### **Supporting Information**

## Redox State Manipulation of a Tris(*p*-tetrazolylphenyl)amine Ligand and its Mn<sup>2+</sup> Coordination Frameworks

Carol Hua,<sup>a</sup> Jing-Yuan Ge,<sup>b</sup> Floriana Tuna,<sup>b</sup> David Collison,<sup>b</sup> Jing-Lin Zuo<sup>b</sup> and Deanna M. D'Alessandro<sup>a</sup>\*

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: <u>deanna.dalessandro@sydney.edu.au</u>

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%). <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 200 MHz): 7.61 (d,  ${}^{3}J_{\text{Ha-Hb}} = 8.4$  Hz, 6H, **H**<sub>a</sub>), 7.16 (d,  ${}^{3}J_{\text{Ha-Hb}} = 8.4$  Hz, 6H, **H**<sub>b</sub>) ppm.

# **Crystallographic Tables**

 Table S1. Crystal data for 1.

Parameter	
Formula	$C_{48}H_{48}Mn_{3}N_{26}O_{6}$
M/g mol <sup>-1</sup>	1177.71
Temperature (K)	150(2)
Crystal system	trigonal
Crystal size (mm <sup>3</sup> )	$0.120\times0.085\times0.050$
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 <sup>3</sup> )	10743.6(18)
Z	6
$\rho_{calc} (mg mm^{-3})$	1.092
λ(ΜοΚα)	0.71073 Å
μ(ΜοΚα)	0.574 mm <sup>-1</sup>
$2 heta_{ m max}$ (°)	65.28
T(CRYSALISPRO) <sub>min, max</sub>	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 <sup>2</sup>	1.055
Residual Extrema	-0.663, 3.345 e <sup>-</sup> Å <sup>-3</sup>

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

Parameter	
Formula	$C_{60}H_{66}Mn_{3}N_{32}O_{6}$
M/g mol <sup>-1</sup>	1496.26
Temperature (K)	150(2)
Crystal system	Trigonal
Crystal size (mm <sup>3</sup> )	$0.160\times0.105\times0.050$
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 <sup>3</sup> )	11044(2)
Ζ	6
$\rho_{calc} (mg mm^{-3})$	1.350
λ(ΜοΚα)	0.71073 Å
μ(ΜοΚα)	0.577 mm <sup>-1</sup>
T(CRYSALISPRO) <sub>min, max</sub>	0.93508, 1.00000
$2 heta_{ m max}$	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 <sup>2</sup>	1.051
Residual Extrema	-0.779, 0.849 e <sup>-</sup> Å <sup>-3</sup>

 Table S2. Crystal data for 2.

 $RI = \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 \{w(F_o^2)^2\}^{1/2}, \ wR2 = (\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 \{w(F_o^2)^2\}^{1/2}, \ wR2 = (\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 \{w(F_o^2)^2\}^{1/2}, \ wR2 = (\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 \{w(F_o^2)^2\}^{1/2}, \ wR2 = (\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 \{w(F_o^2)^2\}^{1/2}, \ wR2 = (\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 \{w(F_o^2)^2\}^{1/2}, \ wR2 = (\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 \{w(F_o^2)^2\}^{1/2}, \ wR2 = (\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 \{w(F_o^2)^2\}^{1/2}, \ wR2 = (\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 \{w(F_o^2)^2\}^{1/2}, \ wR2 = (\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 \{w(F_o^2)^2\}^{1/2}, \ wR2 = (\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 \{w(F_o^2)^2\}^{1/2}, \ wR2 = (\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 \{w(F_o^2)^2\}^{1/2}, \ wR2 = (\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)^2) / \Sigma \{w(F_o^2 - F_c^2)^2\}^{1/2}, \ wR2 = (\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)^2) / \Sigma \{w(F_o^2 - F_c^2)^2\}^{1/2}, \ wR2 = (\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)^2) / \Sigma \{w(F_o^2 - F_c^2)^2\}^{1/2}, \ wR2 = (\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)^2) / \Sigma \{w(F_o^2 - F_c^2)^2\}^{1/2}, \ wR2 = (\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)^2) / \Sigma \{w(F_o^2 - F_c^2)^2\}^{1/2}, \ wR2 = (\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)^2) / \Sigma \{w(F_o^2 - F_c^2)^2\}^{1/2}, \ wR2 = (\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)^2) / \Sigma \{w(F_o^2 - F_c^2)^2\}^{1/2}, \ wR2 = (\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)^2) / \Sigma \{w(F_o^2 - F_c^2)^2\}^{1/2}, \ wR2 = (\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)^2) / \Sigma \{w(F_o^2 - F_c^2)^2\}^{1/2}, \ wR2 = (\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)^2) / \Sigma \{w(F_o^2 - F_c^2)^2\}^{1/2}, \ wR2 = (\Sigma w(F_o^2 - F_c^2)^2) / \Sigma \{w(F_o^2 - F_c^2)^2\}^{$ 

Figures



Scheme S1. Synthesis of the tris(*p*-tetrazolylphenyl)amine (H<sub>3</sub>TTPA) 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<sup>-1</sup> 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  $5-50^{\circ}$  20.



**Figure S7.** Solution state electrochemistry of the H<sub>3</sub>TTPA ligand where cyclic voltammogram over the scan rates of (a) 10-100 mV s<sup>-1</sup> and (b) 50-1000 mV s<sup>-1</sup> in  $[(n-C_4H_9)_4N]PF_6/CH_3CN$  electrolyte and (c) square wave in  $[(n-C_4H_9)_4N]PF_6/CH_2Cl_2$  electrolyte referenced against the Fc<sup>+</sup>/Fc couple. The arrow indicates the direction of the forward scan.



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



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



Figure S10. (a) Solution and solid state UV/Vis/NIR spectrum of the  $H_3$ TTPA ligand over the range 5000-35000 cm<sup>-1</sup> and (b) UV/Vis/NIR spectra in the solid state of the  $H_3$ TTPA ligand, 1 and 2 from 5000-40000 cm<sup>-1</sup>.



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  $[(n-C_4H_9)_4N]PF_6/CH_3CN$  over the scan range of 5000-25000 cm<sup>-1</sup> 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  $[(n-C_4H_9)_4N]PF_6/CH_2Cl_2$  showing the EPR signal of the radical cation and c) of the Mn<sup>2+</sup> signal of **1** against the experimentally obtained spectrum at 1.8 V. Parameters for the simulated spectrum are shown in Table S3.

Compound	Solvent	Nucleus	g-factor	A <sub>iso</sub> (MHz)	Reference
H <sub>3</sub> TTPA	CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	Nitrogen	2.0068	11.5	Figure 5
$[\{Mn_3(TTPA)(MeOH)_3\}Cl_3]_n$ (1)	CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	Nitrogen	2.005	2.8	Figure S15
$[\{Mn_3(TTPA)(MeOH)_3\}Cl_3]_n$ (1)	CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	Manganese	2.001	291	Figure S15
$[\{Mn_{3}(TTPA)(DMF)_{3}\}(NO_{3})_{3}]_{n}$ (2)	CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	Nitrogen	2.001	4.2	Figure S18
$[\{Mn_{3}(TTPA)(DMF)_{3}\}(NO_{3})_{3}]_{n}$ (2)	CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	Manganese	2.001	280	Figure S18

Table S3. EPR parameters used for simulated spectra.



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



**Figure S17.** EPR spectra of **2** during the spectroelectrochemical experiment in  $[(n-C_4H_9)_4N]PF_6/CH_2Cl_2$  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  $[(n-C_4H_9)_4N]PF_6/CH_2Cl_2 b)$  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<sub>3</sub>TTPA ligand as a solution in acetonitrile where  $\lambda_{ex} = 345$  nm (28986 cm<sup>-1</sup>) and (b) a comparison of the H<sub>3</sub>TTPA ligand against the oxidised TTPA ligand with NOPF<sub>6</sub> in acetonitrile.



**Figure S20.** Spectroelectrochemical fluorescence spectrum of  $H_3$ TTPA as the potential was (a) increased from 0 to 1.5 V, (b) decreased from 1.5 to 0 V in  $[(n-C_4H_9)_4N]PF_6/CH_3CN$  electrolyte.

