

N-Triphenylboryl- and N, N'-bis(triphenylboryl)- benzo-2,1,3-telluradiazole

Anthony F. Cozzolino, Alex Bain, Stephanie Hanhan and Ignacio Vargas-Baca*

Contribution from: Department of Chemistry, McMaster University, Hamilton, Ontario L8N4M1 Canada

Supplementary Information

Contents

S1 Synthetic Details.....	2
S2. Details of VT-NMR.....	4
S3. ¹²⁵ Te NMR of 1.....	6
S4. Computational Details	7
S5. Optimized Geometries	8
S6. Charge Analysis.....	13
S7. References.....	14

S1 Synthetic Details

General Procedures and Starting Materials. The manipulation of air-sensitive materials was performed under an atmosphere of dry nitrogen with standard Schlenk and glovebox techniques. All solvents and reagents were dried and purified by standard procedures immediately before each experiment. Benzo-2,1,3-telluradiazole¹ was prepared from *o*-phenylenediamine by reaction with TeCl₄ and BPh₃² was prepared from PhLi by reaction with BF₃ and pyrazine•BPh₃ was made from the reaction of pyrazine with BPh₃ in toluene. Melting points are uncorrected. Elemental analyses were performed on a Thermo EA1112 CHNS/O analyzer by Dr. Steve Kornic of this department. ¹H, ¹³C and ¹²⁵Te NMR spectra were acquired on Bruker Avance DRX 500 spectrometers; ¹H and ¹³C chemical shifts are reported with respect to TMS and were determined by reference to the resonances of the residual proton or the natural abundance ¹³C of the solvent, ¹²⁵Te chemical shifts are reported with respect to TeMe₂. All spectra are recorded at 303K unless otherwise specified.

Preparation of 3₂. A solution of BPh₃ (0.021g, 0.087 mmol) in 5 mL toluene was added to a suspension of **1** (0.020g, 0.087 mmol) in 5 mL toluene. The mixture was heated until dissolved. After cooling, the volume was reduced. The crystals were filtered to give a yield of 0.028g (68%); mp. 184-186°C. Anal Calcd. for Te₁N₂B₁C₂₄H₁₉: N, 5.91%; C, 60.79%; H, 4.04%. Found: N, 6.30%; C, 59.73%; H, 3.92%. Raman (cm⁻¹): 1585w, 1514m, 1436vs, 1358w, 1312vs, 1159m, 1026w, 825w, 719m, 589w, 554m, 344w, 310s, 235m. IR (cm⁻¹): 3059m, 3036m, 3005m, 2992m, 1586m, 1516m, 1486m, 1428s, 1351m, 1307w, 1261m, 1159s, 1139m, 1115w, 1068w, 1031m, 998m, 925w, 911m, 872w, 860m, 820m, 796w, 753s, 746vs, 741vs, 706vs, 640s, 618m, 609m, 584s, 548w, 480m. ¹H NMR (500 MHz, *d*₆-benzene): δ 6.95, 6.24 (broad, 4H, **1** aryl), 7.715, 7.702 (d, 6H, BPh₃ aryl), 7.315, 7.302, 7.287 (dod, 6H, BPh₃ aryl), 7.270, 7.256, 7.241 (t, 3H, BPh₃ aryl), ¹H NMR (500 MHz, *d*₆-benzene 333K): δ 7.043, 7.035, 7.030, 7.024, 6.330, 6.325, 6.316, 6.311 (4H, **1** aryl), 7.642, 7.628 (d, 6H, BPh₃ aryl), 7.268, 7.255, 7.240, 7.220 (multiplet, 9H, BPh₃ aryl), ¹H NMR (500 MHz, *d*₈-toluene): δ 7.0, 6.27 (broad, 4H, **1** aryl), 7.600, 7.597, 7.585, 7.582 (dod, 6H, BPh₃ aryl), 7.248, 7.236, 7.222, 7.206 (multiplet, 9H, BPh₃ aryl), ¹H NMR (500 MHz, *d*₈-toluene 333K): δ 7.058, 7.047, 6.378, 6.363 (4H, **1** aryl), 7.542, 7.538, 7.527, 7.523 (dod, 6H, BPh₃ aryl), 7.193, 7.180 (multiplet, 9H, BPh₃ aryl), ¹³C{¹H} NMR (250 MHz, *d*₆-benzene): δ 161.6 (aryl **1**, 4°), 130.1, 126.1 (aryl **1**, CH), 154.1 (aryl BPh₃, 4°), 135.0, 128.3, 126.7 (aryl BPh₃, CH), ¹²⁵Te (158 MHz, *d*₆-benzene): δ 2203. The X-ray quality crystals of (**1**•BPh₃)₂ were obtained by recrystallization from a saturated toluene solution.

Preparation of 2. A solution of BPh₃ (0.041g, 0.17 mmol) in 5 mL toluene was added to a suspension of **1** (0.012g, 0.053 mmol) in 5 mL toluene. The mixture was heated until dissolved. After cooling, the

solvent was removed and the resulting oily residue was treated with acetonitrile to precipitate an orange solid. The orange precipitate was filtered and rinsed with acetonitrile to give a yield of 0.012 g (31%); mp. 156-158 °C. Anal Calcd. for $\text{Te}_1\text{N}_2\text{B}_2\text{C}_{42}\text{H}_{34}$: N, 3.91%; C, 70.40%; H, 4.79%. Found: N, 3.75%; C, 70.29%; H, 4.75%. Raman (cm^{-1}): 1587w, 1516m, 1436vs, 1371m, 1305s, 1154m, 1026w, 998s, 936w, 857s, 810m, 697w, 570w, 360m, 312s, 240s. IR (cm^{-1}): 3065m, 3043m, 2995m, 1588m, 1518m, 1488m, 1428s, 1373m, 1307m, 1260m, 1141s, 1114s, 1033m, 998m, 915m, 872s, 803s, 753s, 738vs, 722vs, 701vs, 650s, 620m, 611m, 592s, 526w, 470m. ^1H NMR (500 MHz, d_6 -benzene): δ 7.080, 7.072, 7.066, 7.060, 5.949, 5.943, 5.935, 5.929 (AA'BB', 4H, **1** aryl), 7.578, 7.571, 7.565, 7.561 (dod, 12H, BPh_3 aryl), 7.159 (multiplet, 18H, BPh_3 aryl), ^1H NMR (500 MHz, d_8 -toluene): δ 7.075, 7.069, 5.997, 5.990, 5.982, 5.976 (AA'BB', 4H, **1** aryl), 7.527, 7.520, 7.513, 7.506 (dod, 12H, BPh_3 aryl), 7.143 (multiplet, 18H, BPh_3 aryl), $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (250 MHz, d_6 -benzene): δ 161.4 (aryl **1**, 4°), 130.7, 126.1 (aryl **1**, CH), 153.0 (aryl BPh_3 , 4°), 134.9, 128.3, 127.4 (aryl BPh_3 , CH), $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR (250 MHz, d_8 -toluene): δ 161.5 (aryl **1**, 4°), 130.6, 126.1 (aryl **1**, CH), 152.8 (aryl BPh_3 , 4°), 134.9, 128.3, 127.4 (aryl BPh_3 , CH), ^{125}Te (158 MHz, d_6 -benzene): δ 2188. X-ray quality crystals of $(\mathbf{1}\cdot\text{BPh}_3)_2$ were obtained by recrystallization at -34 °C from a bromobenzene/acetonitrile mixture (50:50, v/v). The crystal obtained consisted of two separate domains (multiple crystal) which were indexed separately in order to determine the two independent orientation matrices using the STOE X-Area software. The twin law relating the two domains is [0.99902 0.05955 0.00021 -0.07250 0.99805 0.02457 0.00250 -0.05363 0.99952]. The model was refined against data in HKLF5 format; the crystal contained 17% of the minor component.

S2. Details of VT-NMR

The lineshape analysis have been performed with Mexico.³

Pyrazine•BPh₃ VT NMR

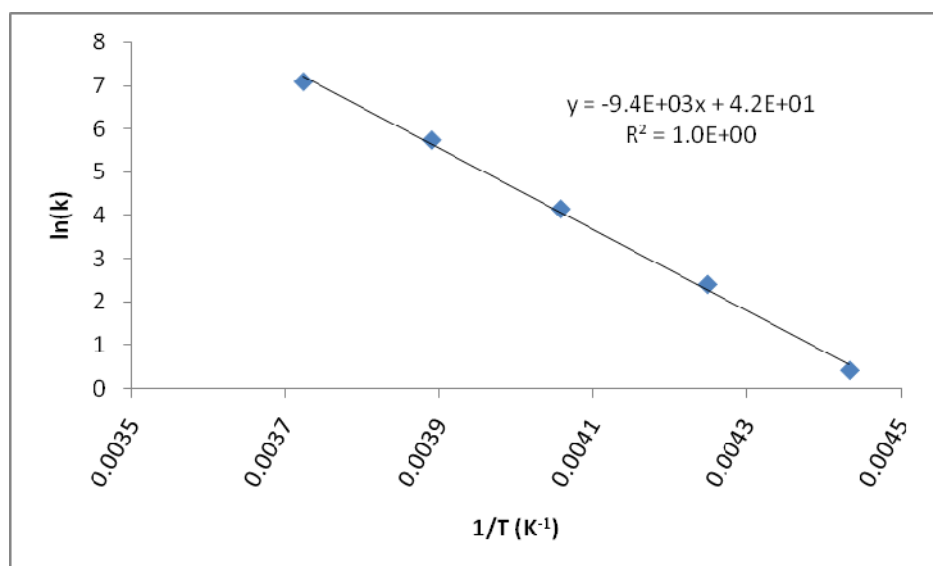
$$\text{Rate} = k[\text{Pyrazine} \cdot \text{BPh}_3]$$

Table S1. Rate data from VT NMR of Pyrazine•BPh₃.

Relative concentration [†]	Rate (s ⁻¹) 226 K	Rate (s ⁻¹) 235 K	Rate (s ⁻¹) 247 K	Rate (s ⁻¹) 257 K	Rate (s ⁻¹) 269 K	Ea (kJ/mol)
0.47	3	20	140	700	3750	83
1.3	7	40	250	1250	5000	77
6.6	13	90	550	2700	11000	76
k (L•mol ⁻¹ •s ⁻¹)	1.5	11	63	310	1200	75

[†] Relative concentration measured by integration of ¹H NMR peaks with respect to residual toluene aromatic peaks. The relative concentration can be multiplied by 1.5 x 10⁻³ mol/L to obtain an approximate concentration; this value is based off of the residual *para*-proton intensity in 99.5% *d8*-toluene.

Figure S1. Arrhenius plot of Pyrazine•BPh₃



1•BPh₃ VT NMR

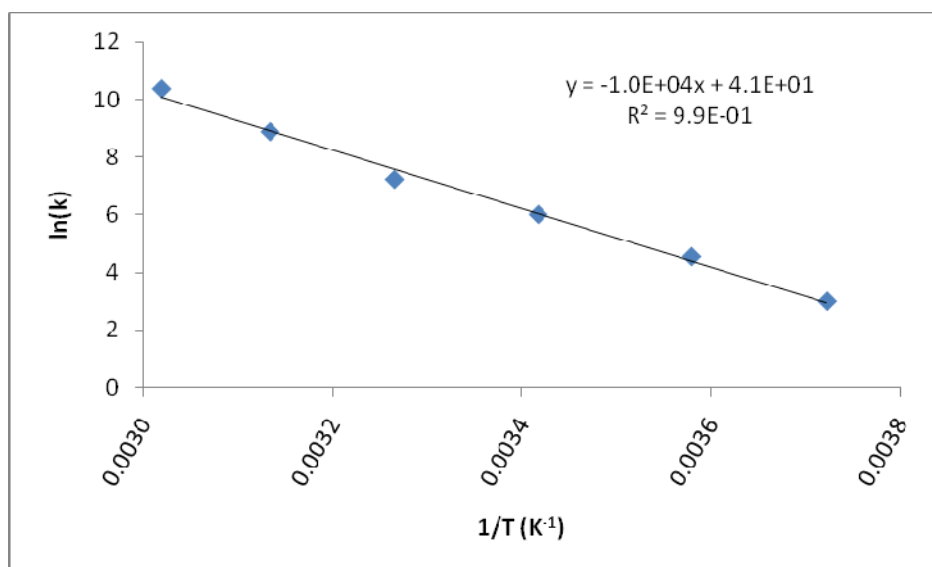
$$\text{Rate} = k[1\bullet\text{BPh}_3]$$

Table S2. Rate data from VT NMR of **1•BPh₃**.

Relative concentration†	Rate (s ⁻¹) 269 K	Rate (s ⁻¹) 279 K	Rate (s ⁻¹) 293 K	Rate (s ⁻¹) 306 K	Rate (s ⁻¹) 319	Rate (s ⁻¹) 331	Ea (kJ/mol)
0.42	13	24	85	400	1400	3500	69
0.70	15	50	250	1000	3900	12000	79
1.2	27	80	360	1500	7000	30000	82
1.3	30	120	500	1700	8000	30000	80
k (L•mol ⁻¹ •s ⁻¹)	20	94	406	1400	7200	32000	84

† Relative concentration measured by integration of ¹H NMR peaks with respect to residual toluene aromatic peaks. The relative concentration can be multiplied by 3.0 × 10⁻³ mol/L to obtain an approximate concentration; this value is based off of the residual *para*-proton intensity in 99.5% *d8*-toluene.

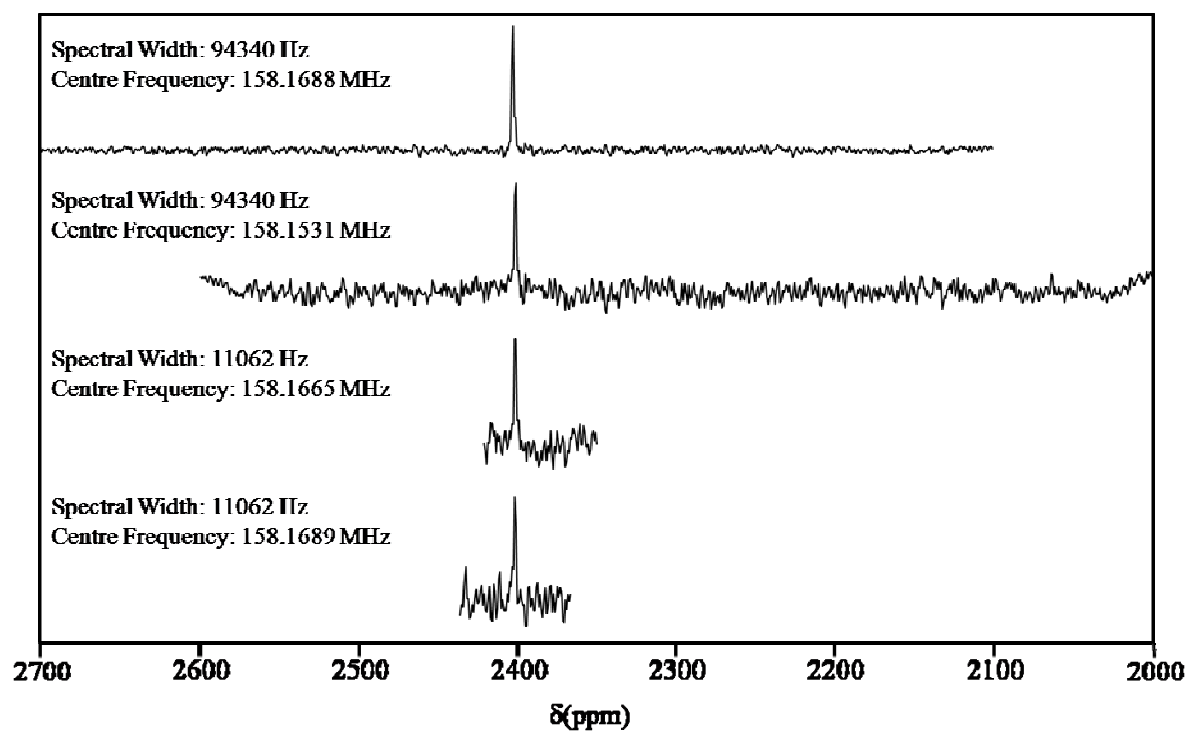
Figure S2. Arrhenius plot of Pyrazine•BPh₃



S3. ^{125}Te NMR of **1**

^{125}Te NMR of **1** were run in d_6 -DMSO at 303 K. The chemical shifts were reported with respect to neat TeMe_2 . The chemical shift of **1** appeared at 2401 ppm irrespective of spectral width or centre frequency as illustrated in Figure S3.

Figure S3. ^{125}Te NMR of **1** in d_6 -DMSO at 303 K



S4. Computational Details

The structures considered in this study were fully optimized using the ADF DFT package (version 2005.01).⁴⁻⁶ The Adiabatic Local Density Approximation (ALDA) was used for the exchange-correlation kernel^{7, 8} and the differentiated static LDA expression was used with the Vosko-Wilk-Nusair parametrization.⁹ The calculation of model geometries was gradient-corrected with the exchange and correlation functionals of the gradient correction proposed in 1991 by Perdew and Wang (PW91).^{10, 11} Preliminary geometry optimizations were conducted using a small double- ζ basis set with frozen cores corresponding to the configuration of the preceding noble gas and no polarization functions; the resulting structures were refined using a triple- ζ all-electron basis set with one polarization function and applying the Zero Order Relativistic Approximation (ZORA)¹²⁻¹⁶ formalism with the specially adapted basis sets. The C_i or C_{2v} point groups were used as a symmetry constraint for each adduct, higher symmetry constraints led to higher energy geometries. The energies were decomposed into Pauli repulsive, electrostatic and orbital contributions.^{17, 18} Single point calculations were performed with the exchange correlation functionals proposed by Becke and Perdew (BP86)^{10, 19} as well as B3LYP²⁰⁻²² for hybrid DFT, varying the basis set size (DZ, DZP, TZP and TZ2P). The charges for each system were analyzed using Mulliken population analysis, Hirshfeld Charges, Voronoi Deformation Densities, Natural Population Analysis and Atoms-in-molecules charges.

DFT geometry optimization (ADF, PW91, ZORA, TZP)[†] reproduced all internal bond lengths of **2** with a maximum deviation of 0.05 and 0.06 Å for the Te-N bond. The optimized geometry of **3**₂ matched the experimental within 3 σ , larger differences correspond to underestimated secondary Te-N (by 0.071 and 0.057 Å) and N2-B1 distances (by 0.04 Å) as well as overestimated Te-N bond lengths (by up to 0.045 Å).

