Supporting material
Table S1: VDE (in eV) calculated at the OVGF/6-311++G(3df,3pd) and MP2/6-311++G(d,p) equilibrium geometries (bond lengths r in Å, valence and dihedral angles $\angle$ in degrees) and non-scaled harmonic vibrational frequencies (in cm^{-1}) for anionic species.

Species and symmetry point group	VDE	Geometry	Vibr. Freq.
$Na(NO_2)_2^-$ D_{2d}	5.147 (0.907)	$r_1(Na_1O_4)=2.375$ $r_2(Na_1N_2)=2.803$ $r_3(N_2O_4)=1.253$ $\angle(O_4Na_1O_6)=52.78$ $\angle(O_4N_3O_5)=114.75$ $\angle(N_2O_6Na_1O_4)=131.85$	$\nu_1=32\ (b_1)$ $\nu_{2,3}=73\ (e)$ $\nu_4=167\ (a_1)$ $\nu_{5,6}=196\ (e)$ $\nu_{7,8}=217\ (e)$ $\nu_9=350\ (b_2)$ $\nu_{10}=882\ (b_2)$ $\nu_{11}=909\ (a_1)$ $\nu_{12,13}=1241\ (e)$ $\nu_{14}=1625\ (a_1)$ $\nu_{15}=1707\ (b_2)$
$Na(NO_2)_2^-$ C_2	5.028 (0.908)	$r_1(Na_1N_2)=2.418$ $r_2(Na_1O_5)=2.256$ $r_3(N_2O_6)=1.193$ $r_4(N_2O_5)=1.294$ $\angle(O_5N_2O_6)=117.44$ $\angle(Na_1N_2O_5)=67.14$ $\angle(N_3Na_1N_2)=154.88$ $\angle(O_5Na_1O_4)=158.85$ $\angle(O_6N_2Na_1N_3)=44.98$ $\angle(O_5Na_1N_3O_7)=-42.10$ $\angle(O_4Na_1O_5N_2)=-136.91$	$\nu_1=29\ (a)$ $\nu_2=72\ (a)$ $\nu_3=74\ (b)$ $\nu_4=122\ (a)$ $\nu_5=137\ (b)$ $\nu_6=179\ (b)$ $\nu_7=184\ (a)$ $\nu_8=261\ (a)$ $\nu_9=425\ (b)$ $\nu_{10}=807\ (a)$ $\nu_{11}=808\ (b)$ $\nu_{12}=1160\ (b)$ $\nu_{13}=1166\ (a)$ $\nu_{14}=2934\ (a)$ $\nu_{15}=2965\ (b)$

$Na(CF_3)_2^-$ D_{3d}	5.168 (0.913)	$r_1(Na_1C_2)=2.477$ $r_2(C_2F_4)=1.408$ $\angle(Na_1C_2F_4)=116.54$ $\angle(F_4C_2F_5)=101.57$ $\angle(F_4C_2F_5F_6)=104.53$ $\angle(Na_1C_2F_4F_5)=-127.73$ $\angle(F_7C_3Na_1F_5)=60.00$	$\nu_1=1\ (a_{1u})$ $\nu_{2,3}=37\ (e_u)$ $\nu_{4,5}=63\ (e_g)$ $\nu_{6,7}=109\ (e_u)$ $\nu_8=116\ (a_{1g})$ $\nu_9=291\ (a_{2u})$ $\nu_{10,11}=476\ (e_g)$ $\nu_{12,13}=477\ (e_u)$ $\nu_{14}=647\ (a_{1g})$ $\nu_{15}=647\ (a_{2u})$ $\nu_{16,17}=876\ (e_g)$ $\nu_{18,19}=879\ (e_u)$ $\nu_{20}=1074\ (a_{2u})$ $\nu_{21}=1081\ (a_{1g})$
$Na(CCl_3)_2^-$ D_{3d}	4.693 (0.900)	$r_1(Na_1C_2)=2.424$ $r_2(C_2Cl_4)=1.834$ $\angle(Na_1C_2Cl_4)=113.02$ $\angle(Cl_4C_2Cl_5)=105.70$ $\angle(Cl_4C_2Cl_5Cl_6)=111.76$ $\angle(Na_1C_2Cl_4Cl_5)=124.11$ $\angle(Cl_7C_3Na_1Cl_5)=60.00$	$\nu_1=7\ (a_{1u})$ $\nu_{2,3}=19\ (e_u)$ $\nu_{4,5}=25\ (e_g)$ $\nu_{6,7}=79\ (e_u)$ $\nu_8=87\ (a_{1g})$ $\nu_{9,10}=259\ (e_g)$ $\nu_{11,12}=260\ (e_u)$ $\nu_{13}=270\ (a_{2u})$ $\nu_{14}=355\ (a_{1g})$ $\nu_{15}=362\ (a_{2u})$ $\nu_{16,17}=642\ (e_g)$ $\nu_{18,19}=644\ (e_u)$ $\nu_{20}=674\ (a_{1g})$ $\nu_{21}=688\ (a_{2u})$

Table S1 (continuation)

