

A semiempirical approach toward the origin of *f*-elements binding selectivity of pyridine-2,6-diylbis(diphenylphosphine oxide)

Dmitrii Yu. Mladentsev, Gladis G. Zakirova and Zolfira Kh. Zakirova

Cartesian coordinates of atoms in the optimized geometries of κ^1 -1-M complexes

κ^1 -1-Ce

C	-0.93730988 +1	1.91145876 +1	-1.93786924 +1
C	-0.99000940 +1	3.23837112 +1	-2.39900635 +1
C	-0.33993207 +1	4.24733801 +1	-1.68170566 +1
C	-0.22024113 +1	1.67605883 +1	-0.76660981 +1
C	0.34351020 +1	3.87930691 +1	-0.51387759 +1
N	0.42067837 +1	2.62490020 +1	-0.04289544 +1
P	0.01010240 +1	0.04883565 +1	0.04915296 +1
C	-0.18969874 +1	0.26199458 +1	1.85398810 +1
C	-1.48627644 +1	0.33115818 +1	2.36675026 +1
C	-1.66215247 +1	0.48951586 +1	3.74707316 +1
C	-0.55080745 +1	0.57449467 +1	4.59073211 +1
C	0.74322399 +1	0.49712425 +1	4.06227239 +1
C	0.92888201 +1	0.33467764 +1	2.68541273 +1
C	1.68889494 +1	-0.56326361 +1	-0.31939231 +1
C	1.83823190 +1	-1.92574678 +1	-0.58401990 +1
C	2.78032458 +1	0.30827960 +1	-0.33704239 +1
C	3.11526326 +1	-2.42567259 +1	-0.86957250 +1
C	4.21656676 +1	-1.56580291 +1	-0.88816499 +1
C	4.05065242 +1	-0.20097648 +1	-0.62113804 +1
P	1.25136713 +1	5.11374771 +1	0.56027182 +1
C	0.25009332 +1	5.20838101 +1	2.10489246 +1
C	-0.06296909 +1	6.49613446 +1	2.54049065 +1
C	-0.82335601 +1	6.65813950 +1	3.70576454 +1
C	-1.26251160 +1	5.53595285 +1	4.41403654 +1
C	-0.94538838 +1	4.24933985 +1	3.96303893 +1
C	-0.18458087 +1	4.08171368 +1	2.80086605 +1
C	2.85723992 +1	4.30285617 +1	0.97340848 +1
C	3.99431370 +1	4.88010345 +1	0.40875296 +1
C	5.25017717 +1	4.32214660 +1	0.68091109 +1
C	5.35155330 +1	3.20429442 +1	1.51408093 +1
C	4.20246120 +1	2.63876410 +1	2.07900429 +1
C	2.94554047 +1	3.19271510 +1	1.81017930 +1
O	1.40988343 +1	6.43128251 +1	-0.15201320 +1
O	-1.06747935 +1	-0.93581989 +1	-0.48641010 +1
Ce	-2.85010493 +1	-2.68442548 +1	-0.82397582 +1
O	-3.39277012 +1	-1.50193439 +1	-3.04195172 +1
N	-3.63388208 +1	-2.49511758 +1	-3.83193582 +1
O	-3.47711170 +1	-3.57774553 +1	-3.14842529 +1
O	-3.85823595 +1	-1.30959140 +1	1.10544849 +1

N	-5.10393951 +1	-1.65850400 +1	1.06905726 +1
O	-5.24128719 +1	-2.49739580 +1	0.10352865 +1
O	-0.70266205 +1	-4.09393135 +1	-0.61978013 +1
N	-1.07375552 +1	-5.04481988 +1	0.17200477 +1
O	-2.30765021 +1	-4.83340678 +1	0.47707939 +1
O	-5.95135868 +1	-1.26939055 +1	1.79224993 +1
O	-0.39921657 +1	-5.93593021 +1	0.55106370 +1
O	-3.93534891 +1	-2.42229327 +1	-4.96978242 +1
H	-1.44357393 +1	1.11249258 +1	-2.48701896 +1
H	-1.53785327 +1	3.47579641 +1	-3.31356420 +1
H	-0.36103738 +1	5.28873400 +1	-2.02399839 +1
H	-2.37981852 +1	0.25303155 +1	1.73239135 +1
H	-2.67107604 +1	0.53581060 +1	4.16009812 +1
H	-0.69133796 +1	0.69328130 +1	5.66630301 +1
H	1.60525576 +1	0.55456536 +1	4.72592358 +1
H	1.94738457 +1	0.25919580 +1	2.29442679 +1
H	0.99039663 +1	-2.62498903 +1	-0.57965849 +1
H	2.67668827 +1	1.38059751 +1	-0.13698963 +1
H	3.24422071 +1	-3.48846967 +1	-1.07956731 +1
H	5.20947484 +1	-1.95807725 +1	-1.11345574 +1
H	4.91140113 +1	0.46706143 +1	-0.63930316 +1
H	0.26915447 +1	7.38446816 +1	1.98780299 +1
H	-1.07339984 +1	7.65825013 +1	4.05640401 +1
H	-1.85622064 +1	5.66277066 +1	5.31946823 +1
H	-1.29379056 +1	3.37680414 +1	4.51333237 +1
H	0.04708883 +1	3.06582659 +1	2.46472011 +1
H	3.92609267 +1	5.76520461 +1	-0.23731672 +1
H	6.14618069 +1	4.76432174 +1	0.24775425 +1
H	6.32983208 +1	2.77438733 +1	1.72976779 +1
H	4.28965963 +1	1.77467388 +1	2.73417339 +1
H	2.05611135 +1	2.74420790 +1	2.26185335 +1

κ^1 -1-Pr

C	-1.34357690 +1	1.05494875 +1	1.78016029 +1
C	-0.04945979 +1	0.77521611 +1	2.25409428 +1
C	1.03473642 +1	1.53124384 +1	1.79983304 +1
C	-1.47036276 +1	2.09692668 +1	0.86474211 +1
C	0.77394600 +1	2.54929970 +1	0.87079280 +1
N	-0.44461830 +1	2.85000743 +1	0.39710981 +1
P	-3.02388840 +1	2.70490447 +1	0.09937455 +1
C	-2.70378604 +1	3.09075297 +1	-1.65900502 +1
C	-2.59741426 +1	2.01787880 +1	-2.54637877 +1
C	-2.36630869 +1	2.27874462 +1	-3.90231316 +1
C	-2.24697085 +1	3.59787666 +1	-4.35138126 +1
C	-2.36220876 +1	4.66263808 +1	-3.45078266 +1
C	-2.59831587 +1	4.41160532 +1	-2.09432486 +1
C	-3.54502369 +1	4.21034766 +1	0.98905463 +1
C	-4.89518069 +1	4.34807506 +1	1.31406287 +1
C	-2.60658813 +1	5.18436140 +1	1.34001241 +1
C	-5.31407399 +1	5.49221483 +1	2.00553335 +1
C	-4.38686842 +1	6.47502359 +1	2.36127808 +1
C	-3.03493689 +1	6.32305362 +1	2.02783891 +1
P	2.11752088 +1	3.63227041 +1	0.15060685 +1
C	2.24701081 +1	3.08337410 +1	-1.60526150 +1

C	3.53285088 +1	2.77330406 +1	-2.04767909 +1
C	3.71634775 +1	2.34251273 +1	-3.36808064 +1
C	2.61665814 +1	2.22447541 +1	-4.22264058 +1
C	1.33100764 +1	2.53554820 +1	-3.76432728 +1
C	1.14231539 +1	2.96775973 +1	-2.44719166 +1
C	1.42802351 +1	5.34457948 +1	0.15646002 +1
C	2.05193204 +1	6.24942848 +1	1.01494425 +1
C	1.59211466 +1	7.57186975 +1	1.06463860 +1
C	0.52417565 +1	7.97038510 +1	0.25555206 +1
C	-0.09019382 +1	7.05265473 +1	-0.60459520 +1
C	0.36552442 +1	5.73043826 +1	-0.65762806 +1
O	3.39837908 +1	3.49868137 +1	0.93154199 +1
O	-4.10718232 +1	1.59419343 +1	0.20446489 +1
Pr	-5.77349589 +1	-0.19296268 +1	0.70913860 +1
O	-3.94547672 +1	-0.73792535 +1	2.39762018 +1
N	-4.64486656 +1	-1.08001501 +1	3.43059341 +1
O	-5.88827289 +1	-0.96754149 +1	3.12962003 +1
O	-5.16065793 +1	-1.14898370 +1	-1.56631333 +1
N	-5.45070450 +1	-2.39712814 +1	-1.41090536 +1
O	-5.88946199 +1	-2.55881721 +1	-0.21155665 +1
O	-7.11761057 +1	1.92117147 +1	1.18021562 +1
N	-8.27059278 +1	1.60627416 +1	0.69393978 +1
O	-8.18930528 +1	0.41631107 +1	0.20923451 +1
O	-5.32759417 +1	-3.24054477 +1	-2.22746606 +1
O	-9.22859767 +1	2.29643146 +1	0.68944847 +1
O	-4.20346765 +1	-1.42555179 +1	4.46992164 +1
H	-2.19738286 +1	0.46050415 +1	2.13321009 +1
H	0.10085868 +1	-0.03158057 +1	2.97543375 +1
H	2.05130430 +1	1.33745446 +1	2.16120461 +1
H	-2.69896055 +1	0.97801611 +1	-2.21914174 +1
H	-2.28990548 +1	1.45074258 +1	-4.60803942 +1
H	-2.07024042 +1	3.79853360 +1	-5.40938972 +1
H	-2.27655781 +1	5.68840009 +1	-3.80817872 +1
H	-2.70207436 +1	5.25822118 +1	-1.40966792 +1
H	-5.64680174 +1	3.59121688 +1	1.05145773 +1
H	-1.54232090 +1	5.08608551 +1	1.09736700 +1
H	-6.36657671 +1	5.60838433 +1	2.26853537 +1
H	-4.71573876 +1	7.36309405 +1	2.90327199 +1
H	-2.31415597 +1	7.09011593 +1	2.31013500 +1
H	4.40258566 +1	2.85556850 +1	-1.38298833 +1
H	4.71540547 +1	2.09815704 +1	-3.72567646 +1
H	2.76002159 +1	1.88716081 +1	-5.24922836 +1
H	0.47605580 +1	2.43882179 +1	-4.43112814 +1
H	0.12786664 +1	3.20299981 +1	-2.10835294 +1
H	2.89884489 +1	5.94885770 +1	1.64588300 +1
H	2.07207762 +1	8.28892743 +1	1.72904315 +1
H	0.17153751 +1	9.00128603 +1	0.29015719 +1
H	-0.91469685 +1	7.37187315 +1	-1.23819187 +1
H	-0.12054248 +1	5.02408371 +1	-1.33741165 +1

κ^1 -1-Nd

C	-0.47856622 +1	0.34457891 +1	1.02016211 +1
C	0.90194728 +1	0.22815440 +1	1.25568837 +1
C	1.74482992 +1	1.29595117 +1	0.93845585 +1

C -0.93121632 +1 1.53966014 +1 0.46258375 +1
C 1.16512862 +1 2.44444637 +1 0.37545809 +1
N -0.14451856 +1 2.58991225 +1 0.12157750 +1
P -2.69440246 +1 1.87989618 +1 0.11657158 +1
C -2.98636741 +1 1.93130986 +1 -1.68658203 +1
C -4.08124259 +1 1.20134733 +1 -2.15716238 +1
C -4.36324490 +1 1.19482948 +1 -3.52639877 +1
C -3.55434962 +1 1.92393913 +1 -4.40508471 +1
C -2.46570372 +1 2.65741939 +1 -3.91981267 +1
C -2.17518436 +1 2.66228015 +1 -2.55062676 +1
C -3.24303443 +1 3.45242083 +1 0.85274473 +1
C -4.53246281 +1 3.87853883 +1 0.51612922 +1
C -2.45306019 +1 4.16472787 +1 1.75447760 +1
C -5.03362492 +1 5.04858325 +1 1.09471494 +1
C -4.25026709 +1 5.77501291 +1 1.99876222 +1
C -2.96346894 +1 5.33681320 +1 2.32604459 +1
P 2.23054429 +1 3.93161830 +1 -0.01971876 +1
C 2.26145214 +1 4.04147005 +1 -1.85967608 +1
C 3.52994083 +1 4.14977087 +1 -2.43012195 +1
C 3.64679779 +1 4.26011280 +1 -3.82182782 +1
C 2.49980678 +1 4.25935423 +1 -4.62015894 +1
C 1.23298632 +1 4.14426498 +1 -4.03473079 +1
C 1.11219141 +1 4.03297294 +1 -2.64559189 +1
C 1.32066719 +1 5.40597245 +1 0.60475006 +1
C 2.00835345 +1 6.18061794 +1 1.53983315 +1
C 1.40457113 +1 7.33926547 +1 2.04411029 +1
C 0.12894515 +1 7.70792569 +1 1.60678702 +1
C -0.55058929 +1 6.92026393 +1 0.67073146 +1
C 0.04713645 +1 5.76009166 +1 0.16476708 +1
O 3.59689780 +1 3.76082532 +1 0.59359744 +1
O -3.54330894 +1 0.69459104 +1 0.68688574 +1
Nd -5.58555922 +1 -0.56038813 +1 0.80603799 +1
O -5.95993347 +1 -0.04189579 +1 3.13904805 +1
N -6.44905749 +1 -1.17243951 +1 3.50841634 +1
O -6.44176622 +1 -2.01440956 +1 2.54023192 +1
O -5.35766084 +1 -1.49510452 +1 -1.41509994 +1
N -4.50898227 +1 -2.42499358 +1 -1.14548531 +1
O -4.22502934 +1 -2.44179602 +1 0.10283065 +1
O -6.39623471 +1 1.50086846 +1 -0.18258996 +1
N -7.65433475 +1 1.21593103 +1 -0.20822721 +1
O -7.87197819 +1 0.05346508 +1 0.27628626 +1
O -4.05099046 +1 -3.16001949 +1 -1.95276409 +1
O -8.48661700 +1 1.94642275 +1 -0.62689968 +1
O -6.84519200 +1 -1.40424665 +1 4.59884751 +1
H -1.15831849 +1 -0.47571813 +1 1.27174524 +1
H 1.30749764 +1 -0.68895284 +1 1.68851874 +1
H 2.82461303 +1 1.24157232 +1 1.13093661 +1
H -4.72844979 +1 0.63292814 +1 -1.47840013 +1
H -5.20918312 +1 0.61715113 +1 -3.90485327 +1
H -3.77386899 +1 1.91918462 +1 -5.47424150 +1
H -1.84211642 +1 3.22292304 +1 -4.61096438 +1
H -1.30975210 +1 3.23752799 +1 -2.19026813 +1
H -5.17419539 +1 3.32395402 +1 -0.18443576 +1
H -1.44443456 +1 3.84453413 +1 2.02931573 +1

H	-6.03920044 +1	5.38925644 +1	0.84553950 +1
H	-4.64782846 +1	6.68383847 +1	2.45322385 +1
H	-2.35489099 +1	5.90440181 +1	3.03013420 +1
H	4.43791916 +1	4.14671668 +1	-1.81224737 +1
H	4.63159797 +1	4.34607668 +1	-4.27923371 +1
H	2.59071762 +1	4.34723099 +1	-5.70312944 +1
H	0.34514429 +1	4.14237532 +1	-4.66322079 +1
H	0.11106210 +1	3.93163806 +1	-2.20469896 +1
H	3.01251801 +1	5.90178872 +1	1.88636751 +1
H	1.93139434 +1	7.95319177 +1	2.77326098 +1
H	-0.33753470 +1	8.61373111 +1	1.99460477 +1
H	-1.54535514 +1	7.20931224 +1	0.33531199 +1
H	-0.50195825 +1	5.15411743 +1	-0.55916884 +1

κ^1 -1-Sm

C	-0.53798690 +1	0.20767170 +1	-0.82568938 +1
C	0.81424352 +1	0.12031809 +1	-1.20336434 +1
C	1.66090776 +1	1.21416656 +1	-1.00461984 +1
C	-0.95863823 +1	1.40679164 +1	-0.25669113 +1
C	1.11414128 +1	2.36486293 +1	-0.41503120 +1
N	-0.16599516 +1	2.48466050 +1	-0.03449816 +1
P	-2.65567018 +1	1.81076650 +1	0.29480467 +1
C	-3.34716772 +1	3.16658676 +1	-0.71110798 +1
C	-4.61520984 +1	3.63594199 +1	-0.34915197 +1
C	-5.22794969 +1	4.61170797 +1	-1.13863790 +1
C	-4.57221853 +1	5.11321814 +1	-2.27034308 +1
C	-3.30010436 +1	4.64599846 +1	-2.61130926 +1
C	-2.67954556 +1	3.66279315 +1	-1.82985433 +1
C	-2.61863173 +1	2.30255065 +1	2.04984046 +1
C	-2.16702640 +1	3.57485044 +1	2.40394617 +1
C	-3.07130329 +1	1.39218112 +1	3.00489796 +1
C	-2.17534105 +1	3.94571463 +1	3.75192960 +1
C	-2.63520606 +1	3.04666954 +1	4.72225739 +1
C	-3.07865495 +1	1.77331853 +1	4.35250747 +1
P	2.11764863 +1	3.91997468 +1	-0.13493882 +1
C	1.02258588 +1	5.31639137 +1	-0.63899356 +1
C	1.51196877 +1	6.11155688 +1	-1.67608839 +1
C	0.75146091 +1	7.19994178 +1	-2.12147705 +1
C	-0.48280614 +1	7.47825974 +1	-1.52699227 +1
C	-0.96257340 +1	6.67264397 +1	-0.48789856 +1
C	-0.20487390 +1	5.58525594 +1	-0.03803966 +1
C	2.35299998 +1	4.03307132 +1	1.69090613 +1
C	1.36813850 +1	3.69069245 +1	2.61416948 +1
C	1.63836783 +1	3.81892754 +1	3.98143489 +1
C	2.88882199 +1	4.28012646 +1	4.40848637 +1
C	3.87344926 +1	4.61037351 +1	3.47272092 +1
C	3.60732401 +1	4.48481525 +1	2.10333539 +1
O	3.40842590 +1	3.86634953 +1	-0.90970720 +1
O	-3.58177667 +1	0.56500379 +1	0.09492100 +1
Sm	-5.62101500 +1	-0.26144479 +1	-0.81629729 +1
O	-5.12238004 +1	-2.61061033 +1	-1.07201332 +1
N	-6.25101471 +1	-3.01278067 +1	-1.54227376 +1
O	-7.05230286 +1	-2.01098503 +1	-1.65686357 +1
O	-6.38444586 +1	1.32242228 +1	-2.47827918 +1

N	-5.44044330 +1	1.19534260 +1	-3.33957730 +1
O	-4.59604360 +1	0.31407451 +1	-2.93370796 +1
O	-6.38411876 +1	1.41873258 +1	0.76145233 +1
N	-6.63314160 +1	0.65288277 +1	1.76480021 +1
O	-6.44736098 +1	-0.57376185 +1	1.43847491 +1
O	-5.35298840 +1	1.80322953 +1	-4.35045602 +1
O	-6.97377106 +1	1.03057903 +1	2.83373854 +1
O	-6.51153814 +1	-4.12821613 +1	-1.82686170 +1
H	-1.21609751 +1	-0.63606177 +1	-0.98132786 +1
H	1.19470529 +1	-0.79824348 +1	-1.65582060 +1
H	2.71463783 +1	1.17711120 +1	-1.30721538 +1
H	-5.15456406 +1	3.26445474 +1	0.53415601 +1
H	-6.22468467 +1	4.97318250 +1	-0.87975840 +1
H	-5.06063570 +1	5.86699884 +1	-2.89079627 +1
H	-2.79079558 +1	5.03971129 +1	-3.49145535 +1
H	-1.68578826 +1	3.31218698 +1	-2.12148455 +1
H	-1.79628174 +1	4.28866333 +1	1.65274275 +1
H	-3.42008334 +1	0.39098826 +1	2.73112548 +1
H	-1.83021042 +1	4.93623040 +1	4.04781228 +1
H	-2.64984586 +1	3.34299865 +1	5.77262400 +1
H	-3.43693258 +1	1.07689321 +1	5.11177716 +1
H	2.48089836 +1	5.90216771 +1	-2.14905959 +1
H	1.12356324 +1	7.82843449 +1	-2.92928400 +1
H	-1.07362309 +1	8.32668894 +1	-1.87271305 +1
H	-1.92581044 +1	6.89277202 +1	-0.03147863 +1
H	-0.60171526 +1	4.96382052 +1	0.77463864 +1
H	0.39108839 +1	3.31305167 +1	2.30551031 +1
H	0.87638843 +1	3.55439105 +1	4.71225696 +1
H	3.09681668 +1	4.37797214 +1	5.47411699 +1
H	4.84876454 +1	4.96165762 +1	3.80659388 +1
H	4.39358098 +1	4.73470179 +1	1.37977690 +1

κ^1 -1-Eu

C	-1.27741970 +1	1.03315375 +1	1.68640182 +1
C	-0.01033510 +1	0.89795142 +1	2.28102136 +1
C	1.02246883 +1	1.76814366 +1	1.92052215 +1
C	-1.43055446 +1	2.05534894 +1	0.75263385 +1
C	0.73970347 +1	2.75153623 +1	0.96122859 +1
N	-0.45533255 +1	2.91740739 +1	0.37425197 +1
P	-2.95621485 +1	2.46867838 +1	-0.17817872 +1
C	-2.51745894 +1	2.68697391 +1	-1.93803064 +1
C	-2.49410552 +1	1.55075938 +1	-2.74875182 +1
C	-2.15303688 +1	1.68970352 +1	-4.10013372 +1
C	-1.84538988 +1	2.95018512 +1	-4.61981136 +1
C	-1.88211820 +1	4.08144422 +1	-3.79573900 +1
C	-2.22503872 +1	3.95351238 +1	-2.44574693 +1
C	-3.67590346 +1	3.99965444 +1	0.50106385 +1
C	-5.05780984 +1	4.02237996 +1	0.70039945 +1
C	-2.87261151 +1	5.09739808 +1	0.81635614 +1
C	-5.64815831 +1	5.18105535 +1	1.22080209 +1
C	-4.85767041 +1	6.29022489 +1	1.53432312 +1
C	-3.47241854 +1	6.24974318 +1	1.33287083 +1
P	2.01032961 +1	3.98598027 +1	0.36442819 +1
C	2.40555504 +1	3.46088333 +1	-1.35865289 +1

C 3.75977901 +1 3.47202207 +1 -1.69331892 +1
 C 4.14933479 +1 3.08695319 +1 -2.98269733 +1
 C 3.18510595 +1 2.69202170 +1 -3.91437571 +1
 C 1.83026603 +1 2.67765393 +1 -3.56301041 +1
 C 1.43557428 +1 3.06163767 +1 -2.27667272 +1
 C 1.10116744 +1 5.59241139 +1 0.27051313 +1
 C 1.30514384 +1 6.47122242 +1 1.33433180 +1
 C 0.65184141 +1 7.71025217 +1 1.33210093 +1
 C -0.18525267 +1 8.05625167 +1 0.26712962 +1
 C -0.37190686 +1 7.16973309 +1 -0.79933556 +1
 C 0.27799794 +1 5.92947095 +1 -0.80100969 +1
 O 3.20103008 +1 4.02462853 +1 1.28510628 +1
 O -3.96588711 +1 1.29388161 +1 -0.02917083 +1
 Eu -5.32928627 +1 -0.63587031 +1 0.17940365 +1
 O -4.17746010 +1 -1.14249445 +1 -1.84576884 +1
 N -4.34490180 +1 -2.41742717 +1 -1.81591094 +1
 O -4.98433083 +1 -2.79258715 +1 -0.77310094 +1
 O -5.64849881 +1 -1.51600879 +1 2.45282180 +1
 N -4.46253812 +1 -1.54518860 +1 3.00288101 +1
 O -3.74198965 +1 -1.06138007 +1 2.01116229 +1
 O -7.06450831 +1 1.09855585 +1 0.38155018 +1
 N -8.08007156 +1 0.67662452 +1 -0.33650045 +1
 O -7.58599595 +1 -0.45750949 +1 -0.77417679 +1
 O -4.12595111 +1 -1.88823259 +1 4.06509671 +1
 O -9.11676281 +1 1.17243163 +1 -0.53284579 +1
 O -3.94454111 +1 -3.15131102 +1 -2.65591689 +1
 H -2.09199746 +1 0.34834727 +1 1.96180613 +1
 H 0.16046059 +1 0.11267754 +1 3.02089350 +1
 H 2.01615494 +1 1.68640944 +1 2.37555854 +1
 H -2.74451989 +1 0.54998483 +1 -2.37128928 +1
 H -2.13684932 +1 0.81045406 +1 -4.74566897 +1
 H -1.58318047 +1 3.05512412 +1 -5.67365723 +1
 H -1.65136233 +1 5.06218093 +1 -4.20949619 +1
 H -2.26233656 +1 4.85024315 +1 -1.82131811 +1
 H -5.69970001 +1 3.16137791 +1 0.46863194 +1
 H -1.78506718 +1 5.08692007 +1 0.67820747 +1
 H -6.72611778 +1 5.21185307 +1 1.38367246 +1
 H -5.32089702 +1 7.19044633 +1 1.94082542 +1
 H -2.85801135 +1 7.11441276 +1 1.58291477 +1
 H 4.52736313 +1 3.76848587 +1 -0.96695711 +1
 H 5.20344439 +1 3.09236472 +1 -3.25575341 +1
 H 3.48923320 +1 2.39065828 +1 -4.91685903 +1
 H 1.08162051 +1 2.36255659 +1 -4.28805814 +1
 H 0.37134418 +1 3.03211659 +1 -2.02361851 +1
 H 1.97522024 +1 6.21883655 +1 2.16576469 +1
 H 0.80439649 +1 8.40600966 +1 2.15582245 +1
 H -0.68745984 +1 9.02373152 +1 0.26273181 +1
 H -1.01390812 +1 7.45046781 +1 -1.63175843 +1
 H 0.12960878 +1 5.25342641 +1 -1.64624837 +1

κ^1 -1-Gd

C -0.47073221 +1 -0.04974470 +1 -0.08004390 +1
 C 0.91049676 +1 -0.22164929 +1 -0.28277555 +1
 C 1.74677051 +1 0.89675037 +1 -0.33259384 +1

C -0.93083153 +1 1.25712926 +1 0.05887154 +1
C 1.15693157 +1 2.16092747 +1 -0.17825075 +1
N -0.15334020 +1 2.36794715 +1 0.01518190 +1
P -2.66183550 +1 1.76961177 +1 0.35084868 +1
C -3.24725571 +1 2.84142732 +1 -1.00554931 +1
C -4.46179212 +1 3.50828450 +1 -0.81592990 +1
C -4.99778995 +1 4.25418823 +1 -1.86968238 +1
C -4.32215335 +1 4.32617852 +1 -3.09348886 +1
C -3.10617258 +1 3.65761408 +1 -3.26715794 +1
C -2.56145261 +1 2.90703046 +1 -2.21855154 +1
C -2.77055014 +1 2.63371274 +1 1.94929405 +1
C -2.06719445 +1 3.82126630 +1 2.15827914 +1
C -3.57957214 +1 2.07538679 +1 2.94059852 +1
C -2.19511867 +1 4.47263685 +1 3.38975391 +1
C -3.01348126 +1 3.93348084 +1 4.38873294 +1
C -3.70198276 +1 2.73619064 +1 4.16814637 +1
P 2.15201737 +1 3.74813521 +1 -0.21705924 +1
C 1.51258707 +1 4.67689360 +1 -1.67523511 +1
C 2.47066321 +1 5.08466540 +1 -2.60282556 +1
C 2.06329815 +1 5.80061032 +1 -3.73632959 +1
C 0.71047655 +1 6.09471934 +1 -3.92655394 +1
C -0.24159562 +1 5.67471520 +1 -2.98958193 +1
C 0.15935107 +1 4.95990154 +1 -1.85607573 +1
C 1.62062717 +1 4.65139482 +1 1.30579470 +1
C 1.91907798 +1 4.05551849 +1 2.53171906 +1
C 1.60069725 +1 4.72993740 +1 3.71689659 +1
C 0.99781372 +1 5.99076742 +1 3.66359753 +1
C 0.70699381 +1 6.57868302 +1 2.42846992 +1
C 1.02341960 +1 5.90796792 +1 1.24013621 +1
O 3.62191094 +1 3.43932682 +1 -0.28638595 +1
O -3.59982575 +1 0.51347082 +1 0.33828934 +1
Gd -5.53136066 +1 -0.36059525 +1 -0.62844792 +1
O -5.05689919 +1 -2.68120182 +1 -0.29146456 +1
N -6.08539321 +1 -3.23505409 +1 -0.85036502 +1
O -6.81387700 +1 -2.26392423 +1 -1.29887202 +1
O -6.12920424 +1 0.79903020 +1 -2.64113088 +1
N -5.11520478 +1 0.54093330 +1 -3.39658653 +1
O -4.31410979 +1 -0.18879626 +1 -2.68884104 +1
O -6.34684040 +1 1.63046953 +1 0.45254114 +1
N -6.94439315 +1 1.12802651 +1 1.48480966 +1
O -6.81496259 +1 -0.15239128 +1 1.38845228 +1
O -4.94408745 +1 0.90223085 +1 -4.50363970 +1
O -7.48504006 +1 1.72509997 +1 2.34344802 +1
O -6.30921361 +1 -4.38502997 +1 -0.93490728 +1
H -1.14107118 +1 -0.91333536 +1 -0.03612037 +1
H 1.32257335 +1 -1.22627128 +1 -0.40036048 +1
H 2.82771591 +1 0.79049646 +1 -0.48607860 +1
H -5.02333969 +1 3.45438558 +1 0.12771837 +1
H -5.95318252 +1 4.76574952 +1 -1.74137992 +1
H -4.75205422 +1 4.89773975 +1 -3.91836833 +1
H -2.58706795 +1 3.70763374 +1 -4.22493995 +1
H -1.61390248 +1 2.38584135 +1 -2.38249257 +1
H -1.41083721 +1 4.25324277 +1 1.39510192 +1
H -4.11353071 +1 1.13280577 +1 2.78670340 +1

H	-1.65092276 +1	5.40018685 +1	3.56990841 +1
H	-3.11373968 +1	4.44843354 +1	5.34547327 +1
H	-4.33517155 +1	2.31721942 +1	4.95065456 +1
H	3.53570972 +1	4.85546433 +1	-2.46457697 +1
H	2.80199690 +1	6.12570850 +1	-4.46777070 +1
H	0.39419467 +1	6.65242693 +1	-4.80850989 +1
H	-1.29521611 +1	5.90332697 +1	-3.14342460 +1
H	-0.59907245 +1	4.63588264 +1	-1.13794740 +1
H	2.40649295 +1	3.07884516 +1	2.59646689 +1
H	1.83160661 +1	4.27585402 +1	4.67957108 +1
H	0.76273307 +1	6.51990965 +1	4.58720497 +1
H	0.24661408 +1	7.56460624 +1	2.38914458 +1
H	0.80317973 +1	6.39619558 +1	0.28742943 +1

κ^1 -1-Tb

C	-0.44648129 +1	0.11186488 +1	-0.46976101 +1
C	0.93735789 +1	-0.05692597 +1	-0.65511388 +1
C	1.78298307 +1	1.05418490 +1	-0.59828634 +1
C	-0.90071949 +1	1.40793616 +1	-0.23855991 +1
C	1.19887979 +1	2.30775912 +1	-0.36014973 +1
N	-0.11410565 +1	2.51142823 +1	-0.18023262 +1
P	-2.63614171 +1	1.90496295 +1	0.06762420 +1
C	-3.20190407 +1	3.05448977 +1	-1.23389402 +1
C	-4.47891716 +1	3.60415027 +1	-1.08360854 +1
C	-4.98913091 +1	4.42504016 +1	-2.09431296 +1
C	-4.22660153 +1	4.68592005 +1	-3.23822138 +1
C	-2.95031941 +1	4.13072879 +1	-3.37477036 +1
C	-2.43250460 +1	3.30490165 +1	-2.36991996 +1
C	-2.73807400 +1	2.71483076 +1	1.69773900 +1
C	-2.10581385 +1	3.94370729 +1	1.89762122 +1
C	-3.45419901 +1	2.08619964 +1	2.71764029 +1
C	-2.21438984 +1	4.56570830 +1	3.14594658 +1
C	-2.94477372 +1	3.95682603 +1	4.17257724 +1
C	-3.56040571 +1	2.71895047 +1	3.96154213 +1
P	2.20940754 +1	3.88205219 +1	-0.24997824 +1
C	1.60392939 +1	4.93531894 +1	-1.63748130 +1
C	2.56973665 +1	5.35900427 +1	-2.54959376 +1
C	2.18475371 +1	6.17193674 +1	-3.62406330 +1
C	0.84657757 +1	6.54705736 +1	-3.77031582 +1
C	-0.11359484 +1	6.11087418 +1	-2.84905304 +1
C	0.26493905 +1	5.29845236 +1	-1.77509266 +1
C	1.65302436 +1	4.66863260 +1	1.32690146 +1
C	1.75899248 +1	3.91711449 +1	2.49741307 +1
C	1.41718019 +1	4.50456804 +1	3.72181691 +1
C	0.98220945 +1	5.83309478 +1	3.76287223 +1
C	0.88336918 +1	6.57679722 +1	2.58257869 +1
C	1.22446756 +1	5.99395556 +1	1.35554672 +1
O	3.67664504 +1	3.56419581 +1	-0.32422549 +1
O	-3.55898651 +1	0.64361890 +1	0.02321735 +1
Tb	-5.61105711 +1	-0.49299495 +1	-0.43887918 +1
O	-5.43773711 +1	-2.74396634 +1	0.44975435 +1

N -6.63373659 +1 -3.19993299 +1 0.25603345 +1
 O -7.29082997 +1 -2.23628133 +1 -0.30995009 +1
 O -6.09635692 +1 0.19430750 +1 -2.71939271 +1
 N -5.27143681 +1 -0.52777551 +1 -3.40813177 +1
 O -4.62189179 +1 -1.23033964 +1 -2.53505422 +1
 O -6.20467747 +1 0.29045216 +1 1.79027829 +1
 N -6.64192248 +1 1.48256917 +1 1.55505967 +1
 O -6.53588229 +1 1.64406525 +1 0.27275622 +1
 O -5.13366534 +1 -0.53710783 +1 -4.57549007 +1
 O -7.03887333 +1 2.26787837 +1 2.33647154 +1
 O -7.04048419 +1 -4.26620860 +1 0.53351181 +1
 H -1.12349368 +1 -0.74629898 +1 -0.50883751 +1
 H 1.34465984 +1 -1.05318884 +1 -0.84098666 +1
 H 2.86667854 +1 0.95001157 +1 -0.73358065 +1
 H -5.10814821 +1 3.40896361 +1 -0.20559958 +1
 H -5.98995893 +1 4.84862945 +1 -1.99465542 +1
 H -4.63346842 +1 5.31761698 +1 -4.02972544 +1
 H -2.36113773 +1 4.32920708 +1 -4.27017403 +1
 H -1.43550674 +1 2.87735222 +1 -2.50641986 +1
 H -1.51822435 +1 4.43010152 +1 1.11262785 +1
 H -3.93339551 +1 1.11069753 +1 2.58121424 +1
 H -1.72330600 +1 5.52383346 +1 3.31794524 +1
 H -3.03326616 +1 4.44879896 +1 5.14243274 +1
 H -4.12687316 +1 2.24454997 +1 4.76415305 +1
 H 3.62383571 +1 5.06985096 +1 -2.44324845 +1
 H 2.92963715 +1 6.51056306 +1 -4.34303545 +1
 H 0.54828902 +1 7.18198977 +1 -4.60507951 +1
 H -1.15533828 +1 6.40491028 +1 -2.96785021 +1
 H -0.49806477 +1 4.96326702 +1 -1.06735416 +1
 H 2.10901734 +1 2.88175888 +1 2.49062265 +1
 H 1.49780046 +1 3.92830327 +1 4.64249563 +1
 H 0.72752618 +1 6.29188577 +1 4.71835230 +1
 H 0.55373734 +1 7.61390484 +1 2.61802445 +1
 H 1.15438482 +1 6.59978813 +1 0.44839535 +1

κ^1 -1-Dy

C -0.32662520 +1 0.14727699 +1 -0.42743247 +1
 C 1.06220719 +1 0.00926731 +1 -0.59987845 +1
 C 1.88091689 +1 1.14042295 +1 -0.54604348 +1
 C -0.81346947 +1 1.43443038 +1 -0.21207806 +1
 C 1.26548360 +1 2.38183822 +1 -0.32335823 +1
 N -0.05338336 +1 2.55625889 +1 -0.15678831 +1
 P -2.56634157 +1 1.88283760 +1 0.06414990 +1
 C -3.13727232 +1 3.04309965 +1 -1.22499925 +1
 C -4.39942855 +1 3.61862569 +1 -1.04855183 +1
 C -4.91422361 +1 4.44840632 +1 -2.04939408 +1
 C -4.17089718 +1 4.69176384 +1 -3.20986833 +1
 C -2.90973855 +1 4.10982154 +1 -3.37297367 +1
 C -2.38677636 +1 3.27598200 +1 -2.37730539 +1
 C -2.74306648 +1 2.65225334 +1 1.70623367 +1
 C -2.02955064 +1 3.81801773 +1 1.99730040 +1

C -3.59903589 +1 2.06854714 +1 2.64137445 +1
C -2.18875218 +1 4.41502694 +1 3.25153027 +1
C -3.05093501 +1 3.84602875 +1 4.19618853 +1
C -3.75263612 +1 2.67566820 +1 3.89383106 +1
P 2.24153539 +1 3.97882629 +1 -0.22081984 +1
C 1.61046319 +1 5.01339465 +1 -1.60972291 +1
C 2.57131405 +1 5.47162007 +1 -2.51053921 +1
C 2.17020894 +1 6.26906272 +1 -3.59060753 +1
C 0.82115844 +1 6.59497608 +1 -3.75371435 +1
C -0.13352890 +1 6.12490095 +1 -2.84355599 +1
C 0.26080211 +1 5.32684403 +1 -1.76452923 +1
C 1.67827838 +1 4.74943508 +1 1.36148004 +1
C 1.91555938 +1 4.03476144 +1 2.53625459 +1
C 1.57377343 +1 4.60724649 +1 3.76757173 +1
C 1.00833183 +1 5.88570544 +1 3.81129671 +1
C 0.77875544 +1 6.59312553 +1 2.62696757 +1
C 1.11932848 +1 6.02494145 +1 1.39275907 +1
O 3.71492258 +1 3.69021459 +1 -0.29753680 +1
O -3.44667364 +1 0.59252816 +1 -0.05189428 +1
Dy -5.48318132 +1 -0.50444988 +1 -0.58652904 +1
O -5.53175480 +1 -2.64611513 +1 0.42136269 +1
N -6.78603189 +1 -2.48352443 +1 0.61903495 +1
O -7.41889882 +1 -1.82771689 +1 -0.28897069 +1
O -6.12940910 +1 -0.13198017 +1 -2.83518973 +1
N -5.58450575 +1 -1.25452806 +1 -3.12553122 +1
O -4.50862727 +1 -1.53206396 +1 -2.48677430 +1
O -6.14155531 +1 0.21677316 +1 1.57533200 +1
N -6.89565690 +1 1.07983379 +1 1.00004295 +1
O -6.42395648 +1 1.61106845 +1 -0.06598390 +1
O -6.02191348 +1 -1.97326042 +1 -3.97339486 +1
O -7.94590981 +1 1.41078053 +1 1.46227197 +1
O -7.34824958 +1 -2.95405925 +1 1.55887414 +1
H -0.98289920 +1 -0.72686890 +1 -0.46409410 +1
H 1.49427330 +1 -0.97864927 +1 -0.77399587 +1
H 2.96789394 +1 1.06095643 +1 -0.67257366 +1
H -5.01234899 +1 3.43490090 +1 -0.15646506 +1
H -5.90321437 +1 4.89374725 +1 -1.92900522 +1
H -4.58140570 +1 5.33088894 +1 -3.99365978 +1
H -2.33654815 +1 4.29403298 +1 -4.28181154 +1
H -1.40130315 +1 2.82855317 +1 -2.53257438 +1
H -1.34092736 +1 4.27611155 +1 1.27904936 +1
H -4.15798838 +1 1.14908770 +1 2.43588237 +1
H -1.63522978 +1 5.32292413 +1 3.49303435 +1
H -3.17492296 +1 4.31729970 +1 5.17237992 +1
H -4.42290991 +1 2.23138948 +1 4.63104167 +1
H 3.63393146 +1 5.22067871 +1 -2.39154703 +1
H 2.91085419 +1 6.63381772 +1 -4.30116737 +1
H 0.51017651 +1 7.21758965 +1 -4.59313607 +1
H -1.18381676 +1 6.38091621 +1 -2.97507218 +1
H -0.49921477 +1 4.96356694 +1 -1.06726338 +1

H 2.37178159 +1 3.04123850 +1 2.52684937 +1
H 1.75700182 +1 4.05952112 +1 4.69108415 +1
H 0.75408365 +1 6.33460287 +1 4.77167963 +1
H 0.34724655 +1 7.59215342 +1 2.66403251 +1
H 0.94708904 +1 6.60503710 +1 0.48259822 +1

κ^1 -1-Ho

C -1.35759603 +1 0.93318758 +1 -1.78581754 +1
C -0.07852700 +1 0.75771631 +1 -2.34383119 +1
C 0.95562504 +1 1.63240611 +1 -1.99898819 +1
C -1.52051323 +1 1.99926573 +1 -0.90481858 +1
C 0.66258319 +1 2.66172315 +1 -1.09184095 +1
N -0.54395070 +1 2.86782524 +1 -0.54322390 +1
P -3.05922718 +1 2.48696622 +1 -0.03602628 +1
C -3.78852328 +1 3.92068462 +1 -0.89058073 +1
C -5.15835346 +1 3.87745244 +1 -1.15700614 +1
C -5.75339337 +1 4.95845441 +1 -1.81971757 +1
C -4.97820281 +1 6.05501767 +1 -2.20698045 +1
C -3.60389486 +1 6.07998308 +1 -1.93726702 +1
C -2.99942144 +1 5.00580962 +1 -1.27799827 +1
C -2.65394038 +1 2.88958110 +1 1.69754501 +1
C -2.57390891 +1 4.21568939 +1 2.12424333 +1
C -2.44700179 +1 1.82380126 +1 2.57578601 +1
C -2.25654169 +1 4.48052186 +1 3.46066181 +1
C -2.03579228 +1 3.42329213 +1 4.35144990 +1
C -2.13351414 +1 2.09970043 +1 3.91251254 +1
P 1.94104635 +1 3.89387419 +1 -0.50480283 +1
C 1.07796109 +1 5.52596930 +1 -0.48904129 +1
C 1.49311531 +1 6.44470190 +1 -1.45275517 +1
C 0.89105092 +1 7.70893350 +1 -1.49498393 +1
C -0.10758383 +1 8.03762694 +1 -0.57362861 +1
C -0.51046888 +1 7.10773707 +1 0.39183579 +1
C 0.08728230 +1 5.84283136 +1 0.43733102 +1
C 2.26551376 +1 3.41171681 +1 1.24551852 +1
C 1.24984600 +1 3.15449433 +1 2.16484849 +1
C 1.58935871 +1 2.78527103 +1 3.47103036 +1
C 2.93484677 +1 2.67627341 +1 3.84156081 +1
C 3.94433662 +1 2.93410581 +1 2.90977863 +1
C 3.61012049 +1 3.30241421 +1 1.60016273 +1
O 3.16173927 +1 3.87066332 +1 -1.38641962 +1
O -4.05763297 +1 1.29004508 +1 -0.07033625 +1
Ho -5.23504998 +1 -0.69918419 +1 -0.03660359 +1
O -3.83695340 +1 -1.00799583 +1 1.85431346 +1
N -3.95721485 +1 -2.28677738 +1 2.00115310 +1
O -4.73262970 +1 -2.72814672 +1 1.07558900 +1
O -5.74126982 +1 -1.90839085 +1 -2.00666626 +1
N -4.58812294 +1 -1.89687506 +1 -2.57334780 +1
O -3.77138713 +1 -1.22891023 +1 -1.82369810 +1
O -7.26109396 +1 -0.41237881 +1 1.14095323 +1
N -7.80278789 +1 0.51762823 +1 0.42925490 +1
O -6.99725814 +1 0.81356200 +1 -0.53089573 +1