The energy of the B-N bond and the Te-N SBIs was evaluated by breaking the appropriate bonds and calculating the energy of the constituent pieces according to equation S1. The total energy of the bond (ΔE_{total}) is comprised of the binding energy ($\Delta E_{\text{binding}}$) with corrections for the relaxation of the molecules ($\Delta E_{\text{reorganization}}$), the basis set superposition error (ΔE_{BSSE}) and the zero-point energy (ΔE_{ZPE}). The calculated values given in the manuscript do not account for the ΔE_{BSSE} and ΔE_{ZPE} , but previous work^{23, 24} suggests that these have only a small contribution.

$$\Delta E_{\text{total}} = \Delta E_{\text{binding}} + \Delta E_{\text{reorganization}} + \Delta E_{\text{BSSE}} + \Delta E_{\text{ZPE}} \quad (\text{S1})$$

S5. Optimized Geometries

1

	x	y	z
C	0.000000	-0.716486	2.542518
C	0.000000	-1.431608	1.375582
C	0.000000	-0.741125	0.116918
C	0.000000	0.741125	0.116918
C	0.000000	1.431608	1.375582
C	0.000000	0.716486	2.542518
N	0.000000	1.406825	-1.035169
N	0.000000	-1.406825	-1.035169
Te	0.000000	0.000000	-2.486163
H	0.000000	-1.243085	3.496054
H	0.000000	-2.519846	1.367326
H	0.000000	2.519846	1.367326
H	0.000000	1.243085	3.496054

1₂

	x	y	z
C	4.943862	0.599456	0.000000
C	3.704136	0.019048	0.000000
C	2.531708	0.845083	0.000000
C	2.695244	2.321732	0.000000
C	4.028823	2.860790	0.000000
C	5.109692	2.023016	0.000000
N	1.622302	3.092048	0.000000
N	1.301836	0.356356	0.000000
Te	-0.037008	1.906556	0.000000
H	5.831211	-0.032519	0.000000
H	3.589240	-1.062981	0.000000
H	4.138511	3.943805	0.000000
H	6.117984	2.435285	0.000000
C	-5.109692	-2.023016	0.000000
C	-4.028823	-2.860790	0.000000
C	-2.695244	-2.321732	0.000000
C	-2.531708	-0.845083	0.000000
C	-3.704136	-0.019048	0.000000
C	-4.943862	-0.599456	0.000000
N	-1.301836	-0.356356	0.000000
N	-1.622302	-3.092048	0.000000
Te	0.037008	-1.906556	0.000000

H	-6.117984	-2.435285	0.000000
H	-4.138511	-3.943805	0.000000
H	-3.589240	1.062981	0.000000
H	-5.831211	0.032519	0.000000

BPh₃

	x	y	z
C	0.000000	0.000000	1.567230
C	0.000000	1.205029	2.292162
C	0.000000	1.205520	3.688196
C	0.000000	0.000000	4.391934
C	0.000000	-1.205520	3.688196
C	0.000000	-1.205029	2.292162
C	1.357814	0.000000	-0.784223
C	1.985825	-1.204927	-1.146126
C	3.194753	-1.205504	-1.844332
C	3.804132	0.000000	-2.196392
C	3.194753	1.205504	-1.844332
C	1.985825	1.204927	-1.146126
C	-1.357814	0.000000	-0.784223
C	-1.985825	1.204927	-1.146126
C	-3.194753	1.205504	-1.844332
C	-3.804132	0.000000	-2.196392
C	-3.194753	-1.205504	-1.844332
C	-1.985825	-1.204927	-1.146126
B	0.000000	0.000000	-0.000534
H	0.000000	2.162165	1.766701
H	0.000000	2.152949	4.226672
H	0.000000	0.000000	5.481494
H	0.000000	-2.152949	4.226672
H	0.000000	-2.162165	1.766701
H	1.530632	-2.161887	-0.882803
H	3.661192	-2.152897	-2.113451
H	4.747628	0.000000	-2.741257
H	3.661192	2.152897	-2.113451
H	1.530632	2.161887	-0.882803
H	-1.530632	2.161887	-0.882803
H	-3.661192	2.152897	-2.113451
H	-4.747628	0.000000	-2.741257
H	-3.661192	-2.152897	-2.113451
H	-1.530632	-2.161887	-0.882803

3

	x	y	z
Te	0.050461	-0.005900	1.856883
N	1.255018	-0.006055	0.245460
N	1.811807	0.026865	2.915930
C	2.522848	0.011941	0.641821
C	3.604088	0.013947	-0.303709
H	3.351315	0.015041	-1.361868
C	4.897132	0.008594	0.139997
H	5.717372	0.002493	-0.575393
C	5.198444	0.007245	1.538725
H	6.240860	-0.004786	1.855342
C	4.214836	0.016623	2.490902
H	4.443297	0.010522	3.552988
C	2.849107	0.019923	2.076737
B	1.732969	0.017675	4.511265
C	0.134615	-0.215342	4.801978
C	-0.761343	0.880468	4.737955
H	-0.355597	1.882175	4.585453
C	-2.141224	0.723170	4.909709
H	-2.796569	1.592570	4.865668
C	-2.670852	-0.542790	5.160999
H	-3.743565	-0.671608	5.306601
C	-1.811153	-1.642611	5.249588
H	-2.214442	-2.632292	5.464523
C	-0.436198	-1.476503	5.078902
H	0.217379	-2.342750	5.174666
C	2.666577	-1.214188	5.036676
C	2.605623	-2.483768	4.427647
H	1.943723	-2.639863	3.574386
C	3.378611	-3.560668	4.868527
H	3.302281	-4.525346	4.366695
C	4.253893	-3.399114	5.945074
H	4.862990	-4.233667	6.292511
C	4.343209	-2.150951	6.563253
H	5.027797	-2.002731	7.399524
C	3.563087	-1.081792	6.111583
H	3.665177	-0.116406	6.605598
C	2.190590	1.473036	5.081575
C	2.765181	2.495910	4.312027
H	2.935958	2.347785	3.245412
C	3.132932	3.728155	4.865554

H	3.577584	4.493604	4.229685
C	2.928287	3.977015	6.222220
H	3.211318	4.935382	6.657674
C	2.345830	2.981633	7.012997
H	2.168199	3.161563	8.073577
C	1.982625	1.758477	6.446986
H	1.514820	1.004913	7.082158

3₂

	x	y	z
Te	0.004772	-0.002247	1.858935
N	1.290310	0.010844	0.283352
N	1.820038	0.020747	2.903131
C	2.564331	0.014482	0.647981
C	3.645417	0.013649	-0.292646
H	3.419824	0.016825	-1.357450
C	4.935036	0.004774	0.164192
H	5.759156	-0.002206	-0.547847
C	5.229766	0.002235	1.564332
H	6.270467	-0.007329	1.883545
C	4.238383	0.008279	2.507670
H	4.459560	-0.000209	3.570797
C	2.870215	0.014381	2.087678
B	1.748860	0.013707	4.494194
C	0.147656	-0.212166	4.811286
C	-0.749354	0.880390	4.753404
H	-0.349380	1.884328	4.602536
C	-2.132493	0.716960	4.901550
H	-2.789998	1.584989	4.850449
C	-2.663625	-0.553535	5.131117
H	-3.738454	-0.689009	5.254360
C	-1.799791	-1.648605	5.229547
H	-2.201124	-2.641411	5.435360
C	-0.422159	-1.474212	5.074983
H	0.232511	-2.340192	5.167535
C	2.679672	-1.217321	5.028075
C	2.623415	-2.488730	4.421967
H	1.965001	-2.648888	3.566297
C	3.395593	-3.562858	4.870351
H	3.322432	-4.529986	4.372177
C	4.264932	-3.397001	5.951964
H	4.873802	-4.229462	6.304652

C	4.347186	-2.147824	6.568826	H	-1.965001	2.648888	-3.566297
H	5.025022	-1.997046	7.409376	C	-3.395593	3.562858	-4.870351
C	3.567822	-1.081578	6.109677	H	-3.322432	4.529986	-4.372177
H	3.663915	-0.114103	6.601755	C	-4.264932	3.397001	-5.951964
C	2.210154	1.471300	5.062613	H	-4.873802	4.229462	-6.304652
C	2.789256	2.495271	4.298174	C	-4.347186	2.147824	-6.568826
H	2.968789	2.349333	3.232334	H	-5.025022	1.997046	-7.409376
C	3.148157	3.728186	4.856019	C	-3.567822	1.081578	-6.109677
H	3.595138	4.496622	4.224599	H	-3.663915	0.114103	-6.601755
C	2.929374	3.975270	6.210765	C	-2.210154	-1.471300	-5.062613
H	3.204302	4.934691	6.649552	C	-2.789256	-2.495271	-4.298174
C	2.343311	2.977913	6.995768	H	-2.968789	-2.349333	-3.232334
H	2.155173	3.155921	8.054716	C	-3.148157	-3.728186	-4.856019
C	1.988402	1.754629	6.425660	H	-3.595138	-4.496622	-4.224599
H	1.513549	0.999847	7.053822	C	-2.929374	-3.975270	-6.210765
Te	-0.004772	0.002247	-1.858935	H	-3.204302	-4.934691	-6.649552
N	-1.290310	-0.010844	-0.283352	C	-2.343311	-2.977913	-6.995768
N	-1.820038	-0.020747	-2.903131	H	-2.155173	-3.155921	-8.054716
C	-2.564331	-0.014482	-0.647981	C	-1.988402	-1.754629	-6.425660
C	-3.645417	-0.013649	0.292646	H	-1.513549	-0.999847	-7.053822
H	-3.419824	-0.016825	1.357450				
C	-4.935036	-0.004774	-0.164192	2			
H	-5.759156	0.002206	0.547847		x	y	z
C	-5.229766	-0.002235	-1.564332	B	-0.063022	-0.030849	-2.864006
H	-6.270467	0.007329	-1.883545	B	-0.063022	-0.030849	2.864006
C	-4.238383	-0.008279	-2.507670	C	1.422316	-0.000074	-3.541378
H	-4.459560	0.000209	-3.570797	C	-3.042221	2.530271	5.005687
C	-2.870215	-0.014381	-2.087678	C	-1.670844	2.121636	-3.050928
B	-1.748860	-0.013707	-4.494194	C	-1.145101	0.939881	-3.595666
C	-0.147656	0.212166	-4.811286	C	3.830116	-0.471679	-3.413225
C	0.749354	-0.880390	-4.753404	C	2.563648	-0.417417	-2.828128
H	0.349380	-1.884328	-4.602536	C	-3.042221	2.530271	-5.005687
C	2.132493	-0.716960	-4.901550	C	-2.551602	1.348465	-5.567484
H	2.789998	-1.584989	-4.850449	C	-1.670844	2.121636	3.050928
C	2.663625	0.553535	-5.131117	C	-2.600805	2.909888	-3.738631
H	3.738454	0.689009	-5.254360	C	-1.627196	0.570748	-4.868807
C	1.799791	1.648605	-5.229547	C	-2.600805	2.909888	3.738631
H	2.201124	2.641411	-5.435360	C	-2.582441	-3.070057	2.443037
C	0.422159	1.474212	-5.074983	C	-2.051312	-1.786682	2.610380
H	-0.232511	2.340192	-5.167535	C	-0.661429	-1.563953	2.779370
C	-2.679672	1.217321	-5.028075	C	-0.363026	-3.997979	2.638574
C	-2.623415	2.488730	-4.421967	C	-1.736429	-4.180256	2.449896

C	0.159013	-2.713808	2.803060
C	2.887860	0.314413	-5.482289
C	3.998563	-0.109262	-4.751753
C	-2.551602	1.348465	5.567484
C	-1.145101	0.939881	3.595666
C	1.627788	0.372579	-4.881101
C	0.648812	1.428573	0.731137
C	1.242344	2.521758	1.431206
C	3.998563	-0.109262	4.751753
C	2.887860	0.314413	5.482289
C	0.159013	-2.713808	-2.803060
C	-0.661429	-1.563953	-2.779370
C	1.242344	2.521758	-1.431206
C	0.648812	1.428573	-0.731137
C	2.563648	-0.417417	2.828128
C	1.796931	3.549070	0.714032
C	1.796931	3.549070	-0.714032
C	-2.582441	-3.070057	-2.443037
C	1.627788	0.372579	4.881101
C	-1.736429	-4.180256	-2.449896
C	-1.627196	0.570748	4.868807
C	1.422316	-0.000074	3.541378
C	-2.051312	-1.786682	-2.610380
C	-0.363026	-3.997979	-2.638574
C	3.830116	-0.471679	3.413225
H	0.302078	-4.861141	2.662239
H	1.230907	-2.590927	2.958977
H	2.469458	-0.707215	1.779970
H	4.687889	-0.794094	2.822719
H	-1.362681	2.452164	2.058492
H	-2.895417	1.026521	6.550761
H	-3.767488	3.140317	5.544477
H	3.000450	0.606872	6.526702
H	-1.280968	-0.360753	5.318553
H	-2.981548	3.821130	3.276951
H	4.983932	-0.151503	5.215717
H	0.782996	0.722178	5.474090
H	-3.656537	-3.200473	-2.313388
H	-2.144528	-5.182836	-2.322832
H	2.255815	4.382996	1.242579
H	-2.895417	1.026521	-6.550761
H	-1.280968	-0.360753	-5.318553

H	-2.725470	-0.928816	-2.626013
H	2.255815	4.382996	-1.242579
H	1.248743	2.508856	-2.517014
H	0.302078	-4.861141	-2.662239
H	1.230907	-2.590927	-2.958977
H	1.248743	2.508856	2.517014
H	0.782996	0.722178	-5.474090
H	3.000450	0.606872	-6.526702
H	4.983932	-0.151503	-5.215717
H	-2.144528	-5.182836	2.322832
H	-3.656537	-3.200473	2.313388
H	-1.362681	2.452164	-2.058492
H	-2.981548	3.821130	-3.276951
H	-3.767488	3.140317	-5.544477
H	-2.725470	-0.928816	2.626013
H	2.469458	-0.707215	-1.779970
H	4.687889	-0.794094	-2.822719
N	0.086799	0.370552	-1.325025
N	0.086799	0.370552	1.325025
Te	-0.622545	-1.032186	0.000000

Pyrazine

	x	y	z
N	-3.00945	-3.09441	-0.33695
C	-1.92711	-3.34207	0.41316
C	-0.99177	-2.35209	0.722608
N	-1.11412	-1.0899	0.28968
C	-2.19657	-0.84321	-0.46134
C	-3.13238	-1.83217	-0.7705
H	-1.80018	-4.36234	0.779072
H	-0.11939	-2.58347	1.336397
H	-2.32236	0.176571	-0.8294
H	-4.0046	-1.60189	-1.38453

Pyrazine•BPh₃

	x	y	z
N	-3.01062	-3.09064	-0.33041
C	-1.92221	-3.3398	0.410817
C	-0.97913	-2.3659	0.729612
N	-1.1273	-1.09825	0.29358
C	-2.20522	-0.83311	-0.47621
C	-3.1288	-1.82867	-0.77228

B	0.019219	0.059285	0.531157
C	-0.72468	1.492085	0.732693
C	0.900547	-0.0585	-0.84182
C	0.859043	-0.24504	1.890679
C	1.944173	-0.99572	-0.96126
C	2.694746	-1.12315	-2.13261
C	2.409805	-0.31647	-3.2373
C	1.36195	0.602751	-3.158
C	0.620413	0.720829	-1.9788
C	-0.02102	2.677298	0.439509
C	-0.55317	3.940756	0.699851
C	-1.82407	4.065706	1.267901
C	-2.54057	2.910422	1.586552
C	-1.98976	1.651191	1.330477
C	0.270977	-0.70684	3.085988
C	0.990463	-0.80824	4.279888
C	2.332825	-0.42385	4.324106
C	2.938462	0.058491	3.162257
C	2.211883	0.139055	1.972855
H	-1.79174	-4.3587	0.775084
H	-0.10249	-2.56749	1.339704
H	-2.30368	0.189105	-0.8294
H	-3.99872	-1.59451	-1.38598
H	2.194797	-1.62816	-0.10815
H	3.506708	-1.84925	-2.18065
H	2.998189	-0.40478	-4.15043
H	1.123755	1.235619	-4.01285
H	-0.18254	1.458114	-1.93798
H	0.975883	2.606941	0.003279
H	0.029238	4.831231	0.461976
H	-2.24552	5.050265	1.469076
H	-3.52659	2.987479	2.045781
H	-2.5718	0.774169	1.625219
H	-0.78874	-0.97325	3.105482
H	0.496916	-1.16836	5.182592
H	2.895653	-0.4876	5.255173
H	3.979993	0.379944	3.180795
H	2.708487	0.526421	1.083142

S6. Charge Analysis
1 (PW91)

		HIRSHFELD				VORONOI DD				BADER				MULLIKEN			
		DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P
1	C	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.07	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.03	0.00	-0.01	-0.27	0.02	0.18	0.20
2	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.04	-0.07	-0.06	-0.06	-0.05	-0.03	0.00	0.05	0.00	-0.18	0.06	0.18	0.20
3	C	0.00	0.01	0.03	0.03	0.01	0.03	0.04	0.04	0.19	0.38	0.41	0.41	0.01	0.10	0.13	0.13
4	C	0.00	0.01	0.03	0.03	0.01	0.03	0.04	0.04	0.19	0.38	0.41	0.41	0.01	0.10	0.18	0.13
5	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.04	-0.07	-0.06	-0.06	-0.05	-0.03	0.00	0.05	0.00	-0.18	0.06	0.18	0.20
6	C	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.07	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.03	0.00	-0.01	-0.27	0.02	0.13	0.20
7	N	-0.22	-0.22	-0.23	-0.22	-0.20	-0.21	-0.23	-0.23	-0.73	-0.93	-0.95	-0.96	-0.58	-0.62	-0.58	-0.41
8	N	-0.22	-0.22	-0.23	-0.22	-0.20	-0.21	-0.23	-0.23	-0.73	-0.93	-0.95	-0.96	-0.58	-0.62	-0.58	-0.41
9	Te	0.41	0.39	0.37	0.35	0.33	0.34	0.32	0.32	0.92	0.96	0.97	0.98	0.90	0.90	0.82	0.49
10	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.08	0.06	0.06	0.06	0.08	0.04	0.03	0.02	0.28	-0.01	-0.15	-0.19
11	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.09	0.07	0.07	0.07	0.10	0.05	-0.02	0.05	0.29	0.00	-0.17	-0.17
12	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.09	0.07	0.07	0.07	0.10	0.05	-0.02	0.05	0.29	0.00	-0.15	-0.17
13	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.08	0.06	0.06	0.06	0.08	0.04	0.03	0.02	0.28	-0.01	-0.17	-0.19
	Te	0.41	0.39	0.37	0.35	0.33	0.34	0.32	0.32	0.92	0.96	0.97	0.98	0.90	0.90	0.82	0.49
	N	-0.22	-0.22	-0.23	-0.22	-0.20	-0.21	-0.23	-0.23	-0.73	-0.93	-0.95	-0.96	-0.58	-0.62	-0.58	-0.41
	N	-0.22	-0.22	-0.23	-0.22	-0.20	-0.21	-0.23	-0.23	-0.73	-0.93	-0.95	-0.96	-0.58	-0.62	-0.58	-0.41
	C ₆ H ₄	0.04	0.05	0.09	0.09	0.07	0.09	0.13	0.13	0.55	0.89	0.93	0.95	0.25	0.35	0.33	0.33

1 (B3LYP)

