

BENZENE

C₆H₆ 4-fold para
-10.866023 Hartree

Cu	0.013468649	0.012681009	5.393380165
Cu	10.285912514	2.582830191	5.367815971
Cu	10.285991669	5.166250706	5.372661591
Cu	0.009294156	7.742622375	5.394131660
Cu	2.582672596	10.286740303	5.368651390
Cu	2.549237251	2.549867392	5.487448215
Cu	2.552190781	5.185666084	5.501650333
Cu	2.582396984	7.753413200	5.362051964
Cu	5.166250706	10.285873413	5.375167847
Cu	5.186335564	2.553490400	5.502234936
Cu	5.195117950	5.194015026	5.480681419
Cu	5.164400101	7.759281158	5.371408463
Cu	7.742740631	0.009176009	5.394215584
Cu	7.753334522	2.581727505	5.361550331
Cu	7.760147572	5.164045334	5.371241570
Cu	7.741834641	7.742307186	5.393129349
Cu	9.035140038	9.034785271	3.646268606
Cu	9.031792641	1.279403567	3.622208595
Cu	9.029941559	3.874875307	3.615024090
Cu	9.035454750	6.466763020	3.625299692
Cu	1.279954910	9.031280518	3.622292280
Cu	1.305119991	1.304844379	3.648691416
Cu	1.316068172	3.872787952	3.665984631
Cu	1.302481413	6.433642864	3.649944544
Cu	3.875544786	9.030650139	3.616360664
Cu	3.873103142	1.315950036	3.667070627
Cu	3.871448994	3.871488333	3.690462351
Cu	3.871724606	6.421434402	3.661640406
Cu	6.466369629	9.036046028	3.625466824
Cu	6.433761120	1.302560210	3.650195122
Cu	6.420883179	3.871330976	3.660972118
Cu	6.444551945	6.444433689	3.643762350
Cu	0.000000000	0.000000000	1.824972272
Cu	0.000000000	2.580939770	1.824972272
Cu	0.000000000	5.161800861	1.824972272
Cu	0.000000000	7.742740631	1.824972272
Cu	2.580939770	0.000000000	1.824972272
Cu	2.580939770	2.580939770	1.824972272
Cu	2.580939770	5.161800861	1.824972272
Cu	2.580939770	7.742740631	1.824972272
Cu	5.161800861	0.000000000	1.824972272
Cu	5.161800861	2.580939770	1.824972272
Cu	5.161800861	5.161800861	1.824972272
Cu	5.161800861	7.742740631	1.824972272
Cu	7.742740631	0.000000000	1.824972272
Cu	7.742740631	2.580939770	1.824972272
Cu	7.742740631	5.161800861	1.824972272

S2

Cu	7.742740631	7.742740631	1.824972272
Cu	9.033210754	9.033210754	0.000000000
Cu	9.033210754	1.290469885	0.000000000
Cu	9.033210754	3.871409655	0.000000000
Cu	9.033210754	6.452270508	0.000000000
Cu	1.290469885	9.033210754	0.000000000
Cu	1.290469885	1.290469885	0.000000000
Cu	1.290469885	3.871409655	0.000000000
Cu	1.290469885	6.452270508	0.000000000
Cu	3.871409655	9.033210754	0.000000000
Cu	3.871409655	1.290469885	0.000000000
Cu	3.871409655	3.871409655	0.000000000
Cu	3.871409655	6.452270508	0.000000000
Cu	6.452270508	9.033210754	0.000000000
Cu	6.452270508	1.290469885	0.000000000
Cu	6.452270508	3.871409655	0.000000000
Cu	6.452270508	6.452270508	0.000000000
C	2.877722740	2.898713350	7.713672161
C	4.246208191	2.523323774	7.726704597
C	2.525489807	4.273657799	7.725368023
C	4.901682377	4.888686657	7.713003635
C	5.253600121	3.514057159	7.724866867
C	3.533590794	5.263721466	7.727706909
H	2.112726927	2.146674395	7.916845798
H	4.511918545	1.478164554	7.884264469
H	6.294860840	3.230861187	7.878499985
H	1.484741330	4.557011127	7.883846760
H	5.667426586	5.640567780	7.911749840
H	3.267998457	6.309904575	7.879419327

TS₁₋₂
-10.797991

Cu	10.318205833	0.005907302	5.393881321
Cu	10.310053825	2.588422298	5.393547058
Cu	10.318599701	5.160501003	5.397724152
Cu	0.000827022	7.735888004	5.400481224
Cu	2.581018448	10.316709518	5.393547058
Cu	2.523284435	2.561996937	5.383522034
Cu	2.561839581	5.155578613	5.400230408
Cu	2.583893538	7.740220070	5.391792774
Cu	5.155499458	10.304461479	5.391625404
Cu	5.105641842	2.530727625	5.507665157
Cu	5.178301811	5.179168224	5.563137054
Cu	5.156799316	7.780941010	5.388451099
Cu	7.734903336	0.000590730	5.391458511
Cu	7.768535614	2.573535919	5.362553120
Cu	7.734745979	5.195039272	5.478843212
Cu	7.737226963	7.752665043	5.400397301
Cu	9.031084061	9.026751518	3.646602869
Cu	9.027894020	1.288264513	3.628307104

