

Formation of NHC-Boryl Radicals through Electrochemical and Photochemical Cleavage of the B–S bond in N-Heterocyclic Carbene-Boryl Sulfides

Sofia Telitel, Anne-Laure Vallet, Stéphane Schweizer, Bernard Delpech, Nicolas Blanchard, Fabrice Morlet-Savary, Bernadette Graff, Dennis P. Curran, Marc Robert,*
Emmanuel Lacôte,* Jacques Lalevée*

Supporting Information

Table of contents

Materials and Methods	S2
Figures	S4
Z-matrixes	S8
References	S58

Materials and Methods

i) Reagents: The investigated NHC-boryl sulfides were prepared as described in our previous article.[1] Trimethylol-propane triacrylate (TMPTA) was obtained from Cytec and used as received. 2,2-dimethoxy-2-phenylacetophenone (DMPA), benzophenone (BP) and 2-isopropylthioxanthone (ITX) were obtained from Aldrich and used as received.

ii) UV absorption: The UV/vis spectra were taken on a JASCO V530 spectrometer

iii) Photolysis: The polychromatic UV light delivered from a Xe-Hg lamp (Hamamatsu, L8252, 150 W, filtered for $\lambda > 300$ nm – excepted otherwise noted) was used.

iv) ESR spin trapping experiments: ESR-ST experiments were carried out using an X-Band spectrometer (MS 400 Magnettech). The radicals were produced at room temperature under a light exposure (see irradiation source) under N₂ and trapped by phenyl-*N*-*t*-butylnitron (PBN) according to a described procedure.[2-3] The spectra were modeled using the WINSIM software.[4]

v) Laser flash photolysis: Nanosecond laser flash photolysis (LFP) experiments were carried out using a Q-switched nanosecond Nd/YAG laser ($\lambda_{\text{exc}} = 355$ nm, 9 ns pulses; energy reduced down to 10 mJ) from Continuum (Minilite) and an analyzing system consisting of a ceramic Xenon lamp, a monochromator, a fast photomultiplier and a transient digitizer (Luzchem LFP 212).[5]

vi) Modeling: All the calculations were performed using the hybrid functional B3LYP from the Gaussian 03 suite of program.[6] The structures were fully optimized at the B3LYP/6-31G* level (and frequency checked). For the CAM-B3LYP calculations, the Gaussian 09 suite of program was used.

vii) Cyclic voltammetry. The working electrode was a carbon disk electrode (3 mm diameter). The counter-electrode was a platinum wire and the reference electrode an aqueous SCE electrode. All experiments were carried out under argon at room temperature (ca. 21°C).

Cyclic voltammograms were obtained by use of a Metrohm AUTOLAB instrument. Ohmic drop was compensated using the positive feedback compensation implemented in the instrument. Each voltammogram was repeated three to five times with very good reproducibility. The supporting electrolyte *n*-Bu₄NBF₄ (Fluka, puriss.) was used in 0.1 M concentration. Acetonitrile (Fluka >99 %) was stored over molecular sieves.

viii) Radical Photopolymerization (RP):

TMPTA was used as the monomer in the film photopolymerization experiments. The experiments were carried out in laminate. The films (25 µm thick) deposited on a BaF₂ pellet were irradiated (see the irradiation sources). The evolution of the double bond content was continuously followed by real time FTIR spectroscopy (JASCO FTIR 4100) at about 1630 cm⁻¹. [1]

Figure S1. UV absorption spectra for (a) **5**, (b) **7**, (c) **13**, (d) **14**, (e) **17**.

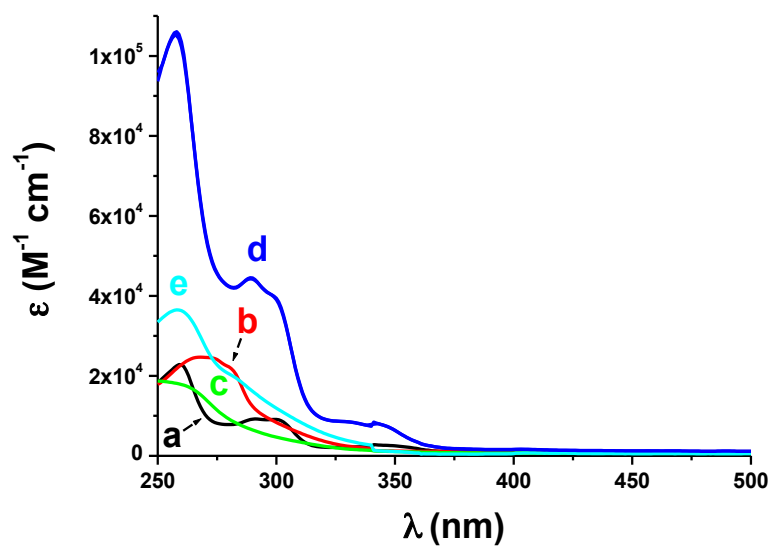


Figure S2. Photolysis of **18** in acetonitrile upon a Xe-Hg lamp exposure from t=0 to 80s.

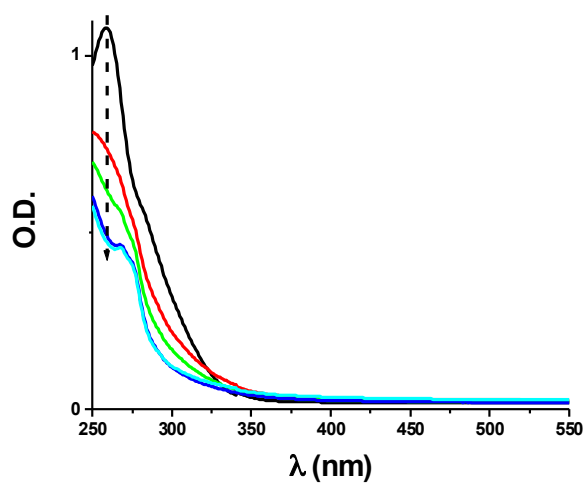
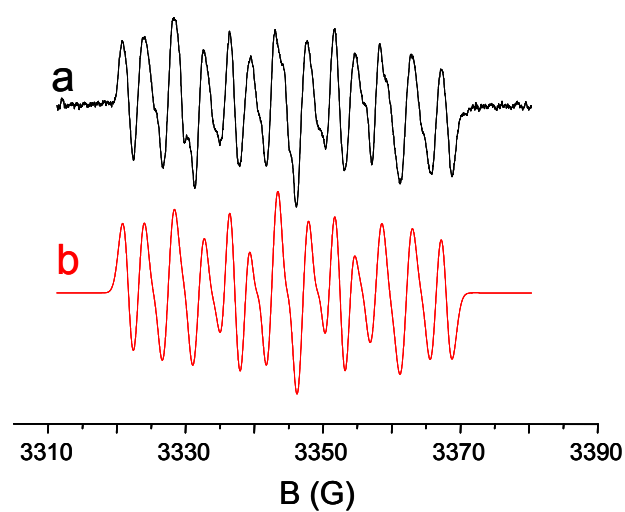
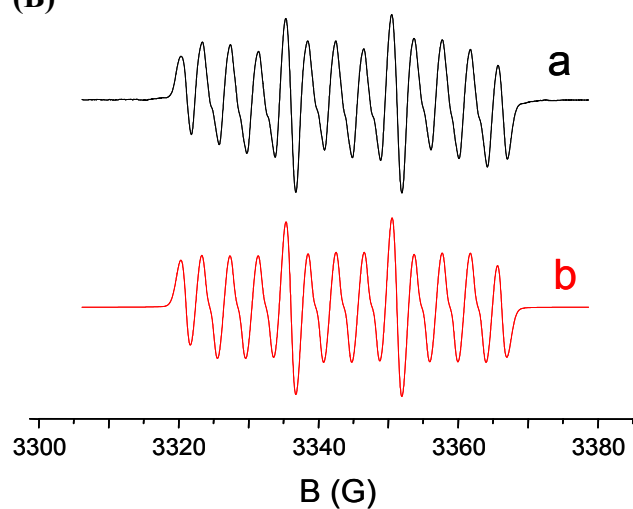


Figure S3. ESR-spin trapping spectra for the irradiation of (A) **16**; (B) **5**; (C) **7**; (D) **14**; (E) **18** solutions in *tert*-butylbenzene; [PBN] = 0.01 M; experimental (a) and simulated (b) spectra (boryls radicals: $a_N = 15.1$; $a_H = 3$; $a_B = 4.3$ G and thiyl radicals: $a_N = 14.2$; $a_H = 2.0$ G are observed).

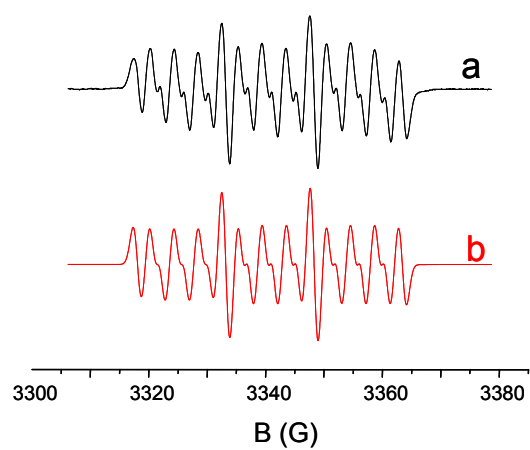
(A)



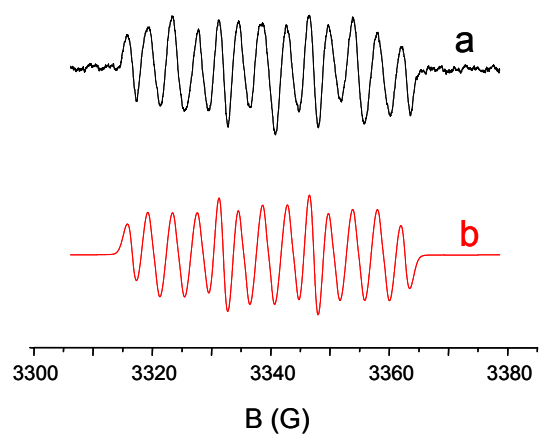
(B)



(C)



(D)



(E)

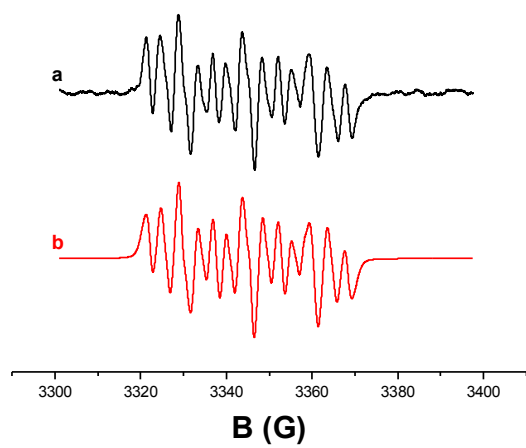
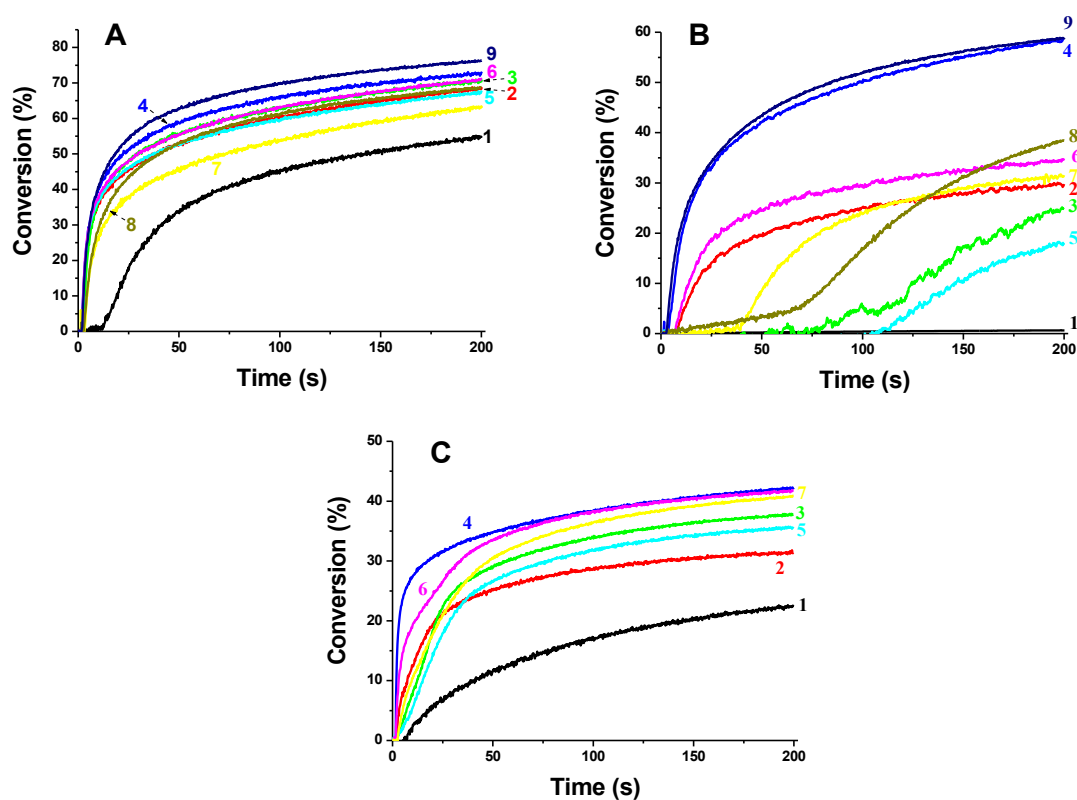


Figure S4. Photopolymerization profiles of TMPTA *in laminate* for different photoinitiating systems: **(A)** upon a Xe-Hg lamp irradiation ($\lambda > 300$ nm) (1) **TMPTA**; (2) **3** (2% w/w); (3) **10** (2% w/w); (4) **9** (2% w/w); (5) **6** (2% w/w); (6) **19** (2% w/w); (7) **18** (2% w/w); (8) **15** (2% w/w); (9) **2** (2% w/w). **(B)** upon a Xe-Hg lamp irradiation ($\lambda > 340$ nm) (1) **TMPTA**; (2) **3** (2% w/w); (3) **10** (2% w/w); (4) **9** (2% w/w); (5) **6** (2% w/w); (6) **19** (2% w/w); (7) **18** (2% w/w); (8) **15** (2% w/w); (9) **2** (2% w/w). **(C)** (1) ITX (1% w/w); (2) **3** + ITX (2%/1% w/w); (3) **10** + ITX (2%/1% w/w); (4) **9** + ITX (2%/1% w/w); (5) **6** + ITX (2%/1% w/w); (6) **19** + ITX (2%/1% w/w); (7) **2** + ITX (2%/1% w/w).