### Hückel

Hückel Calculations Output: N(Ph-tetrazole) <sub>3</sub>																					
ψtot							H H		B H C 10 C 23	22-00 24	26	-5 -4 -2 -1 0 1 2	41	   + + + + + + + + + + +							
Structure Number o Number o Number o Total char	type : deloc f atoms : 49 f Hückel ato f $\pi$ electron ge : 1	alized struc oms : 34 s : 37	ture				H-0 <sub>15</sub>	e 17 e	H B	28	927 H	3 4 5 6 7 8		44 44							
1- Hamilte	onian :	2	2.0	1.0	5.0	6.0	N <sub>3</sub> N <sub>3</sub>	2				9				7.0		0.011	10.10	11	10
N1	1 N2 13 C	2 C 14 C	3 C 15 C	4 C 16 C	5 C 17 C	6 C 18 C	ю					10				19 C	8 C 20 C	9 NI 21 C	10 N2 22 C	23 C	12 24
С	25 N1	26 N1	27 N2	28 N1	29 C	30								I	N1	31 N1	32 N1	33 C	34 N2		
1 N2	$\alpha + 1.37\beta$	0.89β	0.00β	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	
2 C	0.00p 0.89ß	$\alpha + 0.00\beta$	0.00p 1.00B	0.00p 0.00B	0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 1.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00B	0.008	0.008	0.008	0.008	0.008	0.008	
	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	p	p	••••p	••••P	p	p	
3 C	0.00β	1.00β	$\alpha + 0.00\beta$	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	
1.0	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00ß	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.008	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	
4 C	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	1.00p 0.00B	$\alpha + 0.00p$ 0.00B	1.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p	0.00p	0.00p	0.00p	0.00p	0.00p	
5 C	0.00β	0.00β	0.00β	1.00β	$\alpha + 0.00\beta$	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	0.00β	0.00β	-						
6 C	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	1.00β	$\alpha + 0.00\beta$	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	
7 C	0.00p 0.00B	0.00p 1.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 1.00B	a + 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.008	0.008	0.008	0.008	0.006	0.008	
1.6	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.000	0.00p	0.00p	0.000	0.00p	0.00p	
8 C	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	1.00β	0.00β	0.00β	$\alpha + 0.00\beta$	1.02β	0.00β	0.00β	1.02β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	
0.11	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	
9 NI	0.00B	0.00B	0.00p 0.00B	0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00B	1.02B 0.00B	$\alpha + 0.51\beta$	0.99p 0.00B	0.000	0.00B	0.00p 0.00p	0.00p 0.00p	0.008	0.008	0.008	0.008	0.008	0.000	
10 N2	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00p 0.99β	$\alpha + 1.37\beta$	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	0.00β	•	·		,			
11 N1	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.99β	$\alpha + 0.51\beta$	1.09β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	
12 NI	0.00B	0.00B	0.00B	0.00B	0.00B	0.00B	0.00B	0.00B	0.00B	0.00B	0.00B	$0.00\beta$ $\alpha \pm 0.51\beta$	0.00B	0.00B	0.008	0.008	0.008	0.008	0.008	0.008	
12 111	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00B	0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p	0.00p	0.00p	0.00p	0.00p	0.00p	
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	$\alpha + 0.00\beta$	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	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	0.00β	1.00β	$\alpha + 0.00\beta$	1.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	
15 C	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00ß	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	ar 1 0 000	1.000	0.000	0.000	0.000	0.000	
13 U	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	0.00p 0.00B	1.00p 0.00B	α – 0.00β	1.00p	0.00p	0.00p	0.00p	0.00p	
16 C	0.00B	0.00B	0.00B	0.00B	0.00B	0.00B	0.00B	0.00B	0.00B	0.00B	0.00B	0.00B	0.00B	0.00β	1.00B	$\alpha + 0.00\beta$	0.00B	0.00B	0.00B	0.008	
-	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	F	····P	F	r	F	F	
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	0.00β	$\alpha + 0.00\beta$	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	1.00β	0.00β	0.000	0.000	0.000		1 000	1.000	
18 0	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	0.00β 0.00β	0.00β 0.00β	0.00β 0.00β	0.00β 0.00β	0.00β 0.00β	0.00β 0.00β	0.00p	0.00p	0.008	α + 0.00β	1.00β	1.00β	

