Supporting Information

Redox State Manipulation of a Tris(*p*-tetrazolylphenyl)amine Ligand and its Mn^{2+} Coordination Frameworks

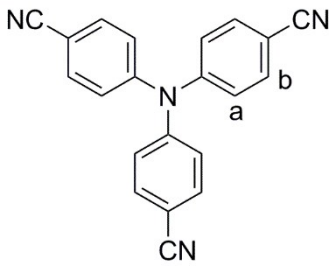
*Carol Hua,[a] Jing-Yuan Ge,[b] Floriana Tuna,[b] David Collison,[b] Jing-Lin Zuo[b] and Deanna M. D'Alessandro[a]**

a) School of Chemistry, The University of Sydney, New South Wales 2006, Australia. Fax: +61 (2) 9351 3329; Tel: +61 (2) 9351 3777; E-mail: deanna.dalessandro@sydney.edu.au

b) State Key Laboratory of Coordination Chemistry, School of Chemistry and Chemical Engineering, Nanjing University, Nanjing 210023, P. R. China.

c) School of Chemistry and Photon Science Institute, The University of Manchester, Manchester M13 9PL, United Kingdom.

Tris(*p*-cyanophenyl)amine.



Di(*p*-cyanophenyl) amine (0.500 g, 2.28 mmol) and *p*-fluorobenzonitrile (0.304 g, 2.51 mmol) were dissolved in dry and distilled DMSO (5.0 mL). Potassium carbonate (0.946 g, 6.84 mmol) was added to yield a yellow-red solution that was heated at 140 °C under nitrogen for 4 days. The reaction mixture was cooled to room temperature and water added to induce precipitation. The solid was filtered and washed with HCl (1 M) and water several times. The precipitate was dried under vacuum to yield the product as a pale yellow solid (0.600 g, 82%). ^{1}H NMR ($CDCl_3$, 200 MHz): 7.61 (d, $^3J_{Ha\text{-}Hb}$ = 8.4 Hz, 6H, $\mathbf{H_a}$), 7.16 (d, $^3J_{Ha\text{-}Hb}$ = 8.4 Hz, 6H, $\mathbf{H_b}$) ppm.

Crystallographic Tables

Table S1. Crystal data for **1**.

Parameter	
Formula	$C_{48}H_{48}Mn_3N_{26}O_6$
M/g mol^{-1}	1177.71
Temperature (K)	150(2)
Crystal system	trigonal
Crystal size (mm^3)	0.120 × 0.085 × 0.050
Crystal colour	Colourless
Crystal Habit	Block
a (Å)	16.5089(10)
b (Å)	16.5089(10)
c (Å)	45.518(6)
γ (°)	120
V (Å^3)	10743.6(18)
Z	6
ρ_{calc} (mg mm^{-3})	1.092
λ(MoKα)	0.71073 Å
μ(MoKα)	0.574 mm^{-1}
$2\theta_{max}$ (°)	65.28
T(CRYSALISPRO)$_{min, max}$	0.94508, 1.00000
hkl range	-24 24, -24 24, -67 68
Reflections collected	83300/4331 [R(int) = 0.0680]
Data/restraints/parameters	2918/126
Final R indexes [all data]	R_1 = 0.0623, wR_2 = 0.1965
Goodness-of-fit on F^2	1.055
Residual Extrema	-0.663, 3.345 e$^-$Å^{-3}

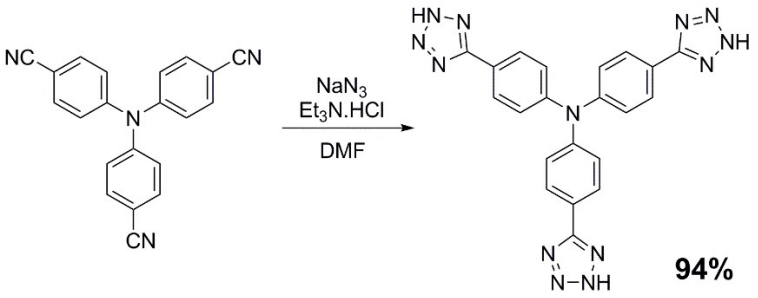
$R1 = \Sigma(|F_o| - |F_c|)/\Sigma(|F_o|)$; $wR_2 = [\Sigma\{w(F_o^2 - F_c^2)^2\}/\Sigma\{w(F_o^2)^2\}]^{1/2}$, $wR2 = (\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)^2/\Sigma(wF_c^2)^2)^{1/2}$ all reflections $w=1/[\sigma^2(F_o^2)+(0.1308P)^2]$ where $P=(F_o^2+2F_c^2)/3$

Table S2. Crystal data for **2**.

Parameter	
Formula	$C_{60}H_{66}Mn_3N_{32}O_6$
M/g mol^{-1}	1496.26
Temperature (K)	150(2)
Crystal system	Trigonal
Crystal size (mm^3)	0.160 × 0.105 × 0.050
Crystal colour	Colourless
Crystal Habit	Block
a (Å)	16.4650(14)
b (Å)	16.4650(14)
c (Å)	47.040(4)
γ (°)	120
V (Å^3)	11044(2)
Z	6
ρ_{calc} (mg mm^{-3})	1.350
λ(MoKα)	0.71073 Å
μ(MoKα)	0.577 mm^{-1}
T(CRYSALISPRO)$_{min, max}$	0.93508, 1.00000
$2\theta_{max}$	62.38
hkl range	-22 22, -23 23, -67 68
Reflections collected	62386/3890 [R(int) = 0.1143]
Data/restraints/parameters	2571/157
Final R indexes [all data]	R_1 = 0.0597, wR_2 = 0.2088
Goodness-of-fit on F^2	1.051
Residual Extrema	-0.779, 0.849 e$^-$Å^{-3}

$R1 = \Sigma(|F_o| - |F_c|)/\Sigma(|F_o|)$; $wR_2 = [\Sigma\{w(F_o^2 - F_c^2)^2\}/\Sigma\{w(F_o^2)^2\}]^{1/2}$, $wR2 = (\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)^2/\Sigma(wF_c^2)^2)^{1/2}$ all reflections $w=1/[\sigma^2(F_o^2)+(0.1388P)^2]$ where $P=(F_o^2+2F_c^2)/3$

Figures



Scheme S1. Synthesis of the tris(*p*-tetrazolylphenyl)amine (H_3TTPA) ligand.

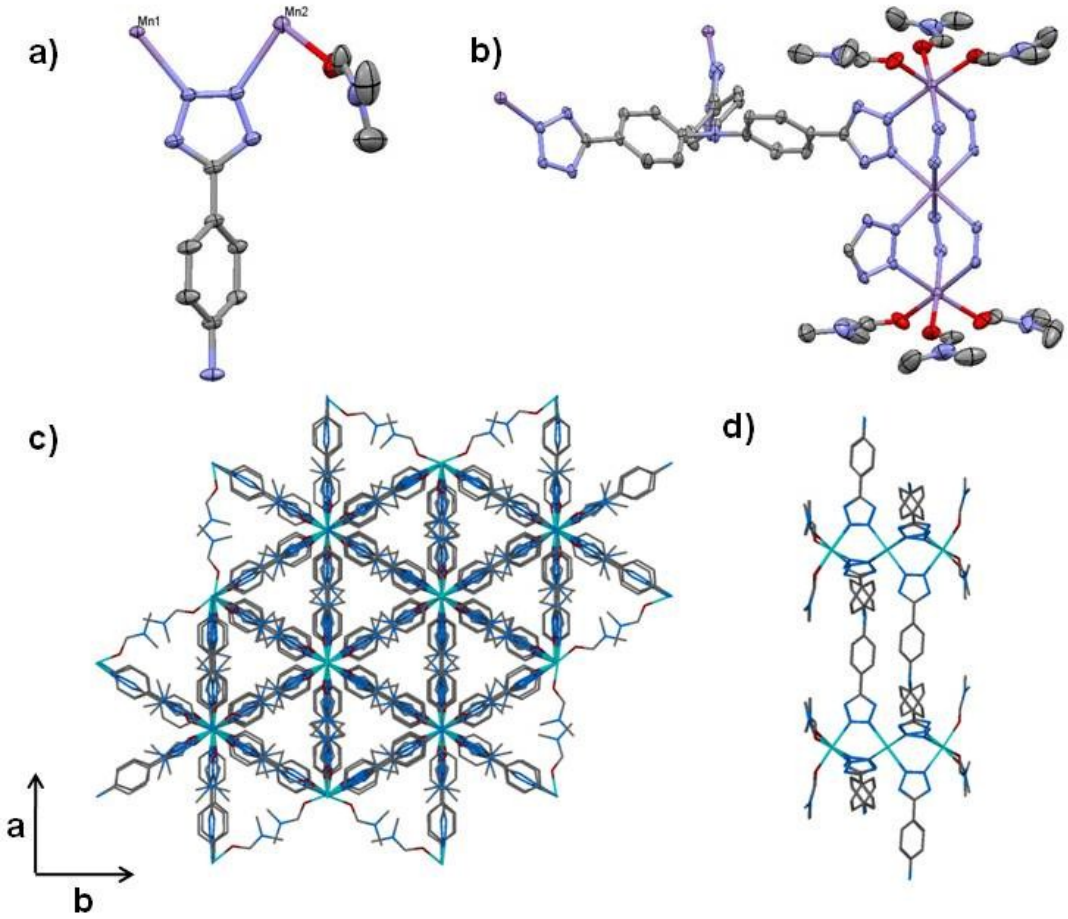


Figure S1. Solid state structure of **2** showing (a) the asymmetric unit, (b) the metal cluster formed upon coordination of three tetrazole rings to two Mn centres, (c) view down the *c* axis of the framework and (d) side on view of one of the networks.

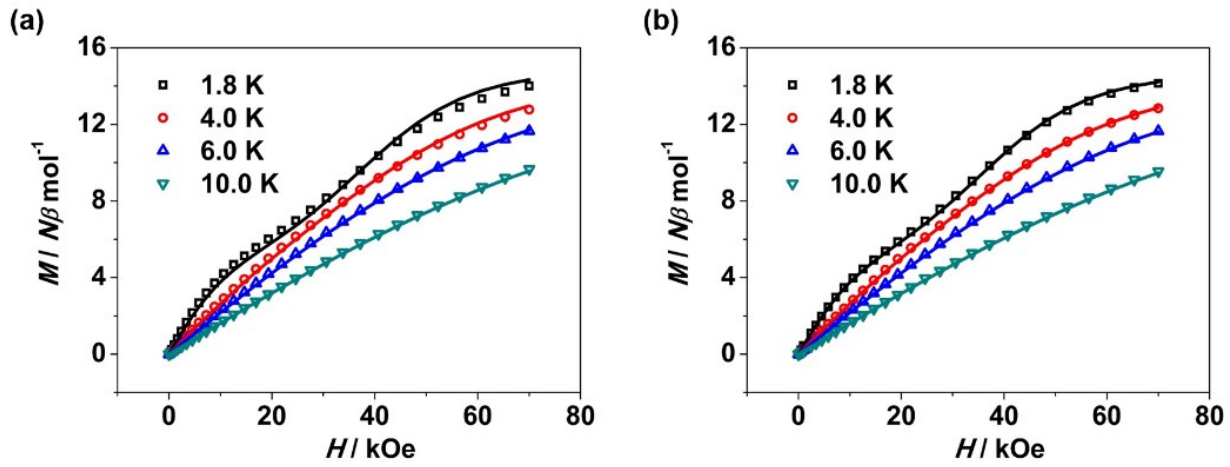


Figure S2. The field-dependent magnetizations of (a) **1** and (b) **2** from 0 to 70 kOe at indicated temperatures. The solid lines are fitted by the PHI program (together with $\chi_M T - T$).