$Na(SHO_3)_2^-$ $1\text{-}C_2$	6.048 (0.909)	$r_1(Na_1O_4)=2.436$ $r_2(Na_1O_5)=2.429$ $r_3(S_2O_9)=1.733$ $r_4(O_8H_{10})=0.970$ $r_5(S_2O_4)=1.515$ $r_6(S_2O_5)=1.516$ $r_7(Na_1S_2)=2.988$ $\angle(H_{11}O_9S_2)=105.35$ $\angle(O_4S_2O_9)=103.08$ $\angle(O_4Na_1O_5)=60.49$ $\angle(O_5S_2O_9)=103.06$ $\angle(O_4S_2O_5)=107.87$ $\angle(O_6S_3O_7O_8)=-108.60$ $\angle(O_7S_3O_6Na_1)=6.84$ $\angle(O_9S_2S_3O_8)=-91.42$	$\nu_1=27\ (a)$ $\nu_2=33\ (b)$ $\nu_3=35\ (a)$ $\nu_4=87\ (a)$ $\nu_5=88\ (b)$ $\nu_6=104\ (b)$ $\nu_7=104\ (a)$ $\nu_8=135\ (a)$ $\nu_9=154\ (b)$ $\nu_{10}=155\ (a)$ $\nu_{11}=321\ (b)$ $\nu_{12}=416\ (a)$ $\nu_{13}=419\ (b)$ $\nu_{14}=420\ (b)$ $\nu_{15}=420\ (a)$ $\nu_{16}=545\ (b)$ $\nu_{17}=584\ (a)$ $\nu_{18}=613\ (b)$ $\nu_{19}=628\ (a)$ $\nu_{20}=1033\ (a)$ $\nu_{21}=1039\ (b)$ $\nu_{22}=1115\ (a)$ $\nu_{23}=1116\ (b)$ $\nu_{24}=1121\ (a)$ $\nu_{25}=1149\ (b)$ $\nu_{26}=3778\ (a)$ $\nu_{27}=3779\ (b)$

Table S1 (continuation)

Na(SHO$_3$)$_2^-$ 2-C_2	7.123 (0.904)	r_1(Na$_1$O$_4$)=2.288 r_2(Na$_1$O$_5$)=2.296 r_3(S$_2$O$_8$)=1.421 r_4(S$_2$H$_{11}$)=1.354 r_5(S$_2$O$_4$)=1.482 r_6(S$_2$O$_5$)=1.481 r_7(Na$_1$S$_2$)=2.840 $\angle$(H$_{11}$S$_2$O$_8$)=106.62 $\angle$(O$_4$S$_2$O$_5$)=106.93 $\angle$(O$_4$Na$_1$O$_5$)=62.58 $\angle$(O$_4$S$_2$O$_8$)=115.93 $\angle$(O$_5$S$_2$O$_8$)=116.744 $\angle$(H$_{11}$S$_2$O$_8$O$_4$)=-115.86 $\angle$(H$_{11}$S$_2$O$_8$O$_5$)=115.93 $\angle$(H$_{11}$S$_2$O$_4$O$_5$)=109.93 $\angle$(Na$_1$O$_5$S$_2$O$_4$)=1.08	ν_1=41 (*a*) ν_2=54 (*b*) ν_3=54 (*a*) ν_4=126 (*a*) ν_5=132 (*b*) ν_6=171 (*a*) ν_7=223 (*b*) ν_8=225 (*a*) ν_9=407 (*b*) ν_{10}=492 (*b*) ν_{11}=492 (*a*) ν_{12}=563 (*b*) ν_{13}=581 (*a*) ν_{14}=645 (*b*) ν_{15}=681 (*a*) ν_{16}=992 (*b*) ν_{17}=1000 (*a*) ν_{18}=1026 (*b*) ν_{19}=1026 (*a*) ν_{20}=1129 (*b*) ν_{21}=1129 (*a*) ν_{22}=1180 (*b*) ν_{23}=1182 (*a*) ν_{24}=1668 (*a*) ν_{25}=1906 (*b*) ν_{26}=2585 (*b*) ν_{27}=2588 (*a*)

Na(COOH)$_2$$^-$ C_2	4.065 (0.906)	r_1(Na$_1$C$_2$)=2.481 r_2(C$_2$O$_4$)=1.228 r_3(C$_2$O$_7$)=1.439 r_4(O$_7$H$_8$)=0.976 ∠(O$_4$C$_2$Na$_1$)=137.66 ∠(O$_7$C$_2$Na$_1$)=108.49 ∠(H$_8$O$_7$C$_2$)=103.24 ∠(O$_4$C$_2$O$_7$H$_8$)=0.06 ∠(H$_8$O$_7$C$_2$Na$_1$)=-179.89 ∠(O$_4$C$_2$Na$_1$C$_3$)=44.29 ∠(O$_4$C$_2$Na$_1$O$_5$)=82.70 ∠(O$_6$C$_3$Na$_1$C$_2$)=-137.78	ν_1=9 (*a*) ν_2=17 (*b*) ν_3=18 (*a*) ν_4=69 (*b*) ν_5=70 (*a*) ν_6=146 (*a*) ν_7=189 (*a*) ν_8=190 (*b*) ν_9=297 (*b*) ν_{10}=589 (*a*) ν_{11}=590 (*b*) ν_{12}=633 (*a*) ν_{13}=633 (*b*) ν_{14}=809 (*b*) ν_{15}=811 (*a*) ν_{16}=1203 (*a*) ν_{17}=1203 (*b*) ν_{18}=1640 (*b*) ν_{19}=1641 (*a*) ν_{20}=3641 (*b*) ν_{21}=3641 (*a*)
Na(CHO)$_2$$^-$ C_2	2.793 (0.907)	r_1(Na$_1$C$_2$)=2.425 r_2(C$_2$O$_4$)=1.263 r_3(C$_2$H$_7$)=1.155 r_4(Na$_1$O$_4$)=2.381 ∠(Na$_1$C$_2$O$_4$)=72.88 ∠(O$_4$C$_2$H$_7$)=110.53 ∠(C$_2$Na$_1$C$_3$)=172.98 ∠(Na$_1$C$_2$H$_7$)=176.57 ∠(O$_4$C$_2$Na$_1$C$_3$)=-135.88 ∠(H$_7$C$_2$Na$_1$C$_3$)=39.66 ∠(H$_6$O$_5$C$_3$O$_4$)=167.17	ν_1=48 (*a*) ν_2=89 (*a*) ν_3=90 (*b*) ν_4=182 (*a*) ν_5=209 (*b*) ν_6=256 (*a*) ν_7=374 (*b*) ν_8=422 (*b*) ν_9=424 (*a*) ν_{10}=1366 (*b*) ν_{11}=1370 (*a*) ν_{12}= 1495 (*a*) ν_{13}=1496 (*b*) ν_{14}=2402 (*b*) ν_{15}=2414 (*a*)