O	-4.31157056 +1	-2.39740472 +1	-3.60369447 +1
O	-8.85211527 +1	1.01594869 +1	0.62965290 +1
O	-3.43664093 +1	-2.93033529 +1	2.84042790 +1
H	-2.17186737 +1	0.24466716 +1	-2.04801780 +1
H	0.09998604 +1	-0.06282252 +1	-3.04265960 +1
H	1.95868209 +1	1.51939398 +1	-2.42620439 +1
H	-5.78362540 +1	3.02079308 +1	-0.87083766 +1
H	-6.82215161 +1	4.93831400 +1	-2.03638843 +1
H	-5.44452800 +1	6.89426981 +1	-2.72547542 +1
H	-3.00269656 +1	6.93434585 +1	-2.24733917 +1
H	-1.92047496 +1	5.04160523 +1	-1.08795212 +1
H	-2.75963166 +1	5.05441040 +1	1.44782996 +1
H	-2.53326809 +1	0.77349428 +1	2.26289990 +1
H	-2.18924948 +1	5.50955387 +1	3.81180520 +1
H	-1.79405983 +1	3.63454492 +1	5.39439133 +1
H	-1.97609768 +1	1.27618453 +1	4.61043742 +1
H	2.28593051 +1	6.20089824 +1	-2.17201801 +1
H	1.20731327 +1	8.43609065 +1	-2.24143831 +1
H	-0.57042299 +1	9.02411552 +1	-0.60291334 +1
H	-1.28025828 +1	7.37412008 +1	1.11280282 +1
H	-0.23408258 +1	5.12739582 +1	1.19948315 +1
H	0.19098601 +1	3.22797386 +1	1.89690591 +1
H	0.80477096 +1	2.57844794 +1	4.19698190 +1
H	3.19560860 +1	2.38631136 +1	4.85949392 +1
H	4.99055480 +1	2.84608368 +1	3.19867402 +1
H	4.41121267 +1	3.49299255 +1	0.87441378 +1

κ^1 -1-Er

C	-0.75592580 +1	0.28961427 +1	-0.99148127 +1
C	0.56812076 +1	0.14585864 +1	-1.44353611 +1
C	1.48800441 +1	1.17545032 +1	-1.22870684 +1
C	-1.07627326 +1	1.47839540 +1	-0.34005907 +1
C	1.03876520 +1	2.32268707 +1	-0.55645037 +1
N	-0.21295930 +1	2.49758798 +1	-0.10778756 +1
P	-2.71639843 +1	1.91940605 +1	0.34264838 +1
C	-3.46635736 +1	3.27677667 +1	-0.61970720 +1
C	-4.77905103 +1	3.63141048 +1	-0.28813460 +1
C	-5.42788299 +1	4.61293765 +1	-1.04096504 +1
C	-4.76321375 +1	5.23487667 +1	-2.10548637 +1
C	-3.44776633 +1	4.88061061 +1	-2.41649024 +1
C	-2.79127926 +1	3.89081611 +1	-1.67322122 +1
C	-2.51189296 +1	2.43142217 +1	2.08211684 +1
C	-2.51081359 +1	3.78458477 +1	2.42331641 +1
C	-2.37759899 +1	1.43157630 +1	3.04625175 +1
C	-2.36279564 +1	4.14368275 +1	3.76736019 +1
C	-2.22526962 +1	3.15280821 +1	4.74657904 +1
C	-2.23265331 +1	1.80096309 +1	4.38919337 +1
P	2.15871135 +1	3.78297920 +1	-0.21792064 +1
C	1.21843379 +1	5.25716061 +1	-0.80517561 +1
C	1.83202662 +1	6.00172643 +1	-1.81241908 +1
C	1.18420261 +1	7.13847741 +1	-2.31295277 +1

C -0.06182359 +1 7.51291769 +1 -1.80216064 +1
 C -0.66623115 +1 6.75663289 +1 -0.79104302 +1
 C -0.02168376 +1 5.62212416 +1 -0.28530099 +1
 C 2.27996628 +1 3.88221282 +1 1.61856023 +1
 C 1.16743197 +1 3.88033668 +1 2.45714432 +1
 C 1.35621014 +1 3.95975039 +1 3.84143003 +1
 C 2.65013007 +1 4.04081945 +1 4.36879927 +1
 C 3.75871893 +1 4.03965677 +1 3.51726268 +1
 C 3.57540105 +1 3.95753162 +1 2.13102941 +1
 O 3.48830148 +1 3.60552901 +1 -0.90446119 +1
 O -3.65335576 +1 0.67333195 +1 0.24447971 +1
 Er -5.56589837 +1 -0.24147288 +1 -0.69251278 +1
 O -4.68145432 +1 -2.45407044 +1 -0.76836914 +1
 N -5.58468422 +1 -3.15358270 +1 -1.41358289 +1
 O -6.47288174 +1 -2.22369032 +1 -1.65800802 +1
 O -6.43970907 +1 1.12206687 +1 -2.44541442 +1
 N -5.45706726 +1 1.24177939 +1 -3.29855257 +1
 O -4.53023648 +1 0.53493630 +1 -2.69913339 +1
 O -6.86990664 +1 -0.51871884 +1 1.28648189 +1
 N -7.12544956 +1 0.69559489 +1 1.69611396 +1
 O -6.52195508 +1 1.39452315 +1 0.76433863 +1
 O -5.40917973 +1 1.82375327 +1 -4.30928751 +1
 O -7.71742951 +1 1.06368904 +1 2.63187865 +1
 O -5.58897984 +1 -4.28532548 +1 -1.69242835 +1
 H -1.48893600 +1 -0.50602510 +1 -1.15380067 +1
 H 0.86996075 +1 -0.76666802 +1 -1.96231050 +1
 H 2.52464773 +1 1.09192845 +1 -1.57762422 +1
 H -5.32720046 +1 3.16686879 +1 0.54570173 +1
 H -6.45806116 +1 4.88540519 +1 -0.80479150 +1
 H -5.27749894 +1 5.99501757 +1 -2.69630477 +1
 H -2.93132531 +1 5.36721306 +1 -3.24429447 +1
 H -1.76398206 +1 3.62878704 +1 -1.94291616 +1
 H -2.63077697 +1 4.57136547 +1 1.67344380 +1
 H -2.39191410 +1 0.36848331 +1 2.78461061 +1
 H -2.36333920 +1 5.19517854 +1 4.05351197 +1
 H -2.11857130 +1 3.43685273 +1 5.79481870 +1
 H -2.13084123 +1 1.03264205 +1 5.15594719 +1
 H 2.81134966 +1 5.71632758 +1 -2.21914813 +1
 H 1.65349734 +1 7.72951638 +1 -3.09799233 +1
 H -0.56454349 +1 8.39861118 +1 -2.19092411 +1
 H -1.63665650 +1 7.05312962 +1 -0.39824823 +1
 H -0.50502092 +1 5.04272589 +1 0.50501252 +1
 H 0.14834685 +1 3.81159009 +1 2.06605271 +1
 H 0.49477561 +1 3.95469751 +1 4.50690196 +1
 H 2.79395026 +1 4.10342382 +1 5.44740287 +1
 H 4.76467277 +1 4.10092837 +1 3.92935802 +1
 H 4.45326442 +1 3.94960828 +1 1.47175105 +1

κ^1 -1-Tm

C -0.40527565 +1 0.11156282 +1 -0.51094281 +1
 C 0.98112410 +1 -0.04835404 +1 -0.68507294 +1

C 1.82048023 +1 1.06649146 +1 -0.61077514 +1
C -0.86800537 +1 1.40325000 +1 -0.27232193 +1
C 1.22777579 +1 2.31501482 +1 -0.36739525 +1
N -0.08780787 +1 2.51029415 +1 -0.19754200 +1
P -2.60714616 +1 1.88851730 +1 0.02827717 +1
C -3.18355269 +1 3.02653149 +1 -1.27746082 +1
C -4.47661343 +1 3.54206272 +1 -1.14361381 +1
C -4.99323415 +1 4.35488467 +1 -2.15759544 +1
C -4.22130681 +1 4.64145321 +1 -3.28888106 +1
C -2.92919915 +1 4.12003386 +1 -3.40937683 +1
C -2.40464589 +1 3.30280121 +1 -2.40103985 +1
C -2.71906416 +1 2.69784806 +1 1.65749281 +1
C -2.10661551 +1 3.93660684 +1 1.85745041 +1
C -3.41964330 +1 2.05402839 +1 2.67876786 +1
C -2.21913496 +1 4.55285719 +1 3.10829569 +1
C -2.93343886 +1 3.92819099 +1 4.13678956 +1
C -3.52956162 +1 2.68084984 +1 3.92519903 +1
P 2.22519426 +1 3.89656158 +1 -0.24241671 +1
C 1.61391725 +1 4.94756338 +1 -1.62931966 +1
C 2.57500271 +1 5.37331895 +1 -2.54519498 +1
C 2.18254151 +1 6.18019823 +1 -3.62152254 +1
C 0.84181179 +1 6.54689353 +1 -3.76582407 +1
C -0.11333288 +1 6.10997319 +1 -2.83970362 +1
C 0.27283792 +1 5.30415939 +1 -1.76354468 +1
C 1.65408925 +1 4.67549352 +1 1.33277603 +1
C 1.72992992 +1 3.91521923 +1 2.49981991 +1
C 1.37792531 +1 4.50044185 +1 3.72243577 +1
C 0.96272966 +1 5.83520678 +1 3.76517754 +1
C 0.89374456 +1 6.58758541 +1 2.58829287 +1
C 1.24531393 +1 6.00709558 +1 1.36315028 +1
O 3.69548164 +1 3.59269129 +1 -0.31129293 +1
O -3.51661508 +1 0.61630465 +1 -0.00770013 +1
Tm -5.52140534 +1 -0.51386375 +1 -0.43025699 +1
O -5.41447490 +1 -2.70668112 +1 0.47727552 +1
N -6.61924742 +1 -3.12426182 +1 0.26000355 +1
O -7.23611186 +1 -2.15173939 +1 -0.33471115 +1
O -5.88647554 +1 0.17390574 +1 -2.68642027 +1
N -5.08924278 +1 -0.60787881 +1 -3.34521550 +1
O -4.52301658 +1 -1.33980914 +1 -2.43696237 +1
O -6.09880238 +1 0.24863974 +1 1.76721651 +1
N -6.59218285 +1 1.42295458 +1 1.53688699 +1
O -6.49794340 +1 1.56451426 +1 0.24807455 +1
O -4.91156929 +1 -0.63947788 +1 -4.50520631 +1
O -7.01493017 +1 2.19654329 +1 2.31252777 +1
O -7.06615099 +1 -4.17286660 +1 0.54239596 +1
H -1.07777921 +1 -0.74965781 +1 -0.56382068 +1
H 1.39523719 +1 -1.04086467 +1 -0.87592345 +1
H 2.90583801 +1 0.96899520 +1 -0.73705273 +1
H -5.11361784 +1 3.32628653 +1 -0.27615555 +1
H -6.00625417 +1 4.75131059 +1 -2.07069269 +1

H	-4.63308551 +1	5.26641599 +1	-4.08318943 +1
H	-2.33272163 +1	4.33799789 +1	-4.29529510 +1
H	-1.39498228 +1	2.90199026 +1	-2.52499784 +1
H	-1.53162170 +1	4.43484912 +1	1.07075668 +1
H	-3.88420868 +1	1.07102954 +1	2.54095666 +1
H	-1.74324706 +1	5.51851249 +1	3.28098545 +1
H	-3.02473416 +1	4.41528144 +1	5.10881972 +1
H	-4.08318857 +1	2.19417100 +1	4.72942660 +1
H	3.63089628 +1	5.09058483 +1	-2.44022055 +1
H	2.92353863 +1	6.52032008 +1	-4.34380196 +1
H	0.53754323 +1	7.17593936 +1	-4.60285962 +1
H	-1.15698098 +1	6.39801622 +1	-2.95656229 +1
H	-0.48578669 +1	4.96882314 +1	-1.05126346 +1
H	2.06325306 +1	2.87448810 +1	2.49187702 +1
H	1.43499865 +1	3.91724724 +1	4.64049763 +1
H	0.70003705 +1	6.29208054 +1	4.71938905 +1
H	0.57914636 +1	7.62930196 +1	2.62517018 +1
H	1.19801136 +1	6.61921479 +1	0.45875606 +1

κ^1 -1-Yb

C	-1.40046563 +1	0.95601627 +1	-1.83006960 +1
C	-0.13406435 +1	0.78038178 +1	-2.41569712 +1
C	0.91404943 +1	1.63932758 +1	-2.07338740 +1
C	-1.53679467 +1	2.00626941 +1	-0.92546234 +1
C	0.64704811 +1	2.65383793 +1	-1.14201596 +1
N	-0.54704118 +1	2.86022722 +1	-0.56637607 +1
P	-3.05727294 +1	2.47452389 +1	-0.01612524 +1
C	-3.80370227 +1	3.92945130 +1	-0.81739901 +1
C	-5.18109650 +1	3.89757134 +1	-1.04297600 +1
C	-5.79006286 +1	4.99516294 +1	-1.66494929 +1
C	-5.02131053 +1	6.09576601 +1	-2.05272154 +1
C	-3.63925500 +1	6.10913944 +1	-1.82392000 +1
C	-3.02082163 +1	5.01908505 +1	-1.20524469 +1
C	-2.62508140 +1	2.82982129 +1	1.72075357 +1
C	-2.47094732 +1	4.14363895 +1	2.16523639 +1
C	-2.47409959 +1	1.74213516 +1	2.58311033 +1
C	-2.13393982 +1	4.37188057 +1	3.50336788 +1
C	-1.96787989 +1	3.29160266 +1	4.37853031 +1
C	-2.14020627 +1	1.98176253 +1	3.92209654 +1
P	1.94968477 +1	3.86086984 +1	-0.55767602 +1
C	1.11001385 +1	5.50501538 +1	-0.52466848 +1
C	1.51215753 +1	6.41329986 +1	-1.50372551 +1
C	0.92407365 +1	7.68424603 +1	-1.53912717 +1
C	-0.04794851 +1	8.02990903 +1	-0.59579806 +1
C	-0.43735388 +1	7.11076896 +1	0.38535302 +1
C	0.14700748 +1	5.83933990 +1	0.42433769 +1
C	2.28744291 +1	3.36047778 +1	1.18507681 +1
C	1.27973999 +1	3.09760636 +1	2.11144439 +1
C	1.63010708 +1	2.71109177 +1	3.40980736 +1
C	2.97847486 +1	2.59029732 +1	3.76560578 +1
C	3.98008306 +1	2.85346762 +1	2.82684727 +1

C	3.63487932 +1	3.23948025 +1	1.52520951 +1
O	3.16118956 +1	3.82659709 +1	-1.45188392 +1
O	-4.05343571 +1	1.27650635 +1	-0.06741458 +1
Yb	-5.27217394 +1	-0.62571663 +1	-0.10637477 +1
O	-3.93720968 +1	-1.03241909 +1	1.78206916 +1
N	-4.01491860 +1	-2.33002153 +1	1.91331243 +1
O	-4.77677816 +1	-2.67579793 +1	0.92114023 +1
O	-5.82829677 +1	-1.69837485 +1	-2.11560034 +1
N	-4.70241981 +1	-1.71342355 +1	-2.75990749 +1
O	-3.88685657 +1	-1.10348321 +1	-1.93971390 +1
O	-7.31645638 +1	-0.40741703 +1	1.01188261 +1
N	-7.85798012 +1	0.62735110 +1	0.43576098 +1
O	-6.96103658 +1	0.97425748 +1	-0.44162261 +1
O	-4.46336611 +1	-2.15227110 +1	-3.81725356 +1
O	-8.89126537 +1	1.12863217 +1	0.65820093 +1
O	-3.51149085 +1	-3.00417900 +1	2.72604408 +1
H	-2.22732255 +1	0.27985259 +1	-2.08895963 +1
H	0.02424892 +1	-0.02777892 +1	-3.13335683 +1
H	1.90839204 +1	1.52527244 +1	-2.52028997 +1
H	-5.80364388 +1	3.03775637 +1	-0.75568973 +1
H	-6.86495384 +1	4.98396512 +1	-1.84942686 +1
H	-5.49839874 +1	6.94770957 +1	-2.53960251 +1
H	-3.04360840 +1	6.96708245 +1	-2.13440357 +1
H	-1.93664968 +1	5.04601871 +1	-1.04678132 +1
H	-2.61417333 +1	5.00057358 +1	1.50161096 +1
H	-2.62155662 +1	0.70251239 +1	2.25523252 +1
H	-2.00908733 +1	5.39051242 +1	3.86849578 +1
H	-1.71115363 +1	3.47484758 +1	5.42309137 +1
H	-2.02518307 +1	1.14160865 +1	4.60814052 +1
H	2.28474967 +1	6.15624456 +1	-2.24014327 +1
H	1.23020600 +1	8.40329035 +1	-2.29752366 +1
H	-0.50027034 +1	9.02140659 +1	-0.62022226 +1
H	-1.18613241 +1	7.39041532 +1	1.12320193 +1
H	-0.16205494 +1	5.13323618 +1	1.19968700 +1
H	0.21864483 +1	3.17887104 +1	1.85522012 +1
H	0.85146984 +1	2.49969329 +1	4.14087485 +1
H	3.24794985 +1	2.28685301 +1	4.77725995 +1
H	5.02848509 +1	2.75581765 +1	3.10423614 +1
H	4.43000935 +1	3.43394992 +1	0.79394180 +1

κ^1 -1-Lu

C	-1.20994197 +1	0.64207606 +1	-1.60873901 +1
C	0.08004149 +1	0.47696335 +1	-2.14448726 +1
C	1.08231279 +1	1.40203899 +1	-1.83953660 +1
C	-1.41562886 +1	1.74991648 +1	-0.79037376 +1
C	0.74740253 +1	2.47023329 +1	-0.99387983 +1
N	-0.47092487 +1	2.66804739 +1	-0.46882683 +1
P	-2.97880154 +1	2.23763998 +1	0.03277711 +1
C	-3.74954950 +1	3.58166121 +1	-0.92396882 +1
C	-5.11188385 +1	3.46932621 +1	-1.20654560 +1
C	-5.73456181 +1	4.48170638 +1	-1.94817057 +1

C -4.99385707 +1 5.57898694 +1 -2.39511737 +1
C -3.62602379 +1 5.67366879 +1 -2.10718906 +1
C -2.99400592 +1 4.66859208 +1 -1.37004921 +1
C -2.61093697 +1 2.77179847 +1 1.73836813 +1
C -2.60872659 +1 4.12504665 +1 2.07882770 +1
C -2.35655979 +1 1.77772380 +1 2.68547347 +1
C -2.32290924 +1 4.49225287 +1 3.39792598 +1
C -2.05654007 +1 3.50824437 +1 4.35749117 +1
C -2.07580079 +1 2.15577194 +1 4.00442484 +1
P 1.98455180 +1 3.76660008 +1 -0.45859838 +1
C 1.08505207 +1 5.37649991 +1 -0.54174809 +1
C 1.51847587 +1 6.26549629 +1 -1.52512139 +1
C 0.89300952 +1 7.51368378 +1 -1.64103465 +1
C -0.14760895 +1 7.85617214 +1 -0.77279839 +1
C -0.56949853 +1 6.95597329 +1 0.21263523 +1
C 0.05211205 +1 5.70762516 +1 0.33213930 +1
C 2.29223664 +1 3.38324742 +1 1.31894594 +1
C 1.26592583 +1 3.18641780 +1 2.24130610 +1
C 1.59008427 +1 2.88747846 +1 3.56906647 +1
C 2.93116127 +1 2.78790170 +1 3.95786266 +1
C 3.95147419 +1 2.98534373 +1 3.02319605 +1
C 3.63246025 +1 3.28357095 +1 1.69203997 +1
O 3.21965474 +1 3.72575199 +1 -1.31951161 +1
O -3.93183950 +1 1.00262163 +1 0.07178497 +1
Lu -5.02642593 +1 -0.95342322 +1 0.22284984 +1
O -3.63893327 +1 -1.09976728 +1 2.02053801 +1
N -3.74532682 +1 -2.37219036 +1 2.20002788 +1
O -4.51783211 +1 -2.88248543 +1 1.31131796 +1
O -5.63115698 +1 -2.20466459 +1 -1.57410746 +1
N -4.48122538 +1 -2.24281810 +1 -2.14043382 +1
O -3.62780183 +1 -1.54221787 +1 -1.47058277 +1
O -6.91143467 +1 -0.65295337 +1 1.44724317 +1
N -7.44956558 +1 0.24988520 +1 0.70369425 +1
O -6.69922281 +1 0.49837559 +1 -0.30908623 +1
O -4.23003863 +1 -2.82333931 +1 -3.13666788 +1
O -8.48108364 +1 0.77939673 +1 0.92701169 +1
O -3.20195118 +1 -2.97489108 +1 3.05742500 +1
H -1.99951336 +1 -0.08519793 +1 -1.83852565 +1
H 0.29217642 +1 -0.37480174 +1 -2.79478086 +1
H 2.09317417 +1 1.29747780 +1 -2.25033087 +1
H -5.71129263 +1 2.61057155 +1 -0.87228539 +1
H -6.79801349 +1 4.40683434 +1 -2.17841769 +1
H -5.48144286 +1 6.36464446 +1 -2.97444135 +1
H -3.05186274 +1 6.52835173 +1 -2.46381643 +1
H -1.92065756 +1 4.75724697 +1 -1.16670432 +1
H -2.83200540 +1 4.90732219 +1 1.34831037 +1
H -2.38111026 +1 0.70655244 +1 2.43897581 +1
H -2.31641362 +1 5.54383507 +1 3.68216537 +1
H -1.84090108 +1 3.79917884 +1 5.38684957 +1
H -1.88265031 +1 1.38938322 +1 4.75619812 +1

H	2.34326608 +1	6.01059265 +1	-2.20361877 +1
H	1.22338949 +1	8.21781447 +1	-2.40325114 +1
H	-0.62883918 +1	8.83044971 +1	-0.85930357 +1
H	-1.37307410 +1	7.23294068 +1	0.89144425 +1
H	-0.28397040 +1	5.01536803 +1	1.10978332 +1
H	0.21028390 +1	3.25500930 +1	1.95865375 +1
H	0.79726204 +1	2.72816075 +1	4.29799194 +1
H	3.18021727 +1	2.55311536 +1	4.99283261 +1
H	4.99405544 +1	2.90502205 +1	3.32687815 +1
H	4.44172055 +1	3.42891336 +1	0.96488444 +1

Cartesian coordinates of atoms in the optimized geometries for κ^2 -1-M complexes

κ^2 -1-Ce

O	0.00213545 +1	0.00163078 +1	0.00095631 +1
Ce	2.54299898 +1	0.00007706 +1	-0.00046353 +1
N	0.19400832 +1	2.74620483 +1	-0.00042820 +1
C	0.58515528 +1	4.00121778 +1	-0.29881850 +1
P	2.43927257 +1	3.92516199 +1	-0.46100337 +1
O	2.89392752 +1	2.46000698 +1	-0.54736133 +1
C	-0.29426651 +1	5.07373898 +1	-0.45861628 +1
C	-1.66456469 +1	4.81134413 +1	-0.31085544 +1
C	-2.10619756 +1	3.51158681 +1	-0.01902373 +1
C	-1.13074690 +1	2.52547899 +1	0.12894514 +1
C	3.08526736 +1	4.80776319 +1	0.99870769 +1
C	2.72423937 +1	4.31932051 +1	2.25592786 +1
C	3.24292107 +1	4.93682860 +1	3.40053953 +1
C	4.11348093 +1	6.02303673 +1	3.27684920 +1
C	4.47548870 +1	6.49592939 +1	2.00934288 +1
C	3.96758284 +1	5.88102093 +1	0.86091099 +1
C	2.85696669 +1	4.83476195 +1	-1.98960059 +1
C	3.51312212 +1	4.11286005 +1	-2.98543057 +1
C	2.53082023 +1	6.18321684 +1	-2.15900886 +1
C	3.84861968 +1	4.75756234 +1	-4.18537791 +1
C	3.52611498 +1	6.10269769 +1	-4.36850798 +1
C	2.86837719 +1	6.81735497 +1	-3.35604455 +1
P	-1.28540503 +1	0.70093086 +1	0.46390299 +1
C	-1.58537907 +1	0.52152285 +1	2.25213240 +1
C	-0.89547116 +1	-0.49283325 +1	2.91404389 +1
C	-1.09206227 +1	-0.65869013 +1	4.29405282 +1
C	-1.96261371 +1	0.18444593 +1	4.98342900 +1
C	-2.64530612 +1	1.20573202 +1	4.30387113 +1
C	-2.45424278 +1	1.38065758 +1	2.93304655 +1
C	-2.74068615 +1	0.14446286 +1	-0.48803542 +1
C	-2.48688734 +1	-0.43191345 +1	-1.73316966 +1
C	-3.56597290 +1	-0.87976881 +1	-2.50725785 +1
C	-4.87116407 +1	-0.75244568 +1	-2.02635708 +1
C	-5.10907031 +1	-0.18155121 +1	-0.76873450 +1

C	-4.03884375 +1	0.26611558 +1	0.01058623 +1
O	2.66958962 +1	-2.57907127 +1	0.01616718 +1
N	2.06211294 +1	-2.87579879 +1	1.10557323 +1
O	1.69714521 +1	-1.78322332 +1	1.67977386 +1
O	4.28655784 +1	0.28894928 +1	1.88452624 +1
N	3.66209065 +1	1.04040615 +1	2.70826477 +1
O	2.50142238 +1	1.32364465 +1	2.22513054 +1
O	4.21880830 +1	-0.16672353 +1	-1.95926729 +1
N	3.43790922 +1	-0.13873588 +1	-2.97481927 +1
O	2.22233363 +1	-0.06869026 +1	-2.56410760 +1
O	4.07659194 +1	1.43680874 +1	3.74990475 +1
O	3.77871364 +1	-0.15101423 +1	-4.11380493 +1
O	1.85705797 +1	-3.97019814 +1	1.51694948 +1
H	0.05228450 +1	6.08022105 +1	-0.69500462 +1
H	-2.38966868 +1	5.61867155 +1	-0.43152625 +1
H	-3.17097382 +1	3.29507747 +1	0.07202509 +1
H	2.06447109 +1	3.44631918 +1	2.38293040 +1
H	2.98143265 +1	4.55110556 +1	4.38724367 +1
H	4.52199938 +1	6.49763800 +1	4.17030952 +1
H	5.16568623 +1	7.33355300 +1	1.91889479 +1
H	4.28638390 +1	6.24983671 +1	-0.11711851 +1
H	3.77705997 +1	3.05449473 +1	-2.85466808 +1
H	2.02549822 +1	6.75743152 +1	-1.38094667 +1
H	4.36108028 +1	4.20129194 +1	-4.97227691 +1
H	3.78659766 +1	6.60362604 +1	-5.30236474 +1
H	2.62398002 +1	7.86781499 +1	-3.50751577 +1
H	-0.19136791 +1	-1.16994510 +1	2.39879737 +1
H	-0.54967495 +1	-1.44595994 +1	4.82119212 +1
H	-2.11164734 +1	0.05608376 +1	6.05650306 +1
H	-3.31727340 +1	1.86332809 +1	4.85228616 +1
H	-2.97981102 +1	2.19090179 +1	2.42772998 +1
H	-1.46520503 +1	-0.55373728 +1	-2.11794262 +1
H	-3.38159331 +1	-1.33441817 +1	-3.48130316 +1
H	-5.71006769 +1	-1.10477098 +1	-2.62861757 +1
H	-6.12886318 +1	-0.09765629 +1	-0.39576798 +1
H	-4.24377253 +1	0.68539896 +1	0.99737378 +1

κ^2 -1-Pr

O	0.00139459 +1	-0.00068951 +1	0.00520654 +1
Pr	2.52039699 +1	-0.00012701 +1	0.00002187 +1
N	0.17505412 +1	2.74364944 +1	-0.00553490 +1
C	0.59668535 +1	3.96492379 +1	-0.38258052 +1
P	2.45487127 +1	3.92710180 +1	-0.24369068 +1
O	2.94692778 +1	2.47927257 +1	-0.10974929 +1
C	-0.25489119 +1	4.98944505 +1	-0.80360102 +1
C	-1.62907304 +1	4.71208999 +1	-0.83282018 +1
C	-2.10143067 +1	3.44165244 +1	-0.46382020 +1
C	-1.15306971 +1	2.50303718 +1	-0.06220388 +1
C	2.82550458 +1	4.92591895 +1	1.23482385 +1
C	3.29375557 +1	4.23293205 +1	2.35029727 +1
C	3.58326338 +1	4.94906153 +1	3.52195607 +1

C 3.39321425 +1 6.33019113 +1 3.56157453 +1
C 2.90586804 +1 7.01105398 +1 2.43498296 +1
C 2.61637200 +1 6.30799451 +1 1.26483914 +1
C 3.06048888 +1 4.69955596 +1 -1.78212218 +1
C 2.72120270 +1 4.04054473 +1 -2.96726256 +1
C 3.89211035 +1 5.81875056 +1 -1.78341347 +1
C 3.20212462 +1 4.53832632 +1 -4.18349938 +1
C 4.01806752 +1 5.67387247 +1 -4.20098736 +1
C 4.36344304 +1 6.31317369 +1 -3.00462585 +1
P -1.30772486 +1 0.70695400 +1 0.39221986 +1
C -1.63585211 +1 0.63084572 +1 2.18263484 +1
C -0.98394559 +1 -0.36973534 +1 2.90239468 +1
C -1.20605930 +1 -0.46360227 +1 4.28464485 +1
C -2.06406244 +1 0.43530867 +1 4.91846496 +1
C -2.70740585 +1 1.44080664 +1 4.18051213 +1
C -2.49107103 +1 1.54469027 +1 2.80563901 +1
C -2.73974523 +1 0.06531938 +1 -0.53897486 +1
C -2.46174557 +1 -0.66346599 +1 -1.69538498 +1
C -3.52720876 +1 -1.18068314 +1 -2.44494149 +1
C -4.84290008 +1 -0.96807749 +1 -2.02752058 +1
C -5.10573963 +1 -0.24144254 +1 -0.85791525 +1
C -4.04954044 +1 0.27561960 +1 -0.10329302 +1
O 2.10640031 +1 -2.49382020 +1 -0.35983391 +1
N 1.54935447 +1 -2.81682220 +1 0.74776075 +1
O 1.52095112 +1 -1.79881054 +1 1.53022829 +1
O 3.10973474 +1 0.96873758 +1 2.30074116 +1
N 4.24537191 +1 0.40410789 +1 2.51122352 +1
O 4.55019004 +1 -0.33692636 +1 1.51449219 +1
O 3.97254686 +1 -0.09712015 +1 -2.10526458 +1
N 3.23128029 +1 0.50776310 +1 -2.94936327 +1
O 2.11564674 +1 0.83110071 +1 -2.39560878 +1
O 4.91213773 +1 0.56898836 +1 3.48241067 +1
O 3.51750324 +1 0.75687737 +1 -4.07790399 +1
O 1.11281728 +1 -3.89042447 +1 1.01245938 +1
H 0.12060361 +1 5.96607887 +1 -1.11092737 +1
H -2.33361687 +1 5.48112622 +1 -1.15569013 +1
H -3.16591836 +1 3.20980286 +1 -0.51027468 +1
H 3.43473213 +1 3.13770559 +1 2.34459985 +1
H 3.95593228 +1 4.41617264 +1 4.39870572 +1
H 3.62145762 +1 6.88657918 +1 4.47189461 +1
H 2.75527466 +1 8.08837896 +1 2.47829825 +1
H 2.23262558 +1 6.85327825 +1 0.40163612 +1
H 2.10281198 +1 3.13028182 +1 -2.97773506 +1
H 4.20208167 +1 6.31428427 +1 -0.86043219 +1
H 2.95447858 +1 4.02540919 +1 -5.11423543 +1
H 4.39685424 +1 6.05621151 +1 -5.15016675 +1
H 5.01336992 +1 7.18710161 +1 -3.02344686 +1
H -0.29174876 +1 -1.08879901 +1 2.42858864 +1
H -0.69590968 +1 -1.23980639 +1 4.85843466 +1
H -2.23365989 +1 0.36166549 +1 5.99371705 +1

H	-3.36951964 +1	2.14181762 +1	4.68560569 +1
H	-2.98592101 +1	2.34312328 +1	2.25235469 +1
H	-1.43224759 +1	-0.85024656 +1	-2.02805837 +1
H	-3.32432675 +1	-1.75536575 +1	-3.34938017 +1
H	-5.67127720 +1	-1.37425760 +1	-2.61003128 +1
H	-6.13438082 +1	-0.09051644 +1	-0.53363156 +1
H	-4.27396425 +1	0.81817661 +1	0.81688214 +1

κ^2 -1-Nd

O	0.00088343 +1	0.00075563 +1	-0.00041847 +1
Nd	2.42976942 +1	0.00006943 +1	0.00013372 +1
C	0.31924729 +1	5.04329761 +1	-0.00000921 +1
C	-0.85592735 +1	4.92142852 +1	-0.75963637 +1
C	-1.49921563 +1	3.67945338 +1	-0.87976718 +1
C	0.77750315 +1	3.89706563 +1	0.64855744 +1
C	-0.94211863 +1	2.60557343 +1	-0.18421243 +1
N	0.15592553 +1	2.70129361 +1	0.59103645 +1
P	2.34426397 +1	3.50669984 +1	1.57120510 +1
C	1.91252181 +1	3.54194250 +1	3.34226624 +1
C	1.87939564 +1	2.32194685 +1	4.01584255 +1
C	1.54714956 +1	2.30715465 +1	5.37915891 +1
C	1.25199050 +1	3.49902987 +1	6.04091333 +1
C	1.28352090 +1	4.71887847 +1	5.34822597 +1
C	1.61513976 +1	4.74300270 +1	3.99301846 +1
C	3.54820928 +1	4.81488255 +1	1.15793895 +1
C	3.34655217 +1	6.14764639 +1	1.52573865 +1
C	4.67836647 +1	4.42002394 +1	0.44286292 +1
C	4.29405921 +1	7.10505684 +1	1.15982785 +1
C	5.43218825 +1	6.72376985 +1	0.43355484 +1
C	5.62571370 +1	5.38830914 +1	0.07824653 +1
P	-1.31162169 +1	0.78583695 +1	-0.20568344 +1
C	-2.51511451 +1	0.46173847 +1	1.12758839 +1
C	-2.34337159 +1	-0.71366147 +1	1.85768129 +1
C	-3.24539121 +1	-1.00915777 +1	2.88978201 +1
C	-4.29174405 +1	-0.13021379 +1	3.17637626 +1
C	-4.44419400 +1	1.05299042 +1	2.43999117 +1
C	-3.54970954 +1	1.35623962 +1	1.41046301 +1
C	-2.07143785 +1	0.43789159 +1	-1.82601088 +1
C	-3.43498367 +1	0.65606290 +1	-2.04451500 +1
C	-3.97325700 +1	0.38108726 +1	-3.30259898 +1
C	-3.15060906 +1	-0.11557929 +1	-4.32493812 +1
C	-1.79368626 +1	-0.33829476 +1	-4.09015308 +1
C	-1.24249017 +1	-0.06242378 +1	-2.82966497 +1
O	2.85152141 +1	2.12473351 +1	1.10582722 +1
O	2.45392581 +1	-0.42473361 +1	2.39152240 +1
N	3.68757666 +1	-0.76635730 +1	2.47850873 +1
O	4.28261392 +1	-0.79283861 +1	1.35369327 +1
O	2.05307160 +1	1.81943992 +1	-1.57432565 +1
N	3.25865901 +1	1.91262439 +1	-1.98351757 +1
O	4.03341819 +1	1.01749025 +1	-1.51327360 +1
O	1.70887207 +1	-1.17487382 +1	-2.00214049 +1

N 1.58814595 +1 -2.32916659 +1 -1.46240288 +1
 O 2.08116847 +1 -2.38500517 +1 -0.28817636 +1
 O 3.62621122 +1 2.77641462 +1 -2.72455739 +1
 O 1.06579636 +1 -3.25211116 +1 -2.00781913 +1
 O 4.21467584 +1 -1.01958679 +1 3.51798619 +1
 H 0.85335774 +1 5.99276531 +1 0.04951580 +1
 H -1.25335281 +1 5.79131171 +1 -1.28650443 +1
 H -2.37909772 +1 3.56709539 +1 -1.51404436 +1
 H 2.10467560 +1 1.36474385 +1 3.51719138 +1
 H 1.52566021 +1 1.35687329 +1 5.91535029 +1
 H 0.99687729 +1 3.48625910 +1 7.10135648 +1
 H 1.05285284 +1 5.64468262 +1 5.87232313 +1
 H 1.64213069 +1 5.70408519 +1 3.47136592 +1
 H 2.47292120 +1 6.45910380 +1 2.10595398 +1
 H 4.85194941 +1 3.37252738 +1 0.15991994 +1
 H 4.15525130 +1 8.14825326 +1 1.43923517 +1
 H 6.16912082 +1 7.47621190 +1 0.14823258 +1
 H 6.51127028 +1 5.09056720 +1 -0.48590672 +1
 H -1.51872520 +1 -1.40868842 +1 1.65193730 +1
 H -3.12330745 +1 -1.92535859 +1 3.46869400 +1
 H -4.99319551 +1 -0.36198303 +1 3.97920587 +1
 H -5.25887604 +1 1.73603656 +1 2.67549452 +1
 H -3.67535510 +1 2.28886802 +1 0.85874882 +1
 H -4.09611761 +1 1.02191672 +1 -1.25739120 +1
 H -5.03321018 +1 0.54197218 +1 -3.49159830 +1
 H -3.57747961 +1 -0.33284091 +1 -5.30508225 +1
 H -1.15342533 +1 -0.73406991 +1 -4.88066319 +1
 H -0.16952215 +1 -0.25980882 +1 -2.67040101 +1

κ^2 -1-Sm

O -0.00007060 +1 0.00002833 +1 0.00026594 +1
 Sm 2.40882644 +1 0.00004646 +1 -0.00000118 +1
 C -0.26056441 +1 5.08846524 +1 -0.00000895 +1
 C -1.59816582 +1 4.84247958 +1 -0.35132714 +1
 C -2.09949450 +1 3.53125803 +1 -0.37421479 +1
 C 0.52017523 +1 3.98432239 +1 0.34118788 +1
 C -1.22166319 +1 2.50905944 +1 -0.01053838 +1
 N 0.05641013 +1 2.71897012 +1 0.35763498 +1
 P 2.32218580 +1 3.78794256 +1 0.77712417 +1
 C 2.45458601 +1 4.25349666 +1 2.53382697 +1
 C 2.72376096 +1 3.23394949 +1 3.44514351 +1
 C 2.82217333 +1 3.55029642 +1 4.80927814 +1
 C 2.65129412 +1 4.86641839 +1 5.23695080 +1
 C 2.37932368 +1 5.88257761 +1 4.30756028 +1
 C 2.28028474 +1 5.57709274 +1 2.95017794 +1
 C 3.24032645 +1 4.94300404 +1 -0.29653573 +1
 C 3.12170973 +1 6.33003413 +1 -0.17608836 +1
 C 4.07119618 +1 4.36327827 +1 -1.25506629 +1
 C 3.84282227 +1 7.15217733 +1 -1.04287808 +1
 C 4.67673696 +1 6.58332480 +1 -2.01767575 +1
 C 4.79245256 +1 5.19707883 +1 -2.12281552 +1

P -1.39200394 +1 0.65502798 +1 -0.01371452 +1
C -2.33143362 +1 0.19301260 +1 1.47981404 +1
C -1.83667172 +1 -0.89285931 +1 2.20234694 +1
C -2.50638740 +1 -1.29305468 +1 3.36760024 +1
C -3.64706259 +1 -0.60715950 +1 3.78819961 +1
C -4.12844686 +1 0.48586266 +1 3.05274053 +1
C -3.46681884 +1 0.89389721 +1 1.89238337 +1
C -2.33837251 +1 0.26637180 +1 -1.52184514 +1
C -3.70449161 +1 -0.01920399 +1 -1.47970590 +1
C -4.37060066 +1 -0.32202766 +1 -2.67000298 +1
C -3.66579850 +1 -0.34825721 +1 -3.88133744 +1
C -2.29685502 +1 -0.07320592 +1 -3.90645865 +1
C -1.62019410 +1 0.23386061 +1 -2.71821110 +1
O 2.75295620 +1 2.33553966 +1 0.50033337 +1
O 2.38390426 +1 0.29369074 +1 2.42316917 +1
N 1.86098323 +1 -0.82968732 +1 2.75233640 +1
O 1.64517152 +1 -1.55774184 +1 1.72869893 +1
O 4.52364197 +1 -1.16375047 +1 0.24556846 +1
N 4.34865022 +1 -2.08424570 +1 -0.63094802 +1
O 3.20018617 +1 -1.96179486 +1 -1.18944076 +1
O 3.49140787 +1 1.17309441 +1 -1.86043065 +1
N 2.47500411 +1 1.30788127 +1 -2.61767238 +1
O 1.43187093 +1 0.76694396 +1 -2.10820460 +1
O 5.13876150 +1 -2.93032771 +1 -0.88922334 +1
O 2.48117764 +1 1.88819164 +1 -3.66069974 +1
O 1.59204650 +1 -1.13670928 +1 3.87252258 +1
H 0.13810374 +1 6.10236485 +1 -0.01317202 +1
H -2.24816179 +1 5.67588745 +1 -0.62542744 +1
H -3.12656786 +1 3.33453500 +1 -0.68169874 +1
H 2.85973920 +1 2.18323687 +1 3.13476764 +1
H 3.03318477 +1 2.75777301 +1 5.52916662 +1
H 2.72988842 +1 5.11095190 +1 6.29709755 +1
H 2.25014888 +1 6.90770449 +1 4.64988831 +1
H 2.07709632 +1 6.38300567 +1 2.23883431 +1
H 2.49011323 +1 6.78957691 +1 0.58975991 +1
H 4.18239198 +1 3.26915365 +1 -1.35214691 +1
H 3.76507805 +1 8.23506896 +1 -0.96328006 +1
H 5.23796219 +1 7.23044996 +1 -2.69335413 +1
H 5.44204584 +1 4.75261078 +1 -2.87896968 +1
H -0.93448602 +1 -1.44158243 +1 1.88791029 +1
H -2.12636713 +1 -2.13792957 +1 3.94484152 +1
H -4.16632864 +1 -0.91906040 +1 4.69567013 +1
H -5.01596309 +1 1.01732608 +1 3.39229408 +1
H -3.84772567 +1 1.75349999 +1 1.34033473 +1
H -4.26649111 +1 -0.02683139 +1 -0.54345786 +1
H -5.43522117 +1 -0.54956417 +1 -2.65732433 +1
H -4.18933115 +1 -0.59165379 +1 -4.80691175 +1
H -1.74639140 +1 -0.10563963 +1 -4.84752455 +1
H -0.53482682 +1 0.43325984 +1 -2.75915273 +1