		HIRSHFELD				VORONOI DD				BADER				MULLIKEN			
		DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P
1	C	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.07	-0.05	-0.05	-0.05	-0.06	-0.02	0.01	-0.02	-0.26	0.03	0.10	0.07
2	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.06	-0.06	-0.06	-0.02	0.01	0.41	0.01	-0.18	0.07	0.19	0.08
3	C	0.01	0.02	0.03	0.03	0.01	0.04	0.05	0.05	0.21	0.40	-0.02	0.43	0.03	0.13	0.09	0.17
4	C	0.01	0.02	0.03	0.03	0.01	0.04	0.05	0.05	0.21	0.40	0.01	0.43	0.03	0.13	0.10	0.17
5	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.06	-0.06	-0.06	-0.02	0.01	0.41	0.01	-0.18	0.07	0.19	0.08
6	C	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.07	-0.05	-0.05	-0.05	-0.06	-0.02	-0.02	-0.02	-0.26	0.03	0.09	0.07
7	N	-0.24	-0.23	-0.24	-0.23	-0.21	-0.23	-0.24	-0.24	-0.76	-0.95	-0.98	-1.00	-0.61	-0.66	-0.62	-0.46
8	N	-0.24	-0.23	-0.24	-0.23	-0.21	-0.23	-0.24	-0.24	-0.76	-0.95	-0.98	-1.00	-0.61	-0.66	-0.62	-0.46
9	Te	0.41	0.40	0.39	0.37	0.33	0.34	0.33	0.33	0.95	0.98	1.00	1.01	0.92	0.92	0.84	0.53
10	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.08	0.06	0.06	0.06	0.07	0.03	0.05	0.03	0.26	-0.02	-0.09	-0.07
11	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.09	0.07	0.08	0.07	0.09	0.05	0.03	0.05	0.28	-0.01	-0.09	-0.06
12	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.09	0.07	0.08	0.07	0.09	0.05	0.05	0.05	0.28	-0.01	-0.09	-0.06
13	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.08	0.06	0.06	0.06	0.07	0.03	0.03	0.03	0.26	-0.02	-0.09	-0.07
Te		0.41	0.40	0.39	0.37	0.33	0.34	0.33	0.33	0.95	0.98	1.00	1.01	0.92	0.92	0.84	0.53
N		-0.24	-0.23	-0.24	-0.23	-0.21	-0.23	-0.24	-0.24	-0.76	-0.95	-0.98	-1.00	-0.61	-0.66	-0.62	-0.46
N		-0.24	-0.23	-0.24	-0.23	-0.21	-0.23	-0.24	-0.24	-0.76	-0.95	-0.98	-1.00	-0.61	-0.66	-0.62	-0.46
C ₆ H ₄		0.06	0.07	0.10	0.10	0.09	0.11	0.14	0.14	0.58	0.93	0.97	0.99	0.29	0.40	0.40	0.39

1₂ (PW91)

		HIRSHFELD				VORONOI DD				BADER				MULLIKEN			
		DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P
1	C	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.06	-0.05	-0.04	-0.04	-0.06	-0.02	-0.02	-0.01	-0.26	0.03	0.19	0.21
2	C	-0.06	-0.06	-0.05	-0.05	-0.08	-0.07	-0.07	-0.06	-0.04	-0.01	-0.01	0.00	-0.21	0.05	0.15	0.18
3	C	0.01	0.02	0.03	0.03	0.01	0.03	0.05	0.05	0.26	0.40	0.43	0.44	0.11	0.16	0.25	0.20
4	C	0.00	0.01	0.03	0.03	0.00	0.02	0.04	0.04	0.21	0.40	0.44	0.45	0.01	0.12	0.13	0.13
5	C	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.03	0.00	-0.03	-0.02	-0.18	0.06	0.19	0.21
6	C	-0.05	-0.05	-0.04	-0.04	-0.07	-0.06	-0.05	-0.05	-0.08	-0.04	-0.03	-0.02	-0.27	0.02	0.18	0.19
7	N	-0.24	-0.23	-0.24	-0.23	-0.22	-0.23	-0.24	-0.24	-0.77	-0.96	-0.99	-0.99	-0.59	-0.63	-0.59	-0.43
8	N	-0.20	-0.19	-0.20	-0.19	-0.18	-0.18	-0.19	-0.19	-0.88	-1.01	-1.05	-1.06	-0.75	-0.76	-0.75	-0.52
9	Te	0.41	0.39	0.36	0.34	0.32	0.32	0.30	0.30	1.05	1.07	1.09	1.08	1.02	0.98	0.95	0.59
10	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.08	0.06	0.06	0.06	0.08	0.04	0.03	0.02	0.28	-0.01	-0.18	-0.20
11	H	0.05	0.04	0.04	0.04	0.10	0.08	0.08	0.08	0.08	0.04	0.04	0.04	0.28	-0.02	-0.18	-0.19
12	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.09	0.07	0.07	0.07	0.10	0.06	0.05	0.05	0.29	0.01	-0.16	-0.18
13	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.08	0.06	0.06	0.06	0.09	0.04	0.03	0.02	0.27	-0.01	-0.17	-0.19
14	C	-0.05	-0.05	-0.04	-0.04	-0.07	-0.06	-0.05	-0.05	-0.08	-0.04	-0.03	-0.02	-0.27	0.02	0.18	0.19
15	C	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.03	0.00	-0.03	-0.02	-0.18	0.06	0.19	0.21
16	C	0.00	0.01	0.03	0.03	0.00	0.02	0.04	0.04	0.21	0.40	0.44	0.45	0.01	0.12	0.13	0.13
17	C	0.01	0.02	0.03	0.03	0.01	0.03	0.05	0.05	0.26	0.40	0.43	0.44	0.11	0.16	0.25	0.20
18	C	-0.06	-0.06	-0.05	-0.05	-0.08	-0.07	-0.07	-0.06	-0.04	-0.01	-0.01	0.00	-0.21	0.05	0.15	0.18
19	C	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.06	-0.05	-0.04	-0.04	-0.06	-0.02	-0.02	-0.01	-0.26	0.03	0.19	0.21
20	N	-0.20	-0.19	-0.20	-0.19	-0.18	-0.18	-0.19	-0.19	-0.88	-1.01	-1.05	-1.06	-0.75	-0.76	-0.75	-0.52
21	N	-0.24	-0.23	-0.24	-0.23	-0.22	-0.23	-0.24	-0.24	-0.77	-0.96	-0.99	-0.99	-0.59	-0.63	-0.59	-0.43
22	Te	0.41	0.39	0.36	0.34	0.32	0.32	0.30	0.30	1.05	1.07	1.09	1.08	1.02	0.98	0.95	0.59
23	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.08	0.06	0.06	0.06	0.09	0.04	0.03	0.02	0.27	-0.01	-0.17	-0.19
24	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.09	0.07	0.07	0.07	0.10	0.06	0.05	0.05	0.29	0.01	-0.16	-0.18
25	H	0.05	0.04	0.04	0.04	0.10	0.08	0.08	0.08	0.08	0.04	0.04	0.04	0.28	-0.02	-0.18	-0.19
26	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.08	0.06	0.06	0.06	0.08	0.04	0.03	0.02	0.28	-0.01	-0.18	-0.20
Te		0.41	0.39	0.36	0.34	0.32	0.32	0.30	0.30	1.05	1.07	1.09	1.08	1.02	0.98	0.95	0.59
N(free)		-0.24	-0.23	-0.24	-0.23	-0.22	-0.23	-0.24	-0.24	-0.77	-0.96	-0.99	-0.99	-0.59	-0.63	-0.59	-0.43
N(SBI)		-0.20	-0.19	-0.20	-0.19	-0.18	-0.18	-0.19	-0.19	-0.88	-1.01	-1.05	-1.06	-0.75	-0.76	-0.75	-0.52
C ₆ H ₄		0.04	0.04	0.08	0.08	0.08	0.09	0.14	0.14	0.60	0.90	0.95	0.97	0.32	0.41	0.39	0.36

1₂ (B3LYP)

		HIRSHFELD				VORONOI DD				BADER				MULLIKEN			
		DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P
1	C	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.06	-0.05	-0.05	-0.04	-0.05	-0.01	-0.01	0.00	-0.25	0.05	0.10	0.10
2	C	-0.06	-0.06	-0.06	-0.06	-0.08	-0.07	-0.07	-0.07	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.20	0.06	0.10	0.10
3	C	0.02	0.03	0.04	0.04	0.03	0.04	0.05	0.05	0.28	0.41	0.44	0.46	0.14	0.20	0.25	0.20
4	C	0.01	0.02	0.03	0.03	0.01	0.03	0.04	0.04	0.22	0.42	0.45	0.47	0.03	0.15	0.18	0.17
5	C	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.02	0.00	-0.01	-0.02	-0.17	0.07	0.11	0.11
6	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.07	-0.03	-0.02	-0.02	-0.26	0.03	0.10	0.10
7	N	-0.25	-0.25	-0.25	-0.25	-0.23	-0.24	-0.25	-0.25	-0.80	-0.99	-1.02	-1.03	-0.62	-0.67	-0.63	-0.47
8	N	-0.22	-0.21	-0.22	-0.21	-0.19	-0.19	-0.20	-0.20	-0.92	-1.04	-1.09	-1.10	-0.79	-0.81	-0.77	-0.56
9	Te	0.42	0.40	0.38	0.37	0.32	0.31	0.31	0.31	1.07	1.09	1.12	1.11	1.04	1.01	0.97	0.64
10	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.08	0.06	0.07	0.06	0.07	0.03	0.03	0.02	0.26	-0.02	-0.10	-0.10
11	H	0.05	0.04	0.04	0.04	0.10	0.08	0.09	0.08	0.08	0.03	0.03	0.03	0.27	-0.03	-0.11	-0.10
12	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.09	0.08	0.08	0.07	0.09	0.05	0.05	0.05	0.28	-0.01	-0.09	-0.08
13	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.08	0.06	0.06	0.06	0.08	0.03	0.03	0.02	0.26	-0.02	-0.11	-0.10
14	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.07	-0.03	-0.02	-0.02	-0.26	0.03	0.10	0.10
15	C	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.02	0.00	-0.01	-0.02	-0.17	0.07	0.11	0.11
16	C	0.01	0.02	0.03	0.03	0.01	0.03	0.04	0.04	0.22	0.42	0.45	0.47	0.03	0.15	0.18	0.17
17	C	0.02	0.03	0.04	0.04	0.03	0.04	0.05	0.05	0.28	0.41	0.44	0.46	0.14	0.20	0.25	0.20
18	C	-0.06	-0.06	-0.06	-0.06	-0.08	-0.07	-0.07	-0.07	-0.03	0.00	0.00	0.00	-0.20	0.06	0.10	0.10
19	C	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.06	-0.05	-0.05	-0.04	-0.05	-0.01	-0.01	0.00	-0.25	0.05	0.10	0.10
20	N	-0.22	-0.21	-0.22	-0.21	-0.19	-0.19	-0.20	-0.20	-0.92	-1.04	-1.09	-1.10	-0.79	-0.81	-0.77	-0.56
21	N	-0.25	-0.25	-0.25	-0.25	-0.23	-0.24	-0.25	-0.25	-0.80	-0.99	-1.02	-1.03	-0.62	-0.67	-0.63	-0.47
22	Te	0.42	0.40	0.38	0.37	0.32	0.31	0.31	0.31	1.07	1.09	1.12	1.11	1.04	1.01	0.97	0.64
23	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.08	0.06	0.06	0.06	0.08	0.03	0.03	0.02	0.26	-0.02	-0.11	-0.10
24	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.09	0.08	0.08	0.07	0.09	0.05	0.05	0.05	0.28	-0.01	-0.09	-0.08
25	H	0.05	0.04	0.04	0.04	0.10	0.08	0.09	0.08	0.08	0.03	0.03	0.03	0.27	-0.03	-0.11	-0.10
26	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.08	0.06	0.07	0.06	0.07	0.03	0.03	0.02	0.26	-0.02	-0.10	-0.10
Te		0.42	0.40	0.38	0.37	0.32	0.31	0.31	0.31	1.07	1.09	1.12	1.11	1.04	1.01	0.97	0.64
N(free)		-0.25	-0.25	-0.25	-0.25	-0.23	-0.24	-0.25	-0.25	-0.80	-0.99	-1.02	-1.03	-0.62	-0.67	-0.63	-0.47
N(SBI)		-0.22	-0.21	-0.22	-0.21	-0.19	-0.19	-0.20	-0.20	-0.92	-1.04	-1.09	-1.10	-0.79	-0.81	-0.77	-0.56
C ₆ H ₄		0.05	0.06	0.09	0.09	0.11	0.12	0.15	0.15	0.64	0.94	0.99	1.02	0.37	0.47	0.44	0.40

BPh3 (PW91)		HIRSHFELD				VORONOI DD				BADER				MULLIKEN				NPA			
		DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P
1	C	-0.07	-0.07	-0.06	-0.06	-0.10	-0.09	-0.11	-0.08	-0.48	-0.56	-0.57	-0.58	-0.37	-0.36	-0.10	-0.12	-0.38		-0.34	-0.36
2	C	-0.05	-0.04	-0.03	-0.04	-0.07	-0.05	-0.04	-0.04	-0.07	-0.03	-0.03	-0.01	-0.26	0.05	0.24	0.25	-0.23		-0.20	-0.21
3	C	-0.05	-0.04	-0.05	-0.04	-0.07	-0.05	-0.06	-0.05	-0.06	-0.03	-0.02	-0.01	-0.26	0.03	0.18	0.20	-0.23		-0.21	-0.22
4	C	-0.05	-0.05	-0.04	-0.05	-0.08	-0.06	-0.04	-0.05	-0.07	-0.04	-0.03	-0.01	-0.27	0.02	0.18	0.20	-0.24		-0.22	-0.23
5	C	-0.05	-0.04	-0.05	-0.04	-0.07	-0.05	-0.06	-0.05	-0.06	-0.03	-0.02	-0.01	-0.26	0.03	0.18	0.20	-0.23		-0.21	-0.22
6	C	-0.05	-0.04	-0.03	-0.04	-0.07	-0.05	-0.04	-0.04	-0.07	-0.03	-0.03	-0.01	-0.26	0.05	0.24	0.25	-0.23		-0.20	-0.21
7	C	-0.07	-0.07	-0.06	-0.06	-0.10	-0.09	-0.11	-0.08	-0.48	-0.55	-0.57	-0.58	-0.37	-0.36	-0.10	-0.12	-0.38		-0.34	-0.36
8	C	-0.05	-0.04	-0.03	-0.04	-0.07	-0.05	-0.04	-0.04	-0.06	-0.02	-0.02	-0.01	-0.26	0.05	0.24	0.25	-0.23		-0.20	-0.21
9	C	-0.05	-0.04	-0.05	-0.04	-0.07	-0.05	-0.06	-0.05	-0.06	-0.03	-0.02	-0.01	-0.26	0.03	0.18	0.20	-0.23		-0.21	-0.22
10	C	-0.05	-0.05	-0.04	-0.05	-0.08	-0.06	-0.04	-0.05	-0.07	-0.04	-0.03	-0.01	-0.27	0.02	0.18	0.20	-0.24		-0.22	-0.23
11	C	-0.05	-0.04	-0.05	-0.04	-0.07	-0.05	-0.06	-0.05	-0.06	-0.03	-0.02	-0.01	-0.26	0.03	0.18	0.20	-0.23		-0.21	-0.22
12	C	-0.05	-0.04	-0.03	-0.04	-0.07	-0.05	-0.04	-0.04	-0.06	-0.02	-0.02	-0.01	-0.26	0.05	0.24	0.25	-0.23		-0.20	-0.21
13	C	-0.07	-0.07	-0.06	-0.06	-0.10	-0.09	-0.11	-0.08	-0.48	-0.55	-0.57	-0.58	-0.37	-0.36	-0.10	-0.12	-0.38		-0.34	-0.36
14	C	-0.05	-0.04	-0.03	-0.04	-0.07	-0.05	-0.04	-0.04	-0.06	-0.02	-0.02	-0.01	-0.26	0.05	0.24	0.25	-0.23		-0.20	-0.21
15	C	-0.05	-0.04	-0.05	-0.04	-0.07	-0.05	-0.06	-0.05	-0.06	-0.03	-0.02	-0.01	-0.26	0.03	0.18	0.20	-0.23		-0.21	-0.22
16	C	-0.05	-0.05	-0.04	-0.05	-0.08	-0.06	-0.04	-0.05	-0.07	-0.04	-0.03	-0.01	-0.27	0.02	0.18	0.20	-0.24		-0.22	-0.23
17	C	-0.05	-0.04	-0.05	-0.04	-0.07	-0.05	-0.06	-0.05	-0.06	-0.03	-0.02	-0.01	-0.26	0.03	0.18	0.20	-0.23		-0.21	-0.22
18	C	-0.05	-0.04	-0.03	-0.04	-0.07	-0.05	-0.04	-0.04	-0.06	-0.02	-0.02	-0.01	-0.26	0.05	0.24	0.25	-0.23		-0.20	-0.21
19	B	0.20	0.20	0.13	0.20	0.17	0.16	0.09	0.15	1.49	1.69	1.78	1.81	1.07	0.94	0.30	0.35	1.05		0.93	0.99
20	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.09	0.07	0.08	0.06	0.06	0.02	0.01	0.00	0.26	-0.04	-0.22	-0.24	0.23		0.21	0.22
21	H	0.05	0.05	0.04	0.04	0.07	0.06	0.05	0.05	0.07	0.03	0.02	0.01	0.27	-0.02	-0.19	-0.21	0.24		0.22	0.23
22	H	0.05	0.05	0.05	0.04	0.07	0.06	0.05	0.05	0.07	0.04	0.02	0.01	0.27	-0.02	-0.19	-0.20	0.24		0.22	0.23
23	H	0.05	0.05	0.04	0.04	0.07	0.06	0.05	0.05	0.07	0.03	0.02	0.01	0.27	-0.02	-0.19	-0.21	0.24		0.22	0.23
24	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.09	0.07	0.08	0.06	0.06	0.02	0.01	0.00	0.26	-0.04	-0.22	-0.24	0.23		0.21	0.22
25	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.09	0.07	0.08	0.06	0.05	0.01	0.00	-0.01	0.26	-0.04	-0.22	-0.24	0.23		0.21	0.22
26	H	0.05	0.05	0.04	0.04	0.07	0.06	0.05	0.05	0.07	0.03	0.02	0.01	0.27	-0.02	-0.19	-0.21	0.24		0.22	0.23
B		0.20	0.20	0.13	0.20	0.17	0.16	0.09	0.15	1.49	1.69	1.78	1.81	1.07	0.94	0.30	0.35	1.05		0.93	0.99
Ph		-0.07	-0.07	-0.04	-0.07	-0.06	-0.05	-0.03	-0.05	-0.50	-0.56	-0.59	-0.60	-0.36	-0.31	-0.10	-0.12	-0.35		-0.31	-0.33

BPh3 (B3LYP)