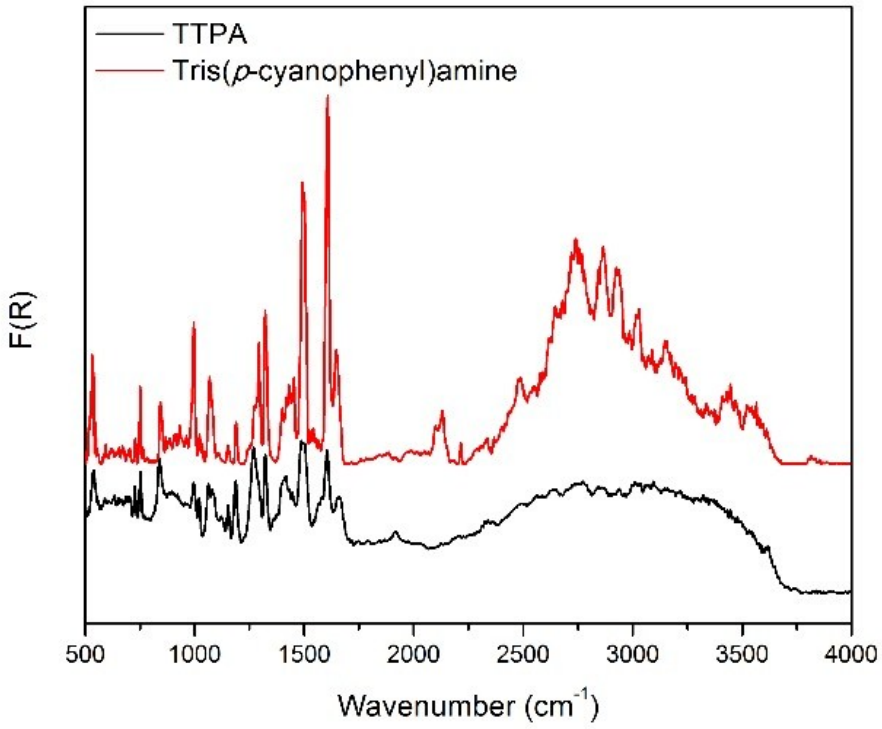


Figure S3. Infrared spectra of tris(*p*-tetrazolylphenyl)amine (H_3TTPA) vs. tris(*p*-cyanophenyl)amine over the range 4000-500 cm^{-1} in KBr matrix.

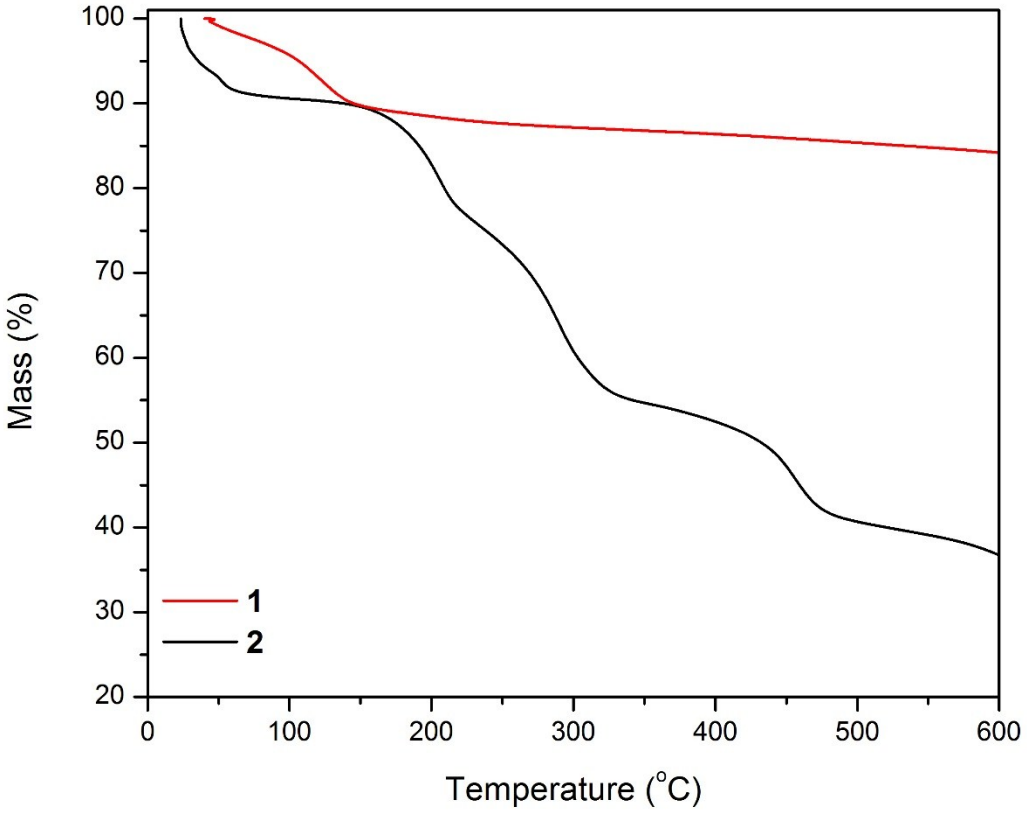


Figure S4. Thermal Gravimetric Analysis (TGA) of **1** and **2** over the range 50-600 °C.

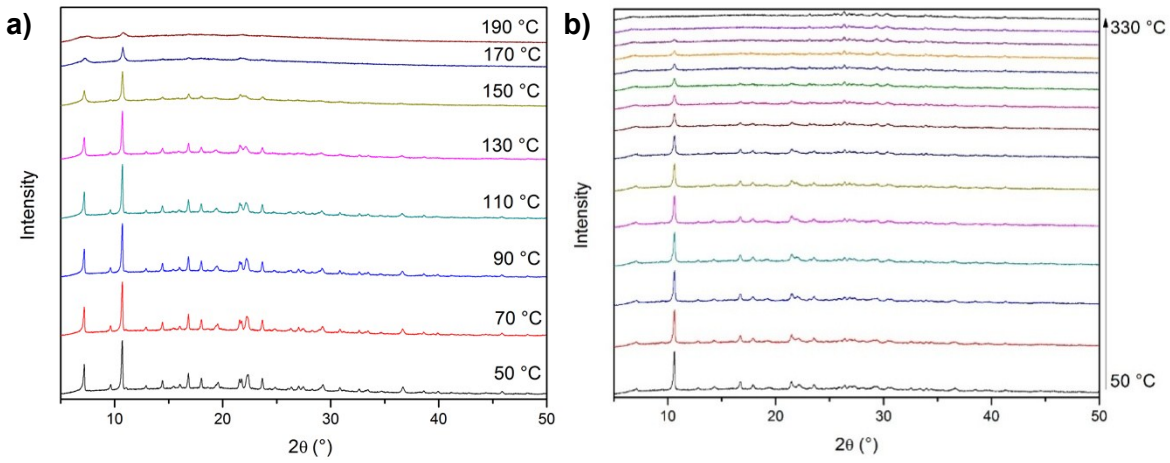


Figure S5. Variable temperature powder X-ray diffraction (VT-PXRD) for (a) **1** from 50-190 °C and (b) **2** from 50-330 °C in 20 °C increments.

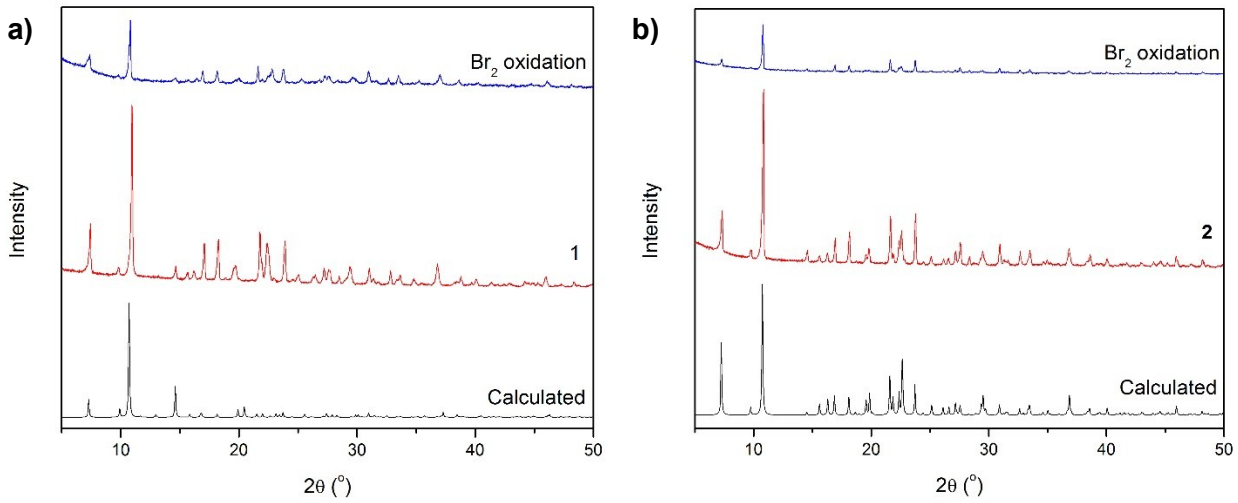


Figure S6. PXRD pattern for (a) **1**; predicted pattern, as synthesised framework and oxidised with bromine and (b) **2**; predicted pattern, as synthesised framework, oxidised with bromine over 5-50° 2θ.

