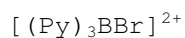


Cartesian Coordinates of Optimized Structures

[(Py)₃BH]²⁺

	x	y	z
B	0.000614	0.000451	0.606415
N	-0.027482	1.501192	1.084653
C	-0.702351	2.386292	0.302128
C	-0.782196	3.728937	0.628793
C	-0.148536	4.187737	1.784051
C	0.546504	3.277434	2.582984
C	0.590717	1.945173	2.210281
H	-1.159489	1.979269	-0.595510
H	-1.325442	4.404845	-0.026941
H	-0.189023	5.241219	2.053873
H	1.060130	3.593928	3.487289
H	1.130933	1.207078	2.795677
N	-1.284098	-0.773290	1.089236
C	-1.700417	-1.817045	0.321464
C	-2.821658	-2.557696	0.650482
C	-3.549056	-2.220932	1.793032
C	-3.121994	-1.147287	2.576658
C	-1.990109	-0.442850	2.201508
H	-1.109426	-2.022234	-0.566858
H	-3.124514	-3.379354	0.006387
H	-4.441299	-2.782167	2.063486
H	-3.662956	-0.847430	3.469770
H	-1.631628	0.407466	2.774293
N	1.312394	-0.726107	1.088994
C	2.414310	-0.602847	0.299899
C	3.615379	-1.205032	0.632421
C	3.696290	-1.963573	1.800700
C	2.562817	-2.091712	2.605940
C	1.388169	-1.465451	2.226250
H	2.289987	-0.017258	-0.606230
H	4.470195	-1.087627	-0.028262
H	4.627236	-2.455160	2.075621
H	2.582083	-2.678753	3.521016
H	0.480040	-1.549931	2.816676
H	0.000596	-0.001664	-0.588208



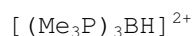
	x	y	z
B	0.004824	0.006587	0.701591
N	-0.046219	1.508294	1.233587
C	-0.747846	2.445161	0.534677
C	-0.801228	3.767910	0.938236
C	-0.128458	4.160757	2.094854
C	0.570308	3.197685	2.824514
C	0.598899	1.890748	2.371638
H	-1.238585	2.097753	-0.368253
H	-1.357220	4.479791	0.335163
H	-0.143813	5.198920	2.420653
H	1.102081	3.453964	3.736532
H	1.144325	1.123469	2.910496
N	-1.267874	-0.793968	1.239380
C	-1.703281	-1.891427	0.558399
C	-2.825270	-2.598069	0.954462
C	-3.531079	-2.189634	2.085606
C	-3.069111	-1.083514	2.801008
C	-1.947247	-0.406460	2.355290
H	-1.136527	-2.160136	-0.325390
H	-3.144117	-3.453086	0.364153
H	-4.425398	-2.720030	2.402825
H	-3.578635	-0.734032	3.695255
H	-1.572973	0.463322	2.882154
N	1.331762	-0.699675	1.238112
C	2.493391	-0.567792	0.537534
C	3.664091	-1.183226	0.944610
C	3.666906	-1.953930	2.106762
C	2.483678	-2.069193	2.838571
C	1.338670	-1.441604	2.381520
H	2.438564	0.024626	-0.369785
H	4.559281	-1.064604	0.339751
H	4.572438	-2.458302	2.435870
H	2.439538	-2.650508	3.755886
H	0.401729	-1.522138	2.921241
Br	-0.012642	-0.015292	-1.309767



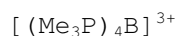
	x	y	z
B	0.181279	0.084250	0.092742
N	1.036443	1.001238	-0.855486
C	1.542815	0.432267	-1.984099
C	2.297933	1.149757	-2.885979
C	2.559582	2.516289	-2.673256
C	2.029034	3.082317	-1.502139
C	1.283942	2.316622	-0.625871
C	3.335253	3.321485	-3.661062
H	1.305615	-0.616769	-2.135187
H	2.675351	0.643199	-3.772206
H	2.707602	3.527462	-4.540907
H	4.209048	2.769137	-4.024499
H	3.658442	4.280756	-3.248579
H	2.190722	4.133256	-1.271944
H	0.856822	2.743682	0.276988
N	-0.834984	0.935307	0.935853
C	-1.999355	1.296733	0.328915
C	-2.966657	2.027112	0.984360
C	-2.785765	2.413266	2.325787
C	-1.576825	2.031620	2.931230
C	-0.635422	1.306021	2.227033
C	-3.841342	3.162678	3.067861
H	-2.123707	0.964287	-0.697401
H	-3.878562	2.285881	0.449695
H	-4.271092	3.959311	2.450139
H	-4.668241	2.481631	3.318759
H	-3.465234	3.590471	4.000776
H	-1.367680	2.295454	3.965786
H	0.297531	0.993136	2.686715
N	1.110242	-0.784412	1.015372
C	0.644551	-1.999029	1.415548
C	1.400487	-2.848737	2.195617
C	2.699975	-2.488132	2.593909
C	3.156072	-1.224102	2.180230
C	2.357374	-0.408375	1.404904
C	3.565721	-3.414059	3.380957
H	-0.351099	-2.263294	1.071841
H	0.978274	-3.809525	2.482590
H	2.975958	-4.102056	3.993727
H	4.271440	-2.870124	4.016047
H	4.162578	-4.027521	2.688420
H	4.148733	-0.874874	2.456766
H	2.703084	0.563253	1.063895
H	-0.450699	-0.663269	-0.594568



	x	y	z
B	0.000310	0.000600	-0.000384
N	0.977628	-0.886669	0.877538
C	2.024006	-0.276867	1.521012
C	2.908770	-0.971774	2.316144
C	2.779636	-2.365069	2.495197
C	1.710158	-2.978239	1.814595
C	0.847237	-2.238435	1.032028
C	3.734070	-3.146826	3.331837
H	2.128733	0.794288	1.373690
H	3.713790	-0.423728	2.802007
H	4.237199	-2.521737	4.074671
H	4.515108	-3.579325	2.686132
H	3.239220	-3.987920	3.829999
H	1.548062	-4.051922	1.891777
H	0.035113	-2.720843	0.500362
N	-0.945335	0.884199	0.914317
C	-0.774549	1.038427	2.260818
C	-1.611229	1.826136	3.025376
C	-2.693692	2.512130	2.444364
C	-2.865242	2.333338	1.055096
C	-2.006013	1.533826	0.334700
C	-3.621830	3.356821	3.248753
H	0.048807	0.503016	2.720220
H	-1.416956	1.903517	4.093383
H	-4.538411	2.786156	3.468434
H	-3.183975	3.654658	4.205096
H	-3.937496	4.247807	2.693905
H	-3.683107	2.823655	0.530152
H	-2.142395	1.386282	-0.732825
N	0.926748	0.908224	-0.912158
C	1.964982	0.322280	-1.589943
C	2.812783	1.038865	-2.405287
C	2.651205	2.429954	-2.573314
C	1.590462	3.018498	-1.858207
C	0.764343	2.257588	-1.056552
C	3.542477	3.228656	-3.462033
H	2.097622	-0.746400	-1.448141
H	3.618424	0.510341	-2.911393
H	4.510862	2.744724	-3.616162
H	3.693020	4.243360	-3.077330
H	3.069519	3.334825	-4.451654
H	1.408924	4.089745	-1.919704
H	-0.039907	2.722221	-0.497250
N	-0.956996	-0.905326	-0.880747
C	-0.841050	-1.042990	-2.235396
C	-1.694535	-1.838803	-2.971654
C	-2.736798	-2.554531	-2.350358
C	-2.850551	-2.392805	-0.953915
C	-1.976779	-1.582331	-0.263215
C	-3.656632	-3.435912	-3.123766
H	-0.051309	-0.483855	-2.723669
H	-1.550455	-1.895090	-4.048766
H	-3.890773	-3.009089	-4.105816
H	-3.162405	-4.402005	-3.314430
H	-4.583426	-3.642592	-2.581967
H	-3.638816	-2.899778	-0.400856
H	-2.072570	-1.445675	0.810287



	x	y	z
B	0.037039	0.040844	-0.455097
P	1.966026	0.033202	0.023682
C	2.889978	-1.096261	-1.063161
H	2.705192	-0.835513	-2.111802
H	2.603967	-2.139485	-0.895327
H	3.961599	-0.989312	-0.851314
C	2.350328	-0.441363	1.740364
H	1.872908	0.246331	2.449700
H	2.013593	-1.463688	1.951635
H	3.437138	-0.399125	1.889064
C	2.766319	1.650708	-0.228242
H	2.635297	1.987079	-1.263110
H	3.840771	1.530855	-0.033966
H	2.377123	2.407579	0.461496
P	-0.920544	1.715512	0.023126
C	-0.404005	3.080344	-1.063694
H	-0.534323	2.789017	-2.112473
H	0.641585	3.356257	-0.893430
H	-1.034491	3.953949	-0.853966
C	-0.701755	2.285881	1.739766
H	0.352148	2.504289	1.951361
H	-1.280721	3.206772	1.887846
H	-1.059843	1.529337	2.449268
C	-2.721395	1.599624	-0.229206
H	-2.946775	1.318036	-1.264196
H	-3.155205	2.589871	-0.034903
H	-3.182172	0.883766	0.460233
P	-0.934599	-1.625618	0.023453
C	-2.373912	-1.861622	-1.064454
H	-2.055627	-1.828417	-2.112985
H	-3.136464	-1.094770	-0.894696
H	-2.814586	-2.844866	-0.855276
C	-1.539119	-1.720106	1.739739
H	-0.705385	-1.650466	2.449706
H	-2.255915	-0.916860	1.949878
H	-2.046579	-2.682148	1.888634
C	0.066050	-3.127636	-0.227208
H	0.422472	-3.183225	-1.262176
H	0.916391	-3.168353	0.462227
H	-0.574849	-3.998094	-0.032031
H	0.037204	0.040745	-1.670374

