H 6.928867 0.180599 -1.487022
C 5.674036 1.374953 -2.786298
H 5.687717 0.612523 -3.580354
H 6.463582 2.095596 -3.034921
C 4.311253 2.052374 -2.775782
H 4.086667 2.483289 -3.759874
H 4.317393 2.887314 -2.058160
C 3.227544 1.061294 -2.377592
H 2.231448 1.519392 -2.403872
H 3.211948 0.246490 -3.115303
C 1.311228 -1.541651 -1.548905
H 0.581325 -2.114740 -0.954943
C 2.334583 -2.519749 -2.132676
H 2.921819 -3.006282 -1.344452
H 3.047614 -1.967687 -2.762127
C 1.636586 -3.575077 -2.982113
H 2.380668 -4.254079 -3.418537
H 1.001007 -4.189339 -2.328514
C 0.786533 -2.942159 -4.074043
H 1.449674 -2.439208 -4.795009
H 0.250425 -3.717063 -4.637174
C -0.190587 -1.921368 -3.508166
H -0.946476 -2.419616 -2.881264
H -0.740544 -1.438169 -4.325026
C 0.515988 -0.867596 -2.666121
H 1.179793 -0.282912 -3.312295
H -0.211453 -0.172324 -2.235846
C 2.830235 -1.569071 0.938794
H 3.678865 -2.038654 0.420705

C 3.367032 -0.747985 2.110612
H 4.049489 0.038071 1.759016
H 2.523551 -0.220340 2.570922
C 4.043092 -1.623916 3.154878
H 4.392122 -1.005205 3.991602
H 4.938435 -2.093031 2.718129
C 3.095347 -2.708287 3.646831
H 3.590023 -3.345845 4.390805
H 2.241387 -2.235696 4.156942
C 2.581514 -3.545178 2.484485
H 1.878765 -4.309994 2.840225
H 3.426326 -4.086182 2.030275
C 1.907805 -2.683455 1.423491
H 0.989289 -2.241453 1.828469
H 1.598065 -3.311996 0.579247
C -1.261491 0.664058 2.338970
H -0.900894 1.632624 2.713213
C -2.778271 0.617663 2.515200
H -3.140155 -0.339562 2.106714
H -3.267756 1.404334 1.928869
C -3.169883 0.730765 3.983552
H -2.875173 1.722733 4.359609
H -4.261390 0.671500 4.087450
C -2.495740 -0.344908 4.823855
H -2.872803 -1.331683 4.511609
H -2.759998 -0.230314 5.883302
C -0.984651 -0.316505 4.639364
H -0.585948 0.628645 5.040538
H -0.511015 -1.123546 5.215151
C -0.616488 -0.437552 3.167128
H 0.471655 -0.424915 3.032645
H -0.961063 -1.408420 2.783065
C -1.564566 2.190508 -0.090099
H -2.626818 1.915328 -0.154617
C -1.106919 2.470237 -1.517739
H -0.031508 2.688867 -1.518274
H -1.249264 1.571506 -2.126267

C -1.876672 3.631582 -2.129555
H -2.932430 3.338422 -2.233272
H -1.507851 3.834885 -3.144113
C -1.775595 4.877013 -1.261487
H -2.348241 5.703903 -1.702312
H -0.725346 5.207359 -1.220166
C -2.258934 4.588535 0.152083
H -2.177983 5.486371 0.779449
H -3.326972 4.323166 0.117596
C -1.478811 3.441847 0.788018
H -1.887083 3.241483 1.786119
H -0.437414 3.754067 0.932325
C -3.353174 -0.207897 -1.314324
C -4.512127 0.293334 -0.701275
C -3.237919 0.021751 -2.691512
C -5.477285 1.009868 -1.406971
H -4.675457 0.126424 0.364598
C -4.196547 0.733256 -3.411895
H -2.369674 -0.357943 -3.229086
C -5.321836 1.239659 -2.770361
H -6.358198 1.387926 -0.887915
H -4.060635 0.894339 -4.481460
H -6.072080 1.798980 -3.326930
C -2.712185 -3.648828 1.599724
H -1.814258 -3.618503 2.226947
H -3.400441 -2.872179 1.950278
H -3.193248 -4.627099 1.753333
C -3.285859 -2.908825 -0.728777
H -4.254837 -2.559412 -0.378329
H -0.740977 -1.900045 0.673151
C -2.372315 -3.476470 0.141955
H -3.195728 -3.058623 -1.804340
C -1.304664 -4.399095 -0.380187
H -1.663102 -5.438443 -0.325494
H -1.066311 -4.183289 -1.425853
H -0.383158 -4.335546 0.208063
C 1.551480 2.046925 0.908945

C 1.587112 2.293455 2.291428
C 2.005450 3.091372 0.084572
C 2.003178 3.512130 2.816088
H 1.271080 1.508969 2.972675
C 2.441689 4.306036 0.599717
H 1.987057 2.957673 -0.992144
C 2.429651 4.530675 1.972178
H 1.997743 3.662085 3.894466
H 2.773886 5.088853 -0.080329
H 2.753633 5.486655 2.378889

TS_{XIII→XIV} (CW)

E = -2650.01461697

Pd -1.875155 -1.168379 0.157377
P 2.080798 -0.624740 -0.182860
P -0.660806 0.758831 0.416583
C 1.100798 0.762865 0.144025
C 3.603212 -0.038621 -1.072947
H 3.775630 0.939977 -0.602118
C 4.901273 -0.834087 -0.906511
H 4.802525 -1.824423 -1.373539
H 5.133875 -1.004109 0.149090
C 6.063844 -0.074953 -1.542871
H 6.221741 0.855896 -0.977214
H 6.987047 -0.659951 -1.440698
C 5.809950 0.268133 -3.003308
H 5.775875 -0.661045 -3.592762
H 6.642321 0.859898 -3.405258
C 4.491160 1.008276 -3.173336
H 4.291385 1.201349 -4.235163
H 4.547228 1.989670 -2.677380
C 3.350311 0.208796 -2.561849
H 2.385015 0.703575 -2.717251
H 3.287048 -0.760662 -3.076555
C 1.255767 -1.966409 -1.136200
H 0.478083 -2.300354 -0.430753
C 2.182301 -3.149507 -1.425775

H 2.711369 -3.476203 -0.522849
H 2.952407 -2.845816 -2.150466
C 1.386516 -4.312229 -2.007090
H 2.054541 -5.159099 -2.211135
H 0.661201 -4.656969 -1.253507
C 0.644433 -3.895222 -3.267408
H 1.378588 -3.639167 -4.047183
H 0.054363 -4.733236 -3.660513
C -0.248759 -2.692680 -3.003314
H -1.050028 -2.973671 -2.306658
H -0.742020 -2.371797 -3.929436
C 0.524638 -1.525158 -2.404685
H 1.235673 -1.156573 -3.151077
H -0.154454 -0.698600 -2.171248
C 2.809229 -1.499559 1.289850
H 3.610036 -2.139899 0.892297
C 3.434849 -0.460827 2.220868
H 4.144505 0.179439 1.679196
H 2.639035 0.209973 2.564992
C 4.103176 -1.109425 3.424367
H 4.517114 -0.335760 4.083905
H 4.954891 -1.720026 3.086141
C 3.119862 -1.990913 4.180576
H 3.610541 -2.470675 5.037238
H 2.315513 -1.360733 4.591727
C 2.509567 -3.036830 3.258782
H 1.782402 -3.652852 3.803729
H 3.301431 -3.720849 2.915166
C 1.836485 -2.395318 2.051386
H 0.977556 -1.798779 2.377576
H 1.428033 -3.171922 1.392232
C -1.039763 1.307425 2.161215
H -0.581248 2.301165 2.266000
C -2.543677 1.453536 2.385112
H -3.011210 0.470217 2.221422
H -2.987109 2.132023 1.647070
C -2.853406 1.945271 3.794189

H -2.462495 2.967842 3.911515
H -3.940104 2.011102 3.937790
C -2.229061 1.047329 4.852820
H -2.696062 0.051222 4.799812
H -2.434933 1.436022 5.858782
C -0.730839 0.900351 4.627078
H -0.243080 1.877328 4.771500
H -0.293011 0.220568 5.370950
C -0.444425 0.392325 3.221356
H 0.633998 0.281338 3.057715
H -0.877587 -0.611000 3.097443
C -1.382762 2.166131 -0.564778
H -2.457948 1.958439 -0.477525
C -1.045997 2.015048 -2.043512
H 0.028945 2.185519 -2.193449
H -1.257272 0.988237 -2.359749
C -1.860891 2.985470 -2.886159
H -2.922474 2.704452 -2.806656
H -1.590635 2.886512 -3.946148
C -1.668646 4.420779 -2.416613
H -2.285461 5.107795 -3.011320
H -0.620878 4.718147 -2.581520
C -1.994464 4.561884 -0.936437
H -1.830272 5.595404 -0.602907
H -3.063656 4.347837 -0.783423
C -1.167933 3.603024 -0.084024
H -1.461093 3.711297 0.967513
H -0.110079 3.885815 -0.144098
C -3.333429 -0.379948 -1.130498
C -4.394301 0.429171 -0.691312
C -3.318850 -0.667044 -2.503879
C -5.371975 0.920921 -1.555068
H -4.471752 0.688815 0.366558
C -4.287782 -0.183393 -3.382896
H -2.522639 -1.288098 -2.915081
C -5.323670 0.616654 -2.911967
H -6.176162 1.545544 -1.165384

H -4.231393 -0.432632 -4.442792
H -6.082596 0.998647 -3.592938
C -4.764815 -2.799216 0.035478
H -5.316543 -1.877661 0.243759
H -4.615515 -2.862930 -1.045684
H -5.388863 -3.645269 0.360616
C -2.348771 -3.413669 0.234305
H -2.376197 -3.750471 -0.801244
H -0.703713 -1.642566 1.145529
C -3.470182 -2.855848 0.786632
H -1.527898 -3.767268 0.852350
C -3.563655 -2.594263 2.262198
H -4.210954 -3.348933 2.733397
H -2.580532 -2.617227 2.743541
H -4.023826 -1.616941 2.454505
C 1.772192 2.091177 0.325670
C 1.908848 2.677177 1.594502
C 2.229737 2.855100 -0.761878
C 2.431871 3.954365 1.766396
H 1.591061 2.115606 2.468541
C 2.773362 4.123378 -0.598751
H 2.128724 2.452610 -1.764587
C 2.866377 4.688172 0.669022
H 2.505610 4.374212 2.768262
H 3.107156 4.681123 -1.472332
H 3.276216 5.687787 0.799984

xiii→*xiv* (**CW**)

E = -2650.01743310
Pd -1.889542 -1.162479 -0.248955
P 2.086812 -0.522423 -0.333090
P -0.684782 0.598493 0.593382
C 1.079958 0.696286 0.368940
C 3.598078 0.319256 -1.010107
H 3.748447 1.128593 -0.281349
C 4.912667 -0.464490 -1.062093
H 4.836844 -1.288099 -1.786078

H 5.146620 -0.915872 -0.093060
C 6.059096 0.465034 -1.454322
H 6.196585 1.205465 -0.651666
H 6.994634 -0.106228 -1.512488
C 5.798440 1.194545 -2.763994
H 5.781854 0.464524 -3.587893
H 6.619414 1.889523 -2.982137
C 4.466144 1.929251 -2.728894
H 4.263196 2.406819 -3.696027
H 4.505180 2.734787 -1.979368
C 3.339579 0.971678 -2.370135
H 2.365638 1.474530 -2.381973
H 3.290558 0.185903 -3.137401
C 1.294211 -1.561959 -1.630595
H 0.532122 -2.107451 -1.051160
C 2.262973 -2.581238 -2.235821
H 2.804231 -3.130841 -1.456871
H 3.020657 -2.056339 -2.835964
C 1.515961 -3.559321 -3.134061
H 2.219305 -4.283621 -3.565095
H 0.807358 -4.136614 -2.519970
C 0.755733 -2.827743 -4.229073
H 1.477622 -2.329028 -4.894471
H 0.199852 -3.539875 -4.852541
C -0.185558 -1.788920 -3.639291
H -0.971084 -2.292700 -3.058933
H -0.695504 -1.238451 -4.439618
C 0.541391 -0.807784 -2.727973
H 1.234167 -0.213872 -3.333241
H -0.171932 -0.108963 -2.277822
C 2.825704 -1.762588 0.841781
H 3.645181 -2.249482 0.293540
C 3.417621 -1.016110 2.036967
H 4.121667 -0.239430 1.708251
H 2.604654 -0.480404 2.540642
C 4.081970 -1.965006 3.023552
H 4.474791 -1.400149 3.878823

H 4.947610 -2.447233 2.543201
C 3.103477 -3.033785 3.488735
H 3.590678 -3.726311 4.187229
H 2.283585 -2.552750 4.044850
C 2.524216 -3.791066 2.302742
H 1.798234 -4.541383 2.642298
H 3.332667 -4.345627 1.800886
C 1.861066 -2.851848 1.302263
H 0.979554 -2.383683 1.753927
H 1.487474 -3.424577 0.444172
C -1.110079 0.592488 2.412549
H -0.692593 1.523725 2.821278
C -2.622514 0.616338 2.629472
H -3.052321 -0.287414 2.164667
H -3.076286 1.472833 2.116745
C -2.973371 0.653171 4.112235
H -2.623301 1.605334 4.539901
H -4.063905 0.638781 4.240170
C -2.331989 -0.500319 4.870306
H -2.762236 -1.448918 4.512049
H -2.567385 -0.436890 5.940787
C -0.825918 -0.527790 4.649762
H -0.376995 0.374014 5.095133
H -0.376111 -1.386845 5.166229
C -0.496026 -0.578281 3.165092
H 0.588523 -0.597933 3.007145
H -0.882725 -1.511642 2.730996
C -1.403409 2.227005 0.053177
H -2.477350 1.999267 0.054477
C -1.038910 2.504839 -1.400936
H 0.038228 2.707538 -1.476330
H -1.242208 1.610506 -2.000338
C -1.840105 3.677168 -1.948151
H -2.901236 3.385704 -1.980906
H -1.542893 3.887840 -2.984304
C -1.669167 4.915837 -1.080068
H -2.275089 5.745892 -1.467373

H -0.619460 5.246980 -1.124613
C -2.033678 4.624997 0.369202
H -1.889185 5.519792 0.989543
H -3.104138 4.373017 0.424770
C -1.218554 3.464339 0.933387
H -1.544399 3.260347 1.961317
H -0.163727 3.758148 0.991673
C -3.315763 -0.033879 -1.310882
C -4.367058 0.673289 -0.704299
C -3.290076 0.010103 -2.713272
C -5.321511 1.378113 -1.435484
H -4.454810 0.678061 0.384147
C -4.230989 0.716866 -3.462503
H -2.505321 -0.521776 -3.252373
C -5.255865 1.407833 -2.825293
H -6.119472 1.909649 -0.916436
H -4.162508 0.725830 -4.550570
H -5.994540 1.960982 -3.403262
C -4.751925 -2.476288 0.228979
H -4.825816 -1.710128 1.011554
H -5.089825 -2.034052 -0.710675
C -2.708816 -3.120907 -1.068424
H -0.762017 -1.974759 0.557897
H -1.803248 -3.720082 -1.152740
H -3.199944 -2.806829 -1.988579
C -3.355906 -3.010886 0.132332
H -5.429892 -3.294602 0.511401
C -2.840593 -3.669873 1.378590
H -3.503001 -4.505162 1.649608
H -1.820117 -4.041474 1.251964
H -2.846960 -2.966466 2.221153
C 1.724332 1.922444 0.942926
C 1.813090 2.121943 2.330231
C 2.194284 2.972664 0.135299
C 2.301021 3.303412 2.877924
H 1.484094 1.329296 2.996183
C 2.703868 4.148306 0.672983

H 2.128529 2.875242 -0.943565
C 2.748320 4.327436 2.051646
H 2.337008 3.419101 3.959948
H 3.048200 4.938064 0.007139
H 3.130569 5.253498 2.476635

TS_{XIII→XIV} (CW)

E = -2650.01628677

Pd -1.849602 -1.188427 -0.314795
P 2.058710 -0.453468 -0.337843
P -0.733996 0.598750 0.584467
C 1.030438 0.737514 0.380812
C 3.581027 0.421694 -0.944651
H 3.710328 1.203312 -0.182193
C 4.900740 -0.353073 -0.999477
H 4.844713 -1.146272 -1.758621
H 5.116501 -0.843340 -0.045259
C 6.050478 0.597268 -1.327253
H 6.166422 1.303595 -0.491169
H 6.990071 0.033046 -1.388732
C 5.815114 1.380662 -2.610336
H 5.822902 0.686502 -3.464802
H 6.636112 2.089206 -2.779173
C 4.477010 2.104810 -2.575793
H 4.293153 2.620925 -3.526824
H 4.491199 2.878313 -1.792402
C 3.350258 1.125240 -2.284049
H 2.372902 1.620350 -2.301043
H 3.327595 0.369821 -3.082343
C 1.303285 -1.439452 -1.698822
H 0.527138 -2.009233 -1.162308
C 2.283999 -2.434173 -2.323602
H 2.814571 -3.011531 -1.557512
H 3.049796 -1.887250 -2.893220
C 1.548868 -3.379314 -3.265891
H 2.256791 -4.089481 -3.712671
H 0.832397 -3.976976 -2.680757

C 0.804085 -2.610243 -4.346384
H 1.536963 -2.095411 -4.987025
H 0.253801 -3.300627 -4.998655
C -0.140846 -1.583446 -3.740348
H -0.944560 -2.094541 -3.192688
H -0.629058 -1.001774 -4.532307
C 0.576266 -0.640833 -2.782150
H 1.284985 -0.031590 -3.352834
H -0.138985 0.046811 -2.318978
C 2.780204 -1.741306 0.798398
H 3.612498 -2.195501 0.241589
C 3.348664 -1.048807 2.036985
H 4.050759 -0.251815 1.756133
H 2.524497 -0.543850 2.553920
C 4.008053 -2.038984 2.986641
H 4.379287 -1.512990 3.875673
H 4.887931 -2.485448 2.497679
C 3.037524 -3.142794 3.380658
H 3.522880 -3.862358 4.052556
H 2.200774 -2.701363 3.944699
C 2.489756 -3.846415 2.147819
H 1.771447 -4.625323 2.435536
H 3.314620 -4.359654 1.628978
C 1.823878 -2.863559 1.192619
H 0.934824 -2.431683 1.665331
H 1.461534 -3.393343 0.302645
C -1.164538 0.552634 2.400818
H -0.737196 1.470247 2.829726
C -2.675435 0.581269 2.623707
H -3.108582 -0.309873 2.143737
H -3.131664 1.447337 2.129954
C -3.018812 0.590068 4.108864
H -2.661782 1.531907 4.553417
H -4.108754 0.578947 4.241805
C -2.380730 -0.581317 4.842395
H -2.818900 -1.520562 4.469352
H -2.609660 -0.535382 5.915171

C -0.876179 -0.615517 4.612334
H -0.417015 0.274543 5.070700
H -0.429358 -1.487481 5.109533
C -0.559163 -0.640755 3.124583
H 0.523190 -0.673199 2.954517
H -0.964726 -1.560412 2.677224
C -1.494830 2.218238 0.076451
H -2.562919 1.959250 0.066549
C -1.130945 2.550806 -1.366028
H -0.060752 2.792511 -1.427521
H -1.300128 1.669953 -1.994094
C -1.968662 3.712149 -1.881021
H -3.020759 3.389512 -1.916914
H -1.682438 3.958132 -2.912503
C -1.832123 4.932480 -0.981804
H -2.464283 5.753576 -1.345498
H -0.793136 5.296331 -1.020729
C -2.182828 4.592420 0.460091
H -2.057386 5.472762 1.104771
H -3.246509 4.312793 0.512883
C -1.337982 3.436481 0.988803
H -1.650245 3.200603 2.013657
H -0.289090 3.751485 1.047125
C -3.329978 -0.088995 -1.341560
C -4.436343 0.466516 -0.677628
C -3.296466 0.110974 -2.730847
C -5.432790 1.180872 -1.343129
H -4.530550 0.350020 0.403915
C -4.280363 0.826265 -3.411965
H -2.469109 -0.297649 -3.312077
C -5.357960 1.368931 -2.719057
H -6.270762 1.594408 -0.781465
H -4.203898 0.960989 -4.491164
H -6.129868 1.928742 -3.244808
C -2.921742 -3.253286 0.090104
H -0.682013 -1.907669 0.500542
C -2.763609 -3.050904 -1.255612

H -1.939243 -3.536573 -1.777550
C -2.031789 -4.189997 0.857206
H -1.777297 -3.785251 1.843164
H -2.566399 -5.138457 1.018594
H -1.101919 -4.397962 0.319391
H -3.555280 -2.615383 -1.860051
C -4.181997 -2.842331 0.793032
H -4.760593 -2.127723 0.200856
H -4.801449 -3.731141 0.984972
H -3.958180 -2.393756 1.769182
C 1.655245 1.953684 0.996141
C 1.754394 2.101686 2.388970
C 2.102781 3.039639 0.224020
C 2.234374 3.267438 2.976323
H 1.441140 1.280221 3.027316
C 2.603672 4.200347 0.800867
H 2.028473 2.980689 -0.857148
C 2.661484 4.326944 2.184884
H 2.280330 3.342765 4.061523
H 2.931865 5.018995 0.162321
H 3.038142 5.240472 2.640895

TS_{XIII→XIV} (CCW)

E = -2650.01141838
Pd -1.946914 -1.014365 0.562830
P 2.051796 -0.677062 -0.106684
P -0.635762 0.857613 0.304720
C 1.114300 0.771979 -0.028098
C 3.544640 -0.328404 -1.156650
H 3.760316 0.717167 -0.892217
C 4.829785 -1.117304 -0.889230
H 4.688446 -2.174883 -1.154220
H 5.102992 -1.091198 0.169915
C 5.981309 -0.529308 -1.702219
H 6.184236 0.487039 -1.331749
H 6.894464 -1.111941 -1.524356
C 5.673473 -0.463592 -3.190884

H 5.594483 -1.486745 -3.589503
H 6.500880 0.015847 -3.729493
C 4.365135 0.268946 -3.450844
H 4.124895 0.260801 -4.521762
H 4.463168 1.325087 -3.155617
C 3.233738 -0.364065 -2.654637
H 2.274261 0.120645 -2.866373
H 3.127155 -1.411935 -2.970094
C 1.140903 -2.146905 -0.735780
H 0.383363 -2.306645 0.050029
C 2.019830 -3.396695 -0.824365
H 2.570775 -3.566829 0.108126
H 2.772295 -3.258226 -1.614926
C 1.174869 -4.620933 -1.154789
H 1.816118 -5.508922 -1.228109
H 0.477799 -4.805747 -0.323811
C 0.385859 -4.420155 -2.439596
H 1.088648 -4.343900 -3.283921
H -0.245945 -5.295051 -2.641087
C -0.458731 -3.156525 -2.375176
H -1.234359 -3.267068 -1.605984
H -0.984245 -2.999140 -3.325449
C 0.374289 -1.928696 -2.040071
H 1.066844 -1.736594 -2.865636
H -0.267066 -1.047088 -1.946426
C 2.825361 -1.267437 1.479543
H 3.587072 -2.004609 1.186303
C 3.523325 -0.089264 2.159321
H 4.232578 0.397673 1.476157
H 2.765769 0.670022 2.386070
C 4.217414 -0.509072 3.447020
H 4.683807 0.363939 3.921553
H 5.033404 -1.210144 3.211937
C 3.236666 -1.178563 4.398547
H 3.745079 -1.493869 5.318802
H 2.470143 -0.446583 4.698092
C 2.557056 -2.364449 3.729514

H 1.832286 -2.828171 4.411302
H 3.312302 -3.134600 3.507134
C 1.857994 -1.954458 2.439032
H 1.030804 -1.272479 2.665218
H 1.400268 -2.832107 1.965142
C -0.914364 1.774980 1.908070
H -0.438827 2.755999 1.765582
C -2.399314 2.006647 2.183336
H -2.884182 1.025564 2.308773
H -2.890555 2.486024 1.328438
C -2.598365 2.846624 3.439819
H -2.182073 3.851412 3.268046
H -3.670131 2.984679 3.634816
C -1.914693 2.221019 4.647851
H -2.409507 1.266455 4.885085
H -2.032965 2.861246 5.531957
C -0.441568 1.954791 4.369673
H 0.083798 2.914099 4.238374
H 0.028645 1.457464 5.229187
C -0.270363 1.109241 3.115263
H 0.789877 0.912742 2.917732
H -0.740479 0.126770 3.265220
C -1.382284 2.055072 -0.913001
H -2.455827 1.891188 -0.745614
C -1.105931 1.603881 -2.342353
H -0.033790 1.708076 -2.558621
H -1.352747 0.542111 -2.439343
C -1.929322 2.408387 -3.337168
H -2.993532 2.184012 -3.166145
H -1.703139 2.087954 -4.363143
C -1.684866 3.901247 -3.174807
H -2.304228 4.473936 -3.878026
H -0.636087 4.126561 -3.425323
C -1.958570 4.344768 -1.744604
H -1.760807 5.418990 -1.629381
H -3.026799 4.195877 -1.523076
C -1.127200 3.554010 -0.737933

H -1.389651 3.878645 0.276358
H -0.066134 3.793115 -0.877759
C -3.416069 -0.477250 -0.840191
C -4.456858 0.401358 -0.496396
C -3.454142 -0.980472 -2.149339
C -5.463232 0.759913 -1.392121
H -4.493815 0.825882 0.509210
C -4.454134 -0.634023 -3.057926
H -2.677290 -1.667489 -2.485277
C -5.467343 0.242416 -2.683792
H -6.249939 1.446420 -1.078304
H -4.438775 -1.049710 -4.065739
H -6.249691 0.518679 -3.388937
C -2.548278 -4.144108 0.703104
H -2.541592 -4.281156 -0.383735
H -1.513942 -4.082484 1.059463
H -3.009832 -5.047022 1.130491
C -2.982137 -2.194669 2.190491
H -2.162927 -2.506112 2.832082
H -0.743491 -1.298560 1.574711
C -3.346964 -2.934454 1.095591
H -3.666097 -1.448362 2.596257
C -4.720139 -2.851366 0.502391
H -5.306266 -3.710863 0.862165
H -5.235672 -1.930665 0.786280
H -4.696212 -2.896849 -0.591304
C 1.816592 2.092525 -0.139246
C 2.026099 2.912749 0.981151
C 2.235612 2.614689 -1.375292
C 2.582079 4.183111 0.874136
H 1.738907 2.545536 1.962218
C 2.811600 3.874047 -1.489992
H 2.077947 2.026906 -2.273808
C 2.977533 4.674058 -0.364331
H 2.712202 4.789258 1.769178
H 3.113504 4.239161 -2.470394
H 3.413054 5.667562 -0.451568

xiii→*xiv* (**CCW**)