Z-matrixes for the optimized structures:

I - Thiyl radicals:

Phenylthiyl

C						
C	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
C	3	B3	2	A2	1	D1
C	4	B4	3	A3	2	D2
C	5	B5	4	A4	3	D3
H	2	B6	1	A5	6	D4
H	3	B7	2	A6	1	D5
H	4	B8	3	A7	2	D6
H	5	B9	4	A8	3	D7
H	6	B10	5	A9	4	D8
S	1	B11	6	A10	5	D9
B1	1.42083054					
B2	1.38802577					
B3	1.40132186					
B4	1.40132186					
B5	1.38802577					
B6	1.08557478					
B7	1.08681634					
B8	1.08694100					
B9	1.08681634					
B10	1.08557478					
B11	1.72762300					
A1	120.62065164					
A2	120.07165442					
A3	120.26411192					
A4	120.07165442					
A5	118.51960881					
A6	119.97699791					
A7	119.86794404					
A8	119.95134766					
A9	120.85973956					
A10	120.82436202					
D1	0.00000000					
D2	0.00000000					
D3	0.00000000					
D4	180.00000000					
D5	180.00000000					
D6	180.00000000					
D7	180.00000000					
D8	180.00000000					
D9	180.00000000					

2-Naphthylthiyl

S						
C	1	B1				
C	2	B2	1	A1		
C	2	B3	1	A2	3	D1
C	4	B4	2	A3	1	D2
C	3	B5	2	A4	1	D3
C	5	B6	4	A5	2	D4
C	6	B7	3	A6	2	D5
C	8	B8	6	A7	3	D6
C	9	B9	8	A8	6	D7
C	10	B10	9	A9	8	D8
H	4	B11	2	A10	1	D9
H	3	B12	2	A11	1	D10
H	5	B13	4	A12	2	D11
H	8	B14	6	A13	3	D12
H	11	B15	10	A14	9	D13
H	9	B16	8	A15	6	D14
H	10	B17	9	A16	8	D15

B1	1.72201724
B2	1.40666833
B3	1.43844969
B4	1.36747895
B5	1.41245778
B6	1.42968480
B7	1.42305812
B8	1.37713204
B9	1.41492077
B10	1.38206701
B11	1.08505565
B12	1.08619357
B13	1.08761725
B14	1.08718916
B15	1.08728247
B16	1.08615634
B17	1.08647916
A1	120.53557935
A2	121.23853112
A3	120.93413470
A4	121.77981255
A5	121.31839020
A6	121.89962637
A7	120.67285671
A8	120.09932873
A9	120.57088883
A10	118.12327004
A11	118.68438552
A12	120.21931317
A13	118.73121566
A14	120.27791467
A15	120.17556077
A16	119.58623164
D1	180.00000000
D2	180.00000000
D3	180.00000000
D4	0.00000000
D5	180.00000000
D6	180.00000000
D7	0.00000000
D8	0.00000000
D9	0.00000000
D10	0.00000000
D11	180.00000000
D12	0.00000000
D13	180.00000000
D14	180.00000000
D15	180.00000000

4-methoxyphenylthyl:

C					
C	1	B1			
C	1	B2	2	A1	
C	2	B3	1	A2	3
H	2	B4	1	A3	3
C	3	B5	1	A4	2
H	3	B6	1	A5	2
C	6	B7	3	A6	1
H	4	B8	2	A7	1
H	6	B9	3	A8	1
S	1	B10	3	A9	6
C	8	B11	6	A10	3
H	12	B12	8	A11	6
H	12	B13	8	A12	6
H	12	B14	8	A13	6
O	8	B15	6	A14	3
					D1
					D2
					D3
					D4
					D5
					D6
					D7
					D8
					D9
					D10
					D11
					D12
					D13
B1	1.42561854				
B2	1.42015219				
B3	1.37845560				
B4	1.08525970				
B5	1.38678579				
B6	1.08529924				
B7	1.40721944				
B8	1.08548028				

B9	1.08393064
B10	1.72059592
B11	2.39295615
B12	1.09661104
B13	1.09071054
B14	1.09664711
B15	1.35259343
A1	117.30920295
A2	121.30774357
A3	118.42431086
A4	121.79137435
A5	118.35776486
A6	119.50697507
A7	121.59508088
A8	119.58841101
A9	121.23663476
A10	93.23570393
A11	95.34740042
A12	135.31744822
A13	95.40313122
A14	124.61713160
D1	-0.00000000
D2	179.99179662
D3	0.00000000
D4	179.99452465
D5	-0.00000000
D6	179.99705659
D7	180.00000000
D8	-179.97135357
D9	179.99239278
D10	55.13709541
D11	179.97133282
D12	-55.13719092
D13	179.95045488

II - NHC-boryl radicals associated with:

1-3

C					
C	1	B1			
C	2	B2	1	A1	
H	2	B3	1	A2	3
H	3	B4	2	A3	1
B	1	B5	3	A4	2
H	6	B6	1	A5	3
H	6	B7	1	A6	3
C	1	B8	6	A7	3
H	9	B9	1	A8	6
H	9	B10	1	A9	6
C	1	B11	6	A10	9
H	12	B12	1	A11	6
H	12	B13	1	A12	6
H	12	B14	1	A13	6
N	3	B15	2	A14	1
N	2	B16	1	A15	16
H	9	B17	1	A16	16
					D1
					D2
					D3
					D4
					D5
					D6
					D7
					D8
					D9
					D10
					D11
					D12
					D13
					D14
					D15
B1	2.28122890				
B2	1.35831201				
B3	1.07913044				
B4	1.07912085				
B5	1.49943204				
B6	1.19807229				
B7	1.19806340				
B8	2.50466006				
B9	1.09516002				
B10	1.09240832				
B11	2.50467566				
B12	1.09242079				
B13	1.09510806				
B14	1.09516308				
B15	1.38281887				
B16	1.38278638				
B17	1.09513169				

A1	72.67772614
A2	156.93126178
A3	130.38998321
A4	162.68317205
A5	119.69823476
A6	119.69905873
A7	99.31093434
A8	95.34913979
A9	136.53090035
A10	99.30227596
A11	136.53625329
A12	95.25733454
A13	95.35733970
A14	107.57769940
A15	34.89794879
A16	95.27296959
D1	179.98933758
D2	179.98989987
D3	-179.91860072
D4	-0.08219888
D5	179.91722870
D6	0.06635466
D7	-54.49515734
D8	179.88256303
D9	-179.96512207
D10	-179.80498350
D11	-54.30222989
D12	54.55644134
D13	0.00382094
D14	179.97422489
D15	-125.64388353

4

C

C	1	B1		A1		
C	1	B2	2	A2	2	D1
H	1	B3	3	A3	2	D2
H	3	B4	1	A4	3	D3
C	2	B5	1	A5	1	D4
C	6	B6	2	A6	2	D5
H	7	B7	6	A7	2	D6
H	7	B8	6	A8	2	D7
H	7	B9	6	A9	1	D8
C	6	B10	2	A10	2	D9
H	11	B11	6	A11	2	D10
H	11	B12	6	A12	2	D11
H	11	B13	6	A13	3	D12
C	2	B14	1	A14	1	D13
H	15	B15	2	A15	1	D14
C	15	B16	2	A16	2	D15
H	17	B17	15	A17	2	D16
H	17	B18	15	A18	2	D17
H	17	B19	15	A19	1	D18
C	15	B20	2	A20	2	D19
H	21	B21	15	A21	2	D20
H	21	B22	15	A22	2	D21
H	21	B23	15	A23	1	D22
H	6	B24	2	A24	2	D23
N	3	B25	1	A25	26	D24
N	1	B26	3	A26	3	D25
B	2	B27	1	A27	1	D26
H	28	B28	2	A28	1	D27
H	28	B29	2			

B1	2.28027742
B2	1.35689200
B3	1.07771927
B4	1.07771604
B5	2.52635983
B6	1.53506025
B7	1.09590589
B8	1.09377410
B9	1.09670766
B10	1.53186066
B11	1.09492140
B12	1.09480081

B13	1.09632027
B14	2.52639308
B15	1.09300262
B16	1.53187067
B17	1.09479882
B18	1.09492093
B19	1.09632391
B20	1.53507360
B21	1.09670336
B22	1.09377951
B23	1.09590576
B24	1.09300922
B25	1.38415977
B26	1.38415547
B27	1.50283434
B28	1.19811035
B29	1.19811271
A1	72.69079426
A2	129.61727573
A3	129.61597364
A4	98.22593688
A5	105.73666253
A6	110.38134593
A7	110.20741746
A8	110.87980510
A9	134.07390050
A10	111.37022881
A11	109.26602626
A12	112.07973053
A13	63.62124527
A14	81.73868455
A15	134.06947989
A16	109.26774486
A17	111.36995671
A18	112.07781535
A19	105.73994662
A20	110.87634070
A21	110.21323809
A22	110.38146901
A23	81.73745274
A24	107.80432944
A25	107.80428017
A26	162.57022514
A27	120.27102231
A28	120.26963472
D1	179.12227722
D2	-179.12221870
D3	-1.70815213
D4	-99.78688573
D5	-147.09845019
D6	-27.35821384
D7	92.96400482
D8	45.55603995
D9	34.13264665
D10	153.62484604
D11	-87.70615533
D12	-178.10898244
D13	-152.12502929
D14	-44.48202826
D15	-153.59331969
D16	-34.10076001
D17	87.73644413
D18	100.85525548
D19	-92.90875212
D20	27.41223904
D21	147.15594576
D22	153.19523774
D23	-0.91632671
D24	0.00297017
D25	-173.04318147
D26	-6.63793699
D27	173.33227508

C					
N	1	B1			
N	2	B2	1	A1	
C	3	B3	2	A2	1
N	1	B4	2	A3	3
C	3	B5	2	A4	1
C	5	B6	1	A5	2
B	4	B7	3	A6	2
H	6	B8	3	A7	2
H	6	B9	3	A8	2
H	6	B10	3	A9	2
H	7	B11	5	A10	1
H	7	B12	5	A11	1
H	7	B13	5	A12	1
H	8	B14	4	A13	3
H	8	B15	4	A14	3
H	1	B16	2	A15	3

B1	1.30341871
B2	1.37299192
B3	1.38121597
B4	1.36560776
B5	1.44600957
B6	1.44936634
B7	1.49985535
B8	1.09007798
B9	1.09517429
B10	1.09517053
B11	1.09232521
B12	1.09434720
B13	1.09435829
B14	1.19752107
B15	1.19676643
B16	1.08064730
A1	103.89602377
A2	113.45961948
A3	112.62341500
A4	120.28369469
A5	127.20139559
A6	129.36769592
A7	107.47918167
A8	110.44067196
A9	110.43643881
A10	108.92857371
A11	110.24144350
A12	110.24678424
A13	119.44690757
A14	119.43129865
A15	124.05601071
D1	-0.00000000
D2	0.00381378
D3	-179.99597858
D4	-179.99036179
D5	180.00000000
D6	0.02077344
D7	-119.93856029
D8	119.98035996
D9	-0.06660233
D10	-120.21999817
D11	120.09080301
D12	-180.00000000
D13	0.00000000
D14	-180.00000000

7 and 8

C					
N	1	B1			
C	2	B2	1	A1	
N	1	B3	2	A2	3
C	2	B4	1	A3	4
C	4	B5	1	A4	2
B	3	B6	2	A5	1
H	5	B7	2	A6	1
H	5	B8	2	A7	1
H	5	B9	2	A8	1

H	6	B10	4	A9	1	D8
H	6	B11	4	A10	1	D9
H	6	B12	4	A11	1	D10
H	7	B13	3	A12	2	D11
H	7	B14	3	A13	2	D12
C	2	B15	1	A14	4	D13
C	1	B16	4	A15	3	D14
C	17	B17	1	A16	4	D15
C	18	B18	17	A17	1	D16
C	16	B19	2	A18	1	D17
H	17	B20	1	A19	4	D18
H	18	B21	17	A20	1	D19
H	19	B22	18	A21	17	D20
H	20	B23	16	A22	2	D21

B1	2.24350280
B2	1.39714720
B3	1.38231511
B4	1.44949055
B5	1.44949055
B6	1.50065426
B7	1.09443872
B8	1.08904588
B9	1.09724022
B10	1.09443872
B11	1.09724022
B12	1.08904588
B13	1.19642855
B14	1.19642855
B15	1.38231511
B16	1.39377487
B17	1.40050403
B18	1.39990200
B19	1.39377487
B20	1.08521580
B21	1.08608621
B22	1.08608621
B23	1.08521580
A1	73.77201832
A2	70.71060746
A3	161.01537524
A4	124.02660923
A5	127.64523997
A6	109.42549237
A7	109.06818802
A8	111.29137487
A9	109.42549237
A10	111.29137487
A11	109.06818802
A12	120.30243950
A13	120.30243950
A14	37.01794222
A15	131.93175645
A16	117.45007014
A17	121.32760126
A18	131.93175645
A19	121.49781821
A20	119.15331358
A21	119.51834064
A22	121.49781821
D1	-1.12339367
D2	-176.23771452
D3	178.52411391
D4	-178.36828576
D5	-44.82866592
D6	-164.11727533
D7	75.63555675
D8	42.09648439
D9	-78.36773827
D10	161.38509380
D11	179.61628261
D12	-0.28461441
D13	-180.00000000
D14	-178.98446566
D15	-179.57746332
D16	-0.26819372
D17	-179.86182405

