

H	14	R19	8	A19	18	D19	0
H	14	R20	8	A20	18	D20	0

Variables:

R2	1.07048
R3	1.46808
R4	1.06991
R5	1.83336
R6	1.52078
R7	1.08179
R8	2.28823
R9	1.08513
R10	1.08282
R11	1.09231
R12	1.46276
R13	1.00311
R14	1.46297
R15	1.08274
R16	1.08571
R17	1.08191
R18	1.08037
R19	1.08274
R20	1.08585
A3	117.03462
A4	115.82325
A5	91.16631
A6	115.87254
A7	111.94368
A8	57.83362
A9	110.84818
A10	109.57236
A11	112.22988
A12	96.96924
A13	132.04112
A14	95.85361
A15	109.16771
A16	111.7266
A17	109.60062
A18	109.58415
A19	109.12374
A20	111.5423
D4	-146.30361
D5	-72.84814
D6	118.71508
D7	-112.46427
D8	-97.05906
D9	-49.56526
D10	-118.52671

D11	121.96741
D12	119.71768
D13	-123.71351
D14	113.95485
D15	35.3689
D16	120.26434
D17	-118.81364
D18	83.77889
D19	-118.87126
D20	120.95518

E=-651.2379041 hartree

0	1							
C								
C	1	R2						
S	1	R3	2	A3				
C	1	R4	2	A4	3	D4	0	
H	1	R5	2	A5	3	D5	0	
H	2	R6	1	A6	3	D6	0	
H	4	R7	1	A7	2	D7	0	
H	4	R8	1	A8	7	D8	0	
H	4	R9	1	A9	7	D9	0	
H	2	R10	1	A10	6	D10	0	
N	3	R11	1	A11	2	D11	0	
C	11	R12	3	A12	1	D12	0	
H	11	R13	3	A13	12	D13	0	
C	11	R14	3	A14	12	D14	0	
H	12	R15	11	A15	3	D15	0	
H	12	R16	11	A16	15	D16	0	
H	12	R17	11	A17	15	D17	0	
H	14	R18	11	A18	3	D18	0	
H	14	R19	11	A19	18	D19	0	
H	14	R20	11	A20	18	D20	0	

Variables:

R2	1.4738
R3	1.83539
R4	1.52161
R5	1.08201
R6	1.06975
R7	1.08505
R8	1.08269
R9	1.08988
R10	1.07087
R11	4.27369
R12	1.46528
R13	1.00418

R14	1.46622
R15	1.08021
R16	1.08168
R17	1.08564
R18	1.08183
R19	1.07931
R20	1.08573
A3	91.89275
A4	116.89505
A5	111.5567
A6	116.38636
A7	110.93376
A8	109.0728
A9	112.5266
A10	116.97293
A11	31.13442
A12	104.96105
A13	108.46708
A14	114.29014
A15	109.29971
A16	109.40765
A17	111.28406
A18	109.38575
A19	109.52122
A20	111.20851
D4	118.38951
D5	-112.54078
D6	69.83324
D7	-47.67542
D8	-118.19425
D9	122.29696
D10	-142.31146
D11	-1.95144
D12	-45.4629
D13	-115.31889
D14	124.42129
D15	62.70662
D16	-118.88014
D17	120.39955
D18	61.75608
D19	-119.07507
D20	120.41191

E=-651.2343254 hartree

2-Methylthiirane + Trimethylamine at C₂

0	1						
C							
C	1	R2					
S	1	R3	2	A3			
H	1	R4	2	A4	3	D4	0
H	1	R5	2	A5	3	D5	0
H	2	R6	1	A6	3	D6	0
C	2	R7	1	A7	6	D7	0
N	2	R8	1	A8	6	D8	0
H	7	R9	2	A9	1	D9	0
H	7	R10	2	A10	9	D10	0
H	7	R11	2	A11	9	D11	0
C	8	R12	2	A12	1	D12	0
C	8	R13	2	A13	12	D13	0
H	8	R14	2	A14	12	D14	0
H	12	R15	8	A15	2	D15	0
H	12	R16	8	A16	15	D16	0
H	12	R17	8	A17	15	D17	0
H	13	R18	8	A18	2	D18	0
H	13	R19	8	A19	18	D19	0
H	13	R20	8	A20	18	D20	0

Variables:

R2	1.46729
R3	1.8374
R4	1.0817
R5	1.081
R6	1.06994
R7	1.50585
R8	2.02449
R9	1.08391
R10	1.08403
R11	1.07971
R12	1.46325
R13	1.46353
R14	1.00322
R15	1.08123
R16	1.08085
R17	1.08647
R18	1.08202
R19	1.08615
R20	1.08164
A3	96.13004
A4	112.82424
A5	113.00959
A6	115.06206

A7	121.07764
A8	106.69016
A9	111.09621
A10	111.43897
A11	108.20481
A12	113.28035
A13	109.28344
A14	104.49192
A15	109.82718
A16	109.28117
A17	111.41557
A18	109.65723
A19	111.64658
A20	109.31876
D4	117.93038
D5	-116.15439
D6	66.6232
D7	-149.14976
D8	99.27379
D9	-51.01348
D10	-122.44586
D11	118.44032
D12	43.16304
D13	-126.09959
D14	117.92102
D15	56.99327
D16	-119.10874
D17	120.72016
D18	-58.17172
D19	-120.72816
D20	118.91853

E=-651.2313917 hartree

2-Methylthiirane + Trimethylamine at C₃

0	1						
C							
C	1	R2					
S	1	R3	2	A3			
H	1	R4	2	A4	3	D4	0
H	1	R5	2	A5	3	D5	0
H	2	R6	1	A6	3	D6	0
H	2	R7	1	A7	6	D7	0