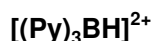


	x	y	z
B	0.000173	-0.000807	0.003422
P	-1.218275	-1.160487	-1.168642
C	-1.951834	-0.257950	-2.577360
H	-2.658211	-0.941466	-3.070600
H	-1.189762	0.028496	-3.311453
H	-2.503140	0.629956	-2.249179
C	-2.640613	-1.869648	-0.267846
H	-3.165392	-2.540232	-0.963987
H	-3.345283	-1.091834	0.047916
H	-2.320911	-2.455921	0.600874
C	-0.370068	-2.594543	-1.916788
H	-1.091634	-3.087274	-2.584783
H	-0.061868	-3.321408	-1.156578
H	0.497645	-2.288677	-2.511837
P	-1.151553	1.218538	1.181722
C	-2.546553	1.990657	0.290436
H	-3.051126	2.665987	0.996775
H	-3.275899	1.243314	-0.042063
H	-2.203893	2.581373	-0.566320
C	-0.227856	2.613794	1.913847
H	-0.923936	3.157822	2.568830
H	0.127086	3.309915	1.145405
H	0.616393	2.267787	2.519826
C	-1.915735	0.361206	2.601979
H	-2.556022	1.092552	3.116670
H	-1.160773	0.011535	3.315395
H	-2.541302	-0.478780	2.281547
P	1.206650	1.146469	-1.193567
C	2.639342	1.867371	-0.318600
H	3.158620	2.523846	-1.032000
H	3.344855	1.093120	0.004014
H	2.330102	2.469938	0.542628
C	0.347256	2.570829	-1.947545
H	1.061499	3.061083	-2.625014
H	0.041302	3.303010	-1.191578
H	-0.523413	2.256282	-2.533505
C	1.926274	0.230004	-2.600019
H	2.606370	0.917778	-3.123411
H	1.154860	-0.088621	-3.310329
H	2.504398	-0.638539	-2.265644
P	1.162802	-1.204998	1.186874
C	2.548927	-1.989447	0.292774
H	3.052060	-2.664719	1.000159
H	3.281561	-1.248069	-0.046104
H	2.198739	-2.582169	-0.559681
C	0.249295	-2.591520	1.948303
H	0.948233	-3.111637	2.619589
H	-0.092985	-3.309774	1.194353
H	-0.602493	-2.241031	2.541662
C	1.939250	-0.324915	2.586550
H	2.608403	-1.038425	3.089233
H	1.191942	0.009173	3.315523
H	2.536996	0.529280	2.249484

[{HC(CMe)₂(NC₆F₅)₂}B(bipy)]²⁺, Compound **14**

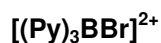
	x	y	z
B	0.010518	-0.043595	0.173782
N	1.259943	0.031967	-0.686562
C	1.220081	0.030092	-2.047665
C	-0.006541	-0.048618	-2.698436
C	-1.225971	-0.089088	-2.032065
N	-1.250372	-0.047405	-0.669761
C	2.473739	0.112645	-2.855569
C	-2.489005	-0.183291	-2.824401
H	3.375261	0.243244	-2.253140
H	2.395334	0.948649	-3.562188
H	2.584371	-0.798225	-3.459508
H	-3.391597	-0.218621	-2.210724
H	-2.453350	-1.085680	-3.449330
H	-2.561834	0.669138	-3.512037
H	-0.012685	-0.066212	-3.784058
C	2.529204	0.000771	-0.006466
C	3.201491	-1.212212	0.190860
C	4.406112	-1.279709	0.884375
C	4.965938	-0.110716	1.403434
C	4.333091	1.116370	1.197200
C	3.136220	1.162689	0.484825
F	2.688644	-2.346160	-0.319615
F	5.023400	-2.446040	1.047075
F	6.105010	-0.164096	2.077063
F	4.879392	2.234588	1.666696
F	2.579418	2.362769	0.246133
C	-2.511331	0.011492	0.023571
C	-3.134364	1.242771	0.262882
C	-4.325615	1.337103	0.976808
C	-4.930298	0.174692	1.458467
C	-4.349298	-1.069545	1.205940
C	-3.158309	-1.140240	0.486316
F	-2.584207	2.371539	-0.219365
F	-4.883632	2.523463	1.197685
F	-6.059802	0.251169	2.144873
F	-4.935052	-2.180289	1.643357
F	-2.647332	-2.352946	0.210847
N	0.066070	-1.284155	1.199922
C	0.085287	-2.587948	0.869398
C	0.156260	-3.565248	1.853027
C	0.205370	-3.179687	3.192840
C	0.179092	-1.824086	3.529385
C	0.107914	-0.894018	2.503837
C	0.064031	0.564206	2.577879
C	0.087761	1.384503	3.694742
C	0.025441	2.766891	3.504196
C	-0.053651	3.286386	2.212721
C	-0.060414	2.416525	1.130111
N	-0.007629	1.085120	1.320149
H	0.042638	-2.826333	-0.188419
H	0.172130	-4.612678	1.566323
H	0.262901	-3.931960	3.976177
H	0.213921	-1.504712	4.567014
H	0.154335	0.959598	4.692515
H	0.041360	3.434386	4.362981
H	-0.103243	4.357388	2.037454
H	-0.107205	2.763118	0.103629

Calculated Atomic Charges



	M U L L I K E N				H I R S H F E L D				V O R O N O I D D				N P A			
	PW91 TZ2P	B3LYP TZ2P	B3LYP DZP	B3LYP DZ	PW91 TZ2P	B3LYP TZ2P	B3LYP DZP	B3LYP DZ	PW91 TZ2P	B3LYP TZ2P	B3LYP DZP	B3LYP DZ	PW91 TZ2P	B3LYP TZ2P	B3LYP DZP	B3LYP DZ
1 B	0.88	0.32	0.97	0.79	0.10	0.13	0.13	0.14	0.07	0.09	0.09	0.10	0.52	0.57	0.71	0.74
2 N	-0.42	-0.22	-0.64	-0.72	-0.01	-0.03	-0.03	-0.03	-0.03	-0.05	-0.06	-0.06	-0.45	-0.47	-0.55	-0.55
3 C	0.43	0.27	0.33	0.04	0.07	0.08	0.08	0.08	0.06	0.06	0.06	0.05	0.07	0.09	0.10	0.11
4 C	0.23	0.13	0.04	-0.26	0.02	0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.03	-0.03	-0.04	-0.21	-0.21	-0.21	-0.21
5 C	0.30	0.16	0.12	-0.18	0.05	0.05	0.05	0.05	0.02	0.02	0.02	0.00	-0.10	-0.09	-0.11	-0.11
6 C	0.23	0.13	0.04	-0.26	0.01	0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.03	-0.03	-0.05	-0.21	-0.21	-0.21	-0.21
7 C	0.43	0.25	0.30	0.01	0.06	0.06	0.06	0.06	0.04	0.04	0.04	0.02	0.05	0.06	0.07	0.07
8 H	-0.16	-0.02	0.04	0.36	0.09	0.09	0.09	0.09	0.12	0.13	0.14	0.15	0.26	0.25	0.26	0.25
9 H	-0.14	-0.02	0.05	0.35	0.10	0.10	0.10	0.10	0.12	0.13	0.13	0.14	0.28	0.27	0.28	0.28
10 H	-0.14	-0.01	0.05	0.35	0.10	0.10	0.10	0.10	0.13	0.14	0.14	0.15	0.28	0.27	0.28	0.28
11 H	-0.15	-0.03	0.04	0.35	0.09	0.09	0.09	0.09	0.12	0.12	0.13	0.14	0.28	0.27	0.28	0.28
12 H	-0.17	-0.04	0.04	0.34	0.07	0.07	0.07	0.07	0.12	0.13	0.13	0.15	0.24	0.24	0.24	0.24
13 N	-0.42	-0.22	-0.64	-0.72	-0.01	-0.03	-0.03	-0.03	-0.03	-0.05	-0.06	-0.06	-0.45	-0.47	-0.55	-0.55
14 C	0.43	0.27	0.33	0.04	0.07	0.08	0.08	0.08	0.06	0.06	0.06	0.05	0.07	0.09	0.10	0.11
15 C	0.23	0.13	0.04	-0.26	0.02	0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.03	-0.03	-0.04	-0.21	-0.21	-0.21	-0.21
16 C	0.30	0.16	0.12	-0.18	0.05	0.05	0.05	0.05	0.02	0.02	0.02	0.00	-0.10	-0.09	-0.11	-0.11
17 C	0.24	0.13	0.04	-0.26	0.01	0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.03	-0.03	-0.05	-0.21	-0.21	-0.21	-0.21
18 C	0.43	0.25	0.30	0.01	0.06	0.06	0.06	0.06	0.04	0.04	0.04	0.02	0.05	0.06	0.07	0.07
19 H	-0.16	-0.02	0.04	0.35	0.09	0.09	0.09	0.09	0.12	0.13	0.14	0.15	0.26	0.25	0.26	0.25
20 H	-0.14	-0.02	0.05	0.35	0.10	0.10	0.10	0.10	0.12	0.13	0.13	0.14	0.28	0.27	0.28	0.28
21 H	-0.14	-0.01	0.05	0.35	0.10	0.10	0.10	0.10	0.13	0.14	0.14	0.15	0.28	0.27	0.28	0.28
22 H	-0.15	-0.03	0.04	0.34	0.09	0.09	0.09	0.09	0.12	0.12	0.13	0.14	0.28	0.27	0.28	0.28
23 H	-0.17	-0.04	0.04	0.34	0.07	0.07	0.07	0.07	0.12	0.13	0.13	0.15	0.24	0.24	0.24	0.24
24 N	-0.42	-0.22	-0.63	-0.72	-0.01	-0.03	-0.03	-0.03	-0.03	-0.05	-0.05	-0.06	-0.45	-0.47	-0.55	-0.55
25 C	0.43	0.27	0.33	0.04	0.07	0.08	0.08	0.08	0.06	0.06	0.06	0.05	0.07	0.09	0.10	0.11
26 C	0.23	0.13	0.04	-0.26	0.02	0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.03	-0.03	-0.04	-0.21	-0.21	-0.21	-0.21
27 C	0.30	0.16	0.12	-0.18	0.05	0.05	0.05	0.05	0.02	0.02	0.02	0.00	-0.10	-0.09	-0.11	-0.11
28 C	0.23	0.13	0.04	-0.26	0.01	0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.03	-0.03	-0.05	-0.21	-0.21	-0.21	-0.21
29 C	0.43	0.25	0.30	0.01	0.06	0.06	0.06	0.06	0.04	0.04	0.04	0.02	0.05	0.06	0.07	0.07
30 H	-0.16	-0.02	0.04	0.36	0.09	0.09	0.09	0.09	0.12	0.13	0.14	0.15	0.26	0.25	0.26	0.25
31 H	-0.14	-0.02	0.05	0.35	0.10	0.10	0.10	0.10	0.13	0.13	0.13	0.14	0.28	0.27	0.28	0.28
32 H	-0.14	-0.01	0.05	0.35	0.10	0.10	0.10	0.10	0.13	0.14	0.14	0.15	0.28	0.27	0.28	0.28
33 H	-0.15	-0.03	0.04	0.35	0.09	0.09	0.09	0.09	0.12	0.12	0.13	0.14	0.28	0.27	0.28	0.28
34 H	-0.17	-0.04	0.04	0.34	0.07	0.07	0.07	0.07	0.12	0.13	0.13	0.15	0.24	0.24	0.24	0.24
35 H	-0.24	-0.11	-0.20	0.08	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.07	-0.06	-0.05	0.01	0.00	-0.02	-0.02