E = -2650.01564460

Pd -1.953930 -1.054820 0.486701

P 2.051083 -0.639153 -0.134339

P -0.656473 0.843003 0.339140

C 1.097150 0.793308 0.019222

C 3.515571 -0.238187 -1.201446

H 3.729584 0.800040 -0.909149

C 4.813128 -1.022576 -0.988440

H 4.672441 -2.076019 -1.269253

H 5.114832 -1.013609 0.063584

C 5.936358 -0.409707 -1.822257

H 6.145665 0.599168 -1.435319

H 6.857483 -0.990978 -1.685961

C 5.582331 -0.311725 -3.298934

H 5.492276 -1.325877 -3.717775

H 6.392086 0.181149 -3.852029

C 4.265853 0.424420 -3.502326

H 3.994570 0.443255 -4.565647

H 4.372608 1.472916 -3.183669

C 3.159330 -0.231044 -2.689574

H 2.192325 0.258299 -2.855869

H 3.042440 -1.269310 -3.031550

C 1.152613 -2.101082 -0.794538

H 0.429254 -2.306319 0.012418

C 2.057545 -3.324147 -0.963646

H 2.667720 -3.500910 -0.070056

H 2.757277 -3.146158 -1.793650

C 1.226182 -4.563021 -1.272196

H 1.885092 -5.428377 -1.420559

H 0.602846 -4.795284 -0.396472

C 0.338189 -4.353242 -2.489955

H 0.974698 -4.256282 -3.383169

H -0.294860 -5.234519 -2.656873

C -0.516127 -3.100649 -2.355045

H -1.244092 -3.221997 -1.538849

H -1.101823 -2.944136 -3.269385

C 0.327033 -1.868483 -2.059322
H 0.980046 -1.669960 -2.916003
H -0.311926 -0.988947 -1.931229
C 2.853148 -1.273608 1.419675
H 3.629094 -1.982961 1.097178
C 3.528842 -0.104182 2.135734
H 4.226685 0.417100 1.465925
H 2.756782 0.632443 2.386805
C 4.232063 -0.548597 3.409850
H 4.683447 0.318579 3.908949
H 5.059776 -1.228719 3.155121
C 3.262471 -1.261271 4.341116
H 3.775542 -1.593652 5.252771
H 2.483291 -0.551581 4.660566
C 2.605272 -2.440220 3.638268
H 1.887685 -2.935345 4.305419
H 3.375510 -3.190102 3.398538
C 1.901543 -2.013100 2.355779
H 1.051586 -1.362709 2.591721
H 1.473411 -2.891855 1.856690
C -0.974188 1.664316 1.985530
H -0.525358 2.664659 1.905176
C -2.469830 1.835294 2.247883
H -2.924464 0.833946 2.309969
H -2.963568 2.343801 1.411178
C -2.714102 2.595589 3.545998
H -2.324925 3.620215 3.440369
H -3.792468 2.691163 3.729760
C -2.031518 1.919017 4.726969
H -2.501750 0.938224 4.897979
H -2.183106 2.501438 5.645329
C -0.546562 1.712630 4.460554
H -0.048915 2.693336 4.396108
H -0.075941 1.179572 5.298121
C -0.326590 0.948938 3.161943
H 0.743187 0.801863 2.972139
H -0.762760 -0.056987 3.241850

C -1.397075 2.098165 -0.828606
H -2.472817 1.907187 -0.708241
C -1.059962 1.742741 -2.272139
H 0.020454 1.854404 -2.432294
H -1.301951 0.690032 -2.449817
C -1.830320 2.616314 -3.251862
H -2.902880 2.387311 -3.156654
H -1.547907 2.365215 -4.283310
C -1.596807 4.094508 -2.976143
H -2.174303 4.714258 -3.675021
H -0.534980 4.333044 -3.147168
C -1.955214 4.438114 -1.538126
H -1.774532 5.502898 -1.338526
H -3.032436 4.267578 -1.387102
C -1.170154 3.585775 -0.545702
H -1.488488 3.839075 0.472688
H -0.106407 3.843440 -0.614964
C -3.431441 -0.422388 -0.860407
C -4.539675 0.328879 -0.436750
C -3.414830 -0.768803 -2.219774
C -5.555637 0.721743 -1.307691
H -4.621099 0.628719 0.610561
C -4.423585 -0.389433 -3.103500
H -2.584939 -1.356682 -2.614075
C -5.501711 0.365171 -2.651291
H -6.394604 1.309102 -0.933870
H -4.365490 -0.681733 -4.152218
H -6.291009 0.669249 -3.336961
C -2.042684 -4.136481 1.268626
H -1.370485 -4.310503 0.420756
H -1.440581 -3.803789 2.119093
C -3.449331 -2.134573 1.785869
H -0.807917 -1.481336 1.533164
H -4.356524 -1.554787 1.620444
H -2.966375 -2.049582 2.757479
C -3.110528 -3.139693 0.921493
H -2.506728 -5.104515 1.508768

C -3.979967 -3.492271 -0.248355
H -4.442387 -4.473975 -0.069722
H -4.765073 -2.749667 -0.410262
H -3.399844 -3.570773 -1.175976
C 1.784175 2.125871 -0.018779
C 1.952020 2.900825 1.140667
C 2.220915 2.710016 -1.220727
C 2.480555 4.186415 1.101273
H 1.651912 2.484990 2.098038
C 2.768985 3.985978 -1.267917
H 2.099276 2.158827 -2.147630
C 2.890213 4.740394 -0.105709
H 2.577146 4.755419 2.024491
H 3.084343 4.399657 -2.224502
H 3.303085 5.746697 -0.140359

TS_{XIII→XIV} (CCW)

E = -2650.01205116
Pd -1.958472 -1.173458 0.269477
P 2.038003 -0.526964 -0.234327
P -0.728647 0.761740 0.430753
C 1.027437 0.827135 0.127340
C 3.527979 0.110446 -1.144425
H 3.684477 1.083697 -0.656840
C 4.848319 -0.655048 -1.016759
H 4.766576 -1.637647 -1.503130
H 5.103389 -0.841040 0.030822
C 5.980370 0.146209 -1.656149
H 6.124856 1.068857 -1.073717
H 6.919456 -0.417315 -1.581861
C 5.692633 0.512773 -3.104547
H 5.671143 -0.404711 -3.712636
H 6.503073 1.133183 -3.508093
C 4.353388 1.223197 -3.236536
H 4.130493 1.433399 -4.290474
H 4.393550 2.194989 -2.720595
C 3.243037 0.383278 -2.623200

H 2.264313 0.858589 -2.750585
H 3.192954 -0.575863 -3.158423
C 1.218202 -1.867913 -1.191729
H 0.466386 -2.241347 -0.476683
C 2.170474 -3.014460 -1.538376
H 2.724094 -3.357040 -0.656037
H 2.919221 -2.662179 -2.263151
C 1.400922 -4.178390 -2.150189
H 2.091693 -4.993407 -2.402339
H 0.707560 -4.579589 -1.394808
C 0.616709 -3.738681 -3.377401
H 1.325147 -3.437718 -4.164809
H 0.040051 -4.579320 -3.784793
C -0.302421 -2.570067 -3.054338
H -1.081546 -2.896005 -2.354245
H -0.822501 -2.230734 -3.959136
C 0.448809 -1.404486 -2.428395
H 1.133278 -0.984352 -3.172173
H -0.249196 -0.609068 -2.149359
C 2.817001 -1.410253 1.207066
H 3.624997 -2.023428 0.782015
C 3.434818 -0.375445 2.147499
H 4.125827 0.286121 1.607388
H 2.631746 0.275261 2.512438
C 4.129987 -1.030183 3.332435
H 4.536891 -0.259043 3.999237
H 4.989121 -1.618775 2.974550
C 3.173201 -1.942578 4.086075
H 3.682942 -2.424368 4.930349
H 2.360407 -1.335582 4.514916
C 2.576017 -2.987650 3.155030
H 1.867225 -3.627177 3.697160
H 3.379267 -3.649060 2.793973
C 1.877223 -2.344400 1.963549
H 1.001585 -1.780152 2.304145
H 1.489894 -3.122402 1.293805
C -1.074155 1.292879 2.188067

H -0.640254 2.299051 2.278988
C -2.572957 1.399226 2.465941
H -3.019103 0.398981 2.345742
H -3.065368 2.046429 1.730689
C -2.835099 1.918918 3.874816
H -2.462666 2.952402 3.949822
H -3.915780 1.964846 4.063910
C -2.146786 1.061711 4.927927
H -2.599653 0.058064 4.925421
H -2.313270 1.476011 5.931003
C -0.657385 0.929692 4.640642
H -0.177499 1.915699 4.745774
H -0.179526 0.270908 5.378823
C -0.420502 0.400373 3.233176
H 0.651935 0.303710 3.027742
H -0.840999 -0.611557 3.141025
C -1.517276 2.157857 -0.517631
H -2.583291 1.918463 -0.402850
C -1.217852 2.032124 -2.006689
H -0.150303 2.222958 -2.184166
H -1.420181 1.005817 -2.329773
C -2.072930 2.995886 -2.816679
H -3.126254 2.692317 -2.713803
H -1.827474 2.914580 -3.884189
C -1.899788 4.429103 -2.334428
H -2.543288 5.110013 -2.907456
H -0.862108 4.750318 -2.517425
C -2.197588 4.543688 -0.846311
H -2.051037 5.576358 -0.502162
H -3.257944 4.301998 -0.674242
C -1.330394 3.594620 -0.024042
H -1.606256 3.681752 1.033973
H -0.281869 3.906252 -0.100300
C -3.457517 -0.399952 -0.989066
C -4.546722 0.364049 -0.538948
C -3.438028 -0.683877 -2.362702
C -5.536335 0.835218 -1.399998

H -4.632930 0.606936 0.521956
C -4.422903 -0.223849 -3.237297
H -2.622782 -1.276296 -2.778604
C -5.478520 0.545070 -2.760027
H -6.359655 1.431018 -1.005386
H -4.361271 -0.465875 -4.298525
H -6.248617 0.910364 -3.437574
C -1.809830 -4.029728 1.827802
H -0.775221 -4.185201 1.503618
H -1.797858 -3.403577 2.724678
H -2.222958 -5.015638 2.091973
C -3.630144 -2.506776 0.998889
H -3.768889 -2.123503 2.010392
H -0.737081 -1.661123 1.179965
C -2.648875 -3.425574 0.736497
H -4.429240 -2.318702 0.287382
C -2.645267 -4.170302 -0.567018
H -3.162030 -5.133703 -0.441695
H -3.151333 -3.605471 -1.357891
H -1.624245 -4.400645 -0.891077
C 1.664564 2.171677 0.315158
C 1.823287 2.740952 1.588895
C 2.069193 2.964912 -0.772382
C 2.319015 4.028307 1.766596
H 1.544681 2.158773 2.462651
C 2.585087 4.244102 -0.604258
H 1.948185 2.576336 -1.778324
C 2.702268 4.790466 0.669547
H 2.411548 4.433864 2.772776
H 2.878139 4.824211 -1.477894
H 3.090731 5.797961 0.805228

XIV

E = -2650.01999864
Pd -1.896673 -1.131801 0.412999
P 2.076206 -0.653200 -0.106282
P -0.656501 0.809217 0.331156

C 1.103807 0.769813 0.042578
C 3.564451 -0.218279 -1.125744
H 3.759152 0.818139 -0.814832
C 4.864971 -0.991093 -0.890583
H 4.743538 -2.041906 -1.189652
H 5.140163 -0.993513 0.168796
C 6.001360 -0.353499 -1.687394
H 6.188647 0.652187 -1.281343
H 6.925704 -0.925793 -1.535811
C 5.683695 -0.238868 -3.171169
H 5.617356 -1.247980 -3.606233
H 6.500983 0.271817 -3.696312
C 4.363459 0.483604 -3.398209
H 4.118775 0.513034 -4.467714
H 4.448867 1.529032 -3.063534
C 3.245798 -0.196984 -2.622201
H 2.275876 0.279898 -2.807348
H 3.153656 -1.232610 -2.979189
C 1.225307 -2.122943 -0.815456
H 0.482243 -2.350142 -0.036182
C 2.144919 -3.337644 -0.961931
H 2.736677 -3.507916 -0.054880
H 2.860991 -3.161248 -1.778203
C 1.322259 -4.579769 -1.282706
H 1.982706 -5.449400 -1.395062
H 0.661933 -4.796746 -0.428603
C 0.481199 -4.378595 -2.534003
H 1.150988 -4.273066 -3.401603
H -0.136808 -5.265151 -2.726355
C -0.390213 -3.136289 -2.422219
H -1.136852 -3.273913 -1.625688
H -0.952909 -2.982826 -3.351474
C 0.427738 -1.892935 -2.098533
H 1.097675 -1.678089 -2.938189
H -0.228365 -1.024686 -1.977964
C 2.845368 -1.301702 1.459620
H 3.636460 -1.997035 1.143836

C 3.491737 -0.137238 2.209792
H 4.192831 0.407391 1.562500
H 2.704922 0.583131 2.462047
C 4.179846 -0.597402 3.486614
H 4.609684 0.265664 4.011147
H 5.021772 -1.259940 3.232243
C 3.205525 -1.343299 4.386427
H 3.708002 -1.687182 5.299657
H 2.410716 -0.651470 4.706989
C 2.576853 -2.516533 3.648738
H 1.856518 -3.036254 4.293750
H 3.361044 -3.249974 3.403909
C 1.886763 -2.069515 2.365380
H 1.031597 -1.428623 2.608629
H 1.473290 -2.940752 1.841789
C -1.015446 1.591282 1.987403
H -0.575794 2.597841 1.945342
C -2.519051 1.737233 2.215306
H -2.964188 0.728944 2.226056
H -2.993046 2.272671 1.384190
C -2.810830 2.447272 3.531921
H -2.435754 3.480790 3.472793
H -3.895282 2.519778 3.688048
C -2.150460 1.741124 4.707946
H -2.609271 0.748036 4.833032
H -2.336042 2.289681 5.640737
C -0.655782 1.566591 4.475408
H -0.172159 2.556017 4.454889
H -0.198450 1.013784 5.307497
C -0.390750 0.848521 3.159403
H 0.685418 0.718655 2.994414
H -0.818598 -0.163926 3.199900
C -1.372831 2.079297 -0.832114
H -2.450284 1.883660 -0.743653
C -0.995565 1.745530 -2.271369
H 0.088175 1.862703 -2.400139
H -1.228677 0.694228 -2.470435

C -1.740021 2.632947 -3.258514
H -2.814383 2.401909 -3.197936
H -1.427751 2.398729 -4.285302
C -1.517137 4.106860 -2.952471
H -2.073930 4.737029 -3.658783
H -0.450863 4.349275 -3.086782
C -1.920174 4.427324 -1.520746
H -1.750243 5.489626 -1.299648
H -3.000673 4.249967 -1.404902
C -1.160819 3.562924 -0.518805
H -1.510351 3.797581 0.494050
H -0.097139 3.827299 -0.552537
C -3.371908 -0.469031 -0.927228
C -4.446913 0.356750 -0.565798
C -3.307098 -0.829091 -2.281784
C -5.390544 0.803468 -1.491147
H -4.561393 0.674273 0.471719
C -4.241631 -0.392946 -3.218759
H -2.501500 -1.478704 -2.624959
C -5.291926 0.431984 -2.827578
H -6.207691 1.446345 -1.163469
H -4.147533 -0.698097 -4.261083
H -6.024765 0.778431 -3.554496
C -3.986330 -3.447679 -0.401850
H -4.682242 -2.789165 -0.930367
H -3.196258 -3.737126 -1.102364
C -2.190533 -3.126368 1.330332
H -0.649048 -1.403992 1.362784
H -1.965126 -3.008256 2.387892
H -1.548715 -3.817886 0.782472
C -3.438291 -2.792723 0.833709
H -4.534313 -4.356764 -0.110591
C -4.470556 -2.190060 1.745258
H -5.142975 -2.977999 2.117504
H -4.012118 -1.694497 2.608654
H -5.086952 -1.460690 1.209078
C 1.783526 2.106951 0.037894

C 1.917817 2.862546 1.214251
C 2.243816 2.715542 -1.142861
C 2.434936 4.153312 1.210488
H 1.599320 2.426544 2.156591
C 2.780296 3.997469 -1.154450
H 2.150434 2.179637 -2.081930
C 2.866753 4.732427 0.023177
H 2.504733 4.706546 2.145617
H 3.114293 4.430872 -2.095846
H 3.270347 5.743046 0.015627

TS_{XIV→XV}

E = -2650.01563923

Pd -1.976186 -1.233796 -0.357979
P 2.062064 -0.389285 -0.310279
P -0.779908 0.570889 0.544861
C 0.994489 0.751128 0.424183
C 3.549592 0.520627 -0.938018
H 3.668680 1.302613 -0.173875
C 4.886088 -0.222478 -1.007419
H 4.839640 -1.021430 -1.760802
H 5.123505 -0.701574 -0.052221
C 6.007076 0.753570 -1.357748
H 6.119230 1.467656 -0.527783
H 6.959297 0.212582 -1.431937
C 5.730877 1.523121 -2.641334
H 5.737469 0.823508 -3.491370
H 6.533407 2.247538 -2.830151
C 4.378959 2.220415 -2.586814
H 4.168467 2.729047 -3.536280
H 4.393105 2.997685 -1.807171
C 3.277003 1.219870 -2.271551
H 2.288217 1.694425 -2.266038
H 3.252035 0.464616 -3.069916
C 1.314686 -1.414190 -1.646023
H 0.572241 -2.016335 -1.097703
C 2.332449 -2.361411 -2.288885

H 2.910357 -2.906204 -1.532754
H 3.054955 -1.770637 -2.870541
C 1.638750 -3.348534 -3.219137
H 2.384987 -3.997302 -3.695954
H 0.994113 -4.006501 -2.619396
C 0.803063 -2.633188 -4.270022
H 1.475920 -2.083773 -4.946677
H 0.267367 -3.361672 -4.892315
C -0.172269 -1.649858 -3.639296
H -0.934619 -2.186608 -3.052555
H -0.715856 -1.107964 -4.422838
C 0.535375 -0.659948 -2.722842
H 1.211219 -0.040230 -3.322432
H -0.190440 0.011984 -2.255752
C 2.805990 -1.655432 0.838389
H 3.652380 -2.116264 0.309478
C 3.332265 -0.945376 2.085102
H 4.085178 -0.191866 1.815001
H 2.503850 -0.386458 2.535474
C 3.890407 -1.922072 3.110743
H 4.234250 -1.373202 3.996833
H 4.774173 -2.430707 2.695396
C 2.845714 -2.960009 3.492207
H 3.250736 -3.664138 4.230283
H 1.993972 -2.455545 3.974357
C 2.357246 -3.704357 2.259200
H 1.584051 -4.436356 2.528598
H 3.194506 -4.279561 1.834241
C 1.812690 -2.755325 1.198813
H 0.882014 -2.292079 1.550997
H 1.548902 -3.328703 0.302380
C -1.272608 0.503020 2.346107
H -0.908892 1.432388 2.806025
C -2.792491 0.457435 2.496764
H -3.157383 -0.459995 2.006683
H -3.266906 1.292994 1.968302
C -3.205213 0.453556 3.963606

H -2.903096 1.406051 4.425917
H -4.298810 0.401340 4.047257
C -2.558182 -0.698882 4.719293
H -2.946147 -1.650099 4.322050
H -2.834794 -0.669244 5.781378
C -1.044457 -0.679290 4.557541
H -0.637994 0.220146 5.046272
H -0.591270 -1.541314 5.066449
C -0.652052 -0.672015 3.086609
H 0.438426 -0.657483 2.975703
H -0.996549 -1.602650 2.611660
C -1.525766 2.205546 0.036341
H -2.588950 1.946478 -0.067306
C -1.043133 2.594859 -1.356955
H 0.033872 2.804970 -1.323056
H -1.180753 1.749108 -2.038302
C -1.796594 3.806122 -1.887385
H -2.851842 3.527996 -2.030474
H -1.410334 4.086566 -2.876806
C -1.704798 4.979084 -0.922671
H -2.268895 5.840063 -1.305527
H -0.654560 5.301575 -0.840494
C -2.209447 4.582109 0.456698
H -2.133451 5.427182 1.154140
H -3.278088 4.326257 0.386514
C -1.444037 3.383988 1.010072
H -1.865386 3.110225 1.984959
H -0.402337 3.676400 1.190278
C -3.357220 -0.065312 -1.371596
C -4.522336 0.390611 -0.735115
C -3.214978 0.282115 -2.721559
C -5.467650 1.176878 -1.391442
H -4.705143 0.132852 0.308785
C -4.154701 1.064441 -3.391392
H -2.341255 -0.058254 -3.275705
C -5.286117 1.524543 -2.726276
H -6.354286 1.516641 -0.855994

H -3.998735 1.317426 -4.440188
H -6.021187 2.138996 -3.243564
C -3.220997 -2.889707 -0.800672
H -1.011933 -2.280434 0.423632
H -3.211854 -3.068908 -1.875949
H -4.196280 -2.661608 -0.371867
C -1.230455 -4.401557 -0.647630
H -0.999634 -4.080938 -1.667918
H -0.293642 -4.485610 -0.086227
C -2.210484 -3.460098 0.008238
H -1.678984 -5.403877 -0.703883
C -2.534121 -3.790053 1.446951
H -3.091986 -4.736770 1.487123
H -1.626319 -3.907716 2.050695
H -3.150657 -3.009395 1.905538
C 1.576473 1.963330 1.087297
C 1.587340 2.103207 2.485092
C 2.056562 3.062822 0.354176
C 2.005470 3.273155 3.109185
H 1.249986 1.272966 3.098569
C 2.495578 4.229147 0.969105
H 2.055646 3.012598 -0.729927
C 2.459431 4.348185 2.354213
H 1.980252 3.340303 4.195601
H 2.848689 5.057842 0.357361
H 2.785546 5.266199 2.839141

XV

E = -2650.02909733
Pd -2.020543 -1.164377 -0.462104
P 2.043557 -0.417728 -0.279079
P -0.759708 0.634069 0.506406
C 1.023385 0.762850 0.456418
C 3.599999 0.412571 -0.839437
H 3.735712 1.173235 -0.056314
C 4.892558 -0.406220 -0.876950
H 4.827857 -1.187180 -1.647398

H 5.066049 -0.916192 0.076014
C 6.079749 0.508491 -1.168856
H 6.202895 1.201280 -0.322598
H 7.001404 -0.085446 -1.220114
C 5.893391 1.313041 -2.447296
H 5.889322 0.627510 -3.308756
H 6.742535 1.992211 -2.596050
C 4.583208 2.087730 -2.427039
H 4.436794 2.622728 -3.374047
H 4.614829 2.850659 -1.633850
C 3.413194 1.150293 -2.167380
H 2.455543 1.685131 -2.183490
H 3.367778 0.412324 -2.981038
C 1.280512 -1.376495 -1.657256
H 0.495094 -1.955562 -1.143765
C 2.273740 -2.360034 -2.284505
H 2.794107 -2.949340 -1.520339
H 3.045867 -1.790605 -2.821483
C 1.578198 -3.291997 -3.268076
H 2.316881 -3.958327 -3.732068
H 0.882926 -3.938842 -2.714602
C 0.812892 -2.515814 -4.328432
H 1.530245 -1.971618 -4.962352
H 0.274419 -3.205093 -4.991383
C -0.149173 -1.520174 -3.697794
H -0.935221 -2.053509 -3.138855
H -0.661350 -0.944414 -4.478520
C 0.564985 -0.573196 -2.740846
H 1.280438 0.037485 -3.303513
H -0.149985 0.110797 -2.275487
C 2.660976 -1.760463 0.857810
H 3.492392 -2.269005 0.349649
C 3.188076 -1.119361 2.140302
H 4.002816 -0.416824 1.916594
H 2.385992 -0.511368 2.574594
C 3.636314 -2.158745 3.156933
H 3.989419 -1.659854 4.068508

H 4.493423 -2.722195 2.756757
C 2.504334 -3.124116 3.477641
H 2.832201 -3.876524 4.206260
H 1.679421 -2.569710 3.950862
C 1.997446 -3.799084 2.212020
H 1.156207 -4.467899 2.439600
H 2.796730 -4.435356 1.801568
C 1.573119 -2.789873 1.152418
H 0.670099 -2.258261 1.481142
H 1.300981 -3.325506 0.234925
C -1.319687 0.578119 2.289308
H -0.934095 1.479417 2.786280
C -2.845015 0.588659 2.382918
H -3.222865 -0.314855 1.877986
H -3.272614 1.439493 1.839019
C -3.309565 0.588935 3.833754
H -2.975640 1.517813 4.321583
H -4.406636 0.591084 3.879105
C -2.749790 -0.608000 4.590117
H -3.174375 -1.530065 4.163119
H -3.059152 -0.581622 5.643186
C -1.232683 -0.667230 4.479249
H -0.795728 0.196943 5.003713
H -0.843745 -1.564447 4.980610
C -0.784333 -0.642329 3.024053
H 0.308858 -0.676533 2.956050
H -1.153379 -1.547121 2.513653
C -1.443035 2.294513 -0.023270
H -2.510306 2.074763 -0.179545
C -0.875455 2.688254 -1.383839
H 0.211425 2.820029 -1.298338
H -1.038954 1.872073 -2.094886
C -1.514840 3.962502 -1.917169
H -2.577207 3.764162 -2.124483
H -1.055363 4.239158 -2.875976
C -1.399142 5.103003 -0.917188
H -1.879842 6.009957 -1.307545

H -0.336012 5.349179 -0.765855
C -2.010014 4.705899 0.418005
H -1.922974 5.526232 1.143096
H -3.086577 4.521184 0.278879
C -1.354106 3.448809 0.978734
H -1.846010 3.178809 1.920742
H -0.308178 3.670797 1.224979
C -3.360301 -0.022418 -1.425200
C -4.535271 0.388249 -0.780109
C -3.150535 0.444299 -2.727557
C -5.431153 1.264899 -1.388599
H -4.762177 0.026365 0.221339
C -4.045142 1.319079 -3.341884
H -2.268158 0.130203 -3.280781
C -5.186994 1.744131 -2.671474
H -6.329738 1.572015 -0.853882
H -3.843774 1.671153 -4.353451
H -5.884287 2.431272 -3.147544
C -3.074335 -2.864907 -0.848316
H -1.252381 -2.747616 0.328975
H -3.034249 -3.181558 -1.895173
H -4.103785 -2.825449 -0.481871
C -1.300200 -4.659337 -0.579284
H -0.853816 -4.331193 -1.525333
H -0.498833 -5.030561 0.072645
C -2.084027 -3.524509 0.065352
H -1.971884 -5.498150 -0.801313
C -2.653884 -3.902175 1.425644
H -3.345531 -4.748369 1.324681
H -1.863323 -4.189792 2.131538
H -3.208420 -3.061262 1.859301
C 1.643481 1.928335 1.162672
C 1.615182 2.038635 2.563030
C 2.198705 3.017914 0.468678
C 2.069330 3.173559 3.225267
H 1.216688 1.213678 3.146537
C 2.672811 4.148733 1.122938

H 2.230769 2.989364 -0.616143
C 2.598822 4.240406 2.508646
H 2.012674 3.219653 4.311621
H 3.085038 4.971776 0.541241
H 2.953623 5.130918 3.023750

TS_{XV→XVI}

E = -2650.01319127

Pd 1.760146 -0.809984 0.549229
P -2.049767 -0.744594 -0.152504
P 0.392669 1.058261 0.109407
C -1.365434 0.841427 -0.108202
C -3.882005 -0.592260 0.048278
H -4.098670 0.326375 -0.519458
C -4.752173 -1.708730 -0.533557
H -4.576065 -2.642839 0.020531
H -4.503849 -1.911401 -1.579582
C -6.226744 -1.322279 -0.445322
H -6.396497 -0.453220 -1.098949
H -6.847261 -2.135384 -0.843729
C -6.656060 -0.971044 0.971949
H -6.612531 -1.876373 1.596851
H -7.702092 -0.638840 0.980530
C -5.748365 0.089620 1.578328
H -6.029462 0.285305 2.621150
H -5.864243 1.040465 1.036079
C -4.293743 -0.348510 1.501222
H -3.631103 0.379336 1.978371
H -4.180304 -1.290761 2.057074
C -1.312858 -1.863545 1.110913
H -0.255147 -1.878106 0.773412
C -1.799127 -3.310773 1.105743
H -1.851208 -3.722970 0.091602
H -2.819340 -3.354156 1.518345
C -0.861695 -4.157411 1.962333
H -1.200347 -5.201422 1.975510
H 0.133609 -4.157430 1.489235

C -0.746297 -3.617861 3.382515
H -1.717240 -3.737970 3.888012
H -0.024063 -4.213747 3.955496
C -0.357732 -2.145014 3.400426
H 0.668745 -2.019788 3.023657
H -0.359139 -1.761521 4.428973
C -1.294870 -1.316897 2.534137
H -2.302545 -1.355353 2.963771
H -0.990592 -0.268801 2.517166
C -1.867790 -1.729334 -1.720872
H -2.529959 -2.601619 -1.613874
C -2.342456 -0.901203 -2.913611
H -3.381704 -0.573866 -2.775708
H -1.746822 0.017388 -2.951069
C -2.184235 -1.653339 -4.227627
H -2.511642 -1.018992 -5.061483
H -2.844048 -2.534881 -4.227911
C -0.743988 -2.102785 -4.426947
H -0.639244 -2.653376 -5.370636
H -0.096477 -1.216353 -4.508289
C -0.280265 -2.958289 -3.257802
H 0.768225 -3.257410 -3.385094
H -0.869120 -3.888808 -3.239501
C -0.443186 -2.239164 -1.924946
H 0.258567 -1.396236 -1.861944
H -0.161395 -2.918557 -1.113139
C 1.034006 2.005265 -1.376436
H 0.304584 2.801826 -1.592173
C 2.401532 2.650709 -1.141486
H 3.105877 1.887254 -0.787483
H 2.344874 3.410538 -0.355135
C 2.952438 3.303433 -2.405313
H 2.321546 4.166058 -2.672274
H 3.955255 3.700868 -2.199433
C 2.995592 2.340609 -3.581507
H 3.702652 1.528747 -3.354735
H 3.370864 2.846352 -4.481111