κ^2 -1-Eu

O	-0.00357260 +1	-0.00183414 +1	0.00042283 +1
Eu	2.38618464 +1	-0.00001986 +1	-0.00068772 +1
C	-0.40387328 +1	5.02778564 +1	0.00069684 +1
C	-1.71020295 +1	4.75841887 +1	-0.44277024 +1
C	-2.19180025 +1	3.44061026 +1	-0.48603829 +1
C	0.35705005 +1	3.94004416 +1	0.42469053 +1
C	-1.33339894 +1	2.43521919 +1	-0.03702491 +1
N	-0.09605059 +1	2.66966929 +1	0.43684322 +1
P	2.13099197 +1	3.72684949 +1	0.94431521 +1
C	2.17358114 +1	3.98036644 +1	2.74738228 +1
C	1.55446814 +1	5.09091653 +1	3.33062887 +1
C	1.61320683 +1	5.25054499 +1	4.71535603 +1
C	2.28139030 +1	4.30036356 +1	5.50366563 +1
C	2.88522008 +1	3.19294911 +1	4.90939963 +1
C	2.83263827 +1	3.02419338 +1	3.51680257 +1
C	3.09006152 +1	5.02944512 +1	0.09713203 +1
C	3.97869422 +1	4.60459828 +1	-0.89052257 +1
C	2.95300057 +1	6.37978559 +1	0.42547221 +1
C	4.74017243 +1	5.56088760 +1	-1.57721849 +1
C	4.60647833 +1	6.91510160 +1	-1.26528337 +1
C	3.71507549 +1	7.32597280 +1	-0.26393235 +1
P	-1.43084531 +1	0.57534298 +1	-0.07288082 +1
C	-2.43286180 +1	0.04446748 +1	1.35041275 +1
C	-3.62631937 +1	0.68712722 +1	1.69218810 +1
C	-4.34866306 +1	0.22894454 +1	2.79474492 +1
C	-3.87174192 +1	-0.85809241 +1	3.54401839 +1
C	-2.67499646 +1	-1.48375559 +1	3.19557036 +1
C	-1.94030441 +1	-1.03113668 +1	2.08859175 +1
C	-2.25539825 +1	0.17444711 +1	-1.64617249 +1
C	-1.45982449 +1	0.20851434 +1	-2.79289106 +1
C	-2.03866072 +1	-0.11283563 +1	-4.02792221 +1
C	-3.38732976 +1	-0.46914666 +1	-4.09737061 +1
C	-4.16965300 +1	-0.50944469 +1	-2.93513487 +1
C	-3.60124653 +1	-0.19355723 +1	-1.69836465 +1
O	2.61396714 +1	2.32859394 +1	0.51180138 +1
O	1.30558419 +1	-1.75984752 +1	1.18662733 +1
N	0.97086660 +1	-2.27392545 +1	0.06817886 +1
O	1.79890765 +1	-2.12621314 +1	-0.88950262 +1
O	3.59578325 +1	0.72879095 +1	-2.02549584 +1
N	2.67625183 +1	1.11794336 +1	-2.85649561 +1
O	1.59139988 +1	0.90950442 +1	-2.15753093 +1
O	4.54661503 +1	-0.81730955 +1	0.85777377 +1
N	4.63100528 +1	-0.36466900 +1	2.07256849 +1
O	3.50864428 +1	0.30363280 +1	2.17423838 +1
O	2.77978963 +1	1.55916440 +1	-3.94122181 +1
O	5.48104259 +1	-0.49595902 +1	2.87093848 +1
O	-0.04133734 +1	-2.91090963 +1	-0.05308976 +1
H	-0.01188760 +1	6.04438243 +1	-0.01020634 +1
H	-2.34712042 +1	5.57915407 +1	-0.77880377 +1

H	-3.18753162 +1	3.22405094 +1	-0.87316197 +1
H	1.02136127 +1	5.83367007 +1	2.73638614 +1
H	1.14001036 +1	6.10869299 +1	5.18903274 +1
H	2.32370287 +1	4.43038441 +1	6.58590760 +1
H	3.39795222 +1	2.44819957 +1	5.52045185 +1
H	3.30856652 +1	2.13034054 +1	3.07190915 +1
H	4.10452154 +1	3.54165778 +1	-1.13991988 +1
H	2.27801686 +1	6.71849863 +1	1.21279993 +1
H	5.43866368 +1	5.24086285 +1	-2.35188328 +1
H	5.20069169 +1	7.65835909 +1	-1.79916919 +1
H	3.62448629 +1	8.38355748 +1	-0.02084822 +1
H	-4.00600640 +1	1.53843265 +1	1.12677020 +1
H	-5.28114943 +1	0.71312174 +1	3.07883354 +1
H	-4.44159297 +1	-1.21168126 +1	4.40438937 +1
H	-2.30126272 +1	-2.32613448 +1	3.77977151 +1
H	-0.99085869 +1	-1.53525402 +1	1.83271394 +1
H	-0.38753462 +1	0.47033319 +1	-2.75898245 +1
H	-1.42718502 +1	-0.09668079 +1	-4.93069307 +1
H	-3.83355754 +1	-0.72613949 +1	-5.05903622 +1
H	-5.21654907 +1	-0.80180605 +1	-2.99602463 +1
H	-4.21993566 +1	-0.25694076 +1	-0.80066228 +1

κ^2 -1-Gd

O	0.00313825 +1	0.00278230 +1	0.00097065 +1
Gd	2.36001841 +1	-0.00019416 +1	0.00058276 +1
C	-0.16984105 +1	5.07839181 +1	-0.00020841 +1
C	-1.53044252 +1	4.86097049 +1	-0.26946016 +1
C	-2.05774306 +1	3.55923464 +1	-0.26824328 +1
C	0.60858715 +1	3.95587637 +1	0.28464988 +1
C	-1.17894170 +1	2.51683605 +1	0.02606495 +1
N	0.12545890 +1	2.69883192 +1	0.31294211 +1
P	2.43299893 +1	3.74773930 +1	0.59411000 +1
C	2.75558269 +1	4.28916606 +1	2.30514954 +1
C	2.21301977 +1	5.46306994 +1	2.83293150 +1
C	2.50134193 +1	5.80567027 +1	4.15564311 +1
C	3.31752863 +1	4.97221673 +1	4.93497225 +1
C	3.84460991 +1	3.79742139 +1	4.39660010 +1
C	3.56355485 +1	3.44617600 +1	3.06827231 +1
C	3.25621903 +1	4.84227008 +1	-0.60663859 +1
C	3.70879624 +1	6.11608924 +1	-0.25614457 +1
C	3.44162779 +1	4.32652246 +1	-1.89012248 +1
C	4.34066904 +1	6.90039119 +1	-1.22427860 +1
C	4.52386216 +1	6.40150630 +1	-2.52163293 +1
C	4.07875460 +1	5.12046762 +1	-2.85371546 +1
P	-1.38534635 +1	0.66488592 +1	0.07714154 +1
C	-2.26547882 +1	0.31073580 +1	1.63202434 +1
C	-1.54487668 +1	-0.32934864 +1	2.63859608 +1
C	-2.18351850 +1	-0.61192997 +1	3.85640619 +1
C	-3.51756442 +1	-0.25415283 +1	4.04674949 +1
C	-4.23053773 +1	0.39061868 +1	3.02361274 +1
C	-3.60404377 +1	0.67479157 +1	1.81033355 +1

C -2.38995403 +1 0.21675434 +1 -1.37856158 +1
 C -1.75088216 +1 -0.54345967 +1 -2.35768408 +1
 C -2.46557254 +1 -0.90801546 +1 -3.50863802 +1
 C -3.79561857 +1 -0.51537655 +1 -3.65952800 +1
 C -4.42806425 +1 0.24187506 +1 -2.66152766 +1
 C -3.72418981 +1 0.60916766 +1 -1.51394533 +1
 O 2.82019727 +1 2.26970478 +1 0.41501916 +1
 O 2.28023368 +1 1.40236568 +1 -1.97665210 +1
 N 1.73246524 +1 0.59952288 +1 -2.82162110 +1
 O 1.50601648 +1 -0.50786525 +1 -2.21528022 +1
 O 1.52755038 +1 -0.31170721 +1 2.25174045 +1
 N 2.59051786 +1 -0.07796764 +1 2.94297860 +1
 O 3.53284670 +1 0.19533521 +1 2.11749827 +1
 O 3.08902503 +1 -2.29019639 +1 0.07003403 +1
 N 4.21788017 +1 -2.20828705 +1 -0.54905912 +1
 O 4.37673387 +1 -0.97182570 +1 -0.87899852 +1
 O 2.66794207 +1 -0.08957852 +1 4.12634281 +1
 O 4.96283028 +1 -3.09654251 +1 -0.77123512 +1
 O 1.46247183 +1 0.85397588 +1 -3.94909537 +1
 H 0.24872209 +1 6.08429114 +1 -0.03200653 +1
 H -2.18064715 +1 5.70849549 +1 -0.49545896 +1
 H -3.10781053 +1 3.38769620 +1 -0.50186696 +1
 H 1.56576757 +1 6.11531057 +1 2.24634064 +1
 H 2.09006164 +1 6.71652665 +1 4.58741937 +1
 H 3.53671679 +1 5.24393489 +1 5.96865248 +1
 H 4.47135511 +1 3.14367739 +1 5.00582601 +1
 H 3.98148100 +1 2.50951776 +1 2.66116589 +1
 H 3.59724550 +1 6.51315391 +1 0.75466314 +1
 H 3.11075748 +1 3.30954824 +1 -2.16853027 +1
 H 4.70241086 +1 7.89536323 +1 -0.97037034 +1
 H 5.02317922 +1 7.01609063 +1 -3.27195112 +1
 H 4.23256229 +1 4.72793114 +1 -3.85949019 +1
 H -0.48575389 +1 -0.61955050 +1 2.51393938 +1
 H -1.62704572 +1 -1.11343090 +1 4.64977933 +1
 H -4.01312620 +1 -0.47609398 +1 4.99277335 +1
 H -5.27266982 +1 0.66295447 +1 3.17995804 +1
 H -4.17712420 +1 1.16840291 +1 1.02028036 +1
 H -0.70074275 +1 -0.87035434 +1 -2.25553276 +1
 H -1.97309833 +1 -1.49960792 +1 -4.28243555 +1
 H -4.35001788 +1 -0.79908354 +1 -4.55519789 +1
 H -5.46874365 +1 0.53646459 +1 -2.78453220 +1
 H -4.23721969 +1 1.18373772 +1 -0.73748221 +1

κ^2 -1-Tb

O -0.00079515 +1 -0.00057977 +1 0.00014833 +1
 Tb 2.40673811 +1 0.00004193 +1 0.00006848 +1
 C -0.43903893 +1 5.03708448 +1 0.00013580 +1
 C -1.77164610 +1 4.75241366 +1 0.34005276 +1
 C -2.24532717 +1 3.42958768 +1 0.33300755 +1
 C 0.36351516 +1 3.95877233 +1 -0.37453995 +1
 C -1.34764680 +1 2.43649916 +1 -0.05785683 +1

N -0.07840542 +1 2.68879311 +1 -0.43230074 +1
P 2.18394116 +1 3.79257271 +1 -0.73594653 +1
C 3.00206390 +1 4.94784113 +1 0.41256429 +1
C 3.24612508 +1 4.47061052 +1 1.70117812 +1
C 3.88205102 +1 5.31090136 +1 2.62541182 +1
C 4.26764228 +1 6.59936144 +1 2.24977796 +1
C 4.02495755 +1 7.05964813 +1 0.94807381 +1
C 3.39357718 +1 6.22892490 +1 0.01895895 +1
C 2.44426474 +1 4.29911287 +1 -2.46826601 +1
C 1.83278500 +1 5.43017928 +1 -3.01336566 +1
C 3.27537906 +1 3.47581190 +1 -3.22805406 +1
C 2.07457482 +1 5.75059988 +1 -4.35111099 +1
C 2.91353007 +1 4.93749387 +1 -5.12724874 +1
C 3.50981617 +1 3.80458055 +1 -4.57102849 +1
P -1.42574861 +1 0.57367852 +1 -0.10998973 +1
C -2.43136504 +1 0.06514779 +1 1.32621778 +1
C -1.76478758 +1 -0.63801969 +1 2.32937657 +1
C -2.48144595 +1 -1.04422460 +1 3.46499129 +1
C -3.84015987 +1 -0.74812918 +1 3.57752433 +1
C -4.49870128 +1 -0.04649631 +1 2.55633077 +1
C -3.79327997 +1 0.36153132 +1 1.42335930 +1
C -2.25245936 +1 0.15460264 +1 -1.67882454 +1
C -3.59312123 +1 0.48612318 +1 -1.89966593 +1
C -4.18388989 +1 0.15631618 +1 -3.11934735 +1
C -3.43334335 +1 -0.50084282 +1 -4.10690752 +1
C -2.09747307 +1 -0.82552415 +1 -3.87451116 +1
C -1.49468084 +1 -0.49678930 +1 -2.64992850 +1
O 2.63370812 +1 2.33711959 +1 -0.52173258 +1
O 3.56261098 +1 0.18876281 +1 -2.13642215 +1
N 2.65159195 +1 -0.22240772 +1 -2.93926583 +1
O 1.61373645 +1 -0.52607670 +1 -2.24008609 +1
O 1.54572834 +1 -0.48359831 +1 2.22322888 +1
N 1.72055657 +1 0.65405820 +1 2.78473108 +1
O 2.25680954 +1 1.45962338 +1 1.93949976 +1
O 3.29810419 +1 -2.25736878 +1 0.05092776 +1
N 4.41899849 +1 -2.06567889 +1 0.65788827 +1
O 4.50232381 +1 -0.80696796 +1 0.92280029 +1
O 1.41226190 +1 0.93286922 +1 3.89857030 +1
O 5.22122051 +1 -2.89131752 +1 0.92259383 +1
O 2.73485851 +1 -0.28896284 +1 -4.12085471 +1
H -0.05793707 +1 6.05699947 +1 0.04861869 +1
H -2.44030297 +1 5.56412342 +1 0.63360698 +1
H -3.26682578 +1 3.20479582 +1 0.63749743 +1
H 2.96297474 +1 3.44975855 +1 2.01385797 +1
H 4.08209249 +1 4.94878682 +1 3.63454608 +1
H 4.76666040 +1 7.24995292 +1 2.96936986 +1
H 4.34005141 +1 8.06101443 +1 0.65983612 +1
H 3.23466536 +1 6.59690496 +1 -0.99654737 +1
H 1.16676898 +1 6.06538085 +1 -2.42872285 +1
H 3.74769825 +1 2.57283028 +1 -2.80695059 +1

H	1.60922073 +1	6.62826912 +1	-4.79639192 +1
H	3.09647143 +1	5.19145434 +1	-6.17241302 +1
H	4.15513834 +1	3.16681643 +1	-5.17756534 +1
H	-0.69214597 +1	-0.88847930 +1	2.25802416 +1
H	-1.96822793 +1	-1.59243129 +1	4.25698175 +1
H	-4.39626302 +1	-1.06499699 +1	4.46095872 +1
H	-5.56085522 +1	0.17290574 +1	2.64935541 +1
H	-4.32526008 +1	0.89210659 +1	0.62874717 +1
H	-4.19511304 +1	0.98965077 +1	-1.13806496 +1
H	-5.22687359 +1	0.40349623 +1	-3.30827191 +1
H	-3.90054195 +1	-0.75813393 +1	-5.05832471 +1
H	-1.51144481 +1	-1.33625419 +1	-4.64023105 +1
H	-0.43421129 +1	-0.76225216 +1	-2.49371252 +1

κ^2 -1-Dy

O	0.00182816 +1	0.00122767 +1	0.00015053 +1
Dy	2.39196643 +1	0.00001265 +1	-0.00005267 +1
C	-0.34379779 +1	5.07232226 +1	0.00024985 +1
C	-1.69396017 +1	4.81242539 +1	0.28710055 +1
C	-2.18446911 +1	3.49609838 +1	0.28856910 +1
C	0.46103775 +1	3.97540282 +1	-0.30894982 +1
C	-1.28206430 +1	2.48199830 +1	-0.03297534 +1
N	0.00705177 +1	2.70874597 +1	-0.34936291 +1
P	2.28953921 +1	3.79113665 +1	-0.61765385 +1
C	3.09052269 +1	4.94652778 +1	0.54259875 +1
C	3.36535747 +1	4.44066880 +1	1.81422584 +1
C	3.98828502 +1	5.27289950 +1	2.75442556 +1
C	4.33073942 +1	6.58229322 +1	2.41080538 +1
C	4.05818690 +1	7.07131986 +1	1.12555608 +1
C	3.43947397 +1	6.24879688 +1	0.18069701 +1
C	2.58920317 +1	4.27009588 +1	-2.35037242 +1
C	2.04640419 +1	5.43170084 +1	-2.90534959 +1
C	3.37511289 +1	3.39628646 +1	-3.10148269 +1
C	2.31627533 +1	5.73276897 +1	-4.24166068 +1
C	3.11484188 +1	4.87051026 +1	-5.00813505 +1
C	3.63942469 +1	3.70724421 +1	-4.44375792 +1
P	-1.40681196 +1	0.62170654 +1	-0.06044475 +1
C	-2.36654949 +1	0.16161793 +1	1.42207218 +1
C	-1.66036598 +1	-0.49679031 +1	2.42899844 +1
C	-2.33694092 +1	-0.86961948 +1	3.60009378 +1
C	-3.69482229 +1	-0.58360210 +1	3.74463460 +1
C	-4.39254252 +1	0.07506072 +1	2.72086110 +1
C	-3.72759713 +1	0.44859908 +1	1.55203657 +1
C	-2.28909599 +1	0.20406667 +1	-1.59829084 +1
C	-1.55378344 +1	-0.43973690 +1	-2.59226814 +1
C	-2.18887624 +1	-0.77193709 +1	-3.79917882 +1
C	-3.53393787 +1	-0.45857514 +1	-3.99162234 +1
C	-4.26133507 +1	0.19052438 +1	-2.98162714 +1
C	-3.63820417 +1	0.52388242 +1	-1.77891652 +1
O	2.72541620 +1	2.33720614 +1	-0.36518591 +1
O	3.64399872 +1	0.22825570 +1	-2.01106774 +1

N	2.78354832	+1	-0.53691690	+1	-2.56086257	+1
O	1.56745432	+1	-0.38068978	+1	-2.19896328	+1
O	1.69422677	+1	-0.64916548	+1	2.17735028	+1
N	2.35578105	+1	0.34843412	+1	2.63010207	+1
O	2.36514274	+1	1.40644835	+1	1.91999688	+1
O	2.99731463	+1	-2.28288037	+1	-0.21484401	+1
N	3.71852227	+1	-2.14849711	+1	0.83195749	+1
O	4.28984457	+1	-1.01335669	+1	0.99419364	+1
O	2.88197190	+1	0.31045619	+1	3.70863939	+1
O	3.89664983	+1	-3.05376748	+1	1.59286292	+1
O	3.08562516	+1	-1.30754452	+1	-3.43040608	+1
H	0.04682320	+1	6.08899305	+1	0.03735243	+1
H	-2.36460175	+1	5.63945925	+1	0.52862735	+1
H	-3.22328030	+1	3.29205323	+1	0.54466884	+1
H	3.11685621	+1	3.40292318	+1	2.09868713	+1
H	4.21222914	+1	4.88858105	+1	3.75028163	+1
H	4.81938100	+1	7.22721215	+1	3.14257844	+1
H	4.34029377	+1	8.08930470	+1	0.86214941	+1
H	3.25819907	+1	6.64010094	+1	-0.82187988	+1
H	1.41184304	+1	6.10547748	+1	-2.32908280	+1
H	3.78815228	+1	2.46509158	+1	-2.67666086	+1
H	1.90511208	+1	6.63345024	+1	-4.69407831	+1
H	3.32161896	+1	5.11105810	+1	-6.05198820	+1
H	4.25302921	+1	3.03178695	+1	-5.04204314	+1
H	-0.58767417	+1	-0.73790359	+1	2.33345470	+1
H	-1.79422484	+1	-1.38687429	+1	4.39318600	+1
H	-4.21994479	+1	-0.87540632	+1	4.65528063	+1
H	-5.45362139	+1	0.28731130	+1	2.83965938	+1
H	-4.29014423	+1	0.94543682	+1	0.75637451	+1
H	-0.48765987	+1	-0.69724244	+1	-2.46525076	+1
H	-1.62158366	+1	-1.27769262	+1	-4.58215945	+1
H	-4.02650358	+1	-0.71904145	+1	-4.92931628	+1
H	-5.31166006	+1	0.42830374	+1	-3.13962070	+1
H	-4.22213378	+1	1.01974297	+1	-0.99824405	+1

κ^2 -1-Ho

O	0.00165841	+1	0.00134820	+1	-0.00033535	+1
Ho	2.35175880	+1	-0.00036997	+1	-0.00019186	+1
C	-0.21836394	+1	5.06706989	+1	0.00023023	+1
C	-1.57531456	+1	4.83928386	+1	0.28000528	+1
C	-2.09568654	+1	3.53455658	+1	0.27530670	+1
C	0.56336370	+1	3.95135287	+1	-0.30171745	+1
C	-1.21441110	+1	2.49973276	+1	-0.03720166	+1
N	0.08489261	+1	2.69311061	+1	-0.33839080	+1
P	2.38715169	+1	3.74270155	+1	-0.61453801	+1
C	3.21086004	+1	4.83854665	+1	0.58514259	+1
C	3.38995510	+1	4.33030762	+1	1.87241978	+1
C	4.02846030	+1	5.12736835	+1	2.83262070	+1
C	4.48096185	+1	6.40397938	+1	2.49348301	+1
C	4.30334364	+1	6.89554520	+1	1.19257639	+1
C	3.67018698	+1	6.10808595	+1	0.22793108	+1

C 2.71253633 +1 4.28711429 +1 -2.32401098 +1
C 2.15073029 +1 5.44940146 +1 -2.85716107 +1
C 3.54310366 +1 3.45986439 +1 -3.08003437 +1
C 2.44156932 +1 5.79598180 +1 -4.17836343 +1
C 3.27958880 +1 4.97813571 +1 -4.95075990 +1
C 3.82657907 +1 3.81495449 +1 -4.40682050 +1
P -1.39505799 +1 0.64509376 +1 -0.09321076 +1
C -2.41090821 +1 0.17810922 +1 1.34874365 +1
C -1.77921498 +1 -0.59166205 +1 2.32508786 +1
C -2.50372143 +1 -0.97095126 +1 3.46515586 +1
C -3.83592427 +1 -0.58280144 +1 3.60846119 +1
C -4.46075221 +1 0.18412873 +1 2.61307626 +1
C -3.74746397 +1 0.56568999 +1 1.47607206 +1
C -2.25574374 +1 0.28141689 +1 -1.65681147 +1
C -3.59426089 +1 0.63963720 +1 -1.84753899 +1
C -4.20928670 +1 0.35027657 +1 -3.06536655 +1
C -3.48522581 +1 -0.29390747 +1 -4.08109222 +1
C -2.15156285 +1 -0.64601305 +1 -3.87838440 +1
C -1.52439827 +1 -0.35794581 +1 -2.65580842 +1
O 2.77650171 +1 2.26458844 +1 -0.43624888 +1
O 3.56704413 +1 0.19937152 +1 -2.05828020 +1
N 2.61918975 +1 -0.05693219 +1 -2.87525502 +1
O 1.53723676 +1 -0.30043070 +1 -2.22752779 +1
O 1.48362807 +1 -0.54251215 +1 2.16975130 +1
N 1.67990798 +1 0.57971028 +1 2.74842764 +1
O 2.23264025 +1 1.40514635 +1 1.93644842 +1
O 3.07572354 +1 -2.26020104 +1 -0.08669636 +1
N 4.17951670 +1 -2.14627716 +1 0.56225181 +1
O 4.33996293 +1 -0.92180830 +1 0.91713800 +1
O 1.37095758 +1 0.83694112 +1 3.86927493 +1
O 4.92971010 +1 -3.03141870 +1 0.79642133 +1
O 2.71139836 +1 -0.04839777 +1 -4.06131809 +1
H 0.19508681 +1 6.07485478 +1 0.03757092 +1
H -2.22807796 +1 5.68137109 +1 0.51874150 +1
H -3.14177546 +1 3.35521679 +1 0.52075689 +1
H 3.05324068 +1 3.31737137 +1 2.15663654 +1
H 4.17790204 +1 4.74026883 +1 3.84128656 +1
H 4.98177776 +1 7.02080934 +1 3.24105514 +1
H 4.67047706 +1 7.88710172 +1 0.93316591 +1
H 3.56282879 +1 6.49921774 +1 -0.78579091 +1
H 1.48647276 +1 6.08946175 +1 -2.27606795 +1
H 3.97729912 +1 2.53307389 +1 -2.66847587 +1
H 2.01503822 +1 6.69780666 +1 -4.61425774 +1
H 3.50014232 +1 5.25238381 +1 -5.98348772 +1
H 4.47019270 +1 3.17286121 +1 -5.01078679 +1
H -0.72764415 +1 -0.91502098 +1 2.22887369 +1
H -2.01671792 +1 -1.57001070 +1 4.23665610 +1
H -4.39789689 +1 -0.87778096 +1 4.49577316 +1
H -5.50318841 +1 0.47511984 +1 2.72980539 +1
H -4.25470123 +1 1.14719810 +1 0.70121897 +1

H -4.17629503 +1 1.13315384 +1 -1.06409220 +1
H -5.25103758 +1 0.61839922 +1 -3.23117943 +1
H -3.97154138 +1 -0.51938398 +1 -5.03102300 +1
H -1.58612134 +1 -1.14659146 +1 -4.66590536 +1
H -0.46564072 +1 -0.64322640 +1 -2.52206828 +1

κ^2 -1-Er

O 0.00000000 +1 0.00000000 +1 0.00000000 +1
Er 2.32986200 +1 0.00000000 +1 0.00000000 +1
C 0.01370487 +1 5.10434676 +1 0.00000000 +1
C -1.36124642 +1 4.92747060 +1 -0.22200305 +1
C -1.92009205 +1 3.63991298 +1 -0.21917904 +1
C 0.77604745 +1 3.95817038 +1 0.22624588 +1
C -1.05667310 +1 2.57153731 +1 0.02572502 +1
N 0.26509870 +1 2.71049252 +1 0.25044505 +1
P 2.60132629 +1 3.71469103 +1 0.51420397 +1
C 2.92312595 +1 4.34247345 +1 2.19339292 +1
C 3.22088706 +1 3.39494152 +1 3.17102821 +1
C 3.47089278 +1 3.82842795 +1 4.48260355 +1
C 3.41954233 +1 5.18685614 +1 4.79236525 +1
C 3.11748021 +1 6.12943488 +1 3.79670180 +1
C 2.86864860 +1 5.70773133 +1 2.49069681 +1
C 3.45949384 +1 4.71232842 +1 -0.75017558 +1
C 3.40026251 +1 6.10808890 +1 -0.77179601 +1
C 4.18611749 +1 3.99852455 +1 -1.70276315 +1
C 4.07426870 +1 6.80165051 +1 -1.77780413 +1
C 4.80321905 +1 6.09690542 +1 -2.74802663 +1
C 4.86109337 +1 4.70360746 +1 -2.71054705 +1
P -1.34933709 +1 0.73299270 +1 0.05666014 +1
C -2.21530830 +1 0.35896530 +1 1.61790317 +1
C -1.70226627 +1 -0.71006397 +1 2.35252258 +1
C -2.31370135 +1 -1.05258441 +1 3.56737170 +1
C -3.41430940 +1 -0.32654339 +1 4.02462806 +1
C -3.91275350 +1 0.75113038 +1 3.27739312 +1
C -3.30965223 +1 1.10123866 +1 2.06755900 +1
C -2.40509245 +1 0.38051628 +1 -1.38480521 +1
C -3.79546554 +1 0.29506519 +1 -1.28652738 +1
C -4.53915513 +1 0.01271942 +1 -2.43476015 +1
C -3.88831988 +1 -0.19240524 +1 -3.65973864 +1
C -2.49660236 +1 -0.11767415 +1 -3.73990220 +1
C -1.74142462 +1 0.16728374 +1 -2.59371378 +1
O 2.93890122 +1 2.22318552 +1 0.34956542 +1
O 3.31497912 +1 0.91850106 +1 -1.99179796 +1
N 2.32145353 +1 1.02164236 +1 -2.82005901 +1
O 1.32543861 +1 0.58192666 +1 -2.10349697 +1
O 1.53125060 +1 -1.21023978 +1 1.91761513 +1
N 1.85946328 +1 -0.46276724 +1 2.92575637 +1
O 2.43501899 +1 0.54721424 +1 2.33416878 +1
O 2.97061663 +1 -2.10154738 +1 -0.94679851 +1
N 4.16333720 +1 -2.32394574 +1 -0.46650541 +1
O 4.34300496 +1 -1.26305983 +1 0.27221600 +1

O	1.66791814 +1	-0.63183162 +1	4.07441812 +1
O	4.88071267 +1	-3.23179842 +1	-0.64943471 +1
O	2.31013530 +1	1.43230688 +1	-3.92335717 +1
H	0.45212189 +1	6.10140472 +1	-0.01742447 +1
H	-1.99719727 +1	5.79516979 +1	-0.40786864 +1
H	-2.98235662 +1	3.49625620 +1	-0.41645031 +1
H	3.26166735 +1	2.31166561 +1	2.94827914 +1
H	3.70580475 +1	3.09429246 +1	5.25447094 +1
H	3.61584669 +1	5.52258991 +1	5.81140314 +1
H	3.08297425 +1	7.18790843 +1	4.04736661 +1
H	2.64556602 +1	6.45599041 +1	1.72501659 +1
H	2.85238732 +1	6.67299609 +1	-0.01256944 +1
H	4.24842334 +1	2.89486917 +1	-1.68781290 +1
H	4.04117637 +1	7.88912504 +1	-1.81092702 +1
H	5.32828349 +1	6.64395111 +1	-3.53228944 +1
H	5.43019932 +1	4.15405629 +1	-3.46217220 +1
H	-0.82477322 +1	-1.28741164 +1	2.01064340 +1
H	-1.91967791 +1	-1.88484491 +1	4.15304084 +1
H	-3.88878037 +1	-0.59387569 +1	4.96992771 +1
H	-4.76764129 +1	1.31510483 +1	3.64635127 +1
H	-3.70230533 +1	1.94978578 +1	1.50719486 +1
H	-4.31880414 +1	0.42700271 +1	-0.33790450 +1
H	-5.62384522 +1	-0.06005475 +1	-2.37897242 +1
H	-4.47407330 +1	-0.41818870 +1	-4.55180537 +1
H	-1.99002583 +1	-0.28927716 +1	-4.69019533 +1
H	-0.63886623 +1	0.20765324 +1	-2.67224335 +1

κ^2 -1-Tm

O	0.00155333 +1	0.00136059 +1	0.00001849 +1
Tm	2.35953318 +1	-0.00002153 +1	-0.00018188 +1
C	-0.33143241 +1	5.04615953 +1	0.00043019 +1
C	-1.67655260 +1	4.79076258 +1	0.31262549 +1
C	-2.17637057 +1	3.47763994 +1	0.30340815 +1
C	0.45828909 +1	3.94894656 +1	-0.34552455 +1
C	-1.28934903 +1	2.46354451 +1	-0.05632129 +1
N	-0.00537013 +1	2.68640102 +1	-0.39887078 +1
P	2.28025139 +1	3.75136128 +1	-0.67919829 +1
C	3.10523532 +1	4.87466899 +1	0.49493669 +1
C	3.31767802 +1	4.38129757 +1	1.78289074 +1
C	3.95776223 +1	5.19902969 +1	2.72446936 +1
C	4.37844858 +1	6.48138253 +1	2.36633169 +1
C	4.16704168 +1	6.95811513 +1	1.06499477 +1
C	3.53206658 +1	6.14991875 +1	0.11878372 +1
C	2.58216762 +1	4.27485411 +1	-2.39940631 +1
C	1.99122394 +1	5.41603006 +1	-2.94617095 +1
C	3.42538703 +1	3.45406519 +1	-3.14840539 +1
C	2.26582819 +1	5.74864812 +1	-4.27452176 +1
C	3.11669799 +1	4.93764564 +1	-5.03995687 +1
C	3.69250002 +1	3.79497122 +1	-4.48223950 +1
P	-1.41214550 +1	0.60389075 +1	-0.11424079 +1
C	-2.43548988 +1	0.10696817 +1	1.31288471 +1

C -1.79823913 +1 -0.64644912 +1 2.29824138 +1
 C -2.53003011 +1 -1.04756534 +1 3.42612239 +1
 C -3.87472029 +1 -0.69698713 +1 3.54842682 +1
 C -4.50457843 +1 0.05410990 +1 2.54425620 +1
 C -3.78405516 +1 0.45737865 +1 1.41927133 +1
 C -2.24476609 +1 0.21123336 +1 -1.68643711 +1
 C -3.57889240 +1 0.57000861 +1 -1.90544492 +1
 C -4.17550122 +1 0.25945379 +1 -3.12727925 +1
 C -3.43753786 +1 -0.40600055 +1 -4.11891271 +1
 C -2.10839427 +1 -0.75805148 +1 -3.88823943 +1
 C -1.49977653 +1 -0.44865469 +1 -2.66140738 +1
 O 2.69108589 +1 2.28191194 +1 -0.48023129 +1
 O 3.56065309 +1 0.21226520 +1 -2.04226460 +1
 N 2.63105849 +1 -0.11885228 +1 -2.85462268 +1
 O 1.56295715 +1 -0.40454917 +1 -2.20115465 +1
 O 1.48108449 +1 -0.53926478 +1 2.13726980 +1
 N 1.64636198 +1 0.59948608 +1 2.69017043 +1
 O 2.20505901 +1 1.42742263 +1 1.88786444 +1
 O 3.16723109 +1 -2.23248898 +1 -0.03900536 +1
 N 4.26509109 +1 -2.08072587 +1 0.61624035 +1
 O 4.36863458 +1 -0.84090947 +1 0.94639323 +1
 O 1.30234446 +1 0.87003935 +1 3.79893312 +1
 O 5.04297260 +1 -2.93320858 +1 0.87093005 +1
 O 2.72703202 +1 -0.13709721 +1 -4.03958253 +1
 H 0.06808969 +1 6.05904381 +1 0.04759410 +1
 H -2.33554738 +1 5.61786155 +1 0.58427973 +1
 H -3.20989129 +1 3.27630946 +1 0.58246842 +1
 H 3.00569117 +1 3.36489334 +1 2.08147355 +1
 H 4.13331750 +1 4.82393515 +1 3.73336556 +1
 H 4.88050496 +1 7.11440143 +1 3.09935232 +1
 H 4.50922680 +1 7.95454629 +1 0.79068087 +1
 H 3.39783029 +1 6.52995965 +1 -0.89591914 +1
 H 1.31641352 +1 6.04977320 +1 -2.37023330 +1
 H 3.88186482 +1 2.54331212 +1 -2.72558870 +1
 H 1.81666451 +1 6.63402162 +1 -4.72119146 +1
 H 3.32472923 +1 5.20091258 +1 -6.07809594 +1
 H 4.34634255 +1 3.15830962 +1 -5.08077044 +1
 H -0.73691698 +1 -0.94016131 +1 2.21827145 +1
 H -2.03901395 +1 -1.63404520 +1 4.20459486 +1
 H -4.44243823 +1 -1.00931347 +1 4.42608105 +1
 H -5.55648836 +1 0.31565764 +1 2.64456371 +1
 H -4.29465064 +1 1.02655627 +1 0.63770738 +1
 H -4.17135288 +1 1.08033250 +1 -1.14106932 +1
 H -5.21342077 +1 0.52801024 +1 -3.31495198 +1
 H -3.90927041 +1 -0.64795190 +1 -5.07214789 +1
 H -1.53203950 +1 -1.27490865 +1 -4.65704353 +1
 H -0.44441687 +1 -0.73423020 +1 -2.50587687 +1

κ^2 -1-Yb

O 0.00279967 +1 0.00272056 +1 0.00182892 +1
 Yb 2.29042581 +1 -0.00086296 +1 -0.00030628 +1

C -0.13977607 +1 5.06230863 +1 -0.00041155 +1
C -1.50012110 +1 4.86032554 +1 0.28365173 +1
C -2.04489694 +1 3.56553772 +1 0.28658391 +1
C 0.62038073 +1 3.93127601 +1 -0.29910447 +1
C -1.18367013 +1 2.51310641 +1 -0.02283839 +1
N 0.11779526 +1 2.68218385 +1 -0.32852154 +1
P 2.43732795 +1 3.67518164 +1 -0.61885033 +1
C 3.30042046 +1 4.76905709 +1 0.55361886 +1
C 3.51939732 +1 4.25649544 +1 1.83282395 +1
C 4.18768384 +1 5.05051649 +1 2.77540940 +1
C 4.62974459 +1 6.32790010 +1 2.42630291 +1
C 4.41223336 +1 6.82359216 +1 1.13277936 +1
C 3.74908150 +1 6.03958137 +1 0.18592221 +1
C 2.75951020 +1 4.17890063 +1 -2.34098867 +1
C 2.22809949 +1 5.34855711 +1 -2.88925875 +1
C 3.55516283 +1 3.31240847 +1 -3.09022604 +1
C 2.51540567 +1 5.66242387 +1 -4.21927254 +1
C 3.31958209 +1 4.80516559 +1 -4.98516963 +1
C 3.83548818 +1 3.63515749 +1 -4.42604380 +1
P -1.38900409 +1 0.66056207 +1 -0.06642290 +1
C -2.38179468 +1 0.21343312 +1 1.39763109 +1
C -1.74365229 +1 -0.56455759 +1 2.36293451 +1
C -2.45301569 +1 -0.93253366 +1 3.51620202 +1
C -3.77660121 +1 -0.52495968 +1 3.68301951 +1
C -4.40804044 +1 0.25066169 +1 2.69854291 +1
C -3.71005405 +1 0.62081605 +1 1.54831445 +1
C -2.28996332 +1 0.29385656 +1 -1.60568021 +1
C -3.61564615 +1 0.70305361 +1 -1.78413672 +1
C -4.26334409 +1 0.40631933 +1 -2.98291584 +1
C -3.58459413 +1 -0.29619231 +1 -3.99151374 +1
C -2.26369192 +1 -0.69885046 +1 -3.80068873 +1
C -1.60335936 +1 -0.40348647 +1 -2.59720488 +1
O 2.78725748 +1 2.19019335 +1 -0.41454189 +1
O 3.39960000 +1 0.17603369 +1 -2.08882576 +1
N 2.46006039 +1 -0.11947677 +1 -2.92190927 +1
O 1.42419894 +1 -0.34078675 +1 -2.17491614 +1
O 1.46538220 +1 -0.47865023 +1 2.17234745 +1
N 1.70870283 +1 0.61951119 +1 2.80474130 +1
O 2.25695085 +1 1.38983782 +1 1.91911605 +1
O 2.97711960 +1 -2.24767839 +1 -0.06522114 +1
N 4.12285162 +1 -2.20082250 +1 0.54037029 +1
O 4.26709413 +1 -0.94978180 +1 0.84787864 +1
O 1.46167785 +1 0.88038864 +1 3.93014320 +1
O 4.86047668 +1 -3.08926340 +1 0.76010476 +1
O 2.51720493 +1 -0.15507547 +1 -4.10071764 +1
H 0.29222352 +1 6.06235423 +1 0.03113832 +1
H -2.13670294 +1 5.71535160 +1 0.51977395 +1
H -3.09348388 +1 3.40688908 +1 0.53491004 +1
H 3.19053618 +1 3.24145034 +1 2.12202573 +1
H 4.36810899 +1 4.66041370 +1 3.77763130 +1

H	5.15352459 +1	6.94250132 +1	3.15972990 +1
H	4.77180425 +1	7.81571211 +1	0.86539324 +1
H	3.61078344 +1	6.43353921 +1	-0.82273084 +1
H	1.58976227 +1	6.01883315 +1	-2.31329468 +1
H	3.96229285 +1	2.37743721 +1	-2.66630224 +1
H	2.11262894 +1	6.56918052 +1	-4.66715771 +1
H	3.53781310 +1	5.05440048 +1	-6.02463613 +1
H	4.45276419 +1	2.96298241 +1	-5.02448286 +1
H	-0.69764745 +1	-0.90200108 +1	2.24773430 +1
H	-1.96135584 +1	-1.53863187 +1	4.27899760 +1
H	-4.32695476 +1	-0.81146188 +1	4.58031972 +1
H	-5.44374018 +1	0.55700673 +1	2.83389040 +1
H	-4.22230093 +1	1.20952392 +1	0.78275776 +1
H	-4.16219347 +1	1.24201391 +1	-1.00558172 +1
H	-5.29553547 +1	0.71368306 +1	-3.13966867 +1
H	-4.09665874 +1	-0.52710409 +1	-4.92645666 +1
H	-1.73398281 +1	-1.24481414 +1	-4.58258876 +1
H	-0.55344639 +1	-0.72738821 +1	-2.47041803 +1

κ^2 -1-Lu

O	-0.00148528 +1	-0.00087212 +1	0.00062488 +1
Lu	2.28087601 +1	0.00076419 +1	0.00039304 +1
C	-0.35228237 +1	5.00713762 +1	0.00002239 +1
C	-1.68758706 +1	4.75345381 +1	0.35425991 +1
C	-2.19828295 +1	3.44403681 +1	0.33886559 +1
C	0.41354030 +1	3.91300663 +1	-0.40425728 +1
C	-1.33593763 +1	2.43287083 +1	-0.08299679 +1
N	-0.06853354 +1	2.65897666 +1	-0.48012188 +1
P	2.22656706 +1	3.67074485 +1	-0.75691158 +1
C	3.09133158 +1	4.78934818 +1	0.39228894 +1
C	3.30234811 +1	4.31629405 +1	1.68789500 +1
C	3.97357777 +1	5.13489827 +1	2.60679651 +1
C	4.42522454 +1	6.39794194 +1	2.21887026 +1
C	4.21368968 +1	6.85448717 +1	0.91030432 +1
C	3.54816820 +1	6.04511784 +1	-0.01350783 +1
C	2.53626573 +1	4.16208416 +1	-2.48358787 +1
C	1.92984918 +1	5.28240730 +1	-3.05625833 +1
C	3.40214732 +1	3.34380881 +1	-3.20890062 +1
C	2.21147689 +1	5.59600632 +1	-4.38770234 +1
C	3.08432427 +1	4.78689029 +1	-5.13010884 +1
C	3.67570270 +1	3.66546154 +1	-4.54622710 +1
P	-1.42863861 +1	0.57142360 +1	-0.14338549 +1
C	-2.46369698 +1	0.04809862 +1	1.26538858 +1
C	-1.84463958 +1	-0.73911382 +1	2.23546678 +1
C	-2.59250826 +1	-1.16332209 +1	3.34429652 +1
C	-3.93454517 +1	-0.80161304 +1	3.46245386 +1
C	-4.54607115 +1	-0.01637595 +1	2.47306089 +1
C	-3.80979341 +1	0.40992368 +1	1.36691670 +1
C	-2.24010450 +1	0.15531310 +1	-1.71938867 +1
C	-3.55415761 +1	0.56511569 +1	-1.97139624 +1
C	-4.14687030 +1	0.23711709 +1	-3.19027671 +1