Cu	9.013401031	3.892715216	3.650529385
Cu	9.020056725	6.453412533	3.648774862
Cu	1.287004232	9.029863358	3.643762350
Cu	1.283184171	1.283184171	3.632066488
Cu	1.287752509	3.871882200	3.635324717
Cu	1.294132471	6.452782631	3.642509222
Cu	3.864163399	9.027461052	3.629142523
Cu	3.872787952	1.306104541	3.657379866
Cu	3.893384933	3.872157812	3.680938482
Cu	3.896062851	6.420371056	3.676176786
Cu	6.457823753	9.031123161	3.629894495
Cu	6.428562641	1.310594082	3.661890984
Cu	6.436281681	3.869676828	3.654121637
Cu	6.438408375	6.434351921	3.656962156
Cu	0.000000000	0.000000000	1.824972272
Cu	0.000000000	2.580939770	1.824972272
Cu	0.000000000	5.161800861	1.824972272
Cu	0.000000000	7.742740631	1.824972272
Cu	2.580939770	0.000000000	1.824972272
Cu	2.580939770	2.580939770	1.824972272
Cu	2.580939770	5.161800861	1.824972272
Cu	2.580939770	7.742740631	1.824972272
Cu	5.161800861	0.000000000	1.824972272
Cu	5.161800861	2.580939770	1.824972272
Cu	5.161800861	5.161800861	1.824972272
Cu	5.161800861	7.742740631	1.824972272
Cu	7.742740631	0.000000000	1.824972272
Cu	7.742740631	2.580939770	1.824972272
Cu	7.742740631	5.161800861	1.824972272
Cu	7.742740631	7.742740631	1.824972272
Cu	9.033210754	9.033210754	0.000000000
Cu	9.033210754	1.290469885	0.000000000
Cu	9.033210754	3.871409655	0.000000000
Cu	9.033210754	6.452270508	0.000000000
Cu	1.290469885	9.033210754	0.000000000
Cu	1.290469885	1.290469885	0.000000000
Cu	1.290469885	3.871409655	0.000000000
Cu	1.290469885	6.452270508	0.000000000
Cu	3.871409655	9.033210754	0.000000000
Cu	3.871409655	1.290469885	0.000000000
Cu	3.871409655	3.871409655	0.000000000
Cu	3.871409655	6.452270508	0.000000000
Cu	6.452270508	9.033210754	0.000000000
Cu	6.452270508	1.290469885	0.000000000
Cu	6.452270508	3.871409655	0.000000000
Cu	6.452270508	6.452270508	0.000000000
C	3.926150560	2.867798328	9.566296577
C	5.028335094	2.394229650	8.860701561
C	3.377283573	4.112269878	9.233883858
C	4.967883587	4.365063190	7.403731823

S4

C	5.559125900	3.152490854	7.805233955
C	3.892597198	4.860449791	8.172484398
H	3.508425713	2.286047220	10.387930870
H	5.496587276	1.446304560	9.129205704
H	6.514533520	2.834166050	7.357950687
H	2.527537823	4.499710560	9.798542976
H	6.342473507	5.215045452	6.656950951
H	3.441476107	5.827159882	7.935392380

C₆H₅ (+H) pseudo-bridge
-10.838928

Cu	0.003308089	0.003544381	5.396972179
Cu	0.001457135	2.589288712	5.385944843
Cu	10.292214394	5.161288738	5.399478436
Cu	10.320805550	7.741913319	5.394465923
Cu	2.584996223	0.000511966	5.379846096
Cu	2.575347424	2.550851822	5.357540607
Cu	2.597086430	5.179246902	5.557205677
Cu	2.571251869	7.779917240	5.372410774
Cu	5.172236919	10.314307213	5.388617992
Cu	5.219850063	2.550221682	5.403572083
Cu	5.106114388	5.110682964	5.621699810
Cu	5.185863018	7.766763687	5.371325016
Cu	7.742465019	10.319820404	5.391291618
Cu	7.748175144	2.588737488	5.416604519
Cu	7.709974766	5.132028103	5.427047253
Cu	7.747308731	7.732697964	5.393463612
Cu	9.036715508	9.032659531	3.639000654
Cu	9.022695541	1.301418066	3.656293631
Cu	9.037542343	3.870976448	3.623795986
Cu	9.014897346	6.439156532	3.655875921
Cu	1.284247518	9.030611038	3.635157585
Cu	1.284798861	1.294998765	3.623795986
Cu	1.312878251	3.904490471	3.671498299
Cu	1.311066628	6.430255890	3.672500849
Cu	3.875229597	9.026397705	3.625884533
Cu	3.891061306	1.302796483	3.648357153
Cu	3.869322300	3.879089117	3.642258644
Cu	3.880703926	6.425215244	3.668824911
Cu	6.465700150	9.023285866	3.630061626
Cu	6.463336945	1.279403567	3.620537758
Cu	6.423128128	3.890746117	3.605750799
Cu	6.424506187	6.425727367	3.674255133
Cu	0.000000000	0.000000000	1.824972272
Cu	0.000000000	2.580939770	1.824972272
Cu	0.000000000	5.161682606	1.824972272
Cu	0.000000000	7.742622375	1.824972272
Cu	2.580939770	0.000000000	1.824972272
Cu	2.580939770	2.580939770	1.824972272
Cu	2.580939770	5.161682606	1.824972272

