



Universidade Federal de Pernambuco
Centro de Ciências Exatas e da Natureza
Departamento de Química Fundamental

Frederico Teixeira Silva

**Estereoquímica em Complexos Metálicos: Generalização das Regras
de Cahn-Ingold-Prelog, Enumeração, Quiralidade, Identificação,
Razões de Coordenação Aleatória e Algoritmos**

Recife

2018

Frederico Teixeira Silva

**Estereoquímica em Complexos Metálicos: Generalização das Regras
de Cahn-Ingold-Prelog, Enumeração, Quiralidade, Identificação,
Razões de Coordenação Aleatória e Algoritmos**

Tese submetida ao Departamento
de Química Fundamental como
parte dos requisitos necessários à
obtenção do diploma de Doutor
em Química.

Área de concentração: Físico-
Química.

Orientador: Prof. Dr. Alfredo Mayall Simas

Co-orientador: Prof. Dr. Sóstenes Luiz Soares Lins

Recife

2018

Catalogação na fonte
Bibliotecária Arabelly Ascoli CRB4-2068

S586e	Silva, Frederico Teixeira Estereoquímica em complexos metálicos: generalização das regras de Cahn-Ingold-Prelog, enumeração, quiralidade identificação, razões de coordenação aleatória e algoritmos / Frederico Teixeira Silva. – 2018. 299 f.: il., fig., tab. Orientador: Alfredo Mayall Simas Tese (Doutorado) – Universidade Federal de Pernambuco. CCEN. Química. Recife, 2018. Inclui referências e apêndices. 1. Físico-química. 2. Estereoisomeria. 3. Complexos metálicos. 4. Combinatória poliedral. I. Simas, Alfredo Mayall (orientador). II. Título. 541.3 CDD (22. ed.) UFPE-FQ 2019-66
-------	--

FREDERICO TEIXEIRA SILVA

***"ESTEREOQUÍMICA EM COMPLEXOS METÁLICOS: GENERALIZAÇÃO
DAS REGRAS DE CAHN-INGOLD-PRELOG, ENUMERAÇÃO,
QUIRALIDADE, IDENTIFICAÇÃO, RAZÕES DE COORDENAÇÃO
ALEATÓRIA E ALGORITMOS"***

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação no Departamento de Química Fundamental da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Química.

Aprovado em: 05/10/2018

BANCA EXAMINADORA

Prof. Alfredo Mayall Simas (Orientador)

Departamento de Química Fundamental
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Osvaldo Antonio Serra

Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto - USP

Prof. Ricardo Oliveira Freire

Departamento de Química
Universidade Federal de Sergipe

Prof. Alfredo Arnóbio de Souza da Gama

Departamento de Química Fundamental
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Ricardo Luiz Longo

Departamento de Química Fundamental
Universidade Federal de Pernambuco

A Deus.

A meus familiares, mãe, pai e namorada
pelo apoio e paciência durante este
doutorado.

AGRADECIMENTOS

Quando cheguei em Recife, eu já sabia ciência, pesquisar, programar, escrever, pensar. Mas não era suficiente, faltava foco, disciplina, capricho. Por isso agradeço ao Simas, meu orientador, pois a orientação dele transcendeu o conteúdo.

Agradeço ao Sóstenes, meu co-orientador. Foi uma honra trabalhar com um matemático.

Não posso deixar de mencionar outros grandes cientistas que fizeram parte da minha formação. Com o Prof. Jadson Belchior da UFMG, aprendi programação; com o Prof. Wagner Batista de Almeida, da UFMG, aprendi a estudar antes de iniciar um projeto; com a Profa. Juliana Fedoce Lopes, da UNIFEI, aprendi estrutura eletrônica e com o Prof. Amary César Ferreira, da UFMG, aprendi a pensar.

Agradeço também aos colegas e professores da UFPE. Ao Prof. José Diogo Lisboa, da UFS, que foi a pessoa que me recebeu na cidade e foi um grande auxílio na programação em linguagem C++. A Diego, Stefferson, Pedro e Geise, valiosos colegas de curso. Também agradeço aos membros do laboratório LAM pelas ajudas.

Por fim, agradeço a todas as pessoas que contribuíram direta ou indiretamente para este trabalho, em especial ao Prof. Breno Galvão, do CEFET, e o pessoal da Taverna: Heitor e Roberto.

Também agradeço aos órgãos financiadores CNPq, FACEPE, PRONEX, e CAPES que possibilitaram este trabalho.

RESUMO

O estereoisomerismo é uma propriedade chave na química inorgânica, com impacto, por exemplo, na atividade biológica de complexos metálicos. Por exemplo, a *cis*-diaminodicloroplatina (II) é amplamente utilizada no tratamento de câncer, porém, o estereoisômero *trans*-diaminodicloroplatina (II) é inerte frente às mesmas células cancerígenas. Neste trabalho, foram desenvolvidos métodos e *softwares* para realizar o estudo do estereoisomerismo em complexos metálicos. O *software Stereoisomer Enumeration* realiza a listagem de todos os estereoisômeros possíveis para uma dada geometria e fórmula molecular. Desta listagem (enumeração) foi observado a emergência de uma nova propriedade a qual chamamos de *random coordination ratio* RCR. Esta propriedade indica as probabilidades relativas de formação de estereoisômeros por grupo pontual para uma dada fórmula molecular genérica e forma de poliedro de coordenação, bem como a probabilidade de um determinado complexo ser quiral, sempre para a situação limite em que efeitos energéticos podem ser desconsiderados. Os resultados da enumeração foram apresentados na forma de tabelas assim como as coordenadas cartesianas dos estereoisômeros enumerados. Neste trabalho, também foi apresentado o *Stereoisomer Identifier*, um *software* que realiza a identificação dos estereoisômeros, baseando a classificação dos ligantes nas regras propostas por Cahn-Ingold-Prehlog. Porém, houve a necessidade de adicionar três novas regras ao cânone original com o objetivo de remover degenerescências na definição das prioridades. Este *software* foi aplicado a um banco de dados de 262.663 complexos, entre os resultados, foi observado que complexos bimetálicos possuem uma forte tendência de cristalizarem-se em estereoisômeros relacionados. Por fim, o *software Complex Build*, ainda em desenvolvimento, permite a construção automatizada de complexos metálicos.

Palavras-chave: Estereoisomeria de complexos metálicos. Combinatória poliedral. *Random coordination ratio*.

ABSTRACT

Stereoisomerism is a key property in inorganic chemistry that impact, for example, in the biological activity of metal complexes. For example, *cis*-diaminodichloroplatinum (II) is widely used in cancer treatments, but the *trans*-diaminodichloroplatinum (II) stereoisomer is inert towards the same cancer cells. In this work, methods and softwares were developed to perform the study of stereoisomerism in metal complexes. The Stereoisomer Enumeration software lists all possible stereoisomers for a given geometry and molecular formula. From this listing (enumeration) we observed the emergence of a new property called *random coordination ratio* RCR. This property indicates the relative probabilities of stereoisomers formation by its point group given a generic molecular formula and coordinate polyhedron, as well as the probability of a particular complex being chiral, always to the limit situation in which energy effects can be disregarded. The results of the enumeration were presented in the form of tables and cartesian coordinates. In this work, we also presented the Stereoisomer Identifier, a software that performs the identification of stereoisomers. In this software, the classification of ligands was based on the use of Cahn-Ingold-Prehlog priority rules. However, it was necessary to add three new rules to the original canon in order to remove degeneracies in priorities definitions. This software was applied to a database of 262,663 complexes, among the results, it was observed that bimetallic complexes have a strong tendency to crystallize into related stereoisomers. Finally, Complex Build software, still in development, allows the automated construction of metal complexes.

Keywords: Stereoisomerism in metal complexes. Polyhedral combinatorics. Random coordination ratio.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1-	Estereoisômeros da fórmula molecular Ma_4b_2 . As três geometrias apresentadas foram consideradas por Alfred Werner no estudo dos complexos metálicos.....	20
Figura 2-	Aplicação das regras CIP na molécula de butano. O asterisco indica o possível centro estereogênico. A letra D se refere a deutério. As prioridades de cada um dos radicais estão representadas por números em vermelho. Observa-se que há dois átomos de carbono ligados ao centro estereogênico. Porém, diferentes prioridades são atribuídas a cada um desses carbonos devido aos diferentes grupos químicos ligados aos mesmos. Também se observa que a prioridade do deutério é maior do que a do hidrogênio.....	28
Figura 3-	Aplicação das regras CIP à molécula de butano. O asterisco indica o possível centro estereogênico. As prioridades de cada um dos radicais estão representadas por números em vermelho. Observa-se que há dois átomos de carbono ligados ao centro estereogênico. Porém, diferentes prioridades são atribuídas a cada um desses carbonos devido aos diferentes grupos químicos ligados aos mesmos. Nesse caso, há dois grupos de mesmas prioridades, portanto, este centro é aquiral.....	29
Figura 4-	Atribuição das prioridades na molécula butano. O asterisco indica o possível centro estereogênico em estudo e as prioridades de cada um dos radicais estão representadas por números em vermelho. A Nova regra 1 que sugerimos atribui maior prioridade a átomos equivalentes em maior quantidade. Observa-se que o hidrogênio recebeu o índice de maior prioridade pois possui mais átomos de simetria equivalente (2 substituintes do tipo H). Os dois compostos de mesma quantidade (1 substituinte do tipo CH_3 e 1 substituinte do tipo CH_2CH_3) receberam suas prioridades com base nas regras CIP. Nesse caso, há dois grupos de mesmas prioridades, portanto, este centro é aquiral.....	31
Figura 5-	Aplicação das operações de simetria no arranjo em estudo. Os monômios são obtidos com a equação (3.5).....	40
Figura 6-	Estereoisômeros do diamindicloroplatina (II).....	46
Figura 7-	Os possíveis estereoisômeros para complexos quadráticos com todos os ligantes monodentados diferentes, bem como para o caso em que existem dois conjuntos de ligantes monodentados idênticos ($a=c$; $b=d$).....	47
Figura 8-	Correspondência entre as posições do vetor de permutações e da geometria vTBPY-4.....	50

Figura 9-	Permutações do vTBPY-4. As cores representam ligantes diferentes. As posições do vetor linha possuem uma correspondência com a geometria vTBPY-4. As permutações foram agrupadas de forma a evidenciar a interconversão das mesmas através de operações de rotação. A letra E corresponde a operação de identidade, C_3^+ corresponde a uma rotação de 120° no eixo principal e C_3^- corresponde a uma rotação de 240° no eixo principal.....	51
Figura 10-	Substratal scaffold set dividido em pares de enantiômeros.....	52
Figura 11-	Aplicação do reference line vector [a a b c] ao substratal scaffold set. Os números 1 e 2 são os ligantes do tipo “a” e estão representados pela cor azul, o número 3 corresponde ao ligante “b” e está representado pela cor verde e o número 3 corresponde ao ligante do tipo “c” e está representado pela cor vermelha.....	53
Figura 12-	Aplicação das operações de simetria nos estereoisômeros do composto Ma_3bc -vTBPY-4. As permutações circuladas correspondem a operações de simetria que não causaram alterações no estereoisômero.....	54
Figura 13-	Estereoisomerismo do complexo $CsYb(hfbc)_4$. Em (a) e (b) estão apresentados o par de enantiômeros sugerido para a estrutura experimental de Pietro e Bari[49].....	57
Figura 14-	Configuração absoluta de compostos tetraédricos. Desde que o composto de prioridade 4 seja colocado para trás do plano do papel, se os números crescerem no sentido horário, o estereoisômero é definido como R, do contrário, a nomenclatura atribuída é S.....	64
Figura 15-	Nomenclatura para tipos de estereoisômeros em complexos octaédricos.....	64
Figura 16-	À esquerda está apresentado o complexo de refcode LEMCAH (tricloro-tris(óxido de trietilfosfina)-vanadium(IV)). À direita estão apresentadas as geometrias ideais disponíveis para o número de coordenação 6. No meio está apresentado o rmsd de cada estrutura em relação ao poliedro de coordenação do LEMCAH. Circulado em azul está apresentado o menor valor de rmsd, portanto, a geometria ideal que descreve o poliedro de coordenação experimental (OC-6).....	67

Figura 17-	Exemplos de quiralidade tipo I (a) e tipo II (b). A figura (a) é disforme e possui simetria C_1 , a figura (b) é um tetraedro com uma esfera amarela no centro. Observa-se que os tetraedros (b) podem se interconverter caso a esfera de cor verde seja permutada com a esfera de cor azul (quiralidade tipo II). Não há nenhuma permutação que permita que as estruturas apresentadas no item (a) se interconvertam (quiralidade tipo I).....	68
Figura 18-	Atribuição do configuration index e chirality symbol a um complexo octaédrico de fórmula molecular Ma_2b_2cd . O configuration index é 42, pois 4 (azul) é o ligante de maior valor numérico trans ao ligante de prioridade 1, e 2 (vermelho) é o ligante trans ao ligante de maior prioridade entre os 4 ligantes restantes. Observando sobre o ligante de prioridade 1 no eixo de referência do octaedro, os números dos ligantes no plano perpendicular ao eixo de referência crescem no sentido anti-horário, portanto, a esse complexo é atribuído o chirality symbol A.....	70
Figura 19-	Identificador do estereoisômero apresentado no nosso trabalho anterior[29].....	71
Figura 20-	Poliedros de coordenação do par enantiomérico de refcode NOJTAH identificados com a metodologia proposta neste trabalho.....	73
Figura 21-	Complexo dilantanídeo de refcode ERUJIM[67], reconhecido por nós como composto meso.....	73
Figura 22-	Estereoisômeros possíveis para o Ma_2b_2cd -OC-6. No canto superior esquerdo estão apresentados o configuration index e chirality symbol de acordo com a recomendação da IUPAC. Não foi atribuído nenhum chirality symbol aos compostos aquirais nesse caso. Os estereoisômeros que estão na mesma caixa são pares de enantiômeros. Abaixo do poliedro está apresentado o descritor que propomos para caracterizar os estereoisômeros. O polyhedral symbol em todos os casos é OC-6 e foi omitido por motivo de simplicidade.....	76
Figura 23-	A molécula N,N'-bis(2-aminoetil)etano-1,2-diamina é um exemplo de tetradentado de fórmula molecular (A_2B_2). Os números no interior do círculo representam as prioridades dos átomos doadores. As aspas seguem a recomendação da IUPAC.....	77
Figura 24-	Composto de fórmula molecular genérica $Ma_2(A_2B_2)$ e shape octaédrico. Existem duas formas de definir as aspas das prioridades do tetradentado. Na figura da direita, invertemos a definição das aspas e observamos que isso causa uma mudança no configuration index (canto superior esquerdo). O polyhedral symbol em todos os casos é OC-6 e foi omitido por motivo de simplicidade.....	78

Figura 25-	Composto de fórmula molecular genérica $\text{Ma}_2(\text{AB})_2$ e shape octaédrica. As prioridades nesse caso são [1 1 2 2 3 3], onde os números 1 e 2 correspondem às prioridades dos ligantes bidentados assimétricos e 3 corresponde à prioridade do ligante “a”. Existem duas formas de definir as aspas sobre as prioridades dos bidentados.....	79
Figura 26-	Possíveis estereoisômeros para um composto $\text{Ma}_4\text{bc-OC-6}$ (em cima) e $\text{Ma}_4(\text{AB})\text{-OC-6}$ (em baixo). As prioridades dos ligantes foram representadas com cores: 1-azul, 2-vermelho e 3-verde. Observa-se que a dentição, reforçada pela linha preta contínua, acompanha os átomos doadores.....	80
Figura 27-	Estereoisômeros quirais de fórmulas moleculares $\text{Ma}_2\text{b}_2\text{c}_2$ (superior) e $\text{M}(\text{A}_2)_3$ (inferior). A dentição foi reforçada com uma linha preta contínua. Observa-se uma correspondência entre esses dois conjuntos de estereoisômeros, caso se suponha que os monodentados de mesma cor sejam bidentados.....	82
Figura 28-	Estereoisômeros aquirais de fórmulas moleculares $\text{Ma}_2\text{b}_2\text{c}_2$ (cima) e $\text{M}(\text{A}_2)_3$ (baixo). A dentição foi reforçada com uma linha preta contínua. Observa-se que os estereoisômeros G-1, G-2 e G-4 da fórmula molecular $\text{Ma}_2\text{b}_2\text{c}_2$ são semelhantes ao estereoisômero G-1 da fórmula molecular $\text{M}(\text{A}_2)_3$. O estereoisômero da fórmula molecular $\text{Ma}_2\text{b}_2\text{c}_2$ G-3, por sua vez, é semelhante ao G-2 da fórmula molecular $\text{M}(\text{A}_2)_3$	83
Figura 29-	Estrutura de refcode EGOCOT. O estudo da dentição dos ligantes foi cancelado devido à densidade do grafo dessa molécula.....	85
Figura 30-	Estrutura do composto de refcode ATIWIK.....	87
Figura 31-	Os 5 estereoisômeros possíveis para a fórmula molecular Ma_3bcd . Os códigos dos estereoisômeros estão apresentados abaixo das figuras. O símbolo do poliedro em todos os casos é OC-6 e foi omitido por motivo de clareza. Os ligantes verde e roxo foram reforçados com uma linha contínua para evidenciar que esta enumeração também é válida para a fórmula molecular $\text{Ma}_3\text{b}(\text{AB})$	88
Figura 32-	Complexos presentes na célula unitária ATIWIK. Esquerda, os compostos Re1, Re3 e Re4 possuem o mesmo identificador (S-1) e o composto da direita corresponde a respectiva imagem especular (R-1)	89
Figura 33-	Análise de componentes principais dos sistemas metálicos. A variância explicada foi 42%. Os metais pós-transição foram representados por círculos verdes, os metais de transição foram representados por círculos vermelhos e os lantanídeos e actinídeos foram representados por círculos azuis.....	93

Figura 34-	Diagrama químico do complexo de código COXRAJ (acima) e geometria dos poliedros de coordenação desse mesmo complexo (abaixo). As prioridades dos ligantes foram representadas com cores: 1-azul, 2-vermelho, 3-verde e 4-roxo. O identificador do estereoisômero de ambos, como proposto neste trabalho, está apresentado abaixo dos poliedros de coordenação. Nesse, os estereoisômeros do poliedro de coordenação foram iguais e ambos do tipo G (aquiral).....	96
Figura 35-	Diagrama químico do complexo de código KIQGEW (acima) e geometria dos poliedros de coordenação desse mesmo complexo (abaixo). As prioridades dos ligantes foram representadas com cores: 1-azul e 2-vermelho. O identificador do estereoisômeros como proposto neste trabalho está apresentado abaixo dos poliedros de coordenação. Nesse caso, os poliedros de coordenação apresentaram uma estereoisomeria do tipo meso (um R e o outro S).....	97
Figura 36-	Diagrama químico do complexo EZUBEH. O cobre da direita está ligado a uma molécula de água (circulada em azul), esse ligante está ausente no cobre da esquerda.....	98
Figura 37-	Diagrama químico do complexo de código NAGVOH (acima) e geometria dos poliedros de coordenação desse mesmo complexo (abaixo). Nas figuras, foi mantida a cor amarela para os dois metais, portanto, neste caso, as prioridades dos ligantes foram representadas pelas seguintes cores: 1-azul, 2-amarelo, 3-vermelho, 4-verde e 5-roxo. O identificador do estereoisômero de ambos, como proposto neste trabalho, está apresentado abaixo dos poliedros de coordenação. Nesse, os estereoisômeros do poliedro de coordenação foram iguais e ambos do tipo S (quiral).....	98
Figura 38-	Diagrama químico do complexo de código JEKKAL (acima) e geometria dos poliedros de coordenação desse mesmo complexo (abaixo). As prioridades dos ligantes foram representadas com cores: 1-azul, 2-vermelho e 3-verde. O identificador do estereoisômero como proposto neste trabalho está apresentado abaixo do poliedro de coordenação. Nesse caso, os dois estereoisômeros apresentaram-se com geometrias do poliedro de coordenação diferentes.....	99
Figura 39-	Diagrama químico do complexo de código AVARUK (acima) e geometria dos poliedros de coordenação desse mesmo complexo (abaixo). As prioridades dos ligantes foram representadas com cores: 1-azul, 2-vermelho e 3-verde. O identificador do estereoisômero como proposto neste trabalho está apresentado abaixo do poliedro de coordenação. Nesse, os estereoisômeros do poliedro de coordenação foram diferentes sem se configurarem como uma estereoisomeria meso.....	100

Figura 40-	Plataforma protótipo do software Complex Build.....	103
Figura 41-	Adição de um ligante ao complexo de código cristalográfico NURFIP usando a plataforma protótipo do software Complex Build.....	104
Figura 42-	Definição dos vetores de referência para um ligante monodentado.....	106
Figura 43-	Definição dos pontos de referência para os ligantes bidentados.....	107
Figura 44-	Exemplo de ligante tridentado laminar, que, para fins de montagem é tratado como bidentado no Complex Build.....	109
Figura 45-	Molécula 1,2,3,4,5-pentametil-ciclopenta-1,3-dieno classificada no Complex Build dentro da categoria tridentado. Os círculos mostram os três átomos de referência utilizados para definir o plano ao qual a direção da ligação será uma normal.....	110
Figura 46-	Posicionamento inicial do nitrato para uma montagem de complexo. Em a), temos a montagem inicial, em b), o nitrato está alinhado aos pontos de referência.....	111
Figura 47-	Os 12 estereoisômeros do complexo de código cristalográfico JALNIU. As estruturas passaram por uma relaxação com o método PM6-D3H4.....	113
Figura 48-	A esquerda a estrutura obtida por raio X do complexo JALNIU, a direita está apresentado o isômero mais estável obtido pelo método PM6-D3H4.....	115
Figura 49-	Dois tipos de ligantes monodentados, a esquerda temos o TPPO e a direita está apresentado o brometo.....	116
Figura 50-	Fluxograma da implementação do recozimento simulado.....	117
Figura 51-	Formato do arquivo do ligante do Complex Build. As letras H, C e O correspondem aos átomos hidrogênio, carbono e oxigênio respectivamente.....	119
Figura 52-	Estereoisômeros para a fórmula molecular Ma4b2. As três geometrias apresentadas foram consideradas por Alfred Werner no estudo dos complexos metálicos.....	121

LISTA DE TABELAS

Tabela 1-	Expansão do índice de ciclos para átomos na geometria bipirâmide trigonal.....	41
Tabela 2-	Número de estereoisômeros para duas fórmulas moleculares diferentes ^a	56
Tabela 3-	Aplicação da fórmula conjecturada (3.47) para o cálculo do número de simetria σ . Da tabela, G.P. se refere ao grupo pontual do estereoisômero, RCW ao random coordination weight e Π (mi!) é o numerador da fórmula (3.47).....	60
Tabela 4-	Motivos e quantidades das estruturas que não puderam ser identificadas através dos métodos deste trabalho. %Estruturas se refere à porcentagem em relação ao total de estruturas (262.663).....	91
Tabela 5-	Características do banco de dados estudado. Total corresponde ao número de estruturas identificadas da categoria em questão. A coluna “%a” foi a mediana da porcentagem de metais aquirais da categoria correspondente, NC define o número de coordenação mais frequente na categoria correspondente e, por fim, shape corresponde à forma da geometria mais comum da categoria correspondente.....	92
Tabela 6-	Classificações dos complexos bimetálicos a respeito do seu estereoisomerismo relativo. %Estruturas se refere a porcentagem em relação ao total de estruturas de complexos bimetálicos (122.744).....	95
Tabela 7-	Energias em eV para os 12 estereoisômeros do JALNIU. O indicador água corresponde ao uso do modelo COSMO com constante dielétrica de 78.4.....	114

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

AM1	<i>Austin Model 1</i>
CIP	<i>Cahn-Ingold-Prehlog</i>
COSMO	<i>Conductor-like Screening Model</i>
CPL	<i>Circularly polarized luminescence</i>
CSD	<i>Cambridge Structure Database</i>
DFT	<i>Density Functional Theory</i>
PCA	<i>Principal componente analysis</i>
PM3	Parametric Model 3
PM6	Parametric Model 6
PM7	Parametric Model 7
RM1	Recife Model 1
RCR	<i>Random coordination ratio</i>
RCW	<i>Random coordination weight</i>
RMSD	<i>Root Mean Square Deviation</i>
<i>shape</i>	Forma padrão do poliedro de coordenação

LISTA DE SÍMBOLOS

•	Produto escalar
Å	Ångström - unidade de distância igual a 10^{-10} m
eV	Elétron-Volt - unidade de energia equivalente a $1,602 \times 10^{-19}$ J.
°	Grau - unidade de ângulo equivalente a $\pi/180$ radianos.
v	Letras minúsculas em negrito representam vetores
x	No contexto de operações entre vetores representa produto vetorial
ΔA	Símbolo referente à variação de uma propriedade genérica A
θ	Variável para ângulos
a, b, c...	Ligantes monodentados ou monocoordenados
(AA), (AB)...	Ligantes polidentados. As letras repetidas se referem a átomos de simetria equivalente, por exemplo, (AA) se refere a um bidentado simétrico.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	20
1.1	ESTEREOISOMERISMO EM COMPLEXOS METÁLICOS	20
1.2	MOTIVAÇÃO	23
1.3	ORGANIZAÇÃO DESTA TESE	24
2	PROPOSTA DE NOVAS REGRAS PARA AS PRIORIDADES DE CAHN-INGOLD-PREHLOG	26
2.1	PRIORIDADES DE CAHN-INGOLD-PREHLOG	27
2.2	GENERALIZAÇÃO DAS REGRAS CIP PARA CENTROS ESTEREOGÊNICOS METÁLICOS COM COORDENAÇÕES REPETIDAS E/OU LIGANTES QUELANTES.	29
2.3	NOTAÇÃO EMPREGADA PARA REPRESENTAR A COMPOSIÇÕES DOS COMPLEXOS.	33
2.3.1	<i>Notação para representar fórmulas moleculares apresentada no nosso trabalho anterior²⁹</i>	33
2.3.2	<i>Notação para representar fórmulas moleculares com a inclusão de todos os tipos de dentações.</i>	34
2.4	ALGORITMO QUE GERA TODAS AS FÓRMULAS MOLECULARES.	35
3	LISTAGEM DOS ESTEREOISÔMEROS.	37
3.1	PRINCÍPIO DE ENUMERAÇÃO DE GEORGE PÓLYA APLICADO A COMPLEXOS METÁLICOS.	38
3.2	ESTUDO DE CASO: CONTAGEM DOS ESTEREOISÔMEROS PARA A GEOMETRIA BIPIRÂMIDE TRIGONAL	39
3.3	ÍNDICES DE CICLO PARA UM CONJUNTO SELECIONADO DE GEOMETRIAS	42
3.4	MÉTODO DE ENUMERAÇÃO: VISÃO GERAL	45
3.5	MÉTODO DE ENUMERAÇÃO: EXEMPLO TRABALHADO	49

3.6	TABELAS DE ESTEREOISÔMEROS	55
3.7	ESTEREOISOMERIA DE COMPLEXOS METÁLICOS EM FASE LÍQUIDA	56
3.8	FÓRMULA PARA O CÁLCULO DO NÚMERO DE SIMETRIA.	58
3.9	EVIDÊNCIA EXPERIMENTAL DOS RANDOM COORDINATION RATIOS	62
4	IDENTIFICAÇÃO DOS ESTEREOISÔMEROS	63
4.1	INTRODUÇÃO	63
4.2	DETERMINAÇÃO DA GEOMETRIA DO POLIEDRO DE COORDENAÇÃO	65
4.3	GEOMETRIAS DISTORCIDAS	68
4.4	IDENTIFICADOR DO ESTEREOISÔMERO: MÉTODO DA IUPAC	69
4.5	IDENTIFICADOR DO ESTEREOISÔMERO APRESENTADO NO NOSSO TRABALHO ANTERIOR ²⁹	71
4.6	PROPOSTA DE UM NOVO IDENTIFICADOR	73
4.7	IDENTIFICADOR DO ESTEREOISÔMERO: EXEMPLO	75
4.8	ESPECIFICIDADES DOS COMPOSTOS QUELADOS	77
4.9	IDENTIFICAÇÃO DE ESTEREOISÔMEROS EM COMPOSTOS QUELADOS	80
4.10	ALGORITMO DO IDENTIFICADOR DO ESTEREOISÔMERO	84
4.11	OBTENÇÃO DAS PRIORIDADES LOCAIS	84
4.12	IDENTIFICADOR DO ESTEREOISÔMERO	86
4.13	RECONHECIMENTO DE QUIRALIDADE NO COMPLEXO DE CÓDIGO CRISTALOGRAFICO ATIWIK	86
4.14	APLICAÇÃO DO IDENTIFICADOR A UM BANCO DE DADOS	90
4.15	COMPLEXOS BIMETÁLICOS	94
5	COMPLEX BUILD: UM SOFTWARE PARA MONTAGEM DA GEOMETRIA DE COMPLEXOS LANTANÍDEOS	101

5.1	OBJETIVO	102
5.2	SOFTWARE COMPLEX BUILD: PROTÓTIPO EM QT	102
5.3	DEFINIÇÃO DOS PONTOS DE REFERÊNCIA PARA A COORDENAÇÃO COM O METAL	105
5.4	TRATAMENTO DOS LIGANTES	106
5.4.1	<i>Ligantes Monodentados</i>	106
5.4.2	<i>Ligantes Bidentados</i>	107
5.4.3	<i>Ligantes Tridentados Laminares</i>	109
5.4.4	<i>Ligantes Tridentados Faciais</i>	109
5.5	MONTAGEM DO COMPLEXO	110
5.6	ESTUDO DE CASO: ESTEREOISÔMEROS DO COMPLEXO JALNIU	112
5.7	ARREFECIMENTO SIMULADO	116
5.8	ADIÇÃO DE NOVOS LIGANTES À BIBLIOTECA	119
6	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	121
	REFERÊNCIAS	125
	APÊNDICE A - TABELAS REFERENTES A ENUMERAÇÃO DE ESTEREOISÔMEROS FEITA NESTE TRABALHO	132
	APÊNDICE B - GEOMETRIAS IDEAIS PARA VÁRIOS SHAPES E NÚMEROS DE COORDENAÇÃO	292
	APÊNDICE C - OUTROS TRABALHOS FINALIZADOS DURANTE O PERÍODO DE DOUTORADO	298

1 INTRODUÇÃO

1.1 ESTEREOISOMERISMO EM COMPLEXOS METÁLICOS

Alfred Werner, laureado com o prêmio Nobel de química em 1913, comentou em uma palestra que, por muitos anos, ele via um dilema a respeito de complexos metálicos¹. Na ocasião, haviam três propostas para a geometria dos complexos de coordenação 6: plana, trigonal prismática e octaédrica. Os possíveis estereoisômeros dessas geometrias para a fórmula molecular Ma_4b_2 e.g. $[\text{CoCl}_2(\text{NH}_3)_4]^+$ estão apresentados na Figura 1.

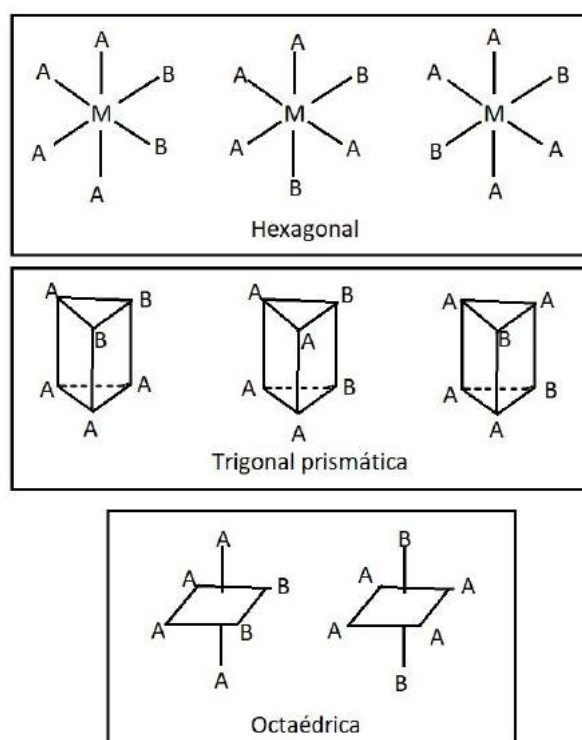


Figura 1. Estereoisômeros da fórmula molecular Ma_4b_2 . As três geometrias apresentadas foram consideradas por Alfred Werner no estudo dos complexos metálicos.

Werner encontrou a solução para a geometria desses compostos realizando uma análise do estereoisomerismo¹. Caso os complexos assumissem as formas plana ou trigonal prismática, esses deveriam formar 3 estereoisômeros. No entanto, caso os complexos fossem octaédricos, apenas 2 estereoisômeros poderiam ser sintetizados com essa fórmula molecular (Figura 1). Após extenso trabalho experimental, foi observada a impossibilidade de encontrar três estereoisômeros com a fórmula molecular Ma_4b_2 .

Werner¹ comenta que as diferenças entre os diastereoisômeros sintetizados eram tão grandes que poderiam ser observadas sem o uso de aparelhos. Os complexos com dois cloretos, por exemplo, podiam gerar um isômero verde e outro violeta. Os experimentos indicavam a existência de apenas dois estereoisômeros. Portanto, Werner concluiu que a geometria deveria ser octaédrica.

Supondo que a geometria fosse octaédrica e realizando uma análise dos estereoisômeros, Werner previu a isomeria óptica para esses compostos. A quiralidade de complexos inorgânicos foi então confirmada experimentalmente pelo grupo do próprio Werner. Os complexos de fórmula molecular: *cis*-[CoCl₂en₂] e *cis*-[CrCl₂en₂] foram sintetizados e os cristais resultantes foram separados pelo método de Pasteur². Os estereoisômeros *trans*-[CoCl₂en₂] e *trans*-[CrCl₂en₂] correspondentes, não apresentaram isomeria óptica, mesmo após incansáveis tentativas¹.

Estereoisomeria é uma parte indissociável da química inorgânica. Por exemplo, compostos de platina são muito utilizados em tratamentos de câncer³. Para essas substâncias, é conhecido que o estereoisômero *cis* possui atividade biológica enquanto o *trans* é inerte⁴. Essas diferenças nas propriedades se tornaram um paradigma na relação entre estrutura e atividade (SAR – *structure-activity relationships*) desses compostos. Existem outros complexos que também apresentam diferenças nas propriedades com base na estereoisomeria *cis-trans*^{5,6}. Outro exemplo é a molécula carvona (2-Metil-5-(1-metiletenil)-2-ciclohexenona). A carvona é quiral, portanto, possui um par de estereoisômeros (enantiômeros) que correspondem à imagem especular não superponível. Nesta molécula, há drásticas mudanças nas interações dos enantiômeros com o olfato humano: uma das estruturas da carvona possui cheiro de hortelã e a outra possui cheiro de cominho⁷.

Quanto à atividade óptica, existe uma área de pesquisa chamada síntese assimétrica de compostos de coordenação. Nessa, há um esforço em gerar complexos enantiomericamente puros⁸. Zelewski e Drahoňovský, por exemplo, sintetizaram o complexo Δ -[M(propano-1,2-diamino)₃] e a rotação específica da luz polarizada pôde ser medida⁸ como sendo igual a $[\alpha]_D = -218^\circ$, um valor bastante significativo. Como comparação, o desvio da luz polarizada do ácido tartárico⁹ (2S,3S), por exemplo, é $[\alpha]_D = -11,98^\circ$.

Em fase sólida, a difração de raios X permite a resolução da geometria. Porém, à exceção dos complexos octaédricos, não se tem notícia de uma notação que defina de forma inequívoca um estereoisômero cristalográfico de complexos metálicos.

Em fase líquida, a identificação pode ser feita através de técnicas como espectroscopia de infravermelho e de RMN. Porém, com essas técnicas, a identificação em geral é mais trabalhosa¹⁰. O complexo de $\text{PtCl}_2(\text{tri}-(2\text{-cianoetil})\text{fosfina})$, por exemplo, foi sintetizado e identificado pela primeira vez como sendo do tipo *trans*¹¹. Porém, tempos depois foi descoberto que o resultado da síntese era, na realidade, uma mistura dos estereoisômeros *cis* e *trans*¹².

Apesar da quiralidade e estereoisomeria em complexos de metais de transição serem conhecidas desde as pesquisas pioneiras de Werner, este reconhecimento ainda é incipiente no caso de complexos de íons lantanídeos.

De qualquer forma, há estudos sobre o estereoisomerismo em complexos de íons lantanídeos com ligantes na forma de anéis¹³⁻¹⁷. Lebdusková et al., por exemplo, observam que complexos com o ligante DOTA (ácido 1,4,7,10-tetraazaciclododecano-1,4,7,10-tetraacético) podem se apresentar na forma de antiprisma quadrado ou na de antiprisma quadrado torcido. A proporção entre essas duas geometrias é relevante em aplicações como agente de contraste para ressonância magnética de imagem (MRI)¹⁷. Da mesma forma, Amin et al.¹⁶ encontraram dois pares de enantiômeros para o complexo de fórmula molecular $[\text{Eu}(1,4,7,10\text{-Tetrakis}(\text{carbamoilmetil})\text{-}1,4,7,10\text{-tetraazaciclododecano})(\text{H}_2\text{O})]$, onde os diastereoisômeros resultantes apresentaram picos de luminescência em frequências diferentes. Segundo os autores, isso foi surpreendente devido à grande similaridade do ambiente químico em torno do Eu^{3+} para os dois casos¹⁶.

Para que os estereoisômeros sejam estudados através de métodos computacionais, é necessário conhecer todas as suas possíveis estruturas. Em complexos octaédricos, alguma complexidade é observada nesses estudos. Por exemplo, caso todos os ligantes sejam monodentados e diferentes, complexos octaédricos podem apresentar 30 possíveis estereoisômeros.

Em complexos de íons lantanídeos com ligantes monodentados, a geometria antiprisma quadrado de número de coordenação 8 é a mais comumente encontrada. Caso todos os ligantes monodentados sejam distintos entre si, o número de possíveis estereoisômeros é 5040¹⁸.

Hay et al., ao estudar compostos de catecolato e água percebeu que haviam 67 estereoisômeros possíveis para seus complexos. Os pesquisadores então construíram manualmente todas as 67 geometrias, calcularam todas e identificaram as que poderiam ser as mais estáveis¹⁹. Este processo é penoso porque é bastante difícil essa construção de estruturas de complexos garantindo que as 67 geometrias sejam todas diferentes e que ao

mesmo tempo formem um conjunto completo de geometrias possíveis. Isso sugere a necessidade de um *software* que permita a construção de estereoisômeros de uma forma geral e sistematizada.

No sentido de sistematizar essa construção, em primeiro lugar, o número de estereoisômeros pode ser calculado usando os princípios de enumeração de George Pólya^{18,20-24}. Krivoshei e Vvedenskii, por exemplo, usaram esse princípio para contar os complexos monodentados de coordenação 4 a 8¹⁸. Haigh aplicou esses princípios para complexos bidentados de coordenação 7 e 8²⁵⁻²⁷. Bennet desenvolveu um algoritmo para realizar essa enumeração, aplicando-o a complexos de coordenação 6 e 8²⁸. Em nosso grupo, um *software*, nomeado *Stereoisomer Enumeration* foi desenvolvido para realizar a enumeração de complexos de número de coordenação de 4 a 10 incluindo as propriedades: quiralidade, identificação, estrutura e *random coordination ratio*²⁹.

1.2 MOTIVAÇÃO

Complexos de íons lantanídeos apresentam-se em uma grande variedade de aplicações, como em biomedicina³⁰, espectroscopia³¹, *self-assembly*³², nanopartículas³³, polímeros³⁴, luminescência³⁵, luminescência de luz polarizada³⁶, histerese magnética³⁷ entre outras. Mesmo com essa variedade, detectamos que o estudo do estereoisomerismo nesses complexos ainda está na sua infância.

Consideramos, por exemplo, o complexo tetrakis(6,6,6-trifluoro-2,2-dimetil-3,5-hexanodionato)-cerium(IV), $[\text{Ce}(\text{fdh})_4]^-$ ³⁸. Caso um pesquisador deseje realizar a construção das coordenadas cartesianas que caracterizam a geometria desse complexo, o pesquisador irá se deparar com pelo menos 349 possibilidades diferentes, sendo essas as possibilidades de estereoisomerismo para as geometrias mais comuns desse complexo. Esse número de possibilidades motiva a construção de um *software* que automatize essa construção de estereoisômeros, dado que a construção manual de todas essas 349 estruturas com a garantia de formarem um conjunto completo com todas as geometrias corretas, sem incorrer em erros, é muito difícil. Uma outra inquietação sobre esse número de estereoisômeros é a seguinte: os estereoisômeros seguem algum padrão? É possível prever quais são os estereoisômeros mais prováveis a partir de princípios fundamentais? Estas respostas são inacessíveis caso não se saiba quantos estereoisômeros existem para um determinado complexo e quais são eles.

O complexo $[\text{Ce}(\text{fdh})_4]^-$ por exemplo, aparece como um par de enantiômeros em uma cristalização preparada com NaOH e como um diastereoisômero diferente em outra cristalização preparada com NH_4OH . A existência destes 3 estereoisômeros bem caracterizados do $[\text{Ce}(\text{fdh})_4]^-$ indicam que o estereoisomerismo em complexos de lantanídeos é um fenômeno real que não pode ser ignorado.

Neste trabalho, partimos da premissa de que é necessário conhecer todos os estereoisômeros possíveis para um determinado complexo. Também consideramos que é necessário, dado um conjunto de coordenadas cartesianas e conectividades, identificar um dado estereoisômero que tenha sido obtido por cristalografia. Consideramos que apenas com a posse dessas duas ferramentas é que será possível estudar complexos metálicos como o $[\text{Ce}(\text{fdh})_4]^-$. Portanto, neste trabalho, objetivamos construir ferramentas para o estudo da estereoisomeria em complexos metálicos.

1.3 ORGANIZAÇÃO DESTA TESE

Esta tese foi dividida em sete capítulos. O primeiro capítulo apresenta uma introdução sobre o estereoisomerismo em complexos metálicos junto com a apresentação de trabalhos na literatura relevantes para este tema.

O segundo capítulo apresenta um método para se obter uma representação única para uma dada fórmula molecular genérica de um composto de coordenação em função de um centro metálico. Essa representação permite construir um algoritmo que gera todas as fórmulas moleculares possíveis para um dado número de coordenação. Adicionalmente, a representação única de fórmulas moleculares impacta na hora de construir um único índice para caracterizar cada estereoisômero possível para a fórmula molecular em questão.

O terceiro capítulo apresenta os métodos que desenvolvemos para realizar a listagem dos estereoisômeros. Os princípios de enumeração de George Pólya²⁴ nos permitem calcular o número de estereoisômeros (válido apenas para ligantes monodentado, generalizados para bidentados por Haigh²⁶). Porém, para a montagem de estruturas, há a necessidade de se conhecer cada conjunto de coordenadas dos poliedros de coordenação de cada estereoisômero possível. Para isso, construímos um algoritmo computacional com a finalidade de realizar a enumeração dos possíveis estereoisômeros para um dado poliedro de coordenação. Observamos que, dessa enumeração, emerge uma propriedade dos estereoisômeros a que nomeamos razões de coordenação aleatória, do

inglês *random coordination ratios* (RCR), a qual determina qual a probabilidade de se encontrar um complexo com uma determinada fórmula genérica em um determinado grupo pontual.

O quarto capítulo apresenta os métodos que desenvolvemos para a identificação dos estereoisômeros com base em suas coordenadas cartesianas e conectividades. Neste capítulo, comparamos a abordagem que desenvolvemos com a apresentada pela IUPAC³⁹ (*International Union of Pure and Applied Chemistry*). Defendemos que nossa abordagem é mais geral e de mais fácil aplicação do que a proposta pela IUPAC.

No quinto capítulo apresentamos o *Complex Build*, um *software* em construção que objetiva realizar a construção automatizada de estereoisômeros de complexos de lantanídeos.

No sexto capítulo apresentamos as conclusões e perspectivas deste trabalho.

No apêndice A apresentamos todas as tabelas dos resultados da enumeração de estereoisômeros apresentadas em nosso artigo²⁹.

No apêndice B apresentamos todas as geometrias estudadas neste trabalho.

No apêndice C apresentamos outros dois trabalhos que realizei durante este período de doutorado. O primeiro⁴⁰ foi o desenvolvimento de um algoritmo genético para o estudo de clusters atômicos e moleculares e o segundo⁴¹ apresenta uma aplicação deste algoritmo a clusters de nitrogênio.

Por fim, em anexo apresentamos um arquivo compactado de nome SilvaFT_codigos_fonte.rar. Dentro do SilvaFT_codigos_fonte.rar contém o código fonte do programa de computador que usamos no artigo *Stereoisomerism in lanthanide complexes: enumeration, chirality, identification, random coordination ratios*²⁹. Esse código está presente no seguinte caminho: `codigos_fonte\StereoisomerEnumeration`.

Dentro do arquivo SilvaFT_codigos_fonte.rar também está disponibilizado o novo código de identificação com os métodos apresentados no capítulo 3. Este está presente no seguinte caminho: `codigos_fonte\StereoisomerIdentifier`.

2 PROPOSTA DE NOVAS REGRAS PARA AS PRIORIDADES DE CAHN- INGOLD-PREHLOG

As regras de Cahn-Ingold-Prehlog⁴² (CIP) são conhecidas pelas suas aplicações em química orgânica na determinação da estereoisomeria R e S. No entanto, a IUPAC também recomenda o uso dessas regras para o estudo do estereoisomerismo em complexos metálicos. Na primeira seção deste capítulo apresentaremos as regras de Cahn-Ingold-Prehlog.

Observamos que as regras CIP são insuficientes para se construir uma representação única de uma estrutura molecular genérica de um complexo metálico com elevados números de coordenação, por isso, neste capítulo, adicionamos 3 novas regras às regras CIP. A adição dessas regras permite uma representação única para cada fórmula molecular de cada estereoisômero de um centro de coordenação metálico de número de coordenação arbitrário (seção 2.2).

Neste trabalho, usamos a seguinte notação para caracterizar complexos monometálicos: as letras a, b, c e etc. caracterizam ligantes monodentados, as letras entre parênteses (A_2), (AB), (A_2B) caracterizam ligantes polidentados. Neste caso, a repetição de letras corresponde a átomos de simetria equivalente, por exemplo, nesta notação, o ligante (A_2) é um ligante bidentado simétrico.

Por exemplo, com o uso das novas regras, um complexo de fórmula molecular $Ma_3b_2(A_2)(AB)_2$ é representado pelo seguinte conjunto de prioridades: [1 1 1 2 2 3 3 4 4 5 5]. Nesse caso, o número 1 representa os monodentados “a”, 2 representa os monodentados “b”, 3 representa os átomos doadores dos bidentados simétricos (A_2) e, por fim, os números 4 e 5 correspondem aos átomos doadores do bidentado assimétrico (AB), os quais devem ser diferenciados com as regras de Cahn-Ingold-Prehlog (seção 2.3).

A partir dos princípios de enumeração de George Pólya²⁴, é possível determinar o número de estereoisômeros de um complexo a partir da sua fórmula molecular e geometria do poliedro de coordenação. As novas regras que propomos permitem uma representação única das fórmulas moleculares, permitindo, portanto, que cada

estereoisômero gerado pelo Pólya seja representado por um único índice. Observa-se que essa unicidade pode não existir nos métodos apresentados pela IUPAC quando há repetição de ligantes e/ou quando existem ligantes polidentados para determinados *shapes* (seção 2.2).

As novas regras que propomos também foram úteis na hora de gerar fórmulas moleculares. O método que utilizamos para construir todas as fórmulas moleculares possíveis para complexos monometálicos consistiu em construir todas as permutações de prioridades e denticões possíveis, eliminando as que correspondem à mesma fórmula molecular. Usamos as novas regras que propomos como critério para distinguir fórmulas moleculares (seção 2.4).

2.1 PRIORIDADES DE CAHN-INGOLD-PREHLOG

Na química orgânica, para que a estereoisomeria de um carbono assimétrico seja definida é necessário atribuir a cada substituinte um número único. Esses números são obtidos através da aplicação de uma convenção proposta por Cahn-Ingold-Prehlog⁴² (CIP). As regras CIP estabelecem a prioridade dos substituintes ou ligantes conectados a um centro estereogênico. Em química orgânica, essas regras são conhecidas quando se faz a determinação da configuração absoluta em carbonos assimétricos (R ou S). Essas mesmas regras também são usadas para classificar a isomeria Z/E em ligações duplas.

O uso das prioridades de Cahn-Ingold-Prehlog são menos conhecidas em química inorgânica, mas a IUPAC sugere também o uso dessas regras na atribuição do *configuration index* de complexos octaédricos: “The procedure for assigning priorities in mononuclear coordination systems is based on the standard sequence rules developed for chiral carbon compounds by Cahn, Ingold and Prelog” (IR-9.3.5.2³⁹).

As regras de Cahn-Ingold-Prehlog estão apresentadas a seguir^{42,43}.

Regra 1. Considerando os átomos diretamente ligados ao centro estereogênico, quanto maior o número atômico, maior a prioridade;

Regra 2. Se houver dois ou mais átomos com o mesmo número atômico, deve-se avaliar os próximos átomos nos ligantes até um ponto em que uma diferença seja encontrada. A prioridade, nesse caso, será avaliada em função deste ponto.

Regra 3. Se dois átomos têm o mesmo número atômico, mas massas diferentes (isótopos), o átomo com maior massa precede o de menor massa;

Regra 4. Ligações duplas ou triplas são contadas como se fossem divididas em duas ou três ligações simples, respectivamente;

Regra 5. Para compostos onde apenas diferenças de configuração entre ligantes sejam detectadas, deve-se usar as seguintes regras:

- a. Ligações duplas cis, precedem ligações trans que, por último, precedem ligações não estereogênicas;
- b. Unidades estereogênicas quirais precedem unidades estereogênicas pseudossimétricas, as quais precedem as unidades não estereogênicas.
- c. Ao considerar unidades estereogênicas, os pares repetidos precedem os sem repetição. Por exemplo, os pares R, R ou S, S precedem os pares R, S ou S, R.
- d. r precede s (quiralidade de um carbono pseudoassimétrico).
- e. R precede S.

Na figura 2 apresentamos a aplicação das regras CIP a um carbono assimétrico. No caso apresentado, observa-se que as prioridades dos carbonos são maiores do que a dos hidrogênios (**Regra 1**); que o número de massa maior, no caso do deutério, precede o número de massa menor, que é o caso do hidrogênio; e, por fim, observando o primeiro ponto de diferença: etil precede metil.

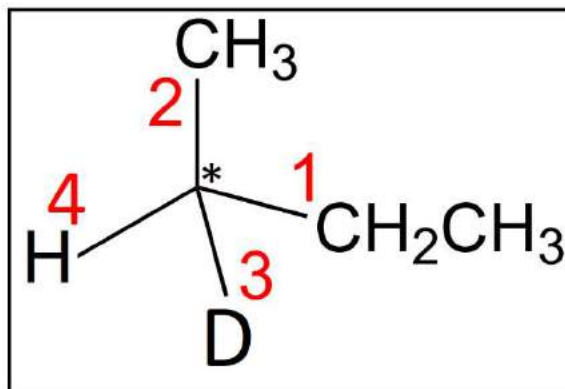


Figura 2. Aplicação das regras CIP na molécula de butano. O asterisco indica o possível centro estereogênico. A letra D se refere a deutério. As prioridades de cada um dos radicais estão representadas por números em vermelho. Observa-se que há dois átomos de carbono ligados ao centro estereogênico. Porém, diferentes prioridades são atribuídas a cada um desses carbonos devido aos diferentes grupos químicos ligados aos mesmos. Também se observa que a prioridade do deutério é maior do que a do hidrogênio.

Neste trabalho, utilizamos as regras CIP para resolver conflitos. Porém, verificamos a necessidade de adicionar novas regras ao cânone original. As novas regras que propomos estão apresentadas na seção seguinte.

2.2 GENERALIZAÇÃO DAS REGRAS CIP PARA CENTROS ESTEREOGÊNICOS METÁLICOS COM COORDENAÇÕES REPETIDAS E/OU LIGANTES QUELANTES.

Nesta seção, apresentaremos como diferenciar os ligantes de um dado complexo mediante a aplicação das regras CIP. Adicionalmente, observamos que os métodos da IUPAC³⁹ levam a degenerescências as quais podem ser eliminadas caso 3 novas regras sejam adicionadas ao cânone original proposto por Cahn-Ingold-Prehlog⁴². Por motivo de clareza, as regras serão aplicadas à molécula orgânica butano. Porém, os princípios apresentados nesta seção são gerais e aplicáveis para qualquer complexo metálico.

Na química orgânica, para que a estereoisomeria de um carbono assimétrico seja definida é necessário atribuir a cada substituinte um número único. Esses números são obtidos através da aplicação de uma convenção proposta por Cahn-Ingold-Prehlog. A figura 3 apresenta uma aplicação dessas regras.

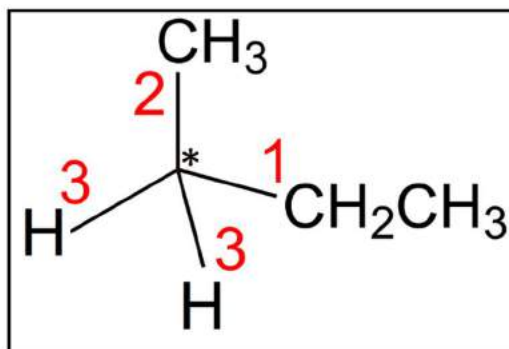


Figura 3. Aplicação das regras CIP à molécula de butano. O asterisco indica o possível centro estereogênico. As prioridades de cada um dos radicais estão representadas por números em vermelho. Observa-se que há dois átomos de carbono ligados ao centro estereogênico. Porém, diferentes prioridades são atribuídas a cada um desses carbonos devido aos diferentes grupos químicos ligados aos mesmos. Nesse caso, há dois grupos de mesmas prioridades, portanto, este centro é aquiral.

Para complexos metálicos, a IUPAC também recomenda o uso das regras CIP para realizar a diferenciação entre ligantes: “The procedure for assigning priorities in mononuclear coordination systems is based on the standard sequence rules developed for chiral carbon compounds by Cahn, Ingold and Prelog” (IR-9.3.5.2³⁹).

Neste trabalho, utilizamos as regras CIP para resolver conflitos, porém, verificamos a necessidade de adicionar novas regras ao cânone original.

A adição de novas regras tem como base algumas degenerescências que observamos no método sugerido pela IUPAC. Por exemplo, para a fórmula molecular $\text{Ma}_2\text{b}_2\text{cd}$ e *shape* OC-6 existem 8 estereoisômeros possíveis, fato que pode ser confirmado com a aplicação dos princípios de enumeração de George Pólya²⁴. Seguindo as regras da IUPAC, um complexo do tipo $\text{Ma}_2\text{b}_2\text{cd}$ -OC-6 possui 6 conjuntos de prioridades possíveis: [1 1 2 2 3 4], [1 1 2 3 3 4], [1 1 2 3 4 4], [1 2 2 3 3 4], [1 2 2 3 4 4], [1 2 3 3 4 4]. Portanto, existem 48 códigos diferentes para descrever os mesmos 8 estereoisômeros. Para que haja uma correspondência biunívoca entre um código identificador do estereoisômero e um dos 8 obtidos a partir dos princípios matemáticos de George Pólya, novas regras precisam ser adicionadas ao cânone de Cahn-Ingold-Prelog para eliminar a redundância. Esta redundância pode ser muito maior ainda para complexos com números de coordenação mais elevados.

A primeira regra que propomos deve ser aplicada antes de todas as demais, inclusive as regras CIP, que enunciamos abaixo.

Nova regra 1. Átomos equivalentes coordenados em maior quantidade precedem os átomos equivalentes coordenados em menor quantidade. Por átomo equivalente entende-se átomos que são considerados iguais de acordo com as regras de CIP.

A figura abaixo exemplifica uma aplicação dessa nova regra na molécula apresentada na figura 4.

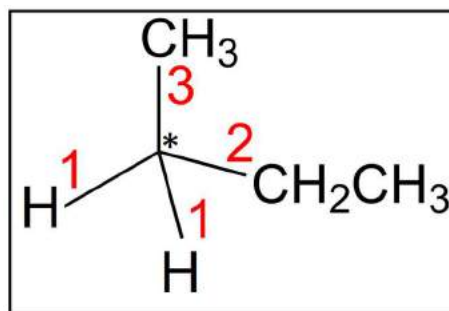


Figura 4. Atribuição das prioridades na molécula butano. O asterisco indica o possível centro estereogênico em estudo e as prioridades de cada um dos radicais estão representadas por números em vermelho. A **Nova regra 1** que sugerimos atribui maior prioridade a átomos equivalentes em maior quantidade. Observa-se que o hidrogênio recebeu o índice de maior prioridade pois possui mais átomos de simetria equivalente (2 substituintes do tipo H). Os dois compostos de mesma quantidade (1 substituinte do tipo CH_3 e 1 substituinte do tipo CH_2CH_3) receberam suas prioridades com base nas regras CIP. Nesse caso, há dois grupos de mesmas prioridades, portanto, este centro é aquiral.

A adição da **Nova Regra 1** faz com que complexos do tipo $\text{Ma}_2\text{b}_2\text{cd-OC-6}$ tenham apenas um conjunto de prioridades possíveis: [1 1 2 2 3 4], tornando a correspondência entre códigos e estereoisômeros biunívoca.

No entanto, para ligantes de maior denticção, outras duas regras são necessárias para diferenciar as prioridades. Quando temos o mesmo número de átomos equivalentes, novas regras precisam ser estabelecidas para diferenciar a prioridades dos átomos. A **Nova Regra 2**, enunciada a seguir, estabelece diferenças quando as denticções dos ligantes são diferentes.

Nova regra 2. Ligantes de menor denticção precedem ligantes de maior denticção.

A **Nova regra 2** não descreve como distinguir dois ligantes que possuem a mesma denticção. Por exemplo, o tridentado com dois átomos equivalentes e um diferente (A_2B) e o tridentado com os três átomos coordenados diferentes (ABC) também precisam ser distinguidos. Para isso, geramos o que chamamos de prioridades canônicas, que são as prioridades de cada átomo do ligante polidentado caso apenas este ligante esteja coordenado ao metal. Por exemplo, caso apenas o ligante (A_2B) esteja ligado ao metal, as prioridades dos átomos doadores (**Nova regra 1**) são: [1 1 2]. Para o caso do ligante (ABC), as prioridades canônicas são: [1 2 3]. A primeira diferença desses dois vetores

acontece na segunda posição, nesta posição, o valor do ligante (A_2B) é 1 e o do ligante (ABC) é 2. De acordo com a **Nova regra 3**, enunciada abaixo, ligantes do tipo (A_2B) devem preceder os ligantes do tipo (ABC).

Nova regra 3. Ligantes de mesma denticção são distinguidos pelo primeiro ponto de diferença nas suas prioridades canônicas.

Essas regras devem ser aplicadas apenas caso haja empate na **Nova regra 1**. Por exemplo, para a fórmula molecular $Ma_3b_2(A_2)(AB)_2$, e levando em consideração a **Nova regra 1**, o único conjunto de prioridades possíveis para essa fórmula molecular é: [1 1 1 2 2 3 3 4 4 5 5].

Aplicando a **Nova regra 1** ao composto de fórmula molecular $Ma_3b_2(A_2)(AB)_2$, atribui-se a prioridade 1 ao ligante do tipo “a”, pois esse está em maior quantidade. Os demais átomos doadores apresentam-se em mesma quantidade e mais regras são necessárias para distingui-los.

Aplicando a **Nova regra 2** ao composto de fórmula molecular $Ma_3b_2(A_2)(AB)_2$ concluímos que a prioridade de monodentados precede a de bidentados, portanto, a prioridade 2 é atribuída ao ligante do tipo “b”.

Para saber qual possui maior prioridade entre os ligantes bidentados (A_2) e (AB) é necessário aplicar a **Nova regra 3**. Nesse caso, há a necessidade de gerar as prioridades canônicas desses bidentados. As prioridades canônicas são as prioridades possíveis caso apenas o polidentado em questão estivesse ligado ao metal. Nesse caso, o (A_2) possui prioridades canônicas [1 1] e o (AB) possui prioridades canônicas [1 2]. Para esses dois vetores, o primeiro ponto de diferença é a posição 2. Neste ponto, (A_2) possui prioridade 1 e (AB) possui prioridade 2. Portanto, a prioridade do bidentado (A_2) é maior do que a prioridade do bidentado (AB) no primeiro ponto de diferença. Logo, a prioridade do bidentado (A_2) é maior do que a do bidentado (AB). Nesse caso, aos dois átomos doadores do ligante (A_2) atribui-se a prioridade de número 3.

Por fim, as prioridades 4 e 5 são ambas dos bidentados (AB) e devem ser atribuídas de acordo com as regras CIP.

A adição dessas 3 novas regras ao cânone de Cahn-Ingold-Prehlog torna o conjunto de prioridades único para um dado complexo metálico genérico de qualquer número de coordenação e qualquer conjunto de ligantes em qualquer combinação de denticções. Isso permite que haja uma correspondência biunívoca entre códigos identificadores e os

estereoisômeros gerados por princípios matemáticos fundamentais. Na seção seguinte apresentamos a notação única que utilizamos para representar fórmulas moleculares.

2.3 NOTAÇÃO EMPREGADA PARA REPRESENTAR A COMPOSIÇÕES DOS COMPLEXOS

Nesta seção, será apresentado como as fórmulas moleculares são representadas. É importante notar que houve uma evolução da notação desde o nosso trabalho anterior²⁹.

No *Stereoisomerism in lanthanide complexes: enumeration, chirality, identification, random coordination ratios*²⁹ estudamos apenas ligantes monodentados e bidentados, portanto, não havia a preocupação de construir uma notação que incluísse ligantes de dentição superior. Nesta seção, apresentaremos tanto a notação anterior como a notação mais geral que permite representar fórmulas moleculares com ligantes em qualquer dentição.

2.3.1 Notação para representar fórmulas moleculares apresentada no nosso trabalho anterior²⁹

No nosso trabalho anterior²⁹, representamos os átomos doadores de um determinado complexo por um vetor chamado *reference letter line vector*. Por exemplo, a fórmula molecular Ma_2bcd possui o seguinte *reference letter line vector*: [a a b c d]. Durante a enumeração de estereoisômeros, este vetor é usado para mapear as posições dos átomos doadores no complexo. O mapeamento entre os elementos do vetor e a geometria ideal correspondente será explicado no capítulo 3 desta tese. Por hora, o *reference letter line vector*: [a a b c d] pode ser entendido como uma representação da fórmula molecular Ma_2bcd .

Além do *reference letter line vector*, ligantes polidentados necessitam de uma nova camada de informação. No nosso trabalho anterior, definimos um vetor chamado *bidentate identification number sequence* para representar ligantes bidentados. Essa sequência de números foi exemplificada pela fórmula molecular $\text{Ma}_2\text{b}_2(\text{A}_2)(\text{B}_2)$ caracterizada pelo seguinte *primitive line vector*: (b, A, a, B, b, A, B ; 2 7 5 8).

Nesse caso, as letras minúsculas correspondem a monodentados e as letras maiúsculas correspondem a bidentados. Os números depois do ponto e vírgula são o *bidentate identification number sequence* e apontam para quais ligantes são bidentados. Nesse caso, há dois bidentados. Os dois primeiros números (2 e 7) correspondem ao

primeiro bidentado, composto pelo segundo e sétimo ligantes (A_2). Os dois números seguintes (5 e 8) correspondem ao segundo bidentado, composto pelo quinto e oitavo ligantes (B_2). Essa representação é importante para mapear os ligantes no metal, mas, por hora, o *primitive line vector* (b, A, a, a, B, b, A, B ; 2 7 5 8) pode ser entendido como uma representação da fórmula molecular $Ma_2b_2(A_2)(B_2)$.

No nosso trabalho anterior, geramos um *primitive line vector* para cada fórmula molecular e *shape* e mantivemos esse vetor ao longo de todo o trabalho. No entanto, na ocasião, assim como a IUPAC, não nos preocupamos em construir um código único que representasse as fórmulas moléculas de forma biunívoca. Percebemos a importância dessa representação quando procuramos construir um método geral para a identificação de estereoisômeros.

2.3.2 Notação para representar fórmulas moleculares com a inclusão de todos os tipos de dentações

No nosso trabalho de identificação, as letras do *reference letter line vector* foram substituídas por números que correspondem às prioridades do complexo (*reference priorities vector*). Por exemplo, para a fórmula molecular Ma_2bcd , antes representada por [a a b c d], agora é representada por [1 1 2 3 4].

Na nova notação, apresentamos um conjunto de vetores para representar a relação da fórmula molecular. Os vetores de denteção especificam quais átomos doadores correspondem ao mesmo ligante polidentado. Nesse caso, o *primitive line vector* exemplificado anteriormente e que representa a fórmula molecular $Ma_2b_2(A_2)(B_2)$ tomaria a seguinte forma: (1 1 2 2 3 3 4 4 ; [5 6] [7 8]). Ou seja, o vetor [5 6] corresponde ao quinto e sexto ligantes, portanto, representam o bidentado (A_2) e o vetor [7 8] corresponde ao sétimo e oitavo ligantes e representa o bidentado (B_2).

Outro exemplo é o composto de fórmula molecular $Ma_3b(ABC)$, sendo (ABC) um ligante tridentado. Nesse caso, a fórmula molecular possui a seguinte representação única: (1 1 1 2 3 4 5 ; [5 6 7]). Sendo o vetor [5 6 7] correspondente ao quinto, sexto e sétimo átomos doadores que representam o ligante tridentado.

Todas as fórmulas moleculares, junto com o *primitive line vector* correspondente, estão apresentadas no arquivo SilvaFT_codigos_fonte.rar em anexo. Após descompactar o arquivo SilvaFT_codigos_fonte.rar, as fórmulas moleculares estão no seguinte caminho: `codigos_fonte\StereoisomerIdentifier\code\python\DataAllFormulas.py`. Vale

ressaltar que, por uma questão de eficiência computacional, no arquivo DataAllFormulas.py todos os números iniciam do 0 e não de 1.

2.4 ALGORITMO QUE GERA TODAS AS FÓRMULAS MOLECULARES

Dizer que um complexo possui coordenação 6 não é suficiente para caracterizar sua estrutura. Mesmo dizer que os ligantes são água e cloreto não torna possível determinar a fórmula molecular deste complexo. Por exemplo, um complexo de coordenação 6 e sabendo que os ligantes são água e cloreto, possui sete possibilidades de arranjos: $M(H_2O)_6$, $M(H_2O)_5Cl$, $M(H_2O)_4Cl_2$, $M(H_2O)_3Cl_3$, $M(H_2O)_2Cl_4$, $M(H_2O)_1Cl_5$, MCl_6 . Nesse caso, haviam dois tipos de ligantes, mas no caso geral, para a coordenação 6, podem existir várias combinações possíveis entre monodentados, bidentados e de denticões superiores, resultando em muitas fórmulas moleculares possíveis. Para descrever todo este espaço de possibilidades foi construído um algoritmo para realizar as devidas combinações.

O algoritmo que usamos, nomeado *AllMolecularFormulasGenerator*, fez uso da representação única de fórmula moleculares descrita na seção anterior e das novas regras que sugerimos para serem adicionadas ao cânone de Cahn-Ingold-Prehlog (seção 2.2). Por exemplo, a fórmula molecular $Ma_2b_2(A_2)(B_2)$ toma a seguinte representação única: (1 1 2 2 3 3 4 4 ; [5 6] [7 8]).

Seja N o número de coordenação, o *AllMolecularFormulasGenerator* gera todos os vetores possíveis com N elementos. No interior de cada vetor os números variam de 1 a N. As possibilidades descritas foram geradas sem considerar as permutações internas, dado que os vetores são ordenados no fim. Por exemplo, para N=3, o *AllMolecularFormulasGenerator* gera os seguintes vetores [1 1 1], [1 1 2], [1 1 3], [1 2 2], [1 2 3], [1 3 3], [2 2 2], [2 2 3], [2 3 3] e [3 3 3].

Aplicando a **Nova Regra 1** das prioridades de Cahn-Ingold-Prehlog que propomos e se considerarmos que os números precisam ser crescentes sem interrupção, essas combinações de vetores tornam-se: [1 1 1], [1 1 2] e [1 2 3]. Traduzindo essas prioridades para fórmulas moleculares, teríamos: Ma_3 , Ma_2b e $Mabc$, as quais são as fórmulas moleculares possíveis para um complexo de coordenação 3 com ligantes monodentados. A geração de fórmulas dos compostos quelados seguiu regras semelhantes.

Aplicando essa metodologia, pudemos obter todas as fórmulas moleculares possíveis nas coordenações de 1 a 8. Também obtivemos todas as fórmulas de coordenação 9 contendo apenas ligantes monodentados e/ou bidentados as quais estão apresentadas nas tabelas do apêndice A.

3 LISTAGEM DOS ESTEREOISÔMEROS

Definidos uma fórmula molecular e um poliedro de coordenação, por exemplo, a fórmula molecular $Ma_2b_2c_2$ com o poliedro de coordenação octaedro (OC-6), é possível calcular o número de estereoisômeros para esta combinação a partir dos princípios de enumeração de George Pólya²⁴.

Porém, os princípios de Pólya resultam apenas no número de estereoisômeros, não em suas estruturas. Outra limitação dos princípios de Pólya é que são eficazes apenas no cálculo de estereoisômeros quando todos os ligantes são monodentados. A extensão do Pólya para bidentados é bem mais trabalhosa^{26,27}. Portanto, neste trabalho, construímos um algoritmo, intitulado *Stereoisomer Enumeration* que realiza a listagem de todos os estereoisômeros possíveis incluindo seu grupo pontual e coordenadas cartesianas.

Observamos que, nesta enumeração, emerge uma nova propriedade a que chamamos *random coordination ratio* (RCR). Adicionalmente, a enumeração possibilita que seja definido um método de identificação de estereoisômeros mais eficiente e mais geral do que o proposto pela IUPAC.

Nas seções 3.1 a 3.3 apresentamos os princípios de enumeração de George Pólya aplicados a complexos metálicos. Com esta teoria, dado um poliedro de coordenação e fórmula molecular, é possível determinar o número total de estereoisômeros dos complexos a partir de uma abordagem puramente matemática. No entanto, este método funciona apenas em complexos monodentados. Adicionalmente, o resultado é apenas um número. Neste trabalho, também nos interessamos pelas estruturas e simetrias de cada estereoisômero e por isso desenvolvemos um *software* com esta finalidade.

Nas seções 3.4 a 3.6 apresentamos o método de enumeração empregado neste trabalho. Em resumo, o método consiste em gerar todas as permutações possíveis dos estereoisômeros de um determinado número de coordenação e eliminar as que podem se interconverter através de rotações. Apenas rotações são levadas em consideração dado que as demais operações de simetria provocam quebra e formação de ligações químicas.

Nas seções 3.7 a 3.9 apresentamos aplicações, evidências experimentais e interpretações dos métodos desenvolvidos.

3.1 PRINCÍPIO DE ENUMERAÇÃO DE GEORGE PÓLYA APLICADO A COMPLEXOS METÁLICOS

Em matemática combinatória, o índice de ciclos é um polinômio estruturado de tal forma que informações sobre o grupo de permutações possam ser obtidos simplesmente lendo seus coeficientes. A construção do índice de ciclos para o grupo pontual desejado é um passo essencial na aplicação do teorema de Pólya e será delineado em seguida⁴⁴.

Seja o conjunto $X=\{1,2,3,4,5,6\}$. Uma permutação neste conjunto pode ser representada pela notação de Cauchy (3.1).

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 3 & 2 & 1 & 5 & 6 & 4 \end{pmatrix} \quad 3.1$$

Esta notação relaciona os elementos do conjunto X os transformando com a seguinte regra: $1 \rightarrow 3$, $2 \rightarrow 2$, $3 \rightarrow 1$, $4 \rightarrow 5$, $5 \rightarrow 6$ e $6 \rightarrow 4$. Uma forma de facilitar a obtenção dos polinômios para a aplicação do teorema de Pólya é rescrever essa permutação como um produto de ciclos (3.2).

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 3 & 2 & 1 & 5 & 6 & 4 \end{pmatrix} = (2)(1\ 3)(4\ 5\ 6) \quad 3.2$$

Nesta representação, os elementos que não são afetados pela permutação são chamados de pontos fixos e aparecem sozinhos nos parênteses. Os ciclos são representados de forma que o resultado é o mesmo, independentemente da ordem em que apareçam. Por exemplo, o elemento 4 precisa ser colocado na posição 5, o 5 na posição 6 e o 6 na posição 4 (4 5 6). Isso é equivalente a dizer que o 5 foi colocado na posição 6, o 6 na posição 4 e o 4 na posição 5 (5 6 4). Na permutação cíclica não importa como o ciclo se inicia: o tamanho da mesma é definido pelo número de elementos do ciclo.

De posse das permutações, os monômios do índice de ciclos podem ser facilmente obtidos com a expressão:

$$\prod_{k=1}^n x_k^{j_k} \quad 3.3$$

onde x_k é a variável que representa os ciclos de tamanho k , n é o número de ciclos de tamanhos diferentes e j_k é o número de ciclos iguais de tamanho k . Aplicando (3.3) em (3.2) obtemos: $x_1 x_2 x_3$. Na contagem dos estereoisômeros de complexos, o índice de ciclos é composto pela soma de todos os monômios para todos os elementos de simetria do grupo pontual em questão.

$$Y = \sum_g \prod_{k=1}^n x_k^{g,j_k} \quad 3.4$$

Na equação (3.4) Y é o índice de ciclos, o somatório é sobre g que corresponde às diferentes operações de simetria e os monômios são definidos pelo produtório sobre o tamanho dos ciclos, k.

A aplicação do teorema de Pólya para o problema específico da contagem de estereoisômeros consiste na seguinte substituição no índice de ciclos:

$$x_k = \sum_i^m a_i^k \quad 3.5$$

onde k é o tamanho do ciclo, i é um índice que define o tipo de átomo e m corresponde ao número total de átomos presentes no sistema. É importante destacar que essa abordagem é válida apenas para ligantes monodentados.

Neste ponto, a obtenção da quantidade de estereoisômeros para cada composição é feita substituindo (3.5) em (3.4). Em seguida, as potências precisam ser expandidas e os termos iguais precisam ser agrupados, sendo o expoente o número de átomos daquele tipo. A quantidade de estereoisômeros é identificada simplesmente como o coeficiente do monômio resultante.

3.2 ESTUDO DE CASO: CONTAGEM DOS ESTEREOISÔMEROS PARA A GEOMETRIA BIPIRÂMIDE TRIGONAL

Para a geometria bipirâmide trigonal, a aquisição do índice de ciclos pode ser feita através da aplicação das operações de rotação do grupo D_{3h} . Esta aplicação nos permite encontrar as permutações possíveis do sistema (figura 5).

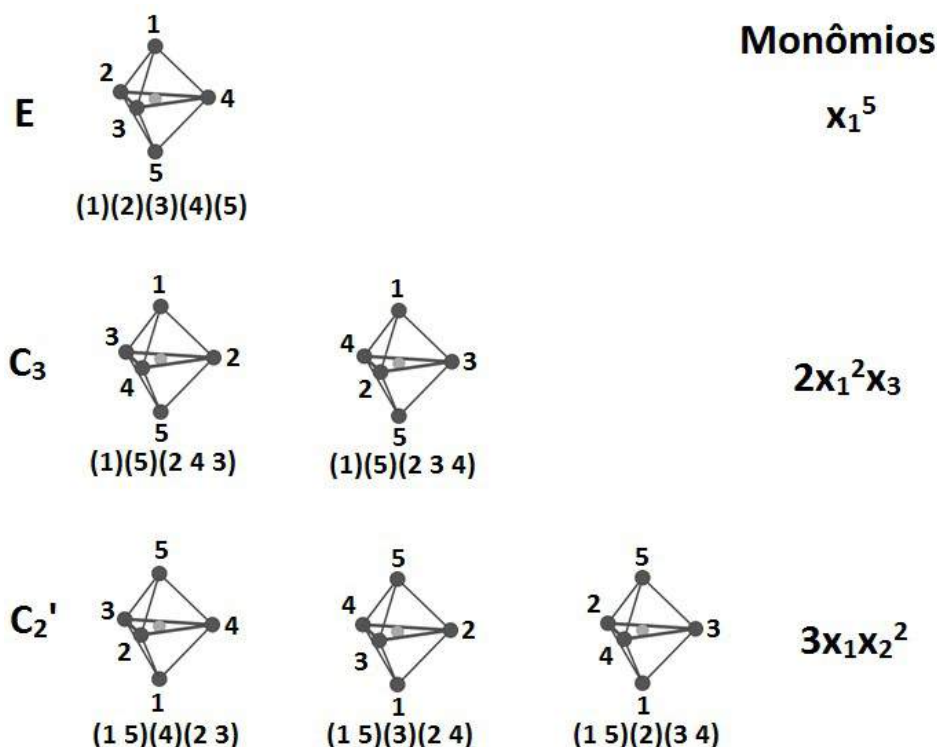


Figura 5. Aplicação das operações de simetria no arranjo em estudo. Os monômios são obtidos com a equação (3.5).

O índice de ciclos é definido como a soma dos monômios divididos pela ordem do grupo (3.6).

$$Y_{BT} = \frac{x_1^5 + 2x_1^2x_3 + 3x_1x_2^2}{6} \quad 3.6$$

Aplicando (3.5) em (3.6), mas substituindo $a_1, a_2 \dots a_n$ por a, b, c , etc., obtêm-se (3.7).

$$Y_{BT} = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} (a+b+c+d+e)^5 \\ +2(a+b+c+d+e)^2(a^3+b^3+c^3+d^3+e^3) \\ +3(a+b+c+d+e)(a^2+b^2+c^2+d^2+e^2)^2 \end{pmatrix} \quad 3.7$$

A expansão dos coeficientes do índice de ciclos pode ser trabalhosa sendo recomendado o uso de um *software* que manipula operações simbólicas como, por exemplo, o Mathematica⁴⁵. A expansão para o caso da bipirâmide trigonal, já agrupada em função das suas fórmulas moleculares, é apresentada na tabela abaixo.

Tabela 1. Expansão do índice de ciclos para átomos na geometria bipirâmide trigonal.

Fórmula Molecular	Expressões	Isômeros
Ma ₅	$a^5+b^5+c^5+d^5+e^5$	1
Ma ₄ b	$2a^4b + 2ab^4 + 2a^4c + 2b^4c + 2ac^4 + 2bc^4 + 2a^4d + 2c^4d + 2b^4d + 2ad^4 + 2bd^4 + 2cd^4 + 2a^4e + 2b^4e + 2c^4e + 2d^4e + 2ae^4 + 2be^4 + 2ce^4 + 2de^4$	2
Ma ₃ b ₂	$3a^3b^2 + 3a^2b^3 + 3a^3c^2 + 3b^3c^2 + 3a^2c^3 + 3b^2c^3 + 3a^3d^2 + 3b^3d^2 + 3c^3d^2 + 3a^2d^3 + 3b^2d^3 + 3c^2d^3 + 3a^3e^2 + 3b^3e^2 + 3c^3e^2 + 3d^3e^2 + 3a^2e^3 + 3b^2e^3 + 3c^2e^3 + 3d^2e^3$	3
Ma ₃ bc	$4a^3bc + 4ab^3c + 4abc^3 + 4a^3bd + 4ab^3d + 4a^3cd + 4b^3cd + 4ac^3d + 4bc^3d + 4abd^3 + 4acd^3 + 4bcd^3 + 4a^3be + 4ab^3e + 4a^3ce + 4ac^3e + 4bc^3e + 4a^3de + 4b^3de + 4c^3de + 4ad^3e + 4bd^3e + 4cd^3e + 4abe^3 + 4ace^3 + 4bce^3 + 4ade^3 + 4bde^3 + 4cde^3 + 4b^3ce$	4
Ma ₂ b ₂ c	$6a^2b^2c + 6a^2bc^2 + 6ab^2c^2 + 6a^2b^2d + 6a^2c^2d + 6b^2c^2d + 6a^2bd^2 + 6ab^2d^2 + 6a^2cd^2 + 6b^2cd^2 + 6ac^2d^2 + 6bc^2d^2 + 6a^2b^2e + 6a^2c^2e + 6b^2c^2e + 6a^2d^2e + 6b^2d^2e + 6c^2d^2e + 6a^2be^2 + 6ab^2e^2 + 6a^2ce^2 + 6b^2ce^2 + 6ac^2e^2 + 6bc^2e^2 + 6a^2de^2 + 6b^2de^2 + 6c^2de^2 + 6ad^2e^2 + 6bd^2e^2 + 6cd^2e^2$	6
Ma ₂ bcd	$10b^2cde + 10ac^2de + 10bc^2de + 10abd^2e + 10acd^2e + 10bcd^2e + 10abce^2 + 10abde^2 + 10acde^2 + 10bcde^2 + 10a^2bcd + 10ab^2cd + 10abc^2d + 10abcd^2 + 10a^2bce + 10ab^2ce + 10abc^2e + 10a^2bde + 10ab^2de + 10a^2cde$	10
Mabcde	$20abcde$	20

Da Tabela 1, é possível extrair os coeficientes das composições desejadas para obter o número de estereoisômeros para a fórmula molecular em questão. É importante observar que os agrupamentos não são feitos com base nos coeficientes e sim no tipo de fórmula molecular, dado que: a, b, c, d e e são genéricos. Por exemplo, o monômio a^3bc é igual ao ab^3c , os quais correspondem a três átomos de um tipo e outros dois diferentes entre si. Essa obtenção de fórmulas moleculares foi melhor discutida no capítulo 2.

A contagem de estereoisômeros com a enumeração de Pólya levou aos mesmos resultados do algoritmo desenvolvido neste trabalho. Por exemplo, o complexo com cinco ligantes monodentados, todos diferentes de geometria bipirâmide de base trigonal possui 20 estereoisômeros de coordenação, sendo esse o mesmo resultado que encontramos nos nossos estudos.

3.3 ÍNDICES DE CICLO PARA UM CONJUNTO SELECIONADO DE GEOMETRIAS

Dos 34 poliedros de coordenação que foram estudados no nosso trabalho anterior²⁹, 19 geometrias não possuíam índice de ciclos disponível. Portanto, geramos os índices de ciclos para esses casos os quais estão apresentados abaixo.