C 1.620288 1.742358 -3.830938
H 0.923042 2.539525 -4.133750
H 1.652362 1.023065 -4.661277
C 1.099005 1.063923 -2.573776
H 0.108512 0.631734 -2.751785
H 1.763571 0.223878 -2.310240
C 0.764796 2.294847 1.454904
H 1.863568 2.344172 1.376095
C 0.469313 1.776150 2.855616
H -0.621544 1.709677 2.993680
H 0.873610 0.759325 2.966467
C 1.056965 2.702101 3.913473
H 2.154621 2.684061 3.825766
H 0.818844 2.331792 4.919814
C 0.562126 4.132039 3.742019
H 1.031449 4.792642 4.483138
H -0.520628 4.161677 3.940871
C 0.816702 4.643782 2.330095
H 0.412222 5.657947 2.212304
H 1.902321 4.718369 2.159868
C 0.211156 3.708180 1.289769
H 0.389719 4.091401 0.277601
H -0.877488 3.687487 1.416893
C 3.726226 -0.422993 0.410679
C 4.354295 -0.471563 -0.841143
C 4.241263 0.460967 1.373957
C 5.421829 0.372427 -1.137864
H 3.987703 -1.156138 -1.604162
C 5.298245 1.309830 1.067976
H 3.790271 0.499519 2.365400
C 5.893784 1.276049 -0.191879
H 5.879965 0.327251 -2.125309
H 5.661511 2.005391 1.823640
H 6.723804 1.938890 -0.427536
C 3.191565 -2.290968 1.153409
H 2.250163 -2.669911 1.612908
H 3.879883 -2.110965 1.982624

C 4.105729 -4.609407 0.959010
H 3.222852 -5.054907 1.439220
H 4.536399 -5.364501 0.288292
C 3.727696 -3.341148 0.197862
H 4.645667 -2.948903 -0.263101
H 4.841507 -4.399299 1.744760
C 2.733641 -3.655489 -0.910345
H 1.809986 -4.074641 -0.484924
H 2.450940 -2.750381 -1.463232
H 3.135770 -4.388734 -1.620971
C -2.243503 2.006045 -0.435232
C -3.011669 2.639479 0.555031
C -2.336816 2.530428 -1.733246
C -3.849519 3.709711 0.264801
H -2.920859 2.289000 1.581087
C -3.162977 3.609842 -2.031647
H -1.741260 2.078550 -2.523334
C -3.932581 4.198824 -1.035364
H -4.431515 4.171848 1.060705
H -3.207331 3.988460 -3.051541
H -4.585165 5.038412 -1.267383

XVI

E = -2650.07801585
Pd -1.845634 -0.255232 -1.029720
P 1.983883 -0.942692 -0.059290
P -0.368382 1.004042 0.206180
C 1.353164 0.586176 0.440876
C 3.817930 -0.786312 -0.261789
H 4.074643 -0.063271 0.527036
C 4.677798 -2.029869 -0.022005
H 4.471414 -2.785510 -0.793972
H 4.449714 -2.494143 0.942372
C 6.157653 -1.653959 -0.047739
H 6.362891 -0.992611 0.807707
H 6.771014 -2.552135 0.100924
C 6.558306 -0.943644 -1.332894

H 6.474367 -1.647060 -2.175650
H 7.612030 -0.639986 -1.286565
C 5.663055 0.257266 -1.603376
H 5.924963 0.724389 -2.561514
H 5.816910 1.021331 -0.825770
C 4.200552 -0.161033 -1.604964
H 3.541299 0.680108 -1.846926
H 4.050243 -0.909783 -2.396202
C 1.205411 -1.637064 -1.575045
H 0.154868 -1.755570 -1.244586
C 1.752854 -3.006207 -1.981190
H 1.813528 -3.690576 -1.127161
H 2.778744 -2.887799 -2.362346
C 0.882992 -3.621567 -3.072237
H 1.294082 -4.593448 -3.375119
H -0.116362 -3.819459 -2.654646
C 0.749757 -2.696737 -4.273751
H 1.733164 -2.590825 -4.757931
H 0.081427 -3.140477 -5.023221
C 0.247101 -1.324293 -3.850935
H -0.766212 -1.419179 -3.432293
H 0.173432 -0.652961 -4.716763
C 1.141869 -0.708661 -2.783998
H 2.140959 -0.550526 -3.205891
H 0.759457 0.265203 -2.470274
C 1.807625 -2.335643 1.162924
H 2.465717 -3.148168 0.822060
C 2.289125 -1.857121 2.532161
H 3.328472 -1.505093 2.478602
H 1.697529 -0.978457 2.814190
C 2.139673 -2.931382 3.599391
H 2.470642 -2.541429 4.570649
H 2.799789 -3.780120 3.361971
C 0.701147 -3.420616 3.677894
H 0.602473 -4.208665 4.435650
H 0.053842 -2.591920 4.003280
C 0.228276 -3.925986 2.323091

H -0.816890 -4.256532 2.377507
H 0.818218 -4.814368 2.048010
C 0.379691 -2.873828 1.230487
H -0.309696 -2.038183 1.404592
H 0.083587 -3.307541 0.267360
C -1.174707 1.333346 1.866356
H -0.560385 2.068171 2.406934
C -2.579670 1.907488 1.680394
H -3.159135 1.200049 1.063786
H -2.551760 2.848014 1.118144
C -3.282160 2.135670 3.013584
H -2.746802 2.916579 3.575936
H -4.296356 2.520078 2.839578
C -3.332833 0.866267 3.850623
H -3.963167 0.122732 3.338886
H -3.807034 1.060808 4.821722
C -1.939102 0.285448 4.038778
H -1.333673 0.980405 4.641509
H -1.985210 -0.656751 4.602708
C -1.257923 0.060119 2.696351
H -0.255875 -0.359926 2.837986
H -1.827735 -0.686104 2.118244
C -0.447566 2.735561 -0.522654
H -1.528079 2.850566 -0.705604
C 0.223410 2.773711 -1.890287
H 1.287841 2.513096 -1.780822
H -0.230388 1.998007 -2.521506
C 0.084926 4.131859 -2.565761
H -0.975721 4.299427 -2.812232
H 0.629283 4.135541 -3.519953
C 0.565029 5.261430 -1.667276
H 0.437119 6.231819 -2.165353
H 1.643915 5.143590 -1.480415
C -0.173880 5.236517 -0.337931
H 0.173311 6.050087 0.312886
H -1.245536 5.416261 -0.518968
C 0.003183 3.895830 0.366259

H -0.561822 3.898988 1.306295
H 1.057718 3.777510 0.639904
C -4.630964 -0.565861 -1.219281
C -5.052201 0.740342 -0.984858
C -3.639883 -0.794218 -2.210004
C -4.509138 1.822545 -1.686463
H -5.832594 0.916369 -0.244945
C -3.057791 0.306025 -2.885109
H -3.452107 -1.811679 -2.554766
C -3.509051 1.613621 -2.619410
H -4.870077 2.830186 -1.488958
H -2.386674 0.136255 -3.724355
H -3.075765 2.449910 -3.165635
C -5.238687 -1.702739 -0.449127
C -4.489818 -2.084138 0.840934
H -4.221449 -1.141610 1.344378
H -6.265315 -1.424659 -0.177838
H -5.314662 -2.594961 -1.088490
C -3.204205 -2.843587 0.563505
H -3.409707 -3.783259 0.031190
H -2.502062 -2.248154 -0.047013
H -2.684469 -3.089703 1.497099
C -5.399551 -2.882127 1.764678
H -4.887595 -3.141751 2.699615
H -6.306047 -2.319602 2.021197
H -5.714292 -3.820960 1.288165
C 2.233846 1.532464 1.188000
C 3.194669 2.324457 0.535339
C 2.090452 1.739363 2.569409
C 3.965109 3.260106 1.215310
H 3.310117 2.223118 -0.540271
C 2.842653 2.687746 3.254258
H 1.363531 1.142797 3.114884
C 3.788306 3.453327 2.581778
H 4.694313 3.856386 0.668778
H 2.691816 2.823039 4.324142
H 4.380323 4.193975 3.116017

6 Untersuchungen zu ylidsubstituierten Verbindungen der Gruppe XV

6.1 Energien der Verbindungen

Tabelle 6.1. Energien der ylidsubstituierten Pentele.

	E(SCF)	CorrH	CorrG
Y₃Sb	-5695.24618272	1.329905	1.123424
Y₃Bi	-5695.24347436	1.329202	1.121641

6.2 Ergebnisse der NBO- und QTAIM-Analysen

Tabelle 6.2. Ergebnisse der NBO-Analysen zu ylidsubstituierten Pentele.

		Y₃Sb	Y₃Bi
Natürliche Ladungen	E1	1.46653	1.60366
	O1	-0.98977	-0.99554
	O3	-0.98843	-0.98852
	O5	-0.97630	-0.97912
	C1	-1.41949	-1.44417
	C27	-1.44066	-1.43291
	C53	-1.45915	-1.46790
WIBERG Bond Indices	E1–O1	0.0612	0.0941
	E1–O3	0.0533	0.0890
	E1–O5	0.0058	0.0106
	E1–C1	0.7247	0.5492
	E1–C27	0.6374	0.6388
	E1–C53	0.6802	0.5815

Tabelle 6.3. Elektronendichten in $|e|/\text{Bohr}^3$ an ausgewählten bindungskritischen Punkten.

	E1–O1	E1–O3	E1–O5
Y₃Sb	–	–	–
Y₃Bi	0.02889741442	0.02504234867	–

Tabelle 6.4. $\lambda_2(\rho)$ an ausgewählten bindungskritischen Punkten.

	E1–O1	E1–O3	E1–O5
Y₃Sb	–	–	–
Y₃Bi	-0.2889741442	-0.02504234867	–

6.3 Koordinaten der Verbindungen

Y_3Sb

E = -5695.24618272

Sb -0.072181 -0.161008 -0.733686

C 1.676461 -1.205109 -0.028736

C 0.487467 1.866313 -0.138545

C -1.737455 -0.742051 0.613867

S -2.002171 -2.417487 0.426101

O -2.488363 -3.095392 1.630267

O -0.773227 -2.926555 -0.226732

C -3.259370 -2.721395 -0.819452

S 1.460765 2.200264 1.229343

O 1.479307 1.029373 2.125053

O 1.062825 3.481846 1.858829

C 3.165059 2.462602 0.763888

S 2.746496 -1.330441 -1.340679

O 4.156464 -1.401198 -0.918452

O 2.355033 -0.256412 -2.295644

C 2.496932 -2.826209 -2.296530

P -3.032075 0.245578 1.141612

C -2.735360 1.250298 2.621799

C -3.597951 1.394475 -0.157108

C -4.541180 -0.670417 1.579689

P 0.186180 3.240411 -1.141576

C 1.663445 4.252485 -1.506361

C -0.442951 2.720933 -2.762079

C -0.960322 4.482307 -0.466110

P 2.045954 -2.197952 1.339249

C 3.330687 -1.561027 2.463288

C 0.684912 -2.567946 2.488541

C 2.688619 -3.798414 0.764218

C -2.955371 -2.472969 -2.157006

C -4.493508 -3.239842 -0.462657

C -3.912209 -2.708915 -3.130232

C -5.176734 -3.210048 -2.793024

C -5.445623 -3.473689 -1.450702

C -6.201047 -3.466260 -3.857439
C -1.420344 1.545625 2.952878
C -3.781039 1.749723 3.406687
C -3.489211 2.549441 4.505163
C -2.165529 2.859321 4.819100
C -1.128059 2.358350 4.041560
C -3.574785 0.924868 -1.472442
C -4.211392 2.614426 0.128028
C -4.790829 3.359152 -0.892627
C -4.795806 2.870371 -2.195252
C -4.189090 1.652187 -2.483462
C -5.711360 -0.567217 0.827842
C -4.515475 -1.467213 2.728785
C -5.651119 -2.169620 3.105140
C -6.817034 -2.072873 2.348476
C -6.848324 -1.268514 1.215632
C 3.960179 3.158998 1.667917
C 3.698005 1.936848 -0.400648
C 5.308433 3.328863 1.387792
C 5.876847 2.804013 0.222557
C 5.052073 2.102848 -0.659381
C 7.328411 3.009683 -0.090815
C -1.569266 4.247996 0.759883
C -1.169344 5.698368 -1.126431
C -2.395955 5.213188 1.325224
C -2.629129 6.406967 0.654935
C -2.016519 6.649306 -0.574338
C 2.097054 5.166448 -0.540484
C 2.418644 4.062421 -2.665314
C 3.288665 5.855201 -0.724548
C 4.045905 5.652697 -1.873254
C 3.603249 4.764812 -2.847347
C -1.549705 3.328983 -3.353600
C 0.257527 1.729048 -3.461344
C -1.944481 2.961165 -4.635721
C -1.248584 1.977058 -5.327611
C -0.150688 1.359554 -4.736447

C 1.216773 -3.179202 -2.707902
C 3.593841 -3.598810 -2.646976
C 1.037718 -4.327385 -3.462284
C 2.124776 -5.130769 -3.824776
C 3.399839 -4.742996 -3.412719
C 1.915198 -6.398238 -4.598029
C 4.203579 -0.564399 2.039909
C 3.463575 -2.111476 3.741101
C 4.470409 -1.663441 4.586349
C 5.344597 -0.666839 4.160535
C 5.210992 -0.120585 2.889277
C 0.101884 -1.500547 3.173314
C 0.338113 -3.876242 2.831167
C -0.590371 -4.107779 3.838408
C -1.179187 -3.043192 4.508009
C -0.832953 -1.739541 4.172039
C 1.814319 -4.679472 0.115323
C 4.040796 -4.116459 0.880785
C 2.289568 -5.892364 -0.362990
C 3.636442 -6.218581 -0.227883
C 4.511197 -5.326855 0.381096
H -1.971051 -2.088078 -2.423105
H -4.699161 -3.447440 0.585701
H -3.674813 -2.509064 -4.174780
H -6.419782 -3.871473 -1.168523
H -5.860595 -4.241649 -4.556134
H -6.393314 -2.563255 -4.450707
H -7.151893 -3.797374 -3.427498
H -0.617754 1.138123 2.351695
H -4.815132 1.504919 3.168777
H -4.299502 2.932854 5.122619
H -1.947705 3.492229 5.677606
H -0.087080 2.598379 4.244653
H -3.096976 -0.025641 -1.692632
H -4.230494 2.990905 1.146891
H -5.244491 4.321805 -0.665008
H -5.266090 3.446765 -2.990284

H -4.176426 1.269961 -3.501417
H -5.737714 0.049046 -0.067240
H -3.596968 -1.555997 3.303738
H -5.623772 -2.800650 3.990864
H -7.705641 -2.625778 2.647887
H -7.757767 -1.189036 0.623679
H 3.512945 3.569774 2.569759
H 3.066319 1.392268 -1.097419
H 5.937031 3.876575 2.089367
H 5.469027 1.664196 -1.564465
H 7.894817 3.310442 0.797127
H 7.456900 3.796824 -0.846967
H 7.782144 2.097815 -0.496035
H -1.368642 3.315960 1.274946
H -0.657905 5.904333 -2.066286
H -2.851874 5.024253 2.295840
H -3.277337 7.162888 1.095018
H -2.184870 7.591246 -1.092730
H 1.521892 5.301939 0.372530
H 2.092211 3.363154 -3.429432
H 3.631326 6.547596 0.041579
H 4.981961 6.190886 -2.011117
H 4.186283 4.608262 -3.752599
H -2.122420 4.075472 -2.811266
H 1.121420 1.234775 -3.018942
H -2.810451 3.441293 -5.087981
H -1.562926 1.689318 -6.329417
H 0.398082 0.580676 -5.261583
H 0.361830 -2.581308 -2.402541
H 4.580591 -3.299842 -2.302646
H 0.031369 -4.612779 -3.767362
H 4.258815 -5.356001 -3.684004
H 1.632276 -7.222504 -3.927835
H 2.825857 -6.703899 -5.124493
H 1.110898 -6.292895 -5.335143
H 4.096502 -0.155190 1.042456
H 2.775457 -2.884406 4.079116

H 4.569127 -2.090029 5.582824
H 6.131073 -0.314136 4.825844
H 5.887144 0.660328 2.549173
H 0.417793 -0.489444 2.940180
H 0.796141 -4.722094 2.329047
H -0.856360 -5.131130 4.094636
H -1.906447 -3.231073 5.296371
H -1.277378 -0.895812 4.697884
H 0.772232 -4.394235 -0.023081
H 4.725871 -3.413771 1.348855
H 1.606727 -6.576515 -0.863266
H 4.008050 -7.166409 -0.613817
H 5.568064 -5.570849 0.469426

Y₃Bi

E = -5695.24347436
Bi -0.033537 -0.063599 -0.605592
C -1.818756 -1.231575 0.155734
C -0.519904 2.049864 0.201604
C 1.856938 -0.808840 0.586370
P -0.295669 3.298553 -0.946484
C 0.944535 4.597732 -0.622198
C -1.795594 4.236004 -1.382257
C 0.290758 2.476645 -2.465449
O -0.818919 3.531370 2.374003
S -1.364845 2.362513 1.646863
O -1.462913 1.099175 2.407013
C -3.055247 2.832890 1.307919
S 2.031499 -2.390292 0.008271
O 2.451459 -3.409556 0.974908
O 0.766127 -2.661651 -0.737148
C 3.284863 -2.421406 -1.272136
P 3.193132 0.032435 1.244048
C 2.832121 0.925362 2.775445
C 4.589400 -1.039188 1.709591
C 3.923357 1.294411 0.144768
C -3.499442 4.109645 1.624971

C -3.915411 1.900044 0.752608
C -5.240621 2.234712 0.521544
P -2.075073 -2.526229 1.248851
C -3.352163 -2.256944 2.518195
C -0.636848 -2.892255 2.279251
C -2.578031 -4.046699 0.393939
S -2.964626 -1.042935 -1.062289
O -4.352105 -1.167515 -0.576821
O -2.575869 0.211250 -1.779610
C -2.812105 -2.296651 -2.338306
C -5.715412 3.513917 0.823173
C -4.825172 4.440975 1.373704
C -7.127815 3.905953 0.510505
C 1.291095 4.916419 0.690319
C 1.472427 5.339056 -1.684397
C 2.141796 5.991375 0.935774
C 2.653295 6.739070 -0.119605
C 2.327718 6.404351 -1.432404
C -1.847518 5.630752 -1.339099
C -3.025487 6.293048 -1.667673
C -2.941539 3.509473 -1.726731
C -4.151198 5.570274 -2.044823
C -4.107168 4.179735 -2.071490
C -0.608695 1.923513 -3.380003
C 1.658064 2.209000 -2.595182
C 2.111474 1.386969 -3.620188
C 1.208102 0.814238 -4.509350
C -0.149860 1.086835 -4.390920
C 4.556906 -2.903934 -0.998248
C 2.980685 -1.887741 -2.521685
C 5.546605 -2.797195 -1.970979
C 5.276427 -2.242173 -3.223405
C 3.972545 -1.802438 -3.486080
C 6.340510 -2.149446 -4.275679
C 4.305057 -2.078226 2.600266
C 5.899825 -0.843026 1.269932
C 5.314350 -2.939643 3.006176

C 6.613849 -2.763639 2.539820
C 6.907195 -1.708737 1.682504
C 3.883048 2.652754 0.457618
C 4.535929 0.879302 -1.043684
C 5.125757 1.810010 -1.887789
C 5.082513 3.166248 -1.571744
C 4.456340 3.584729 -0.403791
C 1.516430 1.247103 3.074950
C 3.864039 1.307470 3.639335
C 1.211130 1.950323 4.235785
C 2.233502 2.325942 5.098099
C 3.558216 2.004698 4.800164
C -1.585218 -2.510081 -2.958044
C -3.929380 -3.025706 -2.715855
C -3.810806 -3.983991 -3.716599
C -2.590428 -4.224824 -4.347164
C -1.481751 -3.467065 -3.954585
C -2.455875 -5.299719 -5.383472
C -1.639123 -4.697778 -0.414816
C -3.903755 -4.482362 0.415229
C -4.277929 -5.595416 -0.330073
C -3.338088 -6.264015 -1.105285
C -2.022939 -5.808785 -1.153607
C -3.955923 -1.014070 2.652008
C -3.664866 -3.288208 3.409857
C -4.600292 -3.075128 4.411801
C -5.216715 -1.830414 4.535260
C -4.890311 -0.801887 3.660929
C -0.102116 -1.829847 3.012140
C -0.204751 -4.197043 2.511468
C 0.866146 -2.082362 3.974745
C 1.294957 -3.385920 4.210370
C 0.766765 -4.438953 3.474934
H 0.722694 0.933879 2.408478
H -0.701148 -1.958541 -2.644240
H -2.803217 4.818982 2.064592
H -3.538038 0.926262 0.468082

H -5.898908 1.485876 0.082611
H -5.178484 5.443718 1.612295
H -7.176686 4.439477 -0.450240
H -7.539583 4.578100 1.272088
H -7.781061 3.030509 0.432361
H 0.865198 4.338037 1.509355
H 1.205369 5.087887 -2.710303
H 2.398935 6.246402 1.962185
H 3.313247 7.582186 0.078000
H 2.734245 6.980638 -2.261406
H -0.974131 6.204593 -1.040948
H -3.061050 7.379911 -1.625840
H -2.929124 2.419917 -1.691686
H -5.071296 6.091398 -2.304183
H -4.993001 3.605851 -2.335847
H -1.673776 2.098883 -3.287475
H 2.365091 2.633172 -1.887321
H 3.173806 1.177379 -3.706355
H 1.564682 0.152707 -5.297619
H -0.865195 0.635873 -5.074931
H 4.764303 -3.341510 -0.023560
H 1.972980 -1.527012 -2.722930
H 6.551683 -3.154506 -1.750056
H 3.735913 -1.378921 -4.462404
H 6.232812 -2.955144 -5.014775
H 7.342387 -2.233517 -3.841914
H 6.282430 -1.201705 -4.823984
H 3.285935 -2.228749 2.943246
H 6.143509 -0.020440 0.604249
H 5.079219 -3.758512 3.682833
H 7.402452 -3.445088 2.853961
H 7.925478 -1.555379 1.330655
H 3.402493 2.987609 1.373548
H 4.572968 -0.176820 -1.297819
H 5.617015 1.471601 -2.798828
H 5.535120 3.897706 -2.238470
H 4.405492 4.641904 -0.157993

H 4.897675 1.052252 3.410688
H 0.172325 2.203998 4.430183
H 2.002233 2.872726 6.010615
H 4.356425 2.296652 5.480147
H -4.873076 -2.838997 -2.209493
H -4.686436 -4.563839 -4.006673
H -0.516086 -3.640510 -4.428242
H -3.411711 -5.505178 -5.877564
H -2.115419 -6.240052 -4.926723
H -1.722323 -5.030550 -6.151914
H -0.622155 -4.310524 -0.476504
H -4.644935 -3.943272 0.999940
H -5.312041 -5.933999 -0.310041
H -3.634364 -7.133815 -1.689299
H -1.291348 -6.313699 -1.781626
H -3.669057 -0.216667 1.980180
H -3.172505 -4.256558 3.319949
H -4.846676 -3.878646 5.103363
H -5.948251 -1.664295 5.324284
H -5.356181 0.176764 3.758767
H -0.474953 -0.818997 2.849401
H -0.624824 -5.026697 1.949010
H 1.276503 -1.254969 4.550560
H 2.047067 -3.580217 4.973743
H 1.109897 -5.456449 3.649378

7 Untersuchungen zu schweren ylidsubstituierten Gruppe XIII-Verbindungen

7.1 Energien der Verbindungen

Tabelle 7.1. Energien der Verbindungen.

	E(SCF)	CorrH	CorrG
Y_2BH	-3818.73708262	0.899654	0.755557
Y_2AlCl	-4496.61812526	0.890562	0.735501
Y_2GaCl	-6179.69918965	0.890039	0.733510
$\{Na[Y \rightarrow GaCl_3]\}_2$	-5204.40470756	0.452479	0.349327
$\{Na[Y \rightarrow GaCl_3]\}_2^a$	-5200.64107696	0.435903	0.327261
$(YGaCl_2)_2$	-9487.45779704	0.902657	0.731013
Y_3Al	-5932.60709521	1.330420	1.129647
Y_3In	-5691.79876573	1.328603	1.123348
88	-3887.71943718	0.938458	0.822887

7.2 Ergebnisse der NBO-Analysen

		Y_2BH	Y_2AlCl	Y_2GaCl	$(YGaCl_2)_2$	Y_3Al	Y_3In	88
WBI	E–O1	0.0054	0.2438	0.2063	0.3147/ 0.3147	0.2320	0.1656	–
	E–O3	0.0054	0.2437	0.2063	–	0.2363	0.1341	–
	E–O5	–	–	–	–	0.0647	0.1029	–
	E–C1	1.0823	0.3924	0.4872	0.4915/ 0.4915	0.3851	0.3419	0.6583
	E–C27	1.0823	0.3925	0.4872	–	0.3830	0.3071	–
	E–C53	–	–	–	–	0.4072	0.3692	–
Natürliche Ladungen	E	0.46673	1.70819	1.54972	1.42946/ 1.42945	1.85178	1.96942	1.60487
	O1	-0.93740	-1.01092	-0.97358	-1.00404/ -1.00403	-1.01493	-1.02722	–
	O3	-0.93739	-1.01088	-0.97359	–	-0.99844	-1.02090	–
	O5	–	–	–	–	-0.96238	-0.97903	–
	C1	-1.23670	-1.57793	-1.56472	-1.54909/ -1.54909	-1.52882	-1.55861	-1.90075
	C2	-1.23669	-1.57801	-1.56472	–	-1.51985	-1.54319	–
	C3	–	–	–	–	-1.61355	-1.60242	–

^a PB86/def2svp//PB86/def2tzvp

7.3 Koordinaten der Verbindungen

Y₂BH

E = -3818.73708262
 S 1.471464 -1.426456 -2.017338
 O 1.295368 -0.740681 -3.297818
 O 2.730095 -2.179009 -1.804460
 C 1.316428 -0.396051 -0.638565
 C 0.147177 -2.608236 -1.857058
 P 2.677068 -0.546431 0.417014
 C 4.278589 -0.133378 -0.319660
 C 2.493643 0.713183 1.712333
 C 2.808110 -2.158231 1.235525
 B 0.000046 -0.000008 0.000138
 C -1.316341 0.396007 -0.638535
 S -1.471428 1.426454 -2.017299
 O -1.295329 0.740719 -3.297812
 O -2.730089 2.178946 -1.804362
 C -0.147206 2.608284 -1.857000
 P -2.677017 0.546419 0.416995
 C -2.493614 -0.713160 1.712366
 C -4.278498 0.133315 -0.319716
 C -2.808091 2.158217 1.235503
 C 3.738434 -3.112550 0.823752
 C 1.793122 -2.511054 2.131716
 C 1.726453 -3.806386 2.627922
 C 2.661968 -4.755414 2.223582
 C 3.664355 -4.407975 1.323330
 C 2.844563 0.477778 3.040550
 C 2.060130 1.984166 1.320006
 C 2.744984 1.503984 3.976400
 C 2.307137 2.764480 3.586884
 C 1.969705 3.003887 2.256496
 C 4.349851 0.357020 -1.622585
 C 5.430982 -0.220460 0.463080
 C 6.656317 0.171295 -0.060925
 C 6.728746 0.661333 -1.361381

