



Supporting Information

for

Conformational analysis of difluoromethylornithine: factors influencing its gas-phase and bioactive conformations

Matheus P. Freitas

Beilstein J. Org. Chem. **2026**, 22, 237–243. doi:10.3762/bjoc.22.17

NBO outcomes, standard orientations and Gibbs free energies for the studied compounds

Table of contents

Page S2: **Figure S1.** Representative conformations of (S)-DFMO with their relative electronic energies (in kcal mol⁻¹), standard Gibbs free energies (in parenthesis), and Boltzmann populations calculated at the DLPNO-CCSD(T)/CBS level of theory in implicit water (SMD). Color labels: H = white, C = grey, N = blue, O = red, F = electric blue.

Page S3: **Table S1.** Antiperiplanar donor–acceptor interactions obtained from NBO calculations at the B3LYP-GD3BJ/6-311++G(d,p) level (kcal mol⁻¹).

Pages S4–S57: Standard coordinates of the optimized geometries of DFMO conformers obtained at the B3LYP-GD3BJ/6-311++G(d,p) level, absolute energies computed at the DLPNO-CCSD(T)/CBS level (hartrees), and pairwise steric exchange energies $dE(i,j)$ (kcal mol⁻¹) with the corresponding pre-NLMO overlaps $S(i,j)$ for disjoint (non-overlapping) NLMO pairs i,j .

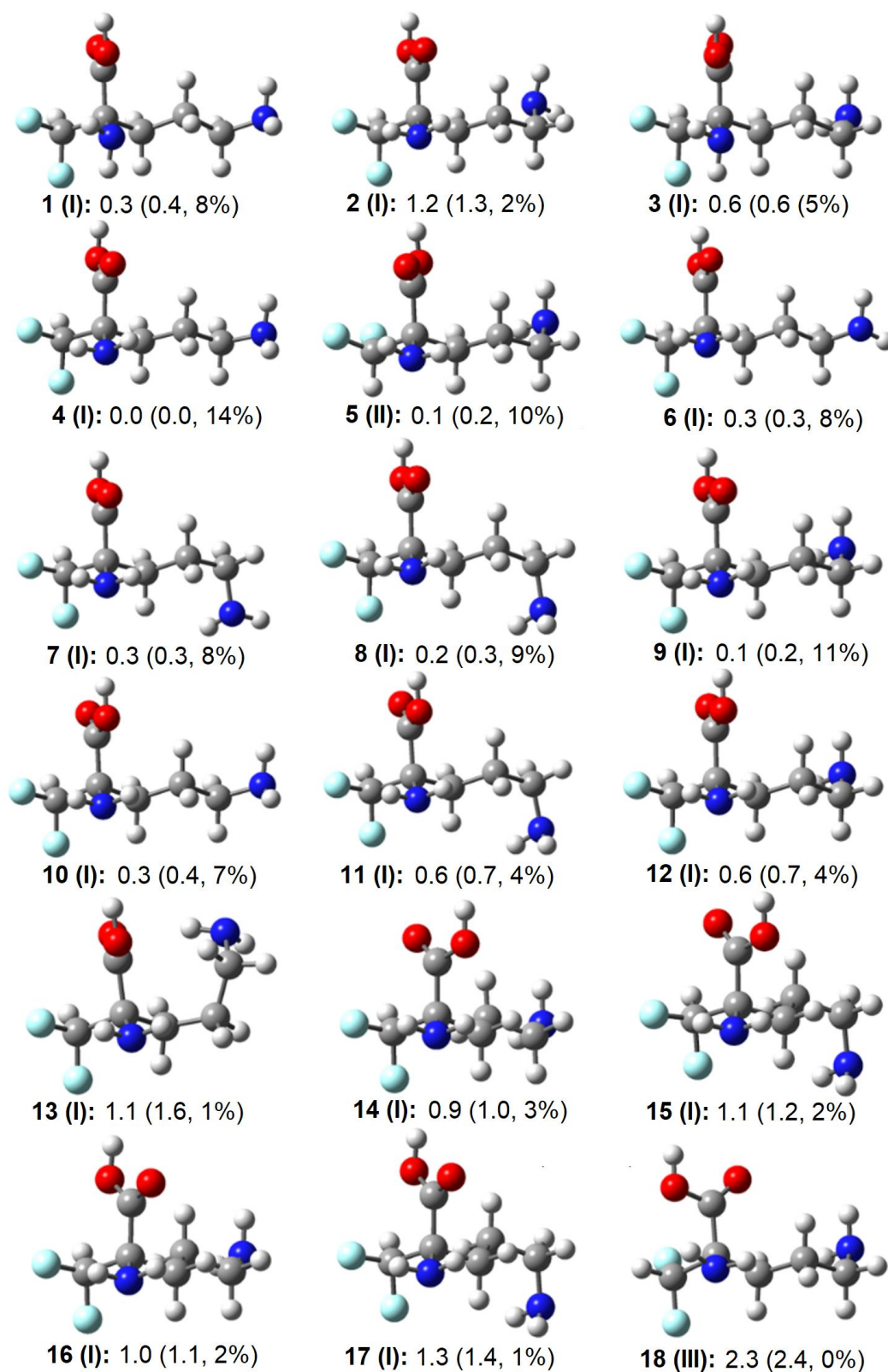


Figure S1. Representative conformations of (S)-DFMO with their relative electronic energies (in kcal mol⁻¹), standard Gibbs free energies (in parenthesis), and Boltzmann populations calculated at the DLPNO-CCSD(T)/CBS level of theory in implicit water (SMD). Color labels: H = white, C = grey, N = blue, O = red, F = electric blue.

Table S1. Antiperiplanar donor–acceptor interactions obtained from NBO calculations at the B3LYP-GD3BJ/6-311++G(d,p) level (kcal mol⁻¹).

Conf.	$\sigma_{CH} \rightarrow \sigma_{CN}^*$	$\sigma_{CH} \rightarrow \sigma_{CC(OOH)}^*$	$\sigma_{CH} \rightarrow \sigma_{CC3H6NH2}^*$	$\sigma_{CF} \rightarrow \sigma_{CN}^*$	$\sigma_{CF} \rightarrow \sigma_{CC(OOH)}^*$	$\sigma_{CF} \rightarrow \sigma_{CC3H6NH2}^*$	$\sigma_{CN} \rightarrow \sigma_{CH}^*$	$\sigma_{CN} \rightarrow \sigma_{CF}^*$	$\sigma_{CC(OOH)} \rightarrow \sigma_{CH}^*$	$\sigma_{CC(OOH)} \rightarrow \sigma_{CF}^*$	$\sigma_{CC3H6NH2} \rightarrow \sigma_{CH}^*$	$\sigma_{CC3H6NH2} \rightarrow \sigma_{CF}^*$	Sum
1	3.50				1.01	1.13	0.83			2.58		2.40	11.45
2	3.25				1.08	1.11	0.99			2.34		2.57	11.34
3	3.48				1.00	1.14	0.83			2.60		2.40	11.45
4	3.23				1.09	1.23	0.99			2.36		2.52	11.42
5		2.59		1.18		1.18		2.12	1.48			2.33	10.88
6	3.19				1.07	1.23	0.99			2.38		2.50	11.36
7	3.16				1.06	1.23	0.99			2.38		2.46	11.28
8	3.22				1.08	1.24	0.99			2.37		2.53	11.43
9	3.21				1.08	1.24	0.99			2.37		2.52	11.41
10	3.18				0.95	1.23	0.93			2.72		2.42	11.43
11	3.17				0.95	1.24	0.93			2.72		2.42	11.43
12	3.17				0.95	1.24	0.93			2.73		2.42	11.44
13	3.13				0.91	1.21	0.93			2.87		2.41	11.46
14	3.08				0.96	1.19	0.95			2.37		2.21	10.76
15	3.07				0.96	1.20	0.95			2.36		2.19	10.73
16	3.11				1.12	1.20	1.05			2.05		2.38	10.91
17	3.10				1.12	1.21	1.05			2.06		2.38	10.92
18			2.38	1.40	0.94			1.77		2.27	1.28		10.04

Conformer 1

Standard orientation:

Center Atomic Atomic Coordinates (Angstroms)

Number Number Type X Y Z

1	6	0	-0.660461	-0.106435	0.193952
2	6	0	-0.748975	1.353889	-0.262234
3	8	0	-0.696842	1.680100	-1.422144
4	8	0	-0.911550	2.228845	0.744298
5	1	0	-0.983494	3.110808	0.347600
6	7	0	-0.706008	-0.231543	1.640495
7	1	0	-0.778773	-1.209873	1.899401
8	1	0	-1.498175	0.262616	2.034697
9	6	0	-1.845514	-0.812519	-0.502472
10	1	0	-1.838234	-0.721327	-1.588418
11	9	0	-1.837393	-2.144818	-0.174492
12	9	0	-3.031395	-0.298447	-0.035889
13	6	0	0.655137	-0.711580	-0.346922
14	1	0	0.617020	-0.712169	-1.439880
15	1	0	0.685346	-1.757128	-0.025135
16	6	0	1.910847	0.018490	0.131303
17	1	0	1.886368	0.104368	1.221120
18	1	0	1.922439	1.038566	-0.270678
19	6	0	3.195649	-0.698083	-0.305072
20	1	0	3.195537	-1.717945	0.095019
21	1	0	3.208705	-0.798242	-1.395758
22	7	0	4.449601	-0.061211	0.098303
23	1	0	4.524441	0.872608	-0.292627
24	1	0	4.499800	0.032247	1.107933

E [DLPNO-CCSD(T)/CBS] = -694.8702753

Pairwise steric exchange energies $dE(i,j)$ (kcal/mol) and associated pre-NLMO overlaps $S(i,j)$ for disjoint (no common atoms) interactions between NLMOs i,j :

Threshold for printing: 0.50 kcal/mol

NLMO (i) NLMO (j) $S(i,j)$ kcal/mol

```
=====
within unit 1
13. LP ( 1) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.0400 0.60
13. LP ( 1) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.0414 0.71
14. LP ( 2) O 3 15. LP ( 1) O 4 -0.0178 -0.62
14. LP ( 2) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.1766 12.36
14. LP ( 2) O 3 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.1110 0.57
14. LP ( 2) O 3 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.1198 0.99
14. LP ( 2) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.2041 13.07
14. LP ( 2) O 3 32. BD ( 1) O 4- H 5 -0.1348 2.28
14. LP ( 2) O 3 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0840 0.95
14. LP ( 2) O 3 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0931 1.06
15. LP ( 1) O 4 17. LP ( 1) N 6 0.0553 0.57
15. LP ( 1) O 4 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.0948 2.91
15. LP ( 1) O 4 26. BD ( 1) C 1- N 6 0.0715 0.61
15. LP ( 1) O 4 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.1308 4.65
15. LP ( 1) O 4 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.0880 1.55
16. LP ( 2) O 4 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.0712 0.85
16. LP ( 2) O 4 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0679 0.80
16. LP ( 2) O 4 30. BD ( 2) C 2- O 3 -0.1963 14.44
17. LP ( 1) N 6 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.0647 0.69
17. LP ( 1) N 6 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.2169 12.27
17. LP ( 1) N 6 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.1134 3.05
17. LP ( 1) N 6 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0977 0.58
17. LP ( 1) N 6 41. BD ( 1) C 16- H 17 0.1124 2.02
18. LP ( 1) F 11 23. LP ( 3) F 12 -0.0607 -0.63
19. LP ( 2) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1542 8.33
19. LP ( 2) F 11 33. BD ( 1) N 6- H 7 -0.0617 0.63
19. LP ( 2) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1116 7.03
20. LP ( 3) F 11 21. LP ( 1) F 12 -0.0594 -0.60
20. LP ( 3) F 11 23. LP ( 3) F 12 0.0576 1.76
20. LP ( 3) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0734 1.88
20. LP ( 3) F 11 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0785 0.81
20. LP ( 3) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0547 1.42
20. LP ( 3) F 11 37. BD ( 1) C 9- F 12 -0.1435 6.99
20. LP ( 3) F 11 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0581 0.78
22. LP ( 2) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1570 8.65
22. LP ( 2) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1106 6.80
23. LP ( 3) F 12 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.0815 0.97
23. LP ( 3) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0734 1.82
23. LP ( 3) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0606 1.71
23. LP ( 3) F 12 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1439 6.95
24. LP ( 1) N 22 41. BD ( 1) C 16- H 17 -0.0894 0.62
24. LP ( 1) N 22 42. BD ( 1) C 16- H 18 -0.0917 0.68
24. LP ( 1) N 22 43. BD ( 1) C 16- C 19 -0.2232 12.04
24. LP ( 1) N 22 44. BD ( 1) C 19- H 20 0.0666 1.66
24. LP ( 1) N 22 45. BD ( 1) C 19- H 21 0.0632 1.49
25. BD ( 1) C 1- C 2 32. BD ( 1) O 4- H 5 -0.1003 4.23
25. BD ( 1) C 1- C 2 33. BD ( 1) N 6- H 7 -0.1242 5.34
25. BD ( 1) C 1- C 2 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.1029 2.19
25. BD ( 1) C 1- C 2 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0840 1.19
25. BD ( 1) C 1- C 2 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1110 3.35
25. BD ( 1) C 1- C 2 37. BD ( 1) C 9- F 12 0.0594 0.60
25. BD ( 1) C 1- C 2 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0718 0.76
25. BD ( 1) C 1- C 2 39. BD ( 1) C 13- H 15 -0.1317 4.85
25. BD ( 1) C 1- C 2 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0888 1.61
25. BD ( 1) C 1- C 2 42. BD ( 1) C 16- H 18 0.0638 0.56
26. BD ( 1) C 1- N 6 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.1074 2.02
26. BD ( 1) C 1- N 6 31. BD ( 1) C 2- O 4 0.0892 1.72
26. BD ( 1) C 1- N 6 35. BD ( 1) C 9- H 10 -0.1034 2.92
26. BD ( 1) C 1- N 6 37. BD ( 1) C 9- F 12 0.0531 0.52
26. BD ( 1) C 1- N 6 38. BD ( 1) C 13- H 14 -0.1334 4.47
26. BD ( 1) C 1- N 6 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0826 1.33
26. BD ( 1) C 1- N 6 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0556 0.64
27. BD ( 1) C 1- C 9 30. BD ( 2) C 2- O 3 0.1277 3.86
27. BD ( 1) C 1- C 9 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.0613 0.94
27. BD ( 1) C 1- C 9 33. BD ( 1) N 6- H 7 0.0773 1.37
27. BD ( 1) C 1- C 9 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.1039 2.23
27. BD ( 1) C 1- C 9 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0778 1.37
27. BD ( 1) C 1- C 9 40. BD ( 1) C 13- C 16 -0.1469 4.74
```

28. BD (1) C 1- C 13 29. BD (1) C 2- O 3 0.0541 0.80
 28. BD (1) C 1- C 13 30. BD (2) C 2- O 3 -0.1148 3.08
 28. BD (1) C 1- C 13 31. BD (1) C 2- O 4 -0.0650 0.91
 28. BD (1) C 1- C 13 33. BD (1) N 6- H 7 0.0700 1.25
 28. BD (1) C 1- C 13 34. BD (1) N 6- H 8 -0.1279 5.25
 28. BD (1) C 1- C 13 35. BD (1) C 9- H 10 0.0725 1.10
 28. BD (1) C 1- C 13 36. BD (1) C 9- F 11 0.0531 0.62
 28. BD (1) C 1- C 13 37. BD (1) C 9- F 12 -0.1136 3.35
 28. BD (1) C 1- C 13 41. BD (1) C 16- H 17 0.0849 1.63
 28. BD (1) C 1- C 13 42. BD (1) C 16- H 18 0.0643 0.91
 28. BD (1) C 1- C 13 43. BD (1) C 16- C 19 -0.1446 4.22
 29. BD (1) C 2- O 3 32. BD (1) O 4- H 5 0.0819 2.09
 30. BD (2) C 2- O 3 35. BD (1) C 9- H 10 0.0586 0.59
 30. BD (2) C 2- O 3 42. BD (1) C 16- H 18 -0.0812 1.08
 33. BD (1) N 6- H 7 39. BD (1) C 13- H 15 0.0756 0.64
 35. BD (1) C 9- H 10 38. BD (1) C 13- H 14 0.0792 0.96
 38. BD (1) C 13- H 14 41. BD (1) C 16- H 17 -0.1264 5.38
 38. BD (1) C 13- H 14 42. BD (1) C 16- H 18 0.0871 1.49
 38. BD (1) C 13- H 14 43. BD (1) C 16- C 19 0.0673 0.97
 38. BD (1) C 13- H 14 45. BD (1) C 19- H 21 0.0653 0.62
 39. BD (1) C 13- H 15 41. BD (1) C 16- H 17 0.0667 0.68
 39. BD (1) C 13- H 15 42. BD (1) C 16- H 18 -0.1245 5.30
 39. BD (1) C 13- H 15 43. BD (1) C 16- C 19 0.0902 1.81
 39. BD (1) C 13- H 15 44. BD (1) C 19- H 20 0.0760 0.85
 40. BD (1) C 13- C 16 44. BD (1) C 19- H 20 0.0749 1.21
 40. BD (1) C 13- C 16 45. BD (1) C 19- H 21 0.0751 1.25
 40. BD (1) C 13- C 16 46. BD (1) C 19- N 22 -0.1287 3.41
 41. BD (1) C 16- H 17 44. BD (1) C 19- H 20 0.0837 1.28
 41. BD (1) C 16- H 17 45. BD (1) C 19- H 21 -0.1149 4.85
 41. BD (1) C 16- H 17 46. BD (1) C 19- N 22 0.0649 0.85
 42. BD (1) C 16- H 18 44. BD (1) C 19- H 20 -0.1142 4.80
 42. BD (1) C 16- H 18 45. BD (1) C 19- H 21 0.0792 1.15
 42. BD (1) C 16- H 18 46. BD (1) C 19- N 22 0.0657 0.88
 43. BD (1) C 16- C 19 47. BD (1) N 22- H 23 0.0533 0.69
 43. BD (1) C 16- C 19 48. BD (1) N 22- H 24 0.0565 0.79
 44. BD (1) C 19- H 20 47. BD (1) N 22- H 23 -0.1096 5.16
 44. BD (1) C 19- H 20 48. BD (1) N 22- H 24 0.0751 1.31
 45. BD (1) C 19- H 21 47. BD (1) N 22- H 23 0.0789 1.47
 45. BD (1) C 19- H 21 48. BD (1) N 22- H 24 -0.1092 5.16
 sum within unit 1: 295.40

 Total disjoint NLMO steric exchange energy from pairwise sum: 295.40

Conformer 2

Standard orientation:

Center Atomic Atomic Coordinates (Angstroms)

Number Number Type X Y Z

1	6	0	-0.648903	-0.099504	0.294348
2	6	0	-0.644215	1.410053	-0.033250
3	8	0	-0.669777	2.287472	0.789009
4	8	0	-0.558544	1.651085	-1.362558
5	1	0	-0.543066	2.612486	-1.485593
6	7	0	-1.004387	-0.358886	1.677385
7	1	0	-1.972939	-0.104446	1.844681
8	1	0	-0.445309	0.224700	2.289537
9	6	0	-1.676691	-0.779188	-0.621494
10	1	0	-1.489824	-0.595696	-1.678345
11	9	0	-1.704907	-2.126493	-0.415280
12	9	0	-2.938544	-0.303534	-0.326856
13	6	0	0.750631	-0.672101	-0.030819
14	1	0	0.974224	-0.514414	-1.087727
15	1	0	0.695459	-1.748257	0.147001
16	6	0	1.881043	-0.076060	0.809935
17	1	0	1.737092	-0.325687	1.865466
18	1	0	1.877236	1.019078	0.743446
19	6	0	3.255012	-0.589670	0.373178
20	1	0	4.005378	-0.265988	1.109419
21	1	0	3.250369	-1.684239	0.385127
22	7	0	3.560911	-0.159406	-0.996869
23	1	0	4.386649	-0.627429	-1.353099
24	1	0	3.745422	0.838542	-1.027312

E [DLPNO-CCSD(T)/CBS] = -694.8698403

Pairwise steric exchange energies $dE(i,j)$ (kcal/mol) and associated pre-NLMO overlaps $S(i,j)$ for disjoint (no common atoms) interactions between NLMOs i,j :

Threshold for printing: 0.50 kcal/mol

NLMO (i) NLMO (j) $S(i,j)$ kcal/mol

```
=====
within unit 1
13. LP ( 1) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.0511 0.78
13. LP ( 1) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.0449 0.80
14. LP ( 2) O 3 15. LP ( 1) O 4 0.0160 -0.55
14. LP ( 2) O 3 17. LP ( 1) N 6 0.0636 0.57
14. LP ( 2) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.1658 11.62
14. LP ( 2) O 3 26. BD ( 1) C 1- N 6 -0.1266 1.55
14. LP ( 2) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 0.2081 13.40
14. LP ( 2) O 3 32. BD ( 1) O 4- H 5 0.1369 2.31
14. LP ( 2) O 3 34. BD ( 1) N 6- H 8 -0.0913 1.22
15. LP ( 1) O 4 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.1095 3.38
15. LP ( 1) O 4 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.1267 4.50
15. LP ( 1) O 4 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0953 1.73
15. LP ( 1) O 4 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0669 0.71
16. LP ( 2) O 4 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.0665 0.86
16. LP ( 2) O 4 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0920 1.54
16. LP ( 2) O 4 30. BD ( 2) C 2- O 3 0.1956 14.02
16. LP ( 2) O 4 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0610 0.65
17. LP ( 1) N 6 19. LP ( 2) F 11 -0.0542 0.59
17. LP ( 1) N 6 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.1972 11.01
17. LP ( 1) N 6 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0621 0.70
17. LP ( 1) N 6 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.1099 2.95
17. LP ( 1) N 6 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.0810 0.76
17. LP ( 1) N 6 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.1136 1.05
18. LP ( 1) F 11 23. LP ( 3) F 12 -0.0598 -0.62
19. LP ( 2) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1495 7.78
19. LP ( 2) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1171 7.65
20. LP ( 3) F 11 21. LP ( 1) F 12 -0.0605 -0.64
20. LP ( 3) F 11 23. LP ( 3) F 12 0.0574 1.74
20. LP ( 3) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0714 1.81
20. LP ( 3) F 11 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0803 0.80
20. LP ( 3) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0528 1.38
20. LP ( 3) F 11 37. BD ( 1) C 9- F 12 -0.1452 7.20
20. LP ( 3) F 11 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0651 0.96
22. LP ( 2) F 12 26. BD ( 1) C 1- N 6 -0.0798 0.51
22. LP ( 2) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1544 8.30
22. LP ( 2) F 12 33. BD ( 1) N 6- H 7 -0.0758 1.07
22. LP ( 2) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1101 6.63
23. LP ( 3) F 12 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.0814 0.97
23. LP ( 3) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0699 1.67
23. LP ( 3) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0623 1.83
23. LP ( 3) F 12 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1409 6.69
24. LP ( 1) N 22 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.1132 2.12
24. LP ( 1) N 22 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0891 0.50
24. LP ( 1) N 22 43. BD ( 1) C 16- C 19 0.1132 2.99
24. LP ( 1) N 22 44. BD ( 1) C 19- H 20 -0.1800 11.28
24. LP ( 1) N 22 45. BD ( 1) C 19- H 21 0.0616 0.78
25. BD ( 1) C 1- C 2 32. BD ( 1) O 4- H 5 -0.0932 3.83
25. BD ( 1) C 1- C 2 33. BD ( 1) N 6- H 7 0.0567 0.50
25. BD ( 1) C 1- C 2 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.0879 1.57
25. BD ( 1) C 1- C 2 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0893 1.29
25. BD ( 1) C 1- C 2 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1141 3.38
25. BD ( 1) C 1- C 2 37. BD ( 1) C 9- F 12 0.0566 0.51
25. BD ( 1) C 1- C 2 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0930 1.27
25. BD ( 1) C 1- C 2 39. BD ( 1) C 13- H 15 -0.1313 4.86
25. BD ( 1) C 1- C 2 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0794 1.19
25. BD ( 1) C 1- C 2 42. BD ( 1) C 16- H 18 0.0685 0.59
26. BD ( 1) C 1- N 6 29. BD ( 1) C 2- O 3 0.0652 1.00
26. BD ( 1) C 1- N 6 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.1086 2.48
26. BD ( 1) C 1- N 6 35. BD ( 1) C 9- H 10 -0.1131 3.46
26. BD ( 1) C 1- N 6 37. BD ( 1) C 9- F 12 0.0569 0.66
26. BD ( 1) C 1- N 6 38. BD ( 1) C 13- H 14 -0.1347 4.59
26. BD ( 1) C 1- N 6 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0690 0.92
26. BD ( 1) C 1- N 6 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0645 0.93
27. BD ( 1) C 1- C 9 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.0799 1.17
27. BD ( 1) C 1- C 9 30. BD ( 2) C 2- O 3 -0.0956 2.06
27. BD ( 1) C 1- C 9 31. BD ( 1) C 2- O 4 0.0715 0.92
27. BD ( 1) C 1- C 9 33. BD ( 1) N 6- H 7 0.1005 2.48
27. BD ( 1) C 1- C 9 34. BD ( 1) N 6- H 8 -0.1380 6.10
```