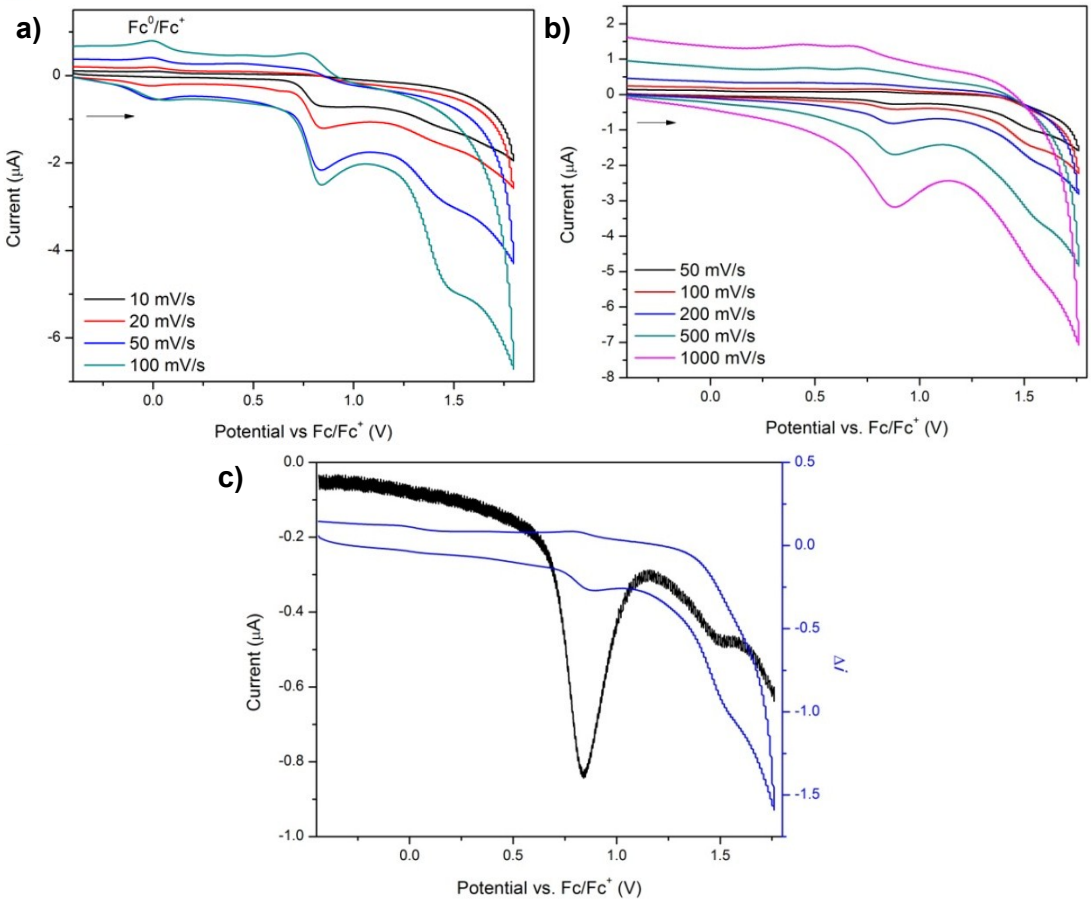


Figure S7. Solution state electrochemistry of the H_3TTPA ligand where cyclic voltammogram over the scan rates of (a) 10-100 mV s^{-1} and (b) 50-1000 mV s^{-1} in $[(n\text{-}C_4H_9)_4N]PF_6/CH_3CN$ electrolyte and (c) square wave in $[(n\text{-}C_4H_9)_4N]PF_6/CH_2Cl_2$ electrolyte referenced against the Fc^+/Fc couple. The arrow indicates the direction of the forward scan.

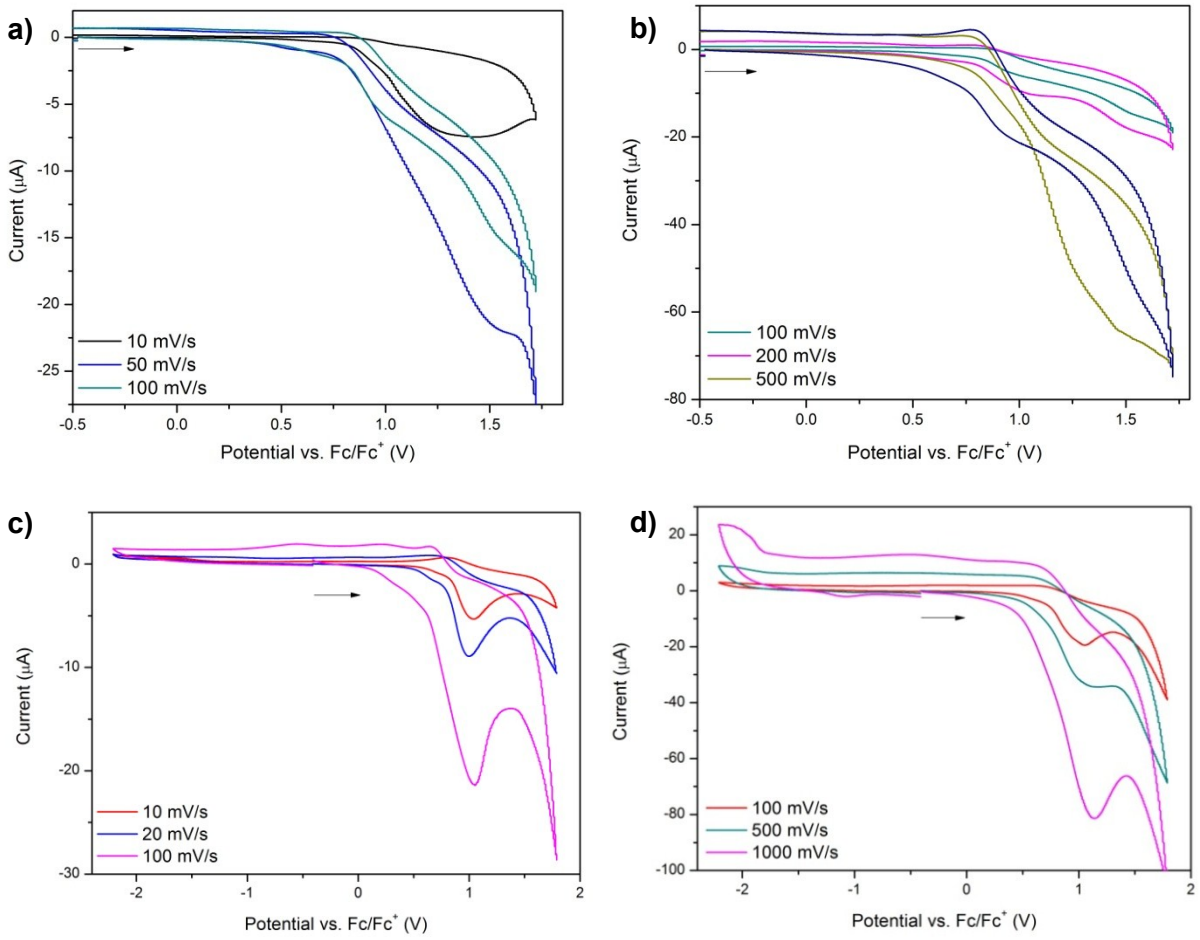


Figure S8. Solid state electrochemistry of **1** in $[(n\text{-}C_4H_9)_4N]PF_6/CH_3CN$ electrolyte over the scan rates of (a) 10-100 mV s^{-1}, (b) 100-500 mV/s and in $[(n\text{-}C_4H_9)_4N]PF_6/CH_2Cl_2$ electrolyte over the scan rates of (c) 10-100 mV s^{-1} and (d) 100-1000 mV s^{-1}.

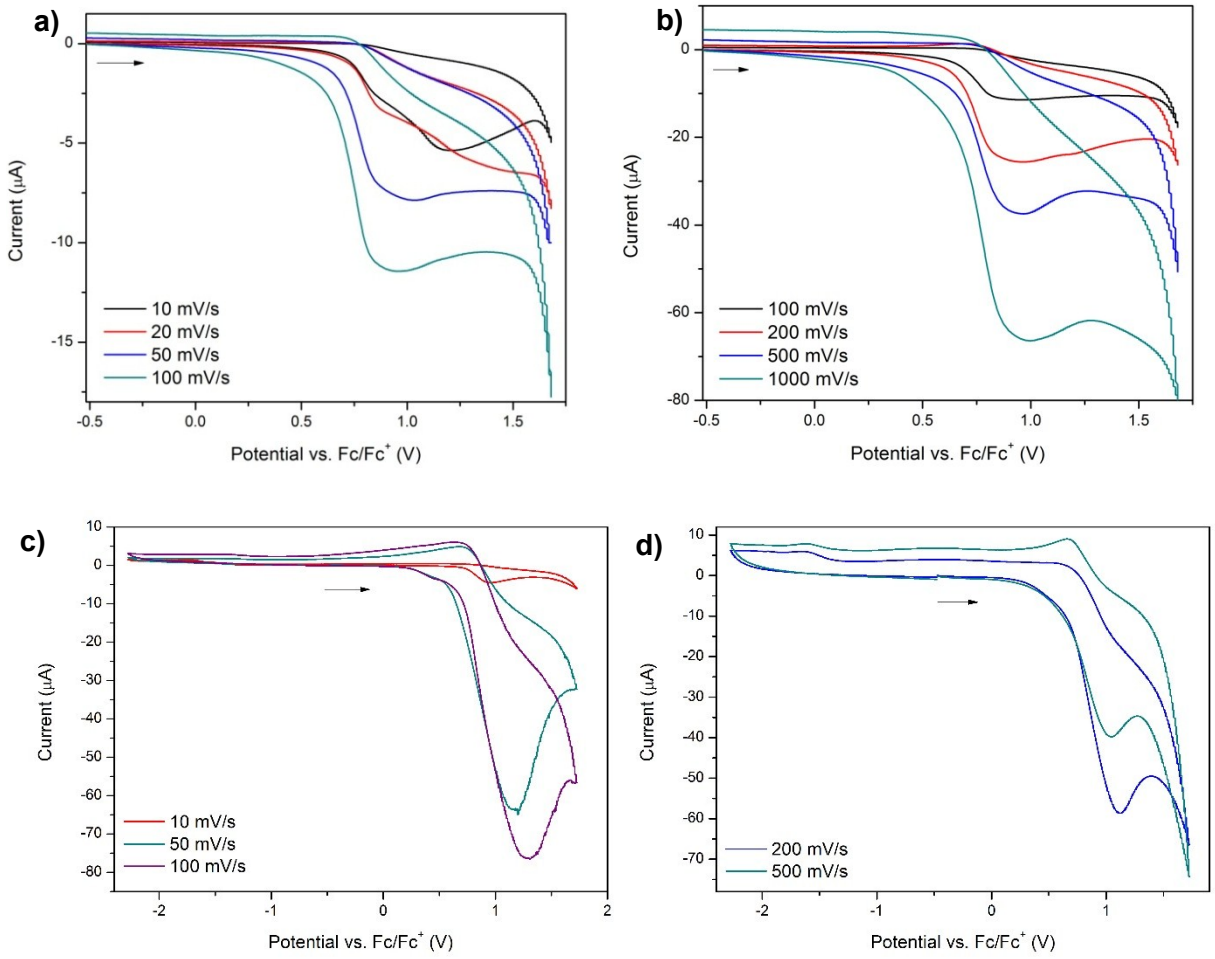


Figure S9. Solid state electrochemistry of **2** in $[(n\text{-}C_4H_9)_4N]PF_6/CH_3CN$ electrolyte over the scan rates of (a) 10-100 mV/s, (b) 100-1000 mV s^{-1} and in $[(n\text{-}C_4H_9)_4N]PF_6/CH_2Cl_2$ electrolyte over the scan rates of (c) 10-100 mV/s and (d) 100-1000 mV s^{-1}.