		HIRSHFELD				VORONOI DD				BADER				MULLIKEN				NPA			
		DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P
1	C	-0.07	-0.07	-0.06	-0.06	-0.10	-0.10	-0.09	-0.09	-0.49	-0.56	-0.58	-0.59	-0.39	-0.36	-0.11	-0.12	-0.39		-0.35	-0.38
2	C	-0.05	-0.04	-0.05	-0.05	-0.07	-0.05	-0.05	-0.05	-0.06	-0.02	-0.02	0.00	-0.24	0.07	0.13	0.15	-0.22		-0.20	-0.20
3	C	-0.05	-0.04	-0.04	-0.04	-0.07	-0.05	-0.05	-0.05	-0.06	-0.02	-0.01	0.00	-0.24	0.04	0.12	0.14	-0.22		-0.20	-0.21
4	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.06	-0.03	-0.02	-0.01	-0.26	0.03	0.11	0.13	-0.24		-0.22	-0.23
5	C	-0.05	-0.04	-0.04	-0.04	-0.07	-0.05	-0.05	-0.05	-0.06	-0.02	-0.01	0.00	-0.24	0.04	0.12	0.14	-0.22		-0.20	-0.21
6	C	-0.05	-0.04	-0.05	-0.05	-0.07	-0.05	-0.05	-0.05	-0.06	-0.02	-0.02	0.00	-0.24	0.07	0.13	0.15	-0.22		-0.20	-0.20
7	C	-0.07	-0.07	-0.06	-0.06	-0.10	-0.10	-0.09	-0.09	-0.49	-0.56	-0.58	-0.59	-0.39	-0.36	-0.11	-0.12	-0.39		-0.35	-0.38
8	C	-0.05	-0.04	-0.05	-0.05	-0.07	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.01	-0.02	0.00	-0.24	0.07	0.13	0.15	-0.22		-0.20	-0.20
9	C	-0.05	-0.04	-0.04	-0.04	-0.07	-0.05	-0.05	-0.05	-0.06	-0.02	-0.01	0.00	-0.24	0.04	0.12	0.14	-0.22		-0.20	-0.21
10	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.06	-0.02	-0.02	-0.01	-0.26	0.03	0.11	0.13	-0.24		-0.22	-0.23
11	C	-0.05	-0.04	-0.04	-0.04	-0.07	-0.05	-0.05	-0.05	-0.06	-0.02	-0.01	0.00	-0.24	0.04	0.12	0.14	-0.22		-0.20	-0.21
12	C	-0.05	-0.04	-0.05	-0.05	-0.07	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.01	-0.02	0.00	-0.24	0.07	0.13	0.15	-0.22		-0.20	-0.20
13	C	-0.07	-0.07	-0.06	-0.06	-0.10	-0.10	-0.09	-0.09	-0.49	-0.56	-0.58	-0.59	-0.39	-0.36	-0.11	-0.12	-0.39		-0.35	-0.38
14	C	-0.05	-0.04	-0.05	-0.05	-0.07	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.01	-0.02	0.00	-0.24	0.07	0.13	0.15	-0.22		-0.20	-0.20
15	C	-0.05	-0.04	-0.04	-0.04	-0.07	-0.05	-0.05	-0.05	-0.06	-0.02	-0.01	0.00	-0.24	0.04	0.12	0.14	-0.22		-0.20	-0.21
16	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.06	-0.02	-0.02	-0.01	-0.26	0.03	0.11	0.13	-0.24		-0.22	-0.23
17	C	-0.05	-0.04	-0.04	-0.04	-0.07	-0.05	-0.05	-0.05	-0.06	-0.02	-0.01	0.00	-0.24	0.04	0.12	0.14	-0.22		-0.20	-0.21
18	C	-0.05	-0.04	-0.05	-0.05	-0.07	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.01	-0.02	0.00	-0.24	0.07	0.13	0.15	-0.22		-0.20	-0.20
19	B	0.22	0.22	0.22	0.21	0.19	0.18	0.16	0.16	1.53	1.74	1.82	1.84	1.12	0.99	0.33	0.36	1.08		0.97	1.03
20	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.09	0.07	0.07	0.06	0.04	0.01	0.01	-0.02	0.24	-0.05	-0.13	-0.15	0.23		0.20	0.21
21	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.07	0.06	0.06	0.05	0.06	0.02	0.02	0.01	0.25	-0.04	-0.12	-0.14	0.24		0.21	0.22
22	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.07	0.06	0.06	0.05	0.06	0.02	0.01	0.00	0.25	-0.04	-0.12	-0.14	0.24		0.21	0.22
23	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.07	0.06	0.06	0.05	0.06	0.02	0.02	0.01	0.25	-0.04	-0.12	-0.14	0.24		0.21	0.22
24	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.09	0.07	0.07	0.06	0.04	0.01	0.01	-0.02	0.24	-0.05	-0.13	-0.15	0.23		0.20	0.21
25	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.09	0.07	0.07	0.06	0.03	0.00	0.00	-0.01	0.24	-0.05	-0.13	-0.15	0.23		0.20	0.21
26	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.08	0.06	0.06	0.05	0.06	0.02	0.02	0.01	0.25	-0.04	-0.12	-0.14	0.24		0.21	0.22
	B	0.22	0.22	0.22	0.21	0.19	0.18	0.16	0.16	1.53	1.74	1.82	1.84	1.12	0.99	0.33	0.36	1.08		0.97	1.03
	Ph	-0.07	-0.07	-0.07	-0.07	-0.07	-0.06	-0.05	-0.05	-0.51	-0.58	-0.61	-0.61	-0.37	-0.33	-0.11	-0.12	-0.36		-0.32	-0.34

3 (PW91)

		HIRSHFELD				VORONOI DD				BADER				MULLIKEN				NPA			
		DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P
1	Te	0.51	0.50	0.47	0.46	0.41	0.41	0.39	0.39	1.06	1.08	1.10	1.09	1.07	1.06	0.95	0.59	1.20	1.13	1.14	1.25
2	N	-0.22	-0.21	-0.23	-0.22	-0.20	-0.21	-0.23	-0.23	-0.78	-0.91	-1.01	-1.03	-0.58	-0.64	-0.59	-0.42	-0.68	-0.65	-0.61	-0.67
3	N	-0.08	-0.08	-0.08	-0.08	-0.08	-0.07	-0.08	-0.08	-1.05	-1.14	-1.19	-1.20	-0.76	-0.67	-0.77	-0.53	-0.72	-0.69	-0.60	-0.64
4	C	0.01	0.02	0.03	0.03	0.01	0.03	0.04	0.04	0.23	0.37	0.45	0.47	0.01	0.14	0.12	0.13	0.15	0.16	0.10	0.09
5	C	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.07	-0.06	-0.05	-0.05	-0.02	0.01	0.00	0.01	-0.19	0.06	0.20	0.21	-0.22	-0.23	-0.20	-0.20
6	H	0.06	0.05	0.05	0.05	0.09	0.08	0.07	0.07	0.10	0.05	0.05	0.04	0.30	0.01	-0.16	-0.18	0.25	0.25	0.24	0.24
7	C	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.07	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.02	-0.01	0.00	-0.26	0.02	0.18	0.19	-0.23	-0.23	-0.21	-0.22
8	H	0.06	0.05	0.05	0.05	0.08	0.07	0.06	0.06	0.08	0.04	0.03	0.02	0.28	-0.01	-0.18	-0.19	0.25	0.25	0.23	0.23
9	C	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.05	-0.04	-0.03	-0.03	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.24	0.05	0.20	0.21	-0.19	-0.20	-0.18	-0.19
10	H	0.06	0.06	0.06	0.06	0.09	0.07	0.07	0.07	0.09	0.04	0.04	0.04	0.29	0.00	-0.18	-0.20	0.25	0.25	0.23	0.24
11	C	-0.03	-0.03	-0.03	-0.03	-0.07	-0.06	-0.05	-0.05	-0.02	0.02	0.02	0.02	-0.23	0.04	0.23	0.25	-0.23	-0.24	-0.22	-0.22
12	H	0.06	0.06	0.06	0.06	0.14	0.12	0.12	0.12	0.12	0.08	0.08	0.08	0.37	0.06	-0.15	-0.15	0.27	0.27	0.26	0.27
13	C	0.05	0.05	0.06	0.06	0.03	0.03	0.05	0.05	0.30	0.38	0.41	0.42	0.14	0.15	0.25	0.20	0.18	0.19	0.16	0.14
14	B	0.02	0.01	0.01	0.01	-0.03	-0.05	-0.05	-0.05	1.52	1.64	1.75	1.79	0.84	0.68	0.92	0.81	0.63	0.60	0.38	0.37
15	C	-0.07	-0.07	-0.06	-0.06	-0.09	-0.09	-0.08	-0.08	-0.46	-0.51	-0.51	-0.51	-0.42	-0.41	-0.44	-0.36	-0.33	-0.33	-0.22	-0.24
16	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.06	-0.05	-0.04	-0.04	-0.11	-0.04	-0.06	-0.06	-0.31	0.00	0.20	0.23	-0.25	-0.25	-0.23	-0.23
17	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.11	0.09	0.09	0.09	0.08	0.03	0.03	0.03	0.32	0.03	-0.17	-0.19	0.25	0.25	0.24	0.24
18	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.05	-0.08	-0.03	-0.03	-0.02	-0.25	0.03	0.19	0.20	-0.23	-0.24	-0.23	-0.24
19	H	0.05	0.05	0.04	0.04	0.07	0.06	0.05	0.05	0.07	0.03	0.02	0.01	0.27	-0.02	-0.19	-0.21	0.24	0.24	0.22	0.23
20	C	-0.05	-0.04	-0.04	-0.04	-0.07	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.02	-0.01	0.00	-0.27	0.01	0.18	0.19	-0.23	-0.24	-0.21	-0.22
21	H	0.05	0.05	0.04	0.04	0.07	0.06	0.05	0.05	0.07	0.02	0.02	0.00	0.27	-0.02	-0.19	-0.20	0.24	0.24	0.22	0.23
22	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.06	-0.05	-0.05	-0.08	-0.03	-0.02	-0.01	-0.26	0.03	0.17	0.19	-0.23	-0.23	-0.22	-0.23
23	H	0.05	0.05	0.05	0.04	0.07	0.06	0.05	0.05	0.08	0.03	0.02	0.00	0.27	-0.02	-0.19	-0.21	0.24	0.24	0.22	0.23
24	C	-0.05	-0.05	-0.04	-0.04	-0.06	-0.05	-0.04	-0.04	-0.08	-0.03	-0.03	-0.03	-0.25	0.06	0.28	0.29	-0.21	-0.21	-0.21	-0.21
25	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.10	0.08	0.08	0.07	0.09	0.04	0.03	0.03	0.32	0.03	-0.20	-0.21	0.25	0.25	0.23	0.24
26	C	-0.07	-0.07	-0.06	-0.06	-0.11	-0.11	-0.10	-0.10	-0.42	-0.47	-0.49	-0.49	-0.33	-0.35	-0.28	-0.27	-0.30	-0.30	-0.21	-0.22
27	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.07	-0.06	-0.06	-0.09	-0.03	-0.04	-0.04	-0.30	0.02	0.22	0.23	-0.24	-0.25	-0.23	-0.23
28	H	0.03	0.03	0.03	0.03	0.08	0.06	0.06	0.06	0.04	0.00	-0.01	-0.01	0.26	-0.03	-0.23	-0.23	0.22	0.23	0.20	0.21
29	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.07	-0.03	-0.02	-0.01	-0.25	0.03	0.18	0.19	-0.23	-0.24	-0.22	-0.23
30	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.04	0.04	0.05	0.02	0.01	0.00	0.26	-0.03	-0.20	-0.22	0.23	0.24	0.21	0.22
31	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.07	-0.02	-0.02	-0.01	-0.28	0.01	0.17	0.19	-0.24	-0.25	-0.23	-0.23

32	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.04	0.04	0.06	0.01	0.01	0.00	0.26	-0.03	-0.20	-0.21	0.23	0.24	0.21	0.22
33	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.05	-0.07	-0.03	-0.02	-0.01	-0.26	0.03	0.17	0.19	-0.23	-0.24	-0.22	-0.23
34	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.04	0.04	0.06	0.02	0.01	0.00	0.26	-0.03	-0.20	-0.22	0.23	0.24	0.21	0.22
35	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.05	-0.08	-0.03	-0.04	-0.03	-0.28	0.04	0.24	0.25	-0.22	-0.22	-0.22	-0.22
36	H	0.03	0.03	0.03	0.03	0.09	0.07	0.07	0.07	0.07	0.03	0.03	0.02	0.31	0.01	-0.21	-0.21	0.24	0.24	0.22	0.23
37	C	-0.07	-0.07	-0.06	-0.06	-0.11	-0.11	-0.10	-0.10	-0.44	-0.49	-0.50	-0.51	-0.34	-0.35	-0.28	-0.27	-0.30	-0.30	-0.21	-0.21
38	C	-0.06	-0.06	-0.06	-0.06	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.09	-0.03	-0.03	-0.03	-0.28	0.04	0.24	0.25	-0.24	-0.24	-0.23	-0.23
39	H	0.02	0.02	0.02	0.02	0.09	0.07	0.07	0.06	0.05	0.01	0.00	0.00	0.29	-0.01	-0.24	-0.24	0.22	0.23	0.21	0.22
40	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.08	-0.04	-0.03	-0.01	-0.26	0.03	0.17	0.19	-0.23	-0.24	-0.22	-0.23
41	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.04	0.04	0.06	0.02	0.01	-0.01	0.26	-0.03	-0.20	-0.22	0.23	0.24	0.21	0.22
42	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.08	-0.03	-0.02	0.00	-0.28	0.01	0.17	0.18	-0.25	-0.25	-0.23	-0.24
43	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.04	0.04	0.06	0.01	0.01	-0.01	0.26	-0.03	-0.20	-0.21	0.23	0.24	0.21	0.22
44	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.07	-0.03	-0.02	-0.01	-0.26	0.03	0.18	0.19	-0.23	-0.24	-0.22	-0.23
45	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.04	0.04	0.06	0.02	0.01	0.00	0.26	-0.03	-0.20	-0.22	0.23	0.24	0.21	0.22
46	C	-0.05	-0.04	-0.04	-0.04	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.08	-0.02	-0.03	-0.02	-0.30	0.02	0.22	0.23	-0.23	-0.23	-0.22	-0.22
47	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.10	0.08	0.08	0.07	0.07	0.02	0.01	0.00	0.29	0.00	-0.20	-0.21	0.24	0.24	0.22	0.23
Te		0.51	0.50	0.47	0.46	0.41	0.41	0.39	0.39	1.06	1.08	1.10	1.09	1.07	1.06	0.95	0.59	1.20	1.13	1.14	1.25
N(B)		-0.08	-0.08	-0.08	-0.08	-0.08	-0.07	-0.08	-0.08	-1.05	-1.14	-1.19	-1.20	-0.76	-0.67	-0.77	-0.53	-0.72	-0.69	-0.60	-0.64
N(free)		-0.22	-0.21	-0.23	-0.22	-0.20	-0.21	-0.23	-0.23	-0.78	-0.91	-1.01	-1.03	-0.58	-0.64	-0.59	-0.42	-0.68	-0.65	-0.61	-0.67
C ₆ H ₄		0.15	0.16	0.19	0.18	0.19	0.20	0.23	0.22	0.77	0.96	1.05	1.09	0.45	0.52	0.51	0.46	0.48	0.49	0.39	0.38
B		0.02	0.01	0.01	0.01	-0.03	-0.05	-0.05	-0.05	1.52	1.64	1.75	1.79	0.84	0.68	0.92	0.81	0.63	0.60	0.38	0.37
Ph _a		-0.10	-0.10	-0.08	-0.09	-0.02	-0.01	0.01	0.00	-0.49	-0.52	-0.55	-0.55	-0.32	-0.30	-0.36	-0.27	-0.27	-0.26	-0.19	-0.20
Ph _b		-0.14	-0.14	-0.14	-0.14	-0.14	-0.13	-0.14	-0.13	-0.52	-0.55	-0.58	-0.59	-0.35	-0.33	-0.33	-0.32	-0.31	-0.31	-0.25	-0.24
Ph _c		-0.14	-0.14	-0.14	-0.14	-0.14	-0.13	-0.13	-0.13	-0.53	-0.56	-0.59	-0.60	-0.35	-0.33	-0.34	-0.33	-0.32	-0.32	-0.25	-0.25

3 (B3LYP)

		HIRSHFELD				VORONOI DD				BADER				MULLIKEN				NPA			
		DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P
1	Te	0.54	0.52	0.52	0.50	0.41	0.42	0.41	0.41	1.10	1.11	1.14	1.13	1.11	1.10	0.98	0.66	1.15	1.16	1.28	
2	N	-0.23	-0.23	-0.24	-0.23	-0.21	-0.22	-0.23	-0.23	-0.80	-0.96	-1.04	-1.06	-0.61	-0.68	-0.62	-0.46	-0.67	-0.63	-0.68	
3	N	-0.10	-0.10	-0.10	-0.10	-0.09	-0.09	-0.09	-0.10	-1.08	-1.17	-1.22	-1.24	-0.83	-0.75	-0.59	-0.42	-0.71	-0.63	-0.67	
4	C	0.02	0.03	0.04	0.04	0.02	0.04	0.04	0.05	0.23	0.40	0.46	0.48	0.03	0.17	0.20	0.18	0.17	0.11	0.10	
5	C	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.07	-0.06	-0.06	-0.06	-0.01	0.03	0.02	0.03	-0.18	0.07	0.09	0.11	-0.22	-0.20	-0.20	
6	H	0.06	0.05	0.06	0.06	0.10	0.08	0.08	0.08	0.10	0.04	0.04	0.04	0.29	0.00	-0.07	-0.09	0.25	0.23	0.24	
7	C	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.07	-0.05	-0.05	-0.05	-0.06	-0.01	-0.01	-0.01	-0.25	0.03	0.09	0.08	-0.23	-0.20	-0.21	
8	H	0.06	0.05	0.05	0.05	0.09	0.07	0.07	0.07	0.07	0.03	0.02	0.03	0.27	-0.02	-0.10	-0.09	0.24	0.22	0.23	
9	C	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.05	-0.03	-0.04	-0.03	-0.03	0.01	0.00	0.00	-0.23	0.06	0.09	0.12	-0.19	-0.17	-0.18	
10	H	0.06	0.06	0.06	0.06	0.09	0.08	0.08	0.08	0.08	0.03	0.04	0.04	0.28	-0.01	-0.07	-0.09	0.25	0.22	0.23	
11	C	-0.03	-0.03	-0.03	-0.03	-0.07	-0.06	-0.06	-0.06	-0.02	0.02	0.03	0.03	-0.23	0.05	0.13	0.15	-0.23	-0.22	-0.21	
12	H	0.06	0.06	0.06	0.06	0.15	0.13	0.14	0.13	0.12	0.07	0.07	0.07	0.36	0.04	-0.04	-0.06	0.27	0.25	0.26	
13	C	0.06	0.06	0.07	0.07	0.04	0.05	0.05	0.05	0.32	0.40	0.42	0.44	0.18	0.20	0.19	0.17	0.21	0.17	0.16	
14	B	0.04	0.03	0.03	0.03	-0.01	-0.04	-0.04	-0.04	1.59	1.72	1.81	1.85	0.97	0.82	0.15	0.16	0.63	0.41	0.40	
15	C	-0.08	-0.08	-0.07	-0.07	-0.10	-0.10	-0.09	-0.09	-0.47	-0.54	-0.51	-0.51	-0.45	-0.44	-0.22	-0.16	-0.34	-0.23	-0.25	
16	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.05	-0.05	-0.05	-0.11	-0.04	-0.07	-0.07	-0.30	0.01	0.09	0.11	-0.24	-0.23	-0.23	
17	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.11	0.10	0.10	0.10	0.07	0.02	0.02	0.02	0.31	0.01	-0.07	-0.08	0.25	0.23	0.24	
18	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.07	-0.03	-0.03	-0.02	-0.25	0.04	0.12	0.13	-0.23	-0.22	-0.23	
19	H	0.05	0.04	0.05	0.05	0.07	0.06	0.06	0.05	0.06	0.02	0.02	0.01	0.26	-0.04	-0.12	-0.14	0.23	0.21	0.22	
20	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.06	-0.06	-0.05	-0.06	-0.01	-0.01	0.00	-0.26	0.02	0.07	0.08	-0.23	-0.21	-0.21	
21	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.07	0.06	0.06	0.05	0.06	0.02	0.01	0.00	0.26	-0.03	-0.09	-0.10	0.24	0.21	0.22	
22	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.07	-0.02	-0.02	-0.01	-0.25	0.04	0.11	0.11	-0.23	-0.21	-0.22	
23	H	0.05	0.04	0.05	0.05	0.07	0.06	0.06	0.05	0.06	0.02	0.01	0.00	0.26	-0.04	-0.12	-0.12	0.23	0.21	0.22	
24	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.06	-0.05	-0.05	-0.04	-0.08	-0.02	-0.03	-0.03	-0.24	0.07	0.17	0.18	-0.20	-0.20	-0.20	
25	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.10	0.09	0.09	0.09	0.08	0.03	0.03	0.03	0.31	0.01	-0.08	-0.10	0.24	0.22	0.23	
26	C	-0.07	-0.07	-0.07	-0.07	-0.12	-0.12	-0.11	-0.11	-0.43	-0.50	-0.49	-0.50	-0.36	-0.37	-0.10	-0.11	-0.31	-0.22	-0.23	
27	C	-0.06	-0.05	-0.06	-0.06	-0.09	-0.07	-0.07	-0.07	-0.09	-0.02	-0.06	-0.05	-0.28	0.04	0.11	0.13	-0.24	-0.23	-0.22	
28	H	0.03	0.03	0.03	0.03	0.09	0.07	0.07	0.07	0.03	-0.01	-0.01	-0.02	0.25	-0.05	-0.12	-0.14	0.22	0.20	0.21	
29	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.06	-0.02	-0.02	0.00	-0.24	0.05	0.12	0.13	-0.23	-0.21	-0.22	
30	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.05	0.04	0.01	0.00	-0.01	0.24	-0.05	-0.13	-0.15	0.23	0.21	0.21	