Calculated Atomic Charges



	M U L L I K E N				H I R S H F E L D				V O R O N O I D D				N P A			
	PW91 TZ2P	B3LYP TZ2P	B3LYP DZP	B3LYP DZ	PW91 TZ2P	B3LYP TZ2P	B3LYP DZP	B3LYP DZ	PW91 TZ2P	B3LYP TZ2P	B3LYP DZP	B3LYP DZ	PW91 TZ2P	B3LYP TZ2P	B3LYP DZP	B3LYP DZ
1 B	0.88	0.42	0.92	0.73	0.16	0.18	0.18	0.18	0.10	0.12	0.13	0.14	0.67	0.71	0.91	0.92
2 N	-0.44	-0.23	-0.63	-0.71	-0.02	-0.04	-0.04	-0.04	-0.03	-0.05	-0.06	-0.07	-0.49	-0.51	-0.60	-0.60
3 C	0.45	0.29	0.34	0.05	0.07	0.07	0.07	0.07	0.06	0.06	0.06	0.05	0.08	0.09	0.11	0.11
4 C	0.24	0.13	0.05	-0.26	0.02	0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.03	-0.03	-0.04	-0.21	-0.21	-0.21	-0.21
5 C	0.30	0.16	0.12	-0.17	0.05	0.05	0.05	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	-0.10	-0.08	-0.10	-0.10
6 C	0.24	0.14	0.04	-0.26	0.01	0.01	0.01	0.01	-0.03	-0.04	-0.04	-0.05	-0.22	-0.22	-0.21	-0.21
7 C	0.43	0.24	0.29	0.00	0.06	0.06	0.06	0.06	0.04	0.04	0.03	0.02	0.05	0.06	0.07	0.07
8 H	-0.15	-0.01	0.05	0.37	0.07	0.07	0.07	0.07	0.11	0.13	0.13	0.15	0.26	0.26	0.26	0.26
9 H	-0.15	-0.02	0.05	0.35	0.10	0.10	0.10	0.10	0.13	0.13	0.13	0.15	0.28	0.28	0.29	0.28
10 H	-0.13	-0.01	0.05	0.35	0.10	0.10	0.10	0.10	0.13	0.14	0.14	0.15	0.28	0.27	0.28	0.28
11 H	-0.15	-0.03	0.04	0.35	0.09	0.10	0.09	0.09	0.12	0.12	0.13	0.14	0.28	0.27	0.28	0.28
12 H	-0.17	-0.03	0.04	0.35	0.07	0.07	0.07	0.07	0.12	0.13	0.13	0.15	0.24	0.24	0.24	0.24
13 N	-0.44	-0.23	-0.63	-0.71	-0.02	-0.04	-0.04	-0.04	-0.03	-0.05	-0.06	-0.07	-0.48	-0.51	-0.60	-0.60
14 C	0.45	0.29	0.34	0.05	0.07	0.07	0.07	0.07	0.06	0.06	0.06	0.05	0.08	0.09	0.10	0.11
15 C	0.23	0.13	0.05	-0.26	0.02	0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.03	-0.03	-0.04	-0.21	-0.21	-0.21	-0.21
16 C	0.30	0.16	0.12	-0.17	0.05	0.05	0.05	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	-0.10	-0.08	-0.10	-0.10
17 C	0.23	0.13	0.04	-0.26	0.01	0.01	0.01	0.01	-0.03	-0.04	-0.04	-0.05	-0.22	-0.22	-0.22	-0.21
18 C	0.43	0.24	0.29	0.00	0.06	0.06	0.06	0.06	0.04	0.04	0.03	0.02	0.05	0.06	0.07	0.07
19 H	-0.15	-0.01	0.05	0.37	0.07	0.07	0.07	0.07	0.11	0.13	0.13	0.15	0.26	0.26	0.26	0.26
20 H	-0.15	-0.02	0.05	0.35	0.10	0.10	0.10	0.10	0.13	0.13	0.13	0.15	0.28	0.28	0.29	0.28
21 H	-0.14	-0.01	0.05	0.35	0.10	0.10	0.10	0.10	0.13	0.14	0.14	0.15	0.28	0.27	0.28	0.28
22 H	-0.15	-0.03	0.04	0.35	0.09	0.09	0.09	0.09	0.12	0.12	0.13	0.14	0.28	0.27	0.28	0.28
23 H	-0.17	-0.03	0.04	0.35	0.07	0.07	0.07	0.07	0.12	0.13	0.13	0.14	0.24	0.24	0.24	0.24
24 N	-0.44	-0.23	-0.63	-0.71	-0.02	-0.04	-0.04	-0.04	-0.03	-0.05	-0.06	-0.07	-0.48	-0.51	-0.60	-0.60
25 C	0.45	0.29	0.34	0.05	0.07	0.07	0.07	0.07	0.06	0.06	0.06	0.05	0.08	0.09	0.11	0.11
26 C	0.23	0.13	0.04	-0.26	0.02	0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.03	-0.03	-0.04	-0.21	-0.21	-0.21	-0.21
27 C	0.30	0.16	0.12	-0.17	0.05	0.05	0.05	0.05	0.03	0.02	0.02	0.01	-0.10	-0.08	-0.10	-0.10
28 C	0.24	0.13	0.04	-0.26	0.01	0.01	0.01	0.01	-0.03	-0.04	-0.04	-0.05	-0.22	-0.22	-0.21	-0.21
29 C	0.43	0.24	0.29	0.00	0.06	0.06	0.06	0.06	0.04	0.03	0.03	0.02	0.05	0.06	0.07	0.07
30 H	-0.15	-0.01	0.05	0.37	0.07	0.07	0.07	0.07	0.11	0.13	0.13	0.15	0.26	0.26	0.26	0.26
31 H	-0.14	-0.02	0.05	0.35	0.10	0.10	0.10	0.10	0.13	0.13	0.13	0.15	0.28	0.28	0.29	0.28
32 H	-0.14	-0.01	0.05	0.35	0.10	0.10	0.10	0.10	0.13	0.14	0.14	0.15	0.28	0.27	0.28	0.28
33 H	-0.15	-0.03	0.04	0.35	0.09	0.10	0.09	0.09	0.12	0.12	0.13	0.14	0.28	0.27	0.28	0.28
34 H	-0.17	-0.03	0.04	0.35	0.07	0.07	0.07	0.07	0.12	0.13	0.13	0.14	0.24	0.24	0.24	0.24
35 Br	-0.28	-0.27	-0.23	0.01	0.03	0.03	0.04	0.04	-0.06	-0.07	-0.06	-0.07	-0.06	-0.08	-0.12	-0.11

