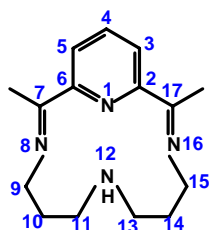


Table S1. List of spin densities of all compounds



Compound	Mulliken Spin density	Loewdin Spin density
[Ni ^{II} (L ^{Red})] ⁰ S = 1	0 Ni: 0.134364	0 Ni: 0.155036
	1 N : 0.184606	1 N : 0.176882
	2 C : 0.114864	2 C : 0.117872
	3 C : 0.201824	3 C : 0.191367
	4 C : 0.088066	4 C : 0.090582
	5 C : 0.173666	5 C : 0.175159
	6 C : 0.105709	6 C : 0.111384
	7 C : 0.302283	7 C : 0.270401
	8 N : 0.227085	8 N : 0.213720
	9 C : 0.009653	9 C : 0.003567
	10 C : 0.002576	10 C : 0.002668
	11 C : 0.000657	11 C : 0.001722
	12 N : 0.006561	12 N : 0.006600
	13 C : 0.000088	13 C : 0.001685
	14 C : 0.002165	14 C : 0.002424
	15 C : 0.016108	15 C : 0.013904
	16 N : 0.151932	16 N : 0.151393
	17 C : 0.170239	17 C : 0.191895
	18 C : 0.020217	18 C : -0.001452
	19 C : 0.030797	19 C : 0.017407
	20 H : 0.002463	20 H : 0.001070
	21 H : 0.000048	21 H : 0.000022
	22 H : 0.002696	22 H : 0.001226
	23 H : 0.004671	23 H : 0.005229
	24 H : 0.025537	24 H : 0.018868
	25 H : 0.001450	25 H : 0.000725
	26 H : 0.000333	26 H : 0.000131
	27 H : 0.001065	27 H : 0.000477
	28 H : 0.001673	28 H : 0.001256
	29 H : 0.001844	29 H : 0.001475
	30 H : 0.000658	30 H : 0.000276
	31 H : 0.001234	31 H : 0.000722
	32 H : 0.002592	32 H : 0.001350
	33 H : 0.017436	33 H : 0.015005
	34 H : 0.002536	34 H : 0.004209
	35 H : 0.019179	35 H : 0.017311
	36 H : 0.000836	36 H : 0.000412
	37 H : 0.015066	37 H : 0.014101
	38 H : 0.010942	38 H : 0.012927
	39 H : 0.007898	39 H : 0.010073
	40 H : -0.000564	40 H : -0.000136
41 H : 0.001789	41 H : 0.001192	

Compound	Mulliken Spin density	Loewdin Spin density
[Ni ^{II} (L ^{Red})] ⁰ S = 0	0 Ni : -0.000016	0 Ni : -0.000016
	1 N : -0.000003	1 N : -0.000004
	2 C : -0.051472	2 C : -0.051176
	3 C : 0.049547	3 C : 0.040932
	4 C : -0.000020	4 C : -0.000013
	5 C : -0.049490	5 C : -0.040890
	6 C : 0.051445	6 C : 0.051161
	7 C : 0.204268	7 C : 0.174357
	8 N : 0.139264	8 N : 0.128261
	9 C : -0.011031	9 C : -0.000974
	10 C : 0.001588	10 C : 0.001392
	11 C : 0.001074	11 C : 0.000276
	12 N : 0.000001	12 N : 0.000001
	13 C : -0.001074	13 C : -0.000276
	14 C : -0.001588	14 C : -0.001392
	15 C : 0.011031	15 C : 0.000975
	16 N : -0.139266	16 N : -0.128262
	17 C : -0.204257	17 C : -0.174349
	18 C : -0.023069	18 C : -0.005403
	19 C : 0.023069	19 C : 0.005402
	20 H : -0.002646	20 H : -0.001181
	21 H : 0.000001	21 H : 0.000000
	22 H : 0.002643	22 H : 0.001180
	23 H : 0.002851	23 H : 0.002913
	24 H : 0.014455	24 H : 0.010560
	25 H : 0.000573	25 H : 0.000269
	26 H : -0.000082	26 H : -0.000085
	27 H : -0.000382	27 H : -0.000109
	28 H : 0.000148	28 H : 0.000259
	29 H : -0.000149	29 H : -0.000259
	30 H : 0.000382	30 H : 0.000109
	31 H : 0.000082	31 H : 0.000085
	32 H : -0.000573	32 H : -0.000269
	33 H : -0.014453	33 H : -0.010560
	34 H : -0.002851	34 H : -0.002913
	35 H : 0.012853	35 H : 0.010986
	36 H : 0.000680	36 H : 0.000275
	37 H : 0.010455	37 H : 0.009237
	38 H : -0.012853	38 H : -0.010987
	39 H : -0.010454	39 H : -0.009236
	40 H : -0.000680	40 H : -0.000275
	41 H : -0.000000	41 H : -0.000000