$Na(CONH_2)_2^-$ C_2	3.154 (0.904)	$r_1(Na_1C_2)=2.442$ $r_2(C_2O_5)=1.264$ $r_3(Na_1O_5)=2.353$ $r_4(C_2N_6)=1.404$ $r_5(N_6H_{10})=1.020$ $r_6(N_6H_{11})=1.007$ $\angle(C_2Na_1C_3)=170.34$ $\angle(Na_1C_2O_5)=70.83$ $\angle(O_5C_2N_6)=114.12$ $\angle(H_{10}N_6H_{11})=116.25$ $\angle(C_2N_6H_{10})=116.11$ $\angle(C_2N_6H_{11})=115.76$ $\angle(O_5C_2Na_1C_3)=-135.37$ $\angle(H_{10}N_6C_2O_5)=-18.15$ $\angle(H_{11}N_6C_2O_5)=-159.72$ $\angle(N_6C_2Na_1C_3)=16.75$ $\angle(O_5C_2Na_1O_4)=103.95$	$\nu_1=31\ (a)$ $\nu_2=54\ (a)$ $\nu_3=59\ (a)$ $\nu_4=128\ (a)$ $\nu_5=129\ (b)$ $\nu_6=153\ (a)$ $\nu_7=161\ (b)$ $\nu_8=184\ (a)$ $\nu_9=339\ (b)$ $\nu_{10}=478\ (b)$ $\nu_{11}=480\ (a)$ $\nu_{12}=571\ (a)$ $\nu_{13}=572\ (b)$ $\nu_{14}=631\ (b)$ $\nu_{15}=632\ (a)$ $\nu_{16}=1023\ (a)$ $\nu_{17}=1024\ (b)$ $\nu_{18}=1148\ (b)$ $\nu_{19}=1148\ (a)$ $\nu_{20}=1520\ (a)$ $\nu_{21}=1520\ (b)$ $\nu_{22}=1578\ (b)$ $\nu_{23}=1578\ (a)$ $\nu_{24}=3445\ (b)$ $\nu_{25}=3445\ (a)$ $\nu_{26}=3702\ (b)$ $\nu_{27}=3702\ (a)$

$Mg(NO_2)_3^-$ D_3	6.501 (0.903)	$r_1(Mg_1N_2)=2.569$ $r_2(Mg_1O_5)=2.147$ $r_3(N_2O_7)=1.268$ $\angle(O_7N_2O_8)=112.98$ $\angle(O_5Mg_1O_6)=59.01$ $\angle(Mg_1O_7N_2)=94.00$ $\angle(O_9Mg_1O_8)=102.15$ $\angle(O_9Mg_1O_7)=102.21$ $\angle(Mg_1O_8N_2O_7)=0.00$ $\angle(O_9Mg_1O_8N_2)=-97.06$ $\angle(N_4O_6Mg_1O_8)=157.47$ $\angle(N_4Mg_1N_2N_3)=180.00$ $\angle(O_6Mg_1O_8O_9)=105.46$	$\nu_{1,2}=69\ (e)$ $\nu_{3,4}=79\ (e)$ $\nu_5=92\ (a_1)$ $\nu_6=117\ (a_2)$ $\nu_7=225\ (a_1)$ $\nu_{8,9}=234\ (e)$ $\nu_{10}=288\ (a_2)$ $\nu_{11}=309\ (a_2)$ $\nu_{12,13}=318\ (e)$ $\nu_{14,15}=439\ (e)$ $\nu_{16,17}=874\ (e)$ $\nu_{18}=875\ (a_1)$ $\nu_{19}=1358\ (a_1)$ $\nu_{20,21}=1359\ (e)$ $\nu_{22,23}=1382\ (e)$ $\nu_{24}=1415\ (a_2)$
$Mg(NO_2)_3^-$ C_3	6.357 (0.903)	$r_1(Mg_1N_2)=2.179$ $r_2(N_2O_8)=1.225$ $r_3(N_2O_7)=1.300$ $r_4(Mg_1O_7)=2.058$ $\angle(O_8N_2Mg_1)=174.64$ $\angle(O_8N_2O_7)=118.23$ $\angle(N_2O_7Mg_1)=77.28$ $\angle(N_2Mg_1N_4)=110.83$ $\angle(O_7Mg_1O_5)=112.84$ $\angle(N_2Mg_1N_4N_3)=-123.48$ $\angle(O_7Mg_1O_5O_6)=129.38$ $\angle(O_8N_2Mg_1N_3)=-43.84$ $\angle(O_8N_2O_7Mg_1)=-179.96$ $\angle(O_5Mg_1O_7N_2)=133.33$ $\angle(N_4O_5Mg_1O_7)=-97.29$ $\angle(N_3Mg_1N_2O_7)=136.50$ $\angle(O_6Mg_1N_2O_7)=98.14$ $\angle(O_{10}N_3Mg_1N_2)=79.64$	$\nu_{1,2}=48\ (e)$ $\nu_3=59\ (a)$ $\nu_{4,5}=100\ (e)$ $\nu_6=103\ (a)$ $\nu_{6,7}=139\ (e)$ $\nu_8=178\ (a)$ $\nu_8=237\ (a)$ $\nu_{9,10}=252\ (e)$ $\nu_{11}=304\ (a)$ $\nu_{12,13}=482\ (a)$ $\nu_{14,15}=798\ (e)$ $\nu_{16}=802\ (a)$ $\nu_{17,18}=1265\ (e)$ $\nu_{19}=1283\ (a)$ $\nu_{20,21}=1531\ (e)$ $\nu_{22}=1543\ (a)$