Calculated Atomic Charges



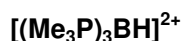
	M U L L I K E N				H I R S H F E L D				V O R O N O I D D				N P A			
	PW91 TZ2P	B3LYP TZ2P	B3LYP D2P	B3LYP DZ	PW91 TZ2P	B3LYP TZ2P	B3LYP D2P	B3LYP DZ	PW91 TZ2P	B3LYP TZ2P	B3LYP D2P	B3LYP DZ	PW91 TZ2P	B3LYP TZ2P	B3LYP D2P	B3LYP DZ
1 B	0.89	0.32	0.96	0.79	0.10	0.12	0.13	0.13	0.06	0.09	0.09	0.10	0.52	0.57	0.71	0.74
2 N	-0.43	-0.23	-0.64	-0.73	-0.02	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.06	-0.07	-0.07	-0.46	-0.48	-0.56	-0.56
3 C	0.42	0.27	0.34	0.04	0.06	0.07	0.07	0.07	0.05	0.05	0.05	0.04	0.07	0.08	0.10	0.10
4 C	0.26	0.14	0.08	-0.23	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.04	-0.04	-0.06	-0.21	-0.21	-0.22	-0.22
5 C	0.10	0.04	-0.11	-0.09	0.08	0.09	0.08	0.08	0.06	0.06	0.05	0.04	0.10	0.11	0.09	0.09
6 C	0.25	0.13	0.08	-0.23	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.03	-0.04	-0.04	-0.06	-0.22	-0.22	-0.23	-0.22
7 C	0.42	0.25	0.31	0.02	0.05	0.06	0.06	0.06	0.03	0.03	0.04	0.02	0.05	0.07	0.08	0.08
8 C	0.54	0.63	0.18	-0.63	-0.08	-0.09	-0.08	-0.07	-0.10	-0.11	-0.11	-0.14	-0.70	-0.67	-0.69	-0.68
9 H	-0.17	-0.03	0.03	0.35	0.08	0.09	0.09	0.09	0.12	0.13	0.13	0.15	0.25	0.25	0.25	0.25
10 H	-0.15	-0.04	0.04	0.34	0.09	0.09	0.09	0.09	0.12	0.12	0.12	0.14	0.27	0.26	0.27	0.27
11 H	-0.12	-0.12	0.04	0.30	0.08	0.08	0.08	0.08	0.10	0.11	0.11	0.12	0.28	0.27	0.28	0.28
12 H	-0.15	-0.16	0.02	0.29	0.08	0.08	0.07	0.07	0.09	0.09	0.09	0.10	0.27	0.26	0.27	0.27
13 H	-0.18	-0.19	0.00	0.28	0.07	0.07	0.07	0.07	0.08	0.08	0.09	0.10	0.26	0.25	0.26	0.26
14 H	-0.17	-0.04	0.03	0.33	0.08	0.09	0.08	0.09	0.11	0.11	0.12	0.13	0.27	0.26	0.27	0.27
15 H	-0.18	-0.05	0.03	0.34	0.07	0.07	0.07	0.07	0.12	0.13	0.13	0.14	0.24	0.24	0.24	0.24
16 N	-0.43	-0.23	-0.64	-0.73	-0.02	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.06	-0.07	-0.07	-0.46	-0.48	-0.56	-0.56
17 C	0.42	0.26	0.33	0.04	0.06	0.07	0.07	0.07	0.05	0.05	0.05	0.04	0.06	0.08	0.10	0.10
18 C	0.26	0.14	0.08	-0.23	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.04	-0.04	-0.06	-0.21	-0.21	-0.22	-0.22
19 C	0.10	0.04	-0.11	-0.09	0.08	0.09	0.08	0.08	0.06	0.06	0.05	0.04	0.10	0.11	0.09	0.09
20 C	0.25	0.13	0.08	-0.23	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.03	-0.04	-0.04	-0.06	-0.22	-0.22	-0.23	-0.22
21 C	0.42	0.25	0.31	0.02	0.05	0.06	0.06	0.06	0.04	0.03	0.04	0.02	0.05	0.07	0.08	0.08
22 C	0.54	0.63	0.18	-0.63	-0.08	-0.09	-0.08	-0.07	-0.10	-0.11	-0.11	-0.14	-0.70	-0.67	-0.69	-0.68
23 H	-0.17	-0.03	0.03	0.35	0.08	0.09	0.09	0.09	0.12	0.13	0.13	0.15	0.25	0.25	0.25	0.25
24 H	-0.15	-0.04	0.04	0.34	0.09	0.09	0.09	0.09	0.12	0.12	0.12	0.14	0.27	0.26	0.27	0.27
25 H	-0.15	-0.16	0.02	0.29	0.08	0.08	0.07	0.07	0.09	0.09	0.09	0.10	0.27	0.26	0.27	0.27
26 H	-0.12	-0.13	0.04	0.30	0.08	0.08	0.08	0.08	0.10	0.11	0.11	0.12	0.28	0.27	0.28	0.28
27 H	-0.18	-0.19	0.00	0.28	0.07	0.07	0.07	0.07	0.08	0.08	0.09	0.10	0.26	0.25	0.26	0.26
28 H	-0.17	-0.04	0.03	0.33	0.08	0.09	0.08	0.09	0.11	0.11	0.12	0.13	0.27	0.26	0.27	0.27
29 H	-0.18	-0.05	0.03	0.34	0.07	0.07	0.07	0.07	0.12	0.13	0.13	0.15	0.24	0.24	0.24	0.24
30 N	-0.43	-0.23	-0.64	-0.73	-0.02	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.06	-0.07	-0.07	-0.46	-0.48	-0.56	-0.56
31 C	0.42	0.27	0.34	0.04	0.06	0.07	0.07	0.07	0.05	0.05	0.05	0.04	0.07	0.09	0.11	0.11
32 C	0.26	0.14	0.08	-0.23	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.04	-0.04	-0.06	-0.21	-0.22	-0.22	-0.22
33 C	0.10	0.04	-0.11	-0.09	0.08	0.09	0.08	0.08	0.06	0.06	0.05	0.04	0.10	0.12	0.09	0.09
34 C	0.26	0.14	0.08	-0.23	0.00	-0.01	0.00	-0.01	-0.03	-0.04	-0.04	-0.06	-0.22	-0.22	-0.22	-0.22
35 C	0.42	0.25	0.31	0.01	0.05	0.06	0.06	0.06	0.03	0.03	0.03	0.02	0.05	0.06	0.08	0.08
36 C	0.54	0.63	0.18	-0.63	-0.08	-0.09	-0.08	-0.07	-0.10	-0.11	-0.11	-0.14	-0.70	-0.67	-0.69	-0.68
37 H	-0.17	-0.03	0.03	0.35	0.08	0.09	0.09	0.09	0.12	0.13	0.13	0.15	0.25	0.25	0.25	0.25
38 H	-0.15	-0.04	0.04	0.34	0.09	0.09	0.09	0.09	0.11	0.12	0.12	0.14	0.27	0.26	0.27	0.27
39 H	-0.16	-0.17	0.01	0.28	0.07	0.07	0.07	0.07	0.08	0.09	0.09	0.10	0.26	0.25	0.27	0.26
40 H	-0.16	-0.17	0.01	0.28	0.07	0.07	0.07	0.07	0.08	0.09	0.09	0.10	0.26	0.25	0.27	0.26
41 H	-0.12	-0.12	0.05	0.30	0.08	0.08	0.08	0.08	0.10	0.11	0.11	0.12	0.29	0.27	0.29	0.28
42 H	-0.16	-0.04	0.03	0.33	0.08	0.09	0.08	0.09	0.11	0.12	0.12	0.13	0.27	0.26	0.27	0.27
43 H	-0.18	-0.05	0.03	0.34	0.07	0.07	0.07	0.07	0.12	0.13	0.13	0.14	0.24	0.24	0.24	0.24
44 H	-0.25	-0.12	-0.21	0.08	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.08	-0.07	-0.05	0.01	-0.01	-0.02	-0.03