Compound	Mulliken Spin density	Loewdin Spin density
[Ni ^{II} (L [•])] ¹⁺ S = 1/2	0 Ni : 0.061033	0 Ni : 0.095808
	1 N : 0.248755	1 N : 0.223462
	2 C : 0.095377	2 C : 0.085977
	3 C : -0.083518	3 C : -0.051357
	4 C : 0.162267	4 C : 0.126112
	5 C : -0.083385	5 C : -0.051245
	6 C : 0.095134	6 C : 0.085762
	7 C : 0.147768	7 C : 0.131843
	8 N : 0.097982	8 N : 0.088193
	9 C : -0.007581	9 C : -0.001244
	10 C : 0.001719	10 C : 0.001048
	11 C : 0.000583	11 C : 0.001013
	12 N : -0.002517	12 N : -0.000246
	13 C : 0.000584	13 C : 0.001014
	14 C : 0.001725	14 C : 0.001051
	15 C : -0.007608	15 C : -0.001245
	16 N : 0.098392	16 N : 0.088553
	17 C : 0.148205	17 C : 0.132235
	18 C : -0.017552	18 C : -0.003908
	19 C : -0.017608	19 C : -0.003922
	20 H : 0.003160	20 H : 0.001390
	21 H : -0.008174	21 H : -0.003973
	22 H : 0.003153	22 H : 0.001387
	23 H : 0.000929	23 H : 0.001090
	24 H : 0.008323	24 H : 0.006502
	25 H : 0.000142	25 H : 0.000076
	26 H : 0.000009	26 H : 0.000011
	27 H : -0.000140	27 H : -0.000131
	28 H : 0.001506	28 H : 0.001016
	29 H : 0.001506	29 H : 0.001016
	30 H : -0.000142	30 H : -0.000132
	31 H : 0.000009	31 H : 0.000010
	32 H : 0.000143	32 H : 0.000076
	33 H : 0.008360	33 H : 0.006528
	34 H : 0.000925	34 H : 0.001088
	35 H : 0.011201	35 H : 0.009730
	36 H : 0.000429	36 H : 0.000171
	37 H : 0.008490	37 H : 0.007441
	38 H : 0.011216	38 H : 0.009740
	39 H : 0.008543	39 H : 0.007487
	40 H : 0.000426	40 H : 0.000167
41 H : 0.000232	41 H : 0.000406	

Compound	Mulliken Spin density	Loewdin Spin density
<i>trans</i> -[Ni ^{II} (L ^{ox})Cl ₂] ⁰ S = 1	0 Ni: 1.567451	0 Ni: 1.579221
	1 N : 0.065692	1 N : 0.062758
	2 C : -0.001326	2 C : -0.001499
	3 C : 0.000471	3 C : 0.000556
	4 C : -0.006816	4 C : -0.005558
	5 C : 0.000519	5 C : 0.000549
	6 C : -0.000601	6 C : -0.001177
	7 C : -0.011708	7 C : -0.008135
	8 N : 0.063990	8 N : 0.062976
	9 C : -0.002481	9 C : -0.001848
	10 C : 0.002142	10 C : 0.001884
	11 C : -0.003492	11 C : -0.001464
	12 N : 0.067724	12 N : 0.059674
	13 C : -0.003610	13 C : -0.001978
	14 C : 0.003635	14 C : 0.003198
	15 C : -0.002413	15 C : -0.001623
	16 N : 0.064410	16 N : 0.061946
	17 C : -0.012694	17 C : -0.008837
	18 Cl: 0.094907	18 Cl: 0.092673
	19 Cl: 0.094766	19 Cl: 0.091650
	20 C : 0.003656	20 C : 0.002811
	21 C : 0.003703	21 C : 0.002975
	22 H : 0.001238	22 H : 0.000897
	23 H : 0.000476	23 H : 0.000232
	24 H : 0.001295	24 H : 0.000929
	25 H : 0.003550	25 H : 0.002494
	26 H : 0.000585	26 H : 0.000481
	27 H : -0.000379	27 H : -0.000269
	28 H : -0.000316	28 H : -0.000191
	29 H : -0.000043	29 H : 0.000062
	30 H : 0.003064	30 H : 0.002542
	31 H : 0.000125	31 H : 0.000137
	32 H : -0.000379	32 H : -0.000261
	33 H : -0.000541	33 H : -0.000352
	34 H : 0.000695	34 H : 0.000597
	35 H : 0.003362	35 H : 0.002507
	36 H : -0.002999	36 H : -0.002087
	37 H : 0.003657	37 H : 0.002844
	38 H : -0.000573	38 H : -0.000598
	39 H : 0.000197	39 H : 0.000286
	40 H : -0.000267	40 H : -0.000352
	41 H : -0.000523	41 H : -0.000401
	42 H : 0.000856	42 H : 0.000609
	43 H : -0.001004	43 H : -0.000859

