

European Journal of Organic Chemistry

Supporting Information

Thiazolo[5,4-*f*]quinoxalines, Oxazolo[5,4-*f*]quinoxalines and Pyrazino[*b,e*]isatins: Synthesis from 6-Aminoquinoxalines and Properties

Frédéric Lassagne,* Joshua M. Sims, William Erb, Olivier Mongin, Nicolas Richy,
Nour El Osmani, Ziad Fajloun,* Laurent Picot,* Valérie Thiéry, Thomas Robert,
Stéphane Bach,* Vincent Dorcet, Thierry Roisnel, and Florence Mongin*

Table of contents

General information and Analyses of the compounds	S2
Representation of the amplitudes of the HOMO orbitals coefficients on the different C(-H) atoms of compounds 2a-m , 6-aminoquinoline and 7-aminoquinoline	S9
Hückel theory calculations performed by using the HuLiS calculator	S14
NMR spectra of compounds 2b-d , 3a-d,g-k , 4a-d,g,h , 5a-d,g,h , 7a-c , 8a , 9a-c , 10b,h , 11b,h and 12b,h	S45
Titration curves for IC ₅₀ determination	S82
References	S83

General information and Analyses of the compounds

General synthetic and analytical details. Column chromatography separations were achieved on silica gel (40-63 μm). Melting points were measured on a Kofler apparatus. IR spectra were taken on a Perkin-Elmer Spectrum 100 spectrometer. ^1H and ^{13}C Nuclear Magnetic Resonance (NMR) spectra were recorded either on a Bruker Avance III spectrometer at 300 MHz and 75 MHz, respectively, or on a Bruker Avance III HD spectrometer at 400 MHz and 101 MHz, respectively, or on a Bruker Avance III HD spectrometer at 500 MHz and 126 MHz respectively. ^1H chemical shifts (δ) are given in ppm relative to the solvent residual peak and ^{13}C chemical shifts are relative to the central peak of the solvent signal.¹ 6-Amino-3-phenylquinoxaline (**2g**) was prepared as described previously by cross-coupling between 6-amino-3-chloroquinoxaline (**2f**) and phenylboronic acid.² 6-Amino-2,3-dimethoxyquinoxaline (**2h**) was synthesized from 2,3-dichloro-6-nitroquinoxaline as documented previously by twofold substitution followed by nitro reduction.³ 2,3-Dichloro-6-nitroquinoxaline was prepared as reported previously by nitration of 2,3-dihydroxyquinoxaline followed by chlorination.⁴ 6-Amino-2,3-dichloroquinoxaline (**2i**) was obtained as documented previously by reduction of 2,3-dichloro-6-nitroquinoxaline.⁵ 6-Amino-3-chloro-5-iodoquinoxaline (**3f**) was prepared as previously reported by iodination of 6-amino-3-chloroquinoxaline (**2f**).⁶ 6-(Benzoylamino)-3-chloro-5-iodoquinoxaline (**6**) was prepared as previously.⁶

General crystallographic details. The samples were studied with monochromatized Mo-K α radiation ($\lambda = 0.71073 \text{ \AA}$, multilayered monochromator). The X-ray diffraction data of the compounds **3c**, **3g** and **3k** were collected at 150(2) K by using a D8 VENTURE Bruker AXS diffractometer equipped with a (CMOS) PHOTON 100 detector. The structure was solved by dual-space algorithm using the *SHELXT* program,⁷ and then refined with full-matrix least-square methods based on F^2 (*SHELXL*).⁸ All non-hydrogen atoms were refined with anisotropic atomic displacement parameters. Except nitrogen-linked hydrogen atoms in the case of **3c** and **3k**, and water hydrogen atoms in the case of **3k** that were introduced in the structural model through Fourier difference maps analysis, H atoms were finally included in their calculated positions and treated as riding on their parent atom with constrained thermal parameters. The molecular diagrams were generated by ORTEP-3 (version 2.02).⁹

6-Nitroquinoxaline (1a). The general procedure 1 from glyoxal (1.3 g, 1.1 mL; 40% in water) gave **1a** in 88% yield (1.5 g) as an orange solid: mp 176-178 $^{\circ}\text{C}$.¹⁰

6-Nitro-2,3-diphenylquinoxaline (1b). The general procedure 1 from benzil (2.1 g) gave **1b** in 92% yield (3.0 g) as a beige solid: mp 192 $^{\circ}\text{C}$.¹¹

6-Nitro-2-phenylquinoxaline (1c). The general procedure 1 from phenylglyoxal monohydrate (1.5 g) gave **1c** in 95% yield (2.4 g) as a beige solid: mp 210 $^{\circ}\text{C}$ lit.¹² 209-210 $^{\circ}\text{C}$.

6-Nitro-2-(2-thienyl)quinoxaline (1d).¹³ The general procedure 1 from 2-thienylglyoxal¹⁴ (1.4 g) gave **1d** in 97% yield (2.5 g) as a yellow solid: mp 250-252 $^{\circ}\text{C}$.

6-Aminoquinoxaline (2a). The general procedure 2 from 6-nitroquinoxaline (**1a**; 1.75 g) gave **2a** (eluent: CHCl_3 -AcOEt 70:30; $R_f = 0.11$) in 75% yield (1.1 g) as a yellow solid: mp 166 $^{\circ}\text{C}$ (lit.¹⁵ 164-165 $^{\circ}\text{C}$).

6-Amino-2,3-diphenylquinoxaline (2b). The general procedure 2 from 6-nitro-2,3-diphenylquinoxaline (**1b**; 3.3 g) gave **2b** (eluent: CHCl_3 -AcOEt 90:10; $R_f = 0.21$) in 90% yield (2.7 g) as a yellow solid: mp 180 $^{\circ}\text{C}$ (lit.¹⁶ 172-173 $^{\circ}\text{C}$); IR (ATR): 543, 595, 696, 727, 762, 828, 907, 978, 1061, 1138, 1213, 1247, 1350, 1487, 1499, 1617, 1627, 3058, 3213, 3334, 3389, 3464 cm^{-1} ; ^1H NMR (CDCl_3) δ 4.21 (br s, 2H, NH_2), 7.16 (dd, 1H, $J = 8.9$ and 2.5 Hz, H7), 7.23 (d, 1H, $J = 2.4$ Hz, H5), 7.29-7.33 (m, 6H, H3', H4', H5', H4'', H5'' and H6''), 7.45-7.50 (m, 4H, H2', H6', H2'' and H6''), 7.95 (d, 1H, $J = 8.9$ Hz, H8); ^{13}C NMR (CDCl_3) δ 108.1 (CH), 122.2 (CH), 128.2 (2CH), 128.2 (2CH), 128.2 (CH), 128.6 (CH), 129.8 (2CH), 129.9 (2CH), 130.3 (CH), 136.4 (C), 139.6 (C), 139.6 (C), 143.2 (C), 148.2 (C), 149.7 (C), 153.5 (C).

6-Amino-2-phenylquinoxaline (2c). The general procedure 2 from 6-nitro-2-phenylquinoxaline (**1c**; 2.5 g) gave **2c** (eluent: CHCl_3 -AcOEt 90:10; $R_f = 0.18$) in 95% yield (2.1 g) as a yellow solid: mp 142 $^{\circ}\text{C}$; IR (ATR): 909, 938, 964, 1025, 1051, 1132, 1227, 1332, 1348, 1423, 1451, 1488, 1615, 3034, 3054, 3195, 3313, 3446 cm^{-1} ; ^1H NMR (CDCl_3) δ 4.24 (br s, 2H, NH_2), 7.17 (br s, 1H, H5), 7.18 (dd, 1H, $J = 7.9$ and 2.5 Hz, H7), 7.43-7.55 (m, 3H, H3', H4' and H5'), 7.93 (dd, 1H, $J = 8.1$ and 1.4 Hz, H8), 8.10-8.13 (m, 2H, H2' and H6'), 9.15 (s, 1H, H3); ^{13}C NMR (CDCl_3) δ 108.2 (CH), 122.4 (CH), 127.1 (2CH, C2' and C6'), 129.1 (2CH, C3' and C5'), 129.4 (CH), 130.8 (CH, C4'), 137.4 (C), 137.4 (C), 143.5 (CH, C3), 143.5 (C), 147.9 (C), 148.4 (C). The NMR data are similar to those reported previously.²

6-Amino-2-(2-thienyl)quinoxaline (2d). The general procedure 2 from 6-nitro-2-(2-thienyl)quinoxaline (**1d**; 2.6 g) gave **2d** (eluent: CHCl_3 -AcOEt 90:10; $R_f = 0.15$) in 97% yield (2.2 g) as a yellow-orange solid: mp 174 $^{\circ}\text{C}$; IR (ATR): 411, 503, 603, 706, 718, 828, 908, 926, 1009, 1134, 1240, 1331, 1362, 1424, 1476, 1491, 1628, 2925, 3092, 3201, 3338, 3462 cm^{-1} ; ^1H NMR (CDCl_3) δ 4.23 (br s, 2H, NH_2), 7.13-7.16 (m, 3H, H5, H7 and H4'), 7.45 (d, 1H, $J = 5.0$ Hz, H5'), 7.72 (d, 1H, $J = 3.7$ Hz, H3'), 7.85 (d, 1H, $J = 8.6$ Hz, H8), 9.06 (s, 1H, H3); ^{13}C NMR (CDCl_3) δ 108.5 (CH), 122.4 (CH), 125.4 (CH), 128.3 (CH), 128.4 (CH), 130.3 (CH), 137.0 (C), 142.2 (CH, C3), 142.9 (C), 143.3 (C), 144.1 (C), 147.7 (C). Anal. Calcd for $\text{C}_{12}\text{H}_9\text{N}_3\text{S}$ (227.28): C, 63.41; H, 3.99; N, 18.49; S, 14.11. Found: C, 63.54; H, 3.55; N, 18.03; S, 14.20.

6-Amino-5-iodoquinoxaline (3a).¹⁷ The general procedure 3 from 6-aminoquinoxaline (**2a**; 2.5 g) gave, after purification by chromatography over silica gel (eluent: CH₂Cl₂; R_f = 0.59), **3a** in 83% yield (3.8 g) as a dark red solid: mp 180-182 °C; IR (ATR): 507, 861, 950, 1042, 1419, 1494, 1534, 1618, 3186, 3297, 3444 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃) δ 4.87 (br s, 2H, NH₂), 7.26 (d, 1H, *J* = 9.0 Hz, H7), 7.85 (d, 1H, *J* = 9.0 Hz, H8), 8.54 (d, 1H, *J* = 1.9 Hz, H2), 8.75 (d, 1H, *J* = 1.9 Hz, H3); ¹³C NMR (CDCl₃) δ 83.0 (C, C5, C-I), 120.8 (CH, C7), 130.5 (CH, C8), 138.8 (C), 141.5 (CH, C2 or C3), 144.4 (C), 145.6 (CH, C2 or C3), 149.5 (C).

6-Amino-5-iodo-2,3-diphenylquinoxaline (3b). The general procedure 3 from 6-amino-2,3-diphenylquinoxaline (**2b**; 5.1 g) gave, after purification by chromatography over silica gel (eluent: CH₂Cl₂; R_f = 0.26), **3b** in 93% yield (6.7 g) as a yellow solid: mp 190 °C; IR (ATR): 509, 521, 551, 601, 698, 760, 805, 982, 1079, 1202, 1246, 1353, 1423, 1480, 1623, 3166, 3281, 3333, 3448 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃) δ 4.82 (br s, 2H, NH₂), 7.22 (d, 1H, *J* = 8.9 Hz, H7), 7.29-7.36 (m, 6H, H3', H4', H5', H3'', H4'' and H5''), 7.51 (dd, 2H, *J* = 6.5 and 3.2 Hz, H2''' and H6'''), 7.65 (dd, 2H, *J* = 7.6 and 1.9 Hz, H2'''' and H6''''), 7.89 (d, 1H, *J* = 8.9 Hz, H8); ¹³C NMR (CDCl₃) δ 83.5 (C, C5, C-I), 120.6 (CH, C7), 128.2 (2CH, C2'''' and C6''''), 128.4 (2CH, C2'''' and C6''''), 128.5 (CH, C4'''), 129.0 (CH, C4'''), 129.9 (2CH, C3'''' and C5''''), 129.9 (CH, C8), 130.5 (2CH, C3'''' and C5'''), 136.4 (C), 138.8 (C), 139.2 (C), 142.3 (C), 149.3 (C), 149.9 (C, C2 or C3), 153.5 (C, C2 or C3). Anal. Calcd for C₂₀H₁₄IN₃ (423.26): C, 56.76; H, 3.33; N, 9.93. Found: C, 56.66; H, 3.94; N, 9.63.

6-Amino-5-iodo-2-phenylquinoxaline (3c). The general procedure 3 from 6-amino-2-phenylquinoxaline (**2c**; 3.8 g) gave, after purification by chromatography over silica gel (eluent: CH₂Cl₂-petroleum ether 95:5; R_f = 0.55), **3c** in 93% yield (5.5 g) as a yellow solid: mp 182 °C; IR (ATR): 511, 605, 700, 767, 797, 839, 914, 954, 1061, 1079, 1147, 1175, 1236, 1403, 1439, 1482, 1620, 3198, 3341, 3452 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃) δ 4.85 (br s, 2H, NH₂), 7.25 (d, 1H, *J* = 8.9 Hz, H7), 7.44-7.56 (m, 3H, H3', H4' and H5'), 7.88 (d, 1H, *J* = 8.9 Hz, H8), 8.09-8.13 (m, 2H, H2' and H6'), 9.21 (s, 1H, H3); ¹³C NMR (CDCl₃) δ 83.1 (C, C5, C-I), 120.9 (CH, C7), 127.2 (2CH, C2' and C6'), 129.2 (2CH, C3' and C5'), 129.7 (CH, C8), 130.6 (CH, C4'), 136.7 (C), 137.9 (C), 142.9 (C), 143.7 (CH, C3), 148.7 (C), 149.1 (C). Anal. Calcd for C₁₄H₁₀IN₃ (347.16): C, 48.44; H, 2.90; N, 12.10. Found: C, 48.54; H, 2.65; N, 11.82. **Crystal data for 3c.** C₁₄H₁₀IN₃, *M* = 347.15, monoclinic, *P* 2₁/*n*, *a* = 6.3397(3), *b* = 15.9480(6), *c* = 12.3812(4) Å, β = 92.4430(10) °, *V* = 1250.67(9) Å³, *Z* = 4, *d* = 1.844 g cm⁻³, μ = 2.545 mm⁻¹. A final refinement on *F*² with 2867 unique intensities and 169 parameters converged at ω*R*(*F*²) = 0.0507 (*R*(*F*) = 0.0210) for 2566 observed reflections with *l* > 2σ(*l*). CCDC 2070501.

6-Amino-5-iodo-2-(2-thienyl)quinoxaline (3d). The general procedure 3 from 6-amino-2-(2-thienyl)quinoxaline (**2d**; 3.9 g) gave, after purification by chromatography over silica gel (eluent: CH₂Cl₂-petroleum ether 90:10; R_f = 0.56) **3d** in 85% yield (5.1 g) as a yellow solid: mp 238-240 °C; IR (ATR): 519, 696, 712, 936, 1008, 1242, 1399, 1425, 1459, 1478, 1560, 1608, 3344, 3448 cm⁻¹; ¹H NMR ((CD₃)₂SO) δ 6.30 (br s, 2H, NH₂), 7.23 (dd, 1H, *J* = 5.0 and 3.7 Hz, H4'), 7.40 (d, 1H, *J* = 9.0 Hz, H7), 7.72 (dd, 1H, *J* = 4.9 and 0.9 Hz, H5'), 7.73 (d, 1H, *J* = 9.1 Hz, H8), 8.02 (dd, 1H, *J* = 3.7 and 0.9 Hz, H3'), 9.31 (s, 1H, H3); ¹³C NMR ((CD₃)₂SO) δ 80.8 (C, C5, C-I), 121.8 (CH), 126.3 (CH), 128.6 (CH), 129.0 (CH), 129.1 (CH), 135.9 (C), 141.7 (C), 142.4 (CH), 142.4 (C), 142.9 (C), 150.9 (C). Anal. Calcd for C₁₂H₈IN₃S (353.18): C, 40.81; H, 2.28; N, 11.90; S, 9.08. Found: C, 40.41; H, 1.91; N, 11.83; S, 8.67.

6-Amino-5-iodo-3-phenylquinoxaline (3g). The general procedure 3 from 6-amino-3-phenylquinoxaline (**2g**; 3.8 g) gave, after purification by chromatography over silica gel (eluent: CH₂Cl₂-petroleum ether 95:5; R_f = 0.30), **3g** in 75% yield (4.4 g) as a yellow solid: mp 190 °C; IR (ATR): 497, 519, 690, 765, 827, 966, 1057, 1208, 1488, 1542, 1620, 3162, 3289, 3368, 3436, 3472 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃) δ 4.84 (br s, 2H, NH₂), 7.20 (d, 1H, *J* = 8.9 Hz, H7), 7.47-7.59 (m, 3H, H3', H4' and H5'), 7.83 (d, 1H, *J* = 8.9 Hz, H8), 8.30-8.34 (m, 2H, H2' and H6'), 9.03 (s, 1H, H2); ¹³C NMR (CDCl₃) δ 84.3 (C, C5, C-I), 120.2 (CH, C7), 127.7 (2CH, C2' and C6'), 129.2 (2CH, C3' and C5'), 129.9 (CH, C8), 130.4 (CH, C4'), 136.7 (C), 137.2 (C), 139.3 (CH, C2), 143.3 (C), 149.6 (C), 152.2 (C). Anal. Calcd for C₁₄H₁₀IN₃ (347.16): C, 48.44; H, 2.90; N, 12.10. Found: C, 48.27; H, 2.86; N, 11.85. **Crystal data for 3g.** C₁₄H₁₀IN₃, *M* = 347.15, monoclinic, *P* 2₁/*c*, *a* = 8.6176(4), *b* = 18.5522(7), *c* = 15.9139(7) Å, β = 102.533(2) °, *V* = 2483.62(19) Å³, *Z* = 8, *d* = 1.857 g cm⁻³, μ = 2.563 mm⁻¹. A final refinement on *F*² with 5645 unique intensities and 325 parameters converged at ω*R*(*F*²) = 0.0616 (*R*(*F*) = 0.0330) for 4331 observed reflections with *l* > 2σ(*l*). CCDC 2070502.

6-Amino-5-iodo-2,3-dimethoxyquinoxaline (3h). The general procedure 3 from 6-amino-2,3-dimethoxyquinoxaline (**2h**; 3.5 g) gave, after purification by chromatography over silica gel (eluent: CH₂Cl₂-pentane 70:30; R_f = 0.43), **3h** in 86% yield (4.8 g) as a white solid: mp 224-226 °C; IR (ATR): 481, 771, 809, 920, 986, 1216, 1330, 1403, 1445, 1484, 1584, 1620, 2947, 3372, 3468 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃) δ 4.10 (s, 3H, OMe), 4.21 (s, 3H, OMe), 4.45 (br s, 2H, NH₂), 6.96 (d, 1H, *J* = 8.7 Hz, H7), 7.52 (d, 1H, *J* = 8.7 Hz, H8); ¹³C NMR (CDCl₃) δ 54.4 (CH₃), 54.7 (CH₃), 83.6 (C), 115.7 (CH, C7), 127.0 (CH, C8), 130.3 (C), 138.4 (C), 147.0 (C), 148.3 (C), 150.8 (C). Anal. Calcd for C₁₀H₁₀IN₃O₂ (331.11): C, 36.27; H, 3.04; N, 12.69. Found: C, 36.47; H, 3.04; N, 12.92. Compound **3h** can also be obtained from **3i** by adapting a reported procedure,¹⁸ as follows. A mixture of 6-amino-2,3-dichloro-5-iodoquinoxaline (**3i**; 3.4 g, 10 mmol), K₂CO₃ (5.5 g, 20 mmol) and benzyltriethylammonium chloride (0.30 g) in methanol (20 mL) was heated under reflux for 4 h. At the end of this period, the solvent was removed under reduced pressure, and the residue was stirred with water (50 mL). The precipitate was filtrated, washed with water and dried before recrystallization from toluene to afford **3h** in 80% yield (2.6 g).

6-Amino-2,3-dichloro-5-iodoquinoxaline (3i). The general procedure 3 from 6-amino-2,3-dichloroquinoxaline (**2i**; 3.6 g) gave, after purification by chromatography over silica gel (eluent: CH₂Cl₂; R_f = 0.58), **3i** in 83% yield (4.8 g) as a yellow solid: mp 200 °C; IR (ATR): 452, 523, 563, 622, 656, 779, 835, 1002, 1141, 1171, 1242, 1268, 1314, 1405, 1421, 1475, 1616, 3376, 3484 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃) δ 4.94 (br s, 2H, NH₂), 7.22 (d, 1H, *J* = 9.0 Hz, H7), 7.74 (d, 1H, *J* = 9.0 Hz, H8); ¹³C NMR (CDCl₃) δ 80.5 (C, C5, C-I), 121.1 (CH, C7), 129.0 (CH, C8), 135.5 (C), 141.6 (C), 143.0 (C), 146.4 (C), 150.5 (C). Anal. Calcd for C₈H₄Cl₂I_N₃ (339.95): C, 28.27; H, 1.19; N, 12.36. Found: C, 28.37; H, 1.07; N, 12.26.

6-(Benzoylamino)-5-iodoquinoxaline (4a). The general procedure 4 from 6-amino-5-iodoquinoxaline (**3a**; 0.54 g) gave **4a** (employed in the next step without purification) in 90% yield (0.68 g) as a white solid: mp 226 °C; IR (ATR): 536, 561, 680, 697, 709, 785, 863, 951, 1036, 1182, 1243, 1268, 1342, 1416, 1494, 1521, 1556, 1603, 1687, 1697, 3384 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃) δ 7.55-7.67 (m, 3H, H3', H4' and H5'), 8.06-8.09 (m, 2H, H2' and H6'), 8.14 (d, 1H, *J* = 9.3 Hz, H7), 8.78 (d, 1H, *J* = 1.8 Hz, H2), 8.88 (d, 1H, *J* = 1.8 Hz, H3), 8.96 (s, 1H, NH), 9.08 (d, 1H, *J* = 9.3 Hz, H8); ¹³C NMR (CD₃)₂SO δ 104.3 (C, C5, C-I), 127.8 (2CH, C2' and C6'), 128.6 (2CH, C3' and C5'), 129.2 (CH), 129.9 (CH), 132.1 (CH, C4'), 133.9 (C, C1'), 141.1 (C), 142.6 (C), 142.9 (C), 145.9 (CH), 146.7 (CH), 165.4 (C, C=O). Anal. Calcd for C₁₅H₁₀I_N₃O (375.17): C, 48.02; H, 2.69; N, 11.20. Found: C, 47.76; H, 2.86; N, 10.94.

6-(Benzoylamino)-5-iodo-2,3-diphenylquinoxaline (4b). The general procedure 4 from 6-amino-5-iodo-2,3-diphenylquinoxaline (**3b**; 0.85 g) gave **4b** (employed in the next step without purification) in 94% yield (0.99 g) as a white solid: mp 226-228 °C; IR (ATR): 666, 697, 766, 797, 811, 838, 981, 1076, 1111, 1161, 1192, 1257, 1341, 1381, 1400, 1442, 1488, 1509, 1547, 1601, 1688, 3028, 3374 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃) δ 7.32-7.42 (m, 6H, H3'', H4'', H5'', H3''', H4''' and H5'''), 7.54-7.63 (m, 5H, H3', H4', H5' and 2 other H of Ph), 7.65-7.68 (m, 2H of Ph), 8.07-8.11 (m, 2H, H2' and H6'), 8.16 (d, 1H, *J* = 9.2 Hz, H7), 8.98 (br s, 1H, NH), 9.05 (d, 1H, *J* = 9.2 Hz, H8); ¹³C NMR (CDCl₃) δ 95.2 (C, C5, C-I), 124.0 (CH, C7), 127.5 (2CH, C2' and C6'), 128.3 (2CH, C2''/ and C6''/), 128.5 (2CH, C2'''/ and C6'''/), 129.1 (CH, C4''/), 129.2 (2CH, C3' and C5'), 129.4 (CH, C4''/), 129.9 (CH, C8), 130.0 (2CH, C3''/ and C5''/), 130.5 (2CH, C3'''/ and C5'''/), 132.7 (CH, C4'), 134.4 (C, C1'), 138.3 (C), 138.7 (C), 139.0 (C), 141.0 (C), 141.7 (C), 153.0 (C, C2 or C3), 154.1 (C, C2 or C3), 165.7 (C, C=O). Anal. Calcd for C₂₇H₁₈I_N₃O (527.37): C, 61.49; H, 3.44; N, 7.97. Found: C, 61.21; H, 3.42; N, 8.05.

6-(Benzoylamino)-5-iodo-2-phenylquinoxaline (4c). The general procedure 4 from 6-amino-5-iodo-2-phenylquinoxaline (**3c**; 0.69 g) gave **4c** in 66% yield (0.60 g) after recrystallization from toluene as a white solid: mp 230 °C; IR (ATR): 667, 685, 700, 767, 795, 832, 952, 972, 1026, 1054, 1075, 1097, 1184, 1259, 1290, 1353, 1390, 1427, 1477, 1490, 1524, 1564, 1602, 1683, 3053, 3375 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃) δ 7.51-7.67 (m, 6H, H3', H4', H5', H3'', H4'' and H5''), 8.06-8.10 (m, 2H, H2' and H6'), 8.18 (d, 1H, *J* = 8.9 Hz, H7), 8.19-8.22 (m, 2H, H2'' and H6''), 8.95 (br s, 1H, NH), 9.07 (d, 1H, *J* = 9.2 Hz, H8), 9.34 (s, 1H, H3); ¹³C NMR ((CD₃)₂SO) δ 104.0 (C, C5, C-I), 127.6 (2CH, C2'' and C6''), 127.8 (2CH, C2' and C6'), 128.6 (2CH, C3' and C5'), 129.2 (CH), 129.2 (2CH, C3'' and C4''), 130.1 (CH), 130.6 (CH), 132.1 (CH, C4'), 133.9 (C, C1'), 135.4 (C), 140.2 (C), 141.5 (C), 142.4 (C), 144.6 (CH, C3), 151.1 (C), 165.3 (C, C=O). Anal. Calcd for C₂₁H₁₄I_N₃O (451.27): C, 55.89; H, 3.13; N, 9.31. Found: C, 56.31; H, 3.48; N, 9.04.

6-(Benzoylamino)-5-iodo-2-(2-thienyl)quinoxaline (4d). The general procedure 4 from 6-amino-5-iodo-2-(2-thienyl)quinoxaline (**3d**; 0.71 g) gave **4d** (employed in the next step without purification) in 65% yield (0.59 g) as a whitish solid: mp 279.5 °C; IR (ATR): 683, 698, 719, 791, 838, 941, 967, 1001, 1008, 1064, 1080, 1140, 1180, 1223, 1255, 1285, 1341, 1436, 1491, 1515, 1563, 1601, 1695, 3070, 3388 cm⁻¹; ¹H NMR ((CD₃)₂SO) δ 7.31 (br s, 1H, H4''), 7.59 (t, 2H, *J* = 7.4 Hz, H3' and H5'), 7.65 (t, 1H, *J* = 7.2 Hz, H4'), 7.85 (d, 1H, *J* = 4.8 Hz, H5''), 8.04-8.16 (m, 5H, H7, H8, H2', H6' and H3''), 9.52 (s, 1H, H3), 9.96 (br s, 1H, NH); ¹³C NMR ((CD₃)₂SO) δ 102.1 (C, C5, C-I), 127.1 (2CH, C2' and C6'), 128.1 (2CH, C3' and C5'), 128.1 (CH), 128.2 (CH), 128.3 (CH), 128.7 (CH), 130.6 (CH), 131.4 (CH, C4'), 133.8 (C, C1'), 139.5 (C), 140.5 (C), 140.8 (C), 141.6 (C), 143.1 (CH, C3), 146.9 (C), 164.9 (C, C=O). Anal. Calcd for C₁₉H₁₂I_N₃OS (457.29): C, 49.90; H, 2.65; N, 9.19; S, 7.01. Found: C, 49.75; H, 2.39; N, 9.52; S, 6.88.

6-(Benzoylamino)-5-iodo-3-phenylquinoxaline (4g). The general procedure 4 from 6-amino-5-iodo-3-phenylquinoxaline (**3g**; 0.69 g) gave **4g** (employed in the next step without purification) in 83% yield (0.75 g) as a whitish solid: mp 222-224 °C; IR (ATR): 682, 698, 762, 832, 906, 963, 1060, 1134, 1249, 1268, 1332, 1382, 1445, 1489, 1508, 1558, 1605, 1674, 3052, 3388 cm⁻¹; ¹H NMR ((CD₃)₂SO) δ 7.58-7.66 (m, 6H, H3', H4', H5', H3'', H4'' and H5''), 8.07 (d, 1H, *J* = 8.9 Hz, H7), 8.11-8.15 (m, 3H, H8, H2' and H6'), 8.48 (d, 2H, *J* = 6.6 Hz, H2'' and H6''), 9.58 (s, 1H, H2), 10.30 (br s, 1H, NH); ¹³C NMR ((CD₃)₂SO) δ 104.5 (C, C5, C-I), 127.6 (2CH, C2'' and C6''), 127.8 (2CH, C2' and C6'), 128.6 (2CH, C3' and C5'), 128.7 (CH), 129.2 (2CH, C3'' and C4''), 129.3 (CH), 130.8 (CH), 132.1 (CH, C4'), 133.9 (C, C1'), 135.4 (C), 139.8 (C), 141.6 (C), 143.0 (C), 143.5 (CH), 151.5 (C), 165.3 (C, C=O). Anal. Calcd for C₂₁H₁₄I_N₃O (451.27): C, 55.89; H, 3.13; N, 9.31. Found: C, 55.66; H, 3.37; N, 9.57.

6-(Benzoylamino)-5-iodo-2,3-dimethoxyquinoxaline (4h). The general procedure 4 from 6-amino-5-iodo-2,3-dimethoxyquinoxaline (**3h**; 0.66 g) gave **4h** (employed in the next step without purification) in 91% yield (0.79 g) as a white solid: mp 252 °C; IR (ATR): 681, 694, 770, 833, 923, 977, 995, 1016, 1184, 1223, 1269, 1284, 1297, 1369, 1394, 1433, 1477, 1494, 1527, 1582, 1612, 1691, 2947, 3392 cm⁻¹; ¹H NMR ((CD₃)₂SO) δ 4.11 (s, 3H, OMe), 4.17 (s, 3H, OMe), 7.57 (t, 2H, *J* = 7.4 Hz, H3' and H5'), 7.63 (t, 1H, *J* = 7.3 Hz, H4'), 7.77 (d, 1H, *J* = 8.7 Hz, H7), 7.81 (d, 1H, *J* = 8.7 Hz, H8), 8.07 (dd, 2H, *J* = 7.1 and 1.2 Hz, H2' and H6'), 9.83 (br s, 1H, NH); ¹³C NMR ((CD₃)₂SO) δ 53.8 (CH₃), 53.8 (CH₃), 99.6 (C, C5, C-I), 125.0 (CH, C7), 125.5 (CH, C8), 127.1 (2CH, C2' and C6'), 128.0 (2CH, C3' and C5'), 131.2 (CH, C4'), 134.0 (C), 134.1 (C), 137.0 (C), 139.1 (C), 149.8 (C, C2 or C3), 150.2 (C, C2 or C3), 164.9 (C, C=O). Anal. Calcd for C₁₇H₁₄I_N₃O₃ (435.22): C, 46.92; H, 3.24; N, 9.66. Found: C, 46.46; H, 3.86; N, 9.94.

2-Phenyloxazolo[5,4-*f*]quinoxaline (5a). The general procedure 5 from 6-(benzoylamino)-5-iodoquinoxaline (**4a**; 47 mg) gave, after purification by chromatography over silica gel (eluent: CH₂Cl₂; R_f = 0.40), **5a** in 85% yield (26 mg) as a white solid: mp 180 °C; IR (ATR): 687, 702, 736, 778, 830, 872, 882, 924, 996, 1024, 1070, 1087, 1222, 1259, 1275, 1348, 1386, 1447, 1455, 1486, 1508, 1546, 1610, 1619, 1917, 3376 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃) δ 7.55-7.60 (m, 3H, H3', H4' and H5'), 8.11 (d, 1H, *J* = 9.0 Hz, H4 or H5), 8.18 (d, 1H, *J* = 8.9 Hz, H4 or H5), 8.39-8.43 (m, 2H, H2' and H6'), 8.93 (d, 1H, *J* = 1.9 Hz, H7 or H8), 8.96 (d, 1H, *J* = 1.9 Hz, H7 or H8); ¹H NMR ((CD₃)₂SO) δ 7.62-7.68 (m, 3H, H3', H4' and H5'), 8.06 (d, 1H, *J* = 8.9 Hz, H4 or H5), 8.21 (d, 1H, *J* = 8.9 Hz, H4 or H5), 8.26-8.28 (m, 2H, H2' and H6'), 9.00 (d, 1H, *J* = 1.8 Hz, H7 or H8), 9.03 (d, 1H, *J* = 1.8 Hz, H7 or H8); ¹³C NMR (CDCl₃) δ 122.1 (CH, C4 or C5), 125.9 (C), 126.2 (CH, C4 or C5), 127.0 (2CH, C2' and C6'), 129.0 (2CH, C3' and C5'), 130.1 (C), 131.7 (CH, C4'), 140.7 (C), 141.6 (C), 144.1 (C), 144.5 (CH, C7 or C8), 145.1 (CH, C7 or C8), 163.7 (C, C2). Anal. Calcd for C₁₅H₉N₃O (247.26): C, 72.87; H, 3.67; N, 16.99. Found: C, 73.10; H, 3.63; N, 16.99.

2,7,8-Triphenyloxazolo[5,4-*f*]quinoxaline (5b). The general procedure 5 from 6-(benzoylamino)-5-iodo-2,3-diphenylquinoxaline (**4b**; 66 mg) gave, after purification by chromatography over silica gel (eluent: CH₂Cl₂; R_f = 0.25), **5b** in 70% yield (35 mg) as a white solid: mp 264-265 °C; IR (ATR): 687, 697, 742, 757, 781, 802, 831, 1017, 1076, 1089, 1249, 1337, 1449, 1481, 1543, 1574, 1609, 3061 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃) δ 7.32-7.43 (m, 6H), 7.55-7.58 (m, 5H, notably H3', H4', H5'), 7.61-7.64 (m, 2H), 8.13 (d, 1H, *J* = 8.9 Hz, H4 or H5), 8.16 (d, 1H, *J* = 8.9 Hz, H4 or H5), 8.40-8.44 (m, 2H, H2' and H6'); ¹³C NMR (CDCl₃) δ 122.6 (CH), 126.7 (CH), 127.0 (C), 128.0 (2CH), 128.4 (2CH), 128.5 (2CH), 129.0 (CH), 129.1 (2CH, C3' and C5'), 129.3 (CH), 129.5 (C), 130.0 (2CH), 130.3 (2CH), 131.9 (CH, C4'), 138.9 (C), 139.1 (C), 140.0 (C), 142.9 (C), 145.1 (C), 152.8 (C), 153.6 (C), 165.0 (C, C2). Anal. Calcd for C₂₇H₁₇N₃O (399.45): C, 81.19; H, 4.29; N, 10.52. Found: C, 81.42; H, 4.58; N, 10.62.

2,7-Diphenyloxazolo[5,4-*f*]quinoxaline (5c). The general procedure 5 from 6-(benzoylamino)-5-iodo-2-phenylquinoxaline (**4c**; 56 mg) gave, after purification by chromatography over silica gel (eluent: CH₂Cl₂; R_f = 0.50), **5c** in 90% yield (36 mg) as a beige solid: mp 232 °C; IR (ATR): 686, 705, 768, 804, 829, 926, 1074, 1087, 1249, 1325, 1453, 1487, 1539, 1607, 3058 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃) δ 7.51-7.60 (m, 6H, H3', H4', H5', H3'', H4'' and H5''), 8.10 (d, 1H, *J* = 8.9 Hz, H4 or H5), 8.14 (d, 1H, *J* = 8.9 Hz, H4 or H5), 8.21 (dd, 2H, *J* = 8.1 and 1.6 Hz, H2'' and H6''), 8.37-8.40 (m, 2H, H2' and H6'), 9.38 (s, 1H, H8); ¹³C NMR (CDCl₃) δ 123.0 (CH), 126.9 (C), 127.1 (CH), 127.6 (2CH), 127.9 (2CH), 129.1 (2CH), 129.3 (2CH), 129.6 (C), 130.4 (CH), 132.0 (CH), 136.6 (C), 141.2 (C), 142.5 (C), 143.1 (CH), 145.0 (C), 151.2 (C), 164.9 (C, C2). Anal. Calcd for C₂₁H₁₃N₃O (323.36): C, 78.00; H, 4.05; N, 13.00. Found: C, 78.25; H, 4.00; N, 12.82.

2-Phenyl-7-(2-thienyl)oxazolo[5,4-*f*]quinoxaline (5d). The general procedure 5 from 6-(benzoylamino)-5-iodo-2-(2-thienyl)quinoxaline (**4d**; 57 mg) gave, after purification by chromatography over silica gel (eluent: CH₂Cl₂; R_f = 0.44), **5d** in 88% yield (36 mg) as a pale yellow solid: mp 236-238 °C; IR (ATR): 687, 704, 739, 776, 795, 821, 861, 925, 999, 1066, 1081, 1251, 1337, 1415, 1541, 3060, 3126 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃) δ 7.18 (dd, 1H, *J* = 5.0 and 3.7 Hz, H4''), 7.52-7.55 (m, 4H, H3', H4', H5' and H5''), 7.84 (dd, 1H, *J* = 3.8 and 1.1 Hz, H3''), 7.99 (d, 1H, *J* = 8.9 Hz, H4 or H5), 8.08 (d, 1H, *J* = 8.9 Hz, H4 or H5), 8.34-8.37 (m, 2H, H2' and H6'), 9.25 (s, 1H, H8); ¹³C NMR (CDCl₃) δ 123.1 (CH), 126.5 (CH), 126.8 (C), 127.0 (CH), 127.9 (2CH, C2' and C6'), 128.6 (CH), 129.1 (2CH, C3' and C5'), 129.2 (C), 130.1 (CH), 131.9 (CH, C4'), 140.9 (C), 141.8 (CH), 142.3 (C), 142.3 (C), 145.1 (C), 146.9 (C), 164.7 (C, C2). Anal. Calcd for C₁₉H₁₁N₃OS (329.38): C, 69.29; H, 3.37; N, 12.76; S, 9.73. Found: C, 69.18; H, 3.54; N, 12.46; S, 10.26.

2,8-Diphenyloxazolo[5,4-*f*]quinoxaline (5g). The general procedure 5 from 6-(benzoylamino)-5-iodo-3-phenylquinoxaline (**4g**; 56 mg) gave, after recrystallization in 1,4-dioxane, **5g** in 89% yield (36 mg) as a whitish solid: mp 200 °C; IR (ATR): 683, 705, 748, 768, 778, 797, 830, 916, 922, 1017, 1068, 1092, 1243, 1314, 1393, 1413, 1447, 1487, 1540, 1550, 1609, 1896, 3056 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃) δ 7.52-7.61 (m, 6H, H3', H4', H5', H3'', H4'' and H5''), 8.05 (d, 1H, *J* = 8.9 Hz, H4 or H5), 8.09 (d, 1H, *J* = 8.9 Hz, H4 or H5), 8.27-8.31 (m, 2H, H2' and H6'), 8.40 (dd, 2H, *J* = 6.7 and 3.0 Hz, H2' and H6'), 9.34 (s, 1H, H7); ¹³C NMR (CDCl₃) δ 122.1 (CH), 126.6 (CH), 126.9 (C), 127.9 (2CH), 128.0 (2CH), 129.1 (2CH), 129.3 (2CH), 130.7 (CH), 130.7 (C), 131.9 (CH, C4'), 136.5 (C), 140.3 (C), 142.4 (CH), 143.1 (C), 145.1 (C), 151.8 (C), 165.0 (C, C2). Anal. Calcd for C₂₁H₁₃N₃O (323.35): C, 78.00; H, 4.05; N, 13.00. Found: C, 78.31; H, 4.10; N, 13.06.

7,8-Dimethoxy-2-phenyloxazolo[5,4-*f*]quinoxaline (5h). The general procedure 5 from 6-(benzoylamino)-5-iodo-2,3-dimethoxyquinoxaline (**4h**; 54 mg) gave, after purification by chromatography over silica gel (eluent: CH₂Cl₂-pentane 70:30; R_f = 0.24), **5h** in 92% yield (35 mg) as a white solid: mp 186-188 °C; IR (ATR): 666, 684, 706, 776, 810, 847, 973, 985, 1022, 1090, 1222, 1242, 1266, 1361, 1409, 1485, 1525, 1555, 1590, 1611, 2954 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃) δ 4.15 (s, 3H, OMe), 4.26 (s, 3H, OMe), 7.50-7.54 (m, 3H, H3', H4' and H5'), 7.69 (d, 1H, *J* = 8.8 Hz, H4 or H5), 7.81 (d, 1H, *J* = 8.7 Hz, H4 or H5), 8.30-8.34 (m, 2H, H2' and H6'); ¹³C NMR (CDCl₃) δ 54.4 (CH₃), 54.8 (CH₃), 118.3 (CH, C4 or C5), 123.6 (CH, C4 or C5), 124.2 (C), 127.3 (C), 127.7 (2CH, C2' and C6'), 129.0 (2CH, C3' and C5'), 131.5 (CH, C4'), 135.5 (C), 140.6 (C), 144.3 (C), 149.4 (C), 150.3 (C), 163.5 (C, C2). Anal. Calcd for C₁₇H₁₃N₃O₃ (307.31): C, 66.44; H, 4.26; N, 13.67. Found: C, 66.67; H, 3.71; N, 13.52.

8-(2-Methoxyethoxy)-2-(3-pyridyl)oxazolo[5,4-f]quinoxaline (7a). The general procedure 6 using sodium 2-methoxyethanolate (26 mg, 0.15 mmol) gave (eluent: CHCl₃-MeOH 97:3; R_f = 0.30) **7a** in 50% yield (20 mg) as a white solid: mp 140 °C; IR (ATR): 465, 596, 614, 704, 718, 761, 825, 857, 924, 950, 1018, 1034, 1064, 1097, 1128, 1200, 1265, 1314, 1349, 1376, 1414, 1460, 1574, 1608, 2823, 2888, 2928, 3046 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃) δ 3.50 (s, 3H, OMe), 3.89 (t, 2H, J = 4.4 Hz, CH₂), 4.80 (t, 2H, J = 4.4 Hz, CH₂), 7.52 (dd, 1H, J = 7.2 and 5.0 Hz, H5'), 7.93 (d, 1H, J = 8.8 Hz, H4 or H5), 8.02 (d, 1H, J = 8.8 Hz, H4 or H5), 8.59 (s, 1H, H7), 8.63 (d, 1H, J = 8.0 Hz, H4'), 8.81 (br s, 1H, H6'), 9.60 (br s, 1H, H2'); ¹³C NMR (CDCl₃) δ 59.3 (CH₃), 66.3 (CH₂), 70.7 (CH₂), 118.7 (CH), 124.0 (C), 124.3 (CH), 126.8 (CH), 128.2 (C), 135.4 (CH), 137.7 (C), 139.1 (CH), 142.9 (C), 144.3 (C), 148.5 (CH), 151.7 (CH), 157.8 (C), 162.1 (C). Anal. Calcd for C₁₇H₁₄N₄O₃ (322.32): C, 63.35; H, 4.38; N, 17.38. Found: C, 63.43; H, 4.43; N, 17.27.

8-(2-(Dimethylamino)ethoxy)-2-(3-pyridyl)oxazolo[5,4-f]quinoxaline (7b). The general procedure 6 using sodium 2-(dimethylamino)ethanolate (17 mg, 0.15 mmol) gave (eluent: CHCl₃-MeOH 94:6; R_f = 0.29) **7b** in 35% yield (14 mg) as a white solid: mp 108-110 °C; IR (ATR): 405, 464, 596, 613, 624, 703, 718, 761, 795, 823, 924, 960, 1017, 1063, 1100, 1164, 1200, 1242, 1264, 1319, 1349, 1372, 1414, 1457, 1548, 1572, 1608, 1675, 2771, 2822, 2947, 3409 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃) δ 2.51 (s, 6H, NMe₂), 3.00 (t, 2H, J = 5.1 Hz, N-CH₂), 4.80 (t, 2H, J = 5.3 Hz, O-CH₂), 7.50 (dd, 1H, J = 7.5 and 5.1 Hz, H5'), 7.92 (d, 1H, J = 8.8 Hz, H4 or H5), 8.00 (d, 1H, J = 8.8 Hz, H4 or H5), 8.57 (s, 1H, H7), 8.61 (d, 1H, J = 7.9 Hz, H4'), 8.79 (d, 1H, J = 4.1 Hz, H6'), 9.57 (s, 1H, H2'); ¹³C NMR (CDCl₃) δ 45.6 (CH₃), 57.7 (CH₂), 64.2 (CH₂), 118.8 (CH), 123.5 (C), 123.9 (CH), 126.8 (CH), 128.1 (C), 135.0 (CH), 137.6 (C), 138.9 (CH), 142.9 (C), 144.2 (C), 149.0 (CH), 152.4 (CH), 157.6 (C), 162.4 (C). Anal. Calcd for C₁₈H₁₇N₅O₂ (335.37): C, 64.47; H, 5.11; N, 20.88. Found: C, 64.61; H, 5.14; N, 21.12.

8-Isopropoxy-2-(3-pyridyl)oxazolo[5,4-f]quinoxaline (7c). The general procedure 6 using sodium isopropanolate (12 mg, 0.15 mmol) gave (eluent: CHCl₃-AcOEt 95:5; R_f = 0.30) **7c** in 45% yield (17 mg) as a white solid: mp 164-166 °C; IR (ATR): 562, 625, 695, 725, 928, 970, 1022, 1052, 1107, 1132, 1184, 1205, 1272, 1317, 1328, 1371, 1386, 1421, 1494, 1527, 1571, 1608, 1688, 2868, 2933, 2975, 3033, 3056, 3368 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃) δ 1.50 (d, 6H, J = 6.2 Hz, Me), 5.70 (sept, 1H, J = 6.2 Hz, CHMe₂), 7.49 (dd, 1H, J = 8.0 and 4.9 Hz, H5'), 7.89 (d, 1H, J = 8.8 Hz, H4 or H5), 7.98 (d, 1H, J = 8.8 Hz, H4 or H5), 8.45 (s, 1H, H7), 8.61 (dt, 1H, J = 8.0 and 1.9 Hz, H4'), 8.79 (dd, 1H, J = 4.8 and 1.6 Hz, H6'), 9.58 (d, 1H, J = 2.0 Hz, H2'); ¹³C NMR (CDCl₃) δ 22.0 (2CH₃), 70.1 (CHMe₂), 118.2 (CH), 123.8 (CH), 123.5 (C), 126.7 (CH), 128.5 (C), 135.0 (CH), 137.3 (C), 139.5 (CH), 142.8 (C), 144.3 (C), 149.0 (CH), 152.3 (CH), 157.6 (C), 162.2 (C). Anal. Calcd for C₁₇H₁₄N₄O₂ (306.32): C, 66.66; H, 4.61; N, 18.29. Found: C, 67.13; H, 4.78; N, 18.44.

6-Amino-5-iodo-3-(2-methoxyethoxy)quinoxaline (3j). A solution of 6-amino-3-chloro-5-iodoquinoxaline (**3f**; 0.31 g, 1.0 mmol) in acetonitrile (20 mL) was added to a stirred solution of sodium 2-methoxyethanolate prepared by reacting sodium (69 mg, 3 mmol) to 2-methoxyethanol (4.5 mL). The red solution was next heated at 50 °C for 1 h and poured onto crushed ice. After extraction with AcOEt (2 x 20 mL), drying over Na₂SO₄ and removal of the solvent under reduced pressure, the crude product was purified by column chromatography over silica gel (eluent: CH₂Cl₂-AcOEt 90:10; R_f = 0.41) to afford **3j** in 85% yield (0.29 g) as a pale yellow solid: mp 120-122 °C; IR (ATR): 463, 596, 634, 726, 778, 823, 842, 888, 911, 964, 1016, 1035, 1118, 1199, 1271, 1313, 1371, 1424, 1456, 1501, 1564, 1621, 2899, 2949, 3362, 3480 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃) δ 3.47 (s, 3H, OMe), 3.87 (t, 2H, J = 4.7 Hz, CH₂), 4.73 (t, 2H, J = 4.7 Hz, CH₂), 7.02 (d, 1H, J = 8.8 Hz, H7), 7.73 (d, 1H, J = 8.8 Hz, H8), 8.18 (s, 1H, H2); ¹³C NMR (CDCl₃) δ 59.3 (CH₃), 65.9 (CH₂), 70.7 (CH₂), 82.6 (C, C5, C-1), 116.4 (CH), 129.8 (CH), 133.6 (C), 135.1 (CH), 142.0 (C), 149.6 (C), 158.5 (C). Anal. Calcd for C₁₂H₁₅IN₄O (358.18): C, 40.24; H, 4.22; N, 15.64. Found: C, 39.80; H, 3.78; N, 15.51.

5-Iodo-3-(2-methoxyethoxy)-6-(3-pyridoylamino)quinoxaline (8a). Compound **8a** can also be obtained from **3j** by adapting a reported procedure,⁶ as follows. To a solution of 6-amino-5-iodo-3-(2-methoxyethoxy)quinoxaline (**3j**; 0.35 g, 1.0 mmol) in acetonitrile (4 mL) were successively added dropwise nicotinoyl chloride (0.16 g, 1.1 mmol) and pyridine (0.4 mL, 5.0 mmol). The mixture was stirred at room temperature for 15 h, poured onto a saturated aqueous NaHCO₃ solution (10 mL) and filtrated. The solid was washed with water (5 mL) and cold ethanol (5 mL), and dried. The product **8a** was obtained in 80% yield (0.36 g) as a white solid: mp 182 °C; IR (ATR): 463, 528, 553, 592, 611, 622, 689, 703, 733, 746, 777, 823, 849, 903, 930, 945, 974, 1025, 1034, 1098, 1124, 1199, 1208, 1253, 1292, 1328, 1393, 1495, 1521, 1573, 1590, 1639, 2815, 2926, 3247 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃) δ 3.48 (s, 3H, OMe), 3.88 (t, 2H, J = 4.6 Hz, CH₂), 4.75 (t, 2H, J = 4.6 Hz, CH₂), 7.50 (dd, 1H, J = 7.9 and 4.9 Hz, H5'), 8.02 (d, 1H, J = 9.1 Hz, H7 or H8), 8.34 (dt, 1H, J = 8.0 and 1.8 Hz, H4'), 8.41 (s, 1H), 8.77 (d, 1H, J = 9.1 Hz, H7 or H8), 8.84 (d, 1H, J = 4.8 Hz, H6'), 8.85 (s, 1H), 9.30 (s, 1H); ¹³C NMR (CDCl₃) δ 59.3 (CH₃), 66.4 (CH₂), 70.5 (CH₂), 93.6 (C, C5, C-1), 120.5 (CH), 123.9 (CH), 129.9 (CH), 130.2 (C), 135.5 (CH), 136.6 (C), 139.2 (CH), 140.7 (C), 141.0 (C), 148.4 (CH), 153.3 (CH), 158.5 (C), 163.8 (C). The product was used in the next step without further purification.