Calculated Atomic Charges



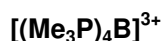
	M U L L I K E N				H I R S H F E L D				V O R O N O I D D				N P A			
	PW91 TZ2P	B3LYP TZ2P	B3LYP DZP	B3LYP DZ	PW91 TZ2P	B3LYP TZ2P	B3LYP DZP	B3LYP DZ	PW91 TZ2P	B3LYP TZ2P	B3LYP DZP	B3LYP DZ	PW91 TZ2P	B3LYP TZ2P	B3LYP DZP	B3LYP DZ
1 B	1.15	0.37	1.08	1.32	0.19	0.21	0.22	0.23	0.13	0.15	0.16	0.19	0.98	1.02	1.21	1.26
2 N	-0.50	-0.27	-0.65	-0.76	-0.03	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.09	-0.09	-0.10	-0.51	-0.54	-0.62	-0.62
3 C	0.40	0.21	0.25	-0.04	0.05	0.05	0.06	0.06	0.02	0.02	0.02	0.01	0.03	0.05	0.06	0.06
4 C	0.27	0.14	0.10	-0.21	0.01	0.00	0.01	0.01	-0.03	-0.04	-0.04	-0.05	-0.21	-0.21	-0.21	-0.21
5 C	0.10	0.04	-0.11	-0.09	0.10	0.10	0.09	0.09	0.07	0.07	0.06	0.06	0.13	0.14	0.11	0.11
6 C	0.27	0.15	0.09	-0.22	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.03	-0.03	-0.05	-0.21	-0.21	-0.21	-0.21
7 C	0.43	0.27	0.31	0.02	0.06	0.06	0.06	0.06	0.04	0.04	0.04	0.03	0.06	0.07	0.09	0.09
8 C	0.54	0.58	0.17	-0.63	-0.07	-0.08	-0.07	-0.07	-0.10	-0.11	-0.11	-0.14	-0.70	-0.68	-0.69	-0.68
9 H	-0.16	-0.03	0.05	0.36	0.07	0.08	0.08	0.08	0.13	0.14	0.14	0.15	0.25	0.25	0.25	0.25
10 H	-0.15	-0.02	0.05	0.35	0.09	0.10	0.10	0.10	0.12	0.13	0.13	0.15	0.28	0.28	0.28	0.28
11 H	-0.16	-0.14	0.02	0.30	0.08	0.08	0.08	0.08	0.09	0.10	0.10	0.11	0.27	0.26	0.27	0.27
12 H	-0.11	-0.09	0.06	0.32	0.09	0.09	0.09	0.09	0.12	0.12	0.12	0.13	0.30	0.29	0.30	0.29
13 H	-0.15	-0.13	0.03	0.30	0.08	0.08	0.08	0.08	0.10	0.10	0.10	0.11	0.28	0.27	0.28	0.28
14 H	-0.15	-0.03	0.05	0.35	0.10	0.10	0.10	0.10	0.13	0.13	0.13	0.15	0.28	0.28	0.28	0.28
15 H	-0.18	-0.04	0.06	0.36	0.07	0.07	0.07	0.07	0.12	0.13	0.13	0.15	0.25	0.25	0.25	0.24
16 N	-0.50	-0.27	-0.65	-0.76	-0.03	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.09	-0.09	-0.10	-0.51	-0.54	-0.62	-0.62
17 C	0.43	0.28	0.31	0.02	0.06	0.06	0.06	0.06	0.04	0.04	0.04	0.03	0.06	0.08	0.09	0.09
18 C	0.27	0.14	0.09	-0.22	0.01	0.00	0.01	0.00	-0.02	-0.03	-0.03	-0.05	-0.21	-0.21	-0.21	-0.21
19 C	0.10	0.04	-0.11	-0.09	0.10	0.10	0.09	0.09	0.07	0.07	0.06	0.06	0.13	0.14	0.11	0.11
20 C	0.27	0.15	0.10	-0.21	0.01	0.01	0.01	0.01	-0.03	-0.04	-0.04	-0.05	-0.21	-0.21	-0.21	-0.21
21 C	0.40	0.21	0.26	-0.04	0.05	0.05	0.06	0.06	0.02	0.02	0.02	0.01	0.03	0.05	0.06	0.06
22 C	0.54	0.58	0.17	-0.63	-0.07	-0.08	-0.07	-0.07	-0.10	-0.11	-0.11	-0.14	-0.70	-0.68	-0.69	-0.68
23 H	-0.17	-0.04	0.06	0.36	0.07	0.07	0.07	0.07	0.12	0.13	0.13	0.15	0.25	0.25	0.25	0.24
24 H	-0.15	-0.03	0.05	0.35	0.09	0.10	0.09	0.10	0.12	0.13	0.13	0.14	0.28	0.28	0.28	0.28
25 H	-0.11	-0.09	0.06	0.32	0.09	0.09	0.09	0.09	0.12	0.12	0.12	0.13	0.30	0.29	0.30	0.29
26 H	-0.16	-0.14	0.02	0.30	0.08	0.08	0.08	0.08	0.09	0.10	0.10	0.11	0.27	0.26	0.27	0.27
27 H	-0.14	-0.12	0.03	0.30	0.08	0.08	0.08	0.08	0.10	0.10	0.10	0.11	0.28	0.27	0.28	0.28
28 H	-0.15	-0.02	0.05	0.35	0.10	0.10	0.10	0.10	0.13	0.13	0.13	0.15	0.28	0.28	0.28	0.28
29 H	-0.16	-0.03	0.05	0.36	0.07	0.08	0.08	0.08	0.12	0.14	0.14	0.15	0.25	0.25	0.25	0.25
30 N	-0.50	-0.27	-0.65	-0.76	-0.03	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.09	-0.09	-0.10	-0.51	-0.54	-0.62	-0.62
31 C	0.40	0.21	0.26	-0.04	0.05	0.05	0.06	0.06	0.02	0.02	0.02	0.01	0.03	0.05	0.06	0.06
32 C	0.27	0.14	0.10	-0.21	0.01	0.00	0.01	0.01	-0.03	-0.04	-0.04	-0.05	-0.21	-0.21	-0.21	-0.21
33 C	0.10	0.04	-0.11	-0.09	0.10	0.10	0.09	0.09	0.07	0.07	0.06	0.06	0.13	0.14	0.11	0.11
34 C	0.27	0.15	0.09	-0.22	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.03	-0.03	-0.05	-0.21	-0.21	-0.21	-0.21
35 C	0.43	0.27	0.31	0.02	0.06	0.06	0.06	0.06	0.04	0.04	0.04	0.03	0.06	0.07	0.09	0.09
36 C	0.54	0.58	0.17	-0.63	-0.07	-0.08	-0.07	-0.07	-0.10	-0.11	-0.11	-0.14	-0.70	-0.68	-0.69	-0.68
37 H	-0.16	-0.03	0.05	0.36	0.07	0.08	0.08	0.08	0.13	0.14	0.14	0.15	0.25	0.25	0.25	0.25
38 H	-0.15	-0.02	0.05	0.35	0.09	0.10	0.10	0.10	0.12	0.13	0.13	0.15	0.28	0.28	0.28	0.28
39 H	-0.16	-0.14	0.02	0.30	0.08	0.08	0.08	0.08	0.09	0.10	0.10	0.11	0.27	0.26	0.27	0.27
40 H	-0.15	-0.13	0.03	0.30	0.08	0.08	0.08	0.08	0.10	0.10	0.10	0.11	0.28	0.27	0.28	0.28
41 H	-0.11	-0.09	0.06	0.32	0.09	0.09	0.09	0.09	0.12	0.12	0.12	0.13	0.30	0.29	0.30	0.29
42 H	-0.15	-0.03	0.05	0.35	0.10	0.10	0.10	0.10	0.13	0.13	0.13	0.15	0.28	0.28	0.28	0.28
43 H	-0.18	-0.04	0.06	0.36	0.07	0.07	0.07	0.07	0.12	0.13	0.13	0.15	0.25	0.25	0.25	0.24
44 N	-0.50	-0.27	-0.65	-0.76	-0.03	-0.05	-0.05	-0.05	-0.07	-0.09	-0.09	-0.10	-0.51	-0.54	-0.62	-0.62
45 C	0.44	0.27	0.31	0.02	0.06	0.06	0.06	0.06	0.04	0.04	0.04	0.03	0.06	0.07	0.09	0.09
46 C	0.27	0.15	0.09	-0.22	0.01	0.01	0.01	0.00	-0.02	-0.03	-0.03	-0.05	-0.21	-0.21	-0.21	-0.21
47 C	0.10	0.04	-0.11	-0.09	0.10	0.10	0.09	0.09	0.07	0.07	0.06	0.06	0.13	0.14	0.11	0.11
48 C	0.27	0.14	0.10	-0.21	0.01	0.00	0.01	0.01	-0.03	-0.04	-0.04	-0.05	-0.21	-0.21	-0.21	-0.21
49 C	0.40	0.21	0.26	-0.04	0.05	0.05	0.06	0.06	0.02	0.02	0.02	0.01	0.03	0.05	0.06	0.06
50 C	0.54	0.58	0.17	-0.63	-0.07	-0.08	-0.07	-0.07	-0.10	-0.11	-0.11	-0.14	-0.70	-0.68	-0.69	-0.68
51 H	-0.18	-0.04	0.06	0.36	0.07	0.07	0.07	0.07	0.12	0.13	0.13	0.15	0.25	0.25	0.25	0.24
52 H	-0.15	-0.03	0.05	0.35	0.10	0.10	0.10	0.10	0.13	0.13	0.13	0.15	0.28	0.28	0.28	0.28
53 H	-0.14	-0.12	0.03	0.30	0.08	0.08	0.08	0.08	0.10	0.10	0.10	0.12	0.28	0.27	0.28	0.28
54 H	-0.11	-0.09	0.06	0.32	0.09	0.09	0.09	0.09	0.12	0.12	0.12	0.13	0.30	0.29	0.30	0.29
55 H	-0.16	-0.14	0.02	0.29	0.08	0.08	0.08	0.08	0.09	0.10	0.10	0.11	0.27	0.26	0.27	0.27
56 H	-0.15	-0.02	0.05	0.35	0.09	0.10	0.09	0.10	0.12	0.13	0.13	0.15	0.28	0.28	0.28	0.28
57 H	-0.16	-0.03	0.05	0.36	0.07	0.08	0.08	0.08	0.12	0.14	0.14	0.15	0.25	0.25	0.25	0.25