Compound	Mulliken Spin density	Loewdin Spin density
[Ni ^{III} (L ^{ox})] ³⁺ S = 1/2	0 Ni : 0.807177	0 Ni : 0.792016
	1 N : -0.018703	1 N : -0.013251
	2 C : 0.009714	2 C : 0.010627
	3 C : 0.071573	3 C : 0.061695
	4 C : -0.035032	4 C : -0.021055
	5 C : 0.071571	5 C : 0.061693
	6 C : 0.009718	6 C : 0.010628
	7 C : 0.023658	7 C : 0.019798
	8 N : 0.039746	8 N : 0.045308
	9 C : -0.005089	9 C : -0.000972
	10 C : -0.000767	10 C : -0.000452
	11 C : -0.000841	11 C : -0.002047
	12 N : -0.042148	12 N : -0.037905
	13 C : -0.000841	13 C : -0.002047
	14 C : -0.000765	14 C : -0.000450
	15 C : -0.005090	15 C : -0.000971
	16 N : 0.039762	16 N : 0.045323
	17 C : 0.023662	17 C : 0.019801
	18 C : 0.000198	18 C : 0.000675
	19 C : 0.000199	19 C : 0.000676
	20 H : -0.003395	20 H : -0.001944
	21 H : 0.001098	21 H : 0.000551
	22 H : -0.003396	22 H : -0.001944
	23 H : 0.001681	23 H : 0.001173
	24 H : 0.008531	24 H : 0.006691
	25 H : 0.001095	25 H : 0.000680
	26 H : -0.000113	26 H : -0.000098
	27 H : -0.000605	27 H : -0.000557
	28 H : -0.005886	28 H : -0.004758
	29 H : -0.005886	29 H : -0.004758
	30 H : -0.000605	30 H : -0.000557
	31 H : -0.000113	31 H : -0.000098
	32 H : 0.001096	32 H : 0.000681
	33 H : 0.008532	33 H : 0.006692
	34 H : 0.001682	34 H : 0.001174
	35 H : 0.002121	35 H : 0.001959
	36 H : -0.000520	36 H : -0.000361
	37 H : 0.002581	37 H : 0.002329
	38 H : 0.002118	38 H : 0.001956
	39 H : 0.002586	39 H : 0.002332
	40 H : -0.000520	40 H : -0.000361
	41 H : 0.000217	41 H : 0.000123