C	-3.42534606 +1	-0.49566876 +1	-4.14628228 +1
C	-2.11684914 +1	-0.89745256 +1	-3.88285518 +1
C	-1.51190268 +1	-0.57111301 +1	-2.65820944 +1
O	2.60165596 +1	2.19169386 +1	-0.53446128 +1
O	3.50148150 +1	0.19917412 +1	-1.92781741 +1
N	2.55473971 +1	-0.11493637 +1	-2.72181600 +1
O	1.47778658 +1	-0.41669004 +1	-2.09848625 +1
O	1.43031670 +1	-0.58829107 +1	2.04458047 +1
N	1.52159766 +1	0.57088556 +1	2.56740387 +1
O	2.06731981 +1	1.42209525 +1	1.78295076 +1
O	3.05094338 +1	-2.14279806 +1	-0.06576234 +1
N	4.10724327 +1	-1.94349455 +1	0.63404868 +1
O	4.20453038 +1	-0.71554592 +1	0.99096165 +1
O	1.12128197 +1	0.84272817 +1	3.65830331 +1
O	4.89243098 +1	-2.78622385 +1	0.91444843 +1
O	2.65004131 +1	-0.10815212 +1	-3.91040540 +1
H	0.05882833 +1	6.01458447 +1	0.06115915 +1
H	-2.32905179 +1	5.57888450 +1	0.66971173 +1
H	-3.21892276 +1	3.24307500 +1	0.66200957 +1
H	2.96464147 +1	3.31584839 +1	2.00959010 +1
H	4.14915377 +1	4.77545950 +1	3.62129854 +1
H	4.95154084 +1	7.03141424 +1	2.93422116 +1
H	4.57955559 +1	7.83576583 +1	0.61293896 +1
H	3.41325747 +1	6.40843662 +1	-1.03441632 +1
H	1.23785063 +1	5.91361048 +1	-2.49805140 +1
H	3.87092579 +1	2.44945089 +1	-2.76499416 +1
H	1.75032001 +1	6.46447763 +1	-4.85480020 +1
H	3.29713656 +1	5.03480256 +1	-6.17101987 +1
H	4.34599052 +1	3.02962803 +1	-5.12708548 +1
H	-0.78577855 +1	-1.04145671 +1	2.15795331 +1
H	-2.11600270 +1	-1.77616116 +1	4.11127394 +1
H	-4.51473303 +1	-1.13167164 +1	4.32525151 +1
H	-5.59610993 +1	0.25368113 +1	2.57003754 +1
H	-4.30589666 +1	1.00603759 +1	0.59717130 +1
H	-4.13289025 +1	1.12979496 +1	-1.23633284 +1
H	-5.16875259 +1	0.54469818 +1	-3.40392145 +1
H	-3.89414228 +1	-0.75018092 +1	-5.09762496 +1
H	-1.55305861 +1	-1.46523824 +1	-4.62445420 +1
H	-0.47218261 +1	-0.89467862 +1	-2.47647214 +1

Cartesian coordinates of atoms in the optimized geometries for κ^3 -1-M complexes

κ^3 -1-Ce

N	-0.02551738 +1	0.00077514 +1	0.00730362 +1
Ce	2.61432652 +1	0.00075261 +1	0.00389009 +1
O	1.60792012 +1	2.33522065 +1	-0.00078121 +1
C	-0.70128658 +1	-1.18203978 +1	0.08797730 +1
P	0.25282757 +1	-2.45314763 +1	1.09893314 +1

O 1.69895556 +1 -1.97765709 +1 1.31810530 +1
C -1.99832707 +1 -1.39375578 +1 -0.38489544 +1
C -2.67275740 +1 -0.31343512 +1 -0.95967247 +1
C -2.05581527 +1 0.94789770 +1 -0.97549303 +1
C -0.76442725 +1 1.04666148 +1 -0.47258880 +1
C -0.05071349 +1 -4.14448522 +1 0.49065044 +1
C -0.41548258 +1 -4.38945812 +1 -0.83287771 +1
C -0.62667220 +1 -5.70989434 +1 -1.24806112 +1
C -0.45025331 +1 -6.76434847 +1 -0.34745150 +1
C -0.06162416 +1 -6.50679067 +1 0.97255202 +1
C 0.14471058 +1 -5.19049080 +1 1.39736029 +1
C -0.66533975 +1 -2.28780554 +1 2.68924632 +1
C -0.13866123 +1 -1.38935037 +1 3.61706677 +1
C -1.82584625 +1 -3.01609666 +1 2.95410843 +1
C -0.79537001 +1 -1.21719530 +1 4.84375042 +1
C -1.95870505 +1 -1.93798381 +1 5.12112191 +1
C -2.47587924 +1 -2.83682223 +1 4.17810463 +1
P 0.12749224 +1 2.67845303 +1 -0.21699086 +1
C -0.20985612 +1 3.69714248 +1 -1.68558869 +1
C 0.08824450 +1 3.13413353 +1 -2.92908794 +1
C -0.09692101 +1 3.90290036 +1 -4.08447475 +1
C -0.55762998 +1 5.21842480 +1 -3.98414575 +1
C -0.82990690 +1 5.77750534 +1 -2.72908274 +1
C -0.64561566 +1 5.01867928 +1 -1.56951400 +1
C -0.66001634 +1 3.34132854 +1 1.28851571 +1
C 0.07048915 +1 3.20700861 +1 2.46958699 +1
C -0.48322000 +1 3.68520058 +1 3.66650431 +1
C -1.74767987 +1 4.27495098 +1 3.66492202 +1
C -2.47572637 +1 4.38867995 +1 2.47074725 +1
C -1.93318438 +1 3.91757495 +1 1.27410627 +1
O 4.09502798 +1 1.12701965 +1 -1.78870013 +1
N 3.25902365 +1 1.32492260 +1 -2.73340763 +1
O 2.10877924 +1 0.85072669 +1 -2.38996038 +1
O 3.37398340 +1 -2.05866276 +1 -1.37966655 +1
N 2.28471886 +1 -2.68108607 +1 -1.56695152 +1
O 1.31340210 +1 -2.02806637 +1 -0.99374039 +1
O 4.23949882 +1 0.38769424 +1 1.96899841 +1
N 3.44631154 +1 0.74652066 +1 2.90938305 +1
O 2.24344913 +1 0.77925146 +1 2.45560480 +1
O 2.13255770 +1 -3.69205972 +1 -2.17272291 +1
O 3.76186837 +1 1.01247795 +1 4.02418702 +1
O 3.48178077 +1 1.86483303 +1 -3.76867215 +1
H -2.48191995 +1 -2.37132535 +1 -0.31951973 +1
H -3.67449198 +1 -0.44164426 +1 -1.37558756 +1
H -2.58725565 +1 1.81006101 +1 -1.38433234 +1
H -0.50515799 +1 -3.57928169 +1 -1.56556902 +1
H -0.90458058 +1 -5.91484682 +1 -2.28159607 +1
H -0.60470912 +1 -7.79277909 +1 -0.67683051 +1
H 0.09209273 +1 -7.33283632 +1 1.66596803 +1
H 0.46109422 +1 -5.01266039 +1 2.42995814 +1

H	0.78008098 +1	-0.81448665 +1	3.41624510 +1
H	-2.23583785 +1	-3.72838840 +1	2.23579903 +1
H	-0.39023076 +1	-0.52225636 +1	5.57947432 +1
H	-2.46721604 +1	-1.80465428 +1	6.07650006 +1
H	-3.38091188 +1	-3.39785448 +1	4.40348002 +1
H	0.48647560 +1	2.11033524 +1	-3.03413467 +1
H	0.13929185 +1	3.47616377 +1	-5.06051793 +1
H	-0.69488705 +1	5.81718271 +1	-4.88600687 +1
H	-1.17048578 +1	6.80954278 +1	-2.65664644 +1
H	-0.83379419 +1	5.48637841 +1	-0.59988236 +1
H	1.06546432 +1	2.72884756 +1	2.49297650 +1
H	0.08085747 +1	3.59074277 +1	4.59564580 +1
H	-2.17637113 +1	4.64876094 +1	4.59603649 +1
H	-3.46413246 +1	4.84532444 +1	2.48148790 +1
H	-2.51624062 +1	4.00929612 +1	0.35636207 +1

κ^3 -1-Pr

N	0.00028523 +1	0.00005177 +1	0.00001201 +1
Pr	2.66946597 +1	0.00001940 +1	0.00000415 +1
O	1.69128133 +1	2.31703029 +1	-0.00002245 +1
C	-0.72255312 +1	-1.15255475 +1	0.09759002 +1
P	0.25082266 +1	-2.61941739 +1	0.75081581 +1
O	1.72798295 +1	-2.19810169 +1	0.79657496 +1
C	-2.08735639 +1	-1.26896528 +1	-0.16825944 +1
C	-2.78924021 +1	-0.12032439 +1	-0.54749559 +1
C	-2.10567782 +1	1.10024699 +1	-0.59491617 +1
C	-0.74155185 +1	1.10263096 +1	-0.30775303 +1
C	-0.03745153 +1	-4.03468992 +1	-0.35996233 +1
C	1.09845717 +1	-4.62517012 +1	-0.91302579 +1
C	0.94301218 +1	-5.71004573 +1	-1.78852676 +1
C	-0.33340952 +1	-6.18340833 +1	-2.09426340 +1
C	-1.46702470 +1	-5.58088839 +1	-1.52763476 +1
C	-1.32174991 +1	-4.49911088 +1	-0.65809594 +1
C	-0.48972486 +1	-2.92830807 +1	2.38976643 +1
C	-0.41409833 +1	-1.89654551 +1	3.32816844 +1
C	-1.03962680 +1	-4.16975842 +1	2.71311680 +1
C	-0.92325480 +1	-2.11016895 +1	4.61454402 +1
C	-1.49033608 +1	-3.34374333 +1	4.94752351 +1
C	-1.54982962 +1	-4.37229517 +1	3.99932811 +1
P	0.22742632 +1	2.71293202 +1	-0.22635589 +1
C	-0.05067048 +1	3.54149564 +1	-1.82003115 +1
C	1.03457508 +1	3.54468143 +1	-2.69652362 +1
C	0.88945828 +1	4.15177257 +1	-3.95406096 +1
C	-0.32478796 +1	4.73410685 +1	-4.31309064 +1
C	-1.41088839 +1	4.71596733 +1	-3.42229617 +1
C	-1.27736156 +1	4.11594692 +1	-2.17084748 +1
C	-0.49943373 +1	3.59562495 +1	1.19284656 +1
C	-0.35225946 +1	2.96888258 +1	2.43399763 +1
C	-0.83842241 +1	3.60990694 +1	3.57940782 +1
C	-1.44682989 +1	4.86426302 +1	3.47501955 +1
C	-1.56638549 +1	5.48930557 +1	2.22792599 +1

C	-1.08116340 +1	4.85811887 +1	1.07789703 +1
O	4.86268785 +1	1.16259876 +1	-0.60399519 +1
N	4.53908487 +1	1.76067463 +1	-1.68808929 +1
O	3.32204881 +1	1.48385275 +1	-1.99098835 +1
O	1.50898727 +1	-1.14582696 +1	-1.98510809 +1
N	2.46328423 +1	-1.88547999 +1	-2.42138729 +1
O	3.49897564 +1	-1.74416849 +1	-1.68763184 +1
O	3.64872029 +1	0.00693607 +1	2.37219230 +1
N	2.61162116 +1	0.21743103 +1	3.07599007 +1
O	1.58081674 +1	0.36049244 +1	2.31216123 +1
O	2.37770210 +1	-2.61672416 +1	-3.35846805 +1
O	2.56552267 +1	0.27509828 +1	4.26525318 +1
O	5.24843143 +1	2.47581063 +1	-2.32125255 +1
H	-2.61147338 +1	-2.22775002 +1	-0.09652365 +1
H	-3.85248426 +1	-0.17221311 +1	-0.79076378 +1
H	-2.64520438 +1	2.01292291 +1	-0.85889711 +1
H	2.11185792 +1	-4.26428509 +1	-0.68494199 +1
H	1.82440665 +1	-6.17108140 +1	-2.23825507 +1
H	-0.45355169 +1	-7.02297944 +1	-2.78108527 +1
H	-2.45895543 +1	-5.95609604 +1	-1.77505224 +1
H	-2.21580827 +1	-4.03471474 +1	-0.23517477 +1
H	0.04470941 +1	-0.92216788 +1	3.09487888 +1
H	-1.07470004 +1	-4.99465855 +1	1.99682018 +1
H	-0.86055638 +1	-1.31639468 +1	5.35980968 +1
H	-1.88080877 +1	-3.50947903 +1	5.95282449 +1
H	-1.98202856 +1	-5.33527128 +1	4.26863782 +1
H	2.00616814 +1	3.07795842 +1	-2.43878388 +1
H	1.73366292 +1	4.15744472 +1	-4.64664384 +1
H	-0.43710400 +1	5.20496332 +1	-5.29107584 +1
H	-2.35561670 +1	5.17100995 +1	-3.71482843 +1
H	-2.13344513 +1	4.11014291 +1	-1.49508867 +1
H	0.15052762 +1	1.99336098 +1	2.54578570 +1
H	-0.72586131 +1	3.13474567 +1	4.55447717 +1
H	-1.82057074 +1	5.36388095 +1	4.37017663 +1
H	-2.02488821 +1	6.47475852 +1	2.15575873 +1
H	-1.15584841 +1	5.37993832 +1	0.12099356 +1

κ^3 -1-Nd

N	0.00037187 +1	-0.00000664 +1	-0.00007494 +1
Nd	2.56969664 +1	-0.00003287 +1	-0.00000926 +1
C	-2.02448746 +1	1.39294370 +1	-0.00001279 +1
C	-2.70711347 +1	0.44527601 +1	-0.76800092 +1
C	-2.06863154 +1	-0.76464961 +1	-1.07879410 +1
C	-0.70693595 +1	1.11645689 +1	0.36334999 +1
C	-0.75390527 +1	-0.93416259 +1	-0.66223092 +1
O	1.65726058 +1	-2.18560233 +1	-0.55120230 +1
P	0.28387342 +1	2.15418168 +1	1.58006167 +1
C	-0.61687015 +1	1.76703939 +1	3.13515076 +1
C	-0.13953421 +1	0.68495241 +1	3.87449736 +1
C	-0.78582889 +1	0.34252580 +1	5.07075089 +1
C	-1.89037712 +1	1.07851391 +1	5.50390788 +1

C -2.35974764 +1 2.16199103 +1 4.74798720 +1
C -1.71958465 +1 2.51218952 +1 3.55658860 +1
C 0.07641367 +1 3.93497687 +1 1.26358218 +1
C -0.28156840 +1 4.40980548 +1 0.00196611 +1
C 0.34138300 +1 4.80787514 +1 2.32313654 +1
C -0.41450919 +1 5.79001989 +1 -0.19304270 +1
C -0.16796527 +1 6.67342554 +1 0.86194667 +1
C 0.21242491 +1 6.18487037 +1 2.11761721 +1
P 0.18382474 +1 -2.55253416 +1 -0.80609859 +1
C -0.52605361 +1 -3.56527342 +1 0.53237664 +1
C 0.24668432 +1 -3.68542357 +1 1.68749930 +1
C -0.25066477 +1 -4.44090941 +1 2.76009834 +1
C -1.50231102 +1 -5.04925977 +1 2.66529933 +1
C -2.27452155 +1 -4.90519820 +1 1.50222141 +1
C -1.78836564 +1 -4.15720313 +1 0.42907592 +1
C -0.15933437 +1 -3.23663473 +1 -2.45365262 +1
C -0.58274826 +1 -4.55732965 +1 -2.62011699 +1
C -0.77920343 +1 -5.04999205 +1 -3.91312511 +1
C -0.52989922 +1 -4.23078608 +1 -5.02194319 +1
C -0.08033146 +1 -2.92018364 +1 -4.84229779 +1
C 0.11700348 +1 -2.41644946 +1 -3.55065495 +1
O 1.70887605 +1 1.56579365 +1 1.66053844 +1
O 2.13264752 +1 -1.15039343 +1 2.10143809 +1
N 3.28013822 +1 -0.91158092 +1 2.61710453 +1
O 4.13712605 +1 -0.46640814 +1 1.78926473 +1
O 1.35827188 +1 2.05659214 +1 -0.57608589 +1
N 2.38211577 +1 2.73011266 +1 -0.99509040 +1
O 3.46643133 +1 2.08787571 +1 -0.89697137 +1
O 2.11944280 +1 -0.38385968 +1 -2.35511491 +1
N 3.21423508 +1 -1.01421634 +1 -2.58948687 +1
O 4.07473433 +1 -0.92771414 +1 -1.66136773 +1
O 2.27716617 +1 3.83549567 +1 -1.43061641 +1
O 3.38959750 +1 -1.61498166 +1 -3.60762660 +1
O 3.51474567 +1 -1.10815558 +1 3.77257632 +1
H -2.52014245 +1 2.31998581 +1 0.29747275 +1
H -3.72859703 +1 0.63392981 +1 -1.10518602 +1
H -2.60178126 +1 -1.53502298 +1 -1.64026664 +1
H 0.73217932 +1 0.09511913 +1 3.54751999 +1
H -0.41713923 +1 -0.49613202 +1 5.66177198 +1
H -2.39015024 +1 0.81303046 +1 6.43616024 +1
H -3.21937978 +1 2.73260090 +1 5.09481513 +1
H -2.09064134 +1 3.36613428 +1 2.98661154 +1
H -0.42607981 +1 3.73406222 +1 -0.84865317 +1
H 0.65417725 +1 4.44779239 +1 3.30827701 +1
H -0.68590350 +1 6.17469839 +1 -1.17583089 +1
H -0.26098685 +1 7.74887190 +1 0.70382862 +1
H 0.42104295 +1 6.87853068 +1 2.93147846 +1
H 1.23116685 +1 -3.19641120 +1 1.78714639 +1
H 0.34699110 +1 -4.54588776 +1 3.66684886 +1
H -1.88704075 +1 -5.63881527 +1 3.49889920 +1

H -3.25303778 +1 -5.37874860 +1 1.44104518 +1
H -2.40578644 +1 -4.05106144 +1 -0.46428662 +1
H -0.75111963 +1 -5.22582007 +1 -1.77216707 +1
H -1.11020219 +1 -6.07712002 +1 -4.06073030 +1
H -0.67562695 +1 -4.62315971 +1 -6.02964891 +1
H 0.14041623 +1 -2.29158502 +1 -5.70618921 +1
H 0.51071420 +1 -1.39228468 +1 -3.43654369 +1

κ^3 -1-Sm

N 0.00251857 +1 0.00034728 +1 -0.00089741 +1
Sm 2.68109524 +1 0.00002393 +1 0.00020275 +1
C -2.10450113 +1 1.25929260 +1 0.00047696 +1
C -2.78939725 +1 0.17307984 +1 -0.55563349 +1
C -2.09161407 +1 -1.01993209 +1 -0.77543157 +1
C -0.74233839 +1 1.11568137 +1 0.25824268 +1
C -0.73293594 +1 -1.05360669 +1 -0.46531930 +1
O 1.73595886 +1 -2.18784114 +1 -0.40181579 +1
P 0.26104701 +1 2.45619089 +1 1.11184911 +1
C -0.38815208 +1 2.48240684 +1 2.81296150 +1
C 0.24244113 +1 1.60866108 +1 3.70156264 +1
C -0.18660033 +1 1.56608166 +1 5.03603534 +1
C -1.22925593 +1 2.38914566 +1 5.46225954 +1
C -1.85591594 +1 3.26027685 +1 4.55868956 +1
C -1.43423664 +1 3.30931766 +1 3.22933217 +1
C -0.02416363 +1 3.98727717 +1 0.17243669 +1
C -1.18783707 +1 4.75472900 +1 0.28237092 +1
C 1.00420385 +1 4.35176838 +1 -0.69812113 +1
C -1.32478307 +1 5.90263177 +1 -0.49685952 +1
C -0.29906011 +1 6.27889924 +1 -1.37910767 +1
C 0.85881772 +1 5.50930736 +1 -1.47866542 +1
P 0.27447123 +1 -2.62855595 +1 -0.59955887 +1
C -0.29015786 +1 -3.71684802 +1 0.75149484 +1
C 0.71157289 +1 -4.23735337 +1 1.57094012 +1
C 0.35112320 +1 -5.07028804 +1 2.64022385 +1
C -0.99284842 +1 -5.36513595 +1 2.87287611 +1
C -1.98903446 +1 -4.83239987 +1 2.04117269 +1
C -1.63979648 +1 -4.00085501 +1 0.97530968 +1
C -0.10943467 +1 -3.35370970 +1 -2.22112894 +1
C -0.86737667 +1 -4.52269151 +1 -2.33473636 +1
C -1.11004197 +1 -5.05348919 +1 -3.60323708 +1
C -0.58360079 +1 -4.42398446 +1 -4.74037925 +1
C 0.18564184 +1 -3.26634888 +1 -4.61151262 +1
C 0.43323270 +1 -2.72419817 +1 -3.34268829 +1
O 1.71524130 +1 1.96198269 +1 1.02407384 +1
O 1.83058864 +1 -0.62170417 +1 2.21168843 +1
N 2.77307503 +1 -1.42442286 +1 2.55553232 +1
O 3.70411785 +1 -1.44877702 +1 1.69462494 +1
O 4.83986369 +1 1.08563221 +1 0.30910579 +1
N 5.47459557 +1 0.54234895 +1 -0.65905883 +1
O 4.71137749 +1 -0.25722404 +1 -1.31080426 +1
O 2.22782274 +1 1.78345520 +1 -1.63095592 +1

N	1.77030304 +1	1.07031259 +1	-2.58332037 +1
O	1.68430780 +1	-0.16030785 +1	-2.24183079 +1
O	6.61336112 +1	0.75177737 +1	-0.92680783 +1
O	1.42965743 +1	1.49308839 +1	-3.64573242 +1
O	2.75002477 +1	-2.06890384 +1	3.56101520 +1
H	-2.63804179 +1	2.18891942 +1	0.21000287 +1
H	-3.84962440 +1	0.25177157 +1	-0.80466225 +1
H	-2.61110662 +1	-1.88459208 +1	-1.19574518 +1
H	1.06782170 +1	0.94418110 +1	3.38850628 +1
H	0.30270593 +1	0.88709028 +1	5.73626421 +1
H	-1.55940582 +1	2.35861573 +1	6.50163023 +1
H	-2.66669636 +1	3.90194101 +1	4.89956375 +1
H	-1.93219327 +1	4.00281168 +1	2.54324030 +1
H	-1.99072057 +1	4.48843820 +1	0.97773503 +1
H	1.92798729 +1	3.75378405 +1	-0.80015298 +1
H	-2.22345304 +1	6.51253500 +1	-0.42237912 +1
H	-0.41203718 +1	7.17806928 +1	-1.98681647 +1
H	1.65747876 +1	5.79736184 +1	-2.16472172 +1
H	1.77496787 +1	-4.01224450 +1	1.40455072 +1
H	1.12610513 +1	-5.47638101 +1	3.29291855 +1
H	-1.27282902 +1	-6.01023559 +1	3.70731815 +1
H	-3.03522196 +1	-5.06568844 +1	2.23325279 +1
H	-2.43024490 +1	-3.58992246 +1	0.34692906 +1
H	-1.26576563 +1	-5.04392476 +1	-1.46133727 +1
H	-1.69777272 +1	-5.96377436 +1	-3.71129981 +1
H	-0.77127553 +1	-4.84669898 +1	-5.72861545 +1
H	0.60622112 +1	-2.78318956 +1	-5.49470592 +1
H	1.05728358 +1	-1.81536699 +1	-3.26612108 +1

κ^3 -1-Eu

N	0.00000000 +1	0.00000000 +1	0.00000000 +1
Eu	2.53153400 +1	0.00000000 +1	0.00000000 +1
C	-2.16476341 +1	1.22171805 +1	0.00000000 +1
C	-2.88621128 +1	0.05353708 +1	0.26097897 +1
C	-2.17802606 +1	-1.14912695 +1	0.33127995 +1
C	-0.78360520 +1	1.13254568 +1	-0.14017309 +1
C	-0.79411985 +1	-1.11640084 +1	0.19317689 +1
O	1.63607621 +1	-2.22117727 +1	0.07582286 +1
P	0.20164418 +1	2.66200015 +1	-0.61444912 +1
C	-0.33393809 +1	3.98471191 +1	0.50569293 +1
C	-0.88141355 +1	5.16885596 +1	0.00217083 +1
C	-1.25430164 +1	6.17733181 +1	0.89310482 +1
C	-1.06133335 +1	6.00340878 +1	2.27088384 +1
C	-0.49767984 +1	4.82327858 +1	2.75956972 +1
C	-0.12257992 +1	3.80385416 +1	1.87425777 +1
C	-0.22453179 +1	3.05627214 +1	-2.34182012 +1
C	0.84759411 +1	3.11045666 +1	-3.23284339 +1
C	-1.53890800 +1	3.27607197 +1	-2.76184182 +1
C	0.59495378 +1	3.39374712 +1	-4.58277027 +1
C	-0.71293793 +1	3.61546481 +1	-5.01650679 +1
C	-1.78018305 +1	3.55861619 +1	-4.10770021 +1

P 0.18534223 +1 -2.72620146 +1 0.19061616 +1
C -0.18392313 +1 -3.56469610 +1 1.75718034 +1
C -1.43538157 +1 -4.14123824 +1 2.00783145 +1
C -1.66246399 +1 -4.75977131 +1 3.23574800 +1
C -0.64342877 +1 -4.79840719 +1 4.20282052 +1
C 0.59549918 +1 -4.21733870 +1 3.94224008 +1
C 0.83487645 +1 -3.58915445 +1 2.70871902 +1
C -0.39979455 +1 -3.64587451 +1 -1.26215155 +1
C -0.25952441 +1 -3.00580750 +1 -2.49674709 +1
C -0.64266975 +1 -3.68500679 +1 -3.65960838 +1
C -1.13943321 +1 -4.98856323 +1 -3.57782920 +1
C -1.25132134 +1 -5.62584331 +1 -2.33530002 +1
C -0.86983098 +1 -4.95738890 +1 -1.16850101 +1
O 1.66568690 +1 2.18505601 +1 -0.49101340 +1
O 3.06119774 +1 -1.39117378 +1 1.85911494 +1
N 3.78756050 +1 -2.11601642 +1 1.09625264 +1
O 4.34672538 +1 -1.53196037 +1 0.11633759 +1
O 3.34174267 +1 0.37487405 +1 -2.30835164 +1
N 2.38926059 +1 -0.03086937 +1 -3.08027567 +1
O 1.49123762 +1 -0.42004574 +1 -2.20669002 +1
O 3.88370418 +1 1.58402360 +1 1.14810549 +1
N 2.86377707 +1 2.08331331 +1 1.70291239 +1
O 1.83323029 +1 1.33123554 +1 1.84411326 +1
O 2.31075570 +1 -0.04170754 +1 -4.25505958 +1
O 2.85187945 +1 3.20493341 +1 2.13844625 +1
O 3.96991823 +1 -3.27887975 +1 1.34178577 +1
H -2.69146266 +1 2.17721699 +1 -0.07693798 +1
H -3.96939046 +1 0.07824495 +1 0.39469423 +1
H -2.71853396 +1 -2.08537561 +1 0.49608754 +1
H -1.01648542 +1 5.33689960 +1 -1.06935542 +1
H -1.68083230 +1 7.10675394 +1 0.51850367 +1
H -1.34436736 +1 6.79930308 +1 2.96176954 +1
H -0.32656928 +1 4.69667127 +1 3.82956881 +1
H 0.35082772 +1 2.89403563 +1 2.28287990 +1
H 1.88439077 +1 2.93834849 +1 -2.90584947 +1
H -2.38229307 +1 3.23242182 +1 -2.07218694 +1
H 1.42459234 +1 3.43219687 +1 -5.29122483 +1
H -0.90896817 +1 3.83210486 +1 -6.06809773 +1
H -2.79712483 +1 3.73219330 +1 -4.45678907 +1
H -2.23876420 +1 -4.12341101 +1 1.27010042 +1
H -2.62722862 +1 -5.21592283 +1 3.45111245 +1
H -0.82819218 +1 -5.28623323 +1 5.16132049 +1
H 1.38901683 +1 -4.24297573 +1 4.69182251 +1
H 1.82591278 +1 -3.12854318 +1 2.52949571 +1
H 0.16112226 +1 -1.98777019 +1 -2.58948744 +1
H -0.53528235 +1 -3.19826052 +1 -4.62965602 +1
H -1.43139253 +1 -5.51792672 +1 -4.48627315 +1
H -1.62087718 +1 -6.64903983 +1 -2.28113201 +1
H -0.93394854 +1 -5.48619244 +1 -0.21423012 +1

κ^3 -1-Gd

N	-0.00138825 +1	-0.00009966 +1	0.00041459 +1
Gd	2.52904859 +1	-0.00003708 +1	0.00000245 +1
O	1.73080296 +1	2.22256483 +1	0.00001237 +1
C	-2.13427329 +1	-1.21516364 +1	-0.10092958 +1
C	-2.83187937 +1	-0.03396223 +1	-0.37687643 +1
C	-2.12265480 +1	1.17156339 +1	-0.40694333 +1
C	-0.75475148 +1	-1.14035315 +1	0.07712448 +1
C	-0.74652421 +1	1.13257859 +1	-0.19151076 +1
P	0.26432648 +1	-2.65809894 +1	0.52409134 +1
C	-0.08845526 +1	-3.89672261 +1	-0.75805853 +1
C	-1.30330991 +1	-4.58878299 +1	-0.81704981 +1
C	-1.50530863 +1	-5.51434551 +1	-1.83997753 +1
C	-0.49849912 +1	-5.73955579 +1	-2.79356399 +1
C	0.70475914 +1	-5.03966705 +1	-2.72590307 +1
C	0.91822731 +1	-4.10442123 +1	-1.70047265 +1
C	-0.33601919 +1	-3.16648579 +1	2.16504216 +1
C	-0.70098062 +1	-4.48685760 +1	2.43478449 +1
C	-0.31453718 +1	-2.19561430 +1	3.16965329 +1
C	-1.09751405 +1	-4.83057336 +1	3.73061129 +1
C	-1.10472503 +1	-3.86205029 +1	4.74235831 +1
C	-0.71155907 +1	-2.55009976 +1	4.46468334 +1
P	0.27102517 +1	2.70608779 +1	-0.07176206 +1
C	-0.14983156 +1	3.71487986 +1	-1.52231517 +1
C	0.41957048 +1	3.33715705 +1	-2.73939843 +1
C	0.14362618 +1	4.09969372 +1	-3.88335403 +1
C	-0.67977607 +1	5.22270297 +1	-3.79430364 +1
C	-1.23310623 +1	5.59835998 +1	-2.56119785 +1
C	-0.96285824 +1	4.84741092 +1	-1.41591479 +1
C	-0.23710094 +1	3.53287491 +1	1.47359172 +1
C	0.80203258 +1	3.88557647 +1	2.33513290 +1
C	0.49400553 +1	4.51231047 +1	3.55120916 +1
C	-0.83592216 +1	4.77194989 +1	3.88552444 +1
C	-1.86978747 +1	4.40840454 +1	3.01009593 +1
C	-1.57277811 +1	3.78218907 +1	1.79780794 +1
O	1.71546873 +1	-2.15370974 +1	0.51213429 +1
O	1.42735648 +1	0.17645176 +1	2.16494578 +1
N	2.37610957 +1	0.69645419 +1	2.87487795 +1
O	3.39092194 +1	0.83789700 +1	2.11703679 +1
O	1.57952353 +1	0.59657687 +1	-2.16773395 +1
N	1.65130012 +1	-0.52873498 +1	-2.79056833 +1
O	2.12041481 +1	-1.38984009 +1	-1.96482042 +1
O	4.55812301 +1	0.65272223 +1	-1.12683698 +1
N	5.37730751 +1	-0.25366899 +1	-0.71165986 +1
O	4.71274170 +1	-1.03291604 +1	0.06413015 +1
O	1.31100921 +1	-0.72906938 +1	-3.90991662 +1
O	6.52094005 +1	-0.34767891 +1	-0.99938478 +1
O	2.28550982 +1	0.99278239 +1	4.02152001 +1
H	-2.67503470 +1	-2.16265022 +1	-0.03851167 +1
H	-3.90882290 +1	-0.05178415 +1	-0.55637501 +1

H	-2.64963107 +1	2.10709932 +1	-0.61084390 +1
H	-2.09655461 +1	-4.42865939 +1	-0.08553101 +1
H	-2.44181667 +1	-6.06565697 +1	-1.90431746 +1
H	-0.66417361 +1	-6.46559113 +1	-3.59114966 +1
H	1.48540224 +1	-5.20789487 +1	-3.46974929 +1
H	1.87232383 +1	-3.54577191 +1	-1.67135751 +1
H	-0.67202968 +1	-5.26674285 +1	1.66964912 +1
H	0.02366051 +1	-1.16122347 +1	2.98299204 +1
H	-1.38661189 +1	-5.85577757 +1	3.95791252 +1
H	-1.40796096 +1	-4.13705751 +1	5.75371882 +1
H	-0.69540702 +1	-1.80223788 +1	5.25825588 +1
H	1.08519688 +1	2.45885233 +1	-2.83231921 +1
H	0.58425708 +1	3.81347951 +1	-4.83949609 +1
H	-0.89015033 +1	5.81703938 +1	-4.68485749 +1
H	-1.86367478 +1	6.48375468 +1	-2.49818241 +1
H	-1.38274532 +1	5.17347728 +1	-0.46206640 +1
H	1.85501162 +1	3.68364256 +1	2.08890051 +1
H	1.29800862 +1	4.78617435 +1	4.23657138 +1
H	-1.07493936 +1	5.25627913 +1	4.83373766 +1
H	-2.90455530 +1	4.61153390 +1	3.28187041 +1
H	-2.39233681 +1	3.49845316 +1	1.13726827 +1

κ^3 -1-Tb

N	0.00034995 +1	0.00003278 +1	0.00014830 +1
Tb	2.55657142 +1	0.00000153 +1	-0.00004509 +1
C	-2.16374273 +1	1.22065479 +1	0.00000184 +1
C	-2.88019457 +1	0.05843004 +1	0.29851485 +1
C	-2.17093437 +1	-1.14243131 +1	0.38825649 +1
C	-0.78474782 +1	1.12899162 +1	-0.15983023 +1
C	-0.78879152 +1	-1.11229020 +1	0.23272012 +1
O	1.65414305 +1	-2.23066854 +1	0.16657987 +1
P	0.20028069 +1	2.63866029 +1	-0.70167125 +1
C	-0.23178576 +1	3.99014661 +1	0.43129121 +1
C	0.31313145 +1	3.93262029 +1	1.71523062 +1
C	0.03020671 +1	4.96614602 +1	2.61940055 +1
C	-0.77534183 +1	6.03678994 +1	2.22909832 +1
C	-1.30291886 +1	6.08859527 +1	0.93052002 +1
C	-1.02559443 +1	5.06565844 +1	0.02185351 +1
C	-0.31346576 +1	3.01386291 +1	-2.41102146 +1
C	-1.64841192 +1	3.19360578 +1	-2.78131178 +1
C	0.72023240 +1	3.08850278 +1	-3.34507442 +1
C	-1.95004356 +1	3.46298772 +1	-4.11777920 +1
C	-0.92151202 +1	3.54410674 +1	-5.06819598 +1
C	0.40757450 +1	3.35785643 +1	-4.68532861 +1
P	0.19967375 +1	-2.71899201 +1	0.28409886 +1
C	-0.18208649 +1	-3.49991037 +1	1.87969086 +1
C	0.81615613 +1	-3.41286730 +1	2.85006766 +1
C	0.58642602 +1	-3.98286560 +1	4.11228899 +1
C	-0.62453970 +1	-4.61831666 +1	4.38176532 +1
C	-1.62261690 +1	-4.69111178 +1	3.39611386 +1
C	-1.40439255 +1	-4.12929247 +1	2.13859893 +1

C	-0.38535068 +1	-3.69016376 +1	-1.13793427 +1
C	-0.81253722 +1	-5.01263914 +1	-1.00508493 +1
C	-1.19445516 +1	-5.72082157 +1	-2.14823231 +1
C	-1.12562423 +1	-5.11095364 +1	-3.40737409 +1
C	-0.67070024 +1	-3.79532596 +1	-3.52914754 +1
C	-0.28773387 +1	-3.07687376 +1	-2.38987873 +1
O	1.66122993 +1	2.14909351 +1	-0.63774174 +1
O	3.39577284 +1	0.29012241 +1	-2.27256547 +1
N	2.39961438 +1	-0.11911040 +1	-2.95260230 +1
O	1.47858977 +1	-0.50096940 +1	-2.13139323 +1
O	2.18970881 +1	-0.77202031 +1	2.29472744 +1
N	1.71335971 +1	0.28149842 +1	2.84882376 +1
O	1.62794805 +1	1.18313984 +1	1.93147440 +1
O	4.75041498 +1	-1.03881964 +1	0.16563935 +1
N	5.43865947 +1	-0.08119583 +1	0.67538847 +1
O	4.64132471 +1	0.91658479 +1	0.85011424 +1
O	1.37818837 +1	0.40274475 +1	3.98082296 +1
O	6.59147641 +1	-0.10749952 +1	0.94296852 +1
O	2.30356632 +1	-0.14096847 +1	-4.13749470 +1
H	-2.69209945 +1	2.17356931 +1	-0.09062200 +1
H	-3.96120892 +1	0.08600334 +1	0.44693386 +1
H	-2.70848534 +1	-2.07423302 +1	0.58268557 +1
H	0.96650304 +1	3.10245769 +1	2.04323547 +1
H	0.45190286 +1	4.93134274 +1	3.62506897 +1
H	-0.99105558 +1	6.84221996 +1	2.93297705 +1
H	-1.91906269 +1	6.93449553 +1	0.62983945 +1
H	-1.42475373 +1	5.14039768 +1	-0.99182437 +1
H	-2.46398980 +1	3.12555349 +1	-2.06086072 +1
H	1.77263454 +1	2.93996784 +1	-3.06044661 +1
H	-2.98428317 +1	3.60615271 +1	-4.42724851 +1
H	-1.16427595 +1	3.75021449 +1	-6.11194336 +1
H	1.20724831 +1	3.41163957 +1	-5.42624419 +1
H	1.77671481 +1	-2.89804030 +1	2.65826391 +1
H	1.36038584 +1	-3.91866731 +1	4.87917609 +1
H	-0.80268046 +1	-5.06089396 +1	5.36314386 +1
H	-2.56537278 +1	-5.18779785 +1	3.61899320 +1
H	-2.19178045 +1	-4.19612790 +1	1.38671141 +1
H	-0.84303536 +1	-5.52013418 +1	-0.03786278 +1
H	-1.53146826 +1	-6.75294725 +1	-2.06256916 +1
H	-1.41806406 +1	-5.67042483 +1	-4.29721275 +1
H	-0.59580217 +1	-3.32892937 +1	-4.51220567 +1
H	0.09936596 +1	-2.05006650 +1	-2.51567241 +1

κ^3 -1-Dy

N	0.00183375 +1	0.00035783 +1	-0.00079156 +1
Dy	2.52512365 +1	0.00010493 +1	0.00012515 +1
C	-2.16015598 +1	1.22871503 +1	0.00068048 +1
C	-2.86932583 +1	0.08927296 +1	-0.39026302 +1
C	-2.16317625 +1	-1.11060304 +1	-0.51440122 +1
C	-0.78620004 +1	1.12567958 +1	0.18636280 +1
C	-0.79029544 +1	-1.09746580 +1	-0.29641840 +1

O 1.64229940 +1 -2.22443026 +1 -0.10390035 +1
P 0.19872108 +1 2.60357660 +1 0.81777952 +1
C -0.49611651 +1 2.97544865 +1 2.45718966 +1
C -0.54936511 +1 1.92292348 +1 3.37547602 +1
C -1.03081277 +1 2.17108831 +1 4.66643773 +1
C -1.43018282 +1 3.46049545 +1 5.02922855 +1
C -1.34468674 +1 4.51136001 +1 4.10773899 +1
C -0.86443005 +1 4.27341582 +1 2.81637004 +1
C -0.05277999 +1 3.95267746 +1 -0.36796014 +1
C -1.25226952 +1 4.67276594 +1 -0.42947431 +1
C 0.99986626 +1 4.21017426 +1 -1.24542808 +1
C -1.38726426 +1 5.68152524 +1 -1.38134395 +1
C -0.33138145 +1 5.96015248 +1 -2.26625923 +1
C 0.85276634 +1 5.22974145 +1 -2.20088661 +1
P 0.18911447 +1 -2.70809294 +1 -0.28740284 +1
C -0.43817980 +1 -3.59678644 +1 1.17290219 +1
C 0.19936763 +1 -3.26865642 +1 2.37271964 +1
C -0.20323615 +1 -3.90633369 +1 3.55431435 +1
C -1.22684095 +1 -4.85474201 +1 3.52381118 +1
C -1.85963610 +1 -5.17248316 +1 2.31350400 +1
C -1.46329799 +1 -4.54352680 +1 1.13182274 +1
C -0.11235721 +1 -3.51853345 +1 -1.88303432 +1
C 0.86348451 +1 -3.29095569 +1 -2.85561608 +1
C 0.70310656 +1 -3.86191247 +1 -4.12793773 +1
C -0.41672504 +1 -4.64303526 +1 -4.40775446 +1
C -1.39000161 +1 -4.86486485 +1 -3.41987948 +1
C -1.23823943 +1 -4.30247779 +1 -2.15339537 +1
O 1.64251062 +1 2.05158166 +1 0.86163290 +1
O 1.75757527 +1 1.49777570 +1 -1.68936489 +1
N 2.17184595 +1 0.64173989 +1 -2.53923942 +1
O 1.97902333 +1 -0.58653686 +1 -2.24396478 +1
O 3.67009570 +1 0.24928333 +1 2.07224321 +1
N 2.53183790 +1 0.36585861 +1 2.61752411 +1
O 1.59586336 +1 -0.38515251 +1 2.16242056 +1
O 4.62291865 +1 -1.04278472 +1 -0.40594966 +1
N 5.14459011 +1 0.11943472 +1 -0.37603650 +1
O 4.45007465 +1 1.06217308 +1 -0.89649845 +1
O 2.34069433 +1 1.06737328 +1 3.57503866 +1
O 6.24810525 +1 0.31480038 +1 0.04892779 +1
O 2.63363037 +1 0.97011201 +1 -3.59769823 +1
H -2.69205208 +1 2.17237846 +1 0.14837970 +1
H -3.94390227 +1 0.13223037 +1 -0.57742627 +1
H -2.69441714 +1 -2.02724054 +1 -0.78208802 +1
H -0.19928828 +1 0.90961249 +1 3.12751259 +1
H -1.07116989 +1 1.35997368 +1 5.39370629 +1
H -1.79788892 +1 3.65278463 +1 6.03842316 +1
H -1.63677072 +1 5.51837997 +1 4.40323256 +1
H -0.77421584 +1 5.11643619 +1 2.12624097 +1
H -2.08477575 +1 4.46988505 +1 0.24551532 +1
H 1.93893520 +1 3.62947310 +1 -1.22348996 +1

H -2.30949611 +1 6.25631445 +1 -1.44523145 +1
H -0.44556963 +1 6.75127521 +1 -3.00909179 +1
H 1.67064493 +1 5.43642616 +1 -2.89369214 +1
H 1.01113292 +1 -2.52263947 +1 2.42224443 +1
H 0.29271098 +1 -3.66102231 +1 4.49466411 +1
H -1.53544137 +1 -5.35453095 +1 4.44339721 +1
H -2.65449892 +1 -5.91653257 +1 2.29699773 +1
H -1.96351843 +1 -4.81454358 +1 0.19528131 +1
H 1.75801126 +1 -2.67141552 +1 -2.66143731 +1
H 1.46121772 +1 -3.68634419 +1 -4.89360587 +1
H -0.54055321 +1 -5.08666190 +1 -5.39704102 +1
H -2.25893434 +1 -5.48013900 +1 -3.64675734 +1
H -2.00007741 +1 -4.50052759 +1 -1.39170823 +1