D18	0.78706342
D19	-179.95272755
D20	-179.68340228
D21	-0.78706342

11

C					
C	1	B1			
C	1	B2	2	A1	
H	1	B3	3	A2	2
C	2	B4	1	A3	3
H	2	B5	1	A4	3
C	3	B6	1	A5	2
H	3	B7	1	A6	2
C	5	B8	2	A7	1
H	5	B9	2	A8	1
S	7	B10	3	A9	1
H	9	B11	5	A10	2
B	11	B12	7	A11	3
C	13	B13	11	A12	7
N	14	B14	13	A13	11
N	14	B15	13	A14	11
C	15	B16	14	A15	13
C	15	B17	14	A16	13
C	17	B18	15	A17	14
C	16	B19	14	A18	13
H	17	B20	15	A19	14
H	18	B21	15	A20	14
H	18	B22	15	A21	14
H	18	B23	15	A22	14
H	19	B24	17	A23	15
H	20	B25	16	A24	14
H	20	B26	16	A25	14
H	20	B27	16	A26	14
H	13	B28	11	A27	7
					D1
					D2
					D3
					D4
					D5
					D6
					D7
					D8
					D9
					D10
					D11
					D12
					D13
					D14
					D15
					D16
					D17
					D18
					D19
					D20
					D21
					D22
					D23
					D24
					D25
					D26
B1	1.39606886				
B2	1.39523753				
B3	1.08743670				
B4	1.39651690				
B5	1.08666282				
B6	1.40173068				
B7	1.08495338				
B8	1.39429996				
B9	1.08724752				
B10	1.79022571				
B11	1.08650317				
B12	1.84626447				
B13	1.50124348				
B14	1.39603249				
B15	1.39735683				
B16	1.38484927				
B17	1.45100696				
B18	1.35578008				
B19	1.44788884				
B20	1.07894792				
B21	1.09242317				
B22	1.09500069				
B23	1.09371531				
B24	1.07901680				
B25	1.09231048				
B26	1.09560341				
B27	1.09513337				
B28	1.19249418				
A1	120.60255503				
A2	119.35130023				
A3	119.32751443				
A4	120.33855607				
A5	120.17521548				
A6	120.14146602				
A7	120.39253296				
A8	120.12822811				
A9	123.17890042				
A10	120.14438807				
A11	105.12230182				

A12	123.67629989
A13	131.92079995
A14	124.22482381
A15	110.25641878
A16	125.24442909
A17	107.81779720
A18	124.27711608
A19	121.73096162
A20	108.52470195
A21	110.90917532
A22	110.80005038
A23	130.45096934
A24	108.73055898
A25	110.77740808
A26	110.55180813
A27	117.47644478
D1	-179.36647984
D2	0.14468117
D3	-179.75777321
D4	-0.76401478
D5	179.03426830
D6	0.45205554
D7	179.86211608
D8	178.12690307
D9	179.07567766
D10	33.66923134
D11	-165.75632172
D12	4.55799936
D13	-174.86941945
D14	-179.64008035
D15	0.60064220
D16	0.05409078
D17	-0.53565836
D18	-179.96779876
D19	178.05096627
D20	-62.29638080
D21	58.13441725
D22	179.95121150
D23	178.29305475
D24	-61.69090309
D25	58.28455581
D26	16.97437702

13

C					
C	1	B1			
C	2	B2	1	A1	
H	1	B3	2	A2	3
H	2	B4	1	A3	3
C	3	B5	2	A4	1
C	6	B6	3	A5	2
C	6	B7	3	A6	2
C	7	B8	6	A7	3
H	7	B9	6	A8	3
C	8	B10	6	A9	3
H	8	B11	6	A10	3
C	9	B12	7	A11	6
H	9	B13	7	A12	6
H	11	B14	8	A13	6
N	1	B15	2	A14	3
C	16	B16	1	A15	2
H	17	B17	16	A16	1
H	17	B18	16	A17	1
H	17	B19	16	A18	1
S	6	B20	3	A19	2
B	3	B21	2	A20	1
C	13	B22	9	A21	7
H	23	B23	13	A22	9
H	23	B24	13	A23	9
H	23	B25	13	A24	9
O	13	B26	9	A25	7
H	22	B27	3	A26	2
C	2	B28	1	A27	16
H	29	B29	2	A28	1
H	29	B30	2	A29	1
					D1
					D2
					D3
					D4
					D5
					D6
					D7
					D8
					D9
					D10
					D11
					D12
					D13
					D14
					D15
					D16
					D17
					D18
					D19
					D20
					D21
					D22
					D23
					D24
					D25
					D26
					D27
					D28

H	29	B31	2	A30	1	D29
N	2	B32	1	A31	16	D30
B1	1.35567270					
B2	2.28237319					
B3	1.07904148					
B4	1.07898250					
B5	4.31215529					
B6	1.39776871					
B7	1.40430041					
B8	1.39776375					
B9	1.08637769					
B10	1.38886040					
B11	1.08516534					
B12	1.39857819					
B13	1.08431522					
B14	1.08598324					
B15	1.38300433					
B16	1.44747949					
B17	1.09237862					
B18	1.09527681					
B19	1.09570696					
B20	1.79113364					
B21	1.50084506					
B22	2.38779844					
B23	1.09192156					
B24	1.09860562					
B25	1.09865174					
B26	1.36898282					
B27	1.19280348					
B28	2.51040400					
B29	1.09248443					
B30	1.09501026					
B31	1.09389779					
B32	1.38505484					
A1	72.78534499					
A2	130.44215236					
A3	130.44302686					
A4	153.04765371					
A5	143.82586225					
A6	94.99502325					
A7	121.25382726					
A8	119.52578291					
A9	120.70371112					
A10	119.65642580					
A11	119.73726622					
A12	119.11852599					
A13	121.01659080					
A14	107.68399219					
A15	125.31690897					
A16	108.72786618					
A17	110.57642541					
A18	110.80952250					
A19	32.29940338					
A20	166.57444921					
A21	93.23751210					
A22	136.42110537					
A23	95.19181903					
A24	95.33541032					
A25	124.81957258					
A26	118.86131316					
A27	136.23748418					
A28	81.53086632					
A29	121.34962576					
A30	122.40553246					
A31	107.82410324					
D1	-179.98853699					
D2	179.97861280					
D3	-171.97872036					
D4	-74.88746511					
D5	126.68453033					
D6	-155.28124441					
D7	24.32651028					
D8	164.93688619					
D9	-15.05469213					
D10	0.54112772					
D11	179.85064468					

D12	-179.88525209
D13	-0.04712508
D14	-179.95506464
D15	1.73836319
D16	121.73701336
D17	-118.29236417
D18	-25.46102518
D19	178.43028654
D20	179.53242913
D21	-179.84988301
D22	-54.75781852
D23	54.89713789
D24	179.55542820
D25	179.44454752
D26	-0.21161431
D27	-178.48656676
D28	74.41107594
D29	-71.07760697
D30	-0.01720293

14

C

N	1	B1			
N	2	B2	1	A1	
C	3	B3	2	A2	1
N	1	B4	2	A3	3
C	3	B5	2	A4	1
C	5	B6	1	A5	2
B	4	B7	3	A6	2
S	8	B8	4	A7	3
C	9	B9	8	A8	4
C	10	B10	9	A9	8
C	10	B11	9	A10	8
C	12	B12	10	A11	9
C	11	B13	10	A12	9
C	13	B14	12	A13	10
C	14	B15	11	A14	10
C	16	B16	14	A15	11
C	17	B17	16	A16	14
C	18	B18	17	A17	16
H	6	B19	3	A18	2
H	6	B20	3	A19	2
H	6	B21	3	A20	2
H	7	B22	5	A21	1
H	7	B23	5	A22	1
H	7	B24	5	A23	1
H	8	B25	4	A24	3
H	12	B26	10	A25	9
H	11	B27	10	A26	9
H	13	B28	12	A27	10
H	16	B29	14	A28	11
H	19	B30	18	A29	17
H	17	B31	16	A30	14
H	18	B32	17	A31	16
H	1	B33	2	A32	3
					D1
					D2
					D3
					D4
					D5
					D6
					D7
					D8
					D9
					D10
					D11
					D12
					D13
					D14
					D15
					D16
					D17
					D18
					D19
					D20
					D21
					D22
					D23
					D24
					D25
					D26
					D27
					D28
					D29
					D30
					D31

B1	1.30090357
B2	1.37266398
B3	1.38620834
B4	1.36760923
B5	1.44521916
B6	1.45212438
B7	1.50023203
B8	1.84235550
B9	1.78981166
B10	1.38192983
B11	1.42249108
B12	1.37460141
B13	1.41930937
B14	1.42103482
B15	1.42178445
B16	1.37683486
B17	1.41669595
B18	1.37740069

B19	1.09003478
B20	1.09577783
B21	1.09539866
B22	1.09248081
B23	1.09414118
B24	1.09331593
B25	1.19190386
B26	1.08480318
B27	1.08697902
B28	1.08788519
B29	1.08760139
B30	1.08777479
B31	1.08683874
B32	1.08669403
B33	1.08063222
A1	104.00408323
A2	113.32613785
A3	112.88638437
A4	120.01876136
A5	125.79871923
A6	125.56125398
A7	122.95227086
A8	104.85054223
A9	118.39461030
A10	121.99289540
A11	120.40610960
A12	121.18828614
A13	121.34578977
A14	122.10712491
A15	120.83603567
A16	120.37712740
A17	120.17290202
A18	107.32127320
A19	110.67581373
A20	110.50031126
A21	108.50569039
A22	110.61876581
A23	110.56063284
A24	118.65971554
A25	119.29207370
A26	119.94318351
A27	119.87448412
A28	118.72968620
A29	120.43708533
A30	120.02391370
A31	119.67366961
A32	124.12854833
D1	0.15800785
D2	-0.05908125
D3	179.84812915
D4	-180.00000000
D5	-179.74722266
D6	176.65138671
D7	169.93166347
D8	143.43627884
D9	-39.88567772
D10	-177.27609750
D11	176.86315144
D12	0.62194103
D13	179.92489535
D14	-179.61761198
D15	0.01097446
D16	0.05341885
D17	1.58007916
D18	-118.26249492
D19	121.45035802
D20	1.04369247
D21	-118.64839112
D22	120.93817706
D23	-1.74910538
D24	2.58534609
D25	-3.61488430
D26	179.95944408
D27	0.38911573
D28	179.98273022
D29	-179.96225653
D30	-179.96937184

C					
C	1	B1			
H	1	B2	2	A1	
C	2	B3	1	A2	3
C	4	B4	2	A3	1
C	4	B5	2	A4	1
C	5	B6	4	A5	2
H	5	B7	4	A6	2
C	6	B8	4	A7	2
H	6	B9	4	A8	2
C	7	B10	5	A9	4
H	7	B11	5	A10	4
H	9	B12	6	A11	4
N	1	B13	2	A12	4
C	14	B14	1	A13	2
H	15	B15	14	A14	1
H	15	B16	14	A15	1
H	15	B17	14	A16	1
S	4	B18	2	A17	1
B	2	B19	1	A18	14
C	11	B20	7	A19	5
H	21	B21	11	A20	7
H	21	B22	11	A21	7
H	21	B23	11	A22	7
O	11	B24	7	A23	5
H	20	B25	2	A24	1
C	2	B26	1	A25	14
H	27	B27	2	A26	1
H	27	B28	2	A27	1
H	27	B29	2	A28	1
N	2	B30	1	A29	14
N	1	B31	14	A30	2

B1	2.23813037
B2	1.08068636
B3	4.30581877
B4	1.39734406
B5	1.40405209
B6	1.39771842
B7	1.08627488
B8	1.38869718
B9	1.08518747
B10	1.39868669
B11	1.08420850
B12	1.08588663
B13	1.36542657
B14	1.44847207
B15	1.09234161
B16	1.09465694
B17	1.09484056
B18	1.79211232
B19	1.50005464
B20	2.38800823
B21	1.09179511
B22	1.09847664
B23	1.09850704
B24	1.36776404
B25	1.19274633
B26	2.54276342
B27	1.09023013
B28	1.09504826
B29	1.09456502
B30	1.38613753
B31	1.30101030
A1	159.71270205
A2	173.58960663
A3	141.91383716
A4	96.38658069
A5	121.18947957
A6	119.57067996
A7	120.65048466
A8	119.73031756

A9	119.73358025
A10	119.12547179
A11	121.03190877
A12	36.57597200
A13	126.76539960
A14	108.77896196
A15	110.33554429
A16	110.47431990
A17	31.72735133
A18	160.57610410
A19	93.23673413
A20	136.34500657
A21	95.22786484
A22	95.31185688
A23	124.81334602
A24	118.91874594
A25	93.35499824
A26	132.68729249
A27	96.93908013
A28	96.83638533
A29	66.53410305
A30	112.77795741
D1	-24.10020762
D2	136.82900493
D3	-20.53465773
D4	-153.98028582
D5	25.62363643
D6	163.43782994
D7	-16.55331903
D8	0.49892265
D9	179.83974687
D10	-179.86164021
D11	-24.11423758
D12	-179.95781860
D13	1.01510731
D14	121.06303969
D15	-119.03752987
D16	-169.53316345
D17	1.11060528
D18	179.57709436
D19	-179.86614312
D20	-54.76843821
D21	54.93627506
D22	179.55853432
D23	-2.62672761
D24	-179.98151795
D25	-0.08993180
D26	-125.10219891
D27	125.04407137
D28	179.90249416
D29	0.04333049

16

B					
S	1	B1			
C	2	B2	1	A1	
C	3	B3	2	A2	1
C	3	B4	2	A3	1
C	4	B5	3	A4	2
H	4	B6	3	A5	2
C	5	B7	3	A6	2
H	5	B8	3	A7	2
C	6	B9	4	A8	3
H	6	B10	4	A9	3
H	8	B11	5	A10	3
H	10	B12	6	A11	4
C	1	B13	2	A12	3
C	14	B14	1	A13	2
C	15	B15	14	A14	1
C	15	B16	14	A15	1
C	16	B17	15	A16	14
C	17	B18	15	A17	14
H	17	B19	15	A18	14
C	19	B20	17	A19	15
					D1
					D2
					D3
					D4
					D5
					D6
					D7
					D8
					D9
					D10
					D11
					D12
					D13
					D14
					D15
					D16
					D17
					D18

H	18	B21	16	A20	15	D19
H	19	B22	17	A21	15	D20
H	21	B23	19	A22	17	D21
C	14	B24	1	A23	2	D22
H	25	B25	14	A24	1	D23
H	25	B26	14	A25	1	D24
H	25	B27	14	A26	1	D25
C	15	B28	14	A27	1	D26
H	29	B29	15	A28	14	D27
H	29	B30	15	A29	14	D28
H	29	B31	15	A30	14	D29
N	16	B32	15	A31	14	D30
N	15	B33	14	A32	1	D31
H	1	B34	14	A33	34	D32