Seesaw SS-4

$$Z(C_{2v}) = \frac{1}{4}(t_1^4 + 2t_1^2t_2 + t_2^2) \quad 3.8$$

$$Z(C_2) = \frac{1}{2}(t_1^4 + t_2^2) \quad 3.9$$

Hexagon HP-6

$$Z(D_{6h}) = \frac{1}{24}(2t_1^6 + 6t_1^2t_2^2 + 8t_2^3 + 4t_3^2 + 4t_6) \quad 3.10$$

$$Z(D_6) = \frac{1}{12}(t_1^6 + 3t_1^2t_2^2 + 4t_2^3 + 2t_3^2 + 2t_6) \quad 3.11$$

Pentagonal pyramid PPY-6

$$Z(C_{5v}) = \frac{1}{10}(t_1^6 + 5t_1^2t_2^2 + 4t_1t_5) \quad 3.12$$

$$Z(C_5) = \frac{1}{5}(t_1^6 + 4t_1t_5) \quad 3.13$$

Heptagon HP-7

$$Z(D_{7h}) = \frac{1}{28}(2t_1^7 + 14t_1t_2^3 + 12t_7) \quad 3.14$$

$$Z(D_7) = \frac{1}{14}(t_1^7 + 7t_1t_2^3 + 6t_7) \quad 3.15$$

Hexagonal pyramid HPY-7

$$Z(C_{6v}) = \frac{1}{12}(t_1^7 + 3t_1^3t_2^2 + 4t_1t_2^3 + 2t_1t_3^2 + 2t_1t_6) \quad 3.16$$

$$Z(C_6) = \frac{1}{6}(t_1^7 + t_1t_2^3 + 2t_1t_3^2 + 2t_1t_6) \quad 3.17$$

Elongated trigonal bipyramid ETBPY-8

$$Z(D_{3h}) = \frac{1}{12}(t_1^8 + 3t_1^4t_2^2 + 4t_2^4 + 2t_1^2t_3^2 + 2t_2t_6) \quad 3.18$$

$$Z(D_3) = \frac{1}{6}(t_1^8 + 3t_2^4 + 2t_1^2t_3^2) \quad 3.19$$

Hexagonal bipyramid HBPY-8

$$Z(D_{6h}) = \frac{1}{24}(t_1^8 + t_1^6t_2 + 3t_1^4t_2^2 + 7t_1^2t_2^3 + 4t_2^4 + 2t_1^2t_3^2 + 2t_2t_3^2 + 2t_1^2t_6 + 2t_2t_6) \quad 3.20$$

$$Z(D_6) = \frac{1}{12}(t_1^8 + 4t_1^2t_2^3 + 3t_2^4 + 2t_1^2t_3^2 + 2t_1^2t_6) \quad 3.21$$

Heptagonal pyramid HPY-8

$$Z(C_{7v}) = \frac{1}{14}(t_1^8 + 7t_1^2t_2^3 + 6t_1t_7) \quad 3.22$$

$$Z(C_7) = \frac{1}{7}(t_1^8 + 6t_1t_7) \quad 3.23$$

Octagon OP-8

$$Z(D_{8h}) = \frac{1}{32}(2t_1^8 + 8t_1^2t_2^3 + 10t_2^4 + 4t_4^2 + 8t_8) \quad 3.24$$

$$Z(D_8) = \frac{1}{16}(t_1^8 + 4t_1^2t_2^3 + 5t_2^4 + 2t_4^2 + 4t_8) \quad 3.25$$

Capped cube CCU-9

$$Z(C_{4v}) = \frac{1}{8}(t_1^9 + 2t_1^5t_2^2 + 3t_1t_2^4 + 2t_1t_4^2) \quad 3.26$$

$$Z(C_4) = \frac{1}{4}(t_1^9 + t_1t_2^4 + 2t_1t_4^2) \quad 3.27$$

Capped square antiprism CSAPR-9

$$Z(C_{4v}) = \frac{1}{8}(t_1^9 + 4t_1^3t_2^3 + t_1t_2^4 + 2t_1t_4^2) \quad 3.28$$

$$Z(C_4) = \frac{1}{4}(t_1^9 + t_1t_2^4 + 2t_1t_4^2) \quad 3.29$$

Enneagon EP-9

$$Z(D_{9h}) = \frac{1}{36}(2t_1^9 + 18t_1t_2^4 + 4t_3^3 + 12t_9) \quad 3.30$$

$$Z(D_9) = \frac{1}{18}(t_1^9 + 9t_1t_2^4 + 2t_3^3 + 6t_9) \quad 3.31$$

Heptagonal bipyramid HBPY-9

$$Z(D_{7h}) = \frac{1}{28}(t_1^9 + t_1^7t_2 + 7t_1^3t_2^3 + 7t_1t_2^4 + 6t_1^2t_7 + 6t_2t_7) \quad 3.32$$

$$Z(D_7) = \frac{1}{14}(t_1^9 + 7t_1t_2^4 + 6t_1^2t_7) \quad 3.33$$

Hula-hoop HH-9

$$Z(C_{2v}) = \frac{1}{4}(t_1^9 + t_1^5t_2^2 + 2t_1t_2^4) \quad 3.34$$

$$Z(C_2) = \frac{1}{2}(t_1^9 + t_1t_2^4) \quad 3.35$$

Triangular cupola JTC-9

$$Z(C_{3v}) = \frac{1}{6}(t_1^9 + 3t_1t_2^4 + 2t_3^3) \quad 3.36$$

$$Z(C_3) = \frac{1}{3}(t_1^9 + 2t_3^3) \quad 3.37$$

Tridiminished icosahedron JTDIC-9

$$Z(C_{3v}) = \frac{1}{6}(t_1^9 + 3t_1^3t_2^3 + 2t_3^3) \quad 3.38$$

$$Z(C_3) = \frac{1}{3}(t_1^9 + 2t_3^3) \quad 3.39$$

Muffin MFF-9

$$Z(C_s) = \frac{1}{2}(t_1^9 + t_1^3t_2^3) \quad 3.40$$

$$Z(C_1) = t_1^9 \quad 3.41$$

Octagonal pyramid OPY-9

$$Z(C_{8v}) = \frac{1}{16} (t_1^9 + 4t_1^3 t_2^3 + 5t_1 t_2^4 + 2t_1 t_4^2 + 4t_1 t_8) \quad 3.42$$

$$Z(C_8) = \frac{1}{8} (t_1^9 + t_1 t_2^4 + 2t_1 t_4^2 + 4t_1 t_8) \quad 3.43$$

Tricapped trigonal prism TCTPR-9

$$Z(D_{3h}) = \frac{1}{12} (t_1^9 + 4t_1^3 t_2^3 + 3t_1 t_2^4 + 2t_3^3 + 2t_3 t_6) \quad 3.44$$

$$Z(D_3) = \frac{1}{6} (t_1^9 + 3t_1 t_2^4 + 2t_3^3) \quad 3.45$$

Para complexos monodentados, os números obtidos através do uso desses índices de ciclo e os números gerados a partir do algoritmo desenvolvido neste trabalho foram iguais.

3.4 MÉTODO DE ENUMERAÇÃO: VISÃO GERAL

Nesta seção e na subsequente apresentaremos o método de enumeração que utilizamos no nosso trabalho anterior²⁹ e é aplicável a complexos com ligantes monodentados e/ou bidentados. Nesse caso, fizemos uma limitação do ângulo máximo de denteção dos complexos bidentados como sendo 90°.

O algoritmo desenvolvido, o qual foi intitulado por nós *Stereoisomer Enumeration*, enumera todos os possíveis estereoisômeros de um determinado complexo metálico e gera todas as geometrias dos poliedros de coordenação correspondentes. Para melhor explicar a metodologia empregada, vamos tomar como exemplo o composto $[PtCl_2(NH_3)_2]$. O composto diamindicloroplatina (II) possui dois estereoisômeros: o cis e o trans. O cis é caracterizado pelos grupos iguais adjacentes. O trans é caracterizado por grupos iguais nos vértices das diagonais de um quadrado (figura 6).

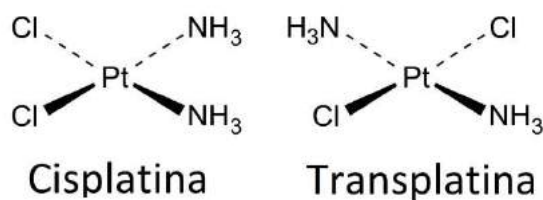


Figura 6. Estereoisômeros do diamindicloroplatina (II).

Quando os complexos são formados por ligantes monodentados, é possível demonstrar que o número de estereoisômeros é definido por sua fórmula molecular e geometria através dos princípios de enumeração de George Pólya²⁴. No caso do diamindicloroplatina (II), sabe-se que a geometria é quadrática. Para o caso de 4 ligantes genéricos, existem 4! formas de encaixar os ligantes nos vértices de um quadrado. No entanto, observa-se que várias dessas formas consistem na mesma estrutura a menos de uma rotação. Porém, estereoisômeros são aqueles que podem se interconverter apenas através de quebras e formações de ligações químicas. Assim, para que a listagem dos mesmos seja obtida é necessário eliminar todos os encaixes que correspondem a rotações dos estereoisômeros.

No *software Stereoisomer Enumeration*, os 4! encaixes são listados na forma de permutações e essas são comparadas entre si de forma a eliminar as estruturas que correspondem a rotações. Para o caso de complexos quadráticos, supondo que o metal central esteja ligado a 4 ligantes genéricos, a remoção das rotações leva à obtenção de apenas 3 estereoisômeros. Todas as demais 21 permutações podem ser encontradas a partir de rotações dessas 3. Na parte superior da figura 7 estão apresentados os três estereoisômeros possíveis para o caso em que os quatro ligantes monodentados são distintos (ligantes = a, b, c e d). Por sua vez, na parte inferior da figura 7, são mostrados os estereoisômeros obtidos quando existem dois tipos de ligantes monodentados idênticos (a=c; b=d) na estrutura do complexo.

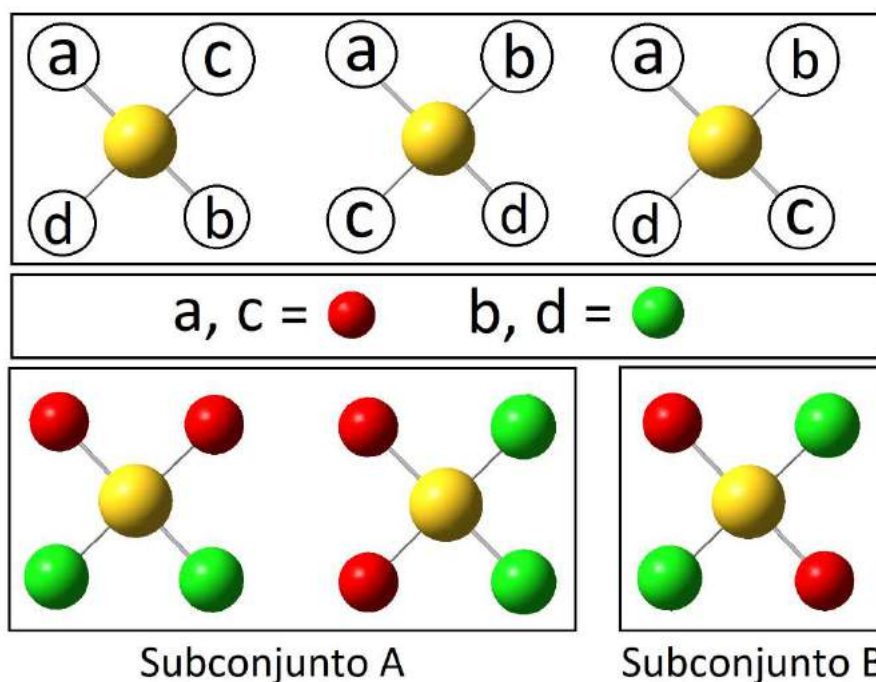


Figura 7. Os possíveis estereoisômeros para complexos quadráticos com todos os ligantes monodentados diferentes, bem como para o caso em que existem dois conjuntos de ligantes monodentados idênticos ($a=c$; $b=d$).

A partir da figura 7, observa-se que dois conjuntos são formados: A e B. Por fim, o estereoisômero presente no conjunto A, de grupo pontual C_{2v} , aparece na proporção 2:1 em relação ao B, de grupo pontual D_{2h} . Não coincidentemente, o número de rotações próprias do grupo A (2 rotações) é metade do número de rotações próprias do grupo B (4 rotações).

Há dois tipos de ligantes monodentados para o $[PtCl_2(NH_3)_2]$: dois cloretos e duas aminas. A nomenclatura que foi usada para caracterizar essa composição é: Ma_2b_2 , em que “a” corresponde a ligantes monodentados de um tipo e “b” corresponde a ligantes monodentados de outro tipo.

A obtenção dos estereoisômeros para o caso do diamindicloroplatina (II) é feita substituindo as permutações genéricas pelos tipos presentes na composição desejada (figura 7). Comparando as estruturas obtidas neste passo, é possível obter o número final de estereoisômeros, nesse caso, dois: um cis e um trans, tal como apresentado acima.

Observa-se que uma nova propriedade emerge com a aplicação deste método. Partindo de um conjunto contendo 3 indivíduos, a substituição fez com que 2 deles se tornassem iguais. A esta propriedade foi dada por nós a denominação de “pesos de

coordenação aleatória”, RCW (*random coordination weights*). Os pesos de coordenação aleatória aparecem quando surgem estereoisômeros degenerados quando comparados ao conjunto de encaixes genérico. No caso do diamindicloroplatina (II), o estereoisômero *cis* possui RCW igual a 2 e o estereoisômero *trans* possui RCW igual a 1. Também observamos, neste trabalho, que o RCW segue um padrão. Em todas as 2861 estruturas apresentadas no nosso artigo²⁹ pudemos relacionar o RCW ao número de rotações próprias dos estereoisômeros. Nesse caso, propomos uma formula conjecturada para essa finalidade a qual está apresentada na seção 3.8.

No caso do complexo $[\text{PtCl}_2(\text{NH}_3)_2]$ e desconsiderando efeitos estéricos e energéticos, a coordenação deste complexo deve ocorrer na proporção *cis-trans* 2:1. Essa proporção 2:1, presente nos complexos $[\text{PtCl}_2(\text{NH}_3)_2]$, constitui-se em um exemplo do que foi nomeado por nós de RCR (*random coordination ratio*). O RCR é agrupado em função dos grupos pontuais dos estereoisômeros. Consiste no número de estereoisômeros com mesmo grupo pontual multiplicado pelo RCW correspondente daquele grupo pontual.

A enumeração como descrita aqui recupera o que é conhecido sobre o complexo diamindicloroplatina (II), ou seja, existem dois estereoisômeros para esse caso: um *cis* e um *trans*. Além deste resultado, nosso método aponta que, se a coordenação fosse aleatória, a formação desses estereoisômeros ocorreria na razão 2:1.

A vantagem deste algoritmo é que ele pode ser aplicado para sistemas maiores, como por exemplo o antiprisma quadrado (SAPR-8), geometria que ocorre frequentemente nos poliedros de coordenação dos complexos de lantanídeos²⁶. Caso todos os ligantes sejam diferentes em um SAPR-8 é possível gerar 5040 estereoisômeros diferentes. Sem auxílio de um *software* de enumeração, obter todas essas estruturas seria uma tarefa desafiadora.

Em resumo, o *Stereoisomer Enumeration* segue as seguintes etapas:

1. Gerar todas as $N!$ permutações, em que N é o número de coordenação;
2. Remover as permutações que se interconvertem através de rotações;
3. Agrupar as permutações que correspondem a imagens especulares, sendo essas geradas a partir da aplicação de um dos planos de simetria da geometria em questão;
4. Substituir as permutações resultantes pela composição do complexo de interesse, nesse processo, as permutações degeneradas são somadas gerando os RCWs;
5. Determinar o grupo pontual de todos os estereoisômeros encontrados.

6. Agrupar estereoisômeros de mesmo grupo pontual gerando o RCRW (*random coordination ratio weights*) que consiste no número de estereoisômeros daquele grupo pontual multiplicado pelo RCW respectivo;
7. Organizar os RCRW em ordem decrescente gerando o RCR. Ao grupo de maior RCR é atribuída a nomenclatura A. O segundo maior grupo é chamado de subconjunto B e assim por diante;
8. Converter as permutações finais em coordenadas cartesianas para que todos os estereoisômeros possam ser visualizados e possam servir como moldes (*templates*) para a construção de um complexo específico de mesma composição, geometria e simetria.

Este protocolo foi aplicado aos seguintes arranjos geométricos: SP-4, SS-4, T-4, vTBPY-4, PP-5, SPY-5, TBPY-5, HP-6, OC-6, PPY-6, TPR-6, COC-7, CTPR-7, HP-7, HPY-7, PBPY-7, BTPR-8, CU-8, ETBPY-8, HBPY-8, HPY-8, OP-8, SAPR-8, TDD-8, CCU-9, CSAPR-9, EP-9, HBPY-9, HH-9, JTC-9, JTDIC-9, MFF-9, OPY-9, e TCTPR-9. Essas geometrias foram escolhidas por serem os poliedros de coordenação sugeridos como mais comuns pelo programa SHAPE⁴⁶⁻⁴⁸ com distância metal-ligante igual a 1.

No nosso artigo, todas as possíveis combinações de complexos contendo ligantes monodentados e/ou bidentados foram geradas com este método²⁹.

3.5 MÉTODO DE ENUMERAÇÃO: EXEMPLO TRABALHADO

Nesta seção, será apresentado um exemplo de como a listagem de todos os possíveis estereoisômeros foi realizada neste trabalho. A geometria que escolhemos para esta tarefa é a *vacant trigonal bipyramid* (vTBPY-4). Essa geometria pertence ao grupo pontual C_{3v} e possui coordenação 4.

Existem 4! permutações para a geometria vTBPY-4, portanto, supondo que todos os ligantes sejam diferentes, existem 4! encaixes desses ligantes. Porém, vamos observar que nem todos os encaixes são estereoisômeros. Nesse caso, existem 8 estereoisômeros que se transformam nas demais 16 permutações através de rotações.

Neste trabalho, as 4! permutações serão representadas por um vetor linha. Na notação que utilizamos, cada posição do vetor é representada por lugares específicos na geometria vTBPY-4. A figura 8 mostra a correspondência entre vetor e geometria.

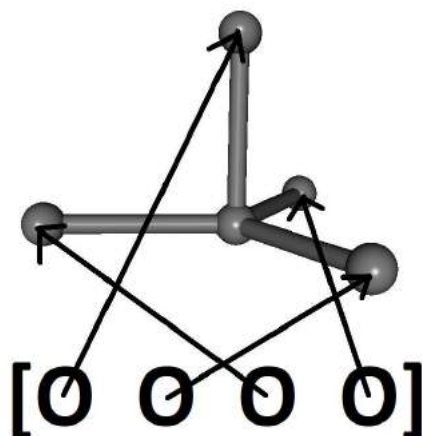


Figura 8. Correspondência entre as posições do vetor de permutações e da geometria vTBPY-4.

Iremos apresentar todas as permutações possíveis para o vTBPY-4, nesse caso, os números correspondem a ligantes diferentes. O número 1 está como roxo, o 2 como azul, o 3 como verde e o 4 como vermelho. As permutações são encaixes diferentes dos ligantes, porém, em alguns casos, é possível converter um encaixe em outro através de rotações. As colunas da figura 9 foram apresentadas de forma a evidenciar as possíveis transformações entre as permutações.

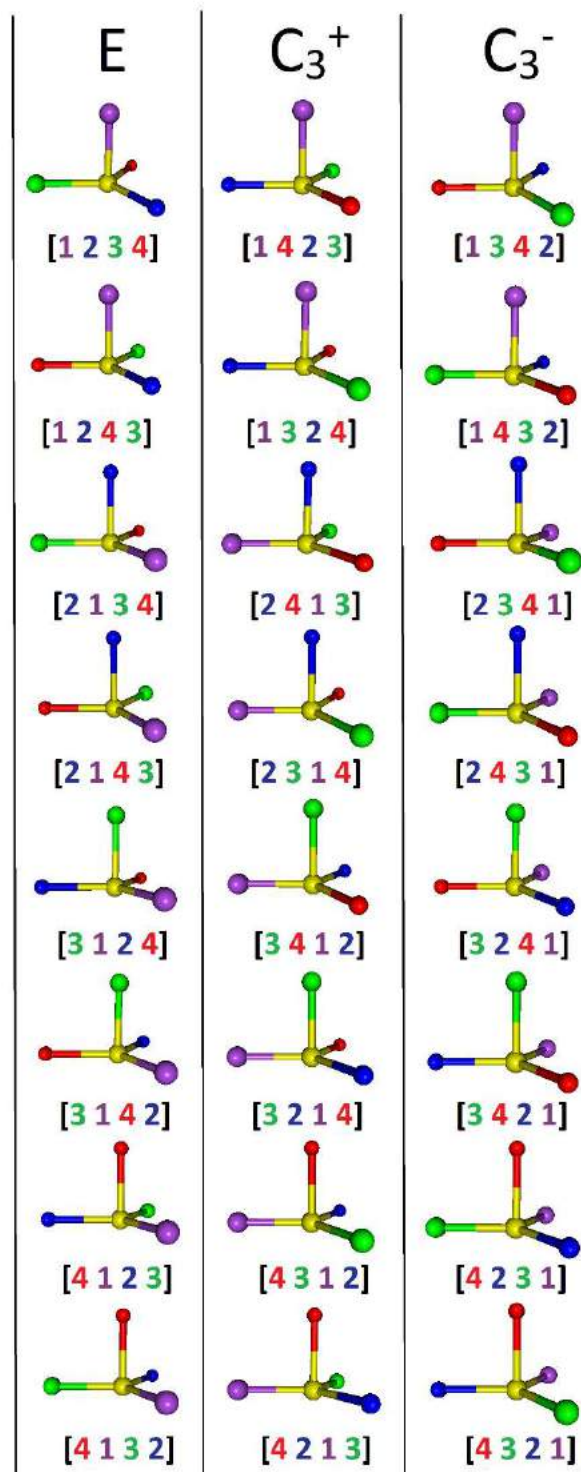


Figura 9. Permutações do vTBPY-4. As cores representam ligantes diferentes. As posições do vetor linha possuem uma correspondência com a geometria vTBPY-4. As permutações foram agrupadas de forma a evidenciar a interconversão das mesmas através de operações de rotação. A letra E corresponde a operação de identidade, C_3^+ corresponde a uma rotação de 120° no eixo principal e C_3^- corresponde a uma rotação de 240° no eixo principal.

A partir da figura 9, é possível observar que existem 8 permutações únicas que não se interconvertem a partir de rotações. Nós nomeamos esse conjunto de *substratal scaffold*. Escolhemos a coluna E da figura 9 como *substratal scaffold set*, mas outras composições também seriam válidas desde que não se interconvertessem através de rotações.

Observa-se que é possível agrupar as permutações do *substratal scaffold* em pares de enantiômeros. Isso é feito aplicando um dos planos de simetria da molécula em uma dada permutação e procurando a permutação equivalente à que foi refletida no *substratal scaffold set*.

Neste trabalho, verificar se duas permutações são equivalentes é o mesmo que verificar se seus valores são iguais, ou, se são iguais após a aplicação de alguma de suas operações de rotação. Por exemplo, a permutação [1 4 2 3] é equivalente à permutação [1 2 3 4], pois, a permutação [1 4 2 3] transforma-se na [1 2 3 4] através da operação de rotação C_3^+ (linha 1 da figura 9).

O *substratal scaffold set*, após agrupamento dos pares de enantiômeros, está apresentado na Figura .

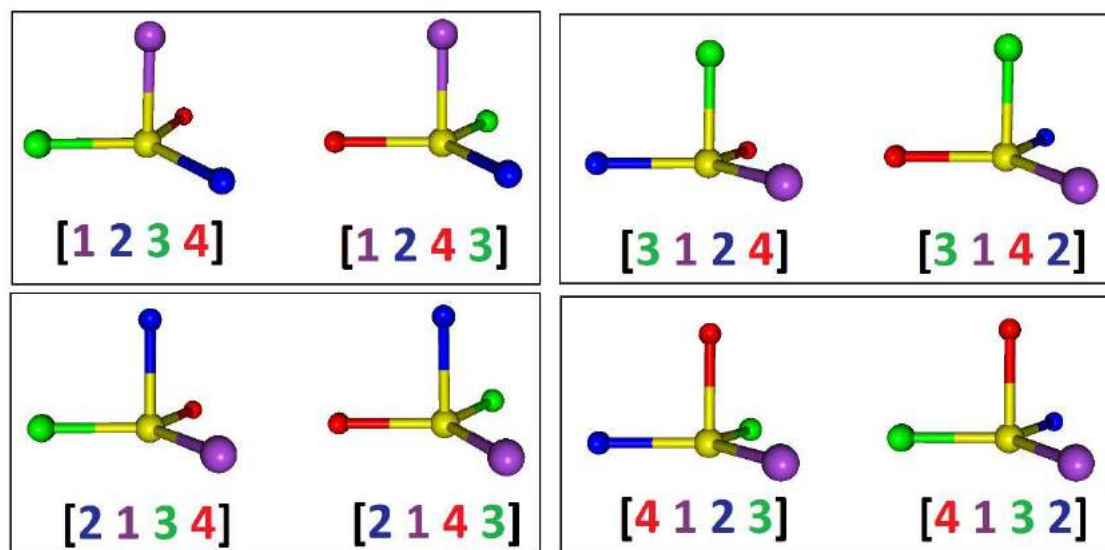


Figura 10. *Substratal scaffold set* dividido em pares de enantiômeros.

O *substratal scaffold*, como apresentado na figura 10, apresenta todos os estereoisômeros possíveis para a geometria vTBPY-4. Quando tipos de átomos ligados ao metal são quimicamente idênticos, temos degenerescências nesse conjunto.

Para que uma fórmula molecular específica seja estudada, é necessário construir uma linha de referência, a que chamamos *reference letter line vector*. Por exemplo, a fórmula Ma_2bc , possui o *reference letter line vector* [a a b c]. Ou seja, os números 1 e 2 correspondem ao ligante do tipo a, o número 3 corresponde ao ligante do tipo b e o número 4 corresponde ao ligante do tipo c. Quando o código [a a b c] é aplicado ao *substratal scaffold set* (figura 11) e são eliminadas permutações equivalentes, todos os estereoisômeros para essa composição são obtidos.

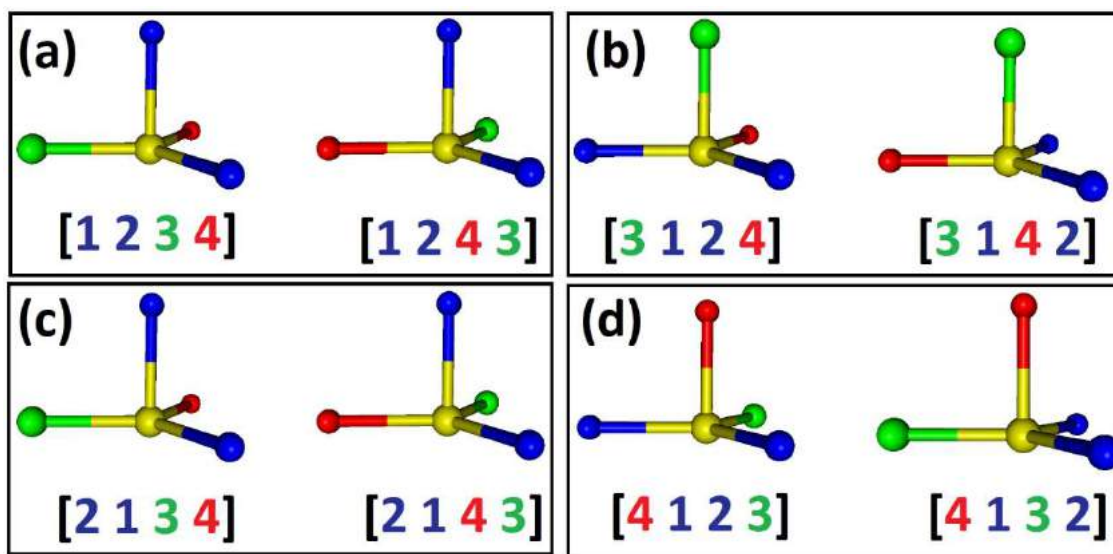


Figura 11. Aplicação do *reference line vector* [a a b c] ao *substratal scaffold set*. Os números 1 e 2 são os ligantes do tipo “a” e estão representados pela cor azul, o número 3 corresponde ao ligante “b” e está representado pela cor verde e o número 4 corresponde ao ligante do tipo “c” e está representado pela cor vermelha.

Na caixa (a) da figura 11 observa-se que os compostos constituem-se em um par de enantiômeros. Cada um deles é equivalente a seu correspondente na caixa (c). Os estereoisômeros das caixas (b) e (d) são aquirais, portanto, são equivalentes às suas respectivas imagens especulares. Ou seja, o total de estereoisômeros para esse caso é 4, onde cada um deles eliminou um dos presentes no *substratal scaffold*. Cada eliminação adiciona uma unidade no valor do *random coordination weight* (RCW) da permutação que foi mantida. Nesse caso, todas as permutações possuem RCW igual a 2, correspondendo ao peso da própria permutação e ao da que foi eliminada.

Dessa forma, é possível definir as permutações que correspondem aos possíveis estereoisômeros do composto $\text{Ma}_3\text{bc-vTBPY-4}$: [1 2 3 4], [1 2 4 3], [3 1 2 4] e [4 1 2 3].

De posse dessas permutações, é possível aplicar todas as operações de simetria da geometria ideal nos estereoisômeros obtidos para determinar o grupo pontual dos mesmos. Esta aplicação está ilustrada na figura 12.

Permutation	E	C ₃ ⁺	C ₃ ⁻	σ(1)	σ(2)	σ(3)
[1 2 3 4]	[a a b c]	[a c a b]	[a b c a]	[a b a c]	[a c b a]	[a a c b]
[1 2 4 3]	[a a c b]	[a b a c]	[a c b a]	[a c a b]	[a b c a]	[a a b c]
[3 1 2 4]	[b a a c]	[b c a a]	[b a c a]	[b a a c]	[b c a a]	[b a c a]
[4 1 2 3]	[c a a b]	[c b a a]	[c a b a]	[c a a b]	[c b a a]	[c a b a]

Figura 12. Aplicação das operações de simetria nos estereoisômeros do composto Ma₃bc-vTBPY-4. As permutações circuladas correspondem a operações de simetria que não causaram alterações no estereoisômero.

Na figura 12, as permutações [1 2 3 4] e [1 2 4 3] não mantiveram nenhuma operação de simetria, sendo, portanto, do grupo pontual C₁. As permutações [3 1 2 4] e [4 1 2 3] mantiveram um plano de simetria, portanto, essas permutações são do grupo pontual C_s. Neste trabalho, a determinação do grupo pontual foi feita com um algoritmo desenvolvido para este fim.

O último elemento que resta para a definição do *stereoisomer* ID é determinar o subconjunto ao qual a permutação pertence (A, B, C e etc.). Para isso, é feita uma contagem da quantidade de estereoisômeros para cada grupo pontual, nesse caso, 2C₁ e 2C_s. Em seguida, multiplicamos o número de estereoisômeros pelo RCW correspondente. Esse total resulta em 4C₁ e 4C_s. A razão entre os grupos pontuais é 4:4. Simplificando os números, chegamos ao RCR que é 1:1 nesse caso. Ambos os grupos possuem o mesmo RCR e são do grupo A. Quando isso acontece, colocamos aspas no código para identificar a existência de outro grupo pontual de mesma probabilidade. Dito isso, o *stereoisomer* ID de cada permutação pode ser definido:

- {[Ma2bc] vTBPY-4 C1 c 1 A' [1 2 3 4]}
- {[Ma2bc] vTBPY-4 C1 c 1 A' [1 2 4 3]}
- {[Ma2bc] vTBPY-4 Cs a 1 A" [3 1 2 4]}
- {[Ma2bc] vTBPY-4 Cs a 1 A" [4 1 2 3]}

Esses são os mesmos códigos que aparecem nos nomes dos arquivos presentes em anexo. Esses estereoisômeros estão presentes no seguinte caminho: CN_6/OC-6/Ma3b(AB) dentro do arquivo Stereoisomers_CN_4-CN_8.zip.

O *software* que realiza esses passos e que foi utilizado no nosso trabalho anterior²⁹ segue em anexo (SilvaFT_codigos_fonte.rar).

3.6 TABELAS DE ESTEREOISÔMEROS

No nosso trabalho anterior²⁹ fizemos uma enumeração completa dos estereoisômeros de complexos monometálicos, monodentados e/ou bidentados, nos seguintes *shapes*: SP-4, SS-4, T-4, vTBPY-4, PP-5, SPY-5, TBPY-5, HP-6, OC-6, PPY-6, TPR-6, COC-7, CTPR-7, HP-7, HPY-7, PBPY-7, BTPR-8, CU-8, ETBPY-8, HBPY-8, HPY-8, OP-8, SAPR-8, TDD-8, CCU-9, CSAPR-9, EP-9, HBPY-9, HH-9, JTC-9, JTDIC-9, MFF-9, OPY-9 e TCTPR-9.

Os resultados foram apresentados na forma de tabelas as quais estão apresentadas no apêndice A desta tese. Em todos os casos, determinamos o número de possíveis estereoisômeros e, dentro deles, seus números de estereoisômeros quirais e aquirais, bem como o *random coordination ratio* (RCR). O RCR representa a probabilidade de se obter qualquer estereoisômero pertencente a um dado grupo pontual caso a coordenação seja feita de forma aleatória. Definimos RCR como o produto do número de estereoisômeros de um determinado grupo pontual pelo seu RCW correspondente.

Quando organizamos os grupos pontuais em ordem decrescente, a saber, do mais provável de ser formado caso a coordenação seja aleatória ao menos provável, podemos atribuir uma letra maiúscula a cada um desses grupos. Nesse caso, os estereoisômeros do subconjunto A correspondem sempre aos mais prováveis, esses são seguidos do subconjunto B e assim por diante. Quando dois grupos pontuais são igualmente prováveis, eles são designados pela mesma letra, o primeiro com uma aspa, o próximo com aspas duplas e etc. Por exemplo, B', B'', B''' e etc.

O grupo pontual foi determinado com um algoritmo desenvolvido para este fim e exemplificado na seção 3.5. Também incluímos o número de simetria rotacional em todos os casos, o qual consiste no número de rotações próprias do estereoisômero em questão.

A Tabela 2 contém dois exemplos desses resultados. Um exemplo é constituído pelos estereoisômeros de um complexo quadrático (SP-4) de fórmula molecular Ma_2b_2 e o outro é formado pelos estereoisômeros de um complexo octaédrico de fórmula molecular Ma_4b_2 .

Tabela 2. Número de estereoisômeros para duas fórmulas moleculares diferentes^a.

Shape	Fórmula	Número			RCR	Subconjuntos											
		Total	c	a		S.C	G.P	χ	σ	RCW	#	S.C	G.P	χ	σ	RCW	#
SP-4	Ma ₂ b ₂	2	0	2	2:1	A	C _{2v}	a	2	2	1	B	D _{2h}	a	4	1	1
OC-6	Ma ₄ b ₂	2	0	2	4:1	A	C _{2v}	a	2	24	1	B	D _{4h}	a	8	6	1

^aShape é o símbolo do poliedro de acordo com a IUPAC; Fórmula é a fórmula molecular genérica; total é o número total de estereoisômeros distintos sendo a soma do número de estereoisômeros quirais com os aquirais; RCR é o *random coordination ratio*. Todos os estereoisômeros foram classificados em subconjuntos (S.C.) de acordo com os seus grupos pontuais (G.P) e ordenados em termos do produto entre o número de estereoisômeros com o RCW correspondente. A essas proporções damos o nome de RCR. χ identifica se os estereoisômeros do subconjunto são quirais (c) ou aquirais (a); e σ é o número de simetria rotacional.

Dados completos para todas as possíveis fórmulas moleculares com ligantes monodentados e bidentados nas coordenações 4 a 9 estão apresentados no apêndice A.

3.7 ESTEREOISOMERIA DE COMPLEXOS METÁLICOS EM FASE LÍQUIDA

Pietro e Bari⁴⁹ realizaram a determinação estrutural, em fase líquida, de uma série de complexos de fórmula molecular MLn(hfbc)₄, em que M corresponde aos cátions Na⁺, K⁺, Rb⁺ e Cs⁺; Ln corresponde aos íons La³⁺, Pr³⁺, Eu³⁺, Gd³⁺, Tb³⁺, Dy³⁺, Er³⁺, Tm³⁺, Yb³⁺ e Lu³⁺; e hfbc corresponde a *3-heptafluorobutyryl camphorate*.

Segundo a tabela A23 do apêndice A, compostos de fórmula molecular M(AB)₄ e shape antiprisma quadrado (SAPR-8) possuem os seguintes grupos pontuais: C₁, C₂, D₂ e C₄. São 42 estereoisômeros para esse caso e todos eles são quirais, portanto, os complexos obtidos por Pietro e Bari⁴⁹ devem ser quirais.

Os resultados de Pietro e Bari⁴⁹ demonstram que os complexos dessa família possuem um eixo C₄ e que a geometria do poliedro de coordenação é um antiprisma quadrado. Nas palavras dos autores: “...indicating an almost perfect square antiprism (SAPR): this means that the first sphere around Ln³⁺ is practically achiral for all CsLn complexes”. Os autores discutem que a natureza aquiral do antiprisma quadrado contradiz uma propriedade pronunciada para complexos desse tipo, que é a luminescência circularmente polarizada, ou *Circularly polarized luminescence* (CPL) e que depende da quiralidade.

A respeito da CPL, os autores ainda adicionam “*The so-called static coupling mechanism⁵⁰ which is implicit in the former analysis and is based only on the oxygen donor atoms of the Ln coordination sphere, is apparently insufficient to fully justify the extraordinary g_{lum} values of CsEu and CsSm and a further source of symmetry-breaking must be sought elsewhere*”.

Em outro trabalho, Pietro e Bari⁵¹ discutem a possibilidade de mecanismos dinâmicos para explicar os altos valores de CPL para esses complexos. À luz dos métodos deste trabalho, propomos que esse complexo possui uma quiralidade estática que deve ser considerada. Esta quiralidade pode ser encontrada na segunda camada de quiralidade⁵². Nesse caso, devemos olhar para a forma como os bidentados estão dispostos. Para a fórmula molecular $M(AB)_4$, existem apenas dois estereoisômeros que preservam o eixo C_4 , e esses dois estereoisômeros correspondem a suas respectivas imagens especulares (figura 13).

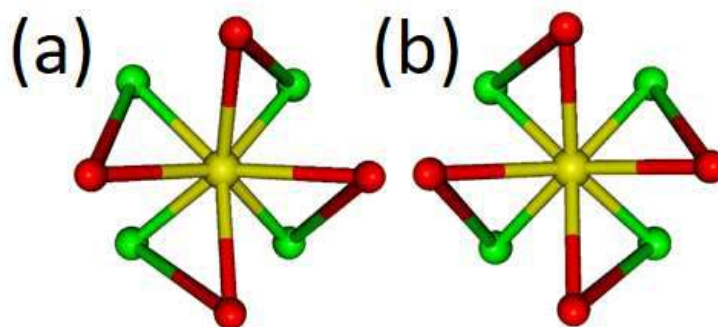


Figura 13. Estereoisomerismo do complexo $CsYb(hfbc)_4$. Em (a) e (b) estão apresentados o par de enantiômeros sugerido para a estrutura experimental de Pietro e Bari⁴⁹.

A figura 13 apresenta os únicos dois estereoisômeros possíveis para a fórmula molecular $M(AB)_4$, poliedro de coordenação SAPR-8 e que tenha um eixo C_4 . Observa-se que esses dois estereoisômeros constituem um par de enantiômeros. Portanto, concluímos que essa quiralidade estática deveria ser considerada nos estudos de Pietro e Bari⁴⁹.

3.8 FÓRMULA PARA O CÁLCULO DO NÚMERO DE SIMETRIA

Paul Ehrenfest⁵³ propôs o conceito de número de simetria σ como sendo o número de orientações equivalentes em relação às rotações da molécula. O número de simetria, definido dessa forma, é igual ao número de rotações próprias da molécula, ou seja, todas as rotações do grupo pontual correspondente junto com a operação de identidade (rotação de 0°). Metano, por exemplo, possui 12 rotações próprias (8C₃, 3C₂ e E). Adicionalmente, o número de simetria pode ser definido como a ordem do grupo rotacional da molécula. O grupo pontual do metano, por exemplo, é T_d. Consequentemente, o grupo de rotação desta molécula é T, de ordem 12. Observa-se que esse número também corresponde ao número de simetria da molécula. Essas definições são válidas apenas para moléculas rígidas.

Fernandez-Ramos et al.⁵⁴ apresentou uma fórmula para calcular o número de simetria de uma molécula em função das suas permutações:

$$\sigma = \frac{m!}{n_d} \quad 3.46$$

em que m é o número de átomos idênticos e n_d é o número de configurações únicas que permanecem distintas mesmo quando a molécula é rotacionada.

Vandewiele et al.⁵⁵, propôs uma abordagem diferente para o cálculo do número de simetria com base na equação (3.46) acima. Os pesquisadores calcularam σ para um conjunto de 403 moléculas. No entanto, Vandewiele et al.⁵⁵ reconheceram que a fórmula que eles propuseram levou a resultados errados em 10% das moléculas do conjunto. Um exemplo de uma molécula que a fórmula proposta por estes pesquisadores falhou foi o hexafluoreto de enxofre (SF₆). A predição dos pesquisadores foi que o número de simetria do SF₆ fosse 360, o número de simetria correto é 24.

Neste trabalho, propomos uma nova fórmula para calcular o número de simetria. Essa fórmula é uma conjectura baseada na equação (3.46) e está apresentada abaixo:

$$\sigma = \frac{\prod_i (m_i!)}{RCW} \quad 3.47$$

em que i itera em todas as seguintes espécies químicas: átomos idênticos, substituintes idênticos, ligantes idênticos, átomos equivalentes coordenados ao metal e assim por diante, m_i é o número dessas espécies idênticas e RCW é o *random coordination weight* do estereoisômero assim como definido neste trabalho.

Para entender o numerador, consideramos, por exemplo, um complexo de fórmula molecular $\text{Ma}_3(\text{A}_2)_2(\text{AB})$ e poliedro de coordenação TCTPR-9.

Para a fórmula molecular $\text{Ma}_3(\text{A}_2)_2(\text{AB})$, o valor de m_1 é 3, pois existem três ligantes monodentados iguais “a”; m_2 é 2 porque existem dois ligantes bidentados simétricos iguais (A_2); $m_3=m_4=2$ porque existem dois átomos doadores iguais coordenados ao metal dentro de cada ligante bidentado; $m_5=1$ porque existe apenas um ligante bidentado assimétrico (AB). $m_6=m_7=1$ porque existe apenas um átomo doador de cada tipo dentro do ligante bidentado assimétrico. O numerador, nesse caso, torna-se igual a: $3! \times 2! \times 2! \times 2! \times 1! \times 1! \times 1! = 48$.

O RCW para a fórmula molecular $\text{Ma}_3(\text{A}_2)_2(\text{AB})$ para o poliedro de coordenação TCTPR-9, de acordo com a tabela A34 do apêndice A, é 48. Portanto, o valor de σ é $48/48 = 1$.

Aplicando nossa fórmula, equação (3.47) ao SF_6 obtemos para o numerador $6!=720$. O RCW do denominador para a fórmula molecular Ma_6 e poliedro de coordenação OC-6 resulta em 30. A razão desses dois valores resultou no valor correto para o sigma: $\sigma=720/30=24$.

Para verificar que nossa fórmula conjecturada está correta, aplicamos nossa fórmula a todos os 2861 complexos que apresentamos no artigo²⁹. Observamos que todos os valores de σ se mostraram corretos para esses casos.

A tabela abaixo exemplifica a aplicação dessa fórmula aos complexos octaédricos.

Tabela 3. Aplicação da fórmula conjecturada (3.47) para o cálculo do número de simetria σ . Da tabela, G.P. se refere ao grupo pontual do estereoisômero, RCW ao *random coordination weight* e $\Pi(m_i!)$ é o numerador da fórmula (3.47).

Formula	G.P.	RCW	σ	G.P.	RCW	σ	$\Pi(m_i!)$
Ma ₆	O _h	30	24				720
Ma ₅ b	C _{4v}	30	4				120
Ma ₄ b ₂	C _{2v}	24	2	D _{4h}	6	8	48
Ma ₄ bc	C _s	24	1	C _{4v}	6	4	24
Ma ₄ (A ₂)	C _{2v}	24	2				48
Ma ₄ (AB)	C _s	24	1				24
Ma ₃ b ₃	C _{2v}	18	2	C _{3v}	12	3	36
Ma ₃ b ₂ c	C _s	12	1	C _{2v}	6	2	12
Ma ₃ bcd	C _s	6	1	C ₁	6	1	6
Ma ₃ b(A ₂)	C _s	12	1				12
Ma ₃ b(AB)	C ₁	6	1	C _s	6	1	6
Ma ₂ b ₂ c ₂	C ₁	8	1	C _{2v}	4	2	8
	D _{2h}	2	4				8
Ma ₂ b ₂ cd	C ₁	4	1	C _s	4	1	4
	C _{2v}	2	2				4
Ma ₂ b ₂ (A ₂)	C ₁	8	1	C _{2v}	4	2	8
Ma ₂ b ₂ (AB)	C ₁	4	1	C _s	4	1	4
Ma ₂ bcde	C ₁	2	1	C _s	2	1	2
Ma ₂ bc(A ₂)	C ₁	4	1	C _s	4	1	4
Ma ₂ bc(AB)	C ₁	2	1	C _s	2	1	2
Ma ₂ (A ₂) ₂	C ₂	8	2	D _{2h}	4	4	16
Ma ₂ (A ₂)(B ₂)	C ₁	8	1	C _{2v}	4	2	8

Tabela 3 (continuação).

Formula	G.P.	RCW	σ	G.P.	RCW	σ	Π (mi!)
$\text{Ma}_2(\text{A}_2)(\text{AB})$	C_1	4	1	C_s	4	1	4
$\text{Ma}_2(\text{AB})_2$	C_1	4	1	C_2	2	2	4
	C_{2v}	2	2	C_{2h}	2	2	4
$\text{Ma}_2(\text{AB})(\text{CD})$	C_1	2	1	C_s	2	1	2
Mabcdef	C_1	1	1				1
$\text{Mabcd}(\text{A}_2)$	C_1	2	1				2
$\text{Mabcd}(\text{AB})$	C_1	1	1				1
$\text{Mab}(\text{A}_2)_2$	C_1	8	1	C_{2v}	4	2	8
$\text{Mab}(\text{A}_2)(\text{B}_2)$	C_1	4	1	C_s	4	1	4
$\text{Mab}(\text{A}_2)(\text{AB})$	C_1	2	1				2
$\text{Mab}(\text{AB})_2$	C_1	2	1	C_2	1	2	2
	C_s	2	1				2
$\text{Mab}(\text{AB})(\text{CD})$	C_1	1	1				1
$\text{M}(\text{A}_2)_3$	D_3	8	6				48
$\text{M}(\text{A}_2)_2(\text{B}_2)$	C_2	8	2				16
$\text{M}(\text{A}_2)_2(\text{AB})$	C_1	8	1				8
$\text{M}(\text{A}_2)(\text{B}_2)(\text{C}_2)$	C_1	8	1				8
$\text{M}(\text{A}_2)(\text{B}_2)(\text{AB})$	C_1	4	1				4
$\text{M}(\text{A}_2)(\text{AB})_2$	C_1	4	1	C_2	2	2	4
$\text{M}(\text{A}_2)(\text{AB})(\text{CD})$	C_1	2	1				2
$\text{M}(\text{AB})_3$	C_1	6	1	C_3	2	3	6
$\text{M}(\text{AB})_2(\text{CD})$	C_1	2	1				2
$\text{M}(\text{AB})(\text{CD})(\text{EF})$	C_1	1	1				1

3.9 EVIDÊNCIA EXPERIMENTAL DOS *RANDOM COORDINATION RATIOS*

O conceito de *random coordination ratio* (RCR) que introduzimos neste trabalho indica a probabilidade de que um determinado poliedro de coordenação pertença a um determinado grupo pontual se a coordenação for aleatória e sem levar em conta efeitos energéticos.

Considere, por exemplo, o caso do complexo octaédrico de Co(III) com três ligantes bidentados assimétricos do benzoilacetato⁵⁶ de fórmula geral $M(AB)_3$ e poliedro de coordenação OC-6. Seu RCR (tabela A9 do apêndice A) é 3:1 com peso 3 correspondente ao complexo trans do grupo de pontual C_1 (mer) e o peso 1 ao complexo cis do grupo pontual C_3 (fac). A isomerização cis-trans (mer-fac) deste complexo exibe uma variação de entalpia determinada experimentalmente como sendo igual a zero. Assim, em equilíbrio, levando em consideração o RCR, deve haver três vezes mais complexos trans do que cis, um fato que realmente foi observado experimentalmente⁵⁶. De maneira semelhante, em dois complexos octaédricos de V(III) com três ligantes de β -dicetonato assimétricos, $V(mhh)_3$ e $V(mmh)_3$, uma mistura de 3:1 aparece nos produtos purificados⁵⁷. Outros artigos também apresentaram achados semelhantes^{58,59}.

Outra evidência experimental de RCRs seria que complexos cristalizados em estruturas pertencentes ao subconjunto A deveriam ser mais numerosas do que aqueles pertencentes ao subconjunto B e assim por diante. Para este teste, fizemos uso do *Cambridge Structure Database*, CSD⁶⁰. O CSD é um repositório de estruturas cristalográficas onde cada estrutura é identificada por um código composto de seis letras. Escolhemos neste repositório um conjunto de 218 estruturas de alta qualidade (fator $R < 5\%$) e com o intuito de ser diversificada em relação aos átomos presentes. Das 218 estruturas cristalográficas de alta qualidade de complexos de lantanídeos, 129 (59,2%) pertencem aos subconjuntos A, 50 (22,9%) pertencem aos subconjuntos B, 34 (15,6%) aos subconjuntos C, 3 (1,4%) pertencem aos subconjuntos D e apenas 2 (0,9%) aos subconjuntos E. Isso prova outro benefício do conhecimento dos RCRs. Fizemos esse teste e verificamos que, de fato, as frequências de ocorrência dos subconjuntos é a esperada, com o subconjunto A sendo o mais frequente, seguido do B, do C e, finalmente do D.

4 IDENTIFICAÇÃO DOS ESTEREOISÔMEROS

O estudo da estereoisomeria em complexos metálicos pode ser dividido em duas etapas principais. A primeira é a determinação da geometria do poliedro de coordenação. A segunda é o desenvolvimento de um índice que caracteriza a posição relativa dos ligantes neste poliedro de coordenação.

Neste trabalho, o poliedro de coordenação foi determinado através de métricas matemáticas que determinam o quanto duas geometrias são diferentes (seção 4.2). No nosso trabalho em curso, apresentamos critérios que excluem poliedros de coordenação muito distorcidos e apresentamos sugestões de como lidar com esse tipo de geometria (seção 4.3).

Em relação à disposição dos ligantes sobre o poliedro de coordenação, apresentamos o método usado pela IUPAC na seção 4.4 deste capítulo.

O método do nosso trabalho anterior²⁹ junto com as aplicações do método aqui proposto estão apresentados na seção 4.5.

O novo identificador de estereoisômeros que desenvolvemos está apresentado nas seções 4.6 a 4.12. Este algoritmo é uma extensão do apresentado no nosso trabalho anterior²⁹ e tem como vantagem ser aplicável a ligantes de qualquer denticão.

Nas seções 4.13 a 4.16 apresentamos aplicações do algoritmo de identificação desenvolvido.

4.1 INTRODUÇÃO

Um átomo de carbono em um composto é classificado como assimétrico quando está ligado a 4 grupos diferentes em uma geometria tetraédrica. Sabe-se que, para este caso, existem dois estereoisômeros (R e S). A partir de um procedimento chamado: “determinação da configuração absoluta”, é possível classificar estes estereoisômeros de forma única. Nesse procedimento, os átomos ligados ao carbono central são numerados de 1 a 4 segundo as prioridades de Cahn-Ingold-Prelog⁶¹ (Capítulo 2). Em seguida, o grupo de índice 4 é colocado para trás do plano. Se a numeração dos outros grupos crescer no sentido horário, a nomenclatura atribuída ao composto é a R; caso os números cresçam

no sentido anti-horário a configuração absoluta deste composto é nomeada como S (figura 14).

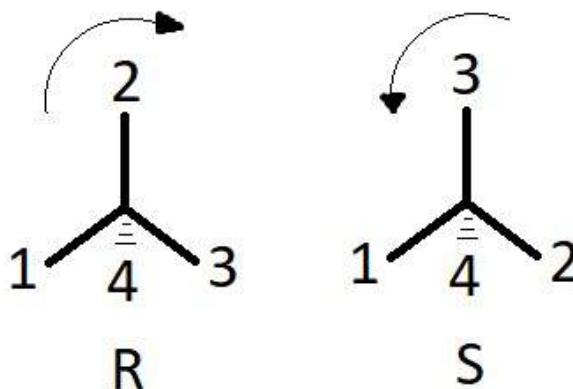


Figura 14. Configuração absoluta de compostos tetraédricos. Desde que o composto de prioridade 4 seja colocado para trás do plano do papel, se os números crescerem no sentido horário, o estereoisômero é definido como R, do contrário, a nomenclatura atribuída é S.

Há também uma nomenclatura para os estereoisômeros octaédricos. Por exemplo, para a composição Ma_3b_3 , caso os grupos iguais estejam na face do octaedro, o estereoisômero é chamado de facial; caso os três grupos iguais estejam no meridiano do poliedro, o estereoisômero é chamado de meridional (figura 15).

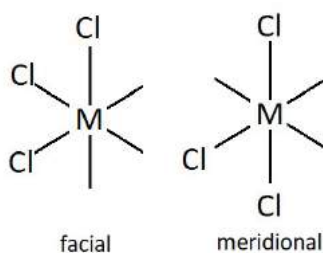


Figura 15. Nomenclatura para tipos de estereoisômeros em complexos octaédricos.

A IUPAC possui um sistema de classificação de estereoisômeros que será apresentado na seção 4.4 deste capítulo. No entanto, consideramos o sistema da IUPAC, na melhor das hipóteses, de difícil aplicabilidade. Neste capítulo, apresentaremos os métodos que desenvolvemos para definir uma nomenclatura única para os estereoisômeros.

Outra propriedade importante que resulta da identificação dos estereoisômeros é a determinação da configuração absoluta, e, portanto, da quiralidade dos complexos inorgânicos. Do ponto de vista cristalográfico, resolver a configuração absoluta de um complexo metálico significa poder distinguir na fase do refinamento entre duas estruturas de quiralidades opostas e, portanto, de padrões de difração muitíssimo semelhantes. Isto nem sempre é possível de ser feito apenas na fase do refinamento, exigindo experimentos adicionais específicos⁶². Além disso, se a precisão do refinamento não for muito elevada pode-se até supor dificuldade inclusive na distinção entre dois estereoisômeros possíveis dentro do mesmo subconjunto de mesma simetria de um complexo. Isso significa que nem sempre as coordenadas cartesianas atualmente depositadas nos bancos de dados correspondem rigorosamente à estrutura correta⁶².

Neste trabalho, observamos que é muito frequente a quiralidade dos complexos metálicos passarem despercebidas. Através dos métodos de identificação que avançamos, é possível determinar o estereoisômero do complexo e sua quiralidade. Porém, para que a configuração absoluta do complexo seja encontrada, é necessário procedimentos experimentais específicos para este fim. Esperamos que, à luz dos resultados que apresentamos, os experimentais se motivem a atentar para o detalhe da quiralidade e proceder à determinação da configuração absoluta dos complexos, inclusive atualizando as estruturas já depositadas nos bancos de dados.

4.2 DETERMINAÇÃO DA GEOMETRIA DO POLIEDRO DE COORDENAÇÃO

O estereoisomerismo acontece quando dois compostos possuem a mesma fórmula molecular e mesmas conectividades, porém, há diferenças nas posições tridimensionais dos seus átomos. Portanto, para um complexo metálico, as diferentes geometrias do poliedro de coordenação configuram-se em diferentes estereoisômeros. Nesta seção, apresentaremos como a geometria do poliedro de coordenação foi determinada neste trabalho.

A IUPAC³⁹ recomenda o uso de um descritor para caracterizar o poliedro de coordenação dos complexos metálicos. Este descritor é chamado *polyhedral symbol* e deve ser atribuído como sendo o da geometria que mais se assemelha ao poliedro de

coordenação experimental. No entanto, a IUPAC não especifica nenhuma métrica para determinar o quão duas geometrias são semelhantes entre si.

Existem várias métricas possíveis para diferenciar duas estruturas^{46,48,63,64}. No nosso trabalho anterior²⁹, usamos a métrica do programa SHAPE⁴⁸ para determinar a geometria do poliedro de coordenação. Na ocasião, admitimos que a geometria era caracterizada pelo menor valor fornecido pelo programa SHAPE. A identificação de estereoisômeros nesse caso serviu apenas para ilustrar os RCRs. Um estudo mais detalhado nessa direção deveria ser feito para determinar se o mínimo fornecido pelo SHAPE é adequado para nossos estudos. Um outro empecilho no uso deste programa é que usamos o SHAPE para determinar a geometria do poliedro de coordenação e um outro algoritmo, proposto por Marques et al.⁶⁴, para determinar o estereoisômero. Consideramos que deveria haver uma única métrica, tanto na atribuição do poliedro de coordenação quanto na determinação do estereoisômero.

No nosso trabalho em curso, usamos o método proposto por Marques et al.⁶⁴ para descrever essas duas etapas. Esse algoritmo minimiza o *root mean square deviation* (rmsd) entre duas estruturas procurando a melhor correspondência entre os átomos das mesmas. Diferentemente da implementação padrão do algoritmo proposto por Marques et al., neste trabalho consideramos as massas de todos os átomos doadores como sendo iguais a 1. Esse algoritmo foi escolhido por possibilitar a diferenciação de estruturas quirais⁶⁴.

Neste trabalho, calculamos o rmsd entre o poliedro de coordenação experimental e todas as geometrias ideais disponíveis²⁹ com o mesmo número de vértices. O *polyhedral symbol* foi atribuído como sendo o da geometria ideal de menor rmsd em relação ao poliedro de coordenação experimental. Nesta abordagem, assim como no nosso trabalho anterior²⁹, todas as distâncias metal-ligante do poliedro de coordenação experimental foram reescaladas para 1. Um exemplo da aplicação dessa técnica está apresentado na figura 16.

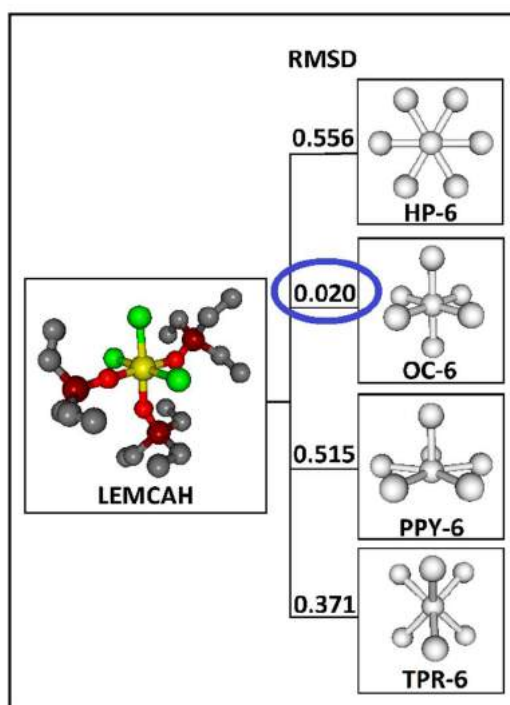


Figura 16. À esquerda está apresentado o complexo de *refcode* LEMCAH (tricloro-tris(óxido de trietilfosfina)-vanadium(IV)). À direita estão apresentadas as geometrias ideais disponíveis para o número de coordenação 6. No meio está apresentado o rmsd de cada estrutura em relação ao poliedro de coordenação do LEMCAH. Circulado em azul está apresentado o menor valor de rmsd, portanto, a geometria ideal que descreve o poliedro de coordenação experimental (OC-6).

Um critério específico foi utilizado para descrever compostos de coordenação 2. Nesses casos, a geometria foi considerada linear (L-2) caso o ângulo entre os dois ligantes fosse superior a 175° . Caso contrário, a geometria foi considerada como sendo angular (A-2).

Caso o menor valor de rmsd encontrado fosse maior do que um critério δ_{cut} pré-estabelecido, consideramos que o poliedro de coordenação não pôde ser estudado com os métodos desenvolvidos neste trabalho. Através de uma inspeção visual de várias estruturas, consideramos que δ_{cut} 0,15 Å foi um critério adequado para os nossos estudos. Das 262.663 estruturas estudadas neste trabalho, 51.033 (19%) foram descartadas por não atenderem o critério δ_{cut} . Na seção seguinte, apresentamos uma discussão de como geometrias distorcidas poderiam ser estudadas com os métodos deste trabalho.

Quanto às geometrias ideais disponíveis neste trabalho, para as coordenações 4 a 8, usamos as mesmas geometrias do nosso trabalho anterior²⁹; e para as coordenações 1 a 3,

as seguintes geometrias foram adicionadas: L-1, A-2, L-2, TP-3, TPY-3, TS-3. A lista completa das geometrias ideais, juntamente com as suas coordenadas cartesianas que utilizamos está apresentada no apêndice B.

4.3 GEOMETRIAS DISTORCIDAS

Nesta seção, apresentaremos como geometrias distorcidas podem ser estudadas com os métodos deste trabalho. Adicionalmente, por motivo de clareza, apresentamos duas classificações para o fenômeno da quiralidade.

A quiralidade do tipo I acontece quando a geometria do poliedro de coordenação não possui nem plano interno de simetria nem centro de inversão. Nesse caso, a imagem especular é uma geometria diferente com mudanças nas posições dos seus átomos. Para os casos de quiralidade tipo I, não é possível acessar a imagem especular através da permutação dos seus elementos.

A quiralidade do tipo II acontece quando a geometria do poliedro de coordenação possui plano interno de simetria ou centro de inversão. Nesse caso, a imagem especular é obtida através da permutação interna dos seus elementos. A figura 17 apresenta um exemplo para cada um desses casos.

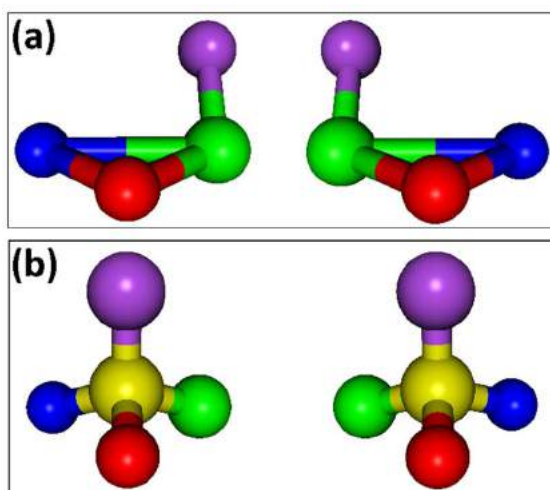


Figura 17. Exemplos de quiralidade tipo I (a) e tipo II (b). A figura (a) é disforme e possui simetria C_1 , a figura (b) é um tetraedro com uma esfera amarela no centro. Observa-se que os tetraedros (b) podem se interconverter caso a esfera de cor verde seja permutada com a esfera de cor azul (quiralidade tipo II). Não há nenhuma permutação que permita que as estruturas apresentadas no item (a) se interconvertam (quiralidade tipo I).

Neste trabalho, todas as geometrias ideais possuíam plano interno de reflexão. Portanto, estudamos apenas a quiralidade do tipo II.

Geometrias onde planos de reflexão e centros de inversão estão ausentes também podem ser estudadas com os métodos apresentados neste trabalho. Neste caso, seria necessário definir um conjunto de coordenadas como R e a imagem especular dessas coordenadas como S. Em seguida, seria necessário realizar a enumeração dos estereoisômeros de ambas agrupando os respectivos pares de enantiômeros entre as estruturas. De posse dessa enumeração, a identificação do estereoisômero poderia ser feita através dos demais métodos apresentados neste trabalho.

4.4 IDENTIFICADOR DO ESTEREOISÔMERO: MÉTODO DA IUPAC

A IUPAC sistematiza os nomes dos complexos inorgânicos em um livro chamado “*Nomenclature of Inorganic Chemistry, IUPAC Recommendations 2005*”³⁹. Este livro também é conhecido como o livro vermelho da IUPAC. Neste trabalho, quando citamos a IUPAC, estamos nos referindo às recomendações presentes neste livro.

O livro vermelho da IUPAC recomenda o uso de dois descritores para que um estereoisômero seja definido. O primeiro, *configuration index*, permite a diferenciação entre diastereoisômeros. O segundo, *chirality symbol*, permite a diferenciação entre um par de enantiômeros. Para que esses descritores sejam atribuídos, é necessário a aplicação de regras específicas que dependem da geometria estudada³⁹. A união do *configuration index* com o *chirality symbol* define completamente um dado estereoisômero. Abaixo, iremos exemplificar a atribuição desses descritores em uma geometria octaédrica.

Seguindo a recomendação da IUPAC, um complexo octaédrico de fórmula molecular Ma_2b_2cd (Ma_2b_2cd -OC-6) possui 6 conjuntos de prioridades possíveis: [1 1 2 2 3 4], [1 1 2 3 3 4], [1 1 2 3 4 4], [1 2 2 3 3 4], [1 2 2 3 4 4] e [1 2 3 3 4 4]. Para cada um desses conjuntos de prioridades existirá um *configuration index* e *chirality symbol* único para identificar cada um dos 8 estereoisômeros possíveis. Portanto, seguindo a determinação da IUPAC, existem 48 códigos para identificar 8 estereoisômeros. Nesta seção, iremos exemplificar a atribuição do *configuration index* e *chirality symbol* apenas para o conjunto de prioridades [1 1 2 2 3 4].

A atribuição do *configuration index* para compostos octaédricos é feita em dois passos. Primeiro o eixo de referência do octaedro é definido. O eixo de referência do

octaedro é caracterizado pelo ligante de prioridade 1 e o ligante trans ao de prioridade 1. Caso haja mais de um ligante de prioridade 1, dentre as opções, deve-se escolher o ligante de maior valor numérico que seja trans a algum ligante de prioridade 1. Definido o eixo de referência, é necessário mais um número para caracterizar o estereoisomerismo dos 4 ligantes restantes. Nesse caso, deve-se selecionar o número trans ao ligante de maior prioridade dentre os 4 restantes. Caso o ligante de maior prioridade dentre os 4 restantes seja repetido, deve-se escolher o ligante de maior valor numérico que seja trans a algum dos ligantes de maior prioridade entre os 4 perpendiculares ao eixo de referência.

A atribuição do *chirality symbol* em complexos octaédricos é feita na perspectiva do ligante de prioridade 1 e sobre o eixo de referência do octaedro. Observa-se os números dos 4 ligantes no plano perpendicular ao eixo de referência do octaedro. Caso os números desses 4 ligantes cresçam no sentido horário, atribui-se o descritor C (horário), do contrário, atribui-se o descritor A (anti-horário). A figura 18 ilustra essa atribuição.

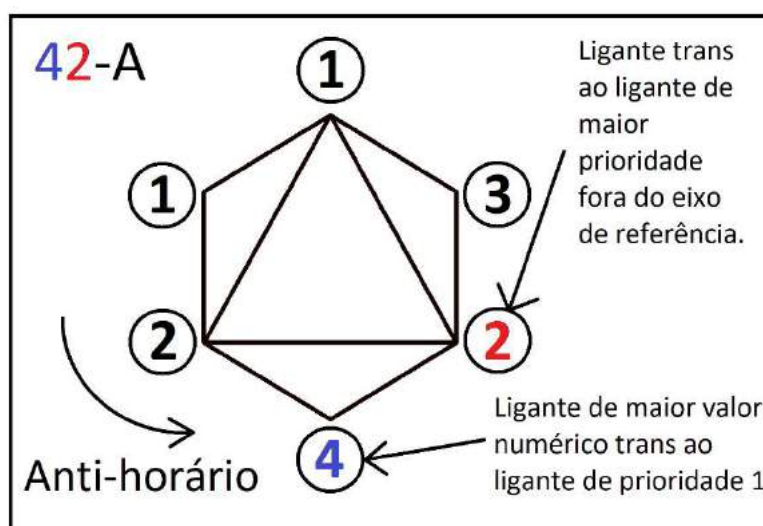


Figura 18. Atribuição do *configuration index* e *chirality symbol* a um complexo octaédrico de fórmula molecular Ma_2b_2cd . O *configuration index* é 42, pois 4 (azul) é o ligante de maior valor numérico trans ao ligante de prioridade 1, e 2 (vermelho) é o ligante trans ao ligante de maior prioridade entre os 4 ligantes restantes. Observando sobre o ligante de prioridade 1 no eixo de referência do octaedro, os números dos ligantes no plano perpendicular ao eixo de referência crescem no sentido anti-horário, portanto, a esse complexo é atribuído o *chirality symbol* A.

Para compostos tetraédricos, a IUPAC recomenda o uso do *chirality symbol* R/S para diferenciar pares de enantiômeros. Para os demais poliedros, a IUPAC recomenda o uso dos descritores C (*clockwise*) e A (*anti-clockwise*) para esse fim. Não encontramos

nenhuma menção no livro vermelho da IUPAC sobre qual *chirality symbol* deve ser utilizado caso o complexo seja aquiral, portanto, admitimos que nenhum símbolo deva ser adicionado nesses casos.

4.5 IDENTIFICADOR DO ESTEREOISÔMERO APRESENTADO NO NOSSO TRABALHO ANTERIOR²⁹

No nosso trabalho *Stereoisomerism in lanthanide complexes: enumeration, chirality, identification, random coordination ratios*²⁹ construímos um índice único para caracterizar os estereoisômeros (figura 19).

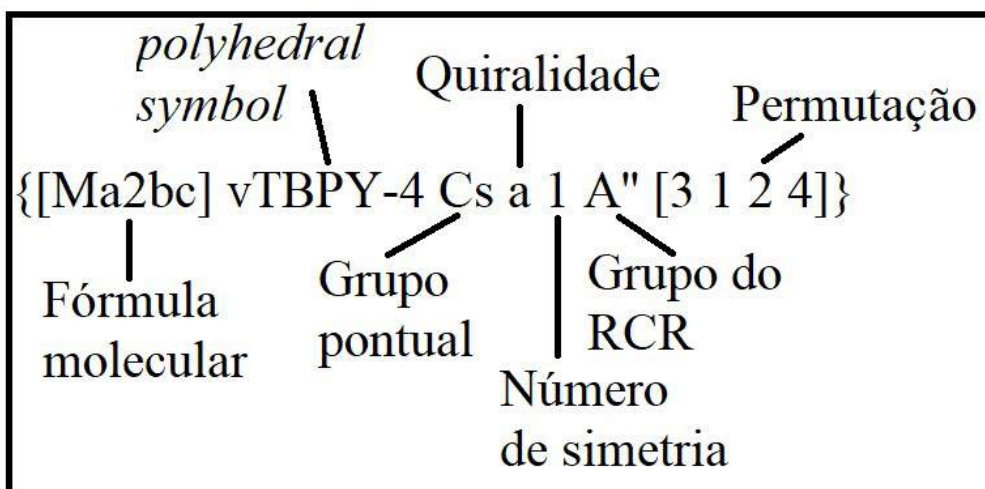


Figura 19. Identificador do estereoisômero apresentado no nosso trabalho anterior²⁹.

O primeiro elemento ([Ma2bc]) é a composição química genérica do estereoisômero em questão. A letra M corresponde a complexos mononucleares. As letras minúsculas (a, b, c, d, e, etc.) correspondem a monodentados diferentes. As letras maiúsculas entre parênteses correspondem a ligantes polidentados.

O segundo elemento desta nomenclatura (vTBPY-4) é a *shape* da geometria do poliedro de coordenação. Compostos de mesma composição, mas *shapes* de poliedros de coordenação diferentes constituem-se em estereoisômeros bem diferentes. Nesta nomenclatura, a geometria é identificada pelo símbolo do poliedro tal como sugerido pela IUPAC⁶⁵.

O terceiro elemento (Cs) é o grupo pontual do estereoisômero.

O quarto elemento (a) indica a quiralidade deste estereoisômero (“a” para aquiral e “c” para quiral).

O quinto elemento (1) representa o número de simetria do estereoisômero (número de rotações próprias).

O sexto elemento (A'') representa o subconjunto do RCR deste estereoisômero.

Por fim, o sétimo elemento ([3 1 2 4]) é a permutação que define o estereoisômero dentre as muitas possibilidades com base numa permutação de referência previamente definida. Essas permutações foram obtidas a partir da enumeração completa dessas estruturas.

Definida esta notação única, a utilidade é sua aplicação para a identificação de cada estrutura sob investigação. Isso é feito comparando o poliedro de coordenação da estrutura com os poliedros de coordenação de todos os estereoisômeros possíveis para aquela composição e geometria previamente encontrados em nosso trabalho. O critério de comparação é o rmsd das estruturas assim como proposto por Marques⁶⁴. Aos ligantes bidentados é adicionado um átomo fictício no ponto médio entre as duas dentições do ligante permitindo, assim, a identificação de complexos com esse tipo de ligante. Comparando a estrutura do composto com todos os estereoisômeros construídos sobre as geometrias ideais, obtêm-se o estereoisômero, definido como aquele que apresenta o menor rmsd dentre os estereoisômeros em questão.

Usando o método de identificação que propomos, foi possível identificar um par de enantiômeros de um complexo de európio, fato que não tinha sido percebido pelos autores dos trabalhos originais. Segundo Becht et al.⁶⁶, os complexos de $\text{NH}_4[\text{Eu}(\text{fdh})_4]^-$ revelaram por cristalografia duas estruturas similares mas não idênticas na mesma célula unitária. Na verdade, elas constituem um par de enantiômeros (figura 20), o que torna a célula unitária aquiral.

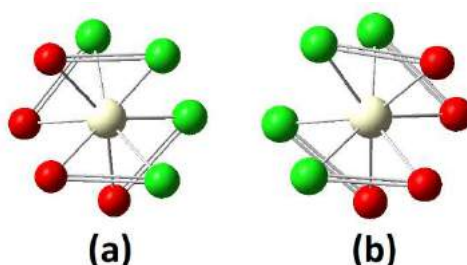


Figura 20. Poliedros de coordenação do par enantiomérico de *refcode* NOJTAH identificados com a metodologia proposta neste trabalho.

Compostos meso são aqueles com dois centros estereogênicos ligados a substituintes ou ligantes idênticos, mas com configurações absolutas opostas em um mesmo composto. Até onde sabemos, ainda não havia sido identificado um composto meso em que os centros quirais fossem formados por íons lantanídeos coordenados. A partir de nosso algoritmo de identificação, detectamos, como sendo um dilantanídeo meso, o composto bis(μ -1,1,1,3,3,3-hexafluoropropano-2-oato)-tetra-aqua-tetrakis(1,1,1,3,3,3-hexafluoropropano-2-oato)-di-európio de código cristalográfico ERUJIM (figura 21). Usando os métodos apresentados neste trabalho, foi possível identificar a configuração absoluta de cada centro metálico, de configurações absolutas refletidas. Portanto, o complexo ERUJIM é um composto meso.

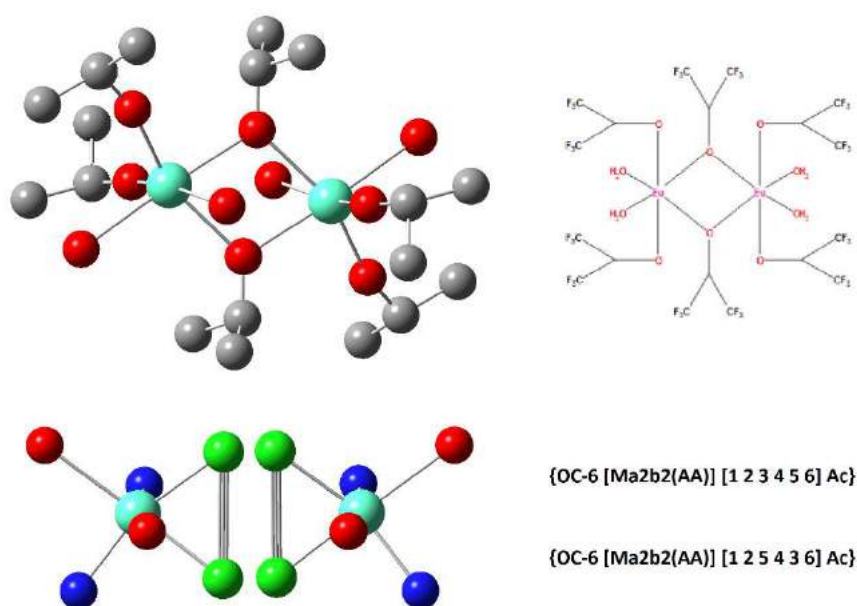


Figura 21. Complexo dilantanídeo de *refcode* ERUJIM⁶⁷, reconhecido por nós como composto meso.

Na seção seguinte apresentaremos as evoluções que fizemos no identificador de estereoisômeros.

4.6 PROPOSTA DE UM NOVO IDENTIFICADOR

Embora o identificador apresentado na seção anterior seja eficaz, estamos estudando um índice mais conciso para caracterizar os diferentes estereoisômeros. Nesta

seção, apresentamos um identificador baseado nos descritores R e S da química orgânica o qual está apresentado a seguir.

Diferentemente da IUPAC, que não apresenta sugestões de descritores para complexos aquirais, neste trabalho propomos o uso da letra G para este fim. Compostos aquirais possuem uma imagem especular, porém, essa imagem pode ser superposta a eles mesmos através de operações de rotação. Ou seja, é como se compostos aquirais possuíssem um irmão gêmeo idêntico. Por isso, propomos o uso da letra G (*geminae* - gêmeo) para compostos aquirais.

Neste trabalho, para que o estereoisômero seja determinado, primeiro é necessário que seja feita uma enumeração completa de todos os possíveis estereoisômeros para a fórmula molecular e *shape* de interesse. Fizemos esta enumeração para todas as fórmulas moleculares dos principais poliedros nas coordenações 1 a 8. Essas enumerações estão apresentadas no arquivo SilvaFT_codigos_fonte.rar em anexo. Após descompactar o arquivo SilvaFT_codigos_fonte.rar, as enumerações estão no seguinte caminho: `codigos_fonte\StereoisomerIdentifier\code\python\StereoisomerList`.

De posse da enumeração, os estereoisômeros são divididos em três listas. Uma lista que define os estereoisômeros aquirais (G) e duas listas para os pares de enantiômeros R e S. Consideramos desnecessário encontrar uma rotação horária e anti-horária para definir cada par de enantiômeros. Sabe-se que, para carbonos assimétricos, não há correspondência entre o desvio da luz polarizada e o descritor estereoquímico R ou S⁶⁸. Ou seja, uma molécula R pode desviar a luz para a direita, e outra molécula diferente, também R, pode desviar a luz para a esquerda. Portanto, neste trabalho, a divisão entre as permutações que correspondem aos enantiômeros R ou S foi arbitrária.

Propomos um novo descritor para substituir o *configuration index* e *chirality symbol* sugeridos pela IUPAC. Nesse, deve-se usar a letra correspondente da lista da enumeração a que ele se refere (R, S ou G) seguida de um número que identifica a posição do estereoisômero nesta lista. Por exemplo, o composto com o índice G-3 corresponde ao terceiro estereoisômero da lista de estereoisômeros aquirais.

A lista de estereoisômeros deve ser definida anteriormente através de métodos adequados de enumeração. O ordenamento das listas deve ser definido através de uma convenção e mantido em todas as identificações subsequentes. No apêndice B, apresentamos as geometrias que foram estudadas neste trabalho.

De posse do identificador proposto é fácil realizar a diferenciação dos estereoisômeros. Por exemplo, G-1 e G-4 referem-se a dois estereoisômeros aquirais

diferentes, correspondendo à primeira e quarta posição da lista de enumeração a que eles se referem. R-3 e S-5 são dois estereoisômeros quirais diferentes. Os pares de enantiômeros são identificados quando o número é o mesmo, porém uma das estruturas é R e a outra é S. Por exemplo, se o identificador resultar em estereoisômeros do tipo R-2 e S-2 então significa que as estruturas em estudo constituem um par de enantiômeros.

A atribuição do identificador do estereoisômero é feita através de um cálculo de rmsd entre o poliedro de coordenação e todos os estereoisômeros da lista enumerada. A estrutura de menor rmsd em relação ao poliedro de coordenação experimental corresponde o estereoisômero em questão.

4.7 IDENTIFICADOR DO ESTEREOISÔMERO: EXEMPLO

Na figura 22 estão listados todos os 8 estereoisômeros de um composto $\text{Ma}_2\text{b}_2\text{cd}$ -OC-6 e prioridades [1 1 2 2 3 4]. Na figura, o descritor proposto neste trabalho está apresentado abaixo do estereoisômero. Os descritores propostos pela IUPAC³⁹ (*configuration index* e *chirality symbol*) estão apresentados no canto superior esquerdo.

Em resumo, propomos uma nova nomenclatura para identificar os estereoisômeros de um dado complexo. Nesta nomenclatura, foi adicionado o descritor G para caracterizar compostos aquirais. Adicionalmente, o código de cada estrutura provém de uma enumeração feita previamente. Essa abordagem torna fácil a extensão desses estudos para outras geometrias, assim como permite a inclusão de geometrias que não possuem nem plano interno de reflexão nem centro de inversão.

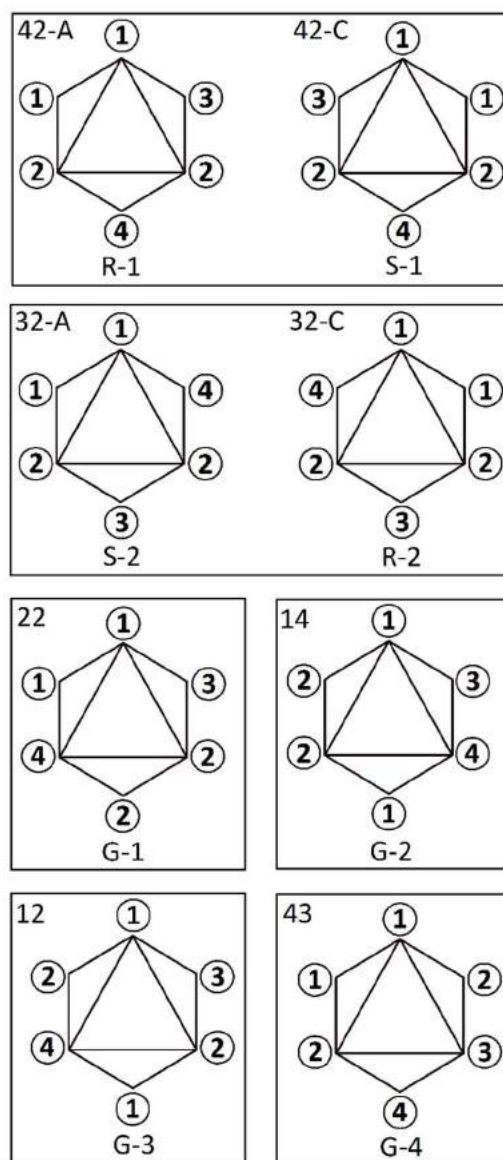


Figura 22. Estereoisômeros possíveis para o $\text{Ma}_2\text{b}_2\text{cd-OC-6}$. No canto superior esquerdo estão apresentados o *configuration index* e *chirality symbol* de acordo com a recomendação da IUPAC. Não foi atribuído nenhum *chirality symbol* aos compostos aquirais nesse caso. Os estereoisômeros que estão na mesma caixa são pares de enantiômeros. Abaixo do poliedro está apresentado o descritor que propomos para caracterizar os estereoisômeros. O *polyhedral symbol* em todos os casos é OC-6 e foi omitido por motivo de simplicidade.

4.8 ESPECIFICIDADES DOS COMPOSTOS QUELADOS

Nesta seção, serão apresentadas algumas características de compostos quelados. Mostraremos que a convenção proposta pela IUPAC leva a degenerescências, ou seja, dois estereoisômeros iguais possuindo códigos diferentes. Acreditamos que degenerescências comprometem a comparação entre estereoisômeros e que devem ser removidas.

Quando existem grupos simetricamente equivalentes como parte de um mesmo polidentado, a IUPAC³⁹ recomenda que sejam adicionadas aspas às prioridades dos átomos doadores iguais. Um número com aspas possui menor prioridade do que um número sem aspas, porém, maior prioridade do que um número maior. Por exemplo, 1' possui menor prioridade do que 1, porém, maior prioridade do que 2. Para polidentados, a recomendação é que o uso das aspas seja feito de forma arbitrária. A figura 23 mostra um exemplo de um tetradentado e sua respectiva numeração de prioridades.

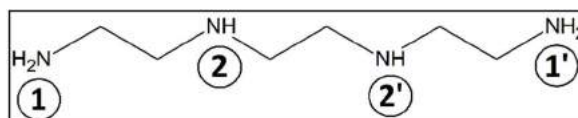


Figura 23. A molécula N,N'-bis(2-aminoetil)etano-1,2-diamina é um exemplo de tetradentado de fórmula molecular (A_2B_2). Os números no interior do círculo representam as prioridades dos átomos doadores. As aspas seguem a recomendação da IUPAC.

Na página 197 do livro vermelho da IUPAC³⁹ é apresentado um exemplo de determinação de *configuration index* com um ligante tetradentado (A_2B_2) semelhante ao N,N'-bis(2-aminoetil)etano-1,2-diamina (figura 23). Na figura abaixo está apresentado o exemplo 5 da página 197 (esquerda). Também está apresentado o mesmo composto caso as aspas fossem definidas de forma diferente (direita).