κ^3 -1-Ho

N -0.00055684 +1 0.00007987 +1 -0.00017127 +1
Ho 2.55742622 +1 -0.00007799 +1 0.00022341 +1
C -2.13545547 +1 1.21752722 +1 0.00016787 +1
C -2.83402460 +1 0.06022263 +1 -0.36096341 +1
C -2.12395333 +1 -1.13845299 +1 -0.48757406 +1
C -0.75495990 +1 1.13014177 +1 0.16486807 +1
C -0.74677351 +1 -1.11430488 +1 -0.27621084 +1
O 1.73466116 +1 -2.19938230 +1 -0.17979554 +1
P 0.27114784 +1 2.60832592 +1 0.71246899 +1
C -0.31046004 +1 2.99917755 +1 2.39154780 +1
C -0.25164277 +1 1.96551678 +1 3.32999099 +1
C -0.63420791 +1 2.22611116 +1 4.65150913 +1
C -1.05038294 +1 3.50805989 +1 5.02057236 +1
C -1.08072024 +1 4.54031246 +1 4.07430284 +1
C -0.69881140 +1 4.29064515 +1 2.75286394 +1
C -0.08291541 +1 3.93744421 +1 -0.47522587 +1
C -1.30011658 +1 4.62755258 +1 -0.48836934 +1
C 0.92645204 +1 4.21703821 +1 -1.39602866 +1
C -1.50146855 +1 5.62506639 +1 -1.44153697 +1
C -0.49197185 +1 5.92313061 +1 -2.37194097 +1
C 0.71353646 +1 5.22400654 +1 -2.35106804 +1
P 0.27759539 +1 -2.68647450 +1 -0.28857654 +1
C -0.21728274 +1 -3.64268678 +1 1.18461032 +1
C 0.83006335 +1 -4.07630400 +1 1.99810676 +1
C 0.53289289 +1 -4.80667046 +1 3.15767944 +1
C -0.79455704 +1 -5.08730069 +1 3.48485424 +1
C -1.83669612 +1 -4.64165365 +1 2.65862860 +1
C -1.55045804 +1 -3.91222166 +1 1.50271742 +1
C -0.13990851 +1 -3.57711867 +1 -1.81515050 +1
C -0.97285005 +1 -4.70015355 +1 -1.80289900 +1
C -1.24208923 +1 -5.35789875 +1 -3.00423586 +1
C -0.66862176 +1 -4.89996104 +1 -4.19987777 +1
C 0.17405773 +1 -3.78789319 +1 -4.19550067 +1
C 0.44923264 +1 -3.11847389 +1 -2.99435184 +1
O 1.71964333 +1 2.09856216 +1 0.65067543 +1
O 2.18317411 +1 1.53262240 +1 -1.82718739 +1

N	1.72448971 +1	0.71811371 +1	-2.69772520 +1
O	1.62166482 +1	-0.45083779 +1	-2.17787224 +1
O	3.43043992 +1	-1.08907485 +1	1.96103091 +1
N	2.42609856 +1	-0.97183891 +1	2.72925192 +1
O	1.48570692 +1	-0.32569160 +1	2.12977839 +1
O	4.56484405 +1	-0.50436086 +1	-1.17641865 +1
N	5.35410525 +1	0.34015127 +1	-0.61294123 +1
O	4.70092341 +1	1.01961631 +1	0.25312978 +1
O	2.33610941 +1	-1.39986535 +1	3.83743933 +1
O	6.50594183 +1	0.46901052 +1	-0.86573584 +1
O	1.40525286 +1	0.99842870 +1	-3.80973628 +1
H	-2.67606769 +1	2.15708847 +1	0.13739889 +1
H	-3.91199166 +1	0.09057132 +1	-0.53226500 +1
H	-2.65089871 +1	-2.05605464 +1	-0.76053212 +1
H	0.10439618 +1	0.95293796 +1	3.07129117 +1
H	-0.58906999 +1	1.42840194 +1	5.39381952 +1
H	-1.34259576 +1	3.70980144 +1	6.05223957 +1
H	-1.38771926 +1	5.54177239 +1	4.37276263 +1
H	-0.69907978 +1	5.11918032 +1	2.04023592 +1
H	-2.09598288 +1	4.41105197 +1	0.22546002 +1
H	1.88239562 +1	3.66076461 +1	-1.40383525 +1
H	-2.43993837 +1	6.17614991 +1	-1.46927546 +1
H	-0.65730834 +1	6.70500650 +1	-3.11491234 +1
H	1.49607614 +1	5.44868446 +1	-3.07785082 +1
H	1.88146257 +1	-3.85887163 +1	1.75788058 +1
H	1.34355263 +1	-5.14424087 +1	3.80591321 +1
H	-1.02512336 +1	-5.65253871 +1	4.38934654 +1
H	-2.86939607 +1	-4.86193163 +1	2.92477929 +1
H	-2.37631014 +1	-3.56620613 +1	0.88092621 +1
H	-1.40920474 +1	-5.08972752 +1	-0.88088784 +1
H	-1.88782046 +1	-6.23445471 +1	-3.01482585 +1
H	-0.87866689 +1	-5.42170680 +1	-5.13483879 +1
H	0.62986022 +1	-3.43771065 +1	-5.12285598 +1
H	1.12977418 +1	-2.24704619 +1	-3.01350419 +1

κ^3 -1-Er

N	-0.01692368 +1	-0.00075130 +1	0.00004319 +1
Er	2.37837325 +1	-0.00040123 +1	-0.00024763 +1
C	-2.14913086 +1	1.20515711 +1	-0.00093336 +1
C	-2.85869148 +1	-0.00170232 +1	0.00013759 +1
C	-2.14841543 +1	-1.20809514 +1	0.00123419 +1
C	-0.75840063 +1	1.15290173 +1	0.00107838 +1
C	-0.75773991 +1	-1.15481179 +1	-0.00086895 +1
O	1.75639756 +1	-2.21050173 +1	0.42464210 +1
P	0.32504733 +1	2.69765015 +1	-0.11556040 +1
C	0.07611718 +1	3.78655301 +1	1.32286434 +1
C	1.23193073 +1	4.33686653 +1	1.87795737 +1
C	1.11161402 +1	5.19750486 +1	2.97876155 +1
C	-0.14743946 +1	5.48023408 +1	3.51074493 +1
C	-1.29748441 +1	4.90482860 +1	2.95184986 +1
C	-1.18879603 +1	4.04833103 +1	1.85361171 +1

C -0.36958567 +1 3.51555560 +1 -1.60390971 +1
C -1.35746067 +1 4.49908269 +1 -1.54513917 +1
C 0.18650343 +1 3.10997096 +1 -2.81845834 +1
C -1.81723147 +1 5.07109189 +1 -2.73437054 +1
C -1.27904864 +1 4.66379690 +1 -3.96302110 +1
C -0.27987283 +1 3.68943068 +1 -4.00636024 +1
P 0.32622719 +1 -2.69916071 +1 0.11542615 +1
C -0.36805079 +1 -3.51658831 +1 1.60408789 +1
C 0.18915965 +1 -3.11069858 +1 2.81798291 +1
C -0.27763311 +1 -3.68835949 +1 4.00659474 +1
C -1.27839438 +1 -4.66120652 +1 3.96440004 +1
C -1.81768446 +1 -5.06873730 +1 2.73636601 +1
C -1.35740613 +1 -4.49865747 +1 1.54637696 +1
C 0.07653002 +1 -3.78752209 +1 -1.32310124 +1
C -1.18891682 +1 -4.04977723 +1 -1.85240147 +1
C -1.29836615 +1 -4.90588242 +1 -2.95084583 +1
C -0.14857048 +1 -5.48013520 +1 -3.51139139 +1
C 1.11102074 +1 -5.19677824 +1 -2.98096755 +1
C 1.23209031 +1 -4.33663796 +1 -1.87984860 +1
O 1.75530500 +1 2.20936511 +1 -0.42510412 +1
O 1.83324513 +1 0.39662834 +1 -2.31602117 +1
N 1.31993681 +1 -0.71659023 +1 -2.72568630 +1
O 1.36574843 +1 -1.44681564 +1 -1.63567571 +1
O 1.83461931 +1 -0.39697207 +1 2.31591526 +1
N 1.32146518 +1 0.71631767 +1 2.72566780 +1
O 1.36603373 +1 1.44613514 +1 1.63533694 +1
O 4.55078683 +1 -0.56509100 +1 -0.83455690 +1
N 5.37967309 +1 -0.00150200 +1 0.00006442 +1
O 4.55107078 +1 0.56274136 +1 0.83451879 +1
O 0.89524660 +1 1.00752207 +1 3.78279599 +1
O 6.55174143 +1 -0.00198910 +1 0.00014797 +1
O 0.89239416 +1 -1.00750417 +1 -3.78238709 +1
H -2.69068431 +1 2.15416113 +1 -0.01433060 +1
H -3.95107936 +1 -0.00200963 +1 0.00006083 +1
H -2.68929847 +1 -2.15750804 +1 0.01479350 +1
H 2.23024299 +1 4.09766424 +1 1.48720748 +1
H 2.00621050 +1 5.63357975 +1 3.42361138 +1
H -0.23882880 +1 6.14541888 +1 4.37013777 +1
H -2.27376625 +1 5.12080644 +1 3.38190228 +1
H -2.09424127 +1 3.59851472 +1 1.44656496 +1
H -1.77216535 +1 4.84814770 +1 -0.59829375 +1
H 0.99122009 +1 2.35305576 +1 -2.86703452 +1
H -2.58606120 +1 5.84101990 +1 -2.70849554 +1
H -1.63921217 +1 5.11609823 +1 -4.88768329 +1
H 0.14658558 +1 3.38057525 +1 -4.96103292 +1
H 0.99505322 +1 -2.35495993 +1 2.86560561 +1
H 0.14955189 +1 -3.37921797 +1 4.96089398 +1
H -1.63871202 +1 -5.11241297 +1 4.88952477 +1
H -2.58777739 +1 -5.83740414 +1 2.71149414 +1
H -1.77276856 +1 -4.84810934 +1 0.59999825 +1

H -2.09407963 +1 -3.60071894 +1 -1.44395925 +1
H -2.27504974 +1 -5.12241763 +1 -3.37983762 +1
H -0.24053490 +1 -6.14495273 +1 -4.37105492 +1
H 2.00537505 +1 -5.63204040 +1 -3.42724052 +1
H 2.23071319 +1 -4.09687154 +1 -1.49019808 +1

κ^3 -1-Tm

N 0.00111265 +1 -0.00004230 +1 0.00030578 +1
Tm 2.49992253 +1 -0.00011834 +1 -0.00002440 +1
C -2.16597158 +1 1.20700326 +1 -0.00011364 +1
C -2.88731195 +1 0.01735146 +1 0.13292119 +1
C -2.17121586 +1 -1.18191708 +1 0.18772663 +1
C -0.77844406 +1 1.13932597 +1 -0.07175668 +1
C -0.78246621 +1 -1.13225595 +1 0.12514160 +1
O 1.67470233 +1 -2.20860480 +1 0.13447013 +1
P 0.23233431 +1 2.71773330 +1 -0.29323628 +1
C -0.27640636 +1 3.84375366 +1 1.03765488 +1
C 0.07786543 +1 3.46669920 +1 2.33510049 +1
C -0.25337138 +1 4.31229235 +1 3.40215658 +1
C -0.91366743 +1 5.51859963 +1 3.16033577 +1
C -1.24334405 +1 5.89391038 +1 1.85052746 +1
C -0.91592301 +1 5.05878115 +1 0.77972624 +1
C -0.19304441 +1 3.35499916 +1 -1.94343048 +1
C -1.47840719 +1 3.79088699 +1 -2.28096871 +1
C 0.84928599 +1 3.36347867 +1 -2.87008384 +1
C -1.71670975 +1 4.25604365 +1 -3.57405694 +1
C -0.67575606 +1 4.27818662 +1 -4.51665668 +1
C 0.59892632 +1 3.83362219 +1 -4.16866546 +1
P 0.22669426 +1 -2.72479601 +1 0.20182165 +1
C -0.15190089 +1 -3.50205559 +1 1.80374072 +1
C 0.88588758 +1 -3.47212055 +1 2.73626675 +1
C 0.67862252 +1 -4.03980866 +1 4.00233709 +1
C -0.54826851 +1 -4.62554288 +1 4.31322244 +1
C -1.58010337 +1 -4.65586213 +1 3.36181483 +1
C -1.38226545 +1 -4.09486703 +1 2.10012346 +1
C -0.29876141 +1 -3.72836729 +1 -1.21690880 +1
C -1.43139878 +1 -4.54810325 +1 -1.18869827 +1
C -1.76157730 +1 -5.28923348 +1 -2.32263356 +1
C -0.95849092 +1 -5.21009089 +1 -3.47199813 +1
C 0.16987126 +1 -4.39166707 +1 -3.48689258 +1
C 0.50970074 +1 -3.64073968 +1 -2.35067398 +1
O 1.67885713 +1 2.20436614 +1 -0.20789286 +1
O 2.54037099 +1 0.94742265 +1 -2.20561586 +1
N 2.04939618 +1 -0.01568956 +1 -2.89441676 +1
O 1.74640328 +1 -0.95636490 +1 -2.06749680 +1
O 2.63091270 +1 -0.98113310 +1 2.19530962 +1
N 1.99147266 +1 -0.12361351 +1 2.90117254 +1
O 1.57066465 +1 0.77996429 +1 2.07782254 +1
O 4.67748596 +1 -0.74181610 +1 -0.62666164 +1
N 5.40808170 +1 0.07489319 +1 0.04929921 +1
O 4.61457152 +1 0.85471070 +1 0.69567968 +1

O	1.78589088 +1	-0.15800157 +1	4.06808832 +1
O	6.59040447 +1	0.10297305 +1	0.07084724 +1
O	1.87267441 +1	-0.03269401 +1	-4.06814381 +1
H	-2.69881711 +1	2.16085651 +1	-0.03854327 +1
H	-3.97743512 +1	0.02435974 +1	0.19121409 +1
H	-2.71060217 +1	-2.12764448 +1	0.27809613 +1
H	0.62367456 +1	2.52849186 +1	2.54785669 +1
H	0.01987853 +1	4.02864032 +1	4.41929441 +1
H	-1.16651368 +1	6.17801659 +1	3.99205757 +1
H	-1.74261000 +1	6.84432996 +1	1.66842767 +1
H	-1.15447070 +1	5.38694915 +1	-0.23437977 +1
H	-2.30105610 +1	3.77597866 +1	-1.56558084 +1
H	1.86234415 +1	2.99556444 +1	-2.61484866 +1
H	-2.70929914 +1	4.60092653 +1	-3.85864315 +1
H	-0.87039501 +1	4.64209632 +1	-5.52674846 +1
H	1.40661748 +1	3.83986023 +1	-4.90274642 +1
H	1.86666627 +1	-3.01110457 +1	2.50763691 +1
H	1.48269545 +1	-4.01557514 +1	4.74025368 +1
H	-0.70951205 +1	-5.06493310 +1	5.29886668 +1
H	-2.53182448 +1	-5.12140950 +1	3.61203166 +1
H	-2.18991334 +1	-4.14504212 +1	1.36470453 +1
H	-2.06210098 +1	-4.63276734 +1	-0.29899378 +1
H	-2.63745271 +1	-5.93544815 +1	-2.31963714 +1
H	-1.22101900 +1	-5.79490435 +1	-4.35478227 +1
H	0.79529478 +1	-4.32857716 +1	-4.37866362 +1
H	1.40576119 +1	-2.99162599 +1	-2.38264474 +1

κ^3 -1-Yb

N	0.00122500 +1	0.00048464 +1	0.00165143 +1
Yb	2.43649929 +1	0.00068783 +1	0.00005227 +1
C	-2.14391700 +1	1.21663080 +1	-0.01659243 +1
C	-2.85886146 +1	0.03791194 +1	0.22011495 +1
C	-2.14822827 +1	-1.16226549 +1	0.32512123 +1
C	-0.75924027 +1	1.13886104 +1	-0.12941908 +1
C	-0.76136517 +1	-1.12367900 +1	0.21435497 +1
O	1.71573332 +1	-2.16095332 +1	0.23968078 +1
P	0.27958120 +1	2.66530971 +1	-0.50587012 +1
C	-0.21553064 +1	3.94860146 +1	0.67820485 +1
C	0.32765502 +1	3.84199909 +1	1.95999032 +1
C	0.00586447 +1	4.81494989 +1	2.91696689 +1
C	-0.83565465 +1	5.87573505 +1	2.58004714 +1
C	-1.35938187 +1	5.97924194 +1	1.28278503 +1
C	-1.04310962 +1	5.01719998 +1	0.32200506 +1
C	-0.11753674 +1	3.12200426 +1	-2.22298299 +1
C	-1.41423654 +1	3.42707366 +1	-2.64842529 +1
C	0.96206862 +1	3.12892833 +1	-3.10592437 +1
C	-1.62676854 +1	3.75974232 +1	-3.98621646 +1
C	-0.54864506 +1	3.77970835 +1	-4.88588841 +1
C	0.73769753 +1	3.46487955 +1	-4.45003973 +1
P	0.27565176 +1	-2.69396244 +1	0.33473086 +1
C	-0.10004164 +1	-3.43494587 +1	1.95376863 +1

C 0.90570822 +1 -3.31937798 +1 2.91381952 +1
 C 0.69308615 +1 -3.86169338 +1 4.19075387 +1
 C -0.50743173 +1 -4.50603460 +1 4.48555987 +1
 C -1.50842882 +1 -4.62068992 +1 3.50738567 +1
 C -1.30451774 +1 -4.08665605 +1 2.23558564 +1
 C -0.23547586 +1 -3.74386655 +1 -1.05678382 +1
 C -1.39504076 +1 -4.52556320 +1 -1.03474863 +1
 C -1.71314242 +1 -5.30187051 +1 -2.14797200 +1
 C -0.87185298 +1 -5.29472503 +1 -3.27278444 +1
 C 0.28201055 +1 -4.51325856 +1 -3.28286629 +1
 C 0.60996866 +1 -3.72753214 +1 -2.16636976 +1
 O 1.71847478 +1 2.14708379 +1 -0.35122154 +1
 O 2.58091939 +1 0.79404472 +1 -2.24322535 +1
 N 2.06015766 +1 -0.17169408 +1 -2.91724029 +1
 O 1.69332816 +1 -1.02656298 +1 -2.01304880 +1
 O 2.31948354 +1 -0.78959165 +1 2.24660672 +1
 N 1.80796107 +1 0.21315868 +1 2.87554261 +1
 O 1.58055204 +1 1.08496044 +1 1.94315442 +1
 O 4.58621560 +1 -0.81306199 +1 -0.54386914 +1
 N 5.36188132 +1 -0.03696808 +1 0.14396168 +1
 O 4.54183053 +1 0.75829476 +1 0.75472580 +1
 O 1.56337163 +1 0.31036007 +1 4.02778135 +1
 O 6.53779204 +1 -0.05109839 +1 0.20162535 +1
 O 1.91549542 +1 -0.25699724 +1 -4.08746754 +1
 H -2.67686862 +1 2.16745399 +1 -0.09642937 +1
 H -3.94627225 +1 0.05405235 +1 0.31865044 +1
 H -2.68794362 +1 -2.09656761 +1 0.49446039 +1
 H 1.01004603 +1 3.01658839 +1 2.24118956 +1
 H 0.42518609 +1 4.74127749 +1 3.92123964 +1
 H -1.08278986 +1 6.63403052 +1 3.32462308 +1
 H -2.00278261 +1 6.81865156 +1 1.02432846 +1
 H -1.43828654 +1 5.13491408 +1 -0.68873305 +1
 H -2.26618617 +1 3.40748672 +1 -1.96867279 +1
 H 1.98476248 +1 2.85582813 +1 -2.78100915 +1
 H -2.62800005 +1 4.00084346 +1 -4.33892976 +1
 H -0.72311209 +1 4.03801288 +1 -5.93150530 +1
 H 1.57484622 +1 3.46718586 +1 -5.15023958 +1
 H 1.86357394 +1 -2.80537741 +1 2.70004770 +1
 H 1.47304114 +1 -3.77152723 +1 4.94868724 +1
 H -0.67287906 +1 -4.92605123 +1 5.47882591 +1
 H -2.43980075 +1 -5.13133284 +1 3.74542653 +1
 H -2.08744617 +1 -4.20346671 +1 1.47986986 +1
 H -2.05635743 +1 -4.55363013 +1 -0.16307610 +1
 H -2.60952468 +1 -5.91911976 +1 -2.14856498 +1
 H -1.12566408 +1 -5.90613912 +1 -4.13986677 +1
 H 0.93626721 +1 -4.50442757 +1 -4.15579349 +1
 H 1.52488522 +1 -3.10552711 +1 -2.19494899 +1

κ^3 -1-Lu

N -0.00455882 +1 0.00002079 +1 -0.00039986 +1
 Lu 2.50315197 +1 0.00002796 +1 0.00002718 +1

C -2.17117554 +1 1.19932063 +1 0.00014800 +1
C -2.88969331 +1 0.00008314 +1 0.00885892 +1
C -2.17112771 +1 -1.19920502 +1 0.01050285 +1
C -0.78089333 +1 1.13928119 +1 -0.01681047 +1
C -0.78073366 +1 -1.13921066 +1 0.01749783 +1
O 1.68985873 +1 -2.13583006 +1 0.00264988 +1
P 0.25854513 +1 2.70581850 +1 -0.06953844 +1
C -0.23425357 +1 3.71904435 +1 1.35201707 +1
C 0.17521505 +1 3.26255290 +1 2.60686510 +1
C -0.14889347 +1 4.01765906 +1 3.74234335 +1
C -0.85891823 +1 5.21210006 +1 3.60920161 +1
C -1.24659626 +1 5.66713248 +1 2.34068738 +1
C -0.92641688 +1 4.92381403 +1 1.20270617 +1
C -0.08667090 +1 3.51634037 +1 -1.66130550 +1
C -1.35717155 +1 3.96980480 +1 -2.02779727 +1
C 1.01016516 +1 3.64055231 +1 -2.51476748 +1
C -1.52610161 +1 4.57051883 +1 -3.27572291 +1
C -0.43144758 +1 4.70843012 +1 -4.14402016 +1
C 0.82921107 +1 4.24562153 +1 -3.76761756 +1
P 0.25864415 +1 -2.70641528 +1 0.05195330 +1
C -0.08693141 +1 -3.53353302 +1 1.63473840 +1
C 1.00452569 +1 -3.65033599 +1 2.49606342 +1
C 0.82143391 +1 -4.26861575 +1 3.74221725 +1
C -0.43607072 +1 -4.75045079 +1 4.10458910 +1
C -1.52574574 +1 -4.61906014 +1 3.22893779 +1
C -1.35445966 +1 -4.00635545 +1 1.98729829 +1
C -0.23772250 +1 -3.70144605 +1 -1.38127441 +1
C -0.90408569 +1 -4.92209788 +1 -1.24472981 +1
C -1.22636532 +1 -5.65062613 +1 -2.39175938 +1
C -0.86584454 +1 -5.16514458 +1 -3.65686070 +1
C -0.18072770 +1 -3.95481292 +1 -3.77780386 +1
C 0.14536237 +1 -3.21467644 +1 -2.63318562 +1
O 1.69004400 +1 2.13570605 +1 -0.01847186 +1
O 2.85966596 +1 1.14094805 +1 -1.96601283 +1
N 2.20982219 +1 0.34490496 +1 -2.70984847 +1
O 1.61536427 +1 -0.57236243 +1 -2.03707519 +1
O 2.81095054 +1 -1.14408212 +1 1.97238805 +1
N 2.18527467 +1 -0.32250527 +1 2.71022316 +1
O 1.62310460 +1 0.60907680 +1 2.03011169 +1
O 4.52428920 +1 -0.71906319 +1 -0.78035635 +1
N 5.24501838 +1 -0.01501303 +1 0.00957409 +1
O 4.52641303 +1 0.69512133 +1 0.79625787 +1
O 2.08648837 +1 -0.41445713 +1 3.89665750 +1
O 6.43297270 +1 -0.02015164 +1 0.01275385 +1
O 2.11731820 +1 0.44609837 +1 -3.89614875 +1
H -2.70693318 +1 2.15159071 +1 0.01145703 +1
H -3.98126637 +1 0.00006137 +1 0.01377843 +1
H -2.70683670 +1 -2.15153750 +1 0.00253054 +1
H 0.75708066 +1 2.33049118 +1 2.73372665 +1
H 0.16790361 +1 3.67176180 +1 4.72728181 +1

H	-1.10689588 +1	5.80068403 +1	4.49387107 +1
H	-1.78602147 +1	6.60811039 +1	2.24432293 +1
H	-1.21200262 +1	5.31284040 +1	0.22319892 +1
H	-2.22106170 +1	3.86536149 +1	-1.37109668 +1
H	2.01381027 +1	3.26563188 +1	-2.23670854 +1
H	-2.50662851 +1	4.93124320 +1	-3.58210939 +1
H	-0.57189333 +1	5.17693558 +1	-5.11949929 +1
H	1.67920461 +1	4.34266432 +1	-4.44576980 +1
H	2.00543109 +1	-3.25971938 +1	2.22929050 +1
H	1.66736794 +1	-4.36110137 +1	4.42606425 +1
H	-0.57813792 +1	-5.22957415 +1	5.07464589 +1
H	-2.50385428 +1	-4.99488078 +1	3.52455608 +1
H	-2.21406002 +1	-3.90830754 +1	1.32397202 +1
H	-1.16777397 +1	-5.33488771 +1	-0.26868886 +1
H	-1.74576712 +1	-6.60372998 +1	-2.30521254 +1
H	-1.11487310 +1	-5.74216189 +1	-4.54876636 +1
H	0.11564156 +1	-3.58546094 +1	-4.76050101 +1
H	0.70912525 +1	-2.27045438 +1	-2.75108732 +1

Cartesian coordinates of atoms in the optimized geometries for $(\kappa^1-1)_2-$ M complexes

$(\kappa^1-1)_2$ -Ce

Ce	0.00787597 +1	0.02676610 +1	0.09303777 +1
O	10.00308817 +1	-0.02421850 +1	-0.02589797 +1
C	-3.52499885 +1	3.28441454 +1	0.03209591 +1
C	-4.18459615 +1	4.41118412 +1	-0.48879284 +1
C	-5.55259634 +1	4.58434511 +1	-0.25704613 +1
C	-4.29263952 +1	2.38705836 +1	0.77141569 +1
C	-6.21302117 +1	3.60203465 +1	0.49380748 +1
N	-5.61935790 +1	2.51543804 +1	1.01294920 +1
P	-3.70313157 +1	0.83751592 +1	1.56558146 +1
C	-4.86602946 +1	-0.49448959 +1	1.09049032 +1
C	-4.59898810 +1	-1.18238693 +1	-0.09423562 +1
C	-5.46503268 +1	-2.20813182 +1	-0.49287005 +1
C	-6.57807680 +1	-2.52879163 +1	0.28969248 +1
C	-6.83089916 +1	-1.83120225 +1	1.47673849 +1
C	-5.96762340 +1	-0.80875255 +1	1.88595594 +1
C	-3.70148238 +1	1.07065112 +1	3.37676425 +1
C	-2.57633777 +1	0.62160677 +1	4.07057597 +1
C	-4.77060307 +1	1.68006648 +1	4.03596135 +1
C	-2.52780003 +1	0.78052227 +1	5.46152424 +1
C	-3.59413290 +1	1.38185369 +1	6.13520774 +1
C	-4.71416783 +1	1.83106613 +1	5.42477283 +1
P	-8.03649397 +1	3.66341427 +1	0.88682404 +1
C	-8.79571940 +1	2.36807663 +1	-0.18634510 +1
C	-9.99563377 +1	2.72449953 +1	-0.80192803 +1
C	-10.63931189 +1	1.79948247 +1	-1.63390576 +1
C	-10.07440951 +1	0.53811594 +1	-1.84344748 +1

C -8.86553160 +1 0.19634208 +1 -1.22648359 +1
C -8.21827282 +1 1.11666990 +1 -0.39419349 +1
C -8.16543216 +1 3.08095905 +1 2.63805765 +1
C -8.18711355 +1 4.07780247 +1 3.61374089 +1
C -8.28717929 +1 3.71288790 +1 4.96222479 +1
C -8.37453197 +1 2.36278845 +1 5.31560169 +1
C -8.36422147 +1 1.37384814 +1 4.32618814 +1
C -8.26169597 +1 1.73363050 +1 2.97643242 +1
O -8.59923290 +1 5.04365523 +1 0.67209992 +1
O -2.27786059 +1 0.50276630 +1 1.06225224 +1
O -0.64830144 +1 2.33161702 +1 -0.88720039 +1
N 0.05612068 +1 2.37896501 +1 -1.96346118 +1
O 0.73969190 +1 1.29514947 +1 -2.04437815 +1
O -0.36786607 +1 -2.52990987 +1 -0.06897070 +1
N -1.28286311 +1 -2.60632009 +1 -0.96545332 +1
O -1.57105834 +1 -1.41735220 +1 -1.36111366 +1
O 0.33076446 +1 -0.08104444 +1 2.66141137 +1
N 1.28713725 +1 0.75286651 +1 2.84510567 +1
O 1.62870167 +1 1.24253548 +1 1.70461890 +1
O -1.78478863 +1 -3.60640438 +1 -1.36278901 +1
O 1.78250036 +1 1.02810652 +1 3.88840407 +1
O 0.06660832 +1 3.27089310 +1 -2.74516727 +1
H -2.45112729 +1 3.13550564 +1 -0.15624254 +1
H -3.62475224 +1 5.14418255 +1 -1.07371893 +1
H -6.08560301 +1 5.45822792 +1 -0.64619029 +1
H -3.72695310 +1 -0.95380055 +1 -0.72341900 +1
H -5.26160388 +1 -2.75968944 +1 -1.41179257 +1
H -7.24845893 +1 -3.33065509 +1 -0.02142167 +1
H -7.69515618 +1 -2.09102750 +1 2.08560408 +1
H -6.17368340 +1 -0.28333713 +1 2.82214413 +1
H -1.72088804 +1 0.15156205 +1 3.56283509 +1
H -5.65303450 +1 2.05133112 +1 3.50215065 +1
H -1.65255743 +1 0.43603225 +1 6.01328308 +1
H -3.55292244 +1 1.50518297 +1 7.21786911 +1
H -5.54261064 +1 2.30410227 +1 5.95095462 +1
H -10.44220740 +1 3.71610053 +1 -0.65509948 +1
H -11.57672302 +1 2.06600952 +1 -2.11905563 +1
H -10.57464918 +1 -0.18044477 +1 -2.49241052 +1
H -8.42307322 +1 -0.78385570 +1 -1.39684905 +1
H -7.26880232 +1 0.82882227 +1 0.06847514 +1
H -8.14170137 +1 5.14080733 +1 3.34849838 +1
H -8.30628998 +1 4.48187206 +1 5.73285773 +1
H -8.45968574 +1 2.07978857 +1 6.36465247 +1
H -8.44482436 +1 0.32538386 +1 4.60592944 +1
H -8.26517144 +1 0.94792362 +1 2.21743580 +1
C 5.82441755 +1 1.31716068 +1 1.36746612 +1
C 7.10238379 +1 1.01756505 +1 0.88510612 +1
C 7.21084797 +1 0.01243968 +1 -0.08559199 +1
N 6.17492781 +1 -0.69109059 +1 -0.57099314 +1
C 4.95553393 +1 -0.37674015 +1 -0.07324346 +1

C 4.71174762 +1 0.61174795 +1 0.87858630 +1
P 8.83557884 +1 -0.49228397 +1 -0.85369640 +1
C 8.73894904 +1 -2.33217283 +1 -1.01543001 +1
C 9.31313978 +1 -3.06929164 +1 0.02032185 +1
C 9.28375805 +1 -4.46837365 +1 -0.03828497 +1
C 8.69265391 +1 -5.10911810 +1 -1.13146220 +1
C 8.13083945 +1 -4.35754361 +1 -2.16917701 +1
C 8.15535373 +1 -2.95830714 +1 -2.11387085 +1
C 8.79018247 +1 0.21503554 +1 -2.55808145 +1
C 9.98243032 +1 0.78269203 +1 -3.00763086 +1
C 10.03320203 +1 1.34188103 +1 -4.29105893 +1
C 8.89456286 +1 1.33276050 +1 -5.10187313 +1
C 7.70191492 +1 0.76867368 +1 -4.63488874 +1
C 7.64603572 +1 0.20765346 +1 -3.35400400 +1
P 3.68475478 +1 -1.43172583 +1 -0.88058888 +1
C 3.93718024 +1 -1.28536736 +1 -2.68706894 +1
C 3.24505113 +1 -0.27839014 +1 -3.36037085 +1
C 3.43059093 +1 -0.13619890 +1 -4.74193039 +1
C 4.29539266 +1 -0.99495898 +1 -5.42519557 +1
C 4.97857996 +1 -2.00447645 +1 -4.73570560 +1
C 4.79771041 +1 -2.15592819 +1 -3.35718684 +1
C 3.90058964 +1 -3.16676302 +1 -0.35361110 +1
C 2.73420751 +1 -3.88463455 +1 -0.08015947 +1
C 2.83901250 +1 -5.22166606 +1 0.32394021 +1
C 4.09624184 +1 -5.81825182 +1 0.45201322 +1
C 5.25653564 +1 -5.08380356 +1 0.17865075 +1
C 5.16268803 +1 -3.74816843 +1 -0.22465490 +1
O 2.27659647 +1 -0.92831810 +1 -0.48016521 +1
H 5.68454166 +1 2.09646837 +1 2.11982961 +1
H 7.98523551 +1 1.54855695 +1 1.25691331 +1
H 3.70138681 +1 0.85212538 +1 1.23909442 +1
H 9.79909555 +1 -2.57906072 +1 0.87242384 +1
H 9.72972823 +1 -5.05489088 +1 0.76337641 +1
H 8.67686815 +1 -6.19781510 +1 -1.18015445 +1
H 7.68210777 +1 -4.86126153 +1 -3.02295158 +1
H 7.72063998 +1 -2.38803020 +1 -2.93790976 +1
H 10.87887628 +1 0.80829114 +1 -2.37539338 +1
H 10.95850820 +1 1.78671481 +1 -4.65326811 +1
H 8.93415491 +1 1.76974335 +1 -6.09956896 +1
H 6.81346146 +1 0.76987101 +1 -5.26440092 +1
H 6.69870859 +1 -0.21845176 +1 -3.00905242 +1
H 2.55110491 +1 0.40584874 +1 -2.84913413 +1
H 2.89108238 +1 0.64389895 +1 -5.28009672 +1
H 4.43445072 +1 -0.88401923 +1 -6.50107336 +1
H 5.64418911 +1 -2.67563666 +1 -5.27549505 +1
H 5.33117048 +1 -2.95536166 +1 -2.83617767 +1
H 1.73287799 +1 -3.43650408 +1 -0.16542430 +1
H 1.93515556 +1 -5.79146060 +1 0.54108548 +1
H 4.17446294 +1 -6.85870573 +1 0.76866791 +1
H 6.23614088 +1 -5.54894223 +1 0.28326537 +1

H 6.08664313 +1 -3.19329665 +1 -0.42393075 +1

$(\kappa^1-1)_2$ -Pr

Pr	0.00000000 +1	0.00000000 +1	0.00000000 +1
O	9.97570400 +1	0.00000000 +1	0.00000000 +1
C	-3.51179841 +1	3.25653814 +1	0.00000000 +1
C	-4.17694445 +1	4.38734164 +1	-0.50506715 +1
C	-5.54034399 +1	4.56263487 +1	-0.25014964 +1
C	-4.26950277 +1	2.35820574 +1	0.74827877 +1
C	-6.19113467 +1	3.57921666 +1	0.50830664 +1
N	-5.59182935 +1	2.48911879 +1	1.01300587 +1
P	-3.67089718 +1	0.79823990 +1	1.51350549 +1
C	-4.83770449 +1	-0.52417726 +1	1.02186702 +1
C	-4.60723909 +1	-1.15942361 +1	-0.19936597 +1
C	-5.47990041 +1	-2.17461868 +1	-0.61048657 +1
C	-6.56231140 +1	-2.53711256 +1	0.19650986 +1
C	-6.77781314 +1	-1.89245636 +1	1.42024112 +1
C	-5.90802529 +1	-0.88063046 +1	1.84180386 +1
C	-3.65192809 +1	0.98926337 +1	3.32917672 +1
C	-2.54204700 +1	0.47861491 +1	4.00499819 +1
C	-4.69178719 +1	1.62460068 +1	4.00991000 +1
C	-2.47951781 +1	0.60171149 +1	5.39893002 +1
C	-3.51700109 +1	1.22898426 +1	6.09382863 +1
C	-4.62195893 +1	1.73957585 +1	5.40158266 +1
P	-8.00693951 +1	3.65733889 +1	0.93182220 +1
C	-8.80364447 +1	2.34640950 +1	-0.09421056 +1
C	-10.03491850 +1	2.68857449 +1	-0.65380820 +1
C	-10.71509750 +1	1.74853626 +1	-1.43849948 +1
C	-10.15442403 +1	0.48701825 +1	-1.65884394 +1
C	-8.91367370 +1	0.16038032 +1	-1.10001751 +1
C	-8.23056204 +1	1.09518455 +1	-0.31362495 +1
C	-8.11430556 +1	3.10834915 +1	2.69476811 +1
C	-8.19604252 +1	4.12334978 +1	3.64790680 +1
C	-8.28989487 +1	3.78232801 +1	5.00320838 +1
C	-8.31066245 +1	2.43736302 +1	5.38480752 +1
C	-8.23942645 +1	1.42913955 +1	4.41723350 +1
C	-8.14267084 +1	1.76502919 +1	3.06110272 +1
O	-8.56267162 +1	5.03834670 +1	0.70208019 +1
O	-2.24927474 +1	0.47367256 +1	0.99218929 +1
O	-0.64696708 +1	2.28736140 +1	-0.95871329 +1
N	0.09467594 +1	2.34242010 +1	-2.00701081 +1
O	0.79127100 +1	1.26847048 +1	-2.08446305 +1
O	-0.39469201 +1	-2.52200639 +1	-0.23886896 +1
N	-1.30712747 +1	-2.54558162 +1	-1.13835560 +1
O	-1.58176002 +1	-1.34397365 +1	-1.49975463 +1
O	0.32211826 +1	-0.23507115 +1	2.53448920 +1
N	1.23607147 +1	0.63477301 +1	2.74973945 +1
O	1.55271256 +1	1.20704773 +1	1.64290175 +1
O	-1.82470874 +1	-3.52431129 +1	-1.57034153 +1
O	1.72434867 +1	0.87753958 +1	3.80597546 +1
O	0.12621595 +1	3.24427693 +1	-2.77835955 +1

H -2.44160689 +1 3.10572914 +1 -0.20682287 +1
H -3.62483336 +1 5.12160379 +1 -1.09570708 +1
H -6.07786565 +1 5.43932109 +1 -0.62737120 +1
H -3.75901870 +1 -0.89797945 +1 -0.84777195 +1
H -5.30525342 +1 -2.68573615 +1 -1.55829201 +1
H -7.23756469 +1 -3.33097427 +1 -0.12456276 +1
H -7.61805433 +1 -2.18513307 +1 2.04768232 +1
H -6.08353001 +1 -0.39704803 +1 2.80624603 +1
H -1.70892848 +1 -0.01289014 +1 3.48071043 +1
H -5.56162097 +1 2.04301207 +1 3.49092315 +1
H -1.61551887 +1 0.20974865 +1 5.93661069 +1
H -3.46457260 +1 1.32492203 +1 7.17882740 +1
H -5.42792952 +1 2.23257326 +1 5.94415843 +1
H -10.47845664 +1 3.68032571 +1 -0.49973712 +1
H -11.67762821 +1 2.00343980 +1 -1.87862223 +1
H -10.68342973 +1 -0.24323659 +1 -2.27091023 +1
H -8.47420758 +1 -0.81960925 +1 -1.27943172 +1
H -7.25800247 +1 0.81763416 +1 0.10494868 +1
H -8.20155179 +1 5.18149176 +1 3.35910510 +1
H -8.35517228 +1 4.56546673 +1 5.75680519 +1
H -8.39091064 +1 2.17268517 +1 6.43900313 +1
H -8.26722891 +1 0.38415936 +1 4.71919094 +1
H -8.09520803 +1 0.96519219 +1 2.31845579 +1
C 5.77734524 +1 1.35514751 +1 1.35089089 +1
C 7.06096585 +1 1.05896826 +1 0.88132075 +1
C 7.18295874 +1 0.04455875 +1 -0.07796339 +1
N 6.15493741 +1 -0.67037903 +1 -0.56324383 +1
C 4.92981335 +1 -0.35938387 +1 -0.07762452 +1
C 4.67248708 +1 0.63742445 +1 0.86167315 +1
P 8.81180879 +1 -0.46601758 +1 -0.83379513 +1
C 8.70875845 +1 -2.30598656 +1 -0.99244634 +1
C 9.25965805 +1 -3.04301679 +1 0.05595363 +1
C 9.22429219 +1 -4.44203932 +1 0.00079645 +1
C 8.65084141 +1 -5.08312759 +1 -1.10168587 +1
C 8.11191177 +1 -4.33172450 +1 -2.15154814 +1
C 8.14226904 +1 -2.93246599 +1 -2.09961387 +1
C 8.77781691 +1 0.23881406 +1 -2.53927980 +1
C 9.97233768 +1 0.80834471 +1 -2.98022969 +1
C 10.03099381 +1 1.36834844 +1 -4.26295259 +1
C 8.89788960 +1 1.35772440 +1 -5.08148258 +1
C 7.70321619 +1 0.79033668 +1 -4.62355117 +1
C 7.63932894 +1 0.22859684 +1 -3.34339637 +1
P 3.68005776 +1 -1.43918685 +1 -0.88476417 +1
C 3.95869271 +1 -1.32507237 +1 -2.68935648 +1
C 3.29071209 +1 -0.31999738 +1 -3.38943414 +1
C 3.49809563 +1 -0.20432827 +1 -4.77030561 +1
C 4.36068020 +1 -1.08658141 +1 -5.42612571 +1
C 5.02010953 +1 -2.09303740 +1 -4.70972705 +1
C 4.81690456 +1 -2.21856512 +1 -3.33169144 +1
C 3.90241838 +1 -3.16199403 +1 -0.32196430 +1

C	2.73713404	+1	-3.88882559	+1	-0.06757543	+1
C	2.84631242	+1	-5.21512168	+1	0.36922794	+1
C	4.10647978	+1	-5.79261878	+1	0.54689458	+1
C	5.26523851	+1	-5.05037809	+1	0.28888338	+1
C	5.16722634	+1	-3.72507922	+1	-0.14648615	+1
O	2.26196528	+1	-0.94092772	+1	-0.51310173	+1
H	5.62700800	+1	2.14125528	+1	2.09410873	+1
H	7.93751915	+1	1.59923304	+1	1.25417068	+1
H	3.65828692	+1	0.87482989	+1	1.21228292	+1
H	9.73233698	+1	-2.55283093	+1	0.91533334	+1
H	9.65242658	+1	-5.02831699	+1	0.81221984	+1
H	8.63085773	+1	-6.17189180	+1	-1.14777114	+1
H	7.67660258	+1	-4.83569840	+1	-3.01217562	+1
H	7.72524715	+1	-2.36259212	+1	-2.93317084	+1
H	10.86436370	+1	0.83482275	+1	-2.34182876	+1
H	10.95796065	+1	1.81498584	+1	-4.61855111	+1
H	8.94344791	+1	1.79614684	+1	-6.07824678	+1
H	6.81948186	+1	0.78977121	+1	-5.25964633	+1
H	6.69085838	+1	-0.20083456	+1	-3.00554349	+1
H	2.59973959	+1	0.38271688	+1	-2.89954120	+1
H	2.97760920	+1	0.57371853	+1	-5.32964327	+1
H	4.51670354	+1	-0.99601834	+1	-6.50158028	+1
H	5.68456770	+1	-2.78193026	+1	-5.22827157	+1
H	5.33151247	+1	-3.01629716	+1	-2.78926417	+1
H	1.73360986	+1	-3.45593360	+1	-0.19401770	+1
H	1.94361743	+1	-5.79160546	+1	0.57298010	+1
H	4.18796815	+1	-6.82434635	+1	0.89013167	+1
H	6.24693599	+1	-5.50115281	+1	0.43021437	+1
H	6.09001888	+1	-3.16441875	+1	-0.33484256	+1