C 5.577843 0.755337 -2.137277
C -1.058166 -2.387342 -2.508874
C 0.334166 -3.710534 -1.028444
C -2.108189 -3.273302 -2.287125
C -1.964445 -4.373652 -1.438849
C -0.722028 -4.588285 -0.830452
C -3.123056 -5.278938 -1.147938
C -2.844695 -0.477788 3.040545
C -2.060003 -1.984128 1.320084
C -1.969660 -3.003858 2.256576
C -2.307273 -2.764481 3.586922
C -2.745196 -1.503999 3.976398
C -5.430926 0.220396 0.462965
C -4.349690 -0.357139 -1.622628
C -5.577641 -0.755521 -2.137356
C -6.728585 -0.661524 -1.361514
C -6.656228 -0.171426 -0.061081
C -3.738390 3.112549 0.823731
C -1.793139 2.510990 2.131764
C -3.664339 4.407952 1.323384
C -2.661994 4.755341 2.223693
C -1.726491 3.806291 2.628033
C 1.058153 2.387449 -2.508809
C -0.334286 3.710614 -1.028453
C 0.721844 4.588456 -0.830512
C 1.964287 4.373864 -1.438867
C 2.108117 3.273478 -2.287086
C 3.122862 5.279188 -1.147930
H 0.000046 -0.000068 1.211183
H 1.041782 -1.777346 2.421762
H 0.934709 -4.075317 3.324356
H 2.604692 -5.772718 2.606497
H 4.384600 -5.153966 0.993843
H 4.486510 -2.849592 0.079720
H 3.188279 -0.506992 3.350945
H 3.011786 1.314233 5.014172
H 2.232193 3.564527 4.321365

H 1.625229 3.986515 1.940042
H 1.785475 2.166161 0.282897
H 5.370580 -0.593825 1.485468
H 7.555152 0.097346 0.547894
H 7.688214 0.969701 -1.772445
H 5.634937 1.131834 -3.156626
H 3.451891 0.416291 -2.233568
H -1.156783 -1.519379 -3.158348
H -3.064349 -3.103362 -2.780382
H -0.581002 -5.458483 -0.189567
H 1.300574 -3.875450 -0.556403
H -3.612403 -4.985243 -0.207857
H -2.804251 -6.321672 -1.037183
H -3.880318 -5.231188 -1.937476
H -1.785189 -2.166105 0.283012
H -1.625147 -3.986475 1.940142
H -2.232409 -3.564536 4.321403
H -3.012120 -1.314259 5.014140
H -3.188476 0.506966 3.350919
H -3.451706 -0.416383 -2.233572
H -5.634674 -1.132064 -3.156692
H -7.688022 -0.969945 -1.772605
H -7.555089 -0.097471 0.547700
H -5.370591 0.593799 1.485341
H -4.486431 2.849621 0.079647
H -4.384568 5.153961 0.993901
H -2.604723 5.772629 2.606653
H -0.934782 4.075195 3.324519
H -1.041849 1.777235 2.421818
H -1.300712 3.875481 -0.556430
H 0.580758 5.458697 -0.189700
H 3.064285 3.103563 -2.780338
H 1.156818 1.519471 -3.158243
H 2.803855 6.321713 -1.035860
H 3.879560 5.232445 -1.938070
H 3.612992 4.984634 -0.208517

Y₂AlCl

E = -4496.61812526
 Cl 0.000037 -0.000282 -3.228680
 Al -0.000115 0.000142 -1.048134
 S -1.990818 1.428535 -0.071310
 O -2.253043 2.029663 1.244326
 O -0.704094 1.878155 -0.775682
 C -1.745201 -0.208925 -0.189144
 C -3.331004 1.957240 -1.118596
 S 1.990285 -1.428594 -0.070751
 O 2.252662 -2.029480 1.244953
 O 0.703549 -1.878226 -0.774969
 C 1.744722 0.208909 -0.188717
 C 3.330399 -1.957542 -1.118050
 P -2.717465 -1.335237 0.611702
 C -4.420153 -0.728052 0.739297
 C -2.754264 -2.883835 -0.323137
 C -2.163056 -1.752664 2.289114
 P 2.717630 1.335339 0.611194
 C 2.754766 2.883508 -0.324339
 C 2.163537 1.753889 2.288431
 C 4.420151 0.727743 0.738871
 C -3.393151 1.484091 -2.427244
 C -4.326613 2.767326 -0.597588
 C -4.482295 1.827042 -3.210122
 C -5.512603 2.634698 -2.709589
 C -5.413147 3.101746 -1.400277
 C -6.691643 2.977888 -3.569546
 C -5.286758 -0.922516 -0.339619
 C -4.800137 0.097892 1.799624
 C -6.056721 0.693208 1.793196
 C -6.924544 0.483361 0.727320
 C -6.535897 -0.317044 -0.343080
 C -3.368032 -4.013181 0.225357
 C -2.190885 -2.941123 -1.597800
 C -2.244116 -4.130304 -2.317552
 C -2.861173 -5.251156 -1.775374

C -3.425080 -5.192747 -0.502876
C -0.798390 -1.621282 2.544593
C -3.018479 -2.226830 3.287286
C -2.503637 -2.559935 4.534653
C -1.139214 -2.432149 4.784081
C -0.286561 -1.968083 3.788170
C 4.325794 -2.767874 -0.596988
C 3.392664 -1.484539 -2.426729
C 4.481713 -1.827856 -3.209600
C 5.511800 -2.635734 -2.709016
C 5.412223 -3.102653 -1.399653
C 6.690779 -2.979277 -3.568918
C 5.286819 0.921732 -0.340091
C 4.799955 -0.097973 1.799436
C 6.056430 -0.693513 1.793215
C 6.924326 -0.484116 0.727311
C 6.535856 0.316050 -0.343333
C 0.798745 1.623642 2.543908
C 3.019248 2.227880 3.286433
C 2.504595 2.561881 4.533641
C 1.140070 2.435208 4.783070
C 0.287117 1.971363 3.787313
C 2.191343 2.940416 -1.599001
C 3.368793 4.012936 0.223694
C 2.244818 4.129302 -2.319228
C 2.862147 5.250227 -1.777514
C 3.426081 5.192195 -0.505005
H -2.594951 0.851834 -2.815187
H -4.244948 3.110966 0.430468
H -4.538798 1.460473 -4.234442
H -6.204242 3.731512 -0.995133
H -6.376503 3.479650 -4.493226
H -7.391075 3.638951 -3.047601
H -7.239590 2.074555 -3.868154
H -4.976008 -1.543197 -1.178397
H -4.107671 0.288081 2.616497
H -6.353278 1.332914 2.621971

H -7.904899 0.956151 0.723727
 H -7.207344 -0.468139 -1.185808
 H -3.795893 -3.973358 1.225784
 H -1.703574 -2.065262 -2.021037
 H -1.792409 -4.175181 -3.306151
 H -2.899445 -6.179183 -2.342991
 H -3.903947 -6.071256 -0.075151
 H -0.133946 -1.252566 1.768351
 H -4.086871 -2.321022 3.096409
 H -3.170266 -2.919483 5.316254
 H -0.741309 -2.696601 5.762217
 H 0.782768 -1.871710 3.962759
 H 4.244025 -3.111406 0.431098
 H 2.594636 -0.852115 -2.814751
 H 4.538281 -1.461393 -4.233954
 H 6.203144 -3.732620 -0.994483
 H 7.239446 -2.076153 -3.866864
 H 6.375517 -3.480273 -4.492957
 H 7.389638 -3.641109 -3.047170
 H 4.976210 1.542225 -1.179061
 H 4.107443 -0.287792 2.616352
 H 6.352847 -1.333050 2.622168
 H 7.904592 -0.957089 0.723889
 H 7.207377 0.466824 -1.186059
 H 0.134033 1.255060 1.767842
 H 4.087714 2.321271 3.095547
 H 3.171454 2.921278 5.315117
 H 0.742337 2.700381 5.761082
 H -0.782301 1.875864 3.961826
 H 1.703812 2.064505 -2.021888
 H 3.796648 3.973407 1.224135
 H 1.793089 4.173883 -3.307830
 H 2.900607 6.178024 -2.345495
 H 3.905151 6.070769 -0.077642

Y_2GaCl

E = -6179.69918965

Ga 0.000044 0.000152 -0.999540
 C -1.751476 0.171377 -0.163615
 C 1.751554 -0.171393 -0.163671
 O 0.839213 2.052705 -0.610677
 Cl 0.000016 0.000420 -3.219906
 O -0.839096 -2.052595 -0.611154
 S 2.071758 1.459497 0.038813
 S -2.071660 -1.459578 0.038424
 O 2.401507 1.921246 1.396780
 C 3.452971 1.934315 -0.981674
 O -2.401493 -1.921621 1.396273
 C -3.452878 -1.934048 -0.982216
 P 2.645600 -1.381786 0.613351
 C 2.588838 -2.898715 -0.372299
 C 4.377855 -0.870702 0.758573
 C 2.068761 -1.823973 2.276088
 P -2.645556 1.381504 0.613760
 C -2.588613 2.898816 -0.371276
 C -4.377852 0.870415 0.758529
 C -2.068923 1.823054 2.276734
 C 3.479708 1.527575 -2.313734
 C 4.500481 2.650736 -0.427139
 C 5.603441 2.956215 -1.219008
 C 5.668420 2.551368 -2.550922
 C 4.586714 1.837947 -3.085192
 C 6.863820 2.862888 -3.400431
 C 2.893637 -2.382739 3.256447
 C 0.711776 -1.634777 2.533656
 C 0.173380 -2.011378 3.756830
 C 0.995964 -2.560155 4.734616
 C 2.354534 -2.742593 4.486076
 C 2.163489 -2.842572 -1.699837
 C 2.990182 -4.115751 0.183929
 C 2.974092 -5.268560 -0.588746
 C 2.548060 -5.212851 -1.913339
 C 2.140823 -4.003826 -2.464283
 C 5.232543 -1.074884 -0.327974

C 4.806441 -0.115825 1.852461
C 6.517322 -0.550030 -0.306899
C 6.953119 0.179241 0.795946
C 6.098093 0.398809 1.869971
C -4.500360 -2.650689 -0.427907
C -3.479528 -1.527062 -2.314195
C -4.586503 -1.837282 -3.085775
C -5.668303 -2.550650 -2.551650
C -5.603268 -2.956015 -1.219890
C -6.864752 -2.859918 -3.400502
C -5.232385 1.075050 -0.328054
C -4.806591 0.115058 1.852031
C -6.517161 0.550161 -0.307384
C -6.953111 -0.179588 0.795084
C -6.098239 -0.399597 1.869140
C -0.711889 1.634058 2.534229
C -2.893925 2.381235 3.257314
C -0.173582 2.010271 3.757560
C -0.996303 2.558443 4.735576
C -2.354908 2.740680 4.487102
C -2.989895 4.115617 0.185513
C -2.163346 2.843228 -1.698862
C -2.140701 4.004818 -2.462796
C -2.547887 5.213614 -1.911301
C -2.973831 5.268766 -0.586658
H 2.642401 0.966349 -2.728300
H 4.445691 2.942268 0.618729
H 6.435231 3.511643 -0.787447
H 4.617005 1.520377 -4.126869
H 7.611247 3.439832 -2.846211
H 6.579669 3.442061 -4.288244
H 7.344722 1.943631 -3.759591
H 3.956388 -2.525582 3.064714
H 0.071931 -1.196923 1.773841
H -0.892464 -1.874169 3.924704
H 0.579200 -2.849298 5.697791
H 2.997500 -3.168454 5.254077

H 1.836531 -1.898934 -2.131376
 H 3.302948 -4.166438 1.225066
 H 3.285179 -6.215911 -0.153143
 H 2.526200 -6.119981 -2.514541
 H 1.792358 -3.957323 -3.493747
 H 4.885247 -1.639778 -1.191494
 H 4.124279 0.085086 2.675164
 H 7.179711 -0.708101 -1.155459
 H 7.961339 0.589030 0.811598
 H 6.432360 0.984056 2.724249
 H -4.445482 -2.942695 0.617825
 H -2.642109 -0.965932 -2.728665
 H -4.616623 -1.519750 -4.127468
 H -6.434917 -3.511854 -0.788582
 H -7.602454 -3.455739 -2.853269
 H -6.579291 -3.418109 -4.301115
 H -7.358446 -1.939346 -3.738658
 H -4.884992 1.640344 -1.191270
 H -4.124539 -0.086193 2.674742
 H -7.179448 0.708628 -1.155956
 H -7.961323 -0.589410 0.810415
 H -6.432628 -0.985203 2.723124
 H -0.071934 1.196657 1.774247
 H -3.956698 2.523962 3.065613
 H 0.892298 1.873245 3.925363
 H -0.579613 2.847270 5.698878
 H -2.997979 3.166061 5.255281
 H -3.302577 4.165848 1.226699
 H -1.836437 1.899758 -2.130818
 H -1.792298 3.958776 -3.492302
 H -2.526048 6.120995 -2.512125
 H -3.284866 6.215938 -0.150628

$\{Na[Y \rightarrow GaCl_3]\}_2$

PW6B95

E = -5204.40470756

O 0.861669 0.245316 -2.783587

S 0.709770 -0.891456 -1.852256
O 0.414475 -2.215474 -2.406067
C -0.373934 -0.572193 -0.591977
C 2.325301 -1.042915 -1.068903
Ga -1.779295 -1.894364 -0.211646
P -0.366206 0.960659 0.120873
C 2.463135 -1.860881 0.049643
C 3.407422 -0.339758 -1.571721
Cl -2.967576 -2.548167 -1.944541
Cl -0.922234 -3.592562 0.954326
Cl -3.272121 -0.847296 1.092637
C -1.580263 2.147154 -0.550026
C 1.234314 1.830613 0.002004
C -0.655227 0.835160 1.914371
C 3.693785 -1.935116 0.684236
C 4.638543 -0.430350 -0.929057
C -2.610852 1.634506 -1.337679
C -1.494960 3.523379 -0.322922
C 2.194455 1.660984 1.002070
C 1.540253 2.593197 -1.127131
C -0.248578 -0.340461 2.547066
C -1.230754 1.862208 2.659454
C 4.798153 -1.213474 0.212931
C -3.562504 2.495812 -1.872632
C -2.446869 4.379807 -0.862881
C 3.440889 2.262326 0.882336
C 2.787467 3.195898 -1.239315
C -0.411737 -0.479885 3.919347
C -1.388300 1.718226 4.032542
C 6.109355 -1.262233 0.941280
C -3.484668 3.863569 -1.634205
C 3.736912 3.034807 -0.235768
C -0.977572 0.548681 4.664403
H 1.600373 -2.422992 0.411206
H 3.257295 0.291518 -2.444924
H 3.803862 -2.566818 1.565968
H 5.488141 0.135545 -1.312265

H -2.652946 0.565080 -1.541502
H -0.669064 3.927495 0.261894
H 1.968865 1.048472 1.872247
H 0.808600 2.688644 -1.924645
H 0.152296 -1.159822 1.952304
H -1.582694 2.765818 2.168029
H -4.365833 2.089799 -2.484067
H -2.374725 5.452145 -0.688013
H 4.185723 2.117615 1.662777
H 3.021134 3.785667 -2.123926
H -0.115255 -1.410522 4.399008
H -1.848937 2.518529 4.609413
H 6.932006 -0.906669 0.310470
H 6.087486 -0.628995 1.840160
H 6.349334 -2.279947 1.272974
H -4.229977 4.534021 -2.059833
H 4.715152 3.503906 -0.330551
H -1.114850 0.433543 5.738571

PB86

E = -5200.64107696
O 1.016085 0.536640 -2.670359
S 1.063024 -0.655888 -1.756641
O 1.035860 -2.020242 -2.357774
C -0.125928 -0.592950 -0.500942
C 2.710026 -0.556208 -0.951209
Ga -1.092133 -2.303616 -0.101365
P -0.687011 0.922241 0.082586
C 3.106511 -1.571495 -0.058492
C 3.584227 0.490170 -1.275850
Cl -2.194385 -3.186749 -1.834312
Cl 0.257078 -3.812984 0.881827
Cl -2.734718 -1.818437 1.375745
C -2.292695 1.527936 -0.633998
C 0.458337 2.357517 -0.168800
C -0.909116 0.876487 1.922075
C 4.383696 -1.514787 0.516078

C 4.863586 0.531745 -0.689802
C -3.074404 0.612820 -1.369159
C -2.734290 2.863028 -0.487239
C 1.356134 2.743265 0.849021
C 0.463370 3.055968 -1.397563
C -0.074207 0.005174 2.653337
C -1.817855 1.708207 2.607135
C 5.285753 -0.465156 0.213165
C -4.296151 1.027033 -1.928190
C -3.955149 3.271689 -1.051687
C 2.236326 3.821413 0.649287
C 1.340399 4.135616 -1.589717
C -0.136756 -0.016462 4.056379
C -1.879568 1.679273 4.010575
C 6.661603 -0.427040 0.843756
C -4.740988 2.350736 -1.768284
C 2.226909 4.522631 -0.568239
C -1.035625 0.821818 4.738520
H 2.409267 -2.392498 0.185429
H 3.246706 1.258434 -1.988398
H 4.692607 -2.309204 1.217620
H 5.550202 1.358131 -0.943565
H -2.719949 -0.420215 -1.525261
H -2.111788 3.596900 0.049941
H 1.367058 2.200232 1.806239
H -0.205430 2.737971 -2.208972
H 0.595604 -0.678548 2.107108
H -2.500349 2.364861 2.047085
H -4.898725 0.301394 -2.497318
H -4.289460 4.316059 -0.937297
H 2.932591 4.111099 1.452704
H 1.337708 4.671151 -2.552842
H 0.509355 -0.711163 4.616502
H -2.601359 2.324456 4.537709
H 7.238912 0.460012 0.511609
H 6.602404 -0.394361 1.953894
H 7.255119 -1.331198 0.584222

H -5.697935 2.670908 -2.212495
H 2.915258 5.369490 -0.724654
H -1.090904 0.795928 5.839230

(YGaCl₂)₂

E = -9487.45779704

Ga 1.097790 1.806120 -1.429763
O -0.750670 1.268332 -1.694781
C 1.993239 0.480682 -0.298668
Cl 0.965153 3.763804 -0.469599
Cl 1.878044 1.931622 -3.469041
O 0.750473 -1.268243 -1.694609
S 1.828056 -1.141648 -0.615477
Ga -1.097881 -1.806276 -1.429128
O 1.639138 -1.983022 0.575010
C 3.269537 -1.788075 -1.434062
P 3.003636 0.903915 1.027720
C 2.125219 1.136227 2.593038
C 3.817244 2.467170 0.623009
C 4.316433 -0.316550 1.331347
S -1.828212 1.141810 -0.615609
O -1.639494 1.983575 0.574627
C -1.993110 -0.480452 -0.298287
C -3.269821 1.787675 -1.434431
Cl -1.878355 -1.932544 -3.468286
Cl -0.964919 -3.763746 -0.468587
P -3.003542 -0.903471 1.028166
C -4.316435 0.316947 1.331551
C -3.816929 -2.466905 0.623710
C -2.125150 -1.135459 2.593541
C 3.885252 -1.048333 -2.439284
C 3.771578 -3.011805 -1.020064
C 5.040709 -1.548181 -3.018082
C 5.587065 -2.772361 -2.611744
C 4.931725 -3.494839 -1.614991
C 6.847211 -3.285023 -3.240797
C 4.088105 -1.413899 2.165304

C 5.527263 -0.211615 0.641511
C 5.068629 -2.386302 2.316116
C 6.273866 -2.275853 1.631221
C 6.500965 -1.190066 0.791757
C 3.984439 3.470513 1.575442
C 4.223633 2.676980 -0.697712
C 4.792082 3.889722 -1.060644
C 4.956473 4.891976 -0.110656
C 4.556647 4.680885 1.204584
C 0.782435 1.505303 2.524621
C 2.762381 1.028951 3.833705
C 2.047456 1.278546 4.998670
C 0.706948 1.651739 4.928561
C 0.079428 1.767307 3.694333
C -3.885373 1.047441 -2.439391
C -3.772171 3.011413 -1.020834
C -5.040962 1.546795 -3.018341
C -5.587611 2.770988 -2.612428
C -4.932454 3.493953 -1.615912
C -6.847709 3.283278 -3.241885
C -5.527307 0.211741 0.641825
C -4.088152 1.414508 2.165238
C -6.501080 1.190148 0.791901
C -6.274012 2.276159 1.631083
C -5.068742 2.386871 2.315876
C -3.983522 -3.470346 1.576147
C -4.223506 -2.676840 -0.696934
C -4.791502 -3.889812 -1.059805
C -4.955260 -4.892171 -0.109821
C -4.555286 -4.680945 1.205354
C -0.782380 -1.504601 2.525209
C -2.762329 -1.027925 3.834174
C -2.047424 -1.277317 4.999198
C -0.706929 -1.650570 4.929177
C -0.079398 -1.766406 3.694978
H 3.457248 -0.100226 -2.764894
H 5.530269 -0.977144 -3.805907

H 5.340105 -4.450825 -1.290429
H 3.261274 -3.559146 -0.231721
H 7.131286 -4.260932 -2.834416
H 7.682419 -2.592409 -3.073981
H 6.731913 -3.390734 -4.326850
H 4.884695 -3.238765 2.966660
H 3.137158 -1.511418 2.681022
H 7.439588 -1.103094 0.248689
H 7.037910 -3.042092 1.748121
H 5.710508 0.635052 -0.015558
H 4.052323 1.908747 -1.450598
H 5.385687 5.849260 -0.400015
H 5.081115 4.057468 -2.095625
H 4.672254 5.470834 1.943746
H 3.640304 3.320632 2.596193
H 3.812340 0.746399 3.890211
H 2.539405 1.184998 5.964913
H 0.150026 1.845327 5.843517
H -0.968828 2.051641 3.628915
H 0.271201 1.573197 1.568495
H -3.457146 0.099328 -2.764688
H -5.530415 0.975351 -3.805938
H -5.341089 4.449923 -1.291623
H -3.262032 3.559138 -0.232651
H -7.682307 2.589443 -3.077178
H -6.731344 3.391000 -4.327633
H -7.133273 4.258204 -2.834190
H -5.710533 -0.635099 -0.015023
H -7.439731 1.102964 0.248916
H -7.038110 3.042365 1.747846
H -4.884834 3.239502 2.966207
H -3.137190 1.512216 2.680900
H -4.052660 -1.908515 -1.449827
H -5.080648 -4.057644 -2.094740
H -5.384091 -5.849642 -0.399129
H -4.670406 -5.470973 1.944507
H -3.639237 -3.320356 2.596831

H -3.812281 -0.745339 3.890614
H -2.539385 -1.183565 5.965415
H -0.150023 -1.844000 5.844176
H 0.968849 -2.050790 3.629627
H -0.271140 -1.572697 1.569099

Y₃Al

E = -5932.60709521
S -0.295886 1.742084 1.745247
O 0.432337 2.797047 2.469393
O 0.333659 0.349574 1.792073
C -0.528345 1.858426 0.104736
C -1.817869 1.525622 2.654212
Al 0.305152 0.063622 -0.242543
S -1.152598 -1.390365 -1.950241
O -0.950404 -2.549551 -2.838462
O -0.226426 -0.201308 -2.177029
C -0.943618 -1.557431 -0.299093
C -2.760268 -0.761334 -2.405907
S 2.914493 0.974788 -1.489802
O 1.853680 1.921870 -1.895349
O 3.758189 0.421345 -2.567137
C 2.232965 -0.181026 -0.472934
C 4.049874 1.913676 -0.452738
P -0.950290 3.378636 -0.557159
C 0.365561 4.599601 -0.808001
C -1.734447 3.200541 -2.176425
C -2.150573 4.153189 0.566509
P -1.666853 -2.912031 0.450028
C -2.012370 -2.626054 2.201024
C -3.257438 -3.274261 -0.348794
C -0.719584 -4.465199 0.404219
P 3.183189 -1.540086 -0.137718
C 2.698659 -2.225536 1.475016
C 3.103901 -2.867398 -1.380682
C 4.974548 -1.184217 -0.030378
C -2.018787 2.205309 3.842748

C -2.780084 0.654995 2.149654
C -3.207329 2.005240 4.541329
H -1.248636 2.885807 4.197854
C -4.189319 1.140535 4.061724
H -3.374709 2.536309 5.477664
C -3.957786 0.472641 2.851619
C -5.458038 0.900842 4.822703
H -4.713088 -0.214521 2.470869
H -2.578179 0.124512 1.218497
H -5.515552 -0.141783 5.164505
H -6.341414 1.079970 4.196839
H -5.529161 1.547191 5.703483
C -3.413118 3.565560 0.702644
C -1.775439 5.187627 1.421825
C -4.305865 4.035733 1.653751
H -3.681303 2.720098 0.071087
C -3.932787 5.080551 2.496118
H -5.283972 3.569901 1.756324
C -2.668914 5.647466 2.385180
H -4.627126 5.442807 3.252000
H -2.370731 6.451662 3.054773
H -0.780657 5.620877 1.342335
C 1.584813 4.421363 -0.165086
C 0.169654 5.690331 -1.658168
C 1.201056 6.598829 -1.856176
H -0.778690 5.818594 -2.178350
C 2.427079 6.410947 -1.221100
H 1.055178 7.446902 -2.522509
C 2.620495 5.323160 -0.377357
H 3.239639 7.114016 -1.396240
H 3.582538 5.155349 0.103935
H 1.714226 3.564105 0.484790
C -1.063957 2.417015 -3.119203
C -2.950022 3.808532 -2.499375
C -3.521558 3.585444 -3.747034
H -3.456444 4.447826 -1.779533
C -2.888755 2.750894 -4.663367

H -4.470497 4.056593 -3.998550
C -1.659270 2.179439 -4.352434
H -3.350988 2.555906 -5.629580
H -1.151589 1.539698 -5.071059
H -0.090533 1.990961 -2.883137
C -3.444086 -1.326339 -3.468893
C -3.290101 0.310555 -1.693946
C -4.683545 -0.803650 -3.827494
H -2.999913 -2.166875 -3.995995
C -5.242826 0.266381 -3.132134
H -5.226169 -1.238882 -4.665848
C -4.529682 0.807117 -2.054713
C -6.554493 0.863949 -3.540808
H -4.951345 1.652416 -1.511952
H -2.711623 0.747293 -0.878878
H -7.054354 0.260556 -4.305495
H -6.403635 1.871434 -3.953162
H -7.234753 0.967290 -2.686316
C -1.021040 -1.998057 2.952455
C -3.206540 -3.022351 2.809299
C -1.244355 -1.714905 4.293929
H -0.093574 -1.692562 2.480668
C -2.443196 -2.081570 4.894644
H -0.475433 -1.194734 4.860907
C -3.416890 -2.748666 4.156032
H -2.620881 -1.849510 5.943201
H -4.349904 -3.051277 4.628132
H -3.973924 -3.535824 2.234296
C 0.020576 -4.755600 -0.744169
C -0.726623 -5.357161 1.477857
C 0.013105 -6.532028 1.404956
H -1.293159 -5.126923 2.377828
C 0.749523 -6.822893 0.260391
H 0.016486 -7.221603 2.247257
C 0.744353 -5.940555 -0.815892
H 1.328683 -7.743075 0.206681
H 1.313774 -6.163827 -1.714106

H 0.017898 -4.056564 -1.578443
C -3.403009 -4.312961 -1.266169
C -4.306630 -2.368225 -0.154954
C -4.596393 -4.453214 -1.968719
H -2.582689 -5.005114 -1.440912
C -5.641206 -3.561672 -1.759605
H -4.704728 -5.262883 -2.687392
C -5.495732 -2.515786 -0.851740
H -6.569893 -3.671861 -2.316285
H -6.300910 -1.798842 -0.705309
H -4.175112 -1.531861 0.529993
C 3.733375 2.156249 0.880831
C 5.241561 2.377114 -0.989039
C 6.123744 3.087341 -0.181097
H 5.471799 2.152180 -2.028203
C 5.834153 3.337053 1.161409
H 7.065113 3.443053 -0.599273
C 4.620336 2.867185 1.676078
C 6.814287 4.052641 2.042685
H 4.365335 3.059761 2.717751
H 2.794833 1.782447 1.290458
H 6.306220 4.664543 2.796794
H 7.477529 4.703408 1.462336
H 7.450654 3.336721 2.582333
C 5.746843 -1.246342 -1.193725
C 5.552527 -0.709824 1.149453
C 7.076638 -0.843828 -1.169899
H 5.295571 -1.575168 -2.125234
C 7.645015 -0.370154 0.006638
H 7.666196 -0.889410 -2.083396
C 6.880675 -0.303830 1.166634
H 8.684463 -0.046986 0.019519
H 7.316501 0.070250 2.091087
H 4.966758 -0.645463 2.061758
C 2.276657 -2.652261 -2.478474
C 3.905990 -4.012378 -1.318090
C 2.215334 -3.600388 -3.496104