27. BD (1) C 1- C 9 38. BD (1) C 13- H 14 0.0895 1.70
 27. BD (1) C 1- C 9 39. BD (1) C 13- H 15 0.0918 1.95
 27. BD (1) C 1- C 9 40. BD (1) C 13- C 16 -0.1509 4.80
 28. BD (1) C 1- C 13 30. BD (2) C 2- O 3 0.1283 3.66
 28. BD (1) C 1- C 13 33. BD (1) N 6- H 7 -0.1297 5.38
 28. BD (1) C 1- C 13 34. BD (1) N 6- H 8 0.0663 1.02
 28. BD (1) C 1- C 13 35. BD (1) C 9- H 10 0.0666 0.98
 28. BD (1) C 1- C 13 36. BD (1) C 9- F 11 0.0501 0.56
 28. BD (1) C 1- C 13 37. BD (1) C 9- F 12 -0.1163 3.54
 28. BD (1) C 1- C 13 41. BD (1) C 16- H 17 0.0603 0.77
 28. BD (1) C 1- C 13 42. BD (1) C 16- H 18 0.0889 1.72
 28. BD (1) C 1- C 13 43. BD (1) C 16- C 19 -0.1436 4.17
 29. BD (1) C 2- O 3 32. BD (1) O 4- H 5 0.0798 1.91
 30. BD (2) C 2- O 3 42. BD (1) C 16- H 18 0.0841 1.25
 34. BD (1) N 6- H 8 41. BD (1) C 16- H 17 0.0635 0.97
 35. BD (1) C 9- H 10 38. BD (1) C 13- H 14 0.0769 0.81
 38. BD (1) C 13- H 14 41. BD (1) C 16- H 17 -0.1248 5.32
 38. BD (1) C 13- H 14 42. BD (1) C 16- H 18 0.0657 0.64
 38. BD (1) C 13- H 14 43. BD (1) C 16- C 19 0.0939 1.99
 39. BD (1) C 13- H 15 41. BD (1) C 16- H 17 0.0921 1.69
 39. BD (1) C 13- H 15 42. BD (1) C 16- H 18 -0.1234 5.27
 39. BD (1) C 13- H 15 43. BD (1) C 16- C 19 0.0664 1.01
 39. BD (1) C 13- H 15 45. BD (1) C 19- H 21 0.0728 0.72
 40. BD (1) C 13- C 16 44. BD (1) C 19- H 20 -0.1339 4.70
 40. BD (1) C 13- C 16 45. BD (1) C 19- H 21 0.0845 1.56
 40. BD (1) C 13- C 16 46. BD (1) C 19- N 22 0.0545 0.61
 41. BD (1) C 16- H 17 44. BD (1) C 19- H 20 0.0933 2.12
 41. BD (1) C 16- H 17 45. BD (1) C 19- H 21 0.0622 0.71
 41. BD (1) C 16- H 17 46. BD (1) C 19- N 22 -0.1314 4.52
 42. BD (1) C 16- H 18 44. BD (1) C 19- H 20 0.0707 1.02
 42. BD (1) C 16- H 18 45. BD (1) C 19- H 21 -0.1155 4.86
 42. BD (1) C 16- H 18 46. BD (1) C 19- N 22 0.0767 1.21
 43. BD (1) C 16- C 19 47. BD (1) N 22- H 23 -0.1210 4.52
 43. BD (1) C 16- C 19 48. BD (1) N 22- H 24 0.0537 0.75
 44. BD (1) C 19- H 20 48. BD (1) N 22- H 24 0.0760 1.34
 45. BD (1) C 19- H 21 47. BD (1) N 22- H 23 0.0958 2.58
 45. BD (1) C 19- H 21 48. BD (1) N 22- H 24 -0.1065 4.98
 sum within unit 1: 296.31

Total disjoint NLMO steric exchange energy from pairwise sum: 296.31

Conformer 3

Standard orientation:

Center Atomic Atomic Coordinates (Angstroms)

Number Number Type X Y Z

1	6	0	-0.621429	-0.083360	0.260911
2	6	0	-0.750277	1.334207	-0.307613
3	8	0	-0.499750	1.602034	-1.456710
4	8	0	-1.188631	2.239054	0.582997
5	1	0	-1.261486	3.086816	0.117838
6	7	0	-0.930760	-0.134713	1.678910
7	1	0	-1.826325	0.293439	1.883302
8	1	0	-0.958811	-1.099661	1.991160
9	6	0	-1.585220	-0.940294	-0.590793
10	1	0	-1.379385	-0.905512	-1.660468
11	9	0	-1.521715	-2.246347	-0.174744
12	9	0	-2.878904	-0.524067	-0.388686
13	6	0	0.820924	-0.580878	0.013942
14	1	0	0.985264	-0.629944	-1.065599
15	1	0	0.882577	-1.603621	0.399596
16	6	0	1.891855	0.287865	0.673490
17	1	0	1.662662	0.390645	1.737596
18	1	0	1.865986	1.296707	0.243661
19	6	0	3.309869	-0.280208	0.509290
20	1	0	4.003900	0.340201	1.084206
21	1	0	3.355562	-1.280592	0.953556
22	7	0	3.830054	-0.378528	-0.855702
23	1	0	3.297250	-1.034834	-1.415346
24	1	0	3.796034	0.520066	-1.326747

E [DLPNO-CCSD(T)/CBS] = -694.8698046

Pairwise steric exchange energies $dE(i,j)$ (kcal/mol) and associated pre-NLMO overlaps $S(i,j)$ for disjoint (no common atoms) interactions between NLMOs i,j :

Threshold for printing: 0.50 kcal/mol

NLMO (i) NLMO (j) $S(i,j)$ kcal/mol

```
=====
within unit 1
13. LP (1) O 3 25. BD (1) C 1- C 2 -0.0399 0.60
13. LP (1) O 3 31. BD (1) C 2- O 4 -0.0413 0.71
14. LP (2) O 3 15. LP (1) O 4 -0.0177 -0.62
14. LP (2) O 3 25. BD (1) C 1- C 2 0.1765 12.35
14. LP (2) O 3 27. BD (1) C 1- C 9 0.1097 0.54
14. LP (2) O 3 28. BD (1) C 1- C 13 0.1219 1.03
14. LP (2) O 3 31. BD (1) C 2- O 4 -0.2041 13.06
14. LP (2) O 3 32. BD (1) O 4- H 5 -0.1346 2.27
14. LP (2) O 3 35. BD (1) C 9- H 10 0.0838 0.94
14. LP (2) O 3 38. BD (1) C 13- H 14 0.0960 1.13
15. LP (1) O 4 17. LP (1) N 6 0.0548 0.56
15. LP (1) O 4 25. BD (1) C 1- C 2 0.0947 2.92
15. LP (1) O 4 26. BD (1) C 1- N 6 0.0714 0.60
15. LP (1) O 4 29. BD (1) C 2- O 3 -0.1311 4.65
15. LP (1) O 4 33. BD (1) N 6- H 7 0.0879 1.55
16. LP (2) O 4 27. BD (1) C 1- C 9 -0.0721 0.87
16. LP (2) O 4 28. BD (1) C 1- C 13 0.0670 0.78
16. LP (2) O 4 30. BD (2) C 2- O 3 -0.1962 14.43
17. LP (1) N 6 25. BD (1) C 1- C 2 0.0654 0.72
17. LP (1) N 6 27. BD (1) C 1- C 9 -0.2185 12.41
17. LP (1) N 6 28. BD (1) C 1- C 13 0.1107 2.91
17. LP (1) N 6 40. BD (1) C 13- C 16 0.0952 0.56
17. LP (1) N 6 41. BD (1) C 16- H 17 0.1110 1.99
18. LP (1) F 11 23. LP (3) F 12 -0.0607 -0.63
19. LP (2) F 11 27. BD (1) C 1- C 9 -0.1539 8.31
19. LP (2) F 11 34. BD (1) N 6- H 8 -0.0613 0.62
19. LP (2) F 11 35. BD (1) C 9- H 10 0.1116 7.02
20. LP (3) F 11 21. LP (1) F 12 -0.0593 -0.60
20. LP (3) F 11 23. LP (3) F 12 0.0577 1.76
20. LP (3) F 11 27. BD (1) C 1- C 9 0.0729 1.86
20. LP (3) F 11 28. BD (1) C 1- C 13 0.0791 0.83
20. LP (3) F 11 35. BD (1) C 9- H 10 0.0551 1.44
20. LP (3) F 11 37. BD (1) C 9- F 12 -0.1432 6.98
20. LP (3) F 11 39. BD (1) C 13- H 15 0.0591 0.80
22. LP (2) F 12 27. BD (1) C 1- C 9 -0.1572 8.69
22. LP (2) F 12 35. BD (1) C 9- H 10 0.1107 6.81
23. LP (3) F 12 25. BD (1) C 1- C 2 0.0814 0.97
23. LP (3) F 12 27. BD (1) C 1- C 9 0.0736 1.82
23. LP (3) F 12 35. BD (1) C 9- H 10 0.0608 1.72
23. LP (3) F 12 36. BD (1) C 9- F 11 -0.1439 6.95
24. LP (1) N 22 38. BD (1) C 13- H 14 -0.0821 0.70
24. LP (1) N 22 42. BD (1) C 16- H 18 -0.0960 0.55
24. LP (1) N 22 43. BD (1) C 16- C 19 -0.2265 12.00
24. LP (1) N 22 44. BD (1) C 19- H 20 0.0766 2.21
24. LP (1) N 22 45. BD (1) C 19- H 21 0.0480 1.01
25. BD (1) C 1- C 2 32. BD (1) O 4- H 5 -0.0998 4.20
25. BD (1) C 1- C 2 33. BD (1) N 6- H 7 0.1026 2.17
25. BD (1) C 1- C 2 34. BD (1) N 6- H 8 -0.1243 5.35
25. BD (1) C 1- C 2 35. BD (1) C 9- H 10 0.0844 1.20
25. BD (1) C 1- C 2 36. BD (1) C 9- F 11 -0.1111 3.35
25. BD (1) C 1- C 2 37. BD (1) C 9- F 12 0.0597 0.60
25. BD (1) C 1- C 2 38. BD (1) C 13- H 14 0.0743 0.83
25. BD (1) C 1- C 2 39. BD (1) C 13- H 15 -0.1314 4.86
25. BD (1) C 1- C 2 40. BD (1) C 13- C 16 0.0874 1.56
25. BD (1) C 1- C 2 42. BD (1) C 16- H 18 0.0677 0.62
26. BD (1) C 1- N 6 29. BD (1) C 2- O 3 -0.1073 2.01
26. BD (1) C 1- N 6 31. BD (1) C 2- O 4 0.0891 1.71
26. BD (1) C 1- N 6 35. BD (1) C 9- H 10 -0.1034 2.91
26. BD (1) C 1- N 6 37. BD (1) C 9- F 12 0.0531 0.52
26. BD (1) C 1- N 6 38. BD (1) C 13- H 14 -0.1333 4.49
26. BD (1) C 1- N 6 39. BD (1) C 13- H 15 0.0815 1.28
26. BD (1) C 1- N 6 40. BD (1) C 13- C 16 0.0562 0.66
27. BD (1) C 1- C 9 30. BD (2) C 2- O 3 0.1295 3.96
27. BD (1) C 1- C 9 31. BD (1) C 2- O 4 -0.0599 0.90
27. BD (1) C 1- C 9 34. BD (1) N 6- H 8 0.0760 1.32
27. BD (1) C 1- C 9 38. BD (1) C 13- H 14 0.1029 2.14
27. BD (1) C 1- C 9 39. BD (1) C 13- H 15 0.0782 1.35
27. BD (1) C 1- C 9 40. BD (1) C 13- C 16 -0.1508 4.98
```

28. BD (1) C 1- C 13 29. BD (1) C 2- O 3 0.0565 0.87
 28. BD (1) C 1- C 13 30. BD (2) C 2- O 3 -0.1124 2.95
 28. BD (1) C 1- C 13 31. BD (1) C 2- O 4 -0.0654 0.92
 28. BD (1) C 1- C 13 33. BD (1) N 6- H 7 -0.1271 5.20
 28. BD (1) C 1- C 13 34. BD (1) N 6- H 8 0.0718 1.31
 28. BD (1) C 1- C 13 35. BD (1) C 9- H 10 0.0745 1.17
 28. BD (1) C 1- C 13 36. BD (1) C 9- F 11 0.0545 0.67
 28. BD (1) C 1- C 13 37. BD (1) C 9- F 12 -0.1119 3.21
 28. BD (1) C 1- C 13 41. BD (1) C 16- H 17 0.0849 1.58
 28. BD (1) C 1- C 13 42. BD (1) C 16- H 18 0.0706 1.07
 28. BD (1) C 1- C 13 43. BD (1) C 16- C 19 -0.1470 4.32
 29. BD (1) C 2- O 3 32. BD (1) O 4- H 5 0.0819 2.08
 30. BD (2) C 2- O 3 35. BD (1) C 9- H 10 0.0597 0.61
 30. BD (2) C 2- O 3 42. BD (1) C 16- H 18 -0.0832 1.11
 34. BD (1) N 6- H 8 39. BD (1) C 13- H 15 0.0757 0.64
 35. BD (1) C 9- H 10 38. BD (1) C 13- H 14 0.0794 0.97
 38. BD (1) C 13- H 14 41. BD (1) C 16- H 17 -0.1272 5.45
 38. BD (1) C 13- H 14 42. BD (1) C 16- H 18 0.0876 1.41
 38. BD (1) C 13- H 14 43. BD (1) C 16- C 19 0.0681 1.05
 38. BD (1) C 13- H 14 47. BD (1) N 22- H 23 0.0468 0.60
 39. BD (1) C 13- H 15 41. BD (1) C 16- H 17 0.0737 0.87
 39. BD (1) C 13- H 15 42. BD (1) C 16- H 18 -0.1205 5.14
 39. BD (1) C 13- H 15 43. BD (1) C 16- C 19 0.0838 1.64
 39. BD (1) C 13- H 15 45. BD (1) C 19- H 21 0.0778 0.79
 40. BD (1) C 13- C 16 44. BD (1) C 19- H 20 -0.1331 4.65
 40. BD (1) C 13- C 16 45. BD (1) C 19- H 21 0.0805 1.32
 40. BD (1) C 13- C 16 46. BD (1) C 19- N 22 0.0521 0.55
 41. BD (1) C 16- H 17 44. BD (1) C 19- H 20 0.0910 2.00
 41. BD (1) C 16- H 17 45. BD (1) C 19- H 21 0.0764 1.07
 41. BD (1) C 16- H 17 46. BD (1) C 19- N 22 -0.1229 3.98
 42. BD (1) C 16- H 18 44. BD (1) C 19- H 20 0.0797 1.32
 42. BD (1) C 16- H 18 45. BD (1) C 19- H 21 -0.1106 4.64
 42. BD (1) C 16- H 18 46. BD (1) C 19- N 22 0.0646 0.76
 43. BD (1) C 16- C 19 48. BD (1) N 22- H 24 0.0617 0.94
 44. BD (1) C 19- H 20 47. BD (1) N 22- H 23 -0.1096 5.09
 44. BD (1) C 19- H 20 48. BD (1) N 22- H 24 0.0710 1.10
 45. BD (1) C 19- H 21 47. BD (1) N 22- H 23 0.0877 1.82
 45. BD (1) C 19- H 21 48. BD (1) N 22- H 24 -0.1065 5.02
 sum within unit 1: 296.33

 Total disjoint NLMO steric exchange energy from pairwise sum: 296.33

Conformer 4

Standard orientation:

Center Atomic Atomic Coordinates (Angstroms)

Number Number Type X Y Z

1 6 0 -0.679955 -0.104791 0.236841
2 6 0 -0.736325 1.411651 -0.053642
3 8 0 -0.642237 2.271909 0.780153
4 8 0 -0.859829 1.677801 -1.376513
5 1 0 -0.877119 2.641499 -1.481381
6 7 0 -0.756299 -0.395483 1.655505
7 1 0 -1.674969 -0.155046 2.014509
8 1 0 -0.091647 0.179679 2.160655
9 6 0 -1.871212 -0.764838 -0.473554
10 1 0 -1.899368 -0.551458 -1.541230
11 9 0 -1.856149 -2.117125 -0.303800
12 9 0 -3.047209 -0.303660 0.079439
13 6 0 0.627523 -0.672376 -0.366798
14 1 0 0.608475 -0.525761 -1.451154
15 1 0 0.615490 -1.747118 -0.174753
16 6 0 1.904300 -0.057611 0.209525
17 1 0 1.948382 -0.232047 1.289911
18 1 0 1.909460 1.029193 0.063103
19 6 0 3.165736 -0.651086 -0.435093
20 1 0 3.164670 -1.737448 -0.298564
21 1 0 3.134853 -0.478822 -1.516380
22 7 0 4.440925 -0.138867 0.063291
23 1 0 4.547269 -0.324193 1.055464
24 1 0 4.508481 0.865664 -0.065305

E [DLPNO-CCSD(T)/CBS] = -694.8691073

Pairwise steric exchange energies $dE(i,j)$ (kcal/mol) and associated pre-NLMO overlaps $S(i,j)$ for disjoint (no common atoms) interactions between NLMOs i,j :

Threshold for printing: 0.50 kcal/mol

NLMO (i) NLMO (j) $S(i,j)$ kcal/mol

```
=====
within unit 1
13. LP ( 1) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.0512 0.78
13. LP ( 1) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.0451 0.80
14. LP ( 2) O 3 15. LP ( 1) O 4 -0.0164 -0.56
14. LP ( 2) O 3 17. LP ( 1) N 6 -0.0648 0.60
14. LP ( 2) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.1654 11.60
14. LP ( 2) O 3 26. BD ( 1) C 1- N 6 0.1266 1.55
14. LP ( 2) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.2084 13.42
14. LP ( 2) O 3 32. BD ( 1) O 4- H 5 -0.1368 2.28
14. LP ( 2) O 3 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.0896 1.16
15. LP ( 1) O 4 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.1106 3.41
15. LP ( 1) O 4 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.1265 4.48
15. LP ( 1) O 4 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0920 1.58
15. LP ( 1) O 4 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0703 0.82
16. LP ( 2) O 4 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.0696 0.94
16. LP ( 2) O 4 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0899 1.48
16. LP ( 2) O 4 30. BD ( 2) C 2- O 3 0.1952 13.98
16. LP ( 2) O 4 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0569 0.58
17. LP ( 1) N 6 19. LP ( 2) F 11 -0.0538 0.58
17. LP ( 1) N 6 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.1950 10.87
17. LP ( 1) N 6 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0614 0.67
17. LP ( 1) N 6 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.1132 3.09
17. LP ( 1) N 6 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.0810 0.76
17. LP ( 1) N 6 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.1178 1.16
18. LP ( 1) F 11 23. LP ( 3) F 12 -0.0599 -0.63
19. LP ( 2) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1496 7.80
19. LP ( 2) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1169 7.63
20. LP ( 3) F 11 21. LP ( 1) F 12 -0.0604 -0.65
20. LP ( 3) F 11 23. LP ( 3) F 12 0.0572 1.73
20. LP ( 3) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0718 1.82
20. LP ( 3) F 11 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0800 0.80
20. LP ( 3) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0532 1.39
20. LP ( 3) F 11 37. BD ( 1) C 9- F 12 -0.1447 7.17
20. LP ( 3) F 11 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0633 0.90
22. LP ( 2) F 12 26. BD ( 1) C 1- N 6 -0.0801 0.51
22. LP ( 2) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1545 8.31
22. LP ( 2) F 12 33. BD ( 1) N 6- H 7 -0.0764 1.09
22. LP ( 2) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1103 6.67
23. LP ( 3) F 12 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.0812 0.96
23. LP ( 3) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0702 1.69
23. LP ( 3) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0622 1.83
23. LP ( 3) F 12 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1410 6.70
24. LP ( 1) N 22 41. BD ( 1) C 16- H 17 -0.0933 0.69
24. LP ( 1) N 22 42. BD ( 1) C 16- H 18 -0.0916 0.63
24. LP ( 1) N 22 43. BD ( 1) C 16- C 19 -0.2235 12.06
24. LP ( 1) N 22 44. BD ( 1) C 19- H 20 0.0619 1.47
24. LP ( 1) N 22 45. BD ( 1) C 19- H 21 0.0662 1.66
25. BD ( 1) C 1- C 2 32. BD ( 1) O 4- H 5 -0.0925 3.79
25. BD ( 1) C 1- C 2 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.0889 1.63
25. BD ( 1) C 1- C 2 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0908 1.34
25. BD ( 1) C 1- C 2 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1139 3.38
25. BD ( 1) C 1- C 2 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0870 1.06
25. BD ( 1) C 1- C 2 39. BD ( 1) C 13- H 15 -0.1314 4.87
25. BD ( 1) C 1- C 2 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0839 1.34
25. BD ( 1) C 1- C 2 42. BD ( 1) C 16- H 18 0.0660 0.56
26. BD ( 1) C 1- N 6 29. BD ( 1) C 2- O 3 0.0652 1.01
26. BD ( 1) C 1- N 6 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.1097 2.54
26. BD ( 1) C 1- N 6 35. BD ( 1) C 9- H 10 -0.1127 3.45
26. BD ( 1) C 1- N 6 37. BD ( 1) C 9- F 12 0.0575 0.69
26. BD ( 1) C 1- N 6 38. BD ( 1) C 13- H 14 -0.1345 4.56
26. BD ( 1) C 1- N 6 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0725 1.05
26. BD ( 1) C 1- N 6 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0598 0.80
27. BD ( 1) C 1- C 9 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.0764 1.07
27. BD ( 1) C 1- C 9 30. BD ( 2) C 2- O 3 -0.0995 2.23
27. BD ( 1) C 1- C 9 31. BD ( 1) C 2- O 4 0.0679 0.82
27. BD ( 1) C 1- C 9 33. BD ( 1) N 6- H 7 0.1018 2.55
27. BD ( 1) C 1- C 9 34. BD ( 1) N 6- H 8 -0.1381 6.12
27. BD ( 1) C 1- C 9 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0938 1.90
27. BD ( 1) C 1- C 9 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0872 1.75
```

27. BD (1) C 1- C 9 40. BD (1) C 13- C 16 -0.1484 4.72
 28. BD (1) C 1- C 13 30. BD (2) C 2- O 3 0.1255 3.50
 28. BD (1) C 1- C 13 33. BD (1) N 6- H 7 -0.1306 5.41
 28. BD (1) C 1- C 13 34. BD (1) N 6- H 8 0.0646 0.97
 28. BD (1) C 1- C 13 35. BD (1) C 9- H 10 0.0658 0.95
 28. BD (1) C 1- C 13 36. BD (1) C 9- F 11 0.0512 0.59
 28. BD (1) C 1- C 13 37. BD (1) C 9- F 12 -0.1161 3.52
 28. BD (1) C 1- C 13 41. BD (1) C 16- H 17 0.0683 1.05
 28. BD (1) C 1- C 13 42. BD (1) C 16- H 18 0.0794 1.38
 28. BD (1) C 1- C 13 43. BD (1) C 16- C 19 -0.1461 4.31
 29. BD (1) C 2- O 3 32. BD (1) O 4- H 5 0.0791 1.88
 30. BD (2) C 2- O 3 42. BD (1) C 16- H 18 0.0805 1.13
 34. BD (1) N 6- H 8 41. BD (1) C 16- H 17 0.0658 1.05
 35. BD (1) C 9- H 10 38. BD (1) C 13- H 14 0.0777 0.84
 38. BD (1) C 13- H 14 41. BD (1) C 16- H 17 -0.1238 5.28
 38. BD (1) C 13- H 14 42. BD (1) C 16- H 18 0.0722 0.89
 38. BD (1) C 13- H 14 43. BD (1) C 16- C 19 0.0851 1.60
 38. BD (1) C 13- H 14 45. BD (1) C 19- H 21 0.0739 0.80
 39. BD (1) C 13- H 15 41. BD (1) C 16- H 17 0.0805 1.22
 39. BD (1) C 13- H 15 42. BD (1) C 16- H 18 -0.1268 5.46
 39. BD (1) C 13- H 15 43. BD (1) C 16- C 19 0.0756 1.30
 39. BD (1) C 13- H 15 44. BD (1) C 19- H 20 0.0711 0.74
 40. BD (1) C 13- C 16 44. BD (1) C 19- H 20 0.0761 1.25
 40. BD (1) C 13- C 16 45. BD (1) C 19- H 21 0.0742 1.20
 40. BD (1) C 13- C 16 46. BD (1) C 19- N 22 -0.1288 3.42
 41. BD (1) C 16- H 17 44. BD (1) C 19- H 20 0.0803 1.16
 41. BD (1) C 16- H 17 45. BD (1) C 19- H 21 -0.1142 4.80
 41. BD (1) C 16- H 17 46. BD (1) C 19- N 22 0.0667 0.90
 42. BD (1) C 16- H 18 44. BD (1) C 19- H 20 -0.1143 4.79
 42. BD (1) C 16- H 18 45. BD (1) C 19- H 21 0.0829 1.26
 42. BD (1) C 16- H 18 46. BD (1) C 19- N 22 0.0645 0.84
 43. BD (1) C 16- C 19 47. BD (1) N 22- H 23 0.0527 0.67
 43. BD (1) C 16- C 19 48. BD (1) N 22- H 24 0.0556 0.76
 44. BD (1) C 19- H 20 47. BD (1) N 22- H 23 0.0786 1.47
 44. BD (1) C 19- H 20 48. BD (1) N 22- H 24 -0.1097 5.19
 45. BD (1) C 19- H 21 47. BD (1) N 22- H 23 -0.1089 5.13
 45. BD (1) C 19- H 21 48. BD (1) N 22- H 24 0.0755 1.32
 sum within unit 1: 293.15