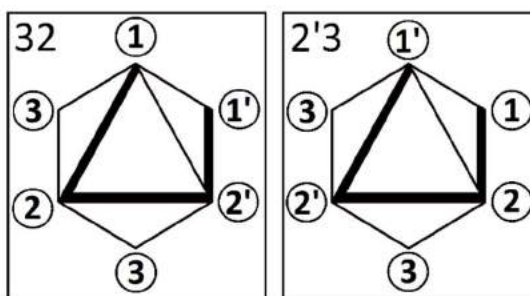


Figura 24. Composto de fórmula molecular genérica $Ma_2(A_2B_2)$ e *shape* octaédrico. Existem duas formas de definir as aspas das prioridades do tetradentado. Na figura da direita, invertemos a definição das aspas e observamos que isso causa uma mudança no *configuration index* (canto superior esquerdo). O *polyhedral symbol* em todos os casos é OC-6 e foi omitido por motivo de simplicidade.

Na figura 24 pode-se observar que o método proposto pela IUPAC leva a degenerescências. Isso se deve ao uso de aspas para diferenciar átomos doadores pertencentes a um ligante polidentado. Claro, se dois átomos doadores são simetricamente equivalentes, significa que a permutação dos mesmos não causa mudanças na estrutura. Portanto, eles não podem ser diferenciados com aspas. A denteção acompanha as posições dos átomos doadores, então, nenhum cuidado especial é necessário para descrever esses casos. No entanto, quando há ligantes polidentados repetidos, maiores complexidades surgem e essa propriedade torna-se inválida.

Para repetição de polidentados, a IUPAC também sugere o uso de aspas. Concordamos com a IUPAC no que diz respeito à necessidade de um tratamento especial quando há a repetição de ligantes. Porém, novamente, o uso de aspas como proposto pela IUPAC leva a degenerescências indesejáveis. A figura 25 mostra uma situação onde o *configuration index* é diferente para duas estruturas que correspondem ao mesmo estereoisômero.

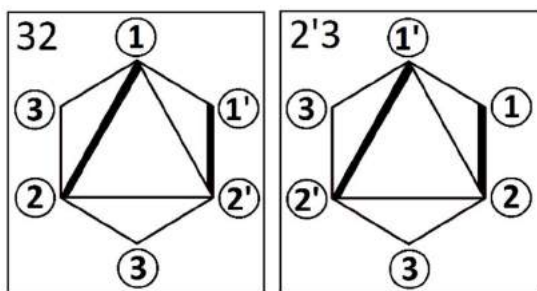


Figura 25. Composto de fórmula molecular genérica $\text{Ma}_2(\text{AB})_2$ e *shape* octaédrica. As prioridades nesse caso são [1 1 2 2 3 3], onde os números 1 e 2 correspondem às prioridades dos ligantes bidentados assimétricos e 3 corresponde à prioridade do ligante “a”. Existem duas formas de definir as aspas sobre as prioridades dos bidentados.

Observa-se, na figura 25, que a definição das aspas provoca mudanças na definição do *configuration index* (canto superior esquerdo). O *polyhedral symbol* em todos os casos é OC-6 e foi omitido por motivo de simplicidade.

A degenerescência acontece porque ligantes repetidos apresentam uma maior complexidade. Como mencionado pela IUPAC, os grupos não podem ser considerados iguais. Porém, também não podem ser considerados como se fossem completamente diferentes.

Neste trabalho, fizemos uma enumeração específica para as fórmulas moleculares que continham ligantes polidentados repetidos. Nesta enumeração, não aplicamos nenhum limite para o ângulo de denteção máximo dos polidentados pois entendemos que a enumeração precisava ser geral.

Quanto aos ligantes polidentados sem repetição, esses foram tratados neste trabalho como monodentados. Por exemplo, um composto de fórmula molecular $\text{Ma}_2(\text{A}_2\text{B}_2)$ possui o vetor de prioridades [1 1 2 2 3 3] que também corresponde à fórmula molecular $\text{Ma}_2\text{b}_2\text{c}_2$. Nesse caso, tanto na definição das prioridades, quanto na atribuição do identificador do estereoisômero, complexos desse tipo foram tratados como se possuíssem fórmula molecular $\text{Ma}_2\text{b}_2\text{c}_2$. Na seção seguinte, expandimos a discussão sobre a atribuição do estereoisômero em compostos quelados juntamente com exemplos apropriados para cada caso.

4.9 IDENTIFICAÇÃO DE ESTEREOISÔMEROS EM COMPOSTOS QUELADOS

Neste trabalho, os ligantes polidentados foram considerados linhas que conectam os diferentes átomos doadores de cada polidentado. É um estudo semelhante ao apresentado na referência⁵² no que diz respeito à segunda camada de quiralidade. Nesse caso, a posição do átomo doador define o polidentado de forma unívoca. Portanto, caso não haja repetição de polidentados, não há diferença entre estudar o estereoisomerismo apenas dos átomos doadores ou considerar as posições do polidentado como um todo. Por exemplo, o complexo $\text{Ma}_4(\text{AB})$ OC-6 possui o seguinte conjunto de prioridades [1 1 1 1 2 3]. A enumeração deste complexo é equivalente ao complexo de fórmula molecular Ma_4bc (figura 26).

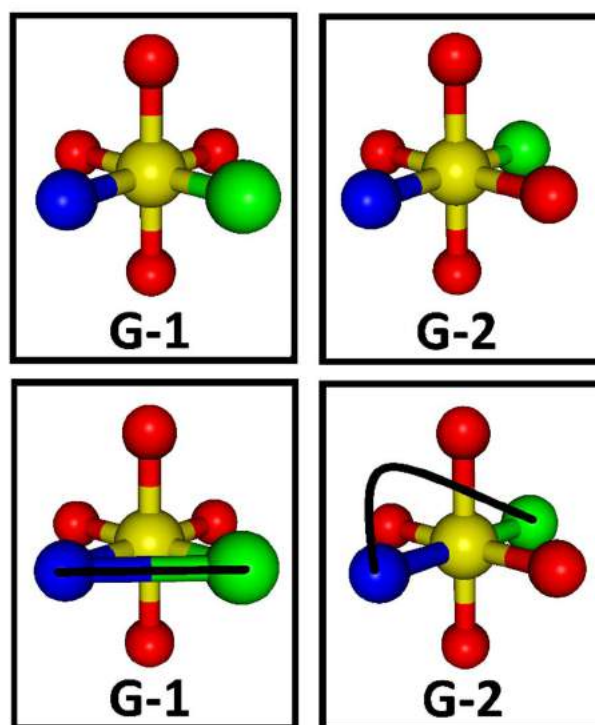


Figura 26. Possíveis estereoisômeros para um composto Ma_4bc -OC-6 (em cima) e $\text{Ma}_4(\text{AB})$ -OC-6 (em baixo). As prioridades dos ligantes foram representadas com cores: 1-azul, 2-vermelho e 3-verde. Observa-se que a denteção, reforçada pela linha preta contínua, acompanha os átomos doadores.

Da figura 26, observa-se que o estereoisômero G-2 da fórmula molecular $\text{Ma}_4(\text{AB})$ apresenta um ângulo de denteção de 180° atravessando o complexo ao meio. Essa

configuração é uma possibilidade matemática, porém, é fisicamente improvável. Mesmo assim, neste trabalho, optamos por adicionar todas as possibilidades matemáticas, dado que se um dia um ligante com essas características for encontrado esse possa ser descrito pelas abordagens que descrevemos aqui.

Uma maior complexidade surge quando os polidentados são repetidos. Nesse caso, há uma repetição de átomos doadores que possibilita mais opções para que as dentições sejam definidas. Iremos exemplificar esse problema com a fórmula molecular $M(A_2)_3$. Para esse caso a enumeração irrestrita resulta em 4 estereoisômeros. Iremos comparar esses resultados com a enumeração da fórmula molecular $Ma_2b_2c_2$, na tentativa de imitar os bidentados através da repetição de ligantes monodentados. Observamos que todos os estereoisômeros da fórmula molecular $M(A_2)_3$ podem ser encontrados no conjunto de estereoisômeros da fórmula molecular $Ma_2b_2c_2$ caso seja suposto que os monodentados iguais componham uma dentição. Porém, a recíproca não é verdadeira. A fórmula molecular $Ma_2b_2c_2$ possui 2 estereoisômeros a mais do que a fórmula molecular $M(A_2)_3$. Ou seja, não é possível encontrar uma contraparte composta apenas por monodentados para descrever ligantes polidentados repetidos.

Tanto para a fórmula molecular $Ma_2b_2c_2$, quanto para a fórmula $M(A_2)_3$, existe apenas um par de estereoisômeros quirais, nesse caso, um par de enantiômeros. Da figura 27, observa-se que há uma correspondência entre a fórmula composta por monodentados e a fórmula com ligantes polidentados repetidos se os monodentados iguais forem considerados como ligados.

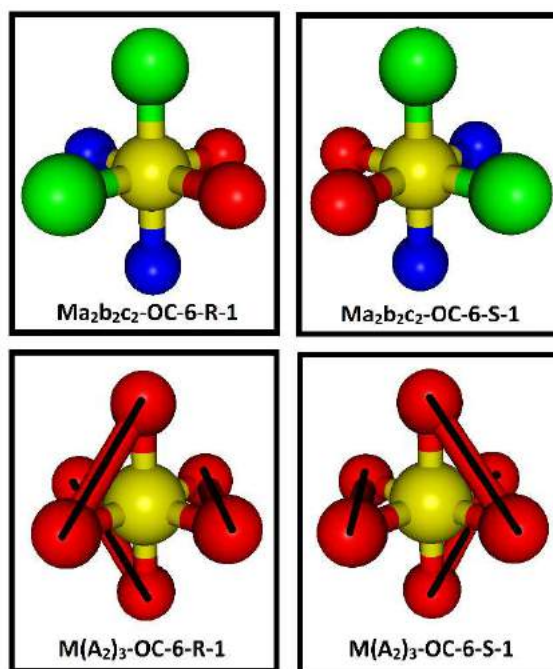


Figura 27. Estereoisômeros quirais de fórmulas moleculares Ma₂b₂c₂ (superior) e M(A₂)₃ (inferior). A dentição foi reforçada com uma linha preta contínua. Observa-se uma correspondência entre esses dois conjuntos de estereoisômeros, caso se suponha que os monodentados de mesma cor sejam bidentados.

Para os estereoisômeros aquirais (G), também se observa uma correspondência entre os estereoisômeros dessas duas fórmulas moleculares caso se suponha que os monodentados iguais sejam considerados bidentados (figura 28).

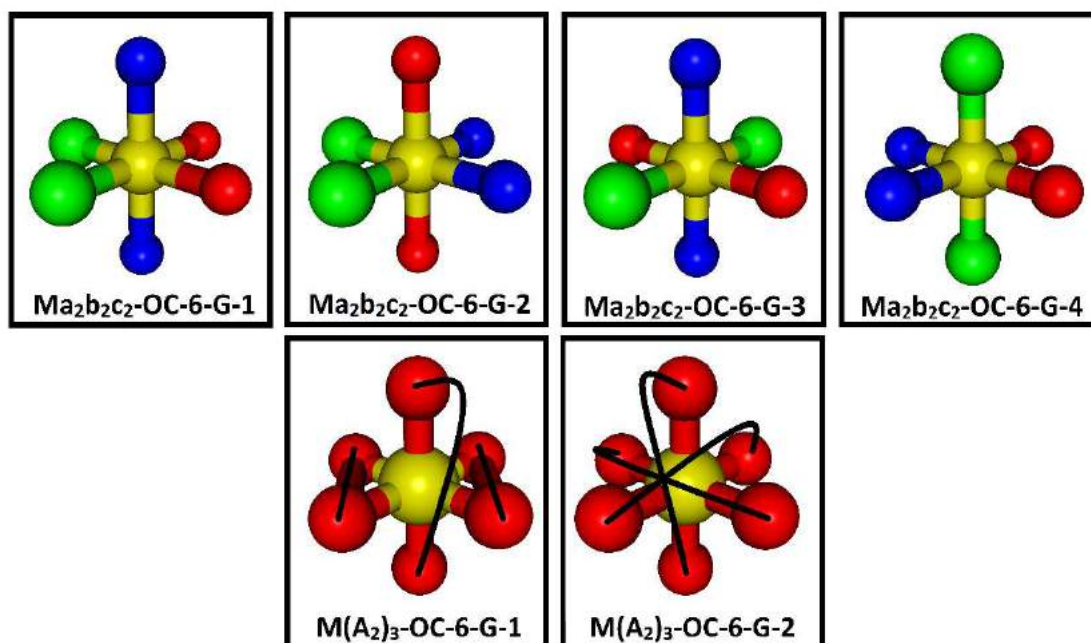


Figura 28. Estereoisômeros aquirais de fórmulas moleculares $\text{Ma}_2\text{b}_2\text{c}_2$ (cima) e $\text{M}(\text{A}_2)_3$ (baixo). A denteção foi reforçada com uma linha preta contínua. Observa-se que os estereoisômeros G-1, G-2 e G-4 da fórmula molecular $\text{Ma}_2\text{b}_2\text{c}_2$ são semelhantes ao estereoisômero G-1 da fórmula molecular $\text{M}(\text{A}_2)_3$. O estereoisômero da fórmula molecular $\text{Ma}_2\text{b}_2\text{c}_2$ G-3, por sua vez, é semelhante ao G-2 da fórmula molecular $\text{M}(\text{A}_2)_3$.

Da figura 28, se observa que, embora seja possível realizar uma correspondência entre uma fórmula molecular de monodentados e uma fórmula molecular contendo ligantes polidentados repetidos, não há uma correspondência biunívoca entre estereoisômeros nos dois casos. Portanto, neste trabalho, fizemos enumerações específicas para todas as fórmulas moleculares possíveis contendo ligantes polidentados repetidos.

Neste trabalho, desenvolvemos um *software*, ao qual demos o nome de *Stereoisomer Identifier*, que permite a atribuição do estereoisômero de um determinado complexo a partir das suas coordenadas cartesianas e conectividades. Neste *software*, a aplicação das regras de Cahn-Ingold-Prelog foi feita através do pacote RDKit⁶⁹. Todas as demais características foram implementadas pelo nosso grupo nas linguagens python e C++ de acordo com os conceitos apresentados nesta tese. O algoritmo do *Stereoisomer Identifier* está apresentado a seguir.

4.10 ALGORITMO DO IDENTIFICADOR DO ESTEREOISÔMERO

Na primeira etapa do *Stereoisomer Identifier* o arquivo com a estrutura cristalográfica no formato “.mol2” é lida. Nesta leitura, obtemos a lista de metais presentes na estrutura assim como o grafo da molécula. É nesta etapa que aplicamos o RDKit⁶⁹.

O RDKit permite que uma molécula no formato “.mol2” seja estudada. Porém, quando aplicamos este *software* às moléculas obtidas diretamente do CSD percebemos que algumas atribuições das prioridades CIP conduzidas pelo RDKit⁶⁹ estavam incorretas. Portanto, decidimos construir uma versão simplificada da molécula no formato “.mol” antes de aplicar o canonicalizador do *software* RDKit⁶⁹. Nessa versão simplificada, todas as ligações foram definidas como ligações simples e todas as ligações metal-ligante foram removidas. Reconhecemos que essas mudanças de alguma forma podem comprometer os resultados, porém, construir um canonicalizador que permita o estudo de complexos metálicos foge ao escopo deste trabalho. A partir dos conceitos que apresentamos aqui, imaginamos que um canonicalizador com essa propriedade possa ser desenvolvido sem problemas. Mesmo com esta simplificação, não foi possível aplicar as regras CIP usando o *software* RDKit⁶⁹ em 16% dos complexos.

4.11 OBTENÇÃO DAS PRIORIDADES LOCAIS

Neste trabalho, realizamos um tratamento das prioridades CIP recebidas pelo programa externo (RDKit). Este tratamento foi discutido no capítulo 2 e tem como objetivo remover degenerescências na definição das prioridades.

O primeiro passo deste tratamento é encontrar quais dos ligantes são polidentados. Isso é feito através do grafo da molécula, caso exista algum caminho que conecte os átomos doadores que não seja através da ligação metal-ligante, esses átomos doadores correspondem a um ligante polidentado. Esse procedimento é aplicado a todos os átomos doadores permitindo que todos os ligantes polidentados sejam identificados. No entanto, existem moléculas bastante complexas, as quais a busca da denticção torna-se computacionalmente intensiva. Neste trabalho, caso o caminho entre os átomos não tenha sido encontrado após 100.000 tentativas, a busca é então cancelada e os estereoisômeros da estrutura não são avaliados. Isso aconteceu em 1% dos complexos deste trabalho. A figura 29 ilustra um exemplo deste erro.

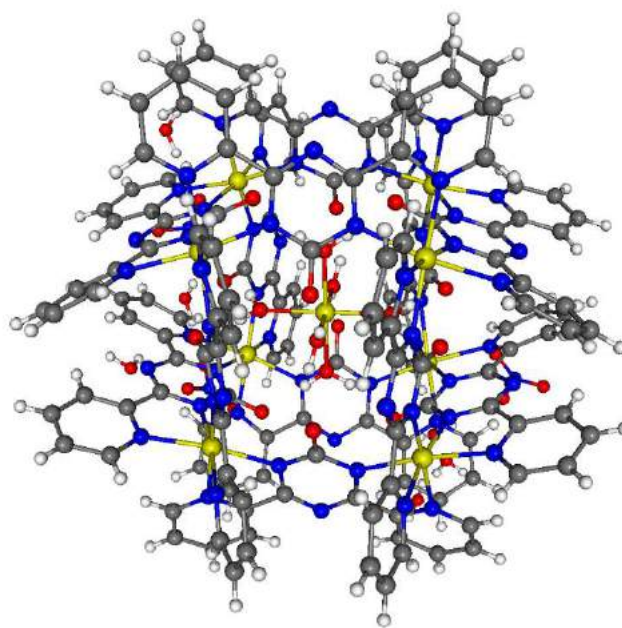


Figura 29. Estrutura de *refcode* EGOCOT. O estudo da dentição dos ligantes foi cancelado devido à densidade do grafo dessa molécula.

Definidos quais ligantes são polidentados, torna-se possível construir a fórmula molecular do complexo e ranquear as prioridades de cada átomo doador. Neste momento, são aplicadas as novas regras CIP que propomos no capítulo 2. Vale novamente ressaltar que o complexo é tratado como polidentado apenas caso haja ligantes polidentados repetidos. Em todos os outros casos, tanto na definição das prioridades quanto na definição do identificador do estereoisômero, o ligante é considerado monodentado. Por exemplo, um complexo de fórmula molecular $\text{Ma}_2(\text{A}_2\text{B}_2)$ possui o vetor de prioridades [1 1 2 2 3 3] que também corresponde à fórmula molecular $\text{Ma}_2\text{b}_2\text{c}_2$. Nesse caso, chamamos a fórmula $\text{Ma}_2\text{b}_2\text{c}_2$ de fórmula de enumeração do complexo.

Na definição das prioridades locais pode acontecer uma inconsistência na definição da fórmula molecular. Por exemplo, um ligante bidentado pode estar ligado a um complexo tanto como ligante bidentado quanto como ligante monodentado. Nesses casos, espera-se que a prioridade dessas duas situações seja diferente. Porém, como as ligações metal-ligante foram removidas na hora de aplicar as prioridades, essa propriedade não aparece. Neste trabalho, descartamos todas as situações em que ligantes de dentições diferentes possuísem mesma prioridade. Fórmulas moleculares inconsistentes devido à remoção das ligações metal-ligante aconteceram em 5% dos casos.

4.12 IDENTIFICADOR DO ESTEREOISÔMERO

Definidas as prioridades locais, a atribuição do identificador do estereoisômero ocorre em duas etapas. A primeira, é a definição do símbolo do poliedro, onde o poliedro de coordenação é comparado com cada um dos poliedros que disponibilizamos. Essa etapa foi apresentada na seção 4.2. A segunda etapa depende da enumeração prévia dos estereoisômeros. Fizemos a enumeração dos principais poliedros de coordenação nas coordenações 1 a 8 as quais estão apresentadas no arquivo SilvaFT_codigos_fonte.rar em anexo. Após descompactar o arquivo SilvaFT_codigos_fonte.rar, as enumerações estão no seguinte caminho: `codigos_fonte\StereoisomerIdentifier\code\python\StereoisomerList`. O método que usamos para a atribuição do estereoisômero foi apresentado na seção 4.6.

Vale ressaltar que, assim como no nosso artigo anterior²⁹, adicionamos um marcador para apontar quais átomos doadores compõe a denteção do polidentado. Seja A o ponto que define um átomo doador de um ligante polidentado e B o ponto que define um átomo doador do mesmo ligante, dois pontos foram adicionados sobre o segmento AB. Partindo do ponto A, o primeiro ponto foi posicionado à distância $\frac{1}{4}$ do segmento AB e o segundo ponto foi situado à distância $\frac{3}{4}$ do segmento AB. Esses marcadores foram aplicados tanto na geometria do poliedro de coordenação quanto na geometria ideal. Após a definição desses marcadores, foram feitos cálculos de rmsd⁶⁴ entre todos os estereoisômeros possíveis. O estereoisômero atribuído à estrutura foi aquele que apresentou o menor rmsd neste procedimento.

Identificado o estereoisômero, o *software* busca outro metal na mesma estrutura e aplica todos os passos novamente. Caso não haja outros metais, o *Stereoisomer Identifier* interrompe sua execução.

4.13 RECONHECIMENTO DE QUIRALIDADE NO COMPLEXO DE CÓDIGO CRISTALOGRAFICO ATIWIK

Foi feita uma busca no CSD em (13/06/18) de complexos com o critério $Z'=4$, sendo Z' o número de moléculas com simetria independente em uma dada estrutura

cristalina⁷⁰, ou seja Z' é o número de moléculas independentes que se encontram na célula unitária.

Em uma inspeção visual, nos interessamos pelo 13º complexo (ATIWI⁷¹). Foi atribuído a essa cristalização o grupo espacial Cc. As moléculas referentes a essa cristalização estão apresentadas na figura 30. A partir dos métodos avançados neste trabalho, mostraremos que 3 dessas 4 estruturas correspondem ao mesmo estereoisômero (S-1) e a estrutura restante corresponde à imagem especular desses 3 (R-1).

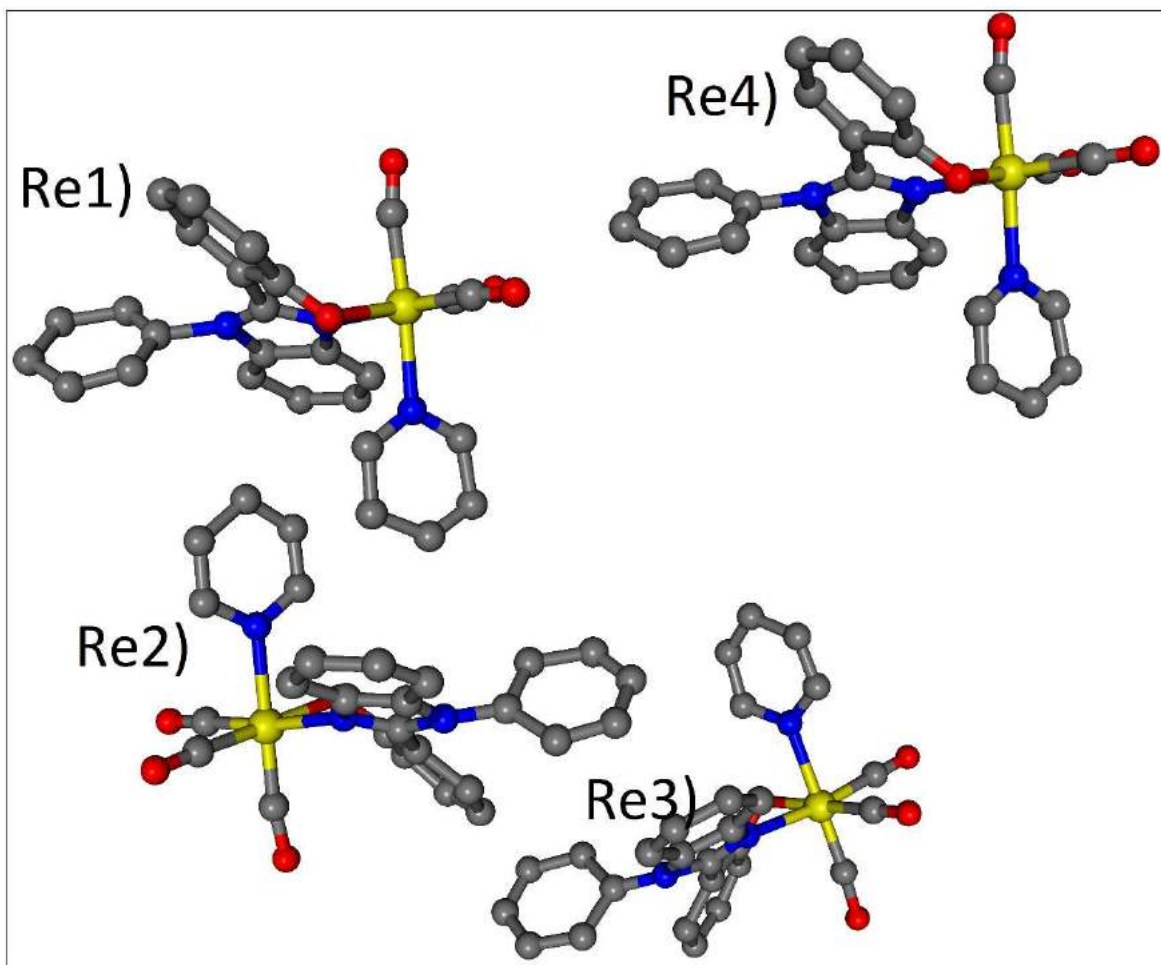


Figura 30. Estrutura do composto de *refcode* ATIWI.

O complexo cristalizado é o tricarbonil-(2-(1-fenil-1H-benzimidazol-2-il)fenolato)-(piridina)-rênio. A fórmula molecular genérica deste composto é $\text{Ma}_3\text{b(AB)}$, em que ‘a’ se refere a carbonil, ‘b’ a piridina e o bidentado assimétrico ‘(AB)’ é o (2-(1-fenil-1H-benzimidazol-2-il)fenolato). Os compostos são octaédricos, fato confirmado pelo nosso *software*.

Com a fórmula molecular e o poliedro de coordenação definidos, é possível visualizar as coordenadas dos diferentes estereoisômeros. Observa-se que, neste caso, não há repetição de ligantes polidentados, portanto, a fórmula de enumeração deste complexo é a Ma_3bcd (figura 31).

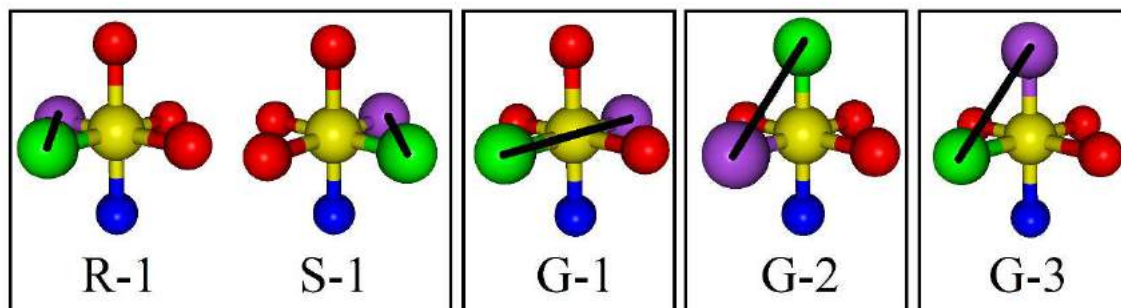


Figura 31. Os 5 estereoisômeros possíveis para a fórmula molecular Ma_3bcd . Os códigos dos estereoisômeros estão apresentados abaixo das figuras. O símbolo do poliedro em todos os casos é OC-6 e foi omitido por motivo de clareza. Os ligantes verde e roxo foram reforçados com uma linha contínua para evidenciar que esta enumeração também é válida para a fórmula molecular $\text{Ma}_3\text{b}(\text{AB})$.

Na figura 31 apresentamos todos os estereoisômeros possíveis para a fórmula molecular Ma_3bcd e reforçamos a ligação dos monodentados verde e roxo como se fossem um ligante bidentado. É fácil perceber que, considerando o verde e o roxo como bidentados, esta enumeração de estereoisômeros também descreve todas as possibilidades para este caso. Também observamos uma possibilidade onde os polidentados adquirem um ângulo de dentição de 180° (G-1). Esta possibilidade matemática é incluída em todas as enumerações dado que, caso surja um ligante com esta propriedade ele possa ser avaliado com os métodos deste trabalho.

A inspeção visual dos estereoisômeros possíveis é desnecessária na atribuição do identificador proposto neste trabalho. O identificador é obtido com a aplicação do algoritmo que desenvolvemos para este fim e que foi apresentado neste capítulo. A inspeção visual discutida nesta seção foi feita apenas com fins didáticos.

Quando comparamos os complexos cristalográficos (figura 30) com os diferentes estereoisômeros possíveis (figura 31), chegamos à conclusão de que o estereoisômero cristalizado foi do tipo R ou S, não do tipo G. Pois os três monodentados iguais - as carbonilas - estão na face do octaedro.

Existem outros estereoisômeros possíveis para esta fórmula molecular, os quais não foram mencionados pelos autores⁷¹. Ju et al. otimizaram o complexo cristalográfico no nível DFT⁷¹, talvez fosse interessante realizar otimizações dos outros estereoisômeros para verificar se a geometria cristalizada é a mais estável. Uma outra possibilidade de estudo seria tentar outras condições de síntese na tentativa de encontrar os outros estereoisômeros. Será que a rota de síntese proposta é diastereoseletiva? Outro fato que passa despercebido é que esses complexos são quirais e os autores não se pronunciaram a este respeito.

Prosseguindo no estudo do estereoisomerismo, aplicamos nosso *software* a cada um dos centros estereogênicos do complexo ATIWIK. Para os complexos Re1, Re3 e Re4 obtivemos o identificador S-1 e para o complexo Re2 obtivemos o identificador R-1. Destacando as coordenadas de cada um dos complexos, fica claro que o composto Re2 é a imagem especular dos demais (figura 32).

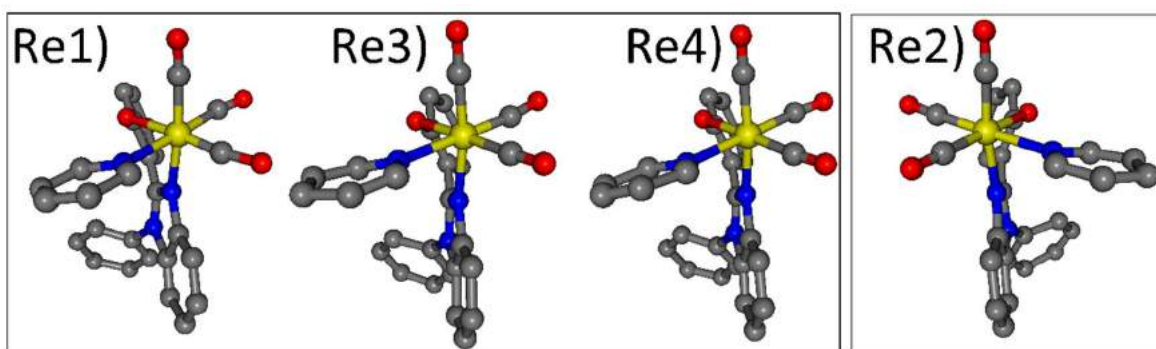


Figura 32. Complexos presentes na célula unitária ATIWIK. Esquerda, os compostos Re1, Re3 e Re4 possuem o mesmo identificador (S-1) e o composto da direita corresponde a respectiva imagem especular (R-1).

A célula unitária do composto ATIWIK possui 4 estruturas de simetria independente ($Z'=4$) onde três delas constituem-se no mesmo estereoisômero e uma que se apresenta como a imagem especular não superponível das demais. Não houve menção dos autores sobre os enantiômeros encontrados na célula unitária. Isto demonstra que a identificação de estereoisômeros, mesmo para complexos octaédricos, passa despercebida pela maioria dos estudos.

4.14 APLICAÇÃO DO IDENTIFICADOR A UM BANCO DE DADOS

Neste trabalho, desenvolvemos um *software*, nomeado *Stereoisomer Identifier*, que permite a atribuição do estereoisômero de um determinado complexo a partir das suas coordenadas cartesianas e conectividades. Neste *software*, a aplicação das regras de Cahn-Ingold-Prehlog foi feita através do pacote RDkit⁶⁹. Todas as demais características foram implementadas pelo nosso grupo nas linguagens python e C++ de acordo com os conceitos apresentados nesta tese.

O código completo do *Stereoisomer Identifier* segue no anexo SilvaFT_codigos_fonte.rar. Nesta seção, apresentaremos os resultados da aplicação deste *software* em um banco de dados composto por 262.663 estruturas.

O conjunto de estruturas do nosso banco de dados foi obtido com uma busca no *Cambridge Structural Database*⁶⁰ (21/03/2018) com os seguintes critérios: pelo menos 1 metal de qualquer tipo, apenas organometálicos, coordenadas 3D disponíveis, sem desordem, sem erros e não polimérico. Esta busca resultou em 262.663 estruturas às quais aplicamos o *Stereoisomer Identifier*. Dentre essas, 139.919 (53% do total) não puderam ser identificados com nosso algoritmo. A tabela 4 apresenta as razões para os complexos que não puderam ser identificados.

Tabela 4. Motivos e quantidades das estruturas que não puderam ser identificadas através dos métodos deste trabalho. %Estruturas se refere à porcentagem em relação ao total de estruturas (262.663).

%Estruturas	Motivo da não identificação
19	Poliedros de coordenação com rmsd maior do que o δ_{cut} estabelecido. Ou seja, suas estruturas estão entre duas ou mais estruturas idealizadas.
16	Não foi possível aplicar as regras CIP usando o <i>software</i> RDKit.
12	Número de coordenação maior do que 8.
5	Fórmulas moleculares inconsistentes devido à remoção das ligações metal-ligante.
1	Grafos das ligações muito densos.
0.	Não apresentaram ligantes.
0.	Não apresentaram metais.

A discussão sobre os motivos de as estruturas não terem sido identificadas foi expandida nas seções 4.10 a 4.12. Medidas estão sendo tomadas para ampliar a aplicabilidade do método.

Dois metais tiveram menos de 50 estruturas identificadas e foram removidos dos nossos estudos por não serem estatisticamente representativos. Os metais removidos foram: Amerício (Am) com 3 estruturas identificadas e plutônio (Pu) com 37 estruturas.

Os metais do nosso banco de dados foram divididos em 3 categorias⁷². Metais pós-transição: Al, Bi, Ga, Ge, In, Pb, Sb, Sn e Tl. Metais de transição: Ag, Au, Cd, Co, Cr, Cu, Fe, Hf, Hg, Ir, La, Mn, Mo, Nb, Ni, Os, Pd, Pt, Re, Rh, Ru, Sc, Ta, Tc, Ti, V, W, Y, Zn e Zr. E lantanídeos e actinídeos: Ce, Dy, Er, Eu, Gd, Ho, Lu, Nd, Np, Pr, Sm, Tb, Th, Tm, U e Yb.

A tabela 5 sumariza os resultados das identificações para essas três categorias quanto a quiralidade, número de coordenação e *shape*.

Tabela 5. Características do banco de dados estudado. Total corresponde ao número de estruturas identificadas da categoria em questão. A coluna “%a” foi a mediana da porcentagem de metais aquirais da categoria correspondente, NC define o número de coordenação mais frequente na categoria correspondente e, por fim, *shape* corresponde à forma da geometria mais comum da categoria correspondente.

Categoria	Total	%a	NC	<i>Shape</i>
Metais pós-transição	25.312	92	4	T-4
Metais de transição	155.046	76	6	OC-6
Lantanídeos e actinídeos	5.276	51	8	SAPR-8

Da tabela 5, podemos concluir que o comportamento geral do nosso banco de dados em relação às três categorias de compostos foram que, na maior parte das vezes, os metais pós-transição apresentaram geometria tetraédrica, os metais de transição apresentaram geometria octaédrica e os lantanídeos e actinídeos apresentaram geometria antiprisma quadrada.

Fizemos uma análise de componentes principais (PCA) dos dados obtidos de acordo com as seguintes variáveis: quantidade de observações em cada número de coordenação, quantidade de poliedros de coordenação em cada tipo de isômero (R, S ou G), quantidade de observações para cada *shape* e quantidade de observações para os tipos de polidentados, se são monodentados, bidentados, etc. Quanto ao tratamento dos dados, primeiro todas as variáveis foram divididas pelo número de observações. Em seguida, foram centradas na média e divididas pelo seu desvio padrão.

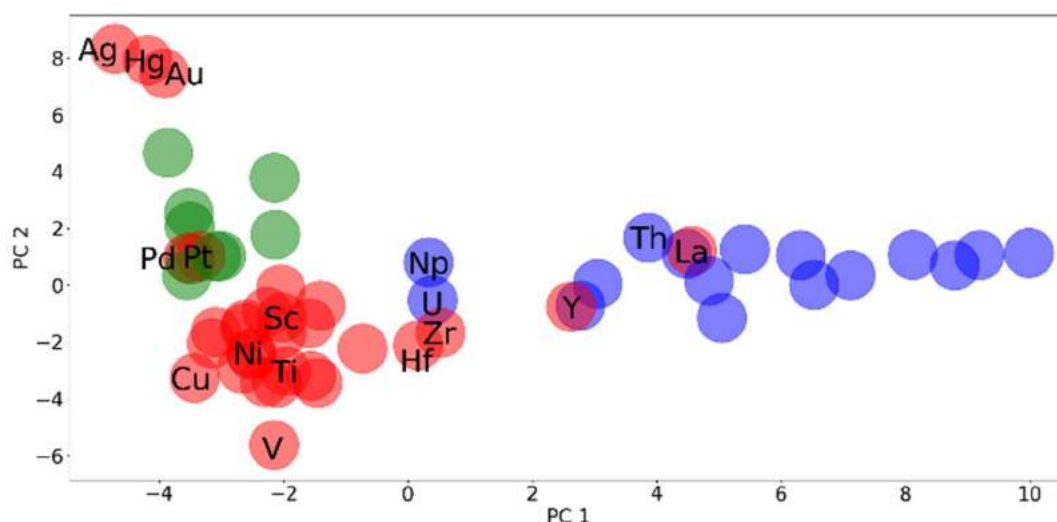


Figura 33. Análise de componentes principais dos sistemas metálicos. A variância explicada foi 42%. Os metais pós-transição foram representados por círculos verdes, os metais de transição foram representados por círculos vermelhos e os lantanídeos e actinídeos foram representados por círculos azuis.

A PCA apresentada na figura 33 ilustra o comportamento geral das 122.744 estruturas que puderam ser identificadas com os métodos deste trabalho. Foi um total de 150.468 complexos nas coordenações 1 a 8.

No nosso banco de dados, haviam 3 metais do grupo de elementos químicos 3. Os metais deste grupo foram Sc, Y e La. A partir da figura 33, observamos que o ítrio e o lantânio apresentaram características mais próximas dos lantanídeos e actinídeos do que dos metais de transição. Essa proximidade foi porque esses compostos apresentaram maiores números de coordenação, 52% dos compostos de ítrio (Y) apresentaram números de coordenação maiores do que 6, sendo que no lantânio (La), 70% dos compostos apresentaram números de coordenação maiores do que 6. No entanto, o escândio não seguiu esta tendência apresentando características mais próximas às dos metais de transição: esse metal apresentou apenas 16% dos seus complexos com coordenação superior a 6.

No nosso banco de dados haviam 3 metais do grupo de elementos químicos número 4. Os metais desse grupo foram Ti, Zr e Hf. A partir da figura 33, observamos que o titânio apresentou características mais próximas às dos metais de transição, enquanto Zr e Hf apresentaram características mais próximas às dos actinídeos Np e U. O urânio e o netúnio tiveram a maioria dos complexos na coordenação 7 e geometria PBPY-7.

Observamos que o deslocamento para os actínídeos por parte do Zr e Hf foi devido a um maior número de complexos com coordenações superiores a 6, nesse caso, respectivamente 30% e 25%. O titânio e o tório não seguiram a mesma tendência. O titânio apresentou características semelhantes às dos demais metais de transição e o tório apresentou características semelhantes às dos lantanídeos.

No nosso banco de dados haviam 3 metais do grupo de elementos químicos número 10. Os metais desse grupo foram Ni, Pd e Pt. A partir da figura 33, observamos que o Pd e o Pt tiveram características mais próximas dos metais pós-transição devido à preferência dos complexos desses metais pela coordenação 4 na geometria quadrático planar. Compostos de paládio apresentaram-se em 97% na geometria SP-4, enquanto complexos de platina apresentaram-se em 82% nessa mesma geometria. O níquel apresentou características mais próximas às dos metais de transição.

No nosso banco de dados haviam 3 metais do grupo de elementos químicos número 11. Os metais desse grupo foram Cu, Ag e Au. A partir da figura 33, observamos que o ouro e a prata apresentaram a coordenação 2 como majoritária com 53% e 67% dos complexos cristalizados com esse número de coordenação respectivamente. Observamos que o mercúrio (Hg), metal do grupo 12 também apresentou o número de coordenação 2 como majoritária, apresentando características de cristalização próximas às do ouro e da prata. O cobre, por sua vez, apresentou características semelhantes às dos demais metais de transição.

Dentre os metais de transição, foi observado um destaque para o vanádio: observamos que esse metal foi o que apresentou o menor número de monodentados, com apenas 11% dos complexos estudados apresentando essa condição. Os metais de transição deram preferência a ligantes monodentados ou bidentados. O vanádio deu preferência a coordenações maiores, onde 42% dos compostos estudados apresentaram ligantes polidentados com denticção 3 ou 4.

Na seção seguinte apresentamos uma análise específica dos complexos bimetálicos encontrados neste banco de dados.

4.15 COMPLEXOS BIMETÁLICOS

Neste trabalho, classificamos como bimetálica a estrutura que apresentava exatamente dois metais em sua célula unitária. Nesta classificação, os metais precisavam ser iguais e conectados diretamente ou através de uma série de ligações químicas. Embora

possam existir complexos bimetálicos cristalizados com outros metais na mesma célula unitária, nos limitamos a estudar apenas os com a regra que enunciamos acima.

Dentre as 122.744 estruturas identificadas com os métodos que desenvolvemos, 17.603 (14% de 122.744) delas foram classificadas como complexos bimetálicos. Os complexos bimetálicos foram classificados em 6 categorias as quais estão apresentadas na tabela 6.

Tabela 6. Classificações dos complexos bimetálicos a respeito do seu estereoisomerismo relativo. %Estruturas se refere a porcentagem em relação ao total de estruturas de complexos bimetálicos (122.744).

%Estruturas	Classificação
69	Mesmo estereoisômero aquiral (G).
13	Estereoisomeria meso.
12	Ligantes diferentes.
5	Mesmo estereoisômero quiral (R ou S).
1	Poliedros de coordenação diferentes.
0.	Estereoisômeros diferentes.

Cada uma das classificações da tabela 6 está apresentada a seguir.

Dentre as estruturas que apresentaram o mesmo estereoisômero, sendo esse do tipo G, destacamos o complexo de *refcode* COXRAJ (figura 34).

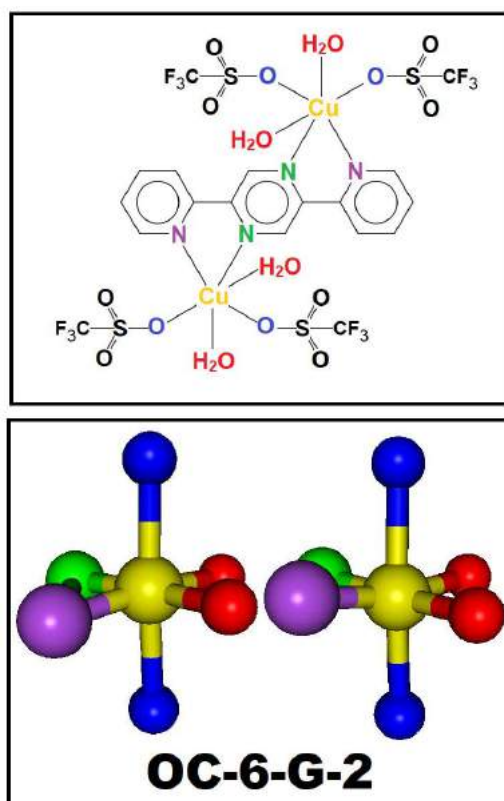


Figura 34. Diagrama químico do complexo de código COXRAJ (acima) e geometria dos poliedros de coordenação desse mesmo complexo (abaixo). As prioridades dos ligantes foram representadas com cores: 1-azul, 2-vermelho, 3-verde e 4-roxo. O identificador do estereoisômero de ambos, como proposto neste trabalho, está apresentado abaixo dos poliedros de coordenação. Nesse, os estereoisômeros do poliedro de coordenação foram iguais e ambos do tipo G (aquiral).

Dentre as estruturas que apresentaram estereoisomeria do tipo meso, destacamos o complexo de *refcode* KIQGEW. Nessa estrutura um dos átomos de manganês apresentou-se como R-1 e ou outro como S-1, seu respectivo enantiômero (figura 35).

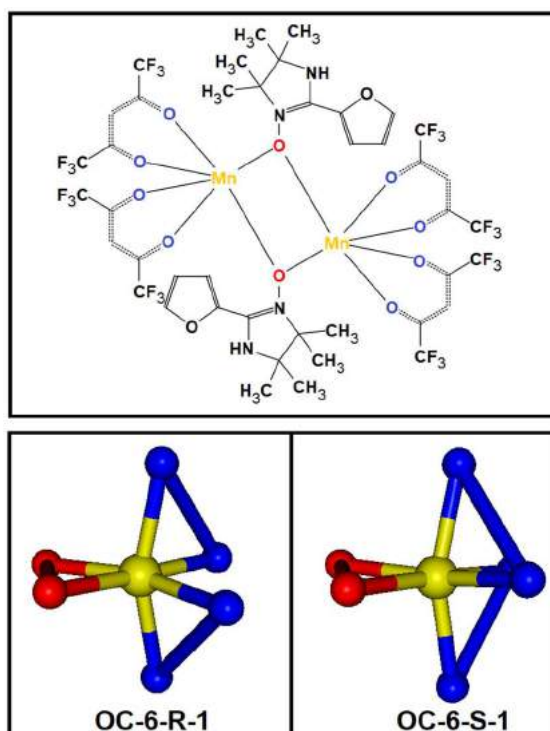


Figura 35. Diagrama químico do complexo de código KIQGEW (acima) e geometria dos poliedros de coordenação desse mesmo complexo (abaixo). As prioridades dos ligantes foram representadas com cores: 1-azul e 2-vermelho. O identificador do estereoisômeros como proposto neste trabalho está apresentado abaixo dos poliedros de coordenação. Nesse caso, os poliedros de coordenação apresentaram uma estereoisomeria do tipo meso (um R e o outro S).

Dentre as estruturas que apresentaram ligantes diferentes, destacamos a EZUBEH. Nessa, uma molécula de água está ligada a um dos átomos de cobre. No outro átomo de cobre não se observa nenhuma molécula de água coordenada (figura 36).

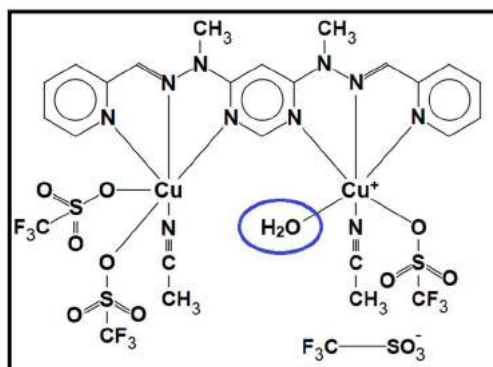


Figura 36. Diagrama químico do complexo EZUBEH. O cobre da direita está ligado a uma molécula de água (circulada em azul), esse ligante está ausente no cobre da esquerda.

Dentre as estruturas que apresentaram o mesmo estereoisômero, sendo ambos do tipo R ou ambos do tipo S, destacamos o complexo de *refcode* NAGVOH (figura 37).

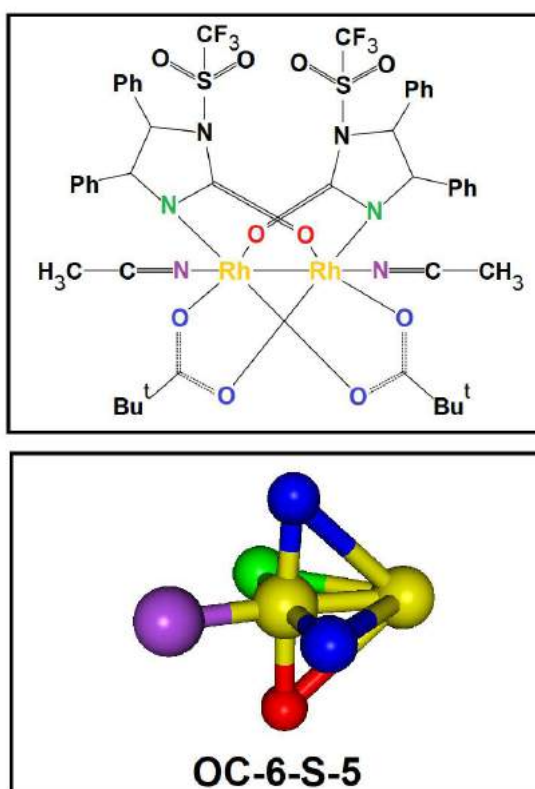


Figura 37. Diagrama químico do complexo de código NAGVOH (acima) e geometria dos poliedros de coordenação desse mesmo complexo (abaixo). Nas figuras, foi mantida a cor amarela para os dois metais, portanto, neste caso, as prioridades dos ligantes foram representadas pelas seguintes cores: 1-azul, 2-amarelo, 3-vermelho, 4-verde e 5-roxo. O identificador do estereoisômero de ambos, como proposto neste trabalho, está apresentado abaixo dos poliedros de coordenação. Nesse, os estereoisômeros do poliedro de coordenação foram iguais e ambos do tipo S (quiral).

Dentre as estruturas que apresentaram poliedros de coordenação diferentes, destacamos o complexo de *refcode* JEKKAL (figura 38). Nesse, o poliedro de coordenação de um dos átomos de cobre apresentou-se como uma pirâmide de base quadrada (SPY-5) e o outro apresentou-se como uma bipirâmide de base triangular (TBPY-5).

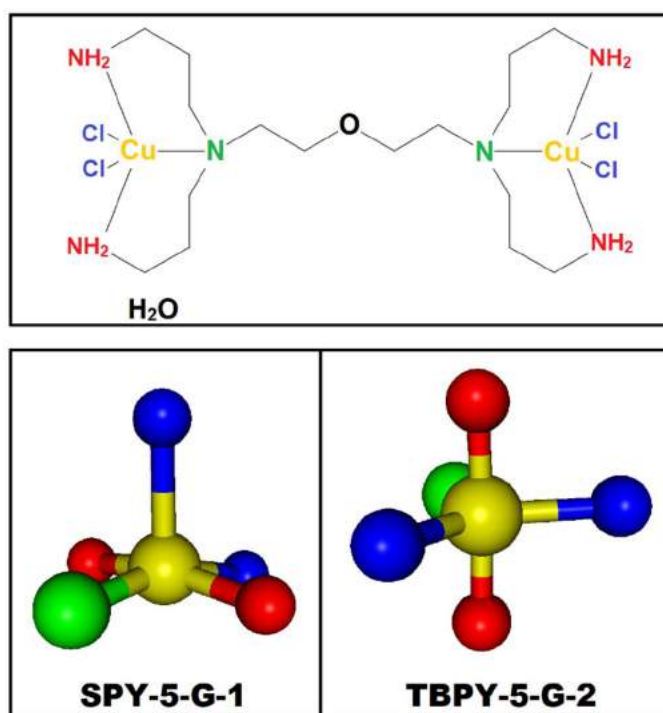


Figura 38. Diagrama químico do complexo de código JEKKAL (acima) e geometria dos poliedros de coordenação desse mesmo complexo (abaixo). As prioridades dos ligantes foram representadas com cores: 1-azul, 2-vermelho e 3-verde. O identificador do estereoisômero como proposto neste trabalho está apresentado abaixo do poliedro de coordenação. Nesse caso, os dois estereoisômeros apresentaram-se com geometrias do poliedro de coordenação diferentes.

Dentre as estruturas em que os estereoisômeros foram diferentes e não do tipo meso, destacamos o complexo de *refcode* AVARUK (figura 39). Nesse, em um caso os nitrogênios (vermelhos) estão trans aos oxigênios centrais (azuis), no outro, os nitrogênios estão cis aos oxigênios centrais.

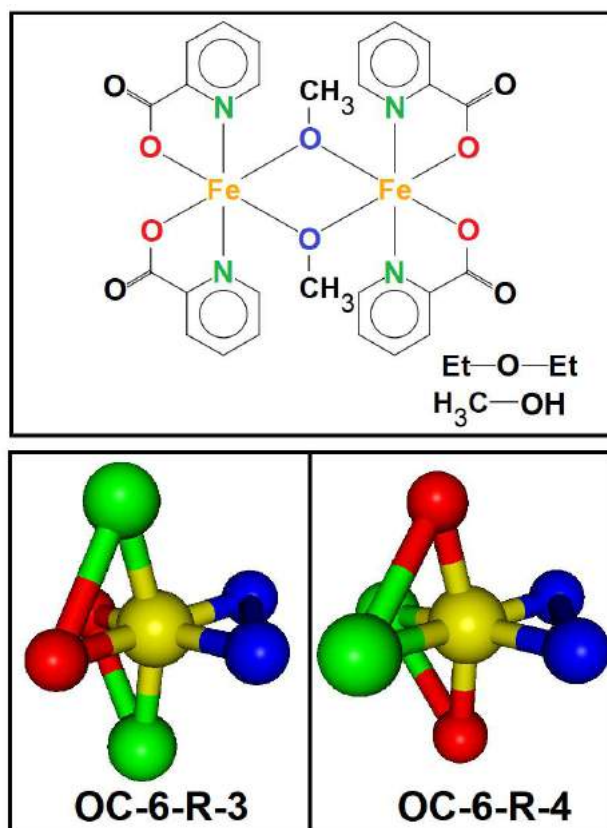


Figura 39. Diagrama químico do complexo de código AVARUK (acima) e geometria dos poliedros de coordenação desse mesmo complexo (abaixo). As prioridades dos ligantes foram representadas com cores: 1-azul, 2-vermelho e 3-verde. O identificador do estereoisômero como proposto neste trabalho está apresentado abaixo do poliedro de coordenação. Nesse, os estereoisômeros do poliedro de coordenação foram diferentes sem se configurarem como uma estereoisomeria meso.

Em resumo, observamos que 86% dos complexos bimetálicos apresentaram estereoisomeria relacionada. Dentre essas, a maioria dos complexos apresentaram o mesmo estereoisômero sendo esse do tipo G (aquiral).

5 *COMPLEX BUILD*: UM *SOFTWARE* PARA MONTAGEM DA GEOMETRIA DE COMPLEXOS LANTANÍDEOS

Neste capítulo, apresentamos um *software* em construção nomeado *Complex Build*. O objetivo deste *software* é automatizar a construção de complexos. Para que o *software* seja eficiente, é necessária uma compreensão profunda da estereoisomeria de complexos metálicos. Por isso, o *Complex Build* ainda está em produção e estima-se que demorará pelo menos mais um ano para ser entregue à comunidade científica. Portanto, neste capítulo, apresentamos os avanços deste algoritmo feitos até o momento.

O *Complex Build* possuirá duas funcionalidades principais: a primeira requer que a fórmula molecular genérica, a *shape* e os tipos de ligantes coordenados sejam fornecidos. De posse destas informações, o *Complex Build* gerará todas as coordenadas de todos os estereoisômeros possíveis desta geometria para futuros cálculos de química quântica e para auxiliar no refinamento de raios X. A segunda funcionalidade requer as coordenadas dos ligantes que compõem o complexo, seja para uma geometria específica, seja para todas as geometrias dos estereoisômeros montados no passo anterior. Através de várias operações matriciais, o *Complex Build* montará o complexo do lantanídeo e fará uma otimização local com o método do arrefecimento simulado para melhor acomodar os ligantes ao complexo, possibilitando uma melhor condição inicial para este complexo ser utilizado em cálculos computacionais quânticos.

Este capítulo se inicia com os objetivos do *software* (seção 5.1) seguido de um protótipo da versão final que almejamos (seção 5.2). Em seguida, apresentamos as operações matemáticas que foram desenvolvidas até o momento para a construção deste *software* (seções 5.3 a 5.5). Também apresentamos um resultado preliminar da aplicação do *Complex Build* ao complexo de *refcode* JALNIU (seção 5.6). Na seção 5.7 apresentamos um resumo do algoritmo do arrefecimento simulado e, na seção 5.8 mostramos como novos ligantes podem ser adicionados à biblioteca do *Complex Build*.

5.1 OBJETIVO

O objetivo do *Complex Build* é ser um *software* com uma interface amigável capaz de montar complexos de íons lantanídeos a partir de um banco de dados de ligantes previamente construído. Isso será feito de forma que o composto de coordenação resultante apresente uma geometria que seja um bom ponto de partida para cálculos posteriores de química quântica. Ou seja, que a geometria gerada pelo *Complex Build*, ao ser otimizada por modelos químico quânticos, não produza estruturas de complexos com constantes de força negativas.

Para isto, vamos dividir o problema em duas etapas. Na primeira, construiremos um banco de dados de ligantes com todas as informações necessárias para que possam ser corretamente coordenados ao íon metálico. Na segunda, de posse deste banco de dados, montaremos o complexo final e pré-otimizaremos sua estrutura. As estruturas finais estarão aptas a serem submetidas ao cálculo quântico desejado – seja um dos modelos Sparkle⁷³, o modelo RM1⁷⁴ para lantanídeos, ou cálculos *ab initio*.

Quando estiver completo, com apenas alguns cliques o *Complex Build* permitirá a construção de complexos de lantanídeos. Para isso, é necessário um banco de dados constantemente enriquecido.

5.2 SOFTWARE COMPLEX BUILD: PROTÓTIPO EM QT

O *software Complex Build* será capaz de construir complexos de íons lantanídeos de forma sistematizada. Além disto, o *software* gerará todos os estereoisômeros possíveis para serem avaliados com métodos de Química Quântica, tais como métodos semiempíricos, DFT e *ab initio* e também como subsídio para o refinamento cristalográfico de estruturas. Na figura 40 é apresentado um protótipo da plataforma do *software Complex Build*. No centro desta figura, é apresentado um dos estereoisômeros do complexo de código cristalográfico NURFIP. A direita, são apresentados os ligantes que compõem o complexo.

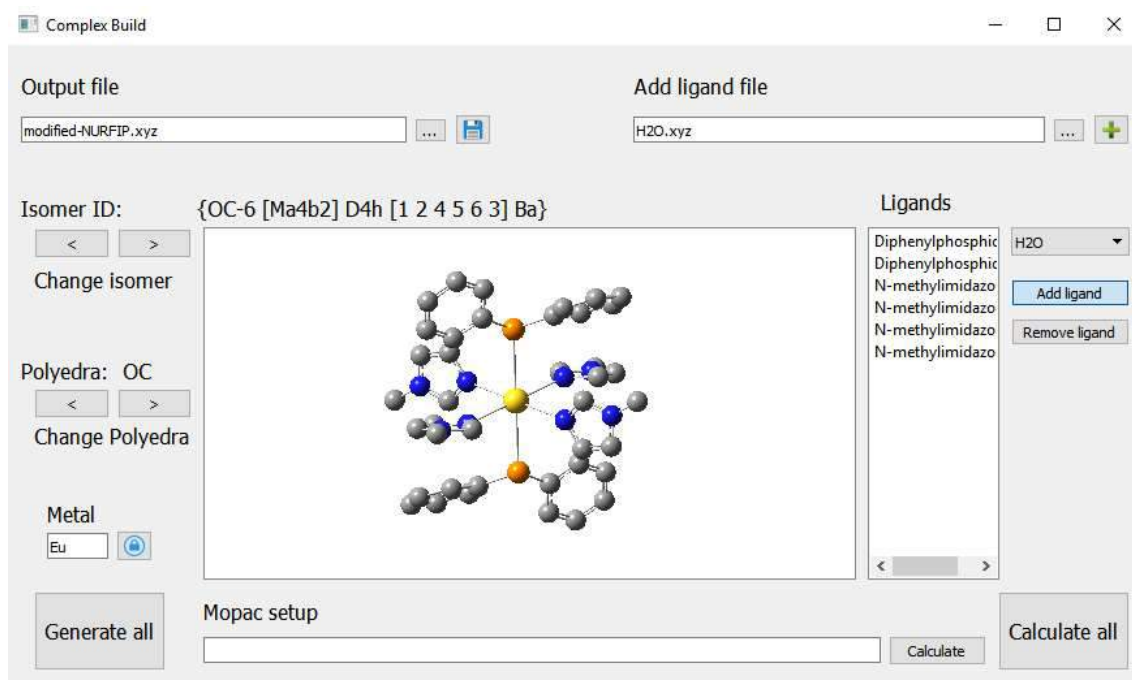


Figura 40. Plataforma protótipo do *software Complex Build*.

A adição de ligantes provoca uma mudança no poliedro de coordenação. Esta modificação faz com que o *software Complex Build* seja capaz de construir um complexo em uma das geometrias adequadas para um número de coordenação maior. Na Figur, por exemplo, a adição de uma molécula de água ao NURFIP fez com que a geometria saísse de OC-6 (figura 41), para PBPY-7 (Figur). Naturalmente, o poliedro de coordenação poderá ser modificado com as setas laterais intituladas “*Change Polyhedra*”.

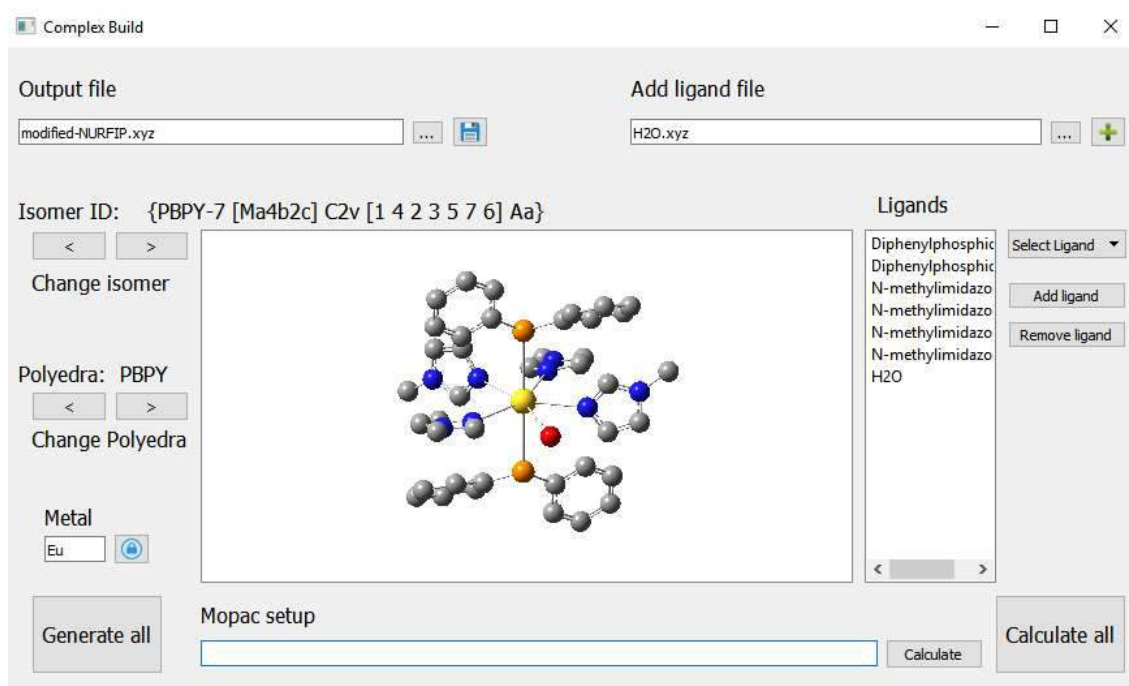


Figura 41. Adição de um ligante ao complexo de código cristalográfico NURFIP usando a plataforma protótipo do *software Complex Build*.

A enumeração de todos os estereoisômeros, incluindo as geometrias que aparecem com frequência em complexos de íons lantanídeos é uma inovação proposta pelo nosso grupo. Portanto, ainda não existe nenhum *software* que seja capaz de construir todas essas possibilidades de estereoisômeros de forma sistematizada.

Acreditamos que o *Complex Build* possa vir a trazer grandes contribuições para a área de Química Teórica. Por exemplo, para o complexo $[\text{Eu}(\text{fdh})_4]^-$ existem 6 estereoisômeros de simetria D_2 , 2 estereoisômeros de simetria C_4 , 16 estereoisômeros de simetria C_2 e 18 estereoisômeros de simetria C_1 . O total de estereoisômeros para este composto é 42. Os métodos teóricos necessitam da estrutura para avaliar as propriedades dos sistemas. No entanto, é muito difícil construir todas as 42 possibilidades sem o auxílio de um *software* desenvolvido para este fim. Uma solução para este problema é usar a geometria cristalográfica, mas esta nem sempre está disponível. Além disso, como mencionamos anteriormente, as geometrias cristalográficas podem nem corresponder rigorosamente à realidade uma vez que o discernimento entre duas estruturas quirais de configurações absolutas opostas, ou até mesmo entre estereoisômeros diferentes, especialmente entre aqueles de mesmo grupo pontual não era fácil de fazer na ausência da consideração de todas as possibilidades de estereoisômeros. Um outro problema que

passa a poder ser abordado de forma mais robusta seria como realizar o *design* de novos compostos que ainda não foram sintetizados e cujas estruturas cristalográficas não são sequer conhecidas.

Acreditamos que o *Complex Build* estabelecerá um novo paradigma no estudo teórico de complexos de íons lantanídeos. Construiremos um *software* amigável para que todos os estudos nessa área sejam feitos exaurindo as possibilidades estruturais e não apenas que sejam feitos a partir de um único estereoisômero específico montado ao acaso como tem sido a prática até então.

5.3 DEFINIÇÃO DOS PONTOS DE REFERÊNCIA PARA A COORDENAÇÃO COM O METAL

A coordenação com o metal será feita com base em distâncias médias pré-definidas para cada tipo de ligante a ser coordenado. Para evitar frequências imaginárias no complexo otimizado pelos métodos quânticos, é imprescindível que a geometria de partida espalhe e separe ao máximo os ligantes ao redor do metal de forma a não criar pontos de sela espúrios na superfície de potencial.

Por isso, num primeiro momento, o ligante é construído sobre pontos pré-definidos na superfície de uma esfera cujo centro é ocupado pelo metal e cujo raio é a distância média de coordenação para o ligante. Essa distância será calculada pelo modelo Sparkle da forma como será descrita a seguir. O número de pontos utilizado no *Complex Build* é igual ao número de coordenação do complexo.

Os pontos são definidos por um dado poliedro de coordenação a partir da geometria ideal para o *polyhedral symbol* tal como discutido na seção 4.2. Se o ligante for monodentado, este é colocado em um dos pontos, ou seja, em um vértice do sólido formado. Se o ligante for bidentado, escolhe-se dois pontos adjacentes para colocá-lo, ou seja, em uma aresta do sólido formado. Se o ligante for um tridentado laminar, escolhe-se dois pontos adjacentes para colocá-lo, caso em que os três átomos coordenados ocuparão apenas dois pontos de máxima distância. Por exemplo, se o número de coordenação do complexo for 9 e um dos ligantes for tridentado, então escolheremos um poliedro de coordenação 8 para montar o complexo, onde o tridentado laminar ocupará apenas 2 pontos.

E, por último, se a molécula estiver na família dos tridentados faciais, três pontos do poliedro de coordenação são escolhidos: pontos que necessariamente formam uma das faces do sólido convexo.

5.4 TRATAMENTO DOS LIGANTES

O banco de dados consistirá em uma coleção de arquivos pré-definidos, cada um correspondendo a um ligante diferente. Para que a montagem seja possível, é preciso definir vetores que nos permitam coordenar o ligante ao metal. O vetor que rege a distância da ligação com o átomo central será chamado de v_1 e o vetor que rege a direcionalidade da ligação química ligante-metal será chamado de v_2 . Esses vetores serão atribuídos com base nas características de denteção do ligante: se ele é monodentado, bidentado, tridentado laminar ou tridentado facial.

5.4.1 Ligantes Monodentados

Nos ligantes monodentados, a origem do sistema de coordenadas, v_1 , é a localização do átomo que será coordenado ao metal. Já o vetor que define a direção da ligação, v_2 , é definido como a diferença entre o vetor v_1 e o vetor que corresponde ao centro de massa da molécula. O módulo do vetor v_1 corresponde à distância do átomo doador ao metal. No *Complex Build*, essa distância será atribuída como uma distância média pré-definida para cada tipo de ligante a ser coordenado. Caso o ligante possua mais de um ponto de coordenação possível, esse deverá ser adicionado de forma separada ao banco de dados. A figura 42 ilustra a definição dos vetores de coordenação para um ligante monodentado.

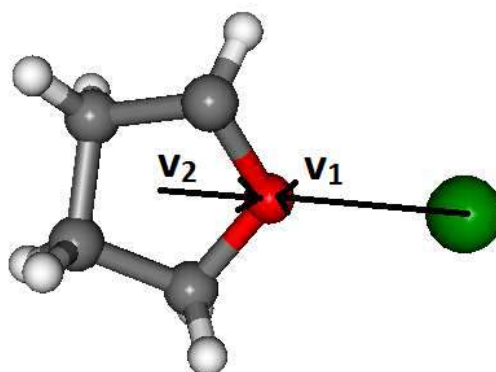


Figura 42. Definição dos vetores de referência para um ligante monodentado.

5.4.2 Ligantes Bidentados

Para que o *Complex Build* faça a montagem dos complexos é necessário que dois vetores de coordenação sejam definidos para cada complexo (v_1 e v_2). Para que esses vetores sejam definidos, nos baseamos em 3 pontos de referência. Os pontos c_1 e c_2 correspondem aos átomos doadores do bidentado e o ponto c_3 é um outro átomo que serve de referência para determinar a direcionalidade da ligação química.

Nos bidentados, o vetor v_1 é definido como o ponto médio entre os dois átomos que serão coordenados ao metal. Por sua vez, para a obtenção do vetor v_2 vários passos foram necessários. No parágrafo seguinte será descrito de forma qualitativa como esse vetor foi obtido. Em seguida, apresentaremos uma descrição mais detalhada com a inclusão das expressões matemáticas utilizadas.

Na definição do vetor v_2 , responsável pela direcionalidade da coordenação ligante metal, é necessário escolher um terceiro átomo como ponto de referência. Esse ponto de referência é girado no plano dos três átomos (os dois que irão se coordenar e este terceiro) até que se forme um ângulo reto entre o segmento que liga os dois átomos que irão se coordenar e o segmento que sai da extremidade do vetor v_1 em direção ao ponto de referência (agora girado com esta finalidade). O vetor que define a direção de ligação, v_2 , é então definido como a diferença entre o vetor v_1 e o ponto de referência. Um exemplo destes vetores está apresentado na figura 43.

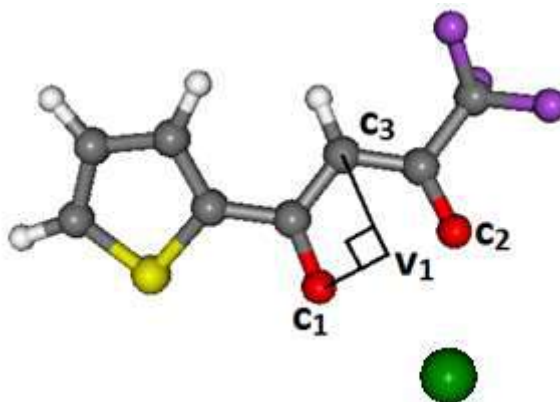


Figura 43. Definição dos pontos de referência para os ligantes bidentados.

Abaixo estão descritas as operações utilizadas para encontrar os vetores v_1 e v_2 .

Sejam c_1 e c_2 os vetores dos átomos que farão a ligação de coordenação (oxigênios em vermelho na figura 43 e c_3 o terceiro átomo que será usado como ponto de referência. O vetor v_1 é o ponto médio do segmento que une c_1 e c_2 como expresso em (5.1).

$$\mathbf{v}_1 = \frac{1}{2}(\mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2) \quad 5.1$$

A normal ao plano formado por esses três vetores, $\mathbf{v}_N$, pode ser obtida a partir da equação (5.2), em que $\times$ indica um produto vetorial,

$$\mathbf{v}_N = (\mathbf{c}_1 - \mathbf{v}_1) \times (\mathbf{c}_1 - \mathbf{c}_3) \quad 5.2$$

Para que o ângulo entre $\mathbf{c}_1$, $\mathbf{v}_1$ e $\mathbf{c}_3$ seja igual a 90° é necessário encontrar o ângulo inicial e aplicar uma matriz de rotação. O ângulo entre três pontos pode ser encontrado com as equações (5.3)-(5.5).

$$\mathbf{v} = \mathbf{c}_1 - \mathbf{v}_1 \quad 5.3$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{c}_3 - \mathbf{v}_1 \quad 5.4$$

$$\theta = \arccos \left(\frac{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{u})}{\|\mathbf{v}\| \|\mathbf{u}\|} \right) \quad 5.5$$

O ângulo de rotação foi definido como expresso em (5.6).

$$\theta_{rot} = -\theta + \frac{\pi}{2} \quad 5.6$$

A matriz de rotação usada neste trabalho é a definida por um vetor normalizado $\mathbf{v}$ e por um ângulo α , sendo a rotação no sentido anti-horário seguindo a regra da mão direita. A equação (5.7), abaixo, define essa matriz, em que $\mathbf{v}=(x,y,z)$ é o vetor normalizado e θ é o ângulo de rotação.

$$M_{rot} = \begin{bmatrix} x^2[1 - \cos(\theta)] + \cos(\theta) & xy[1 - \cos(\theta)] - z\sin(\theta) & xz[1 - \cos(\theta)] + y\sin(\theta) \\ xy[1 - \cos(\theta)] + z\sin(\theta) & y^2[1 - \cos(\theta)] + \cos(\theta) & yz[1 - \cos(\theta)] - x\sin(\theta) \\ xz[1 - \cos(\theta)] - y\sin(\theta) & yz[1 - \cos(\theta)] + x\sin(\theta) & z^2[1 - \cos(\theta)] + \cos(\theta) \end{bmatrix} \quad 5.7$$

O vetor normal que determina o eixo de rotação é o mesmo definido pela equação (5.2). É importante observar que a rotação não deve ser aplicada sobre os vetores partindo da origem. Queremos que ele tenha 90° em relação a $\mathbf{v}_1$. Então, esse é o vetor que precisa ser usado como referência. Dessa forma, o vetor $\mathbf{v}_2$ pode ser facilmente encontrado através da equação abaixo (5.8).

$$\mathbf{v}_2 = M_{rot}(\mathbf{c}_3 - \mathbf{v}_1) \quad 5.8$$

Três átomos definem um plano, mas existem duas escolhas possíveis para o sentido do vetor normal. Uma escolha errada compromete os resultados, levando a uma rotação na direção oposta ao que se esperava. Na implementação deste trabalho a rotação passa por uma checagem, caso a rotação venha a apontar na direção oposta ao íon lantanídeo, o vetor normal é invertido.

5.4.3 Ligantes Tridentados Laminares

Um tipo especial de ligantes tridentados, os laminares, são tratados essencialmente como se fossem bidentados. Tridentados laminares são ligantes em que os três átomos coordenados, na montagem, ficam no mesmo plano.

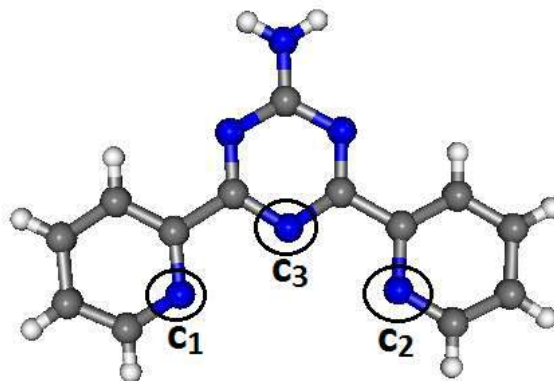


Figura 44. Exemplo de ligante tridentado laminar, que, para fins de montagem é tratado como bidentado no *Complex Build*.

Na figura 44 temos um exemplo de ligante tridentado laminar codificado como pertencente à família dos bidentados. Os átomos circundados são os que se coordenarão diretamente ao metal e serão os pontos de referência. A diferença entre os bidentados e os tridentados laminares é que, nestes, o terceiro átomo c_3 deve ser obrigatoriamente o terceiro que se coordenará. A partir daí o tratamento é idêntico ao dado aos ligantes bidentados.

5.4.4 Ligantes Tridentados Faciais

O grupo dos tridentados faciais é caracterizado por moléculas cujos três átomos que se coordenarão definem um plano, sendo a direção de coordenação ao metal uma normal em relação a este plano. É o caso do ligante apresentado na figura 45.

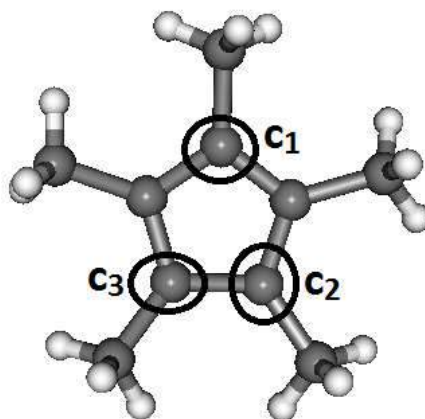


Figura 45. Molécula 1,2,3,4,5-pentametil-ciclopenta-1,3-dieno classificada no *Complex Build* dentro da categoria tridentado. Os círculos mostram os três átomos de referência utilizados para definir o plano ao qual a direção da ligação será uma normal.

Sejam $\mathbf{c}_1$, $\mathbf{c}_2$ e $\mathbf{c}_3$ os três pontos de referência. $\mathbf{v}_1$ é então definido como o centroide do triângulo formado pelos três pontos (5.9).

$$\mathbf{v}_1 = \frac{1}{3}(\mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2 + \mathbf{c}_3) \quad 5.9$$

O vetor $\mathbf{v}_2$ é definido como a normal do plano formado por esses três átomos (5.10).

$$\mathbf{v}_2 = (\mathbf{c}_1 - \mathbf{c}_2) \times (\mathbf{c}_3 - \mathbf{c}_2) \quad 5.10$$

Caso a normal calculada desta forma esteja apontando para o centro de massa da molécula, esse vetor é então invertido pois o metal deverá se situar no lado oposto ao do centro de massa.

5.5 MONTAGEM DO COMPLEXO

Para que um complexo seja montado é necessário que os ligantes necessários estejam disponíveis no banco de dados de forma que os seus vetores de coordenação $\mathbf{v}_1$ e $\mathbf{v}_2$ estejam corretamente definidos. Adicionalmente é necessário definir um poliedro de coordenação. Nesta seção, cada ponto do poliedro de coordenação, sobre o qual serão colocados os átomos doadores será definido pela variável $\mathbf{p}_n$. Essas geometrias são os *shapes* que discutimos no capítulo 4.

O primeiro passo a ser executado na montagem é transladar a molécula para que o ponto $\mathbf{v}_1$ coincida com um dos pontos da esfera. Partindo da molécula centrada em $\mathbf{v}_1$,

seja $\mathbf{p}_1$ o ponto do poliedro de coordenação em estudo e $\mathbf{c}_n$ o átomo n da molécula. A equação (5.11) descreve essa translação.

$$\mathbf{c}_n^{nova} = \mathbf{c}_n + \mathbf{p}_1 \quad 5.11$$

Em seguida, é necessário encontrar a matriz de rotação que fará com que o vetor $\mathbf{v}_2$ aponte para a origem das coordenadas, que é onde o metal estará. A equação (5.12) nos permite encontrar a normal ao plano formado pela origem, onde está o metal, pelo $\mathbf{v}_1$ e pelo $\mathbf{v}_2$.

$$\mathbf{u}_N = \mathbf{v}_1 \times \mathbf{v}_2 \quad 5.12$$

O ângulo de rotação pode ser calculado pela equação (5.5), desde que $\mathbf{v}$ seja igual a $\mathbf{v}_1$ e $\mathbf{u}$ seja igual a $\mathbf{v}_2$. De posse dessas duas grandezas, é possível definir a matriz M_{rot} e rotacionar todos os átomos do ligante de tal forma que $\mathbf{v}_2$ sempre aponte para a origem onde está o metal. É importante, no entanto, fazer uma mudança de coordenadas onde a nova origem passe a se localizar no ponto representado pela extremidade do vetor $\mathbf{v}_1$ durante a rotação. A matriz M_{rot} foi definida em relação ao ponto de referência $\mathbf{v}_1$. Por conseguinte, é necessário transladar todo o sistema para esse ponto de referência, realizar a rotação e depois retornar todos ao referencial onde o metal está posicionado na origem.

Se a molécula for um ligante bidentado, a translação é feita de forma que o ponto do poliedro de coordenação seja centrado no ponto médio da aresta. Além disso, mesmo após a rotação na direção do centro, é necessário que os átomos da ligação química estejam alinhados sobre os pontos de referência.

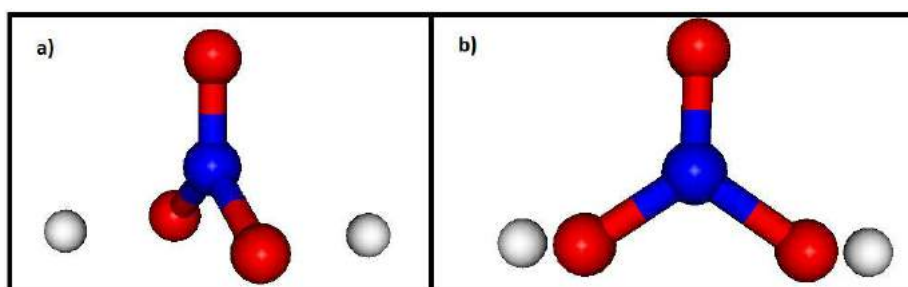


Figura 46. Posicionamento inicial do nitrato para uma montagem de complexo. Em a), temos a montagem inicial, em b), o nitrato está alinhado aos pontos de referência.

Na figura 46 está apresentada a rotação necessária para que o complexo fique alinhado aos pontos de referência. Isso foi realizado usando uma triagem de rotações internas sobre o vetor $\mathbf{v}_2$. A saber, realizou-se várias rotações de $0,1^\circ$ e manteve-se a que apresentou menor distância entre os átomos e os pontos de referência. Seria possível

resolver esse problema usando princípios geométricos fundamentais, mas a triagem era importante para o caso dos complexos tridentados, por isso foi usada também neste passo.

Nas moléculas da família tridentada facial, a translação é feita de forma a igualar os centros geométricos, tanto da molécula quanto dos três pontos do poliedro de coordenação. Por fim, é feita uma triagem para minimizar a distância entre os átomos e os pontos de referência.

5.6 ESTUDO DE CASO: ESTEREOISÔMEROS DO COMPLEXO JALNIU

Como validação dos métodos desenvolvidos neste trabalho, foi escolhido um complexo de európio para o estudo dos seus diversos estereoisômeros. O complexo de código cristalográfico JALNIU é composto por três ligantes monodentados iguais (átomos de bromo) e dois ligantes bidentados iguais. Para a coordenação 7 e fórmula estrutural $\text{Ma}_3(\text{A}_2)_2$, supondo que os bidentados não se liguem em um ângulo superior a 100° , calculamos que esse complexo deve possuir 12 estereoisômeros. A figura 47 mostra todas as estruturas destes estereoisômeros com seus respectivos códigos.