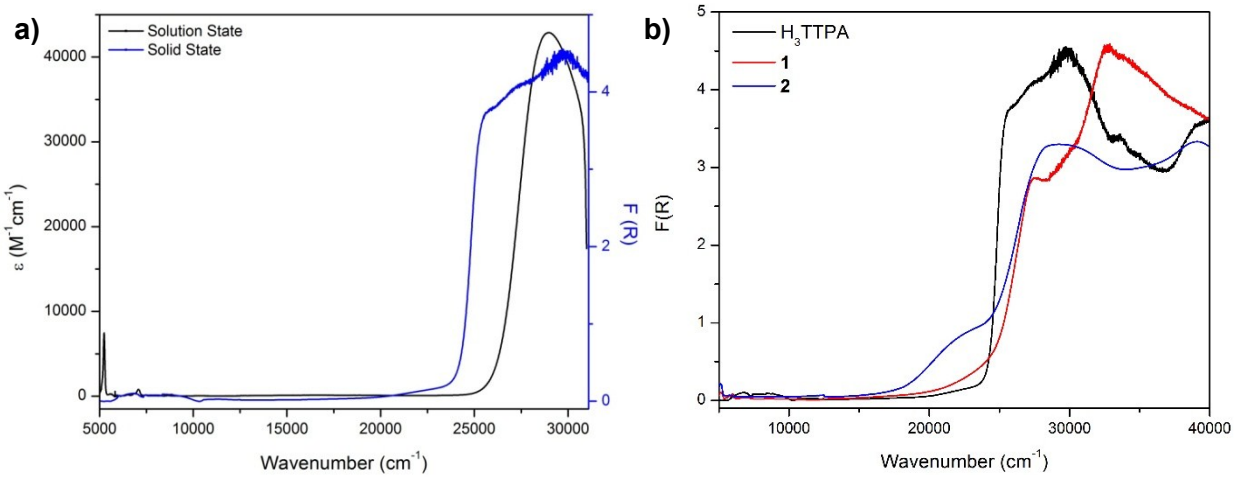


Figure S10. (a) Solution and solid state UV/Vis/NIR spectrum of the H_3TTPA ligand over the range 5000-35000 cm^{-1} and (b) UV/Vis/NIR spectra in the solid state of the H_3TTPA ligand, **1** and **2** from 5000-40000 cm^{-1}.

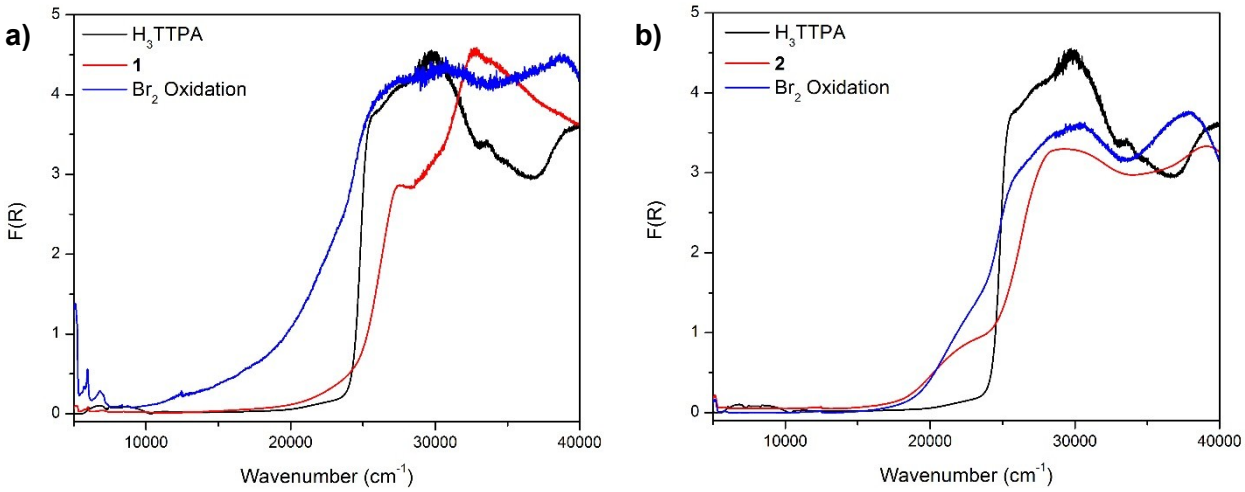


Figure S11. Solid state UV/Vis/NIR spectra of (a) **1** and (b) **2** and the spectra obtained by oxidation using bromine.

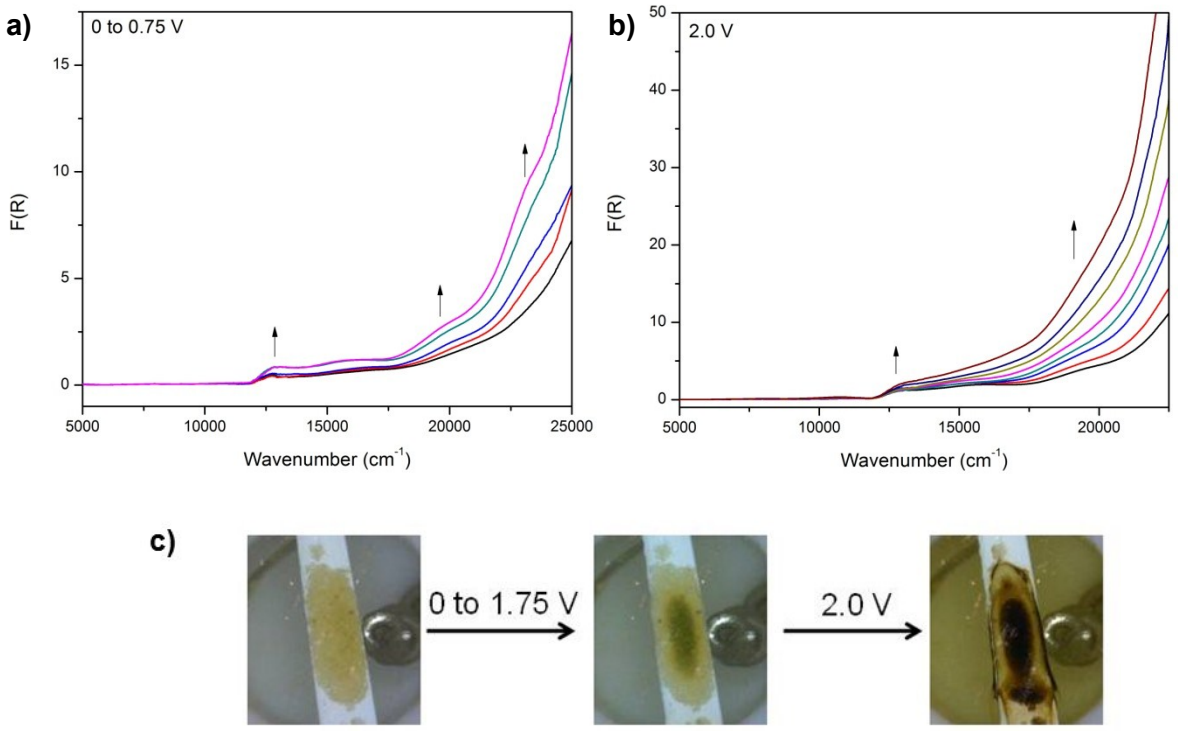


Figure S12. *In situ* solid state spectroelectrochemical experiment on **2** in $[(n\text{-}C_4H_9)_4N]PF_6/CH_3CN$ over the scan range of 5000-25000 cm^{-1} where a) the potential was increased from 0-1.75 V, b) the potential was held at 2.0 V and c) photos of the framework during the experiment.

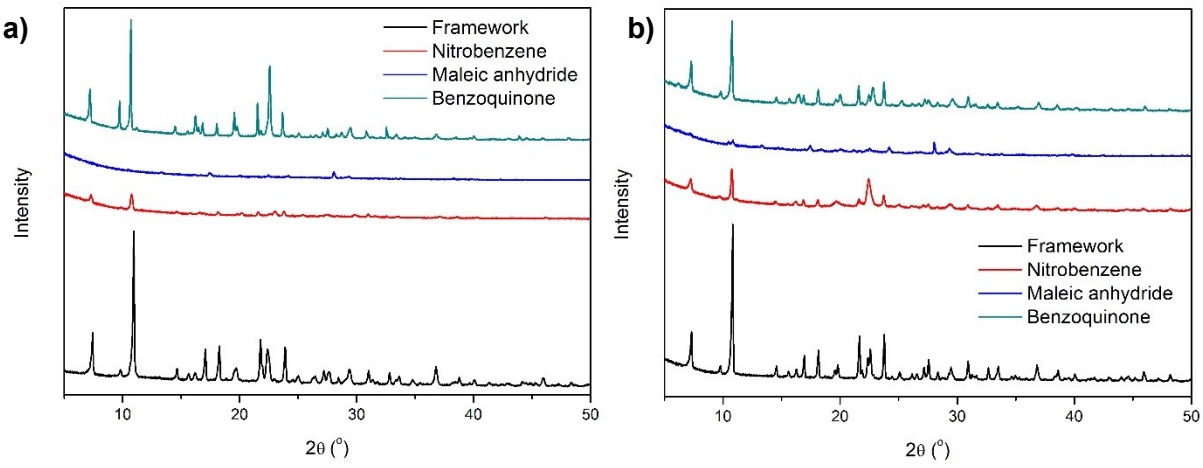


Figure S13. PXRD of (a) **1** and (b) **2** upon infiltration with nitrobenzene, maleic anhydride and benzoquinone electron acceptor guests.

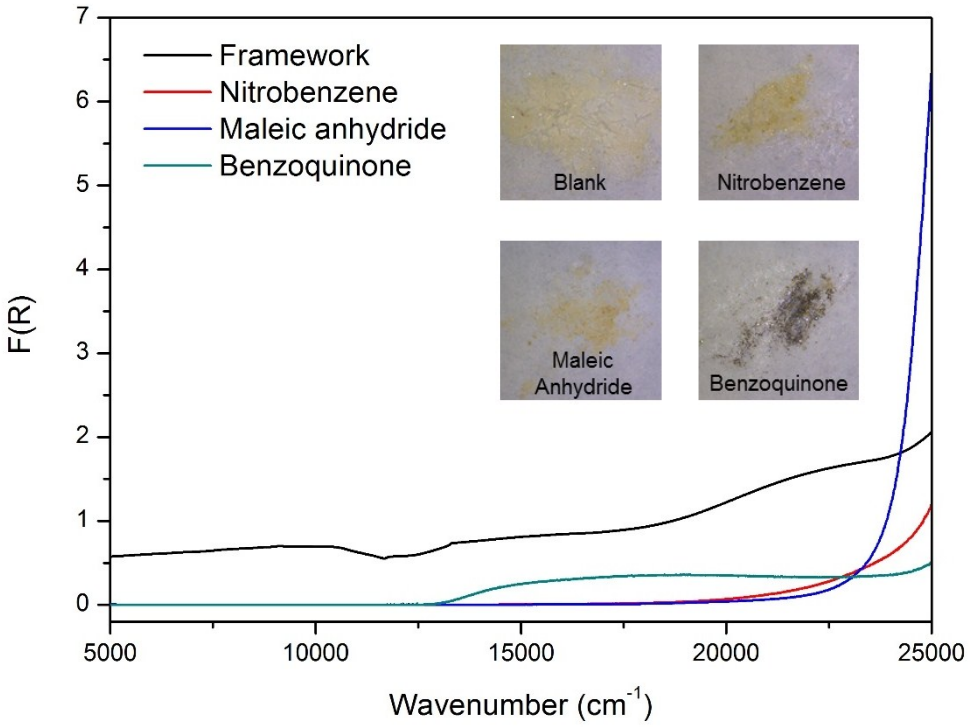


Figure S14. Vis/NIR spectra of **1** and upon infiltration with nitrobenzene, maleic anhydride and benzoquinone electron acceptor guests.