$Mg(CF_3)_3{}^-$ C_{3h}	6.593 (0.910)	$r_1(Mg_1C_2)=2.206$ $r_2(C_2F_{11})=1.387$ $\angle(C_2Mg_1C_3)=120.00$ $\angle(F_{11}C_2F_{12})=103.392$ $\angle(F_9C_3Mg_1C_2)=120.00$ $\angle(F_9C_3Mg_1C_4)=-60.00$	$\nu_{1,2}=5\ (e'')$ $\nu_3=12\ (a'')$ $\nu_{4,5}=44\ (e')$ $\nu_6=57\ (a'')$ $\nu_{7,8}=107\ (e'')$ $\nu_9=120\ (a')$ $\nu_{10,11}=159\ (e')$ $\nu_{12}=169\ (a')$ $\nu_{13}=236\ (a'')$ $\nu_{14,15}=380\ (e')$ $\nu_{16}=492\ (a')$ $\nu_{17,18}=494\ (e'')$ $\nu_{19,20}=496\ (e')$ $\nu_{21}=497\ (a'')$ $\nu_{22}=675\ (a')$ $\nu_{23,24}=679\ (e')$ $\nu_{25}=951\ (a')$ $\nu_{26,27}=955\ (e'')$ $\nu_{28}=966\ (a'')$ $\nu_{29}=969\ (e')$ $\nu_{30}=1151\ (e')$ $\nu_{31}=1161\ (a')$
$Mg(CCl_3)_3{}^-$ C_{3h}	5.552 (0.900)	$r_1(Mg_1C_2)=2.158$ $r_2(C_2Cl_9)=1.813$ $r_3(C_2C_{10})=1.797$ $\angle(Cl_9C_2Cl_8)=107.47$ $\angle(Cl_8C_2Cl_{10})=107.631$ $\angle(Cl_9C_2Mg_1)=108.47$ $\angle(Cl_{10}C_2Mg_1)=116.82$ $\angle(Cl_9C_2Mg_1C_3)=58.22$ $\angle(Cl_9C_2Mg_1C_4)=121.78$ $\angle(Cl_{10}C_2Mg_1C_3)=180.00$ $\angle(C_2Mg_1C_3C_4)=180.00$	$\nu_{1,2}=7\ (e'')$ $\nu_3=16\ (a')$ $\nu_{4,5}=43\ (e')$ $\nu_6=45\ (a'')$ $\nu_{7,8}=54\ (e'')$ $\nu_9=62\ (a')$ $\nu_{10}=95\ (e')$ $\nu_{11}=122\ (a')$ $\nu_{12}=170\ (a'')$ $\nu_{13}=271\ (a'')$ $\nu_{14,15}=271\ (e'')$ $\nu_{16}=273\ (e'')$ $\nu_{17}=278\ (a'')$ $\nu_{18,19}=307\ (e')$ $\nu_{20}=383\ (a')$ $\nu_{21,22}=407\ (e')$ $\nu_{23,24}=684\ (e'')$ $\nu_{25}=691\ (a'')$ $\nu_{26}=698\ (a')$ $\nu_{27,28}=711\ (e')$ $\nu_{29}=771\ (a')$ $\nu_{30,31}=805\ (e')$

Mg(SHO$_3$)$_3$$^-$ 1-C_3	6.770 (0.911)	r_1(Mg$_1$S$_2$)=2.701 r_2(Mg$_1$O$_5$)=2.093 r_3(Mg$_1$O$_6$)=2.175 r_4(S$_4$O$_5$)=1.530 r_5(S$_4$O$_6$)=1.535 r_6(S$_4$O$_{13}$)=1.661 r_7(O$_{13}$H$_{14}$)=0.982 r_8(O$_6$H$_{16}$)=1.926 $\angle$(S$_2$Mg$_1$S$_3$)=115.96 $\angle$(O$_5$Mg$_1$O$_6$)=67.87 $\angle$(S$_4$O$_6$Mg$_1$)=91.81 $\angle$(S$_4$O$_5$Mg$_1$)=95.10 $\angle$(O$_5$S$_4$O$_6$)=102.10 $\angle$(S$_4$O$_{13}$H$_{14}$)=106.70 $\angle$(O$_{13}$S$_4$Mg$_1$)=99.87 $\angle$(H$_{14}$O$_{13}$S$_4$Mg$_1$)=1.36 $\angle$(S$_4$O$_5$Mg$_1$O$_6$)=-11.63 $\angle$(S$_4$Mg$_1$S$_2$S$_3$)=-141.13 $\angle$(O$_6$Mg$_1$O$_8$O$_9$)=89.37 $\angle$(O$_5$Mg$_1$O$_{10}$O$_7$)=-118.59 $\angle$(H$_{15}$O$_{11}$S$_2$O$_9$)=-53.34	$\nu_{1,2}$=78 (*e*) $\nu_{3,4}$=101 (*e*) ν_5=111 (*a*) ν_6=120 (*a*) $\nu_{7,8}$=172 (*e*) ν_9=207 (*a*) ν_{10}=221 (*a*) $\nu_{11,12}$=225 (*e*) ν_{13}=292 (*a*) $\nu_{14,15}$=368 (*e*) ν_{16}=370 (*a*) $\nu_{17,18}$=418 (*e*) ν_{19}=461 (*a*) $\nu_{20,21}$=489 (*e*) $\nu_{22,23}$=606 (*e*) ν_{24}=619 (*a*) $\nu_{25,26}$=671 (*e*) ν_{27}=678 (*a*) ν_{28}=713 (*a*) $\nu_{29,30}$=731 (*e*) ν_{31}=994 (*a*) $\nu_{32,33}$=999 (*e*) $\nu_{34,35}$=1013 (*e*) ν_{36}=1037 (*a*) $\nu_{37,38}$=1252 (*e*) ν_{39}=1254 (*a*) ν_{40}=3563 (*a*) $\nu_{41,42}$=3580 (*e*)