N	5	R8	1	A8	2	D8	0
C	8	R9	5	A9	1	D9	0
C	8	R10	5	A10	9	D10	0
C	8	R11	5	A11	9	D11	0
H	10	R12	8	A12	5	D12	0
H	10	R13	8	A13	12	D13	0
H	10	R14	8	A14	12	D14	0
H	11	R15	8	A15	5	D15	0
H	11	R16	8	A16	15	D16	0
H	11	R17	8	A17	15	D17	0
H	9	R18	8	A18	5	D18	0
H	9	R19	8	A19	18	D19	0
H	9	R20	8	A20	18	D20	0

Variables:

R2	1.46409
R3	1.8343
R4	1.08004
R5	1.08004
R6	1.06959
R7	1.06959
R8	3.12265
R9	1.46322
R10	1.46315
R11	1.46322
R12	1.08212
R13	1.0871
R14	1.08212
R15	1.08222
R16	1.08035
R17	1.08734
R18	1.08734
R19	1.08035
R20	1.08222
A3	91.64975
A4	114.02696
A5	114.02696
A6	117.26646
A7	117.26646
A8	65.99084
A9	73.74877
A10	142.79728
A11	100.93416
A12	109.73215
A13	111.17634
A14	109.7321
A15	109.62654
A16	109.73319

A17	111.02582
A18	111.02578
A19	109.73318
A20	109.62653
D4	115.60705
D5	-115.60705
D6	72.40319
D7	-144.80638
D8	-34.78321
D9	179.94037
D10	-102.96695
D11	108.89049
D12	-87.76549
D13	-120.34369
D14	119.31279
D15	99.87206
D16	-119.33306
D17	120.2411
D18	158.97757
D19	-120.42584
D20	120.24107

E=-651.2294253 hartree

2,2-Dimethylthiirane + Ammonia at C₂

0	1						
C							
C	1	R2					
S	1	R3	2	A3			
H	1	R4	2	A4	3	D4	0
H	1	R5	2	A5	3	D5	0
C	2	R6	1	A6	3	D6	0
C	2	R7	1	A7	6	D7	0
H	6	R8	2	A8	1	D8	0
H	6	R9	2	A9	8	D9	0
H	6	R10	2	A10	8	D10	0
H	7	R11	2	A11	1	D11	0
H	7	R12	2	A12	11	D12	0
H	7	R13	2	A13	11	D13	0
N	11	R14	7	A14	2	D14	0
H	14	R15	11	A15	7	D15	0
H	14	R16	11	A16	15	D16	0
H	14	R17	11	A17	15	D17	0

Variables:

R2 1.47937

R3	1.83534
R4	1.08373
R5	1.08373
R6	1.50708
R7	1.50708
R8	1.08379
R9	1.0828
R10	1.08085
R11	1.0828
R12	1.08379
R13	1.08085
R14	2.85943
R15	1.00446
R16	1.00473
R17	1.00446
A3	102.37619
A4	111.00888
A5	111.00888
A6	118.74796
A7	118.74799
A8	111.2008
A9	111.32646
A10	107.76782
A11	111.32645
A12	111.20084
A13	107.76781
A14	69.36342
A15	148.389
A16	102.61374
A17	69.21108
D4	119.06179
D5	-119.06179
D6	75.65983
D7	-151.31969
D8	161.27754
D9	-122.95961
D10	119.09393
D11	-38.31784
D12	-122.95972
D13	117.94632
D14	-43.74804
D15	92.41892
D16	-165.38
D17	89.92375

E=-611.9282446 hartree

2,2-Dimethylthiirane + Ammonia at C₃

0	1						
C							
C	1	R2					
S	1	R3	2	A3			
C	1	R4	2	A4	3	D4	0
C	1	R5	2	A5	3	D5	0
H	2	R6	1	A6	3	D6	0
H	2	R7	1	A7	6	D7	0
N	2	R8	1	A8	6	D8	0
H	4	R9	1	A9	2	D9	0
H	4	R10	1	A10	9	D10	0
H	4	R11	1	A11	9	D11	0
H	5	R12	1	A12	2	D12	0
H	5	R13	1	A13	12	D13	0
H	5	R14	1	A14	12	D14	0
H	8	R15	2	A15	1	D15	0
H	8	R16	2	A16	15	D16	0
H	8	R17	2	A17	15	D17	0

Variables:

R2	1.4819
R3	1.83529
R4	1.52813
R5	1.52813
R6	1.07117
R7	1.07117
R8	1.85672
R9	1.0842
R10	1.08282
R11	1.09324
R12	1.09324
R13	1.08282
R14	1.0842
R15	1.00466
R16	1.0056
R17	1.00466
A3	93.00397
A4	113.09607
A5	113.09607
A6	116.83306
A7	116.83306
A8	110.25474
A9	111.17254
A10	109.46678
A11	112.18058
A12	112.18063

A13	109.46678
A14	111.17254
A15	110.262
A16	111.80708
A17	110.262
D4	116.27647
D5	-116.27647
D6	70.85244
D7	-141.70488
D8	109.14756
D9	-49.16506
D10	-118.53906
D11	122.28193
D12	-73.11684
D13	-119.17903
D14	122.2819
D15	-59.53614
D16	-120.46386
D17	119.07229