$(\kappa^1-1)_2$ -Nd

Nd	0.10131182	+1	0.27578788	+1	0.17881395	+1
O	9.99104192	+1	-0.06254740	+1	-0.25681164	+1
C	-3.38405107	+1	3.45885291	+1	0.30837166	+1
C	-4.07254628	+1	4.59083860	+1	-0.16243248	+1
C	-5.45905007	+1	4.67575244	+1	-0.00577732	+1
C	-4.14391897	+1	2.46915228	+1	0.92714398	+1
C	-6.10904654	+1	3.60294487	+1	0.62119873	+1
N	-5.48838752	+1	2.51045760	+1	1.09287788	+1
P	-3.52615406	+1	0.89072190	+1	1.63388122	+1
C	-4.63322879	+1	-0.44100842	+1	1.04136930	+1
C	-4.45230613	+1	-0.88183008	+1	-0.27089653	+1
C	-5.27366439	+1	-1.90374455	+1	-0.76168831	+1
C	-6.25821745	+1	-2.46545303	+1	0.05722676	+1
C	-6.42462186	+1	-2.01452764	+1	1.37153719	+1
C	-5.60290885	+1	-0.99864970	+1	1.87347793	+1
C	-3.57193058	+1	1.00121531	+1	3.45431303	+1
C	-2.45150210	+1	0.53825144	+1	4.14609496	+1
C	-4.67507442	+1	1.53646369	+1	4.12219135	+1
C	-2.44387612	+1	0.60437548	+1	5.54558198	+1
C	-3.54451055	+1	1.12906676	+1	6.22780590	+1

C -4.65914632 +1 1.59463274 +1 5.51861864 +1
P -7.95715856 +1 3.53362654 +1 0.87144386 +1
C -8.54289937 +1 2.28290579 +1 -0.35329982 +1
C -9.67239636 +1 2.64406747 +1 -1.08780327 +1
C -10.18362495 +1 1.75287371 +1 -2.03988299 +1
C -9.55859466 +1 0.51989578 +1 -2.24783745 +1
C -8.42206463 +1 0.17269710 +1 -1.50859782 +1
C -7.90763021 +1 1.05904050 +1 -0.55542409 +1
C -8.20633460 +1 2.81536524 +1 2.55576352 +1
C -8.63530958 +1 3.70573820 +1 3.53994235 +1
C -8.85557432 +1 3.23307746 +1 4.83997541 +1
C -8.65264692 +1 1.88160305 +1 5.13500713 +1
C -8.23048210 +1 0.99751360 +1 4.13586515 +1
C -8.00695289 +1 1.46560481 +1 2.83522081 +1
O -8.58723991 +1 4.89226995 +1 0.70590188 +1
O -2.07874334 +1 0.62953975 +1 1.14726218 +1
O -0.54691675 +1 2.48691939 +1 -0.62014388 +1
N 0.21961677 +1 2.54441913 +1 -1.64465778 +1
O 0.93024562 +1 1.48972739 +1 -1.76943257 +1
O -0.36847645 +1 -2.10636741 +1 -0.01849738 +1
N -1.20215854 +1 -2.03346797 +1 -0.98117781 +1
O -1.37145496 +1 -0.83887128 +1 -1.40538530 +1
O 0.42936895 +1 0.02808781 +1 2.58189456 +1
N 1.36467722 +1 0.88380462 +1 2.71679050 +1
O 1.65336342 +1 1.47842001 +1 1.62033141 +1
O -1.76836757 +1 -2.97812996 +1 -1.43994879 +1
O 1.91817655 +1 1.10837537 +1 3.74911244 +1
O 0.26055287 +1 3.47069383 +1 -2.39111203 +1
H -2.29570955 +1 3.37489438 +1 0.17175639 +1
H -3.51991517 +1 5.39559893 +1 -0.65204533 +1
H -6.01551910 +1 5.55045163 +1 -0.35897749 +1
H -3.67924598 +1 -0.46376040 +1 -0.93015657 +1
H -5.13266718 +1 -2.26770111 +1 -1.78031878 +1
H -6.89358279 +1 -3.26450450 +1 -0.32648204 +1
H -7.18736736 +1 -2.46203256 +1 2.00681545 +1
H -5.73515721 +1 -0.67236402 +1 2.90843091 +1
H -1.57014968 +1 0.12850715 +1 3.62936101 +1
H -5.55238663 +1 1.91852865 +1 3.58815975 +1
H -1.57329817 +1 0.24846915 +1 6.09733181 +1
H -3.53497321 +1 1.18047960 +1 7.31710145 +1
H -5.51302919 +1 2.00857919 +1 6.05338444 +1
H -10.16486118 +1 3.61371790 +1 -0.94063601 +1
H -11.06505206 +1 2.02341948 +1 -2.61858341 +1
H -9.95539315 +1 -0.17201142 +1 -2.99041413 +1
H -7.93243150 +1 -0.78527185 +1 -1.67639659 +1
H -7.01301519 +1 0.76747998 +1 0.00439916 +1
H -8.81276683 +1 4.76513528 +1 3.31459331 +1
H -9.19118784 +1 3.91794432 +1 5.61694614 +1
H -8.82991604 +1 1.51350137 +1 6.14536531 +1
H -8.08391058 +1 -0.05492560 +1 4.36906988 +1

H -7.67910180 +1 0.76211575 +1 2.06534888 +1
C 5.92132098 +1 1.51822585 +1 1.21947558 +1
C 7.16643714 +1 1.13877892 +1 0.70856014 +1
C 7.20057090 +1 0.05705701 +1 -0.18225300 +1
N 6.12295110 +1 -0.64687738 +1 -0.56433118 +1
C 4.93699960 +1 -0.25288085 +1 -0.04209842 +1
C 4.76600225 +1 0.81562481 +1 0.83586646 +1
P 8.76946843 +1 -0.56133042 +1 -0.98274326 +1
C 8.61789774 +1 -2.40416027 +1 -0.98373636 +1
C 9.28912085 +1 -3.07312147 +1 0.03975517 +1
C 9.22630337 +1 -4.47110029 +1 0.09864079 +1
C 8.50576584 +1 -5.17878855 +1 -0.86823337 +1
C 7.84600270 +1 -4.49580041 +1 -1.89576349 +1
C 7.90237714 +1 -3.09778848 +1 -1.95659238 +1
C 8.65563425 +1 0.00053387 +1 -2.73708526 +1
C 9.83708864 +1 0.49746916 +1 -3.28767474 +1
C 9.83906738 +1 0.94248735 +1 -4.61590403 +1
C 8.66334411 +1 0.89218400 +1 -5.37034926 +1
C 7.48255158 +1 0.40012695 +1 -4.80277432 +1
C 7.47540332 +1 -0.04739715 +1 -3.47679828 +1
P 3.60688112 +1 -1.32204828 +1 -0.72167491 +1
C 3.78829979 +1 -1.30032626 +1 -2.54182422 +1
C 3.19496205 +1 -0.24925380 +1 -3.24165550 +1
C 3.32839275 +1 -0.20375180 +1 -4.63561904 +1
C 4.04457528 +1 -1.20008668 +1 -5.30419047 +1
C 4.63061277 +1 -2.25072525 +1 -4.58736157 +1
C 4.50030271 +1 -2.30659119 +1 -3.19593066 +1
C 3.78336844 +1 -3.02616222 +1 -0.09346091 +1
C 2.59758981 +1 -3.69615474 +1 0.21671300 +1
C 2.66658171 +1 -5.00862021 +1 0.70065630 +1
C 3.90769446 +1 -5.62840326 +1 0.86987584 +1
C 5.08742429 +1 -4.94207398 +1 0.55751098 +1
C 5.02952429 +1 -3.63081847 +1 0.07508403 +1
O 2.22937947 +1 -0.75112419 +1 -0.29982662 +1
H 5.83967766 +1 2.35842661 +1 1.91246802 +1
H 8.08073923 +1 1.66800533 +1 0.99767672 +1
H 3.78031426 +1 1.11899277 +1 1.21516437 +1
H 9.87494002 +1 -2.53010188 +1 0.79156480 +1
H 9.74596815 +1 -5.00497875 +1 0.89262078 +1
H 8.46397402 +1 -6.26705588 +1 -0.82632151 +1
H 7.29486029 +1 -5.05249104 +1 -2.65088803 +1
H 7.38534311 +1 -2.58125112 +1 -2.76848684 +1
H 10.76261173 +1 0.55485995 +1 -2.70099864 +1
H 10.75536292 +1 1.33085849 +1 -5.05717403 +1
H 8.66497886 +1 1.24068183 +1 -6.40300943 +1
H 6.56551328 +1 0.36911307 +1 -5.38912150 +1
H 6.53658067 +1 -0.41905376 +1 -3.05425367 +1
H 2.61817326 +1 0.54313346 +1 -2.74072552 +1
H 2.86396913 +1 0.60894551 +1 -5.19505620 +1
H 4.14209251 +1 -1.16433128 +1 -6.38975777 +1

H	5.17988430 +1	-3.02823605 +1	-5.11541719 +1
H	4.95367600 +1	-3.13998430 +1	-2.65275087 +1
H	1.60875549 +1	-3.22721469 +1	0.09878356 +1
H	1.74791738 +1	-5.54095621 +1	0.94789631 +1
H	3.95810197 +1	-6.64945581 +1	1.24915146 +1
H	6.05423648 +1	-5.42552797 +1	0.69315538 +1
H	5.96752363 +1	-3.11284787 +1	-0.15455621 +1

$(\kappa^1-1)_2$ -Sm

Sm	0.10289715 +1	0.27428983 +1	0.19478796 +1
O	9.96768515 +1	-0.03352931 +1	-0.26638232 +1
C	-3.34125150 +1	3.48122203 +1	0.32884965 +1
C	-4.02267722 +1	4.61721128 +1	-0.14266321 +1
C	-5.40994605 +1	4.70588713 +1	0.00398637 +1
C	-4.10861244 +1	2.49175955 +1	0.93871505 +1
C	-6.06791452 +1	3.63243808 +1	0.62150117 +1
N	-5.45425325 +1	2.53634902 +1	1.09392648 +1
P	-3.49922352 +1	0.91108355 +1	1.64735269 +1
C	-4.60828022 +1	-0.41899849 +1	1.05462891 +1
C	-4.44013939 +1	-0.85071916 +1	-0.26232937 +1
C	-5.26534319 +1	-1.87021075 +1	-0.75193026 +1
C	-6.24000957 +1	-2.43981850 +1	0.07321613 +1
C	-6.39251989 +1	-1.99930838 +1	1.39276058 +1
C	-5.56764936 +1	-0.98522921 +1	1.89304342 +1
C	-3.55007324 +1	1.02290051 +1	3.46766285 +1
C	-2.43629150 +1	0.55267725 +1	4.16510864 +1
C	-4.65208829 +1	1.56742007 +1	4.13020790 +1
C	-2.43387612 +1	0.62141782 +1	5.56458660 +1
C	-3.53288150 +1	1.15633571 +1	6.24127611 +1
C	-4.64107395 +1	1.62887140 +1	5.52648442 +1
P	-7.91885137 +1	3.56532542 +1	0.85042499 +1
C	-8.48709118 +1	2.32561664 +1	-0.39373758 +1
C	-9.58963836 +1	2.70343238 +1	-1.16003228 +1
C	-10.08341250 +1	1.82164193 +1	-2.12994019 +1
C	-9.46832698 +1	0.58129278 +1	-2.32319151 +1
C	-8.35885245 +1	0.21728140 +1	-1.55164195 +1
C	-7.86179788 +1	1.09421913 +1	-0.58079966 +1
C	-8.19157887 +1	2.83375028 +1	2.52494552 +1
C	-8.66276131 +1	3.70918398 +1	3.50320422 +1
C	-8.90289743 +1	3.22479074 +1	4.79539565 +1
C	-8.67721438 +1	1.87649484 +1	5.08837269 +1
C	-8.21195356 +1	1.00743909 +1	4.09518798 +1
C	-7.96833557 +1	1.48734520 +1	2.80256184 +1
O	-8.54538010 +1	4.92586345 +1	0.68675050 +1
O	-2.05067360 +1	0.64640009 +1	1.16387602 +1
O	-0.52876530 +1	2.48631893 +1	-0.62050167 +1
N	0.24189796 +1	2.55197165 +1	-1.64360751 +1
O	0.94398362 +1	1.48780458 +1	-1.75242438 +1
O	-0.38100091 +1	-2.11209538 +1	-0.01301141 +1
N	-1.21619176 +1	-2.05617265 +1	-0.97863210 +1
O	-1.38015439 +1	-0.85058055 +1	-1.38137341 +1

O 0.42887305 +1 0.03839701 +1 2.60671416 +1
N 1.35205572 +1 0.90635262 +1 2.76496516 +1
O 1.64650359 +1 1.47686320 +1 1.65435094 +1
O -1.77381920 +1 -2.99868230 +1 -1.44550513 +1
O 1.87822052 +1 1.15565518 +1 3.80316763 +1
O 0.29248594 +1 3.47664658 +1 -2.38881486 +1
H -2.25231274 +1 3.39406355 +1 0.19871906 +1
H -3.46404760 +1 5.42200877 +1 -0.62527103 +1
H -5.96104178 +1 5.58366945 +1 -0.34989850 +1
H -3.67343083 +1 -0.42802069 +1 -0.92624235 +1
H -5.13476887 +1 -2.22629256 +1 -1.77469654 +1
H -6.87843731 +1 -3.23681113 +1 -0.30972063 +1
H -7.14684192 +1 -2.45355495 +1 2.03329793 +1
H -5.68924609 +1 -0.66711240 +1 2.93190614 +1
H -1.55572787 +1 0.13504377 +1 3.65317557 +1
H -5.52492919 +1 1.95377859 +1 3.59203479 +1
H -1.56837748 +1 0.25972615 +1 6.12055322 +1
H -3.52733781 +1 1.21018544 +1 7.33048884 +1
H -5.49368736 +1 2.05066668 +1 6.05710309 +1
H -10.07429589 +1 3.67857740 +1 -1.02358763 +1
H -10.94366609 +1 2.10498304 +1 -2.73379582 +1
H -9.85172419 +1 -0.10349300 +1 -3.07927058 +1
H -7.87694447 +1 -0.74651568 +1 -1.70787885 +1
H -6.98806821 +1 0.78979772 +1 0.00479045 +1
H -8.85728835 +1 4.76588198 +1 3.27896459 +1
H -9.27119271 +1 3.89784879 +1 5.56789167 +1
H -8.86990192 +1 1.49913507 +1 6.09249511 +1
H -8.04731494 +1 -0.04265877 +1 4.32668452 +1
H -7.60574682 +1 0.79580620 +1 2.03706771 +1
C 5.89878138 +1 1.52520467 +1 1.22508906 +1
C 7.14301274 +1 1.14961329 +1 0.70943472 +1
C 7.17715502 +1 0.06816622 +1 -0.18188563 +1
N 6.10029512 +1 -0.63904770 +1 -0.55982376 +1
C 4.91512699 +1 -0.24939384 +1 -0.03216756 +1
C 4.74430159 +1 0.81844245 +1 0.84653938 +1
P 8.74677738 +1 -0.54204289 +1 -0.98705222 +1
C 8.61059900 +1 -2.38569554 +1 -0.98484105 +1
C 9.32920665 +1 -3.05051681 +1 0.00870282 +1
C 9.28164504 +1 -4.44917414 +1 0.06662557 +1
C 8.52793725 +1 -5.16130677 +1 -0.87122120 +1
C 7.81985410 +1 -4.48216971 +1 -1.86877533 +1
C 7.86112700 +1 -3.08363337 +1 -1.92858332 +1
C 8.62419791 +1 0.01520599 +1 -2.74240957 +1
C 9.80084146 +1 0.52000417 +1 -3.29627200 +1
C 9.79696732 +1 0.96285473 +1 -4.62519021 +1
C 8.62036839 +1 0.90203882 +1 -5.37750417 +1
C 7.44457502 +1 0.40168813 +1 -4.80689937 +1
C 7.44316963 +1 -0.04354196 +1 -3.48003107 +1
P 3.58564895 +1 -1.32348544 +1 -0.70529927 +1
C 3.76631111 +1 -1.31142813 +1 -2.52544880 +1

C	3.19569114	+1	-0.25030024	+1	-3.22901513	+1
C	3.33358466	+1	-0.21058443	+1	-4.62273494	+1
C	4.03102004	+1	-1.22265803	+1	-5.28742299	+1
C	4.59258829	+1	-2.28415921	+1	-4.56702961	+1
C	4.45776681	+1	-2.33432117	+1	-3.17585312	+1
C	3.76549781	+1	-3.02405226	+1	-0.06845521	+1
C	2.58232508	+1	-3.69967247	+1	0.23911223	+1
C	2.65690381	+1	-5.00959075	+1	0.72936513	+1
C	3.90071222	+1	-5.62140568	+1	0.90704648	+1
C	5.07790212	+1	-4.92969130	+1	0.59674366	+1
C	5.01437978	+1	-3.62093459	+1	0.10853647	+1
O	2.20758467	+1	-0.75125249	+1	-0.28490352	+1
H	5.81694236	+1	2.36558239	+1	1.91785043	+1
H	8.05697958	+1	1.68125497	+1	0.99538921	+1
H	3.75926978	+1	1.11858962	+1	1.23049418	+1
H	9.93958706	+1	-2.50306302	+1	0.73768403	+1
H	9.83848859	+1	-4.98003397	+1	0.83704439	+1
H	8.49728809	+1	-6.24996881	+1	-0.83004954	+1
H	7.24247377	+1	-5.04212262	+1	-2.60147699	+1
H	7.30507240	+1	-2.56944552	+1	-2.71591689	+1
H	10.72727733	+1	0.58523453	+1	-2.71183269	+1
H	10.70939057	+1	1.35771038	+1	-5.06869240	+1
H	8.61748096	+1	1.24881258	+1	-6.41072143	+1
H	6.52685326	+1	0.36229586	+1	-5.39163900	+1
H	6.50807823	+1	-0.42200306	+1	-3.05526925	+1
H	2.63280092	+1	0.55429583	+1	-2.73144021	+1
H	2.88704273	+1	0.61008637	+1	-5.18502016	+1
H	4.13252498	+1	-1.19094666	+1	-6.37275270	+1
H	5.12671296	+1	-3.07399865	+1	-5.09229715	+1
H	4.89139324	+1	-3.17658271	+1	-2.63017355	+1
H	1.59103838	+1	-3.23776693	+1	0.11433583	+1
H	1.74025693	+1	-5.54614829	+1	0.97490311	+1
H	3.95537430	+1	-6.64040360	+1	1.29126206	+1
H	6.04684531	+1	-5.40705388	+1	0.73857267	+1
H	5.95039724	+1	-3.09866525	+1	-0.11918486	+1

$(\kappa^1-1)_2$ -Eu

Eu	0.09253541	+1	0.13487566	+1	0.21518892	+1
O	9.93446465	+1	0.02678777	+1	-0.26901859	+1
C	-3.30414030	+1	3.38384597	+1	0.30126989	+1
C	-3.96017330	+1	4.53258296	+1	-0.17432361	+1
C	-5.34475794	+1	4.65361695	+1	-0.02435441	+1
C	-4.09222514	+1	2.41586325	+1	0.91975135	+1
C	-6.02521364	+1	3.59930102	+1	0.60146188	+1
N	-5.43551911	+1	2.49206332	+1	1.07941274	+1
P	-3.50451828	+1	0.82648834	+1	1.62871977	+1
C	-4.62967374	+1	-0.48675375	+1	1.02667789	+1
C	-4.41651605	+1	-0.96455870	+1	-0.26736920	+1
C	-5.25699000	+1	-1.96718144	+1	-0.76656260	+1
C	-6.28926916	+1	-2.47569892	+1	0.02750101	+1
C	-6.48475973	+1	-1.99146977	+1	1.32605362	+1

C -5.64674174 +1 -0.99293067 +1 1.83510282 +1
C -3.56705752 +1 0.93319722 +1 3.44965848 +1
C -2.46711455 +1 0.43692917 +1 4.15084126 +1
C -4.66076281 +1 1.49766118 +1 4.10900689 +1
C -2.47142262 +1 0.49820115 +1 5.55073997 +1
C -3.56264947 +1 1.05247652 +1 6.22424479 +1
C -4.65647827 +1 1.55192863 +1 5.50565812 +1
P -7.87586918 +1 3.58385998 +1 0.83683791 +1
C -8.48714091 +1 2.33495043 +1 -0.37773634 +1
C -9.60508179 +1 2.71499629 +1 -1.12042501 +1
C -10.13251471 +1 1.82685406 +1 -2.06659322 +1
C -9.53460650 +1 0.57827105 +1 -2.26094073 +1
C -8.40914520 +1 0.21230751 +1 -1.51400950 +1
C -7.87891715 +1 1.09529759 +1 -0.56642448 +1
C -8.15936167 +1 2.89420023 +1 2.52767510 +1
C -8.57166740 +1 3.80779430 +1 3.49754494 +1
C -8.81586601 +1 3.35687664 +1 4.80106550 +1
C -8.65235740 +1 2.00403065 +1 5.11367290 +1
C -8.24575110 +1 1.09688220 +1 4.12883176 +1
C -7.99895117 +1 1.54307967 +1 2.82474896 +1
O -8.46681578 +1 4.95744227 +1 0.64944335 +1
O -2.05829297 +1 0.54721562 +1 1.15272861 +1
O -0.50863563 +1 2.37715469 +1 -0.63398296 +1
N 0.23349683 +1 2.56341878 +1 -1.69561583 +1
O 0.89670918 +1 1.44039844 +1 -1.72597560 +1
O -0.35942936 +1 -2.28036268 +1 -0.03161470 +1
N -1.22316028 +1 -2.36735718 +1 -1.00173189 +1
O -1.38103248 +1 -1.11149992 +1 -1.32199678 +1
O 0.40584248 +1 -0.08088445 +1 2.65778978 +1
N 1.36658487 +1 0.74428549 +1 2.95869260 +1
O 1.64459551 +1 1.24648315 +1 1.78326566 +1
O -1.73073619 +1 -3.31923630 +1 -1.46700345 +1
O 1.85862616 +1 0.97743827 +1 3.99881123 +1
O 0.28256118 +1 3.48613208 +1 -2.41772305 +1
H -2.21658225 +1 3.26846173 +1 0.16821139 +1
H -3.38494244 +1 5.32218547 +1 -0.66184631 +1
H -5.87673666 +1 5.54178861 +1 -0.38163929 +1
H -3.60173102 +1 -0.59188672 +1 -0.90491227 +1
H -5.09548023 +1 -2.35589410 +1 -1.77261970 +1
H -6.94000292 +1 -3.25908709 +1 -0.36255093 +1
H -7.28379654 +1 -2.39900618 +1 1.94320741 +1
H -5.80342713 +1 -0.63932239 +1 2.85752296 +1
H -1.59096155 +1 0.00518532 +1 3.64145661 +1
H -5.52160876 +1 1.90632011 +1 3.56807832 +1
H -1.61732560 +1 0.11498569 +1 6.10945264 +1
H -3.56222021 +1 1.10083206 +1 7.31360299 +1
H -5.50298514 +1 1.98915937 +1 6.03333514 +1
H -10.07570696 +1 3.69701641 +1 -0.98462301 +1
H -11.00513034 +1 2.11200979 +1 -2.65160630 +1
H -9.94396499 +1 -0.11121707 +1 -2.99888988 +1

H -7.94007018 +1 -0.75765076 +1 -1.67144862 +1
H -6.99310999 +1 0.78840333 +1 -0.00079294 +1
H -8.71758036 +1 4.86892222 +1 3.25829052 +1
H -9.13878089 +1 4.05965058 +1 5.56729712 +1
H -8.84803332 +1 1.65310578 +1 6.12676039 +1
H -8.12913554 +1 0.04391296 +1 4.37603215 +1
H -7.68441980 +1 0.82197183 +1 2.06580510 +1
C 5.83120376 +1 1.45821293 +1 1.25608493 +1
C 7.08431142 +1 1.12695426 +1 0.73101936 +1
C 7.14282865 +1 0.07723156 +1 -0.19587599 +1
N 6.08154679 +1 -0.63879675 +1 -0.60138332 +1
C 4.88797945 +1 -0.29273520 +1 -0.06344940 +1
C 4.69307927 +1 0.73943777 +1 0.85226388 +1
P 8.72589938 +1 -0.47874314 +1 -1.01241273 +1
C 8.61837828 +1 -2.32418680 +1 -1.06807016 +1
C 9.29142002 +1 -3.00637498 +1 -0.05455574 +1
C 9.25971614 +1 -4.40652475 +1 -0.03500586 +1
C 8.56768578 +1 -5.10310907 +1 -1.03046510 +1
C 7.90661947 +1 -4.40646498 +1 -2.04792455 +1
C 7.93214667 +1 -3.00635574 +1 -2.06966687 +1
C 8.60321668 +1 0.13203374 +1 -2.74988665 +1
C 9.77364109 +1 0.67459066 +1 -3.28060132 +1
C 9.76906896 +1 1.15851294 +1 -4.59513906 +1
C 8.59777470 +1 1.10043977 +1 -5.35602595 +1
C 7.42784386 +1 0.56233945 +1 -4.80810517 +1
C 7.42708813 +1 0.07652548 +1 -3.49556948 +1
P 3.58080113 +1 -1.37329044 +1 -0.77164578 +1
C 3.76894850 +1 -1.30945210 +1 -2.59032422 +1
C 3.13511263 +1 -0.26928589 +1 -3.27046497 +1
C 3.27430981 +1 -0.18768223 +1 -4.66237368 +1
C 4.03598099 +1 -1.13757747 +1 -5.34786113 +1
C 4.66159375 +1 -2.17856628 +1 -4.65052698 +1
C 4.52571165 +1 -2.27067259 +1 -3.26162938 +1
C 3.80228489 +1 -3.08454987 +1 -0.17571393 +1
C 2.63828269 +1 -3.78611155 +1 0.14558088 +1
C 2.74634775 +1 -5.10469341 +1 0.60600514 +1
C 4.00384219 +1 -5.69899387 +1 0.74067283 +1
C 5.16177763 +1 -4.98081437 +1 0.41809770 +1
C 5.06485479 +1 -3.66344107 +1 -0.04038061 +1
O 2.19181718 +1 -0.84203591 +1 -0.34224989 +1
H 5.73074359 +1 2.27310362 +1 1.97590216 +1
H 7.98602970 +1 1.66784174 +1 1.03698130 +1
H 3.69989384 +1 1.00198383 +1 1.24683220 +1
H 9.85519265 +1 -2.47169459 +1 0.71956813 +1
H 9.78124630 +1 -4.95046618 +1 0.75082105 +1
H 8.54933645 +1 -6.19276090 +1 -1.01881983 +1
H 7.37845106 +1 -4.95384364 +1 -2.82599583 +1
H 7.41514527 +1 -2.47916775 +1 -2.87478448 +1
H 10.69534914 +1 0.73778098 +1 -2.68858622 +1
H 10.67689047 +1 1.58255762 +1 -5.02073103 +1

H	8.59433972 +1	1.47902474 +1	-6.37796928 +1
H	6.51399824 +1	0.52507025 +1	-5.39908879 +1
H	6.49634249 +1	-0.33026271 +1	-3.08740344 +1
H	2.52153876 +1	0.48682026 +1	-2.75469385 +1
H	2.77963016 +1	0.61693783 +1	-5.20678674 +1
H	4.13869813 +1	-1.07327292 +1	-6.43149087 +1
H	5.24669127 +1	-2.91984611 +1	-5.19182758 +1
H	5.01050566 +1	-3.09604594 +1	-2.73368680 +1
H	1.63638113 +1	-3.33762111 +1	0.05478582 +1
H	1.84499935 +1	-5.66152466 +1	0.86222434 +1
H	4.08452698 +1	-6.72485550 +1	1.10100390 +1
H	6.14164336 +1	-5.44405884 +1	0.52734536 +1
H	5.98653398 +1	-3.12024339 +1	-0.27755311 +1

$(\kappa^1-1)_2\text{-Gd}$

Gd	0.11901392 +1	0.27977786 +1	0.22676274 +1
O	9.92929763 +1	-0.00481167 +1	-0.28626740 +1
C	-3.27266472 +1	3.49528300 +1	0.37669945 +1
C	-3.94838928 +1	4.64094773 +1	-0.07927442 +1
C	-5.33643238 +1	4.72985414 +1	0.05920377 +1
C	-4.04649011 +1	2.49675599 +1	0.96296442 +1
C	-6.00118404 +1	3.64696901 +1	0.65284786 +1
N	-5.39319041 +1	2.54116647 +1	1.10959644 +1
P	-3.44401927 +1	0.90206813 +1	1.64417698 +1
C	-4.54704934 +1	-0.41453712 +1	1.01167661 +1
C	-4.36590633 +1	-0.81785973 +1	-0.31243243 +1
C	-5.18693546 +1	-1.82576380 +1	-0.83219210 +1
C	-6.17010054 +1	-2.41230125 +1	-0.02936277 +1
C	-6.33588228 +1	-1.99988061 +1	1.29768450 +1
C	-5.51571823 +1	-0.99728337 +1	1.82786486 +1
C	-3.51266185 +1	0.97273802 +1	3.46561851 +1
C	-2.41065168 +1	0.47496553 +1	4.16246403 +1
C	-4.61568766 +1	1.51314567 +1	4.12991524 +1
C	-2.42174421 +1	0.51084974 +1	5.56315119 +1
C	-3.52201940 +1	1.04098391 +1	6.24143854 +1
C	-4.61814914 +1	1.54180787 +1	5.52722686 +1
P	-7.85368377 +1	3.58312559 +1	0.86866129 +1
C	-8.42060927 +1	2.36067952 +1	-0.39316648 +1
C	-9.51925388 +1	2.75126694 +1	-1.15869038 +1
C	-10.01292790 +1	1.88277190 +1	-2.14056684 +1
C	-9.40112624 +1	0.64287483 +1	-2.34679548 +1
C	-8.29524485 +1	0.26622680 +1	-1.57619778 +1
C	-7.79888981 +1	1.12951597 +1	-0.59278949 +1
C	-8.14115354 +1	2.83240271 +1	2.53230192 +1
C	-8.62334457 +1	3.69609670 +1	3.51559438 +1
C	-8.87645945 +1	3.19649870 +1	4.79951853 +1
C	-8.65190578 +1	1.84530252 +1	5.07955959 +1
C	-8.17509708 +1	0.98824883 +1	4.08144741 +1
C	-7.91904829 +1	1.48317025 +1	2.79692607 +1
O	-8.47439336 +1	4.94791003 +1	0.71756024 +1
O	-1.99039450 +1	0.64757050 +1	1.16927827 +1

O -0.49180682 +1 2.48349727 +1 -0.56628561 +1
N 0.28070854 +1 2.60581939 +1 -1.59275181 +1
O 0.96851470 +1 1.52107210 +1 -1.67344721 +1
O -0.35662311 +1 -2.08151307 +1 -0.02066113 +1
N -1.17732124 +1 -2.06073822 +1 -1.00922341 +1
O -1.32485870 +1 -0.82987375 +1 -1.36276509 +1
O 0.43049741 +1 0.01432757 +1 2.61528507 +1
N 1.35689222 +1 0.87517127 +1 2.83966580 +1
O 1.63930513 +1 1.43635511 +1 1.71233962 +1
O -1.70554917 +1 -2.99678099 +1 -1.50625396 +1
O 1.86501301 +1 1.11236191 +1 3.88220921 +1
O 0.33982479 +1 3.53697863 +1 -2.31885445 +1
H -2.18238540 +1 3.40658943 +1 0.25276265 +1
H -3.38477750 +1 5.45296879 +1 -0.54344813 +1
H -5.88328792 +1 5.61499395 +1 -0.28275841 +1
H -3.59159267 +1 -0.38164283 +1 -0.95915311 +1
H -5.04713466 +1 -2.15907721 +1 -1.86131219 +1
H -6.80495803 +1 -3.20046765 +1 -0.43571389 +1
H -7.09710973 +1 -2.46690961 +1 1.92062013 +1
H -5.64792714 +1 -0.70084511 +1 2.87180192 +1
H -1.52867428 +1 0.06107857 +1 3.64866028 +1
H -5.47898699 +1 1.92119227 +1 3.59251614 +1
H -1.56569706 +1 0.12726806 +1 6.11888217 +1
H -3.52694327 +1 1.06911048 +1 7.33158163 +1
H -5.47164746 +1 1.96000670 +1 6.05921523 +1
H -10.00081659 +1 3.72652858 +1 -1.01242999 +1
H -10.87043619 +1 2.17604464 +1 -2.74356819 +1
H -9.78437087 +1 -0.03156912 +1 -3.11218988 +1
H -7.81554254 +1 -0.69696646 +1 -1.74268295 +1
H -6.92850301 +1 0.81491084 +1 -0.00768661 +1
H -8.81647863 +1 4.75519695 +1 3.30160510 +1
H -9.25391337 +1 3.86010514 +1 5.57567289 +1
H -8.85434475 +1 1.45628307 +1 6.07726139 +1
H -8.01096599 +1 -0.06409027 +1 4.30286989 +1
H -7.54778077 +1 0.80084030 +1 2.02743529 +1
C 5.86571290 +1 1.56842549 +1 1.21035182 +1
C 7.10800217 +1 1.19087605 +1 0.69128710 +1
C 7.13943070 +1 0.10227792 +1 -0.19134254 +1
N 6.06154532 +1 -0.60871720 +1 -0.55907287 +1
C 4.87839834 +1 -0.21631735 +1 -0.02897661 +1
C 4.71030059 +1 0.85716558 +1 0.84323769 +1
P 8.70458636 +1 -0.51722114 +1 -0.99755604 +1
C 8.56381144 +1 -2.36087137 +1 -0.97920756 +1
C 9.26025353 +1 -3.01771613 +1 0.03520018 +1
C 9.20784384 +1 -4.41560863 +1 0.10591116 +1
C 8.47193392 +1 -5.13525468 +1 -0.84032644 +1
C 7.78685103 +1 -4.46428993 +1 -1.85917781 +1
C 7.83298782 +1 -3.06648114 +1 -1.93188247 +1
C 8.57707600 +1 0.02327613 +1 -2.75786446 +1
C 9.75536934 +1 0.51071537 +1 -3.32363398 +1

C 9.74877740 +1 0.93736705 +1 -4.65781794 +1
 C 8.56744911 +1 0.87947994 +1 -5.40299560 +1
 C 7.38988160 +1 0.39773140 +1 -4.82021052 +1
 C 7.39155617 +1 -0.03253279 +1 -3.48841520 +1
 P 3.54918309 +1 -1.29697702 +1 -0.69156792 +1
 C 3.72199483 +1 -1.29089218 +1 -2.51212219 +1
 C 3.14314122 +1 -0.23383928 +1 -3.21496328 +1
 C 3.27368572 +1 -0.19685505 +1 -4.60949089 +1
 C 3.97260390 +1 -1.20716764 +1 -5.27524019 +1
 C 4.54303312 +1 -2.26432117 +1 -4.55526891 +1
 C 4.41521696 +1 -2.31210444 +1 -3.16335968 +1
 C 3.73635576 +1 -2.99341131 +1 -0.04700258 +1
 C 2.55639855 +1 -3.66817526 +1 0.27393819 +1
 C 2.63614706 +1 -4.97570957 +1 0.76991989 +1
 C 3.88182330 +1 -5.58564173 +1 0.94010848 +1
 C 5.05589669 +1 -4.89431180 +1 0.61702084 +1
 C 4.98731156 +1 -3.58816497 +1 0.12281050 +1
 O 2.17118839 +1 -0.72650343 +1 -0.26784635 +1
 H 5.78628731 +1 2.41400169 +1 1.89689505 +1
 H 8.02238868 +1 1.72638171 +1 0.96819529 +1
 H 3.72595665 +1 1.15718675 +1 1.23094911 +1
 H 9.85763750 +1 -2.46486931 +1 0.77057201 +1
 H 9.74734447 +1 -4.94018042 +1 0.89278897 +1
 H 8.43759266 +1 -6.22336761 +1 -0.78910497 +1
 H 7.22358429 +1 -5.02994329 +1 -2.59847419 +1
 H 7.29553993 +1 -2.55933091 +1 -2.73649958 +1
 H 10.68516374 +1 0.57471985 +1 -2.74446035 +1
 H 10.66289887 +1 1.31700505 +1 -5.11102328 +1
 H 8.56232069 +1 1.21398716 +1 -6.44021947 +1
 H 6.46836899 +1 0.36096974 +1 -5.39917266 +1
 H 6.45520594 +1 -0.39746407 +1 -3.05457562 +1
 H 2.57929105 +1 0.56961365 +1 -2.71520176 +1
 H 2.82056844 +1 0.62022898 +1 -5.17148340 +1
 H 4.06871917 +1 -1.17752046 +1 -6.36106966 +1
 H 5.07853765 +1 -3.05263950 +1 -5.08135134 +1
 H 4.85554317 +1 -3.15088616 +1 -2.61775414 +1
 H 1.56349632 +1 -3.20660489 +1 0.15500095 +1
 H 1.72203841 +1 -5.51164602 +1 1.02571085 +1
 H 3.94067712 +1 -6.60275362 +1 1.32853348 +1
 H 6.02636944 +1 -5.37003886 +1 0.75352705 +1
 H 5.92096408 +1 -3.06617897 +1 -0.11502966 +1

$(\kappa^1-1)_2$ -Tb

Tb 0.12412500 +1 0.26657441 +1 0.28622337 +1
 O 9.97349659 +1 -0.01935620 +1 -0.30230281 +1
 C -3.31486116 +1 3.48665160 +1 0.37812519 +1
 C -3.98373242 +1 4.62542780 +1 -0.10397644 +1
 C -5.37357052 +1 4.71717858 +1 0.01501435 +1
 C -4.09686143 +1 2.49771976 +1 0.97035207 +1
 C -6.04640210 +1 3.64416209 +1 0.61681091 +1
 N -5.44493708 +1 2.54536182 +1 1.09906623 +1

P -3.50109573 +1 0.91442926 +1 1.68608993 +1
C -4.60520782 +1 -0.41137407 +1 1.07331722 +1
C -4.40922915 +1 -0.84823072 +1 -0.23801350 +1
C -5.22891213 +1 -1.86454670 +1 -0.74326798 +1
C -6.22505142 +1 -2.42642202 +1 0.06131173 +1
C -6.40525263 +1 -1.98091344 +1 1.37563437 +1
C -5.58663715 +1 -0.96944071 +1 1.89125866 +1
C -3.58684822 +1 1.02447189 +1 3.50568592 +1
C -2.48843665 +1 0.55057478 +1 4.22448071 +1
C -4.70044795 +1 1.57110007 +1 4.14681486 +1
C -2.51412495 +1 0.61738641 +1 5.62392178 +1
C -3.62509341 +1 1.15409228 +1 6.27919981 +1
C -4.71747315 +1 1.63067573 +1 5.54307019 +1
P -7.90141353 +1 3.58323671 +1 0.80968889 +1
C -8.45089830 +1 2.34168951 +1 -0.44116017 +1
C -9.54064840 +1 2.71917964 +1 -1.22567182 +1
C -10.01928915 +1 1.83656084 +1 -2.20236171 +1
C -9.40225800 +1 0.59536763 +1 -2.38375665 +1
C -8.30631344 +1 0.23122465 +1 -1.59323416 +1
C -7.82412895 +1 1.10925787 +1 -0.61586556 +1
C -8.20965491 +1 2.85751301 +1 2.48064368 +1
C -8.69701493 +1 3.73771772 +1 3.44660864 +1
C -8.96524361 +1 3.25793828 +1 4.73496900 +1
C -8.75054350 +1 1.90969915 +1 5.03642736 +1
C -8.26848026 +1 1.03592830 +1 4.05549776 +1
C -7.99730687 +1 1.51109821 +1 2.76660633 +1
O -8.52027621 +1 4.94545177 +1 0.63037736 +1
O -2.04692452 +1 0.64729543 +1 1.22583635 +1
O -0.47850958 +1 2.49147071 +1 -0.51538651 +1
N 0.28817689 +1 2.61667555 +1 -1.54760349 +1
O 0.96778395 +1 1.52502245 +1 -1.62875932 +1
O -0.35145107 +1 -2.10856710 +1 0.06528983 +1
N -1.17449275 +1 -2.09088916 +1 -0.91921962 +1
O -1.32978231 +1 -0.86995435 +1 -1.29549757 +1
O 0.41350783 +1 0.04850523 +1 2.69686757 +1
N 1.37131930 +1 0.87769256 +1 2.90962418 +1
O 1.68521885 +1 1.40176305 +1 1.77311973 +1
O -1.70524408 +1 -3.03498317 +1 -1.40173740 +1
O 1.87972940 +1 1.11832476 +1 3.95128239 +1
O 0.34856713 +1 3.54775100 +1 -2.27227709 +1
H -2.22342496 +1 3.39602812 +1 0.26965677 +1
H -3.41381084 +1 5.43025336 +1 -0.57285273 +1
H -5.91517902 +1 5.59719843 +1 -0.34778468 +1
H -3.62465799 +1 -0.43202429 +1 -0.88515389 +1
H -5.07801397 +1 -2.22380845 +1 -1.76198742 +1
H -6.85877031 +1 -3.22125006 +1 -0.33360887 +1
H -7.17643519 +1 -2.42889318 +1 2.00026847 +1
H -5.73033325 +1 -0.64701142 +1 2.92590123 +1
H -1.59848669 +1 0.13192293 +1 3.72977681 +1
H -5.56115192 +1 1.96078644 +1 3.59179707 +1