B1	1.83877728
B2	1.79216301
B3	1.40215661
B4	1.40117362
B5	1.39475855
B6	1.08630588
B7	1.39513602
B8	1.08490900
B9	1.39613485
B10	1.08706310
B11	1.08721432
B12	1.08658834
B13	1.50294553
B14	2.28585779
B15	1.41168218
B16	1.39400338
B17	1.39451160
B18	1.40003673
B19	1.08508368
B20	1.39916350
B21	1.08514637
B22	1.08598335
B23	1.08605793
B24	2.51479806
B25	1.09419903
B26	1.09066520
B27	1.09511401
B28	2.50464500
B29	1.09078431
B30	1.09240274
B31	1.09655316
B32	1.38379378
B33	1.38486331
B34	1.19108180
A1	104.96311561
A2	117.68346023
A3	122.93729925
A4	120.27021977
A5	119.54383665
A6	120.08968989
A7	119.77781204
A8	120.35086821
A9	119.49751501
A10	119.39577202
A11	120.28733291
A12	124.23107608
A13	166.10104583
A14	72.14223730
A15	166.62046005
A16	120.96456878
A17	117.62705999
A18	121.55824886
A19	121.18657870
A20	121.67460108
A21	119.18597704
A22	119.59234696
A23	94.86118329
A24	93.86514998
A25	136.30614531
A26	97.48748387
A27	63.61326087
A28	130.55645114

A29	83.97434823
A30	111.50930956
A31	106.77948360
A32	34.91119688
A33	118.66452966
D1	-144.18769771
D2	38.87017888
D3	-177.39941354
D4	3.10143714
D5	177.83288550
D6	-1.93917101
D7	-0.35606889
D8	-179.79497236
D9	179.83704969
D10	-179.70199719
D11	-172.04823611
D12	0.74752331
D13	-174.23276217
D14	3.24785562
D15	-179.96708143
D16	-177.80515507
D17	1.71660995
D18	0.22520943
D19	179.63230116
D20	179.98605150
D21	179.94912340
D22	-173.07024823
D23	50.34813454
D24	173.25596922
D25	-58.89497163
D26	6.75643660
D27	47.34262674
D28	156.66841201
D29	-95.19182046
D30	0.04435641
D31	7.16989886
D32	-176.69505096

17

N					
C	1	B1			
N	2	B2	1	A1	
C	1	B3	2	A2	3
C	3	B4	2	A3	1
B	2	B5	1	A4	4
S	6	B6	2	A5	1
C	7	B7	6	A6	2
C	8	B8	7	A7	6
C	8	B9	7	A8	6
C	10	B10	8	A9	7
C	9	B11	8	A10	7
C	11	B12	10	A11	8
C	12	B13	9	A12	8
C	14	B14	12	A13	9
C	15	B15	14	A14	12
C	16	B16	15	A15	14
H	4	B17	1	A16	2
H	4	B18	1	A17	2
H	4	B19	1	A18	2
H	5	B20	3	A19	2
H	5	B21	3	A20	2
H	5	B22	3	A21	2
H	6	B23	2	A22	1
H	10	B24	8	A23	7
H	9	B25	8	A24	7
H	11	B26	10	A25	8
H	14	B27	12	A26	9
H	17	B28	16	A27	15
H	15	B29	14	A28	12
H	16	B30	15	A29	14
C	1	B31	2	A30	3
C	32	B32	1	A31	2
H	33	B33	32	A32	1
C	3	B34	2	A33	1
					D1
					D2
					D3
					D4
					D5
					D6
					D7
					D8
					D9
					D10
					D11
					D12
					D13
					D14
					D15
					D16
					D17
					D18
					D19
					D20
					D21
					D22
					D23
					D24
					D25
					D26
					D27
					D28
					D29
					D30
					D31
					D32

C	35	B35	3	A34	2	D33
C	36	B36	35	A35	3	D34
H	37	B37	36	A36	35	D35
C	37	B38	36	A37	35	D36
H	39	B39	37	A38	36	D37
H	36	B40	35	A39	3	D38

B1	1.39853905
B2	1.39660335
B3	1.44994101
B4	1.45141161
B5	1.50285190
B6	1.83959360
B7	1.79051155
B8	1.38176679
B9	1.42236873
B10	1.37461700
B11	1.41947938
B12	1.42096553
B13	1.42171475
B14	1.37684626
B15	1.41670704
B16	1.37732814
B17	1.09061237
B18	1.09519004
B19	1.09414200
B20	1.09220972
B21	1.09644303
B22	1.09100267
B23	1.19106978
B24	1.08469867
B25	1.08693724
B26	1.08786065
B27	1.08757776
B28	1.08774825
B29	1.08682405
B30	1.08668301
B31	1.38382152
B32	1.39454441
B33	1.08513767
B34	1.38497538
B35	1.39404542
B36	1.39993755
B37	1.08598311
B38	1.39920768
B39	1.08604486
B40	1.08506501
A1	104.97317162
A2	123.94601171
A3	125.33860959
A4	123.45404791
A5	124.28989788
A6	104.71395603
A7	118.36385348
A8	121.99451923
A9	120.40717925
A10	121.17789991
A11	121.32997349
A12	122.10411695
A13	120.82558155
A14	120.37555981
A15	120.18241898
A16	108.94181780
A17	110.89846133
A18	110.39768133
A19	108.90421610
A20	111.55358020
A21	109.90309137
A22	118.63046626
A23	119.31807976
A24	119.94842387
A25	119.88732407
A26	118.73150230
A27	120.44035724
A28	120.02431910
A29	119.66575855
A30	110.67418461

A31	132.22867995
A32	121.66670177
A33	110.51843252
A34	131.77110445
A35	117.63071891
A36	119.17760772
A37	121.20174268
A38	119.59210537
A39	121.57842054
D1	179.92474416
D2	179.93490293
D3	0.74683677
D4	173.62381990
D5	172.88830752
D6	141.84469093
D7	-41.72492076
D8	-177.14139685
D9	176.72328072
D10	0.67296040
D11	179.94113485
D12	-179.65883032
D13	0.02870992
D14	0.04237848
D15	-175.34586120
D16	64.63572250
D17	-55.64039408
D18	-157.43208878
D19	82.14695612
D20	-38.68450504
D21	-4.05608096
D22	2.60789980
D23	-3.72664945
D24	179.94746705
D25	0.36436833
D26	-179.99336330
D27	-179.94435334
D28	-179.97314439
D29	0.65856855
D30	-179.86780700
D31	0.38237354
D32	-1.24886458
D33	-178.81815288
D34	-179.16783169
D35	180.00000000
D36	-0.21670400
D37	-179.97692385
D38	1.27178082

18

C					
C	1	B1			
C	2	B2	1	A1	
C	3	B3	2	A2	1
C	4	B4	3	A3	2
C	4	B5	3	A4	2
C	5	B6	4	A5	3
H	5	B7	4	A6	3
C	6	B8	4	A7	3
H	6	B9	4	A8	3
C	7	B10	5	A9	4
H	7	B11	5	A10	4
H	9	B12	6	A11	4
N	1	B13	2	A12	3
C	14	B14	1	A13	2
H	15	B15	14	A14	1
H	15	B16	14	A15	1
H	15	B17	14	A16	1
S	4	B18	3	A17	2
B	3	B19	2	A18	1
C	11	B20	7	A19	5
H	21	B21	11	A20	7
H	21	B22	11	A21	7
H	21	B23	11	A22	7
O	11	B24	7	A23	5
H	20	B25	3	A24	2
C	2	B26	1	A25	14

H	27	B27	2	A26	1	D25
H	27	B28	2	A27	1	D26
H	27	B29	2	A28	1	D27
N	2	B30	1	A29	14	D28
C	1	B31	14	A30	3	D29
C	2	B32	1	A31	14	D30
C	32	B33	1	A32	14	D31
C	34	B34	32	A33	1	D32
H	32	B35	1	A34	14	D33
H	34	B36	32	A35	1	D34
H	35	B37	34	A36	32	D35
H	33	B38	2	A37	1	D36

B1	1.41190562
B2	2.28645153
B3	4.31989256
B4	1.39720780
B5	1.40393949
B6	1.39769548
B7	1.08626158
B8	1.38861237
B9	1.08514949
B10	1.39876533
B11	1.08416797
B12	1.08582884
B13	1.38371646
B14	1.44968221
B15	1.09067320
B16	1.09419094
B17	1.09521615
B18	1.79244369
B19	1.50278416
B20	2.38798365
B21	1.09846038
B22	1.09174713
B23	1.09839509
B24	1.36730415
B25	1.19135516
B26	2.50416976
B27	1.09250897
B28	1.09666966
B29	1.09079222
B30	1.38468878
B31	1.39449693
B32	1.39394129
B33	1.40019377
B34	1.39893008
B35	1.08519815
B36	1.08608169
B37	1.08602081
B38	1.08508763
A1	72.14238209
A2	153.73109878
A3	141.19809860
A4	96.64043091
A5	121.16023991
A6	119.59742026
A7	120.61214354
A8	119.76245041
A9	119.71879021
A10	119.13771915
A11	121.03060918
A12	106.78542393
A13	125.35813050
A14	108.92983583
A15	110.44369640
A16	110.90513499
A17	32.15429295
A18	166.06670304
A19	93.22469949
A20	95.28581732
A21	136.32538555
A22	95.23539506
A23	124.80221606
A24	118.67293234
A25	135.74712369
A26	84.14286544

A27	111.17075315
A28	130.81191512
A29	107.04195233
A30	132.25265292
A31	121.21718551
A32	117.68382515
A33	121.31175202
A34	121.66728208
A35	119.09127290
A36	119.63016949
A37	121.55773213
D1	-179.26415398
D2	-70.11687052
D3	133.71943701
D4	-152.54565708
D5	27.06756650
D6	162.34456278
D7	-17.65269027
D8	0.43783252
D9	179.80919652
D10	-179.86662085
D11	-0.06814303
D12	-179.24537019
D13	3.74955211
D14	123.44872296
D15	-116.25921636
D16	-13.52702642
D17	174.33572683
D18	179.70524061
D19	55.01749705
D20	-179.81205456
D21	-54.70312152
D22	179.63082721
D23	-177.60951309
D24	-1.10282960
D25	-155.11433909
D26	96.69384795
D27	-45.64090646
D28	-0.93476163
D29	-179.90371671
D30	179.22419127
D31	-179.55645885
D32	-0.01041229
D33	0.40589219
D34	179.86973079
D35	179.68526107
D36	-178.90259126

III - Boronsulfides and boron-bisulfides:

4

C					
C	1	B1			
C	2	B2	1	A1	
H	1	B3	2	A2	3
H	2	B4	1	A3	3
B	3	B5	2	A4	1
N	3	B6	2	A5	1
N	3	B7	2	A6	1
C	7	B8	3	A7	2
H	9	B9	7	A8	3
C	8	B10	3	A9	2
H	11	B11	8	A10	3
H	6	B12	3	A11	2
C	11	B13	8	A12	3
H	14	B14	11	A13	8
H	14	B15	11	A14	8
H	14	B16	11	A15	8
C	11	B17	8	A16	3
H	18	B18	11	A17	8
H	18	B19	11	A18	8
H	18	B20	11	A19	8
C	9	B21	7	A20	3
H	22	B22	9	A21	7
					D1
					D2
					D3
					D4
					D5
					D6
					D7
					D8
					D9
					D10
					D11
					D12
					D13
					D14
					D15
					D16
					D17
					D18
					D19
					D20

H	22	B23	9	A22	7	D21
H	22	B24	9	A23	7	D22
C	9	B25	7	A24	3	D23
H	26	B26	9	A25	7	D24
H	26	B27	9	A26	7	D25
H	26	B28	9	A27	7	D26
S	6	B29	3	A28	2	D27
H	6	B30	3	A29	2	D28
C	30	B31	6	A30	3	D29
C	32	B32	30	A31	6	D30
C	32	B33	30	A32	6	D31
C	33	B34	32	A33	30	D32
H	33	B35	32	A34	30	D33
C	34	B36	32	A35	30	D34
H	34	B37	32	A36	30	D35
C	37	B38	34	A37	32	D36
H	35	B39	33	A38	32	D37
H	37	B40	34	A39	32	D38
H	39	B41	37	A40	34	D39

B1	1.35705789
B2	2.25230710
B3	1.07785576
B4	1.07801186
B5	1.60895313
B6	1.35947776
B7	1.35976773
B8	1.48236838
B9	1.09011614
B10	1.48257808
B11	1.09033189
B12	1.21065680
B13	1.53232414
B14	1.09522869
B15	1.09395414
B16	1.09687745
B17	1.53123783
B18	1.09644224
B19	1.09467848
B20	1.09465422
B21	1.53156891
B22	1.09471979
B23	1.09460111
B24	1.09648221
B25	1.53208432
B26	1.09684865
B27	1.09385955
B28	1.09511480
B29	1.96329116
B30	1.21137415
B31	1.78194223
B32	1.40681754
B33	1.40323371
B34	1.39269782
B35	1.08712901
B36	1.39652636
B37	1.08397598
B38	1.39506412
B39	1.08772263
B40	1.08787766
B41	1.08682985
A1	72.46835062
A2	130.46766192
A3	130.51611082
A4	162.15156869
A5	35.20110194
A6	70.28845780
A7	125.11019803
A8	104.50051399
A9	125.03646083
A10	104.43872937
A11	110.28073910
A12	110.12235296
A13	109.61144440
A14	110.34651117
A15	111.49211487
A16	110.70800515

A17	112.20550598
A18	111.20611685
A19	109.20452097
A20	110.53090247
A21	109.34436332
A22	111.08834437
A23	112.07595274
A24	110.16112197
A25	111.64042413
A26	110.34300234
A27	109.55193413
A28	103.64658949
A29	109.92897907
A30	105.23704842
A31	117.71423929
A32	123.70613697
A33	120.72433649
A34	119.32976945
A35	120.32238038
A36	119.78328063
A37	120.84768162
A38	119.41238718
A39	119.18764740
A40	120.50028361
D1	-179.80264698
D2	179.74124302
D3	-174.68289842
D4	179.98760131
D5	0.08418955
D6	176.80660866
D7	9.01819870
D8	-176.01298793
D9	-14.27600916
D10	-158.17995152
D11	102.50241308
D12	-176.89448464
D13	-57.71392019
D14	63.63133288
D15	-131.48023005
D16	-67.50411712
D17	54.28516735
D18	173.59530236
D19	126.23619602
D20	-174.59903989
D21	-55.23130329
D22	66.32149131
D23	-107.80213638
D24	-63.76497380
D25	57.68894386
D26	176.78208236
D27	82.85569732
D28	-36.01491418
D29	-179.88875983
D30	-179.51863001
D31	0.53964319
D32	-179.91607363
D33	0.09124761
D34	179.91761612
D35	-0.05807553
D36	0.00427796
D37	180.00000000
D38	-179.99397503
D39	179.99628651