6-Amino-5-iodo-3-(*N'*-methylpiperazino)quinoxaline (3k). A solution of 6-amino-3-chloro-5-iodoquinoxaline (**3f**; 0.31 g, 1.0 mmol) and *N*-methylpiperazine (0.50 g, 5.0 mmol) in toluene (10 mL) was heated under reflux for 10 h. After cooling and evaporation under reduced pressure, a saturated aqueous NaHCO₃ solution (5 mL) was added to the residue. Extraction with CH₂Cl₂ (3 x 10 mL), washing with water (5 mL), drying over Na₂SO₄ and removal of the solvent under reduced pressure led to the crude product which was purified by recrystallization from toluene to afford **3k** in 86% yield (0.32 g) as a pale yellow solid: mp 172 °C; IR (ATR): 467, 502, 997, 1025, 1063, 1078, 1127, 1143, 1226, 1246, 1274, 1377, 1436, 1442, 1504, 1549, 1607, 1622, 1643, 2815, 2841, 2977, 3137, 3292, 3349, 3430 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃) δ 2.37 (s, 3H, Me), 2.58 (t, 4H, *J* = 5.1 Hz, CH₂), 3.89 (t, 4H, *J* = 5.1 Hz, CH₂), 4.65 (br s, 2H, NH₂), 6.88 (d, 1H, *J* = 8.7 Hz, H7), 7.61 (d, 1H, *J* = 8.7 Hz, H8), 8.20 (s, 1H, H2); ¹³C NMR (CDCl₃) δ 44.6 (CH₂), 46.3 (CH₃), 54.8 (CH₂), 82.7 (C, C5, C-I), 114.7 (CH, C7), 129.4 (CH, C8), 131.2 (CH, C2), 131.3 (C), 142.8 (C), 149.5 (C), 153.2 (C). Anal. Calcd for C₁₃H₁₆IN₅ (369.21): C, 42.29; H, 4.37; N, 18.97. Found: C, 42.56; H, 4.40; N, 18.57. **Crystal data for 3k.** C₁₃H₂₀IN₅O₂, *M* = 405.24, triclinic, *P*-1, *a* = 8.5564(6), *b* = 9.0262(7), *c* = 10.9365(8) Å, *α* = 82.573(3), *β* = 77.066(2), *γ* = 78.342(2)°, *V* = 803.10 Å³, *Z* = 2, *d* = 1.676 g cm⁻³, *μ* = 2.006 mm⁻¹. A final refinement on *F*² with 3660 unique intensities and 209 parameters converged at ω*R*(*F*²) = 0.1105 (*R*(*F*) = 0.0434) for 3325 observed reflections with *I* > 2σ(*I*). CCDC 2070503.

8-(*N'*-Methylpiperazino)-2-phenylthiazolo[5,4-*f*]quinoxaline (9a). A mixture of 6-amino-5-iodo-3-(*N'*-methylpiperazino)quinoxaline (**5a**; 74 mg, 0.20 mmol), S₈ (61 mg, 0.24 mmol), phenylacetylene (31 mg, 0.30 mmol), CuI (3.8 mg, 20 μmol), K₃PO₄ (85 mg, 0.40 mmol) and 1,10-phenanthroline (7.2 mg, 40 μmol) was stirred in DMSO (2.0 mL) at 110 °C under 1 atm O₂ for 24 h. After cooling, water was added and the product was extracted by AcOEt (10 mL) twice. Drying over Na₂SO₄ and removal of the solvent under reduced pressure led to the crude product which was purified by column chromatography over silica gel (eluent: CH₂Cl₂-MeOH 97:3; *R*_f = 0.13) to afford **9a** in 75% yield (54 mg) as a whitish solid: mp 198-200 °C; IR (ATR): 686, 758, 786, 820, 957, 1006, 1142, 1200, 1255, 1299, 1379, 1390, 1399, 1443, 1454, 1544, 1563, 2786, 2849, 2918, 2936 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃) δ 2.38 (s, 3H, Me), 2.60 (t, 4H, *J* = 5.1 Hz, CH₂), 3.87 (t, 4H, *J* = 5.1 Hz, CH₂), 7.49-7.51 (m, 3H, H3', H4' and H5'), 7.91 (d, 1H, *J* = 8.9 Hz, H4 or H5), 8.02 (d, 1H, *J* = 8.8 Hz, H4 or H5), 8.15 (dd, 2H, *J* = 6.7 and 3.0 Hz), 8.57 (s, 1H, H7); ¹³C NMR (CDCl₃) δ 44.6 (CH₂), 46.3 (CH₃), 54.8 (CH₂), 120.3 (CH, C4 or C5), 127.6 (2CH, C2' and C6'), 127.6 (CH, C4 or C5), 129.2 (2CH, C3' and C5'), 130.7 (C), 131.1 (CH, C4'), 134.0 (C), 134.0 (C), 134.5 (CH, C7), 137.8 (C), 152.0 (C), 155.2 (C), 170.3 (C, C2). Anal. Calcd for C₂₀H₁₉N₅S (361.47): C, 66.46; H, 5.30; N, 19.38; S, 8.87. Found: C, 66.02; H, 4.97; N, 19.36; S, 9.02.

6-(*N'*-benzoyl)thioureido-5-iodo-3-(*N'*-methylpiperazino)quinoxaline (9b) To a stirred mixture of 6-amino-5-iodo-3-(*N'*-methylpiperazino)quinoxaline (**3k**; 0.74 g, 2.0 mmol) in acetonitrile (10 mL) was added a solution of benzoyl isothiocyanate (0.33 g; 2.0 mmol) in acetonitrile (4 mL). The reaction mixture was stirred for 2 h under reflux and then cooled to room temperature. The yellow solid was filtered and washed with acetonitrile to afford **9b** in 85% yield (0.91 g): mp 232 °C; IR (ATR): 668, 724, 831, 982, 999, 1086, 1128, 1149, 1155, 1224, 1257, 1274, 1299, 1384, 1415, 1446, 1461, 1513, 1567, 1661, 2806, 2848, 2883, 2937, 2995 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃) δ 2.40 (s, 3H, Me), 2.63 (s, 4H, CH₂), 3.94 (s, 4H, CH₂), 7.54 (t, 2H, *J* = 7.3 Hz, H3' and H5'), 7.65 (t, 1H, *J* = 7.0 Hz, H4'), 7.87 (d, 1H, *J* = 8.6 Hz, H7 or H8), 7.95 (d, 2H, *J* = 7.6 Hz, H2' and H6'), 8.03 (d, 1H, *J* = 8.5 Hz, H7 or H8), 8.48 (s, 1H), 9.29 (br s, 1H), 12.62 (s, 1H, NH); ¹³C NMR (CDCl₃) δ 44.6 (CH₂), 46.3 (CH₃), 54.8 (CH₂), 100.2 (C, C5, C-I), 123.8 (CH), 127.8 (2CH), 128.6 (CH), 129.3 (2CH), 131.7 (C), 133.9 (CH), 135.2 (C), 136.0 (CH), 142.3 (C), 142.4 (C), 152.8 (C), 166.9 (C), 179.6 (C). Anal. Calcd for C₂₁H₂₁IN₆OS (532.40): C, 47.38; H, 3.98; N, 15.79; S, 6.02. Found: C, 47.59; H, 4.06; N, 15.44; S, 5.74.

2-(Benzoylamino)-8-(*N'*-methylpiperazino)thiazolo[5,4-*f*]quinoxaline (9c) To a stirred mixture of 6-(*N'*-benzoyl)thioureido-5-iodo-3-(*N'*-methylpiperazino)quinoxaline (**9b**; 0.27 g, 0.50 mmol) in DMSO (4 mL) was slowly added triethylamine (0.14 mL; 1.0 mmol). The reaction mixture was stirred for 5 min at room temperature and then heated at 90 °C for 6 h. After cooling to room temperature, the reaction mixture was poured onto water (10 mL) and the solid was filtered, washed with water and dried. The crude product was purified by column chromatography over silica gel (eluent: AcOEt-MeOH-NH₄OH 93:6:1; *R*_f = 0.45) to afford **9c** in 56% yield (0.11 g) as a pale yellow solid: mp > 260 °C; IR (ATR): 406, 471, 512, 615, 631, 647, 664, 698, 715, 785, 816, 900, 937, 952, 1002, 1072, 1083, 1144, 1172, 1208, 1256, 1270, 1285, 1293, 1382, 1404, 1447, 1465, 1494, 1532, 1557, 1603, 1673, 2795, 2847, 2932, 3050 cm⁻¹; ¹H NMR ((CD₃)₂SO) δ 2.27 (s, 3H, Me), ~2.50 (4H, masked by the (CD₃)₂SO signal, CH₂), 3.84 (t, 4H, *J* = 4.8 Hz, CH₂), 7.59 (t, 2H, *J* = 7.5 Hz, H3' and H5'), 7.68 (t, 1H, *J* = 7.4 Hz, H4'), 7.77 (d, 1H, *J* = 8.7 Hz, H4 or H5), 7.85 (d, 1H, *J* = 8.7 Hz, H4 or H5), 8.15-8.18 (m, 2H, H2' and H6'), 8.81 (s, 1H, H7), 13.02 (br s, 1H, NH); ¹³C NMR ((CD₃)₂SO) δ 43.9 (CH₂), 45.7 (CH₃), 54.2 (CH₂), 117.8 (CH, C4 or C5), 125.2 (C), 126.9 (CH, C4 or C5), 128.3 (2CH), 128.6 (2CH), 131.9 (C), 132.4 (C), 132.9 (CH, C4'), 135.0 (CH, C7), 137.0 (C), 149.4 (C), 151.7 (C), 160.6 (C), 166.0 (C). Anal. Calcd for C₂₁H₂₀N₆OS (404.49): C, 62.36; H, 4.98; N, 20.78; S, 7.93. Found: C, 62.73; H, 4.67; N, 20.50; S, 7.96.

6-Amino-2,3-diphenyl-5-(trimethylsilyl)ethynylquinoxaline (10b). The procedure 7 from 6-amino-5-iodo-2,3-diphenylquinoxaline (**3b**; 0.63 g) gave (eluent: pentane-AcOEt 80:20; *R*_f = 0.50) **10b** in 79% yield (0.46 g) as a yellow solid: mp 186-188 °C; IR (ATR): 474, 508, 528, 544, 577, 645, 688, 695, 730, 763, 814, 836, 845, 1025, 1053, 1085, 1138, 1220, 1247, 1355, 1413, 1433, 1444, 1458, 1481, 1596, 1627, 2130, 3212, 3319, 3417, 3419 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃) δ 0.35 (s, 9H, SiMe₃), 4.90 (br s, 2H, NH₂), 7.14 (d, 1H, *J* = 9.1 Hz, H7), 7.27-7.34 (m, 6H), 7.50-7.53 (m, 2H), 7.65 (dd, 2H, *J* = 7.3 and 1.0 Hz), 7.88 (d, 1H, *J* = 9.0 Hz, H8); ¹³C NMR (CDCl₃) δ 0.45 (CH₃, SiMe₃), 99.0 (C), 100.9 (C), 106.4 (C), 120.7 (CH), 128.0 (2CH), 128.4 (2CH), 128.5 (CH), 129.8 (2CH), 130.5 (2CH), 130.7 (CH), 135.7 (C), 139.3 (C), 139.7 (C), 143.2 (C), 149.6 (C), 150.7 (C), 153.0 (C). Anal. Calcd for C₂₅H₂₃N₃Si (393.56): C, 76.30; H, 5.89; N, 10.68. Found: C, 75.89; H, 5.42; N, 10.22.

6-Amino-2,3-dimethoxy-5-(trimethylsilyl)ethynylquinoxaline (10h). The procedure 7, but using PdCl₂(PPh₃)₂ (105 mg, 0.15 mmol) and 12 h reaction time, from 6-amino-5-iodo-2,3-dimethoxyquinoxaline (**3h**; 0.50 g) gave (eluent: pentane-AcOEt 90:10; R_f = 0.31) **10h** in 70% yield (0.31 g) as a beige solid: mp 170 °C; IR (ATR): 833, 855, 982, 1124, 1190, 1228, 1244, 1276, 1342, 1405, 1471, 1486, 1565, 1582, 1623, 2136, 2945, 2964, 3018, 3399, 3503 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃) δ 0.31 (s, 9H, SiMe₃), 4.08 (s, 3H, OMe), 4.19 (s, 3H, OMe), 4.52 (br s, 2H, NH₂), 6.88 (d, 1H, J = 8.8 Hz, H7), 7.52 (d, 1H, J = 8.8 Hz, H8); ¹³C NMR (CDCl₃) δ 0.4 (CH₃, SiMe₃), 54.1 (CH₃, OMe), 54.1 (CH₃, OMe), 99.4 (C), 101.6 (C), 104.9 (C), 115.7 (CH, C7 or C8), 127.9 (CH, C7 or C8), 130.3 (C), 139.1 (C), 147.9 (C), 148.3 (C), 150.4 (C). Anal. Calcd for C₁₅H₁₉N₃O₂Si (301.42): C, 59.77; H, 6.35; N, 13.94. Found: C, 59.67; H, 6.63; N, 14.28.

5-Acetyl-6-amino-2,3-diphenylquinoxaline (11b). The procedure 8 from 6-amino-2,3-diphenyl-5-(trimethylsilyl)ethynylquinoxaline (**10b**; 0.20 g, 0.5 mmol) gave (eluent: CH₂Cl₂-AcOEt 96:4; R_f = 0.34) **11b** in 82% yield (0.14 g) as an orange solid: mp 180 °C; IR (ATR): 545, 579, 595, 698, 763, 818, 839, 911, 990, 1024, 1060, 1143, 1175, 1234, 1265, 1357, 1428, 1443, 1471, 1519, 1574, 1622, 3169, 3264, 3350 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃) δ 3.07 (s, 3H, Me), 7.08 (br s, 2H, NH₂), 7.09 (d, 1H, J = 9.2 Hz, H7), 7.29-7.36 (m, 6H), 7.50-7.56 (m, 4H), 7.97 (d, 1H, J = 9.2 Hz, H8); ¹³C NMR (CDCl₃) δ 35.5 (CH₃), 111.2 (C), 124.6 (CH), 128.2 (2CH), 128.4 (2CH), 128.5 (CH), 128.8 (CH), 129.8 (2CH), 130.2 (2CH), 134.9 (CH), 135.6 (C), 139.3 (C), 139.5 (C), 143.3 (C), 148.4 (C), 151.7 (C), 152.7 (C), 202.8 (C, C=O). Anal. Calcd for C₂₂H₁₇N₃O (339.40): C, 77.86; H, 5.05; N, 12.38. Found: C, 78.04; H, 5.53; N, 12.58.

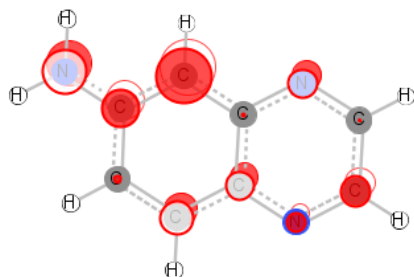
5-Acetyl-6-amino-2,3-dimethoxyquinoxaline (11h). The procedure 8 from 6-amino-2,3-dimethoxy-5-(trimethylsilyl)ethynylquinoxaline (**10h**; 0.15 g, 0.5 mmol) gave (eluent: CH₂Cl₂-AcOEt 97.5:2.5; R_f = 0.32) **11h** in 75% yield (93 mg) as a pale yellow solid: mp 184-186 °C; IR (ATR): 487, 820, 956, 994, 1170, 1225, 1265, 1340, 1355, 1399, 1456, 1483, 1559, 1582, 1647, 2952, 2979, 3018, 3354, 3462 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃) δ 2.93 (s, 3H, C(=O)Me), 4.09 (s, 3H, OMe), 4.12 (s, 3H, OMe), 6.39 (br s, 2H, NH₂), 6.83 (d, 1H, J = 9.0 Hz, H7), 7.62 (d, 1H, J = 9.0 Hz, H8); ¹³C NMR (CDCl₃) δ 34.9 (CH₃, C(=O)Me), 53.9 (CH₃, OMe), 54.7 (CH₃, OMe), 113.0 (C), 119.2 (CH, C7 or C8), 129.9 (C), 132.2 (CH, C7 or C8), 138.2 (C), 147.0 (C), 149.0 (C), 149.9 (C), 202.8 (C, C=O). Anal. Calcd for C₁₂H₁₃N₃O₃ (247.25): C, 58.29; H, 5.30; N, 17.00. Found: C, 57.74; H, 4.86; N, 16.95.

5,6-Diphenylpyrazino[b,e]isatin (12b). The procedure 9 from 5-acetyl-6-amino-2,3-diphenylquinoxaline (**11b**; 0.17 g, 0.50 mmol) gave (eluent: CH₂Cl₂-AcOEt 90:10; R_f = 0.30) **12b** in 60% yield (105 mg) as a red solid: mp > 260 °C; IR (ATR): 695, 960, 1022, 1041, 1066, 1080, 1140, 1182, 1201, 1213, 1240, 1336, 1351, 1403, 1442, 1465, 1486, 1569, 1609, 1700, 1727, 1750, 1762, 3060, 3241 cm⁻¹; ¹H NMR ((CD₃)₂SO) δ 7.35-7.51 (m, 11H), 8.37 (d, 1H, J = 8.8 Hz, H8 or H9), 11.40 (br s, 1H, NH); ¹³C NMR ((CD₃)₂SO) δ 108.8 (C), 117.7 (CH), 128.1 (2CH), 128.1 (2CH), 128.8 (CH), 129.3 (CH), 129.6 (2CH), 129.9 (2CH), 137.0 (C), 137.1 (C), 138.4 (C), 138.5 (C), 140.3 (CH), 151.2 (C), 155.5 (C), 157.2 (C), 159.7 (C), 180.5 (C, C3, C=O). Anal. Calcd for C₂₂H₁₃N₃O₂ (351.36): C, 75.20; H, 3.73; N, 11.96. Found: C, 75.33; H, 3.47; N, 11.71.

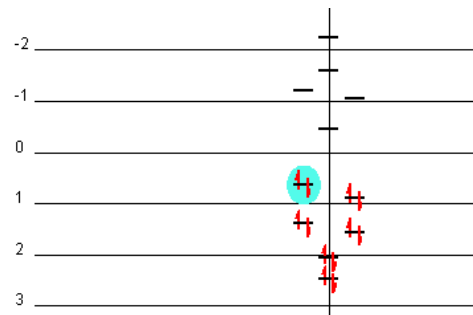
5,6-Dimethoxypyrazino[b,e]isatin (12h). The procedure 9 from 5-acetyl-6-amino-2,3-dimethoxyquinoxaline (**11h**; 0.12 g, 0.50 mmol) gave (eluent: CH₂Cl₂-AcOEt 80:20; R_f = 0.35) **12h** in 17% yield (22 mg) as a red solid: mp > 260 °C; IR (ATR): 985, 1012, 1074, 1211, 1236, 1251, 1382, 1411, 1470, 1490, 1534, 1592, 1615, 1723, 1746, 1764, 2921, 2956, 3199, 3299 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃) δ 3.98 (s, 3H, OMe), 4.07 (s, 3H, OMe), 7.04 (d, 1H, J = 8.5 Hz, H9), 7.88 (d, 1H, J = 8.5 Hz, H8), 11.08 (br s, 1H, NH); ¹³C NMR (CDCl₃) δ 53.8 (CH₃, OMe), 54.3 (CH₃, OMe), 109.1 (C), 112.1 (CH, C9), 132.8 (C), 133.9 (C), 136.6 (CH, C8), 148.5 (C), 152.3 (C), 152.3 (C), 159.5 (C), 181.1 (C, C3, C=O). Anal. Calcd for C₁₂H₉N₃O₄ (259.22): C, 55.60; H, 3.50; N, 16.21. Found: C, 55.50; H, 3.51; N, 16.73.

Hückel theory calculations performed by using the HuLiS calculator

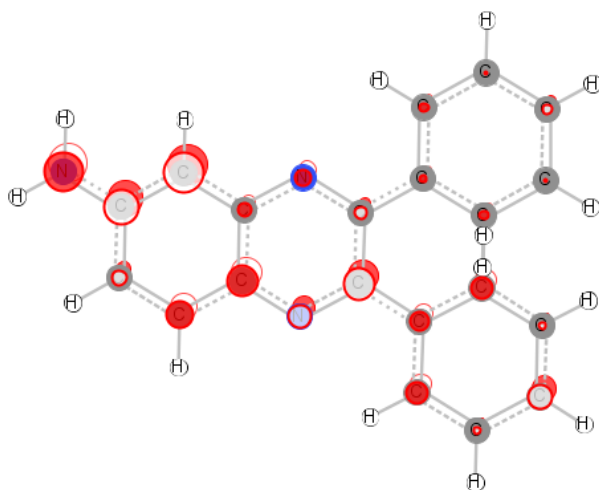
2a



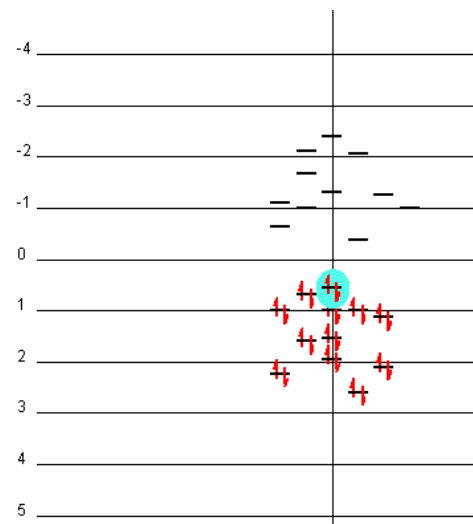
$$\epsilon = \alpha + 0,62\beta$$



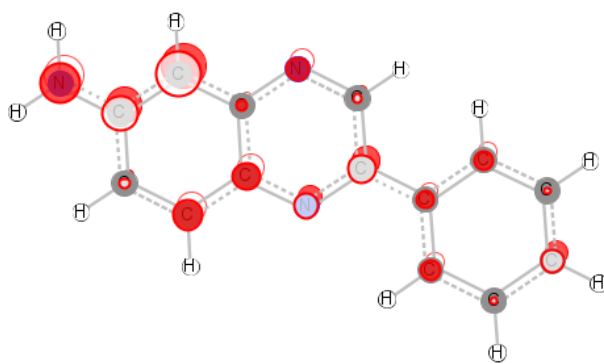
2b



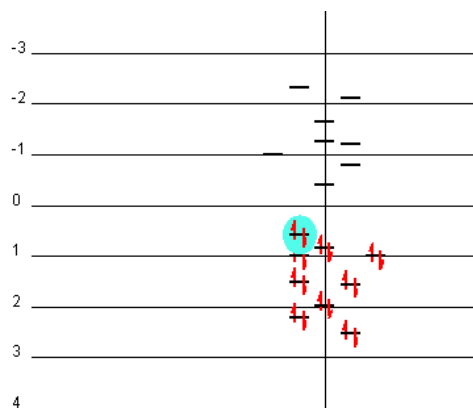
$$\epsilon = \alpha + 0,56\beta$$



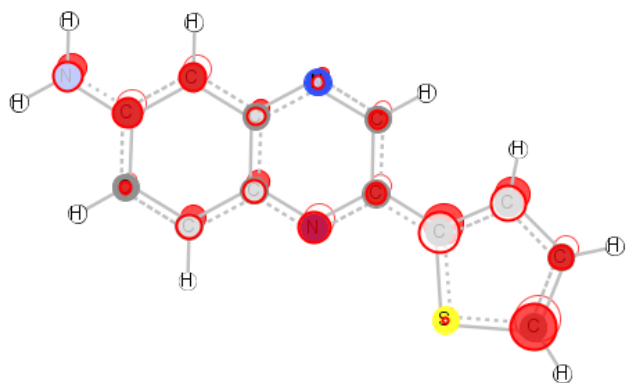
2c



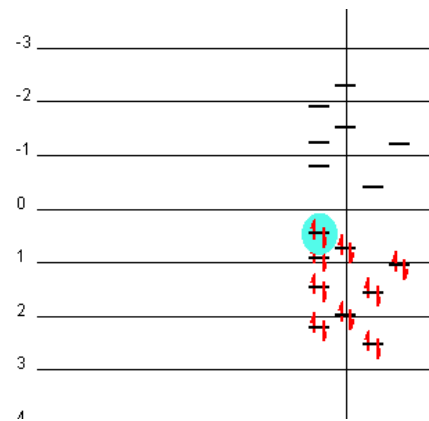
$$\epsilon = \alpha + 0,57\beta$$



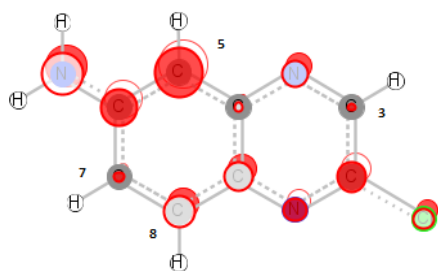
2d



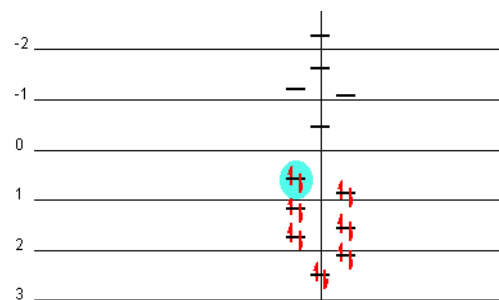
$$\epsilon = \alpha + 0.46\beta$$



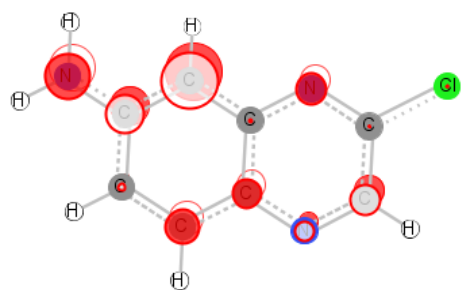
2e



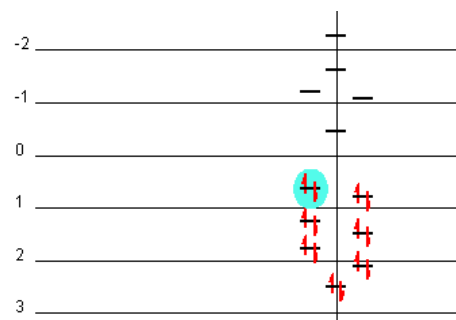
$$\epsilon = \alpha + 0.58\beta$$



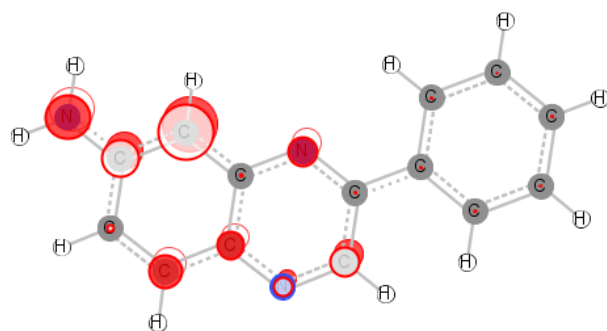
2f



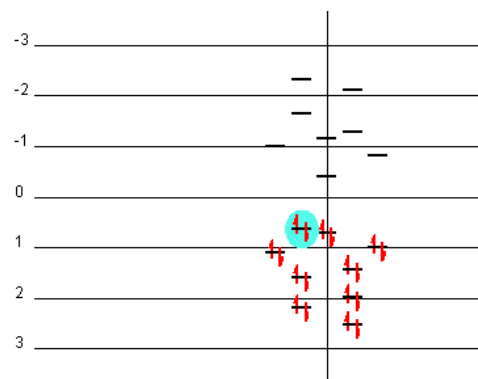
$$\epsilon = \alpha + 0.62\beta$$



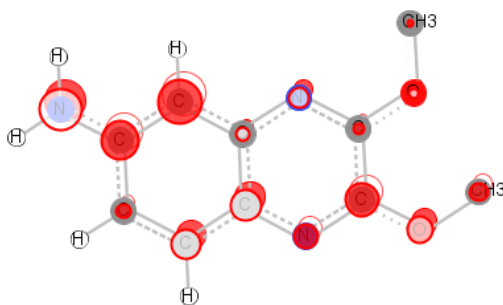
2g



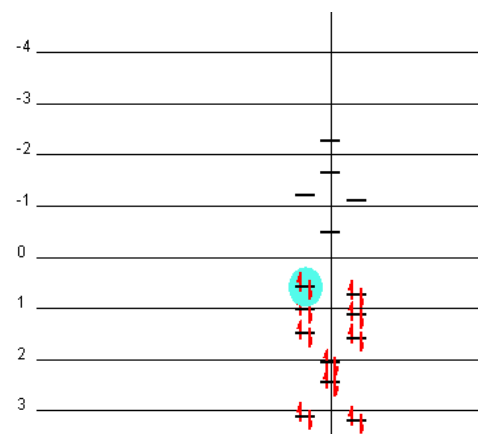
$$\epsilon = \alpha + 0,62\beta$$



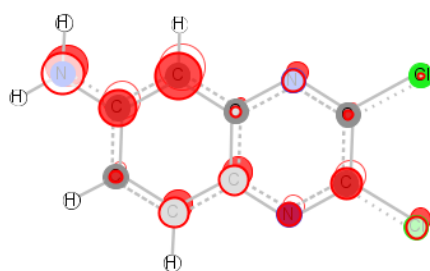
2h



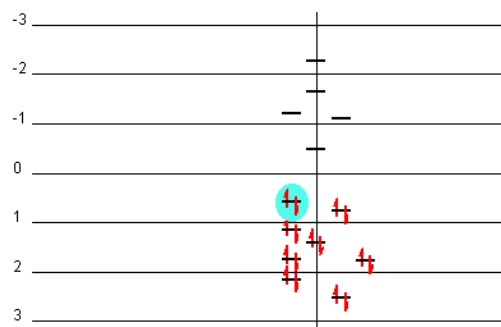
$$\epsilon = \alpha + 0,57\beta$$



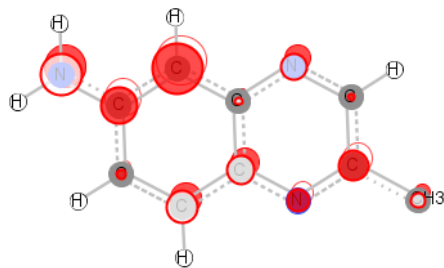
2i



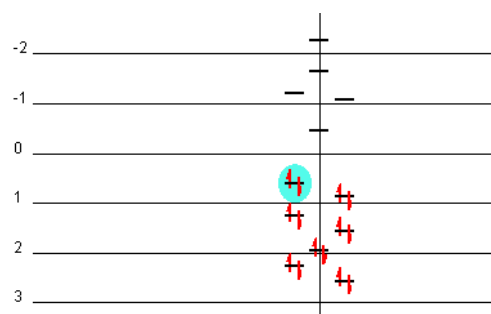
$$\epsilon = \alpha + 0,58\beta$$



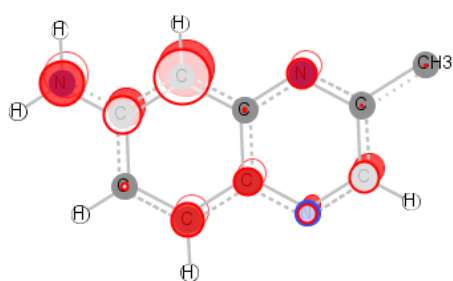
2j



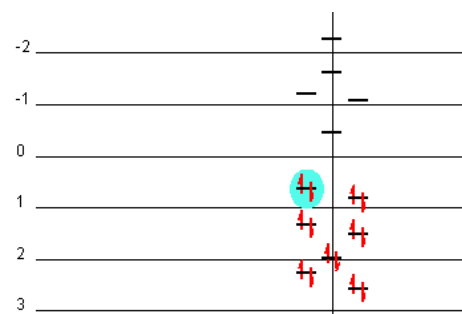
$$\epsilon = \alpha + 0.59\beta$$



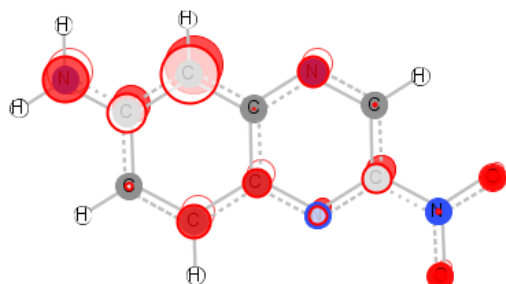
2k



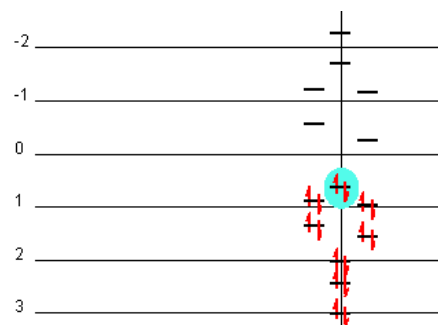
$$\epsilon = \alpha + 0.62\beta$$



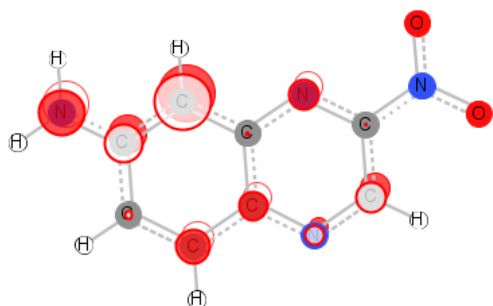
2l



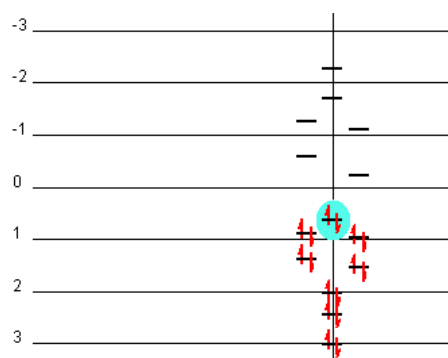
$$\epsilon = \alpha + 0.63\beta$$



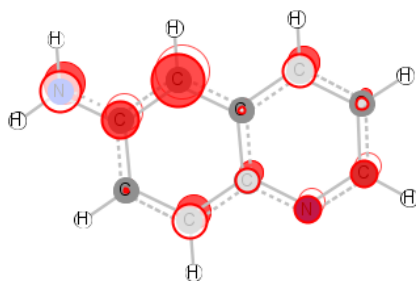
2m



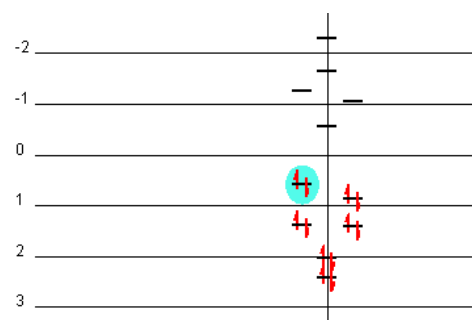
$$\epsilon = \alpha + 0,62\beta$$



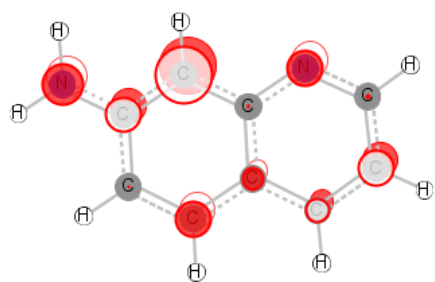
6-Aminoquinoline



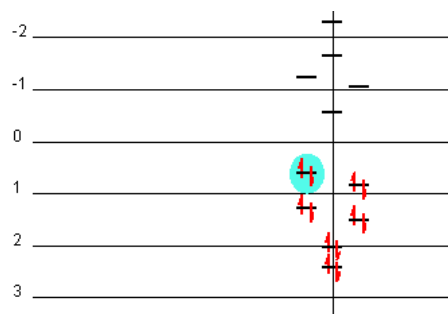
$$\epsilon = \alpha + 0,57\beta$$



7-Aminoquinoline



$$\epsilon = \alpha + 0,60\beta$$



Compound 2a
 ψ_{tot}

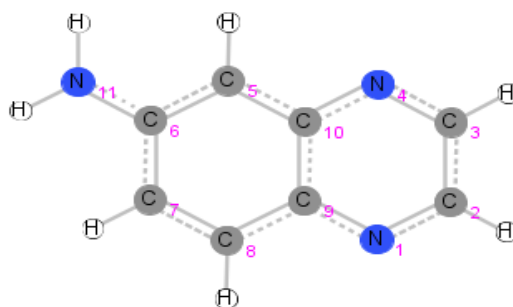
Delocalized structure

18 atoms

11 Hückel atoms

 12 π -electrons

Total charge: 0,00



Hamiltonian:

	1 N1	2 C	3 C	4 N1	5 C	6 C	7 C	8 C	9 C	10 C	11 N2
1 N1	$\alpha + 0,51\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
2 C	$1,02\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
3 C	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
4 N1	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$\alpha + 0,51\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$
5 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$
6 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,89\beta$
7 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
8 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
9 C	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$
10 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$0,00\beta$
11 N2	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,89\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$\alpha + 1,37\beta$

Orbitals :

e_i :	$\alpha + 2,48\beta$	$\alpha + 2,06\beta$	$\alpha + 1,55\beta$	$\alpha + 1,38\beta$	$\alpha + 0,88\beta$	$\alpha + 0,62\beta$	$\alpha - 0,45\beta$	$\alpha - 1,05\beta$	$\alpha - 1,21\beta$	$\alpha - 1,61\beta$	$\alpha - 2,26\beta$
n_i :	2	2	2	2	2	2	0	0	0	0	0
1 N1	0,33	-0,28	-0,41	0,36	0,24	-0,18	-0,47	0,09	0,26	-0,27	0,24
2 C	0,23	-0,25	-0,06	0,48	-0,16	-0,29	0,31	-0,46	-0,03	0,44	-0,19
3 C	0,23	-0,23	0,32	0,3	-0,39	0	0,34	0,4	-0,22	-0,43	0,2
4 N1	0,34	-0,22	0,55	-0,07	-0,17	0,29	-0,45	0,05	0,3	0,25	-0,24
5 C	0,28	0,18	0,17	-0,25	0,21	-0,54	0,29	0,11	0,44	-0,23	-0,34
6 C	0,29	0,48	0,02	0,01	-0,14	-0,37	-0,21	0,35	-0,25	0,46	0,3
7 C	0,22	0,25	-0,23	-0,17	-0,56	-0,07	-0,29	-0,37	-0,21	-0,39	-0,28
8 C	0,25	0,04	-0,38	-0,25	-0,35	0,32	0,34	0,03	0,5	0,17	0,32
9 C	0,41	-0,17	-0,36	-0,17	0,25	0,27	0,14	0,33	-0,4	0,12	-0,46
10 C	0,42	-0,11	0,24	-0,35	0,33	0,03	0,08	-0,47	-0,28	-0,09	0,46
11 N2	0,23	0,62	0,11	0,49	0,25	0,43	0,1	-0,13	0,09	-0,14	-0,07

 Total energy: $12\alpha + 17,94\beta$

Matrix of electronic density:

	1 N1	2 C	3 C	4 N1	5 C	6 C	7 C	8 C	9 C	10 C	11 N2
1 N1	1,15	0,71	0,05	-0,34	0,07	-0,03	-0,18	-0,01	0,56	0,03	0,04
2 C	0,71	0,92	0,59	0,03	0,02	0,15	0,06	-0,17	-0,08	-0,25	-0,09
3 C	0,05	0,59	0,9	0,71	-0,16	0,03	0,17	-0,02	-0,25	-0,06	-0,02
4 N1	-0,34	0,03	0,71	1,17	-0,05	-0,16	-0,04	0,08	0,05	0,55	0,09
5 C	0,07	0,02	-0,16	-0,05	1,09	0,68	0,06	-0,35	-0,05	0,57	-0,22
6 C	-0,03	0,15	0,03	-0,16	0,68	0,93	0,56	0,02	-0,22	0,03	0,35
7 C	-0,18	0,06	0,17	-0,04	0,06	0,56	1,02	0,74	0	-0,23	-0,15
8 C	-0,01	-0,17	-0,02	0,08	-0,35	0,02	0,74	1	0,55	-0,01	-0,05
9 C	0,56	-0,08	-0,25	0,05	-0,05	-0,22	0	0,55	0,98	0,51	0,09
10 C	0,03	-0,25	-0,06	0,55	0,57	0,03	-0,23	-0,01	0,51	0,96	-0,05
11 N2	0,04	-0,09	-0,02	0,09	-0,22	0,35	-0,15	-0,05	0,09	-0,05	1,88

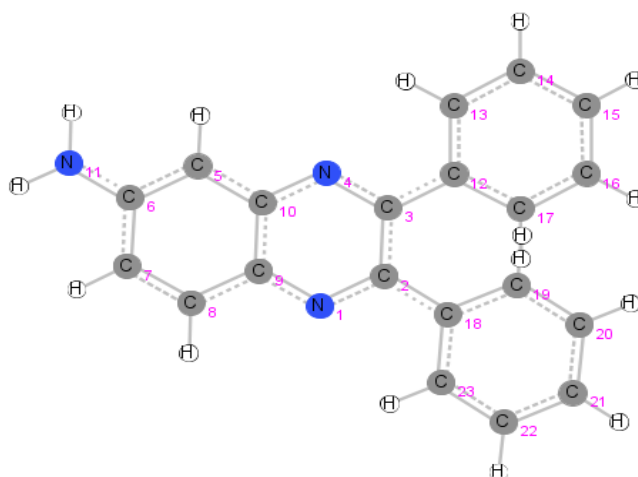
Atomic charges:

1 N1	-0,15
2 C	0,08
3 C	0,1
4 N1	-0,17

5 C -0,09
 6 C 0,07
 7 C -0,02
 8 C 0
 9 C 0,02
 10 C 0,04
 11 N2 0,12
 Total charge: 0,00

Compound 2b

ψ_{tot}
 Delocalized structure
 38 atoms
 23 Hückel atoms
 24 π -electrons



Hamiltonian:

	1 N1	2 C	3 C	4 N1	5 C	6 C	7 C	8 C	9 C	10 C	11 N2
1 N1	$\alpha + 0,51\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
2 C	$1,02\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
3 C	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
4 N1	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$\alpha + 0,51\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$
5 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$
6 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,89\beta$
7 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
8 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
9 C	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$
10 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$0,00\beta$
11 N2	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,89\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$\alpha + 1,37\beta$
12 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
13 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
14 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
15 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
16 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
17 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
18 C	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
19 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
20 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
21 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
22 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
23 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$

	12 C	13 C	14 C	15 C	16 C	17 C	18 C	19 C	20 C	21 C	22 C
1 N1	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
2 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
3 C	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
4 N1	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
5 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
6 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
7 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
8 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
9 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
10 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
11 N2	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
12 C	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
13 C	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
14 C	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
15 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$

16 C	0,00β	0,00β	0,00β	1,00β	α + 0,00β	1,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β
17 C	1,00β	0,00β	0,00β	0,00β	1,00β	α + 0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β
18 C	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	α + 0,00β	1,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β
19 C	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	1,00β	α + 0,00β	1,00β	0,00β	0,00β	0,00β
20 C	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	1,00β	α + 0,00β	1,00β	0,00β	0,00β
21 C	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	1,00β	α + 0,00β	1,00β	0,00β
22 C	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	1,00β	α + 0,00β	1,00β
23 C	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	1,00β	0,00β	0,00β	0,00β	1,00β	1,00β

23 C

1 N1	0,00β
2 C	0,00β
3 C	0,00β
4 N1	0,00β
5 C	0,00β
6 C	0,00β
7 C	0,00β
8 C	0,00β
9 C	0,00β
10 C	0,00β
11 N2	0,00β
12 C	0,00β
13 C	0,00β
14 C	0,00β
15 C	0,00β
16 C	0,00β
17 C	0,00β
18 C	1,00β
19 C	0,00β
20 C	0,00β
21 C	0,00β
22 C	1,00β
23 C	α + 0,00β

Orbitals:

ei :	α + 2,59β	α + 2,23β	α + 2,09β	α + 1,95β	α + 1,60β	α + 1,52β	α + 1,13β	α + 1,00β	α + 1,00β	α + 1,00β	α + 0,69β
ni :	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
1 N1	-0,34	-0,03	0,14	-0,24	-0,34	-0,29	0,04	0	0	0,37	0,12
2 C	-0,35	-0,21	0,15	-0,07	0	-0,39	0,08	0	0	0	-0,1
3 C	-0,36	-0,2	-0,16	-0,06	0,35	-0,12	-0,16	0	0	0	-0,29
4 N1	-0,34	0	-0,13	-0,19	0,43	0,26	0,14	0	0	0	-0,37
5 C	-0,2	0,28	-0,02	0,06	0,1	0,21	0,18	0	0	-0,18	0,41
6 C	-0,17	0,42	-0,01	0,31	0,05	-0,06	-0,03	0	0	-0,17	0,05
7 C	-0,14	0,28	0,02	0,12	-0,19	0,01	-0,34	0	0	-0,37	-0,31
8 C	-0,18	0,2	0,04	-0,07	-0,34	0,08	-0,34	0	0	-0,2	-0,26
9 C	-0,33	0,16	0,07	-0,27	-0,36	0,11	-0,05	0	0	0,18	0,12
10 C	-0,34	0,19	-0,04	-0,21	0,11	0,38	0,24	0	0	0	0,23
11 N2	-0,12	0,44	-0,01	0,49	0,18	-0,35	0,13	0	0	0,42	-0,07
12 C	-0,22	-0,23	-0,35	0,15	0,11	-0,06	-0,4	0	0	0	0,27
13 C	-0,11	-0,15	-0,29	0,17	-0,08	0,02	-0,15	0,5	0,01	0	0,24
14 C	-0,06	-0,12	-0,25	0,18	-0,25	0,09	0,23	0,5	0,01	0	-0,11
15 C	-0,05	-0,1	-0,24	0,19	-0,31	0,11	0,41	0	0	0	-0,32
16 C	-0,06	-0,12	-0,25	0,18	-0,25	0,09	0,23	-0,5	-0,01	0	-0,11
17 C	-0,11	-0,15	-0,29	0,17	-0,08	0,02	-0,15	-0,5	-0,01	0	0,24
18 C	-0,22	-0,24	0,33	0,17	0	-0,18	0,2	0	0	-0,37	0,1
19 C	-0,11	-0,16	0,27	0,2	0	0,06	0,08	0,01	-0,5	-0,19	0,08
20 C	-0,06	-0,12	0,24	0,21	0	0,27	-0,12	0,01	-0,5	0,19	-0,04
21 C	-0,05	-0,11	0,23	0,22	0	0,36	-0,21	0	0	0,37	-0,11
22 C	-0,06	-0,12	0,24	0,21	0	0,27	-0,12	-0,01	0,5	0,19	-0,04

23 C	-0,11	-0,16	0,27	0,2	0	0,06	0,08	-0,01	0,5	-0,19	0,08
ϵ_i :	$\alpha - 1,67\beta$	$\alpha - 2,08\beta$	$\alpha - 2,13\beta$	$\alpha - 2,41\beta$							
n_i :	0	0	0	0							
1 N1	0,17	0,06	0,08	0,23							
2 C	-0,33	-0,13	0,13	-0,37							
3 C	0,33	-0,13	-0,13	0,37							
4 N1	-0,16	0,06	-0,08	-0,23							
5 C	0,17	0,01	-0,31	-0,18							
6 C	-0,3	0	0,31	0,14							
7 C	0,26	-0,01	-0,28	-0,13							
8 C	-0,13	0,02	0,29	0,18							
9 C	-0,04	-0,03	-0,34	-0,3							
10 C	0,02	-0,02	0,34	0,3							
11 N2	0,09	0	-0,08	-0,03							
12 C	-0,05	0,34	0,23	-0,29							
13 C	-0,12	-0,29	-0,18	0,16							
14 C	0,25	0,26	0,15	-0,1							
15 C	-0,3	-0,25	-0,14	0,09							
16 C	0,25	0,26	0,15	-0,1							
17 C	-0,12	-0,29	-0,18	0,16							
18 C	0,05	0,34	-0,23	0,29							
19 C	0,12	-0,29	0,18	-0,16							
20 C	-0,26	0,26	-0,15	0,1							
21 C	0,31	-0,25	0,14	-0,09							
22 C	-0,26	0,26	-0,15	0,1							
23 C	0,12	-0,29	0,18	-0,16							

Total energy: $24\alpha + 34,73\beta$

Electronic density matrix:

	1 N1	2 C	3 C	4 N1	5 C	6 C	7 C	8 C	9 C	10 C	11 N2
1 N1	1,17	0,67	0,04	-0,31	0,05	-0,02	-0,17	-0,02	0,56	0,02	0,04
2 C	0,67	0,93	0,51	0,03	0,02	0,14	0,05	-0,16	-0,08	-0,22	-0,08
3 C	0,04	0,51	0,91	0,67	-0,15	0,03	0,15	-0,02	-0,22	-0,06	-0,02
4 N1	-0,31	0,03	0,67	1,19	-0,06	-0,15	-0,03	0,06	0,04	0,55	0,08
5 C	0,05	0,02	-0,15	-0,06	1,1	0,68	0,06	-0,34	-0,05	0,57	-0,22
6 C	-0,02	0,14	0,03	-0,15	0,68	0,93	0,56	0,02	-0,22	0,03	0,35
7 C	-0,17	0,05	0,15	-0,03	0,06	0,56	1,03	0,73	-0,01	-0,23	-0,15
8 C	-0,02	-0,16	-0,02	0,06	-0,34	0,02	0,73	1	0,55	-0,01	-0,05
9 C	0,56	-0,08	-0,22	0,04	-0,05	-0,22	-0,01	0,55	0,98	0,5	0,09
10 C	0,02	-0,22	-0,06	0,55	0,57	0,03	-0,23	-0,01	0,5	0,96	-0,05
11 N2	0,04	-0,08	-0,02	0,08	-0,22	0,35	-0,15	-0,05	0,09	-0,05	1,88
12 C	-0,05	0,01	0,38	-0,03	0,01	0	-0,01	0,02	0,01	-0,04	0
13 C	-0,02	-0,1	0,04	-0,17	0,06	-0,01	-0,06	0,01	0,08	0,02	0,01
14 C	0,01	0	-0,05	0,01	0	0	0	-0,01	0	0,01	0
15 C	0,02	0,08	-0,03	0,13	-0,05	0,01	0,06	-0,01	-0,07	-0,02	-0,01
16 C	0,01	0	-0,05	0,01	0	0	0	-0,01	0	0,01	0
17 C	-0,02	-0,1	0,04	-0,17	0,06	-0,01	-0,06	0,01	0,08	0,02	0,01
18 C	-0,03	0,38	0,01	-0,05	0,02	0	0	0,01	-0,04	0,01	-0,01
19 C	-0,17	0,03	-0,1	-0,02	-0,01	-0,06	-0,02	0,06	0,03	0,08	0,03
20 C	0,01	-0,05	0	0,01	-0,01	0	0	0	0,01	0	0
21 C	0,13	-0,02	0,08	0,02	0,01	0,05	0,02	-0,05	-0,03	-0,07	-0,03
22 C	0,01	-0,05	0	0,01	-0,01	0	0	0	0,01	0	0
23 C	-0,17	0,03	-0,1	-0,02	-0,01	-0,06	-0,02	0,06	0,03	0,08	0,03