H -1.66120704 +1 0.25250373 +1 6.19673568 +1
H -3.64138987 +1 1.20622515 +1 7.36832937 +1
H -5.57939892 +1 2.05404778 +1 6.05703870 +1
H -10.02666813 +1 3.69487037 +1 -1.09848590 +1
H -10.86913481 +1 2.12003884 +1 -2.82067675 +1
H -9.77353941 +1 -0.08987165 +1 -3.14538675 +1
H -7.82315161 +1 -0.73348018 +1 -1.73971419 +1
H -6.96045529 +1 0.80467759 +1 -0.01562489 +1
H -8.88270387 +1 4.79450249 +1 3.21540771 +1
H -9.34683261 +1 3.93458871 +1 5.49774080 +1
H -8.96497712 +1 1.53601762 +1 6.03746583 +1
H -8.11218906 +1 -0.01400911 +1 4.29347096 +1
H -7.62244891 +1 0.81589889 +1 2.01044899 +1
C 5.92154787 +1 1.48223025 +1 1.28217597 +1
C 7.15962802 +1 1.12361693 +1 0.74009403 +1
C 7.18510702 +1 0.06083920 +1 -0.17353251 +1
N 6.10567218 +1 -0.64317580 +1 -0.55036944 +1
C 4.92675541 +1 -0.26976546 +1 0.00207359 +1
C 4.76468444 +1 0.77808769 +1 0.90626782 +1
P 8.74554598 +1 -0.52836232 +1 -1.01082323 +1
C 8.62156128 +1 -2.37313680 +1 -1.02612231 +1
C 9.35218025 +1 -3.04256870 +1 -0.04448443 +1
C 9.31283295 +1 -4.44189126 +1 0.00187411 +1
C 8.55510211 +1 -5.15016024 +1 -0.93565083 +1
C 7.83549332 +1 -4.46641051 +1 -1.92172650 +1
C 7.86883268 +1 -3.06717065 +1 -1.97015981 +1
C 8.59394794 +1 0.04574804 +1 -2.75843844 +1
C 9.75970370 +1 0.56132394 +1 -3.32535265 +1
C 9.73319652 +1 1.01752733 +1 -4.64947138 +1
C 8.54527476 +1 0.95927116 +1 -5.38406576 +1
C 7.38073127 +1 0.44791873 +1 -4.80043644 +1
C 7.40200486 +1 -0.01093060 +1 -3.47837035 +1
P 3.59229805 +1 -1.33653800 +1 -0.67482430 +1
C 3.75801051 +1 -1.29742916 +1 -2.49676442 +1
C 3.17983886 +1 -0.22582967 +1 -3.17796439 +1
C 3.30119321 +1 -0.16573127 +1 -4.57253839 +1
C 3.98973970 +1 -1.16843708 +1 -5.26028304 +1
C 4.55953672 +1 -2.24034298 +1 -4.56215396 +1
C 4.44180905 +1 -2.31041418 +1 -3.17021564 +1
C 3.78921109 +1 -3.04560323 +1 -0.06426963 +1
C 2.61464521 +1 -3.72983491 +1 0.25631469 +1
C 2.70320690 +1 -5.04666488 +1 0.72563211 +1
C 3.95213776 +1 -5.65665346 +1 0.87013661 +1
C 5.12082818 +1 -4.95582536 +1 0.54833608 +1
C 5.04325616 +1 -3.64023009 +1 0.08102991 +1
O 2.21674106 +1 -0.77672764 +1 -0.23513709 +1
H 5.84665517 +1 2.30756313 +1 1.99338254 +1
H 8.07530584 +1 1.65388946 +1 1.02295529 +1
H 3.78406104 +1 1.06445867 +1 1.31228375 +1
H 9.96577482 +1 -2.49813079 +1 0.68397752 +1

H 9.87878424 +1 -4.97606730 +1 0.76331654 +1
H 8.53054565 +1 -6.23925338 +1 -0.90336824 +1
H 7.25499201 +1 -5.02321329 +1 -2.65435758 +1
H 7.30393165 +1 -2.54959679 +1 -2.74895782 +1
H 10.69474060 +1 0.62476183 +1 -2.75462642 +1
H 10.63688036 +1 1.42084307 +1 -5.10309122 +1
H 8.52487666 +1 1.31650535 +1 -6.41349611 +1
H 6.45397486 +1 0.41035256 +1 -5.37094632 +1
H 6.47512674 +1 -0.39796336 +1 -3.04323725 +1
H 2.62332731 +1 0.57185302 +1 -2.66201972 +1
H 2.84865388 +1 0.66318364 +1 -5.11740745 +1
H 4.07808528 +1 -1.12120359 +1 -6.34613667 +1
H 5.08681462 +1 -3.02262328 +1 -5.10527754 +1
H 4.88244970 +1 -3.16001779 +1 -2.64197540 +1
H 1.61968090 +1 -3.26917585 +1 0.15800086 +1
H 1.79341579 +1 -5.59016303 +1 0.98083346 +1
H 4.01758234 +1 -6.68115625 +1 1.23750986 +1
H 6.09399960 +1 -5.43134025 +1 0.66490755 +1
H 5.97294817 +1 -3.11071029 +1 -0.15550713 +1

$(\kappa^1-1)_2$ -Dy

Dy 0.08670806 +1 0.09244333 +1 0.23818925 +1
O 9.92718690 +1 0.01850637 +1 -0.20827479 +1
C -3.29811729 +1 3.36209751 +1 0.20726113 +1
C -3.94778371 +1 4.50227060 +1 -0.29652040 +1
C -5.32878509 +1 4.64533257 +1 -0.13116384 +1
C -4.08900509 +1 2.42356438 +1 0.86624927 +1
C -6.01216412 +1 3.62088876 +1 0.53883125 +1
N -5.42849366 +1 2.52177643 +1 1.04266308 +1
P -3.51357979 +1 0.84726240 +1 1.61455272 +1
C -4.65279293 +1 -0.46718050 +1 1.04179162 +1
C -4.40784048 +1 -1.01753957 +1 -0.21714718 +1
C -5.25878607 +1 -2.02175563 +1 -0.69497116 +1
C -6.33338268 +1 -2.45932104 +1 0.08489047 +1
C -6.56209353 +1 -1.90118694 +1 1.34798190 +1
C -5.71408650 +1 -0.90042232 +1 1.83570205 +1
C -3.57866293 +1 0.99797664 +1 3.43247029 +1
C -2.48477013 +1 0.50782247 +1 4.14730537 +1
C -4.66923808 +1 1.58584516 +1 4.07633940 +1
C -2.49223350 +1 0.59950514 +1 5.54550801 +1
C -3.58084617 +1 1.17691925 +1 6.20376054 +1
C -4.66831094 +1 1.67015717 +1 5.47155622 +1
P -7.85586620 +1 3.63426425 +1 0.82258783 +1
C -8.52309165 +1 2.35654028 +1 -0.33077808 +1
C -9.68991980 +1 2.71056128 +1 -1.00848094 +1
C -10.26635623 +1 1.79873017 +1 -1.90190842 +1
C -9.66792114 +1 0.55258450 +1 -2.11008468 +1
C -8.49291739 +1 0.21321277 +1 -1.43000158 +1
C -7.91327425 +1 1.12025012 +1 -0.53533291 +1
C -8.08767818 +1 2.99774944 +1 2.54323081 +1
C -8.33760251 +1 3.95976498 +1 3.52177973 +1

C -8.52746764 +1 3.55194232 +1 4.84820805 +1
C -8.47422631 +1 2.19359520 +1 5.17548241 +1
C -8.23403477 +1 1.23826841 +1 4.18187791 +1
C -8.04120374 +1 1.64118251 +1 2.85451922 +1
O -8.43629500 +1 5.00872760 +1 0.61312095 +1
O -2.07061025 +1 0.54412792 +1 1.14586136 +1
O -0.49760052 +1 2.32925112 +1 -0.67714998 +1
N 0.22895494 +1 2.51995835 +1 -1.76316165 +1
O 0.87462577 +1 1.37346928 +1 -1.74401509 +1
O -0.34740660 +1 -2.34665462 +1 0.03078062 +1
N -1.23072578 +1 -2.50805489 +1 -0.92872807 +1
O -1.39152664 +1 -1.23946040 +1 -1.24878531 +1
O 0.37770898 +1 -0.05710698 +1 2.70424697 +1
N 1.35679552 +1 0.75235506 +1 3.03866715 +1
O 1.64132516 +1 1.20133469 +1 1.82982890 +1
O -1.72583739 +1 -3.47347070 +1 -1.36503590 +1
O 1.83489479 +1 1.00061652 +1 4.07599574 +1
O 0.27621048 +1 3.42156399 +1 -2.50410125 +1
H -2.21298123 +1 3.22908234 +1 0.06518559 +1
H -3.37083120 +1 5.26881540 +1 -0.81749276 +1
H -5.85516002 +1 5.52761947 +1 -0.51008537 +1
H -3.56018665 +1 -0.70023224 +1 -0.84284569 +1
H -5.07372917 +1 -2.46594172 +1 -1.67350311 +1
H -6.99174472 +1 -3.24441079 +1 -0.28816568 +1
H -7.39515801 +1 -2.25272273 +1 1.95430406 +1
H -5.89874074 +1 -0.48692756 +1 2.83062473 +1
H -1.61060368 +1 0.05794838 +1 3.64946255 +1
H -5.52581397 +1 1.98962068 +1 3.52477996 +1
H -1.64333225 +1 0.22107773 +1 6.11505590 +1
H -3.58327624 +1 1.24767517 +1 7.29181726 +1
H -5.51331492 +1 2.12506409 +1 5.98675660 +1
H -10.16171086 +1 3.69051807 +1 -0.86267805 +1
H -11.17752583 +1 2.06336472 +1 -2.43543123 +1
H -10.11569032 +1 -0.15567720 +1 -2.80678004 +1
H -8.02378099 +1 -0.75490326 +1 -1.59831508 +1
H -6.98941043 +1 0.83340687 +1 -0.02267461 +1
H -8.40008019 +1 5.02646589 +1 3.27316456 +1
H -8.72369557 +1 4.29308903 +1 5.62120432 +1
H -8.62767225 +1 1.87677262 +1 6.20686651 +1
H -8.20472591 +1 0.18186371 +1 4.44041248 +1
H -7.85949930 +1 0.88186650 +1 2.09001568 +1
C 5.80820194 +1 1.42356406 +1 1.31763244 +1
C 7.06556495 +1 1.10565975 +1 0.79413201 +1
C 7.13432306 +1 0.06629952 +1 -0.14338350 +1
N 6.07914693 +1 -0.65259949 +1 -0.55992718 +1
C 4.88133317 +1 -0.31872003 +1 -0.02436303 +1
C 4.67603765 +1 0.70319851 +1 0.90065203 +1
P 8.72079390 +1 -0.47310255 +1 -0.96406505 +1
C 8.61290482 +1 -2.31742442 +1 -1.05516627 +1
C 9.25100095 +1 -3.01920186 +1 -0.03235763 +1

C 9.21729730 +1 -4.41935368 +1 -0.03955653 +1
 C 8.55789188 +1 -5.09656819 +1 -1.06994651 +1
 C 7.93153976 +1 -4.38048361 +1 -2.09566564 +1
 C 7.95974279 +1 -2.98018883 +1 -2.09114748 +1
 C 8.60176533 +1 0.17084729 +1 -2.69003787 +1
 C 9.77379193 +1 0.71981680 +1 -3.21046591 +1
 C 9.77004747 +1 1.23057960 +1 -4.51483500 +1
 C 8.59801538 +1 1.19248000 +1 -5.27575391 +1
 C 7.42656624 +1 0.64728380 +1 -4.73823229 +1
 C 7.42506490 +1 0.13438691 +1 -3.43604370 +1
 P 3.58308362 +1 -1.40265655 +1 -0.74416138 +1
 C 3.78565531 +1 -1.34173833 +1 -2.56145121 +1
 C 3.12574546 +1 -0.32588451 +1 -3.25312430 +1
 C 3.27591641 +1 -0.24674168 +1 -4.64413030 +1
 C 4.07363539 +1 -1.17539461 +1 -5.31738190 +1
 C 4.72447099 +1 -2.19308765 +1 -4.60870584 +1
 C 4.57812229 +1 -2.28235136 +1 -3.22077633 +1
 C 3.81162415 +1 -3.11191768 +1 -0.14415527 +1
 C 2.65175448 +1 -3.81295072 +1 0.19181676 +1
 C 2.76596646 +1 -5.13016733 +1 0.65508748 +1
 C 4.02525628 +1 -5.72276322 +1 0.77867833 +1
 C 5.17925849 +1 -5.00477504 +1 0.44117690 +1
 C 5.07633562 +1 -3.68933596 +1 -0.02119596 +1
 O 2.19009748 +1 -0.87646355 +1 -0.32440340 +1
 H 5.70002576 +1 2.22960891 +1 2.04609680 +1
 H 7.96247729 +1 1.64882672 +1 1.10964949 +1
 H 3.67848813 +1 0.95603208 +1 1.29238764 +1
 H 9.78953291 +1 -2.50009846 +1 0.76963463 +1
 H 9.71249131 +1 -4.97847950 +1 0.75260244 +1
 H 8.53825371 +1 -6.18622740 +1 -1.07882911 +1
 H 7.42895642 +1 -4.91263146 +1 -2.90073470 +1
 H 7.47135720 +1 -2.43794664 +1 -2.90414940 +1
 H 10.69608871 +1 0.76765967 +1 -2.61799499 +1
 H 10.67892484 +1 1.66026544 +1 -4.93239725 +1
 H 8.59521712 +1 1.59201185 +1 -6.28972488 +1
 H 6.51229826 +1 0.62524109 +1 -5.32927113 +1
 H 6.49335025 +1 -0.27856998 +1 -3.03622896 +1
 H 2.48279768 +1 0.41281155 +1 -2.74679078 +1
 H 2.76120704 +1 0.53875864 +1 -5.19753465 +1
 H 4.18520928 +1 -1.11311466 +1 -6.40021317 +1
 H 5.33715012 +1 -2.91856237 +1 -5.14054629 +1
 H 5.08366057 +1 -3.08961648 +1 -2.68421959 +1
 H 1.64827362 +1 -3.36499364 +1 0.11032702 +1
 H 1.86787226 +1 -5.68707483 +1 0.92202326 +1
 H 4.11080978 +1 -6.74720773 +1 1.14179727 +1
 H 6.16041431 +1 -5.46712964 +1 0.54159763 +1
 H 5.99489722 +1 -3.14631868 +1 -0.27111686 +1

$(\kappa^1-1)_2$ -Ho

Ho 0.12622172 +1 0.31379996 +1 0.21823591 +1
 O 9.92856621 +1 0.00359870 +1 -0.30122933 +1

C -3.26004923 +1 3.52152627 +1 0.41757657 +1
C -3.94029743 +1 4.67034258 +1 -0.02379521 +1
C -5.32905254 +1 4.75059766 +1 0.11247744 +1
C -4.03037870 +1 2.51098816 +1 0.98750977 +1
C -5.98999616 +1 3.65614966 +1 0.68901690 +1
N -5.37775829 +1 2.54690914 +1 1.13127726 +1
P -3.42425566 +1 0.90937930 +1 1.64856916 +1
C -4.52420586 +1 -0.40207480 +1 1.00051630 +1
C -4.35845805 +1 -0.77392952 +1 -0.33480848 +1
C -5.17576793 +1 -1.77954146 +1 -0.86467886 +1
C -6.14088620 +1 -2.39421799 +1 -0.06091855 +1
C -6.29231157 +1 -2.01212402 +1 1.27683288 +1
C -5.47505092 +1 -1.01263451 +1 1.81733416 +1
C -3.49238571 +1 0.95635232 +1 3.47074297 +1
C -2.39064915 +1 0.44922814 +1 4.16122598 +1
C -4.59544584 +1 1.48820103 +1 4.14191336 +1
C -2.40145962 +1 0.46763743 +1 5.56226705 +1
C -3.50150887 +1 0.98951546 +1 6.24722875 +1
C -4.59779513 +1 1.49913574 +1 5.53944771 +1
P -7.84271759 +1 3.58042947 +1 0.89968970 +1
C -8.40023621 +1 2.37439913 +1 -0.38181735 +1
C -9.49296793 +1 2.77454043 +1 -1.15080194 +1
C -9.97800264 +1 1.91884797 +1 -2.14808724 +1
C -9.36439769 +1 0.68167515 +1 -2.36505669 +1
C -8.26513887 +1 0.29494819 +1 -1.58999005 +1
C -7.77680022 +1 1.14585178 +1 -0.59192129 +1
C -8.13140607 +1 2.80318871 +1 2.55069413 +1
C -8.63448853 +1 3.64632146 +1 3.54133846 +1
C -8.89117221 +1 3.12567088 +1 4.81615329 +1
C -8.64938157 +1 1.77412289 +1 5.07969180 +1
C -8.15102757 +1 0.93789221 +1 4.07441482 +1
C -7.89114277 +1 1.45395693 +1 2.79904848 +1
O -8.46944733 +1 4.94441779 +1 0.76733800 +1
O -1.96997522 +1 0.66298816 +1 1.17016058 +1
O -0.48854082 +1 2.49911192 +1 -0.53477203 +1
N 0.29350580 +1 2.60068792 +1 -1.54994862 +1
O 0.98895807 +1 1.52882297 +1 -1.65688185 +1
O -0.34374662 +1 -2.01856851 +1 -0.03666361 +1
N -1.15595262 +1 -1.95173984 +1 -1.02367625 +1
O -1.30733344 +1 -0.72795442 +1 -1.38259494 +1
O 0.42862623 +1 0.01024550 +1 2.57454402 +1
N 1.34757831 +1 0.87738198 +1 2.77481427 +1
O 1.63207493 +1 1.47116773 +1 1.67057902 +1
O -1.69380411 +1 -2.87975239 +1 -1.53406311 +1
O 1.86708482 +1 1.10275648 +1 3.81865692 +1
O 0.35696825 +1 3.53889539 +1 -2.27237981 +1
H -2.16932595 +1 3.44001822 +1 0.29530733 +1
H -3.37940339 +1 5.49162403 +1 -0.47487433 +1
H -5.87947407 +1 5.63789602 +1 -0.21802518 +1
H -3.59913086 +1 -0.31470603 +1 -0.98303093 +1

H -5.04670441 +1 -2.08941259 +1 -1.90250695 +1
H -6.77276966 +1 -3.18067771 +1 -0.47518958 +1
H -7.03984751 +1 -2.50050272 +1 1.90001616 +1
H -5.59555274 +1 -0.74042598 +1 2.86930718 +1
H -1.50927848 +1 0.04104220 +1 3.64202364 +1
H -5.45894088 +1 1.90261502 +1 3.60975852 +1
H -1.54531376 +1 0.07714685 +1 6.11303195 +1
H -3.50622789 +1 1.00426776 +1 7.33764496 +1
H -5.45121079 +1 1.91054960 +1 6.07684161 +1
H -9.97660487 +1 3.74734958 +1 -0.99530920 +1
H -10.83023985 +1 2.22006507 +1 -2.75461880 +1
H -9.74102419 +1 0.01728431 +1 -3.14239246 +1
H -7.78434854 +1 -0.66626026 +1 -1.76448486 +1
H -6.91131369 +1 0.82399842 +1 -0.00342736 +1
H -8.84102988 +1 4.70541169 +1 3.33996349 +1
H -9.28465808 +1 3.77309893 +1 5.59803662 +1
H -8.85503582 +1 1.36849788 +1 6.07008494 +1
H -7.97309608 +1 -0.11481219 +1 4.28305161 +1
H -7.50251573 +1 0.78777999 +1 2.02375435 +1
C 5.87417719 +1 1.59674068 +1 1.18963019 +1
C 7.11376529 +1 1.20966293 +1 0.67134154 +1
C 7.13912174 +1 0.11276711 +1 -0.20132292 +1
N 6.05784444 +1 -0.59762792 +1 -0.55997410 +1
C 4.87727934 +1 -0.19590850 +1 -0.03077109 +1
C 4.71524294 +1 0.88656080 +1 0.83140214 +1
P 8.70213244 +1 -0.51701008 +1 -1.00384102 +1
C 8.56342084 +1 -2.36018626 +1 -0.96423280 +1
C 9.28989587 +1 -3.00673690 +1 0.03558859 +1
C 9.24115461 +1 -4.40394351 +1 0.12096803 +1
C 8.47889519 +1 -5.13305650 +1 -0.79666705 +1
C 7.76308809 +1 -4.47228261 +1 -1.80101722 +1
C 7.80532627 +1 -3.07520258 +1 -1.88815009 +1
C 8.57117275 +1 0.00252940 +1 -2.77011467 +1
C 9.74822232 +1 0.48571367 +1 -3.34217306 +1
C 9.73987485 +1 0.89696176 +1 -4.68113241 +1
C 8.55845034 +1 0.82695589 +1 -5.42508623 +1
C 7.38227583 +1 0.34919685 +1 -4.83624377 +1
C 7.38541369 +1 -0.06475882 +1 -3.49929234 +1
P 3.54257403 +1 -1.27761173 +1 -0.68008310 +1
C 3.70999258 +1 -1.28803485 +1 -2.50108456 +1
C 3.14777106 +1 -0.22649323 +1 -3.21063432 +1
C 3.27421375 +1 -0.20300853 +1 -4.60581702 +1
C 3.95263530 +1 -1.23105780 +1 -5.26563838 +1
C 4.50651828 +1 -2.29242597 +1 -4.53896629 +1
C 4.38271768 +1 -2.32664576 +1 -3.14629170 +1
C 3.72312556 +1 -2.96981812 +1 -0.02285176 +1
C 2.53967887 +1 -3.64183837 +1 0.29126934 +1
C 2.61392552 +1 -4.94657098 +1 0.79532219 +1
C 3.85750451 +1 -5.55654849 +1 0.98032283 +1
C 5.03506202 +1 -4.86794535 +1 0.66425224 +1

C	4.97193204 +1	-3.56450556 +1	0.16216510 +1
O	2.16744748 +1	-0.69824684 +1	-0.25748462 +1
H	5.79951270 +1	2.44865257 +1	1.86889532 +1
H	8.03086060 +1	1.74430314 +1	0.94118943 +1
H	3.73310019 +1	1.19444204 +1	1.21780412 +1
H	9.90750226 +1	-2.44621594 +1	0.74831866 +1
H	9.80329084 +1	-4.92044085 +1	0.89728249 +1
H	8.44780228 +1	-6.22068699 +1	-0.73444426 +1
H	7.17849876 +1	-5.04542595 +1	-2.51760734 +1
H	7.24306286 +1	-2.57568975 +1	-2.68053651 +1
H	10.67830837 +1	0.55812979 +1	-2.76438747 +1
H	10.65251393 +1	1.27430596 +1	-5.13914157 +1
H	8.55220690 +1	1.14883578 +1	-6.46628187 +1
H	6.46076826 +1	0.30301763 +1	-5.41451130 +1
H	6.45002380 +1	-0.42609343 +1	-3.06045066 +1
H	2.59998819 +1	0.59061444 +1	-2.71555263 +1
H	2.83372299 +1	0.61747497 +1	-5.17293972 +1
H	4.04537033 +1	-1.21197585 +1	-6.35203626 +1
H	5.02600487 +1	-3.09445991 +1	-5.06042489 +1
H	4.80944069 +1	-3.16889235 +1	-2.59526082 +1
H	1.54836836 +1	-3.18012219 +1	0.16085472 +1
H	1.69717843 +1	-5.48040443 +1	1.04596009 +1
H	3.91186826 +1	-6.57151303 +1	1.37499234 +1
H	6.00387331 +1	-5.34357064 +1	0.81237322 +1
H	5.90807590 +1	-3.04451576 +1	-0.06986544 +1

$(\kappa^1-1)_2$ -Er

Er	0.10339015 +1	0.16850068 +1	0.21380974 +1
O	9.89576211 +1	0.02560600 +1	-0.25952623 +1
C	-3.23874285 +1	3.41464316 +1	0.34526458 +1
C	-3.89598942 +1	4.57281369 +1	-0.10522845 +1
C	-5.28064927 +1	4.68940309 +1	0.04757140 +1
C	-4.02595494 +1	2.43288390 +1	0.94242076 +1
C	-5.96009793 +1	3.62094161 +1	0.65008235 +1
N	-5.36941321 +1	2.50407804 +1	1.10355004 +1
P	-3.43955863 +1	0.82961581 +1	1.61861255 +1
C	-4.56313191 +1	-0.47057194 +1	0.98706529 +1
C	-4.35476142 +1	-0.91405757 +1	-0.31984625 +1
C	-5.19326053 +1	-1.90749113 +1	-0.84009346 +1
C	-6.21959439 +1	-2.44039896 +1	-0.05432761 +1
C	-6.41178657 +1	-1.98879996 +1	1.25645842 +1
C	-5.57527830 +1	-1.00002881 +1	1.78676676 +1
C	-3.50591250 +1	0.89606616 +1	3.44079194 +1
C	-2.40856790 +1	0.37994006 +1	4.13149037 +1
C	-4.59993120 +1	1.44698359 +1	4.11102900 +1
C	-2.41601826 +1	0.40650495 +1	5.53242235 +1
C	-3.50784381 +1	0.94623890 +1	6.21677755 +1
C	-4.59882327 +1	1.46642369 +1	5.50857191 +1
P	-7.81015059 +1	3.59504682 +1	0.88774043 +1
C	-8.42067851 +1	2.37214061 +1	-0.35329655 +1
C	-9.54197646 +1	2.76589471 +1	-1.08368124 +1

C -10.07070634 +1 1.89764318 +1 -2.04730601 +1
C -9.47064225 +1 0.65503845 +1 -2.27123259 +1
C -8.34197383 +1 0.27516398 +1 -1.53617700 +1
C -7.81028770 +1 1.13838139 +1 -0.57123179 +1
C -8.08702468 +1 2.86555278 +1 2.56301299 +1
C -8.48703627 +1 3.75731671 +1 3.55809163 +1
C -8.72537318 +1 3.27558023 +1 4.85158828 +1
C -8.56886885 +1 1.91427835 +1 5.12932988 +1
C -8.17527866 +1 1.02939866 +1 4.11938713 +1
C -7.93390244 +1 1.50639169 +1 2.82517618 +1
O -8.40591754 +1 4.97053821 +1 0.73314422 +1
O -1.99140074 +1 0.55972976 +1 1.14148598 +1
O -0.50820793 +1 2.33250196 +1 -0.62094500 +1
N 0.23645019 +1 2.49425121 +1 -1.68137183 +1
O 0.90541719 +1 1.37767946 +1 -1.69854638 +1
O -0.32072278 +1 -2.18575988 +1 0.01682800 +1
N -1.17007750 +1 -2.27721325 +1 -0.96370037 +1
O -1.32225602 +1 -1.02584386 +1 -1.30019924 +1
O 0.41187239 +1 -0.04336489 +1 2.58552857 +1
N 1.34438473 +1 0.81658137 +1 2.86771480 +1
O 1.59773995 +1 1.32557977 +1 1.69165316 +1
O -1.67307860 +1 -3.23198055 +1 -1.42683171 +1
O 1.83750472 +1 1.07225518 +1 3.90209137 +1
O 0.28378446 +1 3.40448967 +1 -2.41989541 +1
H -2.15142902 +1 3.30094548 +1 0.20895867 +1
H -3.32165907 +1 5.37307416 +1 -0.57608750 +1
H -5.81348405 +1 5.58453525 +1 -0.29028811 +1
H -3.54464488 +1 -0.52112250 +1 -0.95144377 +1
H -5.03492701 +1 -2.27018504 +1 -1.85626295 +1
H -6.86819073 +1 -3.21718972 +1 -0.46066895 +1
H -7.20692164 +1 -2.41436801 +1 1.86645371 +1
H -5.72933090 +1 -0.67215603 +1 2.81820641 +1
H -1.53248939 +1 -0.04038738 +1 3.61144098 +1
H -5.45868976 +1 1.87048434 +1 3.57831754 +1
H -1.56425793 +1 0.00771382 +1 6.08360137 +1
H -3.51015686 +1 0.96681572 +1 7.30701555 +1
H -5.44559853 +1 1.89223848 +1 6.04512624 +1
H -10.01432922 +1 3.74357346 +1 -0.92441521 +1
H -10.94626607 +1 2.19314408 +1 -2.62260281 +1
H -9.88075666 +1 -0.01872267 +1 -3.02313059 +1
H -7.87168793 +1 -0.69025553 +1 -1.71614135 +1
H -6.92193727 +1 0.82112075 +1 -0.01533835 +1
H -8.62822518 +1 4.82482118 +1 3.34623375 +1
H -9.03881175 +1 3.96112949 +1 5.63709786 +1
H -8.76015505 +1 1.53942594 +1 6.13459431 +1
H -8.06441634 +1 -0.03025918 +1 4.33918643 +1
H -7.62930341 +1 0.80206077 +1 2.04671794 +1
C 5.79076948 +1 1.58442063 +1 1.16622444 +1
C 7.04497633 +1 1.21995568 +1 0.66603290 +1
C 7.10334057 +1 0.12066036 +1 -0.20123541 +1

N 6.04095341 +1 -0.61319451 +1 -0.57032646 +1
C 4.84644127 +1 -0.23339118 +1 -0.05814073 +1
C 4.65130815 +1 0.84946708 +1 0.79690754 +1
P 8.68214706 +1 -0.48861223 +1 -0.98773822 +1
C 8.54419710 +1 -2.33342305 +1 -0.97736566 +1
C 9.14580318 +1 -2.98699570 +1 0.09819919 +1
C 9.09014983 +1 -4.38478078 +1 0.16706974 +1
C 8.44669923 +1 -5.10852572 +1 -0.84153773 +1
C 7.85662097 +1 -4.44114419 +1 -1.92019339 +1
C 7.90582591 +1 -3.04317487 +1 -1.99130740 +1
C 8.57125102 +1 0.06084823 +1 -2.74673574 +1
C 9.74921085 +1 0.56581453 +1 -3.29719505 +1
C 9.75030681 +1 1.00257356 +1 -4.62824507 +1
C 8.57734418 +1 0.93581243 +1 -5.38572393 +1
C 7.39985138 +1 0.43580768 +1 -4.81820698 +1
C 7.39344480 +1 -0.00291009 +1 -3.48929161 +1
P 3.54031709 +1 -1.34727686 +1 -0.71376215 +1
C 3.72576646 +1 -1.36192102 +1 -2.53318797 +1
C 3.07343917 +1 -0.36423421 +1 -3.25771659 +1
C 3.21097942 +1 -0.34123385 +1 -4.65201167 +1
C 3.98915399 +1 -1.30679271 +1 -5.29561441 +1
C 4.63344943 +1 -2.30480316 +1 -4.55368359 +1
C 4.50013611 +1 -2.33786593 +1 -3.16192738 +1
C 3.76236610 +1 -3.02966284 +1 -0.04255500 +1
C 2.59709677 +1 -3.70846151 +1 0.32012129 +1
C 2.70135583 +1 -5.00527520 +1 0.83944825 +1
C 3.95656456 +1 -5.59996260 +1 0.99168292 +1
C 5.11586048 +1 -4.90431895 +1 0.62683824 +1
C 5.02290370 +1 -3.60933184 +1 0.10789473 +1
O 2.15118746 +1 -0.79983565 +1 -0.30345852 +1
H 5.69061236 +1 2.43789502 +1 1.83981633 +1
H 7.94723312 +1 1.77352143 +1 0.94602339 +1
H 3.65653144 +1 1.13727677 +1 1.16927996 +1
H 9.67301787 +1 -2.43279173 +1 0.88384328 +1
H 9.55624390 +1 -4.90620390 +1 1.00151382 +1
H 8.41126383 +1 -6.19668364 +1 -0.79183761 +1
H 7.36574503 +1 -5.00970357 +1 -2.70743820 +1
H 7.44542998 +1 -2.54047294 +1 -2.84492960 +1
H 10.67245627 +1 0.63572659 +1 -2.70833883 +1
H 10.66393222 +1 1.39705737 +1 -5.06953994 +1
H 8.57850352 +1 1.27762519 +1 -6.42058484 +1
H 6.48479697 +1 0.39172470 +1 -5.40677555 +1
H 6.45711928 +1 -0.38092424 +1 -3.06640790 +1
H 2.44724744 +1 0.40278062 +1 -2.77342600 +1
H 2.70219348 +1 0.42956999 +1 -5.23099792 +1
H 4.09052532 +1 -1.28863345 +1 -6.38111590 +1
H 5.23128081 +1 -3.05868200 +1 -5.06241886 +1
H 5.00140906 +1 -3.12925711 +1 -2.59836290 +1
H 1.59695253 +1 -3.25708673 +1 0.21627725 +1
H 1.79902474 +1 -5.54453496 +1 1.12739940 +1

H 4.03468541 +1 -6.60844051 +1 1.39850164 +1
H 6.09381890 +1 -5.36803332 +1 0.74996547 +1
H 5.94549560 +1 -3.08368309 +1 -0.16328712 +1

$(\kappa^1-1)_2$ -Tm

Tm 0.31182702 +1 0.22354774 +1 0.63344767 +1
O 9.96657081 +1 0.05659087 +1 -0.73527562 +1
C -3.07121074 +1 3.45839884 +1 0.50121877 +1
C -3.69159437 +1 4.60800255 +1 -0.01787537 +1
C -5.08677733 +1 4.69381397 +1 -0.04020535 +1
C -3.90540733 +1 2.45153200 +1 0.98157551 +1
C -5.81304231 +1 3.60488278 +1 0.46276986 +1
N -5.25960242 +1 2.49405103 +1 0.97462959 +1
P -3.37250512 +1 0.85617900 +1 1.71959829 +1
C -4.43721489 +1 -0.46131930 +1 1.02605663 +1
C -4.14613571 +1 -0.89757976 +1 -0.26780489 +1
C -4.92978548 +1 -1.91028835 +1 -0.83408600 +1
C -5.98499997 +1 -2.46912234 +1 -0.10645675 +1
C -6.26014842 +1 -2.02475793 +1 1.19178040 +1
C -5.47793885 +1 -1.01759622 +1 1.76856524 +1
C -3.58143962 +1 0.96596329 +1 3.52886468 +1
C -2.52645413 +1 0.51790543 +1 4.32431150 +1
C -4.74658189 +1 1.49555593 +1 4.08854465 +1
C -2.65042388 +1 0.59034168 +1 5.71857460 +1
C -3.81354097 +1 1.10845157 +1 6.29241607 +1
C -4.86113262 +1 1.56150924 +1 5.47956265 +1
P -7.67805168 +1 3.54752912 +1 0.47302568 +1
C -8.11481994 +1 2.30730444 +1 -0.82241620 +1
C -9.12513737 +1 2.69020764 +1 -1.70477092 +1
C -9.51952541 +1 1.80740382 +1 -2.71829249 +1
C -8.89754748 +1 0.56124618 +1 -2.83904294 +1
C -7.88063780 +1 0.19238769 +1 -1.95113434 +1
C -7.48384009 +1 1.06991440 +1 -0.93562736 +1
C -8.14617297 +1 2.82436665 +1 2.10731591 +1
C -8.74977446 +1 3.69846844 +1 3.01101549 +1
C -9.14001325 +1 3.21912448 +1 4.26808981 +1
C -8.92803247 +1 1.87767161 +1 4.59996595 +1
C -8.32738190 +1 1.00993374 +1 3.68080311 +1
C -7.93506861 +1 1.48447942 +1 2.42339025 +1
O -8.27156470 +1 4.91228576 +1 0.23493107 +1
O -1.89254777 +1 0.58015088 +1 1.35442920 +1
O -0.17360650 +1 2.47588123 +1 -0.04504629 +1
N 0.63486917 +1 2.64039498 +1 -1.04386415 +1
O 1.26226383 +1 1.51794328 +1 -1.15643554 +1
O -0.17105370 +1 -2.09274608 +1 0.53771671 +1
N -0.86224231 +1 -2.07679661 +1 -0.53572473 +1
O -0.97106311 +1 -0.89132368 +1 -1.01172315 +1
O 0.44269493 +1 0.12138139 +1 3.03009019 +1
N 1.49712460 +1 0.82287997 +1 3.27387927 +1
O 1.92363858 +1 1.21205866 +1 2.11474258 +1
O -1.34996386 +1 -3.04070357 +1 -1.03678315 +1

O 1.97786280 +1 1.06004085 +1 4.32462362 +1
O 0.76078953 +1 3.60700362 +1 -1.70712541 +1
H -1.97339760 +1 3.37307315 +1 0.50885700 +1
H -3.08040740 +1 5.42660608 +1 -0.40319295 +1
H -5.59244688 +1 5.58200547 +1 -0.43411042 +1
H -3.31313660 +1 -0.48423110 +1 -0.85327194 +1
H -4.70388063 +1 -2.27000970 +1 -1.83863503 +1
H -6.59080598 +1 -3.26106250 +1 -0.54832891 +1
H -7.07680229 +1 -2.47103441 +1 1.75704914 +1
H -5.69548439 +1 -0.69777174 +1 2.79095011 +1
H -1.59493176 +1 0.11693095 +1 3.89518749 +1
H -5.57269717 +1 1.86811984 +1 3.47271728 +1
H -1.83209435 +1 0.24466704 +1 6.35057051 +1
H -3.90643817 +1 1.16524124 +1 7.37746345 +1
H -5.76332271 +1 1.97193635 +1 5.93083744 +1
H -9.61291750 +1 3.67016432 +1 -1.62565751 +1
H -10.30766612 +1 2.09450182 +1 -3.41210242 +1
H -9.20342907 +1 -0.12432376 +1 -3.62900488 +1
H -7.39260595 +1 -0.77589730 +1 -2.05055206 +1
H -6.68143159 +1 0.76101165 +1 -0.25748497 +1
H -8.93195961 +1 4.75008681 +1 2.75448630 +1
H -9.61289799 +1 3.89089177 +1 4.98251029 +1
H -9.23645696 +1 1.50448683 +1 5.57636230 +1
H -8.17307342 +1 -0.03479962 +1 3.94174844 +1
H -7.46907367 +1 0.79440247 +1 1.71432788 +1
C 6.07704476 +1 1.31864882 +1 1.38413266 +1
C 7.25696116 +1 1.02974774 +1 0.69192576 +1
C 7.20906092 +1 0.02150828 +1 -0.28118328 +1
N 6.11319034 +1 -0.69401451 +1 -0.58017184 +1
C 4.99243307 +1 -0.38774893 +1 0.11656522 +1
C 4.90339115 +1 0.60183252 +1 1.09303485 +1
P 8.67867337 +1 -0.45416596 +1 -1.32817792 +1
C 8.62103098 +1 -2.29543976 +1 -1.46762570 +1
C 9.61666531 +1 -2.98969059 +1 -0.78070144 +1
C 9.64416543 +1 -4.38858202 +1 -0.84744408 +1
C 8.68438051 +1 -5.07026758 +1 -1.60159062 +1
C 7.69509264 +1 -4.36053857 +1 -2.29149295 +1
C 7.66265651 +1 -2.96222903 +1 -2.22704151 +1
C 8.29847882 +1 0.23554410 +1 -2.99768280 +1
C 9.34485095 +1 0.91580608 +1 -3.62074266 +1
C 9.14056125 +1 1.47051695 +1 -4.89065440 +1
C 7.89657866 +1 1.34318512 +1 -5.51561359 +1
C 6.85327853 +1 0.66402073 +1 -4.87629954 +1
C 7.05238457 +1 0.10637764 +1 -3.60814723 +1
P 3.62671262 +1 -1.46555841 +1 -0.47164828 +1
C 3.66641876 +1 -1.44247639 +1 -2.30023464 +1
C 3.16622086 +1 -0.30774635 +1 -2.94039285 +1
C 3.18641898 +1 -0.25691585 +1 -4.34017577 +1
C 3.69747783 +1 -1.33127125 +1 -5.07371662 +1
C 4.18889656 +1 -2.46536561 +1 -4.41607949 +1

C	4.17004011	+1	-2.52702500	+1	-3.01869825	+1
C	3.88423066	+1	-3.16327314	+1	0.14538166	+1
C	2.75178860	+1	-3.83267561	+1	0.61324237	+1
C	2.88986607	+1	-5.14061962	+1	1.09578072	+1
C	4.14544952	+1	-5.75367430	+1	1.10743439	+1
C	5.27247084	+1	-5.06574193	+1	0.64001936	+1
C	5.14604790	+1	-3.75952800	+1	0.15812031	+1
O	2.27447600	+1	-0.92095557	+1	0.05231219	+1
H	6.05960505	+1	2.10035932	+1	2.14628997	+1
H	8.18458566	+1	1.57148688	+1	0.90531223	+1
H	3.96486498	+1	0.83525890	+1	1.61700672	+1
H	10.38230201	+1	-2.46254562	+1	-0.19696937	+1
H	10.41664348	+1	-4.94226214	+1	-0.31654207	+1
H	8.70952865	+1	-6.15839964	+1	-1.65704848	+1
H	6.95575858	+1	-4.89621529	+1	-2.88294260	+1
H	6.88412303	+1	-2.42144008	+1	-2.77223436	+1
H	10.32193024	+1	1.03128487	+1	-3.13473162	+1
H	9.94973842	+1	2.00297182	+1	-5.38726344	+1
H	7.73738894	+1	1.77714613	+1	-6.50252020	+1
H	5.88256160	+1	0.57208540	+1	-5.36101695	+1
H	6.21816736	+1	-0.41376934	+1	-3.12598787	+1
H	2.74563691	+1	0.54579724	+1	-2.38570359	+1
H	2.79235589	+1	0.62036644	+1	-4.85340873	+1
H	3.70706042	+1	-1.29067214	+1	-6.16340036	+1
H	4.57696839	+1	-3.30263271	+1	-4.99363716	+1
H	4.54262683	+1	-3.42705101	+1	-2.52247993	+1
H	1.75505341	+1	-3.36346673	+1	0.62020626	+1
H	2.01413801	+1	-5.67474778	+1	1.46449162	+1
H	4.24993510	+1	-6.77133278	+1	1.48499967	+1
H	6.25026287	+1	-5.54511521	+1	0.65601692	+1
H	6.04233694	+1	-3.23653855	+1	-0.19333396	+1

$(\kappa^1-1)_2$ -Yb

Yb	0.21267249	+1	0.24956716	+1	0.44459408	+1
O	9.89893214	+1	0.09975153	+1	-0.47199757	+1
C	-3.08373093	+1	3.52626140	+1	0.45127060	+1
C	-3.72810586	+1	4.68635500	+1	-0.01375269	+1
C	-5.12035785	+1	4.78672257	+1	0.06269852	+1
C	-3.89263631	+1	2.52478532	+1	0.98210497	+1
C	-5.82119143	+1	3.69953083	+1	0.60426421	+1
N	-5.24419176	+1	2.57966105	+1	1.06684436	+1
P	-3.34392379	+1	0.91131308	+1	1.66439455	+1
C	-4.42757325	+1	-0.37565254	+1	0.94348758	+1
C	-4.19043122	+1	-0.74282668	+1	-0.38226184	+1
C	-4.99965952	+1	-1.72301621	+1	-0.96903053	+1
C	-6.02678815	+1	-2.31826216	+1	-0.23008419	+1
C	-6.24832629	+1	-1.94267841	+1	1.09967594	+1
C	-5.44041578	+1	-0.96795267	+1	1.69661503	+1
C	-3.51422429	+1	0.94663658	+1	3.47987093	+1
C	-2.45676776	+1	0.42628762	+1	4.22717045	+1
C	-4.64964439	+1	1.48155530	+1	4.09232503	+1

C -2.54656233 +1 0.43374481 +1 5.62556852 +1
C -3.67956010 +1 0.95858359 +1 6.25183507 +1
C -4.73050213 +1 1.48197161 +1 5.48750990 +1
P -7.68063814 +1 3.64076326 +1 0.74713790 +1
C -8.20903321 +1 2.47258099 +1 -0.58151403 +1
C -9.30323560 +1 2.88229365 +1 -1.34333342 +1
C -9.77215773 +1 2.05220077 +1 -2.36959457 +1
C -9.14066642 +1 0.83101430 +1 -2.62271997 +1
C -8.03891203 +1 0.43541834 +1 -1.85569194 +1
C -7.56663722 +1 1.26072510 +1 -0.82873314 +1
C -8.03018712 +1 2.82034098 +1 2.36605199 +1
C -8.49178207 +1 3.65233762 +1 3.38584526 +1
C -8.78766803 +1 3.09868062 +1 4.63800864 +1
C -8.62642597 +1 1.72620016 +1 4.85031678 +1
C -8.17047038 +1 0.90168330 +1 3.81586885 +1
C -7.87124616 +1 1.45072202 +1 2.56292574 +1
O -8.28943181 +1 5.01401116 +1 0.63158164 +1
O -1.86912386 +1 0.64710227 +1 1.26549738 +1
O -0.31072629 +1 2.42270152 +1 -0.33602560 +1
N 0.51138507 +1 2.57452072 +1 -1.32990543 +1
O 1.16714127 +1 1.45857917 +1 -1.35797630 +1
O -0.25588191 +1 -2.05621557 +1 0.20255329 +1
N -1.02241055 +1 -2.06697945 +1 -0.83600507 +1
O -1.12594815 +1 -0.82036641 +1 -1.17871272 +1
O 0.40147572 +1 0.00348506 +1 2.79326551 +1
N 1.36152195 +1 0.81843954 +1 3.08327999 +1
O 1.69655127 +1 1.33094614 +1 1.93819057 +1
O -1.52188941 +1 -2.99739242 +1 -1.36060907 +1
O 1.83182717 +1 1.04681496 +1 4.13884079 +1
O 0.62627472 +1 3.50752219 +1 -2.03789113 +1
H -1.98915521 +1 3.42669271 +1 0.37722926 +1
H -3.13696483 +1 5.50164049 +1 -0.43569022 +1
H -5.64258095 +1 5.68377948 +1 -0.28584999 +1
H -3.37938145 +1 -0.30049242 +1 -0.97838071 +1
H -4.81689365 +1 -2.02822037 +1 -1.99992984 +1
H -6.65279165 +1 -3.08450977 +1 -0.68859946 +1
H -7.04352407 +1 -2.41669774 +1 1.67276114 +1
H -5.61755710 +1 -0.69942271 +1 2.74159103 +1
H -1.54949810 +1 0.01650223 +1 3.75437080 +1
H -5.47954172 +1 1.90579085 +1 3.51598395 +1
H -1.72606849 +1 0.03194772 +1 6.22033243 +1
H -3.74582591 +1 0.96470414 +1 7.34024393 +1
H -5.61029738 +1 1.89521634 +1 5.97890884 +1
H -9.80037526 +1 3.84334072 +1 -1.16032891 +1
H -10.62598680 +1 2.36082301 +1 -2.97013438 +1
H -9.50533843 +1 0.18609182 +1 -3.42187054 +1
H -7.54395149 +1 -0.51297524 +1 -2.05839866 +1
H -6.69875493 +1 0.93193794 +1 -0.24778302 +1
H -8.63688445 +1 4.72809183 +1 3.22474537 +1
H -9.14985201 +1 3.73715237 +1 5.44196657 +1