Compound	Mulliken Spin density	Loewdin Spin density
<i>trans</i> -[Ni ^{III} (L ^{ox})Cl ₂] ¹⁺ S = 1/2	0 Ni : 0.676564	0 Ni : 0.687353
	1 N : -0.005689	1 N : -0.004695
	2 C : -0.001614	2 C : -0.001711
	3 C : 0.000136	3 C : -0.000184
	4 C : -0.003052	4 C : -0.002565
	5 C : 0.000283	5 C : -0.000086
	6 C : -0.001826	6 C : -0.001864
	7 C : -0.007687	7 C : -0.005848
	8 N : 0.014693	8 N : 0.012695
	9 C : -0.000524	9 C : -0.000512
	10 C : -0.000346	10 C : -0.000316
	11 C : -0.000490	11 C : -0.001081
	12 N : -0.015421	12 N : -0.014002
	13 C : -0.000042	13 C : -0.000954
	14 C : -0.001321	14 C : -0.001069
	15 C : -0.000385	15 C : -0.000409
	16 N : 0.019275	16 N : 0.016788
	17 C : -0.008664	17 C : -0.006551
	18 Cl : 0.165043	18 Cl : 0.159656
	19 Cl : 0.175990	19 Cl : 0.169319
	20 C : 0.001481	20 C : 0.001106
	21 C : 0.001279	21 C : 0.000931
	22 H : -0.000195	22 H : -0.000169
	23 H : 0.000227	23 H : 0.000141
	24 H : -0.000191	24 H : -0.000165
	25 H : -0.000577	25 H : -0.000426
	26 H : 0.000116	26 H : 0.000089
	27 H : -0.000017	27 H : 0.000021
	28 H : -0.000201	28 H : -0.000123
	29 H : -0.000142	29 H : -0.000105
	30 H : -0.002374	30 H : -0.001829
	31 H : -0.000043	31 H : -0.000018
	32 H : -0.000051	32 H : -0.000019
	33 H : 0.000028	33 H : 0.000039
	34 H : 0.000422	34 H : 0.000362
	35 H : -0.000580	35 H : -0.000436
	36 H : -0.000057	36 H : -0.000080
	37 H : -0.002355	37 H : -0.001768
	38 H : -0.000470	38 H : -0.000414
	39 H : -0.000067	39 H : -0.000045
	40 H : -0.000326	40 H : -0.000304
	41 H : -0.000387	41 H : -0.000321
	42 H : 0.000048	42 H : 0.000003
	43 H : -0.000490	43 H : -0.000433

Compound	Mulliken Spin density	Loewdin Spin density
$[\text{Ni}^{\text{I}}(\text{L}^{\bullet})\text{-}\{\text{P}(\text{OCH}_3)_3\}]^0$ $S = 1$	0 Ni : 0.887174	0 Ni : 0.861255
	1 N : -0.142866	1 N : -0.124762
	2 C : -0.139803	2 C : -0.126147
	3 C : -0.038091	3 C : -0.038978
	4 C : -0.030543	4 C : -0.041143
	5 C : -0.209085	5 C : -0.168942
	6 C : 0.076054	6 C : 0.034079
	7 C : -0.045650	7 C : -0.033915
	8 N : 0.061547	8 N : 0.059254
	9 C : -0.003442	9 C : -0.001363
	10 C : 0.001874	10 C : 0.001673
	11 C : -0.002091	11 C : -0.001713
	12 N : 0.019821	12 N : 0.021652
	13 C : 0.000087	13 C : -0.001198
	14 C : -0.011135	14 C : -0.011455
	15 C : 0.024459	15 C : 0.006594
	16 N : -0.277201	16 N : -0.252156
	17 C : -0.131696	17 C : -0.136803
	18 P : -0.058010	18 P : -0.038314
	19 O : 0.002145	19 O : -0.002795
	20 O : 0.001198	20 O : -0.004214
	21 O : -0.000112	21 O : -0.002796
	22 C : 0.000722	22 C : -0.000997
	23 C : -0.002631	23 C : -0.001947
	24 C : -0.002083	24 C : -0.001695
	25 H : 0.003844	25 H : 0.002298
	26 H : 0.002877	26 H : 0.001357
	27 H : 0.013071	27 H : 0.006463
	28 H : 0.005623	28 H : 0.003340
	29 H : 0.001779	29 H : 0.001298
	30 H : 0.003533	30 H : 0.002198
	31 H : -0.000006	31 H : -0.000041
	32 H : 0.000056	32 H : -0.000055
	33 H : 0.001563	33 H : 0.001317
	34 H : 0.000248	34 H : 0.000137
	35 H : -0.000978	35 H : -0.000698
	36 H : 0.000586	36 H : 0.000309
	37 H : -0.001115	37 H : -0.000369
	38 H : 0.000474	38 H : 0.000312
	39 H : -0.003350	39 H : -0.002055
	40 H : -0.024143	40 H : -0.017494
	41 H : 0.004855	41 H : 0.002815
	42 H : 0.013402	42 H : 0.007126
	43 H : 0.000070	43 H : 0.000004
	44 H : 0.000055	44 H : 0.000023
	45 H : -0.003017	45 H : -0.001345
	46 H : -0.000059	46 H : -0.000066
	47 H : -0.000006	47 H : -0.000004
	48 H : -0.000022	48 H : -0.000035
	49 H : 0.000043	49 H : 0.000038
	50 H : 0.000059	50 H : 0.000009
51 H : -0.000081	51 H : -0.000055	