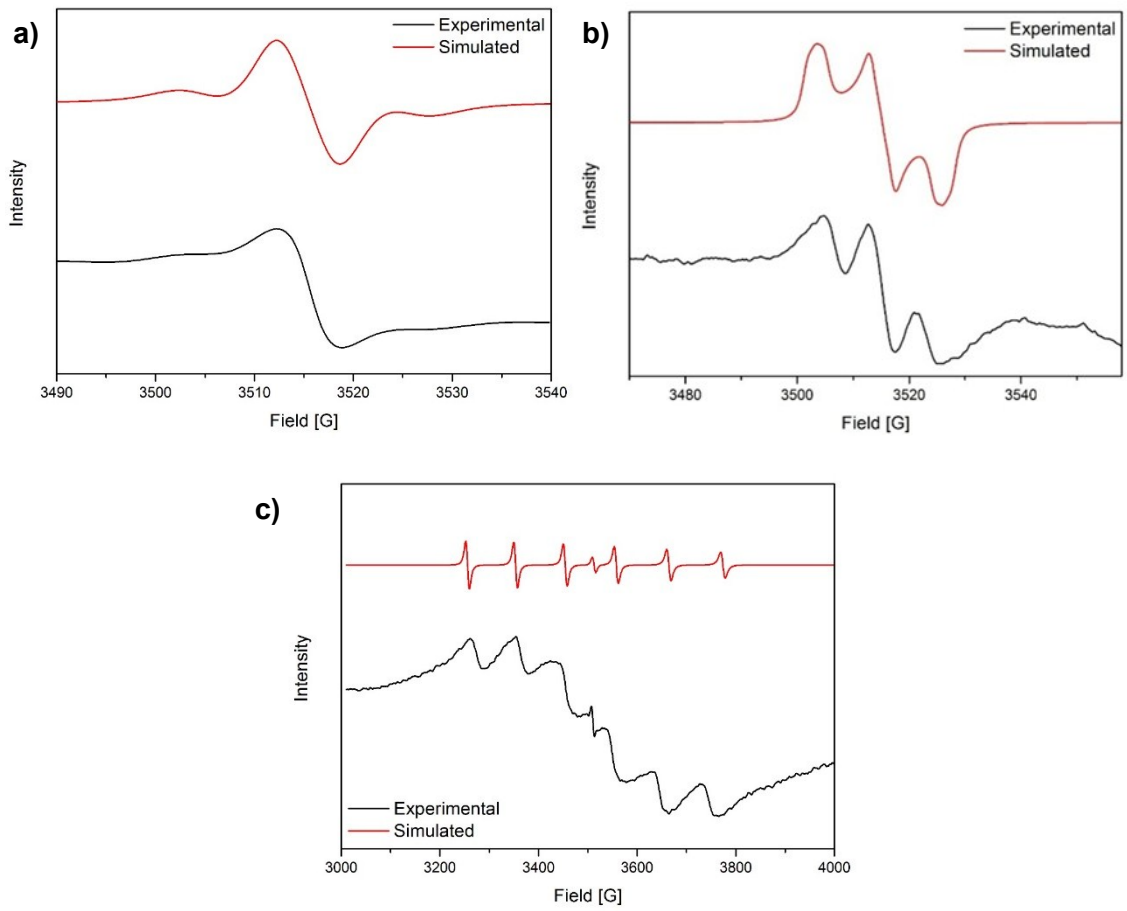


Figure S15. EPR spectra (X-band) of (a) **1** and (b) **2** during the spectroelectrochemical experiment in $[(n\text{-}C_4H_9)_4N]PF_6/CH_2Cl_2$ showing the EPR signal of the radical cation and c) of the Mn^{2+} signal of **1** against the experimentally obtained spectrum at 1.8 V. Parameters for the simulated spectrum are shown in Table S3.

Table S3. EPR parameters used for simulated spectra.

Compound	Solvent	Nucleus	*g*-factor	A_{iso} (MHz)	Reference
H_3TTPA	CH_2Cl_2	Nitrogen	2.0068	11.5	Figure 5
$[\{Mn_3(TTPA)(MeOH)_3\}Cl_3]_n$ (**1**)	CH_2Cl_2	Nitrogen	2.005	2.8	Figure S15
$[\{Mn_3(TTPA)(MeOH)_3\}Cl_3]_n$ (**1**)	CH_2Cl_2	Manganese	2.001	291	Figure S15
$[\{Mn_3(TTPA)(DMF)_3\}(NO_3)_3]_n$ (**2**)	CH_2Cl_2	Nitrogen	2.001	4.2	Figure S18
$[\{Mn_3(TTPA)(DMF)_3\}(NO_3)_3]_n$ (**2**)	CH_2Cl_2	Manganese	2.001	280	Figure S18

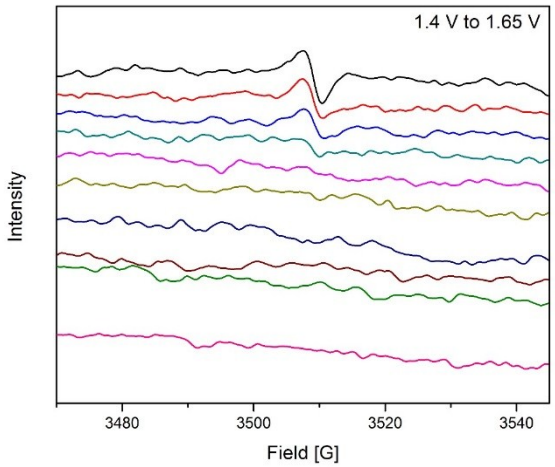


Figure S16. EPR spectra of **1** during the spectroelectrochemical experiment in $[(n\text{-}C_4H_9)_4N]PF_6/CH_2Cl_2$ where the potential was increased from 1.4 to 1.65 V.

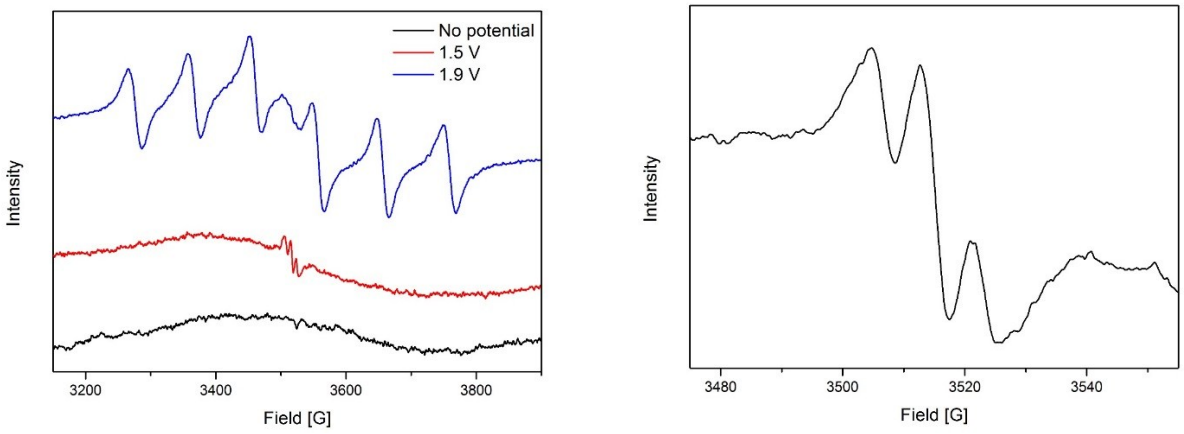


Figure S17. EPR spectra of **2** during the spectroelectrochemical experiment in $[(n\text{-}C_4H_9)_4N]PF_6/CH_2Cl_2$ where a) over the full spectral range the potential was increased from 0 to 1.9 V and b) radical cation.

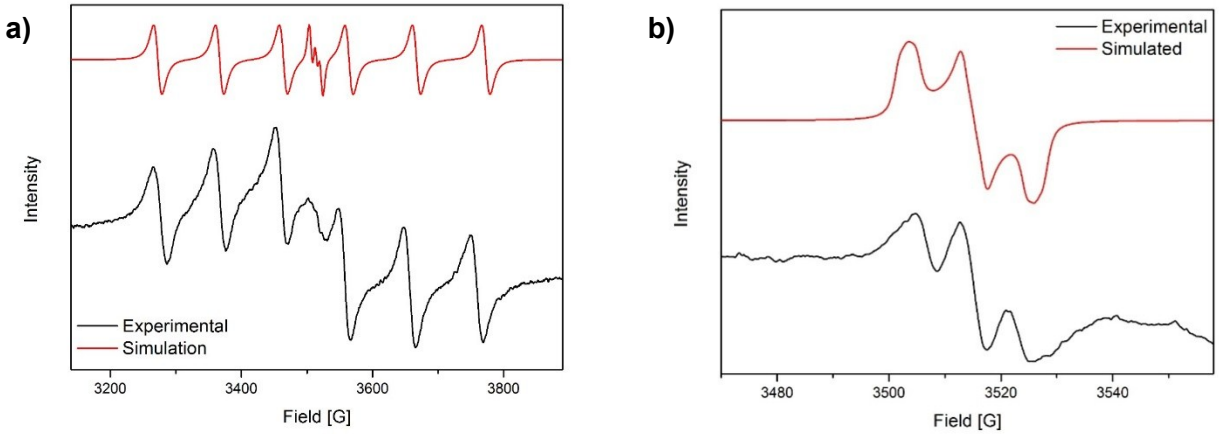


Figure S18. Simulated vs. experimental EPR spectra of **2** during the spectroelectrochemical experiment in $[(n\text{-}C_4H_9)_4N]PF_6/CH_2Cl_2$ b) at 1.9 V over the full spectral strange and d) close up spectrum of the radical. Parameters for the simulated spectrum are shown in Table S3.

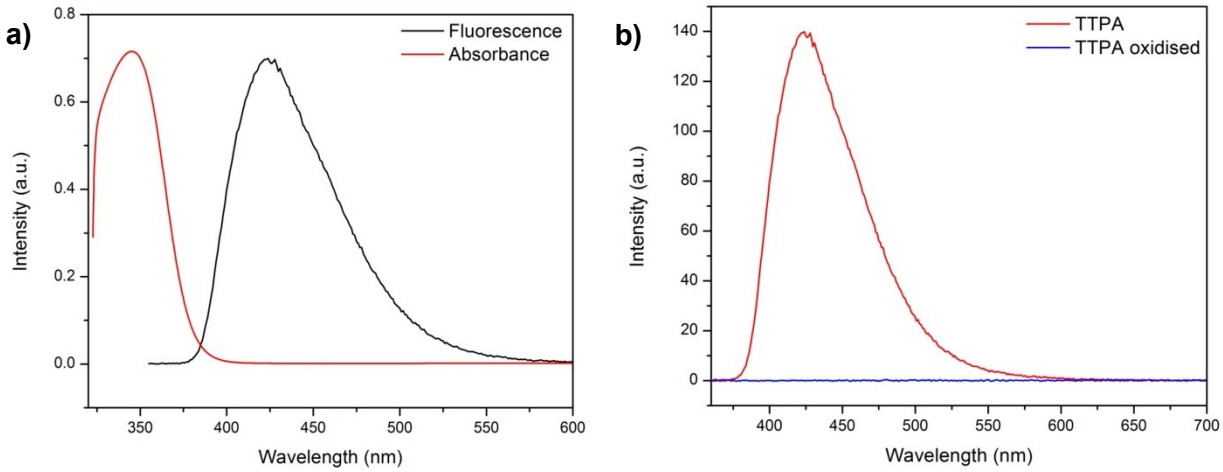


Figure S19. Fluorescence spectrum of (a) the H_3TTPA ligand as a solution in acetonitrile where λ_{ex} = 345 nm (28986 cm^{-1}) and (b) a comparison of the H_3TTPA ligand against the oxidised TTPA ligand with $NOPF_6$ in acetonitrile.