H 1.695669 -1.734440 -2.535823
 C 3.010790 -4.737750 -3.434439
 H 1.541746 -3.435164 -4.333970
 C 3.861557 -4.942371 -2.346973
 H 2.976428 -5.470512 -4.239291
 H 4.492555 -5.828519 -2.306072
 H 4.582318 -4.160154 -0.476376
 C 2.453458 -3.580503 1.702336
 C 2.624040 -1.323513 2.543297
 C 2.361697 -1.779563 3.827872
 H 2.745693 -0.260964 2.349842
 C 2.139646 -3.134776 4.053714
 H 2.313557 -1.068341 4.650346
 C 2.170390 -4.028375 2.989514
 H 1.924184 -3.492843 5.058863
 H 1.973635 -5.085046 3.154843
 H 2.470095 -4.290558 0.879209

Y₃In

E = -5691.79876573
 In 0.384430 0.176293 -0.295135
 C 2.469663 -0.132575 -0.401684
 C -0.730014 1.970353 0.110372
 C -0.902363 -1.618884 -0.243294
 O -0.245254 -0.466702 -2.341947
 O 0.301647 0.786474 2.041813
 S -1.103480 -1.646126 -1.909819
 S -0.555993 2.009352 1.769086
 O -0.095121 3.262210 2.392277
 C -2.110072 1.629673 2.571638
 O -0.849966 -2.907752 -2.631875
 C -2.748084 -1.156396 -2.401118
 S 3.042124 1.132736 -1.350654
 O 3.982531 0.750034 -2.417915
 O 1.825594 1.899712 -1.748965
 C 3.970473 2.217776 -0.263977
 P -1.259242 3.405428 -0.649026

C -2.586698 4.129312 0.355004
C -1.924049 3.040820 -2.290412
C -0.020664 4.704396 -0.903989
P -1.489071 -2.969715 0.614645
C -1.966586 -2.606424 2.325638
C -3.003908 -3.579374 -0.183285
C -0.367679 -4.402017 0.699376
P 3.513936 -1.444640 -0.171069
C 2.997920 -2.361192 1.308016
C 3.580244 -2.649709 -1.534221
C 5.220188 -0.890462 0.121637
C -2.450965 2.275915 3.748649
C -2.950665 0.670844 2.011755
C -4.135752 0.352274 2.652208
C -4.496383 0.971332 3.854762
C -3.643012 1.938795 4.384657
C -5.751720 0.563723 4.564355
C -2.349108 5.227114 1.180145
C -3.796932 3.434623 0.455783
C -3.327962 5.640692 2.078606
C -4.538373 4.962034 2.157840
C -4.774248 3.856093 1.344910
C 1.219045 4.575594 -0.287855
C -0.283748 5.795060 -1.737350
C 2.206473 5.528687 -0.506867
C 1.945354 6.616046 -1.332208
C 0.699531 6.753071 -1.943066
C -3.161188 3.512615 -2.736214
C -1.141826 2.230385 -3.115841
C -1.631865 1.835405 -4.354021
C -2.877674 2.276873 -4.787038
C -3.631492 3.131617 -3.988152
C -3.331821 -0.050213 -1.789767
C -3.411748 -1.865409 -3.387567
C -4.605008 0.332861 -2.172227
C -5.302159 -0.359788 -3.170688
C -4.687350 -1.457932 -3.768548

C -6.664246 0.099893 -3.594536
C -2.995260 -4.680055 -1.036786
C -4.162971 -2.805667 -0.054634
C -5.312352 -3.150918 -0.748324
C -5.306288 -4.262851 -1.587529
C -4.150311 -5.019477 -1.735631
C 0.574242 -4.541412 -0.318032
C -0.487216 -5.390011 1.680026
C 1.380218 -5.673359 -0.373183
C 1.249734 -6.663819 0.593720
C 0.321740 -6.518172 1.623058
C -3.039139 -3.266397 2.935032
C -1.245644 -1.655938 3.043470
C -3.385488 -2.962474 4.246876
C -2.662950 -2.007994 4.958906
C -1.594009 -1.357698 4.355660
C 5.152444 2.786872 -0.709590
C 3.508114 2.455763 1.028896
C 5.879591 3.606596 0.149297
C 5.440893 3.862123 1.448266
C 4.239813 3.277495 1.871201
C 6.239998 4.719401 2.383918
C 6.134077 -0.771601 -0.926696
C 5.538576 -0.380165 1.383198
C 6.767241 0.227777 1.598540
C 7.684914 0.328102 0.556604
C 7.367552 -0.170280 -0.701622
C 2.533363 -2.609496 -2.453183
C 4.589223 -3.608589 -1.671213
C 4.531721 -4.529434 -2.710750
C 3.464841 -4.504826 -3.607834
C 2.464539 -3.547924 -3.476821
C 3.326292 -3.705587 1.492728
C 2.306045 -1.675001 2.307728
C 2.959658 -4.358515 2.661362
C 2.269084 -3.674604 3.656700
C 1.948353 -2.334729 3.479271

H -1.784418 3.038801 4.144241
H -2.650032 0.165926 1.093283
H -4.790704 -0.409678 2.229733
H -3.915399 2.439687 5.312996
H -5.970222 1.221382 5.412021
H -5.656963 -0.461724 4.948594
H -6.617442 0.574153 3.890745
H -1.390855 5.739893 1.134624
H -3.954227 2.541858 -0.147545
H -3.136918 6.493427 2.726875
H -5.298055 5.286342 2.866677
H -5.709299 3.305031 1.423727
H 1.402316 3.719238 0.349905
H -1.248500 5.886123 -2.235827
H 3.182949 5.404229 -0.041563
H 2.719047 7.360727 -1.511281
H 0.501246 7.602290 -2.594242
H -3.761871 4.166176 -2.107126
H -0.157435 1.900290 -2.791447
H -1.031572 1.171694 -4.971897
H -3.261653 1.959491 -5.754898
H -4.597513 3.495157 -4.334764
H -2.774893 0.503395 -1.032664
H -2.927268 -2.730124 -3.834132
H -5.067938 1.202338 -1.707064
H -5.216718 -2.010325 -4.544042
H -6.609629 1.090952 -4.065333
H -7.342422 0.191260 -2.736746
H -7.117266 -0.588878 -4.314979
H -2.083572 -5.258523 -1.168039
H -4.149224 -1.921030 0.580477
H -6.208634 -2.542053 -0.649459
H -6.205376 -4.530653 -2.139435
H -4.141543 -5.878094 -2.403910
H 0.655467 -3.768189 -1.075293
H -1.209160 -5.278951 2.487070
H 2.113700 -5.764636 -1.172889

H 1.878654 -7.551682 0.553322
 H 0.229420 -7.287958 2.387063
 H -3.614547 -4.006545 2.382309
 H -0.448656 -1.095880 2.566345
 H -4.226069 -3.472964 4.713344
 H -2.945190 -1.763201 5.981444
 H -1.042142 -0.585007 4.888002
 H 5.497939 2.562758 -1.716234
 H 2.586587 1.988593 1.376929
 H 6.813825 4.048829 -0.195436
 H 3.871572 3.467601 2.878643
 H 5.608609 5.466725 2.879694
 H 7.043811 5.246026 1.858806
 H 6.701155 4.114056 3.176295
 H 5.865806 -1.115284 -1.922431
 H 4.812989 -0.442535 2.192531
 H 7.006523 0.630187 2.580782
 H 8.647122 0.808578 0.724540
 H 8.076592 -0.076222 -1.521721
 H 1.764993 -1.844960 -2.360094
 H 5.427715 -3.625487 -0.975549
 H 5.322629 -5.268849 -2.822987
 H 3.420328 -5.233254 -4.415730
 H 1.617453 -3.520793 -4.158690
 H 3.845022 -4.256386 0.712756
 H 2.051919 -0.625763 2.170046
 H 3.203955 -5.410833 2.788711
 H 1.977881 -4.189101 4.570558
 H 1.411825 -1.793134 4.254462

88

E = -3887.71943718
 Ga 0.478191 -2.014171 1.717088
 C 1.369323 -0.686219 2.901332
 C 0.181808 -3.758588 2.617349
 Si -0.229205 -3.292339 -1.066633
 C -0.525519 -3.159588 -2.933716

C -1.718044 -4.263293 -0.424185
C 1.315065 -4.375775 -0.930545
C 0.036645 -1.731772 -0.134767
C -0.322039 0.011314 -2.493551
P -0.116497 -0.156896 -0.692889
N -1.412072 0.797425 -0.096563
N 1.252005 0.813032 -0.338403
C -1.336618 1.251510 1.293911
C -2.066683 0.362677 2.306093
C -1.879195 0.875587 3.728033
C -2.337828 2.320924 3.861332
C -1.624267 3.211910 2.854084
C -1.813488 2.696734 1.434317
C -2.781295 0.628777 -0.603188
C -3.236126 -0.817926 -0.799407
C -4.723725 -0.878168 -1.118030
C -5.076134 -0.005801 -2.315373
C -4.624235 1.432810 -2.099473
C -3.130088 1.502407 -1.808692
C 1.193555 2.221878 -0.749094
C 1.528002 3.235618 0.351622
C 1.180610 4.648259 -0.103215
C 1.920426 5.009488 -1.383873
C 1.647405 3.988427 -2.479112
C 1.975655 2.573328 -2.018553
C 2.532012 0.097649 -0.202018
C 3.079626 -0.512742 -1.496179
C 4.283363 -1.399850 -1.208161
C 5.369255 -0.644825 -0.457730
C 4.813877 -0.036387 0.821434
C 3.618655 0.866574 0.540809
H 1.328300 0.350111 2.550434
H 0.967194 -0.739929 3.920716
H 2.431253 -0.967033 2.968850
H 0.909941 -3.898529 3.425981
H -0.817078 -3.757585 3.077624
H 0.229595 -4.624656 1.949253

H 0.284135 -2.649193 -3.468932
H -0.573115 -4.187347 -3.319708
H -1.474641 -2.676322 -3.196848
H -1.715446 -4.349283 0.668143
H -2.651599 -3.763086 -0.714197
H -1.740686 -5.278048 -0.844183
H 1.629989 -4.520109 0.110448
H 1.166811 -5.367515 -1.378775
H 2.145574 -3.886800 -1.458781
H -1.200660 -0.510268 -2.873260
H -0.399227 1.073552 -2.740487
H 0.567843 -0.404548 -2.971790
H -0.272502 1.231969 1.558012
H -1.720936 -0.675800 2.211082
H -3.141807 0.341400 2.073641
H -0.815541 0.811268 3.995694
H -2.417924 0.231940 4.435175
H -2.168911 2.683528 4.883424
H -3.423318 2.376393 3.685741
H -0.548725 3.232955 3.089873
H -1.978516 4.247838 2.932710
H -2.880951 2.755668 1.171577
H -1.280998 3.323948 0.709915
H -3.422137 1.014733 0.200335
H -2.995855 -1.395315 0.101394
H -2.672020 -1.295546 -1.612539
H -5.293839 -0.532189 -0.241620
H -5.028766 -1.917927 -1.292831
H -6.155112 -0.043613 -2.513560
H -4.581362 -0.407611 -3.213288
H -5.180582 1.861632 -1.251316
H -4.869673 2.049872 -2.973351
H -2.584553 1.175532 -2.700793
H -2.815064 2.534056 -1.602488
H 0.132239 2.397843 -0.980304
H 2.596284 3.205435 0.589440
H 0.994472 2.975021 1.273091

H 1.411683 5.368728 0.691928
H 0.096962 4.722092 -0.283175
H 3.001711 5.037141 -1.179294
H 1.641771 6.016768 -1.719500
H 2.217307 4.232743 -3.384802
H 0.583485 4.035866 -2.759833
H 1.754732 1.849783 -2.811763
H 3.054287 2.499223 -1.821765
H 2.306369 -0.765434 0.432448
H 3.356595 0.272842 -2.211586
H 2.290847 -1.120986 -1.957526
H 4.675728 -1.820714 -2.142898
H 3.951971 -2.254846 -0.598788
H 5.764007 0.158614 -1.098967
H 6.215171 -1.307235 -0.232642
H 5.591153 0.529511 1.350875
H 4.502088 -0.845185 1.499758
H 3.213764 1.261748 1.479119
H 3.961167 1.725564 -0.052565

8 Untersuchungen zur Struktur und Reaktivität eines neuen Carbodiphosphorans und seiner Verbindungen

8.1 Energien der Verbindungen

Tabelle 8.1. Energien der Verbindungen.

	E(SCF)	CorrH	CorrG	E(PCM)	$\Delta G(\text{PCM})$ [hartree]	$\Delta G(\text{PCM})$ [kJ/mol]
121	- 2720.35354184	0.821522	0.687702	–	–	–
122	- 4851.15022120	0.699561	0.578453	–	–	–
122^{konf}	- 4851.14338965	0.700001	0.580519	–	0.008898	23.360518
124a⁺	- 3415.85375934	0.726427	0.614806	–	–	–
124b⁺	- 7645.29176089	0.726268	0.612067	–	–	–
124c⁺	- 2517.52102940	0.726073	0.610432	–	–	–
124d⁺	- 3190.93891327	0.892095	0.772179	–	–	–
124e⁺	- 2958.76019829	0.915710	0.791669	–	–	–
XVII	- 2954.91370828	0.723572	0.614434	- 2955.07998507	–	–
TS_{XVII→XX}^{ax}	- 2954.88376153	0.718557	0.611643	- 2955.05113190	0.026062	68.426227
TS_{XVII→XX}^{eq}	- 2954.88845004	0.719104	0.61406	- 2955.05490254	0.024709	64.872246
XX	- 2954.92027755	0.720891	0.612669	- 2955.08914640	-0.010926	-28.687079
TS_{II→XVIII}^{D1}	- 2954.91887327	0.720035	0.614985	- 2955.08656545	-0.006029	-15.830137
TS_{II→XVIII}^{D2}	- 2954.90603307	0.720261	0.610233	- 2955.07311553	0.002669	7.006252
XVIII^{D1}	- 2954.93848685	0.721363	0.614456	- 2955.10574200	-0.025735	-67.567059
XVIII^{D2}	- 2954.94845199	0.722206	0.615604	- 2955.11653511	-0.035380	-92.890295

Untersuchungen zur Struktur und Reaktivität eines neuen Carbodiphosphorans und seiner Verbindungen

TS_{XVII→XIX}	- 2954.90731587	0.722337	0.61526	- 2955.07298139	0.007830	20.556825
XIX	- 2954.92786245	0.723649	0.616551	- 2955.09377137	-0.011669	-30.637747
TS_{XIX→XVIII}	- 2954.87085970	0.71953	0.611417	- 2955.03818074	0.038787	101.836135
TS_{XVII→XXI}^{D1}	- 2954.90276576	0.722452	0.616746	- 2955.06821048	0.014087	36.984342
XXI^{D1}	- 2954.90656103	0.72304	0.615931	- 2955.07507430	0.006408	16.823600
XXI^{D2}	- 2954.90038192	0.723353	0.616753	- 2955.06647749	0.015827	41.552686
TS_{XXI→XXII}^{D1}	- 2954.84650734	0.718269	0.611746	- 2955.01409189	0.063205	165.945200
TS_{XXI→XXII}^{D2}	- 2954.84954509	0.718462	0.612923	- 2955.01722238	0.061252	160.816312
XXII^{D1}	- 2954.94716119	0.722833	0.616711	- 2955.11467231	-0.032410	-85.093085
XXII^{D2}	- 2954.94915665	0.722978	0.617152	- 2955.11593973	-0.033237	-87.262851

8.2 Ergebnisse der NBO-Analyse

Tabelle 8.2. Ergebnisse der NBO-Analyse von **XXX**, **XXx**, **XXX**, **1-ZnCl₂** und **1-Rh**.

	91	119	123	121	122
q _c (NBO)	-1.43594	-1.38110	-1.27821	-1.33601	-1.67303
q _n (NBO)	-0.83021 -0.83021	–	-0.95094 -0.95095	-0.86987 -0.86838	-0.82384 -0.83615
WBI _{C–P}	1.3677 1.3677	1.3219/ 1.3219	1.2968 1.2968	1.2020 1.1984	1.2086 1.1900
WBI _{P–N}	0.7265 0.7265	–	0.9578/ 0.9578	0.7716 0.7713	0.7684 0.7839
WBI _{C–M}	–	–	–	0.5187	0.2083
NBO _C	–	–	–	1 LP	2 LP
NBO _{C–P}	–	–	–	1 BD C1-P2 1 BD C1-P2	1 BD C1-P2 1 BD C1-P2
NBO _{P–N}	–	–	–	1 BD P1-N1 1 BD P2-N2	1 BD P1-N1 1 BD P2-N2
NBO _{C–M}	–	–	–	1 BD C1-Rh1	–

Tabelle 8.3. Ergebnisse der NBO-Analyse der kationischen Strukturen **XXX**.

	124a⁺	124b⁺	124c⁺	124d⁺	124e⁺
$Q_{\text{cal}}(\text{C})$	-1.45	-1.44	-1.42	-1.43	-1.42
$Q_{\text{cal}}(\text{P1})$	0.84	0.67	0.42	0.85	0.87
$Q_{\text{cal}}(\text{P2})$	1.84	1.84	1.84	1.85	1.83
$Q_{\text{cal}}(\text{P2}')$	1.85	1.85	1.85	1.84	1.84
$Q_{\text{cal}}(\text{N1})$	-0.88	-0.88	-0.88	-0.88	-0.87
$Q_{\text{cal}}(\text{N1}')$	-0.87	-0.87	-0.87	-0.87	-0.88
$\text{WBI}(\text{C-P1})$	0.99	1.01	1.04	0.96	0.93
$\text{WBI}(\text{C-P2})$	1.03	1.02	1.01	1.03	1.05
$\text{WBI}(\text{C-P2}')$	1.00	1.00	0.99	1.04	1.06
$\text{WBI}(\text{P2-N1})$	0.83	0.83	0.84	0.84	0.82
$\text{WBI}(\text{P2}'-\text{N1}')$	0.84	0.84	0.84	0.82	0.82

8.3 Koordinaten der optimierten Strukturen

121

E = -2720.35354184

Rh -1.682218 0.961464 0.595136

P 1.519632 1.016282 -0.105187

P 0.151290 -1.629897 0.129995

O -0.892330 1.529406 3.409532

O -2.135419 0.489228 -1.383545

O -3.605805 1.748950 0.798301

N 1.568325 1.679233 -1.680603

N 0.368057 -2.415267 1.635560

C 0.143378 0.071512 0.233984

C 1.664954 2.482374 0.994379

C 2.787928 2.721793 1.811962

H 3.638189 2.024277 1.804026

C 2.830589 3.858754 2.638303

H 3.710571 4.034091 3.276957

C 1.757518 4.764963 2.649675

H 1.789452 5.650293 3.304129

C 0.644758 4.541308 1.819127

H -0.200836 5.246659 1.820536

C 0.601838 3.414105 0.986663

H -0.283184 3.217200 0.357030

C 3.104598 0.112576 0.099110
C 3.979985 -0.063423 -0.988777
H 3.701584 0.344984 -1.970983
C 5.171107 -0.787984 -0.823559
H 5.843927 -0.934783 -1.682614
C 5.497570 -1.334799 0.428962
H 6.432723 -1.902568 0.556094
C 4.621724 -1.168015 1.516682
H 4.867846 -1.603740 2.497793
C 3.426983 -0.450995 1.353201
H 2.736106 -0.330892 2.200384
C 2.470190 2.790564 -2.001264
H 3.071851 2.515904 -2.903183
H 3.191040 2.925498 -1.168658
C 1.707633 4.096557 -2.272888
H 1.259479 4.449016 -1.319304
H 2.423700 4.879606 -2.603813
C 0.602558 3.882913 -3.319826
H 1.071900 3.657004 -4.306318
H 0.015640 4.815769 -3.459454
C -0.311065 2.714835 -2.919155
H -1.066533 2.512603 -3.708536
H -0.879181 2.958710 -1.994263
C 0.502128 1.442471 -2.652561
H -0.168808 0.655900 -2.254116
H 0.959757 1.076894 -3.605758
C 1.459087 -2.298299 -0.969308
C 1.461448 -1.930986 -2.332713
H 0.673191 -1.268632 -2.719482
C 2.469586 -2.403744 -3.186042
H 2.467121 -2.113705 -4.248534
C 3.482908 -3.239793 -2.683425
H 4.277495 -3.606270 -3.352285
C 3.487796 -3.596536 -1.324286
H 4.290599 -4.234571 -0.923601
C 2.477451 -3.130023 -0.468314
H 2.487434 -3.379373 0.602504

C -1.413404 -2.351559 -0.527162
C -1.444096 -3.232232 -1.626543
H -0.510275 -3.528251 -2.126500
C -2.671839 -3.738898 -2.092962
H -2.684635 -4.423365 -2.955828
C -3.873166 -3.370616 -1.465568
H -4.833786 -3.757328 -1.840892
C -3.844495 -2.509578 -0.352278
H -4.779702 -2.213841 0.147271
C -2.621852 -2.018322 0.125530
H -2.596730 -1.309561 0.975183
C 0.450270 -1.664565 2.887832
H 0.607210 -0.597723 2.633958
H 1.345878 -2.015645 3.457747
C -0.810726 -1.839951 3.742899
H -0.685054 -1.301216 4.705411
H -1.659366 -1.352917 3.214509
C -1.113511 -3.328541 3.971678
H -0.300246 -3.777392 4.589340
H -2.052312 -3.454899 4.551774
C -1.204402 -4.077374 2.632675
H -1.340956 -5.168589 2.793715
H -2.088002 -3.719838 2.061356
C 0.054909 -3.841213 1.785245
H 0.927838 -4.349078 2.265034
H -0.060808 -4.293650 0.778920
C -1.216601 1.313713 2.301028
C -3.300980 0.517446 -1.925030
C -3.361844 -0.090606 -3.311231
H -4.362338 -0.006107 -3.775999
H -3.083285 -1.163069 -3.239331
H -2.610848 0.398401 -3.966238
C -4.470755 1.040121 -1.334889
H -5.391817 1.006018 -1.933978
C -4.555413 1.646585 -0.053275
C -5.876736 2.247429 0.393321
H -6.688597 2.090919 -0.342271

H -5.747866 3.337521 0.560742

H -6.173694 1.807865 1.368090

122

E = -4851.15022120

Zn -0.961792 -2.313748 -0.476079

C -0.091942 -0.506401 -0.250019

Cl -0.655902 -3.352008 -2.412838

Cl -2.195069 -3.047822 1.245409

N -1.049143 2.153208 -0.936428

C -0.330686 2.045705 -2.213886

C -2.215883 3.048027 -1.007138

P -1.237714 0.715494 -0.008796

C -2.857579 -0.002495 -0.459235

C -1.353229 1.292209 1.718964

P 1.553630 -0.311288 0.092608

N 2.491213 -0.097359 -1.322783

C 1.952129 1.142333 1.121390

C 2.177399 -1.773477 0.998468

C -1.775000 4.460803 -1.407124

H -2.729504 3.056428 -0.024177

H -2.957357 2.658591 -1.750249

C 3.842564 0.467761 -1.359844

C 2.203509 -1.000362 -2.452575

C -0.999860 4.432143 -2.733706

C 0.160256 3.427290 -2.659838

H -0.628883 5.445710 -2.995356

H -1.692533 4.127987 -3.551580

H -2.666193 5.119354 -1.482638

H -1.127965 4.876708 -0.602602

C -3.989889 0.072396 0.373079

C -2.931826 -0.698893 -1.689976

H -0.993459 1.615301 -3.008050

H 0.513683 1.341807 -2.081120

H 0.918588 3.791753 -1.931488

H 0.670941 3.335227 -3.642017

C -5.175346 -0.580017 -0.000487

C -5.236128 -1.306759 -1.201833
H -6.051214 -0.541309 0.665649
H -3.934180 0.609615 1.331687
C -4.115026 -1.363272 -2.047002
H -6.158966 -1.841638 -1.475147
C -1.059412 2.611889 2.108287
C -1.607415 0.299230 2.694111
H -2.048503 -0.779469 -2.344146
H -4.143510 -1.946183 -2.979886
C -1.034552 2.947160 3.472071
H -0.809958 3.361698 1.344083
C -1.301643 1.969104 4.444054
H -0.790157 3.977182 3.775047
C -1.586008 0.646766 4.052887
H -1.279016 2.234574 5.512898
H -1.787765 -0.124497 4.812738
H -1.815165 -0.742055 2.382385
C 2.360322 -0.252223 -3.780801
H 1.180500 -1.417067 -2.346945
H 2.904895 -1.871039 -2.422562
C 3.735838 0.426229 -3.883005
H 1.556647 0.512237 -3.858573
H 2.204894 -0.963958 -4.618595
C 4.020863 1.291035 -2.643518
H 4.523392 -0.358619 -3.959624
H 3.809586 1.034094 -4.809903
H 5.050249 1.707981 -2.679443
H 3.318418 2.154056 -2.612388
H 4.610067 -0.348308 -1.349902
H 4.013614 1.086371 -0.457142
C 3.548771 -2.108244 0.958074
C 1.285452 -2.570526 1.745727
C 4.017306 -3.235502 1.650210
H 4.253071 -1.492344 0.380150
C 3.121432 -4.038588 2.380439
H 5.086586 -3.496159 1.610711
C 1.757429 -3.705968 2.424643

H 3.490520 -4.930359 2.911148
H 1.042077 -4.331805 2.980139
H 0.210777 -2.327278 1.784856
C 2.048464 1.000745 2.521404
C 2.013761 2.426890 0.540783
C 2.198152 3.556246 1.352483
H 1.922025 2.536718 -0.548846
C 2.305209 3.411926 2.746490
H 2.254653 4.555368 0.892518
C 2.221196 2.134954 3.328694
H 2.446082 4.299253 3.383268
H 2.287157 2.020105 4.421309
H 1.981184 0.000810 2.976115

122*planar*

E = -4851.14338965
Zn -0.274642 -2.402790 -0.631365
C -0.087909 -0.399299 -0.621026
Cl 1.540985 -3.695492 -0.495755
Cl -2.218162 -3.458792 -0.413368
N -1.547585 2.067335 -0.377120
C -1.092043 2.475920 -1.719766
C -2.768142 2.787649 0.027424
P -1.509972 0.371383 -0.086150
C -2.950927 -0.308505 -0.963513
C -1.815820 0.202776 1.708781
P 1.474683 0.061483 -0.094413
N 2.620945 -0.583139 -1.154877
C 1.815904 1.875156 -0.040567
C 1.897080 -0.445891 1.625745
C -2.491359 4.294248 0.081823
H -3.104924 2.412397 1.013676
H -3.598441 2.582594 -0.695527
C 3.911563 -1.117775 -0.699215
C 2.244018 -1.015014 -2.510756
C -1.991451 4.800915 -1.279201
C -0.783906 3.974826 -1.745065

H -1.732636 5.879761 -1.226810
H -2.814989 4.708262 -2.024109
H -3.415856 4.826781 0.391025
H -1.721522 4.488325 0.861374
C -4.232467 -0.300650 -0.378497
C -2.791110 -0.711690 -2.305607
H -1.880040 2.235948 -2.479715
H -0.197393 1.879363 -1.980176
H 0.080836 4.168080 -1.079558
H -0.475715 4.264587 -2.771958
C -5.343179 -0.724707 -1.124924
C -5.180286 -1.140672 -2.457114
H -6.340859 -0.740223 -0.659175
H -4.358978 0.008655 0.670358
C -3.904415 -1.127933 -3.047802
H -6.051826 -1.482938 -3.036812
C -1.431469 1.210273 2.618732
C -2.222783 -1.061664 2.192837
H -1.781203 -0.726831 -2.744358
H -3.773994 -1.462177 -4.088691
C -1.440067 0.954628 3.999232
H -1.121405 2.194221 2.238348
C -1.841458 -0.303369 4.479941
H -1.130148 1.743114 4.702788
C -2.238927 -1.303808 3.575058
H -1.842763 -0.504534 5.562619
H -2.553524 -2.292396 3.944536
H -2.485967 -1.868735 1.484277
C 3.321558 -0.607349 -3.522679
H 1.260342 -0.570624 -2.758833
H 2.114910 -2.123277 -2.507927
C 4.700170 -1.139111 -3.100905
H 3.356522 0.503424 -3.606187
H 3.040111 -0.993862 -4.525646
C 5.031333 -0.707752 -1.663773
H 4.687323 -2.251461 -3.150386
H 5.487526 -0.798124 -3.806617