7

C					
C	1	B1			
C	2	B2	1	A1	
C	3	B3	2	A2	1
C	4	B4	3	A3	2
C	5	B5	4	A4	3
C	1	B6	6	A5	5
H	4	B7	3	A6	2
H	5	B8	4	A7	3
C	7	B9	1	A8	6
					D1
					D2
					D3
					D4
					D5
					D6
					D7

H	10	B10	7	A9	1	D8
H	10	B11	7	A10	1	D9
H	10	B12	7	A11	1	D10
C	7	B13	1	A12	6	D11
H	14	B14	7	A13	1	D12
H	14	B15	7	A14	1	D13
H	14	B16	7	A15	1	D14
B	7	B17	1	A16	6	D15
H	18	B18	7	A17	1	D16
S	18	B19	7	A18	1	D17
H	18	B20	7	A19	1	D18
C	20	B21	18	A20	7	D19
C	22	B22	20	A21	18	D20
C	22	B23	20	A22	18	D21
C	23	B24	22	A23	20	D22
H	23	B25	22	A24	20	D23
C	24	B26	22	A25	20	D24
H	24	B27	22	A26	20	D25
C	25	B28	23	A27	22	D26
H	25	B29	23	A28	22	D27
H	27	B30	24	A29	22	D28
H	29	B31	25	A30	23	D29
H	6	B32	5	A31	4	D30
H	3	B33	2	A32	1	D31
N	7	B34	1	A33	6	D32
N	7	B35	1	A34	6	D33

B1	1.40327368
B2	1.39506808
B3	1.39386255
B4	1.40631295
B5	1.39385206
B6	2.25881162
B7	1.08576953
B8	1.08572614
B9	2.49769572
B10	1.09245113
B11	1.09427863
B12	1.08951850
B13	2.51037663
B14	1.09435546
B15	1.09428238
B16	1.08789871
B17	1.60468367
B18	1.21136968
B19	1.96060775
B20	1.20943335
B21	1.78351290
B22	1.40281649
B23	1.40653295
B24	1.39655824
B25	1.08397656
B26	1.39271843
B27	1.08706266
B28	1.39495214
B29	1.08781150
B30	1.08767050
B31	1.08678659
B32	1.08507054
B33	1.08489506
B34	1.35892697
B35	1.35966834
A1	121.38145053
A2	117.03893952
A3	121.53227937
A4	121.40952981
A5	166.41294914
A6	119.18713196
A7	119.32144506
A8	100.18581361
A9	129.51502582
A10	110.06708291
A11	84.75761049
A12	63.36261737
A13	122.57978332
A14	118.56243256
A15	82.49730066

A16	163.20986272
A17	107.79516968
A18	104.35004035
A19	110.74603610
A20	104.75120036
A21	123.88273977
A22	117.47900503
A23	120.30880150
A24	119.82646726
A25	120.68042271
A26	119.34416077
A27	120.83013397
A28	119.18059657
A29	119.40493959
A30	120.49543823
A31	121.34260042
A32	121.73730311
A33	71.43251066
A34	35.32231340
D1	-0.30619234
D2	0.08636958
D3	0.05877676
D4	179.83576154
D5	-179.97208550
D6	-179.93480365
D7	179.40931837
D8	-43.57957810
D9	96.27007985
D10	-154.23820227
D11	1.13429157
D12	-67.84489568
D13	75.04761139
D14	-176.52939164
D15	-3.68321256
D16	-137.36309614
D17	105.19952766
D18	-15.27359776
D19	170.24660702
D20	5.60677990
D21	-175.11488825
D22	179.48088921
D23	-0.52602378
D24	-179.38785760
D25	0.65625809
D26	-0.18241264
D27	179.95827382
D28	-179.97748840
D29	-179.94215330
D30	-179.93353540
D31	179.49927489
D32	179.48936857
D33	0.05582659

8

C					
N	1	B1			
C	2	B2	1	A1	
N	3	B3	2	A2	1
C	2	B4	1	A3	4
C	4	B5	3	A4	2
B	3	B6	2	A5	1
S	7	B7	3	A6	2
C	8	B8	7	A7	3
C	9	B9	8	A8	7
C	9	B10	8	A9	7
C	11	B11	9	A10	8
C	10	B12	9	A11	8
C	12	B13	11	A12	9
C	13	B14	10	A13	9
C	15	B15	13	A14	10
C	16	B16	15	A15	13
C	17	B17	16	A16	15
H	5	B18	2	A17	1
H	5	B19	2	A18	1
					D1
					D2
					D3
					D4
					D5
					D6
					D7
					D8
					D9
					D10
					D11
					D12
					D13
					D14
					D15
					D16
					D17

H	5	B20	2	A19	1	D18
H	6	B21	4	A20	3	D19
H	6	B22	4	A21	3	D20
H	6	B23	4	A22	3	D21
H	7	B24	3	A23	2	D22
H	7	B25	3	A24	2	D23
H	11	B26	9	A25	8	D24
H	10	B27	9	A26	8	D25
H	12	B28	11	A27	9	D26
H	15	B29	13	A28	10	D27
H	18	B30	17	A29	16	D28
H	16	B31	15	A30	13	D29
H	17	B32	16	A31	15	D30
C	2	B33	1	A32	4	D31
C	1	B34	4	A33	3	D32
C	35	B35	1	A34	4	D33
C	36	B36	35	A35	1	D34
C	34	B37	2	A36	1	D35
H	35	B38	1	A37	4	D36
H	36	B39	35	A38	1	D37
H	37	B40	36	A39	35	D38
H	38	B41	34	A40	2	D39

B1	2.23699213
B2	1.36113736
B3	1.36221307
B4	1.45850745
B5	1.45759305
B6	1.60713242
B7	1.96395856
B8	1.79093835
B9	1.38297857
B10	1.42642241
B11	1.37461855
B12	1.42110736
B13	1.42241280
B14	1.42167645
B15	1.37736210
B16	1.41639430
B17	1.37785487
B18	1.09369450
B19	1.08696074
B20	1.09457436
B21	1.09413021
B22	1.09300181
B23	1.08831833
B24	1.20663431
B25	1.20946758
B26	1.08559236
B27	1.08707071
B28	1.08829766
B29	1.08777594
B30	1.08794926
B31	1.08696175
B32	1.08679951
B33	1.39249921
B34	1.39477734
B35	1.39445271
B36	1.40569279
B37	1.39422610
B38	1.08496034
B39	1.08581875
B40	1.08577260
B41	1.08500276
A1	73.42614658
A2	106.52651482
A3	160.23170701
A4	125.12637684
A5	127.73186080
A6	106.23030851
A7	103.81879539
A8	120.61763832
A9	120.53196265
A10	120.97329664
A11	121.61369559
A12	121.17739897
A13	122.16901272

A14	120.92204083
A15	120.33118624
A16	120.14775565
A17	109.92176647
A18	108.63127113
A19	109.49587491
A20	110.27973232
A21	109.04347292
A22	108.74309832
A23	111.68180697
A24	109.92846944
A25	118.60821351
A26	119.56057393
A27	120.09744912
A28	118.65953733
A29	120.37984492
A30	120.04473136
A31	119.68913459
A32	36.99669747
A33	132.36563163
A34	117.04123593
A35	121.49763214
A36	132.05041074
A37	121.73848810
A38	119.19880021
A39	119.33456178
A40	121.67036668
D1	-0.70409750
D2	177.80635162
D3	176.07889812
D4	175.90042936
D5	-100.59742356
D6	74.22793364
D7	-123.48699424
D8	59.81142170
D9	177.54309456
D10	-176.93954762
D11	-0.66738420
D12	-179.98637449
D13	179.54005123
D14	0.01098706
D15	-0.04016281
D16	-62.23045351
D17	178.24408230
D18	58.29187231
D19	-94.28695282
D20	144.78754147
D21	25.23418140
D22	21.86675478
D23	145.95318009
D24	-2.01872679
D25	3.02888034
D26	-179.70775514
D27	-0.63874001
D28	179.79828915
D29	179.85403426
D30	179.82994780
D31	-179.57242004
D32	179.24813020
D33	179.45489978
D34	0.12202936
D35	179.93342703
D36	-0.89495762
D37	179.90397846
D38	179.84740527
D39	0.32027106

11

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

C	2	B7	1	A6	3	D5
H	8	B8	2	A7	1	D6
H	8	B9	2	A8	1	D7
H	8	B10	2	A9	1	D8
C	3	B11	2	A10	1	D9
H	12	B12	3	A11	2	D10
H	12	B13	3	A12	2	D11
H	12	B14	3	A13	2	D12
N	2	B15	1	A14	3	D13
H	1	B16	2	A15	16	D14
C	1	B17	2	A16	16	D15
C	18	B18	1	A17	2	D16
C	18	B19	1	A18	2	D17
C	19	B20	18	A19	1	D18
H	19	B21	18	A20	1	D19
C	20	B22	18	A21	1	D20
H	20	B23	18	A22	1	D21
C	23	B24	20	A23	18	D22
H	21	B25	19	A24	18	D23
H	23	B26	20	A25	18	D24
H	25	B27	23	A26	20	D25
S	18	B28	1	A27	2	D26
S	1	B29	2	A28	16	D27
C	30	B30	1	A29	2	D28
C	31	B31	30	A30	1	D29
C	31	B32	30	A31	1	D30
C	32	B33	31	A32	30	D31
H	32	B34	31	A33	30	D32
C	33	B35	31	A34	30	D33
H	33	B36	31	A35	30	D34
C	34	B37	32	A36	31	D35
H	34	B38	32	A37	31	D36
H	36	B39	33	A38	31	D37
H	38	B40	34	A39	32	D38

B1	1.61306561
B2	1.35737958
B3	2.20054514
B4	1.35771145
B5	1.07857867
B6	1.07846221
B7	2.50642696
B8	1.09240560
B9	1.09118280
B10	1.09202657
B11	1.46459775
B12	1.09117910
B13	1.09087812
B14	1.09146747
B15	1.35699125
B16	1.20083887
B17	2.95525103
B18	1.40366922
B19	1.40239223
B20	1.39441163
B21	1.08669506
B22	1.39580036
B23	1.08496999
B24	1.39599189
B25	1.08748074
B26	1.08755356
B27	1.08680827
B28	1.78887382
B29	1.96929874
B30	1.79721385
B31	1.40280387
B32	1.40526462
B33	1.39657367
B34	1.08634378
B35	1.39580772
B36	1.08590494
B37	1.39556188
B38	1.08746743
B39	1.08764019
B40	1.08681226
A1	125.60551663
A2	74.28444742

A3	37.01259931
A4	168.08860576
A5	131.06001002
A6	100.54570423
A7	104.54644495
A8	87.77124410
A9	132.16744119
A10	125.37694716
A11	109.98865092
A12	110.10318665
A13	107.97597503
A14	129.04149443
A15	109.26790594
A16	136.01104400
A17	147.98973408
A18	88.46052154
A19	120.47953144
A20	119.43328870
A21	120.09177050
A22	119.76710942
A23	120.73927200
A24	119.47568871
A25	119.24603359
A26	120.38152858
A27	39.16384306
A28	109.39198069
A29	102.37462781
A30	119.96981703
A31	121.44253993
A32	120.72407507
A33	119.12984850
A34	120.61098742
A35	119.26698478
A36	120.35128828
A37	119.58799502
A38	119.57677154
A39	120.33810165
D1	-179.53602157
D2	179.93201656
D3	179.93071207
D4	-179.46719320
D5	179.79578499
D6	-75.03941797
D7	34.74779727
D8	149.80030391
D9	-0.09260009
D10	-61.66561578
D11	59.08250315
D12	178.71742775
D13	-179.25988135
D14	176.93447694
D15	83.39967712
D16	10.71069013
D17	161.56028653
D18	146.04891703
D19	-33.53146798
D20	-162.10299963
D21	18.90745445
D22	-0.72459477
D23	-179.93505980
D24	179.98326322
D25	-179.69180413
D26	-44.28949573
D27	-62.16241246
D28	-65.00092765
D29	122.02449156
D30	-60.39073850
D31	177.86516688
D32	-1.91460051
D33	-178.55835752
D34	0.61402153
D35	0.59053489
D36	-179.67100963
D37	179.73695021
D38	179.84672964

C					
C	1	B1			
C	2	B2	1	A1	
H	1	B3	2	A2	3
H	2	B4	1	A3	3
C	3	B5	2	A4	1
C	6	B6	3	A5	2
C	6	B7	3	A6	2
C	7	B8	6	A7	3
H	7	B9	6	A8	3
C	8	B10	6	A9	3
H	8	B11	6	A10	3
C	11	B12	8	A11	6
H	9	B13	7	A12	6
H	11	B14	8	A13	6
C	3	B15	2	A14	1
C	16	B16	3	A15	2
C	16	B17	3	A16	2
C	17	B18	16	A17	3
H	17	B19	16	A18	3
C	18	B20	16	A19	3
H	18	B21	16	A20	3
C	19	B22	17	A21	16
H	19	B23	17	A22	16
H	21	B24	18	A23	16
N	3	B25	2	A24	1
C	26	B26	3	A25	2
H	27	B27	26	A26	3
H	27	B28	26	A27	3
H	27	B29	26	A28	3
S	6	B30	3	A29	2
S	16	B31	3	A30	2
B	3	B32	2	A31	1
C	13	B33	11	A32	8
H	34	B34	13	A33	11
H	34	B35	13	A34	11
H	34	B36	13	A35	11
C	23	B37	19	A36	17
H	38	B38	23	A37	19
H	38	B39	23	A38	19
H	38	B40	23	A39	19
O	13	B41	11	A40	8
O	23	B42	19	A41	17
H	33	B43	3	A42	2
C	3	B44	2	A43	1
H	45	B45	3	A44	2
H	45	B46	3	A45	2
H	45	B47	3	A46	2
N	3	B48	2	A47	1
					D1
					D2
					D3
					D4
					D5
					D6
					D7
					D8
					D9
					D10
					D11
					D12
					D13
					D14
					D15
					D16
					D17
					D18
					D19
					D20
					D21
					D22
					D23
					D24
					D25
					D26
					D27
					D28
					D29
					D30
					D31
					D32
					D33
					D34
					D35
					D36
					D37
					D38
					D39
					D40
					D41
					D42
					D43
					D44
					D45
					D46