E=-611.9345446 hartree

cis-2,3-Dimethylthiirane + Ammonia

0	1							
C								
C	1	R2						
S	1	R3	2	A3				
C	1	R4	2	A4	3	D4	0	
H	1	R5	2	A5	3	D5	0	
C	2	R6	1	A6	3	D6	0	
H	2	R7	1	A7	6	D7	0	
H	4	R8	1	A8	2	D8	0	
H	4	R9	1	A9	8	D9	0	
H	4	R10	1	A10	8	D10	0	
H	6	R11	2	A11	1	D11	0	
H	6	R12	2	A12	11	D12	0	
H	6	R13	2	A13	11	D13	0	
N	9	R14	4	A14	1	D14	0	
H	14	R15	9	A15	4	D15	0	
H	14	R16	9	A16	15	D16	0	
H	14	R17	9	A17	15	D17	0	

Variables:

R2	1.48209
R3	1.83381
R4	1.52375

R5	1.08484
R6	1.50813
R7	1.07106
R8	1.08288
R9	1.0826
R10	1.09295
R11	1.08308
R12	1.0841
R13	1.07965
R14	4.19294
R15	1.00475
R16	1.00509
R17	1.00436
A3	96.86227
A4	116.49904
A5	109.16051
A6	122.84934
A7	113.621
A8	111.5642
A9	108.76889
A10	112.62807
A11	111.65009
A12	110.76367
A13	108.23413
A14	28.13918
A15	86.22551
A16	164.38332
A17	71.80123
D4	122.1756
D5	-113.05325
D6	-80.46467
D7	147.24594
D8	-59.60027
D9	-118.15592
D10	122.69577
D11	-53.73993
D12	-121.85422
D13	119.2315
D14	-57.71434
D15	179.94333
D16	-157.9788
D17	110.10412

E=-611.9305665 hartree

trans-2,3-Dimethylthiirane + Ammonia

0	1						
C							
C	1	R2					
S	1	R3	2	A3			
H	1	R4	2	A4	3	D4	0
C	1	R5	2	A5	3	D5	0
N	1	R6	2	A6	3	D6	0
C	2	R7	1	A7	3	D7	0
H	2	R8	1	A8	7	D8	0
H	5	R9	1	A9	2	D9	0
H	5	R10	1	A10	9	D10	0
H	5	R11	1	A11	9	D11	0
H	6	R12	1	A12	2	D12	0
H	6	R13	1	A13	12	D13	0
H	6	R14	1	A14	12	D14	0
H	7	R15	2	A15	1	D15	0
H	7	R16	2	A16	15	D16	0
H	7	R17	2	A17	15	D17	0

Variables:

R2	1.48055
R3	1.83415
R4	1.0853
R5	1.52457
R6	2.74179
R7	1.50897
R8	1.07243
R9	1.09211
R10	1.08197
R11	1.08569
R12	1.0039
R13	1.00473
R14	1.0048
R15	1.0848
R16	1.08429
R17	1.07869
A3	96.69303
A4	110.25307
A5	115.35526
A6	42.49673
A7	120.92821
A8	114.50143
A9	112.72131
A10	108.96564
A11	110.96638
A12	94.76265

A13	143.87451
A14	90.09459
A15	110.84252
A16	111.2611
A17	108.44332
D4	115.10602
D5	-119.39767
D6	-170.23983
D7	-79.19882
D8	146.90088
D9	-72.84352
D10	-119.329
D11	122.71767
D12	121.94393
D13	-130.35039
D14	107.81318
D15	-49.79278
D16	-121.93121
D17	118.64125

E=-611.9317735 hartree

2-Fluorothiirane + Ammonia at C₂

0	1							
C								
C	1	R2						
S	1	R3	2	A3				
H	1	R4	2	A4	3	D4	0	
H	1	R5	2	A5	3	D5	0	
F	2	R6	1	A6	3	D6	0	
H	2	R7	1	A7	6	D7	0	
N	4	R8	1	A8	2	D8	0	
H	8	R9	4	A9	1	D9	0	
H	8	R10	4	A10	9	D10	0	
H	8	R11	4	A11	9	D11	0	

Variables:

R2	1.46051
R3	1.82887
R4	1.08283
R5	1.08262
R6	1.30659
R7	1.06834
R8	2.82031
R9	1.00551
R10	1.00585

R11	1.00507
A3	96.98682
A4	110.94996
A5	111.04695
A6	118.0677
A7	119.953
A8	74.14241
A9	94.70993
A10	154.51968
A11	74.11428
D4	117.55215
D5	-119.29518
D6	83.67126
D7	-145.68887
D8	32.33031
D9	79.4776
D10	-152.48457
D11	107.5556

E=-632.5337542 hartree

2-Fluorothiirane + Ammonia at C₃

0	1							
C								
C	1	R2						
S	1	R3	2	A3				
F	1	R4	2	A4	3	D4	0	
H	1	R5	2	A5	3	D5	0	
H	2	R6	1	A6	3	D6	0	
H	2	R7	1	A7	6	D7	0	
N	4	R8	1	A8	2	D8	0	
H	8	R9	4	A9	1	D9	0	
H	8	R10	4	A10	9	D10	0	
H	8	R11	4	A11	9	D11	0	

Variables:

R2	1.46469
R3	1.77521
R4	1.38405
R5	1.07831
R6	1.06861
R7	1.06863
R8	2.89726
R9	1.00458
R10	1.00487
R11	1.00528

A3	93.8451
A4	109.30776
A5	114.8639
A6	118.50986
A7	116.6348
A8	69.57656
A9	106.50173
A10	145.10612
A11	56.29964
D4	120.55107
D5	-119.7632
D6	77.4376
D7	-149.13706
D8	34.57686
D9	75.33888
D10	174.24948
D11	100.819

E=-632.5497528 hartree

B3LYP/6-311++G(d,p)//HF/6-311++G(d,p)

Ammonia

0	1						
H							
N	1	R2					
H	2	R3	1	A3			
H	2	R3	1	A3	3	D4	0

Variables:

R2	1.00021
R3	1.0002
A3	108.40997
D4	-117.47994

E=-56.5723523 hartree

Thiirane

0	1		
S			
C	1	R2	

C	1	R2	2	A3			
H	2	R4	1	A4	3	D4	0
H	2	R4	1	A4	3	-D4	0
H	3	R4	1	A4	2	-D4	0
H	3	R4	1	A4	2	D4	0

Variables:

R2	1.81422
R4	1.07474
A3	47.87211
A4	115.00095
D4	111.39833

E=-476.8332246 hartree

2-Methylthiirane

0	1						
H							
C	1	R2					
S	2	R3	1	A3			
C	2	R4	1	A4	3	D4	0
H	2	R5	1	A5	3	D5	0
C	4	R6	2	A6	1	D6	0
H	4	R7	2	A7	6	D7	0
H	6	R8	4	A8	2	D8	0
H	6	R9	4	A9	8	D9	0
H	6	R10	4	A10	8	D10	0

Variables:

R2	1.07502
R3	1.81799
R4	1.4711
R5	1.07576
R6	1.50947
R7	1.07664
R8	1.08401
R9	1.08804
R10	1.08443
A3	114.92738
A4	118.81427
A5	114.95331
A6	120.745
A7	115.59064
A8	110.93641
A9	109.79508

A10	110.8449
D4	75.60386
D5	-136.58305
D6	143.17462
D7	-145.65569
D8	35.36307
D9	-120.10727
D10	120.37622

E=-516.1627398 hartree

2-Fluorothiirane

C

C	1	R2					
S	1	R3	2	A3			
F	1	R4	2	A4	3	D4	0
H	1	R5	2	A5	3	D5	0
H	2	R6	1	A6	3	D6	0
H	2	R7	1	A7	6	D7	0

Variables:

R2	1.46264
R3	1.78844
R4	1.33953
R5	1.07306
R6	1.0748
R7	1.07456
A3	67.44306
A4	117.0875
A5	120.84227
A6	118.92108
A7	116.57631
D4	-110.37374
D5	108.80647
D6	-106.92308
D7	-146.67298

E=-576.0976659 hartree

Dimethylamine

O	1						
N							
H	1	R2					
C	1	R3	2	A3			
C	1	R3	2	A3	3	D4	0
H	3	R5	1	A5	2	D5	0
H	3	R6	1	A6	5	D6	0

H	3	R7	1	A7	5	D7	0
H	4	R5	1	A5	2	-D5	0
H	4	R7	1	A7	8	-D7	0
H	4	R6	1	A6	8	-D6	0

Variables:

R2	0.99867
R3	1.44779
R5	1.08597
R6	1.0846
R7	1.09401
A3	110.02561
A5	109.53397
A6	109.7729
A7	113.53886
D4	-126.05486
D5	171.8829
D6	-118.04173
D7	120.53376

E=-135.2090208 hartree

Thiirane + Ammonia

0	1						
C							
C	1	R2					
S	1	R3	2	A3			
H	1	R4	2	A4	3	D4	0
H	1	R5	2	A5	3	D5	0
H	2	R6	1	A6	3	D6	0
H	2	R7	1	A7	6	D7	0
N	2	R8	1	A8	6	D8	0
H	8	R9	2	A9	1	D9	0
H	8	R10	2	A10	9	D10	0
H	8	R11	2	A11	9	D11	0

Variables:

R2	1.46942
R3	1.82692
R4	1.08309
R5	1.08309
R6	1.07179
R7	1.07179
R8	1.87554
R9	1.00326
R10	1.00378
R11	1.00326

A3	94.65131
A4	112.74537
A5	112.74537
A6	116.83327
A7	116.83327
A8	109.4515
A9	109.42676
A10	112.84869
A11	109.42685
D4	117.02956
D5	-117.02956
D6	70.97487
D7	-141.94973
D8	109.02513
D9	-59.13061
D10	-120.86889
D11	118.26219

E=-533.3675577 hartree

2-Methylthiirane + Ammonia at C₂

0	1						
C							
C	1	R2					
S	1	R3	2	A3			
H	1	R4	2	A4	3	D4	0
H	1	R5	2	A5	3	D5	0
H	2	R6	1	A6	3	D6	0
C	2	R7	1	A7	6	D7	0
N	5	R8	1	A8	2	D8	0
H	7	R9	2	A9	1	D9	0
H	7	R10	2	A10	9	D10	0
H	7	R11	2	A11	9	D11	0
H	8	R12	5	A12	1	D12	0
H	8	R13	5	A13	12	D13	0
H	8	R14	5	A14	12	D14	0

Variables:

R2	1.47219
R3	1.83014
R4	1.08439
R5	1.08339
R6	1.07279
R7	1.50543
R8	2.79918
R9	1.08514
R10	1.08448

R11	1.07967
R12	1.00302
R13	1.00335
R14	1.00322
A3	98.1
A4	112.10377
A5	111.95574
A6	114.55711
A7	121.13792
A8	74.7184
A9	110.9259
A10	111.24951
A11	107.87165
A12	67.01901
A13	153.50962
A14	97.57812
D4	118.82376
D5	-116.89679
D6	67.06882
D7	-147.26038
D8	-33.25914
D9	-47.43988
D10	-122.42734
D11	118.39042
D12	174.82637
D13	-85.46066
D14	106.37569

E=-572.6936589 hartree

2-Methylthiirane + Ammonia at C₃

0	1							
C								
C	1	R2						
S	1	R3	2	A3				
C	1	R4	2	A4	3	D4	0	
H	1	R5	2	A5	3	D5	0	
H	2	R6	1	A6	3	D6	0	
H	2	R7	1	A7	6	D7	0	
N	2	R8	1	A8	6	D8	0	
H	4	R9	1	A9	2	D9	0	
H	4	R10	1	A10	9	D10	0	
H	4	R11	1	A11	9	D11	0	
H	8	R12	2	A12	1	D12	0	
H	8	R13	2	A13	12	D13	0	