H 5.988024 -1.161597 -1.327229
H 5.161510 0.397401 -1.622013
H 3.826442 -2.228074 -0.634660
H 4.124502 -0.752118 0.322590
C 2.904521 0.213217 2.366202
C 1.149262 -1.468434 2.240786
C 3.153243 -0.147062 3.699735
H 3.489085 1.023645 1.904216
C 2.394560 -1.162970 4.307610
H 3.940028 0.372905 4.268442
C 1.394374 -1.823077 3.574721
H 2.583461 -1.439120 5.356924
H 0.793115 -2.618085 4.040614
H 0.358567 -1.987233 1.681870
C 1.416793 2.666944 1.055715
C 2.526130 2.471068 -1.100571
C 2.834670 3.841828 -1.066258
H 2.858906 1.841074 -1.939402
C 2.444489 4.623989 0.034472
H 3.392880 4.297741 -1.898803
C 1.733470 4.033363 1.095283
H 2.696039 5.695567 0.067692
H 1.429542 4.640460 1.962470
H 0.887077 2.200885 1.898063

124a⁺

E = -3415.85375934
Cl -1.108380 -1.495504 -3.277212
P 0.017883 -2.070713 -1.602505
P 1.618270 -0.212883 -0.093677
N 2.374868 0.731112 -1.257666
C -0.017017 -0.645008 -0.533848
C 1.711502 0.779368 1.409078
C 2.530744 -1.751283 0.174754
C 2.176283 0.450658 -2.682147
C 3.614434 1.464068 -0.978487
P -1.408363 0.150508 0.162852

Cl -1.325964 -3.405344 -0.703035
N -1.508678 1.776266 -0.246627
C -1.327574 0.030956 1.963864
C -2.980915 -0.593593 -0.334155
C -2.766460 2.460752 0.077782
C -0.864549 2.295377 -1.452317
C 3.627858 2.782307 -1.730237
C 3.493370 2.532718 -3.224222
C 2.237708 1.725225 -3.510387
C 1.960541 -2.773055 0.943431
C 3.798178 -1.926980 -0.381764
C 4.492817 -3.111698 -0.164871
C 3.927492 -4.120034 0.607101
C 2.660710 -3.950911 1.160382
C 2.000682 0.200521 2.646567
C 1.487262 2.154977 1.315464
C 2.062983 1.001115 3.780282
C 1.841934 2.371615 3.684667
C 1.553316 2.948895 2.451941
C -0.624052 3.792213 -1.337916
C -1.899860 4.540586 -0.983209
C -2.527659 3.946268 0.268674
C -3.752542 -1.393757 0.512710
C -3.474012 -0.253927 -1.598381
C -4.701369 -0.741082 -2.024892
C -5.451687 -1.559972 -1.188393
C -4.980017 -1.877686 0.080776
C -1.181023 -1.251611 2.504617
C -1.385138 1.140231 2.804827
C -1.322377 0.963216 4.182806
C -1.190112 -0.311818 4.720769
C -1.113434 -1.419998 3.881015
H 2.796058 3.409520 -1.376026
H 4.557082 3.317672 -1.501023
H 4.376513 1.979666 -3.577359
H 3.476557 3.477875 -3.779215
H 1.201032 -0.027320 -2.822462

H 2.941705 -0.263134 -3.031648
H 4.484773 0.868323 -1.300920
H 3.715597 1.616744 0.099520
H -3.207937 2.003682 0.970818
H -3.491957 2.307551 -0.738983
H -1.493231 2.100690 -2.339341
H 0.075448 1.758674 -1.601866
H 2.176065 1.453288 -4.570865
H 1.353646 2.339221 -3.292108
H 0.959179 -2.649405 1.350347
H 4.238557 -1.150485 -1.000410
H 5.476308 -3.249282 -0.608369
H 4.471626 -5.047657 0.771268
H 2.212274 -4.745176 1.752839
H 2.188275 -0.867185 2.727331
H 1.288247 2.598876 0.344898
H 2.292075 0.550652 4.743298
H 1.902398 2.993966 4.575195
H 1.389421 4.021717 2.373133
H -0.206055 4.155455 -2.285301
H 0.129832 3.986289 -0.563289
H -1.694093 5.608631 -0.847888
H -2.614545 4.462747 -1.815851
H -1.863477 4.101966 1.132009
H -3.480375 4.436474 0.501399
H -3.407107 -1.640330 1.511776
H -2.896490 0.390573 -2.255064
H -5.071831 -0.478579 -3.013074
H -6.413329 -1.943511 -1.522789
H -5.572455 -2.504827 0.742974
H -1.135148 -2.115397 1.840485
H -1.447517 2.140868 2.385000
H -1.364814 1.830387 4.838264
H -1.141397 -0.443977 5.799629
H -1.005348 -2.418071 4.300198

124b⁺

E = -7645.29176089

N 2.417754 -0.607556 1.435450

P 1.612314 -0.646540 -0.037021

C 1.863143 -1.283332 2.610198

C 3.869787 -0.411122 1.514624

C -0.126292 -0.501990 0.128293

C 1.941080 -2.199122 -0.903996

C 2.358757 0.707370 -0.965082

C 2.227185 -0.549014 3.891470

C 4.226461 0.402997 2.744803

P -0.962421 0.995368 -0.217741

P -0.793531 -2.106273 0.525607

Br -1.995696 -1.823324 2.433745

C 3.722103 -0.295121 3.998254

N -0.570733 2.218635 0.863174

C -2.765350 0.845948 -0.185047

C -0.535708 1.552513 -1.883360

Br -2.454868 -2.441896 -0.972635

C -1.394252 3.433014 0.816039

C -0.066517 1.913768 2.201796

C -0.601753 4.628913 1.308177

C 0.714538 3.088661 2.768032

C -0.094427 4.376077 2.719948

H 2.231431 -2.322540 2.652809

H 0.773545 -1.331936 2.516082

H 4.226209 0.069906 0.599798

H 4.377322 -1.387830 1.581958

H 1.863482 -1.135720 4.743364

H 1.693367 0.410445 3.919226

H 3.774339 1.402461 2.660781

H 5.313664 0.542180 2.780190

H 4.251507 -1.252620 4.114164

H 3.948594 0.295415 4.893538

H -2.287703 3.298631 1.448929

H -1.760713 3.582667 -0.205985

H 0.560007 1.020481 2.140743

H -0.902602 1.676380 2.883231
H -1.237940 5.521177 1.273245
H 0.246611 4.808907 0.631044
H 1.641421 3.225593 2.194774
H 1.011418 2.850386 3.797164
H -0.953889 4.293733 3.401601
H 0.506021 5.220910 3.076354
C -3.555962 0.829211 -1.337972
C -3.382003 0.850648 1.070516
C -4.764734 0.785808 1.172332
C -5.543524 0.734719 0.021972
C -4.938314 0.768436 -1.230042
C -0.019864 2.817528 -2.156311
C -0.739583 0.640185 -2.924843
C -0.446569 1.002639 -4.232588
C 0.051472 2.273931 -4.505320
C 0.266850 3.175578 -3.469143
C 2.688138 0.574098 -2.315142
C 2.619109 1.905373 -0.294943
C 3.209901 2.964151 -0.969969
C 3.539367 2.830667 -2.315464
C 3.276027 1.639842 -2.985375
C 1.215287 -2.519306 -2.057794
C 2.903009 -3.087244 -0.420767
C 1.462616 -3.710473 -2.724403
C 2.426729 -4.591578 -2.241149
C 3.142394 -4.281672 -1.090302
H -5.546248 0.749306 -2.131647
H -6.627373 0.682419 0.100917
H -5.233061 0.778144 2.153803
H -2.781190 0.906870 1.973504
H -3.103493 0.866348 -2.323699
H 0.186727 3.509777 -1.344313
H -1.143984 -0.348731 -2.705215
H -0.611540 0.293948 -5.041353
H 0.277177 2.560274 -5.530427
H 0.672253 4.162762 -3.680199

H 3.536566 1.535163 -4.036097
H 2.500365 -0.358947 -2.840561
H 2.380441 1.988462 0.761124
H 3.422975 3.891633 -0.442298
H 4.010437 3.657093 -2.843828
H 0.441895 -1.843207 -2.416027
H 0.892188 -3.959117 -3.616438
H 2.612911 -5.529523 -2.759943
H 3.885280 -4.976455 -0.705232
H 3.452103 -2.860639 0.488364

124c⁺

E = -2517.52102940
N 2.086561 -1.790851 1.167471
P 1.480455 -1.133272 -0.250928
C 1.197975 -2.423629 2.143053
C 3.475114 -2.256221 1.271910
C -0.048698 -0.287696 -0.024917
C 1.197095 -2.421578 -1.486104
C 2.816232 -0.064152 -0.818413
C 1.707032 -2.225465 3.561686
C 4.020039 -1.978773 2.661003
P -0.116836 1.465088 0.001240
P -1.331457 -1.515568 -0.008920
C 3.155912 -2.661110 3.710154
N 0.632023 2.108508 1.356908
C -1.801029 2.116733 -0.019537
C 0.686402 2.133443 -1.471840
C 0.398377 3.533415 1.623747
C 0.808083 1.315414 2.574029
C 1.555885 4.120021 2.408791
C 1.942851 1.869180 3.420001
C 1.755047 3.351388 3.706555
H 1.103426 -3.500165 1.920908
H 0.198778 -1.989935 2.049523
H 4.084284 -1.778024 0.500492
H 3.518269 -3.342554 1.087479

H 1.053706 -2.780027 4.245656
H 1.615993 -1.164354 3.830532
H 4.035240 -0.892133 2.832339
H 5.057897 -2.328849 2.715459
H 3.227617 -3.751371 3.581189
H 3.521556 -2.443167 4.720258
H -0.536782 3.651736 2.197182
H 0.246516 4.059632 0.674301
H 1.002370 0.278438 2.288000
H -0.120960 1.317818 3.171018
H 1.356218 5.179792 2.606419
H 2.470987 4.070685 1.799880
H 2.898013 1.721311 2.897550
H 1.999505 1.293709 4.352485
H 0.871160 3.490478 4.346394
H 2.610442 3.746387 4.266485
C -2.361090 2.769497 -1.121908
C -2.525189 2.035644 1.174137
C -3.818028 2.535209 1.243490
C -4.385363 3.146863 0.131080
C -3.649735 3.278492 -1.042389
C 1.714942 3.071599 -1.417873
C 0.221463 1.673247 -2.708789
C 0.776578 2.161543 -3.883756
C 1.793958 3.110639 -3.828294
C 2.261538 3.561502 -2.598959
C 3.201792 -0.024943 -2.159449
C 3.487775 0.713644 0.128713
C 4.544627 1.522994 -0.262692
C 4.930935 1.560233 -1.599303
C 4.258769 0.790969 -2.544125
C 0.508754 -2.115485 -2.666115
C 1.651071 -3.722680 -1.264286
C 0.286679 -3.102220 -3.615319
C 0.743689 -4.398485 -3.391334
C 1.421994 -4.707777 -2.217575
H -4.082746 3.779033 -1.905402

H -5.399294 3.537711 0.183880
H -4.379803 2.449224 2.170706
H -2.078889 1.582380 2.054166
H -1.802273 2.884535 -2.045120
H 2.108188 3.396130 -0.457934
H -0.591597 0.947303 -2.745504
H 0.410196 1.806196 -4.844502
H 2.225749 3.497805 -4.748848
H 3.066008 4.292488 -2.555831
H 4.563244 0.818876 -3.587848
H 2.690895 -0.636461 -2.899275
H 3.193066 0.656684 1.172491
H 5.074669 2.117965 0.478311
H 5.765388 2.187695 -1.905943
H 0.129071 -1.108850 -2.825949
H -0.256026 -2.862825 -4.526970
H 0.560584 -5.173534 -4.132453
H 1.766720 -5.723414 -2.037338
H 2.163520 -3.975548 -0.340646
I -2.613739 -1.334790 2.207704
I -3.092719 -0.772170 -1.680671

124d⁺

E = -3190.93891327
Cl -1.571323 -0.507122 -3.102331
P -1.553167 0.801932 -1.424213
P 0.897030 1.457477 -0.092721
N 1.610536 2.036744 -1.481634
C -0.229878 0.156192 -0.383192
C 0.007738 2.839967 0.670802
C 2.312235 0.971759 0.931873
C 1.345282 1.638339 -2.856801
C 2.573405 3.130604 -1.344273
P -0.028464 -1.442055 0.258799
N 1.039813 -2.401919 -0.609920
C 0.570103 -1.404544 1.969908
C -1.606941 -2.330899 0.263471

C 1.455899 -2.076993 -1.970681
C 1.066109 -3.838055 -0.319221
C 3.888227 2.790540 -2.025446
H 2.729218 3.344663 -0.279448
H 2.146973 4.044723 -1.789957
C -3.198314 0.363990 -0.697259
C 3.656476 2.393310 -3.475934
H 4.562404 3.652983 -1.957250
H 4.366999 1.964300 -1.481673
C 2.637490 1.267176 -3.566707
H 4.600401 2.101513 -3.951103
H 3.282142 3.263410 -4.035921
H 2.414477 1.022364 -4.612445
H 3.051462 0.355666 -3.107402
H 0.851686 2.470198 -3.385896
H 0.642287 0.803511 -2.871657
C 2.580668 1.434834 2.220205
C 3.222658 0.116825 0.301920
C 4.371453 -0.296087 0.960695
H 3.036402 -0.198629 -0.721684
C 4.628874 0.156960 2.251187
H 5.074575 -0.959188 0.460257
C 3.737369 1.023526 2.874095
H 5.534502 -0.154728 2.767518
H 3.945761 1.392737 3.875796
H 1.911496 2.132764 2.713338
C -0.445190 2.778209 1.992819
C -0.374230 3.914204 -0.136658
C -1.243190 3.791961 2.505474
H -0.192438 1.928925 2.621149
C -1.613362 4.864189 1.698375
H -1.586501 3.740842 3.536514
C -1.182666 4.921292 0.377658
H -2.244504 5.654239 2.099827
H -1.480659 5.751175 -0.259184
H -0.060924 3.944784 -1.177298
C 2.850795 -2.611832 -2.245542

H 1.403308 -0.992459 -2.099582
H 0.749562 -2.511379 -2.698850
C 2.926588 -4.106011 -1.966343
H 3.575510 -2.086196 -1.607766
H 3.118707 -2.391832 -3.286382
C 2.454751 -4.406177 -0.551119
H 3.945849 -4.477931 -2.121984
H 2.285789 -4.641654 -2.682393
H 2.436191 -5.486513 -0.364234
H 3.156933 -3.967619 0.173108
H 0.343997 -4.360359 -0.969531
H 0.731593 -4.006158 0.711573
C 1.739668 -2.058782 2.355064
C -0.149956 -0.669795 2.917315
C 2.168194 -1.997941 3.676058
H 2.335033 -2.583587 1.613749
C 1.438944 -1.281821 4.618294
H 3.085294 -2.505841 3.966417
C 0.280993 -0.611254 4.236097
H 1.777572 -1.238122 5.651276
H -0.287949 -0.040337 4.966999
H -1.043477 -0.127605 2.616090
C -1.994586 -2.939690 -0.935656
C -2.451906 -2.399668 1.374128
C -3.689264 -3.022823 1.267503
H -2.155136 -1.975880 2.327981
C -4.088186 -3.588091 0.060345
H -4.343986 -3.068780 2.134945
C -3.233899 -3.557468 -1.037087
H -5.061055 -4.068440 -0.020184
H -3.532724 -4.013367 -1.978172
H -1.339280 -2.907759 -1.801409
C -3.294414 1.012774 0.681904
C -4.292032 0.891548 -1.627634
H -3.320281 -0.720138 -0.605011
C -4.679114 0.821404 1.287285
H -3.071536 2.089342 0.595624

H -2.524325 0.593270 1.343310
C -5.772581 1.326453 0.356675
H -4.834940 -0.250595 1.480633
H -4.732970 1.327911 2.259659
C -5.668926 0.673727 -1.014189
H -5.678368 2.417354 0.245714
H -6.760560 1.143637 0.796982
H -6.442882 1.062923 -1.687012
H -5.852265 -0.407565 -0.918694
H -4.132702 1.967193 -1.802065
H -4.219288 0.398132 -2.604191

124e⁺

E = -2958.76019829
P -0.442473 -0.584188 -1.158901
C 0.041517 0.124046 0.356388
C -2.211176 -0.994836 -1.188272
N -0.236708 0.373472 -2.522166
C 0.357309 1.698802 -2.564940
C -0.721313 -0.109410 -3.818422
C -0.578714 2.718926 -3.196313
P 1.729663 0.315735 0.772046
P -1.022394 0.520045 1.779754
C -1.661161 0.880169 -4.486873
C -1.021418 2.257163 -4.576328
N 2.250270 1.913544 0.719124
C 2.878251 -0.495304 -0.377905
C -2.236631 -0.845021 1.973827
C -2.074195 1.955516 1.357240
C 1.386933 3.017684 1.125312
C 3.672697 2.255244 0.791835
C 1.626060 4.236686 0.251753
C 3.973103 3.441652 -0.108716
C 3.095387 4.631232 0.253863
H 1.276965 1.660029 -3.172085
H 0.652258 1.985257 -1.548647
H -1.210352 -1.081059 -3.679513

H 0.144438 -0.278026 -4.480427
H -0.066873 3.688491 -3.249152
H -1.463821 2.857804 -2.560851
H -2.596912 0.937208 -3.916402
H -1.919415 0.501763 -5.483467
H -0.147171 2.213063 -5.243620
H -1.716407 2.978359 -5.021759
H 1.578922 3.276392 2.181425
H 0.346214 2.700825 1.063202
H 4.277532 1.386933 0.514667
H 3.941413 2.512635 1.830586
H 0.995770 5.060100 0.609212
H 1.300833 4.011989 -0.774477
H 3.798845 3.149405 -1.154297
H 5.035742 3.699111 -0.022128
H 3.370615 4.986633 1.258164
H 3.274644 5.468486 -0.430900
C -2.652505 3.879785 -0.003048
C -1.915080 2.718102 0.201265
C -3.570963 4.295862 0.953614
C -3.731363 3.552242 2.120289
C -2.980270 2.402837 2.328018
C -3.616166 -0.707373 1.805301
C -4.468964 -1.775792 2.059750
C -1.740696 -2.074148 2.423332
C -2.589830 -3.150427 2.648884
C -3.961589 -3.003633 2.468720
C 2.040469 -0.347185 2.428909
C 1.816993 -1.698734 2.708793
C 2.051713 -2.198284 3.982078
C 2.499992 -1.349548 4.990707
C 2.713150 -0.003129 4.721694
C 2.487003 0.498501 3.444646
C 1.169087 -2.417963 -2.576669
C 3.508932 -1.707597 -0.089719
C 4.391442 -2.266313 -1.006001
C 1.806263 -3.645151 -2.727952

C 4.657400 -1.623261 -2.209812
C 4.044776 -0.407498 -2.494909
C 3.163586 0.155725 -1.581518
C 0.428176 -2.155613 -1.426124
C 0.349846 -3.123276 -0.419326
C 0.988683 -4.346347 -0.573179
C 1.714077 -4.610287 -1.732103
H 2.638456 1.555920 3.247372
H 3.051621 0.664694 5.510665
H 2.677826 -1.739889 5.990461
H 1.878483 -3.251710 4.191805
H 1.449756 -2.358908 1.926040
H 3.335651 -2.215274 0.853150
H 4.880043 -3.209125 -0.770589
H 5.355334 -2.062390 -2.919739
H 4.266500 0.113897 -3.423872
H -4.632301 -3.838515 2.660914
H -5.540784 -1.648447 1.919489
H -0.676576 -2.175855 2.622354
H 0.917031 -5.097763 0.210614
H 2.213089 -5.569274 -1.855228
H 2.388043 -3.841290 -3.626051
H 1.277724 -1.655217 -3.341648
H -1.193130 2.390455 -0.541785
H -2.508449 4.459817 -0.913373
H -4.153346 5.201418 0.797773
H -4.438817 3.877605 2.880412
H -3.100394 1.842209 3.254865
H -0.225309 -2.913182 0.481134
H 2.724802 1.128140 -1.777577
H -4.033478 0.233544 1.457224
H -2.182047 -4.098913 2.993900
C -3.102860 0.059952 -1.403198
C -4.466485 -0.181352 -1.498492
C -4.950293 -1.481131 -1.396703
C -4.066786 -2.535974 -1.197075
C -2.701707 -2.299550 -1.091514

H -2.728591 1.072859 -1.512709
H -5.149785 0.649400 -1.661223
H -6.017929 -1.673671 -1.480772
H -4.439529 -3.554980 -1.122634
H -2.030096 -3.139872 -0.949321

XVII

E = -2954.91370828
N -2.230931 1.265378 -1.032775
P -1.654398 -0.061402 -0.226963
C -2.093917 1.393639 -2.493267
C -3.362862 2.049840 -0.492845
C 0.004708 -0.528132 -0.848724
C -2.656148 -1.536888 -0.495151
C -1.640732 0.320705 1.522492
C -1.967994 2.851216 -2.908367
C -3.192771 3.516168 -0.837539
P 1.502623 -0.071428 0.051339
P -0.214548 -1.672191 -2.088784
C -3.095867 3.699788 -2.343618
N 1.519963 1.564849 0.384568
C 2.963931 -0.458247 -0.904171
C 1.479359 -1.001108 1.580244
C 2.799931 2.005594 0.990866
C 1.048110 2.516085 -0.633865
C 2.623134 3.355885 1.654927
C 0.888037 3.910484 -0.048785
C 2.160465 4.384897 0.635711
H -2.970558 0.937922 -2.981404
H -1.214310 0.829774 -2.821477
H -3.435760 1.893475 0.586112
H -4.299173 1.676670 -0.937074
H -1.952880 2.895599 -4.003676
H -1.002440 3.246311 -2.564874
H -2.285627 3.899759 -0.347362
H -4.040625 4.075613 -0.425585
H -4.048325 3.403957 -2.806715

H -2.943338 4.753988 -2.598897
H 3.567243 2.071905 0.201580
H 3.143776 1.249399 1.705002
H 0.095398 2.153919 -1.031149
H 1.769943 2.564502 -1.466433
H 3.575645 3.652245 2.108706
H 1.890807 3.267194 2.470867
H 0.063354 3.921713 0.675764
H 0.599777 4.590822 -0.859712
H 2.950460 4.531086 -0.114804
H 1.998232 5.359003 1.109496
C 4.036277 -1.150829 -0.337559
C 3.077782 0.100927 -2.185413
C 4.254437 -0.056091 -2.900548
C 5.319887 -0.760694 -2.341040
C 5.211956 -1.302672 -1.065391
C 1.388509 -0.379127 2.826480
C 1.497930 -2.399064 1.480504
C 1.434322 -3.168579 2.633743
C 1.357148 -2.548281 3.879460
C 1.334833 -1.160558 3.974202
C -2.030725 -0.637896 2.464092
C -1.278381 1.608150 1.935560
C -1.297963 1.930190 3.283817
C -1.673780 0.971517 4.223093
C -2.040146 -0.306530 3.813160
C -2.214807 -2.800085 -0.062192
C -3.902540 -1.405006 -1.111011
C -3.020743 -3.912648 -0.250557
C -4.261282 -3.777075 -0.873427
C -4.699623 -2.529448 -1.302431
H 6.047458 -1.846406 -0.630545
H 6.241147 -0.885293 -2.906143
H 4.343664 0.366437 -3.898718
H 2.240407 0.632018 -2.637422
H 3.961391 -1.570688 0.663167
H 1.338764 0.704416 2.898955

H 1.574636 -2.883097 0.506157
H 1.457192 -4.253784 2.563818
H 1.317177 -3.153936 4.782411
H 1.271743 -0.680822 4.948309
H -2.350373 -1.048155 4.545495
H -2.344889 -1.631091 2.156677
H -1.010270 2.357568 1.198354
H -1.034233 2.936113 3.603778
H -1.697488 1.229325 5.280052
H -1.247301 -2.909558 0.429700
H -2.683443 -4.890269 0.086183
H -4.887683 -4.653220 -1.026935
H -5.664520 -2.428615 -1.793849
H -4.249354 -0.433775 -1.454585
Cl 1.510773 -2.673239 -2.440256

$TS_{XVII \rightarrow XX^{ax}}$

E = -2954.88376153
N -2.458991 -0.769145 -1.302348
P -1.490029 0.074742 -0.124018
C -1.777754 -1.603977 -2.144680
C -3.891273 -0.998848 -1.009269
C 0.008632 -0.815615 -0.090865
C -2.422440 -0.015432 1.404017
C -1.371993 1.765045 -0.694157
C -2.519081 -2.393452 -3.180708
C -4.627436 -1.559234 -2.207455
P 1.552013 -0.073810 0.300821
P -0.026692 -2.589455 -0.259172
C -3.917640 -2.786807 -2.748814
N 2.356175 0.557118 -1.007758
C 2.471469 -1.433676 1.077888
C 1.290895 1.254032 1.497687
C 3.715763 1.115251 -0.873862
C 1.949013 0.330902 -2.396456
C 3.890864 2.385703 -1.689802
C 2.083921 1.602236 -3.214131

C 3.499148 2.152304 -3.140082
H -1.218533 -2.549231 -1.346403
H -0.806054 -1.209353 -2.465390
H -4.319012 -0.038804 -0.704872
H -3.978698 -1.679611 -0.149960
H -1.900350 -3.245931 -3.484915
H -2.565477 -1.735300 -4.064356
H -4.702922 -0.791756 -2.989607
H -5.650737 -1.793278 -1.895216
H -3.871973 -3.570482 -1.979483
H -4.459456 -3.214421 -3.598134
H 4.441840 0.377078 -1.246867
H 3.938543 1.278219 0.187864
H 0.914907 -0.027881 -2.397763
H 2.569237 -0.466510 -2.834093
H 4.937421 2.702452 -1.609924
H 3.285070 3.202014 -1.273293
H 1.376012 2.348848 -2.829699
H 1.800961 1.386367 -4.251816
H 4.196446 1.436721 -3.599613
H 3.584572 3.080695 -3.715174
C 1.872658 -2.178244 2.106719
C 3.734892 -1.803790 0.614784
C 4.398839 -2.883849 1.186085
C 3.807693 -3.607749 2.215967
C 2.541188 -3.257829 2.671948
C 1.695179 2.560258 1.217160
C 0.638697 0.977113 2.705765
C 0.399143 1.995697 3.617754
C 0.824561 3.293566 3.341680
C 1.473554 3.572352 2.143790
C -1.290770 2.825194 0.215269
C -1.380112 2.011543 -2.072951
C -1.310251 3.316769 -2.536483
C -1.232633 4.373424 -1.631565
C -1.221368 4.127611 -0.262232
C -2.182158 -1.093269 2.264513

C -3.425527 0.913432 1.708648
 C -2.933533 -1.238615 3.421940
 C -3.920741 -0.305416 3.729485
 C -4.164876 0.766690 2.875530
 H 2.070434 -3.826096 3.470830
 H 4.331070 -4.452668 2.658016
 H 5.381270 -3.166486 0.814830
 H 4.199022 -1.273761 -0.208703
 H 0.881670 -1.922425 2.474402
 H 2.155806 2.796013 0.264885
 H 0.302961 -0.028282 2.939657
 H -0.111481 1.773803 4.552070
 H 0.650048 4.087645 4.064714
 H 1.803183 4.585195 1.922917
 H -1.160903 4.954195 0.442049
 H -1.273321 2.637045 1.287536
 H -1.459377 1.190821 -2.783312
 H -1.326179 3.512719 -3.606101
 H -1.187235 5.396707 -1.998500
 H -1.399367 -1.816208 2.036831
 H -2.746772 -2.077136 4.088863
 H -4.504629 -0.415316 4.640968
 H -4.938501 1.491877 3.117467
 H -3.632899 1.747893 1.041623
 Cl 1.432035 -2.973721 -1.664986

$TS_{XVII \rightarrow XX}^{eq}$

E = -2954.88845004
 N -2.407371 -0.984870 -1.111048
 P -1.564308 0.041741 -0.023104
 C -2.694229 -2.238872 -0.571307
 C -2.313020 -0.916331 -2.575334
 C -0.043931 -0.790779 0.292274
 C -2.643161 0.063932 1.403847
 C -1.383586 1.650378 -0.770006
 C -2.996771 -3.309687 -1.581682
 C -3.599398 -1.454365 -3.194289