Mg(SHO$_3$)$_3$$^-$ 2-C_3	8.151 (0.900)	r_1(Mg$_1$S$_2$)=2.674 r_2(Mg$_1$O$_8$)=2.122 r_3(Mg$_1$O$_7$)=2.148 r_4(S$_3$O$_8$)=1.500 r_5(S$_3$O$_7$)=1.499 r_6(S$_3$O$_{12}$)=1.451 r_7(S$_3$H$_{16}$)=1.352 $\angle$(S$_2$Mg$_1$S$_4$)=119.48 $\angle$(O$_9$S$_2$O$_{10}$)=105.54 $\angle$(O$_{12}$S$_3$H$_{16}$)=106.23 $\angle$(O$_7$Mg$_1$O$_8$)=67.99 $\angle$(O$_{10}$C$_2$Mg$_1$)=110.16 $\angle$(S$_3$O$_7$Mg$_1$)=92.56 $\angle$(S$_3$O$_8$Mg$_1$)=93.60 $\angle$(Mg$_1$O$_7$S$_3$O$_{12}$)=-137.23 $\angle$(O$_{10}$Mg$_1$O$_7$S$_3$)=-61.37 $\angle$(O$_{13}$S$_4$Mg$_1$S$_2$)=38.10 $\angle$(O$_5$Mg$_1$S$_4$O$_{13}$)=-87.80 $\angle$(Mg$_1$O$_9$S$_2$O$_{10}$)=-4.82 $\angle$(S$_2$Mg$_1$S$_4$S$_3$)=-165.74 $\angle$(O$_{10}$Mg$_1$O$_5$O$_8$)=105.85 $\angle$(O$_9$Mg$_1$O$_6$O$_7$)=-95.19 $\angle$(S$_2$O$_{10}$Mg$_1$S$_4$)=-69.82	$\nu_{1,2}$=32 (e) ν_3=60 (a) $\nu_{4,5}$=76 (e) ν_6=108 (a) ν_7=147 (a) $\nu_{8,9}$=152 (e) ν_{10}=187 (a) $\nu_{11,12}$=192 (e) ν_{13}=266 (a) $\nu_{14,15}$=420 (e) $\nu_{16,17}$=475 (e) ν_{18}=479 (a) $\nu_{19,20}$=558 (e) ν_{21}=561 (a) $\nu_{22,23}$=626 (e) ν_{24}=631 (a) $\nu_{25,26}$=1026 (e) ν_{27}=1030 (a) $\nu_{28,29}$=1091 (e) ν_{30}=1093 (a) $\nu_{31,32}$=1136 (e) ν_{33}=1161 (a) $\nu_{34,35}$=1166 (e) ν_{36}=1169 (a) $\nu_{37,38}$=1310 (e) ν_{39}=1327 (a) ν_{40}=2638 (a) $\nu_{41,42}$=2638 (e)

$Mg(COOH)_3^-$ C_{3v}	5.204 (0.903)	$r_1(Mg_1C_2)=2.206$ $r_2(C_2O_7)=1.228$ $r_3(C_2O_8)=1.404$ $r_4(O_8H_{11})=0.974$ $\angle(C_2Mg_1C_3)=119.912$ $\angle(O_7C_2Mg_1)=127.32$ $\angle(O_8C_2Mg_1)=116.43$ $\angle(O_7C_2O_8)=116.26$ $\angle(C_2O_8H_{13})=103.96$ $\angle(C_4Mg_1C_2C_3)=174.09$ $\angle(O_7C_2O_8H_{13})=0.00$ $\angle(O_7C_2Mg_1C_3)=87.04$ $\angle(H_{13}O_8C_2Mg_1)=180.00$ $\angle(O_8C_2Mg_1C_3)=-92.96$	$\nu_1=9\ (a_2)$ $\nu_{2,3}=25\ (e)$ $\nu_4=52\ (a_1)$ $\nu_{5,6}=52\ (e)$ $\nu_{7,8}=80\ (e)$ $\nu_9=207\ (a_1)$ $\nu_{10}=225\ (a_1)$ $\nu_{11}=286\ (a_2)$ $\nu_{12,13}=331\ (e)$ $\nu_{14,15}=413\ (e)$ $\nu_{16}=628\ (a_1)$ $\nu_{17,18}=634\ (e)$ $\nu_{19}=659\ (a_2)$ $\nu_{20,21}=667\ (e)$ $\nu_{22,23}=958\ (e)$ $\nu_{24}=969\ (a_1)$ $\nu_{25,26}=1242\ (e)$ $\nu_{27}=1243\ (a_1)$ $\nu_{28,29}=1666\ (e)$ $\nu_{30}=1671\ (a_1)$ $\nu_{31,32}=3681\ (e)$ $\nu_{33}=3681\ (a_1)$