H 8 R14 2 A14 12 D14 0
 Variables:

R2	1.4749
R3	1.82827
R4	1.52177
R5	1.08483
R6	1.0715
R7	1.07286
R8	1.86556
R9	1.08576
R10	1.08272
R11	1.09367
R12	1.00332
R13	1.00366
R14	1.00297
A3	93.91924
A4	115.16097
A5	110.82311
A6	116.86791
A7	116.5721
A8	109.93942
A9	110.68817
A10	109.40445
A11	112.44992
A12	109.44156
A13	112.10358
A14	110.04381
D4	119.78757
D5	-113.50558
D6	70.2739
D7	-141.56895
D8	109.15286
D9	-51.37351
D10	-118.31912
D11	122.22204
D12	-55.25936
D13	-120.41133
D14	118.71898

E=-572.6967148 hartee

2-Fluorothiirane + Ammonia at C₂

0 1
 C
 C 1 R2

S	1	R3	2	A3				
H	1	R4	2	A4	3	D4	0	
H	1	R5	2	A5	3	D5	0	
F	2	R6	1	A6	3	D6	0	
H	2	R7	1	A7	6	D7	0	
N	4	R8	1	A8	2	D8	0	
H	8	R9	4	A9	1	D9	0	
H	8	R10	4	A10	9	D10	0	
H	8	R11	4	A11	9	D11	0	

Variables:

R2	1.46003
R3	1.8269
R4	1.08355
R5	1.08348
R6	1.30047
R7	1.0702
R8	2.80914
R9	1.00397
R10	1.00416
R11	1.00337
A3	97.40175
A4	110.6755
A5	111.01996
A6	118.21546
A7	119.23983
A8	74.44667
A9	94.09318
A10	154.83654
A11	73.50652
D4	117.38533
D5	-119.19934
D6	83.56496
D7	-145.0032
D8	32.02001
D9	80.39553
D10	-152.74233
D11	107.96308

E=-632.6309005 hartree

2-Fluorothiirane + Ammonia at C₃

O	1			
C				
C	1	R2		
S	1	R3	2	A3

F	1	R4	2	A4	3	D4	0
H	1	R5	2	A5	3	D5	0
H	2	R6	1	A6	3	D6	0
H	2	R7	1	A7	6	D7	0
N	4	R8	1	A8	2	D8	0
H	8	R9	4	A9	1	D9	0
H	8	R10	4	A10	9	D10	0
H	8	R11	4	A11	9	D11	0

Variables:

R2	1.46528
R3	1.77513
R4	1.37871
R5	1.07952
R6	1.0698
R7	1.07004
R8	2.89819
R9	1.00293
R10	1.00307
R11	1.00388
A3	94.17375
A4	109.41095
A5	114.57671
A6	118.17576
A7	116.41031
A8	69.58151
A9	107.90705
A10	143.46995
A11	55.44126
D4	120.71274
D5	-119.21927
D6	76.96568
D7	-148.08367
D8	34.16826
D9	74.61114
D10	174.51257
D11	100.17832

E=-632.6465693 hartree

Dimethylamine

0	1						
N							
H	1	R2					
C	1	R3	2	A3			
C	1	R3	2	A3	3	D4	0

H	3	R5	1	A5	2	D5	0
H	3	R6	1	A6	5	D6	0
H	3	R7	1	A7	5	D7	0
H	4	R5	1	A5	2	-D5	0
H	4	R7	1	A7	8	-D7	0
H	4	R6	1	A6	8	-D6	0

Variables:

R2	0.99867
R3	1.44779
R5	1.08597
R6	1.0846
R7	1.09401
A3	110.02561
A5	109.53397
A6	109.7729
A7	113.53886
D4	-126.05486
D5	171.8829
D6	-118.04173
D7	120.53376

E=-135.2090208 hartree

Dimethylamine + Ammonia

0	1						
C							
C	1	R2					
S	1	R3	2	A3			
H	1	R4	2	A4	3	D4	0
H	1	R5	2	A5	3	D5	0
H	2	R6	1	A6	3	D6	0
H	2	R7	1	A7	6	D7	0
N	4	R8	1	A8	2	D8	0
H	8	R9	4	A9	1	D9	0
C	8	R10	4	A10	9	D10	0
C	8	R11	4	A11	9	D11	0
H	10	R12	8	A12	4	D12	0
H	10	R13	8	A13	12	D13	0
H	10	R14	8	A14	12	D14	0
H	11	R15	8	A15	4	D15	0
H	11	R16	8	A16	15	D16	0
H	11	R17	8	A17	15	D17	0

Variables:

R2	1.46252
R3	1.83128

R4	1.08038
R5	1.08203
R6	1.07059
R7	1.07136
R8	3.08793
R9	1.0018
R10	1.46219
R11	1.4627
R12	1.08371
R13	1.08657
R14	1.08267
R15	1.0837
R16	1.08116
R17	1.08666
A3	91.82334
A4	113.94361
A5	113.54873
A6	117.16089
A7	117.699
A8	65.92793
A9	90.90345
A10	151.3818
A11	77.42244
A12	109.17819
A13	111.77368
A14	109.6312
A15	109.14662
A16	109.59698
A17	111.58362
D4	115.56758
D5	-115.87846
D6	72.2972
D7	-145.50434
D8	35.91204
D9	73.45122
D10	-135.53671
D11	109.27401
D12	-42.16173
D13	-120.28467
D14	118.79765
D15	87.4258
D16	-118.86061
D17	120.17257