P 1.532297 0.026881 0.292619
P -0.168751 -2.447271 0.841293
C -4.042638 -2.784655 -2.567560
N 2.254762 0.080281 -1.201929
C 2.627650 -0.849993 1.432880
C 1.260964 1.702585 0.902363
C 3.653941 0.548205 -1.259893
C 1.880821 -0.781917 -2.326367
C 3.910473 1.291774 -2.557367
C 2.128054 -0.079012 -3.650506
C 3.564151 0.414352 -3.750637
H -3.361437 -2.191684 0.299706
H -1.679943 -2.631856 0.045468
H -1.439466 -1.486197 -2.924130
H -2.170179 0.125650 -2.864034
H -3.345020 -4.209968 -1.066881
H -2.075269 -3.578722 -2.115746
H -3.423394 -1.559726 -4.270510
H -4.383938 -0.698654 -3.081102
H -4.993965 -2.659334 -2.038657
H -4.215142 -3.547264 -3.333640
H 4.329960 -0.318486 -1.194152
H 3.863516 1.173615 -0.383903
H 0.832088 -1.079902 -2.207702
H 2.471835 -1.711992 -2.293647
H 4.962402 1.598092 -2.586968
H 3.308816 2.212348 -2.583649
H 1.444036 0.775288 -3.751797
H 1.895173 -0.773232 -4.466806
H 4.245643 -0.448204 -3.777898
H 3.717180 0.958571 -4.688818
C 2.700165 -0.540491 2.797010
C 3.441047 -1.865475 0.910079
C 4.290271 -2.577524 1.746530
C 4.343075 -2.278092 3.103688
C 3.552340 -1.258052 3.625110
C 1.715558 2.809857 0.183781

C 0.562430 1.892167 2.101357
C 0.352600 3.174242 2.590245
C 0.833301 4.274139 1.885543
C 1.505989 4.090296 0.682104
C -1.965158 2.773173 -0.171625
C -0.630273 1.784997 -1.943349
C -0.497231 3.030174 -2.537562
C -1.098133 4.144441 -1.956638
C -1.820162 4.016830 -0.773999
C -2.200492 -0.358096 2.660876
C -3.975248 0.465562 1.221950
C -3.083122 -0.367346 3.735056
C -4.398922 0.046198 3.556474
C -4.845252 0.461023 2.301803
H 3.609450 -1.009536 4.682346
H 5.013406 -2.833108 3.756473
H 4.918746 -3.363264 1.333815
H 3.414068 -2.101136 -0.150684
H 2.119637 0.274633 3.217657
H 2.208450 2.677111 -0.774637
H 0.170433 1.042241 2.653277
H -0.185294 3.314746 3.525167
H 0.676972 5.278606 2.273117
H 1.867529 4.949712 0.121879
H -2.274993 4.891412 -0.314750
H -2.519190 2.683320 0.759548
H -0.146256 0.921280 -2.387615
H 0.076986 3.133064 -3.456060
H -0.997200 5.120737 -2.426199
H -1.172745 -0.687175 2.804216
H -2.742448 -0.700485 4.712577
H -5.087057 0.039957 4.399236
H -5.877556 0.775938 2.166772
H -4.329292 0.773750 0.238686
Cl 0.988266 -3.542360 -0.470020

XX

E = -2954.92027755

N -2.568674 -1.140663 -0.511480

P -1.432819 0.211753 0.037285

C -3.364241 -1.686252 0.345967

C -2.388016 -1.723276 -1.857319

C -0.033349 -0.535811 0.677101

C -2.487678 1.033490 1.227878

C -1.188059 1.230696 -1.408098

C -4.128037 -2.925584 0.137840

C -3.532642 -2.636235 -2.244023

P 1.597337 0.036034 0.310859

P -0.209007 -1.820051 1.922683

C -3.810755 -3.653906 -1.155146

N 2.233192 -0.689081 -1.050132

C 2.680297 -0.348784 1.695455

C 1.547421 1.818508 0.063627

C 3.671664 -0.478319 -1.293258

C 1.761438 -1.983228 -1.547424

C 3.963501 -0.547875 -2.780351

C 2.017011 -2.101538 -3.040413

C 3.487334 -1.871822 -3.359827

H -3.471911 -1.174706 1.305606

H -1.559280 -1.528181 2.266050

H -1.427287 -2.255740 -1.842884

H -2.309302 -0.888757 -2.557561

H -5.192057 -2.643505 0.225380

H -3.943308 -3.540921 1.032748

H -3.269989 -3.121652 -3.189843

H -4.428336 -2.031113 -2.441694

H -4.640958 -4.311369 -1.428580

H -2.932120 -4.292494 -1.006492

H 4.245271 -1.252226 -0.756404

H 3.974394 0.485635 -0.867205

H 0.700757 -2.094794 -1.298678

H 2.288460 -2.802050 -1.028716

H 5.039477 -0.414851 -2.940797

H 3.458287 0.287364 -3.288541
H 1.406153 -1.362367 -3.579480
H 1.694174 -3.093021 -3.380192
H 4.082686 -2.690215 -2.929894
H 3.655031 -1.903366 -4.441941
C 3.205518 0.622767 2.551197
C 3.047171 -1.693810 1.854267
C 3.907983 -2.061777 2.877251
C 4.416995 -1.092108 3.737924
C 4.070974 0.244456 3.571615
C 2.012199 2.410156 -1.111399
C 0.984622 2.611218 1.071561
C 0.899350 3.986954 0.905987
C 1.375608 4.576187 -0.262366
C 1.929038 3.789036 -1.267093
C -1.647820 2.553295 -1.442242
C -0.456968 0.712536 -2.486773
C -0.235528 1.493268 -3.610027
C -0.719913 2.798560 -3.655350
C -1.410907 3.328919 -2.570188
C -2.044728 1.226848 2.539526
C -3.753058 1.496534 0.833541
C -2.861004 1.885807 3.451506
C -4.111224 2.351141 3.056660
C -4.557819 2.156656 1.749649
H 4.485022 1.001510 4.233618
H 5.096730 -1.380689 4.536807
H 4.187748 -3.105361 3.000778
H 2.661556 -2.457308 1.178360
H 2.965597 1.673950 2.415765
H 2.412497 1.793919 -1.912320
H 0.618899 2.154933 1.989350
H 0.468453 4.602088 1.692853
H 1.316334 5.655185 -0.388711
H 2.295518 4.250153 -2.181584
H -1.767058 4.356048 -2.598684
H -2.169351 2.984798 -0.592194

H -0.054335 -0.294402 -2.442709
H 0.321602 1.084629 -4.450603
H -0.547592 3.410197 -4.538594
H -1.067371 0.857339 2.846250
H -2.520076 2.034343 4.473459
H -4.746964 2.867755 3.772780
H -5.536764 2.521658 1.447164
H -4.106016 1.345731 -0.186569
Cl -0.714537 -3.544483 0.775249

TS_{XX→XVIII}^{P1}

E = -2954.91887327
N 2.474726 0.185014 1.534614
P 1.455092 0.432143 0.094216
C 2.889300 -1.057884 1.679071
C 2.281408 1.048797 2.715566
C 0.092866 -0.567714 0.470350
C 2.537215 -0.156106 -1.201468
C 1.075845 2.168163 -0.027598
C 3.534892 -1.575398 2.904198
C 3.230717 0.693353 3.840459
P -1.502161 -0.297903 -0.225784
P 0.440959 -1.965925 1.493835
C 3.167814 -0.792189 4.148925
N -2.536914 0.317576 0.923375
C -2.163185 -1.879259 -0.784647
C -1.384374 0.881733 -1.585516
C -3.966844 0.383484 0.569607
C -2.284532 0.299396 2.362687
C -4.630431 1.584883 1.218740
C -2.907577 1.514578 3.027919
C -4.395521 1.593937 2.721405
H 2.994075 -1.641326 0.759130
H -0.833717 -2.255589 2.030225
H 1.236050 0.917438 3.040202
H 2.404611 2.085821 2.391365
H 4.618565 -1.507325 2.697549

H 3.328389 -2.648945 2.978780
H 2.959318 1.296068 4.713706
H 4.253371 0.983720 3.564987
H 3.839515 -1.054985 4.971431
H 2.152299 -1.069534 4.464896
H -4.467293 -0.541476 0.898497
H -4.061897 0.419503 -0.522985
H -1.202358 0.265103 2.534797
H -2.713848 -0.616745 2.806996
H -5.701846 1.559850 0.989066
H -4.235702 2.510806 0.776286
H -2.405426 2.421237 2.658653
H -2.731146 1.462259 4.108938
H -4.906328 0.733592 3.177881
H -4.834760 2.489470 3.174163
C -1.990968 -2.377943 -2.078572
C -2.778398 -2.676988 0.189242
C -3.178722 -3.969543 -0.118130
C -2.979506 -4.470992 -1.400991
C -2.399472 -3.671613 -2.380214
C -2.039066 2.112414 -1.490340
C -0.593126 0.604838 -2.707557
C -0.480377 1.539629 -3.728498
C -1.153381 2.754136 -3.638956
C -1.927039 3.039902 -2.518382
C 1.573981 2.952993 -1.073350
C 0.203221 2.724174 0.919654
C -0.127629 4.067490 0.845161
C 0.392514 4.855646 -0.179848
C 1.231308 4.298017 -1.139346
C 2.179428 -1.309163 -1.908644
C 3.770429 0.469395 -1.439908
C 3.040569 -1.817074 -2.873909
C 4.252032 -1.182226 -3.127677
C 4.618973 -0.044305 -2.409301
H -2.269979 -4.054533 -3.389924
H -3.293670 -5.484046 -1.642580

H -3.656493 -4.583970 0.641481
H -2.953270 -2.286984 1.191133
H -1.563057 -1.762833 -2.863933
H -2.618186 2.351792 -0.603255
H -0.052520 -0.332391 -2.791800
H 0.130417 1.314419 -4.599929
H -1.073032 3.480995 -4.444512
H -2.446317 3.992648 -2.441672
H 1.617414 4.911290 -1.950172
H 2.204383 2.518402 -1.844540
H -0.225660 2.103026 1.701760
H -0.796783 4.502090 1.584708
H 0.132522 5.910713 -0.236095
H 1.241657 -1.817745 -1.688685
H 2.767726 -2.715365 -3.422805
H 4.924444 -1.581638 -3.884143
H 5.574298 0.438304 -2.602960
H 4.071334 1.345417 -0.866685
Cl 0.645039 -3.666632 0.323489

$TS_{xx \rightarrow xviii}^{D2}$

E = -2954.90603307

N -2.706812 0.312856 -1.026456
P -1.379771 0.509010 0.125714
C -2.342189 0.362642 -2.318686
C -3.974327 -0.343761 -0.607387
C -0.159922 -0.451711 -0.660638
C -2.016303 -0.178229 1.642636
C -0.994724 2.254103 0.279300
C -3.329778 0.220391 -3.436763
C -4.730083 -0.941663 -1.774922
P 1.521932 -0.476587 -0.159060
P -0.750497 -1.339666 -2.052539
C -4.754087 0.014540 -2.948827
N 2.449599 -0.249817 -1.516891
C 2.036947 -2.020314 0.614215
C 1.742041 0.790033 1.106521

C 3.845339 -0.710718 -1.593452
C 2.022891 0.478856 -2.713352
C 4.794677 0.443386 -1.861036
C 2.943231 1.642088 -3.050286
C 4.394948 1.191028 -3.124230
H -1.479360 0.994299 -2.520996
H 0.440488 -1.898948 -2.579236
H -4.575112 0.422322 -0.101664
H -3.735412 -1.117475 0.127810
H -3.010246 -0.609383 -4.078492
H -3.231224 1.122112 -4.055993
H -5.739364 -1.185821 -1.426762
H -4.259363 -1.888250 -2.073240
H -5.370719 -0.372268 -3.765308
H -5.194020 0.974314 -2.647447
H 3.909548 -1.448496 -2.408179
H 4.108059 -1.235012 -0.671588
H 0.994339 0.828237 -2.573083
H 2.017563 -0.230768 -3.557676
H 5.814503 0.050879 -1.948834
H 4.791317 1.122764 -0.996381
H 2.829452 2.432712 -2.294642
H 2.621930 2.077128 -4.004657
H 4.522990 0.528460 -3.992522
H 5.053158 2.050331 -3.292788
C 3.060610 -2.012163 1.571179
C 1.471656 -3.235200 0.215015
C 1.921762 -4.426908 0.768362
C 2.940728 -4.414551 1.716187
C 3.508840 -3.208652 2.115899
C 2.308925 2.022297 0.777176
C 1.334471 0.533550 2.422023
C 1.494089 1.510608 3.395949
C 2.059076 2.739183 3.063507
C 2.463598 2.995670 1.756429
C -1.084141 2.909782 1.511374
C -0.548355 2.959386 -0.848610

C -0.251929 4.309578 -0.753167
C -0.379446 4.966655 0.469062
C -0.782011 4.264054 1.597721
C -1.571042 -1.448082 2.029590
C -3.023110 0.472753 2.371181
C -2.110198 -2.046745 3.161625
C -3.094734 -1.391729 3.895040
C -3.554669 -0.137100 3.497404
H 4.305731 -3.198475 2.856016
H 3.293194 -5.349513 2.146568
H 1.474370 -5.368248 0.457585
H 0.668102 -3.264612 -0.514898
H 3.511506 -1.075113 1.892128
H 2.637949 2.213277 -0.240718
H 0.922436 -0.436463 2.693350
H 1.194235 1.306055 4.421433
H 2.196925 3.497437 3.831718
H 2.913782 3.952433 1.501490
H -0.855902 4.768078 2.558655
H -1.358982 2.367810 2.411084
H -0.405808 2.461435 -1.804410
H 0.084121 4.852461 -1.633659
H -0.149533 6.027586 0.541270
H -0.812128 -1.965432 1.444723
H -1.762937 -3.030602 3.468402
H -3.515049 -1.864697 4.780213
H -4.334835 0.363652 4.066187
H -3.403838 1.442261 2.054893
Cl -1.767236 -3.048672 -1.452640

XVIII^{D1}

E = -2954.93848685
N 2.309628 0.027224 1.715930
P 1.479272 0.591747 0.333129
C 2.411127 -1.407657 1.568505
C 1.842923 0.496188 3.031249
C 0.136603 -0.560778 0.296048

C 2.659408 0.356035 -0.989438
C 0.921806 2.275599 0.482221
C 3.030695 -2.147636 2.741167
C 2.615512 -0.158729 4.157001
P -1.444480 -0.329418 -0.429055
P 0.701418 -2.006231 1.013476
C 2.489648 -1.669994 4.075444
N -2.580838 0.001577 0.736567
C -1.895938 -1.878170 -1.230616
C -1.355916 1.060833 -1.564534
C -3.989075 -0.002600 0.297949
C -2.405627 -0.243785 2.166627
C -4.804620 1.002096 1.091927
C -3.179324 0.779978 2.979050
C -4.649635 0.775901 2.588052
H 2.976868 -1.632742 0.651186
H -0.163890 -2.581109 1.963936
H 0.767189 0.264927 3.158402
H 1.952227 1.584388 3.056208
H 4.110902 -1.960131 2.692296
H 2.898055 -3.226318 2.591421
H 2.229427 0.221363 5.109098
H 3.670924 0.137358 4.097375
H 3.032474 -2.157436 4.891782
H 1.433101 -1.961953 4.189599
H -4.404984 -1.015206 0.428112
H -4.027347 0.218310 -0.776539
H -1.336827 -0.212273 2.404097
H -2.770284 -1.255293 2.421560
H -5.854608 0.918555 0.789008
H -4.483930 2.021937 0.835591
H -2.750402 1.776568 2.798587
H -3.055208 0.560387 4.046169
H -5.095564 -0.191413 2.861791
H -5.198873 1.538828 3.150245
C -1.683780 -2.155112 -2.582363
C -2.383118 -2.879496 -0.378996

C -2.627002 -4.153950 -0.872231
C -2.392647 -4.432999 -2.215808
C -1.932113 -3.434374 -3.068008
C -2.089571 2.216641 -1.282597
C -0.501826 1.030890 -2.674142
C -0.404206 2.141068 -3.502380
C -1.153405 3.282189 -3.230891
C -1.991150 3.319507 -2.120794
C 1.383230 3.258561 -0.400512
C -0.053961 2.588035 1.439584
C -0.530564 3.885592 1.536961
C -0.051077 4.870130 0.674934
C 0.896033 4.555471 -0.293569
C 2.458425 -0.622469 -1.968272
C 3.856495 1.084803 -0.952435
C 3.437151 -0.842855 -2.929950
C 4.611834 -0.097002 -2.910813
C 4.824016 0.860888 -1.920963
H -1.774993 -3.648965 -4.122672
H -2.586580 -5.430493 -2.604180
H -3.011552 -4.927748 -0.211623
H -2.583599 -2.661720 0.670432
H -1.351743 -1.379994 -3.267062
H -2.719251 2.257729 -0.398344
H 0.097187 0.153450 -2.896638
H 0.255848 2.111946 -4.366376
H -1.081927 4.146837 -3.887406
H -2.569735 4.214255 -1.902297
H 1.257431 5.322383 -0.974648
H 2.105745 3.016161 -1.175400
H -0.444012 1.820127 2.101695
H -1.278084 4.132457 2.287827
H -0.424170 5.888993 0.756471
H 1.550789 -1.225166 -1.966207
H 3.286513 -1.604721 -3.691310
H 5.375773 -0.271964 -3.665496
H 5.752209 1.427385 -1.899417

H 4.036415 1.814512 -0.164335
Cl 1.060688 -3.597888 -0.184595

XVIII^{D2}

E = -2954.94845199
N -2.205246 0.033902 -1.698815
P -1.332396 0.540313 -0.364716
C -2.047774 -1.339070 -2.165129
C -3.495388 0.666466 -2.020747
C 0.009536 -0.599375 -0.469602
C -2.334407 0.373914 1.112115
C -0.874906 2.251156 -0.595626
C -3.229281 -2.236675 -1.801494
C -4.676280 -0.204943 -1.635516
P 1.634248 -0.411136 0.184338
P -0.442563 -1.911003 -1.450543
C -4.533336 -1.589595 -2.246875
N 2.635340 0.261421 -0.941796
C 2.260500 -2.063509 0.516770
C 1.488241 0.571608 1.679471
C 4.100151 0.166563 -0.807114
C 2.191257 0.973577 -2.138852
C 4.777000 1.524641 -0.926638
C 2.772731 2.373196 -2.178601
C 4.293080 2.302316 -2.142946
H -1.910760 -1.333801 -3.259234
H 0.460993 -2.269545 -2.463503
H -3.503823 0.869707 -3.101676
H -3.528370 1.641315 -1.518306
H -3.247520 -2.385205 -0.713052
H -3.094983 -3.222733 -2.261372
H -5.600739 0.277372 -1.972571
H -4.734609 -0.281456 -0.540131
H -5.372125 -2.231358 -1.957315
H -4.558286 -1.520400 -3.343956
H 4.470691 -0.500321 -1.601632
H 4.346513 -0.313189 0.147496

H 1.099488 0.986589 -2.163120
H 2.532798 0.406258 -3.020426
H 5.860162 1.362745 -0.975729
H 4.602945 2.113595 -0.016479
H 2.384232 2.940180 -1.318071
H 2.425149 2.887337 -3.082957
H 4.647373 1.808636 -3.059616
H 4.730864 3.306480 -2.146603
C 2.153799 -2.667473 1.770932
C 2.746763 -2.792391 -0.577644
C 3.094730 -4.126950 -0.418794
C 2.966132 -4.733975 0.827813
C 2.507218 -4.003690 1.919893
C 2.249829 1.732407 1.826390
C 0.571608 0.203337 2.671823
C 0.413553 1.000548 3.797078
C 1.175781 2.158455 3.941317
C 2.095685 2.519856 2.961243
C -0.498691 3.035910 0.501580
C -0.864116 2.788724 -1.889437
C -0.483959 4.109529 -2.079930
C -0.103149 4.888559 -0.989398
C -0.106895 4.352670 0.295441
C -2.472861 -0.897811 1.683833
C -3.133647 1.432516 1.556093
C -3.389107 -1.101189 2.704767
C -4.175221 -0.041038 3.155359
C -4.048527 1.219776 2.582136
H 2.431859 -4.474825 2.897288
H 3.241694 -5.779056 0.952187
H 3.479339 -4.692239 -1.264806
H 2.868303 -2.310725 -1.547656
H 1.813462 -2.102339 2.634688
H 2.943447 2.027620 1.045123
H -0.025712 -0.698037 2.563379
H -0.302863 0.716688 4.564785
H 1.054393 2.779568 4.826396

H 2.692878 3.421425 3.078075
H 0.185382 4.965989 1.144787
H -0.517929 2.626411 1.510425
H -1.163019 2.176242 -2.737992
H -0.489414 4.535747 -3.080555
H 0.191282 5.924824 -1.142223
H -1.854813 -1.726472 1.336813
H -3.492522 -2.086462 3.153854
H -4.892370 -0.201978 3.957556
H -4.667176 2.043191 2.931739
H -3.051889 2.419276 1.104680
Cl -0.691447 -3.702067 -0.537086

TS_{XVII→XIX}

E = -2954.90731587
N -2.453705 -1.256727 0.354434
P -1.565848 0.216544 0.054785
C -2.161231 -1.989328 1.614197
C -3.883768 -1.345337 -0.014323
C -0.112235 -0.616195 -0.478391
C -1.303400 1.369467 1.400136
C -2.495489 1.052368 -1.226321
C -2.573331 -3.446685 1.512586
C -4.306387 -2.798581 -0.142318
P 1.547775 -0.063875 -0.189068
P -0.729617 -2.123369 -1.072007
C -4.037025 -3.578467 1.132021
N 1.777161 1.470468 -0.802469
C 2.670082 -1.211204 -0.982908
C 1.843627 0.006086 1.577583
C 3.197477 1.889454 -0.803066
C 1.061452 1.946935 -1.990384
C 3.301020 3.400985 -0.842887
C 1.133381 3.461790 -2.077443
C 2.572718 3.952193 -2.058553
H -2.724271 -1.509994 2.427079
H -1.088640 -1.884470 1.828991

H -4.037825 -0.816721 -0.957086
H -4.480182 -0.837166 0.760213
H -2.363816 -3.925179 2.476458
H -1.944022 -3.957219 0.770490
H -3.761686 -3.249574 -0.984558
H -5.369513 -2.819845 -0.407137
H -4.668309 -3.192051 1.944991
H -4.306252 -4.632165 1.003623
H 3.699577 1.451465 -1.681795
H 3.695943 1.479521 0.083248
H 0.021736 1.613879 -1.938781
H 1.503575 1.506960 -2.901177
H 4.360481 3.681270 -0.857304
H 2.870897 3.819837 0.078650
H 0.591219 3.895549 -1.226420
H 0.617341 3.786336 -2.988763
H 3.086048 3.619377 -2.972188
H 2.604461 5.047102 -2.066429
C 3.760486 -1.766595 -0.311695
C 2.475863 -1.461297 -2.349449
C 3.357591 -2.288202 -3.028793
C 4.434911 -2.859093 -2.353038
C 4.638188 -2.595048 -1.002927
C 2.109748 1.214866 2.223040
C 1.737634 -1.183084 2.309852
C 1.915474 -1.158387 3.686661
C 2.207362 0.043681 4.328765
C 2.304107 1.224195 3.599405
C -3.496484 1.967584 -0.872545
C -2.308594 0.695296 -2.567008
C -3.114963 1.255647 -3.548475
C -4.106073 2.168224 -3.195758
C -4.295660 2.523391 -1.862280
C -1.037250 2.699736 1.040877
C -1.268544 0.990613 2.749231
C -0.755940 3.639226 2.022913
C -0.758949 3.266312 3.363663

C -1.015775 1.946151 3.722880
H 5.485490 -3.035678 -0.482574
H 5.123435 -3.510581 -2.886912
H 3.208504 -2.489536 -4.087142
H 1.634786 -1.016776 -2.882945
H 3.927157 -1.560527 0.743362
H 2.144330 2.143034 1.656901
H 1.528925 -2.124752 1.801792
H 1.842630 -2.080123 4.259698
H 2.362523 0.057083 5.405635
H 2.525514 2.161440 4.105168
H -5.071291 3.236381 -1.592203
H -3.653356 2.245617 0.168080
H -1.527232 -0.009558 -2.847860
H -2.967524 0.984021 -4.591121
H -4.734663 2.608514 -3.967031
H -1.064012 3.004859 -0.002592
H -0.553825 4.670054 1.740545
H -0.561855 4.009462 4.133637
H -1.011636 1.654138 4.770368
H -1.429782 -0.035603 3.056234
Cl 0.605656 -3.554367 -0.418474

XIX

E = -2954.92786245
N -2.191676 -1.035616 -1.070447
P -1.390923 0.198674 0.049975
C -3.287170 -1.873294 -0.485415
C -2.644187 -0.424268 -2.376786
C 0.099390 -0.491177 -0.450377
C -1.912710 0.008620 1.743117
C -1.835824 1.808309 -0.562983
C -3.769304 -2.929287 -1.460341
C -3.102607 -1.481535 -3.359894
P 1.694710 -0.009260 0.073345
P -0.481683 -1.849146 -1.427875
C -4.222076 -2.325674 -2.777384

N 2.367074 1.075385 -1.008175
C 2.754220 -1.445364 0.238695
C 1.467057 0.861946 1.623854
C 3.692998 1.602085 -0.634464
C 2.251763 0.796320 -2.445327
C 3.975562 2.884999 -1.392940
C 2.519766 2.057583 -3.249258
C 3.870249 2.659896 -2.893213
H -4.091893 -1.171747 -0.223389
H -2.918754 -2.322093 0.438743
H -1.808180 0.171033 -2.762606
H -3.460458 0.266155 -2.135677
H -4.578194 -3.482869 -0.969534
H -2.960841 -3.654082 -1.629998
H -2.252374 -2.116853 -3.646747
H -3.419386 -0.961227 -4.271525
H -5.114841 -1.703960 -2.619555
H -4.511137 -3.114622 -3.479231
H 4.465096 0.847285 -0.860706
H 3.715242 1.774469 0.448100
H 1.243384 0.412036 -2.645922
H 2.970961 0.010574 -2.735208
H 4.973097 3.246653 -1.118663
H 3.257565 3.654637 -1.074022
H 1.721926 2.787671 -3.048911
H 2.466559 1.813955 -4.316803
H 4.669441 1.977013 -3.215836
H 4.027012 3.597860 -3.437063
C 3.697074 -1.557799 1.265601
C 2.743080 -2.382904 -0.802179
C 3.630981 -3.448380 -0.791448
C 4.545621 -3.575301 0.250950
C 4.583538 -2.629279 1.269857
C 1.280784 2.249213 1.611268
C 1.312760 0.138528 2.811747
C 0.993570 0.808065 3.985175
C 0.814247 2.189288 3.974577

C 0.953471 2.907529 2.790658
C -3.143397 2.301309 -0.421433
C -0.875231 2.540626 -1.268834
C -1.214677 3.774884 -1.807960
C -2.509009 4.265338 -1.664771
C -3.473344 3.527749 -0.978120
C -2.432040 1.088443 2.473219
C -1.674218 -1.219277 2.382292
C -2.756823 0.916113 3.812814
C -2.565562 -0.316887 4.427495
C -2.016110 -1.381757 3.714430
H 5.310710 -2.721952 2.073310
H 5.240556 -4.412179 0.262151
H 3.614451 -4.177472 -1.598081
H 2.061135 -2.278261 -1.649199
H 3.747165 -0.814590 2.058750
H 1.408572 2.808939 0.686577
H 1.435495 -0.943040 2.819020
H 0.884393 0.249946 4.912470
H 0.570345 2.710368 4.898102
H 0.821104 3.987105 2.787324
H -4.485628 3.912730 -0.877998
H -3.902773 1.729681 0.111066
H 0.132687 2.147475 -1.384262
H -0.468023 4.353373 -2.347650
H -2.773783 5.228996 -2.095086
H -2.560294 2.064600 2.015232
H -3.159676 1.752874 4.378814
H -2.832432 -0.446772 5.474463
H -1.845904 -2.338290 4.203321
H -1.206047 -2.038524 1.840085
Cl -0.556273 -3.506897 -0.144759