	20 C	21 C	22 C	23 C
1 N1	0,01	0,13	0,01	-0,17
2 C	-0,05	-0,02	-0,05	0,03
3 C	0	0,08	0	-0,1

4 N1	0,01	0,02	0,01	-0,02
5 C	-0,01	0,01	-0,01	-0,01
6 C	0	0,05	0	-0,06
7 C	0	0,02	0	-0,02
8 C	0	-0,05	0	0,06
9 C	0,01	-0,03	0,01	0,03
10 C	0	-0,07	0	0,08
11 N2	0	-0,03	0	0,03
12 C	0,01	0	0,01	0
13 C	0	-0,03	0	0,04
14 C	0	0	0	0
15 C	0	0,03	0	-0,03
16 C	0	0	0	0
17 C	0	-0,03	0	0,04
18 C	0	-0,3	0	0,61
19 C	0,68	0,01	-0,32	-0,01
20 C	1	0,66	0	-0,32
21 C	0,66	0,99	0,66	0,01
22 C	0	0,66	1	0,68
23 C	-0,32	0,01	0,68	0,99

Atomic charges:

1 N1	-0,17
2 C	0,07
3 C	0,09
4 N1	-0,19
5 C	-0,1
6 C	0,07
7 C	-0,03
8 C	0
9 C	0,02
10 C	0,04
11 N2	0,12
12 C	-0,01
13 C	0,02
14 C	0
15 C	0,01
16 C	0
17 C	0,02
18 C	-0,01
19 C	0,01
20 C	0
21 C	0,01
22 C	0
23 C	0,01

Total charge: 0,00

Compound 2c

ψ_{tot}

Delocalized structure

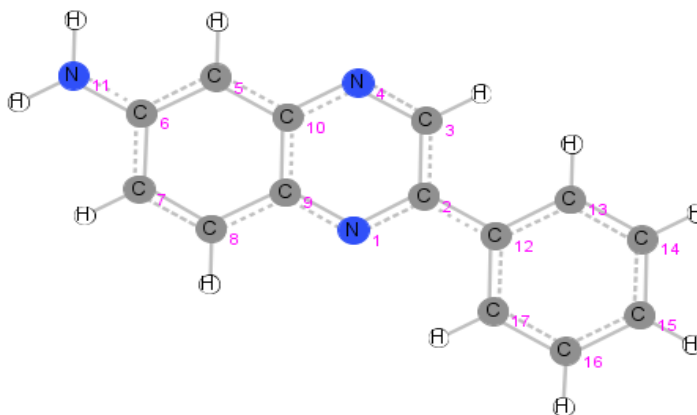
28 atoms

17 Hückel atoms

18 π -electrons

Hamiltonian:

	1 N1	2 C	3 C	4 N1	5 C	6 C	7 C	8 C	9 C	10 C	11 N2
1 N1	$\alpha + 0,51\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
2 C	$1,02\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$



3 C	0,00β	1,00β	$\alpha + 0,00\beta$	1,02β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β
4 N1	0,00β	0,00β	1,02β	$\alpha + 0,51\beta$	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	1,02β	0,00β
5 C	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	$\alpha + 0,00\beta$	1,00β	0,00β	0,00β	0,00β	1,00β	0,00β
6 C	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	1,00β	$\alpha + 0,00\beta$	1,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,89β
7 C	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	1,00β	$\alpha + 0,00\beta$	1,00β	0,00β	0,00β	0,00β
8 C	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	1,00β	$\alpha + 0,00\beta$	1,00β	0,00β	0,00β
9 C	1,02β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	1,00β	$\alpha + 0,00\beta$	1,00β	0,00β
10 C	0,00β	0,00β	0,00β	1,02β	1,00β	0,00β	0,00β	0,00β	1,00β	$\alpha + 0,00\beta$	0,00β
11 N2	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,89β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	$\alpha + 1,37\beta$
12 C	0,00β	1,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β
13 C	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β
14 C	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β
15 C	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β
16 C	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β
17 C	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β

	12 C	13 C	14 C	15 C	16 C	17 C
1 N1	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β
2 C	1,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β
3 C	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β
4 N1	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β
5 C	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β
6 C	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β
7 C	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β
8 C	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β
9 C	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β
10 C	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β
11 N2	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β
12 C	$\alpha + 0,00\beta$	1,00β	0,00β	0,00β	0,00β	1,00β
13 C	1,00β	$\alpha + 0,00\beta$	1,00β	0,00β	0,00β	0,00β
14 C	0,00β	1,00β	$\alpha + 0,00\beta$	1,00β	0,00β	0,00β
15 C	0,00β	0,00β	1,00β	$\alpha + 0,00\beta$	1,00β	0,00β
16 C	0,00β	0,00β	0,00β	1,00β	$\alpha + 0,00\beta$	1,00β
17 C	1,00β	0,00β	0,00β	0,00β	1,00β	$\alpha + 0,00\beta$

Orbitals:

ϵ_i :	$\alpha + 2,53\beta$	$\alpha + 2,20\beta$	$\alpha + 1,97\beta$	$\alpha + 1,56\beta$	$\alpha + 1,51\beta$	$\alpha + 1,00\beta$	$\alpha + 1,00\beta$	$\alpha + 0,84\beta$	$\alpha + 0,57\beta$	$\alpha - 0,41\beta$	$\alpha - 0,80\beta$
n_i :	2	2	2	2	2	2	2	2	2	0	0
1 N1	-0,36	0,14	-0,18	0,43	0,11	0	-0,37	0,12	0,24	-0,48	0,03
2 C	-0,34	0,29	-0,05	0,14	0,39	0	0	-0,11	0,28	0,31	-0,22
3 C	-0,26	0,13	-0,15	-0,27	0,28	0	0	-0,42	0,09	0,25	0,49
4 N1	-0,32	-0,01	-0,25	-0,56	0,03	0	0	-0,24	-0,23	-0,41	-0,17
5 C	-0,23	-0,24	0,06	-0,2	-0,12	0	0,18	0,39	0,44	0,25	0,21
6 C	-0,22	-0,39	0,33	0	0,06	0	0,17	-0,02	0,35	-0,22	0,11
7 C	-0,17	-0,24	0,15	0,21	-0,15	0	0,37	-0,43	0,1	-0,25	-0,26
8 C	-0,22	-0,14	-0,03	0,32	-0,29	0	0,2	-0,34	-0,29	0,32	0,1
9 C	-0,38	-0,06	-0,21	0,3	-0,29	0	-0,18	0,15	-0,27	0,12	0,18
10 C	-0,37	-0,14	-0,2	-0,3	-0,25	0	0	0,34	-0,1	0,12	-0,28
11 N2	-0,17	-0,42	0,49	-0,02	0,42	0	-0,42	0,03	-0,39	0,11	-0,04
12 C	-0,23	0,37	0,24	0,06	0,2	0	0,37	0,21	-0,17	0,11	-0,35
13 C	-0,12	0,26	0,26	-0,03	-0,05	-0,5	0,19	0,14	-0,19	-0,18	0,25
14 C	-0,07	0,2	0,27	-0,1	-0,27	-0,5	-0,19	-0,09	0,06	-0,04	0,15
15 C	-0,05	0,19	0,28	-0,13	-0,36	0	-0,37	-0,22	0,22	0,2	-0,37
16 C	-0,07	0,2	0,27	-0,1	-0,27	0,5	-0,19	-0,09	0,06	-0,04	0,15
17 C	-0,12	0,26	0,26	-0,03	-0,05	0,5	0,19	0,14	-0,19	-0,18	0,25

ϵ_i :	$\alpha - 1,00\beta$	$\alpha - 1,21\beta$	$\alpha - 1,26\beta$	$\alpha - 1,65\beta$	$\alpha - 2,11\beta$	$\alpha - 2,33\beta$
n_i :	0	0	0	0	0	0
1 N1	0	-0,25	-0,02	0,22	0,02	0,26

2 C	0	-0,04	0,24	-0,39	0,2	-0,36
3 C	0	0,24	0,02	0,35	-0,05	0,25
4 N1	0	-0,25	-0,26	-0,18	-0,09	-0,22
5 C	0	-0,43	-0,06	0,2	-0,26	-0,24
6 C	0	0,34	-0,35	-0,36	0,26	0,2
7 C	0	0,12	0,4	0,3	-0,23	-0,19
8 C	0	-0,48	-0,15	-0,14	0,23	0,24
9 C	0	0,46	-0,21	-0,07	-0,25	-0,37
10 C	0	0,18	0,43	0,03	0,28	0,36
11 N2	0	-0,12	0,12	0,11	-0,07	-0,05
12 C	0	0,06	-0,31	0,08	-0,39	0,32
13 C	-0,5	-0,02	0,07	0,13	0,31	-0,19
14 C	0,5	-0,04	0,22	-0,3	-0,27	0,13
15 C	0	0,07	-0,34	0,36	0,26	-0,11
16 C	-0,5	-0,04	0,22	-0,3	-0,27	0,13
17 C	0,5	-0,02	0,07	0,13	0,31	-0,19

Total energy: $18\alpha + 26,33\beta$

Electronic density matrix:

	1 N1	2 C	3 C	4 N1	5 C	6 C	7 C	8 C	9 C	10 C	11 N2
1 N1	1,17	0,66	0,05	-0,32	0,06	-0,02	-0,18	-0,02	0,57	0,02	0,04
2 C	0,66	0,93	0,55	0,02	0,02	0,14	0,05	-0,15	-0,08	-0,22	-0,08
3 C	0,05	0,55	0,89	0,73	-0,17	0,03	0,17	-0,02	-0,25	-0,06	-0,02
4 N1	-0,32	0,02	0,73	1,17	-0,05	-0,16	-0,04	0,07	0,05	0,54	0,08
5 C	0,06	0,02	-0,17	-0,05	1,09	0,68	0,06	-0,34	-0,05	0,57	-0,22
6 C	-0,02	0,14	0,03	-0,16	0,68	0,93	0,56	0,02	-0,21	0,03	0,35
7 C	-0,18	0,05	0,17	-0,04	0,06	0,56	1,02	0,74	0	-0,23	-0,15
8 C	-0,02	-0,15	-0,02	0,07	-0,34	0,02	0,74	1	0,54	-0,01	-0,05
9 C	0,57	-0,08	-0,25	0,05	-0,05	-0,21	0	0,54	0,97	0,5	0,09
10 C	0,02	-0,22	-0,06	0,54	0,57	0,03	-0,23	-0,01	0,5	0,96	-0,05
11 N2	0,04	-0,08	-0,02	0,08	-0,22	0,35	-0,15	-0,05	0,09	-0,05	1,88
12 C	-0,03	0,38	0,01	-0,06	0,03	0	0	0,01	-0,04	0,01	-0,01
13 C	-0,16	0,03	-0,11	-0,01	-0,01	-0,06	-0,02	0,06	0,03	0,08	0,04
14 C	0,01	-0,04	0	0,01	-0,01	0	0	0	0,01	0	0
15 C	0,13	-0,02	0,08	0,02	0,01	0,05	0,02	-0,05	-0,03	-0,07	-0,03
16 C	0,01	-0,04	0	0,01	-0,01	0	0	0	0,01	0	0
17 C	-0,16	0,03	-0,11	-0,01	-0,01	-0,06	-0,02	0,06	0,03	0,08	0,04

	12 C	13 C	14 C	15 C	16 C	17 C
1 N1	-0,03	-0,16	0,01	0,13	0,01	-0,16
2 C	0,38	0,03	-0,04	-0,02	-0,04	0,03
3 C	0,01	-0,11	0	0,08	0	-0,11
4 N1	-0,06	-0,01	0,01	0,02	0,01	-0,01
5 C	0,03	-0,01	-0,01	0,01	-0,01	-0,01
6 C	0	-0,06	0	0,05	0	-0,06
7 C	0	-0,02	0	0,02	0	-0,02
8 C	0,01	0,06	0	-0,05	0	0,06
9 C	-0,04	0,03	0,01	-0,03	0,01	0,03
10 C	0,01	0,08	0	-0,07	0	0,08
11 N2	-0,01	0,04	0	-0,03	0	0,04
12 C	1	0,62	0	-0,3	0	0,62
13 C	0,62	0,99	0,68	0,01	-0,32	-0,01
14 C	0	0,68	1	0,66	0	-0,32
15 C	-0,3	0,01	0,66	0,99	0,66	0,01
16 C	0	-0,32	0	0,66	1	0,68
17 C	0,62	-0,01	-0,32	0,01	0,68	0,99

Atomic charges:

1 N1	-0,17
------	-------

2 C	0,07
3 C	0,11
4 N1	-0,17
5 C	-0,09
6 C	0,07
7 C	-0,02
8 C	0
9 C	0,03
10 C	0,04
11 N2	0,12
12 C	0
13 C	0,01
14 C	0
15 C	0,01
16 C	0
17 C	0,01
Total charge:	0,00

Compound 2d

ψ_{tot}

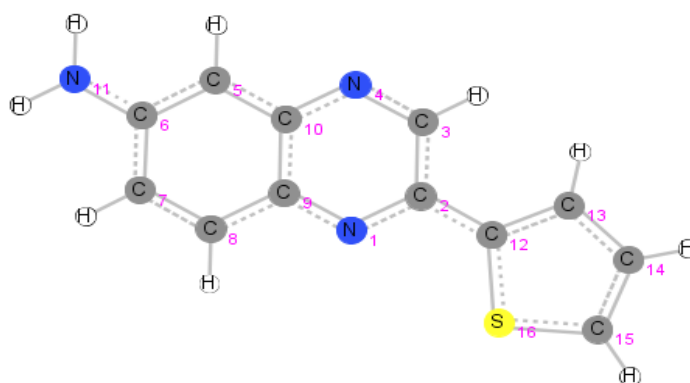
Delocalized structure

25 atoms

16 Hückel atoms

18 π -electrons

Charge totale : 0



Hamiltonian:

	1 N1	2 C	3 C	4 N1	5 C	6 C	7 C	8 C	9 C	10 C	11 N2
1 N1	$\alpha + 0,51\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
2 C	$1,02\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
3 C	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
4 N1	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$\alpha + 0,51\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$
5 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$
6 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,89\beta$
7 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
8 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
9 C	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$
10 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$0,00\beta$
11 N2	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,89\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$\alpha + 1,37\beta$
12 C	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
13 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
14 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
15 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
16 S2	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$

	12 C	13 C	14 C	15 C	16 S2
1 N1	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
2 C	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
3 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
4 N1	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
5 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
6 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
7 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
8 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
9 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
10 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
11 N2	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
12 C	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,69\beta$

13 C	1,00β	α + 0,00β	1,00β	0,00β	0,00β
14 C	0,00β	1,00β	α + 0,00β	1,00β	0,00β
15 C	0,00β	0,00β	1,00β	α + 0,00β	0,69β
16 S2	0,69β	0,00β	0,00β	0,69β	α + 1,11β

Orbitals:

εi :	α + 2,53β	α + 2,20β	α + 1,98β	α + 1,55β	α + 1,46β	α + 1,05β	α + 0,91β	α + 0,74β	α + 0,45β	α - 0,42β	α - 0,79β
ni :	2	2	2	2	2	2	2	2	2	0	0
1 N1	-0,36	0,13	0,19	0,42	-0,23	0,02	-0,32	-0,03	0,29	0,47	0,02
2 C	-0,33	0,28	0,07	0,09	-0,44	0	0,14	-0,1	0,19	-0,31	-0,21
3 C	-0,26	0,12	0,16	-0,31	-0,27	0,01	0,27	0,27	0,17	-0,26	0,49
4 N1	-0,32	-0,01	0,25	-0,56	0,04	0	0,1	0,3	-0,12	0,4	-0,18
5 C	-0,24	-0,24	-0,07	-0,18	0,18	-0,01	-0,04	-0,55	0,26	-0,25	0,21
6 C	-0,22	-0,38	-0,34	-0,02	-0,05	-0,01	0,19	-0,21	0,28	0,21	0,1
7 C	-0,18	-0,23	-0,16	0,22	0,14	-0,02	0,55	0,13	0,11	0,25	-0,26
8 C	-0,22	-0,14	0,03	0,36	0,26	-0,01	0,31	0,3	-0,23	-0,32	0,1
9 C	-0,38	-0,06	0,21	0,34	0,23	0,01	-0,27	0,1	-0,21	-0,12	0,17
10 C	-0,37	-0,14	0,2	-0,26	0,31	0	-0,23	-0,2	-0,16	-0,11	-0,27
11 N2	-0,17	-0,4	-0,5	-0,08	-0,44	0,03	-0,38	0,29	-0,27	-0,11	-0,04
12 C	-0,21	0,36	-0,23	0,02	-0,14	-0,02	0,19	-0,31	-0,38	-0,1	-0,35
13 C	-0,11	0,26	-0,24	-0,02	0,06	-0,51	0,05	-0,15	-0,33	0,24	0,3
14 C	-0,07	0,22	-0,26	-0,05	0,23	-0,51	-0,14	0,2	0,23	0	0,12
15 C	-0,06	0,21	-0,26	-0,06	0,27	-0,03	-0,18	0,3	0,43	-0,24	-0,39
16 S2	-0,14	0,37	-0,39	-0,06	0,25	0,69	-0,03	0,03	-0,05	0,15	0,27

εi :	α - 1,21β	α - 1,24β	α - 1,52β	α - 1,91β	α - 2,30β
ni :	0	0	0	0	0
1 N1	-0,25	0,05	-0,16	-0,14	0,27
2 C	-0,06	-0,25	0,19	0,45	-0,31
3 C	0,25	-0,02	-0,25	-0,26	0,24
4 N1	-0,23	0,27	0,19	0,04	-0,24
5 C	-0,42	0,11	-0,13	-0,24	-0,3
6 C	0,36	0,3	0,32	0,3	0,26
7 C	0,09	-0,39	-0,27	-0,26	-0,24
8 C	-0,47	0,19	0,1	0,19	0,29
9 C	0,48	0,16	0,13	-0,11	-0,43
10 C	0,14	-0,44	-0,13	0,16	0,42
11 N2	-0,12	-0,1	-0,1	-0,08	-0,06
12 C	0,08	0,28	0,12	-0,46	0,19
13 C	0	0,03	-0,42	0,37	-0,1
14 C	-0,08	-0,32	0,52	-0,24	0,05
15 C	0,1	0,36	-0,37	0,1	-0,01
16 S2	-0,05	-0,19	0,06	0,08	-0,04

Total energy: 18α + 25,77β

Electronic density matrix:

	1 N1	2 C	3 C	4 N1	5 C	6 C	7 C	8 C	9 C	10 C	11 N2
1 N1	1,2	0,64	0,06	-0,31	0,06	-0,01	-0,17	-0,03	0,56	0,01	0,03
2 C	0,64	0,94	0,54	0,02	0,02	0,13	0,05	-0,15	-0,08	-0,22	-0,08
3 C	0,06	0,54	0,9	0,73	-0,17	0,04	0,17	-0,02	-0,25	-0,07	-0,02
4 N1	-0,31	0,02	0,73	1,17	-0,05	-0,15	-0,04	0,07	0,05	0,53	0,08
5 C	0,06	0,02	-0,17	-0,05	1,09	0,67	0,06	-0,34	-0,05	0,57	-0,22
6 C	-0,01	0,13	0,04	-0,15	0,67	0,94	0,56	0,02	-0,22	0,02	0,35
7 C	-0,17	0,05	0,17	-0,04	0,06	0,56	1,02	0,73	0	-0,23	-0,15
8 C	-0,03	-0,15	-0,02	0,07	-0,34	0,02	0,73	1	0,55	0	-0,05
9 C	0,56	-0,08	-0,25	0,05	-0,05	-0,22	0	0,55	0,97	0,5	0,09
10 C	0,01	-0,22	-0,07	0,53	0,57	0,02	-0,23	0	0,5	0,96	-0,04
11 N2	0,03	-0,08	-0,02	0,08	-0,22	0,35	-0,15	-0,05	0,09	-0,04	1,88
12 C	-0,07	0,42	0	-0,08	0,03	-0,02	-0,01	0,03	-0,03	0,03	0

13 C	-0,22	0,05	-0,14	-0,03	-0,01	-0,08	-0,03	0,08	0,04	0,1	0,05
14 C	0,06	-0,07	0,02	0,03	-0,01	0,02	0,01	-0,02	0	-0,03	-0,01
15 C	0,17	-0,07	0,1	0,04	0	0,07	0,03	-0,07	-0,03	-0,09	-0,04
16 S2	-0,1	-0,02	-0,08	0	-0,01	-0,04	-0,02	0,04	0,02	0,05	0,02

	12 C	13 C	14 C	15 C	16 S2
1 N1	-0,07	-0,22	0,06	0,17	-0,1
2 C	0,42	0,05	-0,07	-0,07	-0,02
3 C	0	-0,14	0,02	0,1	-0,08
4 N1	-0,08	-0,03	0,03	0,04	0
5 C	0,03	-0,01	-0,01	0	-0,01
6 C	-0,02	-0,08	0,02	0,07	-0,04
7 C	-0,01	-0,03	0,01	0,03	-0,02
8 C	0,03	0,08	-0,02	-0,07	0,04
9 C	-0,03	0,04	0	-0,03	0,02
10 C	0,03	0,1	-0,03	-0,09	0,05
11 N2	0	0,05	-0,01	-0,04	0,02
12 C	1,05	0,71	-0,09	-0,35	0,4
13 C	0,71	1,06	0,58	-0,06	-0,23
14 C	-0,09	0,58	1,09	0,77	-0,22
15 C	-0,35	-0,06	0,77	1,01	0,46
16 S2	0,4	-0,23	-0,22	0,46	1,71

Atomic charges:

1 N1	-0,2
2 C	0,06
3 C	0,1
4 N1	-0,17
5 C	-0,09
6 C	0,06
7 C	-0,02
8 C	0
9 C	0,03
10 C	0,04
11 N2	0,12
12 C	-0,05
13 C	-0,06
14 C	-0,09
15 C	-0,01
16 S2	0,29

Total charge: 0,00

Compound 2e

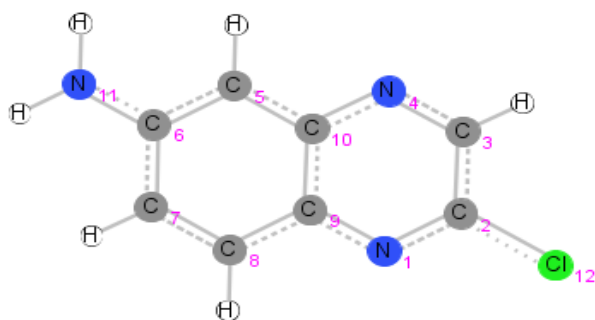
ψ_{tot}

Delocalized structure

18 atoms

12 Hückel atoms

14 π -electrons



Hamiltonian:

	1 N1	2 C	3 C	4 N1	5 C	6 C	7 C	8 C	9 C	10 C	11 N2
1 N1	$\alpha + 0,51\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
2 C	$1,02\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
3 C	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
4 N1	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$\alpha + 0,51\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$
5 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$
6 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,89\beta$
7 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$

8 C	0,00 β	0,00 β	0,00 β	0,00 β	0,00 β	0,00 β	0,00 β	1,00 β	$\alpha + 0,00\beta$	1,00 β	0,00 β	0,00 β
9 C	1,02 β	0,00 β	0,00 β	0,00 β	0,00 β	0,00 β	0,00 β	0,00 β	1,00 β	$\alpha + 0,00\beta$	1,00 β	0,00 β
10 C	0,00 β	0,00 β	0,00 β	1,02 β	1,00 β	0,00 β	0,00 β	0,00 β	0,00 β	1,00 β	$\alpha + 0,00\beta$	0,00 β
11 N2	0,00 β	0,00 β	0,00 β	0,00 β	0,00 β	0,89 β	0,00 β	0,00 β	0,00 β	0,00 β	0,00 β	$\alpha + 1,37\beta$
12 Cl	0,00 β	0,62 β	0,00 β	0,00 β	0,00 β	0,00 β	0,00 β	0,00 β	0,00 β	0,00 β	0,00 β	0,00 β

	12 Cl
1 N1	0,00 β
2 C	0,62 β
3 C	0,00 β
4 N1	0,00 β
5 C	0,00 β
6 C	0,00 β
7 C	0,00 β
8 C	0,00 β
9 C	0,00 β
10 C	0,00 β
11 N2	0,00 β
12 Cl	$\alpha + 1,48\beta$

Orbitals:

ϵ_i :	$\alpha + 2,50\beta$	$\alpha + 2,11\beta$	$\alpha + 1,74\beta$	$\alpha + 1,55\beta$	$\alpha + 1,18\beta$	$\alpha + 0,86\beta$	$\alpha + 0,58\beta$	$\alpha - 0,47\beta$	$\alpha - 1,08\beta$	$\alpha - 1,21\beta$	$\alpha - 1,64\beta$
n_i :	2	2	2	2	2	2	2	0	0	0	0
1 N1	-0,35	0,25	-0,07	0,37	-0,42	0,19	-0,23	-0,45	0,07	0,26	-0,27
2 C	-0,29	0,32	-0,29	-0,01	-0,26	-0,15	-0,3	0,29	-0,46	-0,04	0,46
3 C	-0,25	0,22	-0,01	-0,35	-0,21	-0,42	-0,07	0,38	0,35	-0,22	-0,43
4 N1	-0,33	0,14	0,27	-0,52	0,01	-0,21	0,25	-0,46	0,07	0,3	0,23
5 C	-0,26	-0,22	0,1	-0,14	0,27	0,29	-0,49	0,3	0,08	0,44	-0,24
6 C	-0,26	-0,47	-0,16	-0,03	0,09	-0,1	-0,37	-0,2	0,38	-0,24	0,45
7 C	-0,2	-0,26	-0,04	0,24	0,24	-0,53	-0,1	-0,29	-0,37	-0,21	-0,38
8 C	-0,24	-0,09	0,1	0,41	0,19	-0,36	0,31	0,33	0,02	0,5	0,17
9 C	-0,4	0,08	0,21	0,39	-0,02	0,22	0,28	0,14	0,35	-0,4	0,1
10 C	-0,4	0	0,34	-0,18	0,22	0,35	0,08	0,06	-0,47	-0,28	-0,06
11 N2	-0,2	-0,57	-0,39	-0,17	-0,44	0,17	0,42	0,1	-0,14	0,08	-0,13
12 Cl	-0,17	0,31	-0,69	-0,07	0,54	0,15	0,21	-0,09	0,11	0,01	-0,09

ϵ_i :	$\alpha - 2,26\beta$
n_i :	0
1 N1	-0,24
2 C	0,21
3 C	-0,2
4 N1	0,24
5 C	0,33
6 C	-0,3
7 C	0,27
8 C	-0,32
9 C	0,45
10 C	-0,46
11 N2	0,07
12 Cl	-0,03

Total energy: $14\alpha + 21,05\beta$

Electronic density matrix:

	1 N1	2 C	3 C	4 N1	5 C	6 C	7 C	8 C	9 C	10 C	11 N2
1 N1	1,2	0,69	0,07	-0,33	0,07	-0,01	-0,17	-0,03	0,55	0,01	0,03
2 C	0,69	0,89	0,57	0,04	0,02	0,15	0,06	-0,16	-0,07	-0,23	-0,08
3 C	0,07	0,57	0,92	0,72	-0,16	0,04	0,17	-0,03	-0,26	-0,08	-0,02
4 N1	-0,33	0,04	0,72	1,17	-0,05	-0,16	-0,04	0,07	0,05	0,54	0,08
5 C	0,07	0,02	-0,16	-0,05	1,09	0,68	0,06	-0,35	-0,05	0,57	-0,22

6 C	-0,01	0,15	0,04	-0,16	0,68	0,94	0,56	0,02	-0,22	0,02	0,35
7 C	-0,17	0,06	0,17	-0,04	0,06	0,56	1,02	0,73	-0,01	-0,23	-0,15
8 C	-0,03	-0,16	-0,03	0,07	-0,35	0,02	0,73	1	0,55	0	-0,05
9 C	0,55	-0,07	-0,26	0,05	-0,05	-0,22	-0,01	0,55	0,98	0,51	0,1
10 C	0,01	-0,23	-0,08	0,54	0,57	0,02	-0,23	0	0,51	0,97	-0,04
11 N2	0,03	-0,08	-0,02	0,08	-0,22	0,35	-0,15	-0,05	0,1	-0,04	1,88
12 Cl	-0,17	0,26	-0,1	-0,05	0,01	-0,05	-0,02	0,06	0,01	0,08	0,03

12 Cl

1 N1	-0,17
2 C	0,26
3 C	-0,1
4 N1	-0,05
5 C	0,01
6 C	-0,05
7 C	-0,02
8 C	0,06
9 C	0,01
10 C	0,08
11 N2	0,03
12 Cl	1,94

Atomic charges:

1 N1	-0,2
2 C	0,11
3 C	0,08
4 N1	-0,17
5 C	-0,09
6 C	0,06
7 C	-0,02
8 C	0
9 C	0,02
10 C	0,03
11 N2	0,12
12 Cl	0,06

Total charge: 0,00

Compound 2f

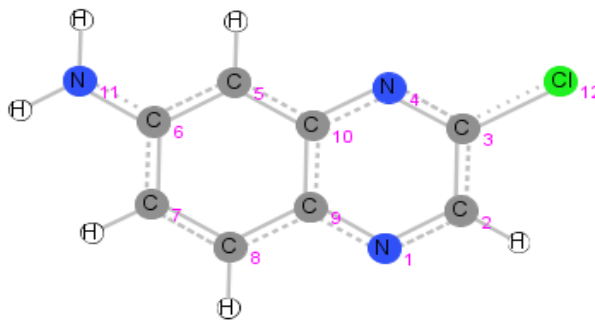
ψ_{tot}

Delocalized structure

18 atoms

12 Hückel atoms

14 π -electrons



Hamiltonian:

	1 N1	2 C	3 C	4 N1	5 C	6 C	7 C	8 C	9 C	10 C	11 N2
1 N1	$\alpha + 0,51\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
2 C	$1,02\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
3 C	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
4 N1	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$\alpha + 0,51\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$
5 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$
6 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,89\beta$
7 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
8 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
9 C	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$
10 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$0,00\beta$
11 N2	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,89\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$\alpha + 1,37\beta$
12 Cl	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,62\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$

	12 Cl
1 N1	0,00 β
2 C	0,00 β
3 C	0,62 β
4 N1	0,00 β
5 C	0,00 β
6 C	0,00 β
7 C	0,00 β
8 C	0,00 β
9 C	0,00 β
10 C	0,00 β
11 N2	0,00 β
12 Cl	$\alpha + 1,48\beta$

Orbitals:

ϵ_i :	$\alpha + 2,50\beta$	$\alpha + 2,10\beta$	$\alpha + 1,78\beta$	$\alpha + 1,47\beta$	$\alpha + 1,26\beta$	$\alpha + 0,79\beta$	$\alpha + 0,62\beta$	$\alpha - 0,47\beta$	$\alpha - 1,07\beta$	$\alpha - 1,22\beta$	$\alpha - 1,64\beta$
n_i :	2	2	2	2	2	2	2	0	0	0	0
1 N1	0,33	-0,19	-0,32	-0,44	-0,26	0,18	-0,18	0,48	0,08	-0,27	-0,25
2 C	0,25	-0,23	-0,01	-0,31	-0,34	-0,23	-0,29	-0,35	-0,43	0,02	0,44
3 C	0,29	-0,3	0,31	0	-0,17	-0,37	0	-0,32	0,37	0,25	-0,46
4 N1	0,36	-0,21	0,15	0,48	-0,17	-0,26	0,29	0,43	0,08	-0,28	0,25
5 C	0,27	0,21	0,02	0,29	0,08	0,22	-0,55	-0,28	0,15	-0,43	-0,23
6 C	0,26	0,47	0,16	-0,03	0,05	-0,13	-0,37	0,22	0,34	0,29	0,45
7 C	0,2	0,27	-0,05	-0,13	0,37	-0,49	-0,07	0,27	-0,4	0,16	-0,38
8 C	0,23	0,1	-0,25	-0,17	0,41	-0,26	0,32	-0,35	0,09	-0,49	0,18
9 C	0,39	-0,05	-0,39	-0,11	0,15	0,29	0,27	-0,11	0,3	0,43	0,09
10 C	0,41	-0,03	-0,12	0,45	0,05	0,3	0,03	-0,09	-0,5	0,23	-0,07
11 N2	0,2	0,57	0,34	-0,22	-0,43	0,19	0,43	-0,11	-0,12	-0,1	-0,13
12 Cl	0,18	-0,3	0,64	-0,29	0,49	0,34	0	0,1	-0,09	-0,06	0,09

ϵ_i :	$\alpha - 2,26\beta$
n_i :	0
1 N1	-0,24
2 C	0,2
3 C	-0,21
4 N1	0,25
5 C	0,33
6 C	-0,3
7 C	0,27
8 C	-0,32
9 C	0,45
10 C	-0,46
11 N2	0,07
12 Cl	0,03

Total energy: $14\alpha + 21,06\beta$

Electronic density matrix:

	1 N1	2 C	3 C	4 N1	5 C	6 C	7 C	8 C	9 C	10 C	11 N2
1 N1	1,15	0,72	0,05	-0,33	0,06	-0,02	-0,17	-0,01	0,55	0,03	0,04
2 C	0,72	0,94	0,57	0,06	0,01	0,15	0,07	-0,17	-0,1	-0,25	-0,09
3 C	0,05	0,57	0,88	0,69	-0,15	0,03	0,16	-0,02	-0,24	-0,06	-0,02
4 N1	-0,33	0,06	0,69	1,22	-0,07	-0,16	-0,02	0,07	0,03	0,54	0,08
5 C	0,06	0,01	-0,15	-0,07	1,1	0,68	0,05	-0,34	-0,04	0,57	-0,22
6 C	-0,02	0,15	0,03	-0,16	0,68	0,93	0,56	0,02	-0,22	0,03	0,35
7 C	-0,17	0,07	0,16	-0,02	0,05	0,56	1,03	0,74	-0,01	-0,23	-0,15
8 C	-0,01	-0,17	-0,02	0,07	-0,34	0,02	0,74	0,99	0,55	-0,01	-0,05
9 C	0,55	-0,1	-0,24	0,03	-0,04	-0,22	-0,01	0,55	0,99	0,51	0,1
10 C	0,03	-0,25	-0,06	0,54	0,57	0,03	-0,23	-0,01	0,51	0,96	-0,05

11 N2	0,04	-0,09	-0,02	0,08	-0,22	0,35	-0,15	-0,05	0,1	-0,05	1,88
12 Cl	-0,05	-0,1	0,26	-0,17	0,06	-0,01	-0,06	0,02	0,08	0	0,01

12 Cl

1 N1	-0,05
2 C	-0,1
3 C	0,26
4 N1	-0,17
5 C	0,06
6 C	-0,01
7 C	-0,06
8 C	0,02
9 C	0,08
10 C	0
11 N2	0,01
12 Cl	1,94

Atomic charges:

1 N1	-0,15
2 C	0,06
3 C	0,12
4 N1	-0,22
5 C	-0,1
6 C	0,07
7 C	-0,03
8 C	0,01
9 C	0,01
10 C	0,04
11 N2	0,12
12 Cl	0,06

Total charge: 0,00

Compound 2g

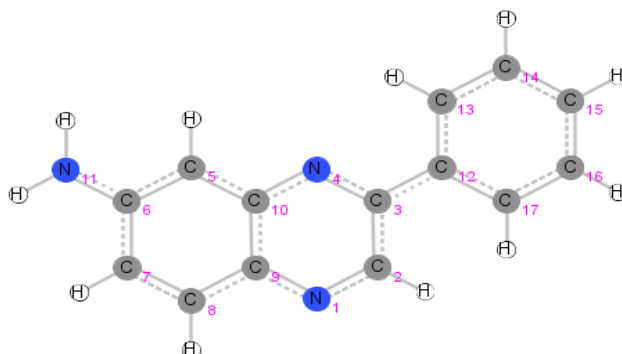
ψ_{tot}

Delocalized structure

28 atoms

17 Hückel atoms

18 π -electrons



Hamiltonian:

	1 N1	2 C	3 C	4 N1	5 C	6 C	7 C	8 C	9 C	10 C	11 N2
1 N1	$\alpha + 0,51\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
2 C	$1,02\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
3 C	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
4 N1	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$\alpha + 0,51\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$
5 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$
6 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,89\beta$
7 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
8 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
9 C	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$
10 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$0,00\beta$
11 N2	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,89\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$\alpha + 1,37\beta$
12 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
13 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
14 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
15 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
16 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
17 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$

	12 C	13 C	14 C	15 C	16 C	17 C
1 N1	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β
2 C	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β
3 C	1,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β
4 N1	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β
5 C	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β
6 C	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β
7 C	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β
8 C	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β
9 C	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β
10 C	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β
11 N2	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β	0,00β
12 C	$\alpha + 0,00\beta$	1,00β	0,00β	0,00β	0,00β	1,00β
13 C	1,00β	$\alpha + 0,00\beta$	1,00β	0,00β	0,00β	0,00β
14 C	0,00β	1,00β	$\alpha + 0,00\beta$	1,00β	0,00β	0,00β
15 C	0,00β	0,00β	1,00β	$\alpha + 0,00\beta$	1,00β	0,00β
16 C	0,00β	0,00β	0,00β	1,00β	$\alpha + 0,00\beta$	1,00β
17 C	1,00β	0,00β	0,00β	0,00β	1,00β	$\alpha + 0,00\beta$

Orbitals:

ϵ_i :	$\alpha + 2,53\beta$	$\alpha + 2,19\beta$	$\alpha + 1,98\beta$	$\alpha + 1,60\beta$	$\alpha + 1,43\beta$	$\alpha + 1,10\beta$	$\alpha + 1,00\beta$	$\alpha + 0,72\beta$	$\alpha + 0,62\beta$	$\alpha - 0,40\beta$	$\alpha - 0,82\beta$	
n_i :	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	0	0
1 N1	-0,32	-0,02	0,3	0,34	-0,41	0,25	0	-0,12	-0,18	-0,42	0,22	
2 C	-0,26	-0,14	0,17	0	-0,43	0,13	0	0,24	-0,29	0,21	-0,52	
3 C	-0,34	-0,29	0,03	-0,35	-0,2	-0,11	0	0,3	0,01	0,34	0,2	
4 N1	-0,37	-0,12	0,13	-0,43	0,27	0,11	0	0,28	0,29	-0,46	0	
5 C	-0,24	0,22	-0,09	-0,1	0,29	0,06	0	-0,19	-0,55	0,28	-0,06	
6 C	-0,22	0,38	-0,33	-0,05	-0,03	-0,1	0	0,1	-0,37	-0,18	0,26	
7 C	-0,17	0,25	-0,14	0,19	0,02	-0,46	0	0,39	-0,07	-0,28	-0,05	
8 C	-0,21	0,17	0,06	0,34	0,06	-0,41	0	0,18	0,32	0,29	-0,21	
9 C	-0,36	0,11	0,26	0,36	0,06	0,01	0	-0,26	0,27	0,17	0,23	
10 C	-0,39	0,1	0,15	-0,11	0,44	0,17	0	-0,24	0,03	0,07	-0,2	
11 N2	-0,17	0,42	-0,49	-0,18	-0,4	0,32	0	-0,14	0,43	0,09	-0,1	
12 C	-0,23	-0,37	-0,24	-0,11	-0,13	-0,36	0	-0,31	0	0,12	0,35	
13 C	-0,12	-0,27	-0,25	0,08	0	-0,14	0,5	-0,26	0	-0,2	-0,24	
14 C	-0,07	-0,21	-0,26	0,25	0,14	0,2	0,5	0,12	0	-0,04	-0,15	
15 C	-0,05	-0,19	-0,26	0,31	0,19	0,36	0	0,35	0	0,21	0,37	
16 C	-0,07	-0,21	-0,26	0,25	0,14	0,2	-0,5	0,12	0	-0,04	-0,15	
17 C	-0,12	-0,27	-0,25	0,08	0	-0,14	-0,5	-0,26	0	-0,2	-0,24	

ϵ_i :	$\alpha - 1,00\beta$	$\alpha - 1,16\beta$	$\alpha - 1,30\beta$	$\alpha - 1,65\beta$	$\alpha - 2,11\beta$	$\alpha - 2,33\beta$
n_i :	0	0	0	0	0	0
1 N1	0	0,14	-0,3	-0,19	-0,09	-0,22
2 C	0	-0,19	0,05	0,36	-0,05	0,25
3 C	0	0,08	0,23	-0,39	0,2	-0,36
4 N1	0	0,27	-0,1	0,21	0,02	0,26
5 C	0	0,36	-0,29	-0,19	0,24	0,25
6 C	0	0,1	0,44	0,36	-0,25	-0,21
7 C	0	-0,44	-0,15	-0,31	0,23	0,19
8 C	0	0,41	-0,25	0,15	-0,24	-0,23
9 C	0	-0,04	0,47	0,06	0,28	0,36
10 C	0	-0,52	-0,06	-0,05	-0,25	-0,38
11 N2	0	-0,03	-0,15	-0,11	0,06	0,05
12 C	0	-0,17	-0,25	0,08	-0,39	0,32
13 C	-0,5	0,06	0,05	0,13	0,32	-0,19
14 C	0,5	0,1	0,19	-0,29	-0,27	0,13
15 C	0	-0,18	-0,3	0,36	0,26	-0,11
16 C	-0,5	0,1	0,19	-0,29	-0,27	0,13

17 C 0,5 0,06 0,05 0,13 0,32 -0,19

Total energy: $18\alpha + 26,33\beta$

Electronic density matrix:

	1 N1	2 C	3 C	4 N1	5 C	6 C	7 C	8 C	9 C	10 C	11 N2
1 N1	1,15	0,73	0,04	-0,32	0,06	-0,03	-0,17	-0,01	0,55	0,03	0,04
2 C	0,73	0,91	0,55	0,03	0,02	0,15	0,06	-0,17	-0,08	-0,24	-0,09
3 C	0,04	0,55	0,92	0,66	-0,15	0,03	0,15	-0,01	-0,23	-0,06	-0,02
4 N1	-0,32	0,03	0,66	1,19	-0,06	-0,16	-0,03	0,07	0,04	0,55	0,09
5 C	0,06	0,02	-0,15	-0,06	1,1	0,68	0,06	-0,34	-0,05	0,57	-0,22
6 C	-0,03	0,15	0,03	-0,16	0,68	0,93	0,56	0,02	-0,22	0,03	0,35
7 C	-0,17	0,06	0,15	-0,03	0,06	0,56	1,03	0,73	-0,01	-0,23	-0,15
8 C	-0,01	-0,17	-0,01	0,07	-0,34	0,02	0,73	1	0,55	-0,01	-0,05
9 C	0,55	-0,08	-0,23	0,04	-0,05	-0,22	-0,01	0,55	0,98	0,5	0,09
10 C	0,03	-0,24	-0,06	0,55	0,57	0,03	-0,23	-0,01	0,5	0,95	-0,05
11 N2	0,04	-0,09	-0,02	0,09	-0,22	0,35	-0,15	-0,05	0,09	-0,05	1,88
12 C	-0,06	0,01	0,38	-0,04	0,01	0	-0,01	0,03	0,01	-0,03	0
13 C	-0,02	-0,11	0,03	-0,16	0,06	-0,01	-0,06	0,01	0,08	0,02	0,01
14 C	0,01	0	-0,04	0,01	0	0	0	-0,01	0	0,01	0
15 C	0,02	0,08	-0,03	0,13	-0,05	0,01	0,06	-0,01	-0,07	-0,02	-0,01
16 C	0,01	0	-0,04	0,01	0	0	0	-0,01	0	0,01	0
17 C	-0,02	-0,11	0,03	-0,16	0,06	-0,01	-0,06	0,01	0,08	0,02	0,01

	12 C	13 C	14 C	15 C	16 C	17 C
1 N1	-0,06	-0,02	0,01	0,02	0,01	-0,02
2 C	0,01	-0,11	0	0,08	0	-0,11
3 C	0,38	0,03	-0,04	-0,03	-0,04	0,03
4 N1	-0,04	-0,16	0,01	0,13	0,01	-0,16
5 C	0,01	0,06	0	-0,05	0	0,06
6 C	0	-0,01	0	0,01	0	-0,01
7 C	-0,01	-0,06	0	0,06	0	-0,06
8 C	0,03	0,01	-0,01	-0,01	-0,01	0,01
9 C	0,01	0,08	0	-0,07	0	0,08
10 C	-0,03	0,02	0,01	-0,02	0,01	0,02
11 N2	0	0,01	0	-0,01	0	0,01
12 C	1,01	0,62	0	-0,3	0	0,62
13 C	0,62	0,99	0,68	0,01	-0,32	-0,01
14 C	0	0,68	1	0,66	0	-0,32
15 C	-0,3	0,01	0,66	0,99	0,66	0,01
16 C	0	-0,32	0	0,66	1	0,68
17 C	0,62	-0,01	-0,32	0,01	0,68	0,99

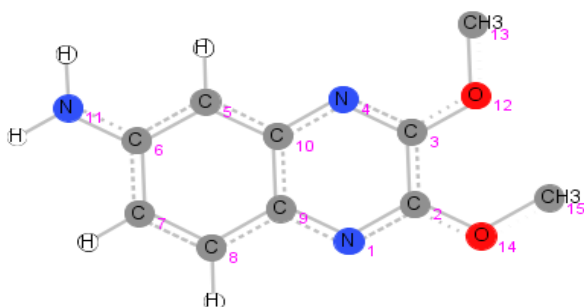
Atomic charges:

1 N1	-0,15
2 C	0,09
3 C	0,08
4 N1	-0,19
5 C	-0,1
6 C	0,07
7 C	-0,03
8 C	0
9 C	0,02
10 C	0,05
11 N2	0,12
12 C	-0,01
13 C	0,01
14 C	0
15 C	0,01
16 C	0

17 C 0,01
 Total charge: 0,00

Compound 2h

ψ_{tot}
 Delocalized structure
 20 atoms
 15 Hückel atoms
 20 π -electrons



Hamiltonian:

	1 N1	2 C	3 C	4 N1	5 C	6 C	7 C	8 C	9 C	10 C	11 N2
1 N1	$\alpha + 0,51\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
2 C	$1,02\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
3 C	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
4 N1	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$\alpha + 0,51\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$
5 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$
6 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,89\beta$
7 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
8 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
9 C	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$
10 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$0,00\beta$
11 N2	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,89\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$\alpha + 1,37\beta$
12 O2	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,66\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
13 CH3	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
14 O2	$0,00\beta$	$0,66\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
15 CH3	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$

	12 O2	13 CH3	14 O2	15 CH3
1 N1	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
2 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,66\beta$	$0,00\beta$
3 C	$0,66\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
4 N1	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
5 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
6 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
7 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
8 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
9 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
10 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
11 N2	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
12 O2	$\alpha + 2,09\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
13 CH3	$1,00\beta$	$\alpha + 2,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
14 O2	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$\alpha + 2,09\beta$	$1,00\beta$
15 CH3	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 2,00\beta$

Orbitals:

ϵ_i	$\alpha + 3,19\beta$	$\alpha + 3,11\beta$	$\alpha + 2,45\beta$	$\alpha + 2,05\beta$	$\alpha + 1,58\beta$	$\alpha + 1,49\beta$	$\alpha + 1,12\beta$	$\alpha + 1,02\beta$	$\alpha + 0,72\beta$	$\alpha + 0,57\beta$	$\alpha - 0,49\beta$
n_i	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	0
1 N1	0,1	-0,04	-0,31	-0,27	-0,37	0,3	0,04	0,35	0,12	0,23	0,45
2 C	0,2	-0,09	-0,19	-0,24	-0,02	0,43	0,07	0,03	-0,14	0,32	-0,33
3 C	0,2	0,09	-0,19	-0,23	0,36	0,19	-0,13	0	-0,34	0,11	-0,36
4 N1	0,1	0,04	-0,32	-0,22	0,49	-0,2	0,11	0,01	-0,35	-0,19	0,43
5 C	0,02	0	-0,29	0,17	0,12	-0,22	0,15	-0,15	0,38	0,43	-0,29
6 C	0,01	0	-0,3	0,47	0,04	0,05	-0,03	-0,15	0,01	0,37	0,2
7 C	0,01	0	-0,23	0,24	-0,21	-0,05	-0,29	-0,35	-0,37	0,14	0,28
8 C	0,02	0	-0,26	0,03	-0,37	-0,13	-0,29	-0,21	-0,27	-0,29	-0,34
9 C	0,05	-0,01	-0,4	-0,17	-0,37	-0,14	-0,04	0,14	0,17	-0,3	-0,11
10 C	0,05	0,01	-0,41	-0,11	0,16	-0,38	0,2	0	0,27	-0,12	-0,06

11 N2	0,01	0	-0,25	0,61	0,16	0,4	0,11	0,39	-0,01	-0,41	-0,1
12 O2	0,51	0,52	0,07	0,01	0,13	0,09	-0,5	-0,06	0,38	-0,09	0,11
13 CH3	0,43	0,47	0,15	0,15	-0,3	-0,18	0,57	0,06	-0,3	0,06	-0,04
14 O2	0,51	-0,52	0,07	0,01	-0,01	0,21	0,25	-0,49	0,16	-0,25	0,1
15 CH3	0,43	-0,47	0,15	0,16	0,02	-0,41	-0,28	0,5	-0,13	0,18	-0,04

ϵ_i : $\alpha - 1,10\beta$ $\alpha - 1,22\beta$ $\alpha - 1,66\beta$ $\alpha - 2,27\beta$

n_i : 0 0 0 0

1 N1	-0,07	0,27	0,25	-0,24
2 C	0,42	-0,02	-0,46	0,22
3 C	-0,33	-0,25	0,46	-0,22
4 N1	-0,11	0,28	-0,23	0,25
5 C	-0,13	0,43	0,24	0,33
6 C	-0,36	-0,29	-0,44	-0,29
7 C	0,41	-0,16	0,37	0,27
8 C	-0,09	0,49	-0,18	-0,32
9 C	-0,31	-0,43	-0,07	0,45
10 C	0,5	-0,23	0,04	-0,46
11 N2	0,13	0,1	0,13	0,07
12 O2	0,08	0,05	-0,09	0,03
13 CH3	-0,02	-0,02	0,02	-0,01
14 O2	-0,1	0,01	0,09	-0,03
15 CH3	0,03	0	-0,02	0,01

Total energy: $20\alpha + 34,62\beta$

Electronic density matrix:

	1 N1	2 C	3 C	4 N1	5 C	6 C	7 C	8 C	9 C	10 C	11 N2
1 N1	1,2	0,7	0,08	-0,31	0,06	-0,01	-0,16	-0,03	0,54	0	0,02
2 C	0,7	0,9	0,54	0,06	0,01	0,15	0,07	-0,17	-0,09	-0,23	-0,08
3 C	0,08	0,54	0,89	0,7	-0,16	0,04	0,16	-0,03	-0,24	-0,07	-0,02
4 N1	-0,31	0,06	0,7	1,22	-0,07	-0,15	-0,02	0,07	0,02	0,54	0,08
5 C	0,06	0,01	-0,16	-0,07	1,1	0,68	0,05	-0,34	-0,04	0,57	-0,22
6 C	-0,01	0,15	0,04	-0,15	0,68	0,94	0,57	0,01	-0,22	0,02	0,34
7 C	-0,16	0,07	0,16	-0,02	0,05	0,57	1,03	0,73	-0,02	-0,23	-0,15
8 C	-0,03	-0,17	-0,03	0,07	-0,34	0,01	0,73	1	0,55	0	-0,05
9 C	0,54	-0,09	-0,24	0,02	-0,04	-0,22	-0,02	0,55	0,99	0,51	0,1
10 C	0	-0,23	-0,07	0,54	0,57	0,02	-0,23	0	0,51	0,97	-0,04
11 N2	0,02	-0,08	-0,02	0,08	-0,22	0,34	-0,15	-0,05	0,1	-0,04	1,88
12 O2	-0,06	-0,08	0,25	-0,17	0,05	-0,01	-0,06	0,02	0,08	0	0,01
13 CH3	0,03	0,02	-0,08	0,06	-0,02	0,01	0,03	-0,01	-0,03	0	0
14 O2	-0,17	0,24	-0,08	-0,05	0,01	-0,05	-0,02	0,06	0,01	0,07	0,03
15 CH3	0,06	-0,08	0,02	0,03	-0,01	0,02	0,01	-0,02	0	-0,03	-0,01

	12 O2	13 CH3	14 O2	15 CH3
1 N1	-0,06	0,03	-0,17	0,06
2 C	-0,08	0,02	0,24	-0,08
3 C	0,25	-0,08	-0,08	0,02
4 N1	-0,17	0,06	-0,05	0,03
5 C	0,05	-0,02	0,01	-0,01
6 C	-0,01	0,01	-0,05	0,02
7 C	-0,06	0,03	-0,02	0,01
8 C	0,02	-0,01	0,06	-0,02
9 C	0,08	-0,03	0,01	0
10 C	0	0	0,07	-0,03
11 N2	0,01	0	0,03	-0,01
12 O2	1,94	0,02	0,01	0
13 CH3	0,02	1,99	0	0
14 O2	0,01	0	1,94	0,02
15 CH3	0	0	0,02	1,99

Atomic charges:

1 N1	-0,2
2 C	0,1
3 C	0,11
4 N1	-0,22
5 C	-0,1
6 C	0,06
7 C	-0,03
8 C	0
9 C	0,01
10 C	0,03
11 N2	0,12
12 O2	0,06
13 CH3	0,01
14 O2	0,06
15 CH3	0,01
Total charge:	0,00

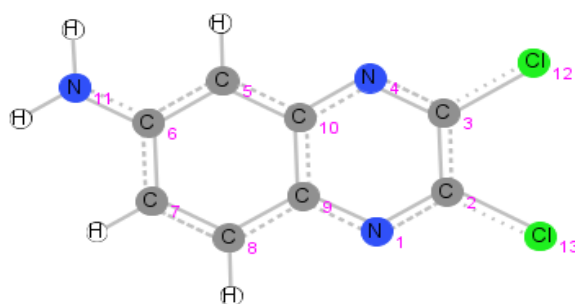
Compound 2i

 ψ_{tot}

Delocalized structure

18 atoms

13 Hückel atoms

16 π -electrons

Hamiltonian:

	1 N1	2 C	3 C	4 N1	5 C	6 C	7 C	8 C	9 C	10 C	11 N2
1 N1	$\alpha + 0,51\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
2 C	$1,02\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
3 C	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
4 N1	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$\alpha + 0,51\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$
5 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$
6 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,89\beta$
7 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
8 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
9 C	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$
10 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$0,00\beta$
11 N2	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,89\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$\alpha + 1,37\beta$
12 Cl	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,62\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
13 Cl	$0,00\beta$	$0,62\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
	12 Cl	13 Cl									
1 N1	$0,00\beta$	$0,00\beta$									
2 C	$0,00\beta$	$0,62\beta$									
3 C	$0,62\beta$	$0,00\beta$									
4 N1	$0,00\beta$	$0,00\beta$									
5 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$									
6 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$									
7 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$									
8 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$									
9 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$									
10 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$									
11 N2	$0,00\beta$	$0,00\beta$									
12 Cl	$\alpha + 1,48\beta$	$0,00\beta$									
13 Cl	$0,00\beta$	$\alpha + 1,48\beta$									

Orbitals:

ϵ_i :	$\alpha + 2,53\beta$	$\alpha + 2,14\beta$	$\alpha + 1,78\beta$	$\alpha + 1,74\beta$	$\alpha + 1,40\beta$	$\alpha + 1,15\beta$	$\alpha + 0,77\beta$	$\alpha + 0,58\beta$	$\alpha - 0,49\beta$	$\alpha - 1,10\beta$	$\alpha - 1,22\beta$
n_i :	2	2	2	2	2	2	2	2	0	0	0
1 N1	0,34	0,17	0,33	0,11	0,3	-0,41	-0,15	0,23	0,45	-0,07	0,27
2 C	0,3	0,28	0,04	0,3	0,04	-0,24	0,18	0,32	-0,33	0,42	-0,02
3 C	0,3	0,27	-0,32	-0,03	-0,06	-0,13	0,39	0,09	-0,36	-0,33	-0,25
4 N1	0,35	0,13	-0,19	-0,3	-0,43	-0,06	0,32	-0,22	0,43	-0,11	0,28
5 C	0,24	-0,24	-0,03	-0,1	-0,23	0,18	-0,34	0,47	-0,3	-0,12	0,43
6 C	0,23	-0,47	-0,14	0,15	0	0,12	0,05	0,37	0,21	-0,36	-0,29
7 C	0,18	-0,28	0,06	0,05	0,23	0,37	0,44	0,12	0,28	0,41	-0,17
8 C	0,22	-0,13	0,24	-0,07	0,33	0,3	0,29	-0,3	-0,34	-0,08	0,49
9 C	0,38	-0,01	0,37	-0,17	0,22	-0,02	-0,22	-0,3	-0,11	-0,31	-0,43
10 C	0,39	-0,05	0,08	-0,33	-0,32	0,09	-0,31	-0,1	-0,06	0,5	-0,24
11 N2	0,17	-0,54	-0,3	0,36	-0,01	-0,47	-0,07	-0,42	-0,1	0,13	0,1
12 Cl	0,18	0,25	-0,66	-0,07	0,51	0,24	-0,34	-0,06	0,11	0,08	0,06
13 Cl	0,18	0,26	0,09	0,71	-0,31	0,44	-0,16	-0,22	0,1	-0,1	0,01

ϵ_i :	$\alpha - 1,66\beta$	$\alpha - 2,27\beta$
n_i :	0	0
1 N1	0,25	0,24
2 C	-0,46	-0,21
3 C	0,46	0,22
4 N1	-0,23	-0,25
5 C	0,24	-0,33
6 C	-0,44	0,29
7 C	0,37	-0,27
8 C	-0,18	0,32
9 C	-0,07	-0,45
10 C	0,04	0,46
11 N2	0,13	-0,07
12 Cl	-0,09	-0,04
13 Cl	0,09	0,04

Total energy: $16\alpha + 24,18\beta$

Electronic density matrix:

	1 N1	2 C	3 C	4 N1	5 C	6 C	7 C	8 C	9 C	10 C	11 N2
1 N1	1,2	0,7	0,08	-0,31	0,06	-0,01	-0,16	-0,03	0,54	0	0,02
2 C	0,7	0,91	0,54	0,06	0,01	0,15	0,07	-0,17	-0,09	-0,24	-0,08
3 C	0,08	0,54	0,89	0,7	-0,16	0,04	0,16	-0,03	-0,24	-0,07	-0,02
4 N1	-0,31	0,06	0,7	1,22	-0,07	-0,15	-0,02	0,07	0,02	0,54	0,08
5 C	0,06	0,01	-0,16	-0,07	1,1	0,68	0,05	-0,34	-0,04	0,57	-0,22
6 C	-0,01	0,15	0,04	-0,15	0,68	0,94	0,57	0,01	-0,22	0,02	0,34
7 C	-0,16	0,07	0,16	-0,02	0,05	0,57	1,03	0,73	-0,02	-0,23	-0,15
8 C	-0,03	-0,17	-0,03	0,07	-0,34	0,01	0,73	1	0,55	0	-0,05
9 C	0,54	-0,09	-0,24	0,02	-0,04	-0,22	-0,02	0,55	0,99	0,51	0,1
10 C	0	-0,24	-0,07	0,54	0,57	0,02	-0,23	0	0,51	0,97	-0,04
11 N2	0,02	-0,08	-0,02	0,08	-0,22	0,34	-0,15	-0,05	0,1	-0,04	1,88
12 Cl	-0,06	-0,09	0,26	-0,17	0,06	-0,01	-0,06	0,03	0,08	0	0,01
13 Cl	-0,17	0,25	-0,09	-0,05	0,01	-0,05	-0,02	0,06	0,01	0,08	0,03

	12 Cl	13 Cl
1 N1	-0,06	-0,17
2 C	-0,09	0,25
3 C	0,26	-0,09
4 N1	-0,17	-0,05
5 C	0,06	0,01
6 C	-0,01	-0,05
7 C	-0,06	-0,02
8 C	0,03	0,06
9 C	0,08	0,01

10 C	0	0,08
11 N2	0,01	0,03
12 Cl	1,94	0,01
13 Cl	0,01	1,94

Atomic charges:

1 N1	-0,2
2 C	0,09
3 C	0,11
4 N1	-0,22
5 C	-0,1
6 C	0,06
7 C	-0,03
8 C	0
9 C	0,01
10 C	0,03
11 N2	0,12
12 Cl	0,06
13 Cl	0,06

Total charge: 0,00

Compound 2j

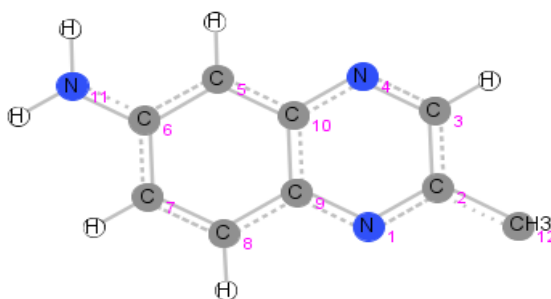
ψ_{tot}

Delocalized structure

18 atoms

12 Hückel atoms

14 π -electrons



Hamiltonian:

	1 N1	2 C	3 C	4 N1	5 C	6 C	7 C	8 C	9 C	10 C	11 N2
1 N1	$\alpha + 0,51\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
2 C	$1,02\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
3 C	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
4 N1	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$\alpha + 0,51\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$
5 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$
6 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,89\beta$
7 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
8 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
9 C	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$
10 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$0,00\beta$
11 N2	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,89\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$\alpha + 1,37\beta$
12 CH3	$0,00\beta$	$0,71\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$

	12 CH3
1 N1	$0,00\beta$
2 C	$0,71\beta$
3 C	$0,00\beta$
4 N1	$0,00\beta$
5 C	$0,00\beta$
6 C	$0,00\beta$
7 C	$0,00\beta$
8 C	$0,00\beta$
9 C	$0,00\beta$
10 C	$0,00\beta$
11 N2	$0,00\beta$
12 CH3	$\alpha + 2,00\beta$

Orbitals:

ϵ_i :	$\alpha + 2,56\beta$	$\alpha + 2,27\beta$	$\alpha + 1,96\beta$	$\alpha + 1,55\beta$	$\alpha + 1,26\beta$	$\alpha + 0,87\beta$	$\alpha + 0,59\beta$	$\alpha - 0,47\beta$	$\alpha - 1,08\beta$	$\alpha - 1,21\beta$	$\alpha - 1,64\beta$
n_i :	2	2	2	2	2	2	2	0	0	0	0
1 N1	0,35	0,04	-0,2	0,39	0,43	0,21	0,22	0,45	-0,07	-0,26	0,27
2 C	0,37	0,24	-0,03	0,02	0,37	-0,16	0,3	-0,29	0,46	0,04	-0,47
3 C	0,26	0,06	-0,17	-0,34	0,26	-0,41	0,06	-0,38	-0,35	0,22	0,43
4 N1	0,29	-0,11	-0,3	-0,54	-0,03	-0,2	-0,26	0,46	-0,08	-0,3	-0,23
5 C	0,2	-0,27	0,06	-0,15	-0,28	0,27	0,5	-0,3	-0,08	-0,44	0,24
6 C	0,18	-0,37	0,38	-0,03	-0,06	-0,11	0,37	0,2	-0,38	0,24	-0,45
7 C	0,14	-0,24	0,17	0,24	-0,22	-0,54	0,09	0,29	0,37	0,22	0,38
8 C	0,19	-0,18	-0,05	0,39	-0,22	-0,36	-0,32	-0,33	-0,02	-0,5	-0,17
9 C	0,34	-0,17	-0,26	0,38	-0,05	0,23	-0,28	-0,14	-0,35	0,4	-0,1
10 C	0,33	-0,24	-0,26	-0,21	-0,29	0,35	-0,08	-0,06	0,47	0,29	0,06
11 N2	0,13	-0,37	0,57	-0,14	0,47	0,19	-0,43	-0,1	0,14	-0,08	0,13
12 CH3	0,46	0,63	0,45	-0,04	-0,35	0,1	-0,15	0,08	-0,1	-0,01	0,09

ϵ_i : $\alpha - 2,26\beta$

n_i :	0
1 N1	0,24
2 C	-0,21
3 C	0,2
4 N1	-0,24
5 C	-0,33
6 C	0,3
7 C	-0,27
8 C	0,32
9 C	-0,45
10 C	0,46
11 N2	-0,07
12 CH3	0,03

Total energy: $14\alpha + 22,11\beta$

Electronic density matrix:

	1 N1	2 C	3 C	4 N1	5 C	6 C	7 C	8 C	9 C	10 C	11 N2
1 N1	1,2	0,69	0,07	-0,33	0,07	-0,01	-0,17	-0,03	0,55	0,01	0,03
2 C	0,69	0,89	0,57	0,04	0,02	0,15	0,06	-0,16	-0,07	-0,24	-0,08
3 C	0,07	0,57	0,92	0,72	-0,16	0,04	0,17	-0,03	-0,26	-0,08	-0,02
4 N1	-0,33	0,04	0,72	1,17	-0,05	-0,16	-0,04	0,07	0,05	0,54	0,08
5 C	0,07	0,02	-0,16	-0,05	1,09	0,68	0,06	-0,35	-0,05	0,57	-0,22
6 C	-0,01	0,15	0,04	-0,16	0,68	0,94	0,56	0,02	-0,22	0,02	0,35
7 C	-0,17	0,06	0,17	-0,04	0,06	0,56	1,02	0,73	-0,01	-0,23	-0,15
8 C	-0,03	-0,16	-0,03	0,07	-0,35	0,02	0,73	1	0,55	0	-0,05
9 C	0,55	-0,07	-0,26	0,05	-0,05	-0,22	-0,01	0,55	0,98	0,51	0,1
10 C	0,01	-0,24	-0,08	0,54	0,57	0,02	-0,23	0	0,51	0,97	-0,04
11 N2	0,03	-0,08	-0,02	0,08	-0,22	0,35	-0,15	-0,05	0,1	-0,04	1,88
12 CH3	-0,16	0,24	-0,1	-0,04	0,01	-0,05	-0,02	0,05	0,01	0,07	0,02

12 CH3

1 N1	-0,16
2 C	0,24
3 C	-0,1
4 N1	-0,04
5 C	0,01
6 C	-0,05
7 C	-0,02
8 C	0,05
9 C	0,01
10 C	0,07
11 N2	0,02
12 CH3	1,95

Atomic charges:

1 N1	-0,2
2 C	0,11
3 C	0,08
4 N1	-0,17
5 C	-0,09
6 C	0,06
7 C	-0,02
8 C	0
9 C	0,02
10 C	0,03
11 N2	0,12
12 CH3	0,05

Total charge: 0,00

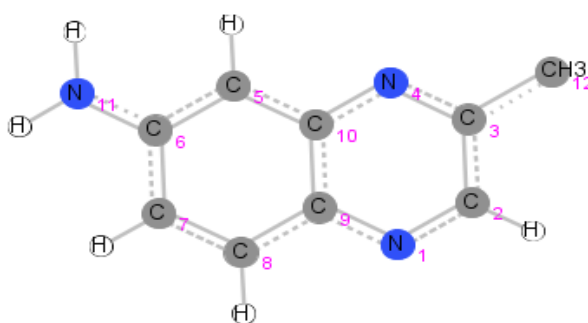
Compound 2k

 ψ_{tot}

Delocalized structure

18 atoms

12 Hückel atoms

14 π -electrons

Hamiltonian:

	1 N1	2 C	3 C	4 N1	5 C	6 C	7 C	8 C	9 C	10 C	11 N2
1 N1	$\alpha + 0,51\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
2 C	$1,02\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
3 C	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
4 N1	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$\alpha + 0,51\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$
5 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$
6 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,89\beta$
7 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
8 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
9 C	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$
10 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$0,00\beta$
11 N2	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,89\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$\alpha + 1,37\beta$
12 CH3	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,71\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$

12 CH3

1 N1	$0,00\beta$
2 C	$0,00\beta$
3 C	$0,71\beta$
4 N1	$0,00\beta$
5 C	$0,00\beta$
6 C	$0,00\beta$
7 C	$0,00\beta$
8 C	$0,00\beta$
9 C	$0,00\beta$
10 C	$0,00\beta$
11 N2	$0,00\beta$
12 CH3	$\alpha + 2,00\beta$

Orbitals:

ϵ_i :	$\alpha + 2,56\beta$	$\alpha + 2,26\beta$	$\alpha + 1,97\beta$	$\alpha + 1,50\beta$	$\alpha + 1,32\beta$	$\alpha + 0,81\beta$	$\alpha + 0,62\beta$	$\alpha - 0,47\beta$	$\alpha - 1,07\beta$	$\alpha - 1,22\beta$	$\alpha - 1,64\beta$
n_i :	2	2	2	2	2	2	2	2	0	0	0
1 N1	-0,29	0,09	-0,36	-0,44	-0,29	0,2	-0,18	-0,48	-0,08	0,27	0,25
2 C	-0,26	-0,06	-0,19	-0,21	-0,43	-0,22	-0,29	0,35	0,42	-0,02	-0,44
3 C	-0,37	-0,24	-0,02	0,14	-0,27	-0,39	0	0,32	-0,37	-0,25	0,46

4 N1	-0,36	-0,02	-0,14	0,55	-0,12	-0,25	0,29	-0,43	-0,08	0,28	-0,25
5 C	-0,21	0,25	0,1	0,25	0,15	0,22	-0,54	0,28	-0,15	0,43	0,23
6 C	-0,18	0,37	0,38	-0,01	0,03	-0,13	-0,37	-0,22	-0,34	-0,3	-0,45
7 C	-0,14	0,25	0,15	-0,19	0,31	-0,52	-0,07	-0,27	0,4	-0,16	0,38
8 C	-0,18	0,21	-0,09	-0,28	0,38	-0,29	0,32	0,35	-0,1	0,49	-0,18
9 C	-0,32	0,22	-0,32	-0,22	0,2	0,28	0,27	0,11	-0,3	-0,44	-0,09
10 C	-0,35	0,2	-0,18	0,39	0,17	0,31	0,03	0,09	0,5	-0,23	0,07
11 N2	-0,14	0,36	0,56	-0,09	-0,48	0,21	0,43	0,11	0,12	0,1	0,13
12 CH3	-0,46	-0,64	0,42	-0,2	0,28	0,23	0	-0,09	0,09	0,06	-0,09

ϵ_i : $\alpha - 2,26\beta$

n_i : 0

1 N1 0,24

2 C -0,2

3 C 0,21

4 N1 -0,25

5 C -0,33

6 C 0,3

7 C -0,27

8 C 0,32

9 C -0,45

10 C 0,46

11 N2 -0,07

12 CH3 -0,03

Total energy: $14\alpha + 22,11\beta$

Electronic density matrix:

	1 N1	2 C	3 C	4 N1	5 C	6 C	7 C	8 C	9 C	10 C	11 N2
1 N1	1,15	0,72	0,05	-0,33	0,06	-0,03	-0,17	-0,01	0,55	0,03	0,04
2 C	0,72	0,94	0,57	0,06	0,01	0,15	0,07	-0,17	-0,1	-0,25	-0,09
3 C	0,05	0,57	0,87	0,69	-0,16	0,03	0,16	-0,02	-0,24	-0,05	-0,02
4 N1	-0,33	0,06	0,69	1,22	-0,07	-0,16	-0,02	0,07	0,03	0,54	0,08
5 C	0,06	0,01	-0,16	-0,07	1,1	0,68	0,05	-0,34	-0,04	0,57	-0,22
6 C	-0,03	0,15	0,03	-0,16	0,68	0,93	0,56	0,02	-0,22	0,03	0,35
7 C	-0,17	0,07	0,16	-0,02	0,05	0,56	1,03	0,74	-0,01	-0,23	-0,15
8 C	-0,01	-0,17	-0,02	0,07	-0,34	0,02	0,74	0,99	0,55	-0,01	-0,05
9 C	0,55	-0,1	-0,24	0,03	-0,04	-0,22	-0,01	0,55	0,99	0,51	0,1
10 C	0,03	-0,25	-0,05	0,54	0,57	0,03	-0,23	-0,01	0,51	0,96	-0,05
11 N2	0,04	-0,09	-0,02	0,08	-0,22	0,35	-0,15	-0,05	0,1	-0,05	1,88
12 CH3	-0,04	-0,1	0,25	-0,16	0,05	-0,01	-0,05	0,02	0,07	0	0,01

12 CH3

1 N1 -0,04

2 C -0,1

3 C 0,25

4 N1 -0,16

5 C 0,05

6 C -0,01

7 C -0,05

8 C 0,02

9 C 0,07

10 C 0

11 N2 0,01

12 CH3 1,94

Atomic charges:

1 N1 -0,15

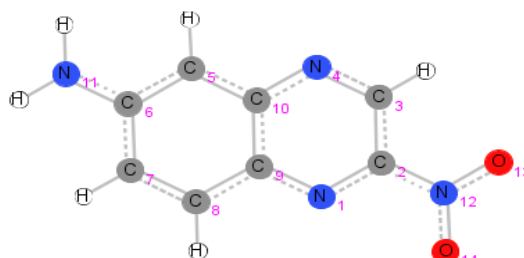
2 C 0,06

3 C 0,13

4 N1 -0,22
 5 C -0,1
 6 C 0,07
 7 C -0,03
 8 C 0,01
 9 C 0,01
 10 C 0,04
 11 N2 0,12
 12 CH3 0,06
 Total charge: 0,00

Compound 2I

ψ_{tot}
 Delocalized structure
 20 atoms
 14 Hückel atoms
 16 π -electrons



Hamiltonian:

	1 N1	2 C	3 C	4 N1	5 C	6 C	7 C	8 C	9 C	10 C	11 N2
1 N1	$\alpha + 0,51\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
2 C	$1,02\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
3 C	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
4 N1	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$\alpha + 0,51\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$
5 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$
6 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,89\beta$
7 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
8 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
9 C	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$
10 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$0,00\beta$
11 N2	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,89\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$\alpha + 1,37\beta$
12 N2	$0,00\beta$	$0,89\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
13 O1	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
14 O1	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$

	12 N2	13 O1	14 O1
1 N1	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
2 C	$0,89\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
3 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
4 N1	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
5 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
6 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
7 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
8 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
9 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
10 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
11 N2	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
12 N2	$\alpha + 1,37\beta$	$1,13\beta$	$1,13\beta$
13 O1	$1,13\beta$	$\alpha + 0,97\beta$	$0,00\beta$
14 O1	$1,13\beta$	$0,00\beta$	$\alpha + 0,97\beta$

Orbitals:

ϵ_i :	$\alpha + 3,01\beta$	$\alpha + 2,44\beta$	$\alpha + 2,03\beta$	$\alpha + 1,55\beta$	$\alpha + 1,36\beta$	$\alpha + 0,97\beta$	$\alpha + 0,88\beta$	$\alpha + 0,63\beta$	$\alpha - 0,25\beta$	$\alpha - 0,57\beta$	$\alpha - 1,16\beta$
n_i :	2	2	2	2	2	2	2	2	2	0	0
1 N1	0,16	-0,28	0,27	0,4	-0,37	0	-0,24	-0,16	-0,43	-0,24	-0,01
2 C	0,31	-0,13	0,2	0,05	-0,45	0	0,16	-0,28	0,23	0,11	-0,38

3 C	0,13	-0,19	0,23	-0,33	-0,28	0	0,39	0,02	-0,01	0,5	0,23
4 N1	0,08	-0,32	0,25	-0,55	0,06	0	0,17	0,29	-0,23	-0,39	0,11
5 C	0,03	-0,3	-0,15	-0,16	0,25	0	-0,21	-0,55	0,1	0,3	-0,03
6 C	0,02	-0,32	-0,46	-0,02	0,01	0	0,14	-0,36	-0,2	-0,09	0,45
7 C	0,02	-0,23	-0,23	0,23	0,18	0	0,56	-0,06	-0,15	-0,29	-0,35
8 C	0,04	-0,26	-0,02	0,38	0,23	0	0,35	0,32	0,24	0,25	-0,04
9 C	0,09	-0,39	0,2	0,36	0,14	0	-0,25	0,26	0,09	0,14	0,4
10 C	0,07	-0,42	0,15	-0,23	0,34	0	-0,32	0,01	0,18	-0,09	-0,41
11 N2	0,01	-0,26	-0,62	-0,12	-0,47	0	-0,25	0,43	0,11	0,04	-0,16
12 N2	0,72	0,17	-0,1	-0,01	0,06	0	0,01	-0,04	0,44	-0,35	0,25
13 O1	0,4	0,13	-0,11	-0,02	0,18	0,71	-0,07	0,12	-0,41	0,26	-0,13
14 O1	0,4	0,13	-0,11	-0,02	0,18	-0,71	-0,07	0,12	-0,41	0,26	-0,13

ϵ_i :	$\alpha - 1,21\beta$	$\alpha - 1,70\beta$	$\alpha - 2,27\beta$
n_i :	0	0	0
1 N1	0,25	-0,26	0,25
2 C	-0,08	0,51	-0,24
3 C	-0,21	-0,41	0,21
4 N1	0,32	0,19	-0,24
5 C	0,43	-0,25	-0,33
6 C	-0,18	0,41	0,29
7 C	-0,26	-0,35	-0,27
8 C	0,5	0,18	0,32
9 C	-0,35	0,05	-0,45
10 C	-0,34	0,01	0,45
11 N2	0,06	-0,12	-0,07
12 N2	0,05	-0,22	0,07
13 O1	-0,03	0,09	-0,03
14 O1	-0,03	0,09	-0,03

Total energy: $16\alpha + 25,74\beta$

Electronic density matrix:

	1 N1	2 C	3 C	4 N1	5 C	6 C	7 C	8 C	9 C	10 C	11 N2
1 N1	1,12	0,67	0,02	-0,32	0,05	-0,05	-0,19	0,01	0,58	0,05	0,05
2 C	0,67	0,93	0,56	0,02	0,03	0,14	0,05	-0,16	-0,08	-0,23	-0,08
3 C	0,02	0,56	0,88	0,72	-0,17	0,02	0,16	0	-0,24	-0,05	-0,01
4 N1	-0,32	0,02	0,72	1,17	-0,06	-0,16	-0,04	0,07	0,05	0,54	0,09
5 C	0,05	0,03	-0,17	-0,06	1,09	0,67	0,06	-0,34	-0,05	0,58	-0,22
6 C	-0,05	0,14	0,02	-0,16	0,67	0,92	0,55	0,03	-0,21	0,04	0,36
7 C	-0,19	0,05	0,16	-0,04	0,06	0,55	1,02	0,74	0	-0,22	-0,14
8 C	0,01	-0,16	0	0,07	-0,34	0,03	0,74	0,99	0,54	-0,02	-0,06
9 C	0,58	-0,08	-0,24	0,05	-0,05	-0,21	0	0,54	0,97	0,5	0,09
10 C	0,05	-0,23	-0,05	0,54	0,58	0,04	-0,22	-0,02	0,5	0,94	-0,06
11 N2	0,05	-0,08	-0,01	0,09	-0,22	0,36	-0,14	-0,06	0,09	-0,06	1,87
12 N2	0,04	0,33	0,05	-0,05	0,04	0,04	0,02	-0,03	-0,06	-0,04	-0,04
13 O1	-0,16	-0,08	-0,13	0,02	-0,03	-0,07	-0,03	0,06	0,06	0,08	0,05
14 O1	-0,16	-0,08	-0,13	0,02	-0,03	-0,07	-0,03	0,06	0,06	0,08	0,05

	12 N2	13 O1	14 O1
1 N1	0,04	-0,16	-0,16
2 C	0,33	-0,08	-0,08
3 C	0,05	-0,13	-0,13
4 N1	-0,05	0,02	0,02
5 C	0,04	-0,03	-0,03
6 C	0,04	-0,07	-0,07
7 C	0,02	-0,03	-0,03
8 C	-0,03	0,06	0,06
9 C	-0,06	0,06	0,06
10 C	-0,04	0,08	0,08

11 N2	-0,04	0,05	0,05
12 N2	1,13	0,65	0,65
13 O1	0,65	1,48	-0,52
14 O1	0,65	-0,52	1,48

Atomic charges:

1 N1	-0,12
2 C	0,07
3 C	0,12
4 N1	-0,17
5 C	-0,09
6 C	0,08
7 C	-0,02
8 C	0,01
9 C	0,03
10 C	0,06
11 N2	0,13
12 N2	0,87
13 O1	-0,48
14 O1	-0,48

Total charge: 0,00

Compound 2m

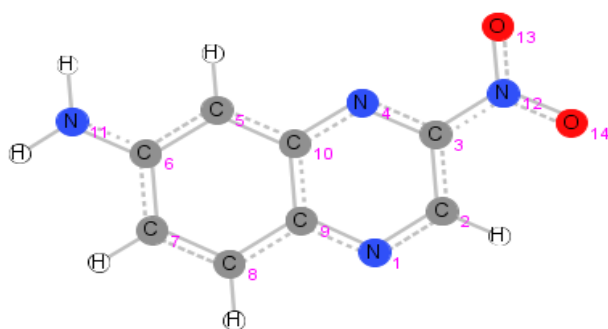
ψ_{tot}

Delocalized structure

20 atoms

14 Hückel atoms

16 π -electrons



Hamiltonian:

	1 N1	2 C	3 C	4 N1	5 C	6 C	7 C	8 C	9 C	10 C	11 N2
1 N1	$\alpha + 0,51\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
2 C	$1,02\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
3 C	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
4 N1	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$\alpha + 0,51\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$
5 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$
6 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,89\beta$
7 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
8 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
9 C	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$
10 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$0,00\beta$
11 N2	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,89\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$\alpha + 1,37\beta$
12 N2	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,89\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
13 O1	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
14 O1	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$

	12 N2	13 O1	14 O1
1 N1	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
2 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
3 C	$0,89\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
4 N1	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
5 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
6 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
7 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
8 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
9 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
10 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
11 N2	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$

12 N2	$\alpha + 1,37\beta$	$1,13\beta$	$1,13\beta$
13 O1	$1,13\beta$	$\alpha + 0,97\beta$	$0,00\beta$
14 O1	$1,13\beta$	$0,00\beta$	$\alpha + 0,97\beta$

Orbitals:

ei :	$\alpha + 3,01\beta$	$\alpha + 2,44\beta$	$\alpha + 2,04\beta$	$\alpha + 1,54\beta$	$\alpha + 1,37\beta$	$\alpha + 0,97\beta$	$\alpha + 0,88\beta$	$\alpha + 0,62\beta$	$\alpha - 0,23\beta$	$\alpha - 0,59\beta$	$\alpha - 1,12\beta$
ni :	2	2	2	2	2	2	2	2	0	0	0
1 N1	0,08	-0,31	0,31	0,42	0,34	0	-0,24	-0,18	-0,24	0,41	-0,09
2 C	0,13	-0,18	0,24	0,1	0,47	0	0,16	-0,29	-0,02	-0,48	0,31
3 C	0,31	-0,13	0,18	-0,27	0,3	0	0,38	0	0,25	-0,14	-0,25
4 N1	0,16	-0,28	0,21	-0,56	-0,02	0	0,16	0,29	-0,42	0,23	-0,18
5 C	0,04	-0,29	-0,16	-0,19	-0,23	0	-0,21	-0,54	0,21	-0,2	-0,26
6 C	0,02	-0,31	-0,46	-0,01	0	0	0,14	-0,37	-0,1	0,23	-0,25
7 C	0,02	-0,24	-0,23	0,22	-0,2	0	0,55	-0,07	-0,24	0,16	0,46
8 C	0,03	-0,26	-0,01	0,36	-0,28	0	0,35	0,32	0,15	-0,33	-0,27
9 C	0,07	-0,4	0,22	0,32	-0,18	0	-0,24	0,27	0,2	0,04	-0,16
10 C	0,09	-0,41	0,13	-0,29	-0,32	0	-0,32	0,03	0,05	-0,11	0,54
11 N2	0,01	-0,26	-0,62	-0,05	0,49	0	-0,25	0,43	0,05	-0,11	0,09
12 N2	0,72	0,17	-0,1	0,06	-0,04	0	0,01	0	0,44	0,37	0,18
13 O1	0,4	0,13	-0,1	0,11	-0,12	0,71	-0,15	0	-0,41	-0,27	-0,1
14 O1	0,4	0,13	-0,1	0,11	-0,12	-0,71	-0,15	0	-0,41	-0,27	-0,1

ei :	$\alpha - 1,25\beta$	$\alpha - 1,70\beta$	$\alpha - 2,27\beta$
ni :	0	0	0
1 N1	0,3	-0,2	-0,24
2 C	-0,01	0,42	0,21
3 C	-0,29	-0,51	-0,24
4 N1	0,21	0,25	0,25
5 C	0,38	-0,23	0,33
6 C	-0,4	0,41	-0,29
7 C	0	-0,36	0,26
8 C	0,4	0,2	-0,31
9 C	-0,5	0,02	0,45
10 C	-0,08	-0,02	-0,45
11 N2	0,14	-0,12	0,07
12 N2	0,17	0,21	0,07
13 O1	-0,09	-0,09	-0,03
14 O1	-0,09	-0,09	-0,03

Total energy: $16\alpha + 25,73\beta$

Electronic density matrix:

	1 N1	2 C	3 C	4 N1	5 C	6 C	7 C	8 C	9 C	10 C	11 N2
1 N1	1,15	0,72	0,04	-0,33	0,06	-0,03	-0,18	-0,01	0,56	0,03	0,04
2 C	0,72	0,9	0,56	0	0,04	0,15	0,04	-0,17	-0,07	-0,23	-0,08
3 C	0,04	0,56	0,91	0,67	-0,15	0,03	0,16	-0,01	-0,24	-0,06	-0,02
4 N1	-0,33	0	0,67	1,15	-0,04	-0,16	-0,06	0,07	0,07	0,56	0,09
5 C	0,06	0,04	-0,15	-0,04	1,09	0,68	0,07	-0,34	-0,06	0,56	-0,22
6 C	-0,03	0,15	0,03	-0,16	0,68	0,93	0,56	0,02	-0,21	0,03	0,35
7 C	-0,18	0,04	0,16	-0,06	0,07	0,56	1,01	0,74	0,01	-0,22	-0,15
8 C	-0,01	-0,17	-0,01	0,07	-0,34	0,02	0,74	1	0,55	-0,01	-0,05
9 C	0,56	-0,07	-0,24	0,07	-0,06	-0,21	0,01	0,55	0,96	0,5	0,09
10 C	0,03	-0,23	-0,06	0,56	0,56	0,03	-0,22	-0,01	0,5	0,95	-0,05
11 N2	0,04	-0,08	-0,02	0,09	-0,22	0,35	-0,15	-0,05	0,09	-0,05	1,88
12 N2	-0,04	0,05	0,32	0,04	-0,03	0,01	0,04	0,02	-0,04	-0,05	-0,01
13 O1	0	-0,13	-0,07	-0,16	0,06	-0,02	-0,07	-0,01	0,09	0,04	0,01
14 O1	0	-0,13	-0,07	-0,16	0,06	-0,02	-0,07	-0,01	0,09	0,04	0,01

	12 N2	13 O1	14 O1
1 N1	-0,04	0	0

2 C	0,05	-0,13	-0,13
3 C	0,32	-0,07	-0,07
4 N1	0,04	-0,16	-0,16
5 C	-0,03	0,06	0,06
6 C	0,01	-0,02	-0,02
7 C	0,04	-0,07	-0,07
8 C	0,02	-0,01	-0,01
9 C	-0,04	0,09	0,09
10 C	-0,05	0,04	0,04
11 N2	-0,01	0,01	0,01
12 N2	1,12	0,66	0,66
13 O1	0,66	1,47	-0,53
14 O1	0,66	-0,53	1,47

Atomic charges:

1 N1	-0,15
2 C	0,1
3 C	0,09
4 N1	-0,15
5 C	-0,09
6 C	0,07
7 C	-0,01
8 C	0
9 C	0,04
10 C	0,05
11 N2	0,12
12 N2	0,88
13 O1	-0,47
14 O1	-0,47

Total charge: 0,00

6-Aminoquinoline

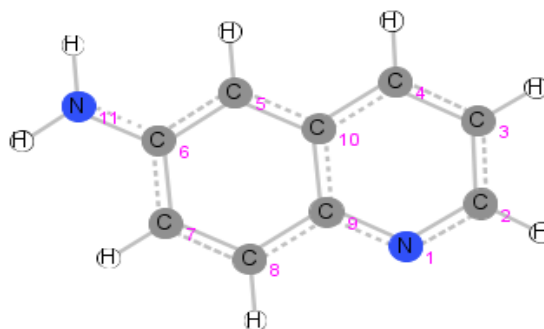
ψ_{tot}

Delocalized structure

19 atoms

11 Hückel atoms

12 π -electrons



Hamiltonian:

	1 N1	2 C	3 C	4 C	5 C	6 C	7 C	8 C	9 C	10 C	11 N2
1 N1	$\alpha + 0,51\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
2 C	$1,02\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
3 C	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
4 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$
5 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$
6 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,89\beta$
7 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
8 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
9 C	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$
10 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$0,00\beta$
11 N2	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,89\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$\alpha + 1,37\beta$

Orbitals:

ϵ_i :	$\alpha + 2,43\beta$	$\alpha + 2,03\beta$	$\alpha + 1,41\beta$	$\alpha + 1,37\beta$	$\alpha + 0,86\beta$	$\alpha + 0,57\beta$	$\alpha - 0,55\beta$	$\alpha - 1,05\beta$	$\alpha - 1,26\beta$	$\alpha - 1,65\beta$	$\alpha - 2,29\beta$
n_i :	2	2	2	2	2	2	0	0	0	0	0
1 N1	-0,34	0,35	0,07	-0,48	-0,26	0,26	0,43	-0,09	-0,32	0,21	-0,23
2 C	-0,22	0,28	-0,28	-0,38	0,2	0,25	-0,33	0,47	0,13	-0,4	0,2
3 C	-0,19	0,22	-0,46	-0,03	0,43	-0,12	-0,26	-0,41	0,17	0,43	-0,22

4 C	-0,24	0,17	-0,37	0,34	0,17	-0,32	0,47	-0,04	-0,34	-0,32	0,3
5 C	-0,3	-0,16	-0,05	0,36	-0,13	0,52	-0,35	-0,09	-0,41	0,23	0,33
6 C	-0,32	-0,45	-0,01	0	0,17	0,36	0,19	-0,36	0,26	-0,46	-0,28
7 C	-0,25	-0,22	0,33	-0,03	0,54	0,04	0,32	0,35	0,16	0,41	0,26
8 C	-0,28	0,01	0,47	-0,04	0,3	-0,34	-0,37	-0,01	-0,47	-0,22	-0,31
9 C	-0,42	0,24	0,34	-0,02	-0,29	-0,24	-0,12	-0,34	0,43	-0,05	0,44
10 C	-0,4	0,12	-0,06	0,49	-0,28	-0,06	0	0,45	0,26	0,09	-0,47
11 N2	-0,27	-0,61	-0,33	-0,37	-0,3	-0,41	-0,09	0,13	-0,09	0,14	0,07

Total energy: $12\alpha + 17,34\beta$

Electronic density matrix:

	1 N1	2 C	3 C	4 C	5 C	6 C	7 C	8 C	9 C	10 C	11 N2
1 N1	1,21	0,71	-0,03	-0,35	0,08	0,01	-0,17	-0,03	0,55	-0,01	0,02
2 C	0,71	0,91	0,61	0,06	0,01	0,15	0,06	-0,16	-0,08	-0,24	-0,08
3 C	-0,03	0,61	1,01	0,72	-0,17	0	0,15	0,01	-0,24	0	0
4 C	-0,35	0,06	0,72	0,95	-0,01	-0,16	-0,06	0,08	0,07	0,55	0,08
5 C	0,08	0,01	-0,17	-0,01	1,08	0,68	0,07	-0,35	-0,06	0,56	-0,22
6 C	0,01	0,15	0	-0,16	0,68	0,94	0,57	0,01	-0,22	0,01	0,34
7 C	-0,17	0,06	0,15	-0,06	0,07	0,57	1,02	0,73	0	-0,23	-0,15
8 C	-0,03	-0,16	0,01	0,08	-0,35	0,01	0,73	1,01	0,55	0	-0,05
9 C	0,55	-0,08	-0,24	0,07	-0,06	-0,22	0	0,55	0,98	0,52	0,1
10 C	-0,01	-0,24	0	0,55	0,56	0,01	-0,23	0	0,52	1	-0,03
11 N2	0,02	-0,08	0	0,08	-0,22	0,34	-0,15	-0,05	0,1	-0,03	1,89

Atomic charges:

1 N1	-0,21
2 C	0,09
3 C	-0,01
4 C	0,05
5 C	-0,08
6 C	0,06
7 C	-0,02
8 C	-0,01
9 C	0,02
10 C	0
11 N2	0,11

Total charge: 0,00

7-Aminoquinoline

ψ_{tot}

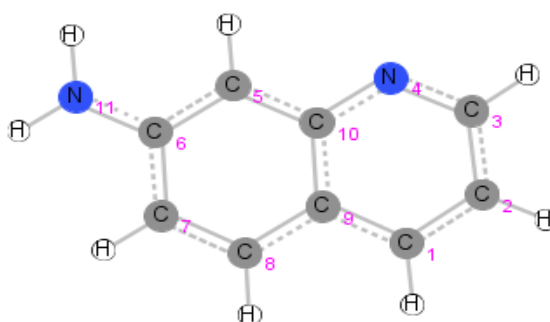
Delocalized structure

19 atoms

11 Hückel atoms

12 π -electrons

Charge totale : 0



Hamiltonian:

	1 C	2 C	3 C	4 N1	5 C	6 C	7 C	8 C	9 C	10 C	11 N2
1 C	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
2 C	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
3 C	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
4 N1	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$\alpha + 0,51\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$0,00\beta$
5 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$
6 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,89\beta$
7 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
8 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$
9 C	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$
10 C	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,02\beta$	$1,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$0,00\beta$	$1,00\beta$	$\alpha + 0,00\beta$	$0,00\beta$

11 N2 0,00β 0,00β 0,00β 0,00β 0,00β 0,89β 0,00β 0,00β 0,00β 0,00β 0,00β α + 1,37β

Orbitals:

ε _i :	α + 2,43β	α + 2,02β	α + 1,50β	α + 1,29β	α + 0,84β	α + 0,60β	α - 0,56β	α - 1,05β	α - 1,25β	α - 1,65β	α - 2,29β
ni :	2	2	2	2	2	2	0	0	0	0	0
1 C	-0,23	0,21	0,22	-0,44	-0,27	-0,22	-0,49	0,09	-0,29	0,34	0,3
2 C	-0,19	0,24	-0,09	-0,53	0,1	-0,34	0,21	-0,46	0,02	-0,43	-0,22
3 C	-0,22	0,28	-0,36	-0,25	0,35	0,02	0,37	0,39	0,27	0,38	0,2
4 N1	-0,35	0,32	-0,44	0,21	0,2	0,34	-0,41	0,04	-0,35	-0,19	-0,24
5 C	-0,31	-0,13	-0,07	0,34	-0,12	-0,55	0,32	0,07	-0,41	0,27	-0,32
6 C	-0,33	-0,45	-0,05	0,03	0,19	-0,34	-0,24	0,38	0,17	-0,48	0,28
7 C	-0,24	-0,23	0,29	0,02	0,57	0	-0,29	-0,35	0,24	0,39	-0,26
8 C	-0,26	-0,02	0,48	-0,01	0,29	0,34	0,4	-0,01	-0,47	-0,16	0,32
9 C	-0,38	0,19	0,43	-0,03	-0,33	0,2	0,06	0,36	0,35	-0,12	-0,46
10 C	-0,43	0,19	-0,06	0,41	-0,29	0,01	0,06	-0,46	0,33	0,02	0,45
11 N2	-0,28	-0,61	-0,32	-0,36	-0,33	0,39	0,11	-0,14	-0,06	0,14	-0,07

Total energy: 12α + 17,35β

Electronic density matrix:

	1 C	2 C	3 C	4 N1	5 C	6 C	7 C	8 C	9 C	10 C	11 N2
1 C	0,93	0,72	0,08	-0,34	0,07	-0,04	-0,18	0,03	0,56	0,05	0,04
2 C	0,72	1,02	0,61	-0,05	0,05	0,14	0,02	-0,16	-0,01	-0,23	-0,08
3 C	0,08	0,61	0,9	0,7	-0,16	0,04	0,16	-0,03	-0,25	-0,06	-0,02
4 N1	-0,34	-0,05	0,7	1,23	-0,07	-0,15	-0,01	0,08	0	0,54	0,08
5 C	0,07	0,05	-0,16	-0,07	1,1	0,68	0,05	-0,35	-0,04	0,57	-0,22
6 C	-0,04	0,14	0,04	-0,15	0,68	0,93	0,56	0,03	-0,22	0,03	0,35
7 C	-0,18	0,02	0,16	-0,01	0,05	0,56	1,04	0,74	-0,03	-0,23	-0,15
8 C	0,03	-0,16	-0,03	0,08	-0,35	0,03	0,74	0,98	0,55	-0,02	-0,06
9 C	0,56	-0,01	-0,25	0	-0,04	-0,22	-0,03	0,55	1,02	0,51	0,1
10 C	0,05	-0,23	-0,06	0,54	0,57	0,03	-0,23	-0,02	0,51	0,96	-0,05
11 N2	0,04	-0,08	-0,02	0,08	-0,22	0,35	-0,15	-0,06	0,1	-0,05	1,88

Atomic charges:

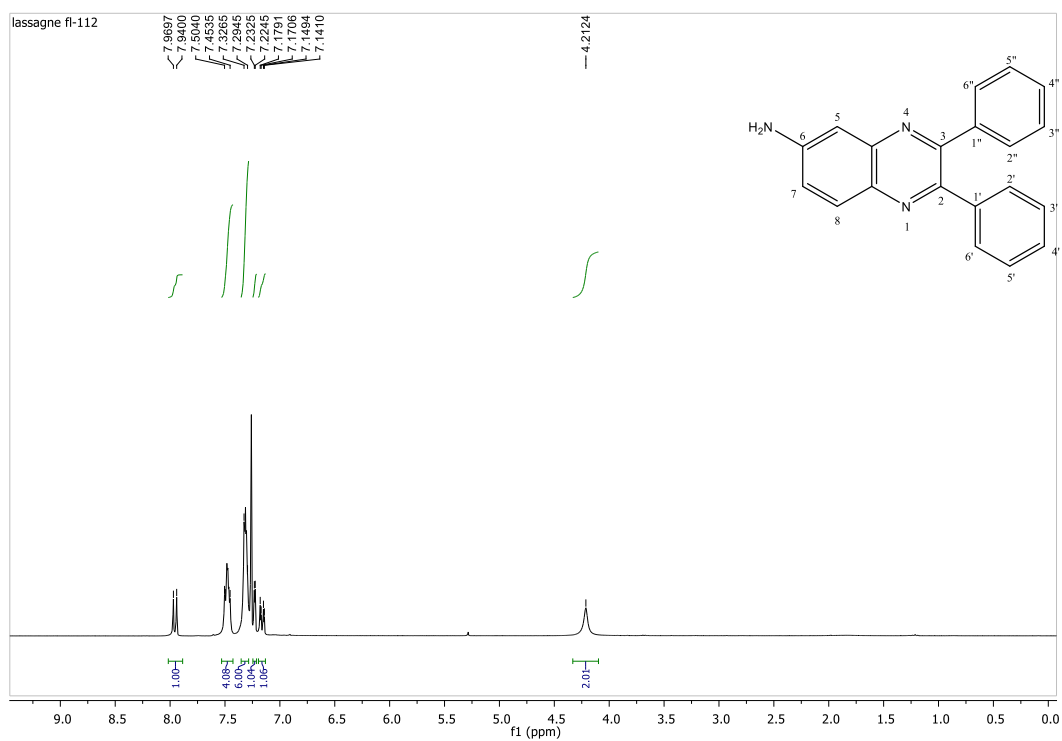
1 C	0,07
2 C	-0,02
3 C	0,1
4 N1	-0,23
5 C	-0,1
6 C	0,07
7 C	-0,04
8 C	0,02
9 C	-0,02
10 C	0,04
11 N2	0,12

Total charge: 0,00

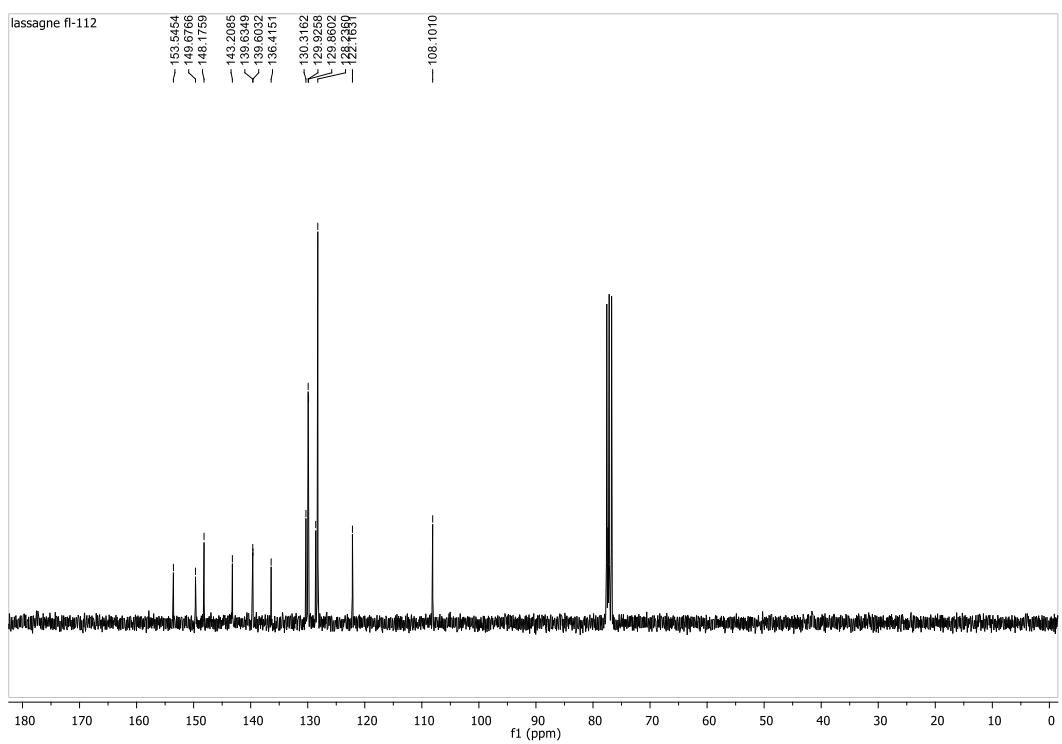
NMR spectra

6-Amino-2,3-diphenylquinoxaline (2b)