Calculated Atomic Charges



	M U L L I K E N				H I R S H F E L D				V O R O N O I				N P A			
	PW91 TZ2P	B3LYP TZ2P	B3LYP DZP	B3LYP DZ	PW91 TZ2P	B3LYP TZ2P	B3LYP DZP	B3LYP DZ	PW91 TZ2P	B3LYP TZ2P	B3LYP DZP	B3LYP DZ	PW91 TZ2P	B3LYP TZ2P	B3LYP DZP	B3LYP DZ
1 B	-0.31	-0.10	-0.36	-0.73	-0.09	-0.08	-0.08	-0.08	-0.16	-0.16	-0.16	-0.15	-0.80	-0.78	-0.69	-0.59
2 P	0.82	0.44	0.79	0.96	0.37	0.40	0.39	0.41	0.28	0.29	0.27	0.27	1.26	1.28	1.26	1.13
3 C	0.50	0.49	-0.10	-0.96	-0.11	-0.12	-0.11	-0.11	-0.13	-0.14	-0.14	-0.16	-0.96	-0.93	-0.96	-0.92
4 H	-0.17	-0.14	0.04	0.32	0.08	0.08	0.08	0.07	0.10	0.10	0.10	0.11	0.28	0.27	0.28	0.28
5 H	-0.16	-0.11	0.03	0.30	0.07	0.07	0.07	0.06	0.09	0.09	0.09	0.10	0.27	0.26	0.27	0.27
6 H	-0.15	-0.10	0.05	0.32	0.08	0.08	0.08	0.08	0.10	0.10	0.10	0.11	0.29	0.28	0.29	0.29
7 C	0.50	0.46	-0.10	-0.97	-0.11	-0.12	-0.12	-0.12	-0.13	-0.15	-0.14	-0.17	-0.96	-0.94	-0.97	-0.93
8 H	-0.16	-0.15	0.03	0.30	0.07	0.07	0.07	0.07	0.09	0.10	0.10	0.10	0.27	0.26	0.27	0.27
9 H	-0.17	-0.14	0.01	0.29	0.07	0.07	0.06	0.06	0.08	0.09	0.09	0.10	0.27	0.26	0.27	0.27
10 H	-0.15	-0.09	0.05	0.33	0.08	0.08	0.08	0.08	0.10	0.11	0.11	0.11	0.29	0.28	0.29	0.29
11 C	0.48	0.46	-0.12	-0.99	-0.11	-0.12	-0.11	-0.11	-0.13	-0.14	-0.14	-0.16	-0.96	-0.94	-0.96	-0.93
12 H	-0.17	-0.13	0.04	0.31	0.08	0.08	0.07	0.07	0.10	0.10	0.10	0.11	0.28	0.27	0.28	0.28
13 H	-0.16	-0.08	0.05	0.33	0.08	0.09	0.08	0.08	0.10	0.10	0.10	0.11	0.29	0.28	0.29	0.29
14 H	-0.18	-0.16	0.01	0.29	0.07	0.07	0.06	0.06	0.08	0.08	0.09	0.10	0.26	0.25	0.26	0.26
15 P	0.82	0.44	0.79	0.96	0.37	0.40	0.39	0.41	0.28	0.29	0.27	0.27	1.26	1.28	1.26	1.13
16 C	0.50	0.49	-0.10	-0.96	-0.11	-0.12	-0.11	-0.11	-0.13	-0.14	-0.14	-0.16	-0.96	-0.93	-0.96	-0.92
17 H	-0.17	-0.14	0.04	0.32	0.08	0.08	0.08	0.07	0.10	0.10	0.10	0.11	0.28	0.27	0.28	0.28
18 H	-0.16	-0.11	0.03	0.30	0.07	0.07	0.07	0.06	0.09	0.09	0.09	0.10	0.27	0.26	0.27	0.27
19 H	-0.15	-0.10	0.05	0.32	0.08	0.08	0.08	0.08	0.10	0.10	0.10	0.11	0.29	0.28	0.29	0.29
20 C	0.50	0.46	-0.10	-0.97	-0.11	-0.12	-0.12	-0.12	-0.13	-0.15	-0.14	-0.17	-0.96	-0.94	-0.97	-0.93
21 H	-0.17	-0.14	0.01	0.29	0.07	0.07	0.06	0.06	0.08	0.09	0.09	0.10	0.27	0.26	0.27	0.27
22 H	-0.15	-0.09	0.05	0.33	0.08	0.08	0.08	0.08	0.10	0.11	0.11	0.11	0.29	0.28	0.29	0.29
23 H	-0.16	-0.15	0.03	0.30	0.07	0.07	0.07	0.07	0.09	0.10	0.10	0.10	0.27	0.26	0.27	0.27
24 C	0.48	0.46	-0.12	-0.99	-0.11	-0.12	-0.11	-0.11	-0.13	-0.14	-0.14	-0.16	-0.96	-0.94	-0.96	-0.93
25 H	-0.17	-0.13	0.04	0.31	0.08	0.08	0.07	0.07	0.10	0.10	0.10	0.11	0.28	0.27	0.28	0.28
26 H	-0.16	-0.08	0.05	0.33	0.08	0.09	0.08	0.08	0.10	0.10	0.10	0.11	0.29	0.28	0.29	0.29
27 H	-0.18	-0.16	0.01	0.29	0.07	0.07	0.06	0.06	0.08	0.08	0.09	0.10	0.26	0.25	0.26	0.26
28 P	0.82	0.44	0.79	0.96	0.37	0.40	0.39	0.41	0.28	0.29	0.27	0.27	1.26	1.28	1.26	1.13
29 C	0.50	0.49	-0.10	-0.96	-0.11	-0.12	-0.11	-0.11	-0.13	-0.14	-0.14	-0.16	-0.96	-0.93	-0.96	-0.92
30 H	-0.17	-0.14	0.04	0.32	0.08	0.08	0.08	0.07	0.10	0.10	0.10	0.11	0.28	0.27	0.28	0.28
31 H	-0.16	-0.11	0.03	0.30	0.07	0.07	0.07	0.06	0.09	0.09	0.09	0.10	0.27	0.26	0.27	0.27
32 H	-0.15	-0.10	0.05	0.32	0.08	0.08	0.08	0.08	0.10	0.10	0.10	0.11	0.29	0.28	0.29	0.29
33 C	0.50	0.46	-0.10	-0.97	-0.11	-0.12	-0.12	-0.12	-0.13	-0.15	-0.14	-0.17	-0.96	-0.94	-0.97	-0.93
34 H	-0.16	-0.15	0.03	0.30	0.07	0.07	0.07	0.07	0.09	0.10	0.10	0.10	0.27	0.26	0.27	0.27
35 H	-0.17	-0.14	0.01	0.29	0.07	0.07	0.06	0.06	0.08	0.09	0.09	0.10	0.27	0.26	0.27	0.27
36 H	-0.15	-0.09	0.05	0.33	0.08	0.08	0.08	0.08	0.10	0.11	0.11	0.11	0.29	0.28	0.29	0.29
37 C	0.48	0.46	-0.12	-0.99	-0.11	-0.12	-0.11	-0.11	-0.13	-0.14	-0.14	-0.16	-0.96	-0.94	-0.96	-0.93
38 H	-0.17	-0.13	0.04	0.31	0.08	0.08	0.07	0.07	0.10	0.10	0.10	0.11	0.28	0.27	0.28	0.28
39 H	-0.18	-0.16	0.01	0.29	0.07	0.07	0.06	0.06	0.08	0.08	0.09	0.10	0.26	0.25	0.26	0.26
40 H	-0.16	-0.08	0.05	0.33	0.08	0.09	0.08	0.08	0.10	0.10	0.10	0.11	0.29	0.28	0.29	0.29
41 H	-0.14	-0.12	0.00	0.22	-0.03	-0.04	-0.04	-0.05	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	0.11	0.09	0.07	0.06