Compound	Mulliken Spin density	Loewdin Spin density
[Ni ^I (L [•])- {P(OCH ₃) ₃ }] ⁰ S = 0	0 Ni : 0.886764	0 Ni : 0.860823
	1 N : -0.143481	1 N : -0.125293
	2 C : -0.139847	2 C : -0.126143
	3 C : -0.037290	3 C : -0.038375
	4 C : -0.031134	4 C : -0.041533
	5 C : -0.208355	5 C : -0.168398
	6 C : 0.075963	6 C : 0.034040
	7 C : 0.045548	7 C : -0.033830
	8 N : 0.061488	8 N : 0.059206
	9 C : -0.003437	9 C : -0.001360
	10 C : 0.001874	10 C : 0.001671
	11 C : -0.002089	11 C : -0.001713
	12 N : 0.019784	12 N : 0.021611
	13 C : 0.000086	13 C : -0.001196
	14 C : -0.011129	14 C : -0.011452
	15 C : 0.024434	15 C : 0.006584
	16 N : -0.276973	16 N : -0.251936
	17 C : -0.131564	17 C : -0.136678
	18 P : -0.058087	18 P : -0.038367
	19 O : 0.002145	19 O : -0.002801
	20 O : 0.001197	20 O : -0.004223
	21 O : -0.000120	21 O : -0.002808
	22 C : 0.000724	22 C : -0.000996
	23 C : -0.002637	23 C : -0.001952
	24 C : -0.002090	24 C : -0.001700
	25 H : 0.003803	25 H : 0.002279
	26 H : 0.002906	26 H : 0.001370
	27 H : 0.013036	27 H : 0.006446
	28 H : 0.005620	28 H : 0.003338
	29 H : 0.001773	29 H : 0.001295
	30 H : 0.003532	30 H : 0.002197
	31 H : -0.000007	31 H : -0.000041
	32 H : 0.000056	32 H : -0.000054
	33 H : 0.001561	33 H : 0.001315
	34 H : 0.000244	34 H : 0.000135
	35 H : -0.000979	35 H : -0.000698
	36 H : 0.000586	36 H : 0.000309
	37 H : -0.001116	37 H : -0.000370
	38 H : 0.000474	38 H : 0.000312
	39 H : -0.003348	39 H : -0.002054
	40 H : -0.024118	40 H : -0.017474
	41 H : 0.004854	41 H : 0.002815
	42 H : 0.013395	42 H : 0.007122
	43 H : 0.000070	43 H : 0.000004
	44 H : 0.000055	44 H : 0.000023
	45 H : -0.003012	45 H : -0.001342
	46 H : -0.000060	46 H : -0.000066
	47 H : -0.000006	47 H : -0.000004
	48 H : -0.000022	48 H : -0.000035
	49 H : 0.000043	49 H : 0.000039
	50 H : 0.000060	50 H : 0.000009
51 H : -0.000081	51 H : -0.000055	