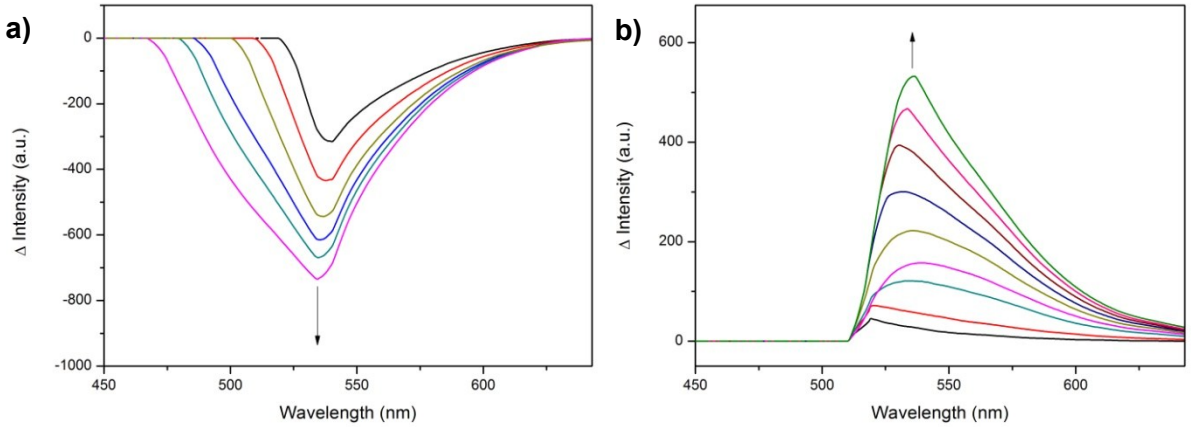
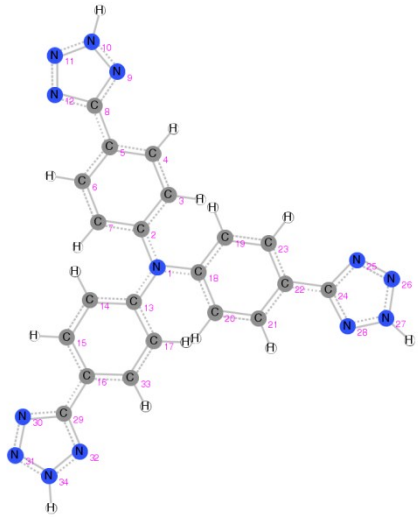
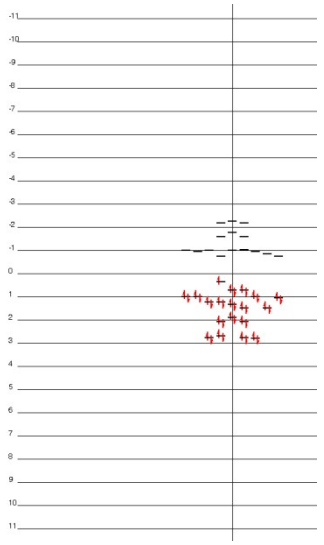


Figure S20. Spectroelectrochemical fluorescence spectrum of H_3TTPA as the potential was (a) increased from 0 to 1.5 V, (b) decreased from 1.5 to 0 V in $[(n\text{-}C_4H_9)_4N]PF_6/CH_3CN$ electrolyte.

Hückel Calculations Output: N(Ph-tetrazole)$_3$





ψtot
Structure type : delocalized structure
Number of atoms : 49
Number of Hückel atoms : 34
Number of π electrons : 37
Total charge : 1

1- Hamiltonian :

	1 N2	2 C	3 C	4 C	5 C	6 C									7 C	8 C	9 N1	10 N2	11 N1	12
N1	13 C	14 C	15 C	16 C	17 C	18 C									19 C	20 C	21 C	22 C	23 C	24
C	25 N1	26 N1	27 N2	28 N1	29 C	30								N1	31 N1	32 N1	33 C	34 N2		
1 N2	α + 1.37β	0.89β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.89β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.89β	0.00β	0.00β	
	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β							
2 C	0.89β	α + 0.00β	1.00β	0.00β	0.00β	0.00β	1.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	
	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β							
3 C	0.00β	1.00β	α + 0.00β	1.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	
	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β							
4 C	0.00β	0.00β	1.00β	α + 0.00β	1.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	
	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β							
5 C	0.00β	0.00β	0.00β	1.00β	α + 0.00β	1.00β	0.00β	1.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	
	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β							
6 C	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	1.00β	α + 0.00β	1.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	
	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β							
7 C	0.00β	1.00β	0.00β	0.00β	0.00β	1.00β	α + 0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	
	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β							
8 C	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	1.00β	0.00β	0.00β	α + 0.00β	1.02β	0.00β	0.00β	1.02β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	
	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β							
9 N1	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	1.02β	α + 0.51β	0.99β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	
	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β							
10 N2	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.99β	α + 1.37β	0.99β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	
	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β							
11 N1	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.99β	α + 0.51β	1.09β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	
	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β							
12 N1	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	1.02β	0.00β	0.00β	1.09β	α + 0.51β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	
	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β							
13 C	0.89β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	α + 0.00β	1.00β	0.00β	0.00β	1.00β	0.00β	0.00β	
	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β							
14 C	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	1.00β	α + 0.00β	1.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	
	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β							
15 C	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	1.00β	α + 0.00β	1.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	
	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β							
16 C	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	1.00β	α + 0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	
	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	1.00β	0.00β	0.00β	0.00β	1.00β	0.00β						
17 C	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	1.00β	0.00β	0.00β	α + 0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	
	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	1.00β	0.00β						
18 C	0.89β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	α + 0.00β	1.00β	1.00β	
	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β						

19 C	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	1.00β	α + 0.00β	0.00β	
	0.00β	0.00β	1.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β							
20 C	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	1.00β	0.00β	α + 0.00β	
	1.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β							
21 C	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	1.00β	α +
0.00β	1.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β								
22 C	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	
	1.00β	α + 0.00β	1.00β	1.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β							
23 C	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	1.00β	0.00β	
	0.00β	1.00β	α + 0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β							
24 C	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	
	0.00β	1.00β	0.00β	α + 0.00β	1.02β	0.00β	0.00β	1.02β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β							
25 N1	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	
	0.00β	0.00β	0.00β	1.02β	α + 0.51β	1.09β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β							
26 N1	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	
	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	1.09β	α + 0.51β	0.99β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β							
27 N2	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	
	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.99β	α + 1.37β	0.99β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β							
28 N1	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	
	0.00β	0.00β	0.00β	1.02β	0.00β	0.00β	0.99β	α + 0.51β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β							
29 C	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	1.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	
	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	α + 0.00β	1.02β	0.00β	1.02β	0.00β	0.00β							
30 N1	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	
	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	1.02β	α + 0.51β	1.09β	0.00β	0.00β	0.00β							
31 N1	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	
	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	1.09β	α + 0.51β	0.00β	0.00β	0.99β							
32 N1	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	
	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	1.02β	0.00β	0.00β	α + 0.51β	0.00β	0.99β							
33 C	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	1.00β	1.00β	0.00β	0.00β	0.00β	
	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	α + 0.00β	0.00β							
34 N2	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	
	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.99β	0.99β	0.00β	α + 1.37β							

2- Orbitals :

εi :	α + 2.79β	α + 2.79β	α + 2.79β	α + 2.69β	α + 2.09β	α + 2.09β	α + 1.91β	α + 1.48β	α + 1.48β	α + 1.34β	α + 1.25β	α + 1.25β	α + 1.06β	α + 1.00β	α + 1.00β	α + 1.00β	α + 0.73β	α + 0.73β	α + 0.37β	α - 0.75β	α -
0.75β	α - 0.84β	α - 0.94β	α - 0.94β	α - 1.00β	α - 1.00β	α - 1.00β	α - 1.03β	α - 1.57β	α - 1.57β	α - 1.76β	α - 2.19β	α - 2.19β	α - 2.26β								
ni :	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	1	0	0
	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0								
1 N2	-0.21	-0.00	-0.00	-0.65	-0.00	0.00	-0.30	-0.00	-0.00	0.16	-0.00	-0.00	0.29	0.00	0.00	-0.00	0.00	0.00	0.44	0.00	
	0.00	0.13	0.00	-0.00	0.00	0.00	0.00	0.20	0.00	0.00	-0.25	0.00	-0.00	-0.18							
2 C	-0.11	0.02	-0.01	-0.32	0.24	-0.11	-0.06	-0.32	-0.05	-0.00	0.19	-0.11	-0.03	0.00	0.00	-0.00	-0.31	-0.13	-0.16	0.28	-
0.16	-0.11	0.18	-0.10	-0.00	-0.00	-0.00	-0.18	-0.17	0.33	0.29	0.11	-0.19	0.24								
3 C	-0.06	0.03	-0.02	-0.14	0.25	-0.11	0.08	-0.24	-0.04	-0.07	0.12	-0.07	-0.14	0.33	-0.19	0.32	-0.11	-0.05	-0.23	-0.10	
	0.06	-0.01	-0.08	0.05	0.15	0.39	-0.27	0.00	0.13	-0.26	-0.15	-0.12	0.21	-0.20							
4 C	-0.06	0.06	-0.03	-0.06	0.29	-0.13	0.21	-0.03	-0.00	-0.09	-0.04	0.02	-0.12	0.33	-0.19	0.32	0.23	0.09	0.08	-0.20	
	0.12	0.12	-0.10	0.06	-0.15	-0.39	0.27	0.18	-0.04	0.08	-0.03	0.15	-0.26	0.20							
5 C	-0.11	0.13	-0.07	-0.03	0.35	-0.16	0.32	0.19	0.03	-0.06	-0.17	0.10	0.02	-0.00	-0.00	0.00	0.28	0.12	0.26	0.25	-
0.15	-0.09	0.18	-0.10	-0.00	-0.00	-0.00	-0.18	-0.07	0.14	0.21	-0.21	0.37	-0.25								
6 C	-0.06	0.06	-0.03	-0.06	0.29	-0.13	0.21	-0.03	-0.00	-0.09	-0.04	0.02	-0.12	-0.33	0.19	-0.32	0.23	0.09	0.08	-0.20	
	0.12	0.12	-0.10	0.06	0.15	0.39	-0.27	0.18	-0.04	0.08	-0.03	0.15	-0.26	0.20							
7 C	-0.06	0.03	-0.02	-0.14	0.25	-0.11	0.08	-0.24	-0.04	-0.07	0.12	-0.07	-0.14	-0.33	0.19	-0.32	-0.11	-0.05	-0.23	-0.10	
	0.06	-0.01	-0.08	0.05	-0.15	-0.39	0.27	0.00	0.13	-0.26	-0.15	-0.12	0.21	-0.20							
8 C	-0.19	0.25	-0.14	0.05	0.16	-0.07	0.19	0.34	0.05	0.12	-0.13	0.07	0.26	0.00	0.00	0.00	-0.25	-0.10	-0.07	0.21	-
0.12	-0.16	0.03	-0.02	-0.00	-0.00	-0.00	-0.16	0.19	-0.37	-0.30	0.16	-0.28	0.18								
9 N1	-0.22	0.29	-0.17	0.09	-0.03	0.02	-0.01	-0.04	-0.01	-0.18	-0.34	0.20	0.29	0.00	0.00	-0.00	-0.33	-0.14	-0.18	-0.36	
	0.21	0.32	0.15	-0.09	-0.00	0.00	0.00	0.05	-0.10	0.20	0.14	-0.06	0.11	-0.07							