Total disjoint NLMO steric exchange energy from pairwise sum: 293.15

Conformer 5

Standard orientation:

Center Atomic Atomic Coordinates (Angstroms)

Number Number Type X Y Z

1	6	0	0.630105	0.055054	-0.508174
2	6	0	0.817909	1.059720	0.652007
3	8	0	1.255545	2.172254	0.515181
4	8	0	0.420504	0.566141	1.842431
5	1	0	0.601805	1.244647	2.510934
6	7	0	0.934441	0.657096	-1.797395
7	1	0	0.236580	1.353180	-2.032711
8	1	0	1.821814	1.148662	-1.749480
9	6	0	1.631080	-1.104583	-0.363064
10	1	0	1.597275	-1.749359	-1.241875
11	9	0	2.907281	-0.605662	-0.249323
12	9	0	1.400374	-1.862490	0.749142
13	6	0	-0.799041	-0.522954	-0.498788
14	1	0	-0.937422	-1.051974	0.444382
15	1	0	-0.861090	-1.258770	-1.307177
16	6	0	-1.903527	0.520716	-0.675248
17	1	0	-1.829118	0.991460	-1.662089
18	1	0	-1.790464	1.320465	0.066855
19	6	0	-3.315139	-0.079150	-0.541714
20	1	0	-4.047741	0.691749	-0.797994
21	1	0	-3.440441	-0.878249	-1.280095
22	7	0	-3.679182	-0.620252	0.766157
23	1	0	-3.579573	0.078111	1.495709
24	1	0	-3.104057	-1.414445	1.022825

E [DLPNO-CCSD(T)/CBS] = -694.869088

Pairwise steric exchange energies $dE(i,j)$ (kcal/mol) and associated pre-NLMO overlaps $S(i,j)$ for disjoint (no common atoms) interactions between NLMOs i,j :

Threshold for printing: 0.50 kcal/mol

NLMO (i) NLMO (j) $S(i,j)$ kcal/mol

```
=====
within unit 1
13. LP ( 1) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.0502 0.75
13. LP ( 1) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.0459 0.83
14. LP ( 2) O 3 15. LP ( 1) O 4 0.0161 -0.56
14. LP ( 2) O 3 17. LP ( 1) N 6 0.0660 0.68
14. LP ( 2) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.1691 11.90
14. LP ( 2) O 3 26. BD ( 1) C 1- N 6 -0.1317 1.72
14. LP ( 2) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 0.2057 13.10
14. LP ( 2) O 3 32. BD ( 1) O 4- H 5 0.1368 2.38
14. LP ( 2) O 3 34. BD ( 1) N 6- H 8 -0.0892 1.18
15. LP ( 1) O 4 22. LP ( 2) F 12 -0.0517 0.59
15. LP ( 1) O 4 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.1063 3.23
15. LP ( 1) O 4 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.1275 4.56
15. LP ( 1) O 4 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0917 1.57
16. LP ( 2) O 4 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.0836 1.30
16. LP ( 2) O 4 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0713 0.91
16. LP ( 2) O 4 30. BD ( 2) C 2- O 3 0.1950 14.18
16. LP ( 2) O 4 42. BD ( 1) C 16- H 18 0.0633 0.56
17. LP ( 1) N 6 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.1875 10.39
17. LP ( 1) N 6 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.1254 3.24
17. LP ( 1) N 6 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0609 0.80
17. LP ( 1) N 6 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.0824 0.78
17. LP ( 1) N 6 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1250 1.67
17. LP ( 1) N 6 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0976 0.91
18. LP ( 1) F 11 23. LP ( 3) F 12 -0.0595 -0.66
19. LP ( 2) F 11 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.0924 0.97
19. LP ( 2) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1560 8.49
19. LP ( 2) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1101 6.78
20. LP ( 3) F 11 21. LP ( 1) F 12 -0.0613 -0.67
20. LP ( 3) F 11 23. LP ( 3) F 12 0.0604 1.84
20. LP ( 3) F 11 26. BD ( 1) C 1- N 6 0.0772 0.73
20. LP ( 3) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0713 1.77
20. LP ( 3) F 11 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.0559 0.64
20. LP ( 3) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0611 1.71
20. LP ( 3) F 11 37. BD ( 1) C 9- F 12 -0.1431 6.82
22. LP ( 2) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1464 7.69
22. LP ( 2) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1167 7.61
23. LP ( 3) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0725 1.86
23. LP ( 3) F 12 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0819 0.83
23. LP ( 3) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0565 1.51
23. LP ( 3) F 12 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1431 7.01
23. LP ( 3) F 12 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0644 0.94
24. LP ( 1) N 22 38. BD ( 1) C 13- H 14 -0.0874 0.77
24. LP ( 1) N 22 42. BD ( 1) C 16- H 18 -0.1025 0.63
24. LP ( 1) N 22 43. BD ( 1) C 16- C 19 -0.2258 11.94
24. LP ( 1) N 22 44. BD ( 1) C 19- H 20 0.0744 2.11
24. LP ( 1) N 22 45. BD ( 1) C 19- H 21 0.0498 1.09
25. BD ( 1) C 1- C 2 32. BD ( 1) O 4- H 5 -0.0931 3.85
25. BD ( 1) C 1- C 2 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.0919 1.75
25. BD ( 1) C 1- C 2 35. BD ( 1) C 9- H 10 -0.0988 3.21
25. BD ( 1) C 1- C 2 36. BD ( 1) C 9- F 11 0.0766 0.98
25. BD ( 1) C 1- C 2 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0873 1.14
25. BD ( 1) C 1- C 2 39. BD ( 1) C 13- H 15 -0.1282 4.70
25. BD ( 1) C 1- C 2 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0763 1.11
25. BD ( 1) C 1- C 2 42. BD ( 1) C 16- H 18 0.0729 0.67
26. BD ( 1) C 1- N 6 29. BD ( 1) C 2- O 3 0.0700 1.14
26. BD ( 1) C 1- N 6 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.1096 2.49
26. BD ( 1) C 1- N 6 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0813 1.44
26. BD ( 1) C 1- N 6 37. BD ( 1) C 9- F 12 -0.1112 2.81
26. BD ( 1) C 1- N 6 38. BD ( 1) C 13- H 14 -0.1413 4.91
26. BD ( 1) C 1- N 6 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0703 0.94
26. BD ( 1) C 1- N 6 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0633 0.89
27. BD ( 1) C 1- C 9 30. BD ( 2) C 2- O 3 -0.1203 3.21
27. BD ( 1) C 1- C 9 33. BD ( 1) N 6- H 7 -0.1336 5.88
27. BD ( 1) C 1- C 9 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.0681 1.03
27. BD ( 1) C 1- C 9 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0885 1.74
27. BD ( 1) C 1- C 9 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0927 1.84
27. BD ( 1) C 1- C 9 40. BD ( 1) C 13- C 16 -0.1526 5.06
28. BD ( 1) C 1- C 13 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.0681 0.72
```

28. BD (1) C 1- C 13 30. BD (2) C 2- O 3 0.1017 2.27
 28. BD (1) C 1- C 13 31. BD (1) C 2- O 4 0.0700 1.06
 28. BD (1) C 1- C 13 33. BD (1) N 6- H 7 0.1013 2.58
 28. BD (1) C 1- C 13 34. BD (1) N 6- H 8 -0.1327 5.57
 28. BD (1) C 1- C 13 35. BD (1) C 9- H 10 0.0665 0.98
 28. BD (1) C 1- C 13 36. BD (1) C 9- F 11 -0.1127 3.26
 28. BD (1) C 1- C 13 37. BD (1) C 9- F 12 0.0543 0.68
 28. BD (1) C 1- C 13 41. BD (1) C 16- H 17 0.0607 0.79
 28. BD (1) C 1- C 13 42. BD (1) C 16- H 18 0.0897 1.74
 28. BD (1) C 1- C 13 43. BD (1) C 16- C 19 -0.1481 4.39
 29. BD (1) C 2- O 3 32. BD (1) O 4- H 5 0.0817 2.01
 30. BD (2) C 2- O 3 42. BD (1) C 16- H 18 0.0674 0.70
 33. BD (1) N 6- H 7 41. BD (1) C 16- H 17 0.0792 1.47
 35. BD (1) C 9- H 10 39. BD (1) C 13- H 15 0.0747 0.73
 38. BD (1) C 13- H 14 41. BD (1) C 16- H 17 -0.1248 5.33
 38. BD (1) C 13- H 14 42. BD (1) C 16- H 18 0.0677 0.68
 38. BD (1) C 13- H 14 43. BD (1) C 16- C 19 0.0912 1.96
 38. BD (1) C 13- H 14 48. BD (1) N 22- H 24 0.0555 0.81
 39. BD (1) C 13- H 15 41. BD (1) C 16- H 17 0.0914 1.61
 39. BD (1) C 13- H 15 42. BD (1) C 16- H 18 -0.1210 5.17
 39. BD (1) C 13- H 15 43. BD (1) C 16- C 19 0.0636 0.98
 39. BD (1) C 13- H 15 45. BD (1) C 19- H 21 0.0716 0.65
 40. BD (1) C 13- C 16 44. BD (1) C 19- H 20 -0.1319 4.59
 40. BD (1) C 13- C 16 45. BD (1) C 19- H 21 0.0827 1.39
 41. BD (1) C 16- H 17 44. BD (1) C 19- H 20 0.0956 2.19
 41. BD (1) C 16- H 17 45. BD (1) C 19- H 21 0.0731 0.95
 41. BD (1) C 16- H 17 46. BD (1) C 19- N 22 -0.1219 3.91
 42. BD (1) C 16- H 18 44. BD (1) C 19- H 20 0.0781 1.22
 42. BD (1) C 16- H 18 45. BD (1) C 19- H 21 -0.1095 4.56
 42. BD (1) C 16- H 18 46. BD (1) C 19- N 22 0.0674 0.84
 43. BD (1) C 16- C 19 47. BD (1) N 22- H 23 0.0596 0.88
 44. BD (1) C 19- H 20 47. BD (1) N 22- H 23 0.0733 1.19
 44. BD (1) C 19- H 20 48. BD (1) N 22- H 24 -0.1093 5.09
 45. BD (1) C 19- H 21 47. BD (1) N 22- H 23 -0.1066 5.03
 45. BD (1) C 19- H 21 48. BD (1) N 22- H 24 0.0864 1.76
 sum within unit 1: 293.96

Total disjoint NLMO steric exchange energy from pairwise sum: 293.96

Conformer 6

Standard orientation:

Center Atomic Atomic Coordinates (Angstroms)

Number Number Type X Y Z

1	6	0	-0.682080	-0.106261	0.241609
2	6	0	-0.725636	1.408928	-0.061300
3	8	0	-0.665170	2.276508	0.767406
4	8	0	-0.803268	1.664536	-1.390928
5	1	0	-0.821292	2.627431	-1.502465
6	7	0	-0.779660	-0.389194	1.658876
7	1	0	-0.063729	0.118363	2.165752
8	1	0	-1.672999	-0.073066	2.022274
9	6	0	-1.872248	-0.758810	-0.478845
10	1	0	-1.889655	-0.545430	-1.546962
11	9	0	-1.868443	-2.111069	-0.309944
12	9	0	-3.049100	-0.288094	0.063565
13	6	0	0.625364	-0.691344	-0.343075
14	1	0	0.608401	-0.571791	-1.430513
15	1	0	0.609837	-1.760859	-0.123944
16	6	0	1.899689	-0.063452	0.223095
17	1	0	1.954066	-0.203882	1.305815
18	1	0	1.903715	1.018759	0.043208
19	6	0	3.156730	-0.672629	-0.395487
20	1	0	3.174618	-1.746764	-0.186026
21	1	0	3.107553	-0.562919	-1.491170
22	7	0	4.357926	-0.080942	0.199824
23	1	0	5.197272	-0.543998	-0.130829
24	1	0	4.438825	0.900623	-0.046440

E [DLPNO-CCSD(T)/CBS] = -694.868972

Pairwise steric exchange energies $dE(i,j)$ (kcal/mol) and associated pre-NLMO overlaps $S(i,j)$ for disjoint (no common atoms) interactions between NLMOs i,j :

Threshold for printing: 0.50 kcal/mol

NLMO (i) NLMO (j) $S(i,j)$ kcal/mol

```
=====
within unit 1
13. LP ( 1) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.0518 0.79
13. LP ( 1) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.0453 0.80
14. LP ( 2) O 3 15. LP ( 1) O 4 0.0164 -0.56
14. LP ( 2) O 3 17. LP ( 1) N 6 0.0676 0.63
14. LP ( 2) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.1651 11.57
14. LP ( 2) O 3 26. BD ( 1) C 1- N 6 -0.1258 1.54
14. LP ( 2) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 0.2087 13.45
14. LP ( 2) O 3 32. BD ( 1) O 4- H 5 0.1372 2.29
14. LP ( 2) O 3 33. BD ( 1) N 6- H 7 -0.0808 0.90
15. LP ( 1) O 4 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.1104 3.39
15. LP ( 1) O 4 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.1261 4.45
15. LP ( 1) O 4 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0906 1.52
15. LP ( 1) O 4 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0728 0.89
16. LP ( 2) O 4 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.0717 0.99
16. LP ( 2) O 4 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0884 1.42
16. LP ( 2) O 4 30. BD ( 2) C 2- O 3 0.1951 13.96
16. LP ( 2) O 4 35. BD ( 1) C 9- H 10 -0.0493 0.53
16. LP ( 2) O 4 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0547 0.53
17. LP ( 1) N 6 19. LP ( 2) F 11 -0.0555 0.60
17. LP ( 1) N 6 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.1983 11.14
17. LP ( 1) N 6 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0773 1.16
17. LP ( 1) N 6 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0995 2.40
17. LP ( 1) N 6 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.0820 0.77
17. LP ( 1) N 6 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.1146 1.17
18. LP ( 1) F 11 23. LP ( 3) F 12 -0.0596 -0.63
19. LP ( 2) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1490 7.74
19. LP ( 2) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1175 7.69
20. LP ( 3) F 11 21. LP ( 1) F 12 -0.0603 -0.65
20. LP ( 3) F 11 23. LP ( 3) F 12 0.0570 1.72
20. LP ( 3) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0724 1.86
20. LP ( 3) F 11 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0807 0.82
20. LP ( 3) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0531 1.38
20. LP ( 3) F 11 37. BD ( 1) C 9- F 12 -0.1446 7.15
20. LP ( 3) F 11 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0628 0.89
22. LP ( 2) F 12 26. BD ( 1) C 1- N 6 -0.0802 0.53
22. LP ( 2) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1546 8.33
22. LP ( 2) F 12 34. BD ( 1) N 6- H 8 -0.0738 1.02
22. LP ( 2) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1105 6.68
23. LP ( 3) F 12 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.0814 0.96
23. LP ( 3) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0708 1.71
23. LP ( 3) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0625 1.84
23. LP ( 3) F 12 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1408 6.68
24. LP ( 1) N 22 41. BD ( 1) C 16- H 17 0.1014 1.15
24. LP ( 1) N 22 43. BD ( 1) C 16- C 19 0.0992 2.41
24. LP ( 1) N 22 44. BD ( 1) C 19- H 20 0.0704 1.20
24. LP ( 1) N 22 45. BD ( 1) C 19- H 21 -0.1836 11.57
25. BD ( 1) C 1- C 2 32. BD ( 1) O 4- H 5 -0.0923 3.77
25. BD ( 1) C 1- C 2 33. BD ( 1) N 6- H 7 0.0785 1.19
25. BD ( 1) C 1- C 2 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.0638 0.71
25. BD ( 1) C 1- C 2 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0923 1.39
25. BD ( 1) C 1- C 2 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1138 3.38
25. BD ( 1) C 1- C 2 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0836 0.95
25. BD ( 1) C 1- C 2 39. BD ( 1) C 13- H 15 -0.1321 4.89
25. BD ( 1) C 1- C 2 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0862 1.42
25. BD ( 1) C 1- C 2 42. BD ( 1) C 16- H 18 0.0688 0.61
26. BD ( 1) C 1- N 6 29. BD ( 1) C 2- O 3 0.0650 1.00
26. BD ( 1) C 1- N 6 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.1099 2.54
26. BD ( 1) C 1- N 6 35. BD ( 1) C 9- H 10 -0.1125 3.44
26. BD ( 1) C 1- N 6 37. BD ( 1) C 9- F 12 0.0583 0.70
26. BD ( 1) C 1- N 6 38. BD ( 1) C 13- H 14 -0.1338 4.54
26. BD ( 1) C 1- N 6 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0756 1.14
26. BD ( 1) C 1- N 6 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0572 0.74
27. BD ( 1) C 1- C 9 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.0731 0.97
27. BD ( 1) C 1- C 9 30. BD ( 2) C 2- O 3 -0.1024 2.36
27. BD ( 1) C 1- C 9 31. BD ( 1) C 2- O 4 0.0663 0.78
27. BD ( 1) C 1- C 9 33. BD ( 1) N 6- H 7 -0.1385 6.16
27. BD ( 1) C 1- C 9 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.0930 2.08
27. BD ( 1) C 1- C 9 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0971 2.06
```

27. BD (1) C 1- C 9 39. BD (1) C 13- H 15 0.0838 1.61
 27. BD (1) C 1- C 9 40. BD (1) C 13- C 16 -0.1487 4.75
 28. BD (1) C 1- C 13 30. BD (2) C 2- O 3 0.1232 3.37
 28. BD (1) C 1- C 13 31. BD (1) C 2- O 4 0.0500 0.52
 28. BD (1) C 1- C 13 33. BD (1) N 6- H 7 0.0757 1.37
 28. BD (1) C 1- C 13 34. BD (1) N 6- H 8 -0.1321 5.55
 28. BD (1) C 1- C 13 35. BD (1) C 9- H 10 0.0656 0.94
 28. BD (1) C 1- C 13 36. BD (1) C 9- F 11 0.0518 0.61
 28. BD (1) C 1- C 13 37. BD (1) C 9- F 12 -0.1157 3.50
 28. BD (1) C 1- C 13 41. BD (1) C 16- H 17 0.0705 1.07
 28. BD (1) C 1- C 13 42. BD (1) C 16- H 18 0.0809 1.42
 28. BD (1) C 1- C 13 43. BD (1) C 16- C 19 -0.1444 4.28
 29. BD (1) C 2- O 3 32. BD (1) O 4- H 5 0.0793 1.89
 30. BD (2) C 2- O 3 42. BD (1) C 16- H 18 0.0810 1.13
 33. BD (1) N 6- H 7 41. BD (1) C 16- H 17 0.0695 1.15
 35. BD (1) C 9- H 10 38. BD (1) C 13- H 14 0.0791 0.86
 38. BD (1) C 13- H 14 41. BD (1) C 16- H 17 -0.1215 5.21
 38. BD (1) C 13- H 14 42. BD (1) C 16- H 18 0.0735 0.91
 38. BD (1) C 13- H 14 43. BD (1) C 16- C 19 0.0855 1.60
 38. BD (1) C 13- H 14 45. BD (1) C 19- H 21 0.0735 0.82
 39. BD (1) C 13- H 15 41. BD (1) C 16- H 17 0.0812 1.21
 39. BD (1) C 13- H 15 42. BD (1) C 16- H 18 -0.1259 5.45
 39. BD (1) C 13- H 15 43. BD (1) C 16- C 19 0.0763 1.32
 39. BD (1) C 13- H 15 44. BD (1) C 19- H 20 0.0692 0.71
 40. BD (1) C 13- C 16 44. BD (1) C 19- H 20 0.0687 1.08
 40. BD (1) C 13- C 16 45. BD (1) C 19- H 21 0.0747 1.22
 40. BD (1) C 13- C 16 46. BD (1) C 19- N 22 -0.1337 3.76
 41. BD (1) C 16- H 17 44. BD (1) C 19- H 20 0.0791 1.23
 41. BD (1) C 16- H 17 45. BD (1) C 19- H 21 -0.1175 4.94
 41. BD (1) C 16- H 17 46. BD (1) C 19- N 22 0.0711 1.07
 42. BD (1) C 16- H 18 44. BD (1) C 19- H 20 -0.1195 5.06
 42. BD (1) C 16- H 18 45. BD (1) C 19- H 21 0.0778 1.11
 42. BD (1) C 16- H 18 46. BD (1) C 19- N 22 0.0732 1.16
 43. BD (1) C 16- C 19 47. BD (1) N 22- H 23 -0.1256 4.88
 43. BD (1) C 16- C 19 48. BD (1) N 22- H 24 0.0617 1.01
 44. BD (1) C 19- H 20 47. BD (1) N 22- H 23 0.0864 2.09
 44. BD (1) C 19- H 20 48. BD (1) N 22- H 24 -0.1109 5.24
 45. BD (1) C 19- H 21 47. BD (1) N 22- H 23 0.0490 0.52
 45. BD (1) C 19- H 21 48. BD (1) N 22- H 24 0.0664 0.96
 sum within unit 1: 294.28

 Total disjoint NLMO steric exchange energy from pairwise sum: 294.28

Conformer 7

Standard orientation:

Center Atomic Atomic Coordinates (Angstroms)

Number Number Type X Y Z

1	6	0	-0.600847	-0.084642	0.256154
2	6	0	-1.006104	1.372861	-0.061491
3	8	0	-1.211041	2.224048	0.761017
4	8	0	-1.075143	1.606174	-1.395851
5	1	0	-1.328063	2.534219	-1.517135
6	7	0	-0.686312	-0.389034	1.668684
7	1	0	-1.631573	-0.243845	2.007738
8	1	0	-0.085019	0.230101	2.199292
9	6	0	-1.562601	-1.008954	-0.508345
10	1	0	-1.593852	-0.797541	-1.576670
11	9	0	-1.225312	-2.318294	-0.339091
12	9	0	-2.838419	-0.852216	-0.011121
13	6	0	0.834056	-0.329290	-0.267900
14	1	0	0.828248	-0.244980	-1.359457
15	1	0	1.076147	-1.360527	-0.006500
16	6	0	1.885441	0.624056	0.306245
17	1	0	1.958119	0.499254	1.390347
18	1	0	1.597287	1.663093	0.112077
19	6	0	3.273915	0.391217	-0.292165
20	1	0	3.224870	0.554623	-1.381575
21	1	0	3.956903	1.144274	0.109751
22	7	0	3.802792	-0.925373	0.078018
23	1	0	4.784259	-1.003804	-0.163187
24	1	0	3.317209	-1.672698	-0.405996

E [DLPNO-CCSD(T)/CBS] = -694.8686125

Pairwise steric exchange energies $dE(i,j)$ (kcal/mol) and associated pre-NLMO overlaps $S(i,j)$ for disjoint (no common atoms) interactions between NLMOs i,j :