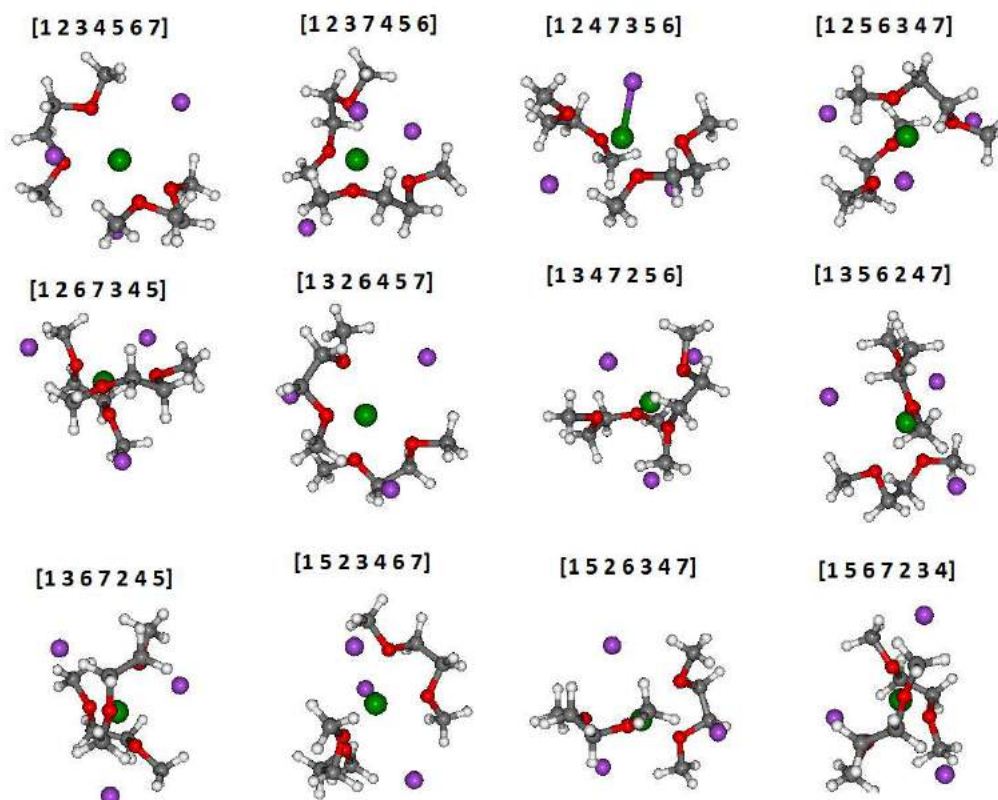


Figura 47. Os 12 estereoisômeros do complexo de código cristalográfico JALNIU. As estruturas passaram por uma relaxação com o método PM6-D3H4.

Foi feita uma triagem com os seguintes métodos semiempíricos: AM1, PM3, PM6, PM6-D3H4, PM7 e RM1. O európio foi calculado usando o modelo Sparkle. Além das otimizações, um cálculo de energia para cada estereoisômero foi realizado usando o modelo COSMO com a constante dielétrica da água em 25°C (78.4). Estes resultados estão apresentados na tabela 7.

Tabela 7. Energias em eV para os 12 estereoisômeros do JALNIU. O indicador água corresponde ao uso do modelo COSMO com constante dielétrica de 78.4.

Código	PM6-D3H4	PM6-D3H4-água	PM6	PM6-água	PM3	PM3-água
[1 2 4 7 3 5 6]	-3145,29	-3164,40	-3145,29	-3164,54	-3533,82	-3552,37
[1 2 6 7 3 4 5]	-3142,62	-3161,14	-3142,62	-3161,14	-3531,08	-3549,03
[1 3 2 6 4 5 7]	-3142,62	-3161,15	-3142,63	-3161,23	-3531,24	-3548,68
[1 3 4 7 2 5 6]	-3142,61	-3161,18	-3142,63	-3161,30	-3530,77	-3548,72
[1 3 5 6 2 4 7]	-3142,61	-3161,18	-3142,64	-3161,23	-3531,46	-3549,29
[1 2 3 7 4 5 6]	-3142,61	-3161,10	-3142,62	-3161,22	-3531,07	-3548,74
[1 3 6 7 2 4 5]	-3142,61	-3161,08	-3142,59	-3161,11	-3531,41	-3549,19
[1 5 6 7 2 3 4]	-3142,60	-3161,11	-3142,63	-3161,20	-3531,46	-3549,20
[1 2 3 4 5 6 7]	-3142,60	-3161,11	-3142,63	-3161,22	-3531,24	-3549,08
[1 5 2 3 4 6 7]	-3142,59	-3161,10	-3142,63	-3161,21	-3531,27	-3548,99
[1 5 2 6 3 4 7]	-3142,59	-3161,21	-3142,59	-3161,12	-3531,26	-3549,03
[1 2 5 6 3 4 7]	-3142,59	-3161,29	-3142,62	-3161,19	-3530,92	-3548,65
Código	PM7	PM7-água	RM1	RM1-água	AM1	AM1-água
[1 2 4 7 3 5 6]	-3134,98	-3152,16	-3685,83	-3686,72	-3678,51	-3695,96
[1 2 6 7 3 4 5]	-3134,99	-3152,49	-3685,78	-3686,65	-3678,48	-3696,00
[1 3 2 6 4 5 7]	-3134,91	-3152,66	-3685,83	-3686,70	-3678,54	-3696,34
[1 3 4 7 2 5 6]	-3134,84	-3152,14	-3685,74	-3686,76	-3678,54	-3696,35
[1 3 5 6 2 4 7]	-3135,00	-3152,61	-3685,72	-3686,72	-3678,51	-3695,95
[1 2 3 7 4 5 6]	-3134,92	-3152,52	-3685,84	-3686,75	-3678,48	-3696,14
[1 3 6 7 2 4 5]	-3134,98	-3152,17	-3685,90	-3686,80	-3678,51	-3696,05
[1 5 6 7 2 3 4]	-3134,98	-3152,23	-3685,89	-3686,80	-3678,54	-3696,22
[1 2 3 4 5 6 7]	-3135,01	-3152,47	-3685,84	-3686,76	-3678,48	-3696,02
[1 5 2 3 4 6 7]	-3135,01	-3152,43	-3685,85	-3686,77	-3678,53	-3696,20
[1 5 2 6 3 4 7]	-3134,89	-3151,95	-3685,90	-3686,89	-3677,89	-3695,63
[1 2 5 6 3 4 7]	-3135,01	-3152,46	-3685,77	-3686,66	-3678,48	-3696,01

Observa-se na tabela 7 que os métodos PM3, PM6 e PM6-D3H4 identificaram o isômero mais estável como sendo a mesma estrutura identificada em fase sólida pela cristalografia. Em todos esses casos, a diferença de energia entre o mais estável e os demais foi em média 3 eV, implicando que esse realmente era o mínimo da estrutura. O uso do modelo COSMO causou inversões na ordem de estabilidade dos ligantes, mas o estereoisômero cristalográfico se manteve como o mais estável em todos os casos.

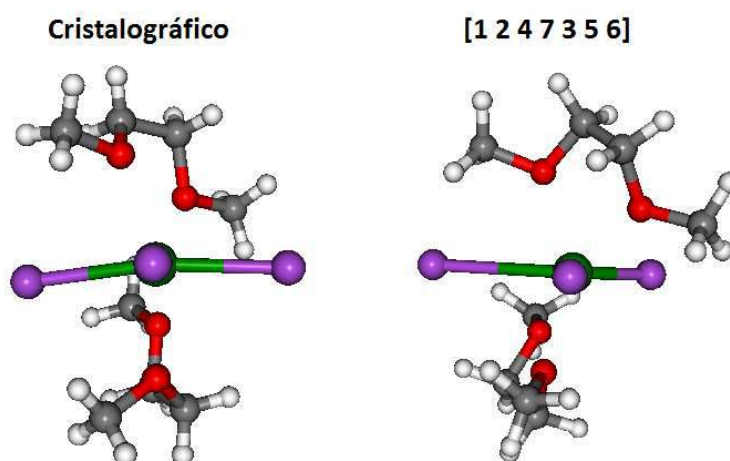


Figura 48. A esquerda a estrutura obtida por raio X do complexo JALNIU, a direita está apresentado o isômero mais estável obtido pelo método PM6-D3H4.

Na figura 48 está apresentada uma comparação entre a geometria obtida com o método PM6-D3H4 e a cristalográfica. O método semiempírico superestimou a distância európio bromo, essa, na média foi 3,1 Å, enquanto a média dessas distâncias na estrutura cristalográfica foi de 2,8 Å. Mas o PM6-D3H4 conseguiu descrever corretamente a distância európio oxigênio, ambas ficaram na faixa de 2,4 Å.

No entanto, os métodos AM1, PM7 e RM1, não identificaram o estereoisômero cristalográfico como sendo o mais estável. Nesses casos, a diferença entre as energias dos doze estereoisômeros foi muito menor, sem destaque em uma estrutura em particular. A adição do modelo COSMO provocou alterações na ordem de estabilidade em todos os casos.

5.7 ARREFECIMENTO SIMULADO

Até o momento, não consideramos a repulsão gerada pelo próprio volume de cada ligante. Na esfera de coordenação, é evidente que o volume ocupado pelo TPPO será maior do que o ocupado pelo brometo (figura 49).

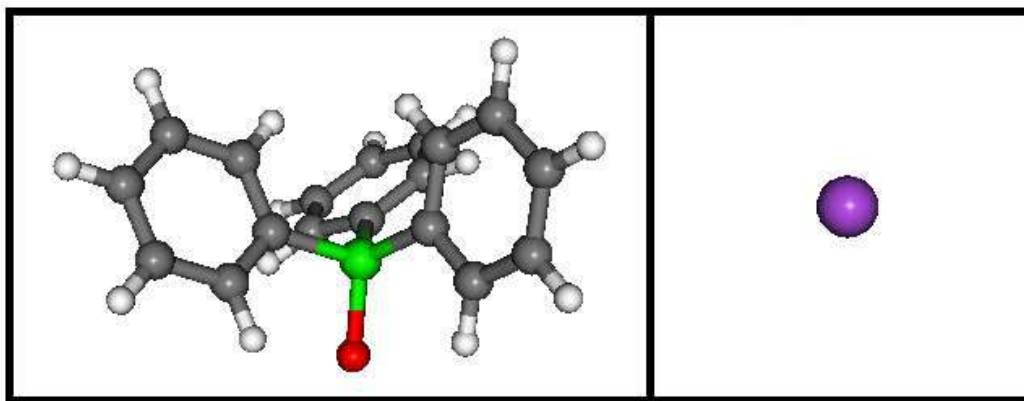


Figura 49. Dois tipos de ligantes monodentados, a esquerda temos o TPPO e a direita está apresentado o brometo.

Para endereçar este problema, propomos realizar um posterior refinamento da geometria após os ligantes serem posicionados no complexo. Nesse caso, repulsões sobre os átomos são avaliadas permitindo que grupos mais volumosos ocupem mais espaço na esfera de coordenação e não que seja igualmente distribuído como os pontos do poliedro de coordenação sugerem. A técnica de otimização global escolhida para este estudo foi o arrefecimento simulado (*simulated annealing*), pois é conhecida sua eficiência na busca das geometrias mais estáveis⁷⁵.

O arrefecimento simulado foi implementado no *Complex Build*, mas não foi ativado durante o estudo dos estereoisômeros do JALNIU (seção 5.5), pois, no momento, o foco era avaliar as diferenças e semelhanças dos diferentes estereoisômeros deste complexo.

O arrefecimento simulado opera depois que o complexo é montado, nesse caso, uma função de repulsão entre os átomos dos ligantes é minimizada, sempre mantendo fixas as geometrias internas dos ligantes.

$$f(x) = \sum_{AB} \sum_i \sum_j \frac{1}{r_{ij}} \quad 5.13$$

Na equação (5.13), i é um índice que representa os átomos de um ligante e j um índice que representa os átomos de outro ligante diferente de i . Esse somatório corre por todos os pares AB de ligantes do complexo. Ou seja, a geometria de cada ligante não muda internamente, apenas a orientação de um em relação ao outro, sujeita à função de repulsão escolhida. Por exemplo, consideremos que a função de repulsão é o inverso da distância entre os átomos, como na equação abaixo.

A Figur apresenta um fluxograma que demonstra um resumo do algoritmo utilizado.

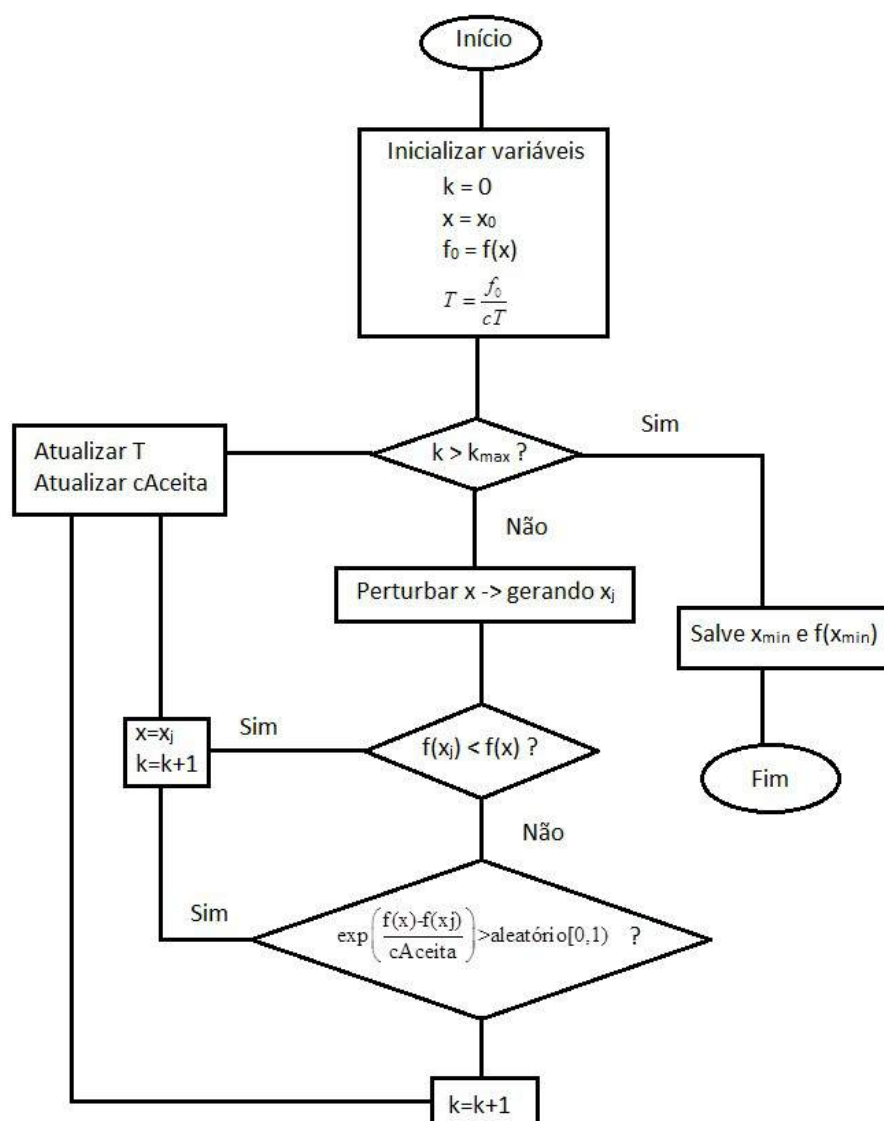


Figura 50. Fluxograma da implementação do recozimento simulado.

Os ligantes sempre apontam para o centro de coordenadas onde o íon lantanídeo se encontra. Por isso, cada ligante possui apenas três graus de liberdade: dois ângulos

espaciais que determinam sua posição na esfera de coordenação e uma rotação ao redor do eixo que vai de v_2 à origem do sistema de coordenadas. Em um ajuste preliminar, foi observado que um número aleatório entre 0 e $\pi/2$ é eficiente para perturbar cada um destes três ângulos.

A temperatura é variável no recozimento simulado. Esta aumenta ou diminui 15% a cada passo de forma a manter a aceitação das novas estruturas em 50%. A constante de aceitação (c_{Aceita}) é, portanto, diretamente proporcional à temperatura.

A partir da estrutura final do arrefecimento simulado, um input para o MOPAC é construído. Uma otimização com o modelo Sparkle é então realizada, seguida por um cálculo de frequência. Embora não se possa garantir, até o momento constatamos que todos os cálculos de frequência, com modelos químicos quânticos, usando a geometria obtida por essa metodologia, não levaram a frequências imaginárias. Isso indica que a construção de complexos por este caminho está representando bem os complexos.

Como exemplo para função de repulsão, temos o inverso da distância apresentado na equação (5.13). Esta é apenas uma sugestão inicial inspirada na repulsão coulômbica. Porém, dadas as restrições do nosso modelo - todos os átomos repelem a todos igualmente - as geometrias de cada ligante não variam. Não fica claro qual seria na realidade a melhor função de repulsão. Porém, o critério de escolha dessa melhor função é bastante claro: escolheremos aquela função de repulsão que levar a uma estrutura o mais semelhante possível à cristalográfica. Este trabalho, portanto, tem como objetivo realizar uma triagem de funções para verificar qual é capaz de levar um conjunto representativo de complexos, cujas estruturas cristalográficas são conhecidas, a uma geometria de partida o mais próximo possível destas cristalográficas.

Começaremos nossos estudos da função repulsão com complexos de európio: o íon lantanídeo para o qual o tratamento teórico da luminescência encontra-se mais avançado. Neste sentido já escolhemos o grupo de complexos de európio para essa triagem, esse será composto por aqueles com os seguintes códigos cristalográficos (CSD): BUXVAR11, DUCNAQ, FUXPOD, ROCTAF, SERHED, SOPFUY, SUXXIS e VIGPAG. Esses foram escolhidos por possuírem uma variedade de ligantes que é representativa do conjunto de complexos de európio disponível na base de dados do CSD e já tinha sido usado em trabalho anterior na parametrização do modelo RM1 para európio⁷⁴. Estes serão os complexos do conjunto de parametrização da função repulsão.

Uma vez determinada qual a melhor função de repulsão, validaremos o uso da mesma com um conjunto teste, contendo mais complexos, 106 no total, também

representativo do universo de complexos de európio presentes no CSD e também usado na parametrização do modelo RM1 para európio⁷⁴. Caso a validação não seja bem-sucedida, voltaremos a examinar outras propostas de funções repulsão. Caso seja bem-sucedida, teremos terminado de definir o modelo *Complex Build* para a obtenção de geometrias de partida para cálculos químico-quânticos.

5.8 ADIÇÃO DE NOVOS LIGANTES À BIBLIOTECA

O *Complex Build* disponibilizará uma vasta biblioteca de ligantes pré-definidos permitindo que o usuário apenas escolha os ligantes com os quais deseja trabalhar. Mas também será possível que novos ligantes sejam adicionados ao *software* à medida que forem surgindo.

Para acrescentar um novo ligante ao banco de dados, basta criar um arquivo de texto com o formato da figura 51.

Número de átomos			
Nome do ligante			
Dentição			
Carga do ligante			
Distância do átomo lantanídeo			
13	ROCTAF	monodentate	0 3
O		0.14610000	2.38640000 -0.34900000
C		-0.41900000	3.40190000 0.55020000
H		-0.06120000	3.29230000 1.46710000
H		-1.40560000	3.32610000 0.58360000
C		-0.00780000	4.73890000 -0.02400000

Figura 51. Formato do arquivo do ligante do *Complex Build*. As letras H, C e O correspondem aos átomos hidrogênio, carbono e oxigênio respectivamente.

A dentição precisa ser explicitada para o ligante: monodentate, bidentate, tridentateL e tridentateF. O único cuidado que precisa ser tomado nas coordenadas é que no caso do monodentate, o átomo que fará a ligação química deverá ser sempre o primeiro da lista. No bidentate, os dois átomos coordenados precisam ser os dois primeiros. No tridentado laminar, tridentateL, os três primeiros átomos precisam ser os que irão se ligar ao metal, com o primeiro e o segundo sendo os átomos mais extremos e o terceiro sendo o átomo intermediário. Já nos tridentados faciais, tridentateF, também os três primeiros

átomos precisam ser os que irão se ligar ao metal; neste caso, a ordem entre os três primeiros átomos não é relevante.

O ligante deverá passar então por uma pré-otimização usando um dos modelos Sparkle ou RM1 para lantanídeos para que sua geometria se aproxime à geometria que o mesmo apresentaria coordenado a um íon lantanídeo. Para isso, é necessário fornecer a carga e o número de coordenação de um complexo típico como os que aparecem na cristalografia. Na construção do ligante, ele é montado de forma coordenada ao metal, a esfera de coordenação é em seguida completada com íons cloreto até atingir a carga de um complexo típico onde o ligante aparece e o restante da coordenação é completada com moléculas de água. Como entrada para este cálculo, ou se coloca uma distância do ligante ao metal parecida com uma cristalográfica, ou se coloca um valor igual a 3 Å. A geometria e distância do ligante ao lantanídeo, que deverá constar no arquivo “.txt” final, será a que emanar do cálculo químico quântico

6 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

A geometria octaédrica dos complexos metálicos foi descoberta por Alfred Werner quando este pesquisador fez uma análise dos possíveis estereoisômeros dos complexos de coordenação 6¹. Na ocasião, Werner observou, experimentalmente, que os complexos de fórmula molecular Ma_4b_2 possuíam apenas 2 estereoisômeros. A partir da análise dos possíveis estereoisômeros para esse tipo de complexo (figura 52), o pesquisador concluiu que a única geometria que possuía apenas 2 estereoisômeros para esta composição é a octaédrica¹. As outras geometrias possuem 3 estereoisômeros para a fórmula molecular Ma_4b_2 .

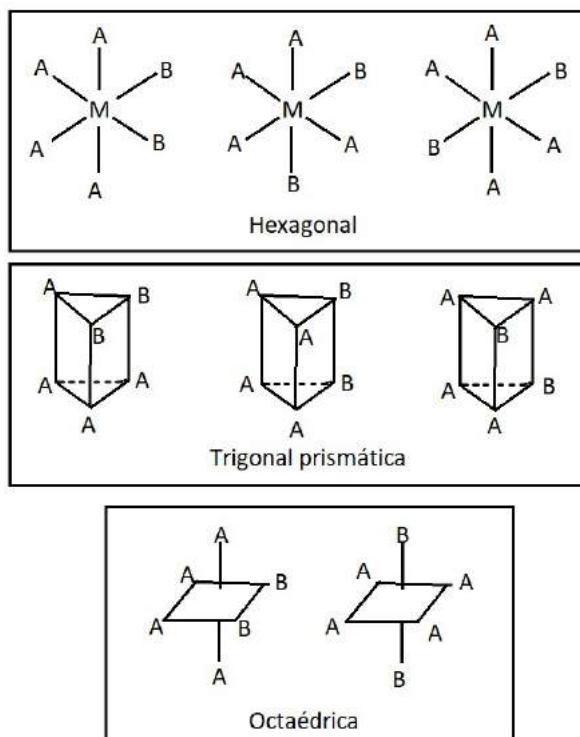


Figura 52. Estereoisômeros para a fórmula molecular Ma_4b_2 . As três geometrias apresentadas foram consideradas por Alfred Werner no estudo dos complexos metálicos

Nesta tese, propomos um estudo similar. Geramos todas as possibilidades de estereoisomerismo para vários *shapes* e números de coordenação. Os resultados são apresentados na forma de tabelas no apêndice A e na forma de coordenadas cartesianas, nas coordenações 1 a 8 no anexo Stereoisomers_CN_4-CN_8.zip.

Desta enumeração emerge o conceito de *random coordination ratio* (RCR). O RCR é uma propriedade que apresenta a probabilidade de que um estereoisômero em um

determinado grupo pontual seja formado quando os fatores energéticos são desconsiderados. O RCR inclui também a probabilidade de um determinado complexo em um determinado *shape* ser quiral ou não caso efeitos energéticos sejam desconsiderados.

Por exemplo, seja um complexo de fórmula genérica $M(AB)_4$ de *shape* TDD-8 como, por exemplo, o complexo de *refcode* CIRKET⁷⁶. Complexos deste tipo possuem RCR igual a 44:18:4:2:2:1:1. Os grupos pontuais para complexos deste tipo agrupados na mesma ordem das proporções são: C_1 , C_2 , C_s , S_4 , D_2 , C_{2v} e D_{2d} . Neste caso, por exemplo, caso a energia seja desconsiderada, estereoisômeros de simetria C_1 são 44 vezes mais prováveis de serem formados do que estereoisômeros de simetria C_{2v} ou D_{2d} . Agrupando os grupos pontuais quirais (C_1 , C_2 , S_4 e D_2) e aquirais (C_s , C_{2v} e D_{2d}), é também fácil perceber que existe uma probabilidade 11 vezes maior de se obter um estereoisômero quiral do que um aquiral.

Os métodos avançados neste trabalho permitiram construir um algoritmo de identificação de estereoisômeros mais eficiente e mais geral do que o proposto pela IUPAC. Este método nos permitiu encontrar, pela primeira vez, um complexo bimetálico cristalizado na forma meso²⁹.

O aperfeiçoamento do método de identificação motivou a criação de 3 novas regras para serem adicionadas às prioridades de Cahn-Ingold-Prehlog. Essas regras permitem, por exemplo, que um complexo SAPR-8-Ma₂b₂cdef tenha um único conjunto de prioridades possíveis: [1 1 2 2 3 4 5 6]. Sem as novas regras haveriam 15 prioridades possíveis para este complexo. Com os métodos atuais e dado que complexos com essa fórmula molecular e *shape* possuem 1.260 estereoisômeros, seriam necessários 18.900 códigos diferentes para descrever os mesmos 1.260 estereoisômeros possíveis.

Também percebemos a ausência, nos métodos da IUPAC, de um descritor químico para caracterizar compostos aquirais. Portanto, propomos o uso da letra G (*geminae*) para caracterizar esses compostos.

No método que desenvolvemos, o descritor químico R, S ou G é acompanhado de um índice que permite realizar a diferenciação entre diastereoisômeros. O método apresentado é diferente do proposto pela IUPAC³⁹ e tem a vantagem de ser mais geral e de fácil aplicação para compostos quelados. Este método também permite estender os estudos para novas geometrias com facilidade, até mesmo se essas forem distorcidas (capítulo 4).

Todos os métodos que apresentamos foram incorporados em um *software* nomeado *Stereoisomer Identifier*. Esse foi aplicado a um conjunto de 262.663 complexos organometálicos obtidos no Cambridge Structural Database⁶⁰ (CSD). Deste banco de dados, 53% não puderam ser identificados com o *software* desenvolvido. Os motivos principais da não identificação foram: distorções severas no poliedro de coordenação (19%), o *software* que usamos para aplicar as regras CIP não foi capaz de obter as prioridades do complexo estudado (16%) e o número de coordenação do complexo foi superior a 8 (12%).

Medidas para resolver essas limitações estão em progresso. As distorções no poliedro podem ser resolvidas com os métodos que avançamos no capítulo 4. A aplicação das regras de Cahn-Ingold-Prehlog pode ser feita através de outros algoritmos⁷⁷⁻⁷⁹. E, por fim, a obtenção da enumeração de complexos com coordenação superior a 8 está em curso, dado que, para os métodos de identificação desenvolvidos é necessário realizar a enumeração completa com a inclusão de todos os tipos de polidentados possíveis, não apenas monodentados e bidentados como feito anteriormente.

Das estruturas que foram identificadas, observamos que, em geral, os metais pós-transição cristalizaram-se na geometria tetraédrica, os metais de transição na geometria octaédrica e os lantanídeos e actinídeos na geometria antiprisma quadrada.

Também observamos que a grande maioria dos complexos bimetálicos apresentaram uma estereoquímica relacionada. Dos 17.603 complexos bimetálicos identificados, 74% apresentaram-se com os dois metais cristalizados no mesmo estereoisômero e 12% desses complexos apresentaram estereoisomeria meso. Imaginamos que essa tendência seja devido ao fato de estarmos realizando identificações de estereoisômeros apenas em estruturas cristalinas sem desordem, as quais se espera terem uma tendência a um maior ordenamento.

O código do *software* desenvolvido está apresentado em anexo e estamos procurando formas de disponibilizá-lo junto ao pacote RDkit⁶⁹.

Neste trabalho, iniciamos o desenvolvimento de um *software* que possibilitará a construção automatizada de complexos nomeado *Complex Build*. Deste *software*, avançamos no desenvolvimento da matemática necessária para posicionar os ligantes ao redor do metal nas geometrias possíveis do poliedro de coordenação (*shapes*) e na posição relativa dos ligantes (estereoisômeros). Porém, mais estudos são necessários para que este *software* seja completado e disponibilizado para a comunidade científica.

Como perspectivas para os trabalhos desenvolvidos nesta tese, desejamos disponibilizar para a comunidade científica o algoritmo de identificação de estereoisômeros que desenvolvemos (*Stereoisomer Identifier*). Adicionalmente, também desejamos disponibilizar as tabelas da enumeração de estereoisômeros de coordenação 10 junto às discussões de aplicabilidade relacionadas a este trabalho. Outra proposta será encerrar o *software Complex Build* e disponibilizá-lo para a comunidade científica.

REFERÊNCIAS

- (1) Werner, A. Nobel Lecture: On the Constitution and Configuration of Higher-Order Compounds, 1913, 14.
- (2) Pasteur, L. L. Mémoire Sur La Relation Qui Peut Exister Entre La Forme Cristalline et La Composition Chimique, et Sur La Cause de La Polarisation Rotatoire. *C R Séances Acad Sci* **1848**, 26, 538–538.
- (3) Barry, N. P. E.; Sadler, P. J. 100 Years of Metal Coordination Chemistry: From Alfred Werner to Anticancer Metallodrugs. *Pure Appl. Chem.* **2014**, 86 (12).
- (4) Farrell, N. Antitumour Activity of Metal Complexes; 1989; pp 142–167.
- (5) Wachter, E.; Zamora, A.; Heidary, D. K.; Ruiz, J.; Glazer, E. C. Geometry Matters: Inverse Cytotoxic Relationship for Cis/Trans-Ru^{II} Polypyridyl Complexes from Cis/Trans-[PtCl₂(NH₃)₂]. *Chem. Commun.* **2016**, 52 (66), 10121–10124.
- (6) Kokan, Z.; Perić, B.; Kovačević, G.; Brozovic, A.; Metzler-Nolte, N.; Kirin, S. I. Cis - versus Trans -Square-Planar Palladium(II) and Platinum(II) Complexes with Triphenylphosphine Amino Acid Bioconjugates. *Eur. J. Inorg. Chem.* **2017**, 2017 (33), 3928–3937.
- (7) Leitereg, T. J.; Guadagni, D. G.; Harris, J.; Mon, T. R.; Teranishi, R. Chemical and Sensory Data Supporting the Difference between the Odors of the Enantiomeric Carvones. *J. Agric. Food Chem.* **1971**, 19 (4), 785–787.
- (8) Drahoňovský, D.; von Zelewsky, A. Asymmetric Synthesis of Coordination Compounds: Back to the Roots. Diastereoselective Synthesis of Simple Platinum(IV) Complexes. *Helv. Chim. Acta* **2005**, 88 (3), 496–506.
- (9) Barreiro, E. J.; Ferreira, V. F.; Costa, P. R. R. Substâncias Enantiomericamente Puras (SEP): A Questão Dos Fármacos Quirais. *Quim. Nova* **1997**, 20 (6), 647–656.
- (10) Linhares, Q. S.; Azevedo, B. A. No Title. *Quim. Nova* **1998**, 21 (2), 193–201.
- (11) Walton, R. A.; Whyman, R. Complexes of Alkyl and Aryl Cyanides. Part V. Tri-(2-Cyanoethyl)-Phosphine Complexes of Cobalt(II) and Nickel(II) Halides: The Nature of the Co-Ordinated Ligand Molecules. *J. Chem. Soc. A Inorganic, Phys. Theor.* **1968**, 1394.
- (12) Holt, M. S.; Nelson, J. H. Platinum(II) Complexes of (Cyanoethyl)Phosphines. *Inorg. Chem.* **1986**, 25 (9), 1316–1320.

- (13) Kreidt, E.; Dee, C.; Seitz, M. Chiral Resolution of Lanthanoid Cryptates with Extreme Configurational Stability. *Inorg. Chem.* **2017**, *56* (15), 8752–8754.
- (14) Kumas, C.; Fernando, W. S.; Zhao, P.; Regueiro-Figueroa, M.; Kiefer, G. E.; Martins, A. F.; Platas-Iglesias, C.; Sherry, A. D. Unexpected Changes in the Population of Coordination Isomers for the Lanthanide Ion Complexes of DOTMA–Tetraglycinate. *Inorg. Chem.* **2016**, *55* (18), 9297–9305.
- (15) Blahut, J.; Hermann, P.; Tošner, Z.; Platas-Iglesias, C. A Combined NMR and DFT Study of Conformational Dynamics in Lanthanide Complexes of Macrocyclic DOTA-like Ligands. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2017**, *19* (39), 26662–26671.
- (16) Amin, S.; Voss, D. A.; Horrocks, W. D.; Lake, C. H.; Churchill, M. R.; Morrow, J. R. Laser-Induced Luminescence Studies and Crystal Structure of the Europium(III) Complex of 1,4,7,10-Tetrakis(Carbamoylmethyl)-1,4,7,10-Tetraazacyclododecane. The Link between Phosphate Diester Binding and Catalysis by Lanthanide(III) Macrocyclic Complexes. *Inorg. Chem.* **1995**, *34* (12), 3294–3300.
- (17) Lebdušková, P.; Hermann, P.; Helm, L.; Tóth, É.; Kotek, J.; Binnemans, K.; Rudovský, J.; Lukeš, I.; Merbach, A. E. Gadolinium^{II} Complexes of Mono- and Diethyl Esters of Monophosphonic Acid Analogue of DOTA as Potential MRI Contrast Agents: Solution Structures and Relaxometric Studies. *Dalt. Trans.* **2007**, No. 4, 493–501.
- (18) Krivoshei, I. V.; Vvedenskii, B. Y. Calculation of the Number of Isomers for the Basic Geometrical Models of Mononuclear Complex Compounds. *Theor. Exp. Chem.* **1967**, *3* (4), 296–300.
- (19) Hay, B. P.; Uddin, J.; Firman, T. K. Eight-Coordinate Stereochemistries of U(IV) Catecholate and Aquo Complexes. *Polyhedron* **2004**, *23* (1), 145–154.
- (20) Marchi, L. E.; Fernelius, W. C.; McReynolds, J. P. No Title. *J. Am. Chem. Soc.* **1943**, *65* (3), 329–333.
- (21) Krivoshei, I. V. Calculation of Numbers of Isomers in Complex Chelates. *J. Struct. Chem.* **1965**, *6* (2), 304–305.
- (22) Krivoshei, I. V. Methods of Calculating the Number of Isomers in the Stereochemistry of Complex Compounds. *J. Struct. Chem.* **1967**, *7* (4), 601–603.
- (23) Hoard, J. L.; Silverton, J. V. Stereochemistry of Discrete Eight-Coördination. I. Basic Analysis. *Inorg. Chem.* **1963**, *2* (2), 235–242.
- (24) Pólya, G. Kombinatorische Anzahlbestimmungen Für Gruppen, Graphen Und

- Chemische Verbindungen. *Acta Math.* **1937**, 68 (1), 145–254.
- (25) Haigh, C. W. Use of Pólya's Theorem to Enumerate the Isomers of Seven-Coordinate Complexes—II. Pentagonal Bipyramidal Geometry. *Polyhedron* **1994**, 13 (19), 2703–2714.
- (26) Haigh, C. W. Enumeration by Pólya's Theorem of the Isomerism in Eight-Coordinate Complexes in Square Antiprismatic, Triangular Dodecahedral and Hendecahedral (Bicapped Trigonal Prismatic) Geometries. *Polyhedron* **1996**, 15 (4), 605–643.
- (27) Haigh, C. W.; Baker, P. K. Use of Pólya's Theorem to Enumerate the Isomers of Seven-Coordinate Complexes with Capped Octahedral Geometry. *Polyhedron* **1994**, 13 (3), 417–433.
- (28) Bennett, W. E. Computation of the Number of Isomers and Their Structures in Coordination Compounds. *Inorg. Chem.* **1969**, 8 (6), 1325–1328.
- (29) Silva, F. T.; Lins, S. L. S.; Simas, A. M. Stereoisomerism in Lanthanide Complexes: Enumeration, Chirality, Identification, Random Coordination Ratios. *Inorg. Chem.* **2018**, 57, 17, 10557–10567.
- (30) Roca-Sabio, A.; Regueiro-Figueroa, M.; Esteban-Gómez, D.; de Blas, A.; Rodríguez-Blas, T.; Platas-Iglesias, C. Density Functional Dependence of Molecular Geometries in Lanthanide(III) Complexes Relevant to Bioanalytical and Biomedical Applications. *Comput. Theor. Chem.* **2012**, 999, 93–104.
- (31) de Sá, G. .; Malta, O. .; de Mello Donegá, C.; Simas, A. .; Longo, R. .; Santa-Cruz, P. .; da Silva, E. . Spectroscopic Properties and Design of Highly Luminescent Lanthanide Coordination Complexes. *Coord. Chem. Rev.* **2000**, 196 (1), 165–195.
- (32) Cantuel, M.; Bernardinelli, G.; Muller, G.; Riehl, J. P.; Piguet, C. The First Enantiomerically Pure Helical Noncovalent Tripod for Assembling Nine-Coordinate Lanthanide(III) Podates. *Inorg. Chem.* **2004**, 43 (6), 1840–1849.
- (33) Zhou, Y.; Zheng, X.-Y.; Cai, J.; Hong, Z.-F.; Yan, Z.-H.; Kong, X.-J.; Ren, Y.-P.; Long, L.-S.; Zheng, L.-S. Three Giant Lanthanide Clusters Ln₃₇ (Ln = Gd, Tb, and Eu) Featuring A Double-Cage Structure. *Inorg. Chem.* **2017**, 56 (4), 2037–2041.
- (34) Sato, S.; Ishii, A.; Yamada, C.; Kim, J.; Ho Song, C.; Fujiwara, A.; Takata, M.; Hasegawa, M. Luminescence of Fusion Materials of Polymeric Chain-Structured Lanthanide Complexes. *Polym. J.* **2015**, 47 (2), 195–200.
- (35) Lima, N. B. D.; Gonçalves, S. M. C.; Júnior, S. A.; Simas, A. M. A Comprehensive

- Strategy to Boost the Quantum Yield of Luminescence of Europium Complexes. *Sci. Rep.* **2013**, 3 (1), 2395.
- (36) Zinna, F.; Di Bari, L. Lanthanide Circularly Polarized Luminescence: Bases and Applications. *Chirality* **2015**, 27 (1), 1–13.
- (37) Goodwin, C. A. P.; Reta, D.; Ortu, F.; Chilton, N. F.; Mills, D. P. Synthesis and Electronic Structures of Heavy Lanthanide Metallocenium Cations. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, 139 (51), 18714–18724.
- (38) Becht, M.; Dahmen, K.-H.; Gramlich, V.; Marteletti, A. Crystal Structure and Thermal Behavior of Some Cerium Complexes with the Fluorinated β -Diketonate Ligand 6,6,6-Trifluoro-2,2-Dimethyl-3,5-Hexanedione (Fdh). *Inorganica Chim. Acta* **1996**, 248 (1), 27–33.
- (39) Connely, N.; Damhus, T.; Hartshorn, R. M.; Hutton, A. T. *Nomenclature of Inorganic Chemistry, IUPAC RECOMMENDATIONS 2005*; 2005.
- (40) Silva, F. T.; Galvão, B. R. L.; Voga, G. P.; Silva, M. X.; Rodrigues, D. D. C.; Belchior, J. C. Exploring the MP2 Energy Surface of Nanoalloy Clusters with a Genetic Algorithm: Application to Sodium–potassium. *Chem. Phys. Lett.* **2015**, 639, 135–141.
- (41) Silva, M. X.; Silva, F. T.; Galvão, B. R. L.; Braga, J. P.; Belchior, J. C. A Genetic Algorithm Survey on Closed-Shell Atomic Nitrogen Clusters Employing a Quantum Chemical Approach. *J. Mol. Model.* **2018**, 24 (8), 196.
- (42) Cahn, R. S.; Ingold, C.; Prelog, V. Specification of Molecular Chirality. *Angew. Chemie Int. Ed. English* **1966**, 5 (4), 385–415.
- (43) Prelog, V.; Helmchen, G. Basic Principles of the CIP-System and Proposals for a Revision. *Angew. Chemie Int. Ed. English* **1982**, 21 (8), 567–583.
- (44) Lins, S. *Princípios de Enumeração*, 1st ed.; IMPA: Rio de Janeiro, 1981.
- (45) Wolfram Research, I. *Mathematica*, Version 10.; Wolfram Research, Inc.: Champaign, Illinois, 2016.
- (46) Casanova, D.; Cirera, J.; Llunell, M.; Alemany, P.; Avnir, D.; Alvarez, S. Minimal Distortion Pathways in Polyhedral Rearrangements. *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, 126 (6), 1755–1763.
- (47) Cirera, J.; Ruiz, E.; Alvarez, S. Shape and Spin State in Four-Coordinate Transition-Metal Complexes: The Case of the d(6) Configuration. *Chemistry* **2006**, 12 (11), 3162–3167.
- (48) Llunell, Miquel; Casanova, David; Cirera, Jordi; Alemany, Pere; Alvarez, S.

- SHAPE Program for the Stereochemical Analysis of Molecular Fragments by Means of Continuous Shape Measures and Associated Tools. Barcelona 2013.
- (49) Di Pietro, S.; Di Bari, L. The Structure of $\text{MLn}(\text{Hfbc})_4$ and a Key to High Circularly Polarized Luminescence. *Inorg. Chem.* **2012**, *51* (21), 12007–12014.
 - (50) Richardson, F. S.; Faulkner, T. R. Optical Activity of the F–f Transitions in Trigonal Dihedral (D_3) Lanthanide(III) Complexes. I. Theory. *J. Chem. Phys.* **1982**, *76* (4), 1595–1606.
 - (51) Zinna, F.; Di Bari, L. Emerging Field of Chiral Ln(III) Complexes for OLEDs. In *Lanthanide-Based Multifunctional Materials*; Elsevier, 2018; pp 171–194.
 - (52) Alvarez, S.; Alemany, P.; Avnir, D. Continuous Chirality Measures in Transition Metal Chemistry. *Chem. Soc. Rev.* **2005**, *34* (4), 313.
 - (53) Ehrenfest, P.; Trkal, V. Collected Papers of Paul Ehrenfest. In *Collected papers of Paul Ehrenfest*; North Holland: Amsterdam, 1920; pp 162–183.
 - (54) Fernández-Ramos, A.; Ellingson, B. A.; Meana-Pañeda, R.; Marques, J. M. C.; Truhlar, D. G. Symmetry Numbers and Chemical Reaction Rates. *Theor. Chem. Acc.* **2007**, *118* (4), 813–826.
 - (55) Vandewiele, N. M.; Van de Vijver, R.; Van Geem, K. M.; Reyniers, M.-F.; Marin, G. B. Symmetry Calculation for Molecules and Transition States. *J. Comput. Chem.* **2015**, *36* (3), 181–192.
 - (56) Fay, R. C.; Girgis, A. Y. Stereochemical Rearrangements of Metal Tris-.Beta.-Diketonates. II. Kinetics and Mechanism of Geometrical Isomerization, Optical, Inversion, and Ligand-Exchange Reactions of Cobalt(III) Benzoylacetate. *J. Am. Chem. Soc.* **1970**, *92* (24), 7061–7072.
 - (57) Roehrscheid, F.; Ernst, R. E.; Holm, R. H. Nuclear Resonance Studies of Vanadium(III) Complexes. I. Stereochemistry and Electron Delocalization of Tris .Beta.-Diketonates. *Inorg. Chem.* **1967**, *6* (7), 1315–1320.
 - (58) Fay, R. C.; Piper, T. S. Coordination Compounds of Trivalent Metals with Unsymmetrical Bidentate Ligands. I. Benzoylacetates. *J. Am. Chem. Soc.* **1962**, *84* (12), 2303–2308.
 - (59) Gordon, J. G.; Holm, R. H. Intramolecular Rearrangement Reactions of Tris-Chelate Complexes. I. General Theory and the Kinetics and Probable Mechanism of the Isomerization and Racemization of Tris(5-Methylhexane-2,4-Dionato)Cobalt(III). *J. Am. Chem. Soc.* **1970**, *92* (18), 5319–5332.
 - (60) Groom, C. R.; Bruno, I. J.; Lightfoot, M. P.; Ward, S. C. The Cambridge Structural

- Database. *Acta Crystallogr. Sect. B* **2016**, 72 (2), 171–179.
- (61) Solomons, T. W. G.; Fryle, C. B. *Química Orgânica, Vol. 1*, 10th ed.; LTC Editora, 2012.
- (62) Flack, H. D.; Bernardinelli, G. The Use of X-Ray Crystallography to Determine Absolute Configuration. *Chirality* **2008**, 20 (5), 681–690.
- (63) Pinsky, M.; Avnir, D. Continuous Symmetry Measures. 5. The Classical Polyhedra. *Inorg. Chem.* **1998**, 37 (21), 5575–5582.
- (64) Marques, J. M. C.; Llanio-Trujillo, J. L.; Abreu, P. E.; Pereira, F. B. How Different Are Two Chemical Structures? *J. Chem. Inf. Model.* **2010**, 50 (12), 2129–2140.
- (65) de Bolster, M. W. G. Glossary of Terms Used in Bioinorganic Chemistry (IUPAC Recommendations 1997). *Pure Appl. Chem.* **1997**, 69 (6).
- (66) Becht, M.; Dahmen, K.-H.; Gramlich, V.; Marteletti, A. Crystal Structure and Thermal Behavior of Some Cerium Complexes with the Fluorinated β -Diketonate Ligand 6,6,6-Trifluoro-2,2-Dimethyl-3,5-Hexanedione (Fdh). *Inorganica Chim. Acta* **1996**, 248 (1), 27–33.
- (67) Boyle, T. J.; Neville, M. L.; Sears, J. M.; Cramer, R. E.; Rodriguez, M. A.; Alam, T. M.; Bingham, S. P. Synthesis, X-Ray Structures, and Characterization of Hexafluoro- Iso -Propoxide Group 3 and Lanthanide Precursors. *Polyhedron* **2016**, 118, 52–60.
- (68) Solomons, T. W. G.; Fryle, C. B. *Organic Chemistry*, 10th ed.; 2011.
- (69) RDKit: Open-source cheminformatics <http://www.rdkit.org> (accessed Aug 14, 2018).
- (70) Steed, K. M.; Steed, J. W. Packing Problems: High Z' Crystal Structures and Their Relationship to Cocrystals, Inclusion Compounds, and Polymorphism. *Chem. Rev.* **2015**, 115 (8), 2895–2933.
- (71) Ju, C.-C.; Zhang, A.-G.; Sun, H.-L.; Wang, K.-Z.; Jiang, W.-L.; Bian, Z.-Q.; Huang, C.-H. Synthesis, Crystal Structure, and Optical and Photoelectrochemical Properties of a N $\cap$ O – Rhenium(I) Complex. *Organometallics* **2011**, 30 (4), 712–716.
- (72) Huheey, J. A.; Keiter, R. L.; Keiter, E. A. *Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*; 1993.
- (73) Filho, M. A. M.; Dutra, J. D. L.; Rocha, G. B.; Freire, R. O.; Simas, A. M. Sparkle/RM1 Parameters for the Semiempirical Quantum Chemical Calculation of Lanthanide Complexes. *RSC Adv.* **2013**, 3 (37), 16747–16755.

- (74) Filho, M. A. M.; Dutra, J. D. L.; Cavalcanti, H. L. B.; Rocha, G. B.; Simas, A. M.; Freire, R. O. RM1 Model for the Prediction of Geometries of Complexes of the Trications of Eu, Gd, and Tb. *J. Chem. Theory Comput.* **2014**, *10* (8), 3031–3037.
- (75) Wales, D. J.; Scheraga, H. A. Global Optimization of Clusters, Crystals, and Biomolecules. *Science* (80-.). **1999**, *285* (5432), 1368–1372.
- (76) Anzhi, W.; Maikun, T.; Jinbi, D.; Dongcai, L.; Jiabin, S. Molecular Structure of Picoline-Tetrakis(4,4,4-Trifluoro-1-(2'-Thien-Yl)-1,3-Butanedione) Europium (III), (TTA)₄Eu(4-MePy)H. *Jiegou Huaxue* **1983**, No. 2, 237.
- (77) Heller, S. R.; McNaught, A.; Pletnev, I.; Stein, S.; Tchekhovskoi, D. InChI, the IUPAC International Chemical Identifier. *J. Cheminform.* **2015**, *7* (1), 23.
- (78) Schneider, N.; Sayle, R. A.; Landrum, G. A. Get Your Atoms in Order—An Open-Source Implementation of a Novel and Robust Molecular Canonicalization Algorithm. *J. Chem. Inf. Model.* **2015**, *55* (10), 2111–2120.
- (79) Carbonell, P.; Carlsson, L.; Faulon, J.-L. Stereo Signature Molecular Descriptor. *J. Chem. Inf. Model.* **2013**, *53* (4), 887–897.

APÊNDICE A - TABELAS REFERENTES A ENUMERAÇÃO DE ESTEREOISÔMEROS FEITA NESTE TRABALHO

Tabela A1. SP-4 Square. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

SP-4 Square

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma4	1	0	1	1	A	D _{4h}	a	8	3	1						
Ma3b	1	0	1	1	A	C _{2h}	a	2	3	1						
Ma2b2	2	0	2	2:1	A	C _{2v}	a	2	2	1	B	D _{2h}	a	4	1	1
Ma2bc	2	0	2	2:1	A	C _s	a	1	2	1	B	C _{2h}	a	2	1	1
Ma2(AA)	1	0	1	1	A	C _{2v}	a	2	2	1						
Ma2(AB)	1	0	1	1	A	C _s	a	1	2	1						
Mabcd	3	0	3	1	A	C _s	a	1	1	3						
Mab(AA)	1	0	1	1	A	C _s	a	1	2	1						
Mab(AB)	2	0	2	1	A	C _s	a	1	1	2						
M(AA)2	1	0	1	1	A	D _{2h}	a	4	2	1						
M(AA)(BB)	1	0	1	1	A	C _{2v}	a	2	2	1						
M(AA)(AB)	1	0	1	1	A	C _s	a	1	2	1						
M(AB)2	2	0	2	1:1	A'	C _{2v}	a	2	1	1	A''	C _{2h}	a	2	1	1
M(AB)(CD)	2	0	2	1	A	C _s	a	1	1	2						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A2. SS-4 Seesaw. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

SS-4 Seesaw

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma4	1	0	1	1	A	C _{2v}	a	2	12	1						
Ma3b	2	0	2	1	A	C _s	a	1	6	2						
Ma2b2	4	2	2	2:1	A	C ₁	c	1	4	2	B	C _{2v}	a	2	2	2
Ma2bc	6	4	2	2:1	A	C ₁	c	1	2	4	B	C _s	a	1	2	2
Ma2(AA)	3	2	1	4:1	A	C ₁	c	1	4	2	B	C _{2v}	a	2	2	1
Ma2(AB)	5	4	1	4:1	A	C ₁	c	1	2	4	B	C _s	a	1	2	1
Mabcd	12	12	0	1	A	C ₁	c	1	1	12						
Mab(AA)	5	4	1	4:1	A	C ₁	c	1	2	4	B	C _s	a	1	2	1
Mab(AB)	10	10	0	1	A	C ₁	c	1	1	10						
M(AA)2	2	2	0	1	A	C ₂	c	2	4	2						
M(AA)(BB)	2	2	0	1	A	C ₁	c	1	4	2						
M(AA)(AB)	4	4	0	1	A	C ₁	c	1	2	4						
M(AB)2	6	6	0	1:1	A'	C ₁	c	1	2	2	A''	C ₂	c	2	1	4
M(AB)(CD)	8	8	0	1	A	C ₁	c	1	1	8						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A3. T-4 Tetrahedron. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

T-4 Tetrahedron

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma4	1	0	1	1	A	T _d	a	12	2	1						
Ma3b	1	0	1	1	A	C _{3v}	a	3	2	1						
Ma2b2	1	0	1	1	A	C _{2v}	a	2	2	1						
Ma2bc	1	0	1	1	A	C _s	a	1	2	1						
Ma2(AA)	1	0	1	1	A	C _{2v}	a	2	2	1						
Ma2(AB)	1	0	1	1	A	C _s	a	1	2	1						
Mabcd	2	2	0	1	A	C ₁	c	1	1	2						
Mab(AA)	1	0	1	1	A	C _s	a	1	2	1						
Mab(AB)	2	2	0	1	A	C ₁	c	1	1	2						
M(AA)2	1	0	1	1	A	D _{2d}	a	4	2	1						
M(AA)(BB)	1	0	1	1	A	C _{2v}	a	2	2	1						
M(AA)(AB)	1	0	1	1	A	C _s	a	1	2	1						
M(AB)2	2	2	0	1	A	C ₂	c	2	1	2						
M(AB)(CD)	2	2	0	1	A	C ₁	c	1	1	2						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A4. vTBPY-4 Vacant trigonal bipyramid. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

vTBPY-4 Axially vacant trigonal bipyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma4	1	0	1	1	A	C _{3v}	a	3	8	1						
Ma3b	2	0	2	3:1	A	C _s	a	1	6	1	B	C _{3v}	a	3	2	1
Ma2b2	2	0	2	1	A	C _s	a	1	4	2						
Ma2bc	4	2	2	1:1	A'	C ₁	c	1	2	2	A''	C _s	a	1	2	2
Ma2(AA)	1	0	1	1	A	C _s	a	1	4	1						
Ma2(AB)	2	0	2	1	A	C _s	a	1	2	2						
Mabcd	8	8	0	1	A	C ₁	c	1	1	8						
Mab(AA)	2	2	0	1	A	C ₁	c	1	2	2						
Mab(AB)	4	4	0	1	A	C ₁	c	1	1	4						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A5. PP-5 Pentagon. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

PP-5 Pentagon

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma5	1	0	1	1	A	D _{5h}	a	10	12	1						
Ma4b	1	0	1	1	A	C _{2v}	a	2	12	1						
Ma3b2	2	0	2	1	A	C _{2v}	a	2	6	2						
Ma3bc	2	0	2	1	A	C _s	a	1	6	2						
Ma3(AA)	1	0	1	1	A	C _{2v}	a	2	6	1						
Ma3(AB)	1	0	1	1	A	C _s	a	1	6	1						
Ma2b2c	4	0	4	2:1	A	C _s	a	1	4	2	B	C _{2v}	a	2	2	2
Ma2bcd	6	0	6	1	A	C _s	a	1	2	6						
Ma2b(AA)	2	0	2	2:1	A	C _s	a	1	4	1	B	C _{2v}	a	2	2	1
Ma2b(AB)	3	0	3	1	A	C _s	a	1	2	3						
Mabcde	12	0	12	1	A	C _s	a	1	1	12						
Mabc(AA)	3	0	3	1	A	C _s	a	1	2	3						
Mabc(AB)	6	0	6	1	A	C _s	a	1	1	6						
Ma(AA)2	1	0	1	1	A	C _{2v}	a	2	4	1						
Ma(AA)(BB)	1	0	1	1	A	C _s	a	1	4	1						
Ma(AA)(AB)	2	0	2	1	A	C _s	a	1	2	2						
Ma(AB)2	3	0	3	1:1	A'	C _s	a	1	2	1	A''	C _{2v}	a	2	1	2
Ma(AB)(CD)	4	0	4	1	A	C _s	a	1	1	4						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A6. SPY-5 Square pyramid. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

SPY-5 Square pyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma5	1	0	1	1	A	C _{4v}	a	4	30	1						
Ma4b	2	0	2	4:1	A	C _s	a	1	24	1	B	C _{4v}	a	4	6	1
Ma3b2	3	0	3	4:1	A	C _s	a	1	12	2	B	C _{2v}	a	2	6	1
Ma3bc	5	2	3	1.5:1	A	C _s	a	1	6	3	B	C ₁	c	1	6	2
Ma3(AA)	1	0	1	1	A	C _s	a	1	12	1						
Ma3(AB)	2	2	0	1	A	C ₁	c	1	6	2						
Ma2b2c	8	4	4	8:6:1	A	C ₁	c	1	4	4	B	C _s	a	1	4	3
					C	C _{2v}	a	2	2	1						
Ma2bcd	15	12	3	4:1	A	C ₁	c	1	2	12	B	C _s	a	1	2	3
Ma2b(AA)	3	2	1	2:1	A	C ₁	c	1	4	2	B	C _s	a	1	4	1
Ma2b(AB)	6	6	0	1	A	C ₁	c	1	2	6						
Mabcde	30	30	0	1	A	C ₁	c	1	1	30						
Mabc(AA)	6	6	0	1	A	C ₁	c	1	2	6						
Mabc(AB)	12	12	0	1	A	C ₁	c	1	1	12						
Ma(AA)2	1	0	1	1	A	C _{2v}	a	2	4	1						
Ma(AA)(BB)	1	0	1	1	A	C _s	a	1	4	1						
Ma(AA)(AB)	2	2	0	1	A	C ₁	c	1	2	2						
Ma(AB)2	3	2	1	1:1	A'	C ₂	c	2	1	2	A''	C _s	a	1	2	1
Ma(AB)(CD)	4	4	0	1	A	C ₁	c	1	1	4						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A7. TBPY-5 Trigonal bipyramid. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

TBPY-5 Trigonal bipyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma5	1	0	1	1	A	D _{3h}	a	6	20	1						
Ma4b	2	0	2	1.5:1	A	C _{2v}	a	2	12	1	B	C _{3v}	a	3	8	1
Ma3b2	3	0	3	6:3:1	A	C _s	a	1	12	1	B	C _{2v}	a	2	6	1
					C	D _{3h}	a	6	2	1						
Ma3bc	4	0	4	9:1	A	C _s	a	1	6	3	B	C _{3v}	a	3	2	1
Ma3(AA)	1	0	1	1	A	C _s	a	1	12	1						
Ma3(AB)	2	0	2	1	A	C _s	a	1	6	2						
Ma2b2c	6	2	4	2:2:1	A'	C ₁	c	1	4	2	A''	C _s	a	1	4	2
					B	C _{2v}	a	2	2	2						
Ma2bcd	10	6	4	1.5:1	A	C ₁	c	1	2	6	B	C _s	a	1	2	4
Ma2b(AA)	3	2	1	2:1	A	C ₁	c	1	4	2	B	C _s	a	1	4	1
Ma2b(AB)	6	4	2	2:1	A	C ₁	c	1	2	4	B	C _s	a	1	2	2
Mabcde	20	20	0	1	A	C ₁	c	1	1	20						
Mabc(AA)	6	6	0	1	A	C ₁	c	1	2	6						
Mabc(AB)	12	12	0	1	A	C ₁	c	1	1	12						
Ma(AA)2	2	2	0	1	A	C ₂	c	2	4	2						
Ma(AA)(BB)	2	2	0	1	A	C ₁	c	1	4	2						
Ma(AA)(AB)	4	4	0	1	A	C ₁	c	1	2	4						
Ma(AB)2	6	6	0	1:1	A'	C ₁	c	1	2	2	A''	C ₂	c	2	1	4
Ma(AB)(CD)	8	8	0	1	A	C ₁	c	1	1	8						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A8. HP-6 Hexagon. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

HP-6 Hexagon

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma6	1	0	1	1	A	D _{6h}	a	12	60	1						
Ma5b	1	0	1	1	A	C _{2v}	a	2	60	1						
Ma4b2	3	0	3	4:1	A	C _{2v}	a	2	24	2	B	D _{2h}	a	4	12	1
Ma4bc	3	0	3	4:1	A	C _s	a	1	24	2	B	C _{2v}	a	2	12	1
Ma4(AA)	1	0	1	1	A	C _{2v}	a	2	24	1						
Ma4(AB)	1	0	1	1	A	C _s	a	1	24	1						
Ma3b3	3	0	3	6:3:1	A	C _s	a	1	36	1	B	C _{2v}	a	2	18	1
					C	D _{3h}	a	6	6	1						
Ma3b2c	6	0	6	4:1	A	C _s	a	1	12	4	B	C _{2v}	a	2	6	2
Ma3bcd	10	0	10	1	A	C _s	a	1	6	10						
Ma3b(AA)	2	0	2	1	A	C _s	a	1	12	2						
Ma3b(AB)	4	0	4	1	A	C _s	a	1	6	4						
Ma2b2c2	11	0	11	8:6:1	A	C _s	a	1	8	4	B	C _{2v}	a	2	4	6
					C	C _{2h}	a	2	4	1						
Ma2b2cd	16	0	16	14:1	A	C _s	a	1	4	14	B	C _{2v}	a	2	2	2
Ma2b2(AA)	4	0	4	2:1	A	C _s	a	1	8	2	B	C _{2v}	a	2	4	2
Ma2b2(AB)	6	0	6	1	A	C _s	a	1	4	6						
Ma2bcde	30	0	30	1	A	C _s	a	1	2	30						
Ma2bc(AA)	6	0	6	1	A	C _s	a	1	4	6						
Ma2bc(AB)	12	0	12	1	A	C _s	a	1	2	12						
Ma2(AA)2	2	0	2	2:1	A	C _{2v}	a	2	8	1	B	D _{2h}	a	4	4	1
Ma2(AA)(BB)	2	0	2	2:1	A	C _s	a	1	8	1	B	C _{2v}	a	2	4	1

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A8 (continuação).

HP-6 Hexagon

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2(AA)(AB)	3	0	3	1	A	C _s	a	1	4	3						
Ma2(AB)2	5	0	5	3:2:1	A	C _{2v}	a	2	2	3	B	C _s	a	1	4	1
					C	C _{2h}	a	2	2	1						
Ma2(AB)(CD)	6	0	6	1	A	C _s	a	1	2	6						
Mabcdef	60	0	60	1	A	C _s	a	1	1	60						
Mabcd(AA)	12	0	12	1	A	C _s	a	1	2	12						
Mabcd(AB)	24	0	24	1	A	C _s	a	1	1	24						
Mab(AA)2	2	0	2	2:1	A	C _s	a	1	8	1	B	C _{2v}	a	2	4	1
Mab(AA)(BB)	3	0	3	1	A	C _s	a	1	4	3						
Mab(AA)(AB)	6	0	6	1	A	C _s	a	1	2	6						
Mab(AB)2	7	0	7	5:1	A	C _s	a	1	2	5	B	C _{2v}	a	2	1	2
Mab(AB)(CD)	12	0	12	1	A	C _s	a	1	1	12						
M(AA)3	1	0	1	1	A	D _{3h}	a	6	8	1						
M(AA)2(BB)	1	0	1	1	A	C _{2v}	a	2	8	1						
M(AA)2(AB)	1	0	1	1	A	C _s	a	1	8	1						
M(AA)(BB)(CC)	1	0	1	1	A	C _s	a	1	8	1						
M(AA)(BB)(AB)	2	0	2	1	A	C _s	a	1	4	2						
M(AA)(AB)2	3	0	3	1:1	A'	C _s	a	1	4	1	A''	C _{2v}	a	2	2	2
M(AA)(AB)(CD)	4	0	4	1	A	C _s	a	1	2	4						
M(AB)3	2	0	2	3:1	A	C _s	a	1	6	1	B	C _{3h}	a	3	2	1
M(AB)2(CD)	4	0	4	1	A	C _s	a	1	2	4						
M(AB)(CD)(EF)	8	0	8	1	A	C _s	a	1	1	8						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A9. OC-6 Octahedron. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

OC-6 Octahedron

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma6	1	0	1	1	A	O _h	a	24	30	1						
Ma5b	1	0	1	1	A	C _{4v}	a	4	30	1						
Ma4b2	2	0	2	4:1	A	C _{2v}	a	2	24	1	B	D _{4h}	a	8	6	1
Ma4bc	2	0	2	4:1	A	C _s	a	1	24	1	B	C _{4v}	a	4	6	1
Ma4(AA)	1	0	1	1	A	C _{2v}	a	2	24	1						
Ma4(AB)	1	0	1	1	A	C _s	a	1	24	1						
Ma3b3	2	0	2	1.5:1	A	C _{2v}	a	2	18	1	B	C _{3v}	a	3	12	1
Ma3b2c	3	0	3	4:1	A	C _s	a	1	12	2	B	C _{2v}	a	2	6	1
Ma3bcd	5	2	3	1.5:1	A	C _s	a	1	6	3	B	C ₁	c	1	6	2
Ma3b(AA)	2	0	2	1	A	C _s	a	1	12	2						
Ma3b(AB)	4	2	2	1:1	A'	C ₁	c	1	6	2	A''	C _s	a	1	6	2
Ma2b2c2	6	2	4	8:6:1	A	C ₁	c	1	8	2	B	C _{2v}	a	2	4	3
					C	D _{2h}	a	4	2	1						
Ma2b2cd	8	4	4	8:6:1	A	C ₁	c	1	4	4	B	C _s	a	1	4	3
					C	C _{2v}	a	2	2	1						
Ma2b2(AA)	4	2	2	2:1	A	C ₁	c	1	8	2	B	C _{2v}	a	2	4	2
Ma2b2(AB)	6	4	2	2:1	A	C ₁	c	1	4	4	B	C _s	a	1	4	2
Ma2bcde	15	12	3	4:1	A	C ₁	c	1	2	12	B	C _s	a	1	2	3
Ma2bc(AA)	6	4	2	2:1	A	C ₁	c	1	4	4	B	C _s	a	1	4	2
Ma2bc(AB)	12	10	2	5:1	A	C ₁	c	1	2	10	B	C _s	a	1	2	2
Ma2(AA)2	3	2	1	4:1	A	C ₂	c	2	8	2	B	D _{2h}	a	4	4	1
Ma2(AA)(BB)	3	2	1	4:1	A	C ₁	c	1	8	2	B	C _{2v}	a	2	4	1

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A9 (continuação).

OC-6 Octahedron

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2(AA)(AB)	5	4	1	4:1	A	C ₁	c	1	4	4	B	C _s	a	1	4	1
Ma2(AB)2	8	6	2	4:4:1:1	A'	C ₁	c	1	4	2	A''	C ₂	c	2	2	4
					B'	C _{2v}	a	2	2	1	B''	C _{2h}	a	2	2	1
Ma2(AB)(CD)	10	8	2	4:1	A	C ₁	c	1	2	8	B	C _s	a	1	2	2
Mabcdef	30	30	0	1	A	C ₁	c	1	1	30						
Mabcd(AA)	12	12	0	1	A	C ₁	c	1	2	12						
Mabcd(AB)	24	24	0	1	A	C ₁	c	1	1	24						
Mab(AA)2	3	2	1	4:1	A	C ₁	c	1	8	2	B	C _{2v}	a	2	4	1
Mab(AA)(BB)	5	4	1	4:1	A	C ₁	c	1	4	4	B	C _s	a	1	4	1
Mab(AA)(AB)	10	10	0	1	A	C ₁	c	1	2	10						
Mab(AB)2	11	10	1	8:1:1	A	C ₁	c	1	2	8	B'	C ₂	c	2	1	2
					B''	C _s	a	1	2	1						
Mab(AB)(CD)	20	20	0	1	A	C ₁	c	1	1	20						
M(AA)3	2	2	0	1	A	D ₃	c	6	8	2						
M(AA)2(BB)	2	2	0	1	A	C ₂	c	2	8	2						
M(AA)2(AB)	2	2	0	1	A	C ₁	c	1	8	2						
M(AA)(BB)(CC)	2	2	0	1	A	C ₁	c	1	8	2						
M(AA)(BB)(AB)	4	4	0	1	A	C ₁	c	1	4	4						
M(AA)(AB)2	6	6	0	1:1	A'	C ₁	c	1	4	2	A''	C ₂	c	2	2	4
M(AA)(AB)(CD)	8	8	0	1	A	C ₁	c	1	2	8						
M(AB)3	4	4	0	3:1	A	C ₁	c	1	6	2	B	C ₃	c	3	2	2
M(AB)2(CD)	8	8	0	1	A	C ₁	c	1	2	8						
M(AB)(CD)(EF)	16	16	0	1	A	C ₁	c	1	1	16						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A10. PPY-6 Pentagonal pyramid. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

PPY-6 Pentagonal pyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma6	1	0	1	1	A	C _{5v}	a	5	144	1						
Ma5b	2	0	2	5:1	A	C _s	a	1	120	1	B	C _{5v}	a	5	24	1
Ma4b2	3	0	3	1	A	C _s	a	1	48	3						
Ma4bc	6	4	2	2:1	A	C ₁	c	1	24	4	B	C _s	a	1	24	2
Ma4(AA)	2	0	2	1	A	C _s	a	1	48	2						
Ma4(AB)	4	2	2	1:1	A'	C ₁	c	1	24	2	A''	C _s	a	1	24	2
Ma3b3	4	0	4	1	A	C _s	a	1	36	4						
Ma3b2c	12	8	4	2:1	A	C ₁	c	1	12	8	B	C _s	a	1	12	4
Ma3bcd	24	24	0	1	A	C ₁	c	1	6	24						
Ma3b(AA)	8	6	2	3:1	A	C ₁	c	1	12	6	B	C _s	a	1	12	2
Ma3b(AB)	16	16	0	1	A	C ₁	c	1	6	16						
Ma2b2c2	18	12	6	2:1	A	C ₁	c	1	8	12	B	C _s	a	1	8	6
Ma2b2cd	36	32	4	8:1	A	C ₁	c	1	4	32	B	C _s	a	1	4	4
Ma2b2(AA)	12	8	4	2:1	A	C ₁	c	1	8	8	B	C _s	a	1	8	4
Ma2b2(AB)	24	20	4	5:1	A	C ₁	c	1	4	20	B	C _s	a	1	4	4
Ma2bcde	72	72	0	1	A	C ₁	c	1	2	72						
Ma2bc(AA)	24	22	2	11:1	A	C ₁	c	1	4	22	B	C _s	a	1	4	2
Ma2bc(AB)	48	48	0	1	A	C ₁	c	1	2	48						
Ma2(AA)2	4	2	2	1:1	A'	C ₁	c	1	16	2	A''	C _s	a	1	16	2
Ma2(AA)(BB)	8	6	2	3:1	A	C ₁	c	1	8	6	B	C _s	a	1	8	2
Ma2(AA)(AB)	16	14	2	7:1	A	C ₁	c	1	4	14	B	C _s	a	1	4	2
Ma2(AB)2	16	14	2	7:1	A	C ₁	c	1	4	14	B	C _s	a	1	4	2

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A10 (continuação).

PPY-6 Pentagonal pyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2(AB)(CD)	32	32	0	1	A	C ₁	c	1	2	32						
Mabcdef	144	144	0	1	A	C ₁	c	1	1	144						
Mabcd(AA)	48	48	0	1	A	C ₁	c	1	2	48						
Mabcd(AB)	96	96	0	1	A	C ₁	c	1	1	96						
Mab(AA)2	8	6	2	3:1	A	C ₁	c	1	8	6	B	C _s	a	1	8	2
Mab(AA)(BB)	16	16	0	1	A	C ₁	c	1	4	16						
Mab(AA)(AB)	32	32	0	1	A	C ₁	c	1	2	32						
Mab(AB)2	32	28	4	7:1	A	C ₁	c	1	2	28	B	C _s	a	1	2	4
Mab(AB)(CD)	64	64	0	1	A	C ₁	c	1	1	64						
M(AA)3	1	0	1	1	A	C _s	a	1	48	1						
M(AA)2(BB)	3	2	1	2:1	A	C ₁	c	1	16	2	B	C _s	a	1	16	1
M(AA)2(AB)	6	4	2	2:1	A	C ₁	c	1	8	4	B	C _s	a	1	8	2
M(AA)(BB)(CC)	6	6	0	1	A	C ₁	c	1	8	6						
M(AA)(BB)(AB)	12	12	0	1	A	C ₁	c	1	4	12						
M(AA)(AB)2	12	10	2	5:1	A	C ₁	c	1	4	10	B	C _s	a	1	4	2
M(AA)(AB)(CD)	24	24	0	1	A	C ₁	c	1	2	24						
M(AB)3	8	4	4	1:1	A'	C ₁	c	1	6	4	A''	C _s	a	1	6	4
M(AB)2(CD)	24	20	4	5:1	A	C ₁	c	1	2	20	B	C _s	a	1	2	4
M(AB)(CD)(EF)	48	48	0	1	A	C ₁	c	1	1	48						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A11. TPR-6 Trigonal prism. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

TPR-6 Trigonal prism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma6	1	0	1	1	A	D _{3h}	a	6	120	1						
Ma5b	1	0	1	1	A	C _s	a	1	120	1						
Ma4b2	4	2	2	2:2:1	A'	C ₂	c	2	24	2	A''	C _s	a	1	48	1
					B	C _{2v}	a	2	24	1						
Ma4bc	5	4	1	4:1	A	C ₁	c	1	24	4	B	C _s	a	1	24	1
Ma4(AA)	2	0	2	2:1	A	C _s	a	1	48	1	B	C _{2v}	a	2	24	1
Ma4(AB)	3	2	1	2:1	A	C ₁	c	1	24	2	B	C _s	a	1	24	1
Ma3b3	4	2	2	6:3:1	A	C ₁	c	1	36	2	B	C _s	a	1	36	1
					C	C _{3v}	a	3	12	1						
Ma3b2c	10	8	2	4:1	A	C ₁	c	1	12	8	B	C _s	a	1	12	2
Ma3bcd	20	20	0	1	A	C ₁	c	1	6	20						
Ma3b(AA)	6	4	2	2:1	A	C ₁	c	1	12	4	B	C _s	a	1	12	2
Ma3b(AB)	12	12	0	1	A	C ₁	c	1	6	12						
Ma2b2c2	18	14	4	2.7:1.3:1	A	C ₁	c	1	8	8	B	C _s	a	1	8	4
					C	C ₂	c	2	4	6						
Ma2b2cd	30	28	2	14:1	A	C ₁	c	1	4	28	B	C _s	a	1	4	2
Ma2b2(AA)	10	6	4	4:4:1	A'	C ₁	c	1	8	4	A''	C _s	a	1	8	4
					B	C ₂	c	2	4	2						
Ma2b2(AB)	18	16	2	8:1	A	C ₁	c	1	4	16	B	C _s	a	1	4	2
Ma2bcde	60	60	0	1	A	C ₁	c	1	2	60						
Ma2bc(AA)	18	16	2	8:1	A	C ₁	c	1	4	16	B	C _s	a	1	4	2
Ma2bc(AB)	36	36	0	1	A	C ₁	c	1	2	36						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A11 (continuação).

TPR-6 Trigonal prism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2(AA)2	5	2	3	1:1:1	A'	C ₂	c	2	8	2	A''	C _s	a	1	16	1
					A'''	C _{2v}	a	2	8	2						
Ma2(AA)(BB)	6	2	4	2:1	A	C _s	a	1	8	4	B	C ₁	c	1	8	2
Ma2(AA)(AB)	12	10	2	5:1	A	C ₁	c	1	4	10	B	C _s	a	1	4	2
Ma2(AB)2	16	14	2	3:2:1	A	C ₁	c	1	4	6	B	C ₂	c	2	2	8
					C	C _s	a	1	4	2						
Ma2(AB)(CD)	24	24	0	1	A	C ₁	c	1	2	24						
Mabcdef	120	120	0	1	A	C ₁	c	1	1	120						
Mabcd(AA)	36	36	0	1	A	C ₁	c	1	2	36						
Mabcd(AB)	72	72	0	1	A	C ₁	c	1	1	72						
Mab(AA)2	6	4	2	2:1	A	C ₁	c	1	8	4	B	C _s	a	1	8	2
Mab(AA)(BB)	12	10	2	5:1	A	C ₁	c	1	4	10	B	C _s	a	1	4	2
Mab(AA)(AB)	24	24	0	1	A	C ₁	c	1	2	24						
Mab(AB)2	24	22	2	11:1	A	C ₁	c	1	2	22	B	C _s	a	1	2	2
Mab(AB)(CD)	48	48	0	1	A	C ₁	c	1	1	48						
M(AA)3	2	0	2	3:1	A	C _{2v}	a	2	24	1	B	D _{3h}	a	6	8	1
M(AA)2(BB)	3	0	3	1:1	A'	C _s	a	1	16	1	A''	C _{2v}	a	2	8	2
M(AA)2(AB)	4	2	2	1:1	A'	C ₁	c	1	8	2	A''	C _s	a	1	8	2
M(AA)(BB)(CC)	4	0	4	1	A	C _s	a	1	8	4						
M(AA)(BB)(AB)	8	6	2	3:1	A	C ₁	c	1	4	6	B	C _s	a	1	4	2
M(AA)(AB)2	10	8	2	2:1:1	A	C ₁	c	1	4	4	B'	C ₂	c	2	2	4
					B''	C _s	a	1	4	2						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A11 (continuação).

TPR-6 Trigonal prism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
M(AA)(AB)(CD)	16	16	0	1	A	C ₁	c	1	2	16						
M(AB)3	6	4	2	12:3:1	A	C ₁	c	1	6	4	B	C _s	a	1	6	1
					C	C _{3v}	a	3	2	1						
M(AB)2(CD)	16	14	2	7:1	A	C ₁	c	1	2	14	B	C _s	a	1	2	2
M(AB)(CD)(EF)	32	32	0	1	A	C ₁	c	1	1	32						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A12. COC-7 Capped octahedron. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

COC-7 Capped octahedron

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma7	1	0	1	1	A	C _{3v}	a	3	1680	1						
Ma6b	3	0	3	6:1	A	C _s	a	1	720	2	B	C _{3v}	a	3	240	1
Ma5b2	7	2	5	2.5:1	A	C _s	a	1	240	5	B	C ₁	c	1	240	2
Ma5bc	14	8	6	1.3:1	A	C ₁	c	1	120	8	B	C _s	a	1	120	6
Ma5(AA)	4	2	2	1:1	A'	C ₁	c	1	240	2	A''	C _s	a	1	240	2
Ma5(AB)	8	6	2	3:1	A	C ₁	c	1	120	6	B	C _s	a	1	120	2
Ma4b3	13	6	7	9:7.5:1	A	C ₁	c	1	144	6	B	C _s	a	1	144	5
					C	C _{3v}	a	3	48	2						
Ma4b2c	35	26	9	2.9:1	A	C ₁	c	1	48	26	B	C _s	a	1	48	9
Ma4bcd	70	64	6	10.7:1	A	C ₁	c	1	24	64	B	C _s	a	1	24	6
Ma4b(AA)	20	16	4	4:1	A	C ₁	c	1	48	16	B	C _s	a	1	48	4
Ma4b(AB)	40	38	2	19:1	A	C ₁	c	1	24	38	B	C _s	a	1	24	2
Ma3b3c	48	36	12	54:15:1	A	C ₁	c	1	36	36	B	C _s	a	1	36	10
					C	C _{3v}	a	3	12	2						
Ma3b2c2	70	56	14	4:1	A	C ₁	c	1	24	56	B	C _s	a	1	24	14
Ma3b2cd	140	128	12	10.7:1	A	C ₁	c	1	12	128	B	C _s	a	1	12	12
Ma3b2(AA)	40	34	6	5.7:1	A	C ₁	c	1	24	34	B	C _s	a	1	24	6
Ma3b2(AB)	80	76	4	19:1	A	C ₁	c	1	12	76	B	C _s	a	1	12	4
Ma3bcde	280	280	0	1	A	C ₁	c	1	6	280						
Ma3bc(AA)	80	74	6	12.3:1	A	C ₁	c	1	12	74	B	C _s	a	1	12	6
Ma3bc(AB)	160	160	0	1	A	C ₁	c	1	6	160						
Ma3(AA)2	12	10	2	5:1	A	C ₁	c	1	48	10	B	C _s	a	1	48	2

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A12 (continuação).

COC-7 Capped octahedron

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3(AA)(BB)	24	22	2	11:1	A	C ₁	c	1	24	22	B	C _s	a	1	24	2
Ma3(AA)(AB)	48	46	2	23:1	A	C ₁	c	1	12	46	B	C _s	a	1	12	2
Ma3(AB)2	48	46	2	23:1	A	C ₁	c	1	12	46	B	C _s	a	1	12	2
Ma3(AB)(CD)	96	96	0	1	A	C ₁	c	1	6	96						
Ma2b2c2d	210	192	18	10.7:1	A	C ₁	c	1	8	192	B	C _s	a	1	8	18
Ma2b2cde	420	408	12	34:1	A	C ₁	c	1	4	408	B	C _s	a	1	4	12
Ma2b2c(AA)	120	112	8	14:1	A	C ₁	c	1	8	112	B	C _s	a	1	8	8
Ma2b2c(AB)	240	236	4	59:1	A	C ₁	c	1	4	236	B	C _s	a	1	4	4
Ma2bcdef	840	840	0	1	A	C ₁	c	1	2	840						
Ma2bcd(AA)	240	234	6	39:1	A	C ₁	c	1	4	234	B	C _s	a	1	4	6
Ma2bcd(AB)	480	480	0	1	A	C ₁	c	1	2	480						
Ma2b(AA)2	36	32	4	8:1	A	C ₁	c	1	16	32	B	C _s	a	1	16	4
Ma2b(AA)(BB)	72	70	2	35:1	A	C ₁	c	1	8	70	B	C _s	a	1	8	2
Ma2b(AA)(AB)	144	142	2	71:1	A	C ₁	c	1	4	142	B	C _s	a	1	4	2
Ma2b(AB)2	144	138	6	23:1	A	C ₁	c	1	4	138	B	C _s	a	1	4	6
Ma2b(AB)(CD)	288	288	0	1	A	C ₁	c	1	2	288						
Mabcdefg	1680	1680	0	1	A	C ₁	c	1	1	1680						
Mabcde(AA)	480	480	0	1	A	C ₁	c	1	2	480						
Mabcde(AB)	960	960	0	1	A	C ₁	c	1	1	960						
Mabc(AA)2	72	66	6	11:1	A	C ₁	c	1	8	66	B	C _s	a	1	8	6
Mabc(AA)(BB)	144	144	0	1	A	C ₁	c	1	4	144						
Mabc(AA)(AB)	288	288	0	1	A	C ₁	c	1	2	288						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A12 (continuação).

COC-7 Capped octahedron

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Mabc(AB)2	288	276	12	23:1	A	C ₁	c	1	2	276	B	C _s	a	1	2	12
Mabc(AB)(CD)	576	576	0	1	A	C ₁	c	1	1	576						
Ma(AA)3	9	8	1	9:1.5:1	A	C ₁	c	1	48	6	B	C _s	a	1	48	1
					C	C ₃	c	3	16	2						
Ma(AA)2(BB)	23	22	1	22:1	A	C ₁	c	1	16	22	B	C _s	a	1	16	1
Ma(AA)2(AB)	46	44	2	22:1	A	C ₁	c	1	8	44	B	C _s	a	1	8	2
Ma(AA)(BB)(CC)	46	46	0	1	A	C ₁	c	1	8	46						
Ma(AA)(BB)(AB)	92	92	0	1	A	C ₁	c	1	4	92						
Ma(AA)(AB)2	92	90	2	45:1	A	C ₁	c	1	4	90	B	C _s	a	1	4	2
Ma(AA)(AB)(CD)	184	184	0	1	A	C ₁	c	1	2	184						
Ma(AB)3	64	60	4	42:3:1	A	C ₁	c	1	6	56	B	C _s	a	1	6	4
					C	C ₃	c	3	2	4						
Ma(AB)2(CD)	184	180	4	45:1	A	C ₁	c	1	2	180	B	C _s	a	1	2	4
Ma(AB)(CD)(EF)	368	368	0	1	A	C ₁	c	1	1	368						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A13. CTPR-7 Capped trigonal prism. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

CTPR-7 Capped trigonal prism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma7	1	0	1	1	A	C _{2v}	a	2	2520	1						
Ma6b	4	2	2	4:2:1	A	C ₁	c	1	720	2	B	C _s	a	1	720	1
					C	C _{2v}	a	2	360	1						
Ma5b2	12	8	4	12:6:2:1	A	C ₁	c	1	240	6	B	C _s	a	1	240	3
					C	C ₂	c	2	120	2	D	C _{2v}	a	2	120	1
Ma5bc	21	18	3	6:1	A	C ₁	c	1	120	18	B	C _s	a	1	120	3
Ma5(AA)	7	4	3	8:4:1	A	C ₁	c	1	240	4	B	C _s	a	1	240	2
					C	C _{2v}	a	2	120	1						
Ma5(AB)	13	12	1	12:1	A	C ₁	c	1	120	12	B	C _s	a	1	120	1
Ma4b3	19	14	5	24:8:2:1	A	C ₁	c	1	144	12	B	C _s	a	1	144	4
					C	C ₂	c	2	72	2	D	C _{2v}	a	2	72	1
Ma4b2c	54	48	6	92:10:2:1	A	C ₁	c	1	48	46	B	C _s	a	1	48	5
					C	C ₂	c	2	24	2	D	C _{2v}	a	2	24	1
Ma4bcd	105	102	3	34:1	A	C ₁	c	1	24	102	B	C _s	a	1	24	3
Ma4b(AA)	33	28	5	56:8:1	A	C ₁	c	1	48	28	B	C _s	a	1	48	4
					C	C _{2v}	a	2	24	1						
Ma4b(AB)	65	64	1	64:1	A	C ₁	c	1	24	64	B	C _s	a	1	24	1
Ma3b3c	70	64	6	10.7:1	A	C ₁	c	1	36	64	B	C _s	a	1	36	6
Ma3b2c2	108	98	10	30.7:3.3:1	A	C ₁	c	1	24	92	B	C _s	a	1	24	10
					C	C ₂	c	2	12	6						
Ma3b2cd	210	204	6	34:1	A	C ₁	c	1	12	204	B	C _s	a	1	12	6

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A13 (continuação).