Compound	Mulliken Spin density	Loewdin Spin density
$[\text{Ni}^{\text{I}}(\text{L}^{\text{ox}})-\{\text{P}(\text{OCH}_3)_3\}]^{\text{I}+}$ $S = 1/2$	0 Ni : 1.137076	0 Ni : 1.124955
	1 N : -0.016316	1 N : -0.008605
	2 C : -0.059283	2 C : -0.048569
	3 C : 0.041160	3 C : 0.024367
	4 C : -0.090341	4 C : -0.071112
	5 C : 0.041060	5 C : 0.024300
	6 C : -0.059579	6 C : -0.048558
	7 C : -0.050662	7 C : -0.047792
	8 N : 0.018935	8 N : 0.021975
	9 C : 0.000158	9 C : -0.000457
	10 C : -0.000221	10 C : -0.000294
	11 C : -0.002989	11 C : -0.002005
	12 N : 0.044211	12 N : 0.041083
	13 C : -0.002898	13 C : -0.001933
	14 C : -0.000308	14 C : -0.000365
	15 C : 0.000207	15 C : -0.000490
	16 N : 0.017807	16 N : 0.021271
	17 C : -0.051564	17 C : -0.048509
	18 P : -0.002570	18 P : -0.001695
	19 O : 0.001617	19 O : 0.000703
	20 O : 0.000788	20 O : 0.000422
	21 O : 0.004589	21 O : 0.003773
	22 C : -0.000807	22 C : -0.000771
	23 C : 0.001335	23 C : 0.001027
	24 C : 0.001027	24 C : 0.000742
	25 H : -0.000417	25 H : 0.000081
	26 H : 0.004598	26 H : 0.002248
	27 H : -0.000414	27 H : 0.000082
	28 H : 0.006726	28 H : 0.004056
	29 H : -0.001083	29 H : -0.000956
	30 H : 0.004038	30 H : 0.002615
	31 H : 0.000127	31 H : -0.000007
	32 H : -0.000485	32 H : -0.000411
	33 H : 0.002418	33 H : 0.002066
	34 H : 0.001022	34 H : 0.000600
	35 H : -0.002073	35 H : -0.001566
	36 H : 0.002477	36 H : 0.002108
	37 H : 0.000922	37 H : 0.000598
	38 H : 0.000131	38 H : -0.000005
	39 H : -0.000497	39 H : -0.000421
	40 H : -0.000953	40 H : -0.000897
	41 H : 0.004014	41 H : 0.002605
	42 H : 0.006755	42 H : 0.004066
	43 H : -0.000045	43 H : -0.000019
	44 H : 0.000114	44 H : 0.000030
	45 H : 0.000592	45 H : -0.000034
	46 H : 0.000052	46 H : 0.000030
	47 H : -0.000153	47 H : -0.000104
	48 H : -0.000156	48 H : -0.000119
	49 H : -0.000071	49 H : -0.000048
	50 H : -0.000064	50 H : -0.000051
51 H : -0.000005	51 H : -0.000011	

Compound	Mulliken Spin density	Loewdin Spin density
$[\text{Ni}^{\text{I}}(\text{L}^{\text{ox}})(\text{CO})]^{1+}$ $S = 1/2$	0 Ni : 0.995660	0 Ni : 0.986505
	1 N : 0.029822	1 N : 0.030511
	2 C : -0.019231	2 C : -0.015770
	3 C : 0.011715	3 C : 0.006952
	4 C : -0.029931	4 C : -0.023873
	5 C : 0.011729	5 C : 0.006966
	6 C : -0.019271	6 C : -0.015793
	7 C : -0.025482	7 C : -0.021836
	8 N : 0.050658	8 N : 0.050271
	9 C : -0.001939	9 C : -0.001030
	10 C : 0.000871	10 C : 0.000561
	11 C : -0.002515	11 C : -0.001789
	12 N : 0.037493	12 N : 0.036681
	13 C : -0.002523	13 C : -0.001804
	14 C : 0.000893	14 C : 0.000574
	15 C : -0.001930	15 C : -0.001037
	16 N : 0.050694	16 N : 0.050419
	17 C : -0.025238	17 C : -0.021634
	18 C : -0.050803	18 C : -0.048661
	19 O : -0.035248	19 O : -0.033279
	20 H : 0.000559	20 H : 0.000509
	21 H : 0.001522	21 H : 0.000750
	22 H : 0.000554	22 H : 0.000506
	23 H : 0.005162	23 H : 0.003323
	24 H : 0.000314	24 H : 0.000223
	25 H : 0.003888	25 H : 0.002578
	26 H : -0.000045	26 H : -0.000045
	27 H : -0.000181	27 H : -0.000180
	28 H : 0.002353	28 H : 0.001954
	29 H : 0.000163	29 H : 0.000297
	30 H : -0.001310	30 H : -0.000969
	31 H : 0.002350	31 H : 0.001954
	32 H : 0.000150	32 H : 0.000293
	33 H : -0.000047	33 H : -0.000046
	34 H : -0.000181	34 H : -0.000180
	35 H : 0.000294	35 H : 0.000205
	36 H : 0.003870	36 H : 0.002570
37 H : 0.005159	37 H : 0.003324	