Threshold for printing: 0.50 kcal/mol

NLMO (i) NLMO (j) $S(i,j)$ kcal/mol

```
=====
within unit 1
13. LP ( 1) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.0522 0.80
13. LP ( 1) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.0456 0.81
14. LP ( 2) O 3 15. LP ( 1) O 4 0.0165 -0.57
14. LP ( 2) O 3 17. LP ( 1) N 6 0.0690 0.64
14. LP ( 2) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.1647 11.54
14. LP ( 2) O 3 26. BD ( 1) C 1- N 6 -0.1253 1.55
14. LP ( 2) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 0.2085 13.45
14. LP ( 2) O 3 32. BD ( 1) O 4- H 5 0.1371 2.29
14. LP ( 2) O 3 34. BD ( 1) N 6- H 8 -0.0741 0.73
15. LP ( 1) O 4 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.1109 3.40
15. LP ( 1) O 4 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.1259 4.45
15. LP ( 1) O 4 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0904 1.51
15. LP ( 1) O 4 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0731 0.90
16. LP ( 2) O 4 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.0724 1.01
16. LP ( 2) O 4 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0880 1.41
16. LP ( 2) O 4 30. BD ( 2) C 2- O 3 0.1953 13.97
16. LP ( 2) O 4 35. BD ( 1) C 9- H 10 -0.0508 0.56
17. LP ( 1) N 6 19. LP ( 2) F 11 -0.0568 0.62
17. LP ( 1) N 6 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.1992 11.21
17. LP ( 1) N 6 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0908 1.68
17. LP ( 1) N 6 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0888 1.90
17. LP ( 1) N 6 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.0827 0.77
17. LP ( 1) N 6 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.1115 1.18
18. LP ( 1) F 11 23. LP ( 3) F 12 -0.0595 -0.63
19. LP ( 2) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1486 7.71
19. LP ( 2) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1178 7.72
20. LP ( 3) F 11 21. LP ( 1) F 12 -0.0602 -0.65
20. LP ( 3) F 11 23. LP ( 3) F 12 0.0567 1.70
20. LP ( 3) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0732 1.90
20. LP ( 3) F 11 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0815 0.82
20. LP ( 3) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0527 1.36
20. LP ( 3) F 11 37. BD ( 1) C 9- F 12 -0.1445 7.14
20. LP ( 3) F 11 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0621 0.86
22. LP ( 2) F 12 26. BD ( 1) C 1- N 6 -0.0805 0.55
22. LP ( 2) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1545 8.32
22. LP ( 2) F 12 33. BD ( 1) N 6- H 7 -0.0716 0.96
22. LP ( 2) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1106 6.70
23. LP ( 3) F 12 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.0813 0.95
23. LP ( 3) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0712 1.73
23. LP ( 3) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0626 1.85
23. LP ( 3) F 12 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1406 6.67
24. LP ( 1) N 22 41. BD ( 1) C 16- H 17 0.1150 1.16
24. LP ( 1) N 22 43. BD ( 1) C 16- C 19 0.1159 3.18
24. LP ( 1) N 22 44. BD ( 1) C 19- H 20 -0.1732 10.85
24. LP ( 1) N 22 45. BD ( 1) C 19- H 21 0.0613 0.81
25. BD ( 1) C 1- C 2 32. BD ( 1) O 4- H 5 -0.0921 3.76
25. BD ( 1) C 1- C 2 33. BD ( 1) N 6- H 7 0.0712 0.97
25. BD ( 1) C 1- C 2 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.0695 0.86
25. BD ( 1) C 1- C 2 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0937 1.43
25. BD ( 1) C 1- C 2 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1135 3.36
25. BD ( 1) C 1- C 2 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0797 0.83
25. BD ( 1) C 1- C 2 39. BD ( 1) C 13- H 15 -0.1313 4.87
25. BD ( 1) C 1- C 2 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0886 1.53
25. BD ( 1) C 1- C 2 42. BD ( 1) C 16- H 18 0.0713 0.66
26. BD ( 1) C 1- N 6 29. BD ( 1) C 2- O 3 0.0647 0.98
26. BD ( 1) C 1- N 6 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.1103 2.56
26. BD ( 1) C 1- N 6 35. BD ( 1) C 9- H 10 -0.1122 3.42
26. BD ( 1) C 1- N 6 37. BD ( 1) C 9- F 12 0.0592 0.73
26. BD ( 1) C 1- N 6 38. BD ( 1) C 13- H 14 -0.1324 4.47
26. BD ( 1) C 1- N 6 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0808 1.32
26. BD ( 1) C 1- N 6 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0519 0.61
27. BD ( 1) C 1- C 9 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.0722 0.95
27. BD ( 1) C 1- C 9 30. BD ( 2) C 2- O 3 -0.1033 2.40
27. BD ( 1) C 1- C 9 31. BD ( 1) C 2- O 4 0.0655 0.75
27. BD ( 1) C 1- C 9 33. BD ( 1) N 6- H 7 0.0843 1.68
27. BD ( 1) C 1- C 9 34. BD ( 1) N 6- H 8 -0.1386 6.17
27. BD ( 1) C 1- C 9 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.1015 2.26
27. BD ( 1) C 1- C 9 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0799 1.45
```

27. BD (1) C 1- C 9 40. BD (1) C 13- C 16 -0.1505 4.83
 28. BD (1) C 1- C 13 30. BD (2) C 2- O 3 0.1220 3.30
 28. BD (1) C 1- C 13 31. BD (1) C 2- O 4 0.0509 0.55
 28. BD (1) C 1- C 13 33. BD (1) N 6- H 7 -0.1327 5.60
 28. BD (1) C 1- C 13 34. BD (1) N 6- H 8 0.0852 1.77
 28. BD (1) C 1- C 13 35. BD (1) C 9- H 10 0.0649 0.91
 28. BD (1) C 1- C 13 36. BD (1) C 9- F 11 0.0530 0.64
 28. BD (1) C 1- C 13 37. BD (1) C 9- F 12 -0.1152 3.46
 28. BD (1) C 1- C 13 41. BD (1) C 16- H 17 0.0648 0.92
 28. BD (1) C 1- C 13 42. BD (1) C 16- H 18 0.0881 1.65
 28. BD (1) C 1- C 13 43. BD (1) C 16- C 19 -0.1457 4.27
 29. BD (1) C 2- O 3 32. BD (1) O 4- H 5 0.0792 1.88
 30. BD (2) C 2- O 3 42. BD (1) C 16- H 18 0.0848 1.23
 34. BD (1) N 6- H 8 41. BD (1) C 16- H 17 0.0686 1.12
 35. BD (1) C 9- H 10 38. BD (1) C 13- H 14 0.0799 0.89
 38. BD (1) C 13- H 14 41. BD (1) C 16- H 17 -0.1202 5.11
 38. BD (1) C 13- H 14 42. BD (1) C 16- H 18 0.0720 0.82
 38. BD (1) C 13- H 14 43. BD (1) C 16- C 19 0.0890 1.81
 38. BD (1) C 13- H 14 44. BD (1) C 19- H 20 0.0797 0.83
 39. BD (1) C 13- H 15 41. BD (1) C 16- H 17 0.0866 1.40
 39. BD (1) C 13- H 15 42. BD (1) C 16- H 18 -0.1248 5.37
 39. BD (1) C 13- H 15 43. BD (1) C 16- C 19 0.0690 1.08
 39. BD (1) C 13- H 15 48. BD (1) N 22- H 24 0.0565 0.87
 40. BD (1) C 13- C 16 44. BD (1) C 19- H 20 0.0794 1.31
 40. BD (1) C 13- C 16 45. BD (1) C 19- H 21 -0.1394 4.97
 40. BD (1) C 13- C 16 46. BD (1) C 19- N 22 0.0585 0.73
 41. BD (1) C 16- H 17 44. BD (1) C 19- H 20 -0.1125 4.71
 41. BD (1) C 16- H 17 45. BD (1) C 19- H 21 0.0765 1.31
 41. BD (1) C 16- H 17 46. BD (1) C 19- N 22 0.0681 0.90
 42. BD (1) C 16- H 18 44. BD (1) C 19- H 20 0.0781 1.08
 42. BD (1) C 16- H 18 45. BD (1) C 19- H 21 0.0842 1.83
 42. BD (1) C 16- H 18 46. BD (1) C 19- N 22 -0.1300 4.47
 43. BD (1) C 16- C 19 47. BD (1) N 22- H 23 -0.1225 4.57
 43. BD (1) C 16- C 19 48. BD (1) N 22- H 24 0.0521 0.67
 44. BD (1) C 19- H 20 48. BD (1) N 22- H 24 0.0760 1.29
 45. BD (1) C 19- H 21 47. BD (1) N 22- H 23 0.0955 2.64
 45. BD (1) C 19- H 21 48. BD (1) N 22- H 24 -0.1123 5.26
 sum within unit 1: 294.96

Total disjoint NLMO steric exchange energy from pairwise sum: 294.96

Conformer 8

Standard orientation:

Center Atomic Atomic Coordinates (Angstroms)

Number Number Type X Y Z

1	6	0	-0.592068	-0.081419	0.241771
2	6	0	-1.035057	1.370446	-0.045926
3	8	0	-1.194200	2.216191	0.792661
4	8	0	-1.186260	1.608037	-1.371346
5	1	0	-1.450671	2.535064	-1.474977
6	7	0	-0.623175	-0.395449	1.657331
7	1	0	-0.141527	0.327298	2.180228
8	1	0	-1.580893	-0.402551	1.994131
9	6	0	-1.553383	-1.022218	-0.500024
10	1	0	-1.613562	-0.811400	-1.566906
11	9	0	-1.187049	-2.325594	-0.337861
12	9	0	-2.820382	-0.892541	0.027453
13	6	0	0.831663	-0.286319	-0.330041
14	1	0	0.799896	-0.156573	-1.416664
15	1	0	1.091200	-1.325517	-0.121727
16	6	0	1.887881	0.648265	0.260315
17	1	0	1.929716	0.526123	1.348319
18	1	0	1.618722	1.693933	0.069323
19	6	0	3.292812	0.396029	-0.314553
20	1	0	3.267528	0.523589	-1.402296
21	1	0	3.970061	1.165396	0.067903
22	7	0	3.896261	-0.905689	-0.034044
23	1	0	3.947502	-1.081467	0.964241
24	1	0	3.369892	-1.665246	-0.450674

E [DLPNO-CCSD(T)/CBS] = -694.8685829

Pairwise steric exchange energies $dE(i,j)$ (kcal/mol) and associated pre-NLMO overlaps $S(i,j)$ for disjoint (no common atoms) interactions between NLMOs i,j :

Threshold for printing: 0.50 kcal/mol

NLMO (i) NLMO (j) $S(i,j)$ kcal/mol

```
=====
within unit 1
13. LP ( 1) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.0512 0.78
13. LP ( 1) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.0451 0.80
14. LP ( 2) O 3 15. LP ( 1) O 4 -0.0163 -0.56
14. LP ( 2) O 3 17. LP ( 1) N 6 -0.0647 0.60
14. LP ( 2) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.1655 11.60
14. LP ( 2) O 3 26. BD ( 1) C 1- N 6 0.1265 1.55
14. LP ( 2) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.2082 13.41
14. LP ( 2) O 3 32. BD ( 1) O 4- H 5 -0.1367 2.27
14. LP ( 2) O 3 33. BD ( 1) N 6- H 7 0.0891 1.14
15. LP ( 1) O 4 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.1106 3.41
15. LP ( 1) O 4 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.1264 4.47
15. LP ( 1) O 4 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0919 1.57
15. LP ( 1) O 4 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0704 0.82
16. LP ( 2) O 4 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.0697 0.94
16. LP ( 2) O 4 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0902 1.48
16. LP ( 2) O 4 30. BD ( 2) C 2- O 3 0.1952 13.98
16. LP ( 2) O 4 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0560 0.55
17. LP ( 1) N 6 19. LP ( 2) F 11 -0.0539 0.58
17. LP ( 1) N 6 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.1949 10.85
17. LP ( 1) N 6 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0622 0.69
17. LP ( 1) N 6 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.1132 3.07
17. LP ( 1) N 6 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.0810 0.76
17. LP ( 1) N 6 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.1197 1.22
18. LP ( 1) F 11 23. LP ( 3) F 12 -0.0600 -0.63
19. LP ( 2) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1495 7.79
19. LP ( 2) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1170 7.63
20. LP ( 3) F 11 21. LP ( 1) F 12 -0.0603 -0.65
20. LP ( 3) F 11 23. LP ( 3) F 12 0.0573 1.73
20. LP ( 3) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0721 1.84
20. LP ( 3) F 11 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0809 0.81
20. LP ( 3) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0531 1.39
20. LP ( 3) F 11 37. BD ( 1) C 9- F 12 -0.1446 7.15
20. LP ( 3) F 11 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0634 0.91
22. LP ( 2) F 12 26. BD ( 1) C 1- N 6 -0.0802 0.52
22. LP ( 2) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1542 8.30
22. LP ( 2) F 12 34. BD ( 1) N 6- H 8 -0.0765 1.10
22. LP ( 2) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1103 6.68
23. LP ( 3) F 12 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.0811 0.96
23. LP ( 3) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0702 1.70
23. LP ( 3) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0623 1.83
23. LP ( 3) F 12 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1411 6.71
24. LP ( 1) N 22 39. BD ( 1) C 13- H 15 -0.0827 0.71
24. LP ( 1) N 22 41. BD ( 1) C 16- H 17 -0.0975 0.58
24. LP ( 1) N 22 43. BD ( 1) C 16- C 19 -0.2268 12.02
24. LP ( 1) N 22 44. BD ( 1) C 19- H 20 0.0510 1.12
24. LP ( 1) N 22 45. BD ( 1) C 19- H 21 0.0744 2.09
25. BD ( 1) C 1- C 2 32. BD ( 1) O 4- H 5 -0.0925 3.79
25. BD ( 1) C 1- C 2 33. BD ( 1) N 6- H 7 0.0886 1.61
25. BD ( 1) C 1- C 2 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0913 1.36
25. BD ( 1) C 1- C 2 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1142 3.39
25. BD ( 1) C 1- C 2 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0847 0.98
25. BD ( 1) C 1- C 2 39. BD ( 1) C 13- H 15 -0.1312 4.86
25. BD ( 1) C 1- C 2 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0849 1.39
25. BD ( 1) C 1- C 2 42. BD ( 1) C 16- H 18 0.0652 0.54
26. BD ( 1) C 1- N 6 29. BD ( 1) C 2- O 3 0.0653 1.01
26. BD ( 1) C 1- N 6 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.1098 2.54
26. BD ( 1) C 1- N 6 35. BD ( 1) C 9- H 10 -0.1126 3.44
26. BD ( 1) C 1- N 6 37. BD ( 1) C 9- F 12 0.0579 0.69
26. BD ( 1) C 1- N 6 38. BD ( 1) C 13- H 14 -0.1334 4.53
26. BD ( 1) C 1- N 6 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0760 1.15
26. BD ( 1) C 1- N 6 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0576 0.74
27. BD ( 1) C 1- C 9 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.0759 1.06
27. BD ( 1) C 1- C 9 30. BD ( 2) C 2- O 3 -0.1000 2.25
27. BD ( 1) C 1- C 9 31. BD ( 1) C 2- O 4 0.0675 0.81
27. BD ( 1) C 1- C 9 33. BD ( 1) N 6- H 7 -0.1381 6.12
27. BD ( 1) C 1- C 9 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.1018 2.54
27. BD ( 1) C 1- C 9 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0962 2.00
27. BD ( 1) C 1- C 9 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0864 1.71
```

27. BD (1) C 1- C 9 40. BD (1) C 13- C 16 -0.1501 4.79
 28. BD (1) C 1- C 13 30. BD (2) C 2- O 3 0.1252 3.48
 28. BD (1) C 1- C 13 33. BD (1) N 6- H 7 0.0653 0.99
 28. BD (1) C 1- C 13 34. BD (1) N 6- H 8 -0.1299 5.37
 28. BD (1) C 1- C 13 35. BD (1) C 9- H 10 0.0666 0.96
 28. BD (1) C 1- C 13 36. BD (1) C 9- F 11 0.0522 0.61
 28. BD (1) C 1- C 13 37. BD (1) C 9- F 12 -0.1154 3.48
 28. BD (1) C 1- C 13 41. BD (1) C 16- H 17 0.0745 1.21
 28. BD (1) C 1- C 13 42. BD (1) C 16- H 18 0.0790 1.32
 28. BD (1) C 1- C 13 43. BD (1) C 16- C 19 -0.1491 4.45
 29. BD (1) C 2- O 3 32. BD (1) O 4- H 5 0.0790 1.88
 30. BD (2) C 2- O 3 42. BD (1) C 16- H 18 0.0804 1.11
 33. BD (1) N 6- H 7 41. BD (1) C 16- H 17 0.0680 1.10
 35. BD (1) C 9- H 10 38. BD (1) C 13- H 14 0.0788 0.86
 38. BD (1) C 13- H 14 41. BD (1) C 16- H 17 -0.1206 5.15
 38. BD (1) C 13- H 14 42. BD (1) C 16- H 18 0.0793 1.10
 38. BD (1) C 13- H 14 43. BD (1) C 16- C 19 0.0787 1.44
 38. BD (1) C 13- H 14 44. BD (1) C 19- H 20 0.0768 0.76
 39. BD (1) C 13- H 15 41. BD (1) C 16- H 17 0.0808 1.13
 39. BD (1) C 13- H 15 42. BD (1) C 16- H 18 -0.1266 5.48
 39. BD (1) C 13- H 15 43. BD (1) C 16- C 19 0.0763 1.37
 39. BD (1) C 13- H 15 48. BD (1) N 22- H 24 0.0513 0.70
 40. BD (1) C 13- C 16 44. BD (1) C 19- H 20 0.0817 1.38
 40. BD (1) C 13- C 16 45. BD (1) C 19- H 21 -0.1325 4.62
 40. BD (1) C 13- C 16 46. BD (1) C 19- N 22 0.0503 0.50
 41. BD (1) C 16- H 17 44. BD (1) C 19- H 20 -0.1109 4.65
 41. BD (1) C 16- H 17 45. BD (1) C 19- H 21 0.0794 1.27
 41. BD (1) C 16- H 17 46. BD (1) C 19- N 22 0.0665 0.80
 42. BD (1) C 16- H 18 44. BD (1) C 19- H 20 0.0747 1.01
 42. BD (1) C 16- H 18 45. BD (1) C 19- H 21 0.0924 2.08
 42. BD (1) C 16- H 18 46. BD (1) C 19- N 22 -0.1213 3.90
 43. BD (1) C 16- C 19 47. BD (1) N 22- H 23 0.0594 0.87
 43. BD (1) C 16- C 19 48. BD (1) N 22- H 24 0.0488 0.51
 44. BD (1) C 19- H 20 47. BD (1) N 22- H 23 -0.1065 5.02
 44. BD (1) C 19- H 20 48. BD (1) N 22- H 24 0.0863 1.74
 45. BD (1) C 19- H 21 47. BD (1) N 22- H 23 0.0734 1.20
 45. BD (1) C 19- H 21 48. BD (1) N 22- H 24 -0.1098 5.13
 sum within unit 1: 294.02

Total disjoint NLMO steric exchange energy from pairwise sum: 294.02

Conformer 9

Standard orientation:

Center Atomic Atomic Coordinates (Angstroms)

Number Number Type X Y Z

1	6	0	-0.650356	-0.087244	0.298889
2	6	0	-0.692904	1.410583	-0.078969
3	8	0	-0.804015	2.312442	0.707065
4	8	0	-0.546269	1.608926	-1.411977
5	1	0	-0.575972	2.564983	-1.570369
6	7	0	-0.998684	-0.314702	1.687504
7	1	0	-0.452873	0.295892	2.284874
8	1	0	-1.973015	-0.079986	1.849171
9	6	0	-1.658158	-0.824672	-0.595939
10	1	0	-1.481907	-0.659162	-1.657995
11	9	0	-1.635479	-2.166699	-0.359022
12	9	0	-2.933240	-0.386899	-0.307498
13	6	0	0.766019	-0.631521	-0.006143
14	1	0	0.948701	-0.534775	-1.080194
15	1	0	0.749714	-1.695685	0.239148
16	6	0	1.885156	0.059387	0.773543
17	1	0	1.720459	-0.071658	1.848373
18	1	0	1.878165	1.139327	0.581197
19	6	0	3.279332	-0.494645	0.432232
20	1	0	4.010392	-0.040841	1.107693
21	1	0	3.301243	-1.570504	0.634684
22	7	0	3.753761	-0.290430	-0.935980
23	1	0	3.750779	0.692855	-1.186992
24	1	0	3.184965	-0.784406	-1.613967

E [DLPNO-CCSD(T)/CBS] = -694.868559

Pairwise steric exchange energies $dE(i,j)$ (kcal/mol) and associated pre-NLMO overlaps $S(i,j)$ for disjoint (no common atoms) interactions between NLMOs i,j :

Threshold for printing: 0.50 kcal/mol

NLMO (i) NLMO (j) $S(i,j)$ kcal/mol

```
=====
within unit 1
13. LP ( 1) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.0513 0.79
13. LP ( 1) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.0454 0.80
14. LP ( 2) O 3 15. LP ( 1) O 4 -0.0165 -0.57
14. LP ( 2) O 3 17. LP ( 1) N 6 -0.0656 0.60
14. LP ( 2) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.1648 11.55
14. LP ( 2) O 3 26. BD ( 1) C 1- N 6 0.1261 1.55
14. LP ( 2) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.2083 13.42
14. LP ( 2) O 3 32. BD ( 1) O 4- H 5 -0.1367 2.28
14. LP ( 2) O 3 33. BD ( 1) N 6- H 7 0.0871 1.09
15. LP ( 1) O 4 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.1108 3.41
15. LP ( 1) O 4 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.1263 4.47
15. LP ( 1) O 4 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0916 1.55
15. LP ( 1) O 4 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0724 0.88
16. LP ( 2) O 4 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.0704 0.96
16. LP ( 2) O 4 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0890 1.45
16. LP ( 2) O 4 30. BD ( 2) C 2- O 3 0.1952 13.97
16. LP ( 2) O 4 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0582 0.59
17. LP ( 1) N 6 19. LP ( 2) F 11 -0.0542 0.59
17. LP ( 1) N 6 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.1952 10.90
17. LP ( 1) N 6 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0651 0.77
17. LP ( 1) N 6 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.1109 2.96
17. LP ( 1) N 6 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.0812 0.77
17. LP ( 1) N 6 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.1174 1.16
18. LP ( 1) F 11 23. LP ( 3) F 12 -0.0599 -0.63
19. LP ( 2) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1494 7.78
19. LP ( 2) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1170 7.64
20. LP ( 3) F 11 21. LP ( 1) F 12 -0.0603 -0.65
20. LP ( 3) F 11 23. LP ( 3) F 12 0.0573 1.73
20. LP ( 3) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0718 1.83
20. LP ( 3) F 11 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0802 0.80
20. LP ( 3) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0535 1.40
20. LP ( 3) F 11 37. BD ( 1) C 9- F 12 -0.1445 7.15
20. LP ( 3) F 11 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0636 0.91
22. LP ( 2) F 12 26. BD ( 1) C 1- N 6 -0.0804 0.52
22. LP ( 2) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1545 8.32
22. LP ( 2) F 12 34. BD ( 1) N 6- H 8 -0.0760 1.08
22. LP ( 2) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1103 6.67
23. LP ( 3) F 12 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.0810 0.96
23. LP ( 3) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0703 1.69
23. LP ( 3) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0623 1.84
23. LP ( 3) F 12 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1409 6.70
24. LP ( 1) N 22 38. BD ( 1) C 13- H 14 -0.0864 0.76
24. LP ( 1) N 22 42. BD ( 1) C 16- H 18 -0.0996 0.60
24. LP ( 1) N 22 43. BD ( 1) C 16- C 19 -0.2265 12.02
24. LP ( 1) N 22 44. BD ( 1) C 19- H 20 0.0749 2.16
24. LP ( 1) N 22 45. BD ( 1) C 19- H 21 0.0485 1.05
25. BD ( 1) C 1- C 2 32. BD ( 1) O 4- H 5 -0.0921 3.77
25. BD ( 1) C 1- C 2 33. BD ( 1) N 6- H 7 0.0869 1.53
25. BD ( 1) C 1- C 2 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.0568 0.51
25. BD ( 1) C 1- C 2 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0916 1.37
25. BD ( 1) C 1- C 2 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1138 3.38
25. BD ( 1) C 1- C 2 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0879 1.07
25. BD ( 1) C 1- C 2 39. BD ( 1) C 13- H 15 -0.1303 4.82
25. BD ( 1) C 1- C 2 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0844 1.35
25. BD ( 1) C 1- C 2 42. BD ( 1) C 16- H 18 0.0693 0.61
26. BD ( 1) C 1- N 6 29. BD ( 1) C 2- O 3 0.0651 1.00
26. BD ( 1) C 1- N 6 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.1098 2.54
26. BD ( 1) C 1- N 6 35. BD ( 1) C 9- H 10 -0.1125 3.44
26. BD ( 1) C 1- N 6 37. BD ( 1) C 9- F 12 0.0578 0.69
26. BD ( 1) C 1- N 6 38. BD ( 1) C 13- H 14 -0.1341 4.55
26. BD ( 1) C 1- N 6 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0737 1.07
26. BD ( 1) C 1- N 6 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0594 0.79
27. BD ( 1) C 1- C 9 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.0755 1.04
27. BD ( 1) C 1- C 9 30. BD ( 2) C 2- O 3 -0.1005 2.28
27. BD ( 1) C 1- C 9 31. BD ( 1) C 2- O 4 0.0671 0.80
27. BD ( 1) C 1- C 9 33. BD ( 1) N 6- H 7 -0.1383 6.14
27. BD ( 1) C 1- C 9 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.1003 2.46
27. BD ( 1) C 1- C 9 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0953 1.96
```