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)

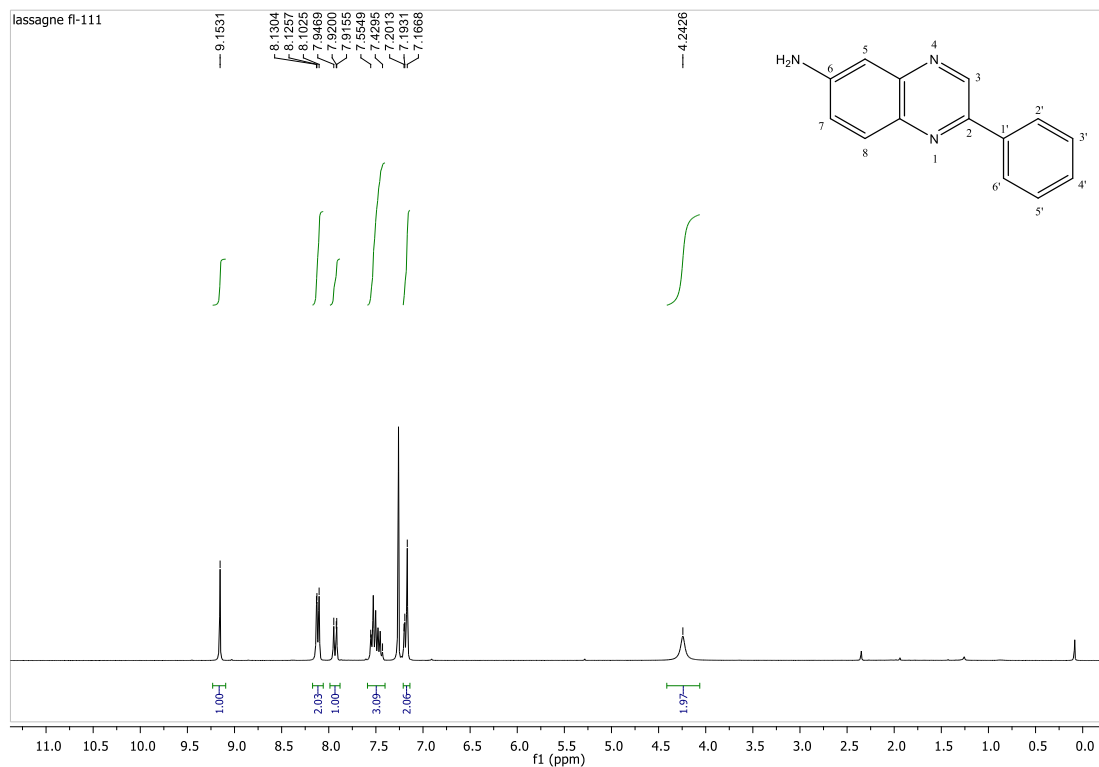


^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3)

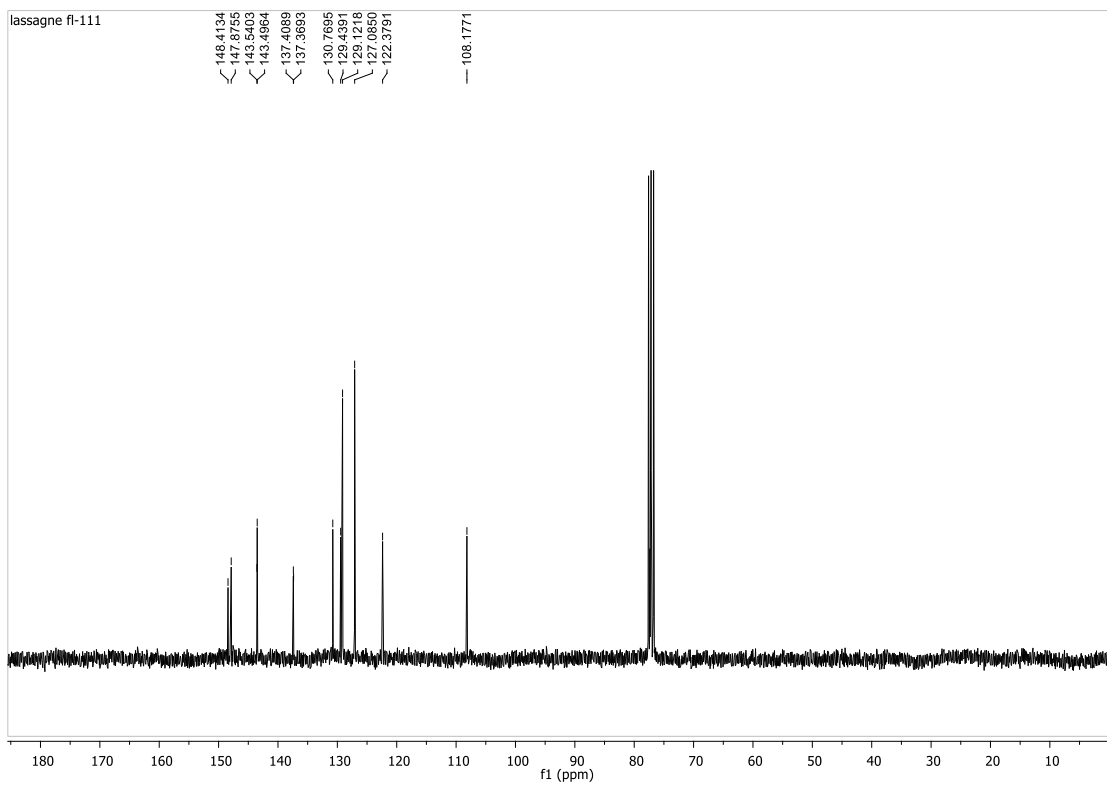


6-Amino-2-phenylquinoxaline (2c)

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)

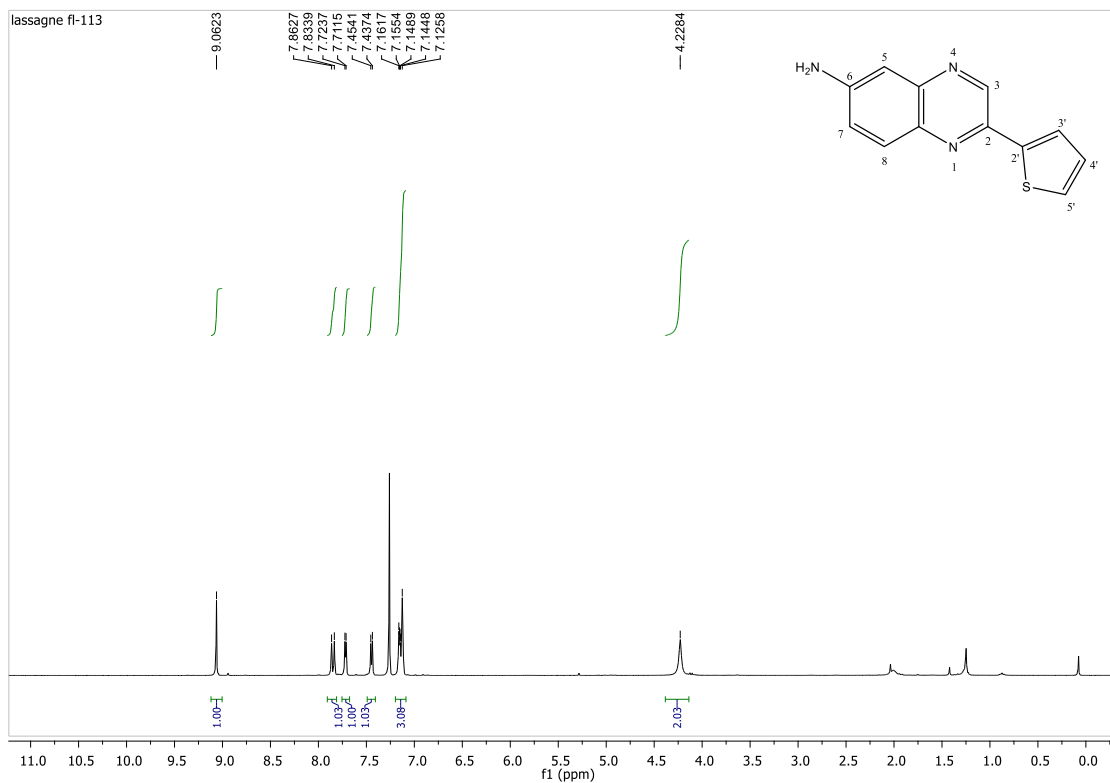


^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3)

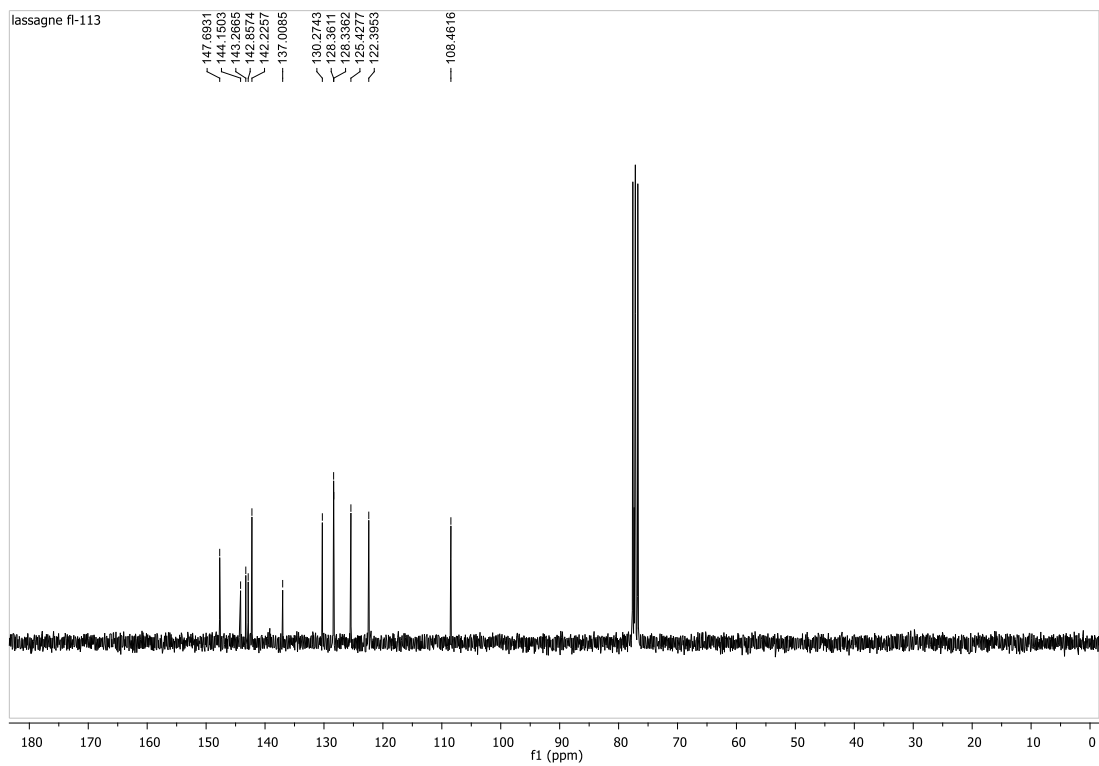


6-Amino-2-(2-thienyl)quinoxaline (2d)

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)

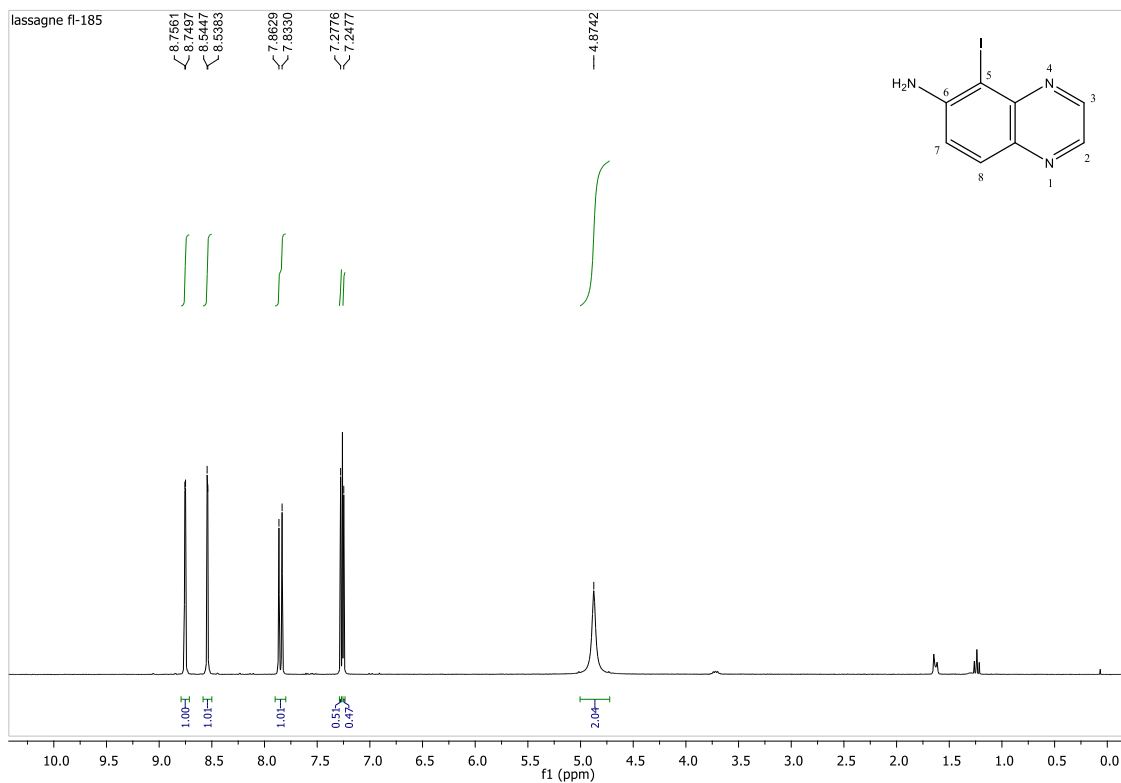


^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3)

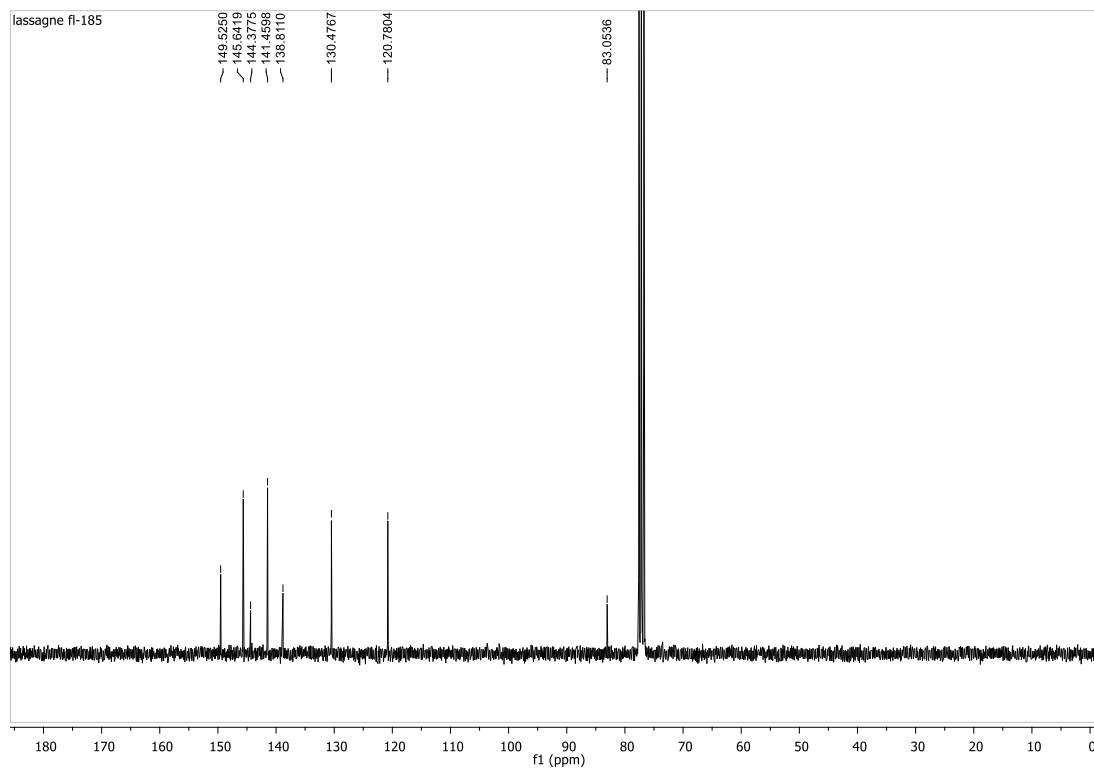


6-Amino-5-iodoquinoxaline (3a)

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)

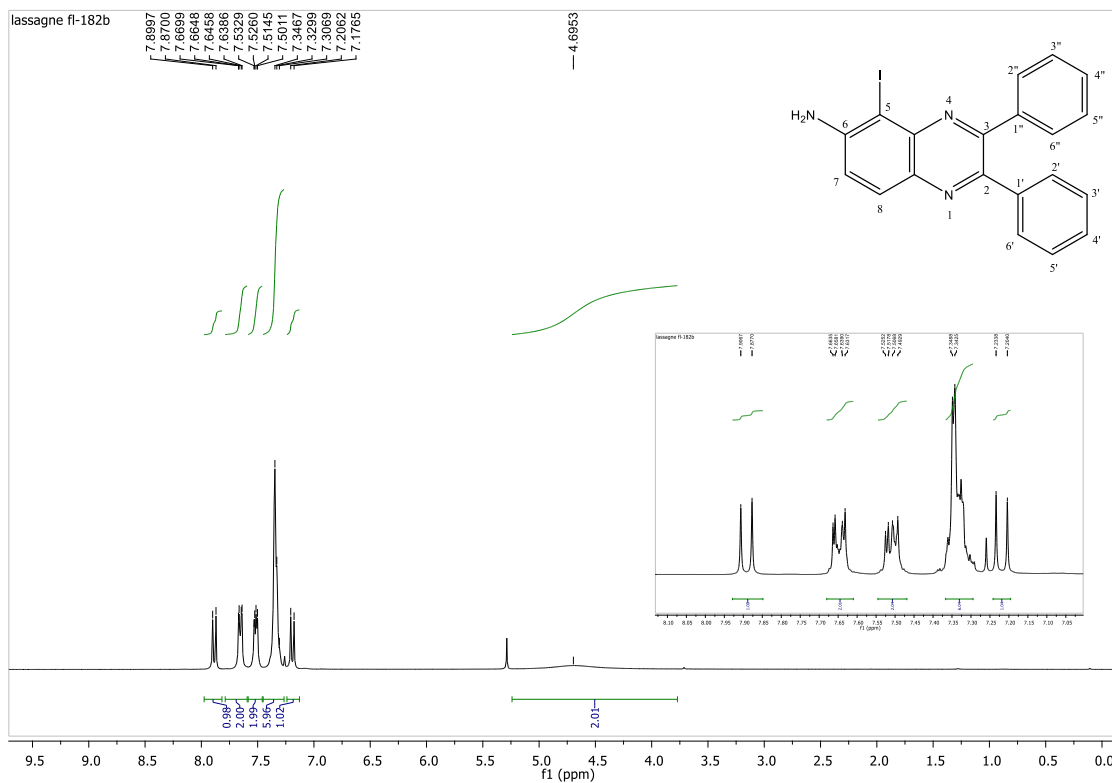


^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3)

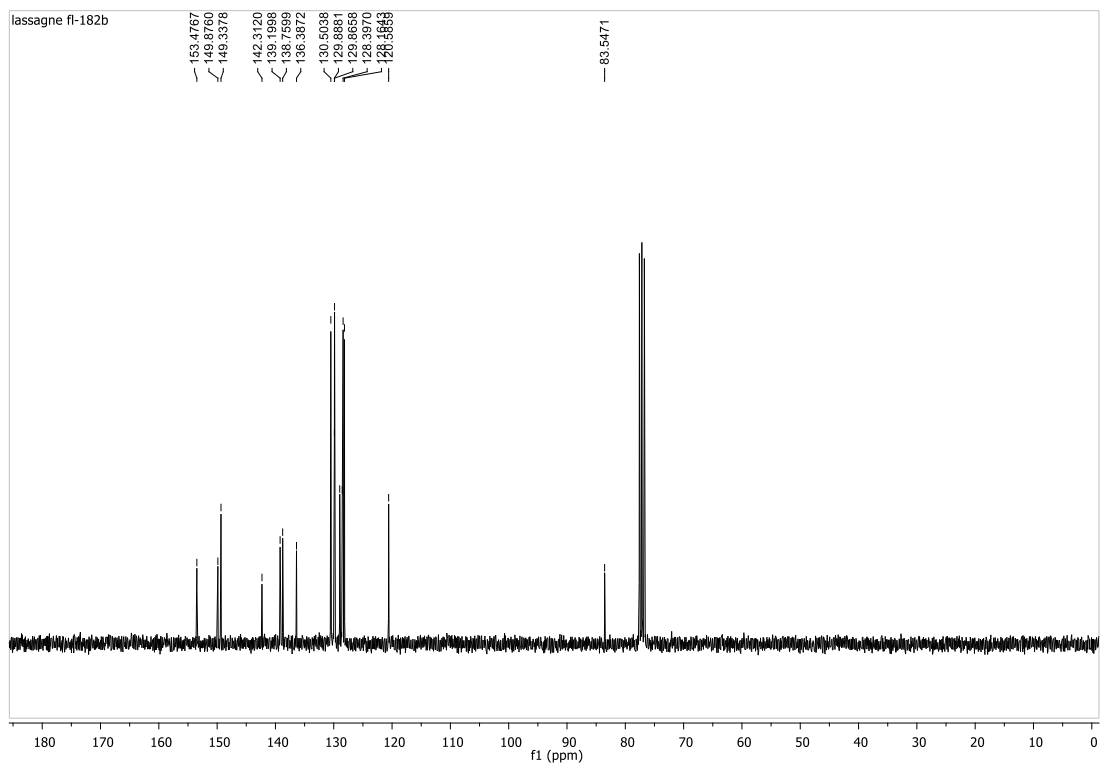


6-Amino-5-iodo-2,3-diphenylquinoxaline (3b)

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)

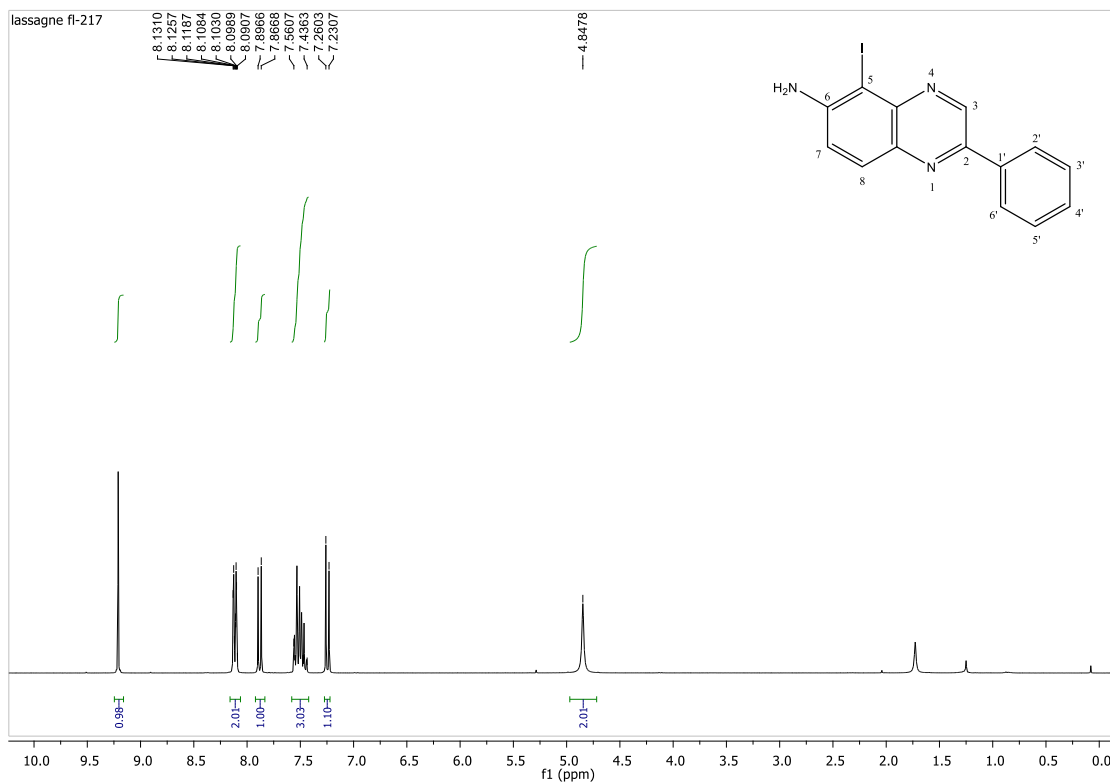


^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3)

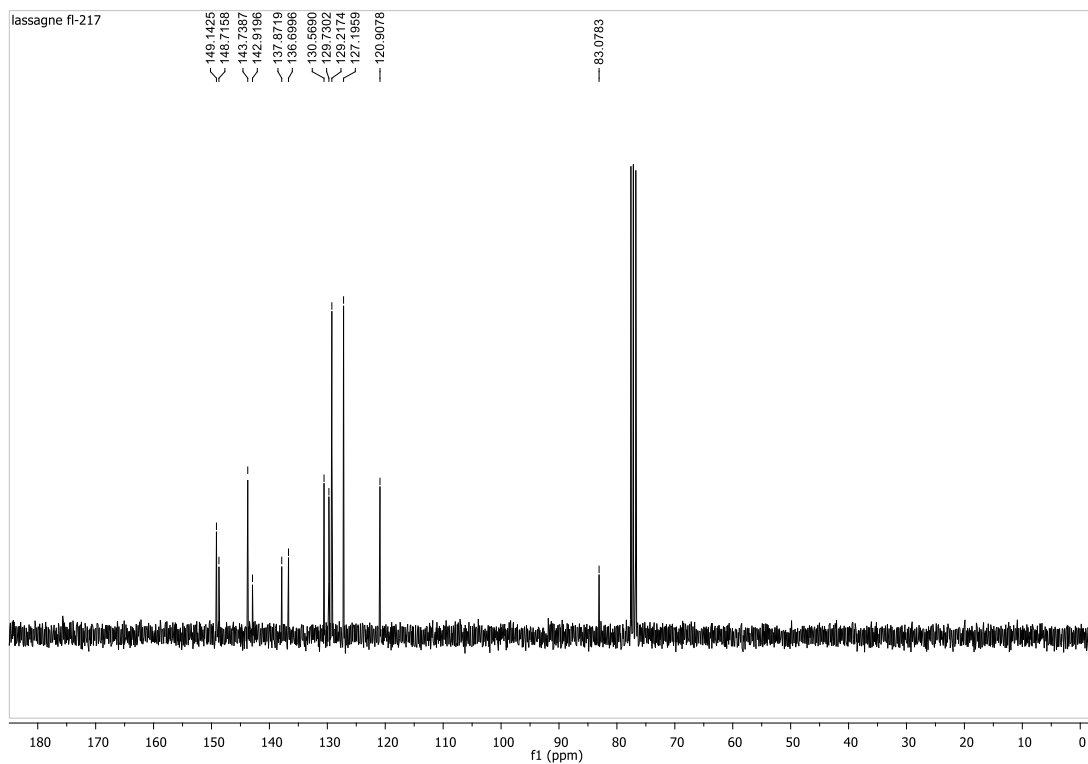


6-Amino-5-iodo-2-phenylquinoxaline (3c)

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)

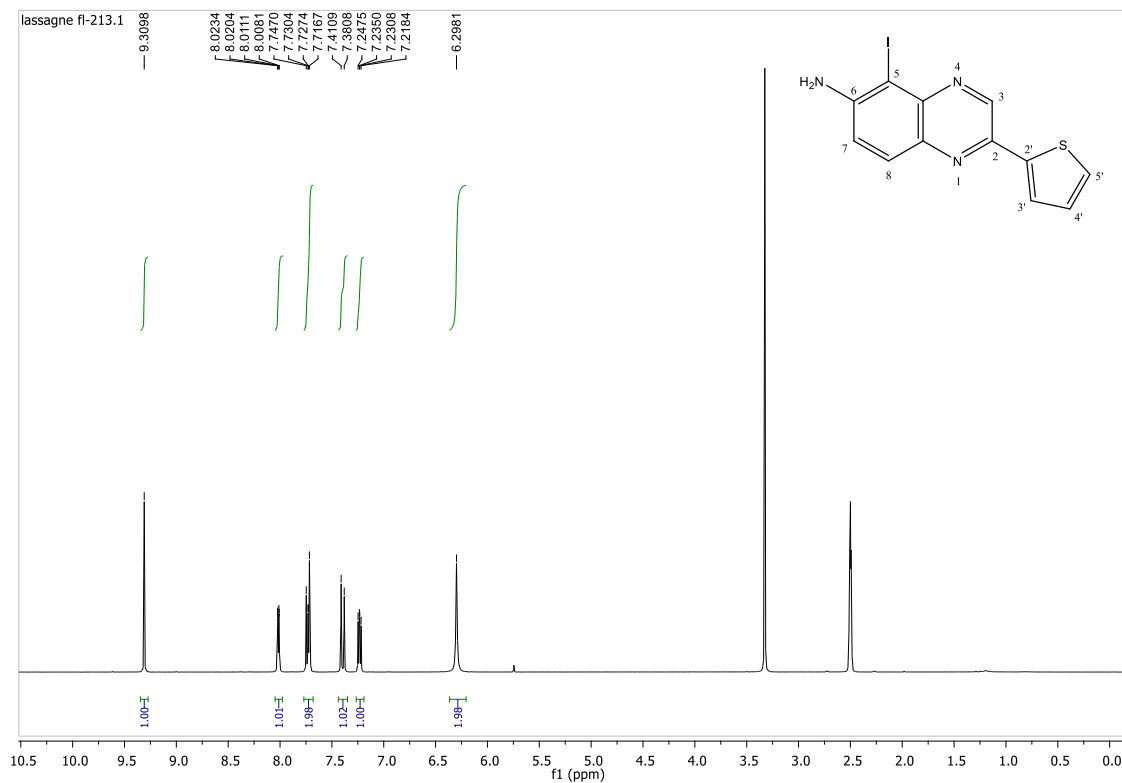


^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3)

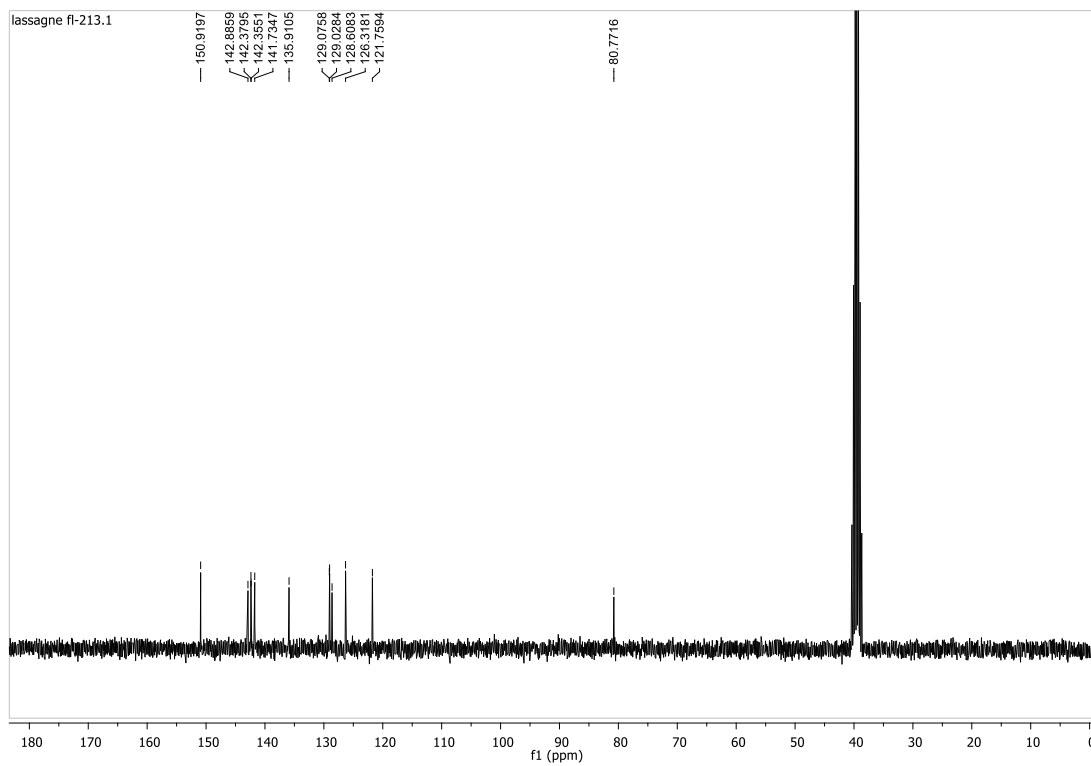


6-Amino-5-iodo-2-(2-thienyl)quinoxaline (3d)

^1H NMR (300 MHz, $(\text{CD}_3)_2\text{SO}$)

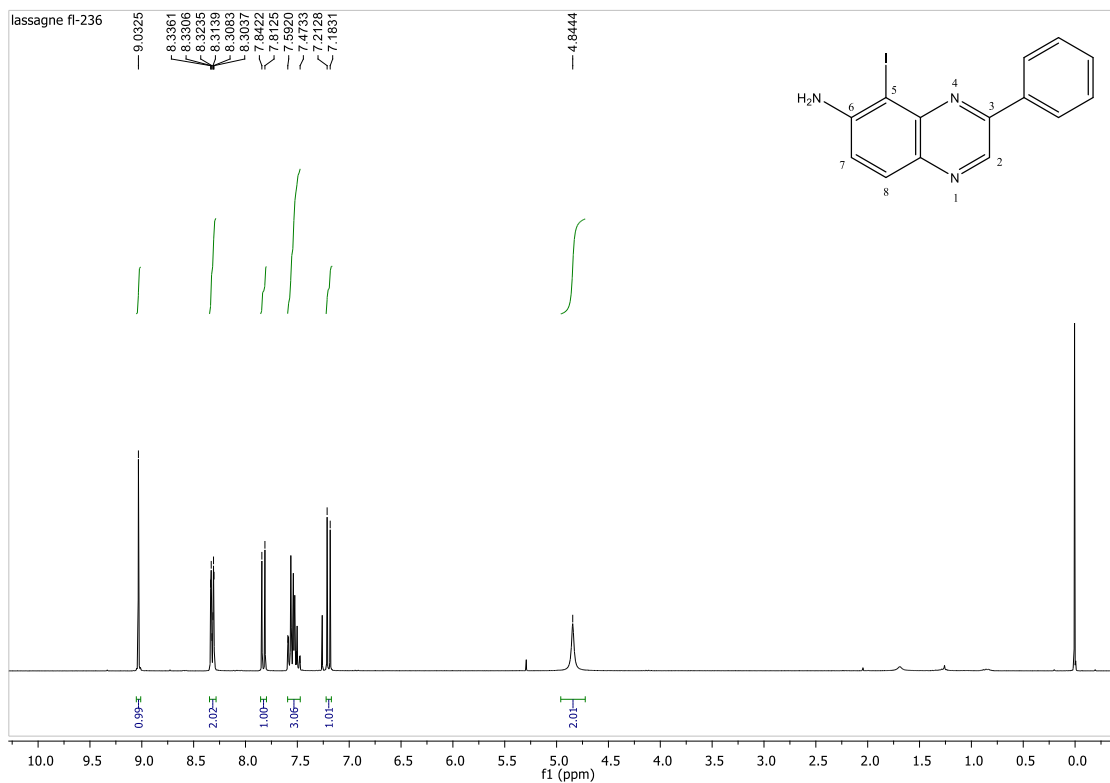


^{13}C NMR (75 MHz, $(\text{CD}_3)_2\text{SO}$)

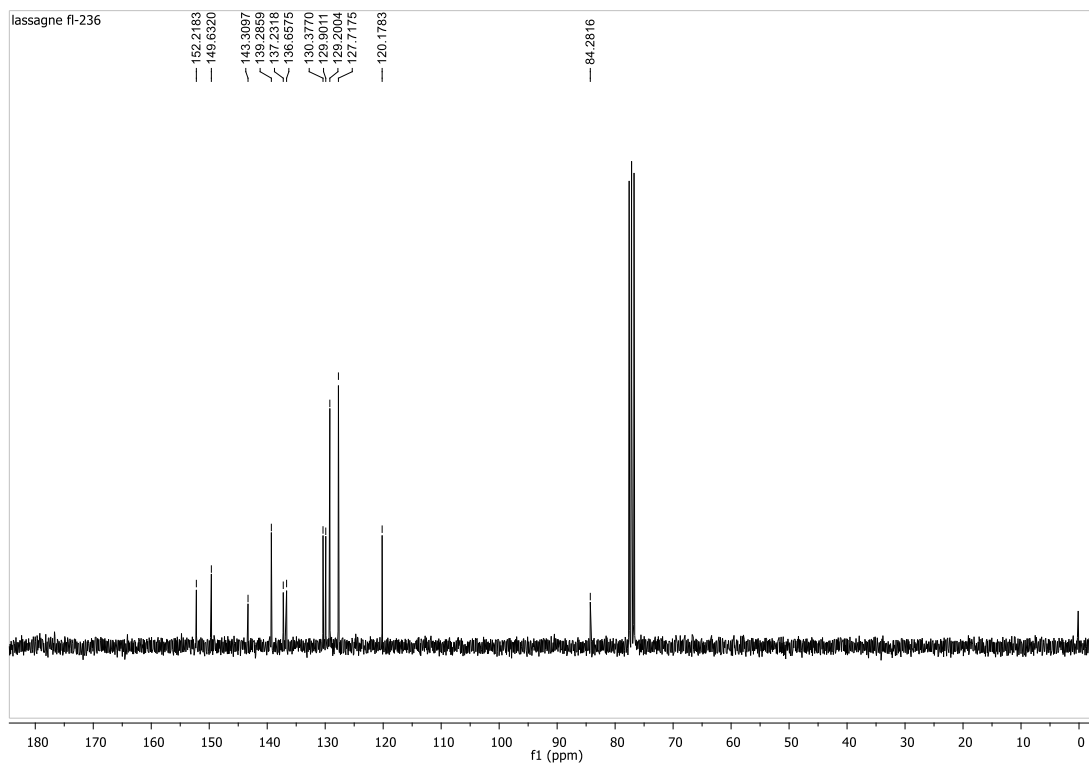


6-Amino-5-iodo-3-phenylquinoxaline (3g)

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)

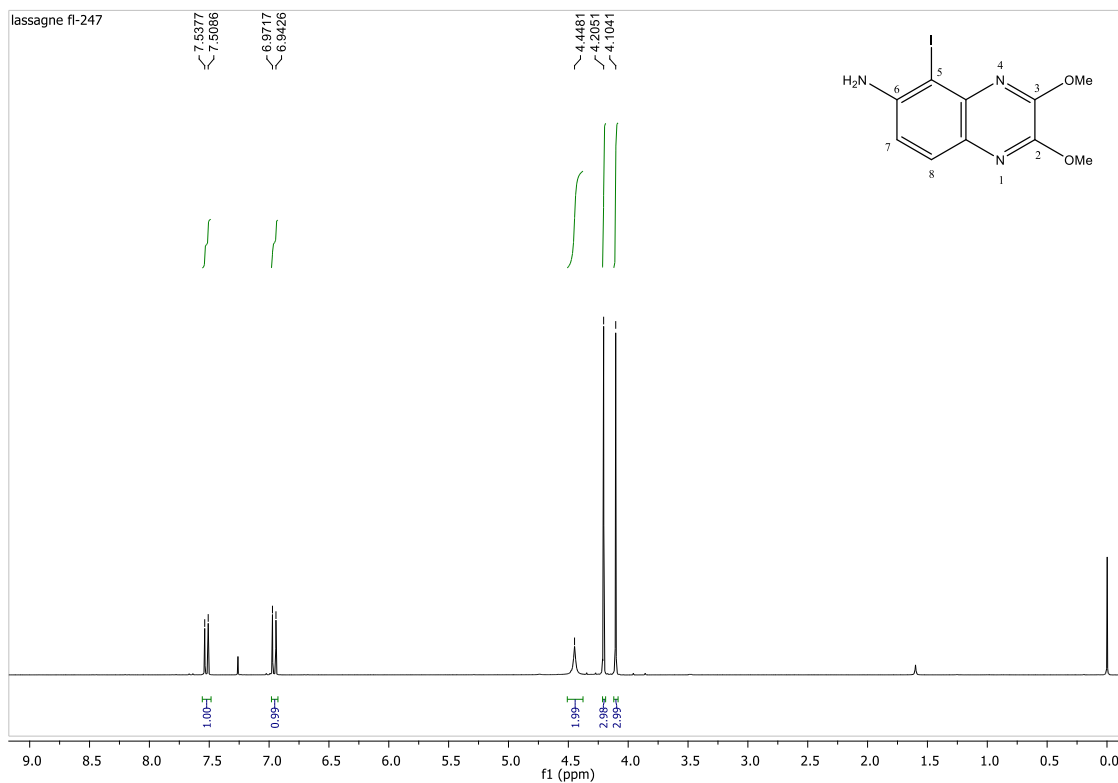


^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3)

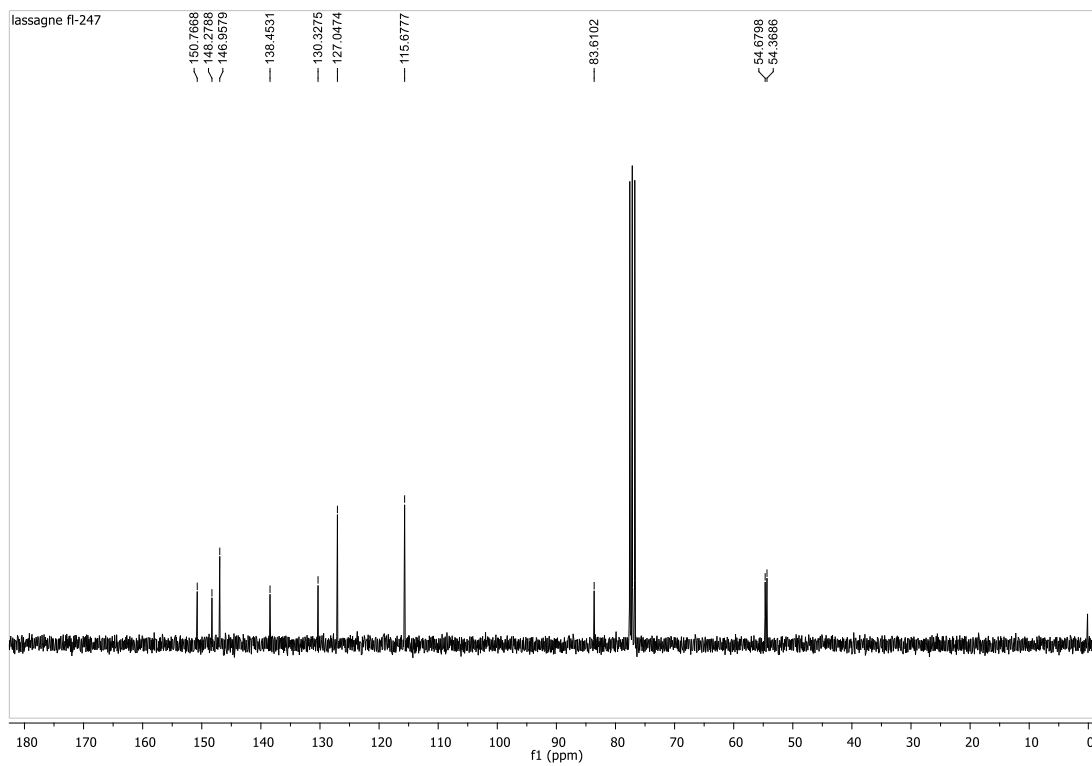


6-Amino-5-iodo-2,3-dimethoxyquinoline (3h)

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)

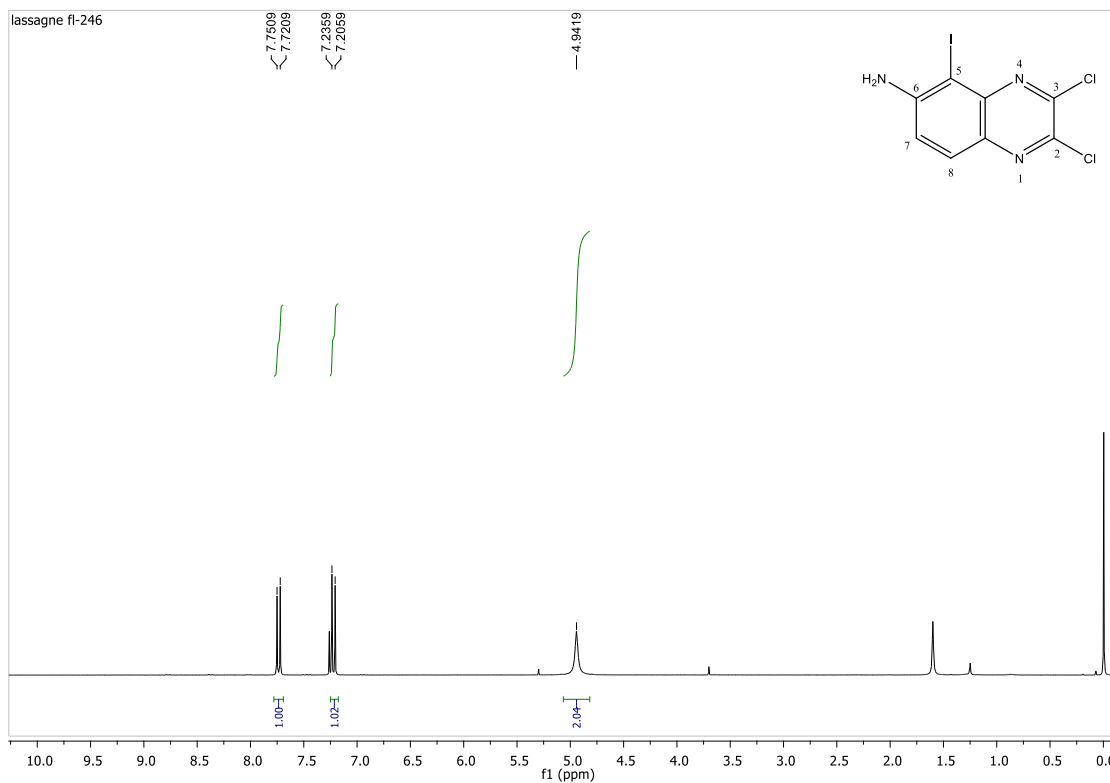


^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3)

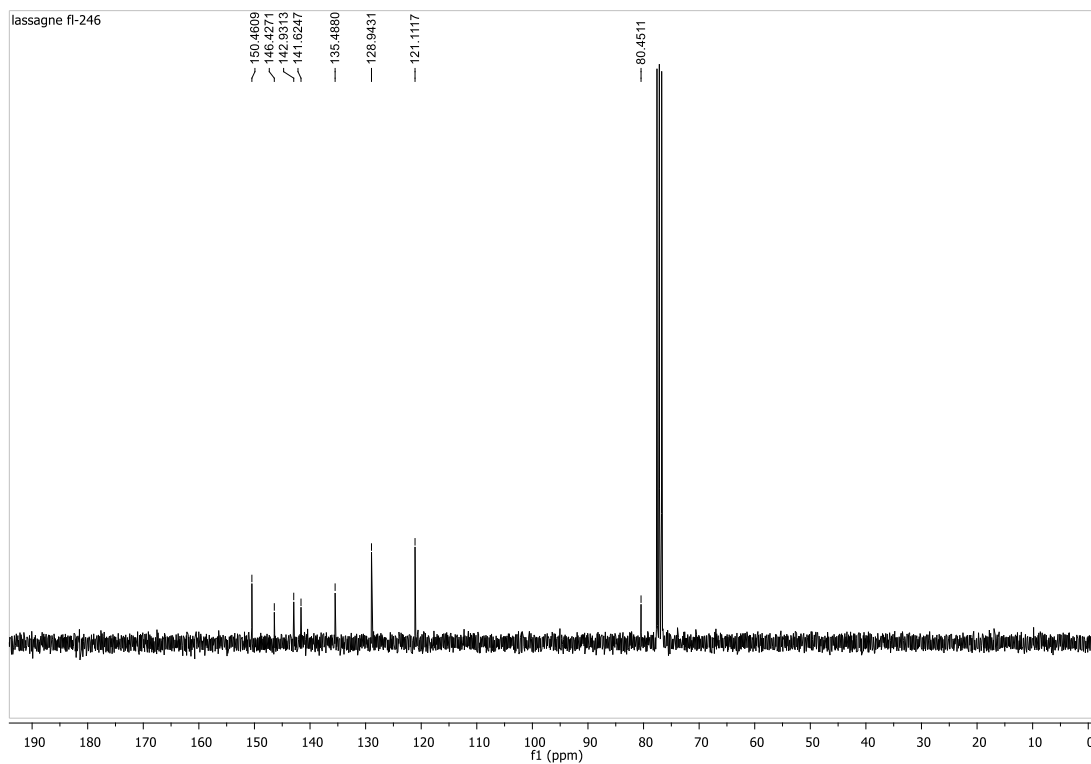


6-Amino-2,3-dichloro-5-iodoquinoxaline (3i)

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)