Compound	Mulliken Spin density	Loewdin Spin density
[Ni ^I (L [•])(CO)] ⁰ S = 1	0 Ni : 1.065863	0 Ni : 1.043537
	1 N : 0.086217	1 N : 0.112886
	2 C : 0.105541	2 C : 0.105903
	3 C : 0.091507	3 C : 0.068619
	4 C : 0.011460	4 C : 0.041319
	5 C : 0.168388	5 C : 0.138803
	6 C : 0.007148	6 C : 0.011806
	7 C : 0.010609	7 C : 0.012801
	8 N : 0.019443	8 N : 0.027383
	9 C : 0.010291	9 C : 0.005848
	10 C : -0.000396	10 C : 0.000573
	11 C : 0.001093	11 C : 0.000820
	12 N : 0.022133	12 N : 0.032549
	13 C : -0.002144	13 C : 0.001335
	14 C : 0.006989	14 C : 0.010845
	15 C : 0.012417	15 C : 0.011894
	16 N : 0.205663	16 N : 0.210573
	17 C : 0.191899	17 C : 0.188922
	18 C : -0.043691	18 C : -0.042570
	19 O : -0.041372	19 O : -0.029887
	20 H : -0.000511	20 H : 0.000206
	21 H : 0.008593	21 H : 0.004031
	22 H : -0.000893	22 H : -0.000009
	23 H : 0.011318	23 H : 0.006212
	24 H : -0.001106	24 H : -0.000347
	25 H : 0.004969	25 H : 0.003198
	26 H : 0.000561	26 H : 0.000344
	27 H : 0.000053	27 H : 0.000114
	28 H : 0.001628	28 H : 0.001662
	29 H : 0.000900	29 H : 0.000688
	30 H : 0.004696	30 H : 0.002010
	31 H : 0.001712	31 H : 0.001937
	32 H : 0.003697	32 H : 0.002035
	33 H : 0.000762	33 H : 0.000592
	34 H : 0.005500	34 H : 0.003310
	35 H : 0.013034	35 H : 0.010764
	36 H : 0.004826	36 H : 0.003166
37 H : 0.011206	37 H : 0.006127	

Compound	Mulliken Spin density	Loewdin Spin density
[Ni ^I (L [•])(CO)] ⁰ S = 0	0 Ni : 0.898541	0 Ni : 0.862778
	1 N : -0.265554	1 N : -0.227051
	2 C : -0.054529	2 C : -0.057849
	3 C : 0.063642	3 C : 0.037435
	4 C : -0.160287	4 C : -0.125949
	5 C : 0.066287	5 C : 0.039448
	6 C : -0.058194	6 C : -0.060674
	7 C : -0.105936	7 C : -0.097895
	8 N : -0.091978	8 N : -0.079919
	9 C : 0.008906	9 C : 0.002216
	10 C : -0.004722	10 C : -0.005462
	11 C : 0.000542	11 C : -0.001447
	12 N : 0.000065	12 N : -0.001150
	13 C : 0.000482	13 C : -0.001467
	14 C : -0.004425	14 C : -0.005174
	15 C : 0.008501	15 C : 0.002095
	16 N : -0.086621	16 N : -0.074930
	17 C : -0.103837	17 C : -0.095614
	18 C : -0.083967	18 C : -0.073218
	19 O : -0.039294	19 O : -0.040633
	20 H : -0.000816	20 H : -0.000008
	21 H : 0.008559	21 H : 0.003996
	22 H : -0.000969	22 H : -0.000079
	23 H : 0.010830	23 H : 0.005890
	24 H : -0.007945	24 H : -0.005641
	25 H : 0.004784	25 H : 0.003082
	26 H : 0.000474	26 H : 0.000173
	27 H : -0.001952	27 H : -0.001226
	28 H : 0.000066	28 H : -0.000165
	29 H : -0.003010	29 H : -0.001470
	30 H : -0.001051	30 H : -0.000890
	31 H : 0.000087	31 H : -0.000144
	32 H : -0.002991	32 H : -0.001458
	33 H : 0.000448	33 H : 0.000160
	34 H : -0.001881	34 H : -0.001186
	35 H : -0.007669	35 H : -0.005438
	36 H : 0.004734	36 H : 0.003050
37 H : 0.010679	37 H : 0.005815	