TS_{XIX→XVIII}

E = -2954.87085970
N 2.632687 0.613905 -0.836007
P 1.442145 -0.246013 0.039515

C 3.715249 1.458528 -0.305665
C 2.342926 0.714633 -2.156324
C -0.029033 0.438783 -0.695695
C 1.665755 0.167218 1.756914
C 1.691701 -1.976473 -0.317313
C 4.976555 1.224252 -1.129598
C 3.232739 1.592790 -2.953209
P -1.648107 0.124258 -0.052557
P 0.084055 1.622790 -1.931047
C 4.696743 1.229354 -2.640614
N -2.468551 -0.989531 -0.982898
C -2.498126 1.704326 0.029678
C -1.498660 -0.631367 1.573719
C -3.677490 -1.650407 -0.455277
C -2.425601 -0.946826 -2.448041
C -3.776617 -3.067970 -0.984582
C -2.561938 -2.340966 -3.040992
C -3.786801 -3.065216 -2.505065
H 3.869923 1.203827 0.745108
H 3.398961 2.507722 -0.347905
H 0.349863 1.435126 -3.289005
H 1.915675 -0.182728 -2.612268
H 5.421842 0.269086 -0.830785
H 5.697100 2.002490 -0.855901
H 3.051782 2.639758 -2.667228
H 3.014825 1.496634 -4.020693
H 4.914181 0.246459 -3.072055
H 5.340525 1.944471 -3.162101
H -4.571389 -1.087087 -0.766833
H -3.653471 -1.631518 0.638084
H -1.476290 -0.496236 -2.759069
H -3.230665 -0.296285 -2.828133
H -4.685947 -3.532232 -0.585756
H -2.925924 -3.656620 -0.610215
H -1.660041 -2.924443 -2.807371
H -2.604111 -2.252506 -4.133039
H -4.696516 -2.559839 -2.860451

H -3.828587 -4.087057 -2.897812
C -3.780164 1.828714 -0.512641
C -1.881198 2.810086 0.629458
C -2.549069 4.023906 0.692742
C -3.828102 4.143372 0.152963
C -4.440157 3.050411 -0.450786
C -1.244311 -2.006307 1.657155
C -1.603134 0.135541 2.737968
C -1.445485 -0.473812 3.976389
C -1.192150 -1.840271 4.058585
C -1.092735 -2.605979 2.900510
C 2.867612 -2.614655 0.103476
C 0.756660 -2.659041 -1.099401
C 0.983289 -3.986895 -1.439590
C 2.142156 -4.625615 -1.009875
C 3.084144 -3.940095 -0.243409
C 1.894182 -0.793604 2.743637
C 1.556533 1.525519 2.092745
C 2.041620 -0.387104 4.065289
C 1.949833 0.959792 4.397821
C 1.703373 1.917253 3.413504
H -5.435365 3.148546 -0.878003
H -4.348236 5.097703 0.200180
H -2.071841 4.882838 1.159005
H -0.876274 2.718164 1.037866
H -4.261358 0.980588 -0.991845
H -1.202834 -2.610102 0.753830
H -1.828318 1.197700 2.685128
H -1.539398 0.119598 4.883056
H -1.087396 -2.314104 5.032554
H -0.915066 -3.677210 2.965620
H 3.993621 -4.441972 0.078992
H 3.613286 -2.080098 0.690535
H -0.148314 -2.151608 -1.425983
H 0.255767 -4.523411 -2.045197
H 2.319640 -5.664785 -1.278965
H 1.938988 -1.850216 2.491171

H 2.224008 -1.129223 4.839106
H 2.068261 1.270210 5.433931
H 1.631023 2.969147 3.680460
H 1.370740 2.267279 1.314774
Cl 0.787953 3.470268 -1.445644

TS_{XVII→XXI}^{D1}

E = -2954.90276576
N -1.436618 1.874801 -0.523141
P -1.494076 0.261673 -0.131976
C -0.555470 2.367696 -1.585833
C -2.753721 2.548040 -0.515281
C -0.013116 -0.614957 -0.514242
C -2.616935 -0.627156 -1.236391
C -1.968099 0.118475 1.586512
C -0.346885 3.865991 -1.444870
C -2.577884 4.043523 -0.336813
P 1.614577 -0.235574 0.089513
P -0.066190 -2.076767 -1.441433
C -1.673115 4.610575 -1.420070
N 2.495687 0.686804 -0.971064
C 2.358133 -1.858657 0.344028
C 1.470771 0.675716 1.623726
C 3.676612 1.460558 -0.542794
C 2.514065 0.335969 -2.398014
C 3.779592 2.736625 -1.355091
C 2.673670 1.571605 -3.269761
C 3.864540 2.414270 -2.839077
H -0.998922 2.156103 -2.575112
H 0.397329 1.835974 -1.523688
H -3.373037 2.124141 0.283812
H -3.268502 2.339572 -1.468534
H 0.285678 4.212313 -2.271717
H 0.202032 4.068872 -0.514825
H -2.148947 4.240595 0.656372
H -3.564642 4.519953 -0.358926
H -2.167852 4.511210 -2.397098

H -1.508385 5.682099 -1.263847
H 4.584337 0.855460 -0.698003
H 3.608670 1.666657 0.528543
H 1.580541 -0.186633 -2.644897
H 3.337325 -0.370756 -2.592554
H 4.659785 3.299493 -1.023645
H 2.899608 3.365989 -1.151867
H 1.758398 2.176215 -3.217775
H 2.778333 1.248518 -4.312165
H 4.796404 1.865026 -3.037079
H 3.915230 3.331914 -3.435112
C 3.673125 -2.088481 -0.074241
C 1.636299 -2.883576 0.984217
C 2.227808 -4.122983 1.187332
C 3.531876 -4.348853 0.754546
C 4.252023 -3.335105 0.126446
C 1.285766 2.063110 1.579300
C 1.499039 0.003220 2.849408
C 1.355791 0.724797 4.027823
C 1.188687 2.105834 3.985378
C 1.152155 2.773892 2.763296
C -2.173660 -1.161171 2.118022
C -2.016077 1.243527 2.413571
C -2.295957 1.085721 3.765346
C -2.510608 -0.183270 4.292749
C -2.445693 -1.306460 3.470993
C -2.144581 -0.828519 -2.558671
C -3.802452 -1.214775 -0.826244
C -2.849464 -1.667474 -3.426974
C -4.003837 -2.302735 -2.986934
C -4.488263 -2.059919 -1.703078
H 5.269484 -3.518529 -0.211052
H 3.991834 -5.322810 0.907968
H 1.671310 -4.914436 1.683986
H 0.620357 -2.704063 1.334782
H 4.240300 -1.302206 -0.565910
H 1.277668 2.583651 0.624575

H 1.654106 -1.072160 2.892096
H 1.390943 0.207205 4.983554
H 1.094389 2.668191 4.912147
H 1.032599 3.854824 2.734564
H -2.612844 -2.297651 3.886377
H -2.123152 -2.039621 1.476732
H -1.818350 2.232164 2.007054
H -2.341846 1.960179 4.410523
H -2.730537 -0.300064 5.351870
H -1.308590 -0.245230 -2.944115
H -2.496823 -1.810632 -4.446117
H -4.543403 -2.973874 -3.651419
H -5.402891 -2.546697 -1.370291
H -4.174878 -1.064620 0.185176
Cl -1.418590 -3.433992 -0.676258

XXI^{P1}

E = -2954.90656103
N -1.552728 1.822789 -0.741342
P -1.468232 0.258421 -0.207532
C -0.643640 2.311131 -1.782292
C -2.885086 2.455764 -0.782274
C 0.019755 -0.574807 -0.532473
C -2.477947 -0.837497 -1.261857
C -2.029970 0.184695 1.487037
C -0.486585 3.818877 -1.681128
C -2.758729 3.961126 -0.647182
P 1.591030 -0.192035 0.161240
P -0.110922 -2.005217 -1.556231
C -1.835913 4.520799 -1.719563
N 2.516938 0.722893 -0.876756
C 2.354717 -1.773518 0.536156
C 1.339524 0.807266 1.631661
C 3.690346 1.469677 -0.389163
C 2.589934 0.381268 -2.301518
C 3.863784 2.746323 -1.189193
C 2.811272 1.621029 -3.154281

C 4.005141 2.429087 -2.669687
H -1.042282 2.053553 -2.780431
H 0.320290 1.807662 -1.665892
H -3.511625 2.035078 0.012452
H -3.368074 2.206428 -1.742404
H 0.159884 4.161485 -2.498486
H 0.027563 4.063832 -0.741621
H -2.366747 4.202688 0.351443
H -3.757001 4.408439 -0.714956
H -2.296385 4.376660 -2.707849
H -1.708930 5.601267 -1.592636
H 4.593991 0.848103 -0.495370
H 3.569238 1.678227 0.677606
H 1.656168 -0.119328 -2.589732
H 3.405467 -0.340812 -2.471880
H 4.742866 3.284054 -0.815801
H 2.992876 3.398413 -1.022689
H 1.910216 2.249056 -3.126053
H 2.946003 1.307820 -4.196357
H 4.928914 1.854663 -2.831020
H 4.106490 3.347777 -3.257747
C 3.666404 -2.031322 0.122739
C 1.640179 -2.744520 1.253134
C 2.238562 -3.959613 1.552931
C 3.542874 -4.213894 1.134675
C 4.253939 -3.254335 0.420045
C 1.109336 2.178314 1.466227
C 1.318682 0.236635 2.906815
C 1.072744 1.043044 4.011748
C 0.854873 2.408221 3.848686
C 0.872546 2.975635 2.577272
C -2.147602 -1.080663 2.077696
C -2.221795 1.341524 2.245590
C -2.566270 1.227989 3.587005
C -2.700873 -0.027090 4.171033
C -2.485747 -1.180886 3.419378
C -1.839379 -1.184513 -2.506369

C -3.626681 -1.490294 -0.872349
C -2.448627 -2.163395 -3.346018
C -3.565396 -2.842976 -2.914055
C -4.150683 -2.502533 -1.687794
H 5.270479 -3.459456 0.092729
H 4.007834 -5.169929 1.365941
H 1.687162 -4.713540 2.109992
H 0.617513 -2.545385 1.570968
H 4.225911 -1.284605 -0.434729
H 1.151033 2.619565 0.473101
H 1.516081 -0.823469 3.045761
H 1.069182 0.604572 5.006992
H 0.681415 3.036369 4.720082
H 0.716952 4.045280 2.453221
H -2.583599 -2.160269 3.882204
H -1.968619 -1.981880 1.490797
H -2.078661 2.322070 1.798437
H -2.722402 2.126015 4.180390
H -2.970941 -0.109283 5.221784
H -1.222484 -0.426561 -2.998901
H -2.012168 -2.372850 -4.321247
H -4.009466 -3.622632 -3.528512
H -5.035082 -3.043858 -1.353833
H -4.093360 -1.268205 0.085290
Cl -1.101498 -3.557272 -0.550725

XXI^{D2}

E = -2954.90038192
N -2.124964 -0.274717 1.377205
P -1.568384 0.147918 -0.116695
C -1.517354 0.228260 2.613479
C -3.479619 -0.827361 1.573750
C 0.078544 0.747232 -0.187463
C -2.320883 1.708245 -0.712704
C -2.046692 -1.176413 -1.222620
C -1.474572 -0.870043 3.661305
C -3.465949 -1.944423 2.600635

P 1.572151 -0.186836 -0.158868
P 0.206647 2.468653 -0.521469
C -2.852751 -1.464735 3.906394
N 2.187513 -0.341133 1.382528
C 2.804083 0.663816 -1.169578
C 1.243544 -1.831706 -0.788324
C 3.461620 -1.081762 1.496968
C 2.140472 0.756811 2.356197
C 3.573926 -1.699378 2.878672
C 2.187701 0.194446 3.765366
C 3.446633 -0.638889 3.963037
H -2.096595 1.090797 2.980636
H -0.513566 0.588047 2.380554
H -3.882122 -1.166115 0.614629
H -4.136903 -0.020805 1.937249
H -1.058121 -0.457960 4.587897
H -0.783614 -1.653156 3.315802
H -2.896618 -2.798044 2.207341
H -4.494055 -2.293481 2.752156
H -3.504434 -0.702120 4.357168
H -2.793267 -2.285708 4.629085
H 4.295103 -0.380801 1.321815
H 3.519001 -1.844801 0.713435
H 1.247177 1.366710 2.185107
H 3.014625 1.412869 2.208248
H 4.533191 -2.224045 2.957124
H 2.785563 -2.456904 2.997918
H 1.296193 -0.423562 3.931097
H 2.150629 1.021754 4.484054
H 4.325132 0.021511 3.926959
H 3.449914 -1.102163 4.955727
C 3.404528 0.108163 -2.303256
C 3.252605 1.910071 -0.695194
C 4.237543 2.609307 -1.380722
C 4.806225 2.061357 -2.525973
C 4.398060 0.809849 -2.976502
C 1.244460 -2.935802 0.068272

C 0.955486 -1.997338 -2.149878
C 0.739026 -3.269341 -2.657865
C 0.787521 -4.374551 -1.810330
C 1.019751 -4.206518 -0.449501
C -2.409297 -0.898422 -2.545081
C -2.077618 -2.492688 -0.747321
C -2.486605 -3.517132 -1.587167
C -2.846171 -3.239591 -2.904079
C -2.801073 -1.934166 -3.384023
C -1.628134 2.448754 -1.723282
C -3.320154 2.326722 0.016007
C -2.024563 3.783830 -2.008302
C -3.000658 4.389722 -1.247814
C -3.648219 3.659951 -0.243544
H 4.864508 0.368233 -3.854230
H 5.585607 2.602998 -3.057619
H 4.574064 3.574044 -1.008189
H 2.861432 2.329847 0.231226
H 3.126098 -0.880841 -2.654345
H 1.428454 -2.801502 1.131959
H 0.897795 -1.134734 -2.811472
H 0.530161 -3.400717 -3.717161
H 0.632592 -5.373081 -2.214026
H 1.038608 -5.069363 0.212525
H -3.091928 -1.718403 -4.409486
H -2.414857 0.120674 -2.924136
H -1.790721 -2.706378 0.279367
H -2.523089 -4.538274 -1.214338
H -3.170892 -4.045434 -3.559109
H -1.540063 4.320343 -2.822061
H -3.282173 5.423427 -1.434771
H -4.414558 4.144856 0.359144
H -3.812037 1.801846 0.830532
Cl -0.515664 3.482641 1.143973
H -1.072485 1.912825 -2.495353

TS_{XXI→XXII}^{D1}

E = -2954.84650734

N -1.738080 1.486335 -0.974147

P -1.550096 -0.019722 -0.311914

C -0.906239 1.948387 -2.091081

C -3.098859 2.057392 -1.027158

C 0.061474 -0.695810 -0.510108

C -2.469772 -1.294332 -1.219360

C -2.227714 0.020479 1.343894

C -0.795477 3.462807 -2.066938

C -3.034970 3.571519 -0.957426

P 1.515952 0.043141 0.165273

P 0.148459 -2.261876 -1.257294

C -2.165082 4.124391 -2.075501

N 2.242512 1.095165 -0.913591

C 2.734479 -1.204276 0.630238

C 1.000077 0.987179 1.597672

C 3.434805 1.803880 -0.406801

C 2.426947 0.671180 -2.308924

C 3.676274 3.052486 -1.233755

C 2.663442 1.879819 -3.198574

C 3.846182 2.698997 -2.703513

H -1.352487 1.617881 -3.044279

H 0.078878 1.493177 -2.000645

H -3.704291 1.650028 -0.211390

H -3.571823 1.746635 -1.974327

H -0.204363 3.787089 -2.931737

H -0.237438 3.760255 -1.167946

H -2.629391 3.868809 0.020502

H -4.053403 3.972734 -1.016687

H -2.654412 3.935002 -3.041850

H -2.067853 5.211799 -1.986537

H 4.307491 1.131453 -0.465787

H 3.290840 2.050648 0.650344

H 1.541271 0.108169 -2.629841

H 3.294815 -0.006576 -2.377659

H 4.563271 3.568942 -0.849327

H 2.823972 3.736073 -1.104607
H 1.758602 2.501770 -3.208295
H 2.827527 1.535663 -4.226483
H 4.770905 2.117833 -2.831207
H 3.964299 3.604586 -3.308519
C 3.376318 -1.181871 1.872916
C 3.185031 -2.093141 -0.358433
C 4.210505 -2.986795 -0.083793
C 4.817079 -2.984697 1.169063
C 4.407689 -2.076060 2.137981
C 0.848521 2.373661 1.515070
C 0.700904 0.310636 2.788034
C 0.314297 1.033057 3.906859
C 0.197606 2.419941 3.834698
C 0.446061 3.086314 2.639109
C -2.405324 -1.212213 1.984121
C -2.516678 1.213841 2.008755
C -3.024369 1.167672 3.300998
C -3.214570 -0.056484 3.934249
C -2.894158 -1.245894 3.281877
C -1.690976 -2.352140 -1.728269
C -3.847660 -1.354339 -1.342154
C -2.284596 -3.472394 -2.337478
C -3.666389 -3.503835 -2.470899
C -4.436866 -2.449638 -1.986336
H 4.897536 -2.055524 3.108831
H 5.622794 -3.683386 1.383566
H 4.546197 -3.677285 -0.854028
H 2.758162 -2.083212 -1.361496
H 3.090678 -0.463482 2.636026
H 1.063187 2.889779 0.581763
H 0.774643 -0.774344 2.840817
H 0.099547 0.513382 4.837783
H -0.094304 2.984682 4.717843
H 0.344023 4.167901 2.584675
H -3.035148 -2.200049 3.784451
H -2.152820 -2.142741 1.474574

H -2.328927 2.170261 1.526722
H -3.263309 2.093480 3.819576
H -3.612585 -0.086519 4.946474
H -0.611101 -2.298043 -2.609028
H -1.671120 -4.293153 -2.708493
H -4.144376 -4.356030 -2.948492
H -5.519798 -2.486515 -2.088327
H -4.479964 -0.580847 -0.910342
Cl 0.218623 -3.873075 0.010728

$TS_{XXI \rightarrow XXII}^{D2}$

E = -2954.84954509
N -1.954739 -0.190727 1.521587
P -1.557416 0.280822 -0.013023
C -1.160012 0.225834 2.682182
C -3.359925 -0.485156 1.854998
C 0.109329 0.799758 -0.236606
C -2.377429 1.820703 -0.510113
C -2.183931 -0.971541 -1.131832
C -1.202887 -0.848179 3.754613
C -3.446263 -1.565328 2.917614
P 1.499572 -0.295675 -0.261926
P 0.330315 2.468164 -0.674881
C -2.633140 -1.186508 4.144963
N 2.186297 -0.432183 1.256010
C 2.761439 0.311776 -1.396858
C 0.933319 -1.932865 -0.718929
C 3.355542 -1.333712 1.335256
C 2.381078 0.747459 2.108376
C 3.533400 -1.825728 2.759272
C 2.526378 0.319960 3.558432
C 3.680764 -0.657251 3.722089
H -1.552166 1.176524 3.078551
H -0.136010 0.395399 2.347770
H -3.895046 -0.785814 0.948073
H -3.830860 0.441653 2.223655
H -0.636604 -0.498728 4.625899

H -0.690761 -1.743910 3.373968
H -3.077362 -2.513148 2.500132
H -4.500163 -1.721590 3.175403
H -3.093195 -0.314986 4.632779
H -2.649588 -1.997227 4.881344
H 4.252899 -0.782703 1.006627
H 3.223311 -2.170925 0.641942
H 1.539514 1.434100 1.976767
H 3.293966 1.282655 1.796202
H 4.410716 -2.481509 2.801040
H 2.663115 -2.437758 3.038352
H 1.590036 -0.151478 3.885297
H 2.675363 1.211418 4.179083
H 4.628078 -0.137466 3.518354
H 3.739815 -1.013883 4.756212
C 3.321414 -0.477769 -2.405847
C 3.310522 1.577246 -1.129061
C 4.354342 2.065558 -1.903007
C 4.879936 1.288239 -2.930945
C 4.372064 0.016521 -3.170999
C 0.768820 -2.910678 0.266684
C 0.630984 -2.220793 -2.056226
C 0.232018 -3.501641 -2.408335
C 0.110424 -4.487693 -1.431124
C 0.358991 -4.188460 -0.095879
C -2.372937 -0.630306 -2.476038
C -2.502398 -2.252779 -0.676792
C -3.041876 -3.177859 -1.561449
C -3.235768 -2.837624 -2.896697
C -2.889814 -1.569069 -3.357345
C -1.509711 2.908165 -0.737001
C -3.746708 2.031112 -0.522243
C -2.009384 4.215759 -0.910515
C -3.382352 4.410621 -0.893383
C -4.241034 3.325360 -0.721154
H 4.801340 -0.603380 -3.954806
H 5.701742 1.668736 -3.533635

H 4.768851 3.048519 -1.691521
H 2.955773 2.183344 -0.295888
H 2.962109 -1.485631 -2.590925
H 0.978466 -2.673690 1.307667
H 0.708909 -1.449854 -2.820463
H 0.015019 -3.732966 -3.448653
H -0.188041 -5.495177 -1.713885
H 0.249024 -4.956628 0.666337
H -3.040591 -1.307022 -4.402107
H -2.124464 0.367253 -2.836434
H -2.328748 -2.521374 0.362471
H -3.306161 -4.171632 -1.207030
H -3.660948 -3.565010 -3.585202
H -1.328531 5.050073 -1.076900
H -3.787563 5.410958 -1.027407
H -5.317135 3.488146 -0.730364
H -4.439540 1.206339 -0.366581
Cl 0.907100 3.820611 0.776964
H -0.654409 2.939907 -1.802859

XXII^{P1}

E = -2954.94716119
N 1.834613 -1.441877 -0.932905
P 1.571803 0.063991 -0.304526
C 1.067274 -1.947777 -2.076606
C 3.212924 -1.974471 -0.908203
C -0.077361 0.665805 -0.560412
C 2.485470 1.379974 -1.157617
C 2.148057 0.064443 1.389977
C 1.002139 -3.464207 -2.028644
C 3.188767 -3.488022 -0.814096
P -1.522462 -0.078171 0.133187
P -0.005096 2.245056 -1.220166
C 2.389600 -4.083711 -1.962312
N -2.174688 -1.199943 -0.919131
C -2.781298 1.165015 0.480291
C -1.040063 -0.935213 1.627886

C -3.360771 -1.925026 -0.416016
C -2.329597 -0.870048 -2.343421
C -3.510498 -3.235183 -1.165199
C -2.471831 -2.141499 -3.163229
C -3.633393 -2.986556 -2.660922
H 1.541630 -1.616674 -3.015200
H 0.066271 -1.521154 -2.032814
H 3.763918 -1.534239 -0.071084
H 3.722189 -1.665753 -1.836209
H 0.463033 -3.822519 -2.913688
H 0.411815 -3.761496 -1.150330
H 2.746696 -3.782733 0.148648
H 4.220223 -3.859097 -0.818838
H 2.917936 -3.894024 -2.907778
H 2.319959 -5.172074 -1.860335
H -4.254675 -1.295569 -0.562913
H -3.260850 -2.092082 0.661166
H -1.465564 -0.277451 -2.670113
H -3.232256 -0.251123 -2.480788
H -4.388954 -3.767329 -0.782570
H -2.634090 -3.866512 -0.955531
H -1.539293 -2.716413 -3.099698
H -2.611535 -1.869589 -4.216105
H -4.579187 -2.463420 -2.863257
H -3.681422 -3.934042 -3.208588
C -3.431565 1.260313 1.714180
C -3.238841 1.937807 -0.598346
C -4.284970 2.832380 -0.428650
C -4.901661 2.949709 0.814309
C -4.482190 2.157403 1.876274
C -0.876577 -2.322928 1.630084
C -0.781136 -0.188164 2.785011
C -0.428364 -0.841725 3.956070
C -0.304201 -2.229802 3.968870
C -0.508224 -2.965942 2.806379
C 2.296147 1.306014 2.019509
C 2.426293 -1.118232 2.077769

C 2.892607 -1.052346 3.384720
C 3.047943 0.180574 4.010254
C 2.737018 1.358822 3.333807
C 1.702654 2.414597 -1.679937
C 3.866059 1.411890 -1.328181
C 2.266080 3.482553 -2.371638
C 3.644273 3.489089 -2.560812
C 4.434810 2.466695 -2.039058
H -4.980184 2.229313 2.840514
H -5.723383 3.649738 0.948767
H -4.629614 3.430118 -1.269356
H -2.799892 1.829350 -1.589024
H -3.139534 0.630778 2.549624
H -1.057987 -2.894948 0.722717
H -0.855416 0.898058 2.771253
H -0.244544 -0.267362 4.861095
H -0.039081 -2.740288 4.892539
H -0.397640 -4.047958 2.818104
H 2.855411 2.320397 3.827960
H 2.067796 2.229611 1.486953
H 2.268728 -2.081695 1.598813
H 3.126996 -1.969772 3.919978
H 3.414416 0.226439 5.033730
H -0.853918 2.526411 -2.301429
H 1.654393 4.298493 -2.751886
H 4.108041 4.306217 -3.108769
H 5.512957 2.495718 -2.181407
H 4.501892 0.636849 -0.906572
Cl -0.458346 3.763179 0.037453

XXII^{D2}

E = -2954.94915665
N -1.883989 -0.389321 1.557446
P -1.572499 0.283641 0.080360
C -1.032778 -0.144788 2.726445
C -3.291341 -0.666135 1.907094
C 0.103785 0.823932 -0.126247

C -2.415939 1.866757 -0.198801
C -2.221719 -0.831374 -1.161525
C -1.093045 -1.330682 3.672630
C -3.388465 -1.856167 2.842795
P 1.499366 -0.249032 -0.292176
P 0.139907 2.522739 -0.349430
C -2.524066 -1.649889 4.075770
N 2.245691 -0.527511 1.173764
C 2.712010 0.466601 -1.419444
C 0.915874 -1.830131 -0.896282
C 3.424035 -1.419307 1.111016
C 2.452346 0.557855 2.140409
C 3.665458 -2.053599 2.467450
C 2.669929 -0.019020 3.528630
C 3.842412 -0.988527 3.538589
H -1.361569 0.771579 3.243646
H -0.012475 0.010710 2.375710
H -3.863161 -0.847471 0.990556
H -3.716477 0.229804 2.389253
H -0.482039 -1.108116 4.555467
H -0.639076 -2.200071 3.175469
H -3.071012 -2.763124 2.308380
H -4.439678 -2.001566 3.117299
H -2.929501 -0.819420 4.671650
H -2.553945 -2.535963 4.718986
H 4.302746 -0.827747 0.803449
H 3.265753 -2.182178 0.341196
H 1.586497 1.226715 2.120467
H 3.335917 1.150856 1.848672
H 4.549930 -2.697920 2.404557
H 2.813588 -2.703155 2.716385
H 1.754912 -0.537888 3.844894
H 2.834941 0.804647 4.233130
H 4.773699 -0.435257 3.349525
H 3.951475 -1.448789 4.526628
C 3.259734 -0.246407 -2.490807
C 3.253511 1.717003 -1.078265

C 4.276369 2.269075 -1.837765
C 4.787123 1.570077 -2.928146
C 4.287393 0.311840 -3.243175
C 0.783458 -2.904638 -0.011766
C 0.572252 -1.978193 -2.246507
C 0.158710 -3.215752 -2.715934
C 0.064527 -4.296923 -1.841689
C 0.358168 -4.138027 -0.491477
C -2.434793 -0.341115 -2.455063
C -2.538138 -2.153657 -0.842415
C -3.097417 -2.974475 -1.813362
C -3.310838 -2.489239 -3.099798
C -2.969003 -1.177755 -3.424452
C -1.579602 2.968822 -0.399458
C -3.796288 2.042143 -0.214736
C -2.088239 4.251160 -0.583182
C -3.469389 4.416338 -0.585906
C -4.313225 3.321556 -0.407091
H 4.705792 -0.248252 -4.076362
H 5.591373 2.000699 -3.520706
H 4.687257 3.239267 -1.567623
H 2.907463 2.258006 -0.198325
H 2.907813 -1.244214 -2.735286
H 1.032518 -2.777589 1.039806
H 0.629532 -1.132800 -2.929585
H -0.093831 -3.338194 -3.766685
H -0.246854 -5.269746 -2.216790
H 0.271760 -4.981448 0.189878
H -3.139003 -0.802246 -4.430957
H -2.195244 0.692165 -2.703564
H -2.347963 -2.533609 0.158610
H -3.362049 -3.999914 -1.565257
H -3.750700 -3.135544 -3.856621
H -1.430173 5.106977 -0.721260
H -3.891992 5.407634 -0.733434
H -5.391357 3.466348 -0.420592
H -4.469653 1.196260 -0.094753

Cl 0.997642 3.698176 1.071416

H 0.854501 2.935016 -1.484868