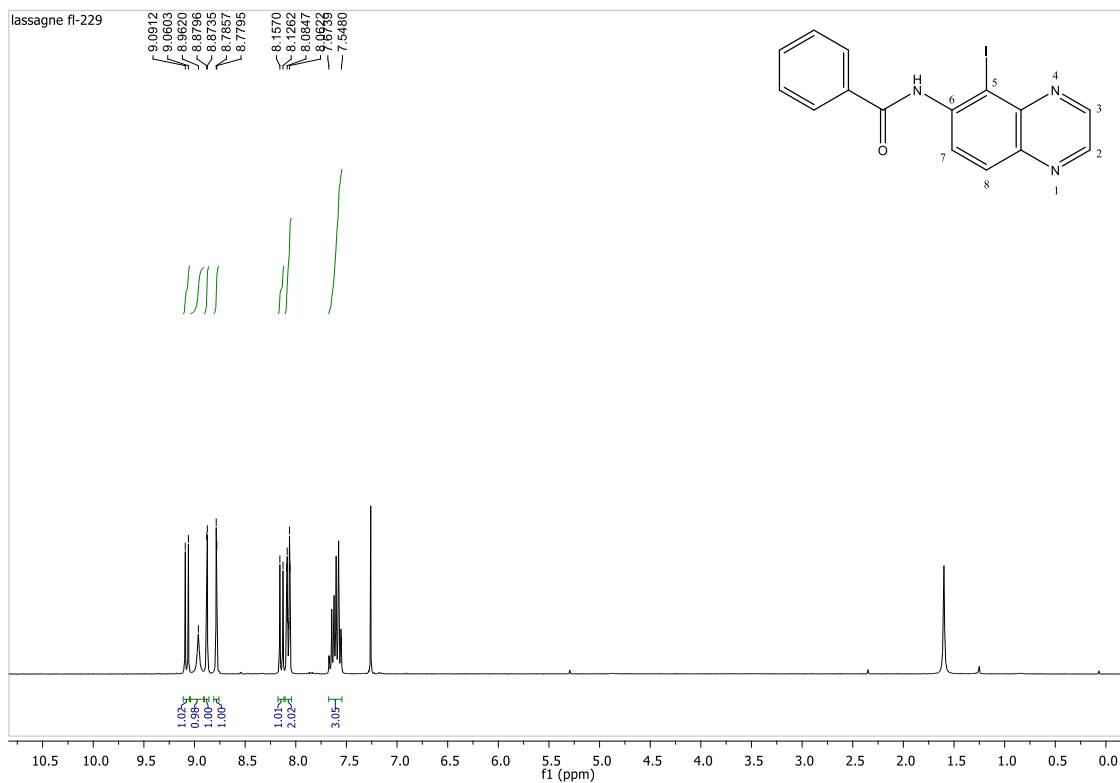


^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3)

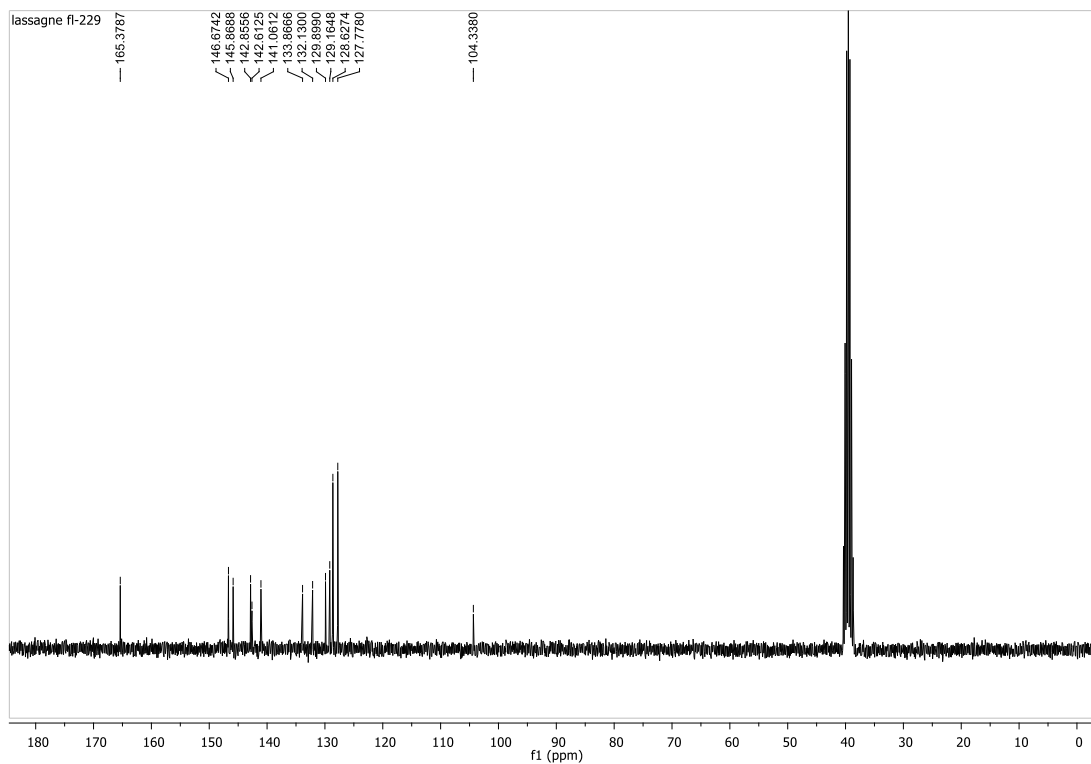


6-(Benzoylamino)-5-iodoquinoxaline (4a)

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)

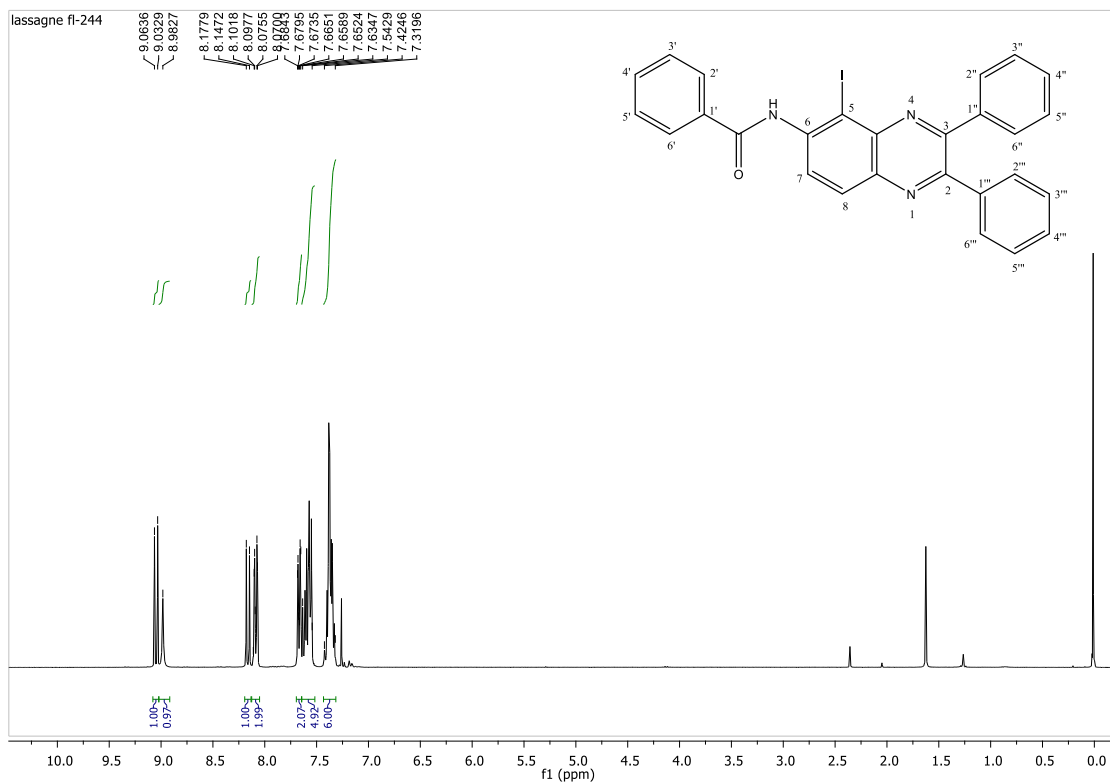


^{13}C NMR (75 MHz, $(\text{CD}_3)_2\text{SO}$)

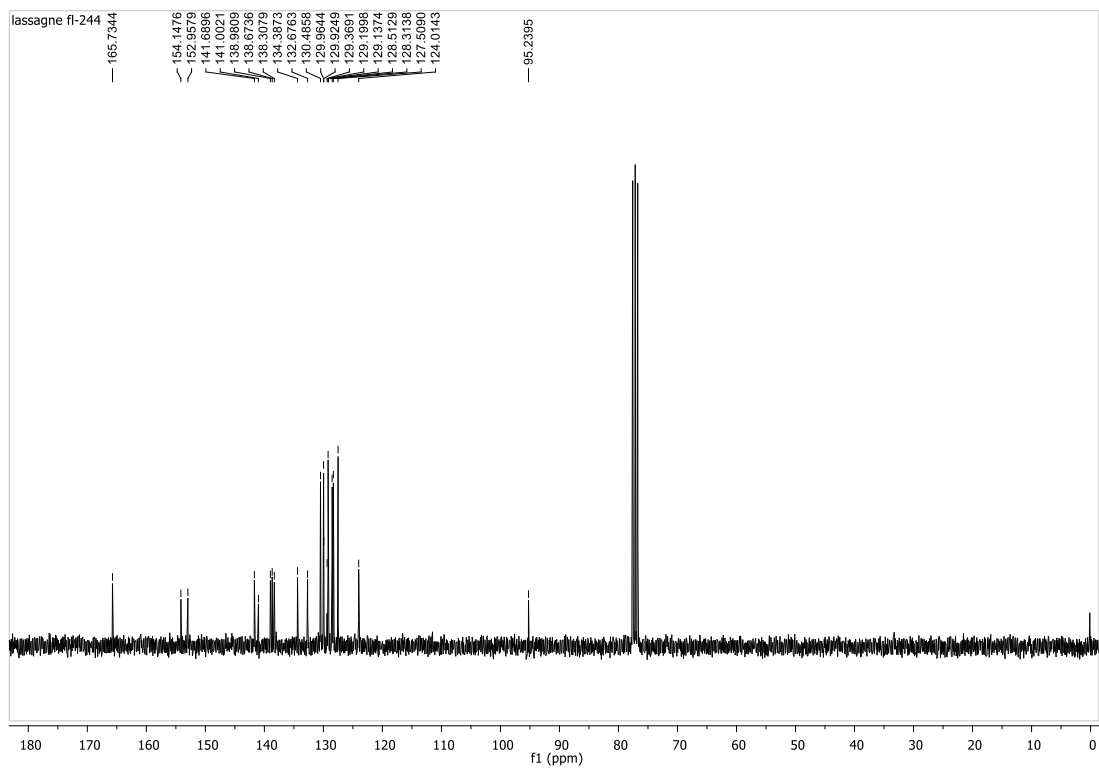


6-(Benzoylamino)-5-iodo-2,3-diphenylquinoxaline (4b)

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)

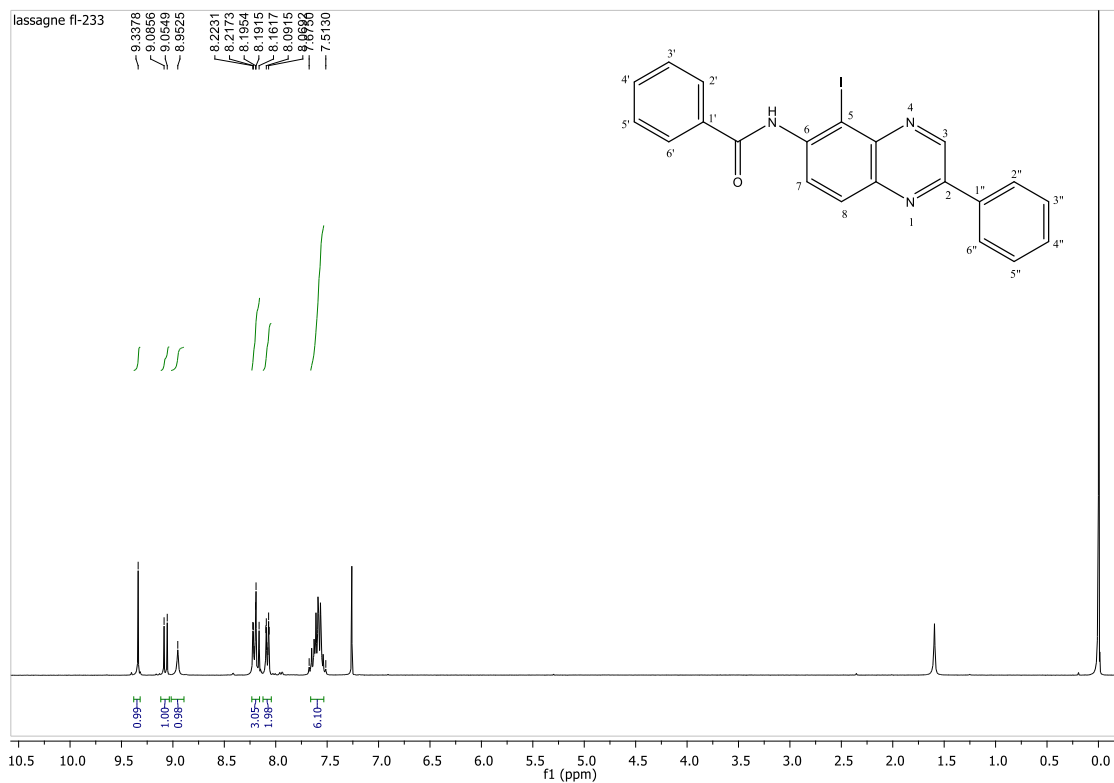


^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3)

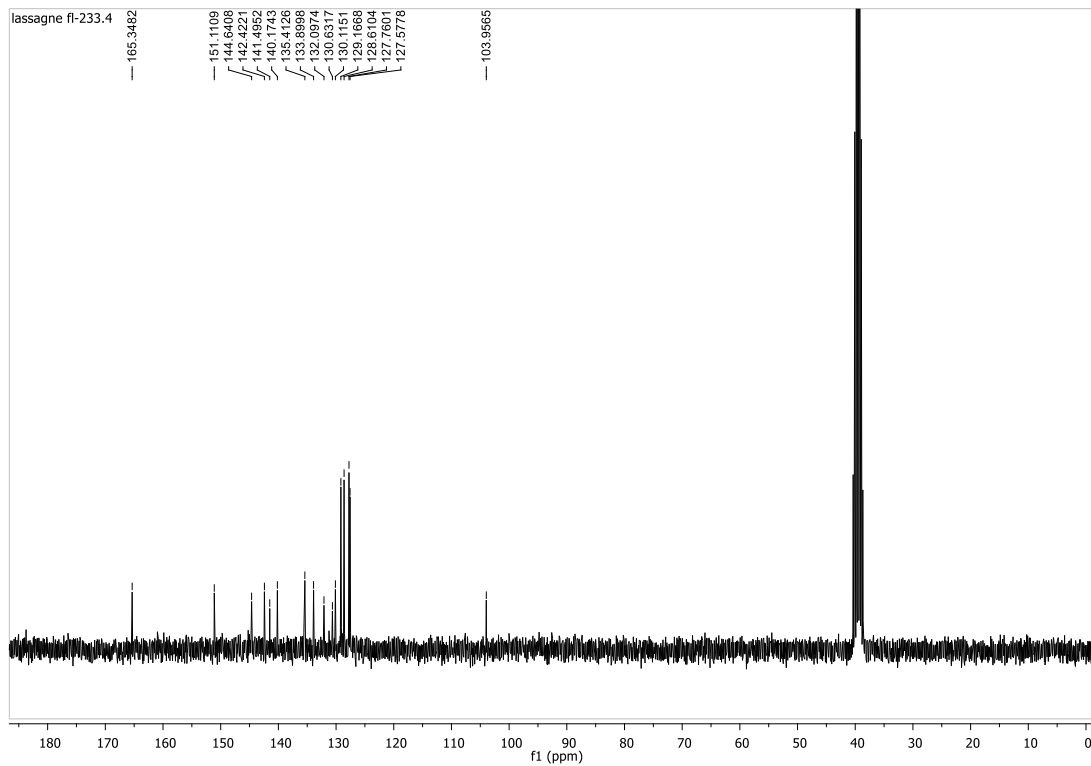


6-(Benzoylamino)-5-iodo-2-phenylquinoxaline (4c)

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)

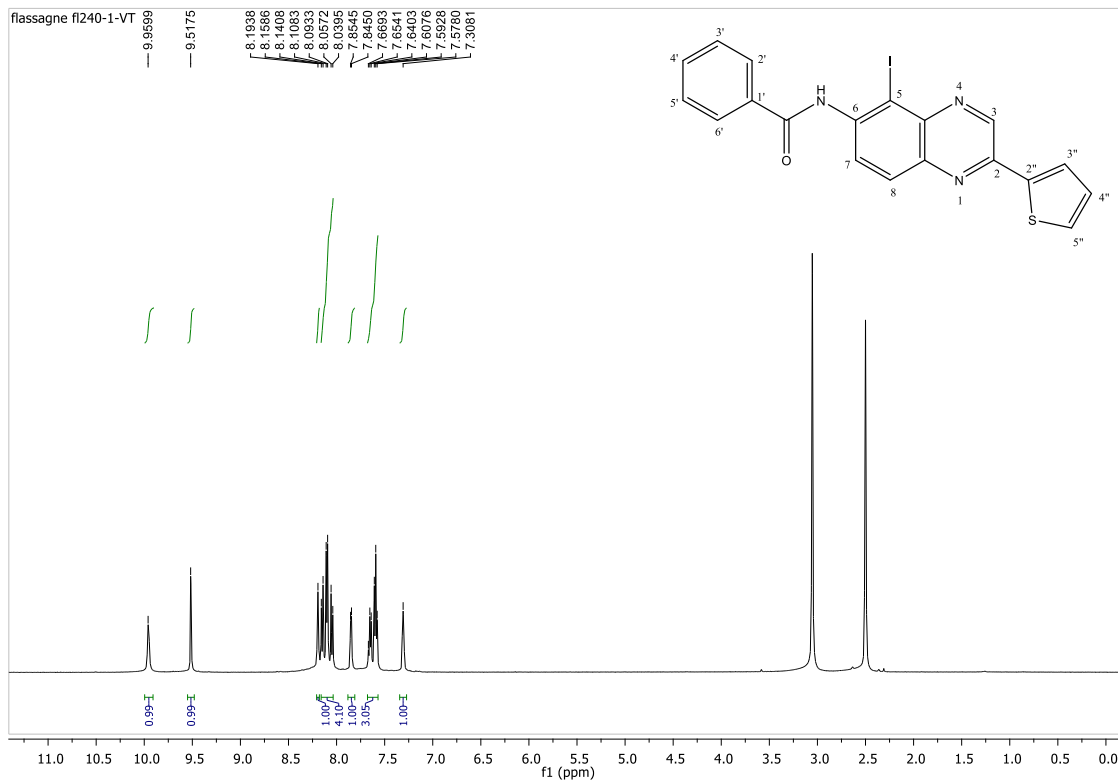


^{13}C NMR (75 MHz, $(\text{CD}_3)_2\text{SO}$)

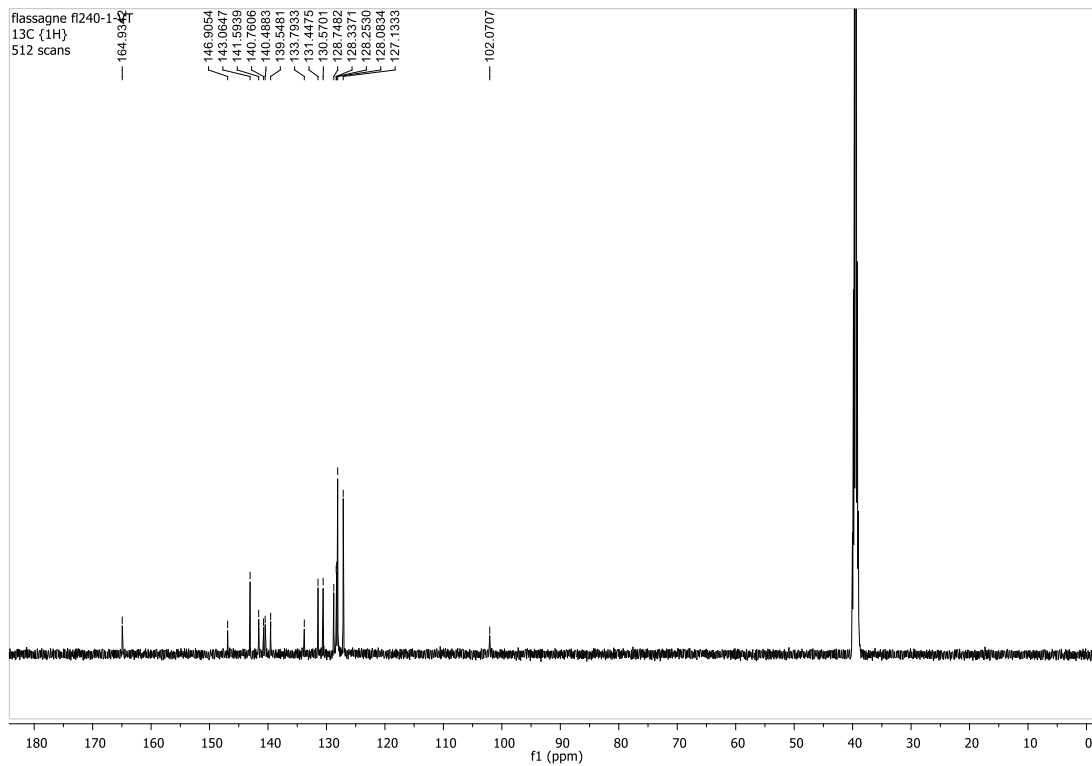


6-(Benzoylamino)-5-iodo-2-(2-thienyl)quinoxaline (4d)

^1H NMR (500 MHz, $(\text{CD}_3)_2\text{SO}$, 358 K)

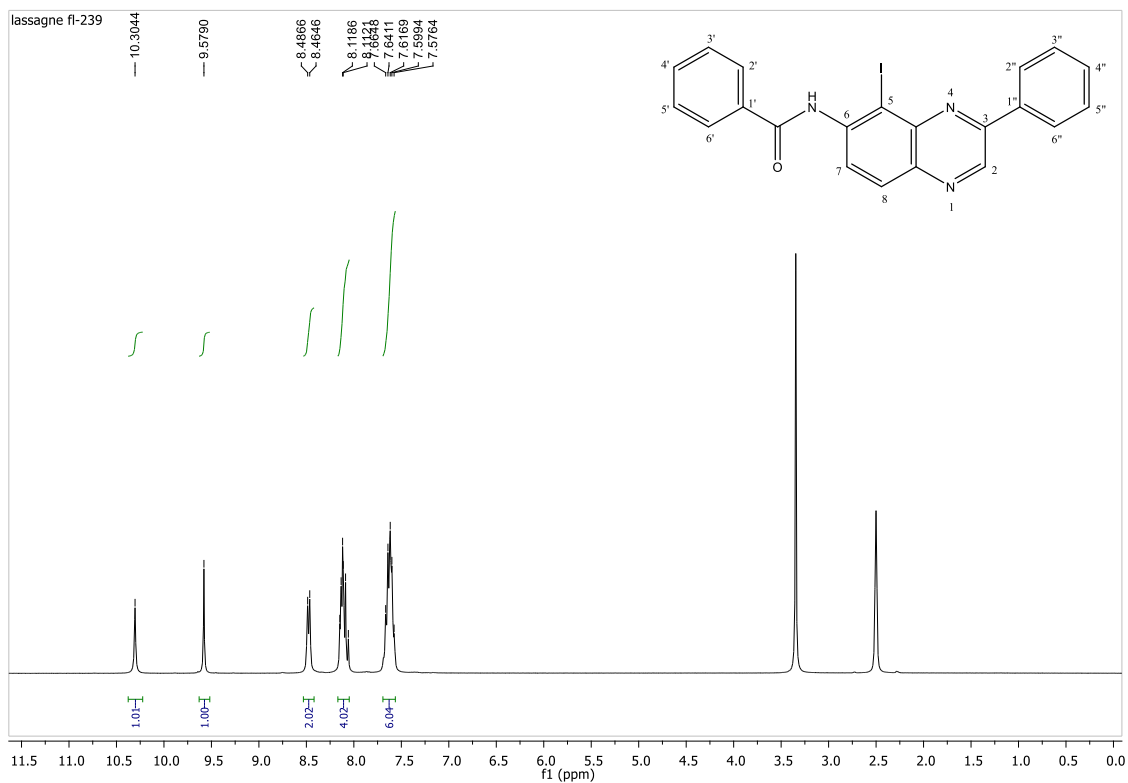


^{13}C NMR (126 MHz, $(\text{CD}_3)_2\text{SO}$, 358 K)

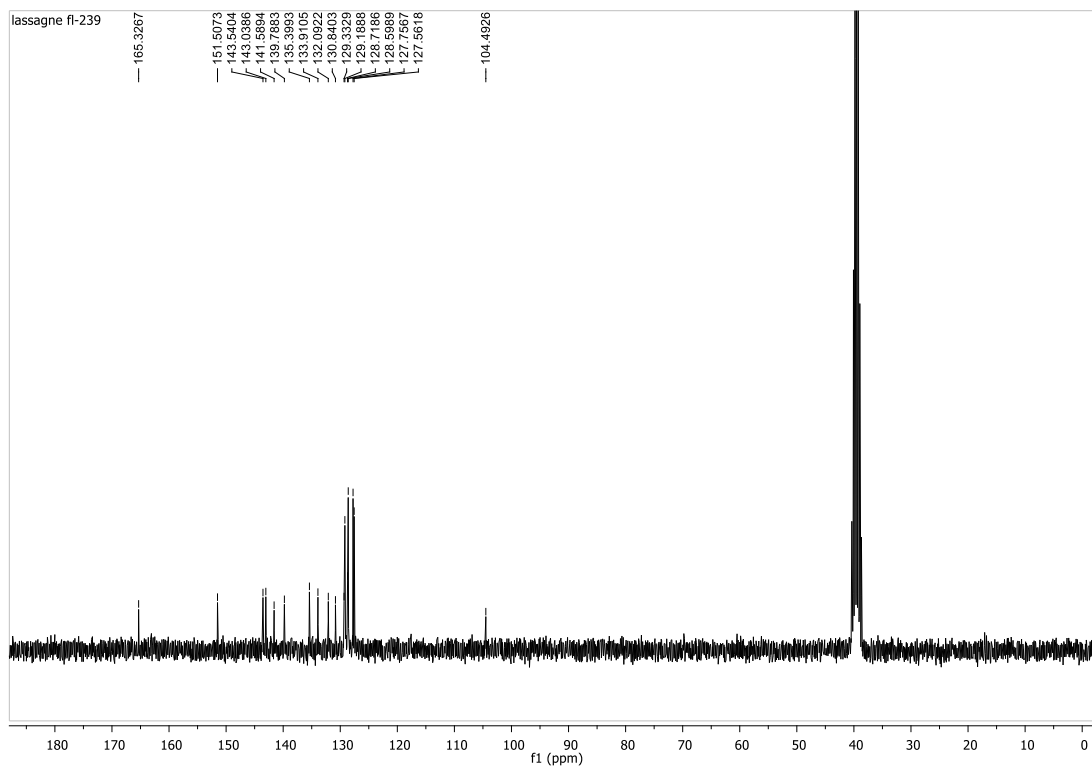


6-(Benzoylamino)-5-iodo-3-phenylquinoxaline (4g)

^1H NMR (300 MHz, $(\text{CD}_3)_2\text{SO}$)

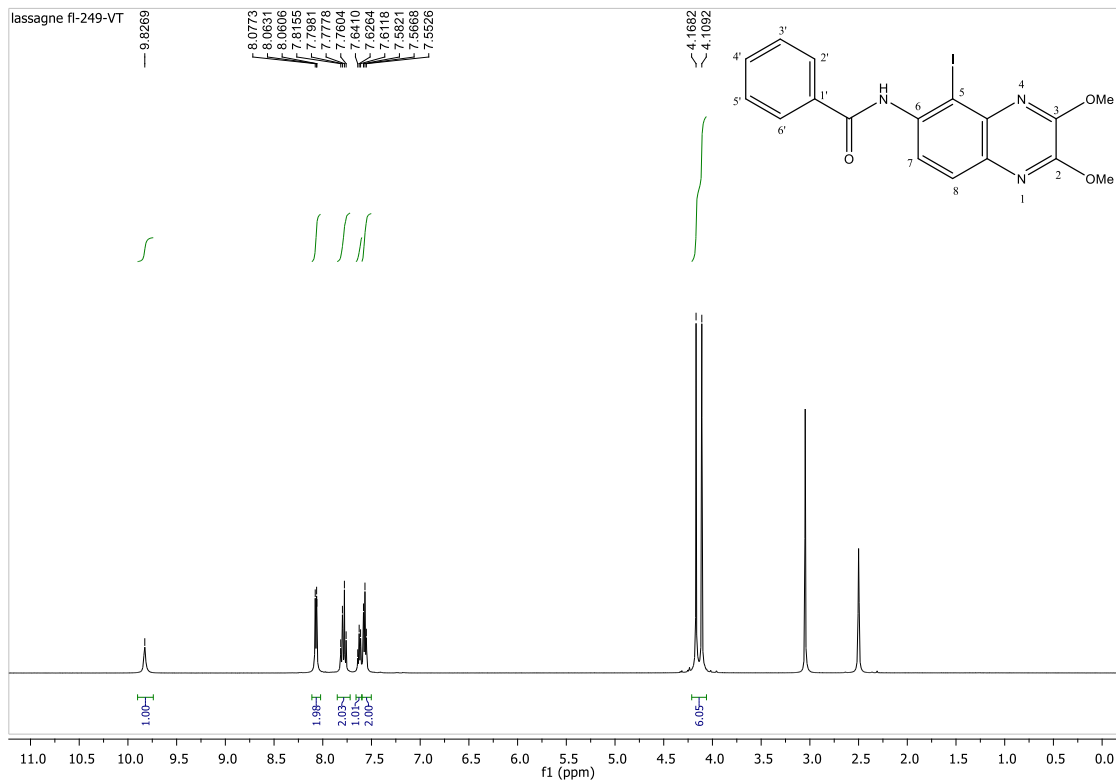


^{13}C NMR (75 MHz, $(\text{CD}_3)_2\text{SO}$)

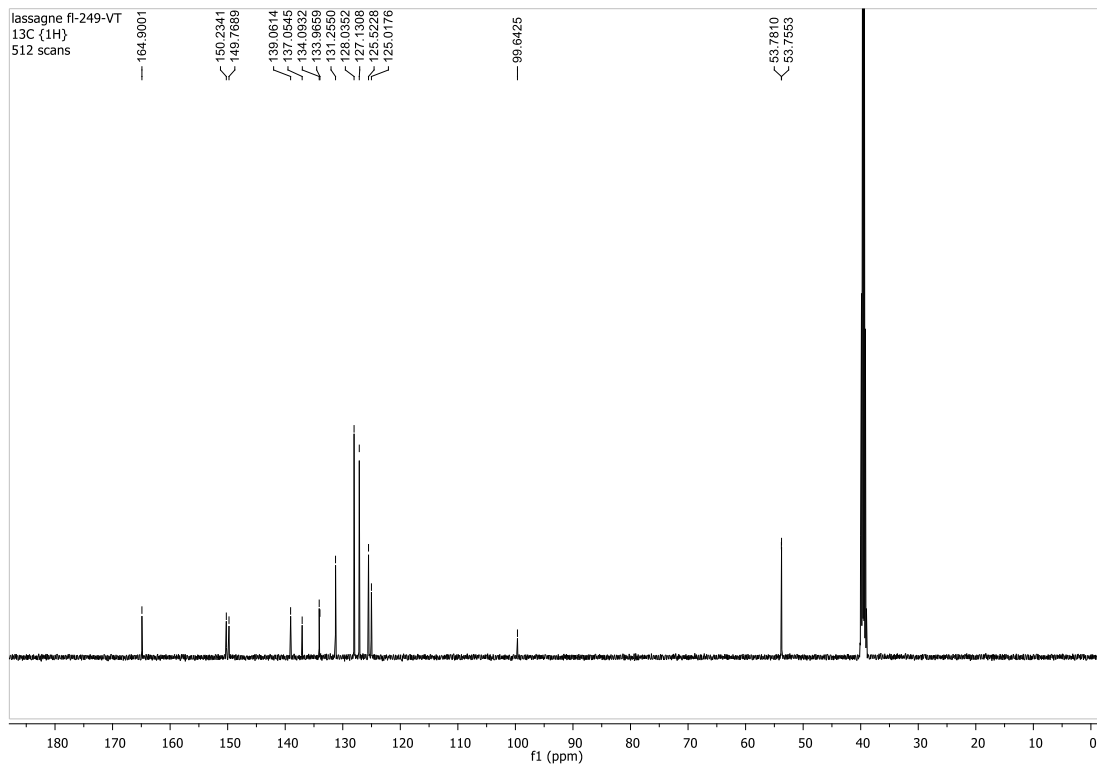


6-(Benzoylamino)-5-iodo-2,3-dimethoxyquinoxaline (4h)

^1H NMR (500 MHz, $(\text{CD}_3)_2\text{SO}$, 358 K)

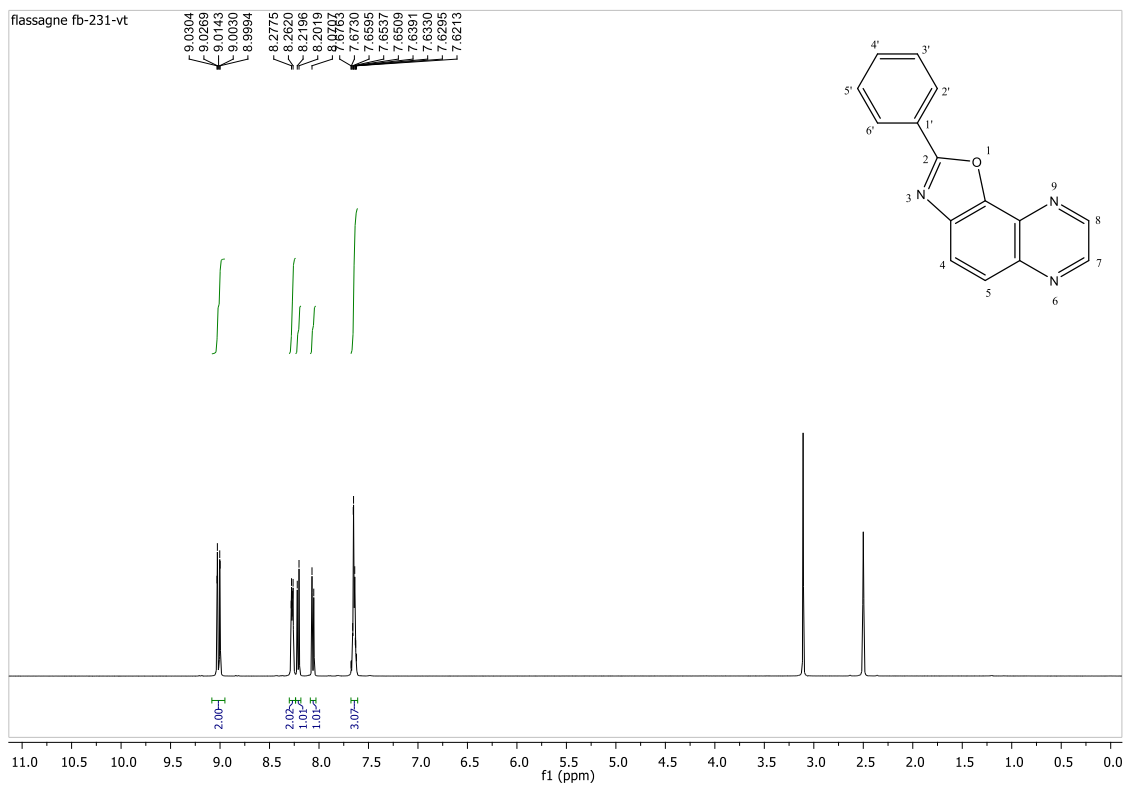


^{13}C NMR (126 MHz, $(\text{CD}_3)_2\text{SO}$, 358 K)

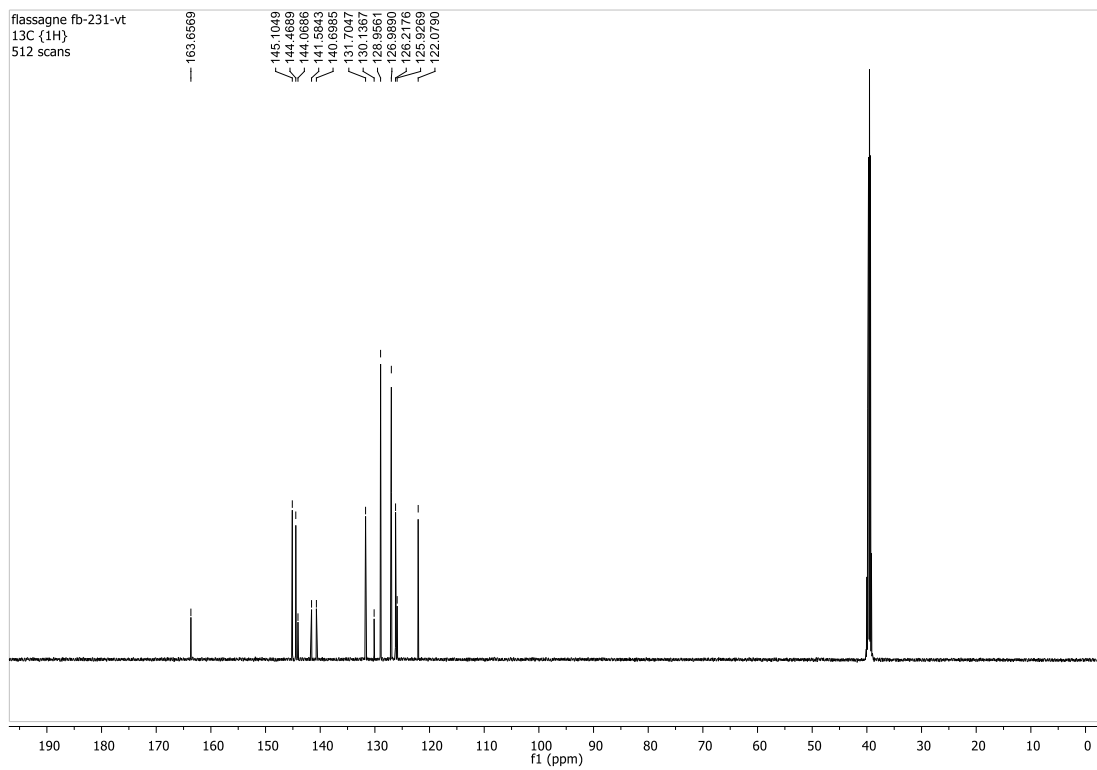


2-Phenyloxazolo[5,4-f]quinoxaline (5a)

^1H NMR (500 MHz, $(\text{CD}_3)_2\text{SO}$, 348 K)

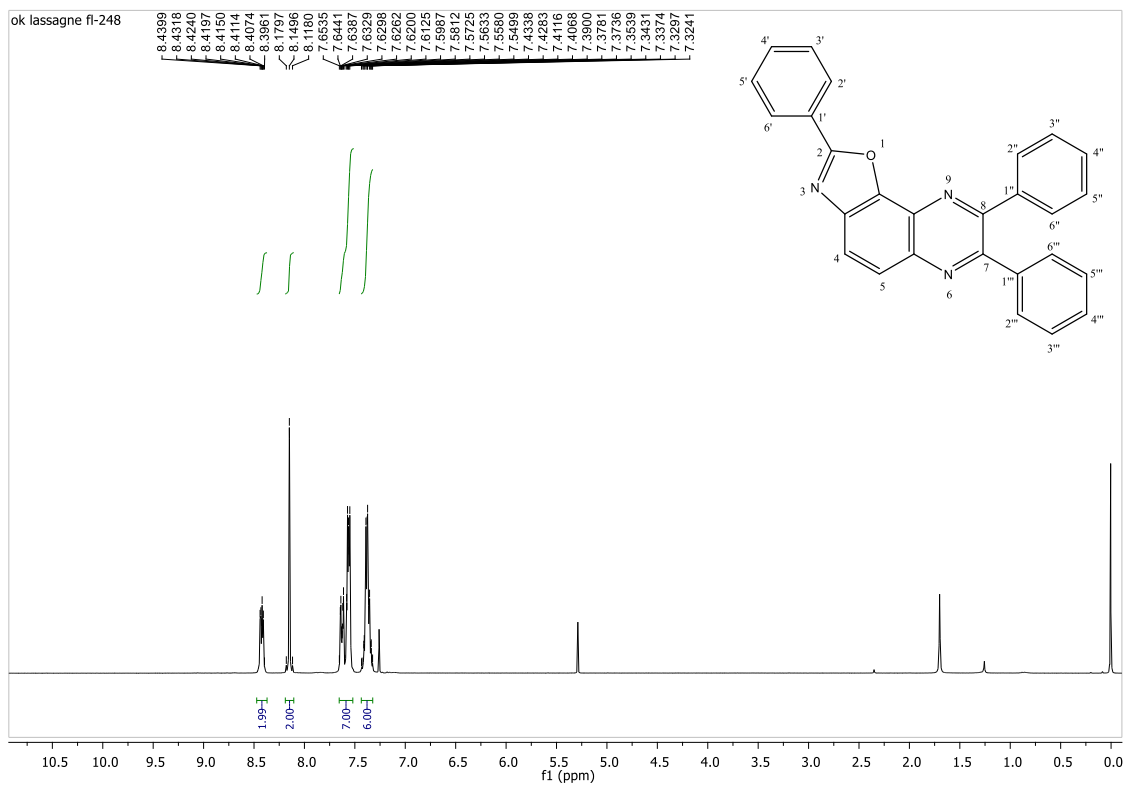


^{13}C NMR (126 MHz, $(\text{CD}_3)_2\text{SO}$, 348 K)

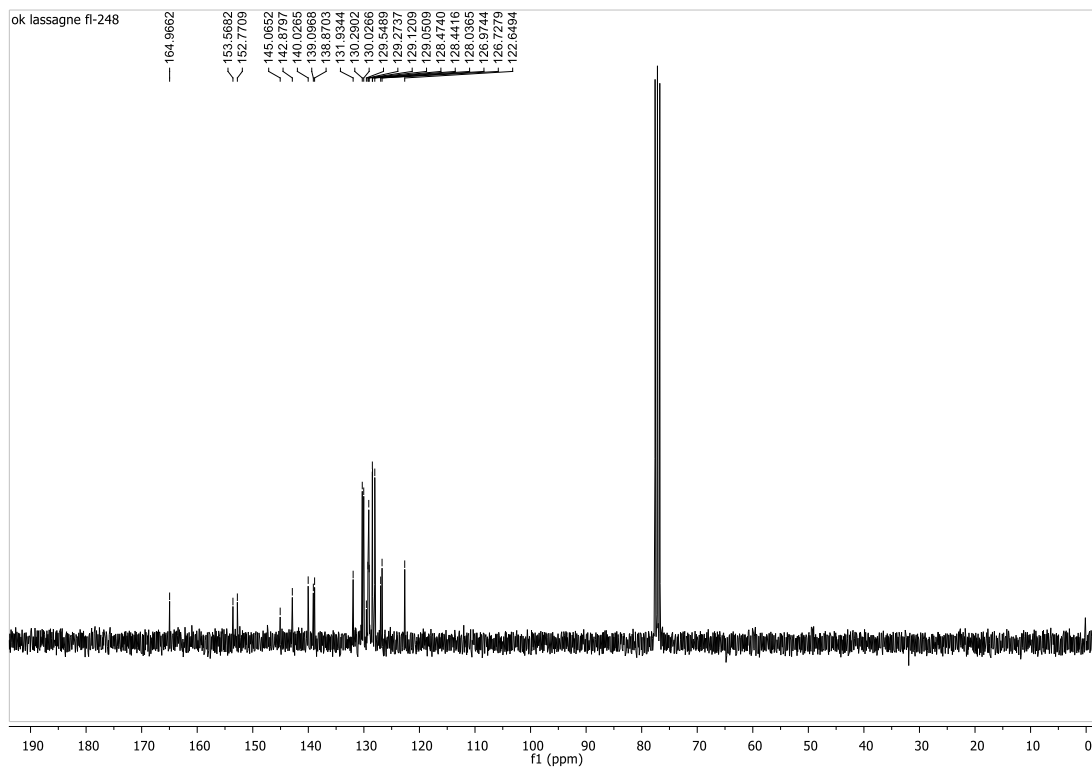


2,7,8-Triphenyloxazolo[5,4-f]quinoxaline (5b)

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)

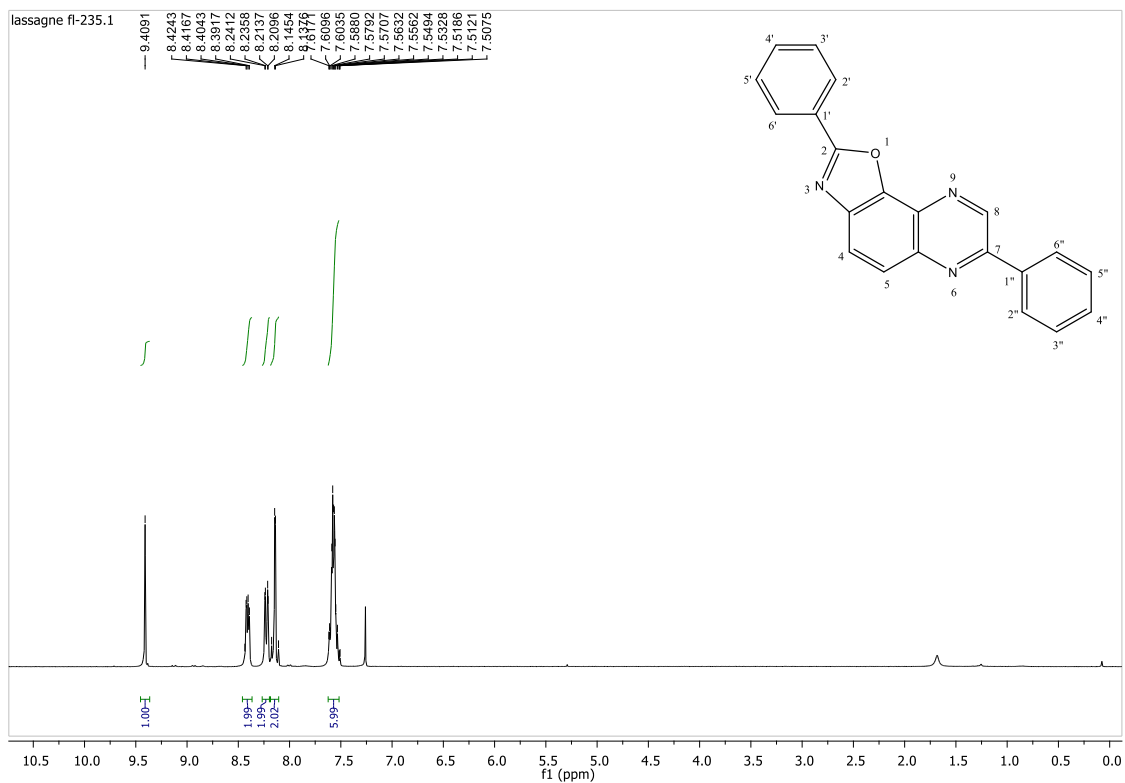


^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3)

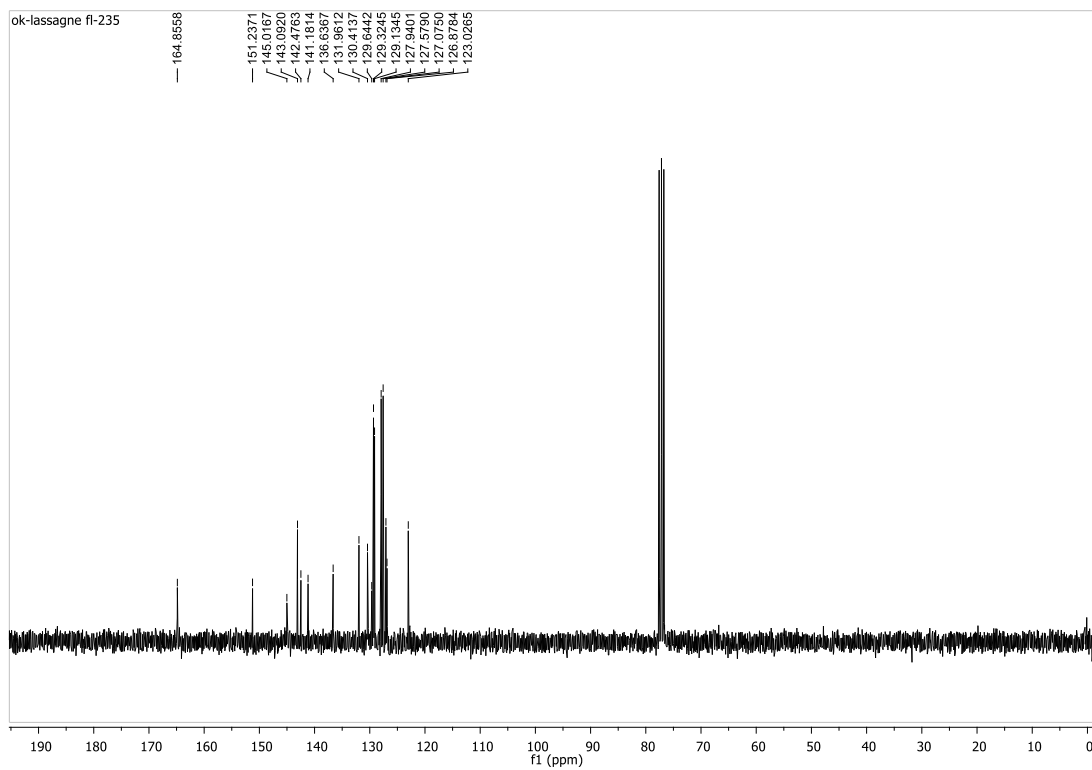


2,7-Diphenyloxazolo[5,4-f]quinoxaline (5c)

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)

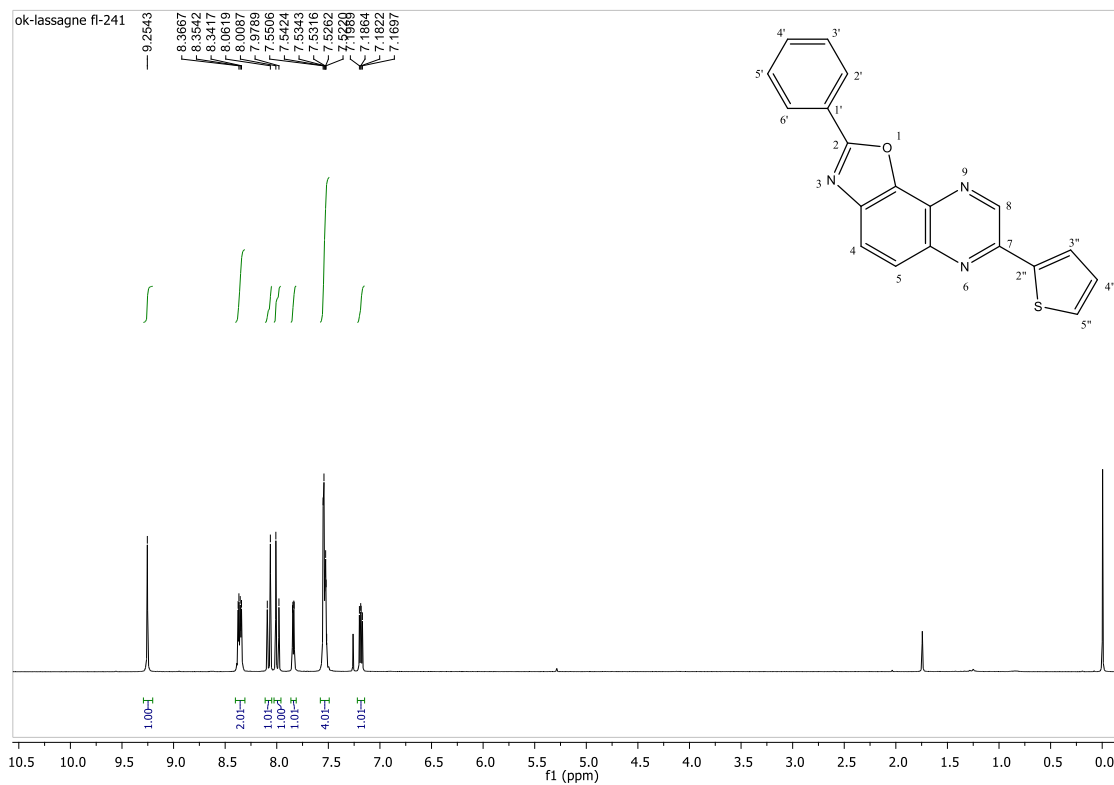


^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3)