S5

Cu	2.580939770	7.742622375	1.824972272
Cu	5.161682606	0.000000000	1.824972272
Cu	5.161682606	2.580939770	1.824972272
Cu	5.161682606	5.161682606	1.824972272
Cu	5.161682606	7.742622375	1.824972272
Cu	7.742622375	0.000000000	1.824972272
Cu	7.742622375	2.580939770	1.824972272
Cu	7.742622375	5.161682606	1.824972272
Cu	7.742622375	7.742622375	1.824972272
Cu	9.033092499	9.033092499	0.000000000
Cu	9.033092499	1.290469885	0.000000000
Cu	9.033092499	3.871409655	0.000000000
Cu	9.033092499	6.452152729	0.000000000
Cu	1.290469885	9.033092499	0.000000000
Cu	1.290469885	1.290469885	0.000000000
Cu	1.290469885	3.871409655	0.000000000
Cu	1.290469885	6.452152729	0.000000000
Cu	3.871409655	9.033092499	0.000000000
Cu	3.871409655	1.290469885	0.000000000
Cu	3.871409655	3.871409655	0.000000000
Cu	3.871409655	6.452152729	0.000000000
Cu	6.452152729	9.033092499	0.000000000
Cu	6.452152729	1.290469885	0.000000000
Cu	6.452152729	3.871409655	0.000000000
Cu	6.452152729	6.452152729	0.000000000
C	3.584629774	3.882042885	9.385679245
C	3.626807928	3.912563801	7.992200851
C	3.732863665	5.064566612	10.112827301
C	3.927371502	6.293443203	8.037981987
C	3.791385412	5.115684509	7.258702755
C	3.911461115	6.270601273	9.433381081
H	3.446241379	2.932030439	9.904140472
H	3.534378290	2.956998587	7.457616329
H	6.515833378	3.824820757	5.980177879
H	3.712936401	5.046057224	11.203132629
H	4.055244923	7.262161732	7.538066864
H	4.035041809	7.200371265	9.990522385

TS₂₋₃**-10.780906**

Cu	0.000787640	0.001535899	5.381767750
Cu	10.271775246	2.568258762	5.369403362
Cu	0.034695555	5.180704117	5.458041191
Cu	0.008860953	7.747151375	5.394549370
Cu	2.581806183	10.289969444	5.383187771
Cu	2.541754723	2.520173311	5.463387966
Cu	2.580506563	5.204727173	5.452360630
Cu	2.589210033	7.759635448	5.380598068
Cu	5.155302525	10.320017815	5.390205383
Cu	5.167274952	2.617880106	5.503237724

S6

Cu	5.181058407	5.174560547	5.587948799
Cu	5.185193539	7.735021591	5.419862747
Cu	7.733210087	0.008900335	5.392293930
Cu	7.745497227	2.594920397	5.389453411
Cu	7.759989738	5.192715645	5.428801537
Cu	7.732107639	7.733367443	5.427966118
Cu	9.016591072	9.016630173	3.666820049
Cu	9.018560410	1.288815856	3.615859509
Cu	9.029665947	3.910161495	3.667906046
Cu	9.050538063	6.455697060	3.638666391
Cu	1.285113931	9.031319618	3.619451761
Cu	1.301654339	1.299842834	3.654873610
Cu	1.298700690	3.859240532	3.619368315
Cu	1.310003400	6.445260525	3.637580395
Cu	3.891100645	9.014661789	3.641757488
Cu	3.868889093	1.314729214	3.663896084
Cu	3.875426531	3.880743265	3.633570433
Cu	3.874402761	6.421670914	3.662141562
Cu	6.457468987	9.039078712	3.627973080
Cu	6.418953419	1.322290540	3.675007105
Cu	6.442110062	3.877159357	3.646101713
Cu	6.435690880	6.430925846	3.607672453
Cu	0.000000000	0.000000000	1.824972272
Cu	0.000000000	2.580939770	1.824972272
Cu	0.000000000	5.161800861	1.824972272
Cu	0.000000000	7.742740631	1.824972272
Cu	2.580939770	0.000000000	1.824972272
Cu	2.580939770	2.580939770	1.824972272
Cu	2.580939770	5.161800861	1.824972272
Cu	2.580939770	7.742740631	1.824972272
Cu	5.161800861	0.000000000	1.824972272
Cu	5.161800861	2.580939770	1.824972272
Cu	5.161800861	5.161800861	1.824972272
Cu	5.161800861	7.742740631	1.824972272
Cu	7.742740631	0.000000000	1.824972272
Cu	7.742740631	2.580939770	1.824972272
Cu	7.742740631	5.161800861	1.824972272
Cu	7.742740631	7.742740631	1.824972272
Cu	9.033210754	9.033210754	0.000000000
Cu	9.033210754	1.290469885	0.000000000
Cu	9.033210754	3.871409655	0.000000000
Cu	9.033210754	6.452270508	0.000000000
Cu	1.290469885	9.033210754	0.000000000
Cu	1.290469885	1.290469885	0.000000000
Cu	1.290469885	3.871409655	0.000000000
Cu	1.290469885	6.452270508	0.000000000
Cu	3.871409655	9.033210754	0.000000000
Cu	3.871409655	1.290469885	0.000000000
Cu	3.871409655	3.871409655	0.000000000
Cu	3.871409655	6.452270508	0.000000000

Cu	6.452270508	9.033210754	0.000000000
Cu	6.452270508	1.290469885	0.000000000
Cu	6.452270508	3.871409655	0.000000000
Cu	6.452270508	6.452270508	0.000000000
C	2.990000725	2.678843498	9.141987801
C	4.381839752	2.789900780	9.142405510
C	2.244735479	3.253860235	8.109910965
C	4.333085060	3.988019705	6.996632099
C	5.046135902	3.439861536	8.094790459
C	2.910685301	3.884681463	7.037985325
H	2.478389025	2.159512758	9.953012466
H	4.960558891	2.363590479	9.963204384
H	6.135048389	3.519413233	8.119017601
H	1.152947903	3.217943907	8.132384300
H	1.622342110	4.848832130	6.620275974
H	6.488777637	6.462155342	6.009501457