B1	1.35761994
B2	2.25145207
B3	1.07844982
B4	1.07860215
B5	4.25649133
B6	1.40511132
B7	1.39816332
B8	1.38934677
B9	1.08647881
B10	1.39860686
B11	1.08545941
B12	1.39838956
B13	1.08600219
B14	1.08460328
B15	3.38231114
B16	1.40060007
B17	1.40531945
B18	1.39875474
B19	1.08604632
B20	1.39058799
B21	1.08627357
B22	1.40006456
B23	1.08468133
B24	1.08605706

B25	1.35747745
B26	1.46411378
B27	1.09154998
B28	1.09110606
B29	1.09106901
B30	1.79065989
B31	1.79804820
B32	1.61217057
B33	2.38809300
B34	1.09890512
B35	1.09212850
B36	1.09868516
B37	2.38914239
B38	1.09182764
B39	1.09878042
B40	1.09829548
B41	1.37098258
B42	1.36879769
B43	1.20125223
B44	2.50503191
B45	1.09207797
B46	1.09237964
B47	1.09125849
B48	1.35720543
A1	72.50380197
A2	131.05791184
A3	131.08136240
A4	146.11492861
A5	129.82247238
A6	105.39478673
A7	120.96234709
A8	119.47849383
A9	121.00051352
A10	119.67963858
A11	120.01484133
A12	121.11118915
A13	118.94513902
A14	120.53055016
A15	109.09825737
A16	102.41400029
A17	121.52721995
A18	119.22000318
A19	121.22722334
A20	119.20808270
A21	119.72138011
A22	119.23797519
A23	121.21156652
A24	70.21804106
A25	125.31112290
A26	107.98297355
A27	110.16173148
A28	109.95485003
A29	30.64678188
A30	59.86541233
A31	164.09364172
A32	93.27023575
A33	95.18303540
A34	136.51039246
A35	95.35610487
A36	93.23852762
A37	136.34947823
A38	95.67150162
A39	94.94366204
A40	124.84671035
A41	124.77099809
A42	109.32635786
A43	63.66293125
A44	132.19359197
A45	104.59815693
A46	87.63932802
A47	35.10947647
D1	179.40367817
D2	-179.96682852
D3	122.52269362
D4	-44.07605743
D5	165.24440396
D6	-147.49566066

D7	32.16268776
D8	153.84719947
D9	-26.71466849
D10	0.97344231
D11	179.93463095
D12	-179.87793505
D13	-91.84685672
D14	123.55462287
D15	-2.08344966
D16	-115.23813955
D17	65.10018157
D18	119.51529654
D19	-60.88400841
D20	-0.93776354
D21	-179.79048412
D22	179.60883956
D23	-0.00550299
D24	-179.14865113
D25	179.24696897
D26	-61.06153959
D27	59.61528443
D28	34.95025798
D29	-120.57402054
D30	-178.51610643
D31	179.68034541
D32	54.56883541
D33	179.67069568
D34	-55.00134296
D35	-178.77798151
D36	-179.59557372
D37	-53.99058939
D38	55.66074374
D39	179.72507717
D40	-179.74562260
D41	-176.72752585
D42	179.69583954
D43	29.63012295
D44	-105.68401538
D45	144.54405891
D46	-179.68307650

C					
N	1	B1			
N	2	B2	1	A1	
C	3	B3	2	A2	1
N	4	B4	3	A3	2
C	3	B5	2	A4	1
C	5	B6	4	A5	3
B	4	B7	3	A6	2
S	8	B8	4	A7	3
C	9	B9	8	A8	4
C	10	B10	9	A9	8
C	10	B11	9	A10	8
C	12	B12	10	A11	9
C	11	B13	10	A12	9
C	13	B14	12	A13	10
C	14	B15	11	A14	10
C	16	B16	14	A15	11
C	17	B17	16	A16	14
C	18	B18	17	A17	16
H	6	B19	3	A18	2
H	6	B20	3	A19	2
H	6	B21	3	A20	2
H	7	B22	5	A21	4
H	7	B23	5	A22	4
H	7	B24	5	A23	4
H	8	B25	4	A24	3
H	12	B26	10	A25	9
H	11	B27	10	A26	9
H	13	B28	12	A27	10
H	16	B29	14	A28	11
H	19	B30	18	A29	17
					D1
					D2
					D3
					D4
					D5
					D6
					D7
					D8
					D9
					D10
					D11
					D12
					D13
					D14
					D15
					D16
					D17
					D18
					D19
					D20
					D21
					D22
					D23
					D24
					D25
					D26
					D27
					D28

H	17	B31	16	A30	14	D29
H	18	B32	17	A31	16	D30
H	1	B33	2	A32	3	D31
S	8	B34	4	A33	3	D32
C	35	B35	8	A34	4	D33
C	36	B36	35	A35	8	D34
C	36	B37	35	A36	8	D35
C	37	B38	36	A37	35	D36
H	37	B39	36	A38	35	D37
C	38	B40	36	A39	35	D38
H	38	B41	36	A40	35	D39
C	41	B42	38	A41	36	D40
C	39	B43	37	A42	36	D41
H	41	B44	38	A43	36	D42
C	43	B45	41	A44	38	D43
C	44	B46	39	A45	37	D44
H	44	B47	39	A46	37	D45
C	46	B48	43	A47	41	D46
H	46	B49	43	A48	41	D47
H	47	B50	44	A49	39	D48
H	49	B51	46	A50	43	D49

B1	1.30322469
B2	1.36898771
B3	1.34531233
B4	1.36441602
B5	1.46001027
B6	1.46740339
B7	1.61331998
B8	1.93991456
B9	1.78906518
B10	1.38273598
B11	1.42364537
B12	1.37491648
B13	1.41935296
B14	1.42070421
B15	1.42203853
B16	1.37700842
B17	1.41686295
B18	1.37737911
B19	1.08959429
B20	1.08926717
B21	1.09318996
B22	1.09185415
B23	1.09043085
B24	1.09002384
B25	1.20116495
B26	1.08470444
B27	1.08732470
B28	1.08795963
B29	1.08779143
B30	1.08787144
B31	1.08698918
B32	1.08679895
B33	1.07989808
B34	1.94367140
B35	1.78577971
B36	1.38291876
B37	1.42842159
B38	1.42126443
B39	1.08517444
B40	1.37232661
B41	1.08670845
B42	1.42199389
B43	1.42157804
B44	1.08796318
B45	1.41861486
B46	1.37755739
B47	1.08808482
B48	1.37805750
B49	1.08792758
B50	1.08701618
B51	1.08664724
A1	103.42689114
A2	113.44744400
A3	103.64175830
A4	118.48802223

A5	127.09730006
A6	126.47232436
A7	103.81660178
A8	104.92831154
A9	118.42891413
A10	122.05132405
A11	120.32992600
A12	121.26817782
A13	121.46633703
A14	122.16610441
A15	120.87511102
A16	120.36756986
A17	120.14156503
A18	107.19596209
A19	109.54666522
A20	109.83791424
A21	107.77637782
A22	109.56928780
A23	109.93599656
A24	109.00199612
A25	119.36015907
A26	119.91997020
A27	119.76047892
A28	118.70321888
A29	120.42275093
A30	120.03163544
A31	119.68185726
A32	124.65419718
A33	113.00971930
A34	107.08515953
A35	125.52560126
A36	115.87288488
A37	121.51878808
A38	120.44421413
A39	121.12130599
A40	118.78949152
A41	121.23703329
A42	122.10873683
A43	119.94725887
A44	122.67429504
A45	120.98353307
A46	118.74735989
A47	120.90300744
A48	118.68692334
A49	119.98694905
A50	120.23767876
D1	-0.31622963
D2	0.26880715
D3	-175.53163216
D4	-179.14440367
D5	-176.78974902
D6	103.18180481
D7	-145.88259423
D8	145.98889843
D9	-36.79262806
D10	-177.86949443
D11	177.18666120
D12	0.78329753
D13	-179.97506193
D14	-179.34249326
D15	0.00732880
D16	0.02630078
D17	-23.06922221
D18	-143.42867652
D19	96.59977507
D20	170.21860219
D21	50.80097918
D22	-68.95211778
D23	-14.21983026
D24	1.31882369
D25	-3.23078895
D26	-179.93066299
D27	0.72548791
D28	-179.98090349
D29	-179.91407652
D30	-179.94274764
D31	-179.51292504

D32	-138.38199078
D33	69.31254538
D34	4.42212096
D35	-175.82850694
D36	179.97088472
D37	1.00192262
D38	-179.88901997
D39	-0.03882016
D40	-0.13871653
D41	179.94496464
D42	179.89651946
D43	-179.81805384
D44	-179.94396654
D45	0.21002253
D46	-179.85259681
D47	0.04705333
D48	-179.90632688
D49	179.92905921

15

C					
C	1	B1			
H	1	B2	2	A1	
C	2	B3	1	A2	3
C	4	B4	2	A3	1
C	4	B5	2	A4	1
C	5	B6	4	A5	2
H	5	B7	4	A6	2
C	6	B8	4	A7	2
H	6	B9	4	A8	2
C	9	B10	6	A9	4
H	7	B11	5	A10	4
H	9	B12	6	A11	4
C	2	B13	1	A12	4
C	14	B14	2	A13	1
C	14	B15	2	A14	1
C	15	B16	14	A15	2
H	15	B17	14	A16	2
C	16	B18	14	A17	2
H	16	B19	14	A18	2
C	17	B20	15	A19	14
H	17	B21	15	A20	14
H	19	B22	16	A21	14
N	2	B23	1	A22	14
C	24	B24	2	A23	1
H	25	B25	24	A24	2
H	25	B26	24	A25	2
H	25	B27	24	A26	2
S	4	B28	2	A27	1
S	14	B29	2	A28	1
B	2	B30	1	A29	24
C	11	B31	9	A30	6
H	32	B32	11	A31	9
H	32	B33	11	A32	9
H	32	B34	11	A33	9
C	21	B35	17	A34	15
H	36	B36	21	A35	17
H	36	B37	21	A36	17
H	36	B38	21	A37	17
O	11	B39	9	A38	6
O	21	B40	17	A39	15
H	31	B41	2	A40	1
C	2	B42	1	A41	24
H	43	B43	2	A42	1
H	43	B44	2	A43	1
H	43	B45	2	A44	1
N	2	B46	1	A45	24
N	1	B47	24	A46	2
B1	2.20870904				
B2	1.07987820				
B3	4.23999477				
B4	1.40483360				
B5	1.39808545				
B6	1.38933398				

B7	1.08641196
B8	1.39840944
B9	1.08555972
B10	1.39863586
B11	1.08593712
B12	1.08453353
B13	3.35840177
B14	1.40058215
B15	1.40537201
B16	1.39880806
B17	1.08606513
B18	1.39058644
B19	1.08622693
B20	1.40034154
B21	1.08466644
B22	1.08597722
B23	1.36382025
B24	1.46355018
B25	1.09166181
B26	1.09095028
B27	1.09106209
B28	1.79135044
B29	1.79892049
B30	1.61193116
B31	2.38833498
B32	1.09882098
B33	1.09203525
B34	1.09858917
B35	2.38928693
B36	1.09173352
B37	1.09872643
B38	1.09819666
B39	1.37009112
B40	1.36795553
B41	1.20169081
B42	2.51373984
B43	1.09242180
B44	1.09134868
B45	1.09011512
B46	1.34349674
B47	1.30333325
A1	159.74774274
A2	148.88887702
A3	128.86823872
A4	106.02948553
A5	120.91202661
A6	119.51305070
A7	120.97798916
A8	119.70367169
A9	119.99239234
A10	121.11313766
A11	118.96400695
A12	115.42218264
A13	109.46527173
A14	101.82876929
A15	121.48969855
A16	119.24906072
A17	121.18444399
A18	119.25893563
A19	119.72023896
A20	119.24680357
A21	121.19115893
A22	36.20477513
A23	126.28394943
A24	108.00950569
A25	109.93301217
A26	109.70605090
A27	30.78769121
A28	59.98668001
A29	162.41982011
A30	93.26796133
A31	95.28867647
A32	136.45019199
A33	95.27706857
A34	93.24672907
A35	136.29855698
A36	95.77816272

A37	94.85545416
A38	124.83397652
A39	124.76546104
A40	108.91700134
A41	94.98086323
A42	106.21838697
A43	87.36007985
A44	129.50163228
A45	67.48064377
A46	111.54818893
D1	67.38364484
D2	19.12940287
D3	-131.16604092
D4	-147.15520990
D5	32.55470316
D6	153.11417710
D7	-27.35294908
D8	0.99661677
D9	179.96729160
D10	-179.86379047
D11	-139.72155353
D12	86.06674453
D13	-39.49589334
D14	-114.80465064
D15	65.58365391
D16	119.58193239
D17	-60.84822048
D18	-0.94396829
D19	-179.72616307
D20	179.59071552
D21	73.33819133
D22	-178.91768456
D23	179.04120489
D24	-61.20945581
D25	59.33641208
D26	100.27487361
D27	-158.22244442
D28	-1.75156534
D29	179.47993561
D30	54.46771149
D31	179.66540051
D32	-55.13956824
D33	-178.55748011
D34	-179.57294595
D35	-53.86704356
D36	55.81568820
D37	179.71054264
D38	-179.72894887
D39	6.58955652
D40	179.83030568
D41	-101.96123112
D42	147.87150395
D43	32.89833469
D44	-179.79627892
D45	0.03190697

16

B					
H	1	B1			
C	2	B2	1	A1	
C	3	B3	2	A2	1
C	3	B4	2	A3	1
C	4	B5	3	A4	2
H	4	B6	3	A5	2
C	5	B7	3	A6	2
H	5	B8	3	A7	2
C	8	B9	5	A8	3
H	6	B10	4	A9	3
H	8	B11	5	A10	3
H	10	B12	8	A11	5
S	3	B13	2	A12	1
S	1	B14	14	A13	3
C	15	B15	1	A14	14
					D1
					D2
					D3
					D4
					D5
					D6
					D7
					D8
					D9
					D10
					D11
					D12
					D13