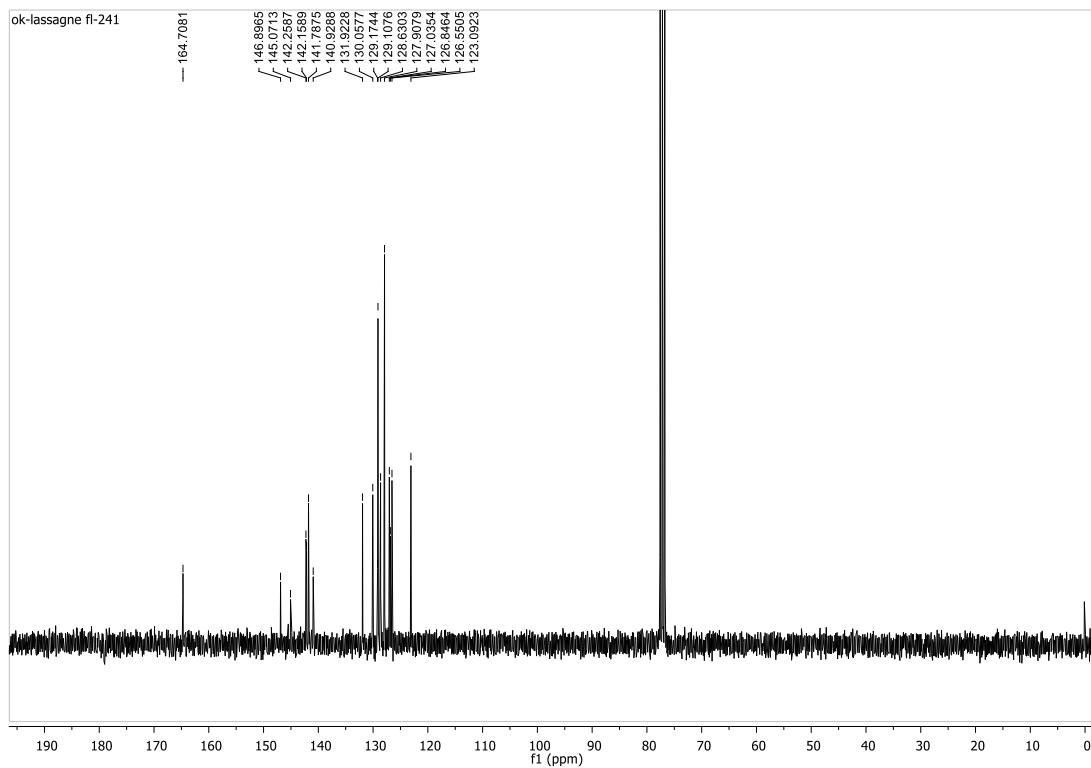


2-Phenyl-7-(2-thienyl)oxazolo[5,4-f]quinoxaline (5d)

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)

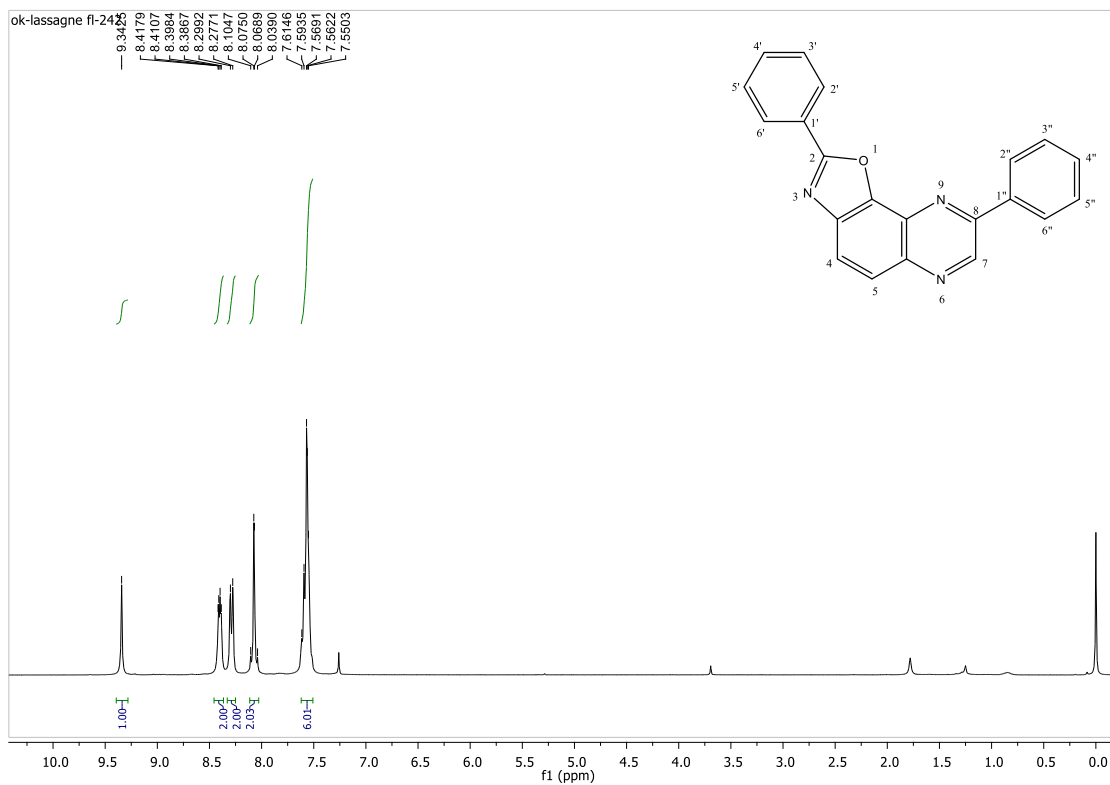


^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3)

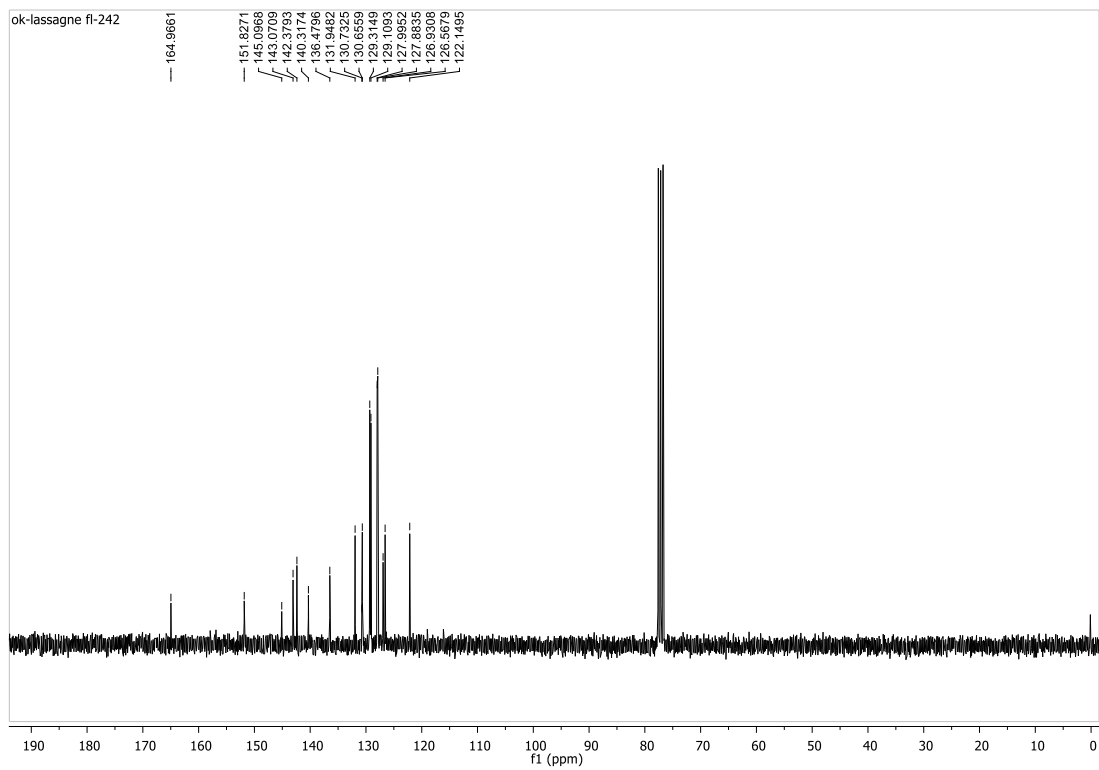


2,8-Diphenyloxazolo[5,4-f]quinoxaline (5g)

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)

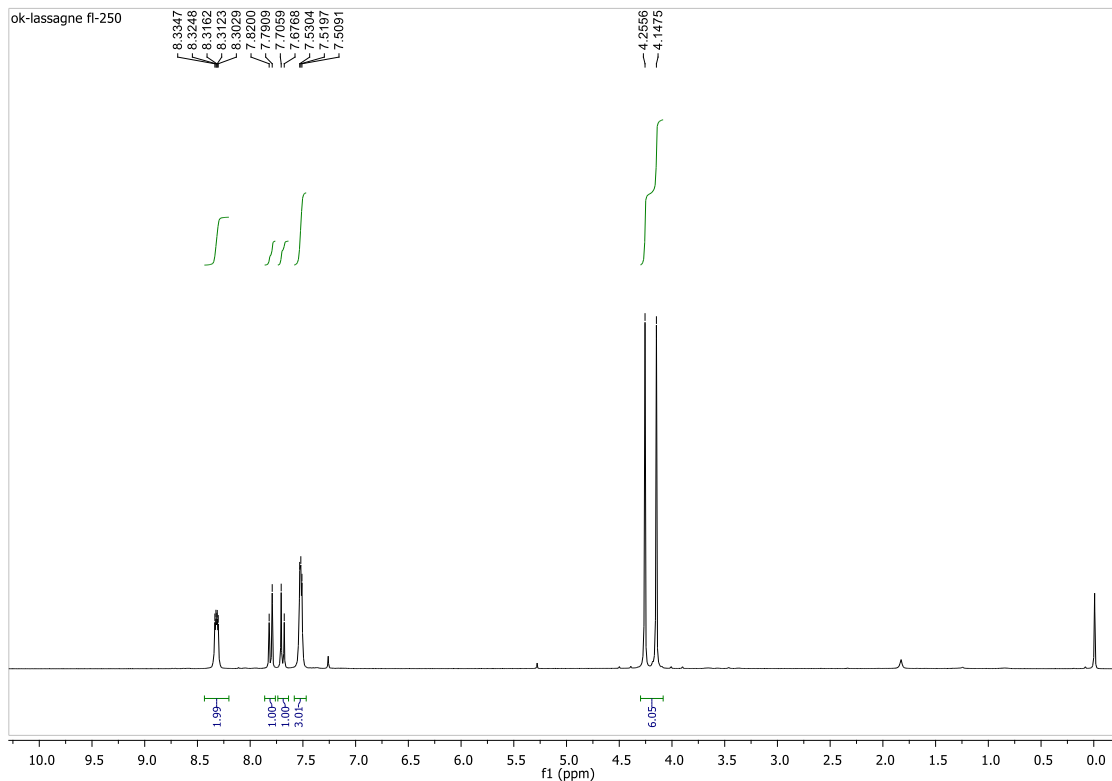
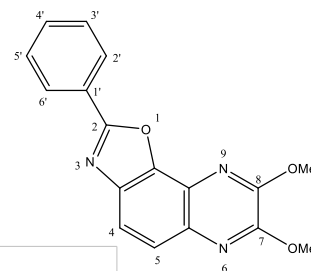


^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3)

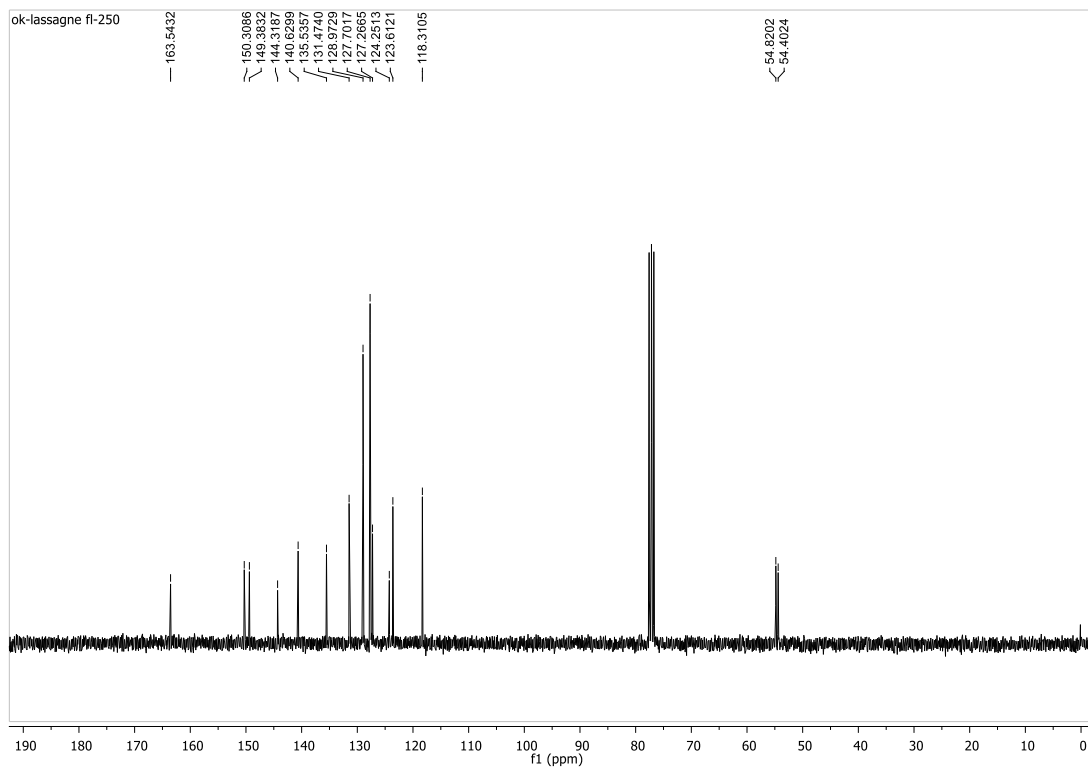


7,8-Dimethoxy-2-phenyloxazolo[5,4-f]quinoxaline (5h)

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)

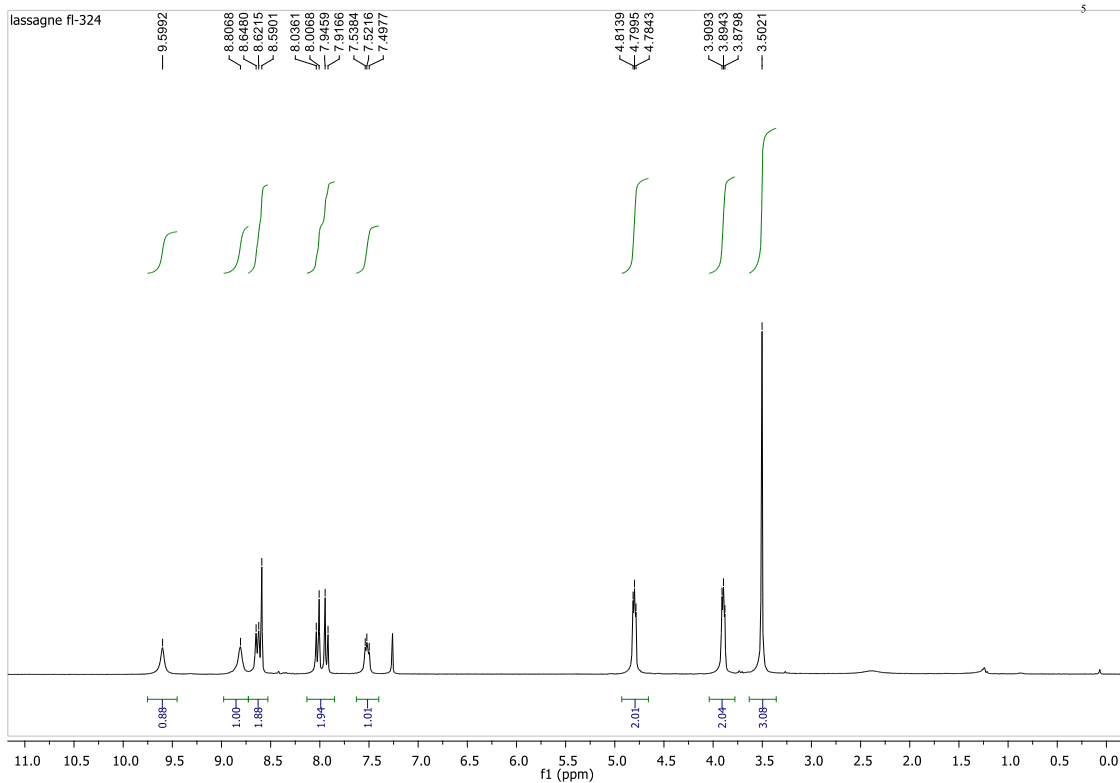
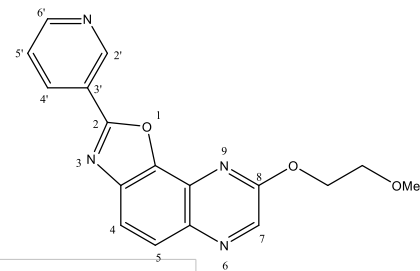


^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3)

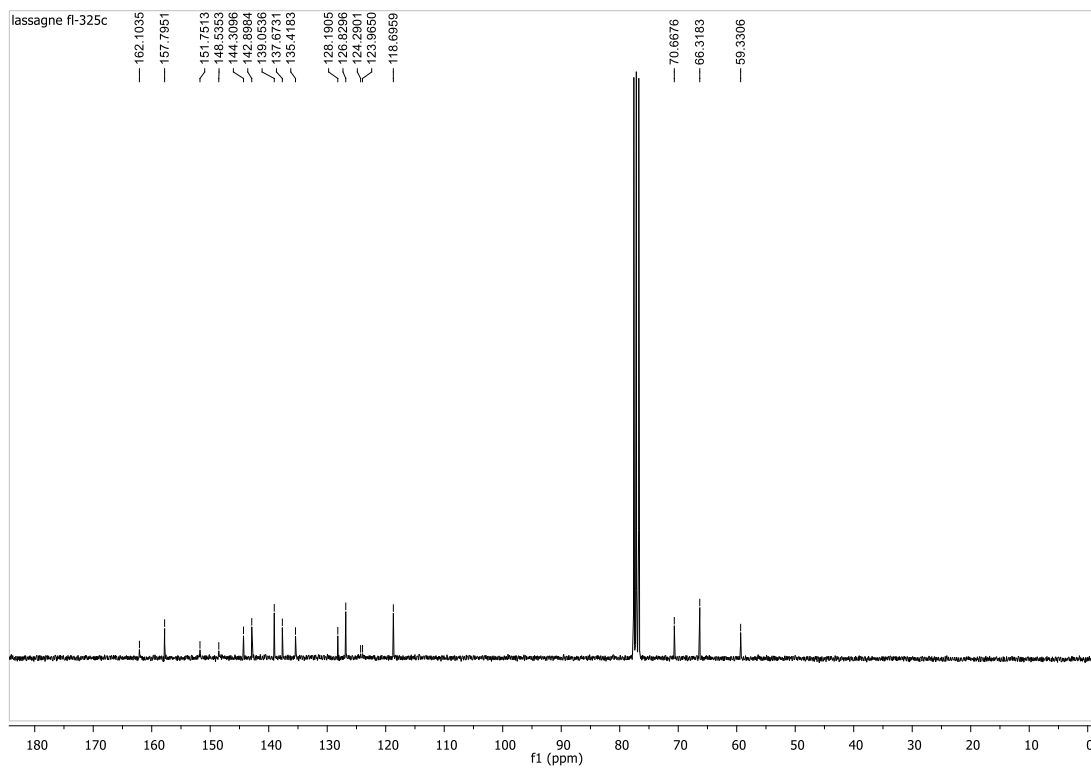


8-(2-Methoxyethoxy)-2-(3-pyridyl)oxazolo[5,4-f]quinoxaline (7a)

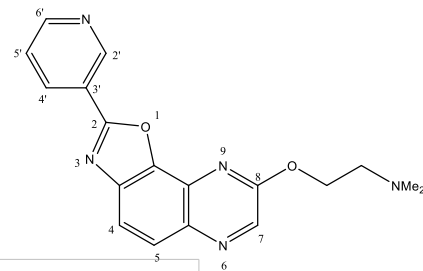
^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)



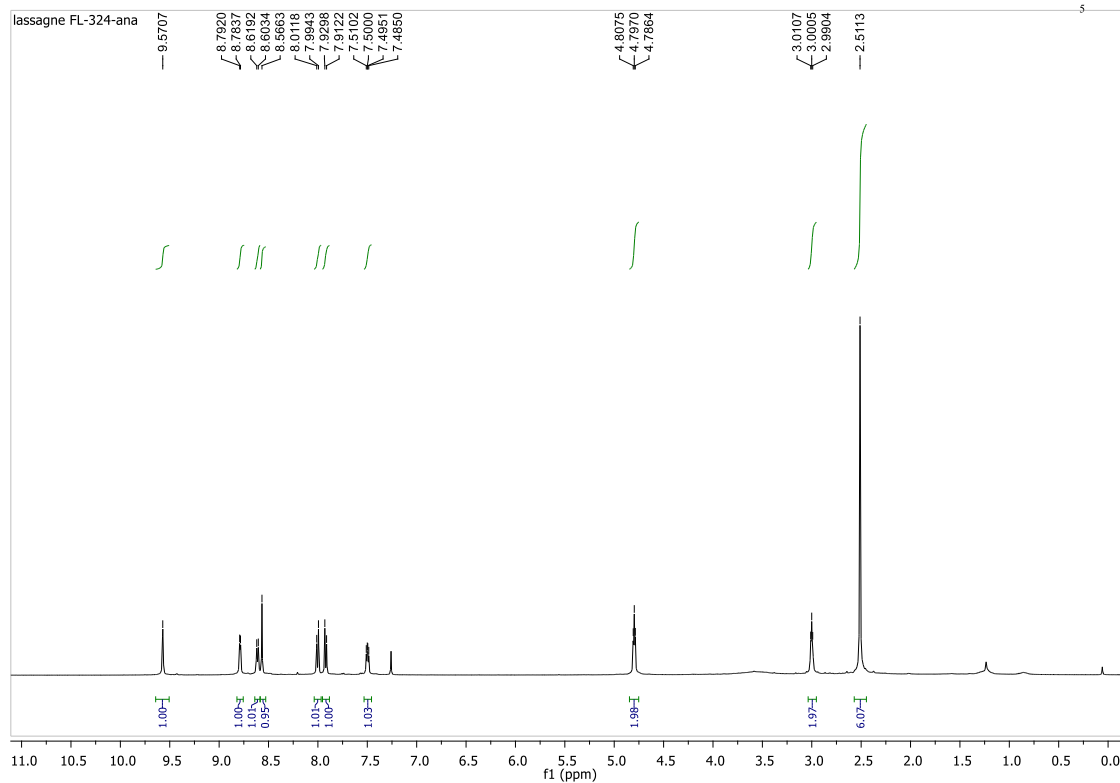
^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3)



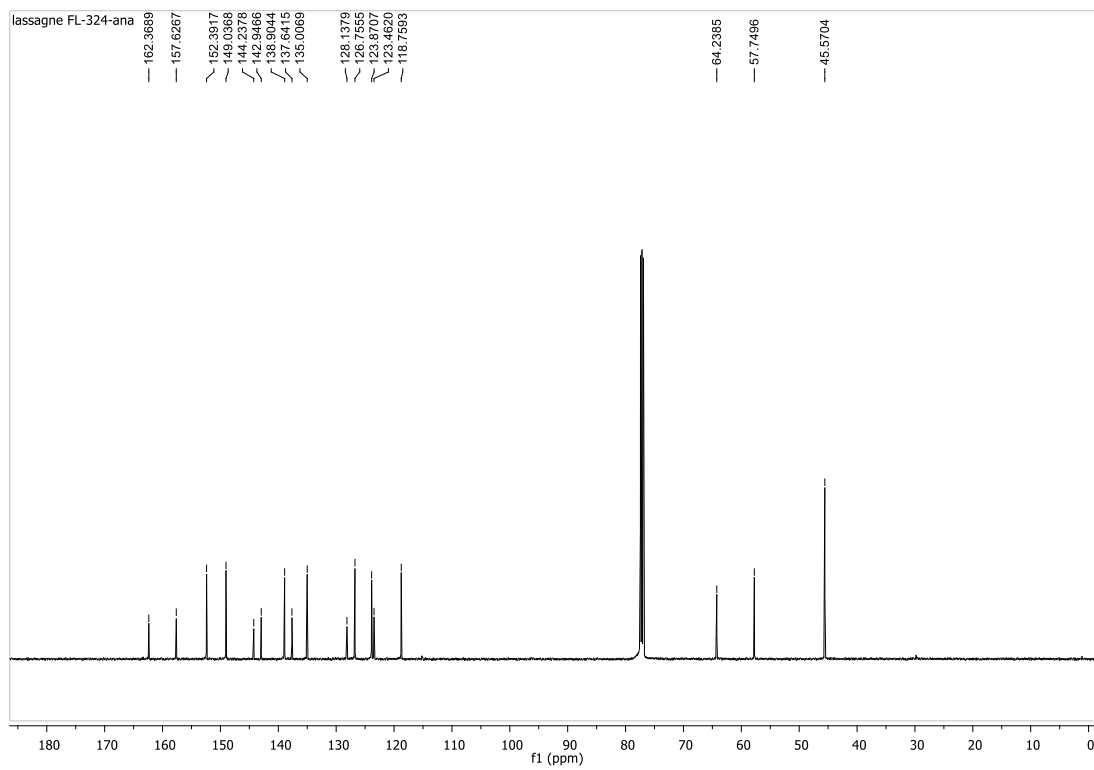
8-(2-(Dimethylamino)ethoxy)-2-(3-pyridyl)oxazolo[5,4-f]quinoxaline (7b)



^1H NMR (500 MHz, CDCl_3)

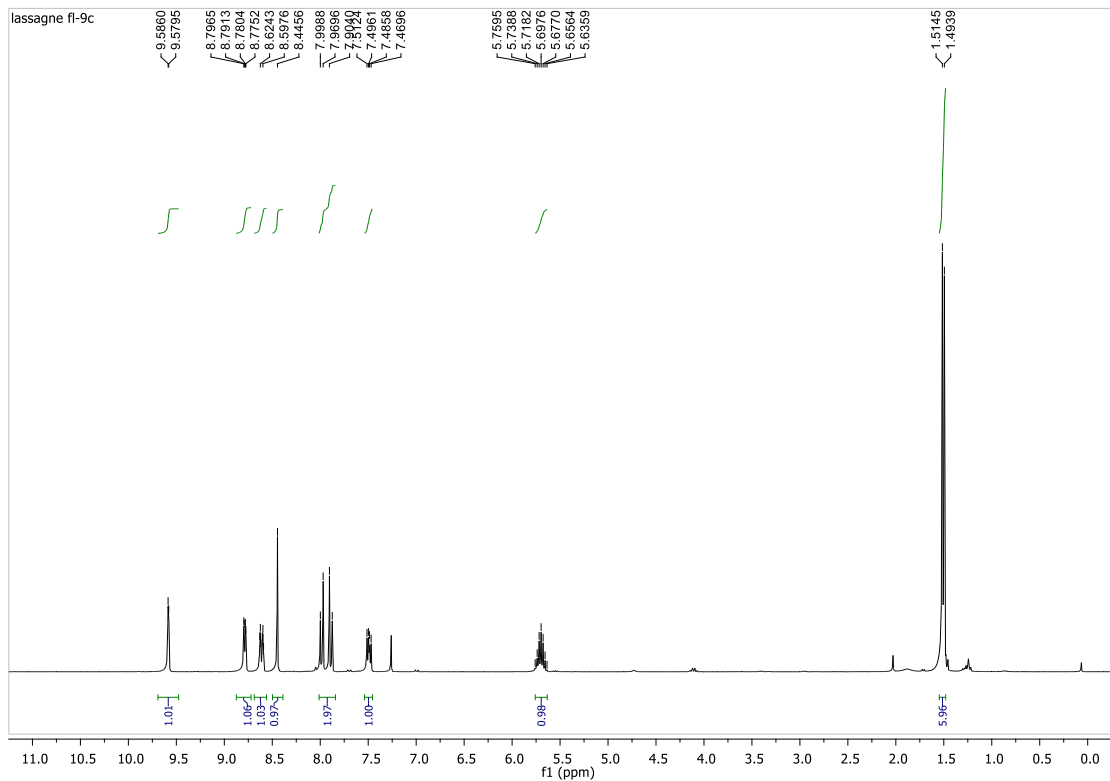
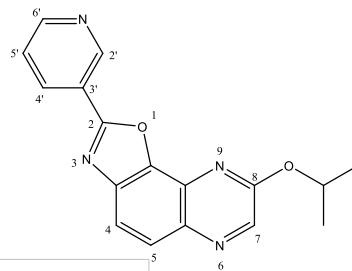


^{13}C NMR (126 MHz, CDCl_3)

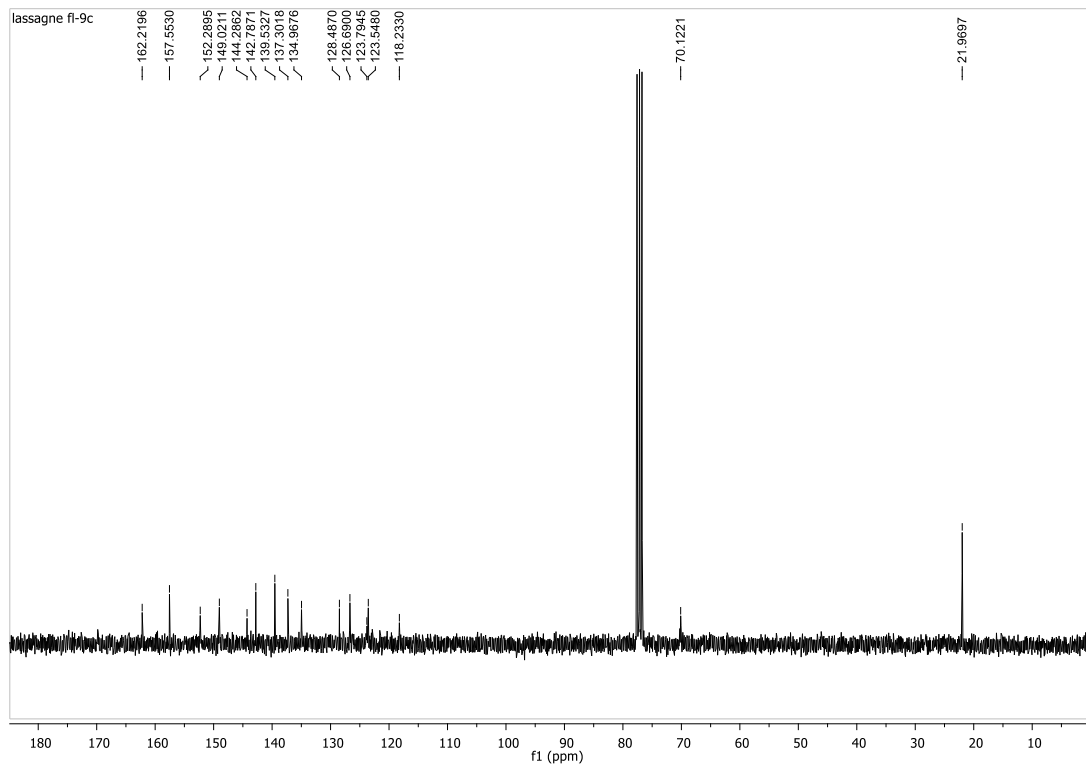


8-Isopropoxy-2-(3-pyridyl)oxazolo[5,4-f]quinoxaline (7c)

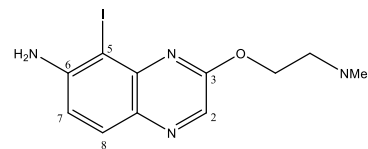
^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)



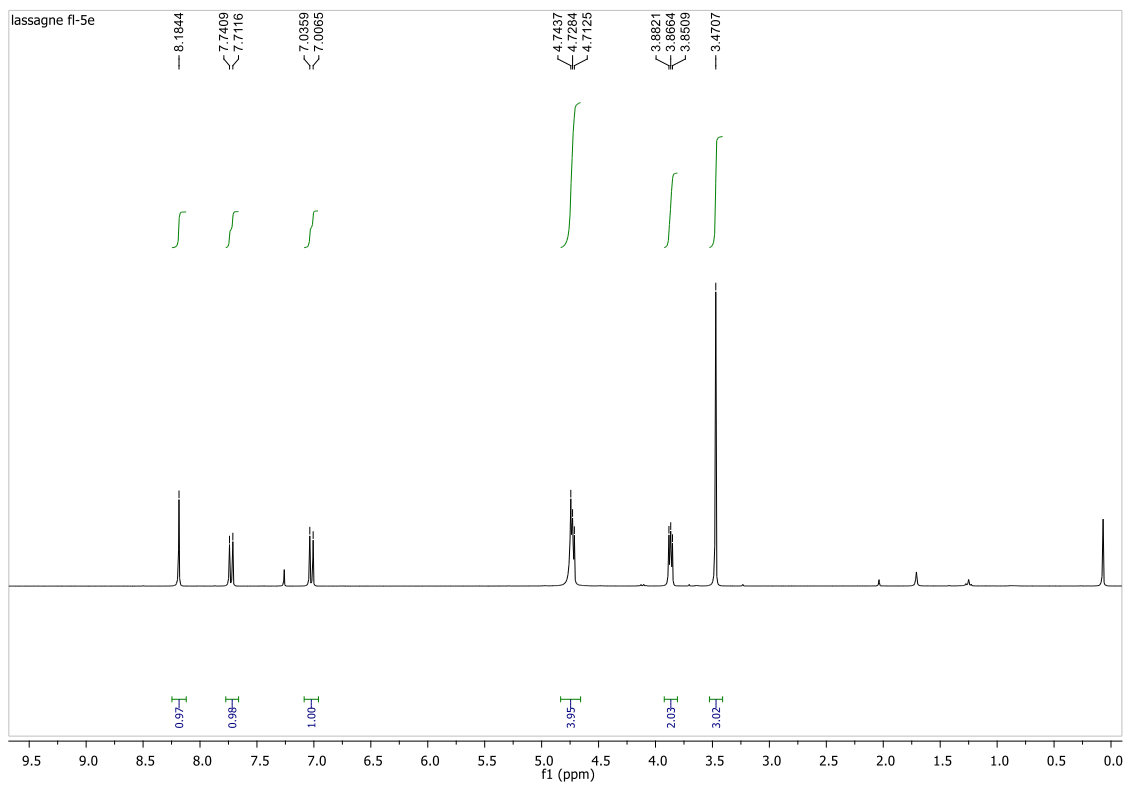
^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3)



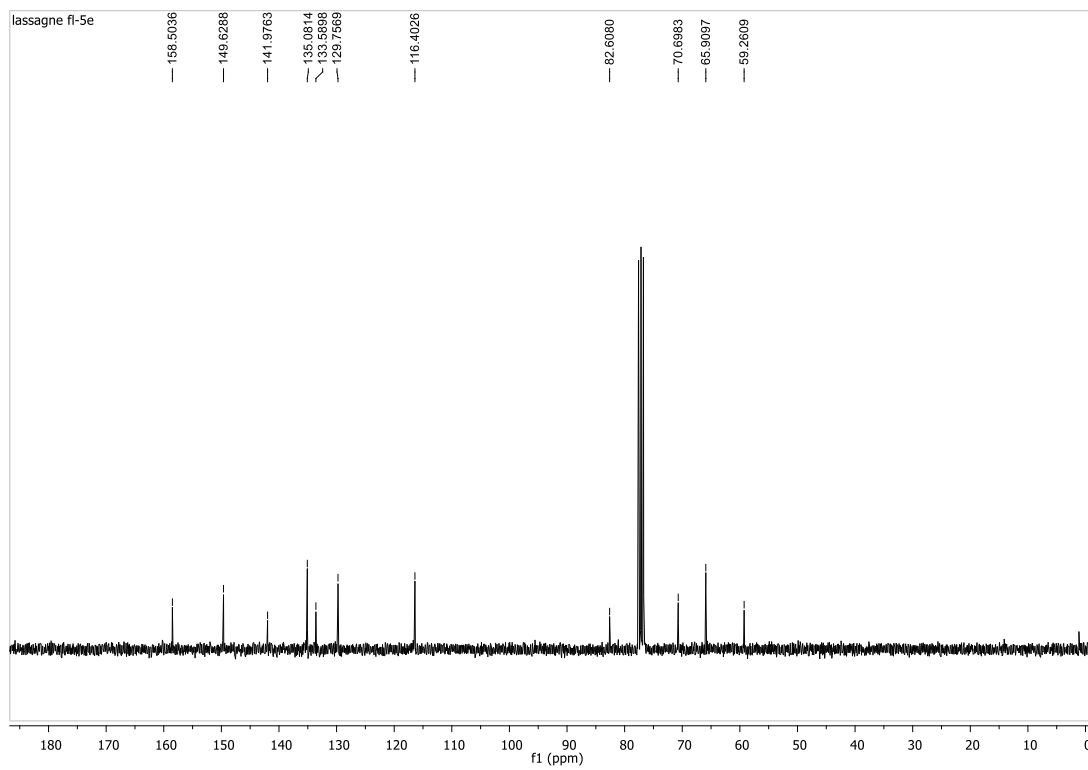
6-Amino-5-iodo-3-(2-methoxyethoxy)quinoxaline (3j)



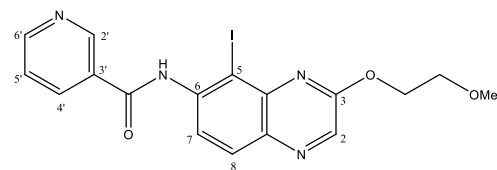
^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)



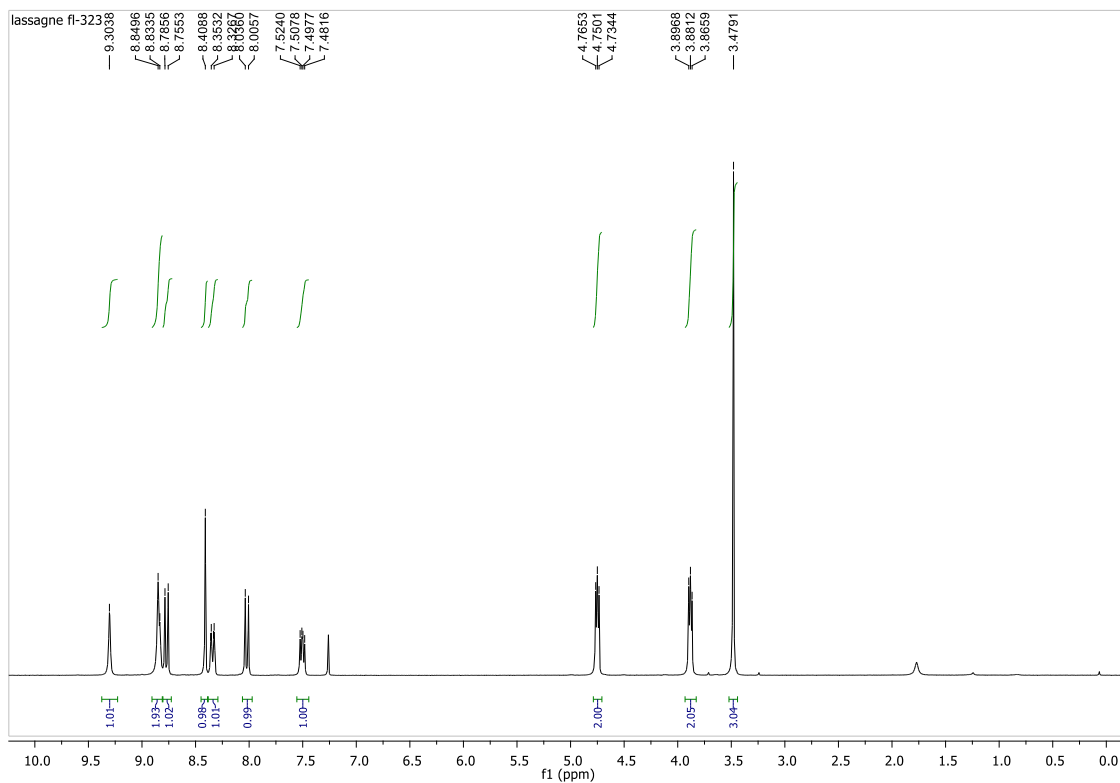
^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3)



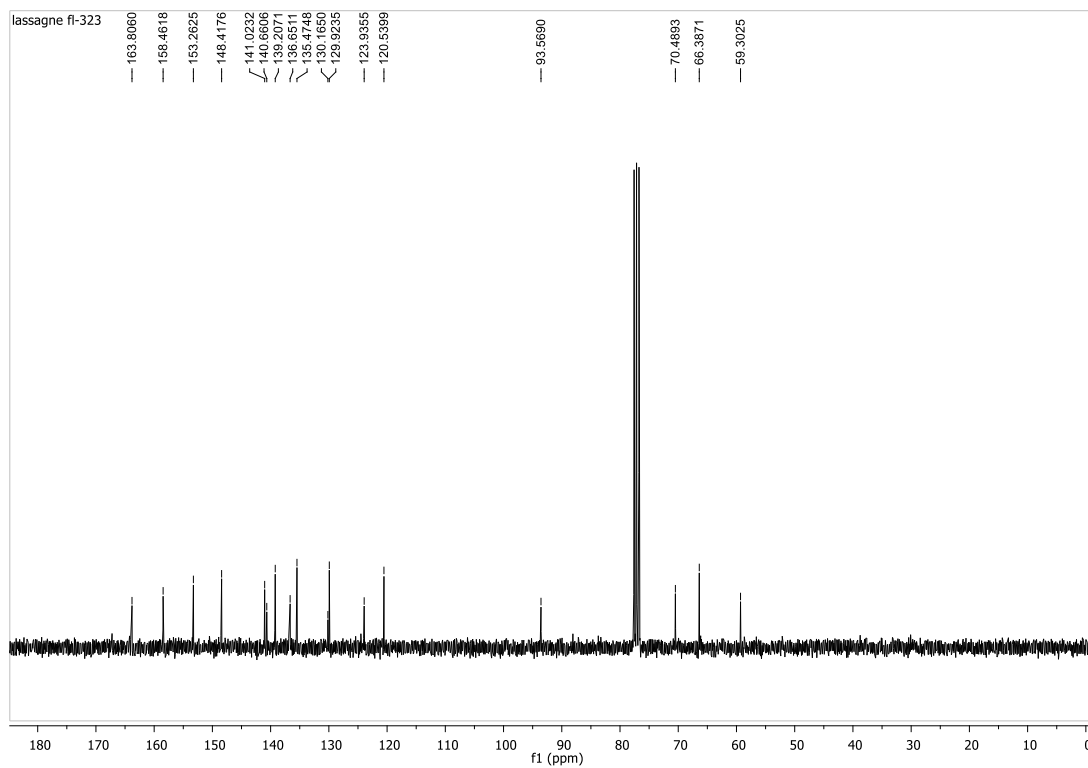
5-Iodo-3-(2-methoxyethoxy)-6-(3-pyridoylamino)quinoxaline (8a)



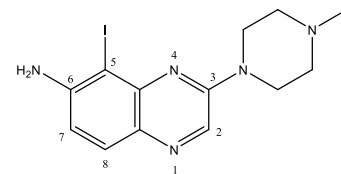
^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)



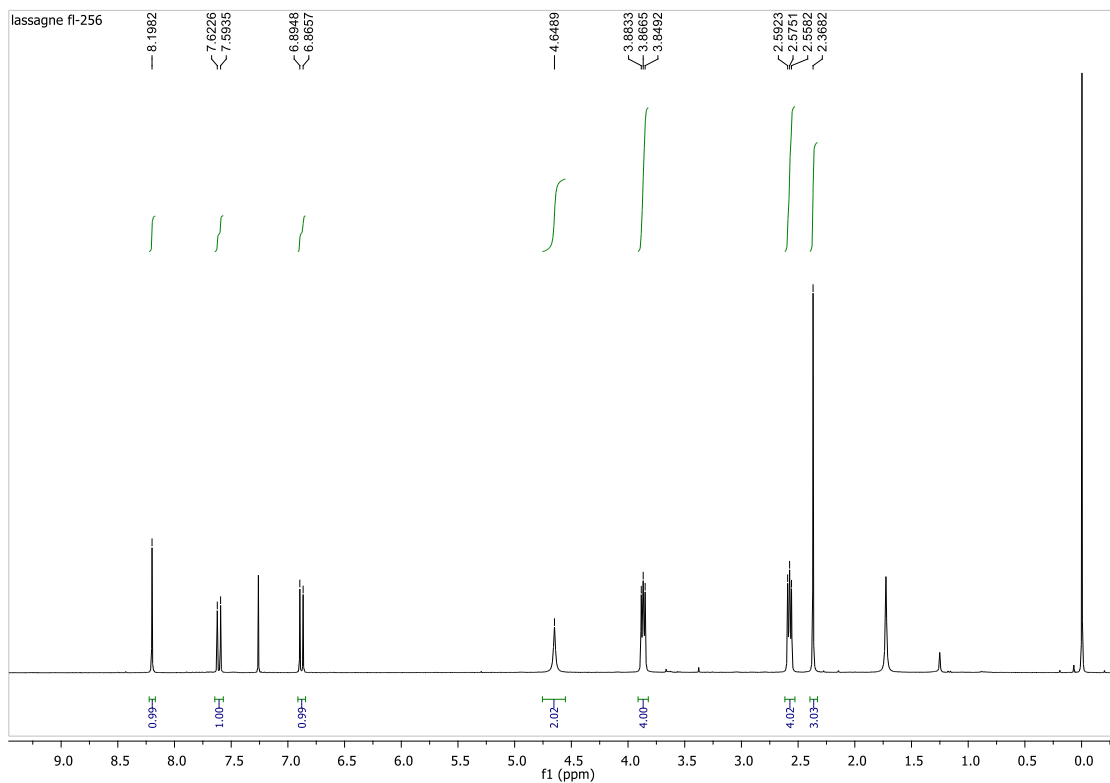
^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3)



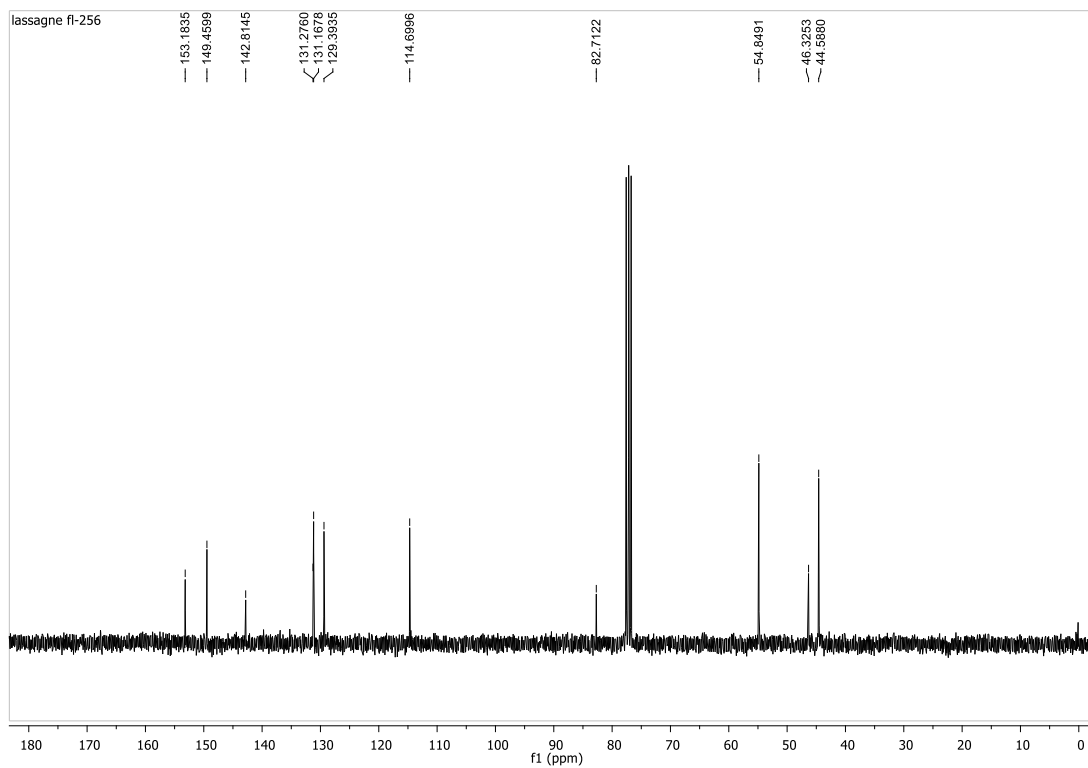
6-Amino-5-iodo-3-(*N'*-methylpiperazino)quinoxaline (3k)



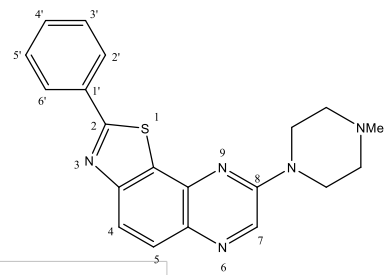
^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)