-11\_\_\_\_

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	$\alpha + 0.00\beta$	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	$\alpha + 0.00\beta$	
	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	0.00B	0.00B	0.00β	0.00β	0.008	0.008	0.008	0.008	0.00β	0.00β	0.008	0.00β	0.008	0.00B	0.00B	0.00B	0.00B	0.00B	0.00B	1.00B	$\alpha$ +
0.00B	1.00β	0.00B	0.00β	0.00β	0.00B	0.00B	0.00B	0.008	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00B	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	
22 C	0.00p	0.00p	0.00p	0.00p	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.008	0.000	0.000	0.008	0.000	0.000	
22 C	1.00p	$\alpha + 0.00\beta$	1.00p	1.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1 000	0.000	
23 C	0.000	0.00p 1.00B	0.00p	0.000	0.000	0.000	0.000	0.00p	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.00p	0.00p	0.00p	0.00p	1.00p	0.00p	
24 C	0.000	1.00p	0.00p	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.008	0.008	0.008	0.008	0.008	0.008	
24 C	0.000	1.00B	0.000	$\alpha + 0.00\beta$	1.02B	0.000	0.000	1.028	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.00p	0.00p	0.00p	0.00p	0.00p	0.00p	
25 NI	0.00p	0.008	0.000	0.008	0.008	0.000	0.00p	0.008	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.008	0.008	0.008	0.008	0.008	0.008	
20 111	0.00B	0.00B	0.008	1.02ß	$\alpha + 0.51\beta$	1.09B	0.00B	0.00B	0.008	0.008	0.00B	0.008	0.00B	0.008	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	
26 N1	0.00B	0.00B	0.008	0.008	0.00B	0.008	0.00B	0.00B	0.008	0.008	0.00B	0.008	0.00B	0.008	0.008	0.008	0.00B	0.008	0.008	0.008	
	0.00B	0.00B	0.00B	0.00B	1.09B	$\alpha + 0.51\beta$	0.99B	0.00B	0.00B	0.00B	0.00B	0.00B	0.00B	0.00B	p	p	p	p	p	p	
27 N2	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00B	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	
	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.00β	0.99β	$\alpha + 1.37\beta$	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	$\alpha + 0.51\beta$	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	$\alpha + 0.00\beta$	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	$\alpha + 0.51\beta$	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	$\alpha + 0.51\beta$	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	
22.0	0.00B	0.00B	0.00β	0.00β	0.00B	0.00B	0.00B	0.008	1.02β	0.00β	0.00β	$\alpha + 0.51\beta$	0.00B	0.99β	0.000	1 000	1 000	0.000	0.000	0.000	
33 C	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.00p	0.000	0.008	1.00p	1.00p	0.008	0.000	0.000	
34 N2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.00p 0.00B	0.000	0.000	0.000	0.000	$\alpha = 0.00p$	0.000	0.008	0.008	0.008	0.008	0.008	0.008	
J4 IN2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.00p 0.00B	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	$\alpha + 1.37\beta$	0.00p	0.00p	0.00p	0.00p	0.00p	0.00p	
	0.00p	0.00p	0.00p	0.00p	0.00p	0.00p	0.00p	0.00p	0.00p	0.00p	0.77p	0. <i>)</i> ) p	0.00p	u + 1.57p							
2- Orbitals	5 :																				
εi :	$\alpha + 2.79\beta$	$\alpha + 2.79\beta$	$\alpha + 2.79\beta$	$\alpha + 2.69\beta$	$\alpha + 2.09\beta$	$\alpha + 2.09\beta$	$\alpha + 1.91\beta$	$\alpha + 1.48\beta$	$\alpha + 1.48\beta$	$\alpha + 1.34\beta$	$\alpha + 1.25\beta$	$\alpha + 1.25\beta$	$\alpha + 1.06\beta$	$\alpha + 1.00\beta$	$\alpha + 1.00\beta$	$\alpha + 1.00\beta$	$\alpha + 0.73\beta$	$\alpha + 0.73\beta$	$\alpha + 0.37\beta$	α - 0.75β	α-
0.75β	α - 0.84β	α - 0.94β	α - 0.94β	$\alpha = 1.00B$	$\alpha = 1.00 \dot{B}$	a 1.000	a 1.020				,									•	
ni :	2	2			u - 1.00p	a - 1.00p	a - 1.05p	α - 1.57β	α - 1.57β	α - 1.76β	α - 2.19β	α - 2.19β	α - 2.26β		,	•					
		-	2	2	2	2 - 1.00p	2 - 1.05p	α - 1.57β 2	α - 1.57β 2	α - 1.76β 2	α - 2.19β 2	α - 2.19β 2	α - 2.26β 2	2	2	2	2	2	1	0	0
1 N2	0	0	2 0	2 0	2 0	2 0	2 0	α - 1.57β 2 0	α - 1.57β 2 0	α - 1.76β 2 0	α - 2.19β 2 0	α - 2.19β 2 0	α - 2.26β 2 0	2	2	2	2	2	1	0	0
	0 -0.21	0 -0.00	2 0 -0.00	2 0 -0.65	2 0 -0.00	2 0 0.00	2 0 -0.30	α - 1.57β 2 0 -0.00	α - 1.57β 2 0 -0.00	α - 1.76β 2 0 0.16	α - 2.19β 2 0 -0.00	α - 2.19β 2 0 -0.00	α - 2.26β 2 0 0.29	2 0.00	2 0.00	2	2 0.00	2 0.00	1 0.44	0 0.00	0
	0 -0.21 0.00	0 -0.00 0.13	2 0 -0.00 0.00	2 0 -0.65 -0.00	2 0 -0.00 0.00	2 0 0.00 0.00	2 0 -0.30 0.00	α - 1.57β 2 0 -0.00 0.20	α - 1.57β 2 0 -0.00 0.00	α - 1.76β 2 0 0.16 0.00	α - 2.19β 2 0 -0.00 -0.25	α - 2.19β 2 0 -0.00 0.00	α - 2.26β 2 0 0.29 -0.00	2 0.00 -0.18	2 0.00	2	2 0.00	2 0.00	1 0.44	0 0.00	0
2 C	0 -0.21 0.00 -0.11	0 -0.00 0.13 0.02	2 0 -0.00 0.00 -0.01	2 0 -0.65 -0.00 -0.32	2 0 -0.00 0.00 0.24	2 0 0.00 0.00 -0.11	2 0 -0.30 0.00 -0.06	α - 1.57β 2 0 -0.00 0.20 -0.32	α - 1.57β 2 0 -0.00 0.00 -0.05	α - 1.76β 2 0 0.16 0.00 -0.00	α - 2.19β 2 0 -0.00 -0.25 0.19	α - 2.19β 2 0 -0.00 0.00 -0.11	α - 2.26β 2 0 0.29 -0.00 -0.03	2 0.00 -0.18 0.00	2 0.00 0.00	2 -0.00 -0.00	2 0.00 -0.31	2 0.00 -0.13	1 0.44 -0.16	0 0.00 0.28	0
2 C 0.16	0 -0.21 0.00 -0.11 -0.11	0 -0.00 0.13 0.02 0.18	2 0 -0.00 0.00 -0.01 -0.10	2 0 -0.65 -0.00 -0.32 -0.00	2 0 -0.00 0.00 0.24 -0.00	0 - 1.00p 2 0 0.00 0.00 -0.11 -0.00	0 -0.30 0.00 -0.06 -0.18	α - 1.57β 2 0 -0.00 0.20 -0.32 -0.17	α - 1.57β 2 0 -0.00 0.00 -0.05 0.33	α - 1.76β 2 0 0.16 0.00 -0.00 0.29	α - 2.19β 2 0 -0.00 -0.25 0.19 0.11	α - 2.19β 2 0 -0.00 0.00 -0.11 -0.19	α - 2.26β 2 0 0.29 -0.00 -0.03 0.24	2 0.00 -0.18 0.00	2 0.00 0.00	2 -0.00 -0.00	2 0.00 -0.31	2 0.00 -0.13	1 0.44 -0.16	0 0.00 0.28	0
2 C 0.16 3 C	0 -0.21 0.00 -0.11 -0.11 -0.06	0 -0.00 0.13 0.02 0.18 0.03	2 0 -0.00 0.00 -0.01 -0.10 -0.02	2 0 -0.65 -0.00 -0.32 -0.00 -0.14	2 0 -0.00 0.00 0.24 -0.00 0.25	2 0 0.00 0.00 -0.11 -0.00 -0.11	2 0 -0.30 0.00 -0.06 -0.18 0.08	α - 1.57β 2 0 -0.00 0.20 -0.32 -0.17 -0.24	α - 1.57β 2 0 -0.00 0.00 -0.05 0.33 -0.04	α - 1.76β 2 0 0.16 0.00 -0.00 0.29 -0.07	α - 2.19β 2 0 -0.00 -0.25 0.19 0.11 0.12	α - 2.19β 2 0 -0.00 0.00 -0.11 -0.19 -0.07	$\begin{array}{c} \alpha - 2.26\beta \\ 2 \\ 0 \\ 0.29 \\ -0.00 \\ -0.03 \\ 0.24 \\ -0.14 \end{array}$	2 0.00 -0.18 0.00 0.33	2 0.00 0.00 -0.19	2 -0.00 -0.00 0.32	2 0.00 -0.31 -0.11	2 0.00 -0.13 -0.05	1 0.44 -0.16 -0.23	0 0.00 0.28 -0.10	0
2 C 0.16 3 C	0 -0.21 0.00 -0.11 -0.11 -0.06 0.06	0 -0.00 0.13 0.02 0.18 0.03 -0.01	2 0 -0.00 0.00 -0.01 -0.10 -0.02 -0.08	2 0 -0.65 -0.00 -0.32 -0.00 -0.14 0.05	2 0 -0.00 0.24 -0.00 0.25 0.15	2 0 0.00 -0.11 -0.00 -0.11 0.39	2 0 -0.30 0.00 -0.06 -0.18 0.08 -0.27	α - 1.57β 2 0 -0.00 0.20 -0.32 -0.17 -0.24 0.00	$\begin{array}{c} \alpha - 1.57\beta \\ 2 \\ 0 \\ -0.00 \\ 0.00 \\ -0.05 \\ 0.33 \\ -0.04 \\ 0.13 \end{array}$	α - 1.76β 2 0 0.16 0.00 -0.00 0.29 -0.07 -0.26	$\begin{array}{c} \alpha - 2.19\beta \\ 2 \\ 0 \\ -0.00 \\ -0.25 \\ 0.19 \\ 0.11 \\ 0.12 \\ -0.15 \end{array}$	α - 2.19β 2 0 -0.00 0.00 -0.11 -0.19 -0.07 -0.12	$\begin{array}{c} \alpha - 2.26\beta \\ 2 \\ 0 \\ 0.29 \\ -0.00 \\ -0.03 \\ 0.24 \\ -0.14 \\ 0.21 \end{array}$	2 0.00 -0.18 0.00 0.33 -0.20	2 0.00 0.00 -0.19	2 -0.00 -0.00 0.32	2 0.00 -0.31 -0.11	2 0.00 -0.13 -0.05	1 0.44 -0.16 -0.23	0 0.00 0.28 -0.10	-