31	C	-0.06	-0.05	-0.06	-0.06	-0.08	-0.07	-0.07	-0.06	-0.06	-0.02	-0.02	-0.01	-0.27	0.02	0.05	0.07	-0.24	-0.22	-0.23
32	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.05	0.05	0.00	0.00	0.00	0.25	-0.05	-0.09	-0.11	0.23	0.21	0.22
33	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.06	-0.02	-0.02	-0.01	-0.25	0.04	0.10	0.12	-0.23	-0.21	-0.22
34	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.05	0.05	0.01	0.01	-0.01	0.25	-0.05	-0.12	-0.14	0.23	0.21	0.21
35	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.07	-0.03	-0.03	-0.03	-0.27	0.06	0.13	0.15	-0.22	-0.21	-0.21
36	H	0.03	0.03	0.03	0.03	0.09	0.08	0.08	0.08	0.06	0.02	0.02	0.02	0.30	-0.01	-0.09	-0.11	0.24	0.22	0.23
37	C	-0.07	-0.07	-0.07	-0.07	-0.12	-0.12	-0.12	-0.12	-0.46	-0.51	-0.51	-0.51	-0.36	-0.37	-0.09	-0.10	-0.31	-0.21	-0.22
38	C	-0.06	-0.06	-0.06	-0.06	-0.09	-0.07	-0.07	-0.07	-0.07	-0.03	-0.04	-0.03	-0.27	0.05	0.13	0.14	-0.23	-0.22	-0.22
39	H	0.02	0.02	0.02	0.02	0.09	0.07	0.08	0.07	0.04	-0.01	-0.01	-0.01	0.27	-0.03	-0.11	-0.13	0.22	0.20	0.21
40	C	-0.06	-0.05	-0.06	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.07	-0.03	-0.02	0.00	-0.25	0.04	0.10	0.12	-0.23	-0.21	-0.22
41	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.04	0.05	0.01	0.01	-0.01	0.24	-0.05	-0.12	-0.14	0.23	0.21	0.21
42	C	-0.06	-0.06	-0.06	-0.06	-0.09	-0.07	-0.07	-0.07	-0.07	-0.02	-0.02	-0.01	-0.27	0.02	0.05	0.08	-0.24	-0.22	-0.23
43	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.05	0.05	0.00	0.00	-0.01	0.25	-0.05	-0.10	-0.12	0.23	0.21	0.22
44	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.07	-0.06	-0.06	-0.02	-0.02	-0.01	-0.25	0.04	0.11	0.13	-0.23	-0.21	-0.22
45	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.05	0.04	0.01	0.01	-0.01	0.25	-0.05	-0.13	-0.15	0.23	0.21	0.22
46	C	-0.05	-0.04	-0.05	-0.05	-0.08	-0.07	-0.07	-0.07	-0.07	-0.02	-0.03	-0.03	-0.28	0.03	0.11	0.13	-0.22	-0.22	-0.22
47	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.10	0.09	0.09	0.08	0.06	0.01	0.01	0.00	0.28	-0.02	-0.10	-0.12	0.23	0.21	0.22
Te		0.54	0.52	0.52	0.50	0.41	0.42	0.41	0.41	1.10	1.11	1.14	1.13	1.11	1.10	0.98	0.66	1.15	1.16	1.28
N(B)		-0.10	-0.10	-0.10	-0.10	-0.09	-0.09	-0.09	-0.10	-1.08	-1.17	-1.22	-1.24	-0.83	-0.75	-0.59	-0.42	-0.71	-0.63	-0.67
N(free)		-0.23	-0.23	-0.24	-0.23	-0.21	-0.22	-0.23	-0.23	-0.80	-0.96	-1.04	-1.06	-0.61	-0.68	-0.62	-0.46	-0.67	-0.63	-0.68
C ₆ H ₄		0.18	0.19	0.20	0.20	0.22	0.24	0.25	0.25	0.81	1.02	1.10	1.14	0.51	0.59	0.52	0.47	0.53	0.42	0.42
B		0.04	0.03	0.03	0.03	-0.01	-0.04	-0.04	-0.04	1.59	1.72	1.81	1.85	0.97	0.82	0.15	0.16	0.63	0.41	0.40
Ph _a		-0.12	-0.12	-0.11	-0.11	-0.02	-0.02	0.00	0.00	-0.52	-0.55	-0.57	-0.57	-0.37	-0.35	-0.14	-0.10	-0.28	-0.21	-0.22
Ph _b		-0.15	-0.15	-0.15	-0.15	-0.15	-0.15	-0.15	-0.14	-0.54	-0.58	-0.61	-0.63	-0.39	-0.37	-0.15	-0.16	-0.32	-0.26	-0.26
Ph _c		-0.16	-0.15	-0.15	-0.15	-0.15	-0.14	-0.14	-0.14	-0.55	-0.59	-0.62	-0.63	-0.39	-0.36	-0.14	-0.16	-0.33	-0.27	-0.27

3₂ (PW91)

		HIRSHFELD				VORONOI DD				BADER				MULLIKEN				NPA			
		DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P
1	Te	0.51	0.50	0.47	0.45	0.38	0.37	0.36	0.36	1.19	1.18	1.21	1.20	1.23	1.21	1.14	0.74	1.28	1.19		
2	N	-0.19	-0.19	-0.19	-0.18	-0.17	-0.17	-0.19	-0.18	-0.93	-1.02	-1.08	-1.09	-0.80	-0.78	-0.81	-0.56	-0.79	-0.75		
3	N	-0.09	-0.09	-0.09	-0.09	-0.09	-0.08	-0.09	-0.09	-1.05	-1.15	-1.20	-1.22	-0.76	-0.67	-0.76	-0.55	-0.72	-0.68		
4	C	0.02	0.03	0.04	0.04	0.02	0.04	0.05	0.05	0.30	0.39	0.43	0.46	0.12	0.19	0.26	0.21	0.19	0.20		
5	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.07	-0.06	-0.06	-0.04	0.00	0.00	0.01	-0.22	0.04	0.17	0.20	-0.24	-0.25		
6	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.12	0.10	0.10	0.09	0.09	0.05	0.04	0.04	0.31	0.00	-0.19	-0.19	0.25	0.25		
7	C	-0.03	-0.03	-0.03	-0.03	-0.06	-0.04	-0.04	-0.04	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.26	0.04	0.19	0.20	-0.21	-0.21		
8	H	0.06	0.06	0.05	0.05	0.09	0.07	0.07	0.06	0.08	0.03	0.03	0.03	0.28	-0.01	-0.18	-0.20	0.25	0.25		
9	C	-0.03	-0.03	-0.03	-0.03	-0.06	-0.04	-0.04	-0.04	-0.05	-0.01	-0.01	-0.01	-0.24	0.05	0.19	0.20	-0.20	-0.21		
10	H	0.06	0.06	0.06	0.06	0.09	0.08	0.07	0.07	0.09	0.04	0.04	0.04	0.29	0.00	-0.18	-0.20	0.25	0.25		
11	C	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.02	0.02	0.02	0.03	-0.23	0.04	0.23	0.25	-0.22	-0.22		
12	H	0.06	0.06	0.06	0.06	0.14	0.13	0.13	0.12	0.13	0.08	0.08	0.08	0.37	0.06	-0.15	-0.16	0.27	0.27		
13	C	0.05	0.05	0.06	0.06	0.03	0.03	0.05	0.05	0.29	0.39	0.42	0.42	0.13	0.16	0.23	0.19	0.19	0.20		
14	B	0.02	0.01	0.01	0.01	-0.03	-0.06	-0.05	-0.05	1.52	1.62	1.75	1.79	0.82	0.66	0.90	0.80	0.63	0.60		
15	C	-0.07	-0.07	-0.07	-0.07	-0.10	-0.10	-0.09	-0.09	-0.44	-0.50	-0.50	-0.50	-0.41	-0.40	-0.43	-0.35	-0.33	-0.33		
16	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.05	-0.04	-0.04	-0.11	-0.04	-0.06	-0.06	-0.31	0.00	0.20	0.24	-0.25	-0.25		
17	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.11	0.09	0.09	0.09	0.08	0.03	0.03	0.02	0.32	0.02	-0.18	-0.19	0.25	0.25		
18	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.08	-0.04	-0.03	-0.02	-0.26	0.01	0.18	0.18	-0.24	-0.24		
19	H	0.05	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.04	0.07	0.02	0.02	0.00	0.27	-0.02	-0.19	-0.21	0.24	0.24		
20	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.05	-0.07	-0.03	-0.02	-0.02	-0.28	0.00	0.17	0.18	-0.24	-0.24		
21	H	0.05	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.04	0.06	0.02	0.01	0.01	0.26	-0.02	-0.19	-0.20	0.24	0.24		
22	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.06	-0.05	-0.05	-0.07	-0.03	-0.02	-0.02	-0.26	0.02	0.17	0.19	-0.23	-0.23		
23	H	0.05	0.05	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.05	0.07	0.02	0.02	0.01	0.27	-0.02	-0.20	-0.21	0.24	0.24		
24	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.04	-0.06	-0.05	-0.04	-0.04	-0.08	-0.02	-0.03	-0.03	-0.25	0.05	0.28	0.29	-0.21	-0.21		
25	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.10	0.08	0.08	0.07	0.08	0.03	0.03	0.02	0.32	0.02	-0.20	-0.21	0.24	0.25		
26	C	-0.07	-0.07	-0.06	-0.06	-0.11	-0.11	-0.10	-0.10	-0.42	-0.47	-0.49	-0.49	-0.33	-0.35	-0.28	-0.27	-0.30	-0.30		
27	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.07	-0.06	-0.06	-0.09	-0.03	-0.04	-0.04	-0.30	0.02	0.22	0.23	-0.25	-0.25		
28	H	0.03	0.03	0.03	0.03	0.08	0.06	0.06	0.05	0.04	0.00	0.00	-0.01	0.26	-0.03	-0.23	-0.23	0.23	0.23		
29	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.08	-0.03	-0.03	-0.01	-0.25	0.03	0.18	0.19	-0.23	-0.24		
30	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.04	0.04	0.06	0.02	0.01	-0.01	0.26	-0.03	-0.20	-0.22	0.23	0.24		
31	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.07	-0.02	-0.02	-0.01	-0.28	0.01	0.17	0.18	-0.24	-0.25		
32	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.04	0.04	0.06	0.01	0.00	0.00	0.26	-0.03	-0.20	-0.21	0.23	0.24		

33	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.05	-0.07	-0.03	-0.02	-0.01	-0.26	0.03	0.17	0.19	-0.23	-0.24
34	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.04	0.04	0.06	0.02	0.01	0.00	0.26	-0.03	-0.20	-0.22	0.23	0.24
35	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.05	-0.09	-0.04	-0.04	-0.03	-0.28	0.04	0.24	0.25	-0.22	-0.22
36	H	0.03	0.03	0.03	0.03	0.09	0.07	0.07	0.06	0.08	0.04	0.03	0.03	0.31	0.01	-0.21	-0.22	0.24	0.24
37	C	-0.07	-0.07	-0.06	-0.06	-0.11	-0.11	-0.10	-0.10	-0.44	-0.48	-0.50	-0.51	-0.33	-0.34	-0.28	-0.27	-0.30	-0.30
38	C	-0.06	-0.06	-0.06	-0.06	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.08	-0.03	-0.03	-0.03	-0.28	0.03	0.25	0.25	-0.24	-0.24
39	H	0.02	0.02	0.02	0.02	0.08	0.07	0.07	0.06	0.05	0.00	0.00	-0.01	0.28	-0.01	-0.24	-0.25	0.22	0.23
40	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.07	-0.03	-0.03	-0.02	-0.26	0.03	0.17	0.18	-0.23	-0.24
41	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.06	0.05	0.04	0.04	0.06	0.02	0.01	0.00	0.26	-0.03	-0.20	-0.22	0.23	0.24
42	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.07	-0.02	-0.02	-0.01	-0.28	0.01	0.17	0.18	-0.25	-0.25
43	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.04	0.04	0.06	0.01	0.00	-0.01	0.26	-0.03	-0.20	-0.21	0.23	0.24
44	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.07	-0.03	-0.02	-0.01	-0.25	0.03	0.18	0.19	-0.23	-0.24
45	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.04	0.04	0.05	0.02	0.01	0.00	0.26	-0.03	-0.20	-0.22	0.23	0.24
46	C	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.08	-0.03	-0.04	-0.03	-0.30	0.02	0.22	0.23	-0.23	-0.23
47	H	0.05	0.04	0.04	0.04	0.10	0.08	0.08	0.07	0.07	0.03	0.02	0.01	0.30	0.01	-0.20	-0.21	0.24	0.24
48	Te	0.51	0.50	0.47	0.45	0.38	0.37	0.36	0.36	1.19	1.18	1.21	1.20	1.23	1.21	1.14	0.74	1.28	1.19
49	N	-0.19	-0.19	-0.19	-0.18	-0.17	-0.17	-0.19	-0.18	-0.93	-1.02	-1.08	-1.09	-0.80	-0.78	-0.81	-0.56	-0.79	-0.75
50	N	-0.09	-0.09	-0.09	-0.09	-0.09	-0.08	-0.09	-0.09	-1.05	-1.15	-1.20	-1.22	-0.76	-0.67	-0.76	-0.55	-0.72	-0.68
51	C	0.02	0.03	0.04	0.04	0.02	0.04	0.05	0.05	0.30	0.39	0.43	0.46	0.12	0.19	0.26	0.21	0.19	0.20
52	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.07	-0.06	-0.06	-0.04	0.00	0.00	0.01	-0.22	0.04	0.17	0.20	-0.24	-0.25
53	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.12	0.10	0.10	0.09	0.09	0.05	0.04	0.04	0.31	0.00	-0.19	-0.19	0.25	0.25
54	C	-0.03	-0.03	-0.03	-0.03	-0.06	-0.04	-0.04	-0.04	-0.05	0.00	0.00	0.00	-0.26	0.04	0.19	0.20	-0.21	-0.21
55	H	0.06	0.06	0.05	0.05	0.09	0.07	0.07	0.06	0.08	0.03	0.03	0.03	0.28	-0.01	-0.18	-0.20	0.25	0.25
56	C	-0.03	-0.03	-0.03	-0.03	-0.06	-0.04	-0.04	-0.04	-0.05	-0.01	-0.01	-0.01	-0.24	0.05	0.19	0.20	-0.20	-0.21
57	H	0.06	0.06	0.06	0.06	0.09	0.08	0.07	0.07	0.09	0.04	0.04	0.04	0.29	0.00	-0.18	-0.20	0.25	0.25
58	C	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.02	0.02	0.02	0.03	-0.23	0.04	0.23	0.25	-0.22	-0.22
59	H	0.06	0.06	0.06	0.06	0.14	0.13	0.13	0.12	0.13	0.08	0.08	0.08	0.37	0.06	-0.15	-0.16	0.27	0.27
60	C	0.05	0.05	0.06	0.06	0.03	0.03	0.05	0.05	0.29	0.39	0.42	0.42	0.13	0.16	0.23	0.19	0.19	0.20
61	B	0.02	0.01	0.01	0.01	-0.03	-0.06	-0.05	-0.05	1.52	1.62	1.75	1.79	0.82	0.66	0.90	0.80	0.63	0.60
62	C	-0.07	-0.07	-0.07	-0.07	-0.10	-0.10	-0.09	-0.09	-0.44	-0.50	-0.50	-0.50	-0.41	-0.40	-0.43	-0.35	-0.33	-0.33
63	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.05	-0.04	-0.04	-0.11	-0.04	-0.06	-0.06	-0.31	0.00	0.20	0.24	-0.25	-0.25
64	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.11	0.09	0.09	0.09	0.08	0.03	0.03	0.02	0.32	0.02	-0.18	-0.19	0.25	0.25
65	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.08	-0.04	-0.03	-0.02	-0.26	0.01	0.18	0.18	-0.24	-0.24
66	H	0.05	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.04	0.07	0.02	0.02	0.00	0.27	-0.02	-0.19	-0.21	0.24	0.24
67	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.05	-0.07	-0.03	-0.02	-0.02	-0.28	0.00	0.17	0.18	-0.24	-0.24
68	H	0.05	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.04	0.06	0.02	0.01	0.01	0.26	-0.02	-0.19	-0.20	0.24	0.24