27. BD (1) C 1- C 9 39. BD (1) C 13- H 15 0.0870 1.73
 27. BD (1) C 1- C 9 40. BD (1) C 13- C 16 -0.1505 4.81
 28. BD (1) C 1- C 13 30. BD (2) C 2- O 3 0.1246 3.45
 28. BD (1) C 1- C 13 33. BD (1) N 6- H 7 0.0672 1.05
 28. BD (1) C 1- C 13 34. BD (1) N 6- H 8 -0.1305 5.41
 28. BD (1) C 1- C 13 35. BD (1) C 9- H 10 0.0666 0.96
 28. BD (1) C 1- C 13 36. BD (1) C 9- F 11 0.0522 0.61
 28. BD (1) C 1- C 13 37. BD (1) C 9- F 12 -0.1155 3.49
 28. BD (1) C 1- C 13 41. BD (1) C 16- H 17 0.0708 1.08
 28. BD (1) C 1- C 13 42. BD (1) C 16- H 18 0.0821 1.45
 28. BD (1) C 1- C 13 43. BD (1) C 16- C 19 -0.1490 4.44
 29. BD (1) C 2- O 3 32. BD (1) O 4- H 5 0.0793 1.89
 30. BD (2) C 2- O 3 42. BD (1) C 16- H 18 0.0817 1.15
 33. BD (1) N 6- H 7 41. BD (1) C 16- H 17 0.0673 1.07
 35. BD (1) C 9- H 10 38. BD (1) C 13- H 14 0.0782 0.85
 38. BD (1) C 13- H 14 41. BD (1) C 16- H 17 -0.1248 5.36
 38. BD (1) C 13- H 14 42. BD (1) C 16- H 18 0.0749 0.91
 38. BD (1) C 13- H 14 43. BD (1) C 16- C 19 0.0826 1.58
 38. BD (1) C 13- H 14 48. BD (1) N 22- H 24 0.0520 0.72
 39. BD (1) C 13- H 15 41. BD (1) C 16- H 17 0.0848 1.34
 39. BD (1) C 13- H 15 42. BD (1) C 16- H 18 -0.1239 5.34
 39. BD (1) C 13- H 15 43. BD (1) C 16- C 19 0.0723 1.25
 39. BD (1) C 13- H 15 45. BD (1) C 19- H 21 0.0744 0.71
 40. BD (1) C 13- C 16 44. BD (1) C 19- H 20 -0.1324 4.61
 40. BD (1) C 13- C 16 45. BD (1) C 19- H 21 0.0818 1.36
 41. BD (1) C 16- H 17 44. BD (1) C 19- H 20 0.0936 2.12
 41. BD (1) C 16- H 17 45. BD (1) C 19- H 21 0.0743 1.00
 41. BD (1) C 16- H 17 46. BD (1) C 19- N 22 -0.1227 3.95
 42. BD (1) C 16- H 18 44. BD (1) C 19- H 20 0.0789 1.26
 42. BD (1) C 16- H 18 45. BD (1) C 19- H 21 -0.1095 4.56
 42. BD (1) C 16- H 18 46. BD (1) C 19- N 22 0.0659 0.79
 43. BD (1) C 16- C 19 47. BD (1) N 22- H 23 0.0601 0.89
 44. BD (1) C 19- H 20 47. BD (1) N 22- H 23 0.0720 1.15
 44. BD (1) C 19- H 20 48. BD (1) N 22- H 24 -0.1088 5.05
 45. BD (1) C 19- H 21 47. BD (1) N 22- H 23 -0.1063 5.00
 45. BD (1) C 19- H 21 48. BD (1) N 22- H 24 0.0874 1.80
 sum within unit 1: 293.99

Total disjoint NLMO steric exchange energy from pairwise sum: 293.99

Conformer **10**

Standard orientation:

Center Atomic Atomic Coordinates (Angstroms)

Number Number Type X Y Z

1	6	0	-0.685056	-0.091367	0.210232
2	6	0	-0.746746	1.362176	-0.312999
3	8	0	-0.830741	1.655813	-1.479456
4	8	0	-0.666365	2.281224	0.670892
5	1	0	-0.698030	3.153708	0.248721
6	7	0	-0.787954	-0.256581	1.647291
7	1	0	-1.680645	0.082882	1.988101
8	1	0	-0.063095	0.265860	2.122815
9	6	0	-1.871412	-0.809081	-0.455069
10	1	0	-1.905587	-0.647211	-1.531778
11	9	0	-1.837825	-2.148656	-0.212234
12	9	0	-3.048451	-0.331865	0.083078
13	6	0	0.626579	-0.717064	-0.318331
14	1	0	0.613730	-0.672344	-1.411404
15	1	0	0.612867	-1.768330	-0.024347
16	6	0	1.899770	-0.046444	0.201580
17	1	0	1.944695	-0.112997	1.294401
18	1	0	1.903728	1.019997	-0.054185
19	6	0	3.164844	-0.697195	-0.378149
20	1	0	3.165579	-1.764610	-0.134335
21	1	0	3.134969	-0.632586	-1.470868
22	7	0	4.437551	-0.134649	0.068925
23	1	0	4.541239	-0.212945	1.075425
24	1	0	4.508829	0.849414	-0.168727

E [DLPNO-CCSD(T)/CBS] = -694.8683005

Pairwise steric exchange energies $dE(i,j)$ (kcal/mol) and associated pre-NLMO overlaps $S(i,j)$ for disjoint (no common atoms) interactions between NLMOs i,j :

Threshold for printing: 0.50 kcal/mol

PNLMO $dE(i,j)$

NLMO (i) NLMO (j) $S(i,j)$ kcal/mol

=====

within unit 1

```

13. LP ( 1) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.0434 0.68
13. LP ( 1) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.0422 0.73
14. LP ( 2) O 3 15. LP ( 1) O 4 -0.0171 -0.60
14. LP ( 2) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.1734 11.91
14. LP ( 2) O 3 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.1207 0.87
14. LP ( 2) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.2057 13.27
14. LP ( 2) O 3 32. BD ( 1) O 4- H 5 -0.1372 2.32
14. LP ( 2) O 3 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1015 1.55
14. LP ( 2) O 3 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0807 0.79
15. LP ( 1) O 4 17. LP ( 1) N 6 -0.0760 1.34
15. LP ( 1) O 4 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.0947 2.96
15. LP ( 1) O 4 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.1296 4.59
15. LP ( 1) O 4 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.0719 0.92
16. LP ( 2) O 4 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.0611 0.64
16. LP ( 2) O 4 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0782 1.02
16. LP ( 2) O 4 30. BD ( 2) C 2- O 3 0.1967 14.33
16. LP ( 2) O 4 42. BD ( 1) C 16- H 18 0.0562 0.53
17. LP ( 1) N 6 19. LP ( 2) F 11 -0.0535 0.55
17. LP ( 1) N 6 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.2089 11.52
17. LP ( 1) N 6 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0785 1.32
17. LP ( 1) N 6 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0949 2.28
17. LP ( 1) N 6 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.1123 1.15
18. LP ( 1) F 11 23. LP ( 3) F 12 -0.0596 -0.62
19. LP ( 2) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1496 7.83
19. LP ( 2) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1167 7.63
20. LP ( 3) F 11 21. LP ( 1) F 12 -0.0604 -0.65
20. LP ( 3) F 11 23. LP ( 3) F 12 0.0573 1.73
20. LP ( 3) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0728 1.88
20. LP ( 3) F 11 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0814 0.85
20. LP ( 3) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0529 1.38
20. LP ( 3) F 11 37. BD ( 1) C 9- F 12 -0.1449 7.18
20. LP ( 3) F 11 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0633 0.92
22. LP ( 2) F 12 26. BD ( 1) C 1- N 6 -0.0828 0.60
22. LP ( 2) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1538 8.25
22. LP ( 2) F 12 33. BD ( 1) N 6- H 7 -0.0770 1.14
22. LP ( 2) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1100 6.66
23. LP ( 3) F 12 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.0806 0.95
23. LP ( 3) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0719 1.76
23. LP ( 3) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0622 1.80
23. LP ( 3) F 12 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1400 6.63
24. LP ( 1) N 22 41. BD ( 1) C 16- H 17 -0.0931 0.68
24. LP ( 1) N 22 42. BD ( 1) C 16- H 18 -0.0920 0.64
24. LP ( 1) N 22 43. BD ( 1) C 16- C 19 -0.2239 12.08
24. LP ( 1) N 22 44. BD ( 1) C 19- H 20 0.0633 1.54
24. LP ( 1) N 22 45. BD ( 1) C 19- H 21 0.0646 1.60
25. BD ( 1) C 1- C 2 32. BD ( 1) O 4- H 5 -0.1010 4.30
25. BD ( 1) C 1- C 2 33. BD ( 1) N 6- H 7 0.0617 0.63
25. BD ( 1) C 1- C 2 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.0710 0.88
25. BD ( 1) C 1- C 2 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0992 1.75
25. BD ( 1) C 1- C 2 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1111 3.29
25. BD ( 1) C 1- C 2 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0879 1.16
25. BD ( 1) C 1- C 2 39. BD ( 1) C 13- H 15 -0.1304 4.85
25. BD ( 1) C 1- C 2 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0825 1.33
25. BD ( 1) C 1- C 2 42. BD ( 1) C 16- H 18 0.0664 0.57
26. BD ( 1) C 1- N 6 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.1010 1.76
26. BD ( 1) C 1- N 6 31. BD ( 1) C 2- O 4 0.0819 1.38
26. BD ( 1) C 1- N 6 35. BD ( 1) C 9- H 10 -0.1108 3.33
26. BD ( 1) C 1- N 6 37. BD ( 1) C 9- F 12 0.0629 0.83
26. BD ( 1) C 1- N 6 38. BD ( 1) C 13- H 14 -0.1338 4.51
26. BD ( 1) C 1- N 6 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0731 1.03
26. BD ( 1) C 1- N 6 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0601 0.81
27. BD ( 1) C 1- C 9 29. BD ( 1) C 2- O 3 0.0576 0.74
27. BD ( 1) C 1- C 9 30. BD ( 2) C 2- O 3 -0.1008 2.42
27. BD ( 1) C 1- C 9 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.0783 1.51
27. BD ( 1) C 1- C 9 33. BD ( 1) N 6- H 7 0.0894 1.95
27. BD ( 1) C 1- C 9 34. BD ( 1) N 6- H 8 -0.1387 6.16
27. BD ( 1) C 1- C 9 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0959 1.98

```

27. BD (1) C 1- C 9 39. BD (1) C 13- H 15 0.0857 1.71
 27. BD (1) C 1- C 9 40. BD (1) C 13- C 16 -0.1490 4.76
 28. BD (1) C 1- C 13 30. BD (2) C 2- O 3 0.1344 4.16
 28. BD (1) C 1- C 13 33. BD (1) N 6- H 7 -0.1314 5.50
 28. BD (1) C 1- C 13 34. BD (1) N 6- H 8 0.0775 1.45
 28. BD (1) C 1- C 13 35. BD (1) C 9- H 10 0.0609 0.78
 28. BD (1) C 1- C 13 36. BD (1) C 9- F 11 0.0559 0.71
 28. BD (1) C 1- C 13 37. BD (1) C 9- F 12 -0.1159 3.49
 28. BD (1) C 1- C 13 41. BD (1) C 16- H 17 0.0675 1.02
 28. BD (1) C 1- C 13 42. BD (1) C 16- H 18 0.0797 1.39
 28. BD (1) C 1- C 13 43. BD (1) C 16- C 19 -0.1459 4.30
 29. BD (1) C 2- O 3 32. BD (1) O 4- H 5 0.0813 2.05
 30. BD (2) C 2- O 3 38. BD (1) C 13- H 14 0.0642 0.62
 30. BD (2) C 2- O 3 42. BD (1) C 16- H 18 0.0726 0.75
 34. BD (1) N 6- H 8 41. BD (1) C 16- H 17 0.0703 1.19
 35. BD (1) C 9- H 10 38. BD (1) C 13- H 14 0.0756 0.77
 38. BD (1) C 13- H 14 41. BD (1) C 16- H 17 -0.1239 5.29
 38. BD (1) C 13- H 14 42. BD (1) C 16- H 18 0.0723 0.90
 38. BD (1) C 13- H 14 43. BD (1) C 16- C 19 0.0857 1.63
 38. BD (1) C 13- H 14 45. BD (1) C 19- H 21 0.0744 0.81
 39. BD (1) C 13- H 15 41. BD (1) C 16- H 17 0.0804 1.20
 39. BD (1) C 13- H 15 42. BD (1) C 16- H 18 -0.1265 5.45
 39. BD (1) C 13- H 15 43. BD (1) C 16- C 19 0.0752 1.29
 39. BD (1) C 13- H 15 44. BD (1) C 19- H 20 0.0712 0.74
 40. BD (1) C 13- C 16 44. BD (1) C 19- H 20 0.0762 1.25
 40. BD (1) C 13- C 16 45. BD (1) C 19- H 21 0.0745 1.21
 40. BD (1) C 13- C 16 46. BD (1) C 19- N 22 -0.1288 3.43
 41. BD (1) C 16- H 17 44. BD (1) C 19- H 20 0.0807 1.17
 41. BD (1) C 16- H 17 45. BD (1) C 19- H 21 -0.1142 4.80
 41. BD (1) C 16- H 17 46. BD (1) C 19- N 22 0.0666 0.90
 42. BD (1) C 16- H 18 44. BD (1) C 19- H 20 -0.1146 4.80
 42. BD (1) C 16- H 18 45. BD (1) C 19- H 21 0.0825 1.25
 42. BD (1) C 16- H 18 46. BD (1) C 19- N 22 0.0642 0.84
 43. BD (1) C 16- C 19 47. BD (1) N 22- H 23 0.0534 0.69
 43. BD (1) C 16- C 19 48. BD (1) N 22- H 24 0.0543 0.72
 44. BD (1) C 19- H 20 47. BD (1) N 22- H 23 0.0776 1.42
 44. BD (1) C 19- H 20 48. BD (1) N 22- H 24 -0.1093 5.16
 45. BD (1) C 19- H 21 47. BD (1) N 22- H 23 -0.1088 5.13
 45. BD (1) C 19- H 21 48. BD (1) N 22- H 24 0.0767 1.37
 sum within unit 1: 293.84

Total disjoint NLMO steric exchange energy from pairwise sum: 293.84

Conformer 11

Standard orientation:

Center Atomic Atomic Coordinates (Angstroms)

Number Number Type X Y Z

1	6	0	-0.596239	-0.074929	0.208436
2	6	0	-1.043148	1.320003	-0.285649
3	8	0	-1.205548	1.603410	-1.446327
4	8	0	-1.206424	2.207404	0.716584
5	1	0	-1.467011	3.049446	0.312163
6	7	0	-0.656726	-0.294348	1.640918
7	1	0	-1.609440	-0.215092	1.979187
8	1	0	-0.101992	0.393764	2.134138
9	6	0	-1.543495	-1.069723	-0.483087
10	1	0	-1.617427	-0.897521	-1.556156
11	9	0	-1.149575	-2.356450	-0.270152
12	9	0	-2.806633	-0.941472	0.055220
13	6	0	0.837527	-0.315884	-0.318713
14	1	0	0.818817	-0.260375	-1.411675
15	1	0	1.098200	-1.336535	-0.034682
16	6	0	1.880802	0.665494	0.216894
17	1	0	1.917862	0.619461	1.311408
18	1	0	1.605078	1.692672	-0.050244
19	6	0	3.292788	0.388240	-0.329299
20	1	0	3.274625	0.447365	-1.422744
21	1	0	3.961437	1.185229	0.009377
22	7	0	3.902348	-0.888797	0.037002
23	1	0	3.388028	-1.676811	-0.339793
24	1	0	3.944697	-1.004016	1.044434

E [DLPNO-CCSD(T)/CBS] = -694.8679437

Pairwise steric exchange energies $dE(i,j)$ (kcal/mol) and associated pre-NLMO overlaps $S(i,j)$ for disjoint (no common atoms) interactions between NLMOs i,j :

Threshold for printing: 0.50 kcal/mol

NLMO (i) NLMO (j) $S(i,j)$ kcal/mol

```
=====
within unit 1
13. LP ( 1) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.0434 0.68
13. LP ( 1) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.0422 0.73
14. LP ( 2) O 3 15. LP ( 1) O 4 -0.0171 -0.59
14. LP ( 2) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.1736 11.93
14. LP ( 2) O 3 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.1213 0.89
14. LP ( 2) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.2055 13.24
14. LP ( 2) O 3 32. BD ( 1) O 4- H 5 -0.1370 2.31
14. LP ( 2) O 3 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1023 1.59
14. LP ( 2) O 3 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0800 0.76
15. LP ( 1) O 4 17. LP ( 1) N 6 -0.0757 1.33
15. LP ( 1) O 4 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.0950 2.96
15. LP ( 1) O 4 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.1296 4.59
15. LP ( 1) O 4 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.0723 0.93
16. LP ( 2) O 4 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.0606 0.63
16. LP ( 2) O 4 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0786 1.03
16. LP ( 2) O 4 30. BD ( 2) C 2- O 3 0.1967 14.32
16. LP ( 2) O 4 42. BD ( 1) C 16- H 18 0.0568 0.53
17. LP ( 1) N 6 19. LP ( 2) F 11 -0.0536 0.55
17. LP ( 1) N 6 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.2085 11.47
17. LP ( 1) N 6 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0787 1.32
17. LP ( 1) N 6 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0957 2.32
17. LP ( 1) N 6 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.1137 1.19
18. LP ( 1) F 11 23. LP ( 3) F 12 -0.0597 -0.62
19. LP ( 2) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1495 7.81
19. LP ( 2) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1168 7.63
20. LP ( 3) F 11 21. LP ( 1) F 12 -0.0603 -0.65
20. LP ( 3) F 11 23. LP ( 3) F 12 0.0573 1.73
20. LP ( 3) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0730 1.89
20. LP ( 3) F 11 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0821 0.85
20. LP ( 3) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0529 1.38
20. LP ( 3) F 11 37. BD ( 1) C 9- F 12 -0.1448 7.16
20. LP ( 3) F 11 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0638 0.93
22. LP ( 2) F 12 26. BD ( 1) C 1- N 6 -0.0828 0.61
22. LP ( 2) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1535 8.24
22. LP ( 2) F 12 33. BD ( 1) N 6- H 7 -0.0772 1.15
22. LP ( 2) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1101 6.67
23. LP ( 3) F 12 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.0804 0.94
23. LP ( 3) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0718 1.76
23. LP ( 3) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0621 1.79
23. LP ( 3) F 12 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1402 6.65
24. LP ( 1) N 22 39. BD ( 1) C 13- H 15 -0.0831 0.72
24. LP ( 1) N 22 41. BD ( 1) C 16- H 17 -0.0971 0.56
24. LP ( 1) N 22 43. BD ( 1) C 16- C 19 -0.2269 12.03
24. LP ( 1) N 22 44. BD ( 1) C 19- H 20 0.0501 1.10
24. LP ( 1) N 22 45. BD ( 1) C 19- H 21 0.0750 2.13
25. BD ( 1) C 1- C 2 32. BD ( 1) O 4- H 5 -0.1010 4.31
25. BD ( 1) C 1- C 2 33. BD ( 1) N 6- H 7 0.0617 0.63
25. BD ( 1) C 1- C 2 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.0711 0.89
25. BD ( 1) C 1- C 2 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0993 1.76
25. BD ( 1) C 1- C 2 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1113 3.29
25. BD ( 1) C 1- C 2 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0868 1.12
25. BD ( 1) C 1- C 2 39. BD ( 1) C 13- H 15 -0.1302 4.85
25. BD ( 1) C 1- C 2 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0826 1.35
25. BD ( 1) C 1- C 2 42. BD ( 1) C 16- H 18 0.0656 0.54
26. BD ( 1) C 1- N 6 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.1010 1.76
26. BD ( 1) C 1- N 6 31. BD ( 1) C 2- O 4 0.0818 1.36
26. BD ( 1) C 1- N 6 35. BD ( 1) C 9- H 10 -0.1107 3.32
26. BD ( 1) C 1- N 6 37. BD ( 1) C 9- F 12 0.0633 0.84
26. BD ( 1) C 1- N 6 38. BD ( 1) C 13- H 14 -0.1328 4.49
26. BD ( 1) C 1- N 6 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0756 1.10
26. BD ( 1) C 1- N 6 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0589 0.78
27. BD ( 1) C 1- C 9 29. BD ( 1) C 2- O 3 0.0585 0.77
27. BD ( 1) C 1- C 9 30. BD ( 2) C 2- O 3 -0.0999 2.38
27. BD ( 1) C 1- C 9 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.0790 1.53
27. BD ( 1) C 1- C 9 33. BD ( 1) N 6- H 7 0.0898 1.96
27. BD ( 1) C 1- C 9 34. BD ( 1) N 6- H 8 -0.1387 6.16
27. BD ( 1) C 1- C 9 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0971 2.03
27. BD ( 1) C 1- C 9 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0859 1.72
```

27. BD (1) C 1- C 9 40. BD (1) C 13- C 16 -0.1508 4.83
 28. BD (1) C 1- C 13 30. BD (2) C 2- O 3 0.1350 4.19
 28. BD (1) C 1- C 13 33. BD (1) N 6- H 7 -0.1306 5.46
 28. BD (1) C 1- C 13 34. BD (1) N 6- H 8 0.0777 1.46
 28. BD (1) C 1- C 13 35. BD (1) C 9- H 10 0.0616 0.78
 28. BD (1) C 1- C 13 36. BD (1) C 9- F 11 0.0568 0.73
 28. BD (1) C 1- C 13 37. BD (1) C 9- F 12 -0.1152 3.46
 28. BD (1) C 1- C 13 41. BD (1) C 16- H 17 0.0728 1.15
 28. BD (1) C 1- C 13 42. BD (1) C 16- H 18 0.0800 1.35
 28. BD (1) C 1- C 13 43. BD (1) C 16- C 19 -0.1489 4.44
 29. BD (1) C 2- O 3 32. BD (1) O 4- H 5 0.0812 2.04
 30. BD (2) C 2- O 3 38. BD (1) C 13- H 14 0.0644 0.61
 30. BD (2) C 2- O 3 42. BD (1) C 16- H 18 0.0730 0.76
 34. BD (1) N 6- H 8 41. BD (1) C 16- H 17 0.0726 1.25
 35. BD (1) C 9- H 10 38. BD (1) C 13- H 14 0.0761 0.79
 38. BD (1) C 13- H 14 41. BD (1) C 16- H 17 -0.1207 5.14
 38. BD (1) C 13- H 14 42. BD (1) C 16- H 18 0.0786 1.08
 38. BD (1) C 13- H 14 43. BD (1) C 16- C 19 0.0801 1.50
 38. BD (1) C 13- H 14 44. BD (1) C 19- H 20 0.0773 0.77
 39. BD (1) C 13- H 15 41. BD (1) C 16- H 17 0.0815 1.15
 39. BD (1) C 13- H 15 42. BD (1) C 16- H 18 -0.1264 5.47
 39. BD (1) C 13- H 15 43. BD (1) C 16- C 19 0.0751 1.33
 39. BD (1) C 13- H 15 47. BD (1) N 22- H 23 0.0507 0.69
 40. BD (1) C 13- C 16 44. BD (1) C 19- H 20 0.0811 1.36
 40. BD (1) C 13- C 16 45. BD (1) C 19- H 21 -0.1325 4.62
 40. BD (1) C 13- C 16 46. BD (1) C 19- N 22 0.0508 0.52
 41. BD (1) C 16- H 17 44. BD (1) C 19- H 20 -0.1110 4.64
 41. BD (1) C 16- H 17 45. BD (1) C 19- H 21 0.0803 1.30
 41. BD (1) C 16- H 17 46. BD (1) C 19- N 22 0.0659 0.78
 42. BD (1) C 16- H 18 44. BD (1) C 19- H 20 0.0754 1.04
 42. BD (1) C 16- H 18 45. BD (1) C 19- H 21 0.0915 2.04
 42. BD (1) C 16- H 18 46. BD (1) C 19- N 22 -0.1216 3.91
 43. BD (1) C 16- C 19 48. BD (1) N 22- H 24 0.0597 0.88
 44. BD (1) C 19- H 20 47. BD (1) N 22- H 23 0.0868 1.77
 44. BD (1) C 19- H 20 48. BD (1) N 22- H 24 -0.1062 5.01
 45. BD (1) C 19- H 21 47. BD (1) N 22- H 23 -0.1097 5.12
 45. BD (1) C 19- H 21 48. BD (1) N 22- H 24 0.0729 1.18
 sum within unit 1: 294.75