C₆H₄ (+2H) 4-fold perp
-10.828873

Cu	0.020833086	0.013783705	5.387364864
Cu	10.278233528	2.587949753	5.378760338
Cu	10.297609329	5.210319519	5.421450138
Cu	0.025046961	7.742071152	5.419695854
Cu	2.582554340	10.309857368	5.386195183
Cu	2.520527840	2.601694107	5.502736092
Cu	2.532814980	5.152230740	5.555869102
Cu	2.575701952	7.726593971	5.415184498
Cu	5.167550564	10.290678024	5.392210484
Cu	5.204018116	2.592006207	5.506328583
Cu	5.215557098	5.133918285	5.562468529
Cu	5.190667629	7.711353302	5.421199322
Cu	7.740220070	0.004213876	5.388116837
Cu	7.756878853	2.586925745	5.373998165
Cu	7.753767490	5.206578255	5.418526173
Cu	7.738368988	7.737502575	5.418275356
Cu	9.039550781	9.015173912	3.679601908
Cu	9.030768394	1.286334753	3.619786024
Cu	9.028759956	3.912327528	3.664647818
Cu	9.035415649	6.466369629	3.615942955
Cu	1.291139364	9.040889740	3.619869471
Cu	1.317604065	1.315477490	3.662308693
Cu	1.294762492	3.873772621	3.636661291
Cu	1.314492941	6.432382584	3.601155996
Cu	3.876962423	8.993041039	3.667906046
Cu	3.871803522	1.318903685	3.675925970
Cu	3.868968010	3.887162447	3.639919519
Cu	3.874245167	6.406193733	3.677012205
Cu	6.459910870	9.036558151	3.621958017
Cu	6.420961857	1.305001855	3.670495749
Cu	6.438526154	3.868928671	3.629727364

S8

Cu	6.425727367	6.427893162	3.596728325
Cu	0.000000000	0.000000000	1.824972272
Cu	0.000000000	2.580939770	1.824972272
Cu	0.000000000	5.161800861	1.824972272
Cu	0.000000000	7.742740631	1.824972272
Cu	2.580939770	0.000000000	1.824972272
Cu	2.580939770	2.580939770	1.824972272
Cu	2.580939770	5.161800861	1.824972272
Cu	2.580939770	7.742740631	1.824972272
Cu	5.161800861	0.000000000	1.824972272
Cu	5.161800861	2.580939770	1.824972272
Cu	5.161800861	5.161800861	1.824972272
Cu	5.161800861	7.742740631	1.824972272
Cu	7.742740631	0.000000000	1.824972272
Cu	7.742740631	2.580939770	1.824972272
Cu	7.742740631	5.161800861	1.824972272
Cu	7.742740631	7.742740631	1.824972272
Cu	9.033210754	9.033210754	0.000000000
Cu	9.033210754	1.290469885	0.000000000
Cu	9.033210754	3.871409655	0.000000000
Cu	9.033210754	6.452270508	0.000000000
Cu	1.290469885	9.033210754	0.000000000
Cu	1.290469885	1.290469885	0.000000000
Cu	1.290469885	3.871409655	0.000000000
Cu	1.290469885	6.452270508	0.000000000
Cu	3.871409655	9.033210754	0.000000000
Cu	3.871409655	1.290469885	0.000000000
Cu	3.871409655	3.871409655	0.000000000
Cu	3.871409655	6.452270508	0.000000000
Cu	6.452270508	9.033210754	0.000000000
Cu	6.452270508	1.290469885	0.000000000
Cu	6.452270508	3.871409655	0.000000000
Cu	6.452270508	6.452270508	0.000000000
C	3.142802954	3.577462196	9.433548927
C	4.542675972	3.559700966	9.437224388
C	2.442118168	3.728295326	8.236643791
C	4.565990448	3.826514244	7.017768383
C	5.254860401	3.695962667	8.245583534
C	3.143236160	3.842897177	7.013591290
H	2.596495628	3.471406460	10.372224808
H	5.080988884	3.437616825	10.378407478
H	6.346333027	3.688795328	8.262124062
H	1.350763798	3.750782490	8.245917320
H	1.255971193	6.502246380	5.993711948
H	6.489171505	6.487596512	6.001147270

PYRIDINE

C₅H₅N top
-10.706267

Cu	10.323246956	10.322734833	5.408501148
Cu	10.322222710	2.582830191	5.399979591
Cu	0.000945168	5.161879539	5.400815010
Cu	0.000984550	7.740456581	5.400063515
Cu	2.582121134	10.322538376	5.400481224
Cu	2.581018448	2.580939770	5.396220207
Cu	2.545968533	5.160697937	5.380180359
Cu	2.578498125	7.745812416	5.382268906
Cu	5.161328316	0.003623145	5.401065826
Cu	5.159280300	2.547386408	5.379178047
Cu	5.167629242	5.169007778	5.611257076
Cu	5.165108681	7.784957886	5.381015778
Cu	7.740574360	0.001654045	5.399311543
Cu	7.744709492	2.579443216	5.378258705
Cu	7.784406662	5.167314053	5.378258705
Cu	7.743055820	7.742937565	5.396053314
Cu	9.034352303	9.034746170	3.646018028
Cu	9.036715508	1.286846757	3.639919519
Cu	9.033958435	3.868968010	3.631314754
Cu	9.033486366	6.459320068	3.633069038
Cu	1.286846757	9.036715508	3.640420675
Cu	1.289052129	1.289091468	3.645850897
Cu	1.292320848	3.865266085	3.635324717
Cu	1.292005777	6.454200268	3.632317305
Cu	3.869164944	9.033998489	3.632233620
Cu	3.864635944	1.293541670	3.634823561
Cu	3.891809464	3.894526958	3.675257683
Cu	3.896062851	6.431634426	3.676176786
Cu	6.458453655	9.033368111	3.633904457
Cu	6.453688622	1.291769505	3.632066488
Cu	6.430925846	3.896732330	3.675424814
Cu	6.432225227	6.434194088	3.674589396
Cu	0.000000000	0.000000000	1.824972272
Cu	0.000000000	2.580939770	1.824972272
Cu	0.000000000	5.161800861	1.824972272
Cu	0.000000000	7.742740631	1.824972272
Cu	2.580939770	0.000000000	1.824972272
Cu	2.580939770	2.580939770	1.824972272
Cu	2.580939770	5.161800861	1.824972272
Cu	2.580939770	7.742740631	1.824972272
Cu	5.161800861	0.000000000	1.824972272
Cu	5.161800861	2.580939770	1.824972272
Cu	5.161800861	5.161800861	1.824972272
Cu	5.161800861	7.742740631	1.824972272
Cu	7.742740631	0.000000000	1.824972272
Cu	7.742740631	2.580939770	1.824972272
Cu	7.742740631	5.161800861	1.824972272