69	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.06	-0.05	-0.05	-0.07	-0.03	-0.02	-0.02	-0.26	0.02	0.17	0.19	-0.23	-0.23
70	H	0.05	0.05	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.05	0.07	0.02	0.02	0.01	0.27	-0.02	-0.20	-0.21	0.24	0.24
71	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.04	-0.06	-0.05	-0.04	-0.04	-0.08	-0.02	-0.03	-0.03	-0.25	0.05	0.28	0.29	-0.21	-0.21
72	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.10	0.08	0.08	0.07	0.08	0.03	0.03	0.02	0.32	0.02	-0.20	-0.21	0.24	0.25
73	C	-0.07	-0.07	-0.06	-0.06	-0.11	-0.11	-0.10	-0.10	-0.42	-0.47	-0.49	-0.49	-0.33	-0.35	-0.28	-0.27	-0.30	-0.30
74	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.07	-0.06	-0.06	-0.09	-0.03	-0.04	-0.04	-0.30	0.02	0.22	0.23	-0.25	-0.25
75	H	0.03	0.03	0.03	0.03	0.08	0.06	0.06	0.05	0.04	0.00	0.00	-0.01	0.26	-0.03	-0.23	-0.23	0.23	0.23
76	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.08	-0.03	-0.03	-0.01	-0.25	0.03	0.18	0.19	-0.23	-0.24
77	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.04	0.04	0.06	0.02	0.01	-0.01	0.26	-0.03	-0.20	-0.22	0.23	0.24
78	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.07	-0.02	-0.02	-0.01	-0.28	0.01	0.17	0.18	-0.24	-0.25
79	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.04	0.04	0.06	0.01	0.00	0.00	0.26	-0.03	-0.20	-0.21	0.23	0.24
80	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.05	-0.07	-0.03	-0.02	-0.01	-0.26	0.03	0.17	0.19	-0.23	-0.24
81	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.04	0.04	0.06	0.02	0.01	0.00	0.26	-0.03	-0.20	-0.22	0.23	0.24
82	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.05	-0.09	-0.04	-0.04	-0.03	-0.28	0.04	0.24	0.25	-0.22	-0.22
83	H	0.03	0.03	0.03	0.03	0.09	0.07	0.07	0.06	0.08	0.04	0.03	0.03	0.31	0.01	-0.21	-0.22	0.24	0.24
84	C	-0.07	-0.07	-0.06	-0.06	-0.11	-0.11	-0.10	-0.10	-0.44	-0.48	-0.50	-0.51	-0.33	-0.34	-0.28	-0.27	-0.30	-0.30
85	C	-0.06	-0.06	-0.06	-0.06	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.08	-0.03	-0.03	-0.03	-0.28	0.03	0.25	0.25	-0.24	-0.24
86	H	0.02	0.02	0.02	0.02	0.08	0.07	0.07	0.06	0.05	0.00	0.00	-0.01	0.28	-0.01	-0.24	-0.25	0.22	0.23
87	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.07	-0.03	-0.03	-0.02	-0.26	0.03	0.17	0.18	-0.23	-0.24
88	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.06	0.05	0.04	0.04	0.06	0.02	0.01	0.00	0.26	-0.03	-0.20	-0.22	0.23	0.24
89	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.07	-0.02	-0.02	-0.01	-0.28	0.01	0.17	0.18	-0.25	-0.25
90	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.04	0.04	0.06	0.01	0.00	-0.01	0.26	-0.03	-0.20	-0.21	0.23	0.24
91	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.07	-0.03	-0.02	-0.01	-0.25	0.03	0.18	0.19	-0.23	-0.24
92	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.04	0.04	0.05	0.02	0.01	0.00	0.26	-0.03	-0.20	-0.22	0.23	0.24
93	C	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.08	-0.03	-0.04	-0.03	-0.30	0.02	0.22	0.23	-0.23	-0.23
94	H	0.05	0.04	0.04	0.04	0.10	0.08	0.08	0.07	0.07	0.03	0.02	0.01	0.30	0.01	-0.20	-0.21	0.24	0.24
Te		0.51	0.50	0.47	0.45	0.38	0.37	0.36	0.36	1.19	1.18	1.21	1.20	1.23	1.21	1.14	0.74	1.28	1.19
N(SBI)		-0.19	-0.19	-0.19	-0.18	-0.17	-0.17	-0.19	-0.18	-0.93	-1.02	-1.08	-1.09	-0.80	-0.78	-0.81	-0.56	-0.79	-0.75
N(B)		-0.09	-0.09	-0.09	-0.09	-0.09	-0.08	-0.09	-0.09	-1.05	-1.15	-1.20	-1.22	-0.76	-0.67	-0.76	-0.55	-0.72	-0.68
C ₆ H ₄		0.16	0.17	0.19	0.19	0.23	0.24	0.27	0.26	0.82	1.00	1.06	1.09	0.55	0.56	0.57	0.52	0.52	0.53
B		0.02	0.01	0.01	0.01	-0.03	-0.06	-0.05	-0.05	1.52	1.62	1.75	1.79	0.82	0.66	0.90	0.80	0.63	0.60
Ph _a		-0.12	-0.12	-0.11	-0.11	-0.05	-0.04	-0.03	-0.03	-0.51	-0.53	-0.57	-0.57	-0.34	-0.33	-0.37	-0.29	-0.29	-0.28
Ph _b		-0.14	-0.14	-0.14	-0.14	-0.14	-0.14	-0.14	-0.14	-0.52	-0.55	-0.58	-0.59	-0.35	-0.33	-0.34	-0.32	-0.31	-0.31
Ph _c		-0.14	-0.14	-0.14	-0.14	-0.13	-0.13	-0.13	-0.13	-0.52	-0.55	-0.58	-0.60	-0.35	-0.32	-0.34	-0.33	-0.32	-0.31

3₂ (B3LYP)

		HIRSHFELD				VORONOI DD				BADER				MULLIKEN				NPA			
		DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P
1	Te	0.54	0.52	0.51	0.50	0.39	0.38	0.38	0.37	1.23	1.22	1.25	1.24	1.27	1.24	1.15	0.78	1.31			
2	N	-0.21	-0.20	-0.21	-0.20	-0.18	-0.18	-0.19	-0.19	-0.96	-1.05	-1.11	-1.13	-0.84	-0.83	-0.79	-0.56	-0.82			
3	N	-0.11	-0.10	-0.11	-0.10	-0.10	-0.10	-0.10	-0.10	-1.08	-1.19	-1.23	-1.25	-0.83	-0.75	-0.61	-0.42	-0.74			
4	C	0.03	0.04	0.05	0.05	0.03	0.05	0.05	0.05	0.31	0.41	0.45	0.47	0.15	0.23	0.24	0.20	0.20			
5	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.07	-0.07	-0.07	-0.03	0.01	0.01	0.02	-0.22	0.05	0.11	0.13	-0.24			
6	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.12	0.10	0.11	0.11	0.08	0.04	0.04	0.03	0.29	-0.02	-0.09	-0.10	0.24			
7	C	-0.03	-0.03	-0.03	-0.03	-0.06	-0.04	-0.04	-0.04	-0.03	0.01	0.01	0.00	-0.24	0.05	0.11	0.08	-0.20			
8	H	0.06	0.06	0.06	0.06	0.09	0.07	0.07	0.07	0.07	0.03	0.02	0.03	0.27	-0.02	-0.11	-0.08	0.24			
9	C	-0.02	-0.02	-0.03	-0.03	-0.06	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	0.00	0.00	-0.01	-0.23	0.06	0.11	0.08	-0.20			
10	H	0.06	0.06	0.06	0.06	0.09	0.08	0.08	0.08	0.08	0.04	0.03	0.04	0.28	-0.01	-0.10	-0.07	0.24			
11	C	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.06	-0.05	-0.06	-0.05	-0.01	0.03	0.03	0.03	-0.23	0.05	0.14	0.15	-0.21			
12	H	0.06	0.06	0.06	0.06	0.15	0.14	0.14	0.14	0.12	0.08	0.08	0.08	0.36	0.05	-0.05	-0.06	0.27			
13	C	0.06	0.06	0.07	0.07	0.04	0.04	0.05	0.05	0.32	0.41	0.43	0.44	0.17	0.20	0.19	0.17	0.21			
14	B	0.04	0.03	0.03	0.03	-0.02	-0.04	-0.04	-0.04	1.58	1.71	1.81	1.84	0.94	0.80	0.16	0.16	0.66			
15	C	-0.08	-0.08	-0.07	-0.07	-0.10	-0.10	-0.10	-0.10	-0.45	-0.52	-0.50	-0.49	-0.44	-0.43	-0.21	-0.15	-0.34			
16	C	-0.06	-0.06	-0.06	-0.06	-0.07	-0.05	-0.05	-0.05	-0.11	-0.04	-0.07	-0.07	-0.30	0.01	0.09	0.09	-0.24			
17	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.11	0.10	0.10	0.10	0.07	0.02	0.02	0.02	0.31	0.01	-0.07	-0.07	0.24			
18	C	-0.06	-0.05	-0.06	-0.06	-0.08	-0.07	-0.07	-0.06	-0.07	-0.03	-0.03	-0.02	-0.26	0.02	0.11	0.09	-0.23			
19	H	0.05	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.05	0.06	0.01	0.01	0.00	0.25	-0.04	-0.12	-0.11	0.23			
20	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.07	-0.06	-0.07	-0.02	-0.02	-0.02	-0.27	0.01	0.05	0.08	-0.24			
21	H	0.05	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.05	0.05	0.01	0.01	0.01	0.25	-0.04	-0.10	-0.11	0.23			
22	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.07	-0.02	-0.02	-0.02	-0.25	0.03	0.11	0.08	-0.23			
23	H	0.05	0.04	0.04	0.05	0.07	0.05	0.06	0.05	0.06	0.01	0.01	0.01	0.25	-0.04	-0.12	-0.10	0.23			
24	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.02	-0.03	-0.03	-0.24	0.07	0.17	0.15	-0.21			
25	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.10	0.08	0.09	0.09	0.07	0.02	0.02	0.02	0.30	0.01	-0.08	-0.08	0.24			
26	C	-0.07	-0.07	-0.07	-0.07	-0.12	-0.12	-0.11	-0.11	-0.43	-0.50	-0.49	-0.50	-0.36	-0.37	-0.10	-0.11	-0.31			
27	C	-0.06	-0.06	-0.06	-0.06	-0.09	-0.07	-0.07	-0.07	-0.09	-0.02	-0.06	-0.05	-0.28	0.04	0.11	0.12	-0.24			
28	H	0.03	0.03	0.03	0.03	0.08	0.07	0.07	0.06	0.03	-0.01	-0.01	-0.02	0.25	-0.05	-0.12	-0.14	0.22			
29	C	-0.06	-0.05	-0.06	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.07	-0.02	-0.02	-0.01	-0.24	0.05	0.11	0.13	-0.23			
30	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.04	0.05	0.01	0.00	-0.01	0.24	-0.05	-0.13	-0.14	0.23			
31	C	-0.06	-0.05	-0.06	-0.06	-0.08	-0.07	-0.07	-0.06	-0.06	-0.02	-0.02	-0.01	-0.27	0.02	0.06	0.07	-0.24			

32	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.05	0.05	0.00	0.00	-0.01	0.25	-0.05	-0.10	-0.11	0.23
33	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.06	-0.02	-0.02	-0.01	-0.25	0.04	0.10	0.12	-0.23
34	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.05	0.05	0.01	0.01	-0.01	0.25	-0.05	-0.12	-0.14	0.23
35	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.08	-0.03	-0.04	-0.03	-0.27	0.06	0.13	0.15	-0.22
36	H	0.03	0.03	0.03	0.03	0.09	0.08	0.08	0.08	0.07	0.03	0.03	0.02	0.30	-0.01	-0.09	-0.11	0.23
37	C	-0.07	-0.07	-0.07	-0.07	-0.12	-0.12	-0.11	-0.11	-0.45	-0.50	-0.50	-0.51	-0.36	-0.37	-0.09	-0.10	-0.31
38	C	-0.06	-0.06	-0.06	-0.06	-0.09	-0.07	-0.07	-0.07	-0.07	-0.02	-0.04	-0.03	-0.27	0.05	0.13	0.14	-0.24
39	H	0.02	0.02	0.02	0.02	0.09	0.07	0.08	0.07	0.03	-0.01	-0.01	-0.01	0.27	-0.03	-0.12	-0.13	0.21
40	C	-0.06	-0.05	-0.06	-0.06	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.06	-0.02	-0.02	-0.01	-0.25	0.04	0.10	0.11	-0.23
41	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.04	0.04	0.01	0.01	-0.01	0.24	-0.05	-0.13	-0.14	0.23
42	C	-0.06	-0.06	-0.06	-0.06	-0.09	-0.07	-0.07	-0.07	-0.06	-0.01	-0.01	-0.01	-0.27	0.02	0.06	0.08	-0.24
43	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.05	0.05	0.00	0.00	-0.01	0.25	-0.05	-0.10	-0.12	0.23
44	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.07	-0.06	-0.06	-0.02	-0.02	-0.01	-0.25	0.04	0.11	0.12	-0.23
45	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.05	0.04	0.01	0.01	-0.01	0.25	-0.05	-0.13	-0.14	0.23
46	C	-0.04	-0.04	-0.05	-0.05	-0.08	-0.07	-0.07	-0.07	-0.07	-0.03	-0.04	-0.03	-0.29	0.03	0.12	0.13	-0.22
47	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.10	0.09	0.09	0.08	0.06	0.02	0.02	0.01	0.28	-0.01	-0.10	-0.11	0.23
48	Te	0.54	0.52	0.51	0.50	0.39	0.38	0.38	0.37	1.23	1.22	1.25	1.24	1.27	1.24	1.15	0.78	1.31
49	N	-0.21	-0.20	-0.21	-0.20	-0.18	-0.18	-0.19	-0.19	-0.96	-1.05	-1.11	-1.13	-0.84	-0.83	-0.79	-0.56	-0.82
50	N	-0.11	-0.10	-0.11	-0.10	-0.10	-0.10	-0.10	-0.10	-1.08	-1.19	-1.23	-1.25	-0.83	-0.75	-0.61	-0.42	-0.74
51	C	0.03	0.04	0.05	0.05	0.03	0.05	0.05	0.05	0.31	0.41	0.45	0.47	0.15	0.23	0.24	0.20	0.20
52	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.07	-0.07	-0.07	-0.03	0.01	0.01	0.02	-0.22	0.05	0.11	0.13	-0.24
53	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.12	0.10	0.11	0.11	0.08	0.04	0.04	0.03	0.29	-0.02	-0.09	-0.10	0.24
54	C	-0.03	-0.03	-0.03	-0.03	-0.06	-0.04	-0.04	-0.04	-0.03	0.01	0.01	0.00	-0.24	0.05	0.11	0.08	-0.20
55	H	0.06	0.06	0.06	0.06	0.09	0.07	0.07	0.07	0.07	0.03	0.02	0.03	0.27	-0.02	-0.11	-0.08	0.24
56	C	-0.02	-0.02	-0.03	-0.03	-0.06	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	0.00	0.00	-0.01	-0.23	0.06	0.11	0.08	-0.20
57	H	0.06	0.06	0.06	0.06	0.09	0.08	0.08	0.08	0.08	0.04	0.03	0.04	0.28	-0.01	-0.10	-0.07	0.24
58	C	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.06	-0.05	-0.06	-0.05	-0.01	0.03	0.03	0.03	-0.23	0.05	0.14	0.15	-0.21
59	H	0.06	0.06	0.06	0.06	0.15	0.14	0.14	0.14	0.12	0.08	0.08	0.08	0.36	0.05	-0.05	-0.06	0.27
60	C	0.06	0.06	0.07	0.07	0.04	0.04	0.05	0.05	0.32	0.41	0.43	0.44	0.17	0.20	0.19	0.17	0.21
61	B	0.04	0.03	0.03	0.03	-0.02	-0.04	-0.04	-0.04	1.58	1.71	1.81	1.84	0.94	0.80	0.16	0.16	0.66
62	C	-0.08	-0.08	-0.07	-0.07	-0.10	-0.10	-0.10	-0.10	-0.45	-0.52	-0.50	-0.49	-0.44	-0.43	-0.21	-0.15	-0.34
63	C	-0.06	-0.06	-0.06	-0.06	-0.07	-0.05	-0.05	-0.05	-0.11	-0.04	-0.07	-0.07	-0.30	0.01	0.09	0.09	-0.24
64	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.11	0.10	0.10	0.10	0.07	0.02	0.02	0.02	0.31	0.01	-0.07	-0.07	0.24
65	C	-0.06	-0.05	-0.06	-0.06	-0.08	-0.07	-0.07	-0.06	-0.07	-0.03	-0.03	-0.02	-0.26	0.02	0.11	0.09	-0.23
66	H	0.05	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.05	0.06	0.01	0.01	0.00	0.25	-0.04	-0.12	-0.11	0.23
67	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.07	-0.06	-0.07	-0.02	-0.02	-0.02	-0.27	0.01	0.05	0.08	-0.24