2 C 0.16 3 C 4 C	0 -0.21 0.00 -0.11 -0.11 -0.06 0.06 -0.06	0 -0.00 0.13 0.02 0.18 0.03 -0.01 0.06	2 0 -0.00 0.00 -0.01 -0.10 -0.02 -0.08 -0.03	2 0 -0.65 -0.00 -0.32 -0.00 -0.14 0.05 -0.06	0 -0.00 0.24 -0.00 0.25 0.15 0.29	a - 1.00p 2 0 0.00 -0.11 -0.00 -0.11 0.39 -0.13	a - 1.05p 2 0 -0.30 0.00 -0.06 -0.18 0.08 -0.27 0.21	$\alpha$ - 1.57 $\beta$ 2 0 -0.00 0.20 -0.32 -0.17 -0.24 0.00 -0.03 -0.03	$\alpha$ - 1.57 $\beta$ 2 0 -0.00 0.00 -0.05 0.33 -0.04 0.13 -0.00	$\alpha$ - 1.76 $\beta$ 2 0 0.16 0.00 -0.00 0.29 -0.07 -0.26 -0.09	$\begin{array}{c} \alpha - 2.19\beta \\ 2 \\ 0 \\ -0.00 \\ -0.25 \\ 0.19 \\ 0.11 \\ 0.12 \\ -0.15 \\ -0.04 \end{array}$	$\alpha - 2.19\beta$ 2 0 -0.00 0.00 -0.11 -0.19 -0.07 -0.12 0.02 $\alpha - 2.19\beta$	$\alpha$ - 2.26 $\beta$ 2 0 0.29 -0.00 -0.03 0.24 -0.14 0.21 -0.12	2 0.00 -0.18 0.00 0.33 -0.20 0.33	2 0.00 0.00 -0.19 -0.19	2 -0.00 -0.00 0.32 0.32	2 0.00 -0.31 -0.11 0.23	2 0.00 -0.13 -0.05 0.09	1 0.44 -0.16 -0.23 0.08	0 0.00 0.28 -0.10 -0.20	0
2 C 0.16 3 C 4 C	0 -0.21 0.00 -0.11 -0.11 -0.06 0.06 -0.06 0.12	0 -0.00 0.13 0.02 0.18 0.03 -0.01 0.06 0.12	2 0 -0.00 0.00 -0.01 -0.10 -0.02 -0.08 -0.03 -0.10	2 0 -0.65 -0.00 -0.32 -0.00 -0.14 0.05 -0.06 0.06	0 -0.00 0.24 -0.00 0.25 0.15 0.29 -0.15	0.00 0.00 -0.11 -0.00 -0.11 0.39 -0.13 -0.39	0 -0.30 0.00 -0.06 -0.18 0.08 -0.27 0.21 0.27	$\alpha$ - 1.57 $\beta$ 2 0 -0.00 0.20 -0.32 -0.17 -0.24 0.00 -0.03 0.18 -0.18	$\alpha$ - 1.57 $\beta$ 2 0 -0.00 0.00 -0.05 0.33 -0.04 0.13 -0.00 -0.04	$\alpha$ - 1.76 $\beta$ 2 0 0.16 0.00 -0.00 0.29 -0.07 -0.26 -0.09 0.08	$\begin{array}{c} \alpha - 2.19\beta \\ 2 \\ 0 \\ -0.00 \\ -0.25 \\ 0.19 \\ 0.11 \\ 0.12 \\ -0.15 \\ -0.04 \\ -0.03 \\ \end{array}$	$\begin{array}{c} \alpha - 2.19 \dot{\beta} \\ 2 \\ 0 \\ -0.00 \\ 0.00 \\ -0.11 \\ -0.19 \\ -0.07 \\ -0.12 \\ 0.02 \\ 0.15 \end{array}$	$\alpha$ - 2.26 $\beta$ 2 0 0.29 -0.00 -0.03 0.24 -0.14 0.21 -0.12 -0.26	2 0.00 -0.18 0.00 0.33 -0.20 0.33 0.20	2 0.00 0.00 -0.19 -0.19	2 -0.00 -0.00 0.32 0.32	2 0.00 -0.31 -0.11 0.23	2 0.00 -0.13 -0.05 0.09	1 0.44 -0.16 -0.23 0.08	0 0.00 0.28 -0.10 -0.20	0
2 C 0.16 3 C 4 C 5 C	0 -0.21 0.00 -0.11 -0.11 -0.06 0.06 -0.06 0.12 -0.11 -0.01	0 -0.00 0.13 0.02 0.18 0.03 -0.01 0.06 0.12 0.13	2 0 -0.00 0.00 -0.01 -0.10 -0.02 -0.08 -0.03 -0.10 -0.07 0.10	2 0 -0.65 -0.00 -0.32 -0.00 -0.14 0.05 -0.06 0.06 -0.03 0.02	0 -0.00 0.00 0.24 -0.00 0.25 0.15 0.29 -0.15 0.35 0.00	0.00 0.00 0.00 -0.11 -0.00 -0.11 0.39 -0.13 -0.39 -0.16 0.00	0-0.30 0.00 -0.30 0.00 -0.06 -0.18 0.08 -0.27 0.21 0.27 0.22 0.22	$\alpha$ - 1.57 $\beta$ 2 0 -0.00 0.20 -0.32 -0.17 -0.24 0.00 -0.03 0.18 0.19 0.07	$\alpha$ - 1.57 $\beta$ 2 0 -0.00 -0.05 0.33 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.03 0.14 0.14	$\alpha$ - 1.76 $\beta$ 2 0 0.16 0.00 -0.00 0.29 -0.07 -0.26 -0.09 0.08 -0.06 -0.21	$\alpha$ - 2.19 $\beta$ 2 0 -0.00 -0.25 0.19 0.11 0.12 -0.15 -0.04 -0.03 -0.17 0.21	$\alpha - 2.19\beta$ 2 0 -0.00 0.00 -0.11 -0.19 -0.07 -0.12 0.02 0.15 0.10 2.27 0.27	$\alpha$ - 2.26 $\beta$ 2 0 0.29 -0.00 -0.03 0.24 -0.14 0.21 -0.12 -0.26 0.02 0.25	2 0.00 -0.18 0.00 0.33 -0.20 0.33 0.20 -0.00	2 0.00 0.00 -0.19 -0.19 -0.00	2 -0.00 -0.00 0.32 0.32 0.00	2 0.00 -0.31 -0.11 0.23 0.28	2 0.00 -0.13 -0.05 0.09 0.12	1 0.44 -0.16 -0.23 0.08 0.26	0 0.00 0.28 -0.10 -0.20 0.25	0 - -
2 C 0.16 3 C 4 C 5 C 0.15	0 -0.21 0.00 -0.11 -0.11 -0.06 0.06 -0.06 0.12 -0.11 -0.09 0.09	0 -0.00 0.13 0.02 0.18 0.03 -0.01 0.06 0.12 0.13 0.18 0.13	2 0 -0.00 0.00 -0.01 -0.10 -0.02 -0.08 -0.03 -0.10 -0.07 -0.10 0 0.2	2 0 -0.65 -0.00 -0.32 -0.00 -0.14 0.05 -0.06 0.06 -0.03 -0.00 0.06	0 -0.00 0.00 0.24 -0.00 0.25 0.15 0.29 -0.15 0.35 -0.00 0.20	0 - 1.000 2 0 - 0.00 -0.11 -0.00 -0.11 0.39 -0.13 -0.39 -0.16 -0.00 -0.12	0-0.30 0.00 -0.30 0.00 -0.06 -0.18 0.08 -0.27 0.21 0.27 0.32 -0.18	$\alpha$ - 1.57 $\beta$ 2 0 -0.00 0.20 -0.32 -0.17 -0.24 0.00 -0.03 0.18 0.19 -0.07 -0.22	$\alpha$ - 1.57 $\beta$ 2 0 -0.00 -0.05 0.33 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.03 0.14 0.00	$\alpha$ - 1.76 $\beta$ 2 0 0.16 0.00 -0.00 0.29 -0.07 -0.26 -0.09 0.08 -0.06 0.21 0.00	$\begin{array}{c} \alpha - 2.19\beta \\ 2 \\ 0 \\ -0.00 \\ -0.25 \\ 0.19 \\ 0.11 \\ 0.12 \\ -0.15 \\ -0.04 \\ -0.03 \\ -0.17 \\ -0.21 \\ 0.04 \end{array}$	$\alpha - 2.19\beta$ 2 0 -0.00 0.00 -0.11 -0.19 -0.07 -0.12 0.02 0.15 0.10 0.37 0.22	$\begin{array}{c} \alpha - 2.26\beta \\ 2 \\ 0 \\ 0.29 \\ -0.00 \\ -0.03 \\ 0.24 \\ -0.14 \\ 0.21 \\ -0.12 \\ -0.26 \\ 0.02 \\ -0.25 \\ 0.12 \end{array}$	2 0.00 -0.18 0.00 0.33 -0.20 0.33 0.20 -0.00 0.32	2 0.00 0.00 -0.19 -0.19 -0.00	2 -0.00 -0.00 0.32 0.32 0.00	2 0.00 -0.31 -0.11 0.23 0.28	2 0.00 -0.13 -0.05 0.09 0.12	1 0.44 -0.16 -0.23 0.08 0.26	0 0.00 0.28 -0.10 -0.20 0.25	-
2 C 0.16 3 C 4 C 5 C 0.15 6 C	0 -0.21 0.00 -0.11 -0.11 -0.06 0.06 -0.06 0.12 -0.11 -0.09 -0.06 0.12	0 -0.00 0.13 0.02 0.18 0.03 -0.01 0.06 0.12 0.13 0.18 0.06 0.12	2 0 -0.00 0.00 -0.01 -0.10 -0.02 -0.08 -0.03 -0.10 -0.07 -0.10 -0.03 0.10	2 0 -0.65 -0.00 -0.32 -0.00 -0.14 0.05 -0.06 0.06 -0.03 -0.00 -0.00 -0.06 0.06	0 -0.00 0.24 -0.00 0.25 0.15 0.29 -0.15 0.35 -0.00 0.29 0.15	0 0.00 -0.11 -0.00 -0.11 0.39 -0.13 -0.39 -0.16 -0.00 -0.13 0.20	0 -0.30 0.00 -0.06 -0.18 0.08 -0.27 0.21 0.27 0.32 -0.18 0.21 0.27	$\alpha$ - 1.57 $\beta$ 2 0 -0.00 0.20 -0.32 -0.17 -0.24 0.00 -0.03 0.18 0.19 -0.07 -0.03 0.18	$\alpha$ - 1.57 $\beta$ 2 0 -0.00 -0.05 0.33 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.03 0.14 -0.00 0.04	$\alpha$ - 1.76 $\beta$ 2 0 0.16 0.00 -0.00 0.29 -0.07 -0.26 -0.09 0.08 -0.06 0.21 -0.09 0.08	$\alpha$ - 2.19 $\beta$ 2 0 -0.00 -0.25 0.19 0.11 0.12 -0.15 -0.04 -0.03 -0.17 -0.21 -0.04 0.02	$\alpha - 2.19\beta$ 2 0 -0.00 0.00 -0.11 -0.19 -0.07 -0.12 0.02 0.15 0.10 0.37 0.02 0.15	$\alpha$ - 2.26 $\beta$ 2 0 0.29 -0.00 -0.03 0.24 -0.14 0.21 -0.12 -0.26 0.02 -0.25 -0.12 0.26	2 0.00 -0.18 0.00 0.33 -0.20 0.33 0.20 -0.00 -0.33 0.20	2 0.00 0.00 -0.19 -0.19 -0.00 0.19	2 -0.00 -0.00 0.32 0.32 0.00 -0.32	2 0.00 -0.31 -0.11 0.23 0.28 0.23	2 0.00 -0.13 -0.05 0.09 0.12 0.09	1 0.44 -0.16 -0.23 0.08 0.26 0.08	0 0.00 0.28 -0.10 -0.20 0.25 -0.20	0 - -