$Mg(COOH)_3^-$ C_s	4.785 (0.902)	$r_1(Mg_1C_2)=2.185$ $r_2(Mg_1C_3)=2.193$ $r_3(Mg_1C_4)=2.190$ $r_4(C_2O_{10})=1.393$ $r_5(C_4O_9)=1.401$ $r_6(C_3O_8)=1.401$ $r_7(C_2O_6)=1.231$ $r_8(C_4O_5)=1.225$ $r_9(C_3O_7)=1.227$ $r_{10}(O_8H_{12})=0.963$ $r_{11}(O_{10}H_{11})=0.969$ $r_{12}(O_9H_{13})=0.973$ $\angle(C_2Mg_1C_3)=109.81$ $\angle(C_2Mg_1C_4)=107.68$ $\angle(C_3Mg_1C_4)=142.51$ $\angle(O_7C_3O_8)=115.05$ $\angle(O_5C_4O_9)=115.91$ $\angle(O_6C_2O_{10})=116.16$ $\angle(H_{11}O_{10}C_2)=103.98$ $\angle(H_{13}O_9C_4)=106.64$ $\angle(H_{12}O_8C_3)=104.59$ $\angle(O_6C_2Mg_1)=120.05$ $\angle(O_7C_3Mg_1)=109.52$ $\angle(O_5C_4Mg_1)=129.91$ $\angle(O_9C_4Mg_1)=114.17$ $\angle(O_{10}C_2Mg_1)=123.79$ $\angle(O_8C_3Mg_1)=135.43$ $\angle(C_4Mg_1C_2C_3)=180.00$ $\angle(H_{11}O_{10}C_2Mg_1)=0.00$ $\angle(H_{11}O_{10}C_2O_6)=180.00$	$\nu_1=34\ (a'')$ $\nu_2=51\ (a')$ $\nu_3=64\ (a'')$ $\nu_4=73\ (a')$ $\nu_5=74\ (a'')$ $\nu_6=105\ (a'')$ $\nu_7=148\ (a')$ $\nu_8=186\ (a')$ $\nu_9=211\ (a')$ $\nu_{10}=218\ (a')$ $\nu_{11}=296\ (a'')$ $\nu_{12}=301\ (a'')$ $\nu_{13}=373\ (a'')$ $\nu_{14}=381\ (a')$ $\nu_{15}=417\ (a')$ $\nu_{16}=547\ (a'')$ $\nu_{17}=645\ (a'')$ $\nu_{18}=661\ (a')$ $\nu_{19}=677\ (a')$ $\nu_{20}=682\ (a')$ $\nu_{21}=686\ (a'')$ $\nu_{22}=983\ (a')$ $\nu_{23}=1008\ (a')$ $\nu_{24}=1037\ (a')$ $\nu_{25}=1240\ (a')$ $\nu_{26}=1311\ (a')$ $\nu_{27}=1339\ (a')$ $\nu_{28}=1656\ (a')$ $\nu_{29}=1671\ (a')$ $\nu_{30}=1679\ (a')$ $\nu_{31}=3680\ (a')$ $\nu_{32}=3762\ (a')$ $\nu_{33}=3865\ (a')$

$Mg(CHO)_3^-$ C_{3h}	3.831 (0.903)	$r_1(Mg_1C_2)=2.224$ $r_2(C_2O_6)=1.247$ $r_3(C_2H_{10})=1.139$ $\angle(C_2Mg_1C_3)=120.00$ $\angle(H_{10}C_2O_6)=113.27$ $\angle(O_6C_2Mg_1)=120.69$ $\angle(H_{10}C_2Mg_1)=126.04$ $\angle(O_6C_2Mg_1C_3)=0.00$ $\angle(C_2Mg_1C_3C_4)=180.00$	$\nu_{1,2}=9\ (e'')$ $\nu_3=21\ (a'')$ $\nu_{4,5}=60\ (e')$ $\nu_6=140\ (a'')$ $\nu_7=143\ (a')$ $\nu_{8,9}=253\ (e')$ $\nu_{10}=387\ (a')$ $\nu_{11,12}=512\ (e')$ $\nu_{13,14}=589\ (e'')$ $\nu_{15}=670\ (a'')$ $\nu_{16,17}=1407\ (e')$ $\nu_{18}=1411\ (a')$ $\nu_{19}=1558\ (a')$ $\nu_{20,21}=1559\ (e')$ $\nu_{22,23}=2583\ (e')$ $\nu_{24}=2593\ (a')$
$Mg(CHO)_3^-$ C_3	3.675 (0.903)	$r_1(Mg_1C_2)=2.157$ $r_2(Mg_1O_5)=2.225$ $r_3(C_2O_6)=1.266$ $r_4(C_2H_9)=1.134$ $\angle(Mg_1C_2O_6)=76.20$ $\angle(C_2Mg_1C_3)=119.551$ $\angle(Mg_1C_2H_9)=171.21$ $\angle(H_9C_2O_6)=112.59$ $\angle(O_5Mg_1O_6)=100.81$ $\angle(Mg_1O_5C_4H_{10})=179.74$ $\angle(H_8C_3Mg_1C_2)=-60.16$ $\angle(O_6Mg_1O_7O_5)=103.35$	$\nu_{1,2}=91\ (e)$ $\nu_3=96\ (a)$ $\nu_{4,5}=132\ (e)$ $\nu_{6,7}=155\ (e)$ $\nu_8=158\ (a)$ $\nu_9=177\ (a)$ $\nu_{10}=388\ (a)$ $\nu_{11,12}=488\ (e)$ $\nu_{13}=582\ (a)$ $\nu_{14,15}=625\ (e)$ $\nu_{16,17}=1378\ (e)$ $\nu_{18}=1383\ (a)$ $\nu_{19,20}=1495\ (e)$ $\nu_{21}=1505\ (a)$ $\nu_{22,23}=2637\ (e)$ $\nu_{24}=2653\ (a)$