Calculated Atomic Charges



	M U L L I K E N				H I R S H F E L D				V O R O N O I D D				N P A			
	PW91 TZ2P	B3LYP TZ2P	B3LYP DZP	B3LYP DZ	PW91 TZ2P	B3LYP TZ2P	B3LYP DZP	B3LYP DZ	PW91 TZ2P	B3LYP TZ2P	B3LYP DZP	B3LYP DZ	PW91 TZ2P	B3LYP TZ2P	B3LYP DZP	B3LYP DZ
1 B	-0.74	-0.22	-0.62	-0.75	-0.05	-0.06	-0.06	-0.06	-0.15	-0.16	-0.17	-0.16	-0.69	-0.69	-0.67	-0.54
2 P	0.90	0.39	0.81	0.97	0.37	0.38	0.38	0.40	0.28	0.29	0.28	0.27	1.23	1.24	1.24	1.11
3 C	0.48	0.47	-0.12	-0.99	0.37	0.38	0.38	0.40	-0.13	-0.14	-0.14	-0.16	1.23	1.24	1.24	1.11
4 H	-0.15	-0.09	0.08	0.35	0.37	0.38	0.38	0.40	0.12	0.12	0.12	0.13	1.23	1.24	1.24	1.11
5 H	-0.17	-0.13	0.03	0.31	0.37	0.38	0.38	0.40	0.09	0.09	0.09	0.10	1.23	1.24	1.24	1.11
6 H	-0.15	-0.12	0.04	0.31	-0.11	-0.12	-0.11	-0.11	0.09	0.10	0.10	0.10	-0.96	-0.93	-0.96	-0.93
7 C	0.48	0.47	-0.12	-0.99	-0.11	-0.12	-0.11	-0.11	-0.13	-0.14	-0.14	-0.16	-0.96	-0.93	-0.96	-0.93
8 H	-0.15	-0.09	0.08	0.35	-0.11	-0.12	-0.11	-0.11	0.12	0.12	0.12	0.13	-0.96	-0.93	-0.96	-0.93
9 H	-0.17	-0.13	0.03	0.31	-0.11	-0.12	-0.11	-0.11	0.09	0.09	0.09	0.10	-0.96	-0.93	-0.96	-0.93
10 H	-0.15	-0.12	0.04	0.31	-0.11	-0.12	-0.11	-0.11	0.09	0.10	0.10	0.11	-0.96	-0.93	-0.96	-0.93
11 C	0.48	0.47	-0.12	-0.99	-0.11	-0.12	-0.11	-0.11	-0.13	-0.14	-0.14	-0.16	-0.96	-0.93	-0.96	-0.93
12 H	-0.15	-0.09	0.08	0.35	-0.11	-0.12	-0.11	-0.11	0.12	0.12	0.12	0.13	-0.96	-0.93	-0.96	-0.93
13 H	-0.17	-0.13	0.03	0.31	-0.11	-0.12	-0.11	-0.11	0.09	0.09	0.09	0.10	-0.96	-0.93	-0.96	-0.93
14 H	-0.15	-0.12	0.04	0.31	-0.11	-0.12	-0.11	-0.11	0.09	0.10	0.10	0.10	-0.96	-0.93	-0.96	-0.93
15 P	0.90	0.39	0.81	0.97	-0.11	-0.12	-0.11	-0.11	0.28	0.29	0.28	0.27	-0.96	-0.93	-0.96	-0.93
16 C	0.48	0.47	-0.11	-0.99	-0.11	-0.12	-0.11	-0.11	-0.13	-0.14	-0.14	-0.16	-0.96	-0.93	-0.96	-0.93
17 H	-0.15	-0.09	0.08	0.35	-0.11	-0.12	-0.11	-0.11	0.12	0.12	0.12	0.13	-0.96	-0.93	-0.96	-0.93
18 H	-0.17	-0.13	0.03	0.31	0.10	0.10	0.09	0.09	0.09	0.09	0.09	0.10	0.31	0.30	0.31	0.31
19 H	-0.15	-0.12	0.04	0.32	0.07	0.07	0.07	0.07	0.09	0.10	0.10	0.11	0.27	0.26	0.27	0.27
20 C	0.49	0.47	-0.11	-0.99	0.07	0.07	0.07	0.07	-0.13	-0.14	-0.14	-0.16	0.28	0.27	0.27	0.27
21 H	-0.15	-0.09	0.08	0.35	0.10	0.10	0.09	0.09	0.12	0.12	0.12	0.13	0.31	0.30	0.31	0.31
22 H	-0.17	-0.13	0.03	0.31	0.07	0.07	0.07	0.07	0.09	0.09	0.09	0.10	0.27	0.26	0.27	0.27
23 H	-0.15	-0.12	0.04	0.32	0.07	0.07	0.07	0.07	0.09	0.10	0.10	0.11	0.28	0.27	0.27	0.27
24 C	0.49	0.47	-0.11	-0.99	0.10	0.10	0.09	0.09	-0.13	-0.14	-0.14	-0.16	0.31	0.30	0.31	0.31
25 H	-0.15	-0.09	0.08	0.35	0.07	0.07	0.07	0.07	0.12	0.12	0.12	0.13	0.27	0.26	0.27	0.27
26 H	-0.17	-0.13	0.03	0.31	0.07	0.07	0.07	0.07	0.09	0.09	0.09	0.10	0.28	0.27	0.27	0.27
27 H	-0.15	-0.12	0.04	0.32	0.10	0.10	0.09	0.09	0.09	0.10	0.10	0.11	0.31	0.30	0.31	0.31
28 P	0.90	0.39	0.81	0.97	0.07	0.07	0.07	0.07	0.28	0.29	0.28	0.27	0.27	0.26	0.27	0.27
29 C	0.48	0.47	-0.12	-0.99	0.07	0.07	0.07	0.07	-0.13	-0.14	-0.14	-0.16	0.28	0.27	0.27	0.27
30 H	-0.15	-0.09	0.08	0.35	0.10	0.10	0.09	0.09	0.12	0.12	0.12	0.13	0.31	0.30	0.31	0.31
31 H	-0.17	-0.13	0.03	0.31	0.07	0.07	0.07	0.07	0.09	0.09	0.09	0.10	0.27	0.26	0.27	0.27
32 H	-0.15	-0.12	0.04	0.31	0.07	0.07	0.07	0.07	0.09	0.10	0.10	0.10	0.28	0.27	0.27	0.27
33 C	0.48	0.47	-0.11	-0.99	0.10	0.10	0.09	0.09	-0.13	-0.14	-0.14	-0.16	0.31	0.30	0.31	0.31
34 H	-0.15	-0.09	0.08	0.35	0.07	0.07	0.07	0.07	0.12	0.12	0.12	0.13	0.27	0.26	0.27	0.27
35 H	-0.17	-0.13	0.03	0.31	0.07	0.07	0.07	0.07	0.09	0.09	0.09	0.10	0.28	0.27	0.27	0.27
36 H	-0.15	-0.12	0.04	0.31	0.10	0.10	0.09	0.09	0.09	0.10	0.10	0.10	0.31	0.30	0.31	0.31
37 C	0.48	0.47	-0.11	-0.99	0.07	0.07	0.07	0.07	-0.13	-0.14	-0.14	-0.16	0.27	0.26	0.27	0.27
38 H	-0.15	-0.09	0.08	0.35	0.07	0.07	0.07	0.07	0.12	0.12	0.12	0.13	0.28	0.27	0.27	0.27
39 H	-0.17	-0.13	0.03	0.31	0.10	0.10	0.09	0.09	0.09	0.09	0.09	0.10	0.31	0.30	0.31	0.31
40 H	-0.15	-0.12	0.04	0.32	0.07	0.07	0.07	0.07	0.09	0.10	0.10	0.10	0.27	0.26	0.27	0.27
41 P	0.90	0.39	0.81	0.97	0.07	0.07	0.07	0.07	0.28	0.29	0.28	0.27	0.28	0.27	0.27	0.27
42 C	0.48	0.47	-0.11	-0.99	0.10	0.10	0.09	0.09	-0.13	-0.14	-0.14	-0.16	0.31	0.30	0.31	0.31
43 H	-0.15	-0.09	0.08	0.35	0.07	0.07	0.07	0.07	0.12	0.12	0.12	0.13	0.27	0.26	0.27	0.27
44 H	-0.17	-0.13	0.03	0.31	0.07	0.07	0.07	0.07	0.09	0.09	0.09	0.10	0.28	0.27	0.27	0.27
45 H	-0.15	-0.12	0.04	0.32	0.10	0.10	0.09	0.09	0.09	0.10	0.10	0.11	0.31	0.30	0.31	0.31
46 C	0.48	0.47	-0.12	-0.99	0.07	0.07	0.07	0.07	-0.13	-0.14	-0.14	-0.16	0.27	0.26	0.27	0.27
47 H	-0.15	-0.09	0.08	0.35	0.07	0.07	0.07	0.07	0.12	0.12	0.12	0.13	0.28	0.27	0.27	0.27
48 H	-0.17	-0.13	0.03	0.31	0.10	0.10	0.09	0.09	0.09	0.09	0.09	0.10	0.31	0.30	0.31	0.31
49 H	-0.15	-0.12	0.04	0.31	0.07	0.07	0.07	0.07	0.09	0.10	0.10	0.10	0.27	0.26	0.27	0.27
50 C	0.48	0.47	-0.12	-0.99	0.07	0.07	0.07	0.07	-0.13	-0.14	-0.14	-0.16	0.28	0.27	0.27	0.27
51 H	-0.15	-0.09	0.08	0.35	0.10	0.10	0.09	0.09	0.12	0.12	0.12	0.13	0.31	0.30	0.31	0.31
52 H	-0.17	-0.13	0.03	0.31	0.07	0.07	0.07	0.07	0.09	0.09	0.09	0.10	0.27	0.26	0.27	0.27
53 H	-0.15	-0.12	0.04	0.31	0.07	0.07	0.07	0.07	0.09	0.10	0.10	0.10	0.28	0.27	0.27	0.27