10 N2	-0.32	0.42	-0.24	0.14	-0.22	0.10	-0.21	-0.39	-0.06	-0.27	-0.12	0.07	-0.10	-0.00	-0.00	-0.00	0.19	0.08	0.10	0.24	-
0.14	-0.26	-0.25	0.15	0.00	0.00	-0.00	0.09	0.01	-0.03	-0.02	0.01	-0.02	0.01								
11 N1	-0.23	0.30	-0.17	0.10	-0.12	0.06	-0.11	-0.00	-0.00	0.18	0.36	-0.21	-0.26	-0.00	0.00	0.00	0.21	0.09	0.08	-0.15	
	0.08	0.27	0.44	-0.25	-0.00	-0.00	-0.00	-0.27	0.06	-0.11	-0.07	0.02	-0.04	0.03							
12 N1	-0.20	0.26	-0.15	0.07	0.02	-0.01	0.06	0.36	0.06	0.38	0.35	-0.21	-0.04	0.00	0.00	0.00	-0.13	-0.05	-0.10	-0.05	
	0.03	-0.10	-0.35	0.20	0.00	0.00	0.00	0.29	-0.13	0.24	0.17	-0.07	0.12	-0.08							
13 C	-0.11	-0.00	0.02	-0.32	-0.03	0.26	-0.06	0.12	0.30	-0.00	0.00	0.22	-0.03	-0.00	-0.00	0.00	0.04	0.33	-0.16	0.00	
	0.32	-0.11	0.00	0.21	-0.00	-0.00	-0.00	-0.18	0.37	-0.02	0.29	-0.22	0.00	0.24							
14 C	-0.06	-0.00	0.03	-0.14	-0.03	0.27	0.08	0.09	0.22	-0.07	0.00	0.14	-0.14	-0.24	-0.44	-0.01	0.02	0.12	-0.23	-0.00	-
0.12	-0.01	-0.00	-0.10	0.09	-0.30	-0.39	0.00	-0.29	0.01	-0.15	0.24	-0.00	-0.20								
15 C	-0.06	-0.00	0.06	-0.06	-0.03	0.31	0.21	0.01	0.03	-0.09	-0.00	-0.05	-0.12	-0.24	-0.44	-0.01	-0.03	-0.24	0.08	-0.00	-
0.23	0.12	-0.00	-0.12	-0.09	0.30	0.39	0.18	0.09	-0.00	-0.03	-0.30	0.00	0.20								
16 C	-0.11	-0.00	0.15	-0.03	-0.04	0.38	0.32	-0.07	-0.18	-0.06	-0.00	-0.20	0.02	0.00	0.00	-0.00	-0.04	-0.30	0.26	0.00	
	0.29	-0.09	0.00	0.21	-0.00	-0.00	-0.00	-0.18	0.16	-0.01	0.21	0.42	-0.01	-0.25							
17 C	-0.06	-0.00	0.03	-0.14	-0.03	0.27	0.08	0.09	0.22	-0.07	0.00	0.14	-0.14	0.24	0.44	0.01	0.02	0.12	-0.23	-0.00	-
0.12	-0.01	-0.00	-0.10	-0.09	0.30	0.39	0.00	-0.29	0.01	-0.15	0.24	-0.00	-0.20								
18 C	-0.11	-0.02	-0.01	-0.32	-0.21	-0.15	-0.06	0.20	-0.25	-0.00	-0.19	-0.11	-0.03	-0.00	-0.00	0.00	0.27	-0.20	-0.16	-0.28	-
0.16	-0.11	-0.18	-0.10	-0.00	-0.00	-0.00	-0.18	-0.20	-0.31	0.29	0.11	0.19	0.24								
19 C	-0.06	-0.03	-0.02	-0.14	-0.22	-0.16	0.08	0.15	-0.19	-0.07	-0.12	-0.07	-0.14	-0.29	0.14	0.38	0.10	-0.07	-0.23	0.10	
	0.06	-0.01	0.08	0.05	-0.47	0.07	-0.16	0.00	0.16	0.25	-0.15	-0.12	-0.20	-0.20							
20 C	-0.06	-0.03	-0.02	-0.14	-0.22	-0.16	0.08	0.15	-0.19	-0.07	-0.12	-0.07	-0.14	0.29	-0.14	-0.38	0.10	-0.07	-0.23	0.10	
	0.06	-0.01	0.08	0.05	0.47	-0.07	0.16	0.00	0.16	0.25	-0.15	-0.12	-0.20	-0.20							
21 C	-0.06	-0.06	-0.03	-0.06	-0.25	-0.18	0.21	0.02	-0.02	-0.09	0.04	0.02	-0.12	0.29	-0.14	-0.38	-0.20	0.15	0.08	0.20	
	0.12	0.12	0.10	0.06	-0.47	0.07	-0.16	0.18	-0.05	-0.07	-0.03	0.16	0.26	0.20							
22 C	-0.11	-0.13	-0.07	-0.03	-0.31	-0.22	0.32	-0.12	0.15	-0.06	0.17	0.10	0.02	0.00	0.00	-0.00	-0.24	0.18	0.26	-0.25	-
0.15	-0.09	-0.18	-0.10	-0.00	-0.00	-0.00	-0.18	-0.08	-0.13	0.21	-0.22	-0.36	-0.25								
23 C	-0.06	-0.06	-0.03	-0.06	-0.25	-0.18	0.21	0.02	-0.02	-0.09	0.04	0.02	-0.12	-0.29	0.14	0.38	-0.20	0.15	0.08	0.20	
	0.12	0.12	0.10	0.06	0.47	-0.07	0.16	0.18	-0.05	-0.07	-0.03	0.16	0.26	0.20							
24 C	-0.19	-0.25	-0.14	0.05	-0.14	-0.10	0.19	-0.22	0.27	0.12	0.13	0.07	0.26	0.00	0.00	0.00	0.22	-0.17	-0.07	-0.21	-
0.12	-0.16	-0.03	-0.02	-0.00	-0.00	-0.00	-0.16	0.23	0.35	-0.30	0.16	0.27	0.18								
25 N1	-0.20	-0.25	-0.15	0.07	-0.01	-0.01	0.06	-0.23	0.28	0.38	-0.35	-0.20	-0.04	-0.00	-0.00	-0.00	0.11	-0.08	-0.10	0.05	
	0.03	-0.10	0.35	0.20	0.00	0.00	0.00	0.29	-0.15	-0.23	0.17	-0.07	-0.12	-0.08							
26 N1	-0.23	-0.30	-0.18	0.10	0.11	0.08	-0.11	0.00	-0.00	0.18	-0.36	-0.21	-0.26	-0.00	-0.00	-0.00	-0.18	0.14	0.08	0.15	
	0.08	0.27	-0.44	-0.25	-0.00	-0.00	-0.00	-0.27	0.07	0.11	-0.07	0.03	0.04	0.03							
27 N2	-0.32	-0.41	-0.24	0.14	0.19	0.14	-0.21	0.25	-0.31	-0.27	0.12	0.07	-0.10	0.00	0.00	0.00	-0.16	0.12	0.10	-0.24	-
0.14	-0.26	0.25	0.14	0.00	0.00	0.00	0.09	0.02	0.03	-0.02	0.01	0.02	0.01								
28 N1	-0.22	-0.29	-0.17	0.09	0.03	0.02	-0.01	0.03	-0.03	-0.18	0.34	0.20	0.29	0.00	0.00	0.00	0.28	-0.22	-0.18	0.36	
	0.21	0.32	-0.15	-0.09	0.00	0.00	0.00	0.05	-0.12	-0.19	0.14	-0.07	-0.11	-0.07							
29 C	-0.19	-0.00	0.28	0.05	-0.02	0.17	0.19	-0.12	-0.32	0.12	-0.00	-0.15	0.26	0.00	0.00	-0.00	0.04	0.27	-0.07	0.00	
	0.25	-0.16	0.00	0.04	-0.00	-0.00	-0.00	-0.16	-0.42	0.02	-0.30	-0.32	0.01	0.18							
30 N1	-0.20	-0.00	0.30	0.07	-0.00	0.02	0.06	-0.13	-0.34	0.38	0.00	0.41	-0.04	-0.00	-0.00	0.00	0.02	0.13	-0.10	-0.00	-
0.05	-0.10	-0.00	-0.41	0.00	0.00	0.00	0.29	0.27	-0.01	0.17	0.14	-0.00	-0.08								
31 N1	-0.23	-0.00	0.35	0.10	0.01	-0.14	-0.11	0.00	0.00	0.18	0.00	0.41	-0.26	-0.00	-0.00	0.00	-0.03	-0.22	0.08	-0.00	-
0.17	0.27	0.00	0.51	-0.00	-0.00	-0.00	-0.27	-0.13	0.01	-0.07	-0.05	0.00	0.03								
32 N1	-0.22	-0.00	0.34	0.09	0.00	-0.04	-0.01	0.02	0.04	-0.18	-0.00	-0.40	0.29	0.00	0.00	-0.00	0.05	0.35	-0.18	-0.00	-
0.41	0.32	0.00	0.17	0.00	0.00	0.00	0.05	0.22	-0.01	0.14	0.13	-0.00	-0.07								
33 C	-0.06	-0.00	0.06	-0.06	-0.03	0.31	0.21	0.01	0.03	-0.09	-0.00	-0.05	-0.12	0.24	0.44	0.01	-0.03	-0.24	0.08	-0.00	-
0.23	0.12	-0.00	-0.12	0.09	-0.30	-0.39	0.18	0.09	-0.00	-0.03	-0.30	0.00	0.20								
34 N2	-0.32	-0.00	0.48	0.14	0.02	-0.24	-0.21	0.14	0.37	-0.27	-0.00	-0.14	-0.10	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.20	0.10	0.00	
	0.27	-0.26	-0.00	-0.29	0.00	-0.00	0.00	0.09	-0.03	0.00	-0.02	-0.02	0.00	0.01							

Total energy : 37α + 59.32β

3- Electronic density matrix : electron densities on and between the atoms (the density non bonded atoms is ill-defined) :

	1 N2	2 C	3 C	4 C	5 C	6 C	7 C	8 C	9 N1	10 N2	11 N1	12 N1	13 C	14 C	15 C	16 C	17 C	18 C	19 C	20 C	21
C	22 C	23 C	24 C	25 N1	26 N1	27 N2	28 N1	29 C	30 N1	31 N1	32 N1	33 C	34 N2								