E=-611.9185437 hartree

MP2/6-31+G(d)//MP2/6-31(d)

Ammonia

O	1						
H							
N	1	R2					
H	2	R3	1	A3			
H	2	R3	1	A3	3	D4	0

Variables:

R2	1.01714
R3	1.01704
A3	106.30398
D4	-113.01219

MP2=-56.3630327 hartree

2-Methylthirane

O	1						
H							
C	1	R2					
S	2	R3	1	A3			
C	2	R4	1	A4	3	D4	0
H	2	R5	1	A5	3	D5	0
C	4	R6	2	A6	1	D6	0
H	4	R7	2	A7	6	D7	0
H	6	R8	4	A8	2	D8	0
H	6	R9	4	A9	8	D9	0
H	6	R10	4	A10	8	D10	0

Variables:

R2	1.08622
R3	1.82044
R4	1.48018
R5	1.08708
R6	1.5069
R7	1.08853
R8	1.09298
R9	1.09557
R10	1.09293
A3	115.67258
A4	118.76871
A5	114.77388
A6	119.92359

A7	115.50281
A8	110.27186
A9	109.92364
A10	111.15226
D4	75.7043
D5	-137.93534
D6	142.06914
D7	-144.68552
D8	36.39561
D9	-119.96488
D10	120.02974

E=-515.1086311 hartree

cis-2,3-Dimethylthiirane

0	1							
C								
C	1	R2						
S	1	R3	2	A3				
C	1	R4	2	A4	3	D4	0	
H	1	R5	2	A5	3	D5	0	
H	2	R6	1	A6	3	D6	0	
H	4	R7	1	A7	2	D7	0	
H	4	R8	1	A8	7	D8	0	
H	4	R9	1	A9	7	D9	0	
C	2	R10	1	A10	6	D10	0	
H	10	R11	2	A11	1	D11	0	
H	10	R12	2	A12	11	D12	0	
H	10	R13	2	A13	11	D13	0	

Variables:

R2	1.48453
R3	1.82905
R4	1.50832
R5	1.08942
R6	1.08942
R7	1.09314
R8	1.09591
R9	1.09077
R10	1.50833
R11	1.09314
R12	1.09077
R13	1.09592
A3	66.05556
A4	122.28842
A5	114.7338

A6	114.74162
A7	110.27929
A8	109.98889
A9	111.53629
A10	122.28056
A11	110.27887
A12	111.53386
A13	109.99153
D4	-110.77021
D5	104.56343
D6	-104.56796
D7	160.63686
D8	119.26062
D9	-119.86337
D10	-144.66622
D11	-160.63213
D12	119.86243
D13	-119.26181

E=-554.2802629 hartree

trans-2,3-Dimethylthiirane

0	1							
C								
C	1	R2						
S	1	R3	2	A3				
H	1	R4	2	A4	3	D4	0	
C	1	R5	2	A5	3	D5	0	
H	2	R6	1	A6	3	D6	0	
C	2	R7	1	A7	6	D7	0	
H	5	R8	1	A8	2	D8	0	
H	5	R9	1	A9	8	D9	0	
H	5	R10	1	A10	8	D10	0	
H	7	R11	2	A11	1	D11	0	
H	7	R12	2	A12	11	D12	0	
H	7	R13	2	A13	11	D13	0	

Variables:

R2	1.47929
R3	1.82838
R4	1.09005
R5	1.50698
R6	1.09005
R7	1.50696
R8	1.09323

R9	1.09294
R10	1.09573
R11	1.09322
R12	1.09294
R13	1.09573
A3	66.13834
A4	114.94486
A5	120.57413
A6	114.94397
A7	120.57321
A8	111.18067
A9	110.28522
A10	109.97251
A11	111.18534
A12	110.2869
A13	109.96641
D4	-104.82209
D5	110.47901
D6	-104.8179
D7	-144.69556
D8	-156.35567
D9	120.00324
D10	-120.00282
D11	-156.35096
D12	120.00727
D13	-120.00127

E=-554.2829907 hartree

2-Fluorothiirane

0	1						
C							
C	1	R2					
S	1	R3	2	A3			
F	1	R4	2	A4	3	D4	0
H	1	R5	2	A5	3	D5	0
H	2	R6	1	A6	3	D6	0
H	2	R7	1	A7	6	D7	0

Variables:

R2	1.46984
R3	1.79756
R4	1.37128
R5	1.08599
R6	1.08625
R7	1.08575
A3	67.2654

A4	116.95459
A5	120.92434
A6	119.20773
A7	115.95415
D4	-110.69802
D5	108.61734
D6	-107.52918
D7	-145.47317

E=-574.9614316 hartree

Dimethylamine

0	1							
N								
H	1	R2						
C	1	R3	2	A3				
C	1	R3	2	A3	3	D4	0	
H	3	R5	1	A5	2	D5	0	
H	3	R6	1	A6	5	D6	0	
H	3	R7	1	A7	5	D7	0	
H	4	R5	1	A5	2	-D5	0	
H	4	R7	1	A7	8	-D7	0	
H	4	R6	1	A6	8	-D6	0	

Variables:

R2	1.01848
R3	1.45803
R5	1.09397
R6	1.09284
R7	1.1035
A3	108.74026
A5	108.85171
A6	109.45739
A7	114.0689
D4	-121.7678
D5	174.19727
D6	-117.7839
D7	120.3542