H -8.86258702 +1 1.29541714 +1 5.82313299 +1
H -8.05586106 +1 -0.16698539 +1 3.98401223 +1
H -7.51684220 +1 0.79255336 +1 1.76510821 +1
C 5.90341461 +1 1.52400509 +1 1.33339651 +1
C 7.11907430 +1 1.18238902 +1 0.73288025 +1
C 7.12052750 +1 0.10525082 +1 -0.16446486 +1
N 6.03923050 +1 -0.62895337 +1 -0.47121634 +1
C 4.88277054 +1 -0.27007889 +1 0.13600118 +1
C 4.74375966 +1 0.79018021 +1 1.02909910 +1
P 8.64111195 +1 -0.45130666 +1 -1.09224927 +1
C 8.57682206 +1 -2.29789558 +1 -1.09132032 +1
C 9.50390407 +1 -2.93975921 +1 -0.27044423 +1
C 9.52047707 +1 -4.33955055 +1 -0.22296489 +1
C 8.61897365 +1 -5.07478583 +1 -0.99837327 +1
C 7.69948473 +1 -4.41794515 +1 -1.82373259 +1
C 7.67789856 +1 -3.01872310 +1 -1.87354164 +1
C 8.35516922 +1 0.10808836 +1 -2.82816962 +1
C 9.44606625 +1 0.71256203 +1 -3.45309946 +1
C 9.31404228 +1 1.16800552 +1 -4.77111951 +1
C 8.09658708 +1 1.01978993 +1 -5.44196496 +1
C 7.00799516 +1 0.41794506 +1 -4.80098427 +1
C 7.13511447 +1 -0.04104605 +1 -3.48490541 +1
P 3.54239869 +1 -1.37728116 +1 -0.45369914 +1
C 3.65722087 +1 -1.44020714 +1 -2.27748590 +1
C 3.15382873 +1 -0.35503787 +1 -2.99547395 +1
C 3.23750990 +1 -0.37221330 +1 -4.39388294 +1
C 3.81427342 +1 -1.46392131 +1 -5.04838948 +1
C 4.30824940 +1 -2.54844447 +1 -4.31305753 +1
C 4.22596705 +1 -2.54234319 +1 -2.91687469 +1
C 3.76237946 +1 -3.04853169 +1 0.24300677 +1
C 2.59870749 +1 -3.71499666 +1 0.63207713 +1
C 2.70479538 +1 -5.00503135 +1 1.16800306 +1
C 3.95929785 +1 -5.60391049 +1 1.30920811 +1
C 5.11713933 +1 -4.91972338 +1 0.91780249 +1
C 5.02273522 +1 -3.63125524 +1 0.38366916 +1
O 2.17441117 +1 -0.80221388 +1 -0.00661120 +1
H 5.84773152 +1 2.36001718 +1 2.03362418 +1
H 8.03626993 +1 1.73679560 +1 0.95843317 +1
H 3.77687615 +1 1.06365270 +1 1.47725034 +1
H 10.22496176 +1 -2.37146931 +1 0.33105939 +1
H 10.23951667 +1 -4.85286852 +1 0.41319164 +1
H 8.63584191 +1 -6.16394177 +1 -0.96466191 +1
H 7.00569975 +1 -4.99553293 +1 -2.43071333 +1
H 6.95441527 +1 -2.52015999 +1 -2.52389349 +1
H 10.40276597 +1 0.84528767 +1 -2.93223391 +1
H 10.15863238 +1 1.64016963 +1 -5.26975588 +1
H 7.99365846 +1 1.37705432 +1 -6.46634782 +1
H 6.05788375 +1 0.30976644 +1 -5.32188401 +1
H 6.26611606 +1 -0.50164699 +1 -3.00400211 +1
H 2.68225537 +1 0.51059637 +1 -2.50271237 +1

H	2.84187675 +1	0.46580468 +1	-4.96787982 +1
H	3.87352994 +1	-1.47643877 +1	-6.13716353 +1
H	4.74814474 +1	-3.39969912 +1	-4.82968120 +1
H	4.60155827 +1	-3.40446057 +1	-2.35923188 +1
H	1.60020843 +1	-3.25788739 +1	0.53511425 +1
H	1.80457695 +1	-5.53600394 +1	1.47721272 +1
H	4.03857667 +1	-6.60734313 +1	1.72847825 +1
H	6.09366482 +1	-5.38792732 +1	1.03318852 +1
H	5.94227679 +1	-3.11197422 +1	0.09192889 +1

$(\kappa^1-1)_2$ -Lu

Lu	0.23628848 +1	0.29477049 +1	0.49272228 +1
O	9.90644476 +1	0.12129089 +1	-0.58086791 +1
C	-3.04923943 +1	3.55675918 +1	0.62376198 +1
C	-3.68489595 +1	4.73815120 +1	0.20232450 +1
C	-5.07906469 +1	4.82906957 +1	0.24180248 +1
C	-3.86801777 +1	2.52424948 +1	1.07371659 +1
C	-5.79014775 +1	3.71200536 +1	0.70380413 +1
N	-5.22204811 +1	2.57037845 +1	1.12178301 +1
P	-3.33242530 +1	0.87844987 +1	1.68638261 +1
C	-4.40627684 +1	-0.37286612 +1	0.89227137 +1
C	-4.14660760 +1	-0.68243718 +1	-0.44402767 +1
C	-4.94624890 +1	-1.63486203 +1	-1.08704960 +1
C	-5.98707653 +1	-2.25958223 +1	-0.39307271 +1
C	-6.23209338 +1	-1.94106528 +1	0.94748047 +1
C	-5.43362300 +1	-0.99504988 +1	1.60059169 +1
C	-3.53119993 +1	0.83778231 +1	3.49898534 +1
C	-2.48132090 +1	0.30361778 +1	4.24687601 +1
C	-4.68530348 +1	1.33474903 +1	4.10916918 +1
C	-2.59811474 +1	0.25682244 +1	5.64270995 +1
C	-3.74997652 +1	0.74241601 +1	6.26590208 +1
C	-4.79319279 +1	1.28100782 +1	5.50132473 +1
P	-7.65318738 +1	3.65125794 +1	0.78762363 +1
C	-8.14513849 +1	2.53016091 +1	-0.59394973 +1
C	-9.20801482 +1	2.97562726 +1	-1.37983927 +1
C	-9.64713285 +1	2.18478469 +1	-2.44927948 +1
C	-9.01736152 +1	0.96665663 +1	-2.72082258 +1
C	-7.94732608 +1	0.53494712 +1	-1.92883937 +1
C	-7.50505435 +1	1.32084532 +1	-0.85848744 +1
C	-8.05331462 +1	2.78307707 +1	2.36922733 +1
C	-8.55661084 +1	3.58464917 +1	3.39376688 +1
C	-8.89373411 +1	2.99573822 +1	4.61912336 +1
C	-8.73160727 +1	1.61883700 +1	4.79970240 +1
C	-8.23339304 +1	0.82515483 +1	3.76049365 +1
C	-7.89245744 +1	1.40954050 +1	2.53451407 +1
O	-8.25400573 +1	5.03025952 +1	0.69824143 +1
O	-1.85126748 +1	0.62564415 +1	1.29659496 +1
O	-0.31037028 +1	2.41650380 +1	-0.16063282 +1
N	0.52031185 +1	2.49032509 +1	-1.13488211 +1
O	1.19304569 +1	1.41069382 +1	-1.26331840 +1
O	-0.15291678 +1	-1.95051849 +1	0.27177498 +1

N -0.88359993 +1 -1.86256562 +1 -0.76997270 +1
O -1.04288025 +1 -0.64788450 +1 -1.14899887 +1
O 0.38149653 +1 0.00203414 +1 2.75871185 +1
N 1.35410520 +1 0.80720562 +1 2.94504128 +1
O 1.70589599 +1 1.39253287 +1 1.85969353 +1
O -1.36657030 +1 -2.79538743 +1 -1.33030179 +1
O 1.87752531 +1 0.99686578 +1 3.99654643 +1
O 0.64318744 +1 3.44496552 +1 -1.83210292 +1
H -1.95339960 +1 3.46781563 +1 0.57885792 +1
H -3.08525504 +1 5.57680524 +1 -0.15738724 +1
H -5.59560088 +1 5.74139591 +1 -0.07481185 +1
H -3.32591575 +1 -0.21563782 +1 -1.00678201 +1
H -4.74462140 +1 -1.89586507 +1 -2.12660582 +1
H -6.60549660 +1 -3.00429703 +1 -0.89532516 +1
H -7.03836796 +1 -2.43750516 +1 1.48508956 +1
H -5.62932083 +1 -0.77232216 +1 2.65288421 +1
H -1.55993386 +1 -0.07583249 +1 3.77808198 +1
H -5.50917785 +1 1.77108932 +1 3.53322949 +1
H -1.78324645 +1 -0.15590316 +1 6.23786235 +1
H -3.83724447 +1 0.70628835 +1 7.35228743 +1
H -5.68753391 +1 1.66433750 +1 5.99077674 +1
H -9.70291569 +1 3.93505489 +1 -1.18245357 +1
H -10.47619286 +1 2.52154554 +1 -3.06910314 +1
H -9.35829344 +1 0.35262373 +1 -3.55403564 +1
H -7.45327750 +1 -0.41075599 +1 -2.14586330 +1
H -6.66108433 +1 0.96475041 +1 -0.25866691 +1
H -8.70280387 +1 4.66366679 +1 3.25631397 +1
H -9.28824442 +1 3.61028945 +1 5.42660328 +1
H -9.00011670 +1 1.16038672 +1 5.75123600 +1
H -8.11873812 +1 -0.24713501 +1 3.90373011 +1
H -7.50538302 +1 0.77555479 +1 1.73227824 +1
C 5.95419037 +1 1.62921010 +1 1.25717502 +1
C 7.15452111 +1 1.26559935 +1 0.63925117 +1
C 7.13463737 +1 0.15504758 +1 -0.21631517 +1
N 6.04632368 +1 -0.58925711 +1 -0.46803646 +1
C 4.90514797 +1 -0.20918748 +1 0.15558042 +1
C 4.78805085 +1 0.88317606 +1 1.01212230 +1
P 8.63276959 +1 -0.44214287 +1 -1.15589328 +1
C 8.55826723 +1 -2.28725452 +1 -1.09465695 +1
C 9.52225951 +1 -2.91121016 +1 -0.30313299 +1
C 9.53473557 +1 -4.30921461 +1 -0.21652300 +1
C 8.59248953 +1 -5.06069216 +1 -0.92500505 +1
C 7.63503777 +1 -4.42192097 +1 -1.72083861 +1
C 7.61686692 +1 -3.02460930 +1 -1.80881229 +1
C 8.31370031 +1 0.05970284 +1 -2.90358563 +1
C 9.39255748 +1 0.64124337 +1 -3.56975134 +1
C 9.23626294 +1 1.04845259 +1 -4.90085107 +1
C 8.00665813 +1 0.87640877 +1 -5.54329490 +1
C 6.93007218 +1 0.29889808 +1 -4.86082830 +1
C 7.08172484 +1 -0.11271093 +1 -3.53173032 +1

P	3.55741530	+1	-1.34425828	+1	-0.35870705	+1
C	3.62616669	+1	-1.47418110	+1	-2.18124682	+1
C	3.14810675	+1	-0.39566400	+1	-2.92646638	+1
C	3.19426097	+1	-0.46634763	+1	-4.32474361	+1
C	3.70933209	+1	-1.60385375	+1	-4.95251292	+1
C	4.17887168	+1	-2.68029106	+1	-4.19005174	+1
C	4.13415886	+1	-2.62051025	+1	-2.79326080	+1
C	3.80247736	+1	-2.98668686	+1	0.39539581	+1
C	2.64765757	+1	-3.65804917	+1	0.80259690	+1
C	2.77166358	+1	-4.92298716	+1	1.39146954	+1
C	4.03534972	+1	-5.49307039	+1	1.56649854	+1
C	5.18379451	+1	-4.80576482	+1	1.15393271	+1
C	5.07134157	+1	-3.54205532	+1	0.56652848	+1
O	2.19438563	+1	-0.75997333	+1	0.09814683	+1
H	5.91526921	+1	2.49158679	+1	1.92590555	+1
H	8.07648961	+1	1.82825827	+1	0.82042860	+1
H	3.83415767	+1	1.17144559	+1	1.47668541	+1
H	10.27471000	+1	-2.33031986	+1	0.24563562	+1
H	10.28209939	+1	-4.80852103	+1	0.39771293	+1
H	8.60645278	+1	-6.14857867	+1	-0.86163746	+1
H	6.90882914	+1	-5.01236668	+1	-2.27522494	+1
H	6.86210682	+1	-2.54019725	+1	-2.43416429	+1
H	10.35841771	+1	0.79274542	+1	-3.07142138	+1
H	10.07164145	+1	1.50153670	+1	-5.43173294	+1
H	7.88487257	+1	1.19595506	+1	-6.57803769	+1
H	5.97056481	+1	0.17245432	+1	-5.35983733	+1
H	6.22235058	+1	-0.55595835	+1	-3.01827083	+1
H	2.72550131	+1	0.50545473	+1	-2.45526045	+1
H	2.81702525	+1	0.36582657	+1	-4.91941008	+1
H	3.73908108	+1	-1.65797368	+1	-6.04126427	+1
H	4.57010598	+1	-3.56719818	+1	-4.68559252	+1
H	4.49049092	+1	-3.47630216	+1	-2.21349381	+1
H	1.64251077	+1	-3.22364010	+1	0.67926480	+1
H	1.87843535	+1	-5.45668001	+1	1.71577993	+1
H	4.12896701	+1	-6.47637864	+1	2.02838247	+1
H	6.16730538	+1	-5.25214599	+1	1.29412412	+1
H	5.98408556	+1	-3.02099738	+1	0.25748063	+1

Cartesian coordinates of atoms in the optimized geometries for κ^1 -2-M complexes

κ^1 -2-Pr

P	-0.11147378	+1	0.51110521	+1	-0.29066754	+1
C	1.70629756	+1	0.28453076	+1	0.03055582	+1
C	2.37380063	+1	1.63933876	+1	0.07137821	+1
P	4.20323026	+1	1.30472955	+1	0.47155547	+1
O	4.84208750	+1	0.31115640	+1	-0.45804325	+1
C	4.97340773	+1	2.98190932	+1	0.42840156	+1
C	6.03449036	+1	3.14200060	+1	-0.46119532	+1

C 6.66513473 +1 4.39008929 +1 -0.55818970 +1
C 6.22885654 +1 5.45523347 +1 0.23348200 +1
C 5.16303916 +1 5.28092531 +1 1.12559671 +1
C 4.53190252 +1 4.03711524 +1 1.22542454 +1
C 4.16219783 +1 0.76070228 +1 2.23724531 +1
C 4.72376527 +1 -0.48610249 +1 2.50589529 +1
C 4.70571489 +1 -0.97701926 +1 3.81882489 +1
C 4.13077730 +1 -0.21683273 +1 4.84001713 +1
C 3.57503572 +1 1.03799677 +1 4.55793461 +1
C 3.59157469 +1 1.53105997 +1 3.24976850 +1
O -0.84657220 +1 -0.86571634 +1 -0.34721585 +1
C -0.32462647 +1 1.41685817 +1 -1.86157769 +1
C -0.31612788 +1 2.81264509 +1 -1.88885448 +1
C -0.47526708 +1 3.46812793 +1 -3.11366196 +1
C -0.64491236 +1 2.72663673 +1 -4.28957147 +1
C -0.65550808 +1 1.32952455 +1 -4.24653903 +1
C -0.49424718 +1 0.66474036 +1 -3.02447588 +1
C -0.89044990 +1 1.44211593 +1 1.07972508 +1
C -2.15024678 +1 2.00477089 +1 0.85841226 +1
C -2.81806549 +1 2.62127839 +1 1.92144255 +1
C -2.22634205 +1 2.66887392 +1 3.18833206 +1
C -0.96309891 +1 2.10394260 +1 3.39629254 +1
C -0.28950111 +1 1.48306336 +1 2.33893376 +1
Pr -2.95464360 +1 -1.95172711 +1 0.43284619 +1
O -3.73756507 +1 -0.77941842 +1 2.55342879 +1
N -2.77636523 +1 -1.04384245 +1 3.36455844 +1
O -1.90506141 +1 -1.76186914 +1 2.74529817 +1
O -2.58297575 +1 -4.44609795 +1 0.14007007 +1
N -3.72310317 +1 -4.92425986 +1 0.50733675 +1
O -4.48014890 +1 -3.93796366 +1 0.84854948 +1
O -3.90430118 +1 -1.58239142 +1 -1.90079157 +1
N -4.09992063 +1 -0.31332330 +1 -1.90420505 +1
O -3.78438621 +1 0.15460993 +1 -0.74410197 +1
O -4.49491768 +1 0.32769975 +1 -2.81659911 +1
O -4.02027065 +1 -6.06584506 +1 0.52918235 +1
O -2.69698313 +1 -0.68079444 +1 4.48815112 +1
H 1.84124860 +1 -0.30774495 +1 0.96789844 +1
H 2.14087247 +1 -0.36964006 +1 -0.77214641 +1
H 2.33481315 +1 2.16491780 +1 -0.90783959 +1
H 1.95018982 +1 2.33194284 +1 0.82099370 +1
H 6.38758892 +1 2.31060569 +1 -1.08569899 +1
H 7.49597469 +1 4.52620933 +1 -1.24928928 +1
H 6.72018131 +1 6.42573818 +1 0.15937060 +1
H 4.83107281 +1 6.11358895 +1 1.74296828 +1
H 3.71039272 +1 3.91708842 +1 1.93540573 +1
H 5.18031085 +1 -1.09140099 +1 1.71152737 +1
H 5.14020280 +1 -1.95146670 +1 4.04038600 +1
H 4.11418268 +1 -0.59999097 +1 5.86102073 +1
H 3.13501226 +1 1.62769097 +1 5.36012651 +1
H 3.16667873 +1 2.51759849 +1 3.05128576 +1

H -0.19831401 +1 3.40873325 +1 -0.98124324 +1
H -0.47414227 +1 4.55697313 +1 -3.15402516 +1
H -0.77348273 +1 3.24224835 +1 -5.24291902 +1
H -0.79471492 +1 0.75525218 +1 -5.16336656 +1
H -0.50922409 +1 -0.43035830 +1 -3.00903162 +1
H -2.64883101 +1 1.96821805 +1 -0.12208698 +1
H -3.81046322 +1 3.04804563 +1 1.76445289 +1
H -2.75735293 +1 3.13656846 +1 4.02003562 +1
H -0.51226801 +1 2.13121890 +1 4.38859128 +1
H 0.68757023 +1 1.03254588 +1 2.53534926 +1

κ^1 -2-Lu

P -0.27260800 +1 0.41613485 +1 0.06455594 +1
C 1.55744801 +1 0.21117527 +1 0.31199262 +1
C 2.23601485 +1 1.54834896 +1 0.12576004 +1
P 4.09388081 +1 1.23023366 +1 0.38656203 +1
O 4.64931406 +1 0.17968298 +1 -0.53325087 +1
C 4.86172545 +1 2.89644864 +1 0.18219166 +1
C 5.87718530 +1 2.98616604 +1 -0.76839023 +1
C 6.50655436 +1 4.21991990 +1 -0.98473686 +1
C 6.11433911 +1 5.34123389 +1 -0.24981857 +1
C 5.09350501 +1 5.23786788 +1 0.70396140 +1
C 4.46388038 +1 4.00867500 +1 0.92290017 +1
C 4.20579134 +1 0.79197118 +1 2.17881819 +1
C 4.77847880 +1 -0.44476559 +1 2.46976654 +1
C 4.87628321 +1 -0.85712008 +1 3.80602495 +1
C 4.40356904 +1 -0.02991106 +1 4.82746256 +1
C 3.83453914 +1 1.21345985 +1 4.52196162 +1
C 3.73649908 +1 1.62879401 +1 3.19054428 +1
O -0.97410374 +1 -0.98653271 +1 0.09868335 +1
C -0.56902627 +1 1.19799066 +1 -1.55746485 +1
C -0.73679960 +1 2.58007479 +1 -1.66040199 +1
C -0.95802600 +1 3.14499948 +1 -2.92024696 +1
C -1.01388298 +1 2.32736977 +1 -4.05556805 +1
C -0.84685780 +1 0.94430672 +1 -3.93738904 +1
C -0.62116149 +1 0.37048091 +1 -2.68046828 +1
C -1.00352399 +1 1.44284668 +1 1.38487342 +1
C -2.35436716 +1 1.77874576 +1 1.25973804 +1
C -2.97589033 +1 2.49946254 +1 2.28626439 +1
C -2.24924835 +1 2.86962193 +1 3.42155517 +1
C -0.89811360 +1 2.52072381 +1 3.53803499 +1
C -0.27090974 +1 1.79666140 +1 2.51956461 +1
Lu -2.76965690 +1 -2.31625746 +1 0.37228218 +1
O -3.30862290 +1 -1.45047789 +1 2.40507315 +1
N -2.54086521 +1 -2.20388769 +1 3.10674889 +1
O -1.91685419 +1 -3.03659168 +1 2.35410678 +1
O -2.48473213 +1 -4.44979199 +1 -0.34896194 +1
N -3.69292449 +1 -4.84120890 +1 -0.15805612 +1
O -4.40374679 +1 -3.88388276 +1 0.33527837 +1
O -3.16682307 +1 -1.88206982 +1 -1.82936011 +1
N -3.72268097 +1 -0.73975458 +1 -1.66558723 +1

O	-3.80231117	+1	-0.44461676	+1	-0.41562869	+1
O	-4.10551130	+1	-0.04114146	+1	-2.54092804	+1
O	-4.10076073	+1	-5.92213629	+1	-0.39625774	+1
O	-2.41891118	+1	-2.13420490	+1	4.28109948	+1
H	1.74632234	+1	-0.24955921	+1	1.31174211	+1
H	1.93649694	+1	-0.55379591	+1	-0.41921904	+1
H	2.10917702	+1	1.95474301	+1	-0.90228636	+1
H	1.89081218	+1	2.33444618	+1	0.82055431	+1
H	6.19533653	+1	2.11075169	+1	-1.35017634	+1
H	7.30190203	+1	4.30103373	+1	-1.72462123	+1
H	6.60492666	+1	6.30056537	+1	-0.41670663	+1
H	4.79541854	+1	6.11456876	+1	1.27592560	+1
H	3.67813120	+1	3.94523075	+1	1.67861132	+1
H	5.15533225	+1	-1.10249338	+1	1.67505836	+1
H	5.32092763	+1	-1.82293163	+1	4.04521989	+1
H	4.47813551	+1	-0.35120147	+1	5.86701284	+1
H	3.47462231	+1	1.85512119	+1	5.32410389	+1
H	3.30478442	+1	2.60785942	+1	2.97283622	+1
H	-0.71026596	+1	3.23371860	+1	-0.78540443	+1
H	-1.09518880	+1	4.22144707	+1	-3.01902623	+1
H	-1.19355665	+1	2.77145137	+1	-5.03634714	+1
H	-0.89998441	+1	0.30826539	+1	-4.82255085	+1
H	-0.50022841	+1	-0.71625764	+1	-2.61013693	+1
H	-2.95801277	+1	1.48811746	+1	0.38768359	+1
H	-4.03428906	+1	2.75342256	+1	2.20502054	+1
H	-2.73900478	+1	3.42319798	+1	4.22472714	+1
H	-0.34123913	+1	2.79996638	+1	4.43163050	+1
H	0.77759599	+1	1.51669707	+1	2.64693167	+1

Cartesian coordinates of atoms in the optimized geometries for κ^2 -2-M complexes

κ^2 -2-Pr

Pr	0.00232001	+1	-0.00181021	+1	-0.00305806	+1
O	2.51403098	+1	-0.01351798	+1	0.02974975	+1
P	1.94150535	+1	3.48162627	+1	-0.00273519	+1
C	3.59870074	+1	2.96990961	+1	0.74571044	+1
C	4.39918246	+1	2.06898327	+1	-0.17239789	+1
P	4.02180228	+1	0.25699057	+1	0.16345151	+1
C	4.97217492	+1	-0.70882723	+1	-1.06012437	+1
C	4.24798275	+1	-1.55835088	+1	-1.89590612	+1
C	4.93568987	+1	-2.31781698	+1	-2.85339171	+1
C	6.32455857	+1	-2.22291369	+1	-2.95452747	+1
C	7.04016019	+1	-1.37243648	+1	-2.09906973	+1
C	6.36319213	+1	-0.61148282	+1	-1.14336596	+1
C	4.61600024	+1	-0.15262409	+1	1.84173724	+1
C	3.84359286	+1	-1.05301498	+1	2.57519612	+1
C	4.25235869	+1	-1.40416332	+1	3.86967623	+1
C	5.42133945	+1	-0.86057546	+1	4.40492651	+1

C 6.19126210 +1 0.03864136 +1 3.65318480 +1
C 5.78896594 +1 0.39679743 +1 2.36431081 +1
O 0.90605957 +1 2.34460935 +1 0.07635539 +1
C 2.27651700 +1 4.00369334 +1 -1.72234623 +1
C 3.21076373 +1 5.01069979 +1 -1.98727124 +1
C 3.45052098 +1 5.38922963 +1 -3.30868612 +1
C 2.75619507 +1 4.76265432 +1 -4.35480813 +1
C 1.82518675 +1 3.76199963 +1 -4.07831303 +1
C 1.57710739 +1 3.37712469 +1 -2.75139167 +1
C 1.39612167 +1 4.91953927 +1 0.98754130 +1
C 0.21435261 +1 4.77345783 +1 1.71283762 +1
C -0.24348398 +1 5.84488075 +1 2.49363043 +1
C 0.47947297 +1 7.03806404 +1 2.53483195 +1
C 1.66378432 +1 7.17304095 +1 1.79591372 +1
C 2.12552622 +1 6.11061253 +1 1.01624496 +1
O -0.27573936 +1 0.33657012 +1 2.52030134 +1
N 0.25831097 +1 -0.73351860 +1 2.97693686 +1
O 0.67159974 +1 -1.45520249 +1 1.99762066 +1
O 0.23792259 +1 0.52703494 +1 -2.49887671 +1
N 0.69986236 +1 -0.58547078 +1 -2.94394620 +1
O 0.78654580 +1 -1.42937531 +1 -1.98592771 +1
O -2.22870894 +1 -1.22528061 +1 -0.11874367 +1
N -3.05574717 +1 -0.24345812 +1 -0.20260927 +1
O -2.39335630 +1 0.85685144 +1 -0.20130502 +1
O -4.23467988 +1 -0.34016399 +1 -0.27125807 +1
O 1.02134690 +1 -0.78741035 +1 -4.07146871 +1
O 0.38064988 +1 -1.01014688 +1 4.12664116 +1
H 4.18160759 +1 3.88944391 +1 0.97324691 +1
H 3.40443715 +1 2.52112299 +1 1.74794196 +1
H 4.22632817 +1 2.27647578 +1 -1.25495401 +1
H 5.48643766 +1 2.25108350 +1 -0.03423926 +1
H 3.15335035 +1 -1.65709002 +1 -1.82547669 +1
H 4.37815371 +1 -2.98294930 +1 -3.51521655 +1
H 6.85832359 +1 -2.81465668 +1 -3.69971115 +1
H 8.12421536 +1 -1.31114387 +1 -2.17980412 +1
H 6.93889970 +1 0.03440794 +1 -0.48013260 +1
H 2.91814042 +1 -1.49800388 +1 2.17484225 +1
H 3.64859839 +1 -2.10128265 +1 4.45469685 +1
H 5.73866389 +1 -1.13504849 +1 5.41217207 +1
H 7.10276857 +1 0.45619935 +1 4.07774684 +1
H 6.40144571 +1 1.09941262 +1 1.79960932 +1
H 3.75461960 +1 5.51742459 +1 -1.18701108 +1
H 4.17166587 +1 6.17371125 +1 -3.53221472 +1
H 2.94561179 +1 5.06278660 +1 -5.38652571 +1
H 1.28194959 +1 3.27173605 +1 -4.88885120 +1
H 0.83389569 +1 2.58563961 +1 -2.56858749 +1
H -0.36955668 +1 3.84377790 +1 1.68823258 +1
H -1.16718187 +1 5.74103936 +1 3.06480113 +1
H 0.12195149 +1 7.87157681 +1 3.14148613 +1
H 2.21841728 +1 8.10954226 +1 1.82892834 +1

H 3.04305526 +1 6.24001278 +1 0.43798724 +1

κ^2 -2-Lu

Lu -0.00337447 +1 0.00012409 +1 -0.00027728 +1
O 2.27070630 +1 -0.00781254 +1 0.00438508 +1
P 1.26137282 +1 3.46021339 +1 -0.00040482 +1
C 2.62643243 +1 3.00236110 +1 1.20936760 +1
C 3.79195999 +1 2.32272556 +1 0.52126874 +1
P 3.63260273 +1 0.44930380 +1 0.58236483 +1
C 5.00288022 +1 -0.19186737 +1 -0.44359600 +1
C 4.67840661 +1 -0.65528829 +1 -1.71850872 +1
C 5.69668643 +1 -1.15985895 +1 -2.53832573 +1
C 7.01346027 +1 -1.19797433 +1 -2.07319114 +1
C 7.32281768 +1 -0.73613531 +1 -0.78693799 +1
C 6.31239889 +1 -0.23373258 +1 0.03806944 +1
C 3.87450369 +1 -0.08978832 +1 2.30811809 +1
C 3.16620130 +1 -1.20832540 +1 2.74340871 +1
C 3.32697123 +1 -1.64363480 +1 4.06795067 +1
C 4.18561011 +1 -0.96175977 +1 4.92977655 +1
C 4.89376281 +1 0.16210117 +1 4.47781428 +1
C 4.73733822 +1 0.60367334 +1 3.16317213 +1
O 0.36540233 +1 2.22494356 +1 -0.27736523 +1
C 2.04716735 +1 4.06158820 +1 -1.53665191 +1
C 2.65099991 +1 5.32038568 +1 -1.59093601 +1
C 3.23464638 +1 5.74304037 +1 -2.78754271 +1
C 3.20119566 +1 4.91218833 +1 -3.91635614 +1
C 2.58849329 +1 3.65981963 +1 -3.84992104 +1
C 2.00276472 +1 3.22585483 +1 -2.65206081 +1
C 0.27475310 +1 4.80299309 +1 0.74631717 +1
C -1.11062783 +1 4.68366879 +1 0.63819198 +1
C -1.92523601 +1 5.68165600 +1 1.19233971 +1
C -1.34754706 +1 6.77424632 +1 1.84117996 +1
C 0.04699585 +1 6.87983806 +1 1.94318927 +1
C 0.86568570 +1 5.88952281 +1 1.39526268 +1
O -1.44352953 +1 0.04096398 +1 1.76960903 +1
N -0.67692033 +1 0.67126212 +1 2.57271443 +1
O 0.43952739 +1 0.98291940 +1 2.02081033 +1
O 0.60950060 +1 -1.89809102 +1 1.11928941 +1
N 0.07590239 +1 -2.73132171 +1 0.30203557 +1
O -0.49541229 +1 -2.12363768 +1 -0.66860315 +1
O 0.18110204 +1 0.55714118 +1 -2.20509144 +1
N -0.98312001 +1 1.09280728 +1 -2.27847201 +1
O -1.70972495 +1 0.82601795 +1 -1.26399680 +1
O -1.33787655 +1 1.75742396 +1 -3.20027957 +1
O 0.12052868 +1 -3.90990733 +1 0.42869802 +1
O -0.95742883 +1 0.95162058 +1 3.69315020 +1
H 2.97283186 +1 3.91370259 +1 1.74078705 +1
H 2.15826427 +1 2.38291054 +1 2.02521668 +1
H 3.92621152 +1 2.63510899 +1 -0.54122746 +1
H 4.74660593 +1 2.61961614 +1 1.00889039 +1
H 3.64597897 +1 -0.64362687 +1 -2.09114941 +1

H	5.45661244	+1	-1.52887817	+1	-3.53571266	+1
H	7.80478925	+1	-1.59410529	+1	-2.71137178	+1
H	8.35030190	+1	-0.77776878	+1	-0.42821829	+1
H	6.57033329	+1	0.10221764	+1	1.04414617	+1
H	2.47658719	+1	-1.76529241	+1	2.08895914	+1
H	2.76832042	+1	-2.51290641	+1	4.41886832	+1
H	4.30596800	+1	-1.29861989	+1	5.96033150	+1
H	5.55919250	+1	0.69086488	+1	5.15802182	+1
H	5.28892493	+1	1.48628282	+1	2.83880809	+1
H	2.67217361	+1	5.99018940	+1	-0.73012176	+1
H	3.70705369	+1	6.72206291	+1	-2.84940123	+1
H	3.65061692	+1	5.25060812	+1	-4.85093783	+1
H	2.54993573	+1	3.01793188	+1	-4.73101569	+1
H	1.51296826	+1	2.23768850	+1	-2.62805876	+1
H	-1.58148928	+1	3.82806358	+1	0.13395507	+1
H	-3.01027026	+1	5.59743090	+1	1.11668018	+1
H	-1.98217337	+1	7.54919393	+1	2.27370208	+1
H	0.48872380	+1	7.73414371	+1	2.45394437	+1
H	1.94684251	+1	5.98947702	+1	1.49294949	+1

Cartesian coordinates of atoms in the optimized geometries for Sn complexes

κ^1 -1-Sn

C	-0.24325199	+1	-0.16800367	+1	-0.54601058	+1
C	1.14251212	+1	-0.12124304	+1	-0.79334121	+1
C	1.82779871	+1	1.08666034	+1	-0.66210777	+1
C	-0.86472747	+1	1.02834982	+1	-0.19714889	+1
C	1.08749749	+1	2.22662038	+1	-0.29070696	+1
N	-0.22761077	+1	2.22341887	+1	-0.06546726	+1
P	-2.63707383	+1	1.24809428	+1	0.14094471	+1
C	-3.22591071	+1	-0.18292058	+1	1.08972333	+1
C	-4.37886369	+1	-0.85141092	+1	0.67304196	+1
C	-4.84459298	+1	-1.93497898	+1	1.42608121	+1
C	-4.16153048	+1	-2.33069317	+1	2.58077250	+1
C	-3.00855390	+1	-1.64759926	+1	2.98889067	+1
C	-2.53404755	+1	-0.56499461	+1	2.24350035	+1
C	-3.09742112	+1	2.77940139	+1	0.97966220	+1
C	-2.23580782	+1	3.45758947	+1	1.84305761	+1
C	-4.40270278	+1	3.23479155	+1	0.74244220	+1
C	-2.69458109	+1	4.61543560	+1	2.48472350	+1
C	-3.99317128	+1	5.07829074	+1	2.25983724	+1
C	-4.84754569	+1	4.38909836	+1	1.38773521	+1
P	1.89594338	+1	3.88317695	+1	0.12944550	+1
C	2.84291797	+1	4.23104749	+1	-1.40864988	+1
C	4.21359472	+1	4.43803521	+1	-1.26208501	+1
C	4.98691836	+1	4.71752569	+1	-2.39715675	+1
C	4.38173777	+1	4.78705014	+1	-3.65428961	+1
C	3.00265230	+1	4.57565340	+1	-3.78713025	+1

C	2.22647681 +1	4.29720526 +1	-2.65870808 +1
C	0.56570405 +1	5.14469785 +1	0.25107787 +1
C	0.61143517 +1	5.94850897 +1	1.39114828 +1
C	-0.32616507 +1	6.97825468 +1	1.53912837 +1
C	-1.29253328 +1	7.18935721 +1	0.55128180 +1
C	-1.33291602 +1	6.36992490 +1	-0.58318771 +1
C	-0.39650961 +1	5.34186426 +1	-0.73765399 +1
O	2.71593117 +1	3.72802301 +1	1.37593040 +1
O	-3.40202164 +1	1.22145257 +1	-1.28149851 +1
Sn	-2.80162030 +1	1.15662831 +1	-3.21750147 +1
H	-0.77960537 +1	-1.11817501 +1	-0.62590801 +1
H	1.67550920 +1	-1.03378595 +1	-1.07721834 +1
H	2.90898705 +1	1.13856275 +1	-0.83617660 +1
H	-4.92761718 +1	-0.55214047 +1	-0.22555742 +1
H	-5.74412813 +1	-2.47025499 +1	1.11444527 +1
H	-4.52963589 +1	-3.17603172 +1	3.16938007 +1
H	-2.48246268 +1	-1.96085375 +1	3.89353295 +1
H	-1.63438056 +1	-0.04588072 +1	2.58498598 +1
H	-1.20985616 +1	3.12725008 +1	2.03410883 +1
H	-5.08312732 +1	2.71414326 +1	0.06086976 +1
H	-2.02723561 +1	5.16103519 +1	3.15583305 +1
H	-4.34647341 +1	5.98101209 +1	2.76504861 +1
H	-5.86095680 +1	4.75640854 +1	1.21659915 +1
H	4.70193243 +1	4.38867031 +1	-0.28022079 +1
H	6.05977617 +1	4.88520625 +1	-2.29607191 +1
H	4.98394481 +1	5.00932785 +1	-4.53728392 +1
H	2.53822998 +1	4.63571688 +1	-4.77053676 +1
H	1.15274128 +1	4.14196698 +1	-2.78095399 +1
H	1.36889895 +1	5.79606358 +1	2.17203207 +1
H	-0.29029765 +1	7.62417087 +1	2.41632915 +1
H	-2.01369820 +1	8.00058117 +1	0.66064292 +1
H	-2.08569540 +1	6.54275631 +1	-1.35043855 +1
H	-0.43739871 +1	4.71727684 +1	-1.63143739 +1
Cl	-4.81438442 +1	1.33110357 +1	-4.25352823 +1
Cl	-1.74312141 +1	-0.87756822 +1	-3.32574244 +1
Cl	-1.33854539 +1	2.89703860 +1	-3.52920723 +1

κ^2 -1-Sn

O	0.00134853 +1	0.00042081 +1	-0.00001080 +1
Sn	2.18432391 +1	-0.00008423 +1	-0.00001510 +1
C	1.50225854 +1	4.98241113 +1	0.00003137 +1
C	0.11539742 +1	5.18366931 +1	-0.06447528 +1
C	-0.75142440 +1	4.08164538 +1	-0.11012861 +1
C	1.96172610 +1	3.66374043 +1	0.01281870 +1
C	-0.17709181 +1	2.80888836 +1	-0.08541156 +1
N	1.15198102 +1	2.58544946 +1	-0.02692963 +1
P	3.72273116 +1	3.06562545 +1	0.04614835 +1
C	4.51653425 +1	3.78531097 +1	-1.41939273 +1
C	4.79439281 +1	2.93055924 +1	-2.48676855 +1
C	5.39956485 +1	3.45404432 +1	-3.63789034 +1
C	5.71445334 +1	4.81222146 +1	-3.70603052 +1

C 5.42782239 +1 5.66056188 +1 -2.62532123 +1
C 4.82716231 +1 5.14897195 +1 -1.47477351 +1
C 4.46002993 +1 3.70515108 +1 1.57578247 +1
C 3.73618049 +1 3.59057987 +1 2.76671708 +1
C 5.76271247 +1 4.21084658 +1 1.56481622 +1
C 4.31845539 +1 4.02297591 +1 3.96222149 +1
C 5.61557754 +1 4.54843575 +1 3.96086767 +1
C 6.33674088 +1 4.64149313 +1 2.76517150 +1
P -1.04262796 +1 1.16227276 +1 -0.08765642 +1
C -2.11777845 +1 1.16826743 +1 1.37545465 +1
C -1.73847154 +1 0.37242341 +1 2.45700739 +1
C -2.54085508 +1 0.35908497 +1 3.60653277 +1
C -3.69979525 +1 1.13527560 +1 3.65911544 +1
C -4.06838382 +1 1.93230240 +1 2.56426624 +1
C -3.27739640 +1 1.95122730 +1 1.41522471 +1
C -2.01481552 +1 1.08958711 +1 -1.61821226 +1
C -3.31123363 +1 0.56828319 +1 -1.59886774 +1
C -4.02154392 +1 0.46304939 +1 -2.79898211 +1
C -3.42867055 +1 0.86130174 +1 -4.00243350 +1
C -2.12287409 +1 1.36473946 +1 -4.01177946 +1
C -1.40538132 +1 1.47425273 +1 -2.81659509 +1
O 3.76642167 +1 1.50299653 +1 -0.01657784 +1
H 2.18153835 +1 5.83785371 +1 0.03775262 +1
H -0.29021903 +1 6.20039155 +1 -0.07933353 +1
H -1.83252207 +1 4.23343098 +1 -0.16295933 +1
H 4.55321899 +1 1.85874604 +1 -2.45076291 +1
H 5.62502514 +1 2.79519511 +1 -4.47929199 +1
H 6.18816080 +1 5.21930365 +1 -4.60323917 +1
H 5.68075947 +1 6.71999604 +1 -2.68818218 +1
H 4.62146202 +1 5.82498470 +1 -0.64242046 +1
H 2.72985655 +1 3.16006968 +1 2.79898488 +1
H 6.35576666 +1 4.27500626 +1 0.64725063 +1
H 3.76639389 +1 3.93763060 +1 4.89987031 +1
H 6.07009515 +1 4.88001313 +1 4.89816349 +1
H 7.35294825 +1 5.03998480 +1 2.77202183 +1
H -0.82923744 +1 -0.24476077 +1 2.43339134 +1
H -2.25662423 +1 -0.26181399 +1 4.45891253 +1
H -4.32601412 +1 1.12281875 +1 4.55509816 +1
H -4.97777738 +1 2.53294226 +1 2.61507201 +1
H -3.58775067 +1 2.57136371 +1 0.57190321 +1
H -3.79018293 +1 0.23022530 +1 -0.67471701 +1
H -5.03551848 +1 0.05885582 +1 -2.79931773 +1
H -3.98466286 +1 0.77138293 +1 -4.93936487 +1
H -1.65928512 +1 1.65882143 +1 -4.95510346 +1
H -0.37663223 +1 1.84755093 +1 -2.85464668 +1
Cl 3.04074072 +1 -2.13817660 +1 0.02123011 +1
Cl 2.03802620 +1 0.54663910 +1 -2.28460674 +1
Cl 1.89684648 +1 0.53544796 +1 2.27364672 +1