2 C 0.16 3 C 4 C 5 C 0.15 6 C	0 -0.21 0.00 -0.11 -0.11 -0.06 0.06 -0.06 0.12 -0.11 -0.09 -0.06 0.12 0.06	0 -0.00 0.13 0.02 0.18 0.03 -0.01 0.06 0.12 0.13 0.18 0.06 0.12 0.02	2 0 -0.00 0.00 -0.01 -0.10 -0.02 -0.08 -0.03 -0.10 -0.07 -0.10 -0.03 -0.10 0.02	2 0 -0.65 -0.00 -0.32 -0.00 -0.14 0.05 -0.06 0.06 -0.03 -0.00 -0.06 0.06 0.06 0.06	0 -0.00 0.00 0.24 -0.00 0.25 0.15 0.29 -0.15 0.35 -0.00 0.29 0.15 0.29 0.15 0.29	0 - 1.000 2 0 - 0.00 -0.11 -0.00 -0.11 0.39 -0.13 -0.39 -0.16 -0.00 -0.13 0.39 0.11	0 -0.30 0.00 -0.06 -0.18 0.08 -0.27 0.21 0.27 0.32 -0.18 0.21 -0.27 0.08	$\alpha$ - 1.57 $\beta$ 2 0 -0.00 0.20 -0.32 -0.17 -0.24 0.00 -0.03 0.18 0.19 -0.07 -0.03 0.18 0.24	$\alpha$ - 1.57 $\beta$ 2 0 -0.00 -0.05 0.33 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.03 0.14 -0.00 -0.04 0.03 0.14 -0.00 -0.04 0.04 0.04 0.04 0.04 0.04 0.04 0.04 0.03 0.14 -0.00 -0.00 -0.04 0.03 0.14 -0.00 -0.04 0.03 0.14 -0.00 -0.04 0.03 0.14 -0.00 -0.04 0.03 0.13 -0.04 0.03 0.13 -0.04 0.03 0.13 -0.04 0.03 0.14 -0.00 -0.04 0.04 0.03 0.14 -0.00 -0.04 0.03 0.14 -0.00 -0.04 0.04 0.03 0.14 -0.00 -0.04 0.04 0.04 0.03 0.14 -0.00 -0.04 0.03 0.14 -0.00 -0.04 0.03 0.14 -0.00 -0.04 0.14 -0.00 -0.04 0.14 -0.00 -0.04 0.14 -0.00 -0.04 0.14 -0.00 -0.04 0.14 -0.00 -0.04 0.14 -0.00 -0.04 -0.	$\alpha$ - 1.76 $\beta$ 2 0 0.16 0.00 -0.00 0.29 -0.07 -0.26 -0.09 0.08 -0.06 0.21 -0.09 0.08 0.02 0.09 0.08	$\begin{array}{c} \alpha - 2.19\beta \\ 2 \\ 0 \\ -0.00 \\ -0.25 \\ 0.19 \\ 0.11 \\ 0.12 \\ -0.15 \\ -0.04 \\ -0.03 \\ -0.17 \\ -0.21 \\ -0.04 \\ -0.03 \\ 0.12 \end{array}$	$\begin{array}{c} \alpha - 2.19\dot{\beta} \\ 2 \\ 0 \\ -0.00 \\ 0.00 \\ -0.11 \\ -0.19 \\ -0.07 \\ -0.12 \\ 0.02 \\ 0.15 \\ 0.10 \\ 0.37 \\ 0.02 \\ 0.15 \\ 0.07 \end{array}$	$\begin{array}{c} \alpha - 2.26\beta \\ 2 \\ 0 \\ 0.29 \\ -0.00 \\ -0.03 \\ 0.24 \\ -0.14 \\ 0.21 \\ -0.12 \\ -0.26 \\ 0.02 \\ -0.25 \\ -0.12 \\ -0.26 \\ 0.14 \end{array}$	2 0.00 -0.18 0.00 0.33 -0.20 0.33 0.20 -0.00 -0.33 0.20 0.23	2 0.00 0.00 -0.19 -0.19 -0.00 0.19	2 -0.00 -0.00 0.32 0.32 0.00 -0.32	2 0.00 -0.31 -0.11 0.23 0.28 0.23	2 0.00 -0.13 -0.05 0.09 0.12 0.09	1 0.44 -0.16 -0.23 0.08 0.26 0.08	0 0.00 0.28 -0.10 -0.20 0.25 -0.20	-
2 C 0.16 3 C 4 C 5 C 0.15 6 C 7 C	$\begin{array}{c} 0 \\ -0.21 \\ 0.00 \\ -0.11 \\ -0.11 \\ -0.06 \\ 0.06 \\ -0.06 \\ 0.12 \\ -0.11 \\ -0.09 \\ -0.06 \\ 0.12 \\ -0.06 \\ 0.06 \end{array}$	0 -0.00 0.13 0.02 0.18 0.03 -0.01 0.06 0.12 0.13 0.18 0.06 0.12 0.03 -0.01	$\begin{array}{c} 2\\ 0\\ -0.00\\ 0.00\\ -0.01\\ -0.10\\ -0.02\\ -0.08\\ -0.03\\ -0.10\\ -0.07\\ -0.10\\ -0.03\\ -0.10\\ -0.02\\ -0.08\\ \end{array}$	2 0 -0.65 -0.00 -0.32 -0.00 -0.14 0.05 -0.06 0.06 -0.03 -0.00 -0.06 0.06 -0.14 0.05	2 0 -0.00 0.24 -0.00 0.25 0.15 0.29 -0.15 0.35 -0.00 0.29 0.15 0.29 -0.15 0.29	0 - 1.000 2 0 - 0.00 -0.11 -0.00 -0.11 0.39 -0.13 -0.39 -0.16 -0.00 -0.13 0.39 -0.11 0.39	0 -0.30 0.00 -0.06 -0.18 0.08 -0.27 0.21 0.27 0.32 -0.18 0.21 -0.27 0.08 0.27	$\alpha$ - 1.57 $\beta$ 2 0 -0.00 0.20 -0.32 -0.17 -0.24 0.00 -0.03 0.18 0.19 -0.07 -0.03 0.18 -0.07 -0.03 0.18 -0.07 -0.03 0.20 -0.00 -0.00 -0.00 -0.00 -0.02 -0.00 -0.02 -0.17 -0.00 -0.00 -0.02 -0.17 -0.02 -0.00 -0.00 -0.02 -0.17 -0.00 -0.03 -0.17 -0.00 -0.03 -0.18 -0.07 -0.00 -0.03 -0.00 -0.03 -0.00 -0.03 -0.00 -	$\alpha$ - 1.57 $\beta$ 2 0 -0.00 -0.05 0.33 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.03 0.14 -0.00 -0.04 -0.04 0.03 0.14 -0.00 -0.04 0.03 0.14 -0.00 -0.04 0.03 0.14 -0.00 -0.04 0.03 0.14 -0.00 -0.04 0.03 0.14 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04	$\alpha$ - 1.76 $\beta$ 2 0 0.16 0.00 -0.00 0.29 -0.07 -0.26 -0.09 0.08 -0.06 0.21 -0.09 0.08 -0.09 0.08 -0.09 0.08 -0.00 0.21 -0.09 0.23 -0.09 0.24 -0.09 0.08 -0.09 0.24 -0.09 0.08 -0.09 0.08 -0.09 0.08 -0.09 0.08 -0.09 0.08 -0.09 0.09 -0.09 0.09 -0.09 0.09 -0.09 0.09 -0.09 0.09 -0.09 0.09 -0.09 0.09 -0.09 0.09 -0.09 0.09 -0.09 0.00 -0.09 0.09 -0.09 0.00 -0.09 0.09 -0.09 0.00 -0.09 0.00 -0.09 0.00 -0.09 0.00 -0.09 0.00 -0.09 0.08 -0.09 0.00 0.21 -0.09 0.09 -0.09 0.00 0.21 -0.09 0.09 -0.09 0.09 -0.09 0.08 -0.09 0.09 -0.09 0.09 -0.09 0.09 -0.09 0.09 -0.09 0.09 -0.09 0.09 -0.09 0.09 -0.09 0.09 -0.09 0.09 -0.09 0.09 -0.09 0.09 -0.09 0.09 -0.09 0.09 -0.09 0.09 -0.09 0.09 -0.09 0.09 -0.09 0.09 -0.07 -0.09 0.07 -0.09 0.07 -0.09 0.07 -0.07 -0.09 0.07 -0.09 0.07 -0.07	$\begin{array}{c} \alpha - 2.19\beta \\ 2 \\ 0 \\ -0.00 \\ -0.25 \\ 0.19 \\ 0.11 \\ 0.12 \\ -0.15 \\ -0.04 \\ -0.03 \\ -0.17 \\ -0.21 \\ -0.04 \\ -0.03 \\ 0.12 \\ 0.15 \end{array}$	$\alpha - 2.19\beta$ 2 0 -0.00 0.00 -0.11 -0.19 -0.07 -0.12 0.02 0.15 0.10 0.37 0.02 0.15 -0.07 -0.07 -0.02 0.15 -0.00 0.00	$\alpha$ - 2.26 $\beta$ 2 0 0.29 -0.00 -0.03 0.24 -0.14 0.21 -0.26 0.02 -0.25 -0.12 -0.26 -0.14 0.21 -0.26 -0.12 -0.26 -0.12 -0.26 -0.12 -0.25 -0.12 -0.26 -0.12 -0.25 -0.12 -0.25 -0.12 -0.25 -0.12 -0.25 -0.12 -0.25 -0.25 -0.12 -0.25 -0.25 -0.12 -0.25 -0.25 -0.12 -0.25 -0.25 -0.12 -0.25 -0.25 -0.12 -0.25 -0.25 -0.12 -0.25 -0.12 -0.25 -0.12 -0.26 -0.25 -0.12 -0.26 -0.25 -0.12 -0.26 -0.12 -0.21 -0.26 -0.12 -0.26 -0.12 -0.21 -0.26 -0.12 -0.26 -0.12 -0.21 -0.26 -0.21 -0.21 -0.26 -0.21 -0.21 -0.26 -0.21 -0.21 -0.26 -0.21	2 0.00 -0.18 0.00 0.33 -0.20 0.33 0.20 -0.00 -0.33 0.20 -0.33 0.20	2 0.00 0.00 -0.19 -0.19 -0.00 0.19 0.19	2 -0.00 -0.00 0.32 0.32 0.00 -0.32 -0.32	2 0.00 -0.31 -0.11 0.23 0.28 0.23 -0.11	2 0.00 -0.13 -0.05 0.09 0.12 0.09 -0.05	1 0.44 -0.16 -0.23 0.08 0.26 0.08 -0.23	0 0.00 0.28 -0.10 -0.20 0.25 -0.20 -0.10	-
2 C 0.16 3 C 4 C 5 C 0.15 6 C 7 C 8 C	$\begin{array}{c} 0 \\ -0.21 \\ 0.00 \\ -0.11 \\ -0.11 \\ -0.06 \\ 0.06 \\ -0.06 \\ 0.12 \\ -0.11 \\ -0.09 \\ -0.06 \\ 0.12 \\ -0.06 \\ 0.06 \\ 0.06 \\ -0.19 \end{array}$	0           -0.00           0.13           0.02           0.18           0.03           -0.01           0.06           0.12           0.13           0.12           0.13           0.12           0.13           0.12           0.13           0.06           0.12           0.03           -0.01           0.03           -0.01           0.25	$\begin{array}{c} 2 \\ 0 \\ -0.00 \\ 0.00 \\ -0.01 \\ -0.01 \\ -0.02 \\ -0.08 \\ -0.03 \\ -0.10 \\ -0.07 \\ -0.10 \\ -0.03 \\ -0.10 \\ -0.02 \\ -0.08 \\ -0.04 \end{array}$	2 0 -0.65 -0.00 -0.32 -0.00 -0.14 0.05 -0.06 0.06 -0.03 -0.06 0.06 -0.03 -0.06 0.06 -0.14 0.05 0.05	2 0 -0.00 0.24 -0.00 0.25 0.15 0.29 -0.15 0.35 -0.00 0.29 0.15 0.29 0.15 0.29 0.15 0.29 0.15 0.29 0.15 0.29 0.15 0.29 0.15 0.29 0.29 0.15 0.29 0.21 0.29 0.21 0.29 0.21 0.29 0.21 0.29 0.21 0.29 0.21 0.29 0.21 0.29 0.29 0.29 0.29 0.29 0.29 0.29 0.29	a - 1.000         2         0         0.00         -0.11         -0.00         -0.13         -0.39         -0.16         -0.00         -0.13         0.39         -0.13         0.39         -0.13         0.39         -0.13         0.39         -0.13         0.39         -0.11	0 -0.30 0.00 -0.06 -0.18 0.08 -0.27 0.21 0.27 0.32 -0.18 0.21 -0.27 0.08 0.27 0.027 0.09	$\alpha$ - 1.57 $\beta$ 2 0 -0.00 0.20 -0.32 -0.17 -0.24 0.00 -0.03 0.18 0.19 -0.07 -0.03 0.18 -0.24 0.00 0.20 0.20 -0.32 -0.17 -0.24 0.00 -0.03 0.18 -0.07 -0.03 0.18 -0.07 -0.03 0.18 -0.02 -0.03 0.18 -0.24 -0.03 0.18 -0.03 0.18 -0.03 0.18 -0.03 0.18 -0.03 0.18 -0.03 0.18 -0.24 -0.03 0.18 -0.03 0.18 -0.24 -0.03 0.18 -0.24 -0.03 0.18 -0.24 -0.03 0.34 -0.03 0.34 -0.03 0.34 -0.03 0.34 -0.03 0.34 -0.03 0.34 -0.03 0.34 -0.03 0.34 -0.03 0.34 -0.03 0.34 -0.03 -0	$\alpha$ - 1.57 $\beta$ 2 0 -0.00 -0.05 0.33 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.03 0.14 -0.00 -0.04 0.03 0.14 -0.00 -0.04 0.13 0.05 0.05 0.03 0.13 -0.00 -0.04 0.03 0.13 -0.00 -0.04 0.03 0.13 -0.00 -0.04 0.03 0.13 -0.00 -0.04 0.03 0.13 -0.00 -0.04 0.03 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.05 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.03 0.14 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.05 0.14 -0.00 -0.04 0.13 -0.05 -0.04 -0.05 -0.04 -0.05 -0.04 -0.05 -0.04 -0.05 -0.04 -0.05 -0.04 -0.05 -0.05 -0.05 -0.04 -0.05 -0.05 -0.04 -0.05 -0.05 -0.04 -0.05 -0.55	$\alpha$ - 1.76 $\beta$ 2 0 0.16 0.00 -0.00 0.29 -0.07 -0.26 -0.09 0.08 -0.06 0.21 -0.09 0.08 -0.09 0.08 -0.09 0.08 -0.09 0.00 -0.09 0.16 0.21 -0.09 0.21 -0.00 0.21 -0.00 0.22 -0.07 -0.26 -0.09 0.08 -0.00 0.21 -0.00 0.22 -0.07 -0.26 -0.09 0.08 -0.09 0.00 -0.00 0.21 -0.00 0.22 -0.02 0.00 -0.02 -0.02 0.00 -0.02 -0.00 0.00 -0.00 0.00 -0.02 -0.00 0.00 -0.00 -0.00 0.00 -	$\begin{array}{c} \alpha - 2.19\beta \\ 2 \\ 0 \\ -0.00 \\ -0.25 \\ 0.19 \\ 0.11 \\ 0.12 \\ -0.15 \\ -0.04 \\ -0.03 \\ -0.17 \\ -0.21 \\ -0.04 \\ -0.03 \\ 0.12 \\ -0.15 \\ -0.15 \\ -0.13 \end{array}$	$\begin{array}{c} \alpha - 2.19\dot{\beta} \\ 2 \\ 0 \\ -0.00 \\ 0.00 \\ -0.11 \\ -0.19 \\ -0.07 \\ -0.12 \\ 0.02 \\ 0.15 \\ 0.10 \\ 0.37 \\ 0.02 \\ 0.15 \\ -0.07 \\ -0.12 \\ 0.07 \end{array}$	$\begin{array}{c} \alpha - 2.26\beta \\ 2 \\ 0 \\ 0.29 \\ -0.00 \\ 0.24 \\ -0.14 \\ 0.21 \\ -0.12 \\ -0.26 \\ 0.02 \\ -0.25 \\ -0.12 \\ -0.26 \\ -0.14 \\ 0.21 \\ 0.26 \end{array}$	2 0.00 -0.18 0.00 0.33 -0.20 0.33 0.20 -0.00 -0.33 0.20 -0.33 -0.20 0.00	2 0.00 0.00 -0.19 -0.19 -0.00 0.19 0.19	2 -0.00 -0.00 0.32 0.32 0.00 -0.32 -0.32 0.00	2 0.00 -0.31 -0.11 0.23 0.28 0.23 -0.11 -0.11 -0.25	2 0.00 -0.13 -0.05 0.09 0.12 0.09 -0.05 -0.05	1 0.44 -0.16 -0.23 0.08 0.26 0.08 -0.23 -0.07	0 0.00 0.28 -0.10 -0.20 0.25 -0.20 -0.10 0.21	0 -
2 C 0.16 3 C 4 C 5 C 0.15 6 C 7 C 8 C 0.12	$\begin{array}{c} 0 \\ -0.21 \\ 0.00 \\ -0.11 \\ -0.11 \\ -0.06 \\ 0.06 \\ -0.06 \\ 0.12 \\ -0.01 \\ -0.09 \\ -0.06 \\ 0.12 \\ -0.06 \\ 0.12 \\ -0.06 \\ 0.19 \\ -0.19 \\ -0.16 \end{array}$	0           -0.00           0.13           0.02           0.18           0.03           -0.01           0.06           0.12           0.13           0.12           0.13           0.12           0.13           0.14           0.06           0.12           0.03           -0.01           0.25           0.03	$\begin{array}{c} 2\\ 0\\ -0.00\\ 0.00\\ -0.01\\ -0.10\\ -0.02\\ -0.08\\ -0.03\\ -0.10\\ -0.07\\ -0.10\\ -0.03\\ -0.10\\ -0.02\\ -0.08\\ -0.14\\ -0.02 \end{array}$	2 0 -0.65 -0.00 -0.32 -0.00 -0.14 0.05 -0.06 0.06 -0.03 -0.00 -0.06 0.06 -0.03 -0.00 -0.14 0.05 0.05 -0.00	2 0 -0.00 0.24 -0.00 0.25 0.15 0.29 -0.15 0.35 -0.00 0.29 0.15 0.29 0.15 0.29 0.15 0.29	$\begin{array}{c} a - 1.009 \\ 2 \\ 0 \\ 0.00 \\ 0.00 \\ -0.11 \\ -0.00 \\ -0.11 \\ 0.39 \\ -0.13 \\ -0.39 \\ -0.16 \\ -0.00 \\ -0.13 \\ 0.39 \\ -0.11 \\ -0.39 \\ -0.07 \\ -0.00 \end{array}$	0 -0.30 0.00 -0.06 -0.18 0.08 -0.27 0.21 0.27 0.32 -0.18 0.21 -0.27 0.32 -0.18 0.21 -0.27 0.08 0.21 -0.27 0.19 -0.16	$\alpha$ - 1.57 $\beta$ 2 0 -0.00 0.20 -0.32 -0.17 -0.24 0.00 -0.03 0.18 0.19 -0.07 -0.03 0.18 -0.24 0.00 0.34 0.19	$\alpha$ - 1.57 $\beta$ 2 0 -0.00 0.00 -0.05 0.33 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.03 0.14 -0.00 -0.04 0.03 0.14 -0.00 -0.04 0.13 0.05 -0.04 0.03 0.13 -0.00 -0.04 0.03 0.13 -0.00 -0.04 0.03 0.13 -0.00 -0.04 0.03 0.13 -0.00 -0.04 0.03 0.13 -0.00 -0.04 0.03 0.13 -0.00 -0.04 0.03 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.03 0.14 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.03 0.14 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 -0.05 -0.04 -0.05 -0.03 -0.05 -0.03 -0.05 -0.03 -0.05 -0.03 -0.05 -0.03 -0.05 -0.03 -0.05 -0.03 -0.05 -0.03 -0.05 -0.03 -0.05 -0.03 -0.05 -0.03 -0.05 -0.5 -0.5 -0.5 -0.5 -0.5 -0.5 -0.5 -0.5	$\alpha$ - 1.76 $\beta$ 2 0 0.16 0.00 -0.00 0.29 -0.07 -0.26 -0.09 0.08 -0.06 0.21 -0.09 0.08 -0.07 -0.26 0.12 -0.30	$\begin{array}{c} \alpha-2.19\beta\\ 2\\ 0\\ -0.00\\ -0.25\\ 0.19\\ 0.11\\ 0.12\\ -0.15\\ -0.04\\ -0.03\\ -0.17\\ -0.21\\ -0.04\\ -0.03\\ 0.12\\ -0.15\\ -0.13\\ 0.16\end{array}$	$\alpha - 2.19\beta$ 2 0 -0.00 0.00 -0.11 -0.19 -0.07 -0.12 0.02 0.15 0.10 0.37 0.02 0.15 -0.07 -0.12 0.07 -0.07 -0.12 0.07 -0.02 0.15 -0.07 -0.02 0.15 -0.07 -0.02 0.28 -0.07 -0.02 0.28 -0.07 -0.02 0.28 -0.02 0.28 -0.02 0.28 -0.02 0.28 -0.02 0.28 -0.02 0.28 -0.02 0.28 -0.02 0.28 -0.02 0.28 -0.02 0.28 -0.02 0.28 -0.02 0.28 -0.02 0.28 -0.02 0.28 -0.02 0.28 -0.02 0.28 -0.02 0.29 -0.02 0.28 -0.07 -0.12 0.02 0.28 -0.07 -0.02 0.28 -0.07 -0.12 0.02 0.28 -0.07 -0.12 0.02 0.15 -0.07 -0.12 0.02 0.15 -0.07 -0.12 0.02 0.15 -0.07 -0.12 0.02 0.15 -0.07 -0.12 0.07 -0.12 0.07 -0.12 0.07 -0.12 0.07 -0.12 0.07 -0.07 -0.12 0.07 -0.07 -0.12 0.07 -0.07 -0.12 0.07 -0.07 -0.12 0.07 -0.07 -0.12 0.07 -0.07 -0.12 0.07 -0.12 0.07 -0.12 0.07 -0.12 0.07 -0.12 0.07 -0.12 0.07 -0.12 0.07 -0.28 -0.07 -0.28 -0.07 -0.28 -0.07 -0.28 -0.07 -0.28 -0.07 -0.07 -0.28 -0.07 -0.07 -0.28 -0.07 -0.07 -0.28 -0.07 -0.28 -0.07 -0.07 -0.07 -0.28 -0.07 -0.08 -0.88 -0.88 -0.88 -0.88 -0.88 -0.88 -	$\begin{array}{c} \alpha - 2.26\beta \\ 2 \\ 0 \\ 0.29 \\ -0.00 \\ -0.03 \\ 0.24 \\ -0.14 \\ 0.21 \\ -0.12 \\ -0.26 \\ 0.02 \\ -0.25 \\ -0.12 \\ -0.26 \\ -0.14 \\ 0.21 \\ 0.26 \\ 0.18 \end{array}$	2 0.00 -0.18 0.00 0.33 -0.20 0.33 0.20 -0.00 -0.33 0.20 -0.33 -0.20 0.00	2 0.00 0.00 -0.19 -0.19 -0.00 0.19 0.19 0.00	2 -0.00 -0.00 0.32 0.32 0.00 -0.32 -0.32 0.00	2 0.00 -0.31 -0.11 0.23 0.28 0.23 -0.11 -0.25	2 0.00 -0.13 -0.05 0.09 0.12 0.09 -0.05 -0.10	1 0.44 -0.16 -0.23 0.08 0.26 0.08 -0.23 -0.07	0 0.00 0.28 -0.10 -0.20 0.25 -0.20 -0.10 0.21	- -