C	16	B16	15	A15	1	D14
C	16	B17	15	A16	1	D15
C	17	B18	16	A17	15	D16
H	17	B19	16	A18	15	D17
C	18	B20	16	A19	15	D18
H	18	B21	16	A20	15	D19
C	19	B22	17	A21	16	D20
H	19	B23	17	A22	16	D21
H	21	B24	18	A23	16	D22
H	23	B25	19	A24	17	D23
C	1	B26	14	A25	3	D24
C	27	B27	1	A26	14	D25
C	28	B28	27	A27	1	D26
C	28	B29	27	A28	1	D27
C	29	B30	28	A29	27	D28
C	30	B31	28	A30	27	D29
H	30	B32	28	A31	27	D30
C	31	B33	29	A32	28	D31
H	31	B34	29	A33	28	D32
H	32	B35	30	A34	28	D33
H	34	B36	31	A35	29	D34
C	29	B37	28	A36	27	D35
H	38	B38	29	A37	28	D36
H	38	B39	29	A38	28	D37
H	38	B40	29	A39	28	D38
C	28	B41	27	A40	1	D39
H	42	B42	28	A41	27	D40
H	42	B43	28	A42	27	D41
H	42	B44	28	A43	27	D42
N	27	B45	1	A44	14	D43
N	27	B46	1	A45	14	D44

B1	1.19960842
B2	2.92655535
B3	1.40345796
B4	1.40236439
B5	1.39455085
B6	1.08663673
B7	1.39572113
B8	1.08507304
B9	1.39605038
B10	1.08742084
B11	1.08749330
B12	1.08679000
B13	1.78925035
B14	1.96703791
B15	1.79762768
B16	1.40293740
B17	1.40453278
B18	1.39629957
B19	1.08630130
B20	1.39552764
B21	1.08591763
B22	1.39576667
B23	1.08738651
B24	1.08763546
B25	1.08683487
B26	1.61603276
B27	2.25857167
B28	1.40116641
B29	1.39535767
B30	1.39486641
B31	1.39359108
B32	1.08477261
B33	1.39354246
B34	1.08486599
B35	1.08574456
B36	1.08571274
B37	2.50100950
B38	1.09386395
B39	1.09393965
B40	1.08643422
B41	2.51476501
B42	1.09282047
B43	1.09322454
B44	1.08908074
B45	1.36101798

B46	1.36014530
A1	79.22813838
A2	141.99780883
A3	75.75124110
A4	120.44450679
A5	119.44791058
A6	120.07587214
A7	119.79179404
A8	120.71252303
A9	119.48177001
A10	119.26476958
A11	120.36346618
A12	60.94824432
A13	111.09670171
A14	102.65670834
A15	119.78584037
A16	121.53062719
A17	120.66965907
A18	119.13750396
A19	120.55664371
A20	119.31072117
A21	120.32018085
A22	119.60844721
A23	119.57812943
A24	120.31348237
A25	107.27114866
A26	162.47290992
A27	71.94066868
A28	166.61787471
A29	121.69148859
A30	116.98417812
A31	121.78185246
A32	116.93444555
A33	121.72942140
A34	119.18726381
A35	119.26307767
A36	135.80409222
A37	91.60822177
A38	97.16690168
A39	136.68588230
A40	63.34179416
A41	86.10245763
A42	105.07071235
A43	133.31204972
A44	126.04986378
A45	127.19648400
D1	118.96163520
D2	-121.70114470
D3	104.67636891
D4	-74.90181695
D5	-141.35586762
D6	39.62162986
D7	-0.77669488
D8	-179.94729865
D9	179.97187072
D10	-179.65061544
D11	20.05955808
D12	-92.41261187
D13	179.11420825
D14	122.62376424
D15	-59.59933484
D16	177.98074005
D17	-1.84403881
D18	-178.66845791
D19	0.66969280
D20	0.61556905
D21	-179.70932876
D22	179.78880522
D23	179.82852108
D24	148.79299525
D25	57.18703784
D26	177.89554660
D27	-3.66537943
D28	-179.79118331
D29	-178.74955754
D30	0.99513236
D31	-0.37434687

D32	179.56076061
D33	-179.99158348
D34	-179.92632713
D35	-0.28498026
D36	131.41989917
D37	-118.43693145
D38	10.10138508
D39	-1.90099660
D40	145.64341967
D41	-104.82887672
D42	33.02814587
D43	-124.99567422
D44	56.17330888

17

N					
C	1	B1			
N	2	B2	1	A1	
C	1	B3	2	A2	3
C	3	B4	2	A3	1
B	2	B5	1	A4	4
S	6	B6	2	A5	1
C	7	B7	6	A6	2
C	8	B8	7	A7	6
C	8	B9	7	A8	6
C	10	B10	8	A9	7
C	9	B11	8	A10	7
C	11	B12	10	A11	8
C	12	B13	9	A12	8
C	14	B14	12	A13	9
C	15	B15	14	A14	12
C	16	B16	15	A15	14
H	4	B17	1	A16	2
H	4	B18	1	A17	2
H	4	B19	1	A18	2
H	5	B20	3	A19	2
H	5	B21	3	A20	2
H	5	B22	3	A21	2
H	6	B23	2	A22	1
H	10	B24	8	A23	7
H	9	B25	8	A24	7
H	11	B26	10	A25	8
H	14	B27	12	A26	9
H	17	B28	16	A27	15
H	15	B29	14	A28	12
H	16	B30	15	A29	14
S	6	B31	2	A30	1
C	32	B32	6	A31	2
C	33	B33	32	A32	6
C	33	B34	32	A33	6
C	34	B35	33	A34	32
H	34	B36	33	A35	32
C	35	B37	33	A36	32
H	35	B38	33	A37	32
C	38	B39	35	A38	33
C	36	B40	34	A39	33
H	38	B41	35	A40	33
C	40	B42	38	A41	35
C	41	B43	36	A42	34
H	41	B44	36	A43	34
C	43	B45	40	A44	38
H	43	B46	40	A45	38
H	44	B47	41	A46	36
H	46	B48	43	A47	40
C	1	B49	2	A48	3
C	50	B50	1	A49	2
H	51	B51	50	A50	1
C	3	B52	2	A51	1
C	53	B53	3	A52	2
C	54	B54	53	A53	3
H	55	B55	54	A54	53
C	51	B56	50	A55	1
H	57	B57	51	A56	50
H	54	B58	53	A57	3
					D1
					D2
					D3
					D4
					D5
					D6
					D7
					D8
					D9
					D10
					D11
					D12
					D13
					D14
					D15
					D16
					D17
					D18
					D19
					D20
					D21
					D22
					D23
					D24
					D25
					D26
					D27
					D28
					D29
					D30
					D31
					D32
					D33
					D34
					D35
					D36
					D37
					D38
					D39
					D40
					D41
					D42
					D43
					D44
					D45
					D46
					D47
					D48
					D49
					D50
					D51
					D52
					D53
					D54
					D55
					D56

B1	1.36148896
B2	1.35940042
B3	1.45957344
B4	1.46329898
B5	1.61647891
B6	1.93735948
B7	1.78673160
B8	1.38416108
B9	1.42302923
B10	1.37554975
B11	1.41792802
B12	1.42003718
B13	1.42250866
B14	1.37668895
B15	1.41713521
B16	1.37730138
B17	1.09352437
B18	1.08707676
B19	1.09439874
B20	1.09267567
B21	1.08808711
B22	1.09299240
B23	1.19896708
B24	1.08353726
B25	1.08748014
B26	1.08806908
B27	1.08780265
B28	1.08796391
B29	1.08703806
B30	1.08681917
B31	1.96382742
B32	1.79097468
B33	1.38310406
B34	1.42474289
B35	1.42004920
B36	1.08687392
B37	1.37504427
B38	1.08583340
B39	1.42064841
B40	1.42181573
B41	1.08828697
B42	1.41971779
B43	1.37686764
B44	1.08755602
B45	1.37725779
B46	1.08796705
B47	1.08685996
B48	1.08675658
B49	1.39303507
B50	1.39503734
B51	1.08490733
B52	1.39189863
B53	1.39536001
B54	1.39345387
B55	1.08572009
B56	1.39351946
B57	1.08568955
B58	1.08473877
A1	106.82232630
A2	126.84300422
A3	126.23191438
A4	126.21512036
A5	104.02827930
A6	106.18997207
A7	117.65151943
A8	123.04980192
A9	120.36125078
A10	121.40435564
A11	121.56840911
A12	122.18372788
A13	120.89097576
A14	120.38795165
A15	120.11529464
A16	109.17136941
A17	109.04164530
A18	109.95613376
A19	108.30229096

A20	109.63517004
A21	110.25838114
A22	110.38372651
A23	119.50078378
A24	119.89072556
A25	119.68618552
A26	118.69185454
A27	120.42859366
A28	120.01821394
A29	119.69266818
A30	111.02429221
A31	103.64889926
A32	119.34602554
A33	121.89001383
A34	121.58771252
A35	119.55947167
A36	121.05055688
A37	119.13812680
A38	121.15624762
A39	122.10141001
A40	120.10051269
A41	122.65430394
A42	120.87623757
A43	118.68094914
A44	120.83138941
A45	118.75638567
A46	120.03071573
A47	120.15912054
A48	110.20960309
A49	132.01766914
A50	121.77047458
A51	110.30147325
A52	132.19827553
A53	116.97477905
A54	119.18810099
A55	116.92174616
A56	119.25378323
A57	121.78334925
D1	176.99694466
D2	178.78600299
D3	-3.33230558
D4	112.46370500
D5	-155.01698097
D6	159.98987735
D7	-21.53859616
D8	-178.89978823
D9	178.45491445
D10	0.52391183
D11	-179.96154174
D12	-179.64052920
D13	0.04576075
D14	0.02386323
D15	132.49309616
D16	12.76181891
D17	-107.34429194
D18	143.68027246
D19	24.91328604
D20	-95.55487915
D21	-6.04775957
D22	0.14455971
D23	-1.86379162
D24	179.95898109
D25	0.43056297
D26	-179.97711363
D27	-179.90802821
D28	-179.95170298
D29	-126.26616642
D30	90.23450038
D31	127.15352384
D32	-55.50875933
D33	177.48229528
D34	-2.71372750
D35	-178.18950248
D36	0.83869032
D37	0.86324863
D38	-179.91796279
D39	179.93740048

D40	179.64027961
D41	-179.50618959
D42	0.50965899
D43	-179.88262143
D44	0.09559590
D45	-179.97725267
D46	-179.98290787
D47	-0.20843338
D48	179.68668341
D49	-0.57201144
D50	0.67495841
D51	179.22710172
D52	179.50018563
D53	179.99549276
D54	179.55676239
D55	-179.98891851
D56	-0.73251950

18

C					
C	1	B1			
C	1	B2	2	A1	
C	3	B3	1	A2	2
C	4	B4	3	A3	1
C	4	B5	3	A4	1
C	5	B6	4	A5	3
H	5	B7	4	A6	3
C	6	B8	4	A7	3
H	6	B9	4	A8	3
C	7	B10	5	A9	4
H	7	B11	5	A10	4
H	9	B12	6	A11	4
C	3	B13	1	A12	2
C	14	B14	3	A13	1
C	14	B15	3	A14	1
C	15	B16	14	A15	3
H	15	B17	14	A16	3
C	16	B18	14	A17	3
H	16	B19	14	A18	3
C	17	B20	15	A19	14
H	17	B21	15	A20	14
H	19	B22	16	A21	14
N	3	B23	1	A22	2
C	24	B24	3	A23	1
H	25	B25	24	A24	3
H	25	B26	24	A25	3
H	25	B27	24	A26	3
S	4	B28	3	A27	1
S	14	B29	3	A28	1
B	3	B30	1	A29	24
C	11	B31	7	A30	5
H	32	B32	11	A31	7
H	32	B33	11	A32	7
H	32	B34	11	A33	7
C	21	B35	17	A34	15
H	36	B36	21	A35	17
H	36	B37	21	A36	17
H	36	B38	21	A37	17
O	11	B39	7	A38	5
O	21	B40	17	A39	15
H	31	B41	3	A40	1
C	3	B42	1	A41	24
H	43	B43	3	A42	1
H	43	B44	3	A43	1
H	43	B45	3	A44	1
N	3	B46	1	A45	24
C	1	B47	24	A46	3
C	2	B48	1	A47	24
C	48	B49	1	A48	24
C	49	B50	2	A49	1
H	48	B51	1	A50	24
H	50	B52	48	A51	1
H	51	B53	49	A52	2
H	49	B54	2	A53	1

B1	1.40155040
B2	2.25904710
B3	4.24773915
B4	1.39781505
B5	1.40532703
B6	1.39850578
B7	1.08646702
B8	1.38931360
B9	1.08549404
B10	1.39807705
B11	1.08446075
B12	1.08609639
B13	3.36012824
B14	1.39982306
B15	1.40548339
B16	1.39803111
B17	1.08600314
B18	1.39077191
B19	1.08630322
B20	1.39994373
B21	1.08450361
B22	1.08605105
B23	1.36119675
B24	1.45921284
B25	1.09419446
B26	1.08648842
B27	1.09405991
B28	1.79088366
B29	1.79832343
B30	1.61443324
B31	2.38785923
B32	1.09892747
B33	1.09872975
B34	1.09206509
B35	2.38919211
B36	1.09818918
B37	1.09180166
B38	1.09870252
B39	1.37039884
B40	1.36827409
B41	1.19987087
B42	2.51199607
B43	1.09300466
B44	1.08961370
B45	1.09265141
B46	1.36070648
B47	1.39465800
B48	1.39533729
B49	1.39380589
B50	1.39385738
B51	1.08489691
B52	1.08572391
B53	1.08578681
B54	1.08480049
A1	71.94578316
A2	150.10190010
A3	128.36091103
A4	106.05966927
A5	121.31614722
A6	119.49331382
A7	120.61721487
A8	119.60664011
A9	119.67990131
A10	119.17560790
A11	120.95745054
A12	113.40209936
A13	117.90570126
A14	93.71413297
A15	121.52966575
A16	119.19663483
A17	121.17079504
A18	119.27969939
A19	119.69669229
A20	119.24235314
A21	121.23770965
A22	35.31484168
A23	127.07860236