Total disjoint NLMO steric exchange energy from pairwise sum: 294.75

Conformer **12**

Standard orientation:

Center Atomic Atomic Coordinates (Angstroms)

Number Number Type X Y Z

1	6	0	-0.647270	-0.072578	0.272310
2	6	0	-0.678338	1.343438	-0.348483
3	8	0	-0.529550	1.566434	-1.524335
4	8	0	-0.861727	2.317368	0.565590
5	1	0	-0.854330	3.161526	0.088257
6	7	0	-1.021017	-0.165765	1.669850
7	1	0	-0.423435	0.416195	2.243150
8	1	0	-1.975890	0.144280	1.812159
9	6	0	-1.643166	-0.897056	-0.560760
10	1	0	-1.474340	-0.794984	-1.632221
11	9	0	-1.589561	-2.217335	-0.231202
12	9	0	-2.925176	-0.466201	-0.290772
13	6	0	0.772055	-0.642524	0.045985
14	1	0	0.962639	-0.651531	-1.030653
15	1	0	0.757549	-1.676238	0.397718
16	6	0	1.881670	0.132447	0.757587
17	1	0	1.721251	0.104606	1.841145
18	1	0	1.862887	1.187981	0.459112
19	6	0	3.283606	-0.433920	0.469287
20	1	0	4.008546	0.093388	1.096525
21	1	0	3.319489	-1.484419	0.776103
22	7	0	3.753266	-0.357622	-0.912769
23	1	0	3.726154	0.594788	-1.262270
24	1	0	3.195244	-0.929304	-1.536420

E [DLPNO-CCSD(T)/CBS] = -694.8679282

Pairwise steric exchange energies $dE(i,j)$ (kcal/mol) and associated pre-NLMO overlaps $S(i,j)$ for disjoint (no common atoms) interactions between NLMOs i,j :

Threshold for printing: 0.50 kcal/mol

NLMO (i) NLMO (j) $S(i,j)$ kcal/mol

```
=====
within unit 1
13. LP ( 1) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.0432 0.68
13. LP ( 1) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.0420 0.73
14. LP ( 2) O 3 15. LP ( 1) O 4 -0.0172 -0.60
14. LP ( 2) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.1734 11.91
14. LP ( 2) O 3 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.1195 0.83
14. LP ( 2) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.2056 13.25
14. LP ( 2) O 3 32. BD ( 1) O 4- H 5 -0.1371 2.32
14. LP ( 2) O 3 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1004 1.51
14. LP ( 2) O 3 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0842 0.87
15. LP ( 1) O 4 17. LP ( 1) N 6 -0.0763 1.35
15. LP ( 1) O 4 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.0946 2.96
15. LP ( 1) O 4 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.1300 4.61
15. LP ( 1) O 4 33. BD ( 1) N 6- H 7 0.0698 0.86
16. LP ( 2) O 4 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.0622 0.66
16. LP ( 2) O 4 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0771 1.00
16. LP ( 2) O 4 30. BD ( 2) C 2- O 3 0.1970 14.36
16. LP ( 2) O 4 42. BD ( 1) C 16- H 18 0.0572 0.54
17. LP ( 1) N 6 19. LP ( 2) F 11 -0.0537 0.55
17. LP ( 1) N 6 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.2090 11.53
17. LP ( 1) N 6 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0810 1.41
17. LP ( 1) N 6 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0933 2.22
17. LP ( 1) N 6 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.1117 1.14
18. LP ( 1) F 11 23. LP ( 3) F 12 -0.0595 -0.62
19. LP ( 2) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1494 7.82
19. LP ( 2) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1168 7.63
20. LP ( 3) F 11 21. LP ( 1) F 12 -0.0603 -0.65
20. LP ( 3) F 11 23. LP ( 3) F 12 0.0572 1.73
20. LP ( 3) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0727 1.88
20. LP ( 3) F 11 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0816 0.85
20. LP ( 3) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0531 1.39
20. LP ( 3) F 11 37. BD ( 1) C 9- F 12 -0.1447 7.17
20. LP ( 3) F 11 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0638 0.93
22. LP ( 2) F 12 26. BD ( 1) C 1- N 6 -0.0829 0.61
22. LP ( 2) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1539 8.27
22. LP ( 2) F 12 34. BD ( 1) N 6- H 8 -0.0766 1.12
22. LP ( 2) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1100 6.65
23. LP ( 3) F 12 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.0803 0.94
23. LP ( 3) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0718 1.75
23. LP ( 3) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0624 1.81
23. LP ( 3) F 12 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1400 6.63
24. LP ( 1) N 22 38. BD ( 1) C 13- H 14 -0.0878 0.78
24. LP ( 1) N 22 42. BD ( 1) C 16- H 18 -0.1001 0.59
24. LP ( 1) N 22 43. BD ( 1) C 16- C 19 -0.2266 12.00
24. LP ( 1) N 22 44. BD ( 1) C 19- H 20 0.0764 2.23
24. LP ( 1) N 22 45. BD ( 1) C 19- H 21 0.0469 0.99
25. BD ( 1) C 1- C 2 32. BD ( 1) O 4- H 5 -0.1010 4.31
25. BD ( 1) C 1- C 2 33. BD ( 1) N 6- H 7 0.0695 0.83
25. BD ( 1) C 1- C 2 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.0630 0.66
25. BD ( 1) C 1- C 2 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0997 1.77
25. BD ( 1) C 1- C 2 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1112 3.29
25. BD ( 1) C 1- C 2 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0897 1.21
25. BD ( 1) C 1- C 2 39. BD ( 1) C 13- H 15 -0.1292 4.80
25. BD ( 1) C 1- C 2 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0828 1.34
25. BD ( 1) C 1- C 2 42. BD ( 1) C 16- H 18 0.0703 0.63
26. BD ( 1) C 1- N 6 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.1015 1.78
26. BD ( 1) C 1- N 6 31. BD ( 1) C 2- O 4 0.0819 1.38
26. BD ( 1) C 1- N 6 35. BD ( 1) C 9- H 10 -0.1106 3.31
26. BD ( 1) C 1- N 6 37. BD ( 1) C 9- F 12 0.0629 0.83
26. BD ( 1) C 1- N 6 38. BD ( 1) C 13- H 14 -0.1332 4.50
26. BD ( 1) C 1- N 6 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0738 1.02
26. BD ( 1) C 1- N 6 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0601 0.81
27. BD ( 1) C 1- C 9 29. BD ( 1) C 2- O 3 0.0549 0.67
27. BD ( 1) C 1- C 9 30. BD ( 2) C 2- O 3 -0.1036 2.56
27. BD ( 1) C 1- C 9 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.0764 1.44
27. BD ( 1) C 1- C 9 33. BD ( 1) N 6- H 7 -0.1385 6.15
27. BD ( 1) C 1- C 9 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.0886 1.90
27. BD ( 1) C 1- C 9 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0967 2.02
27. BD ( 1) C 1- C 9 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0860 1.72
```

27. BD (1) C 1- C 9 40. BD (1) C 13- C 16 -0.1511 4.85
 28. BD (1) C 1- C 13 30. BD (2) C 2- O 3 0.1328 4.05
 28. BD (1) C 1- C 13 33. BD (1) N 6- H 7 0.0795 1.52
 28. BD (1) C 1- C 13 34. BD (1) N 6- H 8 -0.1312 5.50
 28. BD (1) C 1- C 13 35. BD (1) C 9- H 10 0.0619 0.79
 28. BD (1) C 1- C 13 36. BD (1) C 9- F 11 0.0566 0.73
 28. BD (1) C 1- C 13 37. BD (1) C 9- F 12 -0.1153 3.46
 28. BD (1) C 1- C 13 41. BD (1) C 16- H 17 0.0686 1.00
 28. BD (1) C 1- C 13 42. BD (1) C 16- H 18 0.0850 1.54
 28. BD (1) C 1- C 13 43. BD (1) C 16- C 19 -0.1489 4.44
 29. BD (1) C 2- O 3 32. BD (1) O 4- H 5 0.0812 2.05
 30. BD (2) C 2- O 3 35. BD (1) C 9- H 10 -0.0509 0.51
 30. BD (2) C 2- O 3 38. BD (1) C 13- H 14 0.0644 0.61
 30. BD (2) C 2- O 3 42. BD (1) C 16- H 18 0.0760 0.81
 33. BD (1) N 6- H 7 41. BD (1) C 16- H 17 0.0711 1.19
 35. BD (1) C 9- H 10 38. BD (1) C 13- H 14 0.0760 0.79
 38. BD (1) C 13- H 14 41. BD (1) C 16- H 17 -0.1246 5.35
 38. BD (1) C 13- H 14 42. BD (1) C 16- H 18 0.0741 0.87
 38. BD (1) C 13- H 14 43. BD (1) C 16- C 19 0.0848 1.68
 38. BD (1) C 13- H 14 48. BD (1) N 22- H 24 0.0525 0.73
 39. BD (1) C 13- H 15 41. BD (1) C 16- H 17 0.0863 1.39
 39. BD (1) C 13- H 15 42. BD (1) C 16- H 18 -0.1222 5.26
 39. BD (1) C 13- H 15 43. BD (1) C 16- C 19 0.0695 1.17
 39. BD (1) C 13- H 15 45. BD (1) C 19- H 21 0.0733 0.69
 40. BD (1) C 13- C 16 44. BD (1) C 19- H 20 -0.1322 4.61
 40. BD (1) C 13- C 16 45. BD (1) C 19- H 21 0.0815 1.34
 41. BD (1) C 16- H 17 44. BD (1) C 19- H 20 0.0940 2.13
 41. BD (1) C 16- H 17 45. BD (1) C 19- H 21 0.0745 1.01
 41. BD (1) C 16- H 17 46. BD (1) C 19- N 22 -0.1223 3.93
 42. BD (1) C 16- H 18 44. BD (1) C 19- H 20 0.0793 1.28
 42. BD (1) C 16- H 18 45. BD (1) C 19- H 21 -0.1100 4.58
 42. BD (1) C 16- H 18 46. BD (1) C 19- N 22 0.0662 0.80
 43. BD (1) C 16- C 19 47. BD (1) N 22- H 23 0.0614 0.93
 44. BD (1) C 19- H 20 47. BD (1) N 22- H 23 0.0713 1.10
 44. BD (1) C 19- H 20 48. BD (1) N 22- H 24 -0.1089 5.06
 45. BD (1) C 19- H 21 47. BD (1) N 22- H 23 -0.1065 5.02
 45. BD (1) C 19- H 21 48. BD (1) N 22- H 24 0.0882 1.85
 sum within unit 1: 294.94

Total disjoint NLMO steric exchange energy from pairwise sum: 294.94

Conformer 13

Standard orientation:

Center Atomic Atomic Coordinates (Angstroms)

Number Number Type X Y Z

1	6	0	-0.559151	-0.203915	0.205596
2	6	0	-0.000443	1.205903	-0.102031
3	8	0	0.351950	1.559998	-1.201761
4	8	0	0.036937	2.014535	0.972827
5	1	0	0.380155	2.871425	0.674852
6	7	0	-0.884087	-0.469665	1.591771
7	1	0	-0.060527	-0.409633	2.177042
8	1	0	-1.558386	0.200905	1.943134
9	6	0	-1.859030	-0.268695	-0.623389
10	1	0	-1.693029	-0.029814	-1.674069
11	9	0	-2.443278	-1.494097	-0.539867
12	9	0	-2.763174	0.642110	-0.118766
13	6	0	0.408823	-1.274732	-0.354749
14	1	0	0.642010	-1.016454	-1.390705
15	1	0	-0.146277	-2.213534	-0.367722
16	6	0	1.705848	-1.488110	0.434698
17	1	0	2.213778	-2.350800	-0.011401
18	1	0	1.469545	-1.788234	1.462149
19	6	0	2.696766	-0.310368	0.467785
20	1	0	2.257098	0.542624	0.994031
21	1	0	3.556322	-0.611159	1.075298
22	7	0	3.201668	0.171415	-0.814872
23	1	0	2.466889	0.577669	-1.383756
24	1	0	3.639448	-0.574129	-1.345425

E [DLPNO-CCSD(T)/CBS] = -694.8679292

Pairwise steric exchange energies $dE(i,j)$ (kcal/mol) and associated pre-NLMO overlaps $S(i,j)$ for disjoint (no common atoms) interactions between NLMOs i,j :

Threshold for printing: 0.50 kcal/mol

NLMO (i) NLMO (j) $S(i,j)$ kcal/mol

```
=====
within unit 1
13. LP ( 1) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.0427 0.69
13. LP ( 1) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.0412 0.72
13. LP ( 1) O 3 47. BD ( 1) N 22- H 23 0.0541 0.61
14. LP ( 2) O 3 15. LP ( 1) O 4 -0.0152 -0.53
14. LP ( 2) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.1741 11.94
14. LP ( 2) O 3 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.1236 1.00
14. LP ( 2) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.2049 13.14
14. LP ( 2) O 3 32. BD ( 1) O 4- H 5 -0.1366 2.33
14. LP ( 2) O 3 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0830 0.90
14. LP ( 2) O 3 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.1059 1.53
15. LP ( 1) O 4 17. LP ( 1) N 6 -0.0788 1.40
15. LP ( 1) O 4 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.0921 2.84
15. LP ( 1) O 4 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.1308 4.61
15. LP ( 1) O 4 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.0651 0.73
16. LP ( 2) O 4 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.0757 1.00
16. LP ( 2) O 4 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0635 0.71
16. LP ( 2) O 4 30. BD ( 2) C 2- O 3 -0.1934 13.96
16. LP ( 2) O 4 44. BD ( 1) C 19- H 20 0.0786 1.23
17. LP ( 1) N 6 19. LP ( 2) F 11 -0.0547 0.60
17. LP ( 1) N 6 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.2120 11.73
17. LP ( 1) N 6 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0857 1.62
17. LP ( 1) N 6 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0856 1.88
17. LP ( 1) N 6 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.0859 0.50
17. LP ( 1) N 6 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.1007 0.85
18. LP ( 1) F 11 23. LP ( 3) F 12 -0.0594 -0.62
19. LP ( 2) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1469 7.63
19. LP ( 2) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1183 7.79
20. LP ( 3) F 11 21. LP ( 1) F 12 -0.0606 -0.65
20. LP ( 3) F 11 23. LP ( 3) F 12 0.0575 1.75
20. LP ( 3) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0728 1.93
20. LP ( 3) F 11 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0826 0.83
20. LP ( 3) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0507 1.27
20. LP ( 3) F 11 37. BD ( 1) C 9- F 12 -0.1454 7.23
20. LP ( 3) F 11 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0757 1.32
22. LP ( 2) F 12 26. BD ( 1) C 1- N 6 -0.0811 0.55
22. LP ( 2) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1548 8.42
22. LP ( 2) F 12 34. BD ( 1) N 6- H 8 -0.0718 0.95
22. LP ( 2) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1096 6.57
23. LP ( 3) F 12 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.0818 1.00
23. LP ( 3) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0705 1.69
23. LP ( 3) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0635 1.90
23. LP ( 3) F 12 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1400 6.62
24. LP ( 1) N 22 38. BD ( 1) C 13- H 14 -0.0848 0.68
24. LP ( 1) N 22 43. BD ( 1) C 16- C 19 -0.2271 12.06
24. LP ( 1) N 22 44. BD ( 1) C 19- H 20 0.0528 1.16
24. LP ( 1) N 22 45. BD ( 1) C 19- H 21 0.0782 2.29
25. BD ( 1) C 1- C 2 32. BD ( 1) O 4- H 5 -0.1034 4.46
25. BD ( 1) C 1- C 2 33. BD ( 1) N 6- H 7 0.0634 0.70
25. BD ( 1) C 1- C 2 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.0684 0.79
25. BD ( 1) C 1- C 2 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0967 1.64
25. BD ( 1) C 1- C 2 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1096 3.20
25. BD ( 1) C 1- C 2 37. BD ( 1) C 9- F 12 0.0595 0.59
25. BD ( 1) C 1- C 2 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.1045 1.84
25. BD ( 1) C 1- C 2 39. BD ( 1) C 13- H 15 -0.1314 4.80
25. BD ( 1) C 1- C 2 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0544 0.55
26. BD ( 1) C 1- N 6 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.1024 1.78
26. BD ( 1) C 1- N 6 31. BD ( 1) C 2- O 4 0.0826 1.38
26. BD ( 1) C 1- N 6 35. BD ( 1) C 9- H 10 -0.1097 3.28
26. BD ( 1) C 1- N 6 37. BD ( 1) C 9- F 12 0.0587 0.71
26. BD ( 1) C 1- N 6 38. BD ( 1) C 13- H 14 -0.1324 4.39
26. BD ( 1) C 1- N 6 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0743 1.23
27. BD ( 1) C 1- C 9 30. BD ( 2) C 2- O 3 0.1355 4.26
27. BD ( 1) C 1- C 9 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.0510 0.68
27. BD ( 1) C 1- C 9 33. BD ( 1) N 6- H 7 -0.1388 6.22
27. BD ( 1) C 1- C 9 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.0853 1.76
27. BD ( 1) C 1- C 9 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0774 1.21
27. BD ( 1) C 1- C 9 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.1090 2.76
27. BD ( 1) C 1- C 9 40. BD ( 1) C 13- C 16 -0.1482 4.71
```

28. BD (1) C 1- C 13 29. BD (1) C 2- O 3 0.0639 1.10
 28. BD (1) C 1- C 13 30. BD (2) C 2- O 3 -0.0972 2.24
 28. BD (1) C 1- C 13 31. BD (1) C 2- O 4 -0.0722 1.11
 28. BD (1) C 1- C 13 33. BD (1) N 6- H 7 0.0809 1.62
 28. BD (1) C 1- C 13 34. BD (1) N 6- H 8 -0.1325 5.57
 28. BD (1) C 1- C 13 35. BD (1) C 9- H 10 0.0664 1.00
 28. BD (1) C 1- C 13 36. BD (1) C 9- F 11 0.0517 0.64
 28. BD (1) C 1- C 13 37. BD (1) C 9- F 12 -0.1156 3.39
 28. BD (1) C 1- C 13 41. BD (1) C 16- H 17 -0.1416 4.80
 28. BD (1) C 1- C 13 42. BD (1) C 16- H 18 0.0723 1.01
 28. BD (1) C 1- C 13 43. BD (1) C 16- C 19 0.0531 0.57
 29. BD (1) C 2- O 3 32. BD (1) O 4- H 5 0.0807 2.00
 30. BD (2) C 2- O 3 35. BD (1) C 9- H 10 0.0741 0.96
 30. BD (2) C 2- O 3 44. BD (1) C 19- H 20 -0.0805 0.95
 30. BD (2) C 2- O 3 47. BD (1) N 22- H 23 -0.0795 1.40
 33. BD (1) N 6- H 7 42. BD (1) C 16- H 18 0.0815 1.50
 35. BD (1) C 9- H 10 38. BD (1) C 13- H 14 0.0727 0.73
 38. BD (1) C 13- H 14 41. BD (1) C 16- H 17 0.0800 1.35
 38. BD (1) C 13- H 14 42. BD (1) C 16- H 18 -0.1243 5.26
 38. BD (1) C 13- H 14 43. BD (1) C 16- C 19 0.0702 1.03
 38. BD (1) C 13- H 14 47. BD (1) N 22- H 23 0.0481 0.54
 39. BD (1) C 13- H 15 41. BD (1) C 16- H 17 0.0912 2.31
 39. BD (1) C 13- H 15 42. BD (1) C 16- H 18 0.0754 1.23
 39. BD (1) C 13- H 15 43. BD (1) C 16- C 19 -0.1454 5.33
 40. BD (1) C 13- C 16 44. BD (1) C 19- H 20 0.0724 0.93
 40. BD (1) C 13- C 16 45. BD (1) C 19- H 21 -0.1312 4.49
 40. BD (1) C 13- C 16 46. BD (1) C 19- N 22 0.0518 0.54
 41. BD (1) C 16- H 17 44. BD (1) C 19- H 20 -0.1162 4.88
 41. BD (1) C 16- H 17 45. BD (1) C 19- H 21 0.0872 1.74
 41. BD (1) C 16- H 17 46. BD (1) C 19- N 22 0.0577 0.63
 42. BD (1) C 16- H 18 44. BD (1) C 19- H 20 0.0825 1.29
 42. BD (1) C 16- H 18 45. BD (1) C 19- H 21 0.0880 1.83
 42. BD (1) C 16- H 18 46. BD (1) C 19- N 22 -0.1233 3.97
 43. BD (1) C 16- C 19 48. BD (1) N 22- H 24 0.0609 0.88
 44. BD (1) C 19- H 20 47. BD (1) N 22- H 23 0.0885 1.82
 44. BD (1) C 19- H 20 48. BD (1) N 22- H 24 -0.1020 4.78
 45. BD (1) C 19- H 21 47. BD (1) N 22- H 23 -0.1082 5.01
 45. BD (1) C 19- H 21 48. BD (1) N 22- H 24 0.0724 1.18
 sum within unit 1: 298.47

Total disjoint NLMO steric exchange energy from pairwise sum: 298.47

Conformer **14**

Standard orientation:

Center Atomic Atomic Coordinates (Angstroms)

Number Number Type X Y Z

1	6	0	-0.835233	0.026865	0.420887
2	6	0	-0.975513	1.331164	-0.385722
3	8	0	-0.901497	1.429549	-1.584714
4	8	0	-1.150232	2.399603	0.425152
5	1	0	-1.194855	3.185477	-0.140229
6	7	0	-1.724598	-0.070997	1.568952
7	1	0	-1.556487	0.691482	2.214518
8	1	0	-2.697864	-0.038897	1.285651
9	6	0	-1.151695	-1.129308	-0.539937
10	1	0	-0.660734	-1.030192	-1.505147
11	9	0	-0.797452	-2.326993	0.011933
12	9	0	-2.508662	-1.174996	-0.765713
13	6	0	0.624964	-0.066344	0.926861
14	1	0	0.676154	-0.977332	1.526757
15	1	0	0.780073	0.775416	1.609925
16	6	0	1.721313	-0.068164	-0.141082
17	1	0	1.633397	0.809222	-0.790990
18	1	0	1.619232	-0.946635	-0.787485
19	6	0	3.122244	-0.084112	0.488813
20	1	0	3.238994	0.795271	1.131625
21	1	0	3.215932	-0.956110	1.144246
22	7	0	4.244404	-0.106257	-0.447568
23	1	0	4.219242	0.695748	-1.069158
24	1	0	4.220644	-0.938581	-1.027797

E [DLPNO-CCSD(T)/CBS] = -694.8677014

Pairwise steric exchange energies $dE(i,j)$ (kcal/mol) and associated pre-NLMO overlaps $S(i,j)$ for disjoint (no common atoms) interactions between NLMOs i,j :