2 C 0.16 3 C 4 C 5 C 0.15 6 C 7 C 8 C 0.12 9 N1	$\begin{array}{c} 0 \\ -0.21 \\ 0.00 \\ -0.11 \\ -0.11 \\ -0.06 \\ 0.06 \\ -0.06 \\ 0.12 \\ -0.01 \\ -0.09 \\ -0.06 \\ 0.12 \\ -0.06 \\ 0.12 \\ -0.06 \\ 0.06 \\ -0.19 \\ -0.16 \\ -0.22 \end{array}$	0           -0.00           0.13           0.02           0.18           0.03           -0.01           0.06           0.12           0.13           0.12           0.13           0.12           0.13           0.18           0.06           0.12           0.03           -0.01           0.25           0.03           0.29	$\begin{array}{c} 2\\ 0\\ -0.00\\ 0.00\\ -0.01\\ -0.10\\ -0.02\\ -0.08\\ -0.03\\ -0.10\\ -0.07\\ -0.10\\ -0.03\\ -0.10\\ -0.02\\ -0.08\\ -0.14\\ -0.02\\ -0.02\\ -0.17\end{array}$	$\begin{array}{c} 2\\ 0\\ -0.65\\ -0.00\\ -0.32\\ -0.00\\ -0.14\\ 0.05\\ -0.06\\ 0.06\\ -0.03\\ -0.00\\ -0.06\\ 0.06\\ -0.14\\ 0.05\\ 0.05\\ -0.00\\ 0.09\\ \end{array}$	2 0 -0.00 0.24 -0.00 0.25 0.15 0.29 -0.15 0.35 -0.00 0.29 0.15 0.25 -0.15 0.25 -0.15 0.15 0.25 -0.15 0.25 -0.15 0.25 -0.15 0.25 -0.15 0.25 -0.00 0.29 -0.15 0.25 -0.15 0.25 -0.15 0.25 -0.15 0.25 -0.15 0.25 -0.15 0.25 -0.15 0.25 -0.15 0.25 -0.15 0.25 -0.15 0.25 -0.15 0.25 -0.15 -0.15 -0.25 -0.15 -0.25 -0.15 -0.25 -0.15 -0.25 -0.15 -0.25 -0.15 -0.25 -0.15 -0.25 -0.25 -0.15 -0.25 -0.15 -0.25 -0.25 -0.15 -0.25 -0.15 -0.25 -0.	$\begin{array}{c} a - 1.009 \\ 2 \\ 0 \\ 0 \\ 0.00 \\ -0.11 \\ -0.00 \\ -0.11 \\ 0.39 \\ -0.13 \\ -0.39 \\ -0.16 \\ -0.00 \\ -0.13 \\ 0.39 \\ -0.11 \\ -0.39 \\ -0.07 \\ -0.00 \\ 0.02 \end{array}$	a - 1.03p 2 0 -0.30 0.00 -0.06 -0.18 0.08 -0.27 0.27 0.32 -0.18 0.21 -0.27 0.08 0.21 -0.27 0.08 0.27 0.09 -0.16 -0.16 -0.16 -0.16 -0.16 -0.16 -0.17 -0.18 -0.27 -0.19 -0.19 -0.16 -0	$\alpha$ - 1.57 $\beta$ 2 0 -0.00 0.20 -0.32 -0.17 -0.24 0.00 -0.03 0.18 0.19 -0.07 -0.03 0.18 -0.24 0.00 0.34 0.19 -0.24 0.00 0.34 0.19 -0.04	$\alpha$ - 1.57 $\beta$ 2 0 -0.00 0.00 -0.05 0.33 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.03 0.14 -0.00 -0.04 0.03 0.14 -0.00 -0.04 0.03 0.13 -0.00 -0.04 0.03 0.13 -0.00 -0.04 0.03 0.13 -0.00 -0.04 0.03 0.13 -0.00 -0.04 0.03 0.13 -0.00 -0.04 0.03 0.13 -0.00 -0.04 0.03 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.03 0.14 -0.00 -0.04 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 -0.04 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 -0.04 -0.05 -0.04 -0.04 -0.05 -0.04 -0.05 -0.04 -0.05 -0.04 -0.05 -0.04 -0.05 -0.04 -0.05 -0.04 -0.05 -0.04 -0.05 -0.04 -0.00 -0.04 -0.04 -0.00 -0.04 -0.04 -0.04 -0.04 -0.04 -0.04 -0.04 -0.04 -0.04 -0.05 -0.04 -0.04 -0.04 -0.04 -0.05 -0.37 -0.00 -0.04 -0.05 -0.05 -0.37 -0.00 -0.01 -0.01 -0.05 -0.03 -0.05 -0.01 -0.01 -0.01 -0.05 -0.01 -0	$\alpha$ - 1.76 $\beta$ 2 0 0.16 0.00 -0.00 0.29 -0.07 -0.26 -0.09 0.08 -0.06 0.21 -0.09 0.08 -0.07 -0.26 0.12 -0.30 -0.30 -0.18	$\begin{array}{c} \alpha-2.19\beta\\ 2\\ 0\\ -0.00\\ -0.25\\ 0.19\\ 0.11\\ 0.12\\ -0.15\\ -0.04\\ -0.03\\ -0.17\\ -0.21\\ -0.04\\ -0.03\\ 0.12\\ -0.15\\ -0.13\\ 0.16\\ -0.34\\ \end{array}$	$\begin{array}{c} \alpha-2.19\dot{\beta}\\ 2\\ 0\\ -0.00\\ 0.00\\ -0.11\\ -0.19\\ -0.07\\ -0.12\\ 0.02\\ 0.15\\ 0.10\\ 0.37\\ 0.02\\ 0.15\\ -0.07\\ -0.12\\ 0.07\\ -0.12\\ 0.07\\ -0.28\\ 0.20\\ \end{array}$	$\begin{array}{c} \alpha - 2.26\beta \\ 2 \\ 0 \\ 0.29 \\ -0.00 \\ -0.03 \\ 0.24 \\ -0.14 \\ 0.21 \\ -0.12 \\ -0.26 \\ 0.02 \\ -0.25 \\ -0.12 \\ -0.26 \\ -0.14 \\ 0.21 \\ 0.26 \\ 0.18 \\ 0.29 \end{array}$	2 0.00 -0.18 0.00 0.33 -0.20 0.33 0.20 -0.00 -0.33 0.20 -0.33 -0.20 0.00 0.00 0.00	2 0.00 0.00 -0.19 -0.19 -0.00 0.19 0.19 0.00 0.00	2 -0.00 -0.00 0.32 0.32 0.00 -0.32 -0.32 0.00 -0.00	2 0.00 -0.31 -0.11 0.23 0.28 0.23 -0.11 -0.25 -0.33	2 0.00 -0.13 -0.05 0.09 0.12 0.09 -0.05 -0.10 -0.14	1 0.44 -0.16 -0.23 0.08 0.26 0.08 -0.23 -0.07 -0.18	0 0.00 0.28 -0.10 -0.20 0.25 -0.20 -0.10 0.21 -0.36	- -
2 C 0.16 3 C 4 C 5 C 0.15 6 C 7 C 8 C 0.12 9 N1	$\begin{array}{c} 0 \\ -0.21 \\ 0.00 \\ -0.11 \\ -0.11 \\ -0.06 \\ 0.06 \\ -0.06 \\ 0.12 \\ -0.01 \\ -0.06 \\ 0.12 \\ -0.06 \\ 0.12 \\ -0.06 \\ 0.12 \\ -0.06 \\ 0.12 \\ -0.06 \\ 0.12 \\ -0.06 \\ 0.06 \\ -0.19 \\ -0.16 \\ -0.22 \\ 0.21 \end{array}$	0           -0.00           0.13           0.02           0.18           0.03           -0.01           0.06           0.12           0.13           0.12           0.13           0.12           0.13           0.14           0.05           0.06           0.12           0.03           -0.01           0.25           0.03           0.29           0.32	$\begin{array}{c} 2\\ 0\\ -0.00\\ 0.00\\ -0.01\\ -0.10\\ -0.02\\ -0.08\\ -0.03\\ -0.10\\ -0.07\\ -0.10\\ -0.03\\ -0.10\\ -0.02\\ -0.08\\ -0.14\\ -0.02\\ -0.17\\ 0.15 \end{array}$	2 0 -0.65 -0.00 -0.32 -0.00 -0.14 0.05 -0.06 0.06 -0.03 -0.00 -0.06 0.06 -0.14 0.05 0.06 -0.14 0.05 0.05 -0.00 0.09 -0.09	a         1.000           2         0           -0.00         0.00           0.24         -0.00           0.25         0.15           0.29         -0.15           0.29         0.15           0.29         0.15           0.25         -0.15           0.26         -0.15           0.27         -0.15           0.29         -0.15           0.29         -0.15           0.29         -0.15           0.29         -0.15           0.29         -0.15           0.00         -0.03           -0.00         -0.03	$\begin{array}{c} a - 1.000 \\ 2 \\ 0 \\ 0 \\ 0.00 \\ -0.11 \\ -0.00 \\ -0.11 \\ 0.39 \\ -0.13 \\ -0.39 \\ -0.16 \\ -0.00 \\ -0.13 \\ 0.39 \\ -0.11 \\ -0.39 \\ -0.07 \\ -0.00 \\ 0.02 \\ 0.00 \end{array}$	0 - 1.03p 2 0 -0.30 0.00 -0.06 -0.18 0.08 -0.27 0.27 0.32 -0.18 0.21 -0.27 0.08 0.21 -0.27 0.08 0.27 0.19 -0.16 -0.01 0.00	$\alpha$ - 1.57 $\beta$ 2 0 -0.00 0.20 -0.32 -0.17 -0.24 0.00 -0.03 0.18 0.19 -0.07 -0.03 0.18 -0.24 0.00 0.34 0.19 -0.24 0.00 0.34 0.19 -0.04 0.05	$\alpha$ - 1.57 $\beta$ 2 0 -0.00 0.00 -0.05 0.33 -0.04 0.13 -0.00 -0.04 0.03 0.14 -0.00 -0.04 0.03 0.14 -0.00 -0.04 0.13 0.05 -0.37 -0.01 -0.01 -0.10	$\alpha$ - 1.76 $\beta$ 2 0 0.16 0.00 -0.00 0.29 -0.07 -0.26 -0.09 0.08 -0.06 0.21 -0.09 0.08 -0.07 -0.26 0.12 -0.09 0.08 -0.07 -0.26 0.12 -0.09 0.08 -0.07 -0.26 0.12 -0.09 0.08 -0.07 -0.26 0.21 -0.09 0.08 -0.09 0.08 -0.07 -0.26 0.21 -0.09 0.08 -0.09 0.08 -0.07 -0.26 0.21 -0.09 0.08 -0.07 -0.26 0.21 -0.09 0.08 -0.07 -0.26 0.16 0.21 -0.09 0.08 -0.07 -0.26 0.16 0.21 -0.26 0.16 0.21 -0.26 0.12 0.09 0.08 -0.07 -0.26 0.12 0.09 0.08 -0.07 -0.26 0.12 0.09 0.08 -0.07 -0.26 0.12 0.09 0.08 -0.07 -0.26 0.12 0.09 0.08 -0.07 -0.26 0.12 0.09 0.08 -0.07 -0.26 0.12 0.09 0.08 -0.07 -0.26 0.12 -0.09 0.12 -0.26 0.12 -0.09 0.08 -0.07 -0.26 0.12 -0.30 -0.18 0.20 -0.18 0.20 -0.18 0.20	$\begin{array}{c} \alpha-2.19\beta\\ 2\\ 0\\ -0.00\\ -0.25\\ 0.19\\ 0.11\\ 0.12\\ -0.15\\ -0.04\\ -0.03\\ -0.17\\ -0.21\\ -0.04\\ -0.03\\ 0.12\\ -0.15\\ -0.13\\ 0.16\\ -0.34\\ 0.14 \end{array}$	$\begin{array}{c} \alpha-2.19\dot{\beta}\\ 2\\ 0\\ -0.00\\ 0.00\\ -0.11\\ -0.19\\ -0.07\\ -0.12\\ 0.02\\ 0.15\\ 0.10\\ 0.37\\ 0.02\\ 0.15\\ -0.07\\ -0.12\\ 0.07\\ -0.12\\ 0.07\\ -0.28\\ 0.20\\ -0.06\end{array}$	$\begin{array}{c} \alpha - 2.26\beta \\ 2 \\ 0 \\ 0.29 \\ -0.00 \\ -0.03 \\ 0.24 \\ -0.14 \\ 0.21 \\ -0.12 \\ -0.26 \\ 0.02 \\ -0.25 \\ -0.12 \\ -0.26 \\ -0.14 \\ 0.21 \\ 0.26 \\ 0.11 \\ 0.29 \\ 0.11 \end{array}$	2 0.00 -0.18 0.00 0.33 -0.20 0.33 0.20 -0.00 -0.33 0.20 -0.33 -0.20 0.00 0.00 -0.00 -0.00	2 0.00 0.00 -0.19 -0.19 -0.00 0.19 0.19 0.00 0.00	2 -0.00 -0.00 0.32 0.32 0.00 -0.32 -0.32 0.00 -0.00	2 0.00 -0.31 -0.11 0.23 0.28 0.23 -0.11 -0.25 -0.33	2 0.00 -0.13 -0.05 0.09 0.12 0.09 -0.05 -0.10 -0.14	1 0.44 -0.16 -0.23 0.08 0.26 0.08 -0.23 -0.07 -0.18	0 0.00 0.28 -0.10 -0.20 0.25 -0.20 -0.10 0.21 -0.36	-