S10

Cu	7.742740631	7.742740631	1.824972272
Cu	9.033210754	9.033210754	0.000000000
Cu	9.033210754	1.290469885	0.000000000
Cu	9.033210754	3.871409655	0.000000000
Cu	9.033210754	6.452270508	0.000000000
Cu	1.290469885	9.033210754	0.000000000
Cu	1.290469885	1.290469885	0.000000000
Cu	1.290469885	3.871409655	0.000000000
Cu	1.290469885	6.452270508	0.000000000
Cu	3.871409655	9.033210754	0.000000000
Cu	3.871409655	1.290469885	0.000000000
Cu	3.871409655	3.871409655	0.000000000
Cu	3.871409655	6.452270508	0.000000000
Cu	6.452270508	9.033210754	0.000000000
Cu	6.452270508	1.290469885	0.000000000
Cu	6.452270508	3.871409655	0.000000000
Cu	6.452270508	6.452270508	0.000000000
C	5.145614624	5.111549377	10.462283134
C	6.002528191	4.278855801	9.743906975
C	4.303666592	5.969762325	9.756605148
C	5.985515118	4.331864357	8.355273247
C	4.345175266	5.963067055	8.366969109
H	5.134233475	5.090795040	11.552003860
H	6.680607796	3.589276791	10.245241165
H	6.638586998	3.696632385	7.749929428
H	3.614402533	6.639453411	10.269468307
H	3.701712608	6.616454124	7.772485733
N	5.170307159	5.157704830	7.666805267

C₅H₅N top-tilted

-10.705002

Cu	0.000157528	0.000433202	5.395886421
Cu	10.271775246	2.582278728	5.374332428
Cu	10.312929153	5.175899506	5.392377377
Cu	0.009176009	7.746363640	5.400731564
Cu	2.581058025	10.279021263	5.397640705
Cu	2.585901976	2.575032473	5.621950626
Cu	2.579837084	5.220243454	5.361550331
Cu	2.581333637	7.743607044	5.396053314
Cu	5.162982464	0.000551348	5.404574394
Cu	5.207286835	2.581806183	5.396387577
Cu	5.163178921	5.165975094	5.380096912
Cu	5.156248093	7.742661953	5.400063515
Cu	7.744394779	0.008073313	5.400898933
Cu	7.742110252	2.581254721	5.396805286
Cu	7.740101814	5.157508373	5.400481224
Cu	7.743843079	7.744118690	5.403989792
Cu	9.030847549	9.031477928	3.645850897
Cu	9.034785271	1.285586476	3.629977942
Cu	9.032974243	3.880664349	3.632985592

S11

Cu	9.026397705	6.461446762	3.643261194
Cu	1.288146377	9.037384987	3.633403301
Cu	1.316501379	1.314335346	3.675090551
Cu	1.307443500	3.853845358	3.668658018
Cu	1.279994249	6.455224514	3.628307104
Cu	3.877198696	9.039511681	3.636828423
Cu	3.848646879	1.313547730	3.684113264
Cu	3.848095417	3.846086979	3.670830011
Cu	3.877828836	6.456130028	3.625299692
Cu	6.455893993	9.032580376	3.647939444
Cu	6.448332310	1.286098480	3.634823561
Cu	6.450655937	3.872945547	3.633319616
Cu	6.458335400	6.458453655	3.641005516
Cu	0.000000000	0.000000000	1.824972272
Cu	0.000000000	2.580939770	1.824972272
Cu	0.000000000	5.161761284	1.824972272
Cu	0.000000000	7.742740631	1.824972272
Cu	2.580939770	0.000000000	1.824972272
Cu	2.580939770	2.580939770	1.824972272
Cu	2.580939770	5.161761284	1.824972272
Cu	2.580939770	7.742740631	1.824972272
Cu	5.161761284	0.000000000	1.824972272
Cu	5.161761284	2.580939770	1.824972272
Cu	5.161761284	5.161761284	1.824972272
Cu	5.161800861	7.742740631	1.824972272
Cu	7.742740631	0.000000000	1.824972272
Cu	7.742740631	2.580939770	1.824972272
Cu	7.742740631	5.161800861	1.824972272
Cu	7.742740631	7.742740631	1.824972272
Cu	9.033210754	9.033210754	0.000000000
Cu	9.033210754	1.290469885	0.000000000
Cu	9.033210754	3.871409655	0.000000000
Cu	9.033210754	6.452270508	0.000000000
Cu	1.290469885	9.033210754	0.000000000
Cu	1.290469885	1.290469885	0.000000000
Cu	1.290469885	3.871409655	0.000000000
Cu	1.290469885	6.452231407	0.000000000
Cu	3.871409655	9.033210754	0.000000000
Cu	3.871409655	1.290469885	0.000000000
Cu	3.871409655	3.871409655	0.000000000
Cu	3.871409655	6.452231407	0.000000000
Cu	6.452270508	9.033210754	0.000000000
Cu	6.452231407	1.290469885	0.000000000
Cu	6.452231407	3.871409655	0.000000000
Cu	6.452231407	6.452231407	0.000000000
C	1.648570538	3.666780710	10.255350113
C	1.054807901	2.554672003	9.661200523
C	2.630994320	4.353878498	9.545327187
C	1.441696882	2.187474012	8.375658035
C	2.966371536	3.921030998	8.266551971