CTPR-7 Capped trigonal prism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3b2(AA)	66	58	8	56:8:1	A	C ₁	c	1	24	56	B	C _s	a	1	24	8
					C	C ₂	c	2	12	2						
Ma3b2(AB)	130	128	2	64:1	A	C ₁	c	1	12	128	B	C _s	a	1	12	2
Ma3bcde	420	420	0	1	A	C ₁	c	1	6	420						
Ma3bc(AA)	130	124	6	20.7:1	A	C ₁	c	1	12	124	B	C _s	a	1	12	6
Ma3bc(AB)	260	260	0	1	A	C ₁	c	1	6	260						
Ma3(AA)2	23	18	5	16:3:1:1	A	C ₁	c	1	48	16	B	C _s	a	1	48	3
					C'	C ₂	c	2	24	2	C''	C _{2v}	a	2	24	2
Ma3(AA)(BB)	42	36	6	6:1	A	C ₁	c	1	24	36	B	C _s	a	1	24	6
Ma3(AA)(AB)	84	82	2	41:1	A	C ₁	c	1	12	82	B	C _s	a	1	12	2
Ma3(AB)2	88	84	4	19:1:1	A	C ₁	c	1	12	76	B'	C ₂	c	2	6	8
					B''	C _s	a	1	12	4						
Ma3(AB)(CD)	168	168	0	1	A	C ₁	c	1	6	168						
Ma2b2c2d	318	306	12	100:4:1	A	C ₁	c	1	8	300	B	C _s	a	1	8	12
					C	C ₂	c	2	4	6						
Ma2b2cde	630	624	6	104:1	A	C ₁	c	1	4	624	B	C _s	a	1	4	6
Ma2b2c(AA)	196	186	10	184:10:1	A	C ₁	c	1	8	184	B	C _s	a	1	8	10
					C	C ₂	c	2	4	2						
Ma2b2c(AB)	390	388	2	194:1	A	C ₁	c	1	4	388	B	C _s	a	1	4	2
Ma2bcdef	1260	1260	0	1	A	C ₁	c	1	2	1260						
Ma2bcd(AA)	390	384	6	64:1	A	C ₁	c	1	4	384	B	C _s	a	1	4	6
Ma2bcd(AB)	780	780	0	1	A	C ₁	c	1	2	780						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A13 (continuação).

CTPR-7 Capped trigonal prism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2b(AA)2	65	58	7	56:5:1:1	A	C ₁	c	1	16	56	B	C _s	a	1	16	5
					C'	C ₂	c	2	8	2	C''	C _{2v}	a	2	8	2
Ma2b(AA)(BB)	126	118	8	14.8:1	A	C ₁	c	1	8	118	B	C _s	a	1	8	8
Ma2b(AA)(AB)	252	250	2	125:1	A	C ₁	c	1	4	250	B	C _s	a	1	4	2
Ma2b(AB)2	256	250	6	60.5:1.5:1	A	C ₁	c	1	4	242	B	C _s	a	1	4	6
					C	C ₂	c	2	2	8						
Ma2b(AB)(CD)	504	504	0	1	A	C ₁	c	1	2	504						
Mabcdefg	2520	2520	0	1	A	C ₁	c	1	1	2520						
Mabcde(AA)	780	780	0	1	A	C ₁	c	1	2	780						
Mabcde(AB)	1560	1560	0	1	A	C ₁	c	1	1	1560						
Mabc(AA)2	126	120	6	20:1	A	C ₁	c	1	8	120	B	C _s	a	1	8	6
Mabc(AA)(BB)	252	246	6	41:1	A	C ₁	c	1	4	246	B	C _s	a	1	4	6
Mabc(AA)(AB)	504	504	0	1	A	C ₁	c	1	2	504						
Mabc(AB)2	504	498	6	83:1	A	C ₁	c	1	2	498	B	C _s	a	1	2	6
Mabc(AB)(CD)	1008	1008	0	1	A	C ₁	c	1	1	1008						
Ma(AA)3	15	12	3	12:1:1	A	C ₁	c	1	48	12	B'	C _s	a	1	48	1
					B''	C _{2v}	a	2	24	2						
Ma(AA)2(BB)	43	38	5	38:3:1	A	C ₁	c	1	16	38	B	C _s	a	1	16	3
					C	C _{2v}	a	2	8	2						
Ma(AA)2(AB)	84	82	2	41:1	A	C ₁	c	1	8	82	B	C _s	a	1	8	2
Ma(AA)(BB)(CC)	84	78	6	13:1	A	C ₁	c	1	8	78	B	C _s	a	1	8	6
Ma(AA)(BB)(AB)	168	166	2	83:1	A	C ₁	c	1	4	166	B	C _s	a	1	4	2

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A13 (continuação).

CTPR-7 Capped trigonal prism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma(AA)(AB) ₂	170	166	4	81:2:1	A	C ₁	c	1	4	162	B	C _s	a	1	4	4
					C	C ₂	c	2	2	4						
Ma(AA)(AB)(CD)	336	336	0	1	A	C ₁	c	1	2	336						
Ma(AB) ₃	112	110	2	55:1	A	C ₁	c	1	6	110	B	C _s	a	1	6	2
Ma(AB) ₂ (CD)	336	334	2	167:1	A	C ₁	c	1	2	334	B	C _s	a	1	2	2
Ma(AB)(CD)(EF)	672	672	0	1	A	C ₁	c	1	1	672						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A14. HP-7 Heptagon. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

HP-7 Heptagon

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma7	1	0	1	1	A	D _{7h}	a	14	360	1						
Ma6b	1	0	1	1	A	C _{2v}	a	2	360	1						
Ma5b2	3	0	3	1	A	C _{2v}	a	2	120	3						
Ma5bc	3	0	3	1	A	C _s	a	1	120	3						
Ma5(AA)	1	0	1	1	A	C _{2v}	a	2	120	1						
Ma5(AB)	1	0	1	1	A	C _s	a	1	120	1						
Ma4b3	4	0	4	1.5:1	A	C _{2v}	a	2	72	3	B	C _s	a	1	144	1
Ma4b2c	9	0	9	4:1	A	C _s	a	1	48	6	B	C _{2v}	a	2	24	3
Ma4bcd	15	0	15	1	A	C _s	a	1	24	15						
Ma4b(AA)	3	0	3	4:1	A	C _s	a	1	48	2	B	C _{2v}	a	2	24	1
Ma4b(AB)	5	0	5	1	A	C _s	a	1	24	5						
Ma3b3c	10	0	10	1	A	C _s	a	1	36	10						
Ma3b2c2	18	0	18	4:1	A	C _s	a	1	24	12	B	C _{2v}	a	2	12	6
Ma3b2cd	30	0	30	1	A	C _s	a	1	12	30						
Ma3b2(AA)	6	0	6	4:1	A	C _s	a	1	24	4	B	C _{2v}	a	2	12	2
Ma3b2(AB)	10	0	10	1	A	C _s	a	1	12	10						
Ma3bcde	60	0	60	1	A	C _s	a	1	6	60						
Ma3bc(AA)	10	0	10	1	A	C _s	a	1	12	10						
Ma3bc(AB)	20	0	20	1	A	C _s	a	1	6	20						
Ma3(AA)2	2	0	2	1	A	C _{2v}	a	2	24	2						
Ma3(AA)(BB)	2	0	2	1	A	C _s	a	1	24	2						
Ma3(AA)(AB)	4	0	4	1	A	C _s	a	1	12	4						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A14 (continuação).

HP-7 Heptagon

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3(AB)2	6	0	6	1:1	A'	C _s	a	1	12	2	A''	C _{2v}	a	2	6	4
Ma3(AB)(CD)	8	0	8	1	A	C _s	a	1	6	8						
Ma2b2c2d	48	0	48	14:1	A	C _s	a	1	8	42	B	C _{2v}	a	2	4	6
Ma2b2cde	90	0	90	1	A	C _s	a	1	4	90						
Ma2b2c(AA)	16	0	16	14:1	A	C _s	a	1	8	14	B	C _{2v}	a	2	4	2
Ma2b2c(AB)	30	0	30	1	A	C _s	a	1	4	30						
Ma2bcdef	180	0	180	1	A	C _s	a	1	2	180						
Ma2bcd(AA)	30	0	30	1	A	C _s	a	1	4	30						
Ma2bcd(AB)	60	0	60	1	A	C _s	a	1	2	60						
Ma2b(AA)2	4	0	4	2:1	A	C _s	a	1	16	2	B	C _{2v}	a	2	8	2
Ma2b(AA)(BB)	6	0	6	1	A	C _s	a	1	8	6						
Ma2b(AA)(AB)	12	0	12	1	A	C _s	a	1	4	12						
Ma2b(AB)2	14	0	14	5:1	A	C _s	a	1	4	10	B	C _{2v}	a	2	2	4
Ma2b(AB)(CD)	24	0	24	1	A	C _s	a	1	2	24						
Mabcdefg	360	0	360	1	A	C _s	a	1	1	360						
Mabcde(AA)	60	0	60	1	A	C _s	a	1	2	60						
Mabcde(AB)	120	0	120	1	A	C _s	a	1	1	120						
Mabc(AA)2	6	0	6	1	A	C _s	a	1	8	6						
Mabc(AA)(BB)	12	0	12	1	A	C _s	a	1	4	12						
Mabc(AA)(AB)	24	0	24	1	A	C _s	a	1	2	24						
Mabc(AB)2	24	0	24	1	A	C _s	a	1	2	24						
Mabc(AB)(CD)	48	0	48	1	A	C _s	a	1	1	48						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A14 (continuação).

HP-7 Heptagon

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma(AA)3	1	0	1	1	A	C _{2v}	a	2	24	1						
Ma(AA)2(BB)	2	0	2	2:1	A	C _s	a	1	16	1	B	C _{2v}	a	2	8	1
Ma(AA)2(AB)	3	0	3	1	A	C _s	a	1	8	3						
Ma(AA)(BB)(CC)	3	0	3	1	A	C _s	a	1	8	3						
Ma(AA)(BB)(AB)	6	0	6	1	A	C _s	a	1	4	6						
Ma(AA)(AB)2	7	0	7	5:1	A	C _s	a	1	4	5	B	C _{2v}	a	2	2	2
Ma(AA)(AB)(CD)	12	0	12	1	A	C _s	a	1	2	12						
Ma(AB)3	4	0	4	1	A	C _s	a	1	6	4						
Ma(AB)2(CD)	12	0	12	1	A	C _s	a	1	2	12						
Ma(AB)(CD)(EF)	24	0	24	1	A	C _s	a	1	1	24						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A15. HPY-7 Hexagonal pyramid. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

HPY-7 Hexagonal pyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma7	1	0	1	1	A	C _{6v}	a	6	840	1						
Ma6b	2	0	2	6:1	A	C _s	a	1	720	1	B	C _{6v}	a	6	120	1
Ma5b2	4	0	4	6:1	A	C _s	a	1	240	3	B	C _{2v}	a	2	120	1
Ma5bc	7	4	3	1.3:1	A	C ₁	c	1	120	4	B	C _s	a	1	120	3
Ma5(AA)	2	0	2	1	A	C _s	a	1	240	2						
Ma5(AB)	4	2	2	1:1	A'	C ₁	c	1	120	2	A''	C _s	a	1	120	2
Ma4b3	7	2	5	9:6:1.5:1	A	C _s	a	1	144	3	B	C ₁	c	1	144	2
					C	C _{2v}	a	2	72	1	D	C _{3v}	a	3	48	1
Ma4b2c	18	12	6	24:10:1	A	C ₁	c	1	48	12	B	C _s	a	1	48	5
					C	C _{2v}	a	2	24	1						
Ma4bcd	35	32	3	10.7:1	A	C ₁	c	1	24	32	B	C _s	a	1	24	3
Ma4b(AA)	10	8	2	4:1	A	C ₁	c	1	48	8	B	C _s	a	1	48	2
Ma4b(AB)	20	18	2	9:1	A	C ₁	c	1	24	18	B	C _s	a	1	24	2
Ma3b3c	24	18	6	54:15:1	A	C ₁	c	1	36	18	B	C _s	a	1	36	5
					C	C _{3v}	a	3	12	1						
Ma3b2c2	36	26	10	24:10:1	A	C ₁	c	1	24	24	B	C _s	a	1	24	10
					C	C ₂	c	2	12	2						
Ma3b2cd	70	64	6	10.7:1	A	C ₁	c	1	12	64	B	C _s	a	1	12	6
Ma3b2(AA)	20	16	4	4:1	A	C ₁	c	1	24	16	B	C _s	a	1	24	4
Ma3b2(AB)	40	36	4	9:1	A	C ₁	c	1	12	36	B	C _s	a	1	12	4
Ma3bcde	140	140	0	1	A	C ₁	c	1	6	140						
Ma3bc(AA)	40	40	0	1	A	C ₁	c	1	12	40						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A15 (continuação).

HPY-7 Hexagonal pyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3bc(AB)	80	80	0	1	A	C ₁	c	1	6	80						
Ma3(AA)2	6	4	2	8:2:1	A	C ₁	c	1	48	4	B	C _s	a	1	48	1
					C	C _{2v}	a	2	24	1						
Ma3(AA)(BB)	11	10	1	10:1	A	C ₁	c	1	24	10	B	C _s	a	1	24	1
Ma3(AA)(AB)	22	22	0	1	A	C ₁	c	1	12	22						
Ma3(AB)2	23	20	3	18:3:1	A	C ₁	c	1	12	18	B	C _s	a	1	12	3
					C	C ₂	c	2	6	2						
Ma3(AB)(CD)	44	44	0	1	A	C ₁	c	1	6	44						
Ma2b2c2d	106	94	12	92:12:1	A	C ₁	c	1	8	92	B	C _s	a	1	8	12
					C	C ₂	c	2	4	2						
Ma2b2cde	210	204	6	34:1	A	C ₁	c	1	4	204	B	C _s	a	1	4	6
Ma2b2c(AA)	60	56	4	14:1	A	C ₁	c	1	8	56	B	C _s	a	1	8	4
Ma2b2c(AB)	120	116	4	29:1	A	C ₁	c	1	4	116	B	C _s	a	1	4	4
Ma2bcdef	420	420	0	1	A	C ₁	c	1	2	420						
Ma2bcd(AA)	120	120	0	1	A	C ₁	c	1	4	120						
Ma2bcd(AB)	240	240	0	1	A	C ₁	c	1	2	240						
Ma2b(AA)2	17	14	3	28:4:1	A	C ₁	c	1	16	14	B	C _s	a	1	16	2
					C	C _{2v}	a	2	8	1						
Ma2b(AA)(BB)	33	32	1	32:1	A	C ₁	c	1	8	32	B	C _s	a	1	8	1
Ma2b(AA)(AB)	66	66	0	1	A	C ₁	c	1	4	66						
Ma2b(AB)2	67	62	5	60:5:1	A	C ₁	c	1	4	60	B	C _s	a	1	4	5
					C	C ₂	c	2	2	2						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A15 (continuação).

HPY-7 Hexagonal pyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2b(AB)(CD)	132	132	0	1	A	C ₁	c	1	2	132						
Mabcdefg	840	840	0	1	A	C ₁	c	1	1	840						
Mabcde(AA)	240	240	0	1	A	C ₁	c	1	2	240						
Mabcde(AB)	480	480	0	1	A	C ₁	c	1	1	480						
Mabc(AA)2	33	30	3	10:1	A	C ₁	c	1	8	30	B	C _s	a	1	8	3
Mabc(AA)(BB)	66	66	0	1	A	C ₁	c	1	4	66						
Mabc(AA)(AB)	132	132	0	1	A	C ₁	c	1	2	132						
Mabc(AB)2	132	126	6	21:1	A	C ₁	c	1	2	126	B	C _s	a	1	2	6
Mabc(AB)(CD)	264	264	0	1	A	C ₁	c	1	1	264						
Ma(AA)3	4	2	2	6:3:1	A	C ₁	c	1	48	2	B	C _s	a	1	48	1
					C	C _{3v}	a	3	16	1						
Ma(AA)2(BB)	10	8	2	4:1	A	C ₁	c	1	16	8	B	C _s	a	1	16	2
Ma(AA)2(AB)	20	18	2	9:1	A	C ₁	c	1	8	18	B	C _s	a	1	8	2
Ma(AA)(BB)(CC)	20	20	0	1	A	C ₁	c	1	8	20						
Ma(AA)(BB)(AB)	40	40	0	1	A	C ₁	c	1	4	40						
Ma(AA)(AB)2	40	36	4	9:1	A	C ₁	c	1	4	36	B	C _s	a	1	4	4
Ma(AA)(AB)(CD)	80	80	0	1	A	C ₁	c	1	2	80						
Ma(AB)3	28	24	4	33:6:1	A	C ₁	c	1	6	22	B	C _s	a	1	6	4
					C	C ₃	c	3	2	2						
Ma(AB)2(CD)	80	76	4	19:1	A	C ₁	c	1	2	76	B	C _s	a	1	2	4
Ma(AB)(CD)(EF)	160	160	0	1	A	C ₁	c	1	1	160						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A16. PBPY-7 Pentagonal bipyramid. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

PBPY-7 Pentagonal bipyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma7	1	0	1	1	A	D _{5h}	a	10	504	1						
Ma6b	2	0	2	2.5:1	A	C _{2v}	a	2	360	1	B	C _{5v}	a	5	144	1
Ma5b2	4	0	4	10:10:1	A'	C _s	a	1	240	1	A''	C _{2v}	a	2	120	2
					B	D _{5h}	a	10	24	1						
Ma5bc	5	0	5	20:1	A	C _s	a	1	120	4	B	C _{5v}	a	5	24	1
Ma5(AA)	2	0	2	2:1	A	C _s	a	1	240	1	B	C _{2v}	a	2	120	1
Ma5(AB)	3	0	3	1	A	C _s	a	1	120	3						
Ma4b3	5	0	5	1.3:1	A	C _s	a	1	144	2	B	C _{2v}	a	2	72	3
Ma4b2c	12	4	8	3.3:2.7:1	A	C _s	a	1	48	5	B	C ₁	c	1	48	4
					C	C _{2v}	a	2	24	3						
Ma4bcd	21	12	9	1.3:1	A	C ₁	c	1	24	12	B	C _s	a	1	24	9
Ma4b(AA)	8	4	4	8:6:1	A	C ₁	c	1	48	4	B	C _s	a	1	48	3
					C	C _{2v}	a	2	24	1						
Ma4b(AB)	15	10	5	2:1	A	C ₁	c	1	24	10	B	C _s	a	1	24	5
Ma3b3c	14	4	10	2.5:1	A	C _s	a	1	36	10	B	C ₁	c	1	36	4
Ma3b2c2	24	12	12	4:2:1	A	C ₁	c	1	24	12	B	C _s	a	1	24	6
					C	C _{2v}	a	2	12	6						
Ma3b2cd	42	28	14	2:1	A	C ₁	c	1	12	28	B	C _s	a	1	12	14
Ma3b2(AA)	16	10	6	10:4:1	A	C ₁	c	1	24	10	B	C _s	a	1	24	4
					C	C _{2v}	a	2	12	2						
Ma3b2(AB)	30	22	8	2.8:1	A	C ₁	c	1	12	22	B	C _s	a	1	12	8
Ma3bcde	84	72	12	6:1	A	C ₁	c	1	6	72	B	C _s	a	1	6	12

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A16 (continuação).

PBPY-7 Pentagonal bipyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3bc(AA)	30	24	6	4:1	A	C ₁	c	1	12	24	B	C _s	a	1	12	6
Ma3bc(AB)	60	54	6	9:1	A	C ₁	c	1	6	54	B	C _s	a	1	6	6
Ma3(AA)2	8	6	2	4:4:2:1	A'	C ₁	c	1	48	2	A''	C ₂	c	2	24	4
					B	C _s	a	1	48	1	C	C _{2v}	a	2	24	1
Ma3(AA)(BB)	11	8	3	2.7:1	A	C ₁	c	1	24	8	B	C _s	a	1	24	3
Ma3(AA)(AB)	22	18	4	4.5:1	A	C ₁	c	1	12	18	B	C _s	a	1	12	4
Ma3(AB)2	27	24	3	16:4:1:1	A	C ₁	c	1	12	16	B	C ₂	c	2	6	8
					C'	C _s	a	1	12	1	C''	C _{2v}	a	2	6	2
Ma3(AB)(CD)	44	40	4	10:1	A	C ₁	c	1	6	40	B	C _s	a	1	6	4
Ma2b2c2d	66	48	18	16:4:1	A	C ₁	c	1	8	48	B	C _s	a	1	8	12
					C	C _{2v}	a	2	4	6						
Ma2b2cde	126	108	18	6:1	A	C ₁	c	1	4	108	B	C _s	a	1	4	18
Ma2b2c(AA)	46	38	8	38:6:1	A	C ₁	c	1	8	38	B	C _s	a	1	8	6
					C	C _{2v}	a	2	4	2						
Ma2b2c(AB)	90	80	10	8:1	A	C ₁	c	1	4	80	B	C _s	a	1	4	10
Ma2bcdef	252	240	12	20:1	A	C ₁	c	1	2	240	B	C _s	a	1	2	12
Ma2bcd(AA)	90	84	6	14:1	A	C ₁	c	1	4	84	B	C _s	a	1	4	6
Ma2bcd(AB)	180	174	6	29:1	A	C ₁	c	1	2	174	B	C _s	a	1	2	6
Ma2b(AA)2	19	16	3	24:4:4:1	A	C ₁	c	1	16	12	B'	C ₂	c	2	8	4
					B''	C _s	a	1	16	2	C	C _{2v}	a	2	8	1
Ma2b(AA)(BB)	33	30	3	10:1	A	C ₁	c	1	8	30	B	C _s	a	1	8	3
Ma2b(AA)(AB)	66	62	4	15.5:1	A	C ₁	c	1	4	62	B	C _s	a	1	4	4

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A16 (continuação).

PBPY-7 Pentagonal bipyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2b(AB)2	71	66	5	58:4:3:1	A	C ₁	c	1	4	58	B	C ₂	c	2	2	8
					C	C _s	a	1	4	3	D	C _{2v}	a	2	2	2
Ma2b(AB)(CD)	132	128	4	32:1	A	C ₁	c	1	2	128	B	C _s	a	1	2	4
Mabcdefg	504	504	0	1	A	C ₁	c	1	1	504						
Mabcde(AA)	180	180	0	1	A	C ₁	c	1	2	180						
Mabcde(AB)	360	360	0	1	A	C ₁	c	1	1	360						
Mabc(AA)2	33	30	3	10:1	A	C ₁	c	1	8	30	B	C _s	a	1	8	3
Mabc(AA)(BB)	66	66	0	1	A	C ₁	c	1	4	66						
Mabc(AA)(AB)	132	132	0	1	A	C ₁	c	1	2	132						
Mabc(AB)2	132	126	6	21:1	A	C ₁	c	1	2	126	B	C _s	a	1	2	6
Mabc(AB)(CD)	264	264	0	1	A	C ₁	c	1	1	264						
Ma(AA)3	5	4	1	2:1:1	A	C ₁	c	1	48	2	B'	C ₂	c	2	24	2
					B''	C _s	a	1	48	1						
Ma(AA)2(BB)	13	12	1	10:1:1	A	C ₁	c	1	16	10	B'	C ₂	c	2	8	2
					B''	C _s	a	1	16	1						
Ma(AA)2(AB)	24	22	2	11:1	A	C ₁	c	1	8	22	B	C _s	a	1	8	2
Ma(AA)(BB)(CC)	24	24	0	1	A	C ₁	c	1	8	24						
Ma(AA)(BB)(AB)	48	48	0	1	A	C ₁	c	1	4	48						
Ma(AA)(AB)2	50	48	2	22:1:1	A	C ₁	c	1	4	44	B'	C ₂	c	2	2	4
					B''	C _s	a	1	4	2						
Ma(AA)(AB)(CD)	96	96	0	1	A	C ₁	c	1	2	96						
Ma(AB)3	32	28	4	7:1	A	C ₁	c	1	6	28	B	C _s	a	1	6	4
Ma(AB)2(CD)	96	92	4	23:1	A	C ₁	c	1	2	92	B	C _s	a	1	2	4
Ma(AB)(CD)(EF)	192	192	0	1	A	C ₁	c	1	1	192						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A17. BTPR-8 Biaugmented trigonal prism. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

BTPR-8 Biaugmented trigonal prism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma8	1	0	1	1	A	C _{2v}	a	2	20160	1						
Ma7b	4	2	2	1:1	A'	C ₁	c	1	5040	2	A''	C _s	a	1	5040	2
Ma6b2	16	12	4	10:2:1:1	A	C ₁	c	1	1440	10	B	C _s	a	1	1440	2
					C'	C ₂	c	2	720	2	C''	C _{2v}	a	2	720	2
Ma6bc	28	26	2	13:1	A	C ₁	c	1	720	26	B	C _s	a	1	720	2
Ma6(AA)	9	6	3	12:4:1	A	C ₁	c	1	1440	6	B	C _s	a	1	1440	2
					C	C _{2v}	a	2	720	1						
Ma6(AB)	17	16	1	16:1	A	C ₁	c	1	720	16	B	C _s	a	1	720	1
Ma5b3	28	22	6	3.7:1	A	C ₁	c	1	720	22	B	C _s	a	1	720	6
Ma5b2c	84	78	6	13:1	A	C ₁	c	1	240	78	B	C _s	a	1	240	6
Ma5bcd	168	168	0	1	A	C ₁	c	1	120	168						
Ma5b(AA)	51	46	5	9.2:1	A	C ₁	c	1	240	46	B	C _s	a	1	240	5
Ma5b(AB)	102	102	0	1	A	C ₁	c	1	120	102						
Ma4b4	38	32	6	28:4:2:1	A	C ₁	c	1	576	28	B	C _s	a	1	576	4
					C	C ₂	c	2	288	4	D	C _{2v}	a	2	288	2
Ma4b3c	140	134	6	22.3:1	A	C ₁	c	1	144	134	B	C _s	a	1	144	6
Ma4b2c2	216	204	12	194:10:5:1	A	C ₁	c	1	96	194	B	C _s	a	1	96	10
					C	C ₂	c	2	48	10	D	C _{2v}	a	2	48	2
Ma4b2cd	420	414	6	69:1	A	C ₁	c	1	48	414	B	C _s	a	1	48	6
Ma4b2(AA)	129	120	9	236:16:2:1	A	C ₁	c	1	96	118	B	C _s	a	1	96	8
					C	C ₂	c	2	48	2	D	C _{2v}	a	2	48	1
Ma4b2(AB)	255	252	3	84:1	A	C ₁	c	1	48	252	B	C _s	a	1	48	3

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A17 (continuação).

BTPR-8 Biaugmented trigonal prism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma4bcde	840	840	0	1	A	C ₁	c	1	24	840						
Ma4bc(AA)	255	250	5	50:1	A	C ₁	c	1	48	250	B	C _s	a	1	48	5
Ma4bc(AB)	510	510	0	1	A	C ₁	c	1	24	510						
Ma4(AA)2	44	38	6	32:4:3:1	A	C ₁	c	1	192	32	B	C _s	a	1	192	4
					C	C ₂	c	2	96	6	D	C _{2v}	a	2	96	2
Ma4(AA)(BB)	80	74	6	12.3:1	A	C ₁	c	1	96	74	B	C _s	a	1	96	6
Ma4(AA)(AB)	160	158	2	79:1	A	C ₁	c	1	48	158	B	C _s	a	1	48	2
Ma4(AB)2	168	162	6	24.3:1.3:1	A	C ₁	c	1	48	146	B	C ₂	c	2	24	16
					C	C _s	a	1	48	6						
Ma4(AB)(CD)	320	320	0	1	A	C ₁	c	1	24	320						
Ma3b3c2	280	268	12	22.3:1	A	C ₁	c	1	72	268	B	C _s	a	1	72	12
Ma3b3cd	560	560	0	1	A	C ₁	c	1	36	560						
Ma3b3(AA)	170	160	10	16:1	A	C ₁	c	1	72	160	B	C _s	a	1	72	10
Ma3b3(AB)	340	340	0	1	A	C ₁	c	1	36	340						
Ma3b2c2d	840	828	12	69:1	A	C ₁	c	1	24	828	B	C _s	a	1	24	12
Ma3b2cde	1680	1680	0	1	A	C ₁	c	1	12	1680						
Ma3b2c(AA)	510	500	10	50:1	A	C ₁	c	1	24	500	B	C _s	a	1	24	10
Ma3b2c(AB)	1020	1020	0	1	A	C ₁	c	1	12	1020						
Ma3bcdef	3360	3360	0	1	A	C ₁	c	1	6	3360						
Ma3bcd(AA)	1020	1020	0	1	A	C ₁	c	1	12	1020						
Ma3bcd(AB)	2040	2040	0	1	A	C ₁	c	1	6	2040						
Ma3b(AA)2	160	150	10	15:1	A	C ₁	c	1	48	150	B	C _s	a	1	48	10

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A17 (continuação).

BTPR-8 Biaugmented trigonal prism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3b(AA)(BB)	320	312	8	39:1	A	C ₁	c	1	24	312	B	C _s	a	1	24	8
Ma3b(AA)(AB)	640	640	0	1	A	C ₁	c	1	12	640						
Ma3b(AB)2	640	628	12	52.3:1	A	C ₁	c	1	12	628	B	C _s	a	1	12	12
Ma3b(AB)(CD)	1280	1280	0	1	A	C ₁	c	1	6	1280						
Ma2b2c2d2	1272	1248	24	102:2:1	A	C ₁	c	1	16	1224	B	C _s	a	1	16	24
					C	C ₂	c	2	8	24						
Ma2b2c2de	2520	2508	12	209:1	A	C ₁	c	1	8	2508	B	C _s	a	1	8	12
Ma2b2c2(AA)	768	750	18	248:6:1	A	C ₁	c	1	16	744	B	C _s	a	1	16	18
					C	C ₂	c	2	8	6						
Ma2b2c2(AB)	1530	1524	6	254:1	A	C ₁	c	1	8	1524	B	C _s	a	1	8	6
Ma2b2cdef	5040	5040	0	1	A	C ₁	c	1	4	5040						
Ma2b2cd(AA)	1530	1520	10	152:1	A	C ₁	c	1	8	1520	B	C _s	a	1	8	10
Ma2b2cd(AB)	3060	3060	0	1	A	C ₁	c	1	4	3060						
Ma2b2(AA)2	248	236	12	112:4:3:1	A	C ₁	c	1	32	224	B	C _s	a	1	32	8
					C	C ₂	c	2	16	12	D	C _{2v}	a	2	16	4
Ma2b2(AA)(BB)	480	468	12	39:1	A	C ₁	c	1	16	468	B	C _s	a	1	16	12
Ma2b2(AA)(AB)	960	956	4	239:1	A	C ₁	c	1	8	956	B	C _s	a	1	8	4
Ma2b2(AB)2	976	964	12	77.7:1.3:1	A	C ₁	c	1	8	932	B	C ₂	c	2	4	32
					C	C _s	a	1	8	12						
Ma2b2(AB)(CD)	1920	1920	0	1	A	C ₁	c	1	4	1920						
Ma2bcdefg	10080	10080	0	1	A	C ₁	c	1	2	10080						
Ma2bcde(AA)	3060	3060	0	1	A	C ₁	c	1	4	3060						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A17 (continuação).

BTPR-8 Biaugmented trigonal prism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2bcde(AB)	6120	6120	0	1	A	C ₁	c	1	2	6120						
Ma2bc(AA)2	480	470	10	47:1	A	C ₁	c	1	16	470	B	C _s	a	1	16	10
Ma2bc(AA)(BB)	960	952	8	119:1	A	C ₁	c	1	8	952	B	C _s	a	1	8	8
Ma2bc(AA)(AB)	1920	1920	0	1	A	C ₁	c	1	4	1920						
Ma2bc(AB)2	1920	1908	12	159:1	A	C ₁	c	1	4	1908	B	C _s	a	1	4	12
Ma2bc(AB)(CD)	3840	3840	0	1	A	C ₁	c	1	2	3840						
Ma2(AA)3	53	48	5	46:3:1:1	A	C ₁	c	1	96	46	B	C _s	a	1	96	3
					C'	C ₂	c	2	48	2	C''	C _{2v}	a	2	48	2
Ma2(AA)2(BB)	155	148	7	146:5:1:1	A	C ₁	c	1	32	146	B	C _s	a	1	32	5
					C'	C ₂	c	2	16	2	C''	C _{2v}	a	2	16	2
Ma2(AA)2(AB)	306	302	4	75.5:1	A	C ₁	c	1	16	302	B	C _s	a	1	16	4
Ma2(AA)(BB)(CC)	306	300	6	50:1	A	C ₁	c	1	16	300	B	C _s	a	1	16	6
Ma2(AA)(BB)(AB)	612	610	2	305:1	A	C ₁	c	1	8	610	B	C _s	a	1	8	2
Ma2(AA)(AB)2	616	608	8	150:2:1	A	C ₁	c	1	8	600	B	C _s	a	1	8	8
					C	C ₂	c	2	4	8						
Ma2(AA)(AB)(CD)	1224	1224	0	1	A	C ₁	c	1	4	1224						
Ma2(AB)3	408	402	6	67:1	A	C ₁	c	1	12	402	B	C _s	a	1	12	6
Ma2(AB)2(CD)	1224	1218	6	203:1	A	C ₁	c	1	4	1218	B	C _s	a	1	4	6
Ma2(AB)(CD)(EF)	2448	2448	0	1	A	C ₁	c	1	2	2448						
Mabcdefgh	20160	20160	0	1	A	C ₁	c	1	1	20160						
Mabcdef(AA)	6120	6120	0	1	A	C ₁	c	1	2	6120						
Mabcdef(AB)	12240	12240	0	1	A	C ₁	c	1	1	12240						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A17 (continuação).

BTPR-8 Biaugmented trigonal prism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Mabcd(AA)2	960	960	0	1	A	C ₁	c	1	8	960						
Mabcd(AA)(BB)	1920	1920	0	1	A	C ₁	c	1	4	1920						
Mabcd(AA)(AB)	3840	3840	0	1	A	C ₁	c	1	2	3840						
Mabcd(AB)2	3840	3840	0	1	A	C ₁	c	1	2	3840						
Mabcd(AB)(CD)	7680	7680	0	1	A	C ₁	c	1	1	7680						
Mab(AA)3	102	96	6	16:1	A	C ₁	c	1	48	96	B	C _s	a	1	48	6
Mab(AA)2(BB)	306	298	8	37.3:1	A	C ₁	c	1	16	298	B	C _s	a	1	16	8
Mab(AA)2(AB)	612	612	0	1	A	C ₁	c	1	8	612						
Mab(AA)(BB)(CC)	612	606	6	101:1	A	C ₁	c	1	8	606	B	C _s	a	1	8	6
Mab(AA)(BB)(AB)	1224	1224	0	1	A	C ₁	c	1	4	1224						
Mab(AA)(AB)2	1224	1214	10	121.4:1	A	C ₁	c	1	4	1214	B	C _s	a	1	4	10
Mab(AA)(AB)(CD)	2448	2448	0	1	A	C ₁	c	1	2	2448						
Mab(AB)3	816	816	0	1	A	C ₁	c	1	6	816						
Mab(AB)2(CD)	2448	2448	0	1	A	C ₁	c	1	2	2448						
Mab(AB)(CD)(EF)	4896	4896	0	1	A	C ₁	c	1	1	4896						
M(AA)4	11	10	1	4:3:1	A	C ₁	c	1	384	4	B	C ₂	c	2	192	6
					C	C _s	a	1	384	1						
M(AA)3(BB)	32	30	2	15:1	A	C ₁	c	1	96	30	B	C _s	a	1	96	2
M(AA)3(AB)	64	62	2	31:1	A	C ₁	c	1	48	62	B	C _s	a	1	48	2
M(AA)2(BB)2	54	52	2	20:3:1	A	C ₁	c	1	64	40	B	C ₂	c	2	32	12
					C	C _s	a	1	64	2						
M(AA)2(BB)(CC)	96	94	2	47:1	A	C ₁	c	1	32	94	B	C _s	a	1	32	2

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A17 (continuação).

BTPR-8 Biaugmented trigonal prism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
M(AA)2(BB)(AB)	192	190	2	95:1	A	C ₁	c	1	16	190	B	C _s	a	1	16	2
M(AA)2(AB)2	204	202	2	89:6:1	A	C ₁	c	1	16	178	B	C ₂	c	2	8	24
					C	C _s	a	1	16	2						
M(AA)2(AB)(CD)	384	384	0	1	A	C ₁	c	1	8	384						
M(AA)(BB)(CC)(DD)	192	192	0	1	A	C ₁	c	1	16	192						
M(AA)(BB)(CC)(AB)	384	384	0	1	A	C ₁	c	1	8	384						
M(AA)(BB)(AB)2	384	380	4	95:1	A	C ₁	c	1	8	380	B	C _s	a	1	8	4
M(AA)(BB)(AB)(CD)	768	768	0	1	A	C ₁	c	1	4	768						
M(AA)(AB)3	256	252	4	63:1	A	C ₁	c	1	12	252	B	C _s	a	1	12	4
M(AA)(AB)2(CD)	768	764	4	191:1	A	C ₁	c	1	4	764	B	C _s	a	1	4	4
M(AA)(AB)(CD)(EF)	1536	1536	0	1	A	C ₁	c	1	2	1536						
M(AB)4	140	140	0	9.7:1	A	C ₁	c	1	24	116	B	C ₂	c	2	12	24
M(AB)3(CD)	512	512	0	1	A	C ₁	c	1	6	512						
M(AB)2(CD)2	792	792	0	31:1	A	C ₁	c	1	4	744	B	C ₂	c	2	2	48
M(AB)2(CD)(EF)	1536	1536	0	1	A	C ₁	c	1	2	1536						
M(AB)(CD)(EF)(GH)	3072	3072	0	1	A	C ₁	c	1	1	3072						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A18. CU-8 Cube. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

CU-8 Cube

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma8	1	0	1	1	A	O _h	a	24	1680	1						
Ma7b	1	0	1	1	A	C _{3v}	a	3	1680	1						
Ma6b2	3	0	3	6:1	A	C _{2v}	a	2	720	2	B	D _{3d}	a	6	240	1
Ma6bc	3	0	3	6:1	A	C _s	a	1	720	2	B	C _{3v}	a	3	240	1
Ma6(AA)	1	0	1	1	A	C _{2v}	a	2	720	1						
Ma6(AB)	1	0	1	1	A	C _s	a	1	720	1						
Ma5b3	3	0	3	6:1	A	C _s	a	1	720	2	B	C _{3v}	a	3	240	1
Ma5b2c	7	2	5	2.5:1	A	C _s	a	1	240	5	B	C ₁	c	1	240	2
Ma5bcd	14	8	6	1.3:1	A	C ₁	c	1	120	8	B	C _s	a	1	120	6
Ma5b(AA)	3	2	1	2:1	A	C ₁	c	1	240	2	B	C _s	a	1	240	1
Ma5b(AB)	6	4	2	2:1	A	C ₁	c	1	120	4	B	C _s	a	1	120	2
Ma4b4	7	2	5	12:12:4:3 :3:1	A'	C ₂	c	2	288	2	A''	C _s	a	1	576	1
					B	C _{3v}	a	3	192	1	C'	C _{4v}	a	4	144	1
					C''	D _{2h}	a	4	144	1	D	T _d	a	12	48	1
Ma4b3c	13	6	7	9:7.5:1	A	C ₁	c	1	144	6	B	C _s	a	1	144	5
					C	C _{3v}	a	3	48	2						
Ma4b2c2	22	12	10	16:10:4:4 :1	A	C ₁	c	1	96	8	B	C _s	a	1	96	5
					C'	C ₂	c	2	48	4	C''	C _{2v}	a	2	48	4
					D	C _{2h}	a	2	48	1						
Ma4b2cd	35	26	9	2.9:1	A	C ₁	c	1	48	26	B	C _s	a	1	48	9
Ma4b2(AA)	9	6	3	8:4:2:1	A	C ₁	c	1	96	4	B	C _s	a	1	96	2
					C	C ₂	c	2	48	2	D	C _{2v}	a	2	48	1

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A18 (continuação).

CU-8 Cube

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma4b2(AB)	15	12	3	4:1	A	C ₁	c	1	48	12	B	C _s	a	1	48	3
Ma4bcde	70	64	6	10.7:1	A	C ₁	c	1	24	64	B	C _s	a	1	24	6
Ma4bc(AA)	15	14	1	14:1	A	C ₁	c	1	48	14	B	C _s	a	1	48	1
Ma4bc(AB)	30	28	2	14:1	A	C ₁	c	1	24	28	B	C _s	a	1	24	2
Ma4(AA)2	4	2	2	4:2:1	A	C ₂	c	2	96	2	B	C _{2v}	a	2	96	1
					C	D _{2h}	a	4	48	1						
Ma4(AA)(BB)	4	2	2	4:2:1	A	C ₁	c	1	96	2	B	C _s	a	1	96	1
					C	C _{2v}	a	2	48	1						
Ma4(AA)(AB)	7	6	1	6:1	A	C ₁	c	1	48	6	B	C _s	a	1	48	1
Ma4(AB)2	11	8	3	6:4:2:1:1	A	C ₂	c	2	24	6	B	C ₁	c	1	48	2
					C	C _s	a	1	48	1	D'	C _{2v}	a	2	24	1
					D''	C _{2h}	a	2	24	1						
Ma4(AB)(CD)	14	12	2	6:1	A	C ₁	c	1	24	12	B	C _s	a	1	24	2
Ma3b3c2	24	14	10	42:27:1	A	C ₁	c	1	72	14	B	C _s	a	1	72	9
					C	C _{3v}	a	3	24	1						
Ma3b3cd	48	36	12	54:15:1	A	C ₁	c	1	36	36	B	C _s	a	1	36	10
					C	C _{3v}	a	3	12	2						
Ma3b3(AA)	10	8	2	4:1	A	C ₁	c	1	72	8	B	C _s	a	1	72	2
Ma3b3(AB)	20	16	4	4:1	A	C ₁	c	1	36	16	B	C _s	a	1	36	4
Ma3b2c2d	70	56	14	4:1	A	C ₁	c	1	24	56	B	C _s	a	1	24	14
Ma3b2cde	140	128	12	10.7:1	A	C ₁	c	1	12	128	B	C _s	a	1	12	12
Ma3b2c(AA)	30	28	2	14:1	A	C ₁	c	1	24	28	B	C _s	a	1	24	2

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A18 (continuação).

CU-8 Cube

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3b2c(AB)	60	56	4	14:1	A	C ₁	c	1	12	56	B	C _s	a	1	12	4
Ma3bcdef	280	280	0	1	A	C ₁	c	1	6	280						
Ma3bcd(AA)	60	60	0	1	A	C ₁	c	1	12	60						
Ma3bcd(AB)	120	120	0	1	A	C ₁	c	1	6	120						
Ma3b(AA)2	7	6	1	6:1	A	C ₁	c	1	48	6	B	C _s	a	1	48	1
Ma3b(AA)(BB)	14	14	0	1	A	C ₁	c	1	24	14						
Ma3b(AA)(AB)	28	28	0	1	A	C ₁	c	1	12	28						
Ma3b(AB)2	28	26	2	13:1	A	C ₁	c	1	12	26	B	C _s	a	1	12	2
Ma3b(AB)(CD)	56	56	0	1	A	C ₁	c	1	6	56						
Ma2b2c2d2	114	92	22	80:15:6:3 :1	A	C ₁	c	1	16	80	B	C _s	a	1	16	15
					C	C ₂	c	2	8	12	D	C _{2v}	a	2	8	6
					E	C _i	a	1	16	1						
Ma2b2c2de	210	192	18	10.7:1	A	C ₁	c	1	8	192	B	C _s	a	1	8	18
Ma2b2c2(AA)	48	42	6	12:2:1	A	C ₁	c	1	16	36	B	C _s	a	1	16	6
					C	C ₂	c	2	8	6						
Ma2b2c2(AB)	90	84	6	14:1	A	C ₁	c	1	8	84	B	C _s	a	1	8	6
Ma2b2cdef	420	408	12	34:1	A	C ₁	c	1	4	408	B	C _s	a	1	4	12
Ma2b2cd(AA)	90	88	2	44:1	A	C ₁	c	1	8	88	B	C _s	a	1	8	2
Ma2b2cd(AB)	180	176	4	44:1	A	C ₁	c	1	4	176	B	C _s	a	1	4	4
Ma2b2(AA)2	15	10	5	8:6:4:2:1	A	C ₁	c	1	32	4	B	C ₂	c	2	16	6
					C	C _s	a	1	32	2	D	C _{2v}	a	2	16	2
					E	C _{2h}	a	2	16	1						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A18 (continuação).

CU-8 Cube

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2b2(AA)(BB)	22	18	4	16:4:1	A	C ₁	c	1	16	16	B	C _s	a	1	16	4
					C	C ₂	c	2	8	2						
Ma2b2(AA)(AB)	42	40	2	20:1	A	C ₁	c	1	8	40	B	C _s	a	1	8	2
Ma2b2(AB)2	50	42	8	28:7:5:1:1	A	C ₁	c	1	8	28	B	C ₂	c	2	4	14
					C	C _s	a	1	8	5	D'	C _{2v}	a	2	4	2
					D''	C _i	a	1	8	1						
Ma2b2(AB)(CD)	84	80	4	20:1	A	C ₁	c	1	4	80	B	C _s	a	1	4	4
Ma2bcdefg	840	840	0	1	A	C ₁	c	1	2	840						
Ma2bcde(AA)	180	180	0	1	A	C ₁	c	1	4	180						
Ma2bcde(AB)	360	360	0	1	A	C ₁	c	1	2	360						
Ma2bc(AA)2	21	18	3	6:1	A	C ₁	c	1	16	18	B	C _s	a	1	16	3
Ma2bc(AA)(BB)	42	42	0	1	A	C ₁	c	1	8	42						
Ma2bc(AA)(AB)	84	84	0	1	A	C ₁	c	1	4	84						
Ma2bc(AB)2	84	78	6	13:1	A	C ₁	c	1	4	78	B	C _s	a	1	4	6
Ma2bc(AB)(CD)	168	168	0	1	A	C ₁	c	1	2	168						
Ma2(AA)3	4	2	2	3:1.5:1	A	C _s	a	1	96	1	B	C _{2v}	a	2	48	1
					C	D ₃	c	6	16	2						
Ma2(AA)2(BB)	7	4	3	4:4:2:1	A'	C ₁	c	1	32	2	A''	C _s	a	1	32	2
					B	C ₂	c	2	16	2	C	C _{2v}	a	2	16	1
Ma2(AA)2(AB)	11	10	1	10:1	A	C ₁	c	1	16	10	B	C _s	a	1	16	1
Ma2(AA)(BB)(CC)	11	8	3	2.7:1	A	C ₁	c	1	16	8	B	C _s	a	1	16	3
Ma2(AA)(BB)(AB)	22	22	0	1	A	C ₁	c	1	8	22						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A18 (continuação).

CU-8 Cube

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2(AA)(AB)2	25	22	3	5.3:1:1	A	C ₁	c	1	8	16	B'	C ₂	c	2	4	6
					B''	C ₅	a	1	8	3						
Ma2(AA)(AB)(CD)	44	44	0	1	A	C ₁	c	1	4	44						
Ma2(AB)3	16	14	2	18:3:1	A	C ₁	c	1	12	12	B	C ₅	a	1	12	2
					C	C ₃	c	3	4	2						
Ma2(AB)2(CD)	44	42	2	21:1	A	C ₁	c	1	4	42	B	C ₅	a	1	4	2
Ma2(AB)(CD)(EF)	88	88	0	1	A	C ₁	c	1	2	88						
Mabcdefgh	1680	1680	0	1	A	C ₁	c	1	1	1680						
Mabcdef(AA)	360	360	0	1	A	C ₁	c	1	2	360						
Mabcdef(AB)	720	720	0	1	A	C ₁	c	1	1	720						
Mabcd(AA)2	42	36	6	6:1	A	C ₁	c	1	8	36	B	C ₅	a	1	8	6
Mabcd(AA)(BB)	84	84	0	1	A	C ₁	c	1	4	84						
Mabcd(AA)(AB)	168	168	0	1	A	C ₁	c	1	2	168						
Mabcd(AB)2	168	156	12	13:1	A	C ₁	c	1	2	156	B	C ₅	a	1	2	12
Mabcd(AB)(CD)	336	336	0	1	A	C ₁	c	1	1	336						
Mab(AA)3	5	4	1	3:1.5:1	A	C ₁	c	1	48	2	B	C ₅	a	1	48	1
					C	C ₃	c	3	16	2						
Mab(AA)2(BB)	11	10	1	10:1	A	C ₁	c	1	16	10	B	C ₅	a	1	16	1
Mab(AA)2(AB)	22	20	2	10:1	A	C ₁	c	1	8	20	B	C ₅	a	1	8	2
Mab(AA)(BB)(CC)	22	22	0	1	A	C ₁	c	1	8	22						
Mab(AA)(BB)(AB)	44	44	0	1	A	C ₁	c	1	4	44						
Mab(AA)(AB)2	44	42	2	21:1	A	C ₁	c	1	4	42	B	C ₅	a	1	4	2

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A18 (continuação).

CU-8 Cube

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Mab(AA)(AB)(CD)	88	88	0	1	A	C ₁	c	1	2	88						
Mab(AB)3	32	28	4	18:3:1	A	C ₁	c	1	6	24	B	C _s	a	1	6	4
					C	C ₃	c	3	2	4						
Mab(AB)2(CD)	88	84	4	21:1	A	C ₁	c	1	2	84	B	C _s	a	1	2	4
Mab(AB)(CD)(EF)	176	176	0	1	A	C ₁	c	1	1	176						
M(AA)4	2	0	2	2:1	A	D _{2d}	a	4	96	1	B	D _{4h}	a	8	48	1
M(AA)3(BB)	2	0	2	2:1	A	C _s	a	1	96	1	B	C _{2v}	a	2	48	1
M(AA)3(AB)	3	2	1	2:1	A	C ₁	c	1	48	2	B	C _s	a	1	48	1
M(AA)2(BB)2	5	2	3	4:4:1	A'	C ₂	c	2	32	2	A''	C _{2v}	a	2	32	2
					B	D _{2h}	a	4	16	1						
M(AA)2(BB)(CC)	5	2	3	4:4:1	A'	C ₁	c	1	32	2	A''	C _s	a	1	32	2
					B	C _{2v}	a	2	16	1						
M(AA)2(BB)(AB)	9	8	1	8:1	A	C ₁	c	1	16	8	B	C _s	a	1	16	1
M(AA)2(AB)2	14	10	4	8:4:4:1:1	A	C ₂	c	2	8	8	B'	C ₁	c	1	16	2
					B''	C _s	a	1	16	2	C'	C _{2v}	a	2	8	1
					C''	C _{2h}	a	2	8	1						
M(AA)2(AB)(CD)	18	16	2	8:1	A	C ₁	c	1	8	16	B	C _s	a	1	8	2
M(AA)(BB)(CC)(DD)	9	6	3	2:1	A	C ₁	c	1	16	6	B	C _s	a	1	16	3
M(AA)(BB)(CC)(AB)	18	18	0	1	A	C ₁	c	1	8	18						
M(AA)(BB)(AB)2	19	16	3	14:3:1	A	C ₁	c	1	8	14	B	C _s	a	1	8	3
					C	C ₂	c	2	4	2						
M(AA)(BB)(AB)(CD)	36	36	0	1	A	C ₁	c	1	4	36						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A18 (continuação).

CU-8 Cube

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
M(AA)(AB)3	12	10	2	5:1	A	C ₁	c	1	12	10	B	C _s	a	1	12	2
M(AA)(AB)2(CD)	36	34	2	17:1	A	C ₁	c	1	4	34	B	C _s	a	1	4	2
M(AA)(AB)(CD)(EF)	72	72	0	1	A	C ₁	c	1	2	72						
M(AB)4	11	6	5	8:4:4:2:2:2 :1:1	A	C ₁	c	1	24	2	B'	C ₂	c	2	12	2
					B''	C _s	a	1	24	1	C'	S ₄	c	2	12	1
					C''	C _{2h}	a	2	12	1	C'''	D ₂	c	4	6	2
					D'	C _{4v}	a	4	6	1	D''	D _{2d}	a	4	6	1
M(AB)3(CD)	24	20	4	5:1	A	C ₁	c	1	6	20	B	C _s	a	1	6	4
M(AB)2(CD)2	45	38	7	22:8:4:1:1	A	C ₁	c	1	4	22	B	C ₂	c	2	2	16
					C	C _s	a	1	4	4	D'	C _{2v}	a	2	2	2
					D''	C _i	a	1	4	1						
M(AB)2(CD)(EF)	72	68	4	17:1	A	C ₁	c	1	2	68	B	C _s	a	1	2	4
M(AB)(CD)(EF)(GH)	144	144	0	1	A	C ₁	c	1	1	144						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A19. ETBPY-8 Elongated trigonal bipyramid. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

ETBPY-8 Elongated trigonal bipyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma8	1	0	1	1	A	D _{3h}	a	6	6720	1						
Ma7b	2	0	2	3:1	A	C _s	a	1	5040	1	B	C _{3v}	a	3	1680	1
Ma6b2	7	2	5	18:6:3:1	A	C _s	a	1	1440	3	B	C ₂	c	2	720	2
					C	C _{2v}	a	2	720	1	D	D _{3h}	a	6	240	1
Ma6bc	10	4	6	15:12:1	A	C _s	a	1	720	5	B	C ₁	c	1	720	4
					C	C _{3v}	a	3	240	1						
Ma6(AA)	3	0	3	4:1	A	C _s	a	1	1440	2	B	C _{2v}	a	2	720	1
Ma6(AB)	5	2	3	1.5:1	A	C _s	a	1	720	3	B	C ₁	c	1	720	2
Ma5b3	10	4	6	15:12:1	A	C _s	a	1	720	5	B	C ₁	c	1	720	4
					C	C _{3v}	a	3	240	1						
Ma5b2c	28	18	10	1.8:1	A	C ₁	c	1	240	18	B	C _s	a	1	240	10
Ma5bcd	56	44	12	3.7:1	A	C ₁	c	1	120	44	B	C _s	a	1	120	12
Ma5b(AA)	15	8	7	1.1:1	A	C ₁	c	1	240	8	B	C _s	a	1	240	7
Ma5b(AB)	30	24	6	4:1	A	C ₁	c	1	120	24	B	C _s	a	1	120	6
Ma4b4	16	8	8	6:6:3:1.5:1	A'	C ₁	c	1	576	4	A''	C _s	a	1	576	4
					B	C ₂	c	2	288	4	C	C _{2v}	a	2	288	2
					D	C _{3v}	a	3	192	2						
Ma4b3c	48	34	14	51:18:1	A	C ₁	c	1	144	34	B	C _s	a	1	144	12
					C	C _{3v}	a	3	48	2						
Ma4b2c2	76	58	18	48:16:5:1	A	C ₁	c	1	96	48	B	C _s	a	1	96	16
					C	C ₂	c	2	48	10	D	C _{2v}	a	2	48	2
Ma4b2cd	140	122	18	6.8:1	A	C ₁	c	1	48	122	B	C _s	a	1	48	18

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A19 (continuação).

ETBPY-8 Elongated trigonal bipyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma4b2(AA)	39	26	13	48:24:2:1	A	C ₁	c	1	96	24	B	C _s	a	1	96	12
					C	C ₂	c	2	48	2	D	C _{2v}	a	2	48	1
Ma4b2(AB)	75	66	9	7.3:1	A	C ₁	c	1	48	66	B	C _s	a	1	48	9
Ma4bcde	280	268	12	22.3:1	A	C ₁	c	1	24	268	B	C _s	a	1	24	12
Ma4bc(AA)	75	60	15	4:1	A	C ₁	c	1	48	60	B	C _s	a	1	48	15
Ma4bc(AB)	150	144	6	24:1	A	C ₁	c	1	24	144	B	C _s	a	1	24	6
Ma4(AA)2	14	8	6	2.7:2:1.3:1	A	C ₁	c	1	192	4	B	C _s	a	1	192	3
					C	C ₂	c	2	96	4	D	C _{2v}	a	2	96	3
Ma4(AA)(BB)	21	12	9	1.3:1	A	C ₁	c	1	96	12	B	C _s	a	1	96	9
Ma4(AA)(AB)	42	34	8	4.3:1	A	C ₁	c	1	48	34	B	C _s	a	1	48	8
Ma4(AB)2	49	44	5	32:6:3:1	A	C ₁	c	1	48	32	B	C ₂	c	2	24	12
					C	C _s	a	1	48	3	D	C _{2v}	a	2	24	2
Ma4(AB)(CD)	84	80	4	20:1	A	C ₁	c	1	24	80	B	C _s	a	1	24	4
Ma3b3c2	94	74	20	222:57:1	A	C ₁	c	1	72	74	B	C _s	a	1	72	19
					C	C _{3v}	a	3	24	1						
Ma3b3cd	188	164	24	246:33:1	A	C ₁	c	1	36	164	B	C _s	a	1	36	22
					C	C _{3v}	a	3	12	2						
Ma3b3(AA)	50	36	14	2.6:1	A	C ₁	c	1	72	36	B	C _s	a	1	72	14
Ma3b3(AB)	100	88	12	7.3:1	A	C ₁	c	1	36	88	B	C _s	a	1	36	12
Ma3b2c2d	280	252	28	9:1	A	C ₁	c	1	24	252	B	C _s	a	1	24	28
Ma3b2cde	560	536	24	22.3:1	A	C ₁	c	1	12	536	B	C _s	a	1	12	24
Ma3b2c(AA)	150	128	22	5.8:1	A	C ₁	c	1	24	128	B	C _s	a	1	24	22

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A19 (continuação).

ETBPY-8 Elongated trigonal bipyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3b2c(AB)	300	288	12	24:1	A	C ₁	c	1	12	288	B	C _s	a	1	12	12
Ma3bcdef	1120	1120	0	1	A	C ₁	c	1	6	1120						
Ma3bcd(AA)	300	276	24	11.5:1	A	C ₁	c	1	12	276	B	C _s	a	1	12	24
Ma3bcd(AB)	600	600	0	1	A	C ₁	c	1	6	600						
Ma3b(AA)2	42	32	10	3.2:1	A	C ₁	c	1	48	32	B	C _s	a	1	48	10
Ma3b(AA)(BB)	84	68	16	4.3:1	A	C ₁	c	1	24	68	B	C _s	a	1	24	16
Ma3b(AA)(AB)	168	156	12	13:1	A	C ₁	c	1	12	156	B	C _s	a	1	12	12
Ma3b(AB)2	168	164	4	41:1	A	C ₁	c	1	12	164	B	C _s	a	1	12	4
Ma3b(AB)(CD)	336	336	0	1	A	C ₁	c	1	6	336						
Ma2b2c2d2	432	392	40	30.7:3.3:1	A	C ₁	c	1	16	368	B	C _s	a	1	16	40
					C	C ₂	c	2	8	24						
Ma2b2c2de	840	804	36	22.3:1	A	C ₁	c	1	8	804	B	C _s	a	1	8	36
Ma2b2c2(AA)	228	198	30	64:10:1	A	C ₁	c	1	16	192	B	C _s	a	1	16	30
					C	C ₂	c	2	8	6						
Ma2b2c2(AB)	450	432	18	24:1	A	C ₁	c	1	8	432	B	C _s	a	1	8	18
Ma2b2cdef	1680	1656	24	69:1	A	C ₁	c	1	4	1656	B	C _s	a	1	4	24
Ma2b2cd(AA)	450	420	30	14:1	A	C ₁	c	1	8	420	B	C _s	a	1	8	30
Ma2b2cd(AB)	900	888	12	74:1	A	C ₁	c	1	4	888	B	C _s	a	1	4	12
Ma2b2(AA)2	70	54	16	22:6:2.5:1	A	C ₁	c	1	32	44	B	C _s	a	1	32	12
					C	C ₂	c	2	16	10	D	C _{2v}	a	2	16	4
Ma2b2(AA)(BB)	126	104	22	4.7:1	A	C ₁	c	1	16	104	B	C _s	a	1	16	22
Ma2b2(AA)(AB)	252	236	16	14.8:1	A	C ₁	c	1	8	236	B	C _s	a	1	8	16

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A19 (continuação).

ETBPY-8 Elongated trigonal bipyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2b2(AB)2	266	252	14	16:1:1	A	C ₁	c	1	8	224	B'	C ₂	c	2	4	28
					B''	C _s	a	1	8	14						
Ma2b2(AB)(CD)	504	496	8	62:1	A	C ₁	c	1	4	496	B	C _s	a	1	4	8
Ma2bcdefg	3360	3360	0	1	A	C ₁	c	1	2	3360						
Ma2bcde(AA)	900	876	24	36.5:1	A	C ₁	c	1	4	876	B	C _s	a	1	4	24
Ma2bcde(AB)	1800	1800	0	1	A	C ₁	c	1	2	1800						
Ma2bc(AA)2	126	108	18	6:1	A	C ₁	c	1	16	108	B	C _s	a	1	16	18
Ma2bc(AA)(BB)	252	228	24	9.5:1	A	C ₁	c	1	8	228	B	C _s	a	1	8	24
Ma2bc(AA)(AB)	504	492	12	41:1	A	C ₁	c	1	4	492	B	C _s	a	1	4	12
Ma2bc(AB)2	504	492	12	41:1	A	C ₁	c	1	4	492	B	C _s	a	1	4	12
Ma2bc(AB)(CD)	1008	1008	0	1	A	C ₁	c	1	2	1008						
Ma2(AA)3	14	8	6	36:24:6:3 :1	A	C ₁	c	1	96	6	B	C _s	a	1	96	4
					C	C ₂	c	2	48	2	D	C _{2v}	a	2	48	1
					E	D _{3h}	a	6	16	1						
Ma2(AA)2(BB)	37	26	11	24:9:1:1	A	C ₁	c	1	32	24	B	C _s	a	1	32	9
					C'	C ₂	c	2	16	2	C''	C _{2v}	a	2	16	2
Ma2(AA)2(AB)	70	60	10	6:1	A	C ₁	c	1	16	60	B	C _s	a	1	16	10
Ma2(AA)(BB)(CC)	70	54	16	3.4:1	A	C ₁	c	1	16	54	B	C _s	a	1	16	16
Ma2(AA)(BB)(AB)	140	126	14	9:1	A	C ₁	c	1	8	126	B	C _s	a	1	8	14
Ma2(AA)(AB)2	144	134	10	31.5:2.5:1	A	C ₁	c	1	8	126	B	C _s	a	1	8	10
					C	C ₂	c	2	4	8						
Ma2(AA)(AB)(CD)	280	272	8	34:1	A	C ₁	c	1	4	272	B	C _s	a	1	4	8

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A19 (continuação).

ETBPY-8 Elongated trigonal bipyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2(AB)3	94	88	6	264:15:1	A	C ₁	c	1	12	88	B	C _s	a	1	12	5
					C	C _{3v}	a	3	4	1						
Ma2(AB)2(CD)	280	274	6	45.7:1	A	C ₁	c	1	4	274	B	C _s	a	1	4	6
Ma2(AB)(CD)(EF)	560	560	0	1	A	C ₁	c	1	2	560						
Mabcdefgh	6720	6720	0	1	A	C ₁	c	1	1	6720						
Mabcdef(AA)	1800	1800	0	1	A	C ₁	c	1	2	1800						
Mabcdef(AB)	3600	3600	0	1	A	C ₁	c	1	1	3600						
Mabcd(AA)2	252	228	24	9.5:1	A	C ₁	c	1	8	228	B	C _s	a	1	8	24
Mabcd(AA)(BB)	504	480	24	20:1	A	C ₁	c	1	4	480	B	C _s	a	1	4	24
Mabcd(AA)(AB)	1008	1008	0	1	A	C ₁	c	1	2	1008						
Mabcd(AB)2	1008	984	24	41:1	A	C ₁	c	1	2	984	B	C _s	a	1	2	24
Mabcd(AB)(CD)	2016	2016	0	1	A	C ₁	c	1	1	2016						
Mab(AA)3	24	18	6	54:15:1	A	C ₁	c	1	48	18	B	C _s	a	1	48	5
					C	C _{3v}	a	3	16	1						
Mab(AA)2(BB)	70	58	12	4.8:1	A	C ₁	c	1	16	58	B	C _s	a	1	16	12
Mab(AA)2(AB)	140	128	12	10.7:1	A	C ₁	c	1	8	128	B	C _s	a	1	8	12
Mab(AA)(BB)(CC)	140	122	18	6.8:1	A	C ₁	c	1	8	122	B	C _s	a	1	8	18
Mab(AA)(BB)(AB)	280	268	12	22.3:1	A	C ₁	c	1	4	268	B	C _s	a	1	4	12
Mab(AA)(AB)2	280	274	6	45.7:1	A	C ₁	c	1	4	274	B	C _s	a	1	4	6
Mab(AA)(AB)(CD)	560	560	0	1	A	C ₁	c	1	2	560						
Mab(AB)3	188	176	12	264:15:1	A	C ₁	c	1	6	176	B	C _s	a	1	6	10
					C	C _{3v}	a	3	2	2						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A19 (continuação).

ETBPY-8 Elongated trigonal bipyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Mab(AB)2(CD)	560	548	12	45.7:1	A	C ₁	c	1	2	548	B	C _s	a	1	2	12
Mab(AB)(CD)(EF)	1120	1120	0	1	A	C ₁	c	1	1	1120						
M(AA)4	4	2	2	1:1	A'	C ₂	c	2	192	2	A''	C _{2v}	a	2	192	2
M(AA)3(BB)	8	4	4	1:1	A'	C ₁	c	1	96	4	A''	C _s	a	1	96	4
M(AA)3(AB)	16	12	4	3:1	A	C ₁	c	1	48	12	B	C _s	a	1	48	4
M(AA)2(BB)2	16	10	6	3:1:1:1	A	C ₁	c	1	64	6	B'	C ₂	c	2	32	4
					B''	C _s	a	1	64	2	B'''	C _{2v}	a	2	32	4
M(AA)2(BB)(CC)	24	16	8	2:1	A	C ₁	c	1	32	16	B	C _s	a	1	32	8
M(AA)2(BB)(AB)	48	40	8	5:1	A	C ₁	c	1	16	40	B	C _s	a	1	16	8
M(AA)2(AB)2	56	48	8	18:3:2:1	A	C ₁	c	1	16	36	B	C ₂	c	2	8	12
					C	C _s	a	1	16	4	D	C _{2v}	a	2	8	4
M(AA)2(AB)(CD)	96	88	8	11:1	A	C ₁	c	1	8	88	B	C _s	a	1	8	8
M(AA)(BB)(CC)(DD)	48	36	12	3:1	A	C ₁	c	1	16	36	B	C _s	a	1	16	12
M(AA)(BB)(CC)(AB)	96	84	12	7:1	A	C ₁	c	1	8	84	B	C _s	a	1	8	12
M(AA)(BB)(AB)2	96	88	8	11:1	A	C ₁	c	1	8	88	B	C _s	a	1	8	8
M(AA)(BB)(AB)(CD)	192	184	8	23:1	A	C ₁	c	1	4	184	B	C _s	a	1	4	8
M(AA)(AB)3	64	60	4	15:1	A	C ₁	c	1	12	60	B	C _s	a	1	12	4
M(AA)(AB)2(CD)	192	188	4	47:1	A	C ₁	c	1	4	188	B	C _s	a	1	4	4
M(AA)(AB)(CD)(EF)	384	384	0	1	A	C ₁	c	1	2	384						
M(AB)4	40	34	6	3:1.3:1	A	C ₁	c	1	24	18	B	C ₂	c	2	12	16
					C	C _s	a	1	24	6						
M(AB)3(CD)	128	120	8	15:1	A	C ₁	c	1	6	120	B	C _s	a	1	6	8

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A19 (continuação).

ETBPY-8 Elongated trigonal bipyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
M(AB) ₂ (CD) ₂	208	196	12	13.7:1.3:1	A	C ₁	c	1	4	164	B	C ₂	c	2	2	32
					C	C _s	a	1	4	12						
M(AB) ₂ (CD)(EF)	384	376	8	47:1	A	C ₁	c	1	2	376	B	C _s	a	1	2	8
M(AB)(CD)(EF)(GH)	768	768	0	1	A	C ₁	c	1	1	768						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A20. HBPY-8 Hexagonal bipyramid. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

HBPY-8 Hexagonal bipyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma8	1	0	1	1	A	D _{6h}	a	12	3360	1						
Ma7b	2	0	2	3:1	A	C _{2v}	a	2	2520	1	B	C _{6v}	a	6	840	1
Ma6b2	5	0	5	12:12:3:1	A'	C _s	a	1	1440	1	A''	C _{2v}	a	2	720	2
					B	D _{2h}	a	4	360	1	C	D _{6h}	a	12	120	1
Ma6bc	6	0	6	24:3:1	A	C _s	a	1	720	4	B	C _{2v}	a	2	360	1
					C	C _{6v}	a	6	120	1						
Ma6(AA)	2	0	2	2:1	A	C _s	a	1	1440	1	B	C _{2v}	a	2	720	1
Ma6(AB)	3	0	3	1	A	C _s	a	1	720	3						
Ma5b3	7	0	7	18:9:1	A	C _s	a	1	720	3	B	C _{2v}	a	2	360	3
					C	D _{3h}	a	6	120	1						
Ma5b2c	16	4	12	4:2:1	A	C _s	a	1	240	8	B	C ₁	c	1	240	4
					C	C _{2v}	a	2	120	4						
Ma5bcd	28	12	16	1.3:1	A	C _s	a	1	120	16	B	C ₁	c	1	120	12
Ma5b(AA)	9	4	5	1.3:1	A	C _s	a	1	240	5	B	C ₁	c	1	240	4
Ma5b(AB)	18	10	8	1.3:1	A	C ₁	c	1	120	10	B	C _s	a	1	120	8
Ma4b4	10	2	8	6:6:3:1.5:1	A'	C ₁	c	1	576	2	A''	C _{2v}	a	2	288	4
					B	C _s	a	1	576	1	C	D _{2h}	a	4	144	2
					D	C _{3v}	a	3	192	1						
Ma4b3c	26	10	16	33:30:6:1	A	C _s	a	1	144	11	B	C ₁	c	1	144	10
					C	C _{2v}	a	2	72	4	D	C _{3v}	a	3	48	1
Ma4b2c2	42	20	22	40:18:10:1:1	A	C ₁	c	1	96	20	B	C _s	a	1	96	9
					C	C _{2v}	a	2	48	10	D'	C _{2h}	a	2	48	1
					D''	D _{2h}	a	4	24	2						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A20 (continuação).

HBPY-8 Hexagonal bipyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma4b2cd	72	44	28	22:12:1	A	C ₁	c	1	48	44	B	C _s	a	1	48	24
					C	C _{2v}	a	2	24	4						
Ma4b2(AA)	24	16	8	10.7:3.3:1	A	C ₁	c	1	96	16	B	C _s	a	1	96	5
					C	C _{2v}	a	2	48	3						
Ma4b2(AB)	45	32	13	2.5:1	A	C ₁	c	1	48	32	B	C _s	a	1	48	13
Ma4bcde	140	104	36	2.9:1	A	C ₁	c	1	24	104	B	C _s	a	1	24	36
Ma4bc(AA)	45	36	9	4:1	A	C ₁	c	1	48	36	B	C _s	a	1	48	9
Ma4bc(AB)	90	74	16	4.6:1	A	C ₁	c	1	24	74	B	C _s	a	1	24	16
Ma4(AA)2	11	8	3	16.8:2.2:1	A	C ₁	c	1	192	4	B	C ₂	c	2	96	4
					C'	C _{2v}	a	2	96	1	C''	C _{2h}	a	2	96	1
					D	D _{2h}	a	4	48	1						
Ma4(AA)(BB)	15	12	3	24:4:1	A	C ₁	c	1	96	12	B	C _s	a	1	96	2
					C	C _{2v}	a	2	48	1						
Ma4(AA)(AB)	29	24	5	4.8:1	A	C ₁	c	1	48	24	B	C _s	a	1	48	5
Ma4(AB)2	36	28	8	13.3:2.7 :1.3:1:1	A	C ₁	c	1	48	20	B	C ₂	c	2	24	8
					C	C _s	a	1	48	2	D'	C _{2v}	a	2	24	3
					D''	C _{2h}	a	2	24	3						
Ma4(AB)(CD)	58	48	10	4.8:1	A	C ₁	c	1	24	48	B	C _s	a	1	24	10
Ma3b3c2	51	26	25	144:114 :15:6:1	A	C ₁	c	1	72	24	B	C _s	a	1	72	19
					C	C _{2v}	a	2	36	5	D	C ₂	c	2	36	2
					E	D _{3h}	a	6	12	1						
Ma3b3cd	94	62	32	186:93:1	A	C ₁	c	1	36	62	B	C _s	a	1	36	31
					C	C _{3v}	a	3	12	1						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A20 (continuação).

HBPY-8 Hexagonal bipyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3b3(AA)	30	20	10	2:1	A	C ₁	c	1	72	20	B	C _s	a	1	72	10
Ma3b3(AB)	60	44	16	2.8:1	A	C ₁	c	1	36	44	B	C _s	a	1	36	16
Ma3b2c2d	144	102	42	100:36:3:1	A	C ₁	c	1	24	100	B	C _s	a	1	24	36
					C	C _{2v}	a	2	12	6	D	C ₂	c	2	12	2
Ma3b2cde	280	228	52	4.4:1	A	C ₁	c	1	12	228	B	C _s	a	1	12	52
Ma3b2c(AA)	90	76	14	5.4:1	A	C ₁	c	1	24	76	B	C _s	a	1	24	14
Ma3b2c(AB)	180	156	24	6.5:1	A	C ₁	c	1	12	156	B	C _s	a	1	12	24
Ma3bcdef	560	500	60	8.3:1	A	C ₁	c	1	6	500	B	C _s	a	1	6	60
Ma3bcd(AA)	180	168	12	14:1	A	C ₁	c	1	12	168	B	C _s	a	1	12	12
Ma3bcd(AB)	360	336	24	14:1	A	C ₁	c	1	6	336	B	C _s	a	1	6	24
Ma3b(AA)2	32	28	4	24:2:2:1	A	C ₁	c	1	48	24	B'	C ₂	c	2	24	4
					B''	C _s	a	1	48	2	C	C _{2v}	a	2	24	2
Ma3b(AA)(BB)	58	54	4	13.5:1	A	C ₁	c	1	24	54	B	C _s	a	1	24	4
Ma3b(AA)(AB)	116	110	6	18.3:1	A	C ₁	c	1	12	110	B	C _s	a	1	12	6
Ma3b(AB)2	122	112	10	102:8:5:1	A	C ₁	c	1	12	102	B	C _s	a	1	12	8
					C	C ₂	c	2	6	10	D	C _{2v}	a	2	6	2
Ma3b(AB)(CD)	232	220	12	18.3:1	A	C ₁	c	1	6	220	B	C _s	a	1	6	12
Ma2b2c2d2	224	168	56	84:14:6:1	A	C ₁	c	1	16	168	B	C _s	a	1	16	28
					C	C _{2v}	a	2	8	24	D	C _{2h}	a	2	8	4
Ma2b2c2de	424	358	66	356:60:3:1	A	C ₁	c	1	8	356	B	C _s	a	1	8	60
					C	C _{2v}	a	2	4	6	D	C ₂	c	2	4	2

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A20 (continuação).

HBPY-8 Hexagonal bipyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2b2c2(AA)	138	120	18	40:4:1	A	C ₁	c	1	16	120	B	C _s	a	1	16	12
					C	C _{2v}	a	2	8	6						
Ma2b2c2(AB)	270	240	30	8:1	A	C ₁	c	1	8	240	B	C _s	a	1	8	30
Ma2b2cdef	840	768	72	10.7:1	A	C ₁	c	1	4	768	B	C _s	a	1	4	72
Ma2b2cd(AA)	270	252	18	14:1	A	C ₁	c	1	8	252	B	C _s	a	1	8	18
Ma2b2cd(AB)	540	508	32	15.9:1	A	C ₁	c	1	4	508	B	C _s	a	1	4	32
Ma2b2(AA)2	51	44	7	68:10:4:2 :2:1	A	C ₁	c	1	32	34	B	C ₂	c	2	16	10
					C	C _s	a	1	32	2	D'	C _{2v}	a	2	16	2
					D''	C _i	a	1	32	1	E	D _{2h}	a	4	8	2
Ma2b2(AA)(BB)	88	82	6	82:4:1	A	C ₁	c	1	16	82	B	C _s	a	1	16	4
					C	C _{2v}	a	2	8	2						
Ma2b2(AA)(AB)	174	164	10	16.4:1	A	C ₁	c	1	8	164	B	C _s	a	1	8	10
Ma2b2(AB)2	188	170	18	150:10:8:3 :2:1	A	C ₁	c	1	8	150	B	C ₂	c	2	4	20
					C	C _s	a	1	8	8	D	C _{2v}	a	2	4	6
					E	C _i	a	1	8	2	F	C _{2h}	a	2	4	2
Ma2b2(AB)(CD)	348	328	20	16.4:1	A	C ₁	c	1	4	328	B	C _s	a	1	4	20
Ma2bcdefg	1680	1620	60	27:1	A	C ₁	c	1	2	1620	B	C _s	a	1	2	60
Ma2bcde(AA)	540	528	12	44:1	A	C ₁	c	1	4	528	B	C _s	a	1	4	12
Ma2bcde(AB)	1080	1056	24	44:1	A	C ₁	c	1	2	1056	B	C _s	a	1	2	24
Ma2bc(AA)2	90	84	6	80:4:2:1	A	C ₁	c	1	16	80	B	C _s	a	1	16	4
					C	C ₂	c	2	8	4	D	C _{2v}	a	2	8	2
Ma2bc(AA)(BB)	174	170	4	42.5:1	A	C ₁	c	1	8	170	B	C _s	a	1	8	4

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A20 (continuação).

HBPY-8 Hexagonal bipyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2bc(AA)(AB)	348	342	6	57:1	A	C ₁	c	1	4	342	B	C _s	a	1	4	6
Ma2bc(AB)2	354	340	14	330:12:5:1	A	C ₁	c	1	4	330	B	C _s	a	1	4	12
					C	C ₂	c	2	2	10	D	C _{2v}	a	2	2	2
Ma2bc(AB)(CD)	696	684	12	57:1	A	C ₁	c	1	2	684	B	C _s	a	1	2	12
Ma2(AA)3	12	10	2	36:12:6:1	A	C ₁	c	1	96	6	B	C ₂	c	2	48	4
					C	C _s	a	1	96	1	D	D _{3h}	a	6	16	1
Ma2(AA)2(BB)	30	28	2	48:4:2:1	A	C ₁	c	1	32	24	B	C ₂	c	2	16	4
					C	C _s	a	1	32	1	D	C _{2v}	a	2	16	1
Ma2(AA)2(AB)	55	52	3	17.3:1	A	C ₁	c	1	16	52	B	C _s	a	1	16	3
Ma2(AA)(BB)(CC)	55	54	1	54:1	A	C ₁	c	1	16	54	B	C _s	a	1	16	1
Ma2(AA)(BB)(AB)	110	108	2	54:1	A	C ₁	c	1	8	108	B	C _s	a	1	8	2
Ma2(AA)(AB)2	115	110	5	102:4:3:1	A	C ₁	c	1	8	102	B	C ₂	c	2	4	8
					C	C _s	a	1	8	3	D	C _{2v}	a	2	4	2
Ma2(AA)(AB)(CD)	220	216	4	54:1	A	C ₁	c	1	4	216	B	C _s	a	1	4	4
Ma2(AB)3	74	68	6	204:15:1	A	C ₁	c	1	12	68	B	C _s	a	1	12	5
					C	C _{3h}	a	3	4	1						
Ma2(AB)2(CD)	220	212	8	26.5:1	A	C ₁	c	1	4	212	B	C _s	a	1	4	8
Ma2(AB)(CD)(EF)	440	432	8	54:1	A	C ₁	c	1	2	432	B	C _s	a	1	2	8
Mabcdefgh	3360	3360	0	1	A	C ₁	c	1	1	3360						
Mabcdef(AA)	1080	1080	0	1	A	C ₁	c	1	2	1080						
Mabcdef(AB)	2160	2160	0	1	A	C ₁	c	1	1	2160						
Mabcd(AA)2	174	168	6	28:1	A	C ₁	c	1	8	168	B	C _s	a	1	8	6

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A20 (continuação).

HBPY -8 Hexagonal bipyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Mabcd(AA)(BB)	348	348	0	1	A	C ₁	c	1	4	348						
Mabcd(AA)(AB)	696	696	0	1	A	C ₁	c	1	2	696						
Mabcd(AB)2	696	684	12	57:1	A	C ₁	c	1	2	684	B	C _s	a	1	2	12
Mabcd(AB)(CD)	1392	1392	0	1	A	C ₁	c	1	1	1392						
Mab(AA)3	19	16	3	48:6:1	A	C ₁	c	1	48	16	B	C _s	a	1	48	2
					C	C _{3v}	a	3	16	1						
Mab(AA)2(BB)	55	52	3	17.3:1	A	C ₁	c	1	16	52	B	C _s	a	1	16	3
Mab(AA)2(AB)	110	106	4	26.5:1	A	C ₁	c	1	8	106	B	C _s	a	1	8	4
Mab(AA)(BB)(CC)	110	110	0	1	A	C ₁	c	1	8	110						
Mab(AA)(BB)(AB)	220	220	0	1	A	C ₁	c	1	4	220						
Mab(AA)(AB)2	220	214	6	35.7:1	A	C ₁	c	1	4	214	B	C _s	a	1	4	6
Mab(AA)(AB)(CD)	440	440	0	1	A	C ₁	c	1	2	440						
Mab(AB)3	148	140	8	207:12:1	A	C ₁	c	1	6	138	B	C _s	a	1	6	8
					C	C ₃	c	3	2	2						
Mab(AB)2(CD)	440	432	8	54:1	A	C ₁	c	1	2	432	B	C _s	a	1	2	8
Mab(AB)(CD)(EF)	880	880	0	1	A	C ₁	c	1	1	880						
M(AA)4	3	2	1	2:1	A	C ₂	c	2	192	2	B	C _{2h}	a	2	192	1
M(AA)3(BB)	7	6	1	4:1:1	A	C ₁	c	1	96	4	B'	C ₂	c	2	48	2
					B''	C _s	a	1	96	1						
M(AA)3(AB)	12	10	2	5:1	A	C ₁	c	1	48	10	B	C _s	a	1	48	2
M(AA)2(BB)2	12	10	2	6:2:1	A	C ₁	c	1	64	6	B	C ₂	c	2	32	4
					C	C _{2h}	a	2	32	2						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A20 (continuação).