Calculated Atomic Charges

[[HC(CME)₂(NC₆F₅)₂)B(bipy)]²⁺, Compound 14

	M U L L I K E N						H I R S H F E L D						V O R O N O I						N P A			
	PW91 TZ2P	PW91 TZP	B3LYP TZ2P	B3LYP TZP	B3LYP D2P	B3LYP D2	PW91 TZ2P	PW91 TZP	B3LYP TZ2P	B3LYP TZP	B3LYP D2P	B3LYP D2	PW91 TZ2P	PW91 TZP	B3LYP TZ2P	B3LYP TZP	B3LYP D2P	B3LYP D2	PW91 TZP	B3LYP TZP	B3LYP D2P	B3LYP D2
1 B	0.95	0.97	0.49	0.46	1.23	1.59	0.16	0.16	0.19	0.19	0.19	0.20	0.12	0.11	0.14	0.14	0.15	0.18	0.87	0.91	1.16	1.19
2 N	-0.48	-0.49	-0.35	-0.33	-0.64	-0.77	-0.08	-0.08	-0.10	-0.10	-0.10	-0.10	-0.10	-0.10	-0.12	-0.12	-0.12	-0.13	-0.51	-0.55	-0.67	-0.68
3 C	0.24	0.22	0.22	0.18	0.18	0.21	0.11	0.11	0.13	0.13	0.12	0.13	0.11	0.10	0.12	0.12	0.11	0.12	0.35	0.39	0.38	0.38
4 C	0.21	0.21	0.03	0.09	0.01	-0.30	-0.07	-0.07	-0.08	-0.08	-0.08	-0.07	-0.11	-0.12	-0.13	-0.13	-0.13	-0.14	-0.36	-0.38	-0.36	-0.35
5 C	0.24	0.22	0.22	0.18	0.17	0.21	0.11	0.11	0.13	0.13	0.12	0.13	0.10	0.10	0.12	0.12	0.11	0.12	0.35	0.39	0.38	0.38
6 N	-0.49	-0.50	-0.35	-0.34	-0.64	-0.78	-0.08	-0.08	-0.10	-0.10	-0.10	-0.10	-0.10	-0.10	-0.12	-0.12	-0.12	-0.13	-0.52	-0.55	-0.67	-0.68
7 C	0.56	0.45	0.56	0.52	0.14	-0.66	-0.09	-0.09	-0.09	-0.09	-0.08	-0.08	-0.10	-0.10	-0.11	-0.11	-0.11	-0.14	-0.70	-0.67	-0.70	-0.70
8 C	0.56	0.45	0.56	0.53	0.15	-0.66	-0.09	-0.09	-0.09	-0.09	-0.08	-0.08	-0.10	-0.10	-0.11	-0.11	-0.11	-0.14	-0.70	-0.67	-0.70	-0.70
9 H	-0.17	-0.13	-0.11	-0.13	0.03	0.32	0.06	0.06	0.06	0.06	0.05	0.05	0.10	0.10	0.11	0.11	0.11	0.11	0.25	0.24	0.25	0.25
10 H	-0.14	-0.10	-0.13	-0.10	0.05	0.32	0.08	0.08	0.08	0.08	0.08	0.08	0.10	0.10	0.10	0.10	0.10	0.12	0.28	0.27	0.29	0.29
11 H	-0.13	-0.09	-0.12	-0.09	0.05	0.32	0.08	0.08	0.08	0.08	0.08	0.08	0.10	0.10	0.10	0.10	0.10	0.12	0.28	0.27	0.29	0.29
12 H	-0.17	-0.13	-0.11	-0.14	0.03	0.32	0.06	0.06	0.06	0.06	0.05	0.05	0.10	0.10	0.11	0.11	0.11	0.11	0.25	0.24	0.25	0.25
13 H	-0.14	-0.09	-0.13	-0.10	0.05	0.32	0.08	0.08	0.08	0.08	0.08	0.08	0.10	0.10	0.10	0.10	0.10	0.12	0.28	0.27	0.29	0.29
14 H	-0.13	-0.09	-0.12	-0.09	0.05	0.32	0.08	0.08	0.08	0.08	0.08	0.08	0.10	0.10	0.10	0.10	0.10	0.12	0.28	0.27	0.29	0.29
15 H	-0.14	-0.14	-0.07	-0.05	0.03	0.34	0.07	0.08	0.07	0.07	0.07	0.08	0.10	0.10	0.10	0.10	0.11	0.12	0.26	0.26	0.27	0.27
16 C	-0.09	-0.10	-0.02	-0.02	-0.12	-0.05	0.00	0.01	0.01	0.01	0.00	0.01	-0.03	-0.03	-0.03	-0.03	-0.04	-0.03	-0.02	-0.01	-0.01	0.01
17 C	0.48	0.48	0.43	0.43	0.46	0.36	0.08	0.08	0.08	0.08	0.08	0.09	0.06	0.06	0.06	0.06	0.07	0.06	0.32	0.33	0.38	0.37
18 C	0.41	0.40	0.43	0.41	0.44	0.34	0.07	0.07	0.08	0.08	0.08	0.09	0.05	0.05	0.05	0.05	0.06	0.06	0.27	0.29	0.34	0.34
19 C	0.42	0.41	0.43	0.43	0.42	0.33	0.09	0.09	0.10	0.10	0.09	0.10	0.07	0.07	0.07	0.07	0.08	0.07	0.30	0.32	0.36	0.35
20 C	0.41	0.40	0.42	0.41	0.43	0.34	0.07	0.07	0.08	0.08	0.08	0.08	0.05	0.05	0.05	0.05	0.06	0.06	0.27	0.29	0.34	0.33
21 C	0.48	0.48	0.44	0.43	0.46	0.36	0.08	0.08	0.08	0.08	0.08	0.09	0.06	0.06	0.06	0.06	0.07	0.06	0.32	0.33	0.38	0.37
22 F	-0.41	-0.40	-0.41	-0.40	-0.40	-0.33	-0.04	-0.04	-0.05	-0.05	-0.05	-0.06	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.28	-0.30	-0.33	-0.33
23 F	-0.37	-0.35	-0.38	-0.37	-0.37	-0.29	-0.04	-0.04	-0.05	-0.05	-0.04	-0.05	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.03	-0.03	-0.24	-0.26	-0.30	-0.30
24 F	-0.35	-0.34	-0.38	-0.36	-0.36	-0.28	-0.03	-0.03	-0.04	-0.04	-0.03	-0.04	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.23	-0.25	-0.29	-0.29
25 F	-0.37	-0.35	-0.38	-0.37	-0.37	-0.29	-0.04	-0.04	-0.05	-0.05	-0.04	-0.05	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.03	-0.03	-0.24	-0.26	-0.30	-0.30
26 F	-0.41	-0.40	-0.41	-0.40	-0.40	-0.33	-0.04	-0.04	-0.05	-0.05	-0.05	-0.06	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.27	-0.29	-0.33	-0.33
27 C	-0.09	-0.10	-0.01	-0.02	-0.12	-0.05	0.00	0.01	0.01	0.01	0.00	0.01	-0.03	-0.03	-0.04	-0.03	-0.04	-0.03	-0.02	-0.01	-0.01	0.01
28 C	0.48	0.48	0.43	0.43	0.46	0.36	0.08	0.08	0.08	0.08	0.08	0.09	0.06	0.06	0.06	0.06	0.07	0.06	0.32	0.33	0.38	0.37
29 C	0.41	0.40	0.43	0.41	0.44	0.34	0.07	0.07	0.08	0.08	0.08	0.09	0.05	0.05	0.06	0.06	0.06	0.06	0.27	0.29	0.34	0.34
30 C	0.42	0.41	0.44	0.43	0.42	0.33	0.09	0.09	0.10	0.10	0.09	0.10	0.07	0.07	0.07	0.07	0.08	0.07	0.30	0.32	0.36	0.35
31 C	0.41	0.40	0.42	0.41	0.44	0.34	0.07	0.07	0.08	0.08	0.08	0.09	0.05	0.05	0.05	0.05	0.06	0.06	0.27	0.29	0.34	0.34
32 C	0.48	0.48	0.43	0.43	0.46	0.36	0.07	0.07	0.08	0.08	0.08	0.09	0.05	0.06	0.06	0.06	0.06	0.06	0.32	0.33	0.38	0.37
33 F	-0.41	-0.40	-0.41	-0.40	-0.40	-0.33	-0.04	-0.04	-0.05	-0.05	-0.05	-0.06	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.28	-0.30	-0.33	-0.33
34 F	-0.36	-0.35	-0.38	-0.37	-0.37	-0.29	-0.04	-0.04	-0.05	-0.05	-0.04	-0.05	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.03	-0.03	-0.24	-0.26	-0.30	-0.30
35 F	-0.35	-0.34	-0.38	-0.36	-0.36	-0.28	-0.02	-0.02	-0.04	-0.04	-0.03	-0.04	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.23	-0.25	-0.29	-0.29
36 F	-0.37	-0.35	-0.38	-0.37	-0.37	-0.29	-0.04	-0.04	-0.05	-0.05	-0.04	-0.05	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.03	-0.03	-0.24	-0.26	-0.30	-0.30
37 F	-0.41	-0.40	-0.41	-0.40	-0.40	-0.33	-0.04	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.06	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.27	-0.29	-0.33	-0.33
38 N	-0.44	-0.43	-0.26	-0.24	-0.60	-0.73	-0.02	-0.02	-0.04	-0.04	-0.04	-0.05	-0.02	-0.01	-0.03	-0.03	-0.04	-0.05	-0.39	-0.41	-0.54	-0.55
39 C	0.48	0.45	0.29	0.32	0.35	0.07	0.07	0.07	0.07	0.07	0.08	0.08	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.09	0.11	0.13	0.13
40 C	0.24	0.23	0.13	0.16	0.04	-0.25	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	-0.03	-0.03	-0.04	-0.04	-0.03	-0.04	-0.20	-0.20	-0.20	-0.20
41 C	0.28	0.27	0.15	0.14	0.12	-0.18	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.02	0.02	0.02	0.01	0.02	0.00	-0.10	-0.09	-0.11	-0.11
42 C	0.26	0.25	0.14	0.16	0.05	-0.23	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.03	-0.04	-0.04	-0.04	-0.05	-0.19	-0.19	-0.20	-0.20
43 C	0.22	0.22	0.16	0.16	0.23	0.22	0.08	0.09	0.09	0.09	0.08	0.08	0.08	0.08	0.08	0.08	0.08	0.07	0.19	0.20	0.22	0.22
44 C	0.22	0.23	0.16	0.16	0.23	0.22	0.09	0.09	0.09	0.09	0.08	0.08	0.08	0.08	0.08	0.08	0.08	0.07	0.19	0.20	0.22	0.22
45 C	0.26	0.25	0.14	0.16	0.05	-0.23	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.03	-0.03	-0.04	-0.04	-0.04	-0.05	-0.19	-0.19	-0.20	-0.20
46 C	0.28	0.27	0.15	0.14	0.12	-0.18	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.02	0.02	0.02	0.01	0.02	0.00	-0.10	-0.09	-0.11	-0.11
47 C	0.24	0.23	0.13	0.15	0.04	-0.25	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	-0.02	-0.03	-0.03	-0.04	-0.03	-0.04	-0.20	-0.20	-0.21	-0.20
48 C	0.47	0.45	0.28	0.31	0.35	0.06	0.07	0.07	0.07	0.07	0.08	0.08	0.05	0.05	0.05	0.05	0.06	0.05	0.09	0.11	0.13	0.13
49 N	-0.44	-0.44	-0.26	-0.24	-0.60	-0.74	-0.02	-0.02	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.01	-0.01	-0.03	-0.03	-0.03	-0.05	-0.39	-0.42	-0.54	-0.55
50 H	-0.17	-0.17	0.00	-0.03	0.04	0.36	0.08	0.08	0.08	0.08	0.08	0.08	0.12	0.12	0.13	0.13	0.13	0.15	0.25	0.25	0.26	0.27
51 H	-0.15	-0.14	-0.03	-0.05	0.04	0.35	0.10	0.10	0.10	0.10												