Mg(COOCH$_3$)$_3^-$ C_{3v}	5.083 (0.900)	$r_1(Mg_1C_2)$=2.206	ν_1=4 (a_2)
		$r_2(C_2O_6)$=1.224	$\nu_{2,3}$=18 (e)
		$r_3(C_2O_{10})$=1.421	ν_4=32 (a_1)
		$r_4(C_{11}O_{10})$=1.428	$\nu_{5,6}$=36 (e)
		$r_5(C_{11}H_{21})$=1.095	$\nu_{7,8}$=56 (e)
		$r_6(C_{11}H_{20})$=1.092	ν_9=105 (a_2)
		$\angle(C_{11}O_{10}C_2)$=115.11	$\nu_{10,11}$=144 (e)
		$\angle(C_2Mg_1C_3)$=119.96	ν_{12}=167 (a_2)
		$\angle(O_6C_2O_{10})$=117.24	$\nu_{13,14}$=168 (e)
		$\angle(O_6C_2Mg_1)$=132.60	ν_{15}=185 (a_1)
		$\angle(O_{10}C_2Mg_1)$=110.16	ν_{16}=220 (a_1)
		$\angle(H_{21}C_{11}H_{22})$=108.03	$\nu_{17,18}$=329 (e)
		$\angle(H_{21}C_{11}H_{20})$=110.07	ν_{19}=332 (a_1)
		$\angle(H_{21}C_{11}O_{10})$=111.28	$\nu_{20,21}$=372 (e)
		$\angle(H_{20}C_{11}O_{10})$=106.11	ν_{22}=436 (a_2)
		$\angle(O_6C_2O_{10}C_{11})$=0.00	$\nu_{23,24}$=493 (e)
		$\angle(H_{20}C_{11}O_{10}C_2)$=180.00	$\nu_{25,26}$=707 (e)
		$\angle(H_{21}C_{11}O_{10}C_2)$=-60.27	ν_{27}=712 (a_1)
		$\angle(H_{22}C_{11}O_{10}C_2)$=60.27	$\nu_{28,29}$=900 (e)
		$\angle(C_2Mg_1C_3C_4)$=176.08	ν_{30}=904 (a_1)
		$\angle(C_{13}O_9C_4Mg_1)$=-180.00	$\nu_{31,32}$=1047 (e)
		$\angle(O_7C_3Mg_1C_4)$=88.04	ν_{33}=1054 (a_1)
		$\angle(O_8C_3Mg_1C_4)$=-91.96	ν_{34}=1178 (a_2)
			$\nu_{35,36}$=1179 (e)
			$\nu_{37,38}$=1196 (e)
			ν_{39}=1197 (a_1)
			$\nu_{40,41}$=1464 (e)
			ν_{42}=1465 (a_1)
			ν_{43}=1495 (a_2)
			$\nu_{44,45}$=1495 (e)
			$\nu_{46,47}$=1519 (e)
			ν_{48}=1520 (a_1)
			$\nu_{49,50}$=1663 (e)
			ν_{51}=1668 (a_1)
			$\nu_{52,53}$=3063 (e)
			ν_{54}=3063 (a_1)
			ν_{55}=3140 (a_2)
			$\nu_{56,57}$=3140 (e)
			$\nu_{49,50}$=3175 (e)
			ν_{51}=3175 (a_1)