Threshold for printing: 0.50 kcal/mol

NLMO (i) NLMO (j) $S(i,j)$ kcal/mol

```
=====
within unit 1
13. LP ( 1) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.0459 0.71
13. LP ( 1) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.0426 0.73
14. LP ( 2) O 3 15. LP ( 1) O 4 -0.0172 -0.60
14. LP ( 2) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.1721 11.85
14. LP ( 2) O 3 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.1413 1.76
14. LP ( 2) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.2072 13.53
14. LP ( 2) O 3 32. BD ( 1) O 4- H 5 -0.1369 2.27
14. LP ( 2) O 3 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1186 2.36
15. LP ( 1) O 4 17. LP ( 1) N 6 -0.0571 0.76
15. LP ( 1) O 4 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.0986 3.07
15. LP ( 1) O 4 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.1268 4.44
15. LP ( 1) O 4 33. BD ( 1) N 6- H 7 0.0769 1.09
16. LP ( 2) O 4 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0904 1.48
16. LP ( 2) O 4 30. BD ( 2) C 2- O 3 0.1924 13.76
16. LP ( 2) O 4 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0585 0.57
17. LP ( 1) N 6 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.2133 11.89
17. LP ( 1) N 6 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0818 1.47
17. LP ( 1) N 6 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0885 2.05
17. LP ( 1) N 6 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.1133 1.40
18. LP ( 1) F 11 23. LP ( 3) F 12 -0.0599 -0.64
19. LP ( 2) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1514 7.97
19. LP ( 2) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1163 7.51
20. LP ( 3) F 11 21. LP ( 1) F 12 -0.0589 -0.64
20. LP ( 3) F 11 23. LP ( 3) F 12 0.0559 1.69
20. LP ( 3) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0741 1.85
20. LP ( 3) F 11 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0872 0.95
20. LP ( 3) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0582 1.58
20. LP ( 3) F 11 37. BD ( 1) C 9- F 12 -0.1437 7.04
20. LP ( 3) F 11 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0633 0.78
22. LP ( 2) F 12 26. BD ( 1) C 1- N 6 -0.0855 0.74
22. LP ( 2) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1525 8.08
22. LP ( 2) F 12 34. BD ( 1) N 6- H 8 -0.0805 1.31
22. LP ( 2) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1118 6.89
23. LP ( 3) F 12 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.0742 0.72
23. LP ( 3) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0723 1.83
23. LP ( 3) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0578 1.57
23. LP ( 3) F 12 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1418 6.74
24. LP ( 1) N 22 41. BD ( 1) C 16- H 17 -0.0912 0.63
24. LP ( 1) N 22 42. BD ( 1) C 16- H 18 -0.0933 0.70
24. LP ( 1) N 22 43. BD ( 1) C 16- C 19 -0.2234 12.06
24. LP ( 1) N 22 44. BD ( 1) C 19- H 20 0.0679 1.73
24. LP ( 1) N 22 45. BD ( 1) C 19- H 21 0.0613 1.43
25. BD ( 1) C 1- C 2 32. BD ( 1) O 4- H 5 -0.1003 4.21
25. BD ( 1) C 1- C 2 33. BD ( 1) N 6- H 7 0.0651 0.69
25. BD ( 1) C 1- C 2 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.0688 0.84
25. BD ( 1) C 1- C 2 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1018 1.91
25. BD ( 1) C 1- C 2 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1097 3.28
25. BD ( 1) C 1- C 2 38. BD ( 1) C 13- H 14 -0.1300 4.74
25. BD ( 1) C 1- C 2 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0935 1.60
25. BD ( 1) C 1- C 2 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0718 0.87
26. BD ( 1) C 1- N 6 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.0793 0.99
26. BD ( 1) C 1- N 6 30. BD ( 2) C 2- O 3 -0.0816 1.31
26. BD ( 1) C 1- N 6 31. BD ( 1) C 2- O 4 0.0670 0.93
26. BD ( 1) C 1- N 6 35. BD ( 1) C 9- H 10 -0.1133 3.36
26. BD ( 1) C 1- N 6 37. BD ( 1) C 9- F 12 0.0711 1.12
26. BD ( 1) C 1- N 6 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0898 1.87
26. BD ( 1) C 1- N 6 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0802 1.48
26. BD ( 1) C 1- N 6 40. BD ( 1) C 13- C 16 -0.1391 4.03
27. BD ( 1) C 1- C 9 29. BD ( 1) C 2- O 3 0.0804 1.43
27. BD ( 1) C 1- C 9 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.1118 3.02
27. BD ( 1) C 1- C 9 33. BD ( 1) N 6- H 7 -0.1362 5.97
27. BD ( 1) C 1- C 9 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.0862 1.69
27. BD ( 1) C 1- C 9 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0717 1.10
27. BD ( 1) C 1- C 9 39. BD ( 1) C 13- H 15 -0.1402 5.13
27. BD ( 1) C 1- C 9 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0679 0.89
28. BD ( 1) C 1- C 13 30. BD ( 2) C 2- O 3 0.1370 4.19
28. BD ( 1) C 1- C 13 33. BD ( 1) N 6- H 7 0.0811 1.69
28. BD ( 1) C 1- C 13 34. BD ( 1) N 6- H 8 -0.1309 5.58
```

28. BD (1) C 1- C 13 36. BD (1) C 9- F 11 0.0660 1.02
 28. BD (1) C 1- C 13 37. BD (1) C 9- F 12 -0.1105 3.20
 28. BD (1) C 1- C 13 41. BD (1) C 16- H 17 0.0794 1.36
 28. BD (1) C 1- C 13 42. BD (1) C 16- H 18 0.0654 0.91
 28. BD (1) C 1- C 13 43. BD (1) C 16- C 19 -0.1439 4.21
 29. BD (1) C 2- O 3 32. BD (1) O 4- H 5 0.0814 2.00
 30. BD (2) C 2- O 3 41. BD (1) C 16- H 17 0.0891 1.47
 33. BD (1) N 6- H 7 39. BD (1) C 13- H 15 0.0771 0.77
 35. BD (1) C 9- H 10 42. BD (1) C 16- H 18 0.0633 0.94
 38. BD (1) C 13- H 14 41. BD (1) C 16- H 17 -0.1283 5.53
 38. BD (1) C 13- H 14 42. BD (1) C 16- H 18 0.0823 1.33
 38. BD (1) C 13- H 14 43. BD (1) C 16- C 19 0.0715 1.17
 38. BD (1) C 13- H 14 45. BD (1) C 19- H 21 0.0699 0.72
 39. BD (1) C 13- H 15 41. BD (1) C 16- H 17 0.0668 0.73
 39. BD (1) C 13- H 15 42. BD (1) C 16- H 18 -0.1262 5.42
 39. BD (1) C 13- H 15 43. BD (1) C 16- C 19 0.0875 1.74
 39. BD (1) C 13- H 15 44. BD (1) C 19- H 20 0.0780 0.89
 40. BD (1) C 13- C 16 44. BD (1) C 19- H 20 0.0750 1.22
 40. BD (1) C 13- C 16 45. BD (1) C 19- H 21 0.0761 1.26
 40. BD (1) C 13- C 16 46. BD (1) C 19- N 22 -0.1280 3.38
 41. BD (1) C 16- H 17 44. BD (1) C 19- H 20 0.0833 1.27
 41. BD (1) C 16- H 17 45. BD (1) C 19- H 21 -0.1144 4.79
 41. BD (1) C 16- H 17 46. BD (1) C 19- N 22 0.0650 0.86
 42. BD (1) C 16- H 18 44. BD (1) C 19- H 20 -0.1139 4.78
 42. BD (1) C 16- H 18 45. BD (1) C 19- H 21 0.0795 1.15
 42. BD (1) C 16- H 18 46. BD (1) C 19- N 22 0.0661 0.90
 43. BD (1) C 16- C 19 47. BD (1) N 22- H 23 0.0567 0.79
 43. BD (1) C 16- C 19 48. BD (1) N 22- H 24 0.0518 0.64
 44. BD (1) C 19- H 20 47. BD (1) N 22- H 23 0.0746 1.28
 44. BD (1) C 19- H 20 48. BD (1) N 22- H 24 -0.1089 5.13
 45. BD (1) C 19- H 21 47. BD (1) N 22- H 23 -0.1096 5.19
 45. BD (1) C 19- H 21 48. BD (1) N 22- H 24 0.0796 1.51
 sum within unit 1: 294.09

Total disjoint NLMO steric exchange energy from pairwise sum: 294.09

Conformer **15**

Standard orientation:

Center Atomic Atomic Coordinates (Angstroms)

Number Number Type X Y Z

1	6	0	0.708878	0.026928	0.415434
2	6	0	1.270619	-1.229901	-0.274388
3	8	0	1.489445	-1.349862	-1.453304
4	8	0	1.458876	-2.236296	0.609947
5	1	0	1.778737	-3.002595	0.110247
6	7	0	1.316004	0.325467	1.704997
7	1	0	2.309905	0.504673	1.611882
8	1	0	1.191749	-0.451335	2.343438
9	6	0	0.967681	1.210548	-0.529560
10	1	0	0.714402	0.995602	-1.564902
11	9	0	0.267912	2.312377	-0.126406
12	9	0	2.301987	1.543991	-0.487937
13	6	0	-0.809725	-0.180089	0.629725
14	1	0	-1.158648	0.722442	1.134278
15	1	0	-0.923216	-1.009698	1.335827
16	6	0	-1.644587	-0.460577	-0.620921
17	1	0	-1.270379	-1.350191	-1.139294
18	1	0	-1.558804	0.370687	-1.329723
19	6	0	-3.133561	-0.674389	-0.297235
20	1	0	-3.650761	-0.973533	-1.213564
21	1	0	-3.235661	-1.513365	0.399924
22	7	0	-3.856158	0.463742	0.268601
23	1	0	-3.800254	1.274924	-0.338852
24	1	0	-3.487486	0.734777	1.173171

E [DLPNO-CCSD(T)/CBS] = -694.8673379

Pairwise steric exchange energies $dE(i,j)$ (kcal/mol) and associated pre-NLMO overlaps $S(i,j)$ for disjoint (no common atoms) interactions between NLMOs i,j :

Threshold for printing: 0.50 kcal/mol

NLMO (i) NLMO (j) $S(i,j)$ kcal/mol

```
=====
within unit 1
13. LP ( 1) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.0463 0.72
13. LP ( 1) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.0428 0.74
14. LP ( 2) O 3 15. LP ( 1) O 4 -0.0172 -0.60
14. LP ( 2) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.1723 11.86
14. LP ( 2) O 3 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.1417 1.79
14. LP ( 2) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.2071 13.52
14. LP ( 2) O 3 32. BD ( 1) O 4- H 5 -0.1367 2.26
14. LP ( 2) O 3 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1185 2.36
15. LP ( 1) O 4 17. LP ( 1) N 6 -0.0550 0.70
15. LP ( 1) O 4 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.0990 3.08
15. LP ( 1) O 4 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.1267 4.43
15. LP ( 1) O 4 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.0769 1.08
16. LP ( 2) O 4 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0907 1.48
16. LP ( 2) O 4 30. BD ( 2) C 2- O 3 0.1925 13.77
16. LP ( 2) O 4 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0575 0.55
17. LP ( 1) N 6 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.2134 11.91
17. LP ( 1) N 6 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0798 1.39
17. LP ( 1) N 6 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0909 2.15
17. LP ( 1) N 6 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.1133 1.36
18. LP ( 1) F 11 23. LP ( 3) F 12 -0.0599 -0.64
19. LP ( 2) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1512 7.95
19. LP ( 2) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1166 7.52
20. LP ( 3) F 11 21. LP ( 1) F 12 -0.0589 -0.64
20. LP ( 3) F 11 23. LP ( 3) F 12 0.0559 1.69
20. LP ( 3) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0741 1.85
20. LP ( 3) F 11 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0874 0.95
20. LP ( 3) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0582 1.58
20. LP ( 3) F 11 37. BD ( 1) C 9- F 12 -0.1438 7.04
20. LP ( 3) F 11 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0667 0.86
22. LP ( 2) F 12 26. BD ( 1) C 1- N 6 -0.0856 0.74
22. LP ( 2) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1523 8.07
22. LP ( 2) F 12 33. BD ( 1) N 6- H 7 -0.0817 1.35
22. LP ( 2) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1120 6.91
23. LP ( 3) F 12 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.0737 0.70
23. LP ( 3) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0723 1.83
23. LP ( 3) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0576 1.56
23. LP ( 3) F 12 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1420 6.76
24. LP ( 1) N 22 38. BD ( 1) C 13- H 14 -0.0848 0.73
24. LP ( 1) N 22 42. BD ( 1) C 16- H 18 -0.0983 0.59
24. LP ( 1) N 22 43. BD ( 1) C 16- C 19 -0.2267 12.03
24. LP ( 1) N 22 44. BD ( 1) C 19- H 20 0.0738 2.06
24. LP ( 1) N 22 45. BD ( 1) C 19- H 21 0.0513 1.14
25. BD ( 1) C 1- C 2 32. BD ( 1) O 4- H 5 -0.1003 4.20
25. BD ( 1) C 1- C 2 33. BD ( 1) N 6- H 7 0.0679 0.81
25. BD ( 1) C 1- C 2 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.0670 0.74
25. BD ( 1) C 1- C 2 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1022 1.93
25. BD ( 1) C 1- C 2 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1098 3.28
25. BD ( 1) C 1- C 2 38. BD ( 1) C 13- H 14 -0.1309 4.82
25. BD ( 1) C 1- C 2 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0903 1.46
25. BD ( 1) C 1- C 2 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0741 0.96
26. BD ( 1) C 1- N 6 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.0779 0.95
26. BD ( 1) C 1- N 6 30. BD ( 2) C 2- O 3 -0.0842 1.40
26. BD ( 1) C 1- N 6 31. BD ( 1) C 2- O 4 0.0652 0.88
26. BD ( 1) C 1- N 6 35. BD ( 1) C 9- H 10 -0.1131 3.35
26. BD ( 1) C 1- N 6 37. BD ( 1) C 9- F 12 0.0718 1.14
26. BD ( 1) C 1- N 6 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0877 1.74
26. BD ( 1) C 1- N 6 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0840 1.63
26. BD ( 1) C 1- N 6 40. BD ( 1) C 13- C 16 -0.1410 4.08
27. BD ( 1) C 1- C 9 29. BD ( 1) C 2- O 3 0.0808 1.44
27. BD ( 1) C 1- C 9 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.1130 3.09
27. BD ( 1) C 1- C 9 33. BD ( 1) N 6- H 7 0.0878 1.76
27. BD ( 1) C 1- C 9 34. BD ( 1) N 6- H 8 -0.1360 5.96
27. BD ( 1) C 1- C 9 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0760 1.22
27. BD ( 1) C 1- C 9 39. BD ( 1) C 13- H 15 -0.1393 5.09
27. BD ( 1) C 1- C 9 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0647 0.80
28. BD ( 1) C 1- C 13 30. BD ( 2) C 2- O 3 0.1357 4.10
28. BD ( 1) C 1- C 13 33. BD ( 1) N 6- H 7 -0.1301 5.52
28. BD ( 1) C 1- C 13 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.0805 1.65
```

28. BD (1) C 1- C 13 36. BD (1) C 9- F 11 0.0672 1.05
 28. BD (1) C 1- C 13 37. BD (1) C 9- F 12 -0.1098 3.16
 28. BD (1) C 1- C 13 41. BD (1) C 16- H 17 0.0782 1.26
 28. BD (1) C 1- C 13 42. BD (1) C 16- H 18 0.0735 1.12
 28. BD (1) C 1- C 13 43. BD (1) C 16- C 19 -0.1473 4.37
 29. BD (1) C 2- O 3 32. BD (1) O 4- H 5 0.0813 1.99
 30. BD (2) C 2- O 3 41. BD (1) C 16- H 17 0.0884 1.41
 34. BD (1) N 6- H 8 39. BD (1) C 13- H 15 0.0786 0.81
 35. BD (1) C 9- H 10 42. BD (1) C 16- H 18 0.0658 1.01
 38. BD (1) C 13- H 14 41. BD (1) C 16- H 17 -0.1280 5.54
 38. BD (1) C 13- H 14 42. BD (1) C 16- H 18 0.0809 1.17
 38. BD (1) C 13- H 14 43. BD (1) C 16- C 19 0.0738 1.29
 38. BD (1) C 13- H 14 48. BD (1) N 22- H 24 0.0513 0.71
 39. BD (1) C 13- H 15 41. BD (1) C 16- H 17 0.0757 0.99
 39. BD (1) C 13- H 15 42. BD (1) C 16- H 18 -0.1228 5.29
 39. BD (1) C 13- H 15 43. BD (1) C 16- C 19 0.0792 1.50
 39. BD (1) C 13- H 15 45. BD (1) C 19- H 21 0.0797 0.82
 40. BD (1) C 13- C 16 44. BD (1) C 19- H 20 -0.1322 4.59
 40. BD (1) C 13- C 16 45. BD (1) C 19- H 21 0.0822 1.39
 40. BD (1) C 13- C 16 46. BD (1) C 19- N 22 0.0508 0.52
 41. BD (1) C 16- H 17 44. BD (1) C 19- H 20 0.0922 2.08
 41. BD (1) C 16- H 17 45. BD (1) C 19- H 21 0.0748 1.02
 41. BD (1) C 16- H 17 46. BD (1) C 19- N 22 -0.1212 3.89
 42. BD (1) C 16- H 18 44. BD (1) C 19- H 20 0.0791 1.27
 42. BD (1) C 16- H 18 45. BD (1) C 19- H 21 -0.1104 4.62
 42. BD (1) C 16- H 18 46. BD (1) C 19- N 22 0.0657 0.79
 43. BD (1) C 16- C 19 47. BD (1) N 22- H 23 0.0590 0.86
 43. BD (1) C 16- C 19 48. BD (1) N 22- H 24 0.0494 0.52
 44. BD (1) C 19- H 20 47. BD (1) N 22- H 23 0.0738 1.22
 44. BD (1) C 19- H 20 48. BD (1) N 22- H 24 -0.1100 5.14
 45. BD (1) C 19- H 21 47. BD (1) N 22- H 23 -0.1064 5.01
 45. BD (1) C 19- H 21 48. BD (1) N 22- H 24 0.0857 1.71
 sum within unit 1: 295.07

Total disjoint NLMO steric exchange energy from pairwise sum: 295.07

Conformer **16**

Standard orientation:

Center Atomic Atomic Coordinates (Angstroms)

Number Number Type X Y Z

1	6	0	-0.828372	0.003378	0.461656
2	6	0	-0.998549	1.414214	-0.140866
3	8	0	-1.244406	2.390503	0.518104
4	8	0	-0.805426	1.464104	-1.479121
5	1	0	-0.919805	2.386455	-1.756685
6	7	0	-1.692885	-0.193016	1.615133
7	1	0	-2.669738	-0.169883	1.340455
8	1	0	-1.546948	0.560394	2.278795
9	6	0	-1.166516	-1.063100	-0.588786
10	1	0	-0.648626	-0.923436	-1.534535
11	9	0	-0.875088	-2.312044	-0.120922
12	9	0	-2.519712	-1.034921	-0.848050
13	6	0	0.639919	-0.140618	0.934029
14	1	0	0.698442	-1.112095	1.429101
15	1	0	0.795220	0.619926	1.706367
16	6	0	1.733494	-0.018764	-0.129573
17	1	0	1.672361	0.946762	-0.642599
18	1	0	1.608292	-0.789351	-0.898450
19	6	0	3.133435	-0.166607	0.485810
20	1	0	3.272985	0.601526	1.253961
21	1	0	3.202596	-1.130158	1.000965
22	7	0	4.255574	-0.076411	-0.446501
23	1	0	4.260844	0.815381	-0.930944
24	1	0	4.206955	-0.804721	-1.151587

E [DLPNO-CCSD(T)/CBS] = -694.8672662

Pairwise steric exchange energies $dE(i,j)$ (kcal/mol) and associated pre-NLMO overlaps $S(i,j)$ for disjoint (no common atoms) interactions between NLMOs i,j :

Threshold for printing: 0.50 kcal/mol

NLMO (i) NLMO (j) $S(i,j)$ kcal/mol

```
=====
within unit 1
13. LP ( 1) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.0500 0.76
13. LP ( 1) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.0431 0.76
14. LP ( 2) O 3 15. LP ( 1) O 4 -0.0168 -0.58
14. LP ( 2) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.1677 11.69
14. LP ( 2) O 3 26. BD ( 1) C 1- N 6 0.1211 1.32
14. LP ( 2) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.2082 13.47
14. LP ( 2) O 3 32. BD ( 1) O 4- H 5 -0.1368 2.35
14. LP ( 2) O 3 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.0937 1.30
15. LP ( 1) O 4 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.1073 3.34
15. LP ( 1) O 4 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.1273 4.53
15. LP ( 1) O 4 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1129 2.60
16. LP ( 2) O 4 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0923 1.43
16. LP ( 2) O 4 30. BD ( 2) C 2- O 3 0.1953 14.13
16. LP ( 2) O 4 41. BD ( 1) C 16- H 17 0.0755 1.13
17. LP ( 1) N 6 19. LP ( 2) F 11 -0.0534 0.53
17. LP ( 1) N 6 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.2040 11.52
17. LP ( 1) N 6 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0722 1.01
17. LP ( 1) N 6 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0986 2.45
17. LP ( 1) N 6 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.0779 0.66
17. LP ( 1) N 6 30. BD ( 2) C 2- O 3 0.0431 0.52
17. LP ( 1) N 6 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.1176 1.47
18. LP ( 1) F 11 23. LP ( 3) F 12 -0.0599 -0.63
19. LP ( 2) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1507 7.87
19. LP ( 2) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1169 7.59
20. LP ( 3) F 11 21. LP ( 1) F 12 -0.0591 -0.65
20. LP ( 3) F 11 23. LP ( 3) F 12 0.0555 1.67
20. LP ( 3) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0737 1.83
20. LP ( 3) F 11 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0863 0.92
20. LP ( 3) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0575 1.54
20. LP ( 3) F 11 37. BD ( 1) C 9- F 12 -0.1441 7.07
20. LP ( 3) F 11 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0653 0.83
22. LP ( 2) F 12 26. BD ( 1) C 1- N 6 -0.0834 0.65
22. LP ( 2) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1535 8.18
22. LP ( 2) F 12 33. BD ( 1) N 6- H 7 -0.0797 1.25
22. LP ( 2) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1113 6.81
23. LP ( 3) F 12 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.0766 0.77
23. LP ( 3) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0706 1.76
23. LP ( 3) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0586 1.64
23. LP ( 3) F 12 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1422 6.76
24. LP ( 1) N 22 41. BD ( 1) C 16- H 17 -0.0924 0.65
24. LP ( 1) N 22 42. BD ( 1) C 16- H 18 -0.0931 0.68
24. LP ( 1) N 22 43. BD ( 1) C 16- C 19 -0.2238 12.09
24. LP ( 1) N 22 44. BD ( 1) C 19- H 20 0.0665 1.66
24. LP ( 1) N 22 45. BD ( 1) C 19- H 21 0.0627 1.50
25. BD ( 1) C 1- C 2 32. BD ( 1) O 4- H 5 -0.0947 3.92
25. BD ( 1) C 1- C 2 33. BD ( 1) N 6- H 7 0.0641 0.72
25. BD ( 1) C 1- C 2 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.0796 1.20
25. BD ( 1) C 1- C 2 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0930 1.45
25. BD ( 1) C 1- C 2 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1138 3.42
25. BD ( 1) C 1- C 2 38. BD ( 1) C 13- H 14 -0.1299 4.76
25. BD ( 1) C 1- C 2 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0923 1.59
25. BD ( 1) C 1- C 2 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0700 0.83
26. BD ( 1) C 1- N 6 29. BD ( 1) C 2- O 3 0.0562 0.78
26. BD ( 1) C 1- N 6 30. BD ( 2) C 2- O 3 -0.0606 0.85
26. BD ( 1) C 1- N 6 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.0968 1.93
26. BD ( 1) C 1- N 6 35. BD ( 1) C 9- H 10 -0.1161 3.56
26. BD ( 1) C 1- N 6 37. BD ( 1) C 9- F 12 0.0654 0.94
26. BD ( 1) C 1- N 6 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0877 1.80
26. BD ( 1) C 1- N 6 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0841 1.66
26. BD ( 1) C 1- N 6 40. BD ( 1) C 13- C 16 -0.1396 4.03
27. BD ( 1) C 1- C 9 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.1009 1.96
27. BD ( 1) C 1- C 9 30. BD ( 2) C 2- O 3 -0.0571 0.75
27. BD ( 1) C 1- C 9 31. BD ( 1) C 2- O 4 0.0912 1.55
27. BD ( 1) C 1- C 9 33. BD ( 1) N 6- H 7 0.0944 2.07
27. BD ( 1) C 1- C 9 34. BD ( 1) N 6- H 8 -0.1354 5.91
27. BD ( 1) C 1- C 9 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0751 1.18
27. BD ( 1) C 1- C 9 39. BD ( 1) C 13- H 15 -0.1388 5.00
27. BD ( 1) C 1- C 9 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0630 0.76
```