68	H	0.05	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.05	0.05	0.01	0.01	0.01	0.25	-0.04	-0.10	-0.11	0.23
69	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.07	-0.02	-0.02	-0.02	-0.25	0.03	0.11	0.08	-0.23
70	H	0.05	0.04	0.04	0.05	0.07	0.05	0.06	0.05	0.06	0.01	0.01	0.01	0.25	-0.04	-0.12	-0.10	0.23
71	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.02	-0.03	-0.03	-0.24	0.07	0.17	0.15	-0.21
72	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.10	0.08	0.09	0.09	0.07	0.02	0.02	0.02	0.30	0.01	-0.08	-0.08	0.24
73	C	-0.07	-0.07	-0.07	-0.07	-0.12	-0.12	-0.11	-0.11	-0.43	-0.50	-0.49	-0.50	-0.36	-0.37	-0.10	-0.11	-0.31
74	C	-0.06	-0.06	-0.06	-0.06	-0.09	-0.07	-0.07	-0.07	-0.09	-0.02	-0.06	-0.05	-0.28	0.04	0.11	0.12	-0.24
75	H	0.03	0.03	0.03	0.03	0.08	0.07	0.07	0.06	0.03	-0.01	-0.01	-0.02	0.25	-0.05	-0.12	-0.14	0.22
76	C	-0.06	-0.05	-0.06	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.07	-0.02	-0.02	-0.01	-0.24	0.05	0.11	0.13	-0.23
77	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.04	0.05	0.01	0.00	-0.01	0.24	-0.05	-0.13	-0.14	0.23
78	C	-0.06	-0.05	-0.06	-0.06	-0.08	-0.07	-0.07	-0.06	-0.06	-0.02	-0.02	-0.01	-0.27	0.02	0.06	0.07	-0.24
79	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.05	0.05	0.00	0.00	-0.01	0.25	-0.05	-0.10	-0.11	0.23
80	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.06	-0.02	-0.02	-0.01	-0.25	0.04	0.10	0.12	-0.23
81	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.05	0.05	0.01	0.01	-0.01	0.25	-0.05	-0.12	-0.14	0.23
82	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.08	-0.03	-0.04	-0.03	-0.27	0.06	0.13	0.15	-0.22
83	H	0.03	0.03	0.03	0.03	0.09	0.08	0.08	0.08	0.07	0.03	0.03	0.02	0.30	-0.01	-0.09	-0.11	0.23
84	C	-0.07	-0.07	-0.07	-0.07	-0.12	-0.12	-0.11	-0.11	-0.45	-0.50	-0.50	-0.51	-0.36	-0.37	-0.09	-0.10	-0.31
85	C	-0.06	-0.06	-0.06	-0.06	-0.09	-0.07	-0.07	-0.07	-0.07	-0.02	-0.04	-0.03	-0.27	0.05	0.13	0.14	-0.24
86	H	0.02	0.02	0.02	0.02	0.09	0.07	0.08	0.07	0.03	-0.01	-0.01	-0.01	0.27	-0.03	-0.12	-0.13	0.21
87	C	-0.06	-0.05	-0.06	-0.06	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.06	-0.02	-0.02	-0.01	-0.25	0.04	0.10	0.11	-0.23
88	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.04	0.04	0.01	0.01	-0.01	0.24	-0.05	-0.13	-0.14	0.23
89	C	-0.06	-0.06	-0.06	-0.06	-0.09	-0.07	-0.07	-0.07	-0.06	-0.01	-0.01	-0.01	-0.27	0.02	0.06	0.08	-0.24
90	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.05	0.05	0.00	0.00	-0.01	0.25	-0.05	-0.10	-0.12	0.23
91	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.07	-0.06	-0.06	-0.02	-0.02	-0.01	-0.25	0.04	0.11	0.12	-0.23
92	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.05	0.04	0.01	0.01	-0.01	0.25	-0.05	-0.13	-0.14	0.23
93	C	-0.04	-0.04	-0.05	-0.05	-0.08	-0.07	-0.07	-0.07	-0.07	-0.03	-0.04	-0.03	-0.29	0.03	0.12	0.13	-0.22
94	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.10	0.09	0.09	0.08	0.06	0.02	0.02	0.01	0.28	-0.01	-0.10	-0.11	0.23
Te		0.54	0.52	0.51	0.50	0.39	0.38	0.38	0.37	1.23	1.22	1.25	1.24	1.27	1.24	1.15	0.78	1.31
N(SBI)		-0.21	-0.20	-0.21	-0.20	-0.18	-0.18	-0.19	-0.19	-0.96	-1.05	-1.11	-1.13	-0.84	-0.83	-0.79	-0.56	-0.82
N(B)		-0.11	-0.10	-0.11	-0.10	-0.10	-0.10	-0.10	-0.10	-1.08	-1.19	-1.23	-1.25	-0.83	-0.75	-0.61	-0.42	-0.74
C ₆ H ₄		0.19	0.20	0.21	0.21	0.26	0.28	0.29	0.29	0.87	1.04	1.10	1.13	0.61	0.64	0.57	0.50	0.56
B		0.04	0.03	0.03	0.03	-0.02	-0.04	-0.04	-0.04	1.58	1.71	1.81	1.84	0.94	0.80	0.16	0.16	0.66
Ph _a		-0.14	-0.14	-0.13	-0.13	-0.06	-0.05	-0.04	-0.04	-0.54	-0.57	-0.60	-0.60	-0.38	-0.38	-0.17	-0.13	-0.31
Ph _b		-0.16	-0.15	-0.15	-0.15	-0.15	-0.15	-0.15	-0.15	-0.54	-0.58	-0.61	-0.63	-0.39	-0.37	-0.15	-0.16	-0.33
Ph _c		-0.15	-0.15	-0.15	-0.15	-0.15	-0.14	-0.14	-0.14	-0.55	-0.58	-0.61	-0.62	-0.39	-0.36	-0.15	-0.16	-0.33

2 (PW91)

		HIRSHFELD				VORONOI DD				BADER				MULLIKEN				NPA			
		DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P
1	B	0.02	0.01	0.01	0.01	-0.03	0.01	-0.05	-0.05	1.51	1.62	1.75	1.79	0.83	0.66	0.92	0.82	0.64	0.61	0.39	
2	B	0.02	0.01	0.01	0.01	-0.03	0.01	-0.05	-0.05	1.51	1.62	1.75	1.79	0.83	0.66	0.92	0.82	0.64	0.61	0.39	
3	C	-0.07	-0.07	-0.06	-0.06	-0.11	-0.07	-0.10	-0.10	-0.42	-0.47	-0.48	-0.50	-0.33	-0.35	-0.28	-0.27	-0.30	-0.30	-0.21	
4	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.05	-0.06	-0.06	-0.08	-0.03	-0.03	-0.01	-0.28	0.01	0.17	0.19	-0.24	-0.25	-0.23	
5	C	-0.06	-0.06	-0.06	-0.06	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.08	-0.03	-0.03	-0.03	-0.29	0.03	0.25	0.25	-0.24	-0.24	-0.23	
6	C	-0.07	-0.07	-0.06	-0.06	-0.11	-0.07	-0.10	-0.10	-0.43	-0.48	-0.50	-0.51	-0.33	-0.34	-0.28	-0.27	-0.30	-0.30	-0.21	
7	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.05	-0.06	-0.06	-0.07	-0.02	-0.02	-0.02	-0.25	0.03	0.18	0.20	-0.23	-0.24	-0.22	
8	C	-0.06	-0.06	-0.06	-0.05	-0.09	-0.06	-0.06	-0.06	-0.09	-0.03	-0.04	-0.04	-0.30	0.01	0.23	0.24	-0.25	-0.25	-0.23	
9	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.05	-0.06	-0.06	-0.08	-0.03	-0.03	-0.01	-0.28	0.01	0.17	0.19	-0.24	-0.25	-0.23	
10	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.05	-0.06	-0.06	-0.07	-0.03	-0.02	-0.01	-0.25	0.03	0.18	0.19	-0.23	-0.23	-0.22	
11	C	-0.06	-0.06	-0.06	-0.06	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	-0.08	-0.03	-0.03	-0.03	-0.29	0.03	0.25	0.25	-0.24	-0.24	-0.23	
12	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.05	-0.06	-0.05	-0.07	-0.03	-0.03	-0.02	-0.26	0.03	0.17	0.19	-0.23	-0.24	-0.22	
13	C	-0.05	-0.04	-0.04	-0.04	-0.08	-0.04	-0.06	-0.06	-0.08	-0.03	-0.03	-0.03	-0.31	0.01	0.21	0.22	-0.24	-0.24	-0.22	
14	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.05	-0.06	-0.05	-0.07	-0.03	-0.03	-0.02	-0.26	0.03	0.17	0.19	-0.23	-0.24	-0.22	
15	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.03	-0.03	-0.02	-0.25	0.02	0.20	0.20	-0.23	-0.23	-0.22	
16	C	-0.05	-0.05	-0.04	-0.04	-0.06	-0.05	-0.04	-0.04	-0.10	-0.04	-0.05	-0.05	-0.30	0.00	0.22	0.25	-0.24	-0.24	-0.22	
17	C	-0.07	-0.07	-0.07	-0.07	-0.10	-0.07	-0.09	-0.09	-0.47	-0.51	-0.53	-0.53	-0.45	-0.43	-0.48	-0.38	-0.35	-0.34	-0.24	
18	C	-0.05	-0.04	-0.04	-0.04	-0.07	-0.04	-0.05	-0.05	-0.07	-0.02	-0.02	-0.01	-0.26	0.02	0.18	0.19	-0.23	-0.23	-0.22	
19	C	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.07	-0.04	-0.04	-0.04	-0.06	-0.02	-0.01	-0.01	-0.27	0.01	0.19	0.20	-0.23	-0.23	-0.21	
20	C	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.06	-0.04	-0.04	-0.03	-0.08	-0.02	-0.02	-0.02	-0.25	0.05	0.30	0.30	-0.21	-0.21	-0.20	
21	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.02	-0.02	-0.01	-0.26	0.03	0.17	0.19	-0.23	-0.24	-0.22	
22	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.05	-0.06	-0.06	-0.07	-0.03	-0.02	-0.01	-0.28	0.01	0.17	0.19	-0.24	-0.25	-0.22	
23	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.05	-0.06	-0.06	-0.07	-0.03	-0.02	-0.01	-0.25	0.03	0.18	0.19	-0.23	-0.23	-0.22	
24	C	-0.07	-0.07	-0.06	-0.06	-0.11	-0.07	-0.10	-0.10	-0.43	-0.48	-0.50	-0.51	-0.33	-0.34	-0.28	-0.27	-0.30	-0.30	-0.21	
25	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.03	-0.03	-0.02	-0.27	0.05	0.25	0.26	-0.22	-0.22	-0.21	
26	C	0.05	0.05	0.06	0.06	0.03	0.05	0.05	0.04	0.30	0.38	0.40	0.41	0.13	0.16	0.23	0.19	0.20	0.21	0.16	
27	C	-0.03	-0.03	-0.03	-0.03	-0.07	-0.03	-0.06	-0.05	-0.03	0.01	0.01	0.02	-0.25	0.03	0.22	0.23	-0.23	-0.23	-0.22	
28	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.05	-0.06	-0.06	-0.07	-0.03	-0.02	-0.01	-0.28	0.01	0.17	0.19	-0.24	-0.25	-0.22	
29	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.02	-0.02	-0.01	-0.26	0.03	0.17	0.19	-0.23	-0.24	-0.22	
30	C	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.06	-0.04	-0.04	-0.03	-0.08	-0.02	-0.02	-0.02	-0.25	0.05	0.30	0.30	-0.21	-0.21	-0.20	
31	C	-0.07	-0.07	-0.07	-0.07	-0.10	-0.07	-0.09	-0.09	-0.47	-0.51	-0.53	-0.53	-0.45	-0.43	-0.48	-0.38	-0.35	-0.34	-0.24	

32	C	-0.03	-0.03	-0.03	-0.03	-0.07	-0.03	-0.06	-0.05	-0.03	0.01	0.01	0.02	-0.25	0.03	0.22	0.23	-0.23	-0.23	-0.22
33	C	0.05	0.05	0.06	0.06	0.03	0.05	0.05	0.04	0.30	0.38	0.40	0.41	0.13	0.16	0.23	0.19	0.20	0.21	0.16
34	C	-0.06	-0.06	-0.06	-0.05	-0.09	-0.06	-0.06	-0.06	-0.09	-0.03	-0.04	-0.04	-0.30	0.01	0.23	0.24	-0.25	-0.25	-0.23
35	C	-0.02	-0.02	-0.03	-0.03	-0.05	-0.02	-0.04	-0.04	-0.04	0.00	-0.01	-0.01	-0.24	0.05	0.19	0.20	-0.20	-0.20	-0.19
36	C	-0.02	-0.02	-0.03	-0.03	-0.05	-0.02	-0.04	-0.04	-0.04	0.00	-0.01	-0.01	-0.24	0.05	0.19	0.20	-0.20	-0.20	-0.19
37	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.03	-0.03	-0.02	-0.25	0.02	0.20	0.20	-0.23	-0.23	-0.22
38	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.03	-0.03	-0.02	-0.27	0.05	0.25	0.26	-0.22	-0.22	-0.21
39	C	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.07	-0.04	-0.04	-0.04	-0.06	-0.02	-0.01	-0.01	-0.27	0.01	0.19	0.20	-0.23	-0.23	-0.21
40	C	-0.05	-0.04	-0.04	-0.04	-0.08	-0.04	-0.06	-0.06	-0.08	-0.03	-0.03	-0.03	-0.31	0.01	0.21	0.22	-0.24	-0.24	-0.22
41	C	-0.07	-0.07	-0.06	-0.06	-0.11	-0.07	-0.10	-0.10	-0.42	-0.47	-0.48	-0.50	-0.33	-0.35	-0.28	-0.27	-0.30	-0.30	-0.21
42	C	-0.05	-0.05	-0.04	-0.04	-0.06	-0.05	-0.04	-0.04	-0.10	-0.04	-0.05	-0.05	-0.30	0.00	0.22	0.25	-0.24	-0.24	-0.22
43	C	-0.05	-0.04	-0.04	-0.04	-0.07	-0.04	-0.05	-0.05	-0.07	-0.02	-0.02	-0.01	-0.26	0.02	0.18	0.19	-0.23	-0.23	-0.22
44	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.05	-0.06	-0.06	-0.07	-0.02	-0.02	-0.02	-0.25	0.03	0.18	0.20	-0.23	-0.24	-0.22
45	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.08	0.05	0.05	0.05	0.08	0.03	0.02	0.01	0.27	-0.02	-0.19	-0.21	0.24	0.24	0.22
46	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.10	0.04	0.08	0.08	0.09	0.04	0.03	0.03	0.32	0.03	-0.20	-0.20	0.25	0.25	0.23
47	H	0.03	0.03	0.02	0.02	0.08	0.03	0.05	0.05	0.04	0.00	-0.01	-0.02	0.26	-0.02	-0.24	-0.24	0.22	0.22	0.20
48	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.04	0.04	0.04	0.06	0.01	0.01	0.00	0.26	-0.03	-0.21	-0.22	0.23	0.24	0.21
49	H	0.02	0.02	0.02	0.02	0.08	0.02	0.06	0.06	0.04	0.00	0.00	0.00	0.29	-0.01	-0.24	-0.24	0.22	0.23	0.21
50	H	0.05	0.04	0.04	0.04	0.07	0.04	0.04	0.04	0.06	0.02	0.01	0.00	0.26	-0.03	-0.20	-0.22	0.23	0.24	0.22
51	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.04	0.04	0.04	0.07	0.02	0.01	0.00	0.26	-0.03	-0.20	-0.21	0.23	0.24	0.21
52	H	0.05	0.04	0.04	0.04	0.07	0.04	0.04	0.04	0.06	0.01	0.01	0.00	0.26	-0.03	-0.20	-0.22	0.23	0.24	0.22
53	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.10	0.04	0.07	0.07	0.07	0.02	0.02	0.01	0.29	0.00	-0.20	-0.21	0.24	0.24	0.22
54	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.04	0.04	0.04	0.06	0.02	0.01	0.00	0.26	-0.03	-0.20	-0.22	0.23	0.24	0.21
55	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.04	0.04	0.04	0.06	0.02	0.01	0.00	0.26	-0.03	-0.20	-0.21	0.23	0.24	0.21
56	H	0.04	0.03	0.03	0.03	0.09	0.03	0.07	0.07	0.07	0.03	0.02	0.02	0.30	0.01	-0.21	-0.22	0.24	0.24	0.22
57	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.08	0.05	0.05	0.05	0.07	0.03	0.02	0.01	0.27	-0.02	-0.19	-0.21	0.24	0.24	0.22
58	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.08	0.05	0.05	0.05	0.07	0.03	0.02	0.02	0.27	-0.02	-0.19	-0.20	0.24	0.24	0.22
59	H	0.06	0.06	0.06	0.06	0.09	0.06	0.07	0.07	0.09	0.04	0.04	0.04	0.29	0.00	-0.18	-0.20	0.25	0.25	0.23
60	H	0.05	0.04	0.04	0.04	0.07	0.04	0.04	0.04	0.06	0.02	0.01	0.00	0.26	-0.03	-0.20	-0.22	0.23	0.24	0.22
61	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.10	0.04	0.07	0.07	0.07	0.02	0.02	0.01	0.29	0.00	-0.20	-0.21	0.24	0.24	0.22
62	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.11	0.04	0.09	0.09	0.08	0.04	0.03	0.03	0.33	0.03	-0.18	-0.19	0.26	0.26	0.24
63	H	0.06	0.06	0.06	0.06	0.09	0.06	0.07	0.07	0.09	0.04	0.04	0.04	0.29	0.00	-0.18	-0.20	0.25	0.25	0.23
64	H	0.06	0.06	0.06	0.06	0.14	0.06	0.12	0.12	0.13	0.08	0.08	0.07	0.37	0.05	-0.15	-0.16	0.27	0.28	0.26
65	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.08	0.05	0.05	0.05	0.08	0.03	0.02	0.01	0.27	-0.02	-0.19	-0.21	0.24	0.24	0.22
66	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.10	0.04	0.08	0.08	0.09	0.04	0.03	0.03	0.32	0.03	-0.20	-0.20	0.25	0.25	0.23

67	H	0.06	0.06	0.06	0.06	0.14	0.06	0.12	0.12	0.13	0.08	0.08	0.07	0.37	0.05	-0.15	-0.16	0.27	0.28	0.26
68	H	0.04	0.03	0.03	0.03	0.09	0.03	0.07	0.07	0.07	0.03	0.02	0.02	0.30	0.01	-0.21	-0.22	0.24	0.24	0.22
69	H	0.05	0.04	0.04	0.04	0.07	0.04	0.04	0.04	0.06	0.01	0.01	0.00	0.26	-0.03	-0.20	-0.22	0.23	0.24	0.22
70	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.04	0.04	0.04	0.06	0.02	0.01	0.00	0.26	-0.03	-0.20	-0.21	0.23	0.24	0.21
71	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.08	0.05	0.05	0.05	0.07	0.03	0.02	0.02	0.27	-0.02	-0.19	-0.20	0.24	0.24	0.22
72	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.08	0.05	0.05	0.05	0.07	0.03	0.02	0.01	0.27	-0.02	-0.19	-0.21	0.24	0.24	0.22
73	H	0.02	0.02	0.02	0.02	0.08	0.02	0.06	0.06	0.04	0.00	0.00	0.00	0.29	-0.01	-0.24	-0.24	0.22	0.23	0.21
74	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.04	0.04	0.04	0.06	0.02	0.01	0.00	0.26	-0.03	-0.20	-0.22	0.23	0.24	0.21
75	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.04	0.04	0.04	0.07	0.02	0.01	0.00	0.26	-0.03	-0.20	-0.21	0.23	0.24	0.21
76	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.11	0.04	0.09	0.09	0.08	0.04	0.03	0.03	0.33	0.03	-0.18	-0.19	0.26	0.26	0.24
77	H	0.03	0.03	0.02	0.02	0.08	0.03	0.05	0.05	0.04	0.00	-0.01	-0.02	0.26	-0.02	-0.24	-0.24	0.22	0.22	0.20
78	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.04	0.04	0.04	0.06	0.01	0.01	0.00	0.26	-0.03	-0.21	-0.22	0.23	0.24	0.21
79	N	-0.09	-0.08	-0.09	-0.08	-0.08	-0.08	-0.09	-0.09	-1.05	-1.15	-1.20	-1.21	-0.77	-0.68	-0.79	-0.55	-0.73	-0.70	-0.62
80	N	-0.09	-0.08	-0.09	-0.08	-0.08	-0.08	-0.09	-0.09	-1.05	-1.15	-1.20	-1.21	-0.77	-0.68	-0.79	-0.55	-0.73	-0.70	-0.62
81	Te	0.60	0.59	0.58	0.56	0.46	0.59	0.44	0.44	1.19	1.18	1.24	1.22	1.27	1.34	1.11	0.71	1.35	1.28	1.31
	Te	0.60	0.59	0.58	0.56	0.46	0.59	0.44	0.44	1.19	1.18	1.24	1.22	1.27	1.34	1.11	0.71	1.35	1.28	1.31
	N	-0.09	-0.08	-0.09	-0.08	-0.08	-0.08	-0.09	-0.09	-1.05	-1.15	-1.20	-1.21	-0.77	-0.68	-0.79	-0.55	-0.73	-0.70	-0.62
	C ₆ H ₄	0.24	0.24	0.25	0.25	0.27	0.24	0.29	0.29	0.87	1.03	1.05	1.07	0.60	0.60	0.62	0.54	0.60	0.60	0.50
	B	0.02	0.01	0.01	0.01	-0.03	0.01	-0.05	-0.05	1.51	1.62	1.75	1.79	0.83	0.66	0.92	0.82	0.64	0.61	0.39
	Ph _a	-0.07	-0.07	-0.06	-0.06	0.02	-0.07	0.03	0.04	-0.47	-0.48	-0.53	-0.53	-0.30	-0.31	-0.34	-0.25	-0.25	-0.24	-0.17
	Ph _b	-0.14	-0.14	-0.14	-0.14	-0.13	-0.14	-0.13	-0.13	-0.51	-0.54	-0.57	-0.59	-0.34	-0.32	-0.32	-0.31	-0.31	-0.30	-0.25
	Ph _c	-0.14	-0.14	-0.14	-0.13	-0.13	-0.14	-0.13	-0.13	-0.52	-0.55	-0.59	-0.60	-0.35	-0.32	-0.33	-0.33	-0.32	-0.31	-0.25