HBPY-8 Hexagonal bipyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
M(AA)2(BB)(CC)	19	18	1	16:1:1	A	C ₁	c	1	32	16	B'	C ₂	c	2	16	2
					B''	C _s	a	1	32	1						
M(AA)2(BB)(AB)	36	34	2	17:1	A	C ₁	c	1	16	34	B	C _s	a	1	16	2
M(AA)2(AB)2	41	36	5	28:4:2:1:1	A	C ₁	c	1	16	28	B	C ₂	c	2	8	8
					C	C _s	a	1	16	2	D'	C _i	a	1	16	1
					D''	C _{2h}	a	2	8	2						
M(AA)2(AB)(CD)	72	68	4	17:1	A	C ₁	c	1	8	68	B	C _s	a	1	8	4
M(AA)(BB)(CC)(DD)	36	36	0	1	A	C ₁	c	1	16	36						
M(AA)(BB)(CC)(AB)	72	72	0	1	A	C ₁	c	1	8	72						
M(AA)(BB)(AB)2	74	72	2	34:1:1	A	C ₁	c	1	8	68	B'	C ₂	c	2	4	4
					B''	C _s	a	1	8	2						
M(AA)(BB)(AB)(CD)	144	144	0	1	A	C ₁	c	1	4	144						
M(AA)(AB)3	48	44	4	11:1	A	C ₁	c	1	12	44	B	C _s	a	1	12	4
M(AA)(AB)2(CD)	144	140	4	35:1	A	C ₁	c	1	4	140	B	C _s	a	1	4	4
M(AA)(AB)(CD)(EF)	288	288	0	1	A	C ₁	c	1	2	288						
M(AB)4	28	22	6	7:2:2:1	A	C ₁	c	1	24	14	B'	C ₂	c	2	12	8
					B''	C _s	a	1	24	4	C	C _i	a	1	24	2
M(AB)3(CD)	96	88	8	11:1	A	C ₁	c	1	6	88	B	C _s	a	1	6	8
M(AB)2(CD)2	152	140	12	31:2:2:1	A	C ₁	c	1	4	124	B'	C ₂	c	2	2	16
					B''	C _s	a	1	4	8	C	C _i	a	1	4	4
M(AB)2(CD)(EF)	288	280	8	35:1	A	C ₁	c	1	2	280	B	C _s	a	1	2	8
M(AB)(CD)(EF)(GH)	576	576	0	1	A	C ₁	c	1	1	576						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A21. HPY-8 Heptagonal pyramid. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

HPY-8 Heptagonal pyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma8	1	0	1	1	A	C _{7v}	a	7	5760	1						
Ma7b	2	0	2	7:1	A	C _s	a	1	5040	1	B	C _{7v}	a	7	720	1
Ma6b2	4	0	4	1	A	C _s	a	1	1440	4						
Ma6bc	8	6	2	3:1	A	C ₁	c	1	720	6	B	C _s	a	1	720	2
Ma6(AA)	2	0	2	1	A	C _s	a	1	1440	2						
Ma6(AB)	4	2	2	1:1	A'	C ₁	c	1	720	2	A''	C _s	a	1	720	2
Ma5b3	8	2	6	3:1	A	C _s	a	1	720	6	B	C ₁	c	1	720	2
Ma5b2c	24	18	6	3:1	A	C ₁	c	1	240	18	B	C _s	a	1	240	6
Ma5bcd	48	48	0	1	A	C ₁	c	1	120	48						
Ma5b(AA)	12	10	2	5:1	A	C ₁	c	1	240	10	B	C _s	a	1	240	2
Ma5b(AB)	24	24	0	1	A	C ₁	c	1	120	24						
Ma4b4	10	4	6	1.5:1	A	C _s	a	1	576	6	B	C ₁	c	1	576	4
Ma4b3c	40	34	6	5.7:1	A	C ₁	c	1	144	34	B	C _s	a	1	144	6
Ma4b2c2	60	48	12	4:1	A	C ₁	c	1	96	48	B	C _s	a	1	96	12
Ma4b2cd	120	114	6	19:1	A	C ₁	c	1	48	114	B	C _s	a	1	48	6
Ma4b2(AA)	30	24	6	4:1	A	C ₁	c	1	96	24	B	C _s	a	1	96	6
Ma4b2(AB)	60	54	6	9:1	A	C ₁	c	1	48	54	B	C _s	a	1	48	6
Ma4bcde	240	240	0	1	A	C ₁	c	1	24	240						
Ma4bc(AA)	60	58	2	29:1	A	C ₁	c	1	48	58	B	C _s	a	1	48	2
Ma4bc(AB)	120	120	0	1	A	C ₁	c	1	24	120						
Ma4(AA)2	7	4	3	1.3:1	A	C ₁	c	1	192	4	B	C _s	a	1	192	3
Ma4(AA)(BB)	14	12	2	6:1	A	C ₁	c	1	96	12	B	C _s	a	1	96	2

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A21 (continuação).

HPY-8 Heptagonal pyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma4(AA)(AB)	28	26	2	13:1	A	C ₁	c	1	48	26	B	C _s	a	1	48	2
Ma4(AB)2	28	24	4	6:1	A	C ₁	c	1	48	24	B	C _s	a	1	48	4
Ma4(AB)(CD)	56	56	0	1	A	C ₁	c	1	24	56						
Ma3b3c2	80	68	12	5.7:1	A	C ₁	c	1	72	68	B	C _s	a	1	72	12
Ma3b3cd	160	160	0	1	A	C ₁	c	1	36	160						
Ma3b3(AA)	40	36	4	9:1	A	C ₁	c	1	72	36	B	C _s	a	1	72	4
Ma3b3(AB)	80	80	0	1	A	C ₁	c	1	36	80						
Ma3b2c2d	240	228	12	19:1	A	C ₁	c	1	24	228	B	C _s	a	1	24	12
Ma3b2cde	480	480	0	1	A	C ₁	c	1	12	480						
Ma3b2c(AA)	120	116	4	29:1	A	C ₁	c	1	24	116	B	C _s	a	1	24	4
Ma3b2c(AB)	240	240	0	1	A	C ₁	c	1	12	240						
Ma3bcdef	960	960	0	1	A	C ₁	c	1	6	960						
Ma3bcd(AA)	240	240	0	1	A	C ₁	c	1	12	240						
Ma3bcd(AB)	480	480	0	1	A	C ₁	c	1	6	480						
Ma3b(AA)2	28	24	4	6:1	A	C ₁	c	1	48	24	B	C _s	a	1	48	4
Ma3b(AA)(BB)	56	56	0	1	A	C ₁	c	1	24	56						
Ma3b(AA)(AB)	112	112	0	1	A	C ₁	c	1	12	112						
Ma3b(AB)2	112	104	8	13:1	A	C ₁	c	1	12	104	B	C _s	a	1	12	8
Ma3b(AB)(CD)	224	224	0	1	A	C ₁	c	1	6	224						
Ma2b2c2d2	360	336	24	14:1	A	C ₁	c	1	16	336	B	C _s	a	1	16	24
Ma2b2c2de	720	708	12	59:1	A	C ₁	c	1	8	708	B	C _s	a	1	8	12
Ma2b2c2(AA)	180	168	12	14:1	A	C ₁	c	1	16	168	B	C _s	a	1	16	12

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A21 (continuação).

HPY-8 Heptagonal pyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2b2c2(AB)	360	348	12	29:1	A	C ₁	c	1	8	348	B	C _s	a	1	8	12
Ma2b2cdef	1440	1440	0	1	A	C ₁	c	1	4	1440						
Ma2b2cd(AA)	360	356	4	89:1	A	C ₁	c	1	8	356	B	C _s	a	1	8	4
Ma2b2cd(AB)	720	720	0	1	A	C ₁	c	1	4	720						
Ma2b2(AA)2	42	36	6	6:1	A	C ₁	c	1	32	36	B	C _s	a	1	32	6
Ma2b2(AA)(BB)	84	80	4	20:1	A	C ₁	c	1	16	80	B	C _s	a	1	16	4
Ma2b2(AA)(AB)	168	164	4	41:1	A	C ₁	c	1	8	164	B	C _s	a	1	8	4
Ma2b2(AB)2	168	160	8	20:1	A	C ₁	c	1	8	160	B	C _s	a	1	8	8
Ma2b2(AB)(CD)	336	336	0	1	A	C ₁	c	1	4	336						
Ma2bcdefg	2880	2880	0	1	A	C ₁	c	1	2	2880						
Ma2bcde(AA)	720	720	0	1	A	C ₁	c	1	4	720						
Ma2bcde(AB)	1440	1440	0	1	A	C ₁	c	1	2	1440						
Ma2bc(AA)2	84	80	4	20:1	A	C ₁	c	1	16	80	B	C _s	a	1	16	4
Ma2bc(AA)(BB)	168	168	0	1	A	C ₁	c	1	8	168						
Ma2bc(AA)(AB)	336	336	0	1	A	C ₁	c	1	4	336						
Ma2bc(AB)2	336	328	8	41:1	A	C ₁	c	1	4	328	B	C _s	a	1	4	8
Ma2bc(AB)(CD)	672	672	0	1	A	C ₁	c	1	2	672						
Ma2(AA)3	7	4	3	1.3:1	A	C ₁	c	1	96	4	B	C _s	a	1	96	3
Ma2(AA)2(BB)	21	18	3	6:1	A	C ₁	c	1	32	18	B	C _s	a	1	32	3
Ma2(AA)2(AB)	42	38	4	9.5:1	A	C ₁	c	1	16	38	B	C _s	a	1	16	4
Ma2(AA)(BB)(CC)	42	42	0	1	A	C ₁	c	1	16	42						
Ma2(AA)(BB)(AB)	84	84	0	1	A	C ₁	c	1	8	84						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A21 (continuação).

HPY-8 Heptagonal pyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2(AA)(AB)2	84	78	6	13:1	A	C ₁	c	1	8	78	B	C _s	a	1	8	6
Ma2(AA)(AB)(CD)	168	168	0	1	A	C ₁	c	1	4	168						
Ma2(AB)3	56	48	8	6:1	A	C ₁	c	1	12	48	B	C _s	a	1	12	8
Ma2(AB)2(CD)	168	160	8	20:1	A	C ₁	c	1	4	160	B	C _s	a	1	4	8
Ma2(AB)(CD)(EF)	336	336	0	1	A	C ₁	c	1	2	336						
Mabcdefgh	5760	5760	0	1	A	C ₁	c	1	1	5760						
Mabcdef(AA)	1440	1440	0	1	A	C ₁	c	1	2	1440						
Mabcdef(AB)	2880	2880	0	1	A	C ₁	c	1	1	2880						
Mabcd(AA)2	168	168	0	1	A	C ₁	c	1	8	168						
Mabcd(AA)(BB)	336	336	0	1	A	C ₁	c	1	4	336						
Mabcd(AA)(AB)	672	672	0	1	A	C ₁	c	1	2	672						
Mabcd(AB)2	672	672	0	1	A	C ₁	c	1	2	672						
Mabcd(AB)(CD)	1344	1344	0	1	A	C ₁	c	1	1	1344						
Mab(AA)3	14	12	2	6:1	A	C ₁	c	1	48	12	B	C _s	a	1	48	2
Mab(AA)2(BB)	42	40	2	20:1	A	C ₁	c	1	16	40	B	C _s	a	1	16	2
Mab(AA)2(AB)	84	84	0	1	A	C ₁	c	1	8	84						
Mab(AA)(BB)(CC)	84	84	0	1	A	C ₁	c	1	8	84						
Mab(AA)(BB)(AB)	168	168	0	1	A	C ₁	c	1	4	168						
Mab(AA)(AB)2	168	164	4	41:1	A	C ₁	c	1	4	164	B	C _s	a	1	4	4
Mab(AA)(AB)(CD)	336	336	0	1	A	C ₁	c	1	2	336						
Mab(AB)3	112	112	0	1	A	C ₁	c	1	6	112						
Mab(AB)2(CD)	336	336	0	1	A	C ₁	c	1	2	336						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A21 (continuação).

HPY-8 Heptagonal pyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Mab(AB)(CD)(EF)	672	672	0	1	A	C ₁	c	1	1	672						
M(AA)4	1	0	1	1	A	C _s	a	1	384	1						
M(AA)3(BB)	4	2	2	1:1	A'	C ₁	c	1	96	2	A''	C _s	a	1	96	2
M(AA)3(AB)	8	6	2	3:1	A	C ₁	c	1	48	6	B	C _s	a	1	48	2
M(AA)2(BB)2	6	4	2	2:1	A	C ₁	c	1	64	4	B	C _s	a	1	64	2
M(AA)2(BB)(CC)	12	10	2	5:1	A	C ₁	c	1	32	10	B	C _s	a	1	32	2
M(AA)2(BB)(AB)	24	22	2	11:1	A	C ₁	c	1	16	22	B	C _s	a	1	16	2
M(AA)2(AB)2	24	22	2	11:1	A	C ₁	c	1	16	22	B	C _s	a	1	16	2
M(AA)2(AB)(CD)	48	48	0	1	A	C ₁	c	1	8	48						
M(AA)(BB)(CC)(DD)	24	24	0	1	A	C ₁	c	1	16	24						
M(AA)(BB)(CC)(AB)	48	48	0	1	A	C ₁	c	1	8	48						
M(AA)(BB)(AB)2	48	44	4	11:1	A	C ₁	c	1	8	44	B	C _s	a	1	8	4
M(AA)(BB)(AB)(CD)	96	96	0	1	A	C ₁	c	1	4	96						
M(AA)(AB)3	32	28	4	7:1	A	C ₁	c	1	12	28	B	C _s	a	1	12	4
M(AA)(AB)2(CD)	96	92	4	23:1	A	C ₁	c	1	4	92	B	C _s	a	1	4	4
M(AA)(AB)(CD)(EF)	192	192	0	1	A	C ₁	c	1	2	192						
M(AB)4	16	16	0	1	A	C ₁	c	1	24	16						
M(AB)3(CD)	64	64	0	1	A	C ₁	c	1	6	64						
M(AB)2(CD)2	96	96	0	1	A	C ₁	c	1	4	96						
M(AB)2(CD)(EF)	192	192	0	1	A	C ₁	c	1	2	192						
M(AB)(CD)(EF)(GH)	384	384	0	1	A	C ₁	c	1	1	384						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A22. OP-8 Octagon. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

OP-8 Octagon

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma8	1	0	1	1	A	D _{8h}	a	16	2520	1						
Ma7b	1	0	1	1	A	C _{2v}	a	2	2520	1						
Ma6b2	4	0	4	6:1	A	C _{2v}	a	2	720	3	B	D _{2h}	a	4	360	1
Ma6bc	4	0	4	6:1	A	C _s	a	1	720	3	B	C _{2v}	a	2	360	1
Ma6(AA)	2	0	2	1	A	C _{2v}	a	2	720	2						
Ma6(AB)	2	0	2	1	A	C _s	a	1	720	2						
Ma5b3	5	0	5	1.3:1	A	C _s	a	1	720	2	B	C _{2v}	a	2	360	3
Ma5b2c	12	0	12	6:1	A	C _s	a	1	240	9	B	C _{2v}	a	2	120	3
Ma5bcd	21	0	21	1	A	C _s	a	1	120	21						
Ma5b(AA)	7	0	7	5:1	A	C _s	a	1	240	5	B	C _{2v}	a	2	120	2
Ma5b(AB)	12	0	12	1	A	C _s	a	1	120	12						
Ma4b4	8	0	8	16:16:2:1	A'	C _s	a	1	576	2	A''	C _{2v}	a	2	288	4
					B	D _{2h}	a	4	144	1	C	D _{4h}	a	8	72	1
Ma4b3c	19	0	19	10.7:1	A	C _s	a	1	144	16	B	C _{2v}	a	2	72	3
Ma4b2c2	33	0	33	80:22:2:1	A	C _s	a	1	96	20	B	C _{2v}	a	2	48	11
					C	C _{2h}	a	2	48	1	D	D _{2h}	a	4	24	1
Ma4b2cd	54	0	54	34:1	A	C _s	a	1	48	51	B	C _{2v}	a	2	24	3
Ma4b2(AA)	18	0	18	4:1	A	C _s	a	1	96	12	B	C _{2v}	a	2	48	6
Ma4b2(AB)	30	0	30	1	A	C _s	a	1	48	30						
Ma4bcde	105	0	105	1	A	C _s	a	1	24	105						
Ma4bc(AA)	31	0	31	29:1	A	C _s	a	1	48	29	B	C _{2v}	a	2	24	2
Ma4bc(AB)	60	0	60	1	A	C _s	a	1	24	60						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A22 (continuação).

OP-8 Octagon

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma4(AA)2	8	0	8	4:4:1	A'	C _s	a	1	192	2	A''	C _{2v}	a	2	96	4
					B	D _{2h}	a	4	48	2						
Ma4(AA)(BB)	10	0	10	8:1	A	C _s	a	1	96	8	B	C _{2v}	a	2	48	2
Ma4(AA)(AB)	18	0	18	1	A	C _s	a	1	48	18						
Ma4(AB)2	24	0	24	12:5:1	A	C _s	a	1	48	12	B	C _{2v}	a	2	24	10
					C	C _{2h}	a	2	24	2						
Ma4(AB)(CD)	36	0	36	1	A	C _s	a	1	24	36						
Ma3b3c2	38	0	38	10.7:1	A	C _s	a	1	72	32	B	C _{2v}	a	2	36	6
Ma3b3cd	70	0	70	1	A	C _s	a	1	36	70						
Ma3b3(AA)	22	0	22	9:1	A	C _s	a	1	72	18	B	C _{2v}	a	2	36	4
Ma3b3(AB)	40	0	40	1	A	C _s	a	1	36	40						
Ma3b2c2d	108	0	108	34:1	A	C _s	a	1	24	102	B	C _{2v}	a	2	12	6
Ma3b2cde	210	0	210	1	A	C _s	a	1	12	210						
Ma3b2c(AA)	62	0	62	29:1	A	C _s	a	1	24	58	B	C _{2v}	a	2	12	4
Ma3b2c(AB)	120	0	120	1	A	C _s	a	1	12	120						
Ma3bcdef	420	0	420	1	A	C _s	a	1	6	420						
Ma3bcd(AA)	120	0	120	1	A	C _s	a	1	12	120						
Ma3bcd(AB)	240	0	240	1	A	C _s	a	1	6	240						
Ma3b(AA)2	20	0	20	8:1	A	C _s	a	1	48	16	B	C _{2v}	a	2	24	4
Ma3b(AA)(BB)	37	0	37	35:1	A	C _s	a	1	24	35	B	C _{2v}	a	2	12	2
Ma3b(AA)(AB)	72	0	72	1	A	C _s	a	1	12	72						
Ma3b(AB)2	75	0	75	23:1	A	C _s	a	1	12	69	B	C _{2v}	a	2	6	6

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A22 (continuação).

OP-8 Octagon

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3b(AB)(CD)	144	0	144	1	A	C _s	a	1	6	144						
Ma2b2c2d2	171	0	171	96:8:1	A	C _s	a	1	16	144	B	C _{2v}	a	2	8	24
					C	C _{2h}	a	2	8	3						
Ma2b2c2de	318	0	318	104:1	A	C _s	a	1	8	312	B	C _{2v}	a	2	4	6
Ma2b2c2(AA)	96	0	96	14:1	A	C _s	a	1	16	84	B	C _{2v}	a	2	8	12
Ma2b2c2(AB)	180	0	180	1	A	C _s	a	1	8	180						
Ma2b2cdef	630	0	630	1	A	C _s	a	1	4	630						
Ma2b2cd(AA)	182	0	182	89:1	A	C _s	a	1	8	178	B	C _{2v}	a	2	4	4
Ma2b2cd(AB)	360	0	360	1	A	C _s	a	1	4	360						
Ma2b2(AA)2	34	0	34	42:10:1:1	A	C _s	a	1	32	21	B	C _{2v}	a	2	16	10
					C'	C _{2h}	a	2	16	1	C''	D _{2h}	a	4	8	2
Ma2b2(AA)(BB)	56	0	56	26:1	A	C _s	a	1	16	52	B	C _{2v}	a	2	8	4
Ma2b2(AA)(AB)	108	0	108	1	A	C _s	a	1	8	108						
Ma2b2(AB)2	120	0	120	48:5:1	A	C _s	a	1	8	96	B	C _{2v}	a	2	4	20
					C	C _{2h}	a	2	4	4						
Ma2b2(AB)(CD)	216	0	216	1	A	C _s	a	1	4	216						
Ma2bcdefg	1260	0	1260	1	A	C _s	a	1	2	1260						
Ma2bcde(AA)	360	0	360	1	A	C _s	a	1	4	360						
Ma2bcde(AB)	720	0	720	1	A	C _s	a	1	2	720						
Ma2bc(AA)2	56	0	56	26:1	A	C _s	a	1	16	52	B	C _{2v}	a	2	8	4
Ma2bc(AA)(BB)	109	0	109	107:1	A	C _s	a	1	8	107	B	C _{2v}	a	2	4	2
Ma2bc(AA)(AB)	216	0	216	1	A	C _s	a	1	4	216						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A22 (continuação).

OP-8 Octagon

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2bc(AB)2	219	0	219	71:1	A	C _s	a	1	4	213	B	C _{2v}	a	2	2	6
Ma2bc(AB)(CD)	432	0	432	1	A	C _s	a	1	2	432						
Ma2(AA)3	8	0	8	1.2:1	A	C _s	a	1	96	3	B	C _{2v}	a	2	48	5
Ma2(AA)2(BB)	19	0	19	5.6:1	A	C _s	a	1	32	14	B	C _{2v}	a	2	16	5
Ma2(AA)2(AB)	33	0	33	1	A	C _s	a	1	16	33						
Ma2(AA)(BB)(CC)	33	0	33	1	A	C _s	a	1	16	33						
Ma2(AA)(BB)(AB)	66	0	66	1	A	C _s	a	1	8	66						
Ma2(AA)(AB)2	71	0	71	12.2:1	A	C _s	a	1	8	61	B	C _{2v}	a	2	4	10
Ma2(AA)(AB)(CD)	132	0	132	1	A	C _s	a	1	4	132						
Ma2(AB)3	44	0	44	1	A	C _s	a	1	12	44						
Ma2(AB)2(CD)	132	0	132	1	A	C _s	a	1	4	132						
Ma2(AB)(CD)(EF)	264	0	264	1	A	C _s	a	1	2	264						
Mabcdefgh	2520	0	2520	1	A	C _s	a	1	1	2520						
Mabcdef(AA)	720	0	720	1	A	C _s	a	1	2	720						
Mabcdef(AB)	1440	0	1440	1	A	C _s	a	1	1	1440						
Mabcd(AA)2	108	0	108	1	A	C _s	a	1	8	108						
Mabcd(AA)(BB)	216	0	216	1	A	C _s	a	1	4	216						
Mabcd(AA)(AB)	432	0	432	1	A	C _s	a	1	2	432						
Mabcd(AB)2	432	0	432	1	A	C _s	a	1	2	432						
Mabcd(AB)(CD)	864	0	864	1	A	C _s	a	1	1	864						
Mab(AA)3	12	0	12	10:1	A	C _s	a	1	48	10	B	C _{2v}	a	2	24	2
Mab(AA)2(BB)	34	0	34	32:1	A	C _s	a	1	16	32	B	C _{2v}	a	2	8	2

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A22 (continuação).

OP-8 Octagon

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Mab(AA)2(AB)	66	0	66	1	A	C _s	a	1	8	66						
Mab(AA)(BB)(CC)	66	0	66	1	A	C _s	a	1	8	66						
Mab(AA)(BB)(AB)	132	0	132	1	A	C _s	a	1	4	132						
Mab(AA)(AB)2	134	0	134	65:1	A	C _s	a	1	4	130	B	C _{2v}	a	2	2	4
Mab(AA)(AB)(CD)	264	0	264	1	A	C _s	a	1	2	264						
Mab(AB)3	88	0	88	1	A	C _s	a	1	6	88						
Mab(AB)2(CD)	264	0	264	1	A	C _s	a	1	2	264						
Mab(AB)(CD)(EF)	528	0	528	1	A	C _s	a	1	1	528						
M(AA)4	3	0	3	4:2:1	A	C _{2v}	a	2	192	1	B	D _{2h}	a	4	96	1
					C	D _{4h}	a	8	48	1						
M(AA)3(BB)	4	0	4	6:1	A	C _s	a	1	96	3	B	C _{2v}	a	2	48	1
M(AA)3(AB)	7	0	7	1	A	C _s	a	1	48	7						
M(AA)2(BB)2	9	0	9	10:8:2:1	A	C _{2v}	a	2	32	5	B	C _s	a	1	64	2
					C	C _{2h}	a	2	32	1	D	D _{2h}	a	4	16	1
M(AA)2(BB)(CC)	11	0	11	20:1	A	C _s	a	1	32	10	B	C _{2v}	a	2	16	1
M(AA)2(BB)(AB)	21	0	21	1	A	C _s	a	1	16	21						
M(AA)2(AB)2	28	0	28	9.3:3.7:1	A	C _s	a	1	16	14	B	C _{2v}	a	2	8	11
					C	C _{2h}	a	2	8	3						
M(AA)2(AB)(CD)	42	0	42	1	A	C _s	a	1	8	42						
M(AA)(BB)(CC)(DD)	21	0	21	1	A	C _s	a	1	16	21						
M(AA)(BB)(CC)(AB)	42	0	42	1	A	C _s	a	1	8	42						
M(AA)(BB)(AB)2	43	0	43	41:1	A	C _s	a	1	8	41	B	C _{2v}	a	2	4	2

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A22 (continuação).

OP-8 Octagon

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
M(AA)(BB)(AB)(CD)	84	0	84	1	A	C _s	a	1	4	84						
M(AA)(AB)3	28	0	28	1	A	C _s	a	1	12	28						
M(AA)(AB)2(CD)	84	0	84	1	A	C _s	a	1	4	84						
M(AA)(AB)(CD)(EF)	168	0	168	1	A	C _s	a	1	2	168						
M(AB)4	21	0	21	36:14:3:2:1	A	C _s	a	1	24	9	B	C _{2v}	a	2	12	7
					C	D _{2h}	a	4	6	3	D	C _{2h}	a	2	12	1
					E	C _{4h}	a	4	6	1						
M(AB)3(CD)	56	0	56	1	A	C _s	a	1	6	56						
M(AB)2(CD)2	97	0	97	23.7:3.3:1	A	C _s	a	1	4	71	B	C _{2v}	a	2	2	20
					C	C _{2h}	a	2	2	6						
M(AB)2(CD)(EF)	168	0	168	1	A	C _s	a	1	2	168						
M(AB)(CD)(EF)(GH)	336	0	336	1	A	C _s	a	1	1	336						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A23. SAPR-8 Square antiprism. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

SAPR-8 Square antiprism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma8	1	0	1	1	A	D _{4d}	a	8	5040	1						
Ma7b	1	0	1	1	A	C _s	a	1	5040	1						
Ma6b2	6	4	2	4:2:1	A	C ₂	c	2	720	4	B	C _s	a	1	1440	1
					C	C _{2v}	a	2	720	1						
Ma6bc	7	6	1	6:1	A	C ₁	c	1	720	6	B	C _s	a	1	720	1
Ma6(AA)	3	2	1	1:1	A'	C ₂	c	2	720	2	A''	C _s	a	1	1440	1
Ma6(AB)	4	4	0	1	A	C ₁	c	1	720	4						
Ma5b3	7	4	3	1.3:1	A	C ₁	c	1	720	4	B	C _s	a	1	720	3
Ma5b2c	21	18	3	6:1	A	C ₁	c	1	240	18	B	C _s	a	1	240	3
Ma5bcd	42	42	0	1	A	C ₁	c	1	120	42						
Ma5b(AA)	12	10	2	5:1	A	C ₁	c	1	240	10	B	C _s	a	1	240	2
Ma5b(AB)	24	24	0	1	A	C ₁	c	1	120	24						
Ma4b4	13	10	3	16:8:8:2:1	A	C ₁	c	1	576	4	B'	C ₂	c	2	288	4
					B''	C _s	a	1	576	2	C	D ₂	c	4	144	2
					D	C _{4v}	a	4	144	1						
Ma4b3c	35	32	3	10.7:1	A	C ₁	c	1	144	32	B	C _s	a	1	144	3
Ma4b2c2	60	54	6	80:14:10:1	A	C ₁	c	1	96	40	B	C ₂	c	2	48	14
					C	C _s	a	1	96	5	D	C _{2v}	a	2	48	1
Ma4b2cd	105	102	3	34:1	A	C ₁	c	1	48	102	B	C _s	a	1	48	3
Ma4b2(AA)	33	30	3	8:1:1	A	C ₁	c	1	96	24	B'	C ₂	c	2	48	6
					B''	C _s	a	1	96	3						
Ma4b2(AB)	60	60	0	1	A	C ₁	c	1	48	60						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A23 (continuação).

SAPR-8 Square antiprism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma4bcde	210	210	0	1	A	C ₁	c	1	24	210						
Ma4bc(AA)	60	58	2	29:1	A	C ₁	c	1	48	58	B	C _s	a	1	48	2
Ma4bc(AB)	120	120	0	1	A	C ₁	c	1	24	120						
Ma4(AA)2	14	12	2	8:6:2:1:1	A	C ₁	c	1	192	4	B	C ₂	c	2	96	6
					C	C _s	a	1	192	1	D'	C _{2v}	a	2	96	1
					D''	D ₂	c	4	48	2						
Ma4(AA)(BB)	19	18	1	16:1:1	A	C ₁	c	1	96	16	B'	C ₂	c	2	48	2
					B''	C _s	a	1	96	1						
Ma4(AA)(AB)	36	36	0	1	A	C ₁	c	1	48	36						
Ma4(AB)2	45	42	3	8:3:1	A	C ₁	c	1	48	24	B	C ₂	c	2	24	18
					C	C _s	a	1	48	3						
Ma4(AB)(CD)	72	72	0	1	A	C ₁	c	1	24	72						
Ma3b3c2	70	64	6	10.7:1	A	C ₁	c	1	72	64	B	C _s	a	1	72	6
Ma3b3cd	140	140	0	1	A	C ₁	c	1	36	140						
Ma3b3(AA)	40	36	4	9:1	A	C ₁	c	1	72	36	B	C _s	a	1	72	4
Ma3b3(AB)	80	80	0	1	A	C ₁	c	1	36	80						
Ma3b2c2d	210	204	6	34:1	A	C ₁	c	1	24	204	B	C _s	a	1	24	6
Ma3b2cde	420	420	0	1	A	C ₁	c	1	12	420						
Ma3b2c(AA)	120	116	4	29:1	A	C ₁	c	1	24	116	B	C _s	a	1	24	4
Ma3b2c(AB)	240	240	0	1	A	C ₁	c	1	12	240						
Ma3bcdef	840	840	0	1	A	C ₁	c	1	6	840						
Ma3bcd(AA)	240	240	0	1	A	C ₁	c	1	12	240						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A23 (continuação).

SAPR-8 Square antiprism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3bcd(AB)	480	480	0	1	A	C ₁	c	1	6	480						
Ma3b(AA)2	36	32	4	8:1	A	C ₁	c	1	48	32	B	C _s	a	1	48	4
Ma3b(AA)(BB)	72	70	2	35:1	A	C ₁	c	1	24	70	B	C _s	a	1	24	2
Ma3b(AA)(AB)	144	144	0	1	A	C ₁	c	1	12	144						
Ma3b(AB)2	144	138	6	23:1	A	C ₁	c	1	12	138	B	C _s	a	1	12	6
Ma3b(AB)(CD)	288	288	0	1	A	C ₁	c	1	6	288						
Ma2b2c2d2	330	318	12	24:1.3:1	A	C ₁	c	1	16	288	B	C ₂	c	2	8	30
					C	C _s	a	1	16	12						
Ma2b2c2de	630	624	6	104:1	A	C ₁	c	1	8	624	B	C _s	a	1	8	6
Ma2b2c2(AA)	186	180	6	28:1:1	A	C ₁	c	1	16	168	B'	C ₂	c	2	8	12
					B''	C _s	a	1	16	6						
Ma2b2c2(AB)	360	360	0	1	A	C ₁	c	1	8	360						
Ma2b2cdef	1260	1260	0	1	A	C ₁	c	1	4	1260						
Ma2b2cd(AA)	360	356	4	89:1	A	C ₁	c	1	8	356	B	C _s	a	1	8	4
Ma2b2cd(AB)	720	720	0	1	A	C ₁	c	1	4	720						
Ma2b2(AA)2	64	60	4	42:9:2:1	A	C ₁	c	1	32	42	B	C ₂	c	2	16	18
					C	C _s	a	1	32	2	D	C _{2v}	a	2	16	2
Ma2b2(AA)(BB)	110	108	2	52:1:1	A	C ₁	c	1	16	104	B'	C ₂	c	2	8	4
					B''	C _s	a	1	16	2						
Ma2b2(AA)(AB)	216	216	0	1	A	C ₁	c	1	8	216						
Ma2b2(AB)2	234	228	6	32:3:1	A	C ₁	c	1	8	192	B	C ₂	c	2	4	36
					C	C _s	a	1	8	6						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A23 (continuação).

SAPR-8 Square antiprism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2b2(AB)(CD)	432	432	0	1	A	C ₁	c	1	4	432						
Ma2bcdefg	2520	2520	0	1	A	C ₁	c	1	2	2520						
Ma2bcde(AA)	720	720	0	1	A	C ₁	c	1	4	720						
Ma2bcde(AB)	1440	1440	0	1	A	C ₁	c	1	2	1440						
Ma2bc(AA)2	108	104	4	26:1	A	C ₁	c	1	16	104	B	C _s	a	1	16	4
Ma2bc(AA)(BB)	216	214	2	107:1	A	C ₁	c	1	8	214	B	C _s	a	1	8	2
Ma2bc(AA)(AB)	432	432	0	1	A	C ₁	c	1	4	432						
Ma2bc(AB)2	432	426	6	71:1	A	C ₁	c	1	4	426	B	C _s	a	1	4	6
Ma2bc(AB)(CD)	864	864	0	1	A	C ₁	c	1	2	864						
Ma2(AA)3	15	14	1	6:4:1	A	C ₁	c	1	96	6	B	C ₂	c	2	48	8
					C	C _s	a	1	96	1						
Ma2(AA)2(BB)	37	36	1	28:4:1	A	C ₁	c	1	32	28	B	C ₂	c	2	16	8
					C	C _s	a	1	32	1						
Ma2(AA)2(AB)	66	66	0	1	A	C ₁	c	1	16	66						
Ma2(AA)(BB)(CC)	66	66	0	1	A	C ₁	c	1	16	66						
Ma2(AA)(BB)(AB)	132	132	0	1	A	C ₁	c	1	8	132						
Ma2(AA)(AB)2	140	138	2	61:4:1	A	C ₁	c	1	8	122	B	C ₂	c	2	4	16
					C	C _s	a	1	8	2						
Ma2(AA)(AB)(CD)	264	264	0	1	A	C ₁	c	1	4	264						
Ma2(AB)3	88	88	0	1	A	C ₁	c	1	12	88						
Ma2(AB)2(CD)	264	264	0	1	A	C ₁	c	1	4	264						
Ma2(AB)(CD)(EF)	528	528	0	1	A	C ₁	c	1	2	528						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A23 (continuação).

SAPR-8 Square antiprism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Mabcdefgh	5040	5040	0	1	A	C ₁	c	1	1	5040						
Mabcdef(AA)	1440	1440	0	1	A	C ₁	c	1	2	1440						
Mabcdef(AB)	2880	2880	0	1	A	C ₁	c	1	1	2880						
Mabcd(AA)2	216	216	0	1	A	C ₁	c	1	8	216						
Mabcd(AA)(BB)	432	432	0	1	A	C ₁	c	1	4	432						
Mabcd(AA)(AB)	864	864	0	1	A	C ₁	c	1	2	864						
Mabcd(AB)2	864	864	0	1	A	C ₁	c	1	2	864						
Mabcd(AB)(CD)	1728	1728	0	1	A	C ₁	c	1	1	1728						
Mab(AA)3	22	20	2	10:1	A	C ₁	c	1	48	20	B	C _s	a	1	48	2
Mab(AA)2(BB)	66	64	2	32:1	A	C ₁	c	1	16	64	B	C _s	a	1	16	2
Mab(AA)2(AB)	132	132	0	1	A	C ₁	c	1	8	132						
Mab(AA)(BB)(CC)	132	132	0	1	A	C ₁	c	1	8	132						
Mab(AA)(BB)(AB)	264	264	0	1	A	C ₁	c	1	4	264						
Mab(AA)(AB)2	264	260	4	65:1	A	C ₁	c	1	4	260	B	C _s	a	1	4	4
Mab(AA)(AB)(CD)	528	528	0	1	A	C ₁	c	1	2	528						
Mab(AB)3	176	176	0	1	A	C ₁	c	1	6	176						
Mab(AB)2(CD)	528	528	0	1	A	C ₁	c	1	2	528						
Mab(AB)(CD)(EF)	1056	1056	0	1	A	C ₁	c	1	1	1056						
M(AA)4	6	6	0	4:2:1	A	C ₂	c	2	192	2	B	D ₂	c	4	96	2
					C	D ₄	c	8	48	2						
M(AA)3(BB)	8	8	0	6:1	A	C ₁	c	1	96	6	B	C ₂	c	2	48	2
M(AA)3(AB)	14	14	0	1	A	C ₁	c	1	48	14						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A23 (continuação).

SAPR-8 Square antiprism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
M(AA)2(BB)2	18	18	0	12:8:1	A	C ₂	c	2	32	12	B	C ₁	c	1	64	4
					C	D ₂	c	4	16	2						
M(AA)2(BB)(CC)	22	22	0	20:1	A	C ₁	c	1	32	20	B	C ₂	c	2	16	2
M(AA)2(BB)(AB)	42	42	0	1	A	C ₁	c	1	16	42						
M(AA)2(AB)2	56	56	0	2:1	A	C ₁	c	1	16	28	B	C ₂	c	2	8	28
M(AA)2(AB)(CD)	84	84	0	1	A	C ₁	c	1	8	84						
M(AA)(BB)(CC)(DD)	42	42	0	1	A	C ₁	c	1	16	42						
M(AA)(BB)(CC)(AB)	84	84	0	1	A	C ₁	c	1	8	84						
M(AA)(BB)(AB)2	86	86	0	41:1	A	C ₁	c	1	8	82	B	C ₂	c	2	4	4
M(AA)(BB)(AB)(CD)	168	168	0	1	A	C ₁	c	1	4	168						
M(AA)(AB)3	56	56	0	1	A	C ₁	c	1	12	56						
M(AA)(AB)2(CD)	168	168	0	1	A	C ₁	c	1	4	168						
M(AA)(AB)(CD)(EF)	336	336	0	1	A	C ₁	c	1	2	336						
M(AB)4	42	42	0	36:16:3:1	A	C ₁	c	1	24	18	B	C ₂	c	2	12	16
					C	D ₂	c	4	6	6	D	C ₄	c	4	6	2
M(AB)3(CD)	112	112	0	1	A	C ₁	c	1	6	112						
M(AB)2(CD)2	194	194	0	5.5:1	A	C ₁	c	1	4	142	B	C ₂	c	2	2	52
M(AB)2(CD)(EF)	336	336	0	1	A	C ₁	c	1	2	336						
M(AB)(CD)(EF)(GH)	672	672	0	1	A	C ₁	c	1	1	672						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A24. TDD-8 Triangular dodecahedron. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

TDD-8 Triangular dodecahedron

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma8	1	0	1	1	A	D _{2d}	a	4	10080	1						
Ma7b	2	0	2	1	A	C _s	a	1	5040	2						
Ma6b2	10	6	4	2:2:2:1	A'	C ₁	c	1	1440	2	A''	C ₂	c	2	720	4
					A'''	C _s	a	1	1440	2	B	C _{2v}	a	2	720	2
Ma6bc	14	8	6	1.3:1	A	C ₁	c	1	720	8	B	C _s	a	1	720	6
Ma6(AA)	4	2	2	4:2:1	A	C ₁	c	1	1440	2	B	C _s	a	1	1440	1
					C	C _{2v}	a	2	720	1						
Ma6(AB)	7	4	3	1.3:1	A	C ₁	c	1	720	4	B	C _s	a	1	720	3
Ma5b3	14	8	6	1.3:1	A	C ₁	c	1	720	8	B	C _s	a	1	720	6
Ma5b2c	42	32	10	3.2:1	A	C ₁	c	1	240	32	B	C _s	a	1	240	10
Ma5bcd	84	72	12	6:1	A	C ₁	c	1	120	72	B	C _s	a	1	120	12
Ma5b(AA)	21	16	5	3.2:1	A	C ₁	c	1	240	16	B	C _s	a	1	240	5
Ma5b(AB)	42	36	6	6:1	A	C ₁	c	1	120	36	B	C _s	a	1	120	6
Ma4b4	22	14	8	20:8:4:2:1	A	C ₁	c	1	576	10	B	C _s	a	1	576	4
					C	C ₂	c	2	288	4	D	C _{2v}	a	2	288	2
					E	D _{2d}	a	4	144	2						
Ma4b3c	70	56	14	4:1	A	C ₁	c	1	144	56	B	C _s	a	1	144	14
Ma4b2c2	114	98	16	28.7:3.3:2:1	A	C ₁	c	1	96	86	B	C _s	a	1	96	10
					C	C ₂	c	2	48	12	D	C _{2v}	a	2	48	6
Ma4b2cd	210	192	18	10.7:1	A	C ₁	c	1	48	192	B	C _s	a	1	48	18
Ma4b2(AA)	54	46	8	30.7:3.3:1	A	C ₁	c	1	96	46	B	C _s	a	1	96	5
					C	C _{2v}	a	2	48	3						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A24 (continuação).

TDD-8 Triangular dodecahedron

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma4b2(AB)	105	96	9	10.7:1	A	C ₁	c	1	48	96	B	C _s	a	1	48	9
Ma4bcde	420	408	12	34:1	A	C ₁	c	1	24	408	B	C _s	a	1	24	12
Ma4bc(AA)	105	96	9	10.7:1	A	C ₁	c	1	48	96	B	C _s	a	1	48	9
Ma4bc(AB)	210	204	6	34:1	A	C ₁	c	1	24	204	B	C _s	a	1	24	6
Ma4(AA)2	19	16	3	32:16:4:2 :1	A	C ₁	c	1	192	8	B	C ₂	c	2	96	8
					C	C _s	a	1	192	1	D	C _{2v}	a	2	96	1
					E	D _{2d}	a	4	48	1						
Ma4(AA)(BB)	28	24	4	48:6:1	A	C ₁	c	1	96	24	B	C _s	a	1	96	3
					C	C _{2v}	a	2	48	1						
Ma4(AA)(AB)	55	50	5	10:1	A	C ₁	c	1	48	50	B	C _s	a	1	48	5
Ma4(AB)2	65	62	3	44:9:1:1	A	C ₁	c	1	48	44	B	C ₂	c	2	24	18
					C'	C _s	a	1	48	1	C''	C _{2v}	a	2	24	2
Ma4(AB)(CD)	110	106	4	26.5:1	A	C ₁	c	1	24	106	B	C _s	a	1	24	4
Ma3b3c2	140	120	20	6:1	A	C ₁	c	1	72	120	B	C _s	a	1	72	20
Ma3b3cd	280	256	24	10.7:1	A	C ₁	c	1	36	256	B	C _s	a	1	36	24
Ma3b3(AA)	70	60	10	6:1	A	C ₁	c	1	72	60	B	C _s	a	1	72	10
Ma3b3(AB)	140	128	12	10.7:1	A	C ₁	c	1	36	128	B	C _s	a	1	36	12
Ma3b2c2d	420	392	28	14:1	A	C ₁	c	1	24	392	B	C _s	a	1	24	28
Ma3b2cde	840	816	24	34:1	A	C ₁	c	1	12	816	B	C _s	a	1	12	24
Ma3b2c(AA)	210	196	14	14:1	A	C ₁	c	1	24	196	B	C _s	a	1	24	14
Ma3b2c(AB)	420	408	12	34:1	A	C ₁	c	1	12	408	B	C _s	a	1	12	12
Ma3bcdef	1680	1680	0	1	A	C ₁	c	1	6	1680						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A24 (continuação).

TDD-8 Triangular dodecahedron

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3bcd(AA)	420	408	12	34:1	A	C ₁	c	1	12	408	B	C _s	a	1	12	12
Ma3bcd(AB)	840	840	0	1	A	C ₁	c	1	6	840						
Ma3b(AA)2	55	50	5	10:1	A	C ₁	c	1	48	50	B	C _s	a	1	48	5
Ma3b(AA)(BB)	110	104	6	17.3:1	A	C ₁	c	1	24	104	B	C _s	a	1	24	6
Ma3b(AA)(AB)	220	214	6	35.7:1	A	C ₁	c	1	12	214	B	C _s	a	1	12	6
Ma3b(AB)2	220	216	4	54:1	A	C ₁	c	1	12	216	B	C _s	a	1	12	4
Ma3b(AB)(CD)	440	440	0	1	A	C ₁	c	1	6	440						
Ma2b2c2d2	648	612	36	98:4:2:1	A	C ₁	c	1	16	588	B	C _s	a	1	16	24
					C	C ₂	c	2	8	24	D	C _{2v}	a	2	8	12
Ma2b2c2de	1260	1224	36	34:1	A	C ₁	c	1	8	1224	B	C _s	a	1	8	36
Ma2b2c2(AA)	318	300	18	100:4:1	A	C ₁	c	1	16	300	B	C _s	a	1	16	12
					C	C _{2v}	a	2	8	6						
Ma2b2c2(AB)	630	612	18	34:1	A	C ₁	c	1	8	612	B	C _s	a	1	8	18
Ma2b2cdef	2520	2496	24	104:1	A	C ₁	c	1	4	2496	B	C _s	a	1	4	24
Ma2b2cd(AA)	630	612	18	34:1	A	C ₁	c	1	8	612	B	C _s	a	1	8	18
Ma2b2cd(AB)	1260	1248	12	104:1	A	C ₁	c	1	4	1248	B	C _s	a	1	4	12
Ma2b2(AA)2	93	86	7	45.3:6:2.7 :1	A	C ₁	c	1	32	68	B	C ₂	c	2	16	18
					C	C _s	a	1	32	4	D	C _{2v}	a	2	16	3
Ma2b2(AA)(BB)	166	158	8	158:6:1	A	C ₁	c	1	16	158	B	C _s	a	1	16	6
					C	C _{2v}	a	2	8	2						
Ma2b2(AA)(AB)	330	320	10	32:1	A	C ₁	c	1	8	320	B	C _s	a	1	8	10
Ma2b2(AB)2	350	340	10	152:9:3:1	A	C ₁	c	1	8	304	B	C ₂	c	2	4	36
					C	C _s	a	1	8	6	D	C _{2v}	a	2	4	4

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A24 (continuação).

TDD-8 Triangular dodecahedron

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2b2(AB)(CD)	660	652	8	81.5:1	A	C ₁	c	1	4	652	B	C _s	a	1	4	8
Ma2bcdefg	5040	5040	0	1	A	C ₁	c	1	2	5040						
Ma2bcde(AA)	1260	1248	12	104:1	A	C ₁	c	1	4	1248	B	C _s	a	1	4	12
Ma2bcde(AB)	2520	2520	0	1	A	C ₁	c	1	2	2520						
Ma2bc(AA)2	165	156	9	17.3:1	A	C ₁	c	1	16	156	B	C _s	a	1	16	9
Ma2bc(AA)(BB)	330	324	6	54:1	A	C ₁	c	1	8	324	B	C _s	a	1	8	6
Ma2bc(AA)(AB)	660	654	6	109:1	A	C ₁	c	1	4	654	B	C _s	a	1	4	6
Ma2bc(AB)2	660	648	12	54:1	A	C ₁	c	1	4	648	B	C _s	a	1	4	12
Ma2bc(AB)(CD)	1320	1320	0	1	A	C ₁	c	1	2	1320						
Ma2(AA)3	16	14	2	24:2:2:1	A	C ₁	c	1	96	12	B'	C ₂	c	2	48	2
					B''	C _s	a	1	96	1	C	C _{2v}	a	2	48	1
Ma2(AA)2(BB)	45	42	3	80:4:2:1	A	C ₁	c	1	32	40	B	C _s	a	1	32	2
					C	C ₂	c	2	16	2	D	C _{2v}	a	2	16	1
Ma2(AA)2(AB)	87	82	5	16.4:1	A	C ₁	c	1	16	82	B	C _s	a	1	16	5
Ma2(AA)(BB)(CC)	87	84	3	28:1	A	C ₁	c	1	16	84	B	C _s	a	1	16	3
Ma2(AA)(BB)(AB)	174	170	4	42.5:1	A	C ₁	c	1	8	170	B	C _s	a	1	8	4
Ma2(AA)(AB)2	177	172	5	168:3:2:1	A	C ₁	c	1	8	168	B	C _s	a	1	8	3
					C	C ₂	c	2	4	4	D	C _{2v}	a	2	4	2
Ma2(AA)(AB)(CD)	348	344	4	86:1	A	C ₁	c	1	4	344	B	C _s	a	1	4	4
Ma2(AB)3	116	110	6	18.3:1	A	C ₁	c	1	12	110	B	C _s	a	1	12	6
Ma2(AB)2(CD)	348	342	6	57:1	A	C ₁	c	1	4	342	B	C _s	a	1	4	6
Ma2(AB)(CD)(EF)	696	696	0	1	A	C ₁	c	1	2	696						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A24 (continuação).

TDD-8 Triangular dodecahedron

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Mabcdefgh	10080	10080	0	1	A	C ₁	c	1	1	10080						
Mabcdef(AA)	2520	2520	0	1	A	C ₁	c	1	2	2520						
Mabcdef(AB)	5040	5040	0	1	A	C ₁	c	1	1	5040						
Mabcd(AA)2	330	318	12	26.5:1	A	C ₁	c	1	8	318	B	C _s	a	1	8	12
Mabcd(AA)(BB)	660	660	0	1	A	C ₁	c	1	4	660						
Mabcd(AA)(AB)	1320	1320	0	1	A	C ₁	c	1	2	1320						
Mabcd(AB)2	1320	1296	24	54:1	A	C ₁	c	1	2	1296	B	C _s	a	1	2	24
Mabcd(AB)(CD)	2640	2640	0	1	A	C ₁	c	1	1	2640						
Mab(AA)3	29	26	3	8.7:1	A	C ₁	c	1	48	26	B	C _s	a	1	48	3
Mab(AA)2(BB)	87	84	3	28:1	A	C ₁	c	1	16	84	B	C _s	a	1	16	3
Mab(AA)2(AB)	174	168	6	28:1	A	C ₁	c	1	8	168	B	C _s	a	1	8	6
Mab(AA)(BB)(CC)	174	174	0	1	A	C ₁	c	1	8	174						
Mab(AA)(BB)(AB)	348	348	0	1	A	C ₁	c	1	4	348						
Mab(AA)(AB)2	348	342	6	57:1	A	C ₁	c	1	4	342	B	C _s	a	1	4	6
Mab(AA)(AB)(CD)	696	696	0	1	A	C ₁	c	1	2	696						
Mab(AB)3	232	220	12	18.3:1	A	C ₁	c	1	6	220	B	C _s	a	1	6	12
Mab(AB)2(CD)	696	684	12	57:1	A	C ₁	c	1	2	684	B	C _s	a	1	2	12
Mab(AB)(CD)(EF)	1392	1392	0	1	A	C ₁	c	1	1	1392						
M(AA)4	6	4	2	4:2:2:1	A	C ₂	c	2	192	2	B'	S ₄	c	2	192	1
					B''	D ₂	c	4	96	2	C	D _{2d}	a	4	96	1
M(AA)3(BB)	9	8	1	8:1	A	C ₁	c	1	96	8	B	C _s	a	1	96	1
M(AA)3(AB)	18	16	2	8:1	A	C ₁	c	1	48	16	B	C _s	a	1	48	2

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A24 (continuação).

TDD-8 Triangular dodecahedron

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
M(AA)2(BB)2	21	20	1	14:12:1	A	C ₂	c	2	32	14	B	C ₁	c	1	64	6
					C	C _{2v}	a	2	32	1						
M(AA)2(BB)(CC)	27	26	1	26:1	A	C ₁	c	1	32	26	B	C _s	a	1	32	1
M(AA)2(BB)(AB)	54	52	2	26:1	A	C ₁	c	1	16	52	B	C _s	a	1	16	2
M(AA)2(AB)2	69	66	3	38:14:1:1	A	C ₁	c	1	16	38	B	C ₂	c	2	8	28
					C'	C _s	a	1	16	1	C''	C _{2v}	a	2	8	2
M(AA)2(AB)(CD)	108	104	4	26:1	A	C ₁	c	1	8	104	B	C _s	a	1	8	4
M(AA)(BB)(CC)(DD)	54	54	0	1	A	C ₁	c	1	16	54						
M(AA)(BB)(CC)(AB)	108	108	0	1	A	C ₁	c	1	8	108						
M(AA)(BB)(AB)2	108	106	2	53:1	A	C ₁	c	1	8	106	B	C _s	a	1	8	2
M(AA)(BB)(AB)(CD)	216	216	0	1	A	C ₁	c	1	4	216						
M(AA)(AB)3	72	68	4	17:1	A	C ₁	c	1	12	68	B	C _s	a	1	12	4
M(AA)(AB)2(CD)	216	212	4	53:1	A	C ₁	c	1	4	212	B	C _s	a	1	4	4
M(AA)(AB)(CD)(EF)	432	432	0	1	A	C ₁	c	1	2	432						
M(AB)4	51	44	7	44:18:4:2 :2:1:1	A	C ₁	c	1	24	22	B	C ₂	c	2	12	18
					C	C _s	a	1	24	2	D'	S ₄	c	2	12	2
					D''	D ₂	c	4	6	4	E'	C _{2v}	a	2	12	1
					E''	D _{2d}	a	4	6	2						
M(AB)3(CD)	144	136	8	17:1	A	C ₁	c	1	6	136	B	C _s	a	1	6	8
M(AB)2(CD)2	246	238	8	91:14:2:1	A	C ₁	c	1	4	182	B	C ₂	c	2	2	56
					C	C _s	a	1	4	4	D	C _{2v}	a	2	2	4
M(AB)2(CD)(EF)	432	424	8	53:1	A	C ₁	c	1	2	424	B	C _s	a	1	2	8
M(AB)(CD)(EF)(GH)	864	864	0	1	A	C ₁	c	1	1	864						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A25. CCU-9 Capped cube. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

CCU-9 Capped cube

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma9	1	0	1	1	A	C _{4v}	a	4	90720	1						
Ma8b	3	0	3	8:1	A	C _s	a	1	40320	2	B	C _{4v}	a	4	10080	1
Ma7b2	10	2	8	6:2:1	A	C _s	a	1	10080	6	B	C ₁	c	1	10080	2
					C	C _{2v}	a	2	5040	2						
Ma7bc	18	8	10	1.3:1	A	C _s	a	1	5040	10	B	C ₁	c	1	5040	8
Ma7(AA)	4	0	4	1	A	C _s	a	1	10080	4						
Ma7(AB)	8	4	4	1:1	A'	C ₁	c	1	5040	4	A''	C _s	a	1	5040	4
Ma6b3	22	10	12	10:10:1	A'	C ₁	c	1	4320	10	A''	C _s	a	1	4320	10
					B	C _{2v}	a	2	2160	2						
Ma6b2c	64	42	22	42:20:1	A	C ₁	c	1	1440	42	B	C _s	a	1	1440	20
					C	C _{2v}	a	2	720	2						
Ma6bcd	126	96	30	3.2:1	A	C ₁	c	1	720	96	B	C _s	a	1	720	30
Ma6b(AA)	28	20	8	2.5:1	A	C ₁	c	1	1440	20	B	C _s	a	1	1440	8
Ma6b(AB)	56	44	12	3.7:1	A	C ₁	c	1	720	44	B	C _s	a	1	720	12
Ma5b4	34	18	16	36:24:2:1	A	C ₁	c	1	2880	18	B	C _s	a	1	2880	12
					C	C _{2v}	a	2	1440	2	D	C _{4v}	a	4	720	2
Ma5b3c	126	96	30	3.2:1	A	C ₁	c	1	720	96	B	C _s	a	1	720	30
Ma5b2c2	192	150	42	50:12:1	A	C ₁	c	1	480	150	B	C _s	a	1	480	36
					C	C _{2v}	a	2	240	6						
Ma5b2cd	378	328	50	6.6:1	A	C ₁	c	1	240	328	B	C _s	a	1	240	50
Ma5b2(AA)	84	68	16	4.3:1	A	C ₁	c	1	480	68	B	C _s	a	1	480	16
Ma5b2(AB)	168	148	20	7.4:1	A	C ₁	c	1	240	148	B	C _s	a	1	240	20

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A25 (continuação).

CCU-9 Capped cube

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma5bcde	756	696	60	11.6:1	A	C ₁	c	1	120	696	B	C _s	a	1	120	60
Ma5bc(AA)	168	156	12	13:1	A	C ₁	c	1	240	156	B	C _s	a	1	240	12
Ma5bc(AB)	336	312	24	13:1	A	C ₁	c	1	120	312	B	C _s	a	1	120	24
Ma5(AA)2	21	14	7	9.3:2.7:1	A	C ₁	c	1	960	14	B	C _s	a	1	960	4
					C	C _{2v}	a	2	480	3						
Ma5(AA)(BB)	39	30	9	3.3:1	A	C ₁	c	1	480	30	B	C _s	a	1	480	9
Ma5(AA)(AB)	78	72	6	12:1	A	C ₁	c	1	240	72	B	C _s	a	1	240	6
Ma5(AB)2	81	70	11	66:9:2:1	A	C ₁	c	1	240	66	B	C _s	a	1	240	9
					C	C ₂	c	2	120	4	D	C _{2v}	a	2	120	2
Ma5(AB)(CD)	156	144	12	12:1	A	C ₁	c	1	120	144	B	C _s	a	1	120	12
Ma4b4c	160	122	38	244:68:2:1	A	C ₁	c	1	576	122	B	C _s	a	1	576	34
					C	C _{2v}	a	2	288	2	D	C _{4v}	a	4	144	2
Ma4b3c2	318	262	56	87.3:16.7:1	A	C ₁	c	1	288	262	B	C _s	a	1	288	50
					C	C _{2v}	a	2	144	6						
Ma4b3cd	630	560	70	8:1	A	C ₁	c	1	144	560	B	C _s	a	1	144	70
Ma4b3(AA)	140	120	20	6:1	A	C ₁	c	1	288	120	B	C _s	a	1	288	20
Ma4b3(AB)	280	252	28	9:1	A	C ₁	c	1	144	252	B	C _s	a	1	144	28
Ma4b2c2d	948	862	86	287.3:26.7:1	A	C ₁	c	1	96	862	B	C _s	a	1	96	80
					C	C _{2v}	a	2	48	6						
Ma4b2cde	1890	1800	90	20:1	A	C ₁	c	1	48	1800	B	C _s	a	1	48	90
Ma4b2c(AA)	420	396	24	16.5:1	A	C ₁	c	1	96	396	B	C _s	a	1	96	24
Ma4b2c(AB)	840	804	36	22.3:1	A	C ₁	c	1	48	804	B	C _s	a	1	48	36

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A25 (continuação).

CCU-9 Capped cube

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma4bcdef	3780	3720	60	62:1	A	C ₁	c	1	24	3720	B	C _s	a	1	24	60
Ma4bcd(AA)	840	828	12	69:1	A	C ₁	c	1	48	828	B	C _s	a	1	48	12
Ma4bcd(AB)	1680	1656	24	69:1	A	C ₁	c	1	24	1656	B	C _s	a	1	24	24
Ma4b(AA)2	99	90	9	60:4:1	A	C ₁	c	1	192	90	B	C _s	a	1	192	6
					C	C _{2v}	a	2	96	3						
Ma4b(AA)(BB)	195	186	9	20.7:1	A	C ₁	c	1	96	186	B	C _s	a	1	96	9
Ma4b(AA)(AB)	390	384	6	64:1	A	C ₁	c	1	48	384	B	C _s	a	1	48	6
Ma4b(AB)2	393	378	15	374:13:2:1	A	C ₁	c	1	48	374	B	C _s	a	1	48	13
					C	C ₂	c	2	24	4	D	C _{2v}	a	2	24	2
Ma4b(AB)(CD)	780	768	12	64:1	A	C ₁	c	1	24	768	B	C _s	a	1	24	12
Ma3b3c3	420	360	60	6:1	A	C ₁	c	1	216	360	B	C _s	a	1	216	60
Ma3b3c2d	1260	1160	100	11.6:1	A	C ₁	c	1	72	1160	B	C _s	a	1	72	100
Ma3b3cde	2520	2400	120	20:1	A	C ₁	c	1	36	2400	B	C _s	a	1	36	120
Ma3b3c(AA)	560	536	24	22.3:1	A	C ₁	c	1	72	536	B	C _s	a	1	72	24
Ma3b3c(AB)	1120	1072	48	22.3:1	A	C ₁	c	1	36	1072	B	C _s	a	1	36	48
Ma3b2c2d2	1896	1764	132	294:20:1	A	C ₁	c	1	48	1764	B	C _s	a	1	48	120
					C	C _{2v}	a	2	24	12						
Ma3b2c2de	3780	3640	140	26:1	A	C ₁	c	1	24	3640	B	C _s	a	1	24	140
Ma3b2c2(AA)	840	800	40	20:1	A	C ₁	c	1	48	800	B	C _s	a	1	48	40
Ma3b2c2(AB)	1680	1624	56	29:1	A	C ₁	c	1	24	1624	B	C _s	a	1	24	56
Ma3b2cdef	7560	7440	120	62:1	A	C ₁	c	1	12	7440	B	C _s	a	1	12	120
Ma3b2cd(AA)	1680	1656	24	69:1	A	C ₁	c	1	24	1656	B	C _s	a	1	24	24

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A25 (continuação).

CCU-9 Capped cube

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3b2cd(AB)	3360	3312	48	69:1	A	C ₁	c	1	12	3312	B	C _s	a	1	12	48
Ma3b2(AA)2	198	180	18	176:16:2:1	A	C ₁	c	1	96	176	B	C _s	a	1	96	16
					C	C ₂	c	2	48	4	D	C _{2v}	a	2	48	2
Ma3b2(AA)(BB)	390	372	18	20.7:1	A	C ₁	c	1	48	372	B	C _s	a	1	48	18
Ma3b2(AA)(AB)	780	768	12	64:1	A	C ₁	c	1	24	768	B	C _s	a	1	24	12
Ma3b2(AB)2	786	756	30	374:13:2:1	A	C ₁	c	1	24	748	B	C _s	a	1	24	26
					C	C ₂	c	2	12	8	D	C _{2v}	a	2	12	4
Ma3b2(AB)(CD)	1560	1536	24	64:1	A	C ₁	c	1	12	1536	B	C _s	a	1	12	24
Ma3bcdefg	15120	15120	0	1	A	C ₁	c	1	6	15120						
Ma3bcde(AA)	3360	3360	0	1	A	C ₁	c	1	12	3360						
Ma3bcde(AB)	6720	6720	0	1	A	C ₁	c	1	6	6720						
Ma3bc(AA)2	390	380	10	38:1	A	C ₁	c	1	48	380	B	C _s	a	1	48	10
Ma3bc(AA)(BB)	780	780	0	1	A	C ₁	c	1	24	780						
Ma3bc(AA)(AB)	1560	1560	0	1	A	C ₁	c	1	12	1560						
Ma3bc(AB)2	1560	1540	20	77:1	A	C ₁	c	1	12	1540	B	C _s	a	1	12	20
Ma3bc(AB)(CD)	3120	3120	0	1	A	C ₁	c	1	6	3120						
Ma3(AA)3	32	24	8	3:1	A	C ₁	c	1	288	24	B	C _s	a	1	288	8
Ma3(AA)2(BB)	96	84	12	7:1	A	C ₁	c	1	96	84	B	C _s	a	1	96	12
Ma3(AA)2(AB)	192	188	4	47:1	A	C ₁	c	1	48	188	B	C _s	a	1	48	4
Ma3(AA)(BB)(CC)	192	180	12	15:1	A	C ₁	c	1	48	180	B	C _s	a	1	48	12
Ma3(AA)(BB)(AB)	384	384	0	1	A	C ₁	c	1	24	384						
Ma3(AA)(AB)2	384	372	12	31:1	A	C ₁	c	1	24	372	B	C _s	a	1	24	12

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A25 (continuação).

CCU-9 Capped cube

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3(AA)(AB)(CD)	768	768	0	1	A	C ₁	c	1	12	768						
Ma3(AB)3	256	248	8	31:1	A	C ₁	c	1	36	248	B	C _s	a	1	36	8
Ma3(AB)2(CD)	768	760	8	95:1	A	C ₁	c	1	12	760	B	C _s	a	1	12	8
Ma3(AB)(CD)(EF)	1536	1536	0	1	A	C ₁	c	1	6	1536						
Ma2b2c2d2e	5676	5484	192	914:30:1	A	C ₁	c	1	16	5484	B	C _s	a	1	16	180
					C	C _{2v}	a	2	8	12						
Ma2b2c2def	11340	11160	180	62:1	A	C ₁	c	1	8	11160	B	C _s	a	1	8	180
Ma2b2c2d(AA)	2520	2472	48	51.5:1	A	C ₁	c	1	16	2472	B	C _s	a	1	16	48
Ma2b2c2d(AB)	5040	4968	72	69:1	A	C ₁	c	1	8	4968	B	C _s	a	1	8	72
Ma2b2cdefg	22680	22560	120	188:1	A	C ₁	c	1	4	22560	B	C _s	a	1	4	120
Ma2b2cde(AA)	5040	5016	24	209:1	A	C ₁	c	1	8	5016	B	C _s	a	1	8	24
Ma2b2cde(AB)	10080	10032	48	209:1	A	C ₁	c	1	4	10032	B	C _s	a	1	4	48
Ma2b2c(AA)2	588	560	28	556:26:2:1	A	C ₁	c	1	32	556	B	C _s	a	1	32	26
					C	C ₂	c	2	16	4	D	C _{2v}	a	2	16	2
Ma2b2c(AA)(BB)	1170	1152	18	64:1	A	C ₁	c	1	16	1152	B	C _s	a	1	16	18
Ma2b2c(AA)(AB)	2340	2328	12	194:1	A	C ₁	c	1	8	2328	B	C _s	a	1	8	12
Ma2b2c(AB)2	2346	2296	50	1144:23:2:1	A	C ₁	c	1	8	2288	B	C _s	a	1	8	46
					C	C ₂	c	2	4	8	D	C _{2v}	a	2	4	4
Ma2b2c(AB)(CD)	4680	4656	24	194:1	A	C ₁	c	1	4	4656	B	C _s	a	1	4	24
Ma2bcdefgh	45360	45360	0	1	A	C ₁	c	1	2	45360						
Ma2bcdef(AA)	10080	10080	0	1	A	C ₁	c	1	4	10080						
Ma2bcdef(AB)	20160	20160	0	1	A	C ₁	c	1	2	20160						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A25 (continuação).

CCU-9 Capped cube

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2bcd(AA)2	1170	1140	30	38:1	A	C ₁	c	1	16	1140	B	C _s	a	1	16	30
Ma2bcd(AA)(BB)	2340	2340	0	1	A	C ₁	c	1	8	2340						
Ma2bcd(AA)(AB)	4680	4680	0	1	A	C ₁	c	1	4	4680						
Ma2bcd(AB)2	4680	4620	60	77:1	A	C ₁	c	1	4	4620	B	C _s	a	1	4	60
Ma2bcd(AB)(CD)	9360	9360	0	1	A	C ₁	c	1	2	9360						
Ma2b(AA)3	96	84	12	7:1	A	C ₁	c	1	96	84	B	C _s	a	1	96	12
Ma2b(AA)2(BB)	288	272	16	17:1	A	C ₁	c	1	32	272	B	C _s	a	1	32	16
Ma2b(AA)2(AB)	576	564	12	47:1	A	C ₁	c	1	16	564	B	C _s	a	1	16	12
Ma2b(AA)(BB)(CC)	576	564	12	47:1	A	C ₁	c	1	16	564	B	C _s	a	1	16	12
Ma2b(AA)(BB)(AB)	1152	1152	0	1	A	C ₁	c	1	8	1152						
Ma2b(AA)(AB)2	1152	1132	20	56.6:1	A	C ₁	c	1	8	1132	B	C _s	a	1	8	20
Ma2b(AA)(AB)(CD)	2304	2304	0	1	A	C ₁	c	1	4	2304						
Ma2b(AB)3	768	744	24	31:1	A	C ₁	c	1	12	744	B	C _s	a	1	12	24
Ma2b(AB)2(CD)	2304	2280	24	95:1	A	C ₁	c	1	4	2280	B	C _s	a	1	4	24
Ma2b(AB)(CD)(EF)	4608	4608	0	1	A	C ₁	c	1	2	4608						
Mabcdefghi	90720	90720	0	1	A	C ₁	c	1	1	90720						
Mabcdefg(AA)	20160	20160	0	1	A	C ₁	c	1	2	20160						
Mabcdefg(AB)	40320	40320	0	1	A	C ₁	c	1	1	40320						
Mabcde(AA)2	2340	2280	60	38:1	A	C ₁	c	1	8	2280	B	C _s	a	1	8	60
Mabcde(AA)(BB)	4680	4680	0	1	A	C ₁	c	1	4	4680						
Mabcde(AA)(AB)	9360	9360	0	1	A	C ₁	c	1	2	9360						
Mabcde(AB)2	9360	9240	120	77:1	A	C ₁	c	1	2	9240	B	C _s	a	1	2	120

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A25 (continuação).

CCU-9 Capped cube

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Mabcde(AB)(CD)	18720	18720	0	1	A	C ₁	c	1	1	18720						
Mabc(AA)3	192	180	12	15:1	A	C ₁	c	1	48	180	B	C _s	a	1	48	12
Mabc(AA)2(BB)	576	564	12	47:1	A	C ₁	c	1	16	564	B	C _s	a	1	16	12
Mabc(AA)2(AB)	1152	1128	24	47:1	A	C ₁	c	1	8	1128	B	C _s	a	1	8	24
Mabc(AA)(BB)(CC)	1152	1152	0	1	A	C ₁	c	1	8	1152						
Mabc(AA)(BB)(AB)	2304	2304	0	1	A	C ₁	c	1	4	2304						
Mabc(AA)(AB)2	2304	2280	24	95:1	A	C ₁	c	1	4	2280	B	C _s	a	1	4	24
Mabc(AA)(AB)(CD)	4608	4608	0	1	A	C ₁	c	1	2	4608						
Mabc(AB)3	1536	1488	48	31:1	A	C ₁	c	1	6	1488	B	C _s	a	1	6	48
Mabc(AB)2(CD)	4608	4560	48	95:1	A	C ₁	c	1	2	4560	B	C _s	a	1	2	48
Mabc(AB)(CD)(EF)	9216	9216	0	1	A	C ₁	c	1	1	9216						
Ma(AA)4	15	10	5	40:8:4:1	A	C ₁	c	1	384	10	B	C _s	a	1	384	2
					C	C _{2v}	a	2	192	2	D	C _{4v}	a	4	96	1
Ma(AA)3(BB)	53	44	9	4.9:1	A	C ₁	c	1	96	44	B	C _s	a	1	96	9
Ma(AA)3(AB)	106	100	6	16.7:1	A	C ₁	c	1	48	100	B	C _s	a	1	48	6
Ma(AA)2(BB)2	82	70	12	28:2.8:1	A	C ₁	c	1	64	70	B	C _s	a	1	64	7
					C	C _{2v}	a	2	32	5						
Ma(AA)2(BB)(CC)	159	146	13	11.2:1	A	C ₁	c	1	32	146	B	C _s	a	1	32	13
Ma(AA)2(BB)(AB)	318	312	6	52:1	A	C ₁	c	1	16	312	B	C _s	a	1	16	6
Ma(AA)2(AB)2	323	306	17	298:15:4:1	A	C ₁	c	1	16	298	B	C _s	a	1	16	15
					C	C ₂	c	2	8	8	D	C _{2v}	a	2	8	2
Ma(AA)2(AB)(CD)	636	624	12	52:1	A	C ₁	c	1	8	624	B	C _s	a	1	8	12

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A25 (continuação).

CCU-9 Capped cube

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma(AA)(BB)(CC)(DD)	318	306	12	25.5:1	A	C ₁	c	1	16	306	B	C _s	a	1	16	12
Ma(AA)(BB)(CC)(AB)	636	636	0	1	A	C ₁	c	1	8	636						
Ma(AA)(BB)(AB)2	636	622	14	44.4:1	A	C ₁	c	1	8	622	B	C _s	a	1	8	14
Ma(AA)(BB)(AB)(CD)	1272	1272	0	1	A	C ₁	c	1	4	1272						
Ma(AA)(AB)3	424	412	12	34.3:1	A	C ₁	c	1	12	412	B	C _s	a	1	12	12
Ma(AA)(AB)2(CD)	1272	1260	12	105:1	A	C ₁	c	1	4	1260	B	C _s	a	1	4	12
Ma(AA)(AB)(CD)(EF)	2544	2544	0	1	A	C ₁	c	1	2	2544						
Ma(AB)4	218	202	16	388:26:8:1 :1	A	C ₁	c	1	24	194	B	C _s	a	1	24	13
					C	C ₂	c	2	12	8	D'	C _{2v}	a	2	12	1
					D''	C _{4v}	a	4	6	2						
Ma(AB)3(CD)	848	824	24	34.3:1	A	C ₁	c	1	6	824	B	C _s	a	1	6	24
Ma(AB)2(CD)2	1282	1250	32	617:14:4:1	A	C ₁	c	1	4	1234	B	C _s	a	1	4	28
					C	C ₂	c	2	2	16	D	C _{2v}	a	2	2	4
Ma(AB)2(CD)(EF)	2544	2520	24	105:1	A	C ₁	c	1	2	2520	B	C _s	a	1	2	24
Ma(AB)(CD)(EF)(GH)	5088	5088	0	1	A	C ₁	c	1	1	5088						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A26. CSAPR-9 Capped square antiprism. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

CSAPR-9 Capped square antiprism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma9	1	0	1	1	A	C _{4v}	a	4	90720	1						
Ma8b	3	0	3	8:1	A	C _s	a	1	40320	2	B	C _{4v}	a	4	10080	1
Ma7b2	10	4	6	4:4:1	A'	C ₁	c	1	10080	4	A''	C _s	a	1	10080	4
					B	C _{2v}	a	2	5040	2						
Ma7bc	18	12	6	2:1	A	C ₁	c	1	5040	12	B	C _s	a	1	5040	6
Ma7(AA)	5	2	3	1.5:1	A	C _s	a	1	10080	3	B	C ₁	c	1	10080	2
Ma7(AB)	10	8	2	4:1	A	C ₁	c	1	5040	8	B	C _s	a	1	5040	2
Ma6b3	22	12	10	12:8:1	A	C ₁	c	1	4320	12	B	C _s	a	1	4320	8
					C	C _{2v}	a	2	2160	2						
Ma6b2c	64	52	12	52:10:1	A	C ₁	c	1	1440	52	B	C _s	a	1	1440	10
					C	C _{2v}	a	2	720	2						
Ma6bcd	126	120	6	20:1	A	C ₁	c	1	720	120	B	C _s	a	1	720	6
Ma6b(AA)	35	28	7	4:1	A	C ₁	c	1	1440	28	B	C _s	a	1	1440	7
Ma6b(AB)	70	68	2	34:1	A	C ₁	c	1	720	68	B	C _s	a	1	720	2
Ma5b4	34	22	12	40:20:2:1	A	C ₁	c	1	2880	20	B	C _s	a	1	2880	10
					C	C ₂	c	2	1440	2	D	C _{4v}	a	4	720	2
Ma5b3c	126	108	18	6:1	A	C ₁	c	1	720	108	B	C _s	a	1	720	18
Ma5b2c2	192	168	24	164:22:2:1	A	C ₁	c	1	480	164	B	C _s	a	1	480	22
					C	C ₂	c	2	240	4	D	C _{2v}	a	2	240	2
Ma5b2cd	378	360	18	20:1	A	C ₁	c	1	240	360	B	C _s	a	1	240	18
Ma5b2(AA)	105	92	13	7.1:1	A	C ₁	c	1	480	92	B	C _s	a	1	480	13
Ma5b2(AB)	210	204	6	34:1	A	C ₁	c	1	240	204	B	C _s	a	1	240	6

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A26 (continuação).

CSAPR-9 Capped square antiprism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma5bcde	756	756	0	1	A	C ₁	c	1	120	756						
Ma5bc(AA)	210	198	12	16.5:1	A	C ₁	c	1	240	198	B	C _s	a	1	240	12
Ma5bc(AB)	420	420	0	1	A	C ₁	c	1	120	420						
Ma5(AA)2	32	26	6	24:4:1:1	A	C ₁	c	1	960	24	B	C _s	a	1	960	4
					C'	C ₂	c	2	480	2	C''	C _{2v}	a	2	480	2
Ma5(AA)(BB)	60	54	6	9:1	A	C ₁	c	1	480	54	B	C _s	a	1	480	6
Ma5(AA)(AB)	120	116	4	29:1	A	C ₁	c	1	240	116	B	C _s	a	1	240	4
Ma5(AB)2	124	118	6	27.5:1.5:1	A	C ₁	c	1	240	110	B	C _s	a	1	240	6
					C	C ₂	c	2	120	8						
Ma5(AB)(CD)	240	240	0	1	A	C ₁	c	1	120	240						
Ma4b4c	160	142	18	280:32:2:1	A	C ₁	c	1	576	140	B	C _s	a	1	576	16
					C	C ₂	c	2	288	2	D	C _{4v}	a	4	144	2
Ma4b3c2	318	288	30	284:28:2:1	A	C ₁	c	1	288	284	B	C _s	a	1	288	28
					C	C ₂	c	2	144	4	D	C _{2v}	a	2	144	2
Ma4b3cd	630	612	18	34:1	A	C ₁	c	1	144	612	B	C _s	a	1	144	18
Ma4b3(AA)	175	158	17	9.3:1	A	C ₁	c	1	288	158	B	C _s	a	1	288	17
Ma4b3(AB)	350	344	6	57.3:1	A	C ₁	c	1	144	344	B	C _s	a	1	144	6
Ma4b2c2d	948	912	36	908:34:2:1	A	C ₁	c	1	96	908	B	C _s	a	1	96	34
					C	C ₂	c	2	48	4	D	C _{2v}	a	2	48	2
Ma4b2cde	1890	1872	18	104:1	A	C ₁	c	1	48	1872	B	C _s	a	1	48	18
Ma4b2c(AA)	525	504	21	24:1	A	C ₁	c	1	96	504	B	C _s	a	1	96	21
Ma4b2c(AB)	1050	1044	6	174:1	A	C ₁	c	1	48	1044	B	C _s	a	1	48	6

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A26 (continuação).

CSAPR-9 Capped square antiprism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma4bcdef	3780	3780	0	1	A	C ₁	c	1	24	3780						
Ma4bcd(AA)	1050	1038	12	86.5:1	A	C ₁	c	1	48	1038	B	C _s	a	1	48	12
Ma4bcd(AB)	2100	2100	0	1	A	C ₁	c	1	24	2100						
Ma4b(AA)2	152	138	14	136:12:1:1	A	C ₁	c	1	192	136	B	C _s	a	1	192	12
					C'	C ₂	c	2	96	2	C''	C _{2v}	a	2	96	2
Ma4b(AA)(BB)	300	290	10	29:1	A	C ₁	c	1	96	290	B	C _s	a	1	96	10
Ma4b(AA)(AB)	600	596	4	149:1	A	C ₁	c	1	48	596	B	C _s	a	1	48	4
Ma4b(AB)2	604	586	18	144.5:4.5:1	A	C ₁	c	1	48	578	B	C _s	a	1	48	18
					C	C ₂	c	2	24	8						
Ma4b(AB)(CD)	1200	1200	0	1	A	C ₁	c	1	24	1200						
Ma3b3c3	420	384	36	10.7:1	A	C ₁	c	1	216	384	B	C _s	a	1	216	36
Ma3b3c2d	1260	1224	36	34:1	A	C ₁	c	1	72	1224	B	C _s	a	1	72	36
Ma3b3cde	2520	2520	0	1	A	C ₁	c	1	36	2520						
Ma3b3c(AA)	700	676	24	28.2:1	A	C ₁	c	1	72	676	B	C _s	a	1	72	24
Ma3b3c(AB)	1400	1400	0	1	A	C ₁	c	1	36	1400						
Ma3b2c2d2	1896	1836	60	304:10:1	A	C ₁	c	1	48	1824	B	C _s	a	1	48	60
					C	C ₂	c	2	24	12						
Ma3b2c2de	3780	3744	36	104:1	A	C ₁	c	1	24	3744	B	C _s	a	1	24	36
Ma3b2c2(AA)	1050	1016	34	29.9:1	A	C ₁	c	1	48	1016	B	C _s	a	1	48	34
Ma3b2c2(AB)	2100	2088	12	174:1	A	C ₁	c	1	24	2088	B	C _s	a	1	24	12
Ma3b2cdef	7560	7560	0	1	A	C ₁	c	1	12	7560						
Ma3b2cd(AA)	2100	2076	24	86.5:1	A	C ₁	c	1	24	2076	B	C _s	a	1	24	24

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A26 (continuação).

CSAPR-9 Capped square antiprism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3b2cd(AB)	4200	4200	0	1	A	C ₁	c	1	12	4200						
Ma3b2(AA)2	304	284	20	140:8:1:1	A	C ₁	c	1	96	280	B	C _s	a	1	96	16
					C'	C ₂	c	2	48	4	C''	C _{2v}	a	2	48	4
Ma3b2(AA)(BB)	600	584	16	36.5:1	A	C ₁	c	1	48	584	B	C _s	a	1	48	16
Ma3b2(AA)(AB)	1200	1192	8	149:1	A	C ₁	c	1	24	1192	B	C _s	a	1	24	8
Ma3b2(AB)2	1208	1184	24	146:3:1	A	C ₁	c	1	24	1168	B	C _s	a	1	24	24
					C	C ₂	c	2	12	16						
Ma3b2(AB)(CD)	2400	2400	0	1	A	C ₁	c	1	12	2400						
Ma3bcdefg	15120	15120	0	1	A	C ₁	c	1	6	15120						
Ma3bcde(AA)	4200	4200	0	1	A	C ₁	c	1	12	4200						
Ma3bcde(AB)	8400	8400	0	1	A	C ₁	c	1	6	8400						
Ma3bc(AA)2	600	576	24	24:1	A	C ₁	c	1	48	576	B	C _s	a	1	48	24
Ma3bc(AA)(BB)	1200	1188	12	99:1	A	C ₁	c	1	24	1188	B	C _s	a	1	24	12
Ma3bc(AA)(AB)	2400	2400	0	1	A	C ₁	c	1	12	2400						
Ma3bc(AB)2	2400	2364	36	65.7:1	A	C ₁	c	1	12	2364	B	C _s	a	1	12	36
Ma3bc(AB)(CD)	4800	4800	0	1	A	C ₁	c	1	6	4800						
Ma3(AA)3	58	52	6	8.7:1	A	C ₁	c	1	288	52	B	C _s	a	1	288	6
Ma3(AA)2(BB)	174	166	8	20.8:1	A	C ₁	c	1	96	166	B	C _s	a	1	96	8
Ma3(AA)2(AB)	348	340	8	42.5:1	A	C ₁	c	1	48	340	B	C _s	a	1	48	8
Ma3(AA)(BB)(CC)	348	342	6	57:1	A	C ₁	c	1	48	342	B	C _s	a	1	48	6
Ma3(AA)(BB)(AB)	696	692	4	173:1	A	C ₁	c	1	24	692	B	C _s	a	1	24	4
Ma3(AA)(AB)2	696	686	10	68.6:1	A	C ₁	c	1	24	686	B	C _s	a	1	24	10

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A26 (continuação).