Compound	Mulliken Spin density	Loewdin Spin density
$[\text{Zn}^{\text{II}}(\text{L}^{\text{Red}})]^0$ S = 1	0 Zn: 0.080721	0 Zn: 0.102268
	1 N : 0.183755	1 N : 0.174362
	2 C : 0.118560	2 C : 0.120397
	3 C : 0.213957	3 C : 0.202640
	4 C : 0.090138	4 C : 0.092495
	5 C : 0.178232	5 C : 0.181075
	6 C : 0.101958	6 C : 0.108587
	7 C : 0.352661	7 C : 0.313024
	8 N : 0.222518	8 N : 0.209916
	9 C : -0.013605	9 C : -0.000927
	10 C : 0.002666	10 C : 0.002085
	11 C : 0.000172	11 C : 0.002104
	12 N : 0.004628	12 N : 0.003544
	13 C : 0.001189	13 C : 0.002424
	14 C : 0.002316	14 C : 0.002759
	15 C : 0.019763	15 C : 0.014903
	16 N : 0.142294	16 N : 0.144916
	17 C : 0.167674	17 C : 0.194883
	18 C : -0.030726	18 C : -0.005111
	19 C : 0.041033	19 C : 0.021424
	20 H : -0.003519	20 H : -0.001569
	21 H : 0.000003	21 H : 0.000005
	22 H : 0.003579	22 H : 0.001617
	23 H : 0.008677	23 H : 0.008321
	24 H : 0.023468	24 H : 0.018090
	25 H : 0.001300	25 H : 0.000754
	26 H : 0.000236	26 H : 0.000147
	27 H : 0.002305	27 H : 0.000963
	28 H : 0.001294	28 H : 0.000820
	29 H : 0.000967	29 H : 0.000732
	30 H : 0.002006	30 H : 0.000840
	31 H : 0.001345	31 H : 0.000861
	32 H : 0.003160	32 H : 0.001759
	33 H : 0.013126	33 H : 0.012932
	34 H : 0.004162	34 H : 0.006051
	35 H : 0.022424	35 H : 0.019791
	36 H : 0.000844	36 H : 0.000306
	37 H : 0.017238	37 H : 0.015891
	38 H : 0.010440	38 H : 0.013108
	39 H : 0.007344	39 H : 0.010299
	40 H : -0.000772	40 H : -0.000209
	41 H : 0.000471	41 H : 0.000725

Compound	Mulliken Spin density	Loewdin Spin density
$[\text{Zn}^{\text{II}}(\text{L}^{\text{Red}})]^0$ $S = 0$	0 Zn: -0.000000	0 Zn: 0.000000
	1 N : -0.000002	1 N : -0.000002
	2 C : -0.063208	2 C : -0.064181
	3 C : 0.064705	3 C : 0.054050
	4 C : -0.000003	4 C : -0.000002
	5 C : -0.064698	5 C : -0.054045
	6 C : 0.063203	6 C : 0.064178
	7 C : 0.284095	7 C : 0.246261
	8 N : 0.171446	8 N : 0.157932
	9 C : -0.014422	9 C : -0.003262
	10 C : 0.001954	10 C : 0.001405
	11 C : 0.001490	11 C : 0.000641
	12 N : 0.000000	12 N : 0.000000
	13 C : -0.001490	13 C : -0.000641
	14 C : -0.001954	14 C : -0.001405
	15 C : 0.014422	15 C : 0.003262
	16 N : -0.171448	16 N : -0.157934
	17 C : -0.284090	17 C : -0.246258
	18 C : -0.032323	18 C : -0.007467
	19 C : 0.032323	19 C : 0.007467
	20 H : -0.003571	20 H : -0.001610
	21 H : 0.000000	21 H : 0.000000
	22 H : 0.003571	22 H : 0.001609
	23 H : 0.006484	23 H : 0.006066
	24 H : 0.016994	24 H : 0.012989
	25 H : 0.000882	25 H : 0.000516
	26 H : -0.000031	26 H : -0.000015
	27 H : -0.000562	27 H : -0.000086
	28 H : 0.000392	28 H : 0.000417
	29 H : -0.000392	29 H : -0.000417
	30 H : 0.000561	30 H : 0.000086
	31 H : 0.000031	31 H : 0.000015
	32 H : -0.000882	32 H : -0.000516
	33 H : -0.016993	33 H : -0.012989
	34 H : -0.006484	34 H : -0.006066
	35 H : 0.018143	35 H : 0.015472
	36 H : 0.000818	36 H : 0.000283
	37 H : 0.014015	37 H : 0.012460
	38 H : -0.018145	38 H : -0.015474
	39 H : -0.014013	39 H : -0.012459
	40 H : -0.000818	40 H : -0.000283
41 H : 0.000000	41 H : 0.000000	