S12

H	1.354583859	3.988728762	11.254009247
H	0.290914953	1.975126266	10.177489281
H	0.992466152	1.329300523	7.869812012
H	3.133863211	5.224024296	9.965375900
H	3.731327772	4.434257507	7.676078320
N	2.372411966	2.865120411	7.670480728

TS₂₋₃

-10.652927

Cu	0.006576797	10.318481445	5.385443687
Cu	10.272208214	2.566959143	5.373162746
Cu	10.306667328	5.173694134	5.399812698
Cu	0.008939718	7.745812416	5.395384789
Cu	2.580191612	10.272759438	5.387532234
Cu	2.579403877	2.450033903	5.548684120
Cu	2.549237251	5.267029285	5.567648411
Cu	2.575347424	7.798544884	5.387448311
Cu	5.151994705	10.322026253	5.392795086
Cu	5.200828552	2.571842432	5.398643017
Cu	5.140101433	5.164833069	5.463555336
Cu	5.153058052	7.749553680	5.397055626
Cu	7.741874218	0.005237808	5.400648117
Cu	7.740810871	2.586768389	5.397055626
Cu	7.736006260	5.158216953	5.401566982
Cu	7.744788647	7.738093376	5.402152061
Cu	9.027500153	9.028878212	3.644932032
Cu	9.027696609	1.284286857	3.631231070
Cu	9.033131599	3.876844406	3.638499260
Cu	9.028524399	6.456996441	3.641089201
Cu	1.282514691	9.031202316	3.617446661
Cu	1.307167888	1.308664322	3.656878471
Cu	1.320833445	3.868219614	3.687956095
Cu	1.311814904	6.430255890	3.666068077
Cu	3.880270720	9.029902458	3.621456861
Cu	3.852782011	1.313114524	3.666318655
Cu	3.841439962	3.861130953	3.680353880
Cu	3.854554176	6.432855129	3.655124187
Cu	6.456287861	9.028759956	3.647772551
Cu	6.449238300	1.289721608	3.638165236
Cu	6.433997631	3.882948637	3.648858547
Cu	6.440731525	6.447584152	3.654873610
Cu	0.000000000	0.000000000	1.824972272
Cu	0.000000000	2.580939770	1.824972272
Cu	0.000000000	5.161761284	1.824972272
Cu	0.000000000	7.742740631	1.824972272
Cu	2.580939770	0.000000000	1.824972272
Cu	2.580939770	2.580939770	1.824972272
Cu	2.580939770	5.161761284	1.824972272
Cu	2.580939770	7.742740631	1.824972272
Cu	5.161761284	0.000000000	1.824972272

S13

Cu	5.161761284	2.580939770	1.824972272
Cu	5.161761284	5.161761284	1.824972272
Cu	5.161800861	7.742740631	1.824972272
Cu	7.742740631	0.000000000	1.824972272
Cu	7.742740631	2.580939770	1.824972272
Cu	7.742740631	5.161800861	1.824972272
Cu	7.742740631	7.742740631	1.824972272
Cu	9.033210754	9.033210754	0.000000000
Cu	9.033210754	1.290469885	0.000000000
Cu	9.033210754	3.871409655	0.000000000
Cu	9.033210754	6.452270508	0.000000000
Cu	1.290469885	9.033210754	0.000000000
Cu	1.290469885	1.290469885	0.000000000
Cu	1.290469885	3.871409655	0.000000000
Cu	1.290469885	6.452231407	0.000000000
Cu	3.871409655	9.033210754	0.000000000
Cu	3.871409655	1.290469885	0.000000000
Cu	3.871409655	3.871409655	0.000000000
Cu	3.871409655	6.452231407	0.000000000
Cu	6.452270508	9.033210754	0.000000000
Cu	6.452231407	1.290469885	0.000000000
Cu	6.452231407	3.871409655	0.000000000
Cu	6.452231407	6.452231407	0.000000000
C	1.651957393	4.507429123	9.719679832
C	1.629352093	3.108973742	9.686596870
C	2.049321890	5.212406635	8.587018967
C	1.997652769	2.467480183	8.511413574
C	2.382336378	4.508886337	7.418351650
H	1.358325124	5.040937424	10.624772072
H	1.331190944	2.523205757	10.554596901
H	1.995289803	1.380260825	8.419266701
H	2.077361822	6.301792145	8.584512711
H	3.760667324	4.993600368	6.612757206
N	2.366701603	3.153199911	7.410415173

C₅H₄N (+H) 4-fold perp
-10.688788

Cu	10.312062263	10.278548241	5.370155334
Cu	10.296664238	2.531869888	5.458793163
Cu	0.041351117	5.195472240	5.474833488
Cu	10.322105408	7.760501862	5.377256393
Cu	2.580506563	10.274688721	5.373998165
Cu	2.600512743	2.523599625	5.512845039
Cu	2.562193871	5.183775902	5.547598362
Cu	2.583460331	7.753216267	5.381433487
Cu	5.144630432	0.014689492	5.395384789
Cu	5.153058052	2.600709438	5.422285557
Cu	5.150497913	5.153333664	5.430806637
Cu	5.153018475	7.742189407	5.395969868
Cu	7.737699509	0.006616178	5.391876221