CSAPR-9 Capped square antiprism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3(AA)(AB)(CD)	1392	1392	0	1	A	C ₁	c	1	12	1392						
Ma3(AB)3	464	452	12	37.7:1	A	C ₁	c	1	36	452	B	C _s	a	1	36	12
Ma3(AB)2(CD)	1392	1380	12	115:1	A	C ₁	c	1	12	1380	B	C _s	a	1	12	12
Ma3(AB)(CD)(EF)	2784	2784	0	1	A	C ₁	c	1	6	2784						
Ma2b2c2d2e	5676	5604	72	932:12:1	A	C ₁	c	1	16	5592	B	C _s	a	1	16	72
					C	C ₂	c	2	8	12						
Ma2b2c2def	11340	11304	36	314:1	A	C ₁	c	1	8	11304	B	C _s	a	1	8	36
Ma2b2c2d(AA)	3150	3108	42	74:1	A	C ₁	c	1	16	3108	B	C _s	a	1	16	42
Ma2b2c2d(AB)	6300	6288	12	524:1	A	C ₁	c	1	8	6288	B	C _s	a	1	8	12
Ma2b2cdefg	22680	22680	0	1	A	C ₁	c	1	4	22680						
Ma2b2cde(AA)	6300	6276	24	261.5:1	A	C ₁	c	1	8	6276	B	C _s	a	1	8	24
Ma2b2cde(AB)	12600	12600	0	1	A	C ₁	c	1	4	12600						
Ma2b2c(AA)2	904	876	28	436:12:1:1	A	C ₁	c	1	32	872	B	C _s	a	1	32	24
					C'	C ₂	c	2	16	4	C''	C _{2v}	a	2	16	4
Ma2b2c(AA)(BB)	1800	1780	20	89:1	A	C ₁	c	1	16	1780	B	C _s	a	1	16	20
Ma2b2c(AA)(AB)	3600	3592	8	449:1	A	C ₁	c	1	8	3592	B	C _s	a	1	8	8
Ma2b2c(AB)2	3608	3572	36	444.5:4.5:1	A	C ₁	c	1	8	3556	B	C _s	a	1	8	36
					C	C ₂	c	2	4	16						
Ma2b2c(AB)(CD)	7200	7200	0	1	A	C ₁	c	1	4	7200						
Ma2bcdefgh	45360	45360	0	1	A	C ₁	c	1	2	45360						
Ma2bcdef(AA)	12600	12600	0	1	A	C ₁	c	1	4	12600						
Ma2bcdef(AB)	25200	25200	0	1	A	C ₁	c	1	2	25200						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A26 (continuação).

CSAPR-9 Capped square antiprism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2bcd(AA)2	1800	1776	24	74:1	A	C ₁	c	1	16	1776	B	C _s	a	1	16	24
Ma2bcd(AA)(BB)	3600	3588	12	299:1	A	C ₁	c	1	8	3588	B	C _s	a	1	8	12
Ma2bcd(AA)(AB)	7200	7200	0	1	A	C ₁	c	1	4	7200						
Ma2bcd(AB)2	7200	7164	36	199:1	A	C ₁	c	1	4	7164	B	C _s	a	1	4	36
Ma2bcd(AB)(CD)	14400	14400	0	1	A	C ₁	c	1	2	14400						
Ma2b(AA)3	174	164	10	16.4:1	A	C ₁	c	1	96	164	B	C _s	a	1	96	10
Ma2b(AA)2(BB)	522	510	12	42.5:1	A	C ₁	c	1	32	510	B	C _s	a	1	32	12
Ma2b(AA)2(AB)	1044	1036	8	129.5:1	A	C ₁	c	1	16	1036	B	C _s	a	1	16	8
Ma2b(AA)(BB)(CC)	1044	1038	6	173:1	A	C ₁	c	1	16	1038	B	C _s	a	1	16	6
Ma2b(AA)(BB)(AB)	2088	2084	4	521:1	A	C ₁	c	1	8	2084	B	C _s	a	1	8	4
Ma2b(AA)(AB)2	2088	2070	18	115:1	A	C ₁	c	1	8	2070	B	C _s	a	1	8	18
Ma2b(AA)(AB)(CD)	4176	4176	0	1	A	C ₁	c	1	4	4176						
Ma2b(AB)3	1392	1380	12	115:1	A	C ₁	c	1	12	1380	B	C _s	a	1	12	12
Ma2b(AB)2(CD)	4176	4164	12	347:1	A	C ₁	c	1	4	4164	B	C _s	a	1	4	12
Ma2b(AB)(CD)(EF)	8352	8352	0	1	A	C ₁	c	1	2	8352						
Mabcdefghi	90720	90720	0	1	A	C ₁	c	1	1	90720						
Mabcdefg(AA)	25200	25200	0	1	A	C ₁	c	1	2	25200						
Mabcdefg(AB)	50400	50400	0	1	A	C ₁	c	1	1	50400						
Mabcde(AA)2	3600	3600	0	1	A	C ₁	c	1	8	3600						
Mabcde(AA)(BB)	7200	7200	0	1	A	C ₁	c	1	4	7200						
Mabcde(AA)(AB)	14400	14400	0	1	A	C ₁	c	1	2	14400						
Mabcde(AB)2	14400	14400	0	1	A	C ₁	c	1	2	14400						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A26 (continuação).

CSAPR-9 Capped square antiprism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Mabcde(AB)(CD)	28800	28800	0	1	A	C ₁	c	1	1	28800						
Mabc(AA)3	348	336	12	28:1	A	C ₁	c	1	48	336	B	C _s	a	1	48	12
Mabc(AA)2(BB)	1044	1032	12	86:1	A	C ₁	c	1	16	1032	B	C _s	a	1	16	12
Mabc(AA)2(AB)	2088	2088	0	1	A	C ₁	c	1	8	2088						
Mabc(AA)(BB)(CC)	2088	2088	0	1	A	C ₁	c	1	8	2088						
Mabc(AA)(BB)(AB)	4176	4176	0	1	A	C ₁	c	1	4	4176						
Mabc(AA)(AB)2	4176	4152	24	173:1	A	C ₁	c	1	4	4152	B	C _s	a	1	4	24
Mabc(AA)(AB)(CD)	8352	8352	0	1	A	C ₁	c	1	2	8352						
Mabc(AB)3	2784	2784	0	1	A	C ₁	c	1	6	2784						
Mabc(AB)2(CD)	8352	8352	0	1	A	C ₁	c	1	2	8352						
Mabc(AB)(CD)(EF)	16704	16704	0	1	A	C ₁	c	1	1	16704						
Ma(AA)4	28	26	2	44:4:2:1	A	C ₁	c	1	384	22	B	C _s	a	1	384	2
					C	C ₂	c	2	192	2	D	C ₄	c	4	96	2
Ma(AA)3(BB)	102	98	4	24.5:1	A	C ₁	c	1	96	98	B	C _s	a	1	96	4
Ma(AA)3(AB)	204	200	4	50:1	A	C ₁	c	1	48	200	B	C _s	a	1	48	4
Ma(AA)2(BB)2	156	152	4	48.7:1.3:1	A	C ₁	c	1	64	146	B	C _s	a	1	64	4
					C	C ₂	c	2	32	6						
Ma(AA)2(BB)(CC)	306	302	4	75.5:1	A	C ₁	c	1	32	302	B	C _s	a	1	32	4
Ma(AA)2(BB)(AB)	612	608	4	152:1	A	C ₁	c	1	16	608	B	C _s	a	1	16	4
Ma(AA)2(AB)2	618	614	4	150.5:1.5:1	A	C ₁	c	1	16	602	B	C ₂	c	2	8	12
					C	C _s	a	1	16	4						
Ma(AA)2(AB)(CD)	1224	1224	0	1	A	C ₁	c	1	8	1224						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A26 (continuação).

CSAPR-9 Capped square antiprism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma(AA)(BB)(CC)(DD)	612	612	0	1	A	C ₁	c	1	16	612						
Ma(AA)(BB)(CC)(AB)	1224	1224	0	1	A	C ₁	c	1	8	1224						
Ma(AA)(BB)(AB)2	1224	1216	8	152:1	A	C ₁	c	1	8	1216	B	C _s	a	1	8	8
Ma(AA)(BB)(AB)(CD)	2448	2448	0	1	A	C ₁	c	1	4	2448						
Ma(AA)(AB)3	816	808	8	101:1	A	C ₁	c	1	12	808	B	C _s	a	1	12	8
Ma(AA)(AB)2(CD)	2448	2440	8	305:1	A	C ₁	c	1	4	2440	B	C _s	a	1	4	8
Ma(AA)(AB)(CD)(EF)	4896	4896	0	1	A	C ₁	c	1	2	4896						
Ma(AB)4	416	416	0	402:5:1	A	C ₁	c	1	24	402	B	C ₂	c	2	12	10
					C	C ₄	c	4	6	4						
Ma(AB)3(CD)	1632	1632	0	1	A	C ₁	c	1	6	1632						
Ma(AB)2(CD)2	2460	2460	0	203:1	A	C ₁	c	1	4	2436	B	C ₂	c	2	2	24
Ma(AB)2(CD)(EF)	4896	4896	0	1	A	C ₁	c	1	2	4896						
Ma(AB)(CD)(EF)(GH)	9792	9792	0	1	A	C ₁	c	1	1	9792						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A27. EP-9 Enneagon. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

EP-9 Enneagon

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma9	1	0	1	1	A	D _{9h}	a	18	20160	1						
Ma8b	1	0	1	1	A	C _{2v}	a	2	20160	1						
Ma7b2	4	0	4	1	A	C _{2v}	a	2	5040	4						
Ma7bc	4	0	4	1	A	C _s	a	1	5040	4						
Ma7(AA)	2	0	2	1	A	C _{2v}	a	2	5040	2						
Ma7(AB)	2	0	2	1	A	C _s	a	1	5040	2						
Ma6b3	7	0	7	18:9:1	A	C _s	a	1	4320	3	B	C _{2v}	a	2	2160	3
					C	D _{3h}	a	6	720	1						
Ma6b2c	16	0	16	6:1	A	C _s	a	1	1440	12	B	C _{2v}	a	2	720	4
Ma6bcd	28	0	28	1	A	C _s	a	1	720	28						
Ma6b(AA)	8	0	8	6:1	A	C _s	a	1	1440	6	B	C _{2v}	a	2	720	2
Ma6b(AB)	14	0	14	1	A	C _s	a	1	720	14						
Ma5b4	10	0	10	1.3:1	A	C _s	a	1	2880	4	B	C _{2v}	a	2	1440	6
Ma5b3c	28	0	28	1	A	C _s	a	1	720	28						
Ma5b2c2	48	0	48	6:1	A	C _s	a	1	480	36	B	C _{2v}	a	2	240	12
Ma5b2cd	84	0	84	1	A	C _s	a	1	240	84						
Ma5b2(AA)	24	0	24	6:1	A	C _s	a	1	480	18	B	C _{2v}	a	2	240	6
Ma5b2(AB)	42	0	42	1	A	C _s	a	1	240	42						
Ma5bcde	168	0	168	1	A	C _s	a	1	120	168						
Ma5bc(AA)	42	0	42	1	A	C _s	a	1	240	42						
Ma5bc(AB)	84	0	84	1	A	C _s	a	1	120	84						
Ma5(AA)2	9	0	9	1.8:1	A	C _{2v}	a	2	480	7	B	C _s	a	1	960	2

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A27 (continuação).

EP-9 Enneagon

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma5(AA)(BB)	12	0	12	10:1	A	C _s	a	1	480	10	B	C _{2v}	a	2	240	2
Ma5(AA)(AB)	22	0	22	1	A	C _s	a	1	240	22						
Ma5(AB)2	28	0	28	2.7:1	A	C _s	a	1	240	16	B	C _{2v}	a	2	120	12
Ma5(AB)(CD)	44	0	44	1	A	C _s	a	1	120	44						
Ma4b4c	38	0	38	10.7:1	A	C _s	a	1	576	32	B	C _{2v}	a	2	288	6
Ma4b3c2	76	0	76	10.7:1	A	C _s	a	1	288	64	B	C _{2v}	a	2	144	12
Ma4b3cd	140	0	140	1	A	C _s	a	1	144	140						
Ma4b3(AA)	38	0	38	10.7:1	A	C _s	a	1	288	32	B	C _{2v}	a	2	144	6
Ma4b3(AB)	70	0	70	1	A	C _s	a	1	144	70						
Ma4b2c2d	216	0	216	34:1	A	C _s	a	1	96	204	B	C _{2v}	a	2	48	12
Ma4b2cde	420	0	420	1	A	C _s	a	1	48	420						
Ma4b2c(AA)	108	0	108	34:1	A	C _s	a	1	96	102	B	C _{2v}	a	2	48	6
Ma4b2c(AB)	210	0	210	1	A	C _s	a	1	48	210						
Ma4bcdef	840	0	840	1	A	C _s	a	1	24	840						
Ma4bcd(AA)	210	0	210	1	A	C _s	a	1	48	210						
Ma4bcd(AB)	420	0	420	1	A	C _s	a	1	24	420						
Ma4b(AA)2	31	0	31	6.9:1	A	C _s	a	1	192	24	B	C _{2v}	a	2	96	7
Ma4b(AA)(BB)	56	0	56	54:1	A	C _s	a	1	96	54	B	C _{2v}	a	2	48	2
Ma4b(AA)(AB)	110	0	110	1	A	C _s	a	1	48	110						
Ma4b(AB)2	116	0	116	17.3:1	A	C _s	a	1	48	104	B	C _{2v}	a	2	24	12
Ma4b(AB)(CD)	220	0	220	1	A	C _s	a	1	24	220						
Ma3b3c3	94	0	94	279:1	A	C _s	a	1	216	93	B	C _{3h}	a	3	72	1

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A27 (continuação).

EP-9 Enneagon

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3b3c2d	280	0	280	1	A	C _s	a	1	72	280						
Ma3b3cde	560	0	560	1	A	C _s	a	1	36	560						
Ma3b3c(AA)	140	0	140	1	A	C _s	a	1	72	140						
Ma3b3c(AB)	280	0	280	1	A	C _s	a	1	36	280						
Ma3b2c2d2	432	0	432	34:1	A	C _s	a	1	48	408	B	C _{2v}	a	2	24	24
Ma3b2c2de	840	0	840	1	A	C _s	a	1	24	840						
Ma3b2c2(AA)	216	0	216	34:1	A	C _s	a	1	48	204	B	C _{2v}	a	2	24	12
Ma3b2c2(AB)	420	0	420	1	A	C _s	a	1	24	420						
Ma3b2cdef	1680	0	1680	1	A	C _s	a	1	12	1680						
Ma3b2cd(AA)	420	0	420	1	A	C _s	a	1	24	420						
Ma3b2cd(AB)	840	0	840	1	A	C _s	a	1	12	840						
Ma3b2(AA)2	62	0	62	6.9:1	A	C _s	a	1	96	48	B	C _{2v}	a	2	48	14
Ma3b2(AA)(BB)	112	0	112	54:1	A	C _s	a	1	48	108	B	C _{2v}	a	2	24	4
Ma3b2(AA)(AB)	220	0	220	1	A	C _s	a	1	24	220						
Ma3b2(AB)2	232	0	232	17.3:1	A	C _s	a	1	24	208	B	C _{2v}	a	2	12	24
Ma3b2(AB)(CD)	440	0	440	1	A	C _s	a	1	12	440						
Ma3bcdefg	3360	0	3360	1	A	C _s	a	1	6	3360						
Ma3bcde(AA)	840	0	840	1	A	C _s	a	1	12	840						
Ma3bcde(AB)	1680	0	1680	1	A	C _s	a	1	6	1680						
Ma3bc(AA)2	110	0	110	1	A	C _s	a	1	48	110						
Ma3bc(AA)(BB)	220	0	220	1	A	C _s	a	1	24	220						
Ma3bc(AA)(AB)	440	0	440	1	A	C _s	a	1	12	440						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A27 (continuação).

EP-9 Enneagon

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3bc(AB)2	440	0	440	1	A	C _s	a	1	12	440						
Ma3bc(AB)(CD)	880	0	880	1	A	C _s	a	1	6	880						
Ma3(AA)3	14	0	14	21:7.5:1	A	C _s	a	1	288	7	B	C _{2v}	a	2	144	5
					C	D _{3h}	a	6	48	2						
Ma3(AA)2(BB)	33	0	33	7.4:1	A	C _s	a	1	96	26	B	C _{2v}	a	2	48	7
Ma3(AA)2(AB)	59	0	59	1	A	C _s	a	1	48	59						
Ma3(AA)(BB)(CC)	59	0	59	1	A	C _s	a	1	48	59						
Ma3(AA)(BB)(AB)	118	0	118	1	A	C _s	a	1	24	118						
Ma3(AA)(AB)2	125	0	125	15.9:1	A	C _s	a	1	24	111	B	C _{2v}	a	2	12	14
Ma3(AA)(AB)(CD)	236	0	236	1	A	C _s	a	1	12	236						
Ma3(AB)3	80	0	80	117:1	A	C _s	a	1	36	78	B	C _{3h}	a	3	12	2
Ma3(AB)2(CD)	236	0	236	1	A	C _s	a	1	12	236						
Ma3(AB)(CD)(EF)	472	0	472	1	A	C _s	a	1	6	472						
Ma2b2c2d2e	1272	0	1272	104:1	A	C _s	a	1	16	1248	B	C _{2v}	a	2	8	24
Ma2b2c2def	2520	0	2520	1	A	C _s	a	1	8	2520						
Ma2b2c2d(AA)	636	0	636	104:1	A	C _s	a	1	16	624	B	C _{2v}	a	2	8	12
Ma2b2c2d(AB)	1260	0	1260	1	A	C _s	a	1	8	1260						
Ma2b2cdefg	5040	0	5040	1	A	C _s	a	1	4	5040						
Ma2b2cde(AA)	1260	0	1260	1	A	C _s	a	1	8	1260						
Ma2b2cde(AB)	2520	0	2520	1	A	C _s	a	1	4	2520						
Ma2b2c(AA)2	172	0	172	22.6:1	A	C _s	a	1	32	158	B	C _{2v}	a	2	16	14
Ma2b2c(AA)(BB)	332	0	332	164:1	A	C _s	a	1	16	328	B	C _{2v}	a	2	8	4

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A27 (continuação).

EP-9 Enneagon

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2b2c(AA)(AB)	660	0	660	1	A	C _s	a	1	8	660						
Ma2b2c(AB)2	672	0	672	54:1	A	C _s	a	1	8	648	B	C _{2v}	a	2	4	24
Ma2b2c(AB)(CD)	1320	0	1320	1	A	C _s	a	1	4	1320						
Ma2bcdefgh	10080	0	10080	1	A	C _s	a	1	2	10080						
Ma2bcdef(AA)	2520	0	2520	1	A	C _s	a	1	4	2520						
Ma2bcdef(AB)	5040	0	5040	1	A	C _s	a	1	2	5040						
Ma2bcd(AA)2	330	0	330	1	A	C _s	a	1	16	330						
Ma2bcd(AA)(BB)	660	0	660	1	A	C _s	a	1	8	660						
Ma2bcd(AA)(AB)	1320	0	1320	1	A	C _s	a	1	4	1320						
Ma2bcd(AB)2	1320	0	1320	1	A	C _s	a	1	4	1320						
Ma2bcd(AB)(CD)	2640	0	2640	1	A	C _s	a	1	2	2640						
Ma2b(AA)3	33	0	33	7.4:1	A	C _s	a	1	96	26	B	C _{2v}	a	2	48	7
Ma2b(AA)2(BB)	92	0	92	24.3:1	A	C _s	a	1	32	85	B	C _{2v}	a	2	16	7
Ma2b(AA)2(AB)	177	0	177	1	A	C _s	a	1	16	177						
Ma2b(AA)(BB)(CC)	177	0	177	1	A	C _s	a	1	16	177						
Ma2b(AA)(BB)(AB)	354	0	354	1	A	C _s	a	1	8	354						
Ma2b(AA)(AB)2	361	0	361	49.6:1	A	C _s	a	1	8	347	B	C _{2v}	a	2	4	14
Ma2b(AA)(AB)(CD)	708	0	708	1	A	C _s	a	1	4	708						
Ma2b(AB)3	236	0	236	1	A	C _s	a	1	12	236						
Ma2b(AB)2(CD)	708	0	708	1	A	C _s	a	1	4	708						
Ma2b(AB)(CD)(EF)	1416	0	1416	1	A	C _s	a	1	2	1416						
Mabcdefghi	20160	0	20160	1	A	C _s	a	1	1	20160						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A27 (continuação).

EP-9 Enneagon

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Mabcdefg(AA)	5040	0	5040	1	A	C _s	a	1	2	5040						
Mabcdefg(AB)	10080	0	10080	1	A	C _s	a	1	1	10080						
Mabcde(AA)2	660	0	660	1	A	C _s	a	1	8	660						
Mabcde(AA)(BB)	1320	0	1320	1	A	C _s	a	1	4	1320						
Mabcde(AA)(AB)	2640	0	2640	1	A	C _s	a	1	2	2640						
Mabcde(AB)2	2640	0	2640	1	A	C _s	a	1	2	2640						
Mabcde(AB)(CD)	5280	0	5280	1	A	C _s	a	1	1	5280						
Mabc(AA)3	59	0	59	1	A	C _s	a	1	48	59						
Mabc(AA)2(BB)	177	0	177	1	A	C _s	a	1	16	177						
Mabc(AA)2(AB)	354	0	354	1	A	C _s	a	1	8	354						
Mabc(AA)(BB)(CC)	354	0	354	1	A	C _s	a	1	8	354						
Mabc(AA)(BB)(AB)	708	0	708	1	A	C _s	a	1	4	708						
Mabc(AA)(AB)2	708	0	708	1	A	C _s	a	1	4	708						
Mabc(AA)(AB)(CD)	1416	0	1416	1	A	C _s	a	1	2	1416						
Mabc(AB)3	472	0	472	1	A	C _s	a	1	6	472						
Mabc(AB)2(CD)	1416	0	1416	1	A	C _s	a	1	2	1416						
Mabc(AB)(CD)(EF)	2832	0	2832	1	A	C _s	a	1	1	2832						
Ma(AA)4	6	0	6	1:1	A'	C _s	a	1	384	2	A''	C _{2v}	a	2	192	4
Ma(AA)3(BB)	17	0	17	15:1	A	C _s	a	1	96	15	B	C _{2v}	a	2	48	2
Ma(AA)3(AB)	32	0	32	1	A	C _s	a	1	48	32						
Ma(AA)2(BB)2	28	0	28	5:1	A	C _s	a	1	64	20	B	C _{2v}	a	2	32	8
Ma(AA)2(BB)(CC)	49	0	49	47:1	A	C _s	a	1	32	47	B	C _{2v}	a	2	16	2

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A27 (continuação).

EP-9 Enneagon

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma(AA)2(BB)(AB)	96	0	96	1	A	C _s	a	1	16	96						
Ma(AA)2(AB)2	103	0	103	12.7:1	A	C _s	a	1	16	89	B	C _{2v}	a	2	8	14
Ma(AA)2(AB)(CD)	192	0	192	1	A	C _s	a	1	8	192						
Ma(AA)(BB)(CC)(DD)	96	0	96	1	A	C _s	a	1	16	96						
Ma(AA)(BB)(CC)(AB)	192	0	192	1	A	C _s	a	1	8	192						
Ma(AA)(BB)(AB)2	194	0	194	95:1	A	C _s	a	1	8	190	B	C _{2v}	a	2	4	4
Ma(AA)(BB)(AB)(CD)	384	0	384	1	A	C _s	a	1	4	384						
Ma(AA)(AB)3	128	0	128	1	A	C _s	a	1	12	128						
Ma(AA)(AB)2(CD)	384	0	384	1	A	C _s	a	1	4	384						
Ma(AA)(AB)(CD)(EF)	768	0	768	1	A	C _s	a	1	2	768						
Ma(AB)4	70	0	70	9.7:1	A	C _s	a	1	24	58	B	C _{2v}	a	2	12	12
Ma(AB)3(CD)	256	0	256	1	A	C _s	a	1	6	256						
Ma(AB)2(CD)2	396	0	396	31:1	A	C _s	a	1	4	372	B	C _{2v}	a	2	2	24
Ma(AB)2(CD)(EF)	768	0	768	1	A	C _s	a	1	2	768						
Ma(AB)(CD)(EF)(GH)	1536	0	1536	1	A	C _s	a	1	1	1536						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A28. HBPY-9 Heptagonal bipyramid. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

HBPY-9 Heptagonal bipyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma9	1	0	1	1	A	D _{7h}	a	14	25920	1						
Ma8b	2	0	2	3.5:1	A	C _{2v}	a	2	20160	1	B	C _{7v}	a	7	5760	1
Ma7b2	5	0	5	21:14:1	A	C _{2v}	a	2	5040	3	B	C _s	a	1	10080	1
					C	D _{7h}	a	14	720	1						
Ma7bc	6	0	6	35:1	A	C _s	a	1	5040	5	B	C _{7v}	a	7	720	1
Ma7(AA)	2	0	2	2:1	A	C _s	a	1	10080	1	B	C _{2v}	a	2	5040	1
Ma7(AB)	3	0	3	1	A	C _s	a	1	5040	3						
Ma6b3	8	0	8	2:1	A	C _s	a	1	4320	4	B	C _{2v}	a	2	2160	4
Ma6b2c	20	6	14	5:3:1	A	C _s	a	1	1440	10	B	C ₁	c	1	1440	6
					C	C _{2v}	a	2	720	4						
Ma6bcd	36	18	18	1:1	A'	C ₁	c	1	720	18	A''	C _s	a	1	720	18
Ma6b(AA)	11	6	5	12:8:1	A	C ₁	c	1	1440	6	B	C _s	a	1	1440	4
					C	C _{2v}	a	2	720	1						
Ma6b(AB)	21	14	7	2:1	A	C ₁	c	1	720	14	B	C _s	a	1	720	7
Ma5b4	12	2	10	2:1.5:1	A	C _s	a	1	2880	4	B	C _{2v}	a	2	1440	6
					C	C ₁	c	1	2880	2						
Ma5b3c	36	14	22	1.6:1	A	C _s	a	1	720	22	B	C ₁	c	1	720	14
Ma5b2c2	60	30	30	5:3:1	A	C ₁	c	1	480	30	B	C _s	a	1	480	18
					C	C _{2v}	a	2	240	12						
Ma5b2cd	108	66	42	1.6:1	A	C ₁	c	1	240	66	B	C _s	a	1	240	42
Ma5b2(AA)	33	22	11	14.7:5.3:1	A	C ₁	c	1	480	22	B	C _s	a	1	480	8
					C	C _{2v}	a	2	240	3						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A28 (continuação).

HBPY-9 Heptagonal bipyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma5b2(AB)	63	46	17	2.7:1	A	C ₁	c	1	240	46	B	C _s	a	1	240	17
Ma5bcde	216	156	60	2.6:1	A	C ₁	c	1	120	156	B	C _s	a	1	120	60
Ma5bc(AA)	63	50	13	3.8:1	A	C ₁	c	1	240	50	B	C _s	a	1	240	13
Ma5bc(AB)	126	106	20	5.3:1	A	C ₁	c	1	120	106	B	C _s	a	1	120	20
Ma5(AA)2	13	10	3	4:3:1:1	A	C ₁	c	1	960	4	B	C ₂	c	2	480	6
					C'	C _s	a	1	960	1	C''	C _{2v}	a	2	480	2
Ma5(AA)(BB)	18	14	4	3.5:1	A	C ₁	c	1	480	14	B	C _s	a	1	480	4
Ma5(AA)(AB)	36	30	6	5:1	A	C ₁	c	1	240	30	B	C _s	a	1	240	6
Ma5(AB)2	44	38	6	13:3:1:1	A	C ₁	c	1	240	26	B	C ₂	c	2	120	12
					C'	C _s	a	1	240	2	C''	C _{2v}	a	2	120	4
Ma5(AB)(CD)	72	64	8	8:1	A	C ₁	c	1	120	64	B	C _s	a	1	120	8
Ma4b4c	48	24	24	8:6:1	A	C ₁	c	1	576	24	B	C _s	a	1	576	18
					C	C _{2v}	a	2	288	6						
Ma4b3c2	96	56	40	9.3:4.7:1	A	C ₁	c	1	288	56	B	C _s	a	1	288	28
					C	C _{2v}	a	2	144	12						
Ma4b3cd	180	126	54	2.3:1	A	C ₁	c	1	144	126	B	C _s	a	1	144	54
Ma4b3(AA)	54	40	14	26.7:7.3:1	A	C ₁	c	1	288	40	B	C _s	a	1	288	11
					C	C _{2v}	a	2	144	3						
Ma4b3(AB)	105	84	21	4:1	A	C ₁	c	1	144	84	B	C _s	a	1	144	21
Ma4b2c2d	276	198	78	33:11:1	A	C ₁	c	1	96	198	B	C _s	a	1	96	66
					C	C _{2v}	a	2	48	12						
Ma4b2cde	540	426	114	3.7:1	A	C ₁	c	1	48	426	B	C _s	a	1	48	114

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A28 (continuação).

HBPY-9 Heptagonal bipyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma4b2c(AA)	159	134	25	89.3:14.7 :1	A	C ₁	c	1	96	134	B	C _s	a	1	96	22
					C	C _{2v}	a	2	48	3						
Ma4b2c(AB)	315	274	41	6.7:1	A	C ₁	c	1	48	274	B	C _s	a	1	48	41
Ma4bcdef	1080	900	180	5:1	A	C ₁	c	1	24	900	B	C _s	a	1	24	180
Ma4bcd(AA)	315	282	33	8.5:1	A	C ₁	c	1	48	282	B	C _s	a	1	48	33
Ma4bcd(AB)	630	570	60	9.5:1	A	C ₁	c	1	24	570	B	C _s	a	1	24	60
Ma4b(AA)2	49	42	7	36:5:3:1	A	C ₁	c	1	192	36	B	C _s	a	1	192	5
					C	C ₂	c	2	96	6	D	C _{2v}	a	2	96	2
Ma4b(AA)(BB)	90	82	8	10.3:1	A	C ₁	c	1	96	82	B	C _s	a	1	96	8
Ma4b(AA)(AB)	180	166	14	11.9:1	A	C ₁	c	1	48	166	B	C _s	a	1	48	14
Ma4b(AB)2	188	170	18	79:7:3:1	A	C ₁	c	1	48	158	B	C _s	a	1	48	14
					C	C ₂	c	2	24	12	D	C _{2v}	a	2	24	4
Ma4b(AB)(CD)	360	336	24	14:1	A	C ₁	c	1	24	336	B	C _s	a	1	24	24
Ma3b3c3	120	72	48	1.5:1	A	C ₁	c	1	216	72	B	C _s	a	1	216	48
Ma3b3c2d	360	272	88	3.1:1	A	C ₁	c	1	72	272	B	C _s	a	1	72	88
Ma3b3cde	720	600	120	5:1	A	C ₁	c	1	36	600	B	C _s	a	1	36	120
Ma3b3c(AA)	210	184	26	7.1:1	A	C ₁	c	1	72	184	B	C _s	a	1	72	26
Ma3b3c(AB)	420	380	40	9.5:1	A	C ₁	c	1	36	380	B	C _s	a	1	36	40
Ma3b2c2d2	552	432	120	36:8:1	A	C ₁	c	1	48	432	B	C _s	a	1	48	96
					C	C _{2v}	a	2	24	24						
Ma3b2c2de	1080	912	168	5.4:1	A	C ₁	c	1	24	912	B	C _s	a	1	24	168

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A28 (continuação).

HBPY-9 Heptagonal bipyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3b2c2(AA)	318	280	38	93.3:10.7 :1	A	C ₁	c	1	48	280	B	C _s	a	1	48	32
					C	C _{2v}	a	2	24	6						
Ma3b2c2(AB)	630	568	62	9.2:1	A	C ₁	c	1	24	568	B	C _s	a	1	24	62
Ma3b2cdef	2160	1920	240	8:1	A	C ₁	c	1	12	1920	B	C _s	a	1	12	240
Ma3b2cd(AA)	630	584	46	12.7:1	A	C ₁	c	1	24	584	B	C _s	a	1	24	46
Ma3b2cd(AB)	1260	1180	80	14.8:1	A	C ₁	c	1	12	1180	B	C _s	a	1	12	80
Ma3b2(AA)2	98	88	10	38:3:3:1	A	C ₁	c	1	96	76	B'	C ₂	c	2	48	12
					B''	C _s	a	1	96	6	C	C _{2v}	a	2	48	4
Ma3b2(AA)(BB)	180	168	12	14:1	A	C ₁	c	1	48	168	B	C _s	a	1	48	12
Ma3b2(AA)(AB)	360	340	20	17:1	A	C ₁	c	1	24	340	B	C _s	a	1	24	20
Ma3b2(AB)2	376	352	24	82:4:3:1	A	C ₁	c	1	24	328	B	C _s	a	1	24	16
					C	C ₂	c	2	12	24	D	C _{2v}	a	2	12	8
Ma3b2(AB)(CD)	720	688	32	21.5:1	A	C ₁	c	1	12	688	B	C _s	a	1	12	32
Ma3bcdefg	4320	3960	360	11:1	A	C ₁	c	1	6	3960	B	C _s	a	1	6	360
Ma3bcde(AA)	1260	1200	60	20:1	A	C ₁	c	1	12	1200	B	C _s	a	1	12	60
Ma3bcde(AB)	2520	2400	120	20:1	A	C ₁	c	1	6	2400	B	C _s	a	1	6	120
Ma3bc(AA)2	180	168	12	14:1	A	C ₁	c	1	48	168	B	C _s	a	1	48	12
Ma3bc(AA)(BB)	360	348	12	29:1	A	C ₁	c	1	24	348	B	C _s	a	1	24	12
Ma3bc(AA)(AB)	720	696	24	29:1	A	C ₁	c	1	12	696	B	C _s	a	1	12	24
Ma3bc(AB)2	720	684	36	19:1	A	C ₁	c	1	12	684	B	C _s	a	1	12	36
Ma3bc(AB)(CD)	1440	1392	48	29:1	A	C ₁	c	1	6	1392	B	C _s	a	1	6	48

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A28 (continuação).

HBPY-9 Heptagonal bipyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3(AA)3	19	16	3	24:4:4:1	A	C ₁	c	1	288	12	B'	C ₂	c	2	144	4
					B''	C _s	a	1	288	2	C	C _{2v}	a	2	144	1
Ma3(AA)2(BB)	52	48	4	88:6:4:1	A	C ₁	c	1	96	44	B	C _s	a	1	96	3
					C	C ₂	c	2	48	4	D	C _{2v}	a	2	48	1
Ma3(AA)2(AB)	99	92	7	13.1:1	A	C ₁	c	1	48	92	B	C _s	a	1	48	7
Ma3(AA)(BB)(CC)	99	96	3	32:1	A	C ₁	c	1	48	96	B	C _s	a	1	48	3
Ma3(AA)(BB)(AB)	198	192	6	32:1	A	C ₁	c	1	24	192	B	C _s	a	1	24	6
Ma3(AA)(AB)2	203	192	11	184:9:4:1	A	C ₁	c	1	24	184	B	C _s	a	1	24	9
					C	C ₂	c	2	12	8	D	C _{2v}	a	2	12	2
Ma3(AA)(AB)(CD)	396	384	12	32:1	A	C ₁	c	1	12	384	B	C _s	a	1	12	12
Ma3(AB)3	132	120	12	10:1	A	C ₁	c	1	36	120	B	C _s	a	1	36	12
Ma3(AB)2(CD)	396	376	20	18.8:1	A	C ₁	c	1	12	376	B	C _s	a	1	12	20
Ma3(AB)(CD)(EF)	792	768	24	32:1	A	C ₁	c	1	6	768	B	C _s	a	1	6	24
Ma2b2c2d2e	1632	1416	216	118:16:1	A	C ₁	c	1	16	1416	B	C _s	a	1	16	192
					C	C _{2v}	a	2	8	24						
Ma2b2c2def	3240	2952	288	10.3:1	A	C ₁	c	1	8	2952	B	C _s	a	1	8	288
Ma2b2c2d(AA)	948	888	60	296:18:1	A	C ₁	c	1	16	888	B	C _s	a	1	16	54
					C	C _{2v}	a	2	8	6						
Ma2b2c2d(AB)	1890	1788	102	17.5:1	A	C ₁	c	1	8	1788	B	C _s	a	1	8	102
Ma2b2cdefg	6480	6120	360	17:1	A	C ₁	c	1	4	6120	B	C _s	a	1	4	360
Ma2b2cde(AA)	1890	1824	66	27.6:1	A	C ₁	c	1	8	1824	B	C _s	a	1	8	66
Ma2b2cde(AB)	3780	3660	120	30.5:1	A	C ₁	c	1	4	3660	B	C _s	a	1	4	120

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A28 (continuação).

HBPY-9 Heptagonal bipyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2b2c(AA)2	278	264	14	126:5:3:1	A	C ₁	c	1	32	252	B	C _s	a	1	32	10
					C	C ₂	c	2	16	12	D	C _{2v}	a	2	16	4
Ma2b2c(AA)(BB)	540	524	16	32.8:1	A	C ₁	c	1	16	524	B	C _s	a	1	16	16
Ma2b2c(AA)(AB)	1080	1052	28	37.6:1	A	C ₁	c	1	8	1052	B	C _s	a	1	8	28
Ma2b2c(AB)2	1096	1060	36	259:7:3:1	A	C ₁	c	1	8	1036	B	C _s	a	1	8	28
					C	C ₂	c	2	4	24	D	C _{2v}	a	2	4	8
Ma2b2c(AB)(CD)	2160	2112	48	44:1	A	C ₁	c	1	4	2112	B	C _s	a	1	4	48
Ma2bcdefgh	12960	12600	360	35:1	A	C ₁	c	1	2	12600	B	C _s	a	1	2	360
Ma2bcdef(AA)	3780	3720	60	62:1	A	C ₁	c	1	4	3720	B	C _s	a	1	4	60
Ma2bcdef(AB)	7560	7440	120	62:1	A	C ₁	c	1	2	7440	B	C _s	a	1	2	120
Ma2bcd(AA)2	540	528	12	44:1	A	C ₁	c	1	16	528	B	C _s	a	1	16	12
Ma2bcd(AA)(BB)	1080	1068	12	89:1	A	C ₁	c	1	8	1068	B	C _s	a	1	8	12
Ma2bcd(AA)(AB)	2160	2136	24	89:1	A	C ₁	c	1	4	2136	B	C _s	a	1	4	24
Ma2bcd(AB)2	2160	2124	36	59:1	A	C ₁	c	1	4	2124	B	C _s	a	1	4	36
Ma2bcd(AB)(CD)	4320	4272	48	89:1	A	C ₁	c	1	2	4272	B	C _s	a	1	2	48
Ma2b(AA)3	52	48	4	88:6:4:1	A	C ₁	c	1	96	44	B	C _s	a	1	96	3
					C	C ₂	c	2	48	4	D	C _{2v}	a	2	48	1
Ma2b(AA)2(BB)	151	146	5	284:8:4:1	A	C ₁	c	1	32	142	B	C _s	a	1	32	4
					C	C ₂	c	2	16	4	D	C _{2v}	a	2	16	1
Ma2b(AA)2(AB)	297	290	7	41.4:1	A	C ₁	c	1	16	290	B	C _s	a	1	16	7
Ma2b(AA)(BB)(CC)	297	294	3	98:1	A	C ₁	c	1	16	294	B	C _s	a	1	16	3
Ma2b(AA)(BB)(AB)	594	588	6	98:1	A	C ₁	c	1	8	588	B	C _s	a	1	8	6

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A28 (continuação).

HBPY-9 Heptagonal bipyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2b(AA)(AB)2	599	586	13	578:11:4:1	A	C ₁	c	1	8	578	B	C _s	a	1	8	11
					C	C ₂	c	2	4	8	D	C _{2v}	a	2	4	2
Ma2b(AA)(AB)(CD)	1188	1176	12	98:1	A	C ₁	c	1	4	1176	B	C _s	a	1	4	12
Ma2b(AB)3	396	384	12	32:1	A	C ₁	c	1	12	384	B	C _s	a	1	12	12
Ma2b(AB)2(CD)	1188	1168	20	58.4:1	A	C ₁	c	1	4	1168	B	C _s	a	1	4	20
Ma2b(AB)(CD)(EF)	2376	2352	24	98:1	A	C ₁	c	1	2	2352	B	C _s	a	1	2	24
Mabcdefghi	25920	25920	0	1	A	C ₁	c	1	1	25920						
Mabcdefg(AA)	7560	7560	0	1	A	C ₁	c	1	2	7560						
Mabcdefg(AB)	15120	15120	0	1	A	C ₁	c	1	1	15120						
Mabcde(AA)2	1080	1080	0	1	A	C ₁	c	1	8	1080						
Mabcde(AA)(BB)	2160	2160	0	1	A	C ₁	c	1	4	2160						
Mabcde(AA)(AB)	4320	4320	0	1	A	C ₁	c	1	2	4320						
Mabcde(AB)2	4320	4320	0	1	A	C ₁	c	1	2	4320						
Mabcde(AB)(CD)	8640	8640	0	1	A	C ₁	c	1	1	8640						
Mabc(AA)3	99	96	3	32:1	A	C ₁	c	1	48	96	B	C _s	a	1	48	3
Mabc(AA)2(BB)	297	294	3	98:1	A	C ₁	c	1	16	294	B	C _s	a	1	16	3
Mabc(AA)2(AB)	594	594	0	1	A	C ₁	c	1	8	594						
Mabc(AA)(BB)(CC)	594	594	0	1	A	C ₁	c	1	8	594						
Mabc(AA)(BB)(AB)	1188	1188	0	1	A	C ₁	c	1	4	1188						
Mabc(AA)(AB)2	1188	1182	6	197:1	A	C ₁	c	1	4	1182	B	C _s	a	1	4	6
Mabc(AA)(AB)(CD)	2376	2376	0	1	A	C ₁	c	1	2	2376						
Mabc(AB)3	792	792	0	1	A	C ₁	c	1	6	792						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A28 (continuação).

HBPY-9 Heptagonal bipyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Mabc(AB)2(CD)	2376	2376	0	1	A	C ₁	c	1	2	2376						
Mabc(AB)(CD)(EF)	4752	4752	0	1	A	C ₁	c	1	1	4752						
Ma(AA)4	9	8	1	4:2:1	A	C ₁	c	1	384	4	B	C ₂	c	2	192	4
					C	C _s	a	1	384	1						
Ma(AA)3(BB)	28	26	2	13:1	A	C ₁	c	1	96	26	B	C _s	a	1	96	2
Ma(AA)3(AB)	56	54	2	27:1	A	C ₁	c	1	48	54	B	C _s	a	1	48	2
Ma(AA)2(BB)2	46	44	2	18:2:1	A	C ₁	c	1	64	36	B	C ₂	c	2	32	8
					C	C _s	a	1	64	2						
Ma(AA)2(BB)(CC)	84	82	2	41:1	A	C ₁	c	1	32	82	B	C _s	a	1	32	2
Ma(AA)2(BB)(AB)	168	166	2	83:1	A	C ₁	c	1	16	166	B	C _s	a	1	16	2
Ma(AA)2(AB)2	176	174	2	79:4:1	A	C ₁	c	1	16	158	B	C ₂	c	2	8	16
					C	C _s	a	1	16	2						
Ma(AA)2(AB)(CD)	336	336	0	1	A	C ₁	c	1	8	336						
Ma(AA)(BB)(CC)(DD)	168	168	0	1	A	C ₁	c	1	16	168						
Ma(AA)(BB)(CC)(AB)	336	336	0	1	A	C ₁	c	1	8	336						
Ma(AA)(BB)(AB)2	336	332	4	83:1	A	C ₁	c	1	8	332	B	C _s	a	1	8	4
Ma(AA)(BB)(AB)(CD)	672	672	0	1	A	C ₁	c	1	4	672						
Ma(AA)(AB)3	224	220	4	55:1	A	C ₁	c	1	12	220	B	C _s	a	1	12	4
Ma(AA)(AB)2(CD)	672	668	4	167:1	A	C ₁	c	1	4	668	B	C _s	a	1	4	4
Ma(AA)(AB)(CD)(EF)	1344	1344	0	1	A	C ₁	c	1	2	1344						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A28 (continuação).

HBPY-9 Heptagonal bipyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma(AB)4	120	120	0	13:1	A	C ₁	c	1	24	104	B	C ₂	c	2	12	16
Ma(AB)3(CD)	448	448	0	1	A	C ₁	c	1	6	448						
Ma(AB)2(CD)2	688	688	0	41:1	A	C ₁	c	1	4	656	B	C ₂	c	2	2	32
Ma(AB)2(CD)(EF)	1344	1344	0	1	A	C ₁	c	1	2	1344						
Ma(AB)(CD)(EF)(GH)	2688	2688	0	1	A	C ₁	c	1	1	2688						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A29. HH-9 Hula-hoop. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

HH-9 Hula-hoop

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma9	1	0	1	1	A	C _{2v}	a	2	181440	1						
Ma8b	5	2	3	4:4:1	A'	C ₁	c	1	40320	2	A''	C _s	a	1	40320	2
					B	C _{2v}	a	2	20160	1						
Ma7b2	20	12	8	10:6:1:1	A	C ₁	c	1	10080	10	B	C _s	a	1	10080	6
					C'	C ₂	c	2	5040	2	C''	C _{2v}	a	2	5040	2
Ma7bc	36	26	10	2.6:1	A	C ₁	c	1	5040	26	B	C _s	a	1	5040	10
Ma7(AA)	10	6	4	12:6:1	A	C ₁	c	1	10080	6	B	C _s	a	1	10080	3
					C	C _{2v}	a	2	5040	1						
Ma7(AB)	19	14	5	2.8:1	A	C ₁	c	1	5040	14	B	C _s	a	1	5040	5
Ma6b3	44	32	12	30:10:1:1	A	C ₁	c	1	4320	30	B	C _s	a	1	4320	10
					C'	C ₂	c	2	2160	2	C''	C _{2v}	a	2	2160	2
Ma6b2c	128	106	22	104:20:1:1	A	C ₁	c	1	1440	104	B	C _s	a	1	1440	20
					C'	C ₂	c	2	720	2	C''	C _{2v}	a	2	720	2
Ma6bcd	252	222	30	7.4:1	A	C ₁	c	1	720	222	B	C _s	a	1	720	30
Ma6b(AA)	67	58	9	116:16:1	A	C ₁	c	1	1440	58	B	C _s	a	1	1440	8
					C	C _{2v}	a	2	720	1						
Ma6b(AB)	133	118	15	7.9:1	A	C ₁	c	1	720	118	B	C _s	a	1	720	15
Ma5b4	66	50	16	46:14:2:1	A	C ₁	c	1	2880	46	B	C _s	a	1	2880	14
					C	C ₂	c	2	1440	4	D	C _{2v}	a	2	1440	2
Ma5b3c	252	222	30	7.4:1	A	C ₁	c	1	720	222	B	C _s	a	1	720	30
Ma5b2c2	384	342	42	332:40:5:1	A	C ₁	c	1	480	332	B	C _s	a	1	480	40
					C	C ₂	c	2	240	10	D	C _{2v}	a	2	240	2

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A29 (continuação).

HH-9 Hula-hoop

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma5b2cd	756	706	50	14.1:1	A	C ₁	c	1	240	706	B	C _s	a	1	240	50
Ma5b2(AA)	201	184	17	364:32:2:1	A	C ₁	c	1	480	182	B	C _s	a	1	480	16
					C	C ₂	c	2	240	2	D	C _{2v}	a	2	240	1
Ma5b2(AB)	399	374	25	15.0:1	A	C ₁	c	1	240	374	B	C _s	a	1	240	25
Ma5bcde	1512	1452	60	24.2:1	A	C ₁	c	1	120	1452	B	C _s	a	1	120	60
Ma5bc(AA)	399	384	15	25.6:1	A	C ₁	c	1	240	384	B	C _s	a	1	240	15
Ma5bc(AB)	798	768	30	25.6:1	A	C ₁	c	1	120	768	B	C _s	a	1	120	30
Ma5(AA)2	57	50	7	46:5:2:1	A	C ₁	c	1	960	46	B	C _s	a	1	960	5
					C	C ₂	c	2	480	4	D	C _{2v}	a	2	480	2
Ma5(AA)(BB)	108	100	8	12.5:1	A	C ₁	c	1	480	100	B	C _s	a	1	480	8
Ma5(AA)(AB)	216	206	10	20.6:1	A	C ₁	c	1	240	206	B	C _s	a	1	240	10
Ma5(AB)2	222	206	16	196:14:5:1	A	C ₁	c	1	240	196	B	C _s	a	1	240	14
					C	C ₂	c	2	120	10	D	C _{2v}	a	2	120	2
Ma5(AB)(CD)	432	412	20	20.6:1	A	C ₁	c	1	120	412	B	C _s	a	1	120	20
Ma4b4c	318	280	38	276:36:2:1	A	C ₁	c	1	576	276	B	C _s	a	1	576	36
					C	C ₂	c	2	288	4	D	C _{2v}	a	2	288	2
Ma4b3c2	636	580	56	570:54:5:1	A	C ₁	c	1	288	570	B	C _s	a	1	288	54
					C	C ₂	c	2	144	10	D	C _{2v}	a	2	144	2
Ma4b3cd	1260	1190	70	17:1	A	C ₁	c	1	144	1190	B	C _s	a	1	144	70
Ma4b3(AA)	334	312	22	620:42:2:1	A	C ₁	c	1	288	310	B	C _s	a	1	288	21
					C	C ₂	c	2	144	2	D	C _{2v}	a	2	144	1
Ma4b3(AB)	665	630	35	18:1	A	C ₁	c	1	144	630	B	C _s	a	1	144	35

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A29 (continuação).

HH-9 Hula-hoop

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma4b2c2d	1896	1810	86	1800:84:5 :1	A	C ₁	c	1	96	1800	B	C _s	a	1	96	84
					C	C ₂	c	2	48	10	D	C _{2v}	a	2	48	2
Ma4b2cde	3780	3690	90	41:1	A	C ₁	c	1	48	3690	B	C _s	a	1	48	90
Ma4b2c(AA)	999	972	27	1940:52:2 :1	A	C ₁	c	1	96	970	B	C _s	a	1	96	26
					C	C ₂	c	2	48	2	D	C _{2v}	a	2	48	1
Ma4b2c(AB)	1995	1950	45	43.3:1	A	C ₁	c	1	48	1950	B	C _s	a	1	48	45
Ma4bcdef	7560	7500	60	125:1	A	C ₁	c	1	24	7500	B	C _s	a	1	24	60
Ma4bcd(AA)	1995	1980	15	132:1	A	C ₁	c	1	48	1980	B	C _s	a	1	48	15
Ma4bcd(AB)	3990	3960	30	132:1	A	C ₁	c	1	24	3960	B	C _s	a	1	24	30
Ma4b(AA)2	273	264	9	260:7:2:1	A	C ₁	c	1	192	260	B	C _s	a	1	192	7
					C	C ₂	c	2	96	4	D	C _{2v}	a	2	96	2
Ma4b(AA)(BB)	540	532	8	66.5:1	A	C ₁	c	1	96	532	B	C _s	a	1	96	8
Ma4b(AA)(AB)	1080	1070	10	107:1	A	C ₁	c	1	48	1070	B	C _s	a	1	48	10
Ma4b(AB)2	1086	1066	20	1056:18:5 :1	A	C ₁	c	1	48	1056	B	C _s	a	1	48	18
					C	C ₂	c	2	24	10	D	C _{2v}	a	2	24	2
Ma4b(AB)(CD)	2160	2140	20	107:1	A	C ₁	c	1	24	2140	B	C _s	a	1	24	20
Ma3b3c3	840	780	60	13:1	A	C ₁	c	1	216	780	B	C _s	a	1	216	60
Ma3b3c2d	2520	2420	100	24.2:1	A	C ₁	c	1	72	2420	B	C _s	a	1	72	100
Ma3b3cde	5040	4920	120	41:1	A	C ₁	c	1	36	4920	B	C _s	a	1	36	120
Ma3b3c(AA)	1330	1300	30	43.3:1	A	C ₁	c	1	72	1300	B	C _s	a	1	72	30
Ma3b3c(AB)	2660	2600	60	43.3:1	A	C ₁	c	1	36	2600	B	C _s	a	1	36	60

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A29 (continuação).

HH-9 Hula-hoop

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3b2c2d2	3792	3660	132	303:11:1	A	C ₁	c	1	48	3636	B	C _s	a	1	48	132
					C	C ₂	c	2	24	24						
Ma3b2c2de	7560	7420	140	53:1	A	C ₁	c	1	24	7420	B	C _s	a	1	24	140
Ma3b2c2(AA)	1998	1954	44	649.3:14.7 :1	A	C ₁	c	1	48	1948	B	C _s	a	1	48	44
					C	C ₂	c	2	24	6						
Ma3b2c2(AB)	3990	3920	70	56:1	A	C ₁	c	1	24	3920	B	C _s	a	1	24	70
Ma3b2cdef	15120	15000	120	125:1	A	C ₁	c	1	12	15000	B	C _s	a	1	12	120
Ma3b2cd(AA)	3990	3960	30	132:1	A	C ₁	c	1	24	3960	B	C _s	a	1	24	30
Ma3b2cd(AB)	7980	7920	60	132:1	A	C ₁	c	1	12	7920	B	C _s	a	1	12	60
Ma3b2(AA)2	546	528	18	518:16:5:1	A	C ₁	c	1	96	518	B	C _s	a	1	96	16
					C	C ₂	c	2	48	10	D	C _{2v}	a	2	48	2
Ma3b2(AA)(BB)	1080	1064	16	66.5:1	A	C ₁	c	1	48	1064	B	C _s	a	1	48	16
Ma3b2(AA)(AB)	2160	2140	20	107:1	A	C ₁	c	1	24	2140	B	C _s	a	1	24	20
Ma3b2(AB)2	2172	2132	40	175.7:3.3 :1	A	C ₁	c	1	24	2108	B	C _s	a	1	24	40
					C	C ₂	c	2	12	24						
Ma3b2(AB)(CD)	4320	4280	40	107:1	A	C ₁	c	1	12	4280	B	C _s	a	1	12	40
Ma3bcdefg	30240	30240	0	1	A	C ₁	c	1	6	30240						
Ma3bcde(AA)	7980	7980	0	1	A	C ₁	c	1	12	7980						
Ma3bcde(AB)	15960	15960	0	1	A	C ₁	c	1	6	15960						
Ma3bc(AA)2	1080	1070	10	107:1	A	C ₁	c	1	48	1070	B	C _s	a	1	48	10
Ma3bc(AA)(BB)	2160	2160	0	1	A	C ₁	c	1	24	2160						
Ma3bc(AA)(AB)	4320	4320	0	1	A	C ₁	c	1	12	4320						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A29 (continuação).

HH-9 Hula-hoop

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3bc(AB)2	4320	4300	20	215:1	A	C ₁	c	1	12	4300	B	C _s	a	1	12	20
Ma3bc(AB)(CD)	8640	8640	0	1	A	C ₁	c	1	6	8640						
Ma3(AA)3	101	94	7	184:12:2:1	A	C ₁	c	1	288	92	B	C _s	a	1	288	6
					C	C ₂	c	2	144	2	D	C _{2v}	a	2	144	1
Ma3(AA)2(BB)	300	292	8	580:14:2:1	A	C ₁	c	1	96	290	B	C _s	a	1	96	7
					C	C ₂	c	2	48	2	D	C _{2v}	a	2	48	1
Ma3(AA)2(AB)	597	592	5	118.4:1	A	C ₁	c	1	48	592	B	C _s	a	1	48	5
Ma3(AA)(BB)(CC)	597	594	3	198:1	A	C ₁	c	1	48	594	B	C _s	a	1	48	3
Ma3(AA)(BB)(AB)	1194	1194	0	1	A	C ₁	c	1	24	1194						
Ma3(AA)(AB)2	1197	1184	13	392.7:4.3 :1	A	C ₁	c	1	24	1178	B	C _s	a	1	24	13
					C	C ₂	c	2	12	6						
Ma3(AA)(AB)(CD)	2388	2388	0	1	A	C ₁	c	1	12	2388						
Ma3(AB)3	796	786	10	78.6:1	A	C ₁	c	1	36	786	B	C _s	a	1	36	10
Ma3(AB)2(CD)	2388	2378	10	237.8:1	A	C ₁	c	1	12	2378	B	C _s	a	1	12	10
Ma3(AB)(CD)(EF)	4776	4776	0	1	A	C ₁	c	1	6	4776						
Ma2b2c2d2e	11352	11160	192	928:16:1	A	C ₁	c	1	16	11136	B	C _s	a	1	16	192
					C	C ₂	c	2	8	24						
Ma2b2c2def	22680	22500	180	125:1	A	C ₁	c	1	8	22500	B	C _s	a	1	8	180
Ma2b2c2d(AA)	5988	5934	54	1976:18:1	A	C ₁	c	1	16	5928	B	C _s	a	1	16	54
					C	C ₂	c	2	8	6						
Ma2b2c2d(AB)	11970	11880	90	132:1	A	C ₁	c	1	8	11880	B	C _s	a	1	8	90
Ma2b2cdefg	45360	45240	120	377:1	A	C ₁	c	1	4	45240	B	C _s	a	1	4	120

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A29 (continuação).

HH-9 Hula-hoop

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2b2cde(AA)	11970	11940	30	398:1	A	C ₁	c	1	8	11940	B	C _s	a	1	8	30
Ma2b2cde(AB)	23940	23880	60	398:1	A	C ₁	c	1	4	23880	B	C _s	a	1	4	60
Ma2b2c(AA)2	1626	1598	28	1588:26:5 :1	A	C ₁	c	1	32	1588	B	C _s	a	1	32	26
					C	C ₂	c	2	16	10	D	C _{2v}	a	2	16	2
Ma2b2c(AA)(BB)	3240	3224	16	201.5:1	A	C ₁	c	1	16	3224	B	C _s	a	1	16	16
Ma2b2c(AA)(AB)	6480	6460	20	323:1	A	C ₁	c	1	8	6460	B	C _s	a	1	8	20
Ma2b2c(AB)2	6492	6432	60	534:5:1	A	C ₁	c	1	8	6408	B	C _s	a	1	8	60
					C	C ₂	c	2	4	24						
Ma2b2c(AB)(CD)	12960	12920	40	323:1	A	C ₁	c	1	4	12920	B	C _s	a	1	4	40
Ma2bcdefgh	90720	90720	0	1	A	C ₁	c	1	2	90720						
Ma2bcdef(AA)	23940	23940	0	1	A	C ₁	c	1	4	23940						
Ma2bcdef(AB)	47880	47880	0	1	A	C ₁	c	1	2	47880						
Ma2bcd(AA)2	3240	3210	30	107:1	A	C ₁	c	1	16	3210	B	C _s	a	1	16	30
Ma2bcd(AA)(BB)	6480	6480	0	1	A	C ₁	c	1	8	6480						
Ma2bcd(AA)(AB)	12960	12960	0	1	A	C ₁	c	1	4	12960						
Ma2bcd(AB)2	12960	12900	60	215:1	A	C ₁	c	1	4	12900	B	C _s	a	1	4	60
Ma2bcd(AB)(CD)	25920	25920	0	1	A	C ₁	c	1	2	25920						
Ma2b(AA)3	300	288	12	572:22:2:1	A	C ₁	c	1	96	286	B	C _s	a	1	96	11
					C	C ₂	c	2	48	2	D	C _{2v}	a	2	48	1
Ma2b(AA)2(BB)	897	884	13	1764:24:2 :1	A	C ₁	c	1	32	882	B	C _s	a	1	32	12
					C	C ₂	c	2	16	2	D	C _{2v}	a	2	16	1
Ma2b(AA)2(AB)	1791	1776	15	118.4:1	A	C ₁	c	1	16	1776	B	C _s	a	1	16	15

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A29 (continuação).

HH-9 Hula-hoop

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2b(AA)(BB)(CC)	1791	1788	3	596:1	A	C ₁	c	1	16	1788	B	C _s	a	1	16	3
Ma2b(AA)(BB)(AB)	3582	3582	0	1	A	C ₁	c	1	8	3582						
Ma2b(AA)(AB)2	3585	3562	23	1185.3:7.7 :1	A	C ₁	c	1	8	3556	B	C _s	a	1	8	23
					C	C ₂	c	2	4	6						
Ma2b(AA)(AB)(CD)	7164	7164	0	1	A	C ₁	c	1	4	7164						
Ma2b(AB)3	2388	2358	30	78.6:1	A	C ₁	c	1	12	2358	B	C _s	a	1	12	30
Ma2b(AB)2(CD)	7164	7134	30	237.8:1	A	C ₁	c	1	4	7134	B	C _s	a	1	4	30
Ma2b(AB)(CD)(EF)	14328	14328	0	1	A	C ₁	c	1	2	14328						
Mabcdefghi	181440	181440	0	1	A	C ₁	c	1	1	181440						
Mabcdefg(AA)	47880	47880	0	1	A	C ₁	c	1	2	47880						
Mabcdefg(AB)	95760	95760	0	1	A	C ₁	c	1	1	95760						
Mabcde(AA)2	6480	6420	60	107:1	A	C ₁	c	1	8	6420	B	C _s	a	1	8	60
Mabcde(AA)(BB)	12960	12960	0	1	A	C ₁	c	1	4	12960						
Mabcde(AA)(AB)	25920	25920	0	1	A	C ₁	c	1	2	25920						
Mabcde(AB)2	25920	25800	120	215:1	A	C ₁	c	1	2	25800	B	C _s	a	1	2	120
Mabcde(AB)(CD)	51840	51840	0	1	A	C ₁	c	1	1	51840						
Mabc(AA)3	597	582	15	38.8:1	A	C ₁	c	1	48	582	B	C _s	a	1	48	15
Mabc(AA)2(BB)	1791	1776	15	118.4:1	A	C ₁	c	1	16	1776	B	C _s	a	1	16	15
Mabc(AA)2(AB)	3582	3552	30	118.4:1	A	C ₁	c	1	8	3552	B	C _s	a	1	8	30
Mabc(AA)(BB)(CC)	3582	3582	0	1	A	C ₁	c	1	8	3582						
Mabc(AA)(BB)(AB)	7164	7164	0	1	A	C ₁	c	1	4	7164						
Mabc(AA)(AB)2	7164	7134	30	237.8:1	A	C ₁	c	1	4	7134	B	C _s	a	1	4	30

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A29 (continuação).

HH-9 Hula-hoop

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Mabc(AA)(AB)(CD)	14328	14328	0	1	A	C ₁	c	1	2	14328						
Mabc(AB)3	4776	4716	60	78.6:1	A	C ₁	c	1	6	4716	B	C _s	a	1	6	60
Mabc(AB)2(CD)	14328	14268	60	237.8:1	A	C ₁	c	1	2	14268	B	C _s	a	1	2	60
Mabc(AB)(CD)(EF)	28656	28656	0	1	A	C ₁	c	1	1	28656						
Ma(AA)4	43	38	5	72:8:2:1	A	C ₁	c	1	384	36	B	C _s	a	1	384	4
					C	C ₂	c	2	192	2	D	C _{2v}	a	2	192	1
Ma(AA)3(BB)	166	158	8	19.8:1	A	C ₁	c	1	96	158	B	C _s	a	1	96	8
Ma(AA)3(AB)	332	322	10	32.2:1	A	C ₁	c	1	48	322	B	C _s	a	1	48	10
Ma(AA)2(BB)2	252	242	10	238:8:2:1	A	C ₁	c	1	64	238	B	C _s	a	1	64	8
					C	C ₂	c	2	32	4	D	C _{2v}	a	2	32	2
Ma(AA)2(BB)(CC)	498	490	8	61.3:1	A	C ₁	c	1	32	490	B	C _s	a	1	32	8
Ma(AA)2(BB)(AB)	996	986	10	98.6:1	A	C ₁	c	1	16	986	B	C _s	a	1	16	10
Ma(AA)2(AB)2	1002	980	22	970:20:5:1	A	C ₁	c	1	16	970	B	C _s	a	1	16	20
					C	C ₂	c	2	8	10	D	C _{2v}	a	2	8	2
Ma(AA)2(AB)(CD)	1992	1972	20	98.6:1	A	C ₁	c	1	8	1972	B	C _s	a	1	8	20
Ma(AA)(BB)(CC)(DD)	996	996	0	1	A	C ₁	c	1	16	996						
Ma(AA)(BB)(CC)(AB)	1992	1992	0	1	A	C ₁	c	1	8	1992						
Ma(AA)(BB)(AB)2	1992	1976	16	123.5:1	A	C ₁	c	1	8	1976	B	C _s	a	1	8	16
Ma(AA)(BB)(AB)(CD)	3984	3984	0	1	A	C ₁	c	1	4	3984						
Ma(AA)(AB)3	1328	1308	20	65.4:1	A	C ₁	c	1	12	1308	B	C _s	a	1	12	20
Ma(AA)(AB)2(CD)	3984	3964	20	198.2:1	A	C ₁	c	1	4	3964	B	C _s	a	1	4	20
Ma(AA)(AB)(CD)(EF)	7968	7968	0	1	A	C ₁	c	1	2	7968						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A29 (continuação).

HH-9 Hula-hoop

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma(AB)4	670	646	24	105.7:4:1	A	C ₁	c	1	24	634	B	C _s	a	1	24	24
					C	C ₂	c	2	12	12						
Ma(AB)3(CD)	2656	2616	40	65.4:1	A	C ₁	c	1	6	2616	B	C _s	a	1	6	40
Ma(AB)2(CD)2	3996	3948	48	327:4:1	A	C ₁	c	1	4	3924	B	C _s	a	1	4	48
					C	C ₂	c	2	2	24						
Ma(AB)2(CD)(EF)	7968	7928	40	198.2:1	A	C ₁	c	1	2	7928	B	C _s	a	1	2	40
Ma(AB)(CD)(EF)(GH)	15936	15936	0	1	A	C ₁	c	1	1	15936						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A30. JTC-9 Triangular cupola. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

JTC-9 Triangular cupola

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma9	1	0	1	1	A	C _{3v}	a	3	120960	1						
Ma8b	3	2	1	2:1	A	C ₁	c	1	40320	2	B	C _s	a	1	40320	1
Ma7b2	12	8	4	2:1	A	C ₁	c	1	10080	8	B	C _s	a	1	10080	4
Ma7bc	24	24	0	1	A	C ₁	c	1	5040	24						
Ma7(AA)	7	4	3	1.3:1	A	C ₁	c	1	10080	4	B	C _s	a	1	10080	3
Ma7(AB)	14	14	0	1	A	C ₁	c	1	5040	14						
Ma6b3	30	26	4	72:9:2:1	A	C ₁	c	1	4320	24	B	C _s	a	1	4320	3
					C	C ₃	c	3	1440	2	D	C _{3v}	a	3	1440	1
Ma6b2c	84	80	4	20:1	A	C ₁	c	1	1440	80	B	C _s	a	1	1440	4
Ma6bcd	168	168	0	1	A	C ₁	c	1	720	168						
Ma6b(AA)	49	46	3	15.3:1	A	C ₁	c	1	1440	46	B	C _s	a	1	1440	3
Ma6b(AB)	98	98	0	1	A	C ₁	c	1	720	98						
Ma5b4	42	36	6	6:1	A	C ₁	c	1	2880	36	B	C _s	a	1	2880	6
Ma5b3c	168	168	0	1	A	C ₁	c	1	720	168						
Ma5b2c2	252	240	12	20:1	A	C ₁	c	1	480	240	B	C _s	a	1	480	12
Ma5b2cd	504	504	0	1	A	C ₁	c	1	240	504						
Ma5b2(AA)	147	138	9	15.3:1	A	C ₁	c	1	480	138	B	C _s	a	1	480	9
Ma5b2(AB)	294	294	0	1	A	C ₁	c	1	240	294						
Ma5bcde	1008	1008	0	1	A	C ₁	c	1	120	1008						
Ma5bc(AA)	294	294	0	1	A	C ₁	c	1	240	294						
Ma5bc(AB)	588	588	0	1	A	C ₁	c	1	120	588						
Ma5(AA)2	43	34	9	3.8:1	A	C ₁	c	1	960	34	B	C _s	a	1	960	9

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A30 (continuação).

JTC-9 Triangular cupola

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma5(AA)(BB)	86	80	6	13.3:1	A	C ₁	c	1	480	80	B	C _s	a	1	480	6
Ma5(AA)(AB)	172	172	0	1	A	C ₁	c	1	240	172						
Ma5(AB)2	172	160	12	13.3:1	A	C ₁	c	1	240	160	B	C _s	a	1	240	12
Ma5(AB)(CD)	344	344	0	1	A	C ₁	c	1	120	344						
Ma4b4c	210	204	6	34:1	A	C ₁	c	1	576	204	B	C _s	a	1	576	6
Ma4b3c2	420	408	12	34:1	A	C ₁	c	1	288	408	B	C _s	a	1	288	12
Ma4b3cd	840	840	0	1	A	C ₁	c	1	144	840						
Ma4b3(AA)	245	236	9	26.2:1	A	C ₁	c	1	288	236	B	C _s	a	1	288	9
Ma4b3(AB)	490	490	0	1	A	C ₁	c	1	144	490						
Ma4b2c2d	1260	1248	12	104:1	A	C ₁	c	1	96	1248	B	C _s	a	1	96	12
Ma4b2cde	2520	2520	0	1	A	C ₁	c	1	48	2520						
Ma4b2c(AA)	735	726	9	80.7:1	A	C ₁	c	1	96	726	B	C _s	a	1	96	9
Ma4b2c(AB)	1470	1470	0	1	A	C ₁	c	1	48	1470						
Ma4bcdef	5040	5040	0	1	A	C ₁	c	1	24	5040						
Ma4bcd(AA)	1470	1470	0	1	A	C ₁	c	1	48	1470						
Ma4bcd(AB)	2940	2940	0	1	A	C ₁	c	1	24	2940						
Ma4b(AA)2	215	206	9	22.9:1	A	C ₁	c	1	192	206	B	C _s	a	1	192	9
Ma4b(AA)(BB)	430	424	6	70.7:1	A	C ₁	c	1	96	424	B	C _s	a	1	96	6
Ma4b(AA)(AB)	860	860	0	1	A	C ₁	c	1	48	860						
Ma4b(AB)2	860	848	12	70.7:1	A	C ₁	c	1	48	848	B	C _s	a	1	48	12
Ma4b(AB)(CD)	1720	1720	0	1	A	C ₁	c	1	24	1720						
Ma3b3c3	564	564	0	279:1	A	C ₁	c	1	216	558	B	C ₃	c	3	72	6

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A30 (continuação).

JTC-9 Triangular cupola

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3b3c2d	1680	1680	0	1	A	C ₁	c	1	72	1680						
Ma3b3cde	3360	3360	0	1	A	C ₁	c	1	36	3360						
Ma3b3c(AA)	980	980	0	1	A	C ₁	c	1	72	980						
Ma3b3c(AB)	1960	1960	0	1	A	C ₁	c	1	36	1960						
Ma3b2c2d2	2520	2496	24	104:1	A	C ₁	c	1	48	2496	B	C _s	a	1	48	24
Ma3b2c2de	5040	5040	0	1	A	C ₁	c	1	24	5040						
Ma3b2c2(AA)	1470	1452	18	80.7:1	A	C ₁	c	1	48	1452	B	C _s	a	1	48	18
Ma3b2c2(AB)	2940	2940	0	1	A	C ₁	c	1	24	2940						
Ma3b2cdef	10080	10080	0	1	A	C ₁	c	1	12	10080						
Ma3b2cd(AA)	2940	2940	0	1	A	C ₁	c	1	24	2940						
Ma3b2cd(AB)	5880	5880	0	1	A	C ₁	c	1	12	5880						
Ma3b2(AA)2	430	412	18	22.9:1	A	C ₁	c	1	96	412	B	C _s	a	1	96	18
Ma3b2(AA)(BB)	860	848	12	70.7:1	A	C ₁	c	1	48	848	B	C _s	a	1	48	12
Ma3b2(AA)(AB)	1720	1720	0	1	A	C ₁	c	1	24	1720						
Ma3b2(AB)2	1720	1696	24	70.7:1	A	C ₁	c	1	24	1696	B	C _s	a	1	24	24
Ma3b2(AB)(CD)	3440	3440	0	1	A	C ₁	c	1	12	3440						
Ma3bcdefg	20160	20160	0	1	A	C ₁	c	1	6	20160						
Ma3bcde(AA)	5880	5880	0	1	A	C ₁	c	1	12	5880						
Ma3bcde(AB)	11760	11760	0	1	A	C ₁	c	1	6	11760						
Ma3bc(AA)2	860	860	0	1	A	C ₁	c	1	48	860						
Ma3bc(AA)(BB)	1720	1720	0	1	A	C ₁	c	1	24	1720						
Ma3bc(AA)(AB)	3440	3440	0	1	A	C ₁	c	1	12	3440						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A30 (continuação).

JTC-9 Triangular cupola

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3bc(AB)2	3440	3440	0	1	A	C ₁	c	1	12	3440						
Ma3bc(AB)(CD)	6880	6880	0	1	A	C ₁	c	1	6	6880						
Ma3(AA)3	88	78	10	111:12:2:1	A	C ₁	c	1	288	74	B	C _s	a	1	288	8
					C	C ₃	c	3	96	4	D	C _{3v}	a	3	96	2
Ma3(AA)2(BB)	252	240	12	20:1	A	C ₁	c	1	96	240	B	C _s	a	1	96	12
Ma3(AA)2(AB)	504	504	0	1	A	C ₁	c	1	48	504						
Ma3(AA)(BB)(CC)	504	498	6	83:1	A	C ₁	c	1	48	498	B	C _s	a	1	48	6
Ma3(AA)(BB)(AB)	1008	1008	0	1	A	C ₁	c	1	24	1008						
Ma3(AA)(AB)2	1008	990	18	55:1	A	C ₁	c	1	24	990	B	C _s	a	1	24	18
Ma3(AA)(AB)(CD)	2016	2016	0	1	A	C ₁	c	1	12	2016						
Ma3(AB)3	680	680	0	167:1	A	C ₁	c	1	36	668	B	C ₃	c	3	12	12
Ma3(AB)2(CD)	2016	2016	0	1	A	C ₁	c	1	12	2016						
Ma3(AB)(CD)(EF)	4032	4032	0	1	A	C ₁	c	1	6	4032						
Ma2b2c2d2e	7560	7536	24	314:1	A	C ₁	c	1	16	7536	B	C _s	a	1	16	24
Ma2b2c2def	15120	15120	0	1	A	C ₁	c	1	8	15120						
Ma2b2c2d(AA)	4410	4392	18	244:1	A	C ₁	c	1	16	4392	B	C _s	a	1	16	18
Ma2b2c2d(AB)	8820	8820	0	1	A	C ₁	c	1	8	8820						
Ma2b2cdefg	30240	30240	0	1	A	C ₁	c	1	4	30240						
Ma2b2cde(AA)	8820	8820	0	1	A	C ₁	c	1	8	8820						
Ma2b2cde(AB)	17640	17640	0	1	A	C ₁	c	1	4	17640						
Ma2b2c(AA)2	1290	1272	18	70.7:1	A	C ₁	c	1	32	1272	B	C _s	a	1	32	18
Ma2b2c(AA)(BB)	2580	2568	12	214:1	A	C ₁	c	1	16	2568	B	C _s	a	1	16	12

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A30 (continuação).

JTC-9 Triangular cupola

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2b2c(AA)(AB)	5160	5160	0	1	A	C ₁	c	1	8	5160						
Ma2b2c(AB)2	5160	5136	24	214:1	A	C ₁	c	1	8	5136	B	C _s	a	1	8	24
Ma2b2c(AB)(CD)	10320	10320	0	1	A	C ₁	c	1	4	10320						
Ma2bcdefgh	60480	60480	0	1	A	C ₁	c	1	2	60480						
Ma2bcdef(AA)	17640	17640	0	1	A	C ₁	c	1	4	17640						
Ma2bcdef(AB)	35280	35280	0	1	A	C ₁	c	1	2	35280						
Ma2bcd(AA)2	2580	2580	0	1	A	C ₁	c	1	16	2580						
Ma2bcd(AA)(BB)	5160	5160	0	1	A	C ₁	c	1	8	5160						
Ma2bcd(AA)(AB)	10320	10320	0	1	A	C ₁	c	1	4	10320						
Ma2bcd(AB)2	10320	10320	0	1	A	C ₁	c	1	4	10320						
Ma2bcd(AB)(CD)	20640	20640	0	1	A	C ₁	c	1	2	20640						
Ma2b(AA)3	252	242	10	24.2:1	A	C ₁	c	1	96	242	B	C _s	a	1	96	10
Ma2b(AA)2(BB)	756	744	12	62:1	A	C ₁	c	1	32	744	B	C _s	a	1	32	12
Ma2b(AA)2(AB)	1512	1512	0	1	A	C ₁	c	1	16	1512						
Ma2b(AA)(BB)(CC)	1512	1506	6	251:1	A	C ₁	c	1	16	1506	B	C _s	a	1	16	6
Ma2b(AA)(BB)(AB)	3024	3024	0	1	A	C ₁	c	1	8	3024						
Ma2b(AA)(AB)2	3024	3006	18	167:1	A	C ₁	c	1	8	3006	B	C _s	a	1	8	18
Ma2b(AA)(AB)(CD)	6048	6048	0	1	A	C ₁	c	1	4	6048						
Ma2b(AB)3	2016	2016	0	1	A	C ₁	c	1	12	2016						
Ma2b(AB)2(CD)	6048	6048	0	1	A	C ₁	c	1	4	6048						
Ma2b(AB)(CD)(EF)	12096	12096	0	1	A	C ₁	c	1	2	12096						
Ma2b(AB)(CD)(EF)	12096	12096	0	1	A	C ₁	c	1	2	12096						
Ma2b(AB)(CD)(EF)	12096	12096	0	1	A	C ₁	c	1	2	12096						
Mabcdefghi	120960	120960	0	1	A	C ₁	c	1	1	120960						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A30 (continuação).

JTC-9 Triangular cupola

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Mabcdefg(AA)	35280	35280	0	1	A	C ₁	c	1	2	35280						
Mabcdefg(AB)	70560	70560	0	1	A	C ₁	c	1	1	70560						
Mabcde(AA)2	5160	5160	0	1	A	C ₁	c	1	8	5160						
Mabcde(AA)(BB)	10320	10320	0	1	A	C ₁	c	1	4	10320						
Mabcde(AA)(AB)	20640	20640	0	1	A	C ₁	c	1	2	20640						
Mabcde(AB)2	20640	20640	0	1	A	C ₁	c	1	2	20640						
Mabcde(AB)(CD)	41280	41280	0	1	A	C ₁	c	1	1	41280						
Mabc(AA)3	504	504	0	1	A	C ₁	c	1	48	504						
Mabc(AA)2(BB)	1512	1512	0	1	A	C ₁	c	1	16	1512						
Mabc(AA)2(AB)	3024	3024	0	1	A	C ₁	c	1	8	3024						
Mabc(AA)(BB)(CC)	3024	3024	0	1	A	C ₁	c	1	8	3024						
Mabc(AA)(BB)(AB)	6048	6048	0	1	A	C ₁	c	1	4	6048						
Mabc(AA)(AB)2	6048	6048	0	1	A	C ₁	c	1	4	6048						
Mabc(AA)(AB)(CD)	12096	12096	0	1	A	C ₁	c	1	2	12096						
Mabc(AB)3	4032	4032	0	1	A	C ₁	c	1	6	4032						
Mabc(AB)2(CD)	12096	12096	0	1	A	C ₁	c	1	2	12096						
Mabc(AB)(CD)(EF)	24192	24192	0	1	A	C ₁	c	1	1	24192						
Ma(AA)4	38	32	6	5.3:1	A	C ₁	c	1	384	32	B	C _s	a	1	384	6
Ma(AA)3(BB)	152	146	6	24.3:1	A	C ₁	c	1	96	146	B	C _s	a	1	96	6
Ma(AA)3(AB)	304	304	0	1	A	C ₁	c	1	48	304						
Ma(AA)2(BB)2	228	216	12	18:1	A	C ₁	c	1	64	216	B	C _s	a	1	64	12
Ma(AA)2(BB)(CC)	456	450	6	75:1	A	C ₁	c	1	32	450	B	C _s	a	1	32	6

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A30 (continuação).

JTC-9 Triangular cupola

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma(AA)2(BB)(AB)	912	912	0	1	A	C ₁	c	1	16	912						
Ma(AA)2(AB)2	912	894	18	49.7:1	A	C ₁	c	1	16	894	B	C _s	a	1	16	18
Ma(AA)2(AB)(CD)	1824	1824	0	1	A	C ₁	c	1	8	1824						
Ma(AA)(BB)(CC)(DD)	912	912	0	1	A	C ₁	c	1	16	912						
Ma(AA)(BB)(CC)(AB)	1824	1824	0	1	A	C ₁	c	1	8	1824						
Ma(AA)(BB)(AB)2	1824	1812	12	151:1	A	C ₁	c	1	8	1812	B	C _s	a	1	8	12
Ma(AA)(BB)(AB)(CD)	3648	3648	0	1	A	C ₁	c	1	4	3648						
Ma(AA)(AB)3	1216	1216	0	1	A	C ₁	c	1	12	1216						
Ma(AA)(AB)2(CD)	3648	3648	0	1	A	C ₁	c	1	4	3648						
Ma(AA)(AB)(CD)(EF)	7296	7296	0	1	A	C ₁	c	1	2	7296						
Ma(AB)4	608	596	12	49.7:1	A	C ₁	c	1	24	596	B	C _s	a	1	24	12
Ma(AB)3(CD)	2432	2432	0	1	A	C ₁	c	1	6	2432						
Ma(AB)2(CD)2	3648	3624	24	151:1	A	C ₁	c	1	4	3624	B	C _s	a	1	4	24
Ma(AB)2(CD)(EF)	7296	7296	0	1	A	C ₁	c	1	2	7296						
Ma(AB)(CD)(EF)(GH)	14592	14592	0	1	A	C ₁	c	1	1	14592						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A31. JTDIC-9 Tridiminished icosahedron. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

JTDIC-9 Tridiminished icosahedron

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma9	1	0	1	1	A	C _{3v}	a	3	120960	1						
Ma8b	3	0	3	1	A	C _s	a	1	40320	3						
Ma7b2	12	6	6	1:1	A'	C ₁	c	1	10080	6	A''	C _s	a	1	10080	6
Ma7bc	24	18	6	3:1	A	C ₁	c	1	5040	18	B	C _s	a	1	5040	6
Ma7(AA)	5	2	3	1.5:1	A	C _s	a	1	10080	3	B	C ₁	c	1	10080	2
Ma7(AB)	10	8	2	4:1	A	C ₁	c	1	5040	8	B	C _s	a	1	5040	2
Ma6b3	30	20	10	20:7:1	A	C ₁	c	1	4320	20	B	C _s	a	1	4320	7
					C	C _{3v}	a	3	1440	3						
Ma6b2c	84	72	12	6:1	A	C ₁	c	1	1440	72	B	C _s	a	1	1440	12
Ma6bcd	168	162	6	27:1	A	C ₁	c	1	720	162	B	C _s	a	1	720	6
Ma6b(AA)	35	28	7	4:1	A	C ₁	c	1	1440	28	B	C _s	a	1	1440	7
Ma6b(AB)	70	68	2	34:1	A	C ₁	c	1	720	68	B	C _s	a	1	720	2
Ma5b4	42	30	12	2.5:1	A	C ₁	c	1	2880	30	B	C _s	a	1	2880	12
Ma5b3c	168	150	18	8.3:1	A	C ₁	c	1	720	150	B	C _s	a	1	720	18
Ma5b2c2	252	228	24	9.5:1	A	C ₁	c	1	480	228	B	C _s	a	1	480	24
Ma5b2cd	504	486	18	27:1	A	C ₁	c	1	240	486	B	C _s	a	1	240	18
Ma5b2(AA)	105	92	13	7.1:1	A	C ₁	c	1	480	92	B	C _s	a	1	480	13
Ma5b2(AB)	210	204	6	34:1	A	C ₁	c	1	240	204	B	C _s	a	1	240	6
Ma5bcde	1008	1008	0	1	A	C ₁	c	1	120	1008						
Ma5bc(AA)	210	198	12	16.5:1	A	C ₁	c	1	240	198	B	C _s	a	1	240	12
Ma5bc(AB)	420	420	0	1	A	C ₁	c	1	120	420						
Ma5(AA)2	23	18	5	3.6:1	A	C ₁	c	1	960	18	B	C _s	a	1	960	5

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A31 (continuação).