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	0.00	0.00	0.00	0.2.	0.10	0.20	0.20	
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	
20 0	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	0.11	0.50	0.20	0.10	0.00	0.20	
24 C	-0.19	-0.25	-0.14	0.00	-0.14	-0.10	0.10	-0.22	0.27	0.12	0.13	0.10	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	0.00	0.00	0.00	0.22	0.17	0.07	0.21	
25 N1	-0.20	-0.25	-0.15	0.00	-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	
20 111	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	0.00	0.00	0.11	0.00	0.10	0.00	
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	
20 111	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	0.00	0.00	0.10	0.11	0.00	0.10	
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	0.00	0.00	0.00	0.10	0.12	0.10	0.2.	
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	0.00	0.00	0.00	0.02	0.10	0.10	0.00	
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	0.00	0.00	0.00	0.05	0.22	0.00	0.00	
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	0.2 .	0.11	0.01	0.05	0.2.	0.00	0.00	
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	
5.1.2	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	0.00	0.00	0.00	0.20	0.10	0.00	
	0.27	0.20	0.00	0.22	0.00	0.00	0.00	0.07	0.00	0.00	0.02	0.02	0.00	0.01							
Total ene	ergy : 37a ·	+ 59.32β																			
3- Electro	onic densit	ty matrix :	electron der	nsities on ar	nd between t	the atoms (t	he density r	non bonded	d atoms is ill	-defined) :	11.37			14.0	15.0	16.0	15 0	10.0	10.0	•••	
C	1 N2	2 C	3 C	4 C	5 C	6 C	7 C	8 C	9 NI	10 N2	II NI	12 NI	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 NI	26 N1	27 N2	28 NI	29 C	30 N1	31 NI	32 NI	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					<b>-</b>			
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	0.01	0.02	0.02	0.00	0.00	0.02	
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	0.00	0.00	0.02	0.00	0.07	0.00	0.00	
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	0.02	0.01	0.02	0.02	0.00	0.00	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	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
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				<b>-</b>			
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	0.00			1 00	0.00		0.00	
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	
10.0	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	0.02	0.07	0.00	0.02	0.50	0.50	
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	
10.0	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	0.00	0.00	0.00	0.50	1.00	0.00	
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	0.00	0.02	0.02	0.00	0.50	0.00	1.00	
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	
<b>a</b> 1 a	0./1	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	0.01	0.00	0.00	0.00		0.51	
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	
<b>aa</b> a	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	0.00	0.00	0.00		0 0 <b>0</b>	0 0 <b>0</b>	
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	
<b>aa</b> a	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	0.01	0.00	0.00	0.00			
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	0 0 <b>0</b>	0.01		0 0 <b>0</b>	0 0 <b>0</b>	0.07	0.07	
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	
05.311	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	0.01	0.01	0.01	0.07	0.01	0.01	
25 NI	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	0.01	0.01	0.02	0.01	0.00	0.02	0.02	
26 NI	-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	0.01	o •••	0.67	o • •	0.01	0.07	
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 NI	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