$Mg(CONH_2)_3^-$ C_1	3.888 (0.900)	$r_1(Mg_1C_2)=2.203$ $r_2(Mg_1C_3)=2.206$ $r_3(Mg_1C_4)=2.209$ $r_4(C_2O_7)=1.247$ $r_5(C_3O_6)=1.252$ $r_6(C_4O_5)=1.249$ $r_7(C_2N_8)=1.396$ $r_8(C_3N_{10})=1.390$ $r_9(C_4N_9)=1.398$ $r_{10}(N_{10}H_{11})=1.017$ $r_{11}(N_{10}H_{12})=1.013$ $r_{12}(N_8H_{16})=1.017$ $r_{13}(N_8H_{15})=1.018$ $r_{14}(N_9H_{14})=1.009$ $r_{15}(N_9H_{13})=1.017$ $\angle(C_2Mg_1C_3)=109.37$ $\angle(C_2Mg_1C_4)=139.06$ $\angle(C_3Mg_1C_4)=111.35$ $\angle(O_6C_3Mg_1)=123.57$ $\angle(O_7C_2Mg_1)=132.89$ $\angle(O_5C_4Mg_1)=113.00$ $\angle(N_9C_4Mg_1)=129.86$ $\angle(N_8C_2Mg_1)=109.05$ $\angle(N_{10}C_3Mg_1)=118.44$ $\angle(H_{13}N_9H_{14})=116.44$ $\angle(H_{15}N_8H_{16})=117.82$ $\angle(H_{12}N_{10}H_{11})=118.33$ $\angle(N_9C_4Mg_1)=129.86$ $\angle(H_{14}N_9C_4)=116.64$ $\angle(H_{13}N_9C_4)=116.21$ $\angle(H_{16}N_8C_2)=116.91$ $\angle(H_{15}N_8C_2)=117.98$ $\angle(H_{11}N_{10}C_3)=117.61$ $\angle(H_{11}N_{10}C_3)=116.23$ $\angle(Mg_1C_4N_9O_5)=-176.41$ $\angle(C_4Mg_1C_2N_9)=-16.11$ $\angle(O_7C_2Mg_1C_4)=-4.27$ $\angle(C_3Mg_1C_4O_5)=-6.46$ $\angle(N_{10}C_3Mg_1C_4)=-8.03$ $\angle(O_6C_3Mg_1C_4)=172.63$ $\angle(N_8C_2Mg_1C_4)=175.37$ $\angle(H_{15}N_8C_2Mg_1)=16.44$ $\angle(H_{16}N_8C_2Mg_1)=166.02$ $\angle(H_{11}N_{10}C_3Mg_1)=165.13$ $\angle(H_{12}N_{10}C_3Mg_1)=16.41$ $\angle(H_{14}N_9C_4O_5)=-160.50$	$\nu_1=38\ (a)$ $\nu_2=55\ (a)$ $\nu_3=65\ (a)$ $\nu_4=74\ (a)$ $\nu_5=83\ (a)$ $\nu_6=101\ (a)$ $\nu_7=139\ (a)$ $\nu_8=177\ (a)$ $\nu_9=199\ (a)$ $\nu_{10}=215\ (a)$ $\nu_{11}=281\ (a)$ $\nu_{12}=282\ (a)$ $\nu_{13}=371\ (a)$ $\nu_{14}=375\ (a)$ $\nu_{15}=402\ (a)$ $\nu_{16}=487\ (a)$ $\nu_{17}=531\ (a)$ $\nu_{18}=559\ (a)$ $\nu_{19}=592\ (a)$ $\nu_{20}=603\ (a)$ $\nu_{21}=613\ (a)$ $\nu_{22}=646\ (a)$ $\nu_{23}=697\ (a)$ $\nu_{24}=724\ (a)$ $\nu_{25}=1059\ (a)$ $\nu_{26}=1077\ (a)$ $\nu_{27}=1090\ (a)$ $\nu_{28}=1188\ (a)$ $\nu_{29}=1198\ (a)$ $\nu_{30}=1204\ (a)$ $\nu_{31}=1573\ (a)$ $\nu_{32}=1585\ (a)$ $\nu_{33}=1595(a)$ $\nu_{34}=1601\ (a)$ $\nu_{35}=1609\ (a)$ $\nu_{36}=1632\ (a)$ $\nu_{37}=3464\ (a)$ $\nu_{38}=3499\ (a)$ $\nu_{39}=3514\ (a)$ $\nu_{40}=3618\ (a)$ $\nu_{41}=3664\ (a)$ $\nu_{42}=3706\ (a)$

$Mg(CONH_2)_3{}^-$ C_3	3.767 (0.900)	$r_1(Mg_1C_2)=2.188$ $r_2(Mg_1O_5)=2.136$ $r_3(C_2O_6)=1.273$ $r_4(C_2N_{10})=1.385$ $r_5(N_8H_{15})=1.019$ $r_6(N_8H_{16})=1.007$ $\angle(C_2Mg_1C_3)=117.94$ $\angle(N_{10}C_2Mg_1)=174.13$ $\angle(Mg_1O_5C_4)=75.13$ $\angle(Mg_1C_2O_6)=70.66$ $\angle(H_{11}N_{10}H_{12})=116.93$ $\angle(C_2N_{10}H_{12})=116.50$ $\angle(C_2N_{10}H_{11})=116.42$ $\angle(O_5C_2O_6O_7)=-110.72$ $\angle(C_2Mg_1C_3C_4)=-151.81$ $\angle(Mg_1O_6C_2N_{10})=179.46$ $\angle(C_3O_7Mg_1O_6)=101.71$ $\angle(H_{15}N_8H_{16}C_3)=144.21$	$\nu_{1,2}=53\ (e)$ $\nu_3=63\ (a)$ $\nu_{4,5}=101\ (e)$ $\nu_6=109\ (a)$ $\nu_{7,8}=122\ (e)$ $\nu_9=183\ (a)$ $\nu_{10}=229\ (a)$ $\nu_{11,12}=254\ (e)$ $\nu_{13}=257\ (a)$ $\nu_{14,15}=407\ (e)$ $\nu_{16}=451\ (a)$ $\nu_{17,18}=462\ (e)$ $\nu_{19,20}=582\ (e)$ $\nu_{21}=585\ (a)$ $\nu_{22}=644\ (a)$ $\nu_{23,24}=645\ (e)$ $\nu_{25,26}=1074\ (e)$ $\nu_{27}=1075\ (a)$ $\nu_{28,29}=1217\ (e)$ $\nu_{30}=1219\ (a)$ $\nu_{31,32}=1494\ (e)$ $\nu_{33}=1513\ (a)$ $\nu_{34,35}=1594\ (e)$ $\nu_{36}=1595\ (a)$ $\nu_{37,38}=3493\ (e)$ $\nu_{39}=3494\ (a)$ $\nu_{40,41}=3726\ (e)$ $\nu_{42}=3727\ (a)$