E=-134.6747486

Thiirane + Ammonia

0	1		
C			
C	1	R2	

S	1	R3	2	A3				
H	1	R4	2	A4	3	D4	0	
H	1	R5	2	A5	3	D5	0	
H	2	R6	1	A6	3	D6	0	
H	2	R7	1	A7	6	D7	0	
N	2	R8	1	A8	6	D8	0	
H	8	R9	2	A9	1	D9	0	
H	8	R10	2	A10	9	D10	0	
H	8	R11	2	A11	9	D11	0	

Variables:

R2	1.47952
R3	1.81488
R4	1.09612
R5	1.09612
R6	1.08575
R7	1.08575
R8	1.74155
R9	1.02213
R10	1.02342
R11	1.02213
A3	95.52004
A4	111.95316
A5	111.95284
A6	114.54243
A7	114.54277
A8	111.17851
A9	108.8925
A10	113.39236
A11	108.89302
D4	118.52606
D5	-118.52587
D6	66.41149
D7	-132.82507
D8	113.58738
D9	-58.80736
D10	-121.18957
D11	117.62055

MP2=-532.2408636

2-Methylthiirane + Ammonia at C₂

0	1			
C				
C	1	R2		
S	1	R3	2	A3

H	1	R4	2	A4	3	D4	0
H	1	R5	2	A5	3	D5	0
H	2	R6	1	A6	3	D6	0
C	2	R7	1	A7	6	D7	0
N	2	R8	1	A8	6	D8	0
H	7	R9	2	A9	1	D9	0
H	7	R10	2	A10	9	D10	0
H	7	R11	2	A11	9	D11	0
H	8	R12	2	A12	1	D12	0
H	8	R13	2	A13	12	D13	0
H	8	R14	2	A14	12	D14	0

Variables:

R2	1.47301
R3	1.81546
R4	1.09648
R5	1.09693
R6	1.08631
R7	1.51148
R8	1.84562
R9	1.09535
R10	1.09467
R11	1.0871
R12	1.02142
R13	1.02213
R14	1.02132
A3	95.34355
A4	111.69322
A5	112.37803
A6	113.71426
A7	119.9642
A8	106.25747
A9	110.13885
A10	111.22675
A11	109.22849
A12	107.76736
A13	114.20243
A14	108.99174
D4	118.91771
D5	-117.75159
D6	64.84523
D7	-143.12121
D8	105.39317
D9	-47.42385
D10	-121.10948
D11	118.58711
D12	-52.99816
D13	-121.13356

D14

117.26812

E=-571.4119715 hartree

2-Methylthiirane + Ammonia at C₃

0	1						
C							
C	1	R2					
S	1	R3	2	A3			
C	1	R4	2	A4	3	D4	0
H	1	R5	2	A5	3	D5	0
H	2	R6	1	A6	3	D6	0
H	2	R7	1	A7	6	D7	0
N	2	R8	1	A8	6	D8	0
H	4	R9	1	A9	2	D9	0
H	4	R10	1	A10	9	D10	0
H	4	R11	1	A11	9	D11	0
H	8	R12	2	A12	1	D12	0
H	8	R13	2	A13	12	D13	0
H	8	R14	2	A14	12	D14	0

Variables:

R2	1.48055
R3	1.81295
R4	1.52073
R5	1.09805
R6	1.08595
R7	1.08702
R8	1.74769
R9	1.09422
R10	1.09193
R11	1.1032
R12	1.02218
R13	1.02327
R14	1.02228
A3	94.70707
A4	114.06952
A5	110.65482
A6	115.3983
A7	114.05691
A8	110.89738
A9	109.71545
A10	109.3061
A11	113.2192
A12	108.99258
A13	113.19838

A14	108.7757
D4	119.54042
D5	-115.38083
D6	66.84702
D7	-133.76853
D8	113.51298
D9	-53.17786
D10	-117.58917
D11	122.51376
D12	-59.72957
D13	-121.15178
D14	117.62427

E=-571.4173694 hartree

cis-2,3-Dimethylthiirane + Ammonia

0	1							
C								
C	1	R2						
S	1	R3	2	A3				
C	1	R4	2	A4	3	D4	0	
H	1	R5	2	A5	3	D5	0	
H	2	R6	1	A6	3	D6	0	
H	4	R7	1	A7	2	D7	0	
H	4	R8	1	A8	7	D8	0	
H	4	R9	1	A9	7	D9	0	
C	2	R10	1	A10	6	D10	0	
H	10	R11	2	A11	1	D11	0	
H	10	R12	2	A12	11	D12	0	
H	10	R13	2	A13	11	D13	0	

Variables:

R2	1.48453
R3	1.82905
R4	1.50832
R5	1.08942
R6	1.08942
R7	1.09314
R8	1.09591
R9	1.09077
R10	1.50833
R11	1.09314
R12	1.09077
R13	1.09592
A3	66.05556
A4	122.28842

A5	114.7338
A6	114.74162
A7	110.27929
A8	109.98889
A9	111.53629
A10	122.28056
A11	110.27887
A12	111.53386
A13	109.99153
D4	-110.77021
D5	104.56343
D6	-104.56796
D7	160.63686
D8	119.26062
D9	-119.86337
D10	-144.66622
D11	-160.63213
D12	119.86243
D13	-119.26181

E=-554.2802629 hartree

trans-2,3-Dimethylthiirane + Ammonia

0	1							
C								
C	1	R2						
S	1	R3	2	A3				
H	1	R4	2	A4	3	D4	0	
C	1	R5	2	A5	3	D5	0	
H	2	R6	1	A6	3	D6	0	
C	2	R7	1	A7	6	D7	0	
H	5	R8	1	A8	2	D8	0	
H	5	R9	1	A9	8	D9	0	
H	5	R10	1	A10	8	D10	0	
H	7	R11	2	A11	1	D11	0	
H	7	R12	2	A12	11	D12	0	
H	7	R13	2	A13	11	D13	0	