A24	109.44994863
A25	108.90368655
A26	109.54323705
A27	31.61828157
A28	59.83535781
A29	161.39544805
A30	93.22038045
A31	95.63159439
A32	94.90232960
A33	136.49966817
A34	93.23269037
A35	94.75059569
A36	136.31491405
A37	95.85699843
A38	124.79252737
A39	124.76235000
A40	110.57326889
A41	99.57896920
A42	109.83580427
A43	85.61013738
A44	129.09538105
A45	71.39493458
A46	131.93124808
A47	121.39434472
A48	116.95809163
A49	117.01164837
A50	121.70408104
A51	119.27652721
A52	119.17138773
A53	121.77517046
D1	-113.72860374
D2	22.09247399
D3	-127.21085556
D4	-146.12096758
D5	33.56553234
D6	152.09823128
D7	-28.33499949
D8	0.70953847
D9	179.98923437
D10	-179.92025907
D11	111.95565257
D12	91.26901807
D13	-33.18835743
D14	-110.81186725
D15	69.31558882
D16	124.09207009
D17	-56.37056266
D18	-0.41162177
D19	-179.78720080
D20	179.63963526
D21	-179.85036961
D22	-177.69141773
D23	-124.50781649
D24	-4.48337905
D25	115.16528906
D26	105.63431737
D27	-157.33830854
D28	-2.86962933
D29	-179.94776987
D30	-54.65851352
D31	54.92403794
D32	179.68126234
D33	-178.63782928
D34	55.76576087
D35	-179.74296278
D36	-53.90381060
D37	179.53044747
D38	-179.88084380
D39	11.77024407
D40	-179.28096554
D41	-97.23811280
D42	153.13363968
D43	42.15357698
D44	-179.62484793
D45	-179.77001389
D46	179.45936300
D47	-179.71123325

D48	0.45648241
D49	0.32136250
D50	179.91004384
D51	-179.97393568
D52	-179.24148134

TS structure for the cleavage of the triplet state of 4 (QST2 approach - B3LYP/6-31G* level)

C				
C	1	B1		
C	2	B2	1	A1
N	2	B3	1	A2 3 D1
C	4	B4	2	A3 1 D2
C	5	B5	4	A4 2 D3
C	4	B6	2	A5 1 D4
N	6	B7	5	A6 4 D5
C	8	B8	6	A7 5 D6
C	9	B9	8	A8 6 D7
C	9	B10	8	A9 6 D8
B	7	B11	4	A10 2 D9
S	12	B12	7	A11 4 D10
C	13	B13	12	A12 7 D11
C	14	B14	13	A13 12 D12
C	15	B15	14	A14 13 D13
C	16	B16	15	A15 14 D14
C	17	B17	16	A16 15 D15
C	18	B18	17	A17 16 D16
H	1	B19	2	A18 4 D17
H	1	B20	2	A19 4 D18
H	1	B21	2	A20 4 D19
H	2	B22	1	A21 4 D20
H	3	B23	2	A22 1 D21
H	3	B24	2	A23 1 D22
H	3	B25	2	A24 1 D23
H	5	B26	4	A25 2 D24
H	6	B27	5	A26 4 D25
H	9	B28	8	A27 6 D26
H	10	B29	9	A28 8 D27
H	10	B30	9	A29 8 D28
H	10	B31	9	A30 8 D29
H	11	B32	9	A31 8 D30
H	11	B33	9	A32 8 D31
H	11	B34	9	A33 8 D32
H	12	B35	7	A34 4 D33
H	15	B36	14	A35 13 D34
H	16	B37	15	A36 14 D35
H	17	B38	16	A37 15 D36
H	18	B39	17	A38 16 D37
H	19	B40	18	A39 17 D38
H	12	B41	7	A40 4 D39

B1	1.53478880
B2	1.53330282
B3	1.47176460
B4	1.38390056
B5	1.35610893
B6	1.38699366
B7	1.38531223
B8	1.47292787
B9	1.53185378

B10	1.53444359
B11	1.55572361
B12	2.19152252
B13	1.70158859
B14	1.45617423
B15	1.36964260
B16	1.42823512
B17	1.42111858
B18	1.37276355
B19	1.09433874
B20	1.09564177
B21	1.09669163
B22	1.09080234
B23	1.09512459
B24	1.09457488
B25	1.09641071
B26	1.07830255
B27	1.07778075
B28	1.09151909
B29	1.09450305
B30	1.09412677
B31	1.09658617
B32	1.09577996
B33	1.09681015
B34	1.09427257
B35	1.20102507
B36	1.08622150
B37	1.08732942
B38	1.08535302
B39	1.08775880
B40	1.08473835
B41	1.20142829
A1	112.70350342
A2	110.70470094
A3	124.49947912
A4	107.64170936
A5	125.27129781
A6	107.58820470
A7	124.96042578
A8	111.25976392
A9	110.50704532
A10	128.14014595
A11	102.27691725
A12	113.04993386
A13	119.67867053
A14	120.87404851
A15	120.66171994
A16	119.50498879
A17	121.06881442
A18	110.60077644
A19	110.10251675
A20	111.26121502
A21	108.74336200
A22	109.63581044
A23	110.96031145
A24	111.96373629
A25	122.42870637
A26	129.88638615
A27	105.51459004
A28	109.11871918

A29	111.03840323
A30	112.29812934
A31	110.18208635
A32	111.14231219
A33	110.48292961
A34	116.11522203
A35	118.26019529
A36	119.88631546
A37	120.21300025
A38	119.28175167
A39	121.04205364
A40	115.59093494
D1	-124.93195084
D2	70.75332287
D3	-176.35605179
D4	-104.65707545
D5	0.78983057
D6	-174.56645482
D7	-44.60184022
D8	81.42721957
D9	1.17272511
D10	88.60640984
D11	91.80624179
D12	-134.18728782
D13	166.14162366
D14	2.47946863
D15	-0.11626438
D16	-1.35474610
D17	56.06381876
D18	175.89459187
D19	-64.49769696
D20	-114.75332409
D21	60.77040523
D22	-179.60250220
D23	-58.35643816
D24	3.76161648
D25	-179.32674597
D26	-161.33684982
D27	-172.75631436
D28	-53.92929136
D29	68.27963077
D30	176.17885489
D31	-63.98421790
D32	56.47958265
D33	-158.00289888
D34	-13.08325070
D35	-179.65138056
D36	178.23681284
D37	177.93762002
D38	178.79757345
D39	-18.69346554

TS structure for the cleavage of the triplet state of 4 (QST2 approach - CAM-B3LYP/6-31G* level)
--

C					
C	1	B1			
C	2	B2	1	A1	
C	3	B3	2	A2	1
C	4	B4	3	A3	2
					D1
					D2

C	1	B5	2	A4	3	D3
H	1	B6	2	A5	3	D4
H	4	B7	3	A6	2	D5
H	5	B8	4	A7	3	D6
H	2	B9	1	A8	6	D7
H	3	B10	2	A9	1	D8
S	6	B11	1	A10	2	D9
B	12	B12	6	A11	1	D10
C	13	B13	12	A12	6	D11
N	14	B14	13	A13	12	D12
C	15	B15	14	A14	13	D13
C	16	B16	15	A15	14	D14
N	14	B17	13	A16	12	D15
H	16	B18	15	A17	14	D16
H	17	B19	16	A18	15	D17
C	15	B20	14	A19	13	D18
C	21	B21	15	A20	14	D19
H	21	B22	15	A21	14	D20
C	21	B23	15	A22	14	D21
C	18	B24	14	A23	13	D22
C	25	B25	18	A24	14	D23
C	25	B26	18	A25	14	D24
H	25	B27	18	A26	14	D25
H	13	B28	12	A27	6	D26
H	22	B29	21	A28	15	D27
H	22	B30	21	A29	15	D28
H	22	B31	21	A30	15	D29
H	24	B32	21	A31	15	D30
H	24	B33	21	A32	15	D31
H	24	B34	21	A33	15	D32
H	26	B35	25	A34	18	D33
H	26	B36	25	A35	18	D34
H	26	B37	25	A36	18	D35
H	27	B38	25	A37	18	D36
H	27	B39	25	A38	18	D37
H	27	B40	25	A39	18	D38
H	13	B41	12	A40	6	D39

B1	1.36385694
B2	1.42182118
B3	1.41278292
B4	1.36871441
B5	1.45312578
B6	1.08517229
B7	1.08652462
B8	1.08413910
B9	1.08610901
B10	1.08447090
B11	1.67589955
B12	2.25657021
B13	1.54300563
B14	1.37793207
B15	1.37968284
B16	1.34922906
B17	1.37709730
B18	1.07780161
B19	1.07714365
B20	1.46480021
B21	1.52767304
B22	1.08959180

B23	1.52641073
B24	1.46582143
B25	1.52487137
B26	1.52715670
B27	1.09031212
B28	1.19841433
B29	1.09305205
B30	1.09417789
B31	1.09550209
B32	1.09504336
B33	1.09362101
B34	1.09323710
B35	1.09526693
B36	1.09304652
B37	1.09298011
B38	1.09557461
B39	1.09304694
B40	1.09429520
B41	1.19859523
A1	120.67422459
A2	119.64457665
A3	121.01251281
A4	120.93318155
A5	120.97830250
A6	119.34170277
A7	121.14687310
A8	119.88129175
A9	120.12762010
A10	120.48420221
A11	112.63080146
A12	99.62328160
A13	128.19368649
A14	110.06103854
A15	107.59368313
A16	126.74811785
A17	122.40750569
A18	129.97298664
A19	125.27051221
A20	110.57491190
A21	105.02974471
A22	110.85959864
A23	124.57275042
A24	111.18042048
A25	110.37345476
A26	105.67157738
A27	99.01559490
A28	110.60567959
A29	110.19434905
A30	111.07127197
A31	111.84363388
A32	109.69198376
A33	110.99175056
A34	112.20935619
A35	109.11805521
A36	111.00166231
A37	110.96880744
A38	110.46116831
A39	110.26661743
A40	103.45775820
D1	0.16986784

D2	1.32658015
D3	-2.42405726
D4	178.27795737
D5	-178.26752333
D6	-179.21877946
D7	179.57091606
D8	-178.37189736
D9	-167.25256628
D10	130.53398740
D11	-86.73104131
D12	-88.93217403
D13	174.19001464
D14	0.46087901
D15	83.98277512
D16	-179.65328176
D17	179.36849005
D18	-1.37584819
D19	103.61845170
D20	-13.68151092
D21	-130.81339404
D22	11.58242837
D23	-145.07777702
D24	89.11250910
D25	-28.34633524
D26	153.93612838
D27	-56.00218479
D28	-175.97650577
D29	64.44359559
D30	-66.47408498
D31	174.45719294
D32	54.73655308
D33	-68.75421125
D34	172.27899079
D35	53.58076269
D36	63.84254116
D37	-56.54533048
D38	-176.33224279
D39	34.09016279

- [1] Pan, X.; Vallet, A.-L.; Schweizer, S.; Dahbi, K. J.-L.; Delpech, B.; Blanchard, N.; Graff, B.; Geib, S. J.; Curran, D. P.; Lalevée, J.; Lacôte, E. *J. Am. Chem. Soc.* DOI: 10.1021/ja403627k.
- [2] Lalevée, J.; Blanchard, N.; Tehfe, M. A.; Morlet-Savary, F.; Fouassier, J. P. *Macromolecules*, **2011**, *43*, 10191-10195.
- [3] a) Tordo, P. *Spin-trapping: recent developments and applications*. In: Atherton, N.M., Davies, M.J., Gilbert, B.C., eds., *Electron Spin Resonance*, volume 16. Cambridge, The Royal Society of Chemistry; 1998; b) *Landolt Bornstein: Magnetic Properties of Free Radicals*; Fischer, H. Ed.; Springer Verlag: Berlin, 2005; Vol. 26d; c) Chandra, H.; Davidson, I.M.T.; Symons, M.C.R. *J. Chem. Soc. Faraday Trans. 1* **1983**, *79*, 2705-2711; d) Alberti, A.; Leardini, R.; Pedulli, G.F.; Tundo, A.; Zanardi, G. *Chim. Ital.* **1983**, *113*, 869-871; e) Lalevée, J.; Gigmes, D.; Bertin, D.; Graff, B.; Allonas, X.; Fouassier, J.P. *Chem. Phys. Letters*, **2007**, *438*, 346-350.
- [4] Duling, D. R. *J. Magn. Res., Ser. B* **1994**, *104*, 105-110.
- [5] a) Tehfe, M.A.; Lalevée, J.; Telitel, S.; Contal, E.; Dumur, F.; Gigmes, D.; Bertin, D.; Nechab, M.; Graff, B.; Morlet-Savary, F.; Fouassier, J.P. *Macromolecules*, **2012**, *45*, 4454-4460; b) Lalevée, J.; El-Roz, M.; Allonas, X.; Fouassier, J.P.; *J. Polym. Sci. Part A: Polym. Chem.* **2008**, *46*, 2008-2014; c) Tehfe, M.A.; Lalevée, J.; Gigmes, D.; Fouassier, J.P. *Macromolecules*, **2010**, *43*, 1364-1370; d) Tehfe, M.A.; Lalevée, J.; Gigmes, D.; Fouassier, J.P. *J. Polym. Sci. Part A: Polym. Chem.*, **2010**, *48*, 1830-1837; e) Souane, R.; Tehfe, M.A.; Lalevée, J.; Gigmes, D.; Fouassier, J.P. *Macromol. Chem. Phys.* **2010**, *211*, 1441-1445; f) Lalevée, J.; Tehfe, M.A.; Gigmes, D.; Fouassier, J.P. *Macromolecules*, **2010**, *43*, 6608-6615.
- [6] (a) *Gaussian 03, Revision B-2*, Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; Scuseria, G. E.; Robb, M. A.; Cheeseman, J. R.; Zakrzewski, V. G.; Montgomery, J. A. Jr.; Stratmann, R. E.; Burant, J. C.; Dapprich, S.; Millam, J. M.; Daniels, A. D.; Kudin, K. N.; Strain, M. C.; Farkas, O.; Tomasi, J.; Barone, V.; Cossi, M.; Cammi, R.; Mennucci, B.; Pomelli, C.; Adamo, C.; Clifford, S.; Ochterski, J.; Petersson, G. A.; Ayala, P. Y.; Cui, Q.; Morokuma, K.; Salvador, P.; Dannenberg, J. J.; Malick, D. K.; Rabuck, A. D.; Raghavachari, K.; Foresman, J. B.; Cioslowski, J.; Ortiz, J. V.; Baboul, A. G.; Stefanov, B. B.; Liu, G.; Liashenko, A.; Piskorz, P.; Komaromi, I.; Gomperts, R.; Martin, R. L.; Fox, D. J.; Keith, T.; Al-Laham, M. A.; Peng, C. Y.; Nanayakkara, A.; Challacombe, M.; Gill, P. M. W.; Johnson, B.; Chen, W.; Wong, M. W.; Andres, J. L.; Gonzalez, C.; Head-Gordon, M.; Replogle, E. S.; Pople, J. A. Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 2003. (b) Foresman, J. B.; Frisch, A. in *"Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods"* Second Edition, Gaussian. Inc. 1996.