S14

Cu	7.726357460	2.585980654	5.378008366
Cu	7.743055820	5.158138275	5.388451099
Cu	7.742937565	7.742740631	5.396220207
Cu	9.017536163	9.027618408	3.627805948
Cu	9.045655251	1.306734681	3.652701378
Cu	9.068221092	3.876332521	3.674004555
Cu	9.052704811	6.430255890	3.662225246
Cu	1.287791967	9.026161194	3.617613792
Cu	1.301181793	1.305828929	3.652116537
Cu	1.291690707	3.865856886	3.613436699
Cu	1.304883718	6.440062046	3.631732464
Cu	3.881609678	9.027263641	3.620287180
Cu	3.849119425	1.309452057	3.656043053
Cu	3.830491781	3.876174927	3.628474236
Cu	3.851718664	6.430649757	3.665734053
Cu	6.451010227	9.034549713	3.645850897
Cu	6.433091640	1.301811934	3.650445700
Cu	6.457784176	3.876489878	3.620454311
Cu	6.436281681	6.444551945	3.658131599
Cu	0.000000000	0.000000000	1.824972272
Cu	0.000000000	2.580939770	1.824972272
Cu	0.000000000	5.161761284	1.824972272
Cu	0.000000000	7.742740631	1.824972272
Cu	2.580939770	0.000000000	1.824972272
Cu	2.580939770	2.580939770	1.824972272
Cu	2.580939770	5.161761284	1.824972272
Cu	2.580939770	7.742740631	1.824972272
Cu	5.161761284	0.000000000	1.824972272
Cu	5.161761284	2.580939770	1.824972272
Cu	5.161761284	5.161761284	1.824972272
Cu	5.161800861	7.742740631	1.824972272
Cu	7.742740631	0.000000000	1.824972272
Cu	7.742740631	2.580939770	1.824972272
Cu	7.742740631	5.161800861	1.824972272
Cu	7.742740631	7.742740631	1.824972272
Cu	9.033210754	9.033210754	0.000000000
Cu	9.033210754	1.290469885	0.000000000
Cu	9.033210754	3.871409655	0.000000000
Cu	9.033210754	6.452270508	0.000000000
Cu	1.290469885	9.033210754	0.000000000
Cu	1.290469885	1.290469885	0.000000000
Cu	1.290469885	3.871409655	0.000000000
Cu	1.290469885	6.452231407	0.000000000
Cu	3.871409655	9.033210754	0.000000000
Cu	3.871409655	1.290469885	0.000000000
Cu	3.871409655	3.871409655	0.000000000
Cu	3.871409655	6.452231407	0.000000000
Cu	6.452270508	9.033210754	0.000000000
Cu	6.452231407	1.290469885	0.000000000
Cu	6.452231407	3.871409655	0.000000000

S15

Cu	6.452231407	6.452231407	0.000000000
C	0.969900250	4.502033710	9.457692146
C	0.995341063	3.103854179	9.446330070
C	1.096080303	5.200276852	8.258699417
C	1.144953370	2.453538895	8.230128288
C	1.229152083	4.520543575	7.028795719
H	0.850218356	5.040503979	10.398540497
H	0.899327695	2.524150848	10.362701416
H	1.176183224	1.365295768	8.151013374
H	1.082729697	6.290647030	8.250261307
H	4.061625004	3.881963968	5.998223305
N	1.249670148	3.128586054	7.060708523

TS₃₋₄

-10.600327

Cu	10.320490837	10.319230080	5.394549370
Cu	0.000196910	2.584326506	5.396554470
Cu	10.319387436	5.162116051	5.390623093
Cu	10.288906097	7.734549046	5.404658318
Cu	2.585705042	0.001496517	5.393129349
Cu	2.590982199	2.555459499	5.400648117
Cu	2.620636940	5.179443836	5.486278534
Cu	2.560461044	7.767708778	5.432728291
Cu	5.155775547	0.054150272	5.379428387
Cu	5.202403545	2.535689831	5.417941093
Cu	5.139352798	5.009550095	5.481099129
Cu	5.109698296	7.869983673	5.549352646
Cu	7.726239681	10.304225922	5.396554470
Cu	7.738290310	2.577198505	5.428551197
Cu	7.730453491	5.108162403	5.421533585
Cu	7.663740158	7.689614296	5.482602596
Cu	9.008202553	9.012849808	3.660136700
Cu	9.021238327	1.293659806	3.668741465
Cu	9.042859077	3.863927126	3.624798536
Cu	8.991702080	6.444551945	3.671331167
Cu	1.285744071	9.020648003	3.659468412
Cu	1.288421988	1.294683814	3.637162685
Cu	1.311972499	3.889564753	3.674088240
Cu	1.300709248	6.447820663	3.666485786
Cu	3.874914646	9.011549950	3.656210184
Cu	3.876371861	1.307207227	3.640170097
Cu	3.858649969	3.861879110	3.617530346
Cu	3.887162447	6.447584152	3.647354841
Cu	6.432028294	9.004225731	3.659050703
Cu	6.466645241	1.279167295	3.614606380
Cu	6.441086292	3.878774166	3.588374138
Cu	6.415409088	6.441007614	3.653035641
Cu	0.000000000	0.000000000	1.824972272
Cu	0.000000000	2.580939770	1.824972272
Cu	0.000000000	5.161761284	1.824972272