Variables:

R2	1.47929
R3	1.82838
R4	1.09005
R5	1.50698
R6	1.09005
R7	1.50696

R8	1.09323
R9	1.09294
R10	1.09573
R11	1.09322
R12	1.09294
R13	1.09573
A3	66.13834
A4	114.94486
A5	120.57413
A6	114.94397
A7	120.57321
A8	111.18067
A9	110.28522
A10	109.97251
A11	111.18534
A12	110.2869
A13	109.96641
D4	-104.82209
D5	110.47901
D6	-104.8179
D7	-144.69556
D8	-156.35567
D9	120.00324
D10	-120.00282
D11	-156.35096
D12	120.00727
D13	-120.00127

E=-554.2829907 hartree

2-Fluorothirane + Ammonia at C₂

0	1						
C							
C	1	R2					
S	1	R3	2	A3			
H	1	R4	2	A4	3	D4	0
H	1	R5	2	A5	3	D5	0
F	2	R6	1	A6	3	D6	0
H	2	R7	1	A7	6	D7	0
N	2	R8	1	A8	6	D8	0
H	8	R9	2	A9	1	D9	0
H	8	R10	2	A10	9	D10	0
H	8	R11	2	A11	9	D11	0

Variables:

R2

1.46555

R3	1.81132
R4	1.09821
R5	1.0967
R6	1.35465
R7	1.08586
R8	1.77273
R9	1.0224
R10	1.02294
R11	1.02214
A3	96.94385
A4	110.75298
A5	109.82453
A6	116.51505
A7	117.23807
A8	109.95079
A9	106.73436
A10	110.78121
A11	111.94305
D4	119.33466
D5	-119.83508
D6	79.91893
D7	-137.94202
D8	107.39437
D9	-59.32101
D10	-117.93835
D11	119.27254

E=-631.2682116 hartree

2-Fluorothiirane + Ammonia at C₂

0	1							
C								
C	1	R2						
S	1	R3	2	A3				
F	1	R4	2	A4	3	D4	0	
H	1	R5	2	A5	3	D5	0	
H	2	R6	1	A6	3	D6	0	
H	2	R7	1	A7	6	D7	0	
N	2	R8	1	A8	6	D8	0	
H	8	R9	2	A9	1	D9	0	
H	8	R10	2	A10	9	D10	0	
H	8	R11	2	A11	9	D11	0	

Variables:

R2	1.46584
R3	1.75188

R4	1.43415
R5	1.0935
R6	1.08315
R7	1.08223
R8	1.87459
R9	1.02037
R10	1.02088
R11	1.02266
A3	93.68787
A4	107.86753
A5	115.21308
A6	118.38409
A7	114.89802
A8	104.89844
A9	113.10209
A10	115.78234
A11	99.43911
D4	121.44489
D5	-120.85001
D6	77.97214
D7	-143.8942
D8	111.05462
D9	-77.23431
D10	-126.91216
D11	115.43987

E=-631.285635 hartree

Thiirane + Dimethylamine

0	1							
C								
C	1	R2						
S	1	R3	2	A3				
H	1	R4	2	A4	3	D4	0	
H	1	R5	2	A5	3	D5	0	
H	2	R6	1	A6	3	D6	0	
H	2	R7	1	A7	6	D7	0	
N	2	R8	1	A8	6	D8	0	
H	8	R9	2	A9	1	D9	0	
C	8	R10	2	A10	9	D10	0	
C	8	R11	2	A11	9	D11	0	
H	10	R12	8	A12	2	D12	0	
H	10	R13	8	A13	12	D13	0	
H	10	R14	8	A14	12	D14	0	

H	11	R15	8	A15	2	D15	0
H	11	R16	8	A16	15	D16	0
H	11	R17	8	A17	15	D17	0

Variables:

R2	1.47231
R3	1.8177
R4	1.09306
R5	1.09456
R6	1.08546
R7	1.08623
R8	1.83225
R9	1.02303
R10	1.47192
R11	1.47201
R12	1.09199
R13	1.09463
R14	1.09102
R15	1.092
R16	1.08969
R17	1.09457
A3	91.5202
A4	113.676
A5	113.06075
A6	115.37904
A7	116.03831
A8	112.50402
A9	103.72926
A10	110.08829
A11	110.35898
A12	108.19372
A13	111.51769
A14	109.06778
A15	108.19276
A16	108.99179
A17	111.30295
D4	116.60638
D5	-117.09178
D6	68.32919
D7	-137.55377
D8	111.03555
D9	-51.89868
D10	-117.47304
D11	117.19405
D12	-60.00284
D13	-120.26772
D14	118.4361
D15	60.1832

D16
D17

-118.41585
120.1841

E=-610.5682861 hartree

B. Supplementary Tables

Table A. B3LYP/6-31+G(d)//HF/6-31+G(d) Parameters for the Reaction of 2-Methylthiirane at C₂ with Various Amines.

Nucleophile	Distance ^a , N-C ₂	Distance ^a , C ₂ -S	Distance ^a , C ₃ -S	Angle ^b , NC ₂ S	Dihedral Angles ^b
NH ₃	1.95	2.50	1.83	150	60.2, -57.3, -178
MeNH ₂	2.00	2.47	1.83	150	-54.6, 63.9, -175
MeNH ₂	1.99	2.48	1.83	150	62.0, -59.1, -51.5
Me ₂ NH	2.02	2.47	1.84	152	43.2, -82.9, 161
Me ₂ NH	2.02	2.47	1.84	149	-156, 72.6, -41.9
Me ₃ N	2.02	2.50	1.84	150	-72.3, 46.8, 170