2 (B3LYP)

		HIRSHFELD				VORONOI DD				BADER				MULLIKEN				NPA			
		DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P	DZ	DZP	TZP	TZ2P
1	B	0.04	0.03	0.03	0.03	-0.01	-0.04	-0.04	-0.04	0.00	1.72	1.81	1.85	0.96	0.80	0.17	0.16	0.67			
2	B	0.04	0.03	0.03	0.03	-0.01	-0.04	-0.04	-0.04	0.00	1.72	1.81	1.85	0.96	0.80	0.17	0.16	0.67			
3	C	-0.07	-0.07	-0.07	-0.07	-0.12	-0.12	-0.11	-0.11	0.00	-0.50	-0.49	-0.50	-0.36	-0.37	-0.10	-0.10	-0.31			
4	C	-0.06	-0.05	-0.06	-0.06	-0.08	-0.07	-0.07	-0.06	0.00	-0.02	-0.02	-0.01	-0.27	0.02	0.06	0.08	-0.24			
5	C	-0.06	-0.06	-0.06	-0.06	-0.09	-0.07	-0.07	-0.07	0.00	-0.02	-0.03	-0.03	-0.27	0.05	0.13	0.14	-0.23			
6	C	-0.07	-0.07	-0.07	-0.07	-0.12	-0.12	-0.11	-0.11	0.00	-0.51	-0.51	-0.52	-0.35	-0.37	-0.09	-0.09	-0.31			
7	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.07	-0.06	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	-0.24	0.05	0.12	0.13	-0.23			
8	C	-0.06	-0.06	-0.06	-0.06	-0.09	-0.07	-0.07	-0.07	0.00	-0.02	-0.05	-0.04	-0.29	0.03	0.11	0.12	-0.24			
9	C	-0.06	-0.05	-0.06	-0.06	-0.08	-0.07	-0.07	-0.06	0.00	-0.02	-0.02	-0.01	-0.27	0.02	0.06	0.08	-0.24			
10	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	0.00	-0.02	-0.02	-0.01	-0.24	0.05	0.11	0.12	-0.22			
11	C	-0.06	-0.06	-0.06	-0.06	-0.09	-0.07	-0.07	-0.07	0.00	-0.02	-0.03	-0.03	-0.27	0.05	0.13	0.14	-0.23			
12	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	0.00	-0.02	-0.02	-0.01	-0.25	0.04	0.10	0.12	-0.23			
13	C	-0.05	-0.04	-0.05	-0.05	-0.08	-0.07	-0.07	-0.07	0.00	-0.03	-0.03	-0.03	-0.29	0.03	0.11	0.11	-0.23			
14	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	0.00	-0.02	-0.02	-0.01	-0.25	0.04	0.10	0.12	-0.23			
15	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.06	-0.06	-0.06	0.00	-0.02	-0.02	-0.02	-0.25	0.03	0.12	0.08	-0.23			
16	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.06	-0.05	-0.05	-0.04	0.00	-0.03	-0.06	-0.07	-0.29	0.02	0.10	0.09	-0.23			
17	C	-0.08	-0.08	-0.07	-0.07	-0.11	-0.10	-0.10	-0.10	0.00	-0.55	-0.52	-0.52	-0.48	-0.46	-0.25	-0.16	-0.36			
18	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.06	-0.06	-0.05	0.00	-0.02	-0.02	-0.01	-0.25	0.03	0.12	0.10	-0.22			
19	C	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.07	-0.05	-0.05	-0.05	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.26	0.03	0.07	0.10	-0.22			
20	C	-0.05	-0.04	-0.05	-0.05	-0.06	-0.04	-0.04	-0.04	-0.01	-0.02	-0.03	-0.03	-0.23	0.07	0.17	0.12	-0.20			
21	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.25	0.04	0.11	0.11	-0.23			
22	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.07	-0.06	0.00	-0.02	-0.02	-0.01	-0.27	0.02	0.06	0.07	-0.24			
23	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	0.00	-0.02	-0.02	-0.01	-0.24	0.05	0.11	0.12	-0.22			
24	C	-0.07	-0.07	-0.07	-0.07	-0.12	-0.12	-0.11	-0.11	0.00	-0.51	-0.51	-0.52	-0.35	-0.37	-0.09	-0.09	-0.31			
25	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.06	-0.06	-0.06	0.00	-0.02	-0.03	-0.02	-0.25	0.07	0.14	0.15	-0.21			
26	C	0.06	0.07	0.07	0.07	0.04	0.04	0.05	0.05	-0.01	0.40	0.42	0.43	0.16	0.21	0.21	0.15	0.22			
27	C	-0.03	-0.03	-0.03	-0.03	-0.07	-0.06	-0.06	-0.06	0.00	0.02	0.02	0.02	-0.24	0.04	0.13	0.13	-0.22			
28	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.07	-0.06	0.00	-0.02	-0.02	-0.01	-0.27	0.02	0.06	0.07	-0.24			
29	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.06	-0.06	0.00	-0.01	-0.01	0.00	-0.25	0.04	0.11	0.11	-0.23			
30	C	-0.05	-0.04	-0.05	-0.05	-0.06	-0.04	-0.04	-0.04	-0.01	-0.02	-0.03	-0.03	-0.23	0.07	0.17	0.12	-0.20			

31	C	-0.08	-0.08	-0.07	-0.07	-0.11	-0.10	-0.10	-0.10	0.00	-0.55	-0.52	-0.52	-0.48	-0.46	-0.25	-0.16	-0.36
32	C	-0.03	-0.03	-0.03	-0.03	-0.07	-0.06	-0.06	-0.06	0.00	0.02	0.02	0.02	-0.24	0.04	0.13	0.13	-0.22
33	C	0.06	0.07	0.07	0.07	0.04	0.04	0.05	0.05	-0.01	0.40	0.42	0.43	0.16	0.21	0.21	0.15	0.22
34	C	-0.06	-0.06	-0.06	-0.06	-0.09	-0.07	-0.07	-0.07	0.00	-0.02	-0.05	-0.04	-0.29	0.03	0.11	0.12	-0.24
35	C	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.05	-0.04	-0.04	-0.04	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.23	0.06	0.12	0.07	-0.19
36	C	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.05	-0.04	-0.04	-0.04	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.23	0.06	0.12	0.07	-0.19
37	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.06	-0.06	-0.06	0.00	-0.02	-0.02	-0.02	-0.25	0.03	0.12	0.08	-0.23
38	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.06	-0.06	-0.06	0.00	-0.02	-0.03	-0.02	-0.25	0.07	0.14	0.15	-0.21
39	C	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.07	-0.05	-0.05	-0.05	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.26	0.03	0.07	0.10	-0.22
40	C	-0.05	-0.04	-0.05	-0.05	-0.08	-0.07	-0.07	-0.07	0.00	-0.03	-0.03	-0.03	-0.29	0.03	0.11	0.11	-0.23
41	C	-0.07	-0.07	-0.07	-0.07	-0.12	-0.12	-0.11	-0.11	0.00	-0.50	-0.49	-0.50	-0.36	-0.37	-0.10	-0.10	-0.31
42	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.06	-0.05	-0.05	-0.04	0.00	-0.03	-0.06	-0.07	-0.29	0.02	0.10	0.09	-0.23
43	C	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.06	-0.06	-0.05	0.00	-0.02	-0.02	-0.01	-0.25	0.03	0.12	0.10	-0.22
44	C	-0.06	-0.05	-0.05	-0.05	-0.08	-0.06	-0.07	-0.06	0.00	-0.01	-0.02	-0.01	-0.24	0.05	0.12	0.13	-0.23
45	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.08	0.06	0.06	0.06	0.00	0.02	0.01	0.01	0.26	-0.03	-0.12	-0.10	0.23
46	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.11	0.09	0.10	0.10	0.00	0.03	0.03	0.03	0.31	0.01	-0.08	-0.05	0.24
47	H	0.02	0.02	0.02	0.02	0.08	0.07	0.06	0.06	0.00	-0.02	-0.02	-0.02	0.25	-0.04	-0.13	-0.14	0.21
48	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.24	-0.05	-0.13	-0.14	0.23
49	H	0.02	0.02	0.02	0.02	0.09	0.07	0.07	0.07	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.27	-0.03	-0.12	-0.13	0.21
50	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.05	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.25	-0.04	-0.13	-0.14	0.23
51	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.05	0.00	0.01	0.01	0.00	0.25	-0.04	-0.10	-0.12	0.23
52	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.25	-0.05	-0.13	-0.14	0.23
53	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.10	0.08	0.08	0.08	0.00	0.01	0.01	0.01	0.28	-0.02	-0.10	-0.11	0.23
54	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.05	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.24	-0.05	-0.12	-0.14	0.23
55	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.05	0.00	0.01	0.01	0.00	0.25	-0.04	-0.10	-0.11	0.23
56	H	0.03	0.03	0.03	0.03	0.09	0.08	0.08	0.08	0.00	0.02	0.02	0.01	0.29	-0.01	-0.09	-0.11	0.23
57	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.08	0.06	0.06	0.06	0.00	0.02	0.02	0.02	0.26	-0.03	-0.12	-0.09	0.23
58	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.08	0.06	0.06	0.06	0.00	0.02	0.01	0.02	0.26	-0.03	-0.09	-0.10	0.23
59	H	0.06	0.06	0.06	0.06	0.10	0.08	0.08	0.08	0.00	0.04	0.04	0.04	0.28	-0.01	-0.10	-0.06	0.24
60	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.05	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.25	-0.04	-0.13	-0.14	0.23
61	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.10	0.08	0.08	0.08	0.00	0.01	0.01	0.01	0.28	-0.02	-0.10	-0.11	0.23
62	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.12	0.10	0.11	0.10	0.00	0.03	0.03	0.03	0.31	0.01	-0.07	-0.06	0.25
63	H	0.06	0.06	0.06	0.06	0.10	0.08	0.08	0.08	0.00	0.04	0.04	0.04	0.28	-0.01	-0.10	-0.06	0.24
64	H	0.06	0.06	0.06	0.06	0.15	0.13	0.14	0.13	0.01	0.07	0.08	0.08	0.36	0.04	-0.05	-0.04	0.27
65	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.08	0.06	0.06	0.06	0.00	0.02	0.01	0.01	0.26	-0.03	-0.12	-0.10	0.23

66	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.11	0.09	0.10	0.10	0.00	0.03	0.03	0.03	0.31	0.01	-0.08	-0.05	0.24
67	H	0.06	0.06	0.06	0.06	0.15	0.13	0.14	0.13	0.01	0.07	0.08	0.08	0.36	0.04	-0.05	-0.04	0.27
68	H	0.03	0.03	0.03	0.03	0.09	0.08	0.08	0.08	0.00	0.02	0.02	0.01	0.29	-0.01	-0.09	-0.11	0.23
69	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.05	0.00	0.00	0.00	-0.01	0.25	-0.05	-0.13	-0.14	0.23
70	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.05	0.00	0.01	0.01	0.00	0.25	-0.04	-0.10	-0.11	0.23
71	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.08	0.06	0.06	0.06	0.00	0.02	0.01	0.02	0.26	-0.03	-0.09	-0.10	0.23
72	H	0.05	0.05	0.05	0.05	0.08	0.06	0.06	0.06	0.00	0.02	0.02	0.02	0.26	-0.03	-0.12	-0.09	0.23
73	H	0.02	0.02	0.02	0.02	0.09	0.07	0.07	0.07	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	0.27	-0.03	-0.12	-0.13	0.21
74	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.05	0.00	0.01	0.01	-0.01	0.24	-0.05	-0.12	-0.14	0.23
75	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.05	0.00	0.01	0.01	0.00	0.25	-0.04	-0.10	-0.12	0.23
76	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.12	0.10	0.11	0.10	0.00	0.03	0.03	0.03	0.31	0.01	-0.07	-0.06	0.25
77	H	0.02	0.02	0.02	0.02	0.08	0.07	0.06	0.06	0.00	-0.02	-0.02	-0.02	0.25	-0.04	-0.13	-0.14	0.21
78	H	0.04	0.04	0.04	0.04	0.07	0.05	0.05	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.24	-0.05	-0.13	-0.14	0.23
79	N	-0.10	-0.10	-0.10	-0.10	-0.10	-0.09	-0.10	-0.10	0.01	-1.18	-1.23	-1.25	-0.84	-0.75	-0.62	-0.41	-0.76
80	N	-0.10	-0.10	-0.10	-0.10	-0.10	-0.09	-0.10	-0.10	0.01	-1.18	-1.23	-1.25	-0.84	-0.75	-0.62	-0.41	-0.76
81	Te	0.64	0.63	0.63	0.61	0.47	0.47	0.47	0.47	0.00	1.25	1.29	1.27	1.33	1.36	1.16	0.79	1.39
	Te	0.64	0.63	0.63	0.61	0.47	0.47	0.47	0.47	0.00	1.25	1.29	1.27	1.33	1.36	1.16	0.79	1.39
	N	-0.10	-0.10	-0.10	-0.10	-0.10	-0.09	-0.10	-0.10	0.01	-1.18	-1.23	-1.25	-0.84	-0.75	-0.62	-0.41	-0.76
	C ₆ H ₄	0.28	0.28	0.28	0.28	0.31	0.31	0.32	0.32	-0.02	1.07	1.10	1.13	0.66	0.67	0.59	0.50	0.64
	B	0.04	0.03	0.03	0.03	-0.01	-0.04	-0.04	-0.04	0.00	1.72	1.81	1.85	0.96	0.80	0.17	0.16	0.67
	Ph _a	-0.09	-0.09	-0.08	-0.08	0.01	0.02	0.03	0.03	0.00	-0.53	-0.56	-0.56	-0.35	-0.35	-0.14	-0.08	-0.27
	Ph _b	-0.16	-0.15	-0.15	-0.15	-0.15	-0.14	-0.14	-0.14	0.00	-0.58	-0.61	-0.62	-0.38	-0.35	-0.14	-0.16	-0.32
	Ph _c	-0.15	-0.15	-0.15	-0.15	-0.15	-0.14	-0.14	-0.14	0.00	-0.59	-0.61	-0.62	-0.39	-0.36	-0.14	-0.16	-0.33

S7. References

1. A. F. Cozzolino, N. E. Gruhn, D. L. Lichtenberger and I. Vargas-Baca, *Inorg. Chem.*, 2008, **47**, 6220-6226.
2. H. C. Brown and U. S. Racherla, *J. Org. Chem.*, 1986, **51**, 427-432.
3. A. D. Bain, *Prog. Nucl. Magn. Reson. Spectrosc.*, 2003, **43**, 63-103.
4. G. Te Velde, F. M. Bickelhaupt, E. J. Baerends, C. Fonseca Guerra, S. J. A. Van Gisbergen, J. G. Snijders and T. Ziegler, *J. Comput. Chem.*, 2001, **22**, 931-967.
5. C. F. Guerra, J. G. Snijders, G. t. Velde and E J Baerends, *Theor. Chim. Acta*, 1998, **99**, 391.
6. E. J. Baerends, J. Autschbach, A. Bérces, C. Bo, P. M. Boerrigter, L. Cavallo, D. P. Chong, L. Deng, R. M. Dickson, D. E. Ellis, L. Fan, T. H. Fischer, C. F. Guerra, S. J. A. v. Gisbergen, J. A. Groeneveld, O. V. Gritsenko, M. Grüning, F. E. Harris, P. v. d. Hoek, H. Jacobsen, G. v. Kessel, F. Kootstra, E. v. Lenthe, D. A. McCormack, V. P. Osinga, S. Patchkovskii, P. H. T. Philipsen, D. Post, C. C. Pye, W. Ravenek, P. Ros, P. R. T. Schipper, H. G. Schreckenbach, J. G. Snijders, M. Sola, M. Swart, D. Swerhone, G. t. Velde, P. Vernooijs, L. Versluis, O. Visser, E. v. Wezenbeek, G. Wiesenekker, S. K. Wolff, T. K. Woo and T. Ziegler, SCM, Theoretical Chemistry, Vrije Universiteit, Amsterdam, The Netherlands, <http://www.scm.com>.
7. S. J. A. van Gisbergen, J. G. Snijders and E. J. Baerends, *Phys. Rev. Lett.*, 1997, **78**, 3097-3100.
8. S. J. A. van Gisbergen, J. G. Snijders and E. J. Baerends, *J. Chem. Phys.*, 1998, **109**, 10644-10656.
9. S. H. Vosko, L. Wilk and M. Nusair, *Can. J. Phys.*, 1980, **58**, 1200-1211.
10. J. P. Perdew, *Phys. Rev. B: Condens. Matter*, 1986, **33**, 8822.
11. J. P. Perdew and Y. Wang, *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.*, 1992, **45**, 13244.
12. E. van Lenthe, A. Ehlers and E.-J. Baerends, *J. Chem. Phys.*, 1999, **110**, 8943-8953.
13. E. van Lenthe, E. J. Baerends and J. G. Snijders, *J. Chem. Phys.*, 1993, **99**, 4597-4610.
14. E. van Lenthe, E. J. Baerends and J. G. Snijders, *J. Chem. Phys.*, 1994, **101**, 9783-9792.
15. E. van Lenthe, J. G. Snijders and E. J. Baerends, *J. Chem. Phys.*, 1996, **105**, 6505-6516.
16. E. van Lenthe, R. van Leeuwen, E. J. Baerends and J. G. Snijders, *Int. J. Quantum Chem.*, 1996, **57**, 281-293.
17. T. Ziegler and A. Rauk, *Inorg. Chem.*, 1979, **18**, 1755-1759.
18. T. Ziegler and A. Rauk, *Inorg. Chem.*, 1979, **18**, 1558-1565.
19. A. D. Becke, *Phys. Rev. A*, 1988, **38**, 3098-3100.
20. C. T. Lee, W. T. Yang and R. G. Parr, *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.*, 1988, **37**, 785-789.
21. A. D. Becke, *J. Chem. Phys.*, 1993, **98**, 5648-5652.
22. P. J. Stephens, F. J. Devlin, C. F. Chabalowski and M. J. Frisch, *J. Phys. Chem.*, 1994, **98**, 11623-11627.
23. A. F. Cozzolino, I. Vargas-Baca, S. Mansour and A. H. Mahmoudkhani, *J. Am. Chem. Soc.*, 2005, **40**, 4966-4971.
24. A. F. Cozzolino, J. F. Britten and I. Vargas-Baca, *Cryst. Growth Des.*, 2006, **6**, 181-186.