S16

Cu	0.000000000	7.742740631	1.824972272
Cu	2.580939770	0.000000000	1.824972272
Cu	2.580939770	2.580939770	1.824972272
Cu	2.580939770	5.161761284	1.824972272
Cu	2.580939770	7.742740631	1.824972272
Cu	5.161761284	0.000000000	1.824972272
Cu	5.161761284	2.580939770	1.824972272
Cu	5.161761284	5.161761284	1.824972272
Cu	5.161800861	7.742740631	1.824972272
Cu	7.742740631	0.000000000	1.824972272
Cu	7.742740631	2.580939770	1.824972272
Cu	7.742740631	5.161800861	1.824972272
Cu	7.742740631	7.742740631	1.824972272
Cu	9.033210754	9.033210754	0.000000000
Cu	9.033210754	1.290469885	0.000000000
Cu	9.033210754	3.871409655	0.000000000
Cu	9.033210754	6.452270508	0.000000000
Cu	1.290469885	9.033210754	0.000000000
Cu	1.290469885	1.290469885	0.000000000
Cu	1.290469885	3.871409655	0.000000000
Cu	1.290469885	6.452231407	0.000000000
Cu	3.871409655	9.033210754	0.000000000
Cu	3.871409655	1.290469885	0.000000000
Cu	3.871409655	3.871409655	0.000000000
Cu	3.871409655	6.452231407	0.000000000
Cu	6.452270508	9.033210754	0.000000000
Cu	6.452231407	1.290469885	0.000000000
Cu	6.452231407	3.871409655	0.000000000
Cu	6.452231407	6.452231407	0.000000000
C	4.621952057	7.394997120	8.584428787
C	3.989319324	6.646148205	9.577825546
C	4.575599670	6.938402176	7.259872437
C	3.365744591	5.443027973	9.232379913
C	3.955372095	5.683887959	7.001728058
H	5.136320591	8.324058533	8.835889816
H	3.991800547	6.979674816	10.616250992
H	2.867877245	4.831031322	9.988684654
H	6.108859539	7.214982033	6.579257011
H	6.506066322	3.820803881	6.021197319
N	3.362633467	4.958629131	7.981590748

C₅H₃N (+2H) 4-fold perp
-10.647345

Cu	0.005710392	10.310447693	5.390957355
Cu	0.001929719	2.584011555	5.388367653
Cu	10.290993690	5.160304070	5.385944843
Cu	10.316394806	7.737896442	5.378258705
Cu	2.580939770	0.050802801	5.372578144
Cu	2.585271835	2.570661068	5.385944843
Cu	2.599685669	5.123245716	5.483354568

S17

Cu	2.594408512	7.805003643	5.496303558
Cu	5.179995060	0.037491679	5.379762650
Cu	5.207562447	2.570267200	5.419445038
Cu	5.128325939	5.098277569	5.589703560
Cu	5.134745121	7.766724110	5.546512127
Cu	7.742149830	10.316946030	5.387866020
Cu	7.737581730	2.593817711	5.418609619
Cu	7.692173958	5.150064945	5.457456589
Cu	7.734352112	7.730807781	5.412009716
Cu	9.018560410	9.021317482	3.646268606
Cu	9.023758888	1.302835822	3.657379866
Cu	9.021395683	3.877395630	3.644013166
Cu	9.025097847	6.436123848	3.631732464
Cu	1.310830355	9.012377739	3.658215284
Cu	1.282829762	1.296928525	3.626302242
Cu	1.305001855	3.897716761	3.658883572
Cu	1.319336891	6.452428341	3.671665430
Cu	3.880546331	9.022380829	3.645767450
Cu	3.890549421	1.315674424	3.643094063
Cu	3.877828836	3.888501406	3.640002966
Cu	3.874639034	6.444197178	3.623461723
Cu	6.431319237	9.012298584	3.660303831
Cu	6.463730812	1.282554150	3.619201183
Cu	6.433958054	3.888580322	3.591548681
Cu	6.405642509	6.451364994	3.627388239
Cu	0.000000000	0.000000000	1.824972272
Cu	0.000000000	2.580939770	1.824972272
Cu	0.000000000	5.161761284	1.824972272
Cu	0.000000000	7.742740631	1.824972272
Cu	2.580939770	0.000000000	1.824972272
Cu	2.580939770	2.580939770	1.824972272
Cu	2.580939770	5.161761284	1.824972272
Cu	2.580939770	7.742740631	1.824972272
Cu	5.161761284	0.000000000	1.824972272
Cu	5.161761284	2.580939770	1.824972272
Cu	5.161761284	5.161761284	1.824972272
Cu	5.161800861	7.742740631	1.824972272
Cu	7.742740631	0.000000000	1.824972272
Cu	7.742740631	2.580939770	1.824972272
Cu	7.742740631	5.161800861	1.824972272
Cu	7.742740631	7.742740631	1.824972272
Cu	9.033210754	9.033210754	0.000000000
Cu	9.033210754	1.290469885	0.000000000
Cu	9.033210754	3.871409655	0.000000000
Cu	9.033210754	6.452270508	0.000000000
Cu	1.290469885	9.033210754	0.000000000
Cu	1.290469885	1.290469885	0.000000000
Cu	1.290469885	3.871409655	0.000000000
Cu	1.290469885	6.452231407	0.000000000
Cu	3.871409655	9.033210754	0.000000000

S18

Cu	3.871409655	1.290469885	0.000000000
Cu	3.871409655	3.871409655	0.000000000
Cu	3.871409655	6.452231407	0.000000000
Cu	6.452270508	9.033210754	0.000000000
Cu	6.452231407	1.290469885	0.000000000
Cu	6.452231407	3.871409655	0.000000000
Cu	6.452231407	6.452231407	0.000000000
C	3.707698584	7.819693089	8.274739265
C	3.606565714	7.055051804	9.435553551
C	3.792054892	7.169338226	7.024451733
C	3.606014252	5.659116745	9.331961632
C	3.784493446	5.741504192	7.035061359
H	3.714354277	8.909866333	8.333218575
H	3.527644157	7.527636051	10.415750504
H	3.529613256	5.037038326	10.228616714
H	6.637681007	6.494448662	5.946594238
H	6.473340034	3.791503429	6.012843132
N	3.699270964	5.003642559	8.164547920