1	N2	1.51	0.40	-0.04	-0.08	-0.01	-0.08	-0.04	0.05	0.02	-0.02	-0.02	0.01	0.40	-0.04	-0.08	-0.01	-0.04	0.40	-0.04	-0.04	-
0.08		-0.01	-0.08	0.05	0.01	-0.02	-0.02	0.02	0.05	0.01	-0.02	0.02	-0.08	-0.02								
2	C	0.40	0.93	0.58	0.02	-0.24	0.02	0.58	-0.02	0.10	-0.04	-0.02	0.07	-0.07	-0.08	0.02	0.06	-0.08	-0.07	-0.08	-0.08	
		0.02	0.06	0.02	-0.02	-0.02	0.02	0.02	-0.04	-0.02	-0.02	0.02	-0.04	0.02	0.02							
3	C	-0.04	0.58	1.00	0.71	0.02	-0.29	-0.00	-0.06	-0.02	0.01	0.02	-0.01	-0.08	-0.00	0.03	0.02	-0.00	-0.08	-0.00	-0.00	
		0.03	0.02	0.03	-0.02	-0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.02	-0.01	0.01	-0.02	0.03	0.01							
4	C	-0.08	0.02	0.71	0.99	0.59	-0.01	-0.29	0.01	-0.15	0.07	0.04	-0.11	0.02	0.03	-0.01	-0.03	0.03	0.02	0.03	0.03	-
0.01		-0.03	-0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.02	0.01	0.01	-0.01	0.02	-0.01	-0.01								
5	C	-0.01	-0.24	0.02	0.59	0.97	0.59	0.02	0.38	0.02	-0.03	-0.06	0.00	0.06	0.02	-0.03	-0.03	0.02	0.06	0.02	0.02	-
0.03		-0.03	-0.03	0.02	0.01	-0.02	-0.02	0.03	0.02	0.01	-0.02	0.03	-0.03	-0.02								
6	C	-0.08	0.02	-0.29	-0.01	0.59	0.99	0.71	0.01	-0.15	0.07	0.04	-0.11	0.02	0.03	-0.01	-0.03	0.03	0.02	0.03	0.03	-
0.01		-0.03	-0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.02	0.01	0.01	-0.01	0.02	-0.01	-0.01								
7	C	-0.04	0.58	-0.00	-0.29	0.02	0.71	1.00	-0.06	-0.02	0.01	0.02	-0.01	-0.08	-0.00	0.03	0.02	-0.00	-0.08	-0.00	-0.00	
		0.03	0.02	0.03	-0.02	-0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.02	-0.01	0.01	-0.02	0.03	0.01							
8	C	0.05	-0.02	-0.06	0.01	0.38	0.01	-0.06	0.97	0.67	-0.22	-0.14	0.56	-0.02	-0.02	0.01	0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	
		0.01	0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.01	0.01							
9	N1	0.02	0.10	-0.02	-0.15	0.02	-0.15	-0.02	0.67	1.18	0.53	-0.35	-0.10	-0.04	-0.02	0.02	0.03	-0.02	-0.04	-0.02	-0.02	
		0.02	0.03	0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.01	-0.01	0.01	-0.02	0.02	0.01							
10	N2	-0.02	-0.04	0.01	0.07	-0.03	0.07	0.01	-0.22	0.53	1.51	0.56	-0.27	0.02	0.01	-0.01	-0.02	0.01	0.02	0.01	0.01	-
0.01		-0.02	-0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01	-0.01								
11	N1	-0.02	-0.02	0.02	0.04	-0.06	0.04	0.02	-0.14	-0.35	0.56	1.09	0.72	0.02	0.01	-0.01	-0.02	0.01	0.02	0.01	0.01	-
0.01		-0.02	-0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01	-0.01								
12	N1	0.01	0.07	-0.01	-0.11	0.00	-0.11	-0.01	0.56	-0.10	-0.27	0.72	1.20	-0.02	-0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	
		0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.01	0.01							
13	C	0.40	-0.07	-0.08	0.02	0.06	0.02	-0.08	-0.02	-0.04	0.02	0.02	-0.02	0.93	0.58	0.02	-0.24	0.58	-0.07	-0.08	-0.08	
		0.02	0.06	0.02	-0.02	-0.02	0.02	0.02	-0.04	-0.02	0.07	-0.02	0.10	0.02	-0.04							
14	C	-0.04	-0.08	-0.00	0.03	0.02	0.03	-0.00	-0.02	-0.02	0.01	0.01	-0.01	0.58	1.00	0.71	0.02	-0.00	-0.08	-0.00	-0.00	
		0.03	0.02	0.03	-0.02	-0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.06	-0.01	0.02	-0.02	-0.29	0.01							
15	C	-0.08	0.02	0.03	-0.01	-0.03	-0.01	0.03	0.01	0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.02	0.71	0.99	0.59	-0.29	0.02	0.03	0.03	-
0.01		-0.03	-0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.02	0.01	-0.11	0.04	-0.15	-0.01	0.07								
16	C	-0.01	0.06	0.02	-0.03	-0.03	-0.03	0.02	0.02	0.03	-0.02	-0.02	0.01	-0.24	0.02	0.59	0.97	0.02	0.06	0.02	0.02	-
0.03		-0.03	-0.03	0.02	0.01	-0.02	-0.02	0.03	0.38	0.00	-0.06	0.02	0.59	-0.03								
17	C	-0.04	-0.08	-0.00	0.03	0.02	0.03	-0.00	-0.02	-0.02	0.01	0.01	-0.01	0.58	-0.00	-0.29	0.02	1.00	-0.08	-0.00	-0.00	
		0.03	0.02	0.03	-0.02	-0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.06	-0.01	0.02	-0.02	0.71	0.01							
18	C	0.40	-0.07	-0.08	0.02	0.06	0.02	-0.08	-0.02	-0.04	0.02	0.02	-0.02	-0.07	-0.08	0.02	0.06	-0.08	0.93	0.58	0.58	
		0.02	-0.24	0.02	-0.02	0.07	-0.02	-0.04	0.10	-0.02	-0.02	0.02	-0.04	0.02	0.02							
19	C	-0.04	-0.08	-0.00	0.03	0.02	0.03	-0.00	-0.02	-0.02	0.01	0.01	-0.01	-0.08	-0.00	0.03	0.02	-0.00	0.58	1.00	-0.00	-
0.29		0.02	0.71	-0.06	-0.01	0.02	0.01	-0.02	-0.02	-0.01	0.01	-0.02	0.03	0.01								
20	C	-0.04	-0.08	-0.00	0.03	0.02	0.03	-0.00	-0.02	-0.02	0.01	0.01	-0.01	-0.08	-0.00	0.03	0.02	-0.00	0.58	-0.00	1.00	
		0.71	0.02	-0.29	-0.06	-0.01	0.02	0.01	-0.02	-0.02	-0.01	0.01	-0.02	0.03	0.01							
21	C	-0.08	0.02	0.03	-0.01	-0.03	-0.01	0.03	0.01	0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.02	0.03	-0.01	-0.03	0.03	0.02	-0.29	0.71	
		0.99	0.59	-0.01	0.01	-0.11	0.04	0.07	-0.15	0.01	0.01	-0.01	0.02	-0.01	-0.01							
22	C	-0.01	0.06	0.02	-0.03	-0.03	-0.03	0.02	0.02	0.03	-0.02	-0.02	0.01	0.06	0.02	-0.03	-0.03	0.02	-0.24	0.02	0.02	
		0.59	0.97	0.59	0.38	0.00	-0.06	-0.03	0.02	0.02	0.01	-0.02	0.03	-0.03	-0.02							
23	C	-0.08	0.02	0.03	-0.01	-0.03	-0.01	0.03	0.01	0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.02	0.03	-0.01	-0.03	0.03	0.02	0.71	-0.29	-
0.01		0.59	0.99	0.01	-0.11	0.04	0.07	-0.15	0.01	0.01	-0.01	0.02	-0.01	-0.01								
24	C	0.05	-0.02	-0.02	0.01	0.02	0.01	-0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.02	-0.02	0.01	0.02	-0.02	-0.02	-0.06	-0.06	
		0.01	0.38	0.01	0.97	0.56	-0.14	-0.22	0.67	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.01	0.01							
25	N1	0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.07	-0.01	-0.01	-
0.11		0.00	-0.11	0.56	1.20	0.72	-0.27	-0.10	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.01	0.01								
26	N1	-0.02	0.02	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.02	0.01	-0.01	-0.02	0.01	-0.02	0.02	0.02	
		0.04	-0.06	0.04	-0.14	0.72	1.09	0.56	-0.35	0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01	-0.01							
27	N2	-0.02	0.02	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.02	0.01	-0.01	-0.02	0.01	-0.04	0.01	0.01	
		0.07	-0.03	0.07	-0.22	-0.27	0.56	1.51	0.53	0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01	-0.01							
28	N1	0.02	-0.04	-0.02	0.02	0.03	0.02	-0.02	-0.01	-0.02	0.01	0.01	-0.01	-0.04	-0.02	0.02	0.03	-0.02	0.10	-0.02	-0.02	-
0.15		0.02	-0.15	0.67	-0.10	-0.35	0.53	1.18	-0.01	-0.01	0.01	-0.02	0.02	0.01								

29 C	0.05	-0.02	-0.02	0.01	0.02	0.01	-0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.02	-0.06	0.01	0.38	-0.06	-0.02	-0.02	-0.02
	0.01	0.02	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.97	0.56	-0.14	0.67	0.01	-0.22						
30 N1	0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.07	-0.01	-0.11	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01
	0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.01	0.56	1.20	0.72	-0.10	-0.11	-0.27						
31 N1	-0.02	0.02	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.02	0.02	0.04	-0.06	0.02	0.02	0.01	0.01
0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.14	0.72	1.09	-0.35	0.04	0.56							
32 N1	0.02	-0.04	-0.02	0.02	0.03	0.02	-0.02	-0.01	-0.02	0.01	0.01	-0.01	0.10	-0.02	-0.15	0.02	-0.02	-0.04	-0.02	-0.02
	0.02	0.03	0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.01	-0.02	0.67	-0.10	-0.35	1.18	-0.15	0.53						
33 C	-0.08	0.02	0.03	-0.01	-0.03	-0.01	0.03	0.01	0.02	-0.01	-0.01	0.01	0.02	-0.29	-0.01	0.59	0.71	0.02	0.03	0.03
0.01	-0.03	-0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.02	0.01	-0.11	0.04	-0.15	0.99	0.07							
34 N2	-0.02	0.02	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.04	0.01	0.07	-0.03	0.01	0.02	0.01	0.01
0.01	-0.02	-0.01	0.01	0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.22	-0.27	0.56	0.53	0.07	1.51							

4- Atomic charges :

Atom	Charge :
1 N2	0.49
2 C	0.07
3 C	0.00
4 C	0.01
5 C	0.03
6 C	0.01
7 C	0.00
8 C	0.03
9 N1	-0.18
10 N2	0.49
11 N1	-0.09
12 N1	-0.20
13 C	0.07
14 C	0.00
15 C	0.01
16 C	0.03
17 C	0.00
18 C	0.07
19 C	0.00
20 C	0.00
21 C	0.01
22 C	0.03
23 C	0.01
24 C	0.03
25 N1	-0.20
26 N1	-0.09
27 N2	0.49
28 N1	-0.18
29 C	0.03
30 N1	-0.20
31 N1	-0.09
32 N1	-0.18
33 C	0.01
34 N2	0.49

Total charge : 1.00