28. BD (1) C 1- C 13 30. BD (2) C 2- O 3 0.1378 4.33
 28. BD (1) C 1- C 13 33. BD (1) N 6- H 7 -0.1313 5.61
 28. BD (1) C 1- C 13 34. BD (1) N 6- H 8 0.0748 1.39
 28. BD (1) C 1- C 13 35. BD (1) C 9- H 10 0.0575 0.66
 28. BD (1) C 1- C 13 36. BD (1) C 9- F 11 0.0608 0.85
 28. BD (1) C 1- C 13 37. BD (1) C 9- F 12 -0.1123 3.31
 28. BD (1) C 1- C 13 41. BD (1) C 16- H 17 0.0709 1.11
 28. BD (1) C 1- C 13 42. BD (1) C 16- H 18 0.0696 1.04
 28. BD (1) C 1- C 13 43. BD (1) C 16- C 19 -0.1444 4.26
 29. BD (1) C 2- O 3 32. BD (1) O 4- H 5 0.0793 1.95
 30. BD (2) C 2- O 3 39. BD (1) C 13- H 15 0.0684 0.62
 34. BD (1) N 6- H 8 39. BD (1) C 13- H 15 0.0783 0.79
 35. BD (1) C 9- H 10 42. BD (1) C 16- H 18 0.0670 1.04
 38. BD (1) C 13- H 14 41. BD (1) C 16- H 17 -0.1278 5.52
 38. BD (1) C 13- H 14 42. BD (1) C 16- H 18 0.0769 1.10
 38. BD (1) C 13- H 14 43. BD (1) C 16- C 19 0.0781 1.40
 38. BD (1) C 13- H 14 45. BD (1) C 19- H 21 0.0734 0.79
 39. BD (1) C 13- H 15 41. BD (1) C 16- H 17 0.0721 0.93
 39. BD (1) C 13- H 15 42. BD (1) C 16- H 18 -0.1270 5.47
 39. BD (1) C 13- H 15 43. BD (1) C 16- C 19 0.0821 1.54
 39. BD (1) C 13- H 15 44. BD (1) C 19- H 20 0.0761 0.85
 40. BD (1) C 13- C 16 44. BD (1) C 19- H 20 0.0753 1.24
 40. BD (1) C 13- C 16 45. BD (1) C 19- H 21 0.0756 1.24
 40. BD (1) C 13- C 16 46. BD (1) C 19- N 22 -0.1281 3.39
 41. BD (1) C 16- H 17 44. BD (1) C 19- H 20 0.0822 1.23
 41. BD (1) C 16- H 17 45. BD (1) C 19- H 21 -0.1140 4.77
 41. BD (1) C 16- H 17 46. BD (1) C 19- N 22 0.0656 0.87
 42. BD (1) C 16- H 18 44. BD (1) C 19- H 20 -0.1144 4.80
 42. BD (1) C 16- H 18 45. BD (1) C 19- H 21 0.0808 1.18
 42. BD (1) C 16- H 18 46. BD (1) C 19- N 22 0.0658 0.88
 43. BD (1) C 16- C 19 47. BD (1) N 22- H 23 0.0553 0.75
 43. BD (1) C 16- C 19 48. BD (1) N 22- H 24 0.0526 0.67
 44. BD (1) C 19- H 20 47. BD (1) N 22- H 23 0.0758 1.33
 44. BD (1) C 19- H 20 48. BD (1) N 22- H 24 -0.1089 5.13
 45. BD (1) C 19- H 21 47. BD (1) N 22- H 23 -0.1093 5.16
 45. BD (1) C 19- H 21 48. BD (1) N 22- H 24 0.0786 1.46
 sum within unit 1: 293.94

Total disjoint NLMO steric exchange energy from pairwise sum: 293.94

Conformer **17**

Standard orientation:

Center Atomic Atomic Coordinates (Angstroms)

Number Number Type X Y Z

1	6	0	-0.696859	-0.044625	0.455849
2	6	0	-1.291671	1.288963	-0.044149
3	8	0	-1.634171	2.177623	0.691256
4	8	0	-1.356294	1.387050	-1.391686
5	1	0	-1.724788	2.258703	-1.604524
6	7	0	-1.274679	-0.443201	1.730447
7	1	0	-1.199608	0.324849	2.389218
8	1	0	-2.261469	-0.657009	1.626448
9	6	0	-0.959390	-1.157034	-0.568292
10	1	0	-0.665354	-0.895781	-1.581815
11	9	0	-0.306231	-2.303203	-0.214792
12	9	0	-2.305533	-1.450222	-0.588625
13	6	0	0.824725	0.157960	0.663570
14	1	0	1.185185	-0.781412	1.085908
15	1	0	0.936155	0.923127	1.439384
16	6	0	1.652541	0.553317	-0.560220
17	1	0	1.294388	1.501454	-0.974798
18	1	0	1.544794	-0.194336	-1.354407
19	6	0	3.148962	0.700922	-0.231162
20	1	0	3.663843	1.089574	-1.114734
21	1	0	3.274105	1.455512	0.552928
22	7	0	3.852983	-0.506346	0.197324
23	1	0	3.493099	-0.864656	1.074581
24	1	0	3.771265	-1.246783	-0.491971

E [DLPNO-CCSD(T)/CBS] = -694.8670141

Pairwise steric exchange energies $dE(i,j)$ (kcal/mol) and associated pre-NLMO overlaps $S(i,j)$ for disjoint (no common atoms) interactions between NLMOs i,j :

Threshold for printing: 0.50 kcal/mol

NLMO (i) NLMO (j) $S(i,j)$ kcal/mol

```
=====
within unit 1
13. LP ( 1) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.0501 0.77
13. LP ( 1) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.0430 0.75
14. LP ( 2) O 3 15. LP ( 1) O 4 -0.0168 -0.57
14. LP ( 2) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.1682 11.73
14. LP ( 2) O 3 26. BD ( 1) C 1- N 6 0.1212 1.31
14. LP ( 2) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.2077 13.43
14. LP ( 2) O 3 32. BD ( 1) O 4- H 5 -0.1364 2.33
14. LP ( 2) O 3 33. BD ( 1) N 6- H 7 0.0946 1.32
15. LP ( 1) O 4 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.1073 3.35
15. LP ( 1) O 4 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.1273 4.53
15. LP ( 1) O 4 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1133 2.61
16. LP ( 2) O 4 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0925 1.44
16. LP ( 2) O 4 30. BD ( 2) C 2- O 3 -0.1953 14.13
16. LP ( 2) O 4 41. BD ( 1) C 16- H 17 0.0751 1.09
17. LP ( 1) N 6 19. LP ( 2) F 11 -0.0533 0.53
17. LP ( 1) N 6 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.2041 11.52
17. LP ( 1) N 6 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0705 0.95
17. LP ( 1) N 6 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.1005 2.53
17. LP ( 1) N 6 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.0776 0.65
17. LP ( 1) N 6 30. BD ( 2) C 2- O 3 -0.0435 0.52
17. LP ( 1) N 6 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.1185 1.48
18. LP ( 1) F 11 23. LP ( 3) F 12 -0.0598 -0.63
19. LP ( 2) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1505 7.85
19. LP ( 2) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1171 7.60
20. LP ( 3) F 11 21. LP ( 1) F 12 -0.0590 -0.64
20. LP ( 3) F 11 23. LP ( 3) F 12 0.0553 1.67
20. LP ( 3) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0737 1.83
20. LP ( 3) F 11 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0865 0.92
20. LP ( 3) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0572 1.53
20. LP ( 3) F 11 37. BD ( 1) C 9- F 12 -0.1441 7.06
20. LP ( 3) F 11 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0678 0.89
22. LP ( 2) F 12 26. BD ( 1) C 1- N 6 -0.0833 0.65
22. LP ( 2) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1532 8.16
22. LP ( 2) F 12 34. BD ( 1) N 6- H 8 -0.0803 1.28
22. LP ( 2) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1115 6.83
23. LP ( 3) F 12 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.0766 0.77
23. LP ( 3) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0708 1.77
23. LP ( 3) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0586 1.63
23. LP ( 3) F 12 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1423 6.77
24. LP ( 1) N 22 38. BD ( 1) C 13- H 14 -0.0863 0.76
24. LP ( 1) N 22 42. BD ( 1) C 16- H 18 -0.0989 0.59
24. LP ( 1) N 22 43. BD ( 1) C 16- C 19 -0.2270 12.03
24. LP ( 1) N 22 44. BD ( 1) C 19- H 20 0.0749 2.12
24. LP ( 1) N 22 45. BD ( 1) C 19- H 21 0.0515 1.13
25. BD ( 1) C 1- C 2 32. BD ( 1) O 4- H 5 -0.0950 3.93
25. BD ( 1) C 1- C 2 33. BD ( 1) N 6- H 7 0.0808 1.25
25. BD ( 1) C 1- C 2 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.0632 0.69
25. BD ( 1) C 1- C 2 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0935 1.46
25. BD ( 1) C 1- C 2 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1141 3.43
25. BD ( 1) C 1- C 2 38. BD ( 1) C 13- H 14 -0.1301 4.78
25. BD ( 1) C 1- C 2 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0910 1.53
25. BD ( 1) C 1- C 2 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0707 0.87
26. BD ( 1) C 1- N 6 29. BD ( 1) C 2- O 3 0.0563 0.78
26. BD ( 1) C 1- N 6 30. BD ( 2) C 2- O 3 0.0607 0.85
26. BD ( 1) C 1- N 6 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.0965 1.93
26. BD ( 1) C 1- N 6 35. BD ( 1) C 9- H 10 -0.1154 3.54
26. BD ( 1) C 1- N 6 37. BD ( 1) C 9- F 12 0.0661 0.95
26. BD ( 1) C 1- N 6 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0877 1.79
26. BD ( 1) C 1- N 6 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0861 1.72
26. BD ( 1) C 1- N 6 40. BD ( 1) C 13- C 16 -0.1415 4.11
27. BD ( 1) C 1- C 9 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.1011 1.97
27. BD ( 1) C 1- C 9 30. BD ( 2) C 2- O 3 0.0569 0.74
27. BD ( 1) C 1- C 9 31. BD ( 1) C 2- O 4 0.0914 1.55
27. BD ( 1) C 1- C 9 33. BD ( 1) N 6- H 7 -0.1352 5.91
27. BD ( 1) C 1- C 9 34. BD ( 1) N 6- H 8 0.0954 2.12
27. BD ( 1) C 1- C 9 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.0781 1.26
27. BD ( 1) C 1- C 9 39. BD ( 1) C 13- H 15 -0.1380 4.97
27. BD ( 1) C 1- C 9 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0619 0.73
```

28. BD (1) C 1- C 13 30. BD (2) C 2- O 3 -0.1381 4.35
 28. BD (1) C 1- C 13 33. BD (1) N 6- H 7 0.0744 1.36
 28. BD (1) C 1- C 13 34. BD (1) N 6- H 8 -0.1304 5.55
 28. BD (1) C 1- C 13 35. BD (1) C 9- H 10 0.0577 0.66
 28. BD (1) C 1- C 13 36. BD (1) C 9- F 11 0.0617 0.88
 28. BD (1) C 1- C 13 37. BD (1) C 9- F 12 -0.1119 3.28
 28. BD (1) C 1- C 13 41. BD (1) C 16- H 17 0.0702 1.04
 28. BD (1) C 1- C 13 42. BD (1) C 16- H 18 0.0758 1.20
 28. BD (1) C 1- C 13 43. BD (1) C 16- C 19 -0.1479 4.40
 29. BD (1) C 2- O 3 32. BD (1) O 4- H 5 0.0792 1.94
 30. BD (2) C 2- O 3 39. BD (1) C 13- H 15 -0.0681 0.60
 33. BD (1) N 6- H 7 39. BD (1) C 13- H 15 0.0789 0.80
 35. BD (1) C 9- H 10 42. BD (1) C 16- H 18 0.0693 1.11
 38. BD (1) C 13- H 14 41. BD (1) C 16- H 17 -0.1276 5.53
 38. BD (1) C 13- H 14 42. BD (1) C 16- H 18 0.0769 1.01
 38. BD (1) C 13- H 14 43. BD (1) C 16- C 19 0.0786 1.48
 38. BD (1) C 13- H 14 47. BD (1) N 22- H 23 0.0531 0.75
 39. BD (1) C 13- H 15 41. BD (1) C 16- H 17 0.0800 1.16
 39. BD (1) C 13- H 15 42. BD (1) C 16- H 18 -0.1235 5.32
 39. BD (1) C 13- H 15 43. BD (1) C 16- C 19 0.0752 1.36
 39. BD (1) C 13- H 15 45. BD (1) C 19- H 21 0.0787 0.80
 40. BD (1) C 13- C 16 44. BD (1) C 19- H 20 -0.1320 4.58
 40. BD (1) C 13- C 16 45. BD (1) C 19- H 21 0.0818 1.39
 40. BD (1) C 13- C 16 46. BD (1) C 19- N 22 0.0496 0.50
 41. BD (1) C 16- H 17 44. BD (1) C 19- H 20 0.0934 2.12
 41. BD (1) C 16- H 17 45. BD (1) C 19- H 21 0.0747 1.01
 41. BD (1) C 16- H 17 46. BD (1) C 19- N 22 -0.1215 3.89
 42. BD (1) C 16- H 18 44. BD (1) C 19- H 20 0.0793 1.27
 42. BD (1) C 16- H 18 45. BD (1) C 19- H 21 -0.1109 4.64
 42. BD (1) C 16- H 18 46. BD (1) C 19- N 22 0.0661 0.80
 43. BD (1) C 16- C 19 48. BD (1) N 22- H 24 0.0587 0.86
 44. BD (1) C 19- H 20 47. BD (1) N 22- H 23 -0.1098 5.12
 44. BD (1) C 19- H 20 48. BD (1) N 22- H 24 0.0733 1.19
 45. BD (1) C 19- H 21 47. BD (1) N 22- H 23 0.0867 1.76
 45. BD (1) C 19- H 21 48. BD (1) N 22- H 24 -0.1056 4.98
 sum within unit 1: 295.07

Total disjoint NLMO steric exchange energy from pairwise sum: 295.07

Conformer **18**

Standard orientation:

Center Atomic Atomic Coordinates (Angstroms)

Number Number Type X Y Z

1	6	0	-0.680722	-0.068287	0.424026
2	6	0	-0.840743	1.363853	-0.132412
3	8	0	-0.022094	1.994787	-0.744658
4	8	0	-2.065294	1.864262	0.182904
5	1	0	-2.122600	2.756341	-0.190950
6	7	0	-0.961842	-0.130876	1.857933
7	1	0	-1.804643	0.381153	2.094608
8	1	0	-0.196304	0.257165	2.395033
9	6	0	-1.759075	-0.928916	-0.269632
10	1	0	-2.771839	-0.658515	0.032723
11	9	0	-1.667861	-0.771278	-1.633066
12	9	0	-1.576023	-2.252201	-0.006040
13	6	0	0.719308	-0.612427	0.106211
14	1	0	0.878378	-0.486951	-0.966088
15	1	0	0.712642	-1.683505	0.316794
16	6	0	1.866218	0.047189	0.877722
17	1	0	1.809655	-0.221799	1.939364
18	1	0	1.795350	1.136879	0.808666
19	6	0	3.249735	-0.386255	0.359155
20	1	0	4.013877	0.015108	1.031854
21	1	0	3.335889	-1.476747	0.412552
22	7	0	3.595166	0.022216	-1.001685
23	1	0	3.474835	1.023080	-1.122388
24	1	0	3.007227	-0.433616	-1.690343

E [DLPNO-CCSD(T)/CBS] = -694.8654368

Pairwise steric exchange energies $dE(i,j)$ (kcal/mol) and associated pre-NLMO overlaps $S(i,j)$ for disjoint (no common atoms) interactions between NLMOs i,j :

Threshold for printing: 0.50 kcal/mol

NLMO (i) NLMO (j) $S(i,j)$ kcal/mol

```
=====
within unit 1
13. LP ( 1) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.0508 0.82
13. LP ( 1) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.0402 0.69
14. LP ( 2) O 3 15. LP ( 1) O 4 -0.0159 -0.55
14. LP ( 2) O 3 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.1645 11.09
14. LP ( 2) O 3 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.1475 1.95
14. LP ( 2) O 3 31. BD ( 1) C 2- O 4 -0.2088 13.74
14. LP ( 2) O 3 32. BD ( 1) O 4- H 5 -0.1361 2.24
14. LP ( 2) O 3 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.1023 1.27
14. LP ( 2) O 3 42. BD ( 1) C 16- H 18 0.0839 1.05
15. LP ( 1) O 4 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.1073 3.45
15. LP ( 1) O 4 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.1258 4.35
15. LP ( 1) O 4 33. BD ( 1) N 6- H 7 0.0763 1.04
15. LP ( 1) O 4 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0712 0.84
16. LP ( 2) O 4 17. LP ( 1) N 6 -0.0532 0.65
16. LP ( 2) O 4 26. BD ( 1) C 1- N 6 0.0680 0.86
16. LP ( 2) O 4 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.0808 1.21
16. LP ( 2) O 4 30. BD ( 2) C 2- O 3 -0.1938 13.79
16. LP ( 2) O 4 33. BD ( 1) N 6- H 7 0.0487 0.52
17. LP ( 1) N 6 23. LP ( 3) F 12 -0.0580 0.63
17. LP ( 1) N 6 25. BD ( 1) C 1- C 2 -0.2086 11.63
17. LP ( 1) N 6 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.1304 4.09
17. LP ( 1) N 6 28. BD ( 1) C 1- C 13 0.0465 0.54
17. LP ( 1) N 6 30. BD ( 2) C 2- O 3 0.0490 0.58
17. LP ( 1) N 6 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0848 0.62
18. LP ( 1) F 11 23. LP ( 3) F 12 0.0620 -0.68
19. LP ( 2) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1557 8.38
19. LP ( 2) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1096 6.74
19. LP ( 2) F 11 38. BD ( 1) C 13- H 14 -0.0637 0.72
20. LP ( 3) F 11 21. LP ( 1) F 12 -0.0583 -0.64
20. LP ( 3) F 11 23. LP ( 3) F 12 -0.0579 1.76
20. LP ( 3) F 11 25. BD ( 1) C 1- C 2 0.0877 1.16
20. LP ( 3) F 11 27. BD ( 1) C 1- C 9 0.0746 1.87
20. LP ( 3) F 11 30. BD ( 2) C 2- O 3 0.0516 0.53
20. LP ( 3) F 11 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0597 1.71
20. LP ( 3) F 11 37. BD ( 1) C 9- F 12 -0.1409 6.73
21. LP ( 1) F 12 39. BD ( 1) C 13- H 15 0.0436 0.58
22. LP ( 2) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.1457 7.47
22. LP ( 2) F 12 28. BD ( 1) C 1- C 13 -0.0862 0.75
22. LP ( 2) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.1164 7.70
22. LP ( 2) F 12 39. BD ( 1) C 13- H 15 -0.0849 1.57
23. LP ( 3) F 12 26. BD ( 1) C 1- N 6 -0.0673 0.51
23. LP ( 3) F 12 27. BD ( 1) C 1- C 9 -0.0754 2.09
23. LP ( 3) F 12 35. BD ( 1) C 9- H 10 -0.0489 1.15
23. LP ( 3) F 12 36. BD ( 1) C 9- F 11 0.1471 7.26
24. LP ( 1) N 22 38. BD ( 1) C 13- H 14 -0.0886 0.81
24. LP ( 1) N 22 42. BD ( 1) C 16- H 18 -0.1007 0.61
24. LP ( 1) N 22 43. BD ( 1) C 16- C 19 -0.2245 11.77
24. LP ( 1) N 22 44. BD ( 1) C 19- H 20 0.0816 2.47
24. LP ( 1) N 22 45. BD ( 1) C 19- H 21 0.0427 0.82
25. BD ( 1) C 1- C 2 32. BD ( 1) O 4- H 5 -0.0986 4.07
25. BD ( 1) C 1- C 2 33. BD ( 1) N 6- H 7 0.0970 1.88
25. BD ( 1) C 1- C 2 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0752 0.86
25. BD ( 1) C 1- C 2 36. BD ( 1) C 9- F 11 0.0712 0.89
25. BD ( 1) C 1- C 2 37. BD ( 1) C 9- F 12 -0.1083 3.16
25. BD ( 1) C 1- C 2 38. BD ( 1) C 13- H 14 0.1051 1.98
25. BD ( 1) C 1- C 2 39. BD ( 1) C 13- H 15 -0.1289 4.68
25. BD ( 1) C 1- C 2 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0520 0.51
26. BD ( 1) C 1- N 6 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.0627 0.58
26. BD ( 1) C 1- N 6 30. BD ( 2) C 2- O 3 -0.1024 2.15
26. BD ( 1) C 1- N 6 31. BD ( 1) C 2- O 4 0.0561 0.60
26. BD ( 1) C 1- N 6 35. BD ( 1) C 9- H 10 0.0815 1.46
26. BD ( 1) C 1- N 6 36. BD ( 1) C 9- F 11 -0.1109 2.89
26. BD ( 1) C 1- N 6 38. BD ( 1) C 13- H 14 -0.1388 4.75
26. BD ( 1) C 1- N 6 40. BD ( 1) C 13- C 16 0.0784 1.31
27. BD ( 1) C 1- C 9 29. BD ( 1) C 2- O 3 -0.0668 0.82
27. BD ( 1) C 1- C 9 30. BD ( 2) C 2- O 3 0.1086 2.68
27. BD ( 1) C 1- C 9 31. BD ( 1) C 2- O 4 0.0597 0.59
27. BD ( 1) C 1- C 9 33. BD ( 1) N 6- H 7 0.0613 0.73
```

27. BD (1) C 1- C 9 34. BD (1) N 6- H 8 -0.1296 5.49
 27. BD (1) C 1- C 9 38. BD (1) C 13- H 14 0.0715 1.08
 27. BD (1) C 1- C 9 39. BD (1) C 13- H 15 0.1029 2.44
 27. BD (1) C 1- C 9 40. BD (1) C 13- C 16 -0.1535 5.03
 28. BD (1) C 1- C 13 29. BD (1) C 2- O 3 0.0787 1.58
 28. BD (1) C 1- C 13 31. BD (1) C 2- O 4 -0.1115 2.90
 28. BD (1) C 1- C 13 33. BD (1) N 6- H 7 -0.1263 5.08
 28. BD (1) C 1- C 13 34. BD (1) N 6- H 8 0.1078 2.95
 28. BD (1) C 1- C 13 35. BD (1) C 9- H 10 -0.1061 3.36
 28. BD (1) C 1- C 13 37. BD (1) C 9- F 12 0.0714 1.17
 28. BD (1) C 1- C 13 41. BD (1) C 16- H 17 0.0530 0.56
 28. BD (1) C 1- C 13 42. BD (1) C 16- H 18 0.0915 1.83
 28. BD (1) C 1- C 13 43. BD (1) C 16- C 19 -0.1469 4.22
 29. BD (1) C 2- O 3 32. BD (1) O 4- H 5 0.0778 1.81
 30. BD (2) C 2- O 3 42. BD (1) C 16- H 18 -0.0626 0.80
 34. BD (1) N 6- H 8 41. BD (1) C 16- H 17 0.0856 1.73
 38. BD (1) C 13- H 14 41. BD (1) C 16- H 17 -0.1220 5.14
 38. BD (1) C 13- H 14 43. BD (1) C 16- C 19 0.1003 2.37
 38. BD (1) C 13- H 14 48. BD (1) N 22- H 24 0.0568 0.85
 39. BD (1) C 13- H 15 41. BD (1) C 16- H 17 0.1009 2.06
 39. BD (1) C 13- H 15 42. BD (1) C 16- H 18 -0.1197 5.10
 39. BD (1) C 13- H 15 43. BD (1) C 16- C 19 0.0585 0.81
 39. BD (1) C 13- H 15 45. BD (1) C 19- H 21 0.0687 0.59
 40. BD (1) C 13- C 16 44. BD (1) C 19- H 20 -0.1319 4.61
 40. BD (1) C 13- C 16 45. BD (1) C 19- H 21 0.0822 1.38
 41. BD (1) C 16- H 17 44. BD (1) C 19- H 20 0.0961 2.20
 41. BD (1) C 16- H 17 45. BD (1) C 19- H 21 0.0718 0.92
 41. BD (1) C 16- H 17 46. BD (1) C 19- N 22 -0.1221 3.93
 42. BD (1) C 16- H 18 44. BD (1) C 19- H 20 0.0788 1.24
 42. BD (1) C 16- H 18 45. BD (1) C 19- H 21 -0.1110 4.62
 42. BD (1) C 16- H 18 46. BD (1) C 19- N 22 0.0684 0.88
 43. BD (1) C 16- C 19 47. BD (1) N 22- H 23 0.0664 1.10
 44. BD (1) C 19- H 20 47. BD (1) N 22- H 23 0.0673 0.95
 44. BD (1) C 19- H 20 48. BD (1) N 22- H 24 -0.1090 5.05
 45. BD (1) C 19- H 21 47. BD (1) N 22- H 23 -0.1073 5.09
 45. BD (1) C 19- H 21 48. BD (1) N 22- H 24 0.0906 2.00
 sum within unit 1: 296.29

Total disjoint NLMO steric exchange energy from pairwise sum: 296.29