JTDIC-9 Tridiminished icosahedron

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma5(AA)(BB)	46	40	6	6.7:1	A	C ₁	c	1	480	40	B	C _s	a	1	480	6
Ma5(AA)(AB)	92	88	4	22:1	A	C ₁	c	1	240	88	B	C _s	a	1	240	4
Ma5(AB)2	92	88	4	22:1	A	C ₁	c	1	240	88	B	C _s	a	1	240	4
Ma5(AB)(CD)	184	184	0	1	A	C ₁	c	1	120	184						
Ma4b4c	210	192	18	10.7:1	A	C ₁	c	1	576	192	B	C _s	a	1	576	18
Ma4b3c2	420	390	30	13:1	A	C ₁	c	1	288	390	B	C _s	a	1	288	30
Ma4b3cd	840	822	18	45.7:1	A	C ₁	c	1	144	822	B	C _s	a	1	144	18
Ma4b3(AA)	175	158	17	9.3:1	A	C ₁	c	1	288	158	B	C _s	a	1	288	17
Ma4b3(AB)	350	344	6	57.3:1	A	C ₁	c	1	144	344	B	C _s	a	1	144	6
Ma4b2c2d	1260	1224	36	34:1	A	C ₁	c	1	96	1224	B	C _s	a	1	96	36
Ma4b2cde	2520	2502	18	139:1	A	C ₁	c	1	48	2502	B	C _s	a	1	48	18
Ma4b2c(AA)	525	504	21	24:1	A	C ₁	c	1	96	504	B	C _s	a	1	96	21
Ma4b2c(AB)	1050	1044	6	174:1	A	C ₁	c	1	48	1044	B	C _s	a	1	48	6
Ma4bcdef	5040	5040	0	1	A	C ₁	c	1	24	5040						
Ma4bcd(AA)	1050	1038	12	86.5:1	A	C ₁	c	1	48	1038	B	C _s	a	1	48	12
Ma4bcd(AB)	2100	2100	0	1	A	C ₁	c	1	24	2100						
Ma4b(AA)2	115	104	11	9.5:1	A	C ₁	c	1	192	104	B	C _s	a	1	192	11
Ma4b(AA)(BB)	230	220	10	22:1	A	C ₁	c	1	96	220	B	C _s	a	1	96	10
Ma4b(AA)(AB)	460	456	4	114:1	A	C ₁	c	1	48	456	B	C _s	a	1	48	4
Ma4b(AB)2	460	448	12	37.3:1	A	C ₁	c	1	48	448	B	C _s	a	1	48	12
Ma4b(AB)(CD)	920	920	0	1	A	C ₁	c	1	24	920						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A31 (continuação).

JTDIC-9 Tridiminished icosahedron

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3b3c3	564	528	36	264:15:1	A	C ₁	c	1	216	528	B	C _s	a	1	216	30
					C	C _{3v}	a	3	72	6						
Ma3b3c2d	1680	1644	36	45.7:1	A	C ₁	c	1	72	1644	B	C _s	a	1	72	36
Ma3b3cde	3360	3360	0	1	A	C ₁	c	1	36	3360						
Ma3b3c(AA)	700	676	24	28.2:1	A	C ₁	c	1	72	676	B	C _s	a	1	72	24
Ma3b3c(AB)	1400	1400	0	1	A	C ₁	c	1	36	1400						
Ma3b2c2d2	2520	2460	60	41:1	A	C ₁	c	1	48	2460	B	C _s	a	1	48	60
Ma3b2c2de	5040	5004	36	139:1	A	C ₁	c	1	24	5004	B	C _s	a	1	24	36
Ma3b2c2(AA)	1050	1016	34	29.9:1	A	C ₁	c	1	48	1016	B	C _s	a	1	48	34
Ma3b2c2(AB)	2100	2088	12	174:1	A	C ₁	c	1	24	2088	B	C _s	a	1	24	12
Ma3b2cdef	10080	10080	0	1	A	C ₁	c	1	12	10080						
Ma3b2cd(AA)	2100	2076	24	86.5:1	A	C ₁	c	1	24	2076	B	C _s	a	1	24	24
Ma3b2cd(AB)	4200	4200	0	1	A	C ₁	c	1	12	4200						
Ma3b2(AA)2	230	214	16	13.4:1	A	C ₁	c	1	96	214	B	C _s	a	1	96	16
Ma3b2(AA)(BB)	460	444	16	27.8:1	A	C ₁	c	1	48	444	B	C _s	a	1	48	16
Ma3b2(AA)(AB)	920	912	8	114:1	A	C ₁	c	1	24	912	B	C _s	a	1	24	8
Ma3b2(AB)2	920	904	16	56.5:1	A	C ₁	c	1	24	904	B	C _s	a	1	24	16
Ma3b2(AB)(CD)	1840	1840	0	1	A	C ₁	c	1	12	1840						
Ma3bcdefg	20160	20160	0	1	A	C ₁	c	1	6	20160						
Ma3bcde(AA)	4200	4200	0	1	A	C ₁	c	1	12	4200						
Ma3bcde(AB)	8400	8400	0	1	A	C ₁	c	1	6	8400						
Ma3bc(AA)2	460	442	18	24.6:1	A	C ₁	c	1	48	442	B	C _s	a	1	48	18

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A31 (continuação).

JTDIC-9 Tridiminished icosahedron

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3bc(AA)(BB)	920	908	12	75.7:1	A	C ₁	c	1	24	908	B	C _s	a	1	24	12
Ma3bc(AA)(AB)	1840	1840	0	1	A	C ₁	c	1	12	1840						
Ma3bc(AB)2	1840	1816	24	75.7:1	A	C ₁	c	1	12	1816	B	C _s	a	1	12	24
Ma3bc(AB)(CD)	3680	3680	0	1	A	C ₁	c	1	6	3680						
Ma3(AA)3	37	32	5	90:12:2:1	A	C ₁	c	1	288	30	B	C _s	a	1	288	4
					C	C ₃	c	3	96	2	D	C _{3v}	a	3	96	1
Ma3(AA)2(BB)	105	98	7	14:1	A	C ₁	c	1	96	98	B	C _s	a	1	96	7
Ma3(AA)2(AB)	210	204	6	34:1	A	C ₁	c	1	48	204	B	C _s	a	1	48	6
Ma3(AA)(BB)(CC)	210	204	6	34:1	A	C ₁	c	1	48	204	B	C _s	a	1	48	6
Ma3(AA)(BB)(AB)	420	416	4	104:1	A	C ₁	c	1	24	416	B	C _s	a	1	24	4
Ma3(AA)(AB)2	420	412	8	51.5:1	A	C ₁	c	1	24	412	B	C _s	a	1	24	8
Ma3(AA)(AB)(CD)	840	840	0	1	A	C ₁	c	1	12	840						
Ma3(AB)3	284	276	8	408:9:2:1	A	C ₁	c	1	36	272	B	C _s	a	1	36	6
					C	C ₃	c	3	12	4	D	C _{3v}	a	3	12	2
Ma3(AB)2(CD)	840	832	8	104:1	A	C ₁	c	1	12	832	B	C _s	a	1	12	8
Ma3(AB)(CD)(EF)	1680	1680	0	1	A	C ₁	c	1	6	1680						
Ma2b2c2d2e	7560	7488	72	104:1	A	C ₁	c	1	16	7488	B	C _s	a	1	16	72
Ma2b2c2def	15120	15084	36	419:1	A	C ₁	c	1	8	15084	B	C _s	a	1	8	36
Ma2b2c2d(AA)	3150	3108	42	74:1	A	C ₁	c	1	16	3108	B	C _s	a	1	16	42
Ma2b2c2d(AB)	6300	6288	12	524:1	A	C ₁	c	1	8	6288	B	C _s	a	1	8	12
Ma2b2cdefg	30240	30240	0	1	A	C ₁	c	1	4	30240						
Ma2b2cde(AA)	6300	6276	24	261.5:1	A	C ₁	c	1	8	6276	B	C _s	a	1	8	24

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A31 (continuação).

JTDIC-9 Tridiminished icosahedron

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2b2cde(AB)	12600	12600	0	1	A	C ₁	c	1	4	12600						
Ma2b2c(AA)2	690	668	22	30.4:1	A	C ₁	c	1	32	668	B	C _s	a	1	32	22
Ma2b2c(AA)(BB)	1380	1360	20	68:1	A	C ₁	c	1	16	1360	B	C _s	a	1	16	20
Ma2b2c(AA)(AB)	2760	2752	8	344:1	A	C ₁	c	1	8	2752	B	C _s	a	1	8	8
Ma2b2c(AB)2	2760	2736	24	114:1	A	C ₁	c	1	8	2736	B	C _s	a	1	8	24
Ma2b2c(AB)(CD)	5520	5520	0	1	A	C ₁	c	1	4	5520						
Ma2bcdefgh	60480	60480	0	1	A	C ₁	c	1	2	60480						
Ma2bcdef(AA)	12600	12600	0	1	A	C ₁	c	1	4	12600						
Ma2bcdef(AB)	25200	25200	0	1	A	C ₁	c	1	2	25200						
Ma2bcd(AA)2	1380	1362	18	75.7:1	A	C ₁	c	1	16	1362	B	C _s	a	1	16	18
Ma2bcd(AA)(BB)	2760	2748	12	229:1	A	C ₁	c	1	8	2748	B	C _s	a	1	8	12
Ma2bcd(AA)(AB)	5520	5520	0	1	A	C ₁	c	1	4	5520						
Ma2bcd(AB)2	5520	5496	24	229:1	A	C ₁	c	1	4	5496	B	C _s	a	1	4	24
Ma2bcd(AB)(CD)	11040	11040	0	1	A	C ₁	c	1	2	11040						
Ma2b(AA)3	105	96	9	10.7:1	A	C ₁	c	1	96	96	B	C _s	a	1	96	9
Ma2b(AA)2(BB)	315	304	11	27.6:1	A	C ₁	c	1	32	304	B	C _s	a	1	32	11
Ma2b(AA)2(AB)	630	624	6	104:1	A	C ₁	c	1	16	624	B	C _s	a	1	16	6
Ma2b(AA)(BB)(CC)	630	624	6	104:1	A	C ₁	c	1	16	624	B	C _s	a	1	16	6
Ma2b(AA)(BB)(AB)	1260	1256	4	314:1	A	C ₁	c	1	8	1256	B	C _s	a	1	8	4
Ma2b(AA)(AB)2	1260	1244	16	77.8:1	A	C ₁	c	1	8	1244	B	C _s	a	1	8	16
Ma2b(AA)(AB)(CD)	2520	2520	0	1	A	C ₁	c	1	4	2520						
Ma2b(AB)3	840	832	8	104:1	A	C ₁	c	1	12	832	B	C _s	a	1	12	8

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A31 (continuação).

JTDIC-9 Tridiminished icosahedron

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2b(AB)2(CD)	2520	2512	8	314:1	A	C ₁	c	1	4	2512	B	C _s	a	1	4	8
Ma2b(AB)(CD)(EF)	5040	5040	0	1	A	C ₁	c	1	2	5040						
Mabcdefghi	120960	120960	0	1	A	C ₁	c	1	1	120960						
Mabcdefg(AA)	25200	25200	0	1	A	C ₁	c	1	2	25200						
Mabcdefg(AB)	50400	50400	0	1	A	C ₁	c	1	1	50400						
Mabcde(AA)2	2760	2760	0	1	A	C ₁	c	1	8	2760						
Mabcde(AA)(BB)	5520	5520	0	1	A	C ₁	c	1	4	5520						
Mabcde(AA)(AB)	11040	11040	0	1	A	C ₁	c	1	2	11040						
Mabcde(AB)2	11040	11040	0	1	A	C ₁	c	1	2	11040						
Mabcde(AB)(CD)	22080	22080	0	1	A	C ₁	c	1	1	22080						
Mabc(AA)3	210	198	12	16.5:1	A	C ₁	c	1	48	198	B	C _s	a	1	48	12
Mabc(AA)2(BB)	630	618	12	51.5:1	A	C ₁	c	1	16	618	B	C _s	a	1	16	12
Mabc(AA)2(AB)	1260	1260	0	1	A	C ₁	c	1	8	1260						
Mabc(AA)(BB)(CC)	1260	1260	0	1	A	C ₁	c	1	8	1260						
Mabc(AA)(BB)(AB)	2520	2520	0	1	A	C ₁	c	1	4	2520						
Mabc(AA)(AB)2	2520	2496	24	104:1	A	C ₁	c	1	4	2496	B	C _s	a	1	4	24
Mabc(AA)(AB)(CD)	5040	5040	0	1	A	C ₁	c	1	2	5040						
Mabc(AB)3	1680	1680	0	1	A	C ₁	c	1	6	1680						
Mabc(AB)2(CD)	5040	5040	0	1	A	C ₁	c	1	2	5040						
Mabc(AB)(CD)(EF)	10080	10080	0	1	A	C ₁	c	1	1	10080						
Ma(AA)4	12	10	2	5:1	A	C ₁	c	1	384	10	B	C _s	a	1	384	2
Ma(AA)3(BB)	48	44	4	11:1	A	C ₁	c	1	96	44	B	C _s	a	1	96	4

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A31 (continuação).

JTDIC-9 Tridiminished icosahedron

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma(AA)3(AB)	96	92	4	23:1	A	C ₁	c	1	48	92	B	C _s	a	1	48	4
Ma(AA)2(BB)2	72	68	4	17:1	A	C ₁	c	1	64	68	B	C _s	a	1	64	4
Ma(AA)2(BB)(CC)	144	140	4	35:1	A	C ₁	c	1	32	140	B	C _s	a	1	32	4
Ma(AA)2(BB)(AB)	288	284	4	71:1	A	C ₁	c	1	16	284	B	C _s	a	1	16	4
Ma(AA)2(AB)2	288	284	4	71:1	A	C ₁	c	1	16	284	B	C _s	a	1	16	4
Ma(AA)2(AB)(CD)	576	576	0	1	A	C ₁	c	1	8	576						
Ma(AA)(BB)(CC)(DD)	288	288	0	1	A	C ₁	c	1	16	288						
Ma(AA)(BB)(CC)(AB)	576	576	0	1	A	C ₁	c	1	8	576						
Ma(AA)(BB)(AB)2	576	568	8	71:1	A	C ₁	c	1	8	568	B	C _s	a	1	8	8
Ma(AA)(BB)(AB)(CD)	1152	1152	0	1	A	C ₁	c	1	4	1152						
Ma(AA)(AB)3	384	376	8	47:1	A	C ₁	c	1	12	376	B	C _s	a	1	12	8
Ma(AA)(AB)2(CD)	1152	1144	8	143:1	A	C ₁	c	1	4	1144	B	C _s	a	1	4	8
Ma(AA)(AB)(CD)(EF)	2304	2304	0	1	A	C ₁	c	1	2	2304						
Ma(AB)4	192	192	0	1	A	C ₁	c	1	24	192						
Ma(AB)3(CD)	768	768	0	1	A	C ₁	c	1	6	768						
Ma(AB)2(CD)2	1152	1152	0	1	A	C ₁	c	1	4	1152						
Ma(AB)2(CD)(EF)	2304	2304	0	1	A	C ₁	c	1	2	2304						
Ma(AB)(CD)(EF)(GH)	4608	4608	0	1	A	C ₁	c	1	1	4608						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A32. MFF-9 Muffin. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

MFF-9 Muffin

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma9	1	0	1	1	A	C _s	a	1	362880	1						
Ma8b	9	6	3	2:1	A	C ₁	c	1	40320	6	B	C _s	a	1	40320	3
Ma7b2	36	30	6	5:1	A	C ₁	c	1	10080	30	B	C _s	a	1	10080	6
Ma7bc	72	66	6	11:1	A	C ₁	c	1	5040	66	B	C _s	a	1	5040	6
Ma7(AA)	20	16	4	4:1	A	C ₁	c	1	10080	16	B	C _s	a	1	10080	4
Ma7(AB)	40	36	4	9:1	A	C ₁	c	1	5040	36	B	C _s	a	1	5040	4
Ma6b3	84	74	10	7.4:1	A	C ₁	c	1	4320	74	B	C _s	a	1	4320	10
Ma6b2c	252	240	12	20:1	A	C ₁	c	1	1440	240	B	C _s	a	1	1440	12
Ma6bcd	504	498	6	83:1	A	C ₁	c	1	720	498	B	C _s	a	1	720	6
Ma6b(AA)	140	132	8	16.5:1	A	C ₁	c	1	1440	132	B	C _s	a	1	1440	8
Ma6b(AB)	280	276	4	69:1	A	C ₁	c	1	720	276	B	C _s	a	1	720	4
Ma5b4	126	114	12	9.5:1	A	C ₁	c	1	2880	114	B	C _s	a	1	2880	12
Ma5b3c	504	486	18	27:1	A	C ₁	c	1	720	486	B	C _s	a	1	720	18
Ma5b2c2	756	732	24	30.5:1	A	C ₁	c	1	480	732	B	C _s	a	1	480	24
Ma5b2cd	1512	1494	18	83:1	A	C ₁	c	1	240	1494	B	C _s	a	1	240	18
Ma5b2(AA)	420	404	16	25.3:1	A	C ₁	c	1	480	404	B	C _s	a	1	480	16
Ma5b2(AB)	840	828	12	69:1	A	C ₁	c	1	240	828	B	C _s	a	1	240	12
Ma5bcde	3024	3024	0	1	A	C ₁	c	1	120	3024						
Ma5bc(AA)	840	828	12	69:1	A	C ₁	c	1	240	828	B	C _s	a	1	240	12
Ma5bc(AB)	1680	1680	0	1	A	C ₁	c	1	120	1680						
Ma5(AA)2	120	112	8	14:1	A	C ₁	c	1	960	112	B	C _s	a	1	960	8
Ma5(AA)(BB)	240	230	10	23:1	A	C ₁	c	1	480	230	B	C _s	a	1	480	10

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A32 (continuação).

MFF-9 Muffin

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma5(AA)(AB)	480	472	8	59:1	A	C ₁	c	1	240	472	B	C _s	a	1	240	8
Ma5(AB)2	480	474	6	79:1	A	C ₁	c	1	240	474	B	C _s	a	1	240	6
Ma5(AB)(CD)	960	960	0	1	A	C ₁	c	1	120	960						
Ma4b4c	630	612	18	34:1	A	C ₁	c	1	576	612	B	C _s	a	1	576	18
Ma4b3c2	1260	1230	30	41:1	A	C ₁	c	1	288	1230	B	C _s	a	1	288	30
Ma4b3cd	2520	2502	18	139:1	A	C ₁	c	1	144	2502	B	C _s	a	1	144	18
Ma4b3(AA)	700	680	20	34:1	A	C ₁	c	1	288	680	B	C _s	a	1	288	20
Ma4b3(AB)	1400	1388	12	115.7:1	A	C ₁	c	1	144	1388	B	C _s	a	1	144	12
Ma4b2c2d	3780	3744	36	104:1	A	C ₁	c	1	96	3744	B	C _s	a	1	96	36
Ma4b2cde	7560	7542	18	419:1	A	C ₁	c	1	48	7542	B	C _s	a	1	48	18
Ma4b2c(AA)	2100	2076	24	86.5:1	A	C ₁	c	1	96	2076	B	C _s	a	1	96	24
Ma4b2c(AB)	4200	4188	12	349:1	A	C ₁	c	1	48	4188	B	C _s	a	1	48	12
Ma4bcdef	15120	15120	0	1	A	C ₁	c	1	24	15120						
Ma4bcd(AA)	4200	4188	12	349:1	A	C ₁	c	1	48	4188	B	C _s	a	1	48	12
Ma4bcd(AB)	8400	8400	0	1	A	C ₁	c	1	24	8400						
Ma4b(AA)2	600	584	16	36.5:1	A	C ₁	c	1	192	584	B	C _s	a	1	192	16
Ma4b(AA)(BB)	1200	1186	14	84.7:1	A	C ₁	c	1	96	1186	B	C _s	a	1	96	14
Ma4b(AA)(AB)	2400	2392	8	299:1	A	C ₁	c	1	48	2392	B	C _s	a	1	48	8
Ma4b(AB)2	2400	2382	18	132.3:1	A	C ₁	c	1	48	2382	B	C _s	a	1	48	18
Ma4b(AB)(CD)	4800	4800	0	1	A	C ₁	c	1	24	4800						
Ma3b3c3	1680	1644	36	45.7:1	A	C ₁	c	1	216	1644	B	C _s	a	1	216	36
Ma3b3c2d	5040	5004	36	139:1	A	C ₁	c	1	72	5004	B	C _s	a	1	72	36

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A32 (continuação).

MFF-9 Muffin

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3b3cde	10080	10080	0	1	A	C ₁	c	1	36	10080						
Ma3b3c(AA)	2800	2776	24	115.7:1	A	C ₁	c	1	72	2776	B	C _s	a	1	72	24
Ma3b3c(AB)	5600	5600	0	1	A	C ₁	c	1	36	5600						
Ma3b2c2d2	7560	7500	60	125:1	A	C ₁	c	1	48	7500	B	C _s	a	1	48	60
Ma3b2c2de	15120	15084	36	419:1	A	C ₁	c	1	24	15084	B	C _s	a	1	24	36
Ma3b2c2(AA)	4200	4160	40	104:1	A	C ₁	c	1	48	4160	B	C _s	a	1	48	40
Ma3b2c2(AB)	8400	8376	24	349:1	A	C ₁	c	1	24	8376	B	C _s	a	1	24	24
Ma3b2cdef	30240	30240	0	1	A	C ₁	c	1	12	30240						
Ma3b2cd(AA)	8400	8376	24	349:1	A	C ₁	c	1	24	8376	B	C _s	a	1	24	24
Ma3b2cd(AB)	16800	16800	0	1	A	C ₁	c	1	12	16800						
Ma3b2(AA)2	1200	1176	24	49:1	A	C ₁	c	1	96	1176	B	C _s	a	1	96	24
Ma3b2(AA)(BB)	2400	2376	24	99:1	A	C ₁	c	1	48	2376	B	C _s	a	1	48	24
Ma3b2(AA)(AB)	4800	4784	16	299:1	A	C ₁	c	1	24	4784	B	C _s	a	1	24	16
Ma3b2(AB)2	4800	4776	24	199:1	A	C ₁	c	1	24	4776	B	C _s	a	1	24	24
Ma3b2(AB)(CD)	9600	9600	0	1	A	C ₁	c	1	12	9600						
Ma3bcdefg	60480	60480	0	1	A	C ₁	c	1	6	60480						
Ma3bcde(AA)	16800	16800	0	1	A	C ₁	c	1	12	16800						
Ma3bcde(AB)	33600	33600	0	1	A	C ₁	c	1	6	33600						
Ma3bc(AA)2	2400	2376	24	99:1	A	C ₁	c	1	48	2376	B	C _s	a	1	48	24
Ma3bc(AA)(BB)	4800	4788	12	399:1	A	C ₁	c	1	24	4788	B	C _s	a	1	24	12
Ma3bc(AA)(AB)	9600	9600	0	1	A	C ₁	c	1	12	9600						
Ma3bc(AB)2	9600	9564	36	265.7:1	A	C ₁	c	1	12	9564	B	C _s	a	1	12	36

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A32 (continuação).

MFF-9 Muffin

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3bc(AB)(CD)	19200	19200	0	1	A	C ₁	c	1	6	19200						
Ma3(AA)3	232	222	10	22.2:1	A	C ₁	c	1	288	222	B	C _s	a	1	288	10
Ma3(AA)2(BB)	696	682	14	48.7:1	A	C ₁	c	1	96	682	B	C _s	a	1	96	14
Ma3(AA)2(AB)	1392	1376	16	86:1	A	C ₁	c	1	48	1376	B	C _s	a	1	48	16
Ma3(AA)(BB)(CC)	1392	1380	12	115:1	A	C ₁	c	1	48	1380	B	C _s	a	1	48	12
Ma3(AA)(BB)(AB)	2784	2776	8	347:1	A	C ₁	c	1	24	2776	B	C _s	a	1	24	8
Ma3(AA)(AB)2	2784	2768	16	173:1	A	C ₁	c	1	24	2768	B	C _s	a	1	24	16
Ma3(AA)(AB)(CD)	5568	5568	0	1	A	C ₁	c	1	12	5568						
Ma3(AB)3	1856	1832	24	76.3:1	A	C ₁	c	1	36	1832	B	C _s	a	1	36	24
Ma3(AB)2(CD)	5568	5544	24	231:1	A	C ₁	c	1	12	5544	B	C _s	a	1	12	24
Ma3(AB)(CD)(EF)	11136	11136	0	1	A	C ₁	c	1	6	11136						
Ma2b2c2d2e	22680	22608	72	314:1	A	C ₁	c	1	16	22608	B	C _s	a	1	16	72
Ma2b2c2def	45360	45324	36	1259:1	A	C ₁	c	1	8	45324	B	C _s	a	1	8	36
Ma2b2c2d(AA)	12600	12552	48	261.5:1	A	C ₁	c	1	16	12552	B	C _s	a	1	16	48
Ma2b2c2d(AB)	25200	25176	24	1049:1	A	C ₁	c	1	8	25176	B	C _s	a	1	8	24
Ma2b2cdefg	90720	90720	0	1	A	C ₁	c	1	4	90720						
Ma2b2cde(AA)	25200	25176	24	1049:1	A	C ₁	c	1	8	25176	B	C _s	a	1	8	24
Ma2b2cde(AB)	50400	50400	0	1	A	C ₁	c	1	4	50400						
Ma2b2c(AA)2	3600	3568	32	111.5:1	A	C ₁	c	1	32	3568	B	C _s	a	1	32	32
Ma2b2c(AA)(BB)	7200	7172	28	256.1:1	A	C ₁	c	1	16	7172	B	C _s	a	1	16	28
Ma2b2c(AA)(AB)	14400	14384	16	899:1	A	C ₁	c	1	8	14384	B	C _s	a	1	8	16
Ma2b2c(AB)2	14400	14364	36	399:1	A	C ₁	c	1	8	14364	B	C _s	a	1	8	36

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A32 (continuação).

MFF-9 Muffin

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2b2c(AB)(CD)	28800	28800	0	1	A	C ₁	c	1	4	28800						
Ma2bcdefgh	181440	181440	0	1	A	C ₁	c	1	2	181440						
Ma2bcdef(AA)	50400	50400	0	1	A	C ₁	c	1	4	50400						
Ma2bcdef(AB)	100800	100800	0	1	A	C ₁	c	1	2	100800						
Ma2bcd(AA)2	7200	7176	24	299:1	A	C ₁	c	1	16	7176	B	C _s	a	1	16	24
Ma2bcd(AA)(BB)	14400	14388	12	1199:1	A	C ₁	c	1	8	14388	B	C _s	a	1	8	12
Ma2bcd(AA)(AB)	28800	28800	0	1	A	C ₁	c	1	4	28800						
Ma2bcd(AB)2	28800	28764	36	799:1	A	C ₁	c	1	4	28764	B	C _s	a	1	4	36
Ma2bcd(AB)(CD)	57600	57600	0	1	A	C ₁	c	1	2	57600						
Ma2b(AA)3	696	682	14	48.7:1	A	C ₁	c	1	96	682	B	C _s	a	1	96	14
Ma2b(AA)2(BB)	2088	2070	18	115:1	A	C ₁	c	1	32	2070	B	C _s	a	1	32	18
Ma2b(AA)2(AB)	4176	4160	16	260:1	A	C ₁	c	1	16	4160	B	C _s	a	1	16	16
Ma2b(AA)(BB)(CC)	4176	4164	12	347:1	A	C ₁	c	1	16	4164	B	C _s	a	1	16	12
Ma2b(AA)(BB)(AB)	8352	8344	8	1043:1	A	C ₁	c	1	8	8344	B	C _s	a	1	8	8
Ma2b(AA)(AB)2	8352	8328	24	347:1	A	C ₁	c	1	8	8328	B	C _s	a	1	8	24
Ma2b(AA)(AB)(CD)	16704	16704	0	1	A	C ₁	c	1	4	16704						
Ma2b(AB)3	5568	5544	24	231:1	A	C ₁	c	1	12	5544	B	C _s	a	1	12	24
Ma2b(AB)2(CD)	16704	16680	24	695:1	A	C ₁	c	1	4	16680	B	C _s	a	1	4	24
Ma2b(AB)(CD)(EF)	33408	33408	0	1	A	C ₁	c	1	2	33408						
Mabcdefghi	362880	362880	0	1	A	C ₁	c	1	1	362880						
Mabcdefg(AA)	100800	100800	0	1	A	C ₁	c	1	2	100800						
Mabcdefg(AB)	201600	201600	0	1	A	C ₁	c	1	1	201600						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A32 (continuação).

MFF-9 Muffin

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Mabcde(AA)2	14400	14400	0	1	A	C ₁	c	1	8	14400						
Mabcde(AA)(BB)	28800	28800	0	1	A	C ₁	c	1	4	28800						
Mabcde(AA)(AB)	57600	57600	0	1	A	C ₁	c	1	2	57600						
Mabcde(AB)2	57600	57600	0	1	A	C ₁	c	1	2	57600						
Mabcde(AB)(CD)	115200	115200	0	1	A	C ₁	c	1	1	115200						
Mabc(AA)3	1392	1380	12	115:1	A	C ₁	c	1	48	1380	B	C _s	a	1	48	12
Mabc(AA)2(BB)	4176	4164	12	347:1	A	C ₁	c	1	16	4164	B	C _s	a	1	16	12
Mabc(AA)2(AB)	8352	8352	0	1	A	C ₁	c	1	8	8352						
Mabc(AA)(BB)(CC)	8352	8352	0	1	A	C ₁	c	1	8	8352						
Mabc(AA)(BB)(AB)	16704	16704	0	1	A	C ₁	c	1	4	16704						
Mabc(AA)(AB)2	16704	16680	24	695:1	A	C ₁	c	1	4	16680	B	C _s	a	1	4	24
Mabc(AA)(AB)(CD)	33408	33408	0	1	A	C ₁	c	1	2	33408						
Mabc(AB)3	11136	11136	0	1	A	C ₁	c	1	6	11136						
Mabc(AB)2(CD)	33408	33408	0	1	A	C ₁	c	1	2	33408						
Mabc(AB)(CD)(EF)	66816	66816	0	1	A	C ₁	c	1	1	66816						
Ma(AA)4	102	98	4	24.5:1	A	C ₁	c	1	384	98	B	C _s	a	1	384	4
Ma(AA)3(BB)	408	400	8	50:1	A	C ₁	c	1	96	400	B	C _s	a	1	96	8
Ma(AA)3(AB)	816	808	8	101:1	A	C ₁	c	1	48	808	B	C _s	a	1	48	8
Ma(AA)2(BB)2	612	604	8	75.5:1	A	C ₁	c	1	64	604	B	C _s	a	1	64	8
Ma(AA)2(BB)(CC)	1224	1216	8	152:1	A	C ₁	c	1	32	1216	B	C _s	a	1	32	8
Ma(AA)2(BB)(AB)	2448	2440	8	305:1	A	C ₁	c	1	16	2440	B	C _s	a	1	16	8
Ma(AA)2(AB)2	2448	2440	8	305:1	A	C ₁	c	1	16	2440	B	C _s	a	1	16	8

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A32 (continuação).

MFF-9 Muffin

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma(AA)2(AB)(CD)	4896	4896	0	1	A	C ₁	c	1	8	4896						
Ma(AA)(BB)(CC)(DD)	2448	2448	0	1	A	C ₁	c	1	16	2448						
Ma(AA)(BB)(CC)(AB)	4896	4896	0	1	A	C ₁	c	1	8	4896						
Ma(AA)(BB)(AB)2	4896	4880	16	305:1	A	C ₁	c	1	8	4880	B	C _s	a	1	8	16
Ma(AA)(BB)(AB)(CD)	9792	9792	0	1	A	C ₁	c	1	4	9792						
Ma(AA)(AB)3	3264	3248	16	203:1	A	C ₁	c	1	12	3248	B	C _s	a	1	12	16
Ma(AA)(AB)2(CD)	9792	9776	16	611:1	A	C ₁	c	1	4	9776	B	C _s	a	1	4	16
Ma(AA)(AB)(CD)(EF)	19584	19584	0	1	A	C ₁	c	1	2	19584						
Ma(AB)4	1632	1632	0	1	A	C ₁	c	1	24	1632						
Ma(AB)3(CD)	6528	6528	0	1	A	C ₁	c	1	6	6528						
Ma(AB)2(CD)2	9792	9792	0	1	A	C ₁	c	1	4	9792						
Ma(AB)2(CD)(EF)	19584	19584	0	1	A	C ₁	c	1	2	19584						
Ma(AB)(CD)(EF)(GH)	39168	39168	0	1	A	C ₁	c	1	1	39168						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A33. OPY-9 Octagonal pyramid. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

OPY-9 Octagonal pyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma9	1	0	1	1	A	C _{8v}	a	8	45360	1						
Ma8b	2	0	2	8:1	A	C _s	a	1	40320	1	B	C _{8v}	a	8	5040	1
Ma7b2	5	0	5	8:1	A	C _s	a	1	10080	4	B	C _{2v}	a	2	5040	1
Ma7bc	9	6	3	2:1	A	C ₁	c	1	5040	6	B	C _s	a	1	5040	3
Ma7(AA)	3	0	3	1	A	C _s	a	1	10080	3						
Ma7(AB)	6	4	2	2:1	A	C ₁	c	1	5040	4	B	C _s	a	1	5040	2
Ma6b3	11	4	7	12:8:1	A	C _s	a	1	4320	6	B	C ₁	c	1	4320	4
					C	C _{2v}	a	2	2160	1						
Ma6b2c	32	24	8	48:14:1	A	C ₁	c	1	1440	24	B	C _s	a	1	1440	7
					C	C _{2v}	a	2	720	1						
Ma6bcd	63	60	3	20:1	A	C ₁	c	1	720	60	B	C _s	a	1	720	3
Ma6b(AA)	21	16	5	3.2:1	A	C ₁	c	1	1440	16	B	C _s	a	1	1440	5
Ma6b(AB)	42	40	2	20:1	A	C ₁	c	1	720	40	B	C _s	a	1	720	2
Ma5b4	17	8	9	32:28:2:1	A	C ₁	c	1	2880	8	B	C _s	a	1	2880	7
					C	C _{2v}	a	2	1440	1	D	C _{4v}	a	4	720	1
Ma5b3c	63	54	9	6:1	A	C ₁	c	1	720	54	B	C _s	a	1	720	9
Ma5b2c2	96	78	18	152:34:2:1	A	C ₁	c	1	480	76	B	C _s	a	1	480	17
					C	C ₂	c	2	240	2	D	C _{2v}	a	2	240	1
Ma5b2cd	189	180	9	20:1	A	C ₁	c	1	240	180	B	C _s	a	1	240	9
Ma5b2(AA)	63	52	11	4.7:1	A	C ₁	c	1	480	52	B	C _s	a	1	480	11
Ma5b2(AB)	126	120	6	20:1	A	C ₁	c	1	240	120	B	C _s	a	1	240	6
Ma5bcde	378	378	0	1	A	C ₁	c	1	120	378						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A33 (continuação).

OPY-9 Octagonal pyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma5bc(AA)	126	120	6	20:1	A	C ₁	c	1	240	120	B	C _s	a	1	240	6
Ma5bc(AB)	252	252	0	1	A	C ₁	c	1	120	252						
Ma5(AA)2	22	14	8	14:6:1	A	C ₁	c	1	960	14	B	C _s	a	1	960	6
					C	C _{2v}	a	2	480	2						
Ma5(AA)(BB)	42	36	6	6:1	A	C ₁	c	1	480	36	B	C _s	a	1	480	6
Ma5(AA)(AB)	84	80	4	20:1	A	C ₁	c	1	240	80	B	C _s	a	1	240	4
Ma5(AB)2	86	76	10	36:5:1	A	C ₁	c	1	240	72	B	C _s	a	1	240	10
					C	C ₂	c	2	120	4						
Ma5(AB)(CD)	168	168	0	1	A	C ₁	c	1	120	168						
Ma4b4c	80	68	12	272:40:2:1	A	C ₁	c	1	576	68	B	C _s	a	1	576	10
					C	C _{2v}	a	2	288	1	D	C _{4v}	a	4	144	1
Ma4b3c2	159	138	21	272:40:2:1	A	C ₁	c	1	288	136	B	C _s	a	1	288	20
					C	C ₂	c	2	144	2	D	C _{2v}	a	2	144	1
Ma4b3cd	315	306	9	34:1	A	C ₁	c	1	144	306	B	C _s	a	1	144	9
Ma4b3(AA)	105	92	13	7.1:1	A	C ₁	c	1	288	92	B	C _s	a	1	288	13
Ma4b3(AB)	210	204	6	34:1	A	C ₁	c	1	144	204	B	C _s	a	1	144	6
Ma4b2c2d	474	450	24	896:46:2:1	A	C ₁	c	1	96	448	B	C _s	a	1	96	23
					C	C ₂	c	2	48	2	D	C _{2v}	a	2	48	1
Ma4b2cde	945	936	9	104:1	A	C ₁	c	1	48	936	B	C _s	a	1	48	9
Ma4b2c(AA)	315	300	15	20:1	A	C ₁	c	1	96	300	B	C _s	a	1	96	15
Ma4b2c(AB)	630	624	6	104:1	A	C ₁	c	1	48	624	B	C _s	a	1	48	6
Ma4bcdef	1890	1890	0	1	A	C ₁	c	1	24	1890						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A33 (continuação).

OPY-9 Octagonal pyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma4bcd(AA)	630	624	6	104:1	A	C ₁	c	1	48	624	B	C _s	a	1	48	6
Ma4bcd(AB)	1260	1260	0	1	A	C ₁	c	1	24	1260						
Ma4b(AA)2	106	94	12	94:10:1	A	C ₁	c	1	192	94	B	C _s	a	1	192	10
					C	C _{2v}	a	2	96	2						
Ma4b(AA)(BB)	210	202	8	25.3:1	A	C ₁	c	1	96	202	B	C _s	a	1	96	8
Ma4b(AA)(AB)	420	416	4	104:1	A	C ₁	c	1	48	416	B	C _s	a	1	48	4
Ma4b(AB)2	422	406	16	201:8:1	A	C ₁	c	1	48	402	B	C _s	a	1	48	16
					C	C ₂	c	2	24	4						
Ma4b(AB)(CD)	840	840	0	1	A	C ₁	c	1	24	840						
Ma3b3c3	210	192	18	10.7:1	A	C ₁	c	1	216	192	B	C _s	a	1	216	18
Ma3b3c2d	630	612	18	34:1	A	C ₁	c	1	72	612	B	C _s	a	1	72	18
Ma3b3cde	1260	1260	0	1	A	C ₁	c	1	36	1260						
Ma3b3c(AA)	420	408	12	34:1	A	C ₁	c	1	72	408	B	C _s	a	1	72	12
Ma3b3c(AB)	840	840	0	1	A	C ₁	c	1	36	840						
Ma3b2c2d2	948	906	42	300:14:1	A	C ₁	c	1	48	900	B	C _s	a	1	48	42
					C	C ₂	c	2	24	6						
Ma3b2c2de	1890	1872	18	104:1	A	C ₁	c	1	24	1872	B	C _s	a	1	24	18
Ma3b2c2(AA)	630	604	26	23.2:1	A	C ₁	c	1	48	604	B	C _s	a	1	48	26
Ma3b2c2(AB)	1260	1248	12	104:1	A	C ₁	c	1	24	1248	B	C _s	a	1	24	12
Ma3b2cdef	3780	3780	0	1	A	C ₁	c	1	12	3780						
Ma3b2cd(AA)	1260	1248	12	104:1	A	C ₁	c	1	24	1248	B	C _s	a	1	24	12
Ma3b2cd(AB)	2520	2520	0	1	A	C ₁	c	1	12	2520						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A33 (continuação).

OPY-9 Octagonal pyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3b2(AA)2	212	192	20	190:18:1:1	A	C ₁	c	1	96	190	B	C _s	a	1	96	18
					C'	C ₂	c	2	48	2	C''	C _{2v}	a	2	48	2
Ma3b2(AA)(BB)	420	406	14	29:1	A	C ₁	c	1	48	406	B	C _s	a	1	48	14
Ma3b2(AA)(AB)	840	832	8	104:1	A	C ₁	c	1	24	832	B	C _s	a	1	24	8
Ma3b2(AB)2	844	818	26	202.5:6.5 :1	A	C ₁	c	1	24	810	B	C _s	a	1	24	26
					C	C ₂	c	2	12	8						
Ma3b2(AB)(CD)	1680	1680	0	1	A	C ₁	c	1	12	1680						
Ma3bcdefg	7560	7560	0	1	A	C ₁	c	1	6	7560						
Ma3bcde(AA)	2520	2520	0	1	A	C ₁	c	1	12	2520						
Ma3bcde(AB)	5040	5040	0	1	A	C ₁	c	1	6	5040						
Ma3bc(AA)2	420	408	12	34:1	A	C ₁	c	1	48	408	B	C _s	a	1	48	12
Ma3bc(AA)(BB)	840	834	6	139:1	A	C ₁	c	1	24	834	B	C _s	a	1	24	6
Ma3bc(AA)(AB)	1680	1680	0	1	A	C ₁	c	1	12	1680						
Ma3bc(AB)2	1680	1662	18	92.3:1	A	C ₁	c	1	12	1662	B	C _s	a	1	12	18
Ma3bc(AB)(CD)	3360	3360	0	1	A	C ₁	c	1	6	3360						
Ma3(AA)3	47	38	9	4.2:1	A	C ₁	c	1	288	38	B	C _s	a	1	288	9
Ma3(AA)2(BB)	141	130	11	11.8:1	A	C ₁	c	1	96	130	B	C _s	a	1	96	11
Ma3(AA)2(AB)	282	274	8	34.3:1	A	C ₁	c	1	48	274	B	C _s	a	1	48	8
Ma3(AA)(BB)(CC)	282	276	6	46:1	A	C ₁	c	1	48	276	B	C _s	a	1	48	6
Ma3(AA)(BB)(AB)	564	560	4	140:1	A	C ₁	c	1	24	560	B	C _s	a	1	24	4
Ma3(AA)(AB)2	564	548	16	34.3:1	A	C ₁	c	1	24	548	B	C _s	a	1	24	16
Ma3(AA)(AB)(CD)	1128	1128	0	1	A	C ₁	c	1	12	1128						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A33 (continuação).

OPY-9 Octagonal pyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3(AB)3	376	364	12	30.3:1	A	C ₁	c	1	36	364	B	C _s	a	1	36	12
Ma3(AB)2(CD)	1128	1116	12	93:1	A	C ₁	c	1	12	1116	B	C _s	a	1	12	12
Ma3(AB)(CD)(EF)	2256	2256	0	1	A	C ₁	c	1	6	2256						
Ma2b2c2d2e	2838	2790	48	928:16:1	A	C ₁	c	1	16	2784	B	C _s	a	1	16	48
					C	C ₂	c	2	8	6						
Ma2b2c2def	5670	5652	18	314:1	A	C ₁	c	1	8	5652	B	C _s	a	1	8	18
Ma2b2c2d(AA)	1890	1860	30	62:1	A	C ₁	c	1	16	1860	B	C _s	a	1	16	30
Ma2b2c2d(AB)	3780	3768	12	314:1	A	C ₁	c	1	8	3768	B	C _s	a	1	8	12
Ma2b2cdefg	11340	11340	0	1	A	C ₁	c	1	4	11340						
Ma2b2cde(AA)	3780	3768	12	314:1	A	C ₁	c	1	8	3768	B	C _s	a	1	8	12
Ma2b2cde(AB)	7560	7560	0	1	A	C ₁	c	1	4	7560						
Ma2b2c(AA)2	632	608	24	606:22:1:1	A	C ₁	c	1	32	606	B	C _s	a	1	32	22
					C'	C ₂	c	2	16	2	C''	C _{2v}	a	2	16	2
Ma2b2c(AA)(BB)	1260	1244	16	77.8:1	A	C ₁	c	1	16	1244	B	C _s	a	1	16	16
Ma2b2c(AA)(AB)	2520	2512	8	314:1	A	C ₁	c	1	8	2512	B	C _s	a	1	8	8
Ma2b2c(AB)2	2524	2492	32	621:8:1	A	C ₁	c	1	8	2484	B	C _s	a	1	8	32
					C	C ₂	c	2	4	8						
Ma2b2c(AB)(CD)	5040	5040	0	1	A	C ₁	c	1	4	5040						
Ma2bcdefgh	22680	22680	0	1	A	C ₁	c	1	2	22680						
Ma2bcdef(AA)	7560	7560	0	1	A	C ₁	c	1	4	7560						
Ma2bcdef(AB)	15120	15120	0	1	A	C ₁	c	1	2	15120						
Ma2bcd(AA)2	1260	1248	12	104:1	A	C ₁	c	1	16	1248	B	C _s	a	1	16	12

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A33 (continuação).

OPY-9 Octagonal pyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2bcd(AA)(BB)	2520	2514	6	419:1	A	C ₁	c	1	8	2514	B	C _s	a	1	8	6
Ma2bcd(AA)(AB)	5040	5040	0	1	A	C ₁	c	1	4	5040						
Ma2bcd(AB)2	5040	5022	18	279:1	A	C ₁	c	1	4	5022	B	C _s	a	1	4	18
Ma2bcd(AB)(CD)	10080	10080	0	1	A	C ₁	c	1	2	10080						
Ma2b(AA)3	141	130	11	11.8:1	A	C ₁	c	1	96	130	B	C _s	a	1	96	11
Ma2b(AA)2(BB)	423	410	13	31.5:1	A	C ₁	c	1	32	410	B	C _s	a	1	32	13
Ma2b(AA)2(AB)	846	838	8	104.8:1	A	C ₁	c	1	16	838	B	C _s	a	1	16	8
Ma2b(AA)(BB)(CC)	846	840	6	140:1	A	C ₁	c	1	16	840	B	C _s	a	1	16	6
Ma2b(AA)(BB)(AB)	1692	1688	4	422:1	A	C ₁	c	1	8	1688	B	C _s	a	1	8	4
Ma2b(AA)(AB)2	1692	1672	20	83.6:1	A	C ₁	c	1	8	1672	B	C _s	a	1	8	20
Ma2b(AA)(AB)(CD)	3384	3384	0	1	A	C ₁	c	1	4	3384						
Ma2b(AB)3	1128	1116	12	93:1	A	C ₁	c	1	12	1116	B	C _s	a	1	12	12
Ma2b(AB)2(CD)	3384	3372	12	281:1	A	C ₁	c	1	4	3372	B	C _s	a	1	4	12
Ma2b(AB)(CD)(EF)	6768	6768	0	1	A	C ₁	c	1	2	6768						
Mabcdefghi	45360	45360	0	1	A	C ₁	c	1	1	45360						
Mabcdefg(AA)	15120	15120	0	1	A	C ₁	c	1	2	15120						
Mabcdefg(AB)	30240	30240	0	1	A	C ₁	c	1	1	30240						
Mabcde(AA)2	2520	2520	0	1	A	C ₁	c	1	8	2520						
Mabcde(AA)(BB)	5040	5040	0	1	A	C ₁	c	1	4	5040						
Mabcde(AA)(AB)	10080	10080	0	1	A	C ₁	c	1	2	10080						
Mabcde(AB)2	10080	10080	0	1	A	C ₁	c	1	2	10080						
Mabcde(AB)(CD)	20160	20160	0	1	A	C ₁	c	1	1	20160						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A33 (continuação).

OPY-9 Octagonal pyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Mabc(AA)3	282	276	6	46:1	A	C ₁	c	1	48	276	B	C _s	a	1	48	6
Mabc(AA)2(BB)	846	840	6	140:1	A	C ₁	c	1	16	840	B	C _s	a	1	16	6
Mabc(AA)2(AB)	1692	1692	0	1	A	C ₁	c	1	8	1692						
Mabc(AA)(BB)(CC)	1692	1692	0	1	A	C ₁	c	1	8	1692						
Mabc(AA)(BB)(AB)	3384	3384	0	1	A	C ₁	c	1	4	3384						
Mabc(AA)(AB)2	3384	3372	12	281:1	A	C ₁	c	1	4	3372	B	C _s	a	1	4	12
Mabc(AA)(AB)(CD)	6768	6768	0	1	A	C ₁	c	1	2	6768						
Mabc(AB)3	2256	2256	0	1	A	C ₁	c	1	6	2256						
Mabc(AB)2(CD)	6768	6768	0	1	A	C ₁	c	1	2	6768						
Mabc(AB)(CD)(EF)	13536	13536	0	1	A	C ₁	c	1	1	13536						
Ma(AA)4	25	20	5	80:12:2:1	A	C ₁	c	1	384	20	B	C _s	a	1	384	3
					C	C _{2v}	a	2	192	1	D	C _{4v}	a	4	96	1
Ma(AA)3(BB)	95	90	5	18:1	A	C ₁	c	1	96	90	B	C _s	a	1	96	5
Ma(AA)3(AB)	190	186	4	46.5:1	A	C ₁	c	1	48	186	B	C _s	a	1	48	4
Ma(AA)2(BB)2	144	134	10	264:18:2:1	A	C ₁	c	1	64	132	B	C _s	a	1	64	9
					C	C ₂	c	2	32	2	D	C _{2v}	a	2	32	1
Ma(AA)2(BB)(CC)	285	280	5	56:1	A	C ₁	c	1	32	280	B	C _s	a	1	32	5
Ma(AA)2(BB)(AB)	570	566	4	141.5:1	A	C ₁	c	1	16	566	B	C _s	a	1	16	4
Ma(AA)2(AB)2	573	558	15	184:5:1	A	C ₁	c	1	16	552	B	C _s	a	1	16	15
					C	C ₂	c	2	8	6						
Ma(AA)2(AB)(CD)	1140	1140	0	1	A	C ₁	c	1	8	1140						
Ma(AA)(BB)(CC)(DD)	570	570	0	1	A	C ₁	c	1	16	570						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A33 (continuação).

OPY-9 Octagonal pyramid

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma(AA)(BB)(CC)(AB)	1140	1140	0	1	A	C ₁	c	1	8	1140						
Ma(AA)(BB)(AB)2	1140	1130	10	113:1	A	C ₁	c	1	8	1130	B	C _s	a	1	8	10
Ma(AA)(BB)(AB)(CD)	2280	2280	0	1	A	C ₁	c	1	4	2280						
Ma(AA)(AB)3	760	752	8	94:1	A	C ₁	c	1	12	752	B	C _s	a	1	12	8
Ma(AA)(AB)2(CD)	2280	2272	8	284:1	A	C ₁	c	1	4	2272	B	C _s	a	1	4	8
Ma(AA)(AB)(CD)(EF)	4560	4560	0	1	A	C ₁	c	1	2	4560						
Ma(AB)4	384	374	10	740:14:3:2 :1	A	C ₁	c	1	24	370	B	C _s	a	1	24	7
					C	C _{2v}	a	2	12	3	D	C ₂	c	2	12	2
					E	C ₄	c	4	6	2						
Ma(AB)3(CD)	1520	1520	0	1	A	C ₁	c	1	6	1520						
Ma(AB)2(CD)2	2286	2266	20	375.7:3.3 :1	A	C ₁	c	1	4	2254	B	C _s	a	1	4	20
					C	C ₂	c	2	2	12						
Ma(AB)2(CD)(EF)	4560	4560	0	1	A	C ₁	c	1	2	4560						
Ma(AB)(CD)(EF)(GH)	9120	9120	0	1	A	C ₁	c	1	1	9120						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A34. TCTPR-9 Tricapped trigonal prism. Total é o número de estereoisômeros para o shape e fórmula molecular correspondente. Total é igual a soma dos estereoisômeros quirais (c) e aquirais (a). RCR é o *random coordination ratio*. Os estereoisômeros foram organizados em subconjuntos de acordo com seus grupos pontuais (G.P.) e ordenados de acordo com o RCR do grupo pontual em questão. Dentro de cada subconjunto, χ identifica a quiralidade do subconjunto, σ identifica o número de simetria, RCW o *random coordination weight* e # é o número de estereoisômeros do subconjunto.

TCTPR-9 Tricapped trigonal prism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma9	1	0	1	1	A	D _{3h}	a	6	60480	1						
Ma8b	2	0	2	2:1	A	C _s	a	1	40320	1	B	C _{2v}	a	2	20160	1
Ma7b2	8	4	4	2:2:1:1	A'	C ₁	c	1	10080	2	A''	C _s	a	1	10080	2
					B'	C ₂	c	2	5040	2	B''	C _{2v}	a	2	5040	2
Ma7bc	12	8	4	2:1	A	C ₁	c	1	5040	8	B	C _s	a	1	5040	4
Ma7(AA)	3	2	1	2:1	A	C ₁	c	1	10080	2	B	C _s	a	1	10080	1
Ma7(AB)	6	6	0	1	A	C ₁	c	1	5040	6						
Ma6b3	17	10	7	48:24:6:3 :2:1	A	C ₁	c	1	4320	8	B	C _s	a	1	4320	4
					C	C ₂	c	2	2160	2	D	C _{2v}	a	2	2160	1
					E	C _{3v}	a	3	1440	1	F	D _{3h}	a	6	720	1
Ma6b2c	44	36	8	34:6:1:1	A	C ₁	c	1	1440	34	B	C _s	a	1	1440	6
					C'	C ₂	c	2	720	2	C''	C _{2v}	a	2	720	2
Ma6bcd	84	80	4	20:1	A	C ₁	c	1	720	80	B	C _s	a	1	720	4
Ma6b(AA)	21	18	3	6:1	A	C ₁	c	1	1440	18	B	C _s	a	1	1440	3
Ma6b(AB)	42	42	0	1	A	C ₁	c	1	720	42						
Ma5b4	24	16	8	12:6:2:1	A	C ₁	c	1	2880	12	B	C _s	a	1	2880	6
					C	C ₂	c	2	1440	4	D	C _{2v}	a	2	1440	2
Ma5b3c	84	72	12	6:1	A	C ₁	c	1	720	72	B	C _s	a	1	720	12
Ma5b2c2	132	116	16	106:14:5:1	A	C ₁	c	1	480	106	B	C _s	a	1	480	14
					C	C ₂	c	2	240	10	D	C _{2v}	a	2	240	2
Ma5b2cd	252	240	12	20:1	A	C ₁	c	1	240	240	B	C _s	a	1	240	12
Ma5b2(AA)	63	58	5	11.6:1	A	C ₁	c	1	480	58	B	C _s	a	1	480	5

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A34 (continuação).

TCTPR-9 Tricapped trigonal prism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma5b2(AB)	126	126	0	1	A	C ₁	c	1	240	126						
Ma5bcde	504	504	0	1	A	C ₁	c	1	120	504						
Ma5bc(AA)	126	120	6	20:1	A	C ₁	c	1	240	120	B	C _s	a	1	240	6
Ma5bc(AB)	252	252	0	1	A	C ₁	c	1	120	252						
Ma5(AA)2	20	18	2	24:6:2:1	A	C ₁	c	1	960	12	B	C ₂	c	2	480	6
					C	C _s	a	1	960	1	D	C _{2v}	a	2	480	1
Ma5(AA)(BB)	33	32	1	32:1	A	C ₁	c	1	480	32	B	C _s	a	1	480	1
Ma5(AA)(AB)	66	66	0	1	A	C ₁	c	1	240	66						
Ma5(AB)2	73	70	3	18.7:2.3:1	A	C ₁	c	1	240	56	B	C ₂	c	2	120	14
					C	C _s	a	1	240	3						
Ma5(AB)(CD)	132	132	0	1	A	C ₁	c	1	120	132						
Ma4b4c	108	96	12	92:10:2:1	A	C ₁	c	1	576	92	B	C _s	a	1	576	10
					C	C ₂	c	2	288	4	D	C _{2v}	a	2	288	2
Ma4b3c2	216	196	20	186:18:5:1	A	C ₁	c	1	288	186	B	C _s	a	1	288	18
					C	C ₂	c	2	144	10	D	C _{2v}	a	2	144	2
Ma4b3cd	420	408	12	34:1	A	C ₁	c	1	144	408	B	C _s	a	1	144	12
Ma4b3(AA)	105	98	7	14:1	A	C ₁	c	1	288	98	B	C _s	a	1	288	7
Ma4b3(AB)	210	210	0	1	A	C ₁	c	1	144	210						
Ma4b2c2d	636	612	24	602:22:5:1	A	C ₁	c	1	96	602	B	C _s	a	1	96	22
					C	C ₂	c	2	48	10	D	C _{2v}	a	2	48	2
Ma4b2cde	1260	1248	12	104:1	A	C ₁	c	1	48	1248	B	C _s	a	1	48	12
Ma4b2c(AA)	315	306	9	34:1	A	C ₁	c	1	96	306	B	C _s	a	1	96	9

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A34 (continuação).

TCTPR-9 Tricapped trigonal prism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma4b2c(AB)	630	630	0	1	A	C ₁	c	1	48	630						
Ma4bcdef	2520	2520	0	1	A	C ₁	c	1	24	2520						
Ma4bcd(AA)	630	624	6	104:1	A	C ₁	c	1	48	624	B	C _s	a	1	48	6
Ma4bcd(AB)	1260	1260	0	1	A	C ₁	c	1	24	1260						
Ma4b(AA)2	86	80	6	148:10:6:1	A	C ₁	c	1	192	74	B	C _s	a	1	192	5
					C	C ₂	c	2	96	6	D	C _{2v}	a	2	96	1
Ma4b(AA)(BB)	165	162	3	54:1	A	C ₁	c	1	96	162	B	C _s	a	1	96	3
Ma4b(AA)(AB)	330	330	0	1	A	C ₁	c	1	48	330						
Ma4b(AB)2	337	328	9	44.9:1.3:1	A	C ₁	c	1	48	314	B	C _s	a	1	48	9
					C	C ₂	c	2	24	14						
Ma4b(AB)(CD)	660	660	0	1	A	C ₁	c	1	24	660						
Ma3b3c3	282	258	24	258:21:1	A	C ₁	c	1	216	258	B	C _s	a	1	216	21
					C	C _{3v}	a	3	72	3						
Ma3b3c2d	840	816	24	34:1	A	C ₁	c	1	72	816	B	C _s	a	1	72	24
Ma3b3cde	1680	1680	0	1	A	C ₁	c	1	36	1680						
Ma3b3c(AA)	420	408	12	34:1	A	C ₁	c	1	72	408	B	C _s	a	1	72	12
Ma3b3c(AB)	840	840	0	1	A	C ₁	c	1	36	840						
Ma3b2c2d2	1272	1232	40	100.7:3.3:1	A	C ₁	c	1	48	1208	B	C _s	a	1	48	40
					C	C ₂	c	2	24	24						
Ma3b2c2de	2520	2496	24	104:1	A	C ₁	c	1	24	2496	B	C _s	a	1	24	24
Ma3b2c2(AA)	630	616	14	44:1	A	C ₁	c	1	48	616	B	C _s	a	1	48	14
Ma3b2c2(AB)	1260	1260	0	1	A	C ₁	c	1	24	1260						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A34 (continuação).

TCTPR-9 Tricapped trigonal prism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3b2cdef	5040	5040	0	1	A	C ₁	c	1	12	5040						
Ma3b2cd(AA)	1260	1248	12	104:1	A	C ₁	c	1	24	1248	B	C _s	a	1	24	12
Ma3b2cd(AB)	2520	2520	0	1	A	C ₁	c	1	12	2520						
Ma3b2(AA)2	172	164	8	152:6:6:1	A	C ₁	c	1	96	152	B'	C ₂	c	2	48	12
					B''	C _s	a	1	96	6	C	C _{2v}	a	2	48	2
Ma3b2(AA)(BB)	330	326	4	81.5:1	A	C ₁	c	1	48	326	B	C _s	a	1	48	4
Ma3b2(AA)(AB)	660	660	0	1	A	C ₁	c	1	24	660						
Ma3b2(AB)2	674	662	12	52.8:1.2:1	A	C ₁	c	1	24	634	B	C ₂	c	2	12	28
					C	C _s	a	1	24	12						
Ma3b2(AB)(CD)	1320	1320	0	1	A	C ₁	c	1	12	1320						
Ma3bcdefg	10080	10080	0	1	A	C ₁	c	1	6	10080						
Ma3bcde(AA)	2520	2520	0	1	A	C ₁	c	1	12	2520						
Ma3bcde(AB)	5040	5040	0	1	A	C ₁	c	1	6	5040						
Ma3bc(AA)2	330	318	12	26.5:1	A	C ₁	c	1	48	318	B	C _s	a	1	48	12
Ma3bc(AA)(BB)	660	654	6	109:1	A	C ₁	c	1	24	654	B	C _s	a	1	24	6
Ma3bc(AA)(AB)	1320	1320	0	1	A	C ₁	c	1	12	1320						
Ma3bc(AB)2	1320	1302	18	72.3:1	A	C ₁	c	1	12	1302	B	C _s	a	1	12	18
Ma3bc(AB)(CD)	2640	2640	0	1	A	C ₁	c	1	6	2640						
Ma3(AA)3	31	30	1	42:1.5:1	A	C ₁	c	1	288	28	B	C _s	a	1	288	1
					C	C ₃	c	3	96	2						
Ma3(AA)2(BB)	89	88	1	88:1	A	C ₁	c	1	96	88	B	C _s	a	1	96	1
Ma3(AA)2(AB)	178	178	0	1	A	C ₁	c	1	48	178						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A34 (continuação).

TCTPR-9 Tricapped trigonal prism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma3(AA)(BB)(CC)	178	178	0	1	A	C ₁	c	1	48	178						
Ma3(AA)(BB)(AB)	356	356	0	1	A	C ₁	c	1	24	356						
Ma3(AA)(AB)2	356	354	2	177:1	A	C ₁	c	1	24	354	B	C _s	a	1	24	2
Ma3(AA)(AB)(CD)	712	712	0	1	A	C ₁	c	1	12	712						
Ma3(AB)3	240	240	0	177:1	A	C ₁	c	1	36	236	B	C ₃	c	3	12	4
Ma3(AB)2(CD)	712	712	0	1	A	C ₁	c	1	12	712						
Ma3(AB)(CD)(EF)	1424	1424	0	1	A	C ₁	c	1	6	1424						
Ma2b2c2d2e	3792	3744	48	310:4:1	A	C ₁	c	1	16	3720	B	C _s	a	1	16	48
					C	C ₂	c	2	8	24						
Ma2b2c2def	7560	7536	24	314:1	A	C ₁	c	1	8	7536	B	C _s	a	1	8	24
Ma2b2c2d(AA)	1890	1872	18	104:1	A	C ₁	c	1	16	1872	B	C _s	a	1	16	18
Ma2b2c2d(AB)	3780	3780	0	1	A	C ₁	c	1	8	3780						
Ma2b2cdefg	15120	15120	0	1	A	C ₁	c	1	4	15120						
Ma2b2cde(AA)	3780	3768	12	314:1	A	C ₁	c	1	8	3768	B	C _s	a	1	8	12
Ma2b2cde(AB)	7560	7560	0	1	A	C ₁	c	1	4	7560						
Ma2b2c(AA)2	502	490	12	478:10:6:1	A	C ₁	c	1	32	478	B	C _s	a	1	32	10
					C	C ₂	c	2	16	12	D	C _{2v}	a	2	16	2
Ma2b2c(AA)(BB)	990	984	6	164:1	A	C ₁	c	1	16	984	B	C _s	a	1	16	6
Ma2b2c(AA)(AB)	1980	1980	0	1	A	C ₁	c	1	8	1980						
Ma2b2c(AB)2	1994	1976	18	139.1 :1.3:1	A	C ₁	c	1	8	1948	B	C _s	a	1	8	18
					C	C ₂	c	2	4	28						
Ma2b2c(AB)(CD)	3960	3960	0	1	A	C ₁	c	1	4	3960						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A34 (continuação).

TCTPR-9 Tricapped trigonal prism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma2bcdefgh	30240	30240	0	1	A	C ₁	c	1	2	30240						
Ma2bcdef(AA)	7560	7560	0	1	A	C ₁	c	1	4	7560						
Ma2bcdef(AB)	15120	15120	0	1	A	C ₁	c	1	2	15120						
Ma2bcd(AA)2	990	978	12	81.5:1	A	C ₁	c	1	16	978	B	C _s	a	1	16	12
Ma2bcd(AA)(BB)	1980	1974	6	329:1	A	C ₁	c	1	8	1974	B	C _s	a	1	8	6
Ma2bcd(AA)(AB)	3960	3960	0	1	A	C ₁	c	1	4	3960						
Ma2bcd(AB)2	3960	3942	18	219:1	A	C ₁	c	1	4	3942	B	C _s	a	1	4	18
Ma2bcd(AB)(CD)	7920	7920	0	1	A	C ₁	c	1	2	7920						
Ma2b(AA)3	89	86	3	28.7:1	A	C ₁	c	1	96	86	B	C _s	a	1	96	3
Ma2b(AA)2(BB)	267	264	3	88:1	A	C ₁	c	1	32	264	B	C _s	a	1	32	3
Ma2b(AA)2(AB)	534	534	0	1	A	C ₁	c	1	16	534						
Ma2b(AA)(BB)(CC)	534	534	0	1	A	C ₁	c	1	16	534						
Ma2b(AA)(BB)(AB)	1068	1068	0	1	A	C ₁	c	1	8	1068						
Ma2b(AA)(AB)2	1068	1062	6	177:1	A	C ₁	c	1	8	1062	B	C _s	a	1	8	6
Ma2b(AA)(AB)(CD)	2136	2136	0	1	A	C ₁	c	1	4	2136						
Ma2b(AB)3	712	712	0	1	A	C ₁	c	1	12	712						
Ma2b(AB)2(CD)	2136	2136	0	1	A	C ₁	c	1	4	2136						
Ma2b(AB)(CD)(EF)	4272	4272	0	1	A	C ₁	c	1	2	4272						
Mabcdefghi	60480	60480	0	1	A	C ₁	c	1	1	60480						
Mabcdefg(AA)	15120	15120	0	1	A	C ₁	c	1	2	15120						
Mabcdefg(AB)	30240	30240	0	1	A	C ₁	c	1	1	30240						
Mabcde(AA)2	1980	1980	0	1	A	C ₁	c	1	8	1980						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A34 (continuação).

TCTPR-9 Tricapped trigonal prism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Mabcde(AA)(BB)	3960	3960	0	1	A	C ₁	c	1	4	3960						
Mabcde(AA)(AB)	7920	7920	0	1	A	C ₁	c	1	2	7920						
Mabcde(AB)2	7920	7920	0	1	A	C ₁	c	1	2	7920						
Mabcde(AB)(CD)	15840	15840	0	1	A	C ₁	c	1	1	15840						
Mabc(AA)3	178	172	6	28.7:1	A	C ₁	c	1	48	172	B	C _s	a	1	48	6
Mabc(AA)2(BB)	534	528	6	88:1	A	C ₁	c	1	16	528	B	C _s	a	1	16	6
Mabc(AA)2(AB)	1068	1068	0	1	A	C ₁	c	1	8	1068						
Mabc(AA)(BB)(CC)	1068	1068	0	1	A	C ₁	c	1	8	1068						
Mabc(AA)(BB)(AB)	2136	2136	0	1	A	C ₁	c	1	4	2136						
Mabc(AA)(AB)2	2136	2124	12	177:1	A	C ₁	c	1	4	2124	B	C _s	a	1	4	12
Mabc(AA)(AB)(CD)	4272	4272	0	1	A	C ₁	c	1	2	4272						
Mabc(AB)3	1424	1424	0	1	A	C ₁	c	1	6	1424						
Mabc(AB)2(CD)	4272	4272	0	1	A	C ₁	c	1	2	4272						
Mabc(AB)(CD)(EF)	8544	8544	0	1	A	C ₁	c	1	1	8544						
Ma(AA)4	14	14	0	5:1	A	C ₁	c	1	384	10	B	C ₂	c	2	192	4
Ma(AA)3(BB)	48	48	0	1	A	C ₁	c	1	96	48						
Ma(AA)3(AB)	96	96	0	1	A	C ₁	c	1	48	96						
Ma(AA)2(BB)2	76	76	0	17:1	A	C ₁	c	1	64	68	B	C ₂	c	2	32	8
Ma(AA)2(BB)(CC)	144	144	0	1	A	C ₁	c	1	32	144						
Ma(AA)2(BB)(AB)	288	288	0	1	A	C ₁	c	1	16	288						
Ma(AA)2(AB)2	296	296	0	35:1	A	C ₁	c	1	16	280	B	C ₂	c	2	8	16
Ma(AA)2(AB)(CD)	576	576	0	1	A	C ₁	c	1	8	576						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

Tabela A34 (continuação).

TCTPR-9 Tricapped trigonal prism

Formula*	Set			RCP	Subsets											
	Total	c	a		Subset	Group	χ	σ	RCW	#	Subset	Group	χ	σ	RCW	#
Ma(AA)(BB)(CC)(DD)	288	288	0	1	A	C ₁	c	1	16	288						
Ma(AA)(BB)(CC)(AB)	576	576	0	1	A	C ₁	c	1	8	576						
Ma(AA)(BB)(AB)2	576	576	0	1	A	C ₁	c	1	8	576						
Ma(AA)(BB)(AB)(CD)	1152	1152	0	1	A	C ₁	c	1	4	1152						
Ma(AA)(AB)3	384	384	0	1	A	C ₁	c	1	12	384						
Ma(AA)(AB)2(CD)	1152	1152	0	1	A	C ₁	c	1	4	1152						
Ma(AA)(AB)(CD)(EF)	2304	2304	0	1	A	C ₁	c	1	2	2304						
Ma(AB)4	200	200	0	23:1	A	C ₁	c	1	24	184	B	C ₂	c	2	12	16
Ma(AB)3(CD)	768	768	0	1	A	C ₁	c	1	6	768						
Ma(AB)2(CD)2	1168	1168	0	71:1	A	C ₁	c	1	4	1136	B	C ₂	c	2	2	32
Ma(AB)2(CD)(EF)	2304	2304	0	1	A	C ₁	c	1	2	2304						
Ma(AB)(CD)(EF)(GH)	4608	4608	0	1	A	C ₁	c	1	1	4608						

*a, b, c, d,... se refere a ligantes monodentados; (AA) e (AB) se referem a ligantes bidentados, (AA) sendo simétricos e (AB) assimétricos.

APÊNDICE B - GEOMETRIAS IDEAIS PARA VÁRIOS SHAPES E NÚMEROS DE COORDENAÇÃO

As tabelas A35-A46 apresentam os shapes utilizados neste trabalho. Um critério específico foi utilizado para descrever compostos de coordenação 2. Nesses casos, a geometria foi considerada linear (L-2) caso o ângulo entre os dois ligantes fosse superior a 175°. Caso contrário, a geometria foi considerada como sendo angular (A-2).

Tabela A35. Geometrias ideais para os shapes de coordenação 3: TP-3, TPY-3 e TS-3.

Positions	SP-4			SS-4			T-4			vTBPY-4		
	x	y	z	x	y	z	x	y	Z	x	y	z
M	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
1	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-1.0000	0.0000	0.8163	-0.5772	0.0000	0.0000	-1.0000
2	0.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-0.8163	-0.5772	1.0000	0.0000	0.0000
3	-1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.8163	0.0000	0.5772	-0.5000	0.8660	0.0000
4	0.0000	-1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	-0.8163	0.0000	0.5772	-0.5000	-0.8660	0.0000

Tabela A36. Geometrias ideais para os shapes de coordenação 4: SP-4, SS-4, T-4 e vTBPY-4.

Positions	PP-5			SPY-5			TBPY-5		
	x	y	z	x	y	z	x	Y	z
M	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
1	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.0000	1.0000
2	0.3090	0.9511	0.0000	0.9682	0.0000	-0.2500	1.0000	0.0000	0.0000
3	-0.8090	0.5878	0.0000	-0.9682	0.0000	-0.2500	-1.0000	0.0000	0.0000
4	-0.8090	-0.5878	0.0000	0.0000	0.9682	-0.2500	0.0000	0.8660	-0.5000
5	0.3090	-0.9511	0.0000	0.0000	-0.9682	-0.2500	0.0000	-0.8660	-0.5000

Tabela A37. Geometrias ideais para os shapes de coordenação 5: PP-5, SPY-5 e TBPY-5.

Positions	HP-6			OC-6			PPY-6			TPR-6		
	x	y	z	x	y	z	x	y	z	x	y	z
M	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
1	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.0000	-1.0000	-0.6547	-0.3780	0.6547
2	0.5000	0.8660	0.0000	1.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.0000	-0.6547	-0.3780	-0.6547
3	-0.5000	0.8660	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.3090	0.9511	0.0000	0.6547	-0.3780	0.6547
4	-1.0000	0.0000	0.0000	-1.0000	0.0000	0.0000	-0.8090	0.5878	0.0000	0.6547	-0.3780	-0.6547
5	-0.5000	-0.8660	0.0000	0.0000	-1.0000	0.0000	-0.8090	-0.5878	0.0000	0.0000	0.7559	0.6547
6	0.5000	-0.8660	0.0000	0.0000	0.0000	-1.0000	0.3090	-0.9511	0.0000	0.0000	0.7559	-0.6547

Tabela A38. Geometrias ideais para os shapes de coordenação 6: HP-6, OC-6, PPY-6 e TPR-6.

Positions	COC-7			CTPR-7			HP-7		
	x	y	z	x	y	z	x	y	z
M	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
1	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.0000	1.0000	1.0000	0.0000	0.0000
2	0.9777	0.0000	0.2101	0.6869	0.6869	0.2374	0.6235	0.7818	0.0000
3	0.1698	0.9628	0.2101	-0.6869	0.6869	0.2374	-0.2225	0.9749	0.0000
4	-0.9187	0.3344	0.2101	0.6869	-0.6869	0.2374	-0.9010	0.4339	0.0000
5	-0.4888	-0.8467	0.2101	-0.6869	-0.6869	0.2374	-0.9010	-0.4339	0.0000
6	0.3628	-0.6284	-0.6881	0.6175	0.0000	-0.7866	-0.2225	-0.9749	0.0000
7	-0.2601	0.4505	-0.8540	-0.6175	0.0000	-0.7866	0.6235	-0.7818	0.0000

Tabela A39. Geometrias ideais para os shapes de coordenação 7: COC-7, CTPR-7 e HP-7

Positions	HPY-7			PBPY-7		
	x	y	z	x	y	z
M	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
1	0.0000	0.0000	-1.0000	0.0000	0.0000	1.0000
2	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-1.0000
3	0.5000	0.8660	0.0000	1.0000	0.0000	0.0000
4	-0.5000	0.8660	0.0000	0.3090	0.9511	0.0000
5	-1.0000	0.0000	0.0000	-0.8090	0.5878	0.0000
6	-0.5000	-0.8660	0.0000	-0.8090	-0.5878	0.0000
7	0.5000	-0.8660	0.0000	0.3090	-0.9511	0.0000

Tabela A40. Geometrias ideais para os shapes de coordenação 7: HPY-7, e PBPY-7

Positions	BTPR-8			CU-8			ETBPY-8		
	x	y	z	x	y	z	x	y	z
M	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
1	-0.6547	-0.3780	0.6547	0.5774	0.5774	0.5774	0.6547	0.0000	0.7559
2	-0.6547	-0.3780	-0.6547	0.5774	0.5774	-0.5774	-0.6547	0.0000	0.7559
3	0.6547	-0.3780	0.6547	0.5774	-0.5774	0.5774	0.6547	0.6547	-0.3780
4	0.6547	-0.3780	-0.6547	-0.5774	0.5774	0.5774	-0.6547	0.6547	-0.3780
5	0.0000	0.7559	0.6547	0.5774	-0.5774	-0.5774	0.6547	-0.6547	-0.3780
6	0.0000	0.7559	-0.6547	-0.5774	0.5774	-0.5774	-0.6547	-0.6547	-0.3780
7	0.0000	-1.0000	0.0000	-0.5774	-0.5774	0.5774	1.0000	0.0000	0.0000
8	-0.8660	0.5000	0.0000	-0.5774	-0.5774	-0.5774	-1.0000	0.0000	0.0000

Tabela A41. Geometrias ideais para os shapes de coordenação 8: BTPR-8, CU-8 e ETBPY-8

Positions	HBPY-8			HPY-8			OP-8		
	x	y	z	x	y	z	x	y	z
M	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
1	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.0000	-1.0000	1.0000	0.0000	0.0000
2	0.0000	0.0000	-1.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.7071	0.7071	0.0000
3	0.0000	-1.0000	0.0000	0.6235	0.7818	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000
4	0.8660	-0.5000	0.0000	-0.2225	0.9749	0.0000	-0.7071	0.7071	0.0000
5	0.8660	0.5000	0.0000	-0.9010	0.4339	0.0000	-1.0000	0.0000	0.0000
6	0.0000	1.0000	0.0000	-0.9010	-0.4339	0.0000	-0.7071	-0.7071	0.0000
7	-0.8660	0.5000	0.0000	-0.2225	-0.9749	0.0000	0.0000	-1.0000	0.0000
8	-0.8660	-0.5000	0.0000	0.6235	-0.7818	0.0000	0.7071	-0.7071	0.0000

Tabela A42. Geometrias ideais para os shapes de coordenação 8: HBPY-8, HPY-8 e OP-8.

Positions	SAPR-8			TDD-8		
	x	y	z	x	y	z
M	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
1	0.0000	0.0000	1.0000	-0.5997	0.0000	0.8002
2	0.9653	0.0000	0.2612	0.0000	-0.9364	0.3509
3	-0.5655	0.7823	0.2612	0.5998	0.0000	0.8002
4	-0.8825	-0.3912	0.2612	0.0000	0.9364	0.3509
5	0.1999	-0.9444	0.2612	-0.9364	0.0000	-0.3509
6	0.3998	0.7823	-0.4776	0.0000	-0.5997	-0.8002
7	-0.5998	0.1620	-0.7836	0.9365	0.0000	-0.3509
8	0.4826	-0.3912	-0.7836	0.0000	0.5997	-0.8002

Tabela A43. Geometrias ideais para os shapes de coordenação 8: SAPR-8 e TDD-8.

Positions	CCU-9			CSAPR-9			EP-9			HBPY-9		
	x	y	z	x	y	z	x	y	z	x	y	z
M	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
1	0.6418	0.6418	0.4196	0.0000	0.0000	1.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	-1.0000
2	0.6418	-0.6418	0.4196	0.9322	0.0000	0.3619	0.7660	0.6428	0.0000	1.0000	0.0000	0.0000
3	-0.6418	0.6418	0.4196	0.0000	0.9322	0.3619	0.1736	0.9848	0.0000	0.6235	0.7818	0.0000
4	-0.6418	-0.6418	0.4196	-0.9322	0.0000	0.3619	-0.5000	0.8660	0.0000	-0.2225	0.9749	0.0000
5	0.5387	0.5387	-0.6478	0.0000	-0.9322	0.3619	-0.9397	0.3420	0.0000	-0.9010	0.4339	0.0000
6	0.5387	-0.5387	-0.6478	0.5606	0.5606	-0.6095	-0.9397	-0.3420	0.0000	-0.9010	-0.4339	0.0000
7	-0.5387	0.5387	-0.6478	-0.5606	0.5606	-0.6095	-0.5000	-0.8660	0.0000	-0.2225	-0.9749	0.0000
8	-0.5387	-0.5387	-0.6478	-0.5606	-0.5606	-0.6095	0.1736	-0.9848	0.0000	0.6235	-0.7818	0.0000
9	0.0000	0.0000	1.0000	0.5606	-0.5606	-0.6095	0.7660	-0.6428	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000

Tabela A44. Geometrias ideais para os shapes de coordenação 9: CCU-9, CSAPR-9, EP-9 e HBPY-9.

Positions	HH-9			JTC-9			JTDIC-9		
	x	y	z	x	y	z	x	y	z
M	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
1	1.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.0000	-0.2764	0.8507	-0.4472
2	0.5000	0.8660	0.0000	0.5000	0.8660	0.0000	-0.8944	0.0000	-0.4472
3	-0.5000	0.8660	0.0000	-0.5000	0.8660	0.0000	-0.2764	-0.8507	-0.4472
4	-1.0000	0.0000	0.0000	-1.0000	0.0000	0.0000	0.7236	-0.5257	-0.4472
5	-0.5000	-0.8660	0.0000	-0.5000	-0.8660	0.0000	0.8944	0.0000	0.4472
6	0.5000	-0.8660	0.0000	0.5000	-0.8660	0.0000	0.2764	0.8507	0.4472
7	0.0000	0.0000	1.0000	0.5000	0.2887	-0.8165	-0.7236	-0.5257	0.4472
8	0.5000	0.0000	-0.8660	-0.5000	0.2887	-0.8165	0.0000	0.0000	-1.0000
9	-0.5000	0.0000	-0.8660	0.0000	-0.5774	-0.8165	0.0000	0.0000	1.0000

Tabela A45. Geometrias ideais para os shapes de coordenação 9: HH-9, JTC-9 e JTDIC-9.

Positions	MFF-9			OPY-9			TCTPR-9		
	x	y	z	x	y	z	x	y	z
M	0.0000	0.0002	0.0487	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
1	0.0000	0.9877	0.2066	0.0000	0.0000	-1.0000	0.0000	0.0000	1.0000
2	0.9391	0.3053	0.2066	1.0000	0.0000	0.0000	-0.2357	0.9129	0.3333
3	0.5804	-0.7986	0.2066	0.7071	0.7071	0.0000	-0.9428	0.0000	0.3333
4	-0.5804	-0.7986	0.2066	0.0000	1.0000	0.0000	0.2357	-0.9129	0.3333
5	-0.9391	0.3053	0.2066	-0.7071	0.7071	0.0000	0.9428	0.0000	0.3333
6	-0.5799	-0.3354	-0.6936	-1.0000	0.0000	0.0000	0.5303	0.6847	-0.5000
7	0.5799	-0.3354	-0.6936	-0.7071	-0.7071	0.0000	-0.5303	-0.6847	-0.5000
8	0.0000	0.6696	-0.6943	0.0000	-1.0000	0.0000	-0.5893	0.4564	-0.6667
9	0.0000	0.0002	1.0487	0.7071	-0.7071	0.0000	0.5893	-0.4564	-0.6667

APÊNDICE C - OUTROS TRABALHOS FINALIZADOS DURANTE O PERÍODO DE DOUTORADO

Artigo 1

Título: Exploring the MP2 Energy Surface of nanoalloy clusters with a Genetic Algorithm: Application to Sodium-Potassium

Autores: F. T. Silva¹, B. R. L. Galvão², G. P. Voga¹, M. X. Silva¹, D. D. C. Rodrigues¹ e J. C. Belchior^{1*}

¹ Departamento de Química-ICEx, Universidade Federal de Minas Gerais, Av. Antônio Carlos 6627, Pampulha, (31.270-901) Belo Horizonte, Minas Gerais, Brasil

² Departamento de Química, Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, CEFET-MG, Av. Amazonas 5253, (30421-169) Belo Horizonte, Minas Gerais, Brasil

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2015.09.016>

Resumo (traduzido):

Um algoritmo genético acoplado a cálculos de estrutura eletrônica foi desenvolvido. Este algoritmo tem como finalidade encontrar o mínimo global de uma superfície de energia potencial *ab initio* de clusters metálicos. O critério de convergência do gradiente de energia foi progressivamente reduzido ao longo das gerações com o objetivo de reduzir o número de cálculos de energia. Um estudo de caso foi a liga de Na-K com energias MP2/ECP, onde foi demonstrado que o algoritmo é eficiente em obter o mínimo global. Foi feita, pela primeira vez, uma análise particular de transições 2D-3D-2D para um cluster de 6 átomos. Estruturas inéditas foram desveladas para ligas maiores.

Artigo 2

Título: A genetic algorithm survey on closed-shell atomic nitrogen clusters employing a quantum chemical approach

Autores: M. X. Silva¹, F. T. Silva², B. R. L. Galvão³, J. P. Braga¹, e J. C. Belchior^{1*}

¹ Departamento de Química-ICEX, Universidade Federal de Minas Gerais, Av. Antônio Carlos 6627, Pampulha, (31.270-901) Belo Horizonte, Minas Gerais, Brasil

² Departamento de Química Fundamental-CCEN, Universidade Federal de Pernambuco, Av. Jornalista Anibal Fernandes, Cidade Universitária, 50.740-560, Recife, Pernambuco, Brasil

³ Departamento de Química, Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, CEFET-MG, Av. Amazonas 5253, (30421-169) Belo Horizonte, Minas Gerais, Brasil

DOI: <https://doi.org/10.1007/s00894-018-3724-6>

Resumo (traduzido):

A hipersuperfície de energia potencial de camada fechada de clusters de nitrogênio com até 10 átomos foi explorada através de um algoritmo genético e métodos DFT. Foi estabelecido um parâmetro limitante para a distância máxima entre os átomos, controlado pelo usuário, assim como “operador de gerenciamento”, ambos adicionados ao procedimento evolucionário padrão. Na exploração do GA, os potenciais de troca e correlação utilizados foram B3LYP e PBE, ambos com a base 6-31G. As estruturas geradas foram reotimizadas nos níveis MP2 e CCSD(T) empregando bases maiores, os cálculos de análise vibracional correspondentes também foram realizados neste nível de cálculo. A energia de ligação de todas as estruturas obtidas foi calculada e comparada, assim como a energia relativa de dissociação do cluster nas moléculas N₂, N₃⁺ e N₃⁻. Com a abordagem atual, confirmamos algumas estruturas de polinitrogênio reportadas anteriormente e previmos a estabilidade de novas estruturas. Também podemos concluir que a superfície de energia claramente depende do método de cálculo empregado.