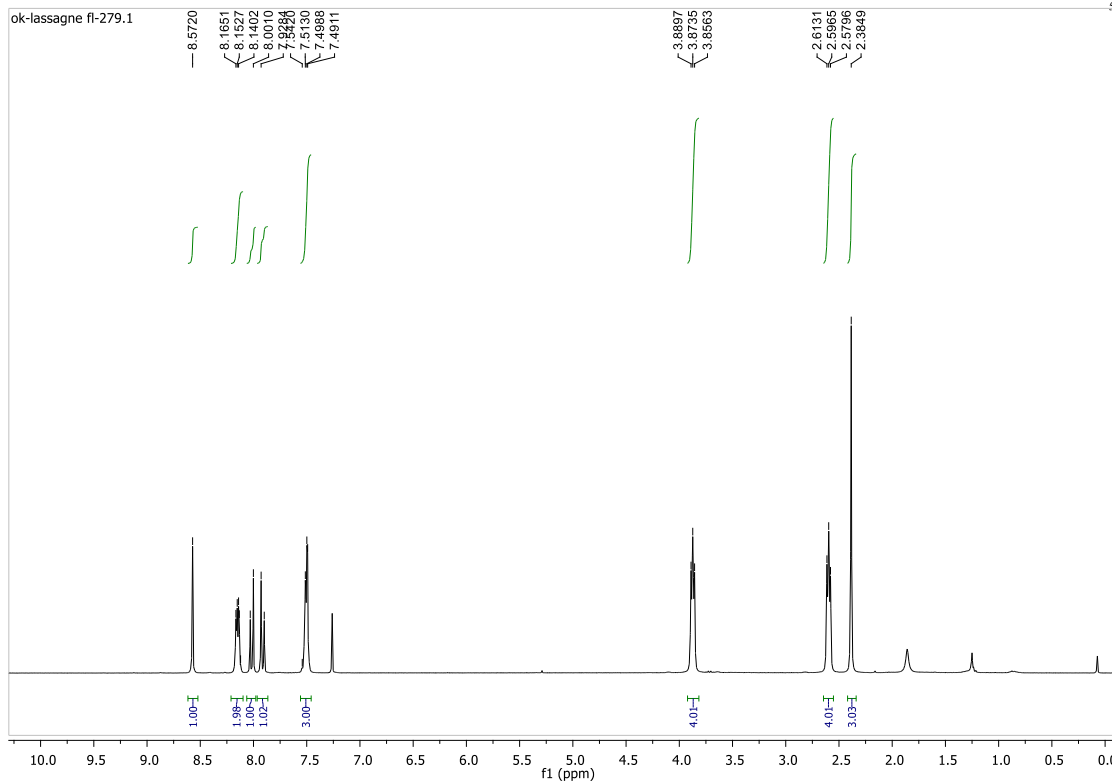
^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3)



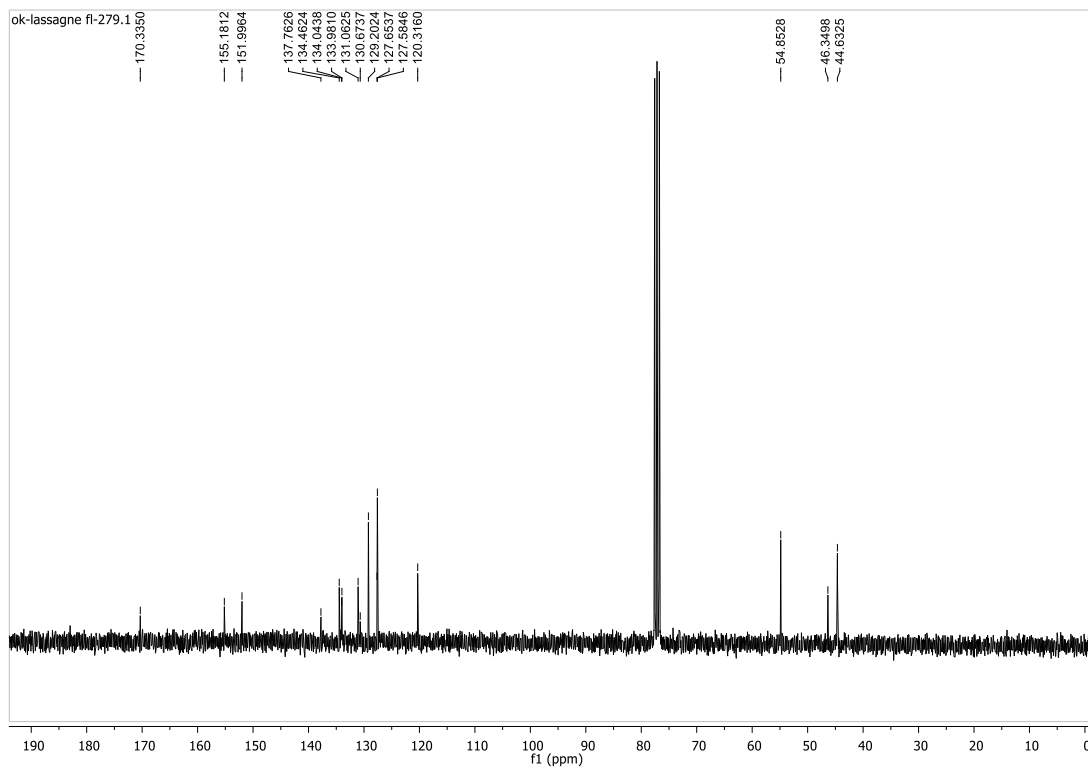
8-(*N'*-Methylpiperazino)-2-phenylthiazolo[5,4-*f*]quinoxaline (9a)



^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)

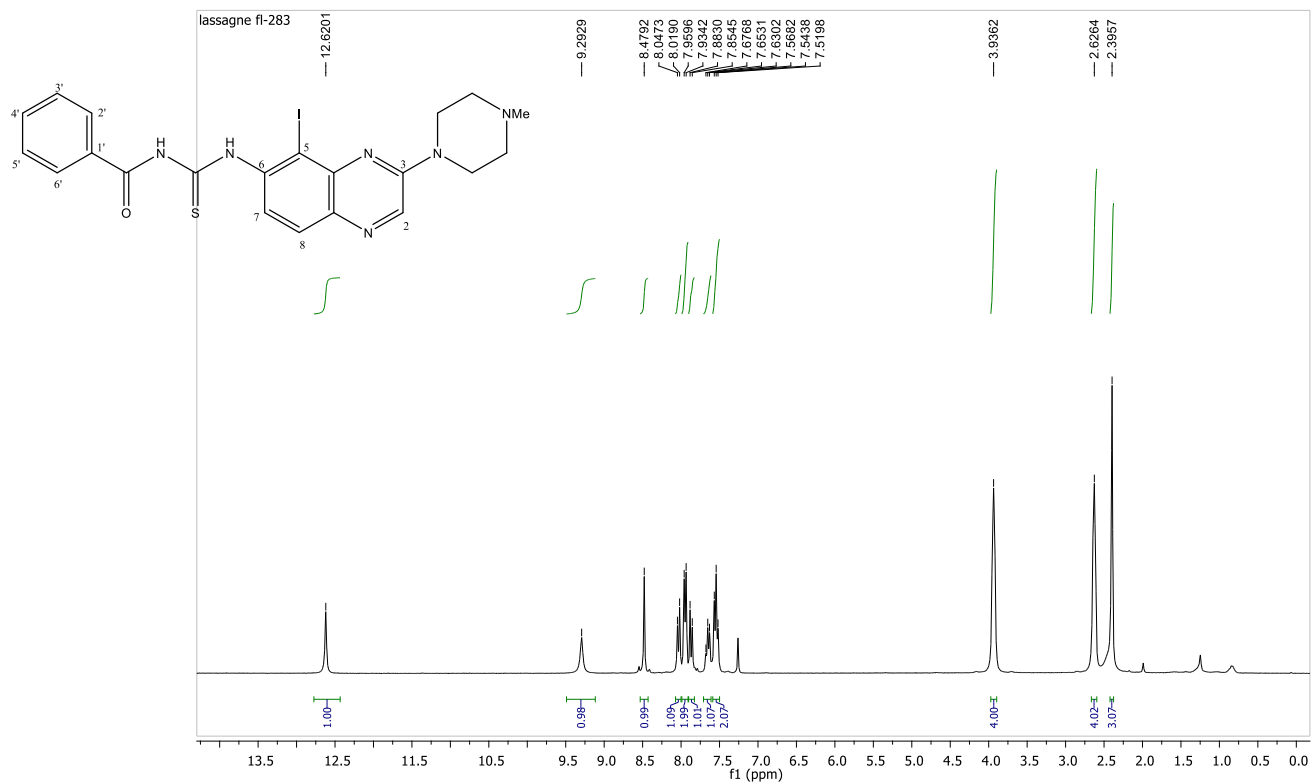


^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3)

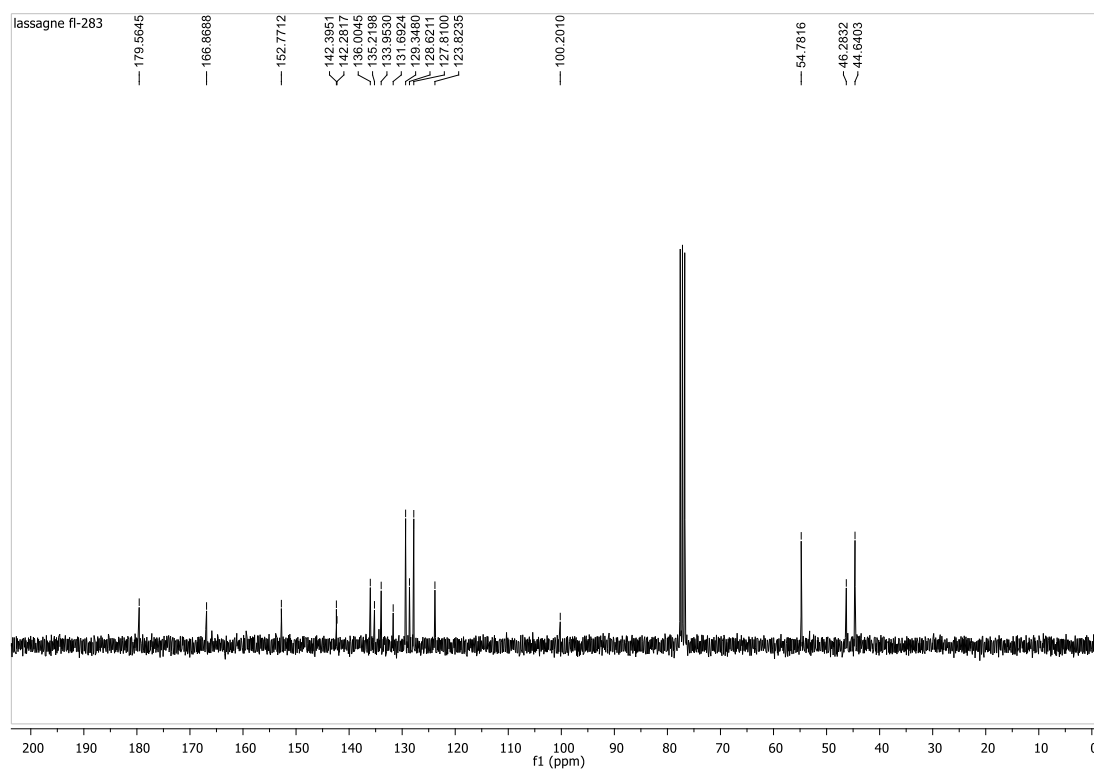


6-(*N'*-benzoyl)thioureido-5-iodo-3-(*N'*-methylpiperazino)quinoxaline (9b)

^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)

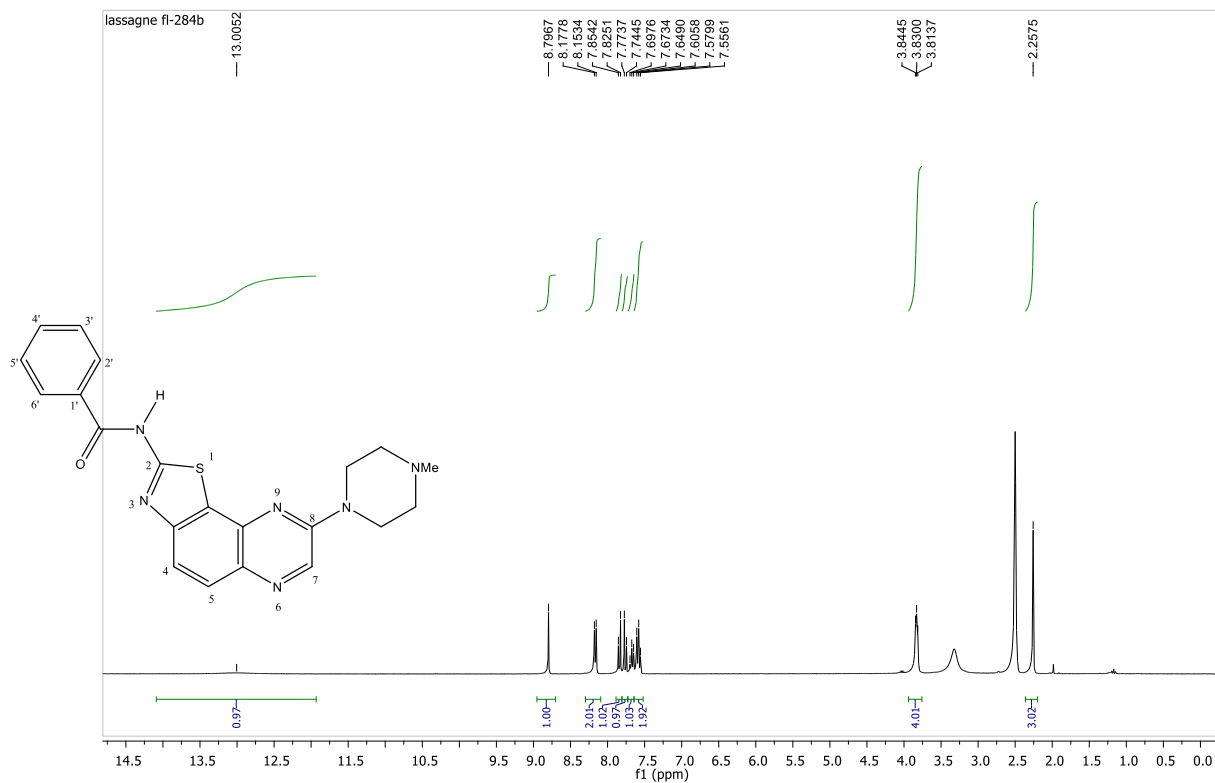


^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3)

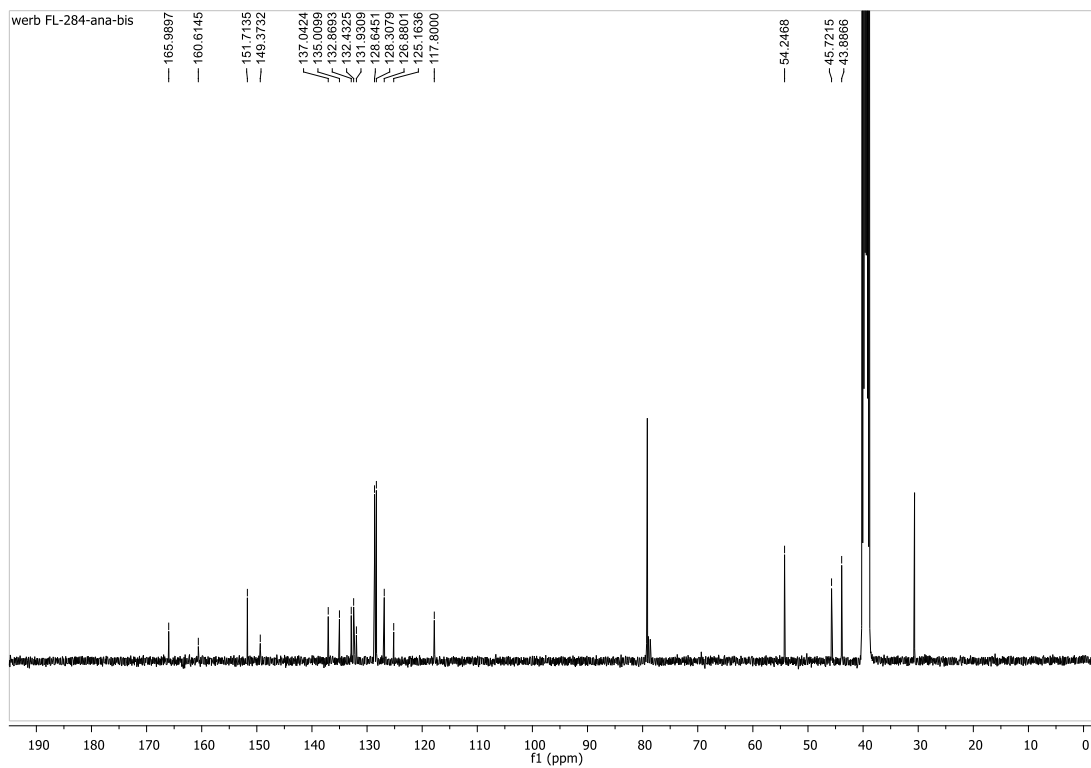


2-(Benzoylamino)-8-(*N*'-methylpiperazino)thiazolo[5,4-*f*]quinoxaline (9c)

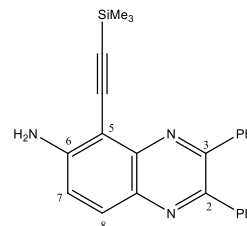
^1H NMR (400 MHz, $(\text{CD}_3)_2\text{SO}$)



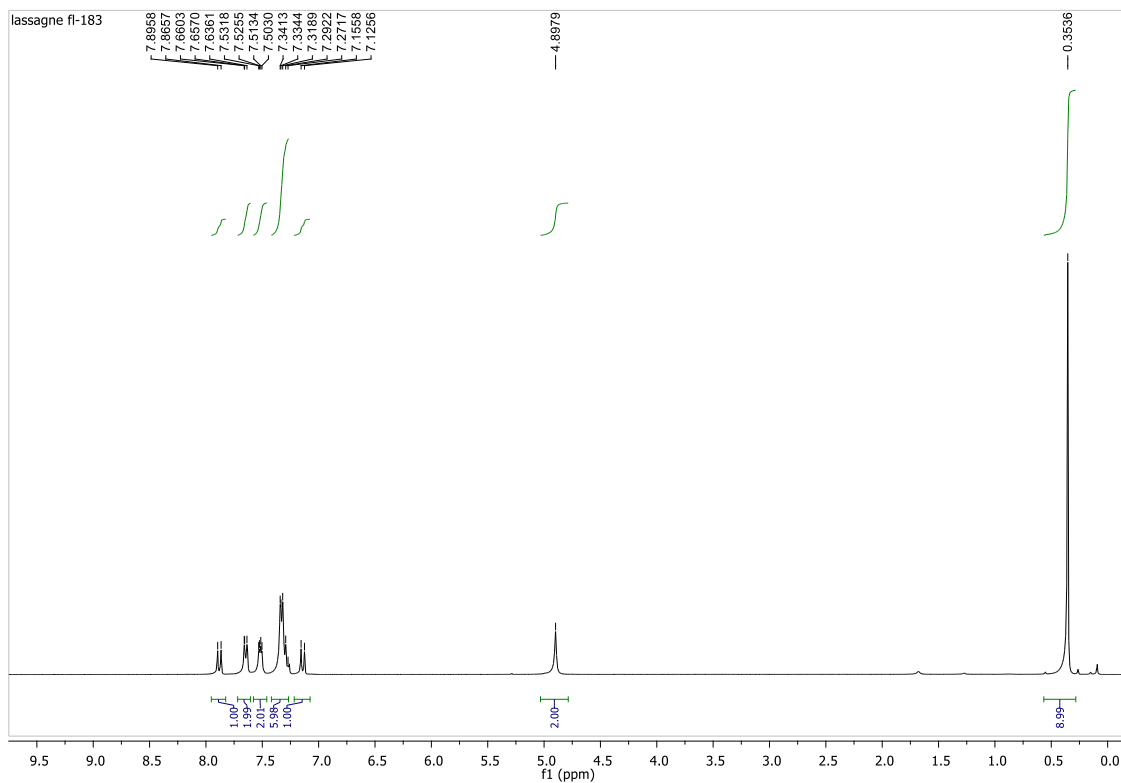
^{13}C NMR (101 MHz, $(\text{CD}_3)_2\text{SO}$, presence of $\text{CD}(\text{H})\text{Cl}_3$ and $(\text{CH}_3)_2\text{CO}$)



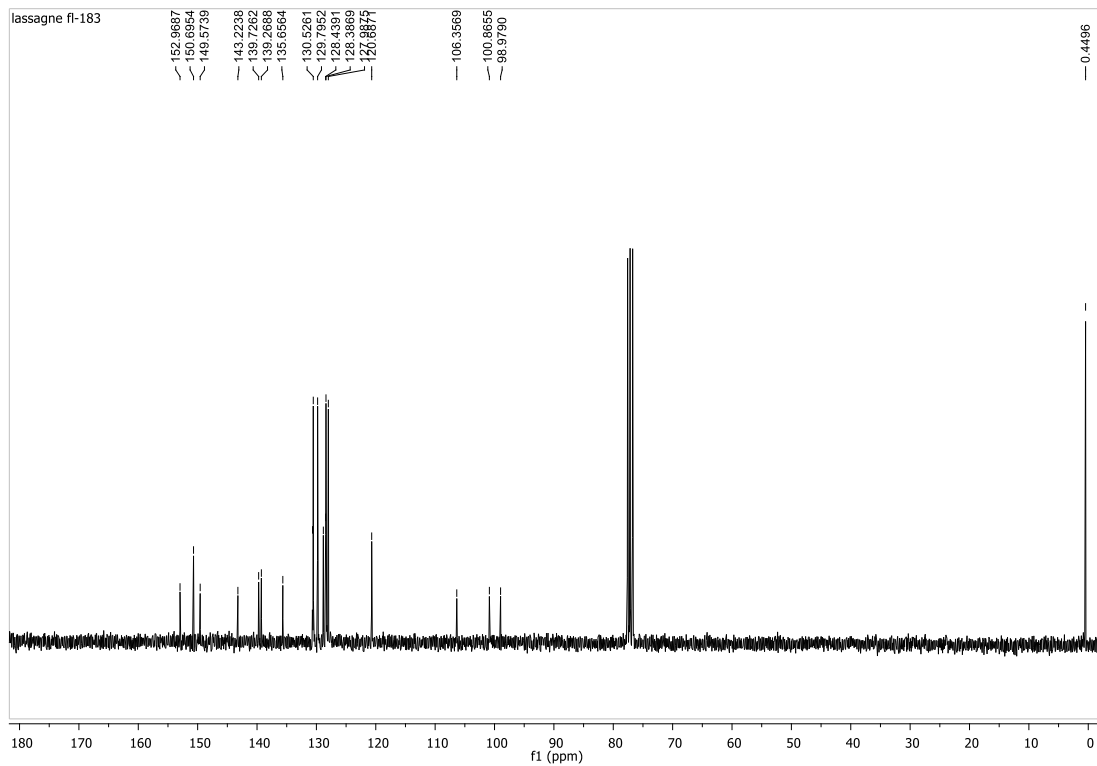
6-Amino-2,3-diphenyl-5-(trimethylsilyl)ethynylquinoxaline (10b)



^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)

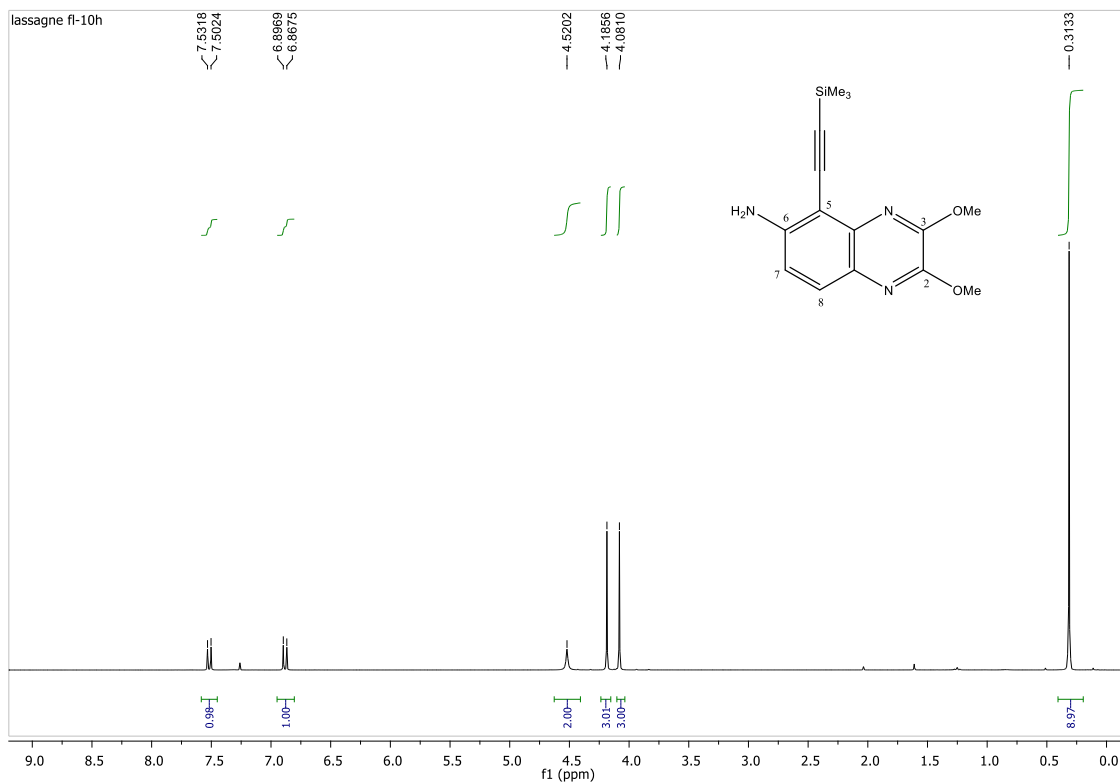


^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3)

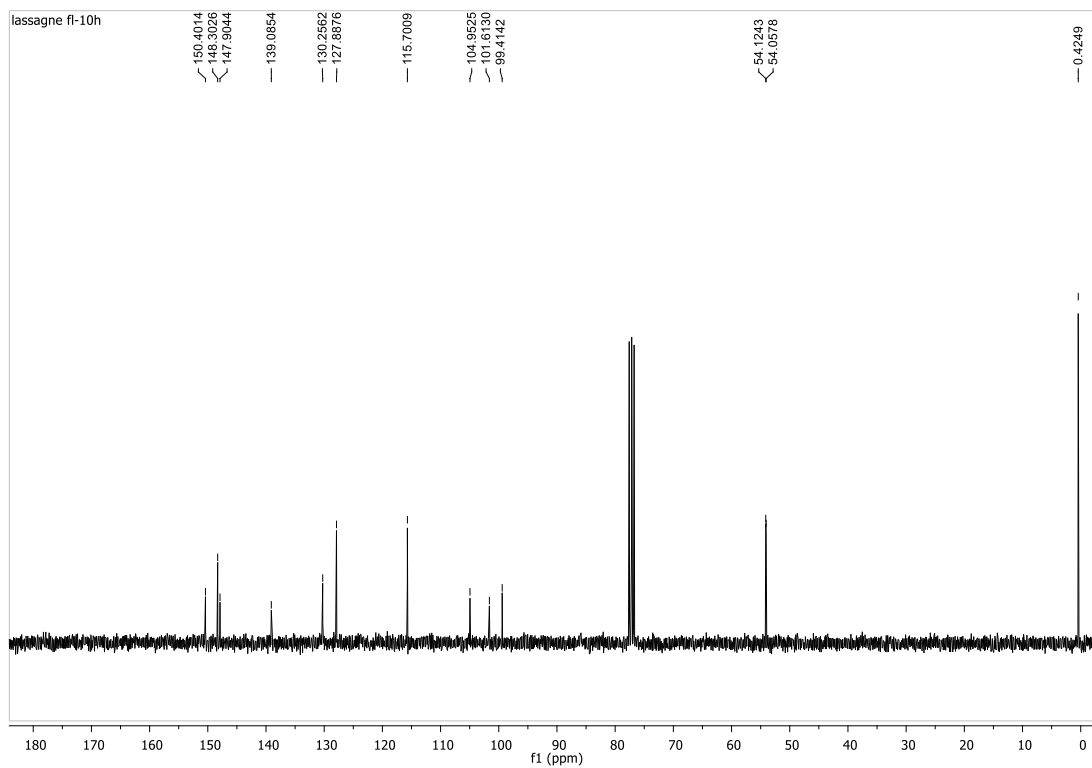


6-Amino-2,3-dimethoxy-5-(trimethylsilyl)ethynylquinoxaline (10h)

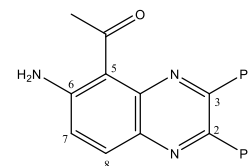
^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)



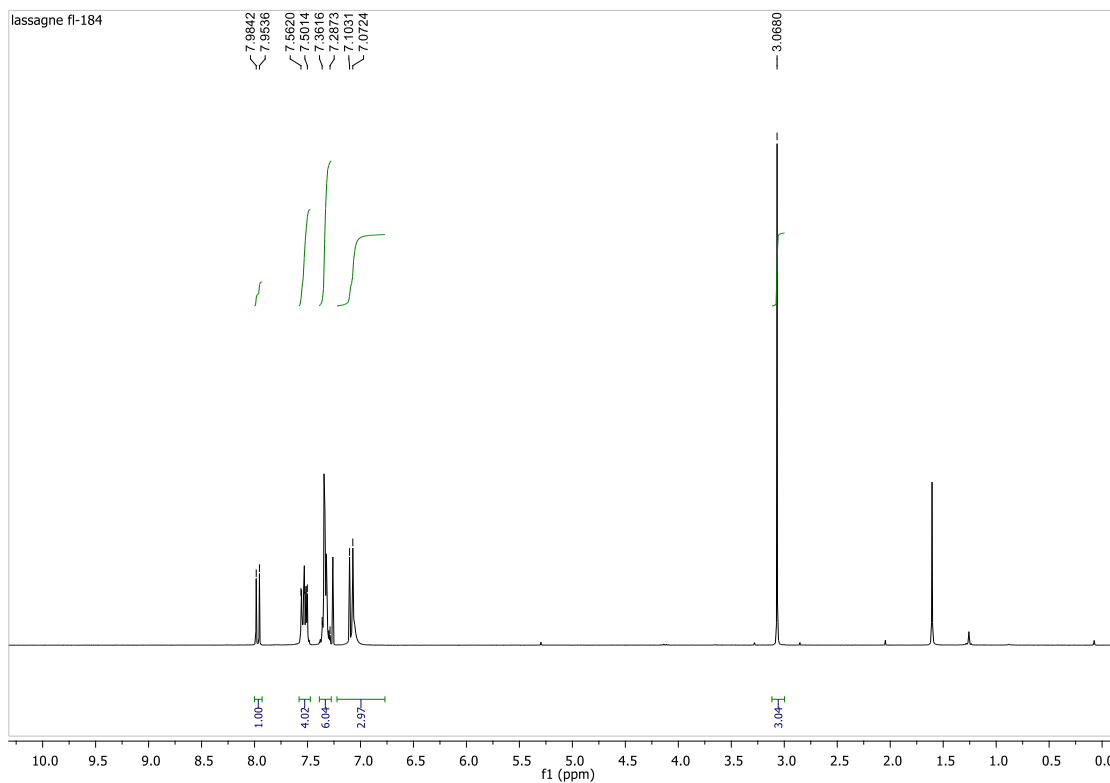
^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3)



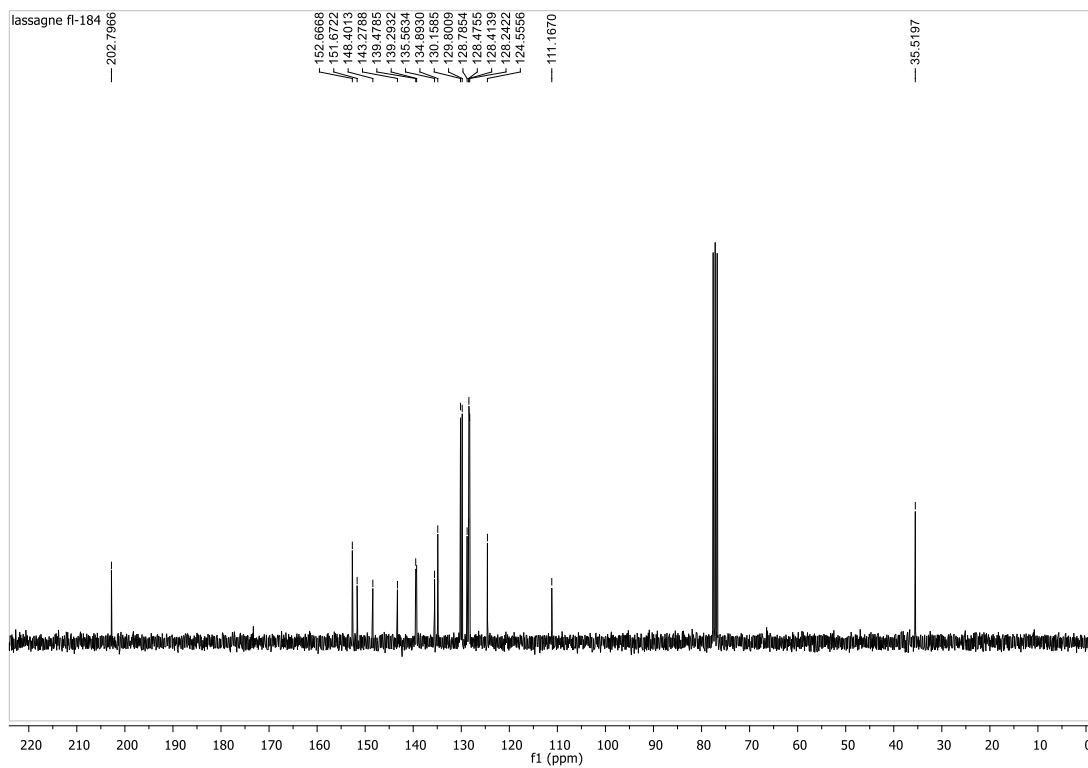
5-Acetyl-6-amino-2,3-diphenylquinoxaline (11b)



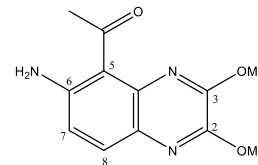
^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)



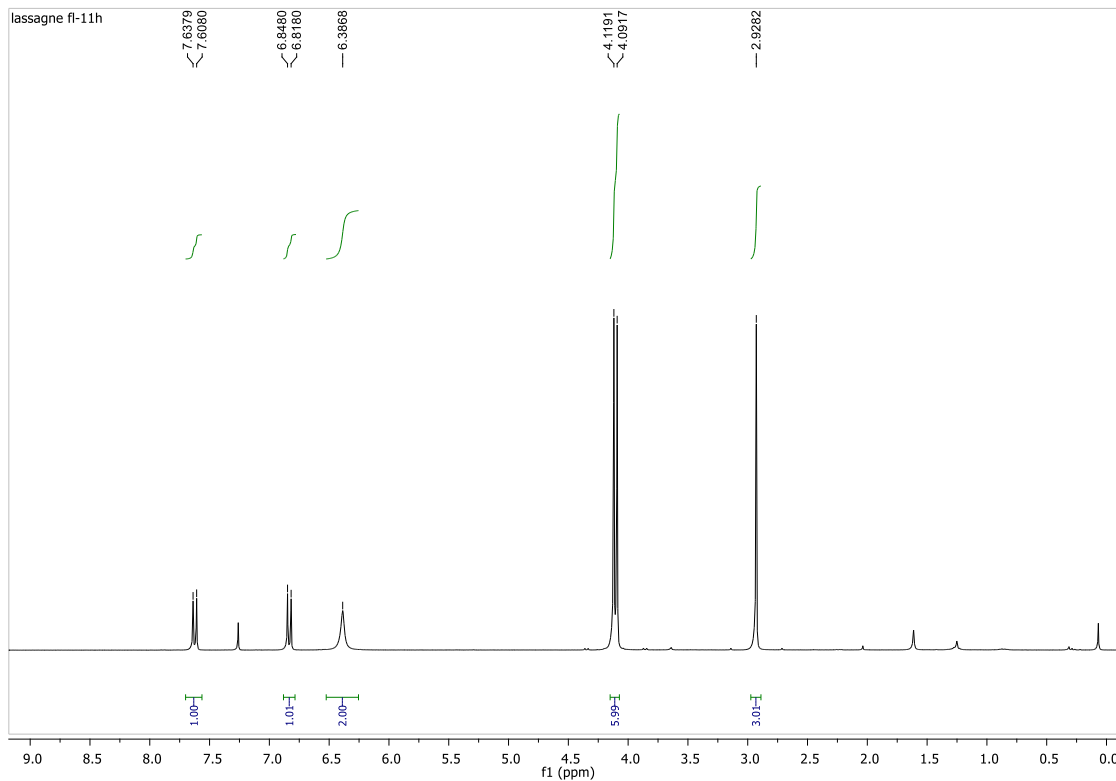
^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3)



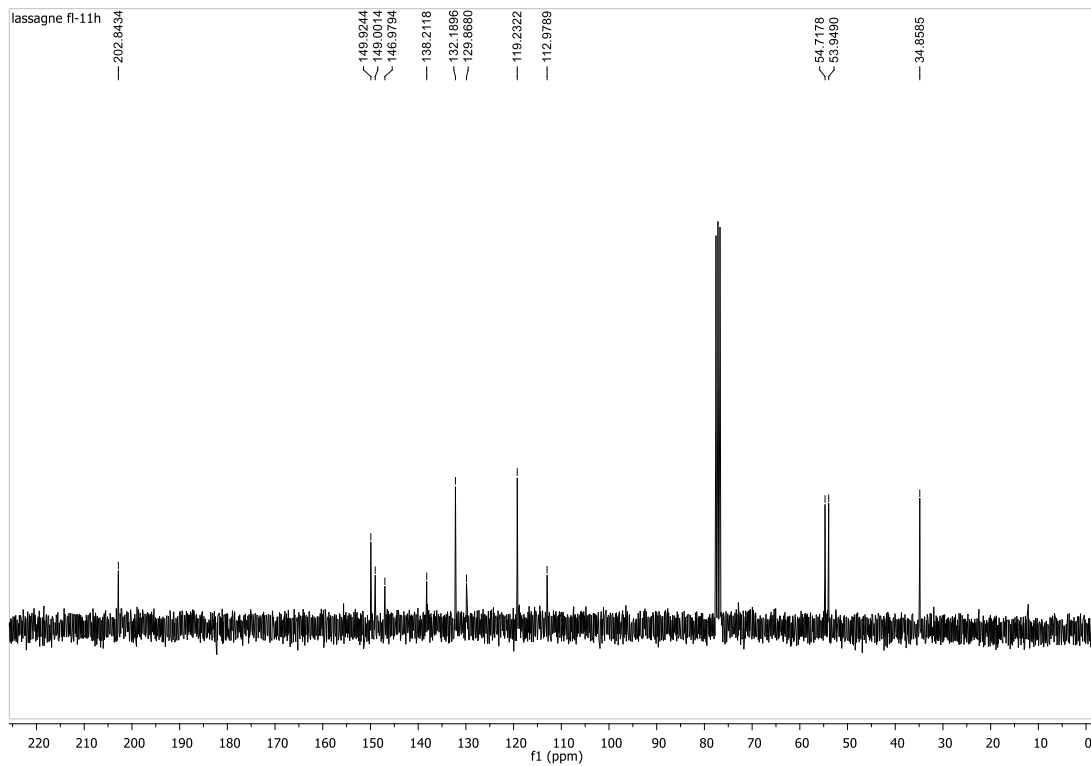
5-Acetyl-6-amino-2,3-dimethoxyquinoxaline (11h)



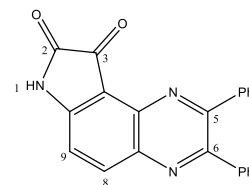
^1H NMR (300 MHz, CDCl_3)



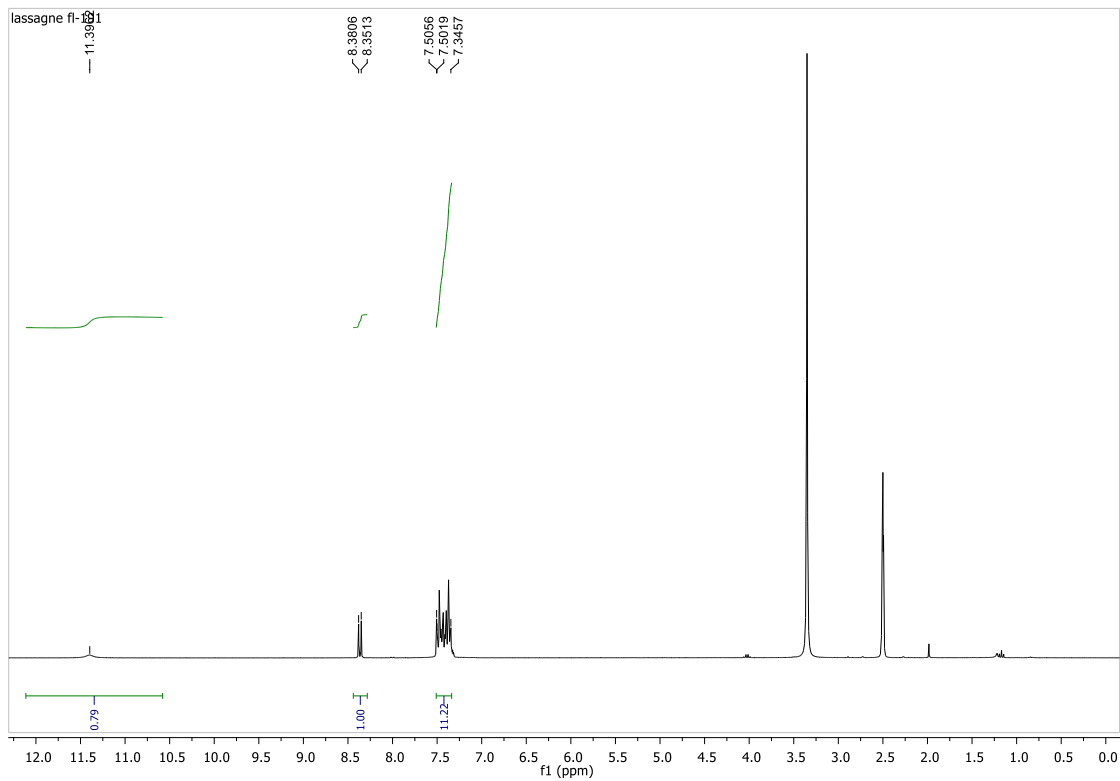
^{13}C NMR (75 MHz, CDCl_3)



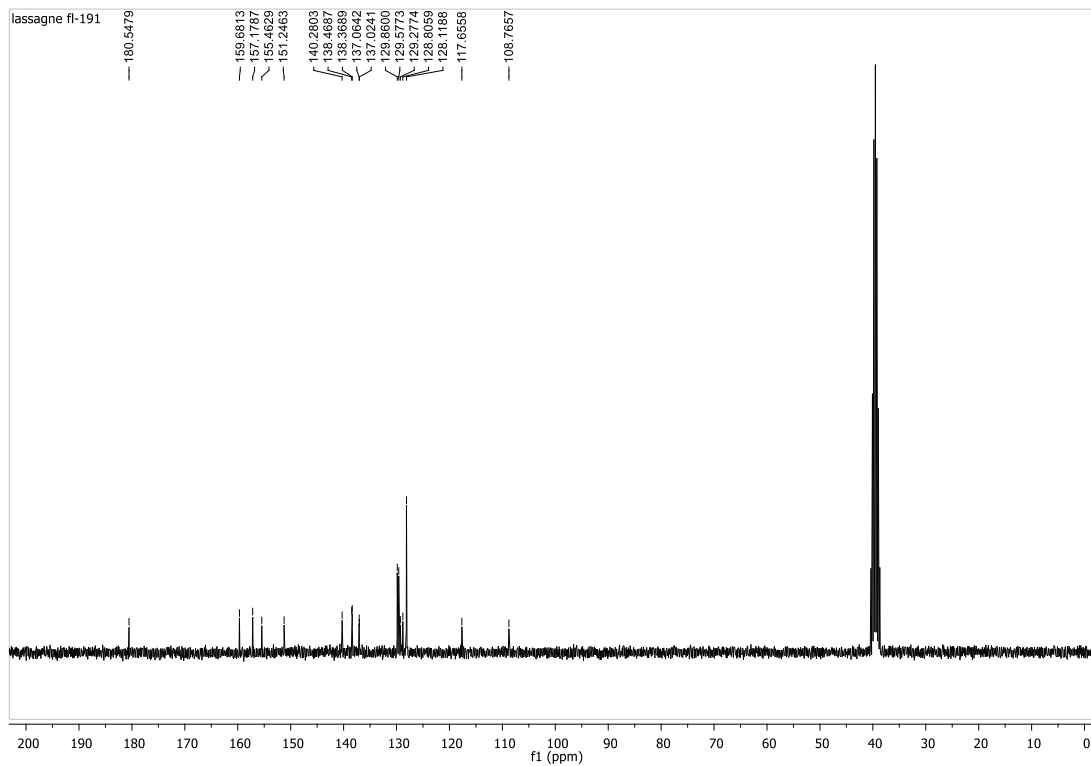
5,6-Diphenylpyrazino[b,e]isatin (12b)



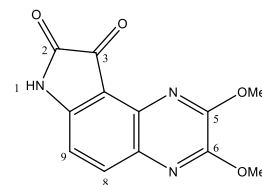
^1H NMR (300 MHz, $(\text{CD}_3)_2\text{SO}$)



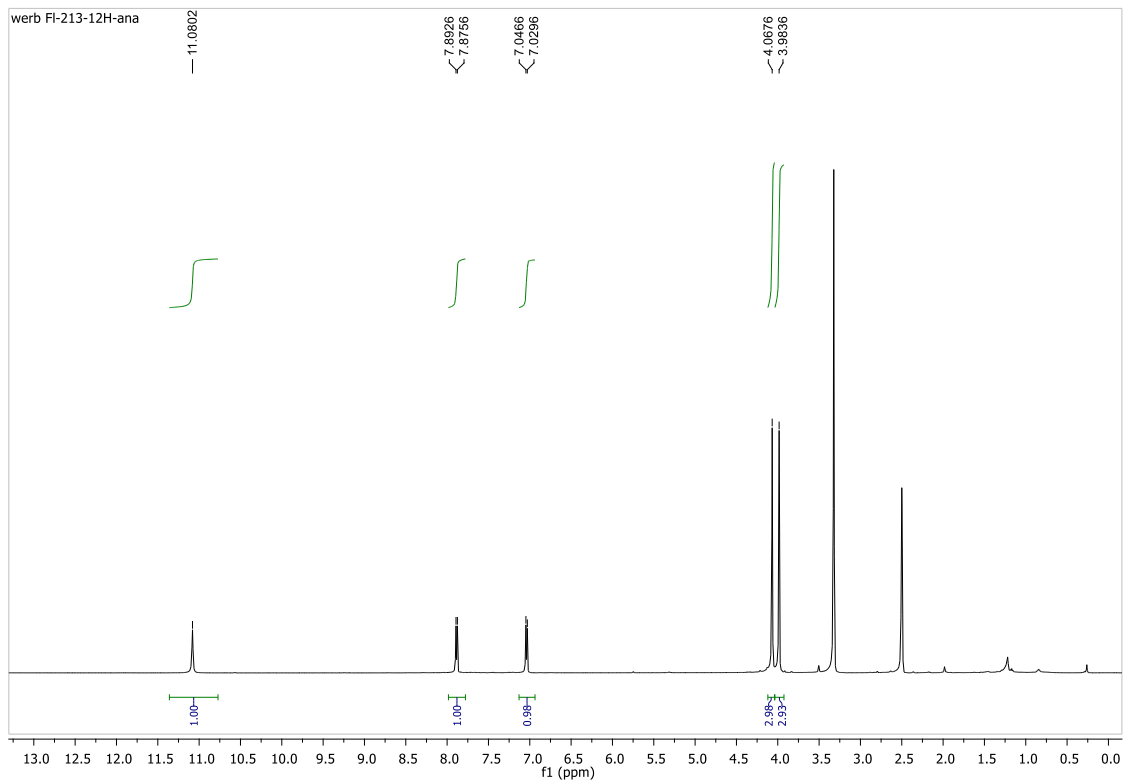
^{13}C NMR (75 MHz, $(\text{CD}_3)_2\text{SO}$)



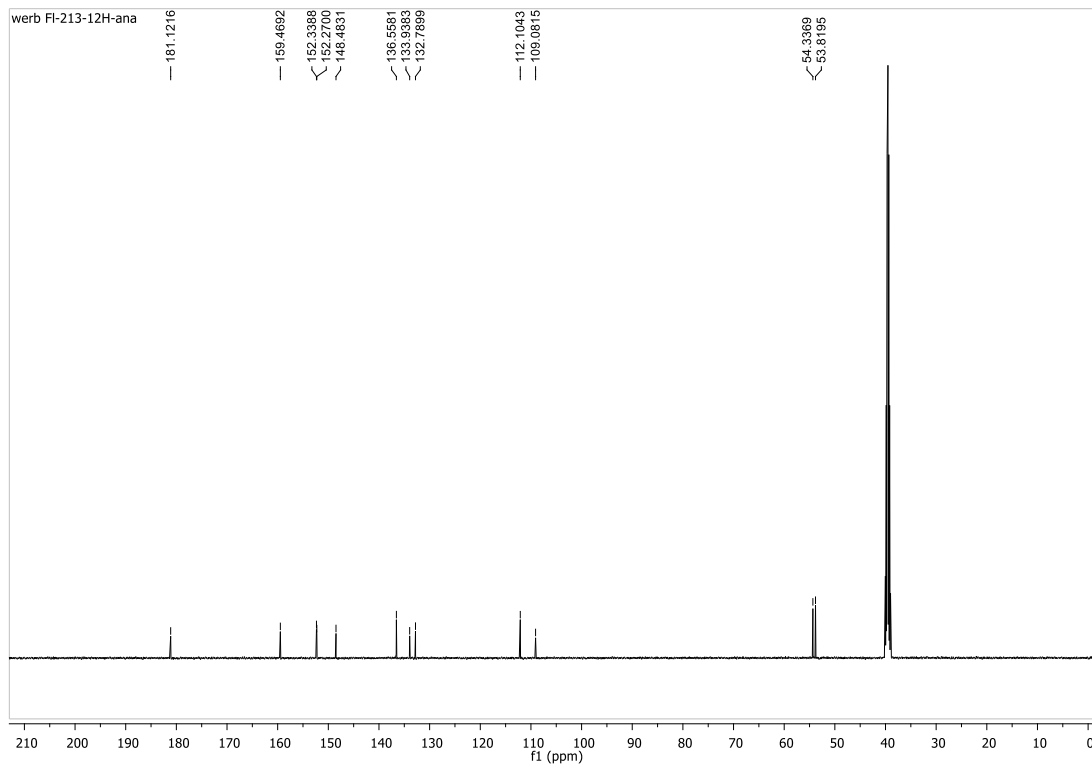
5,6-Dimethoxy pyrazino[b,e]isatin (12h)



^1H NMR (500 MHz, $(\text{CD}_3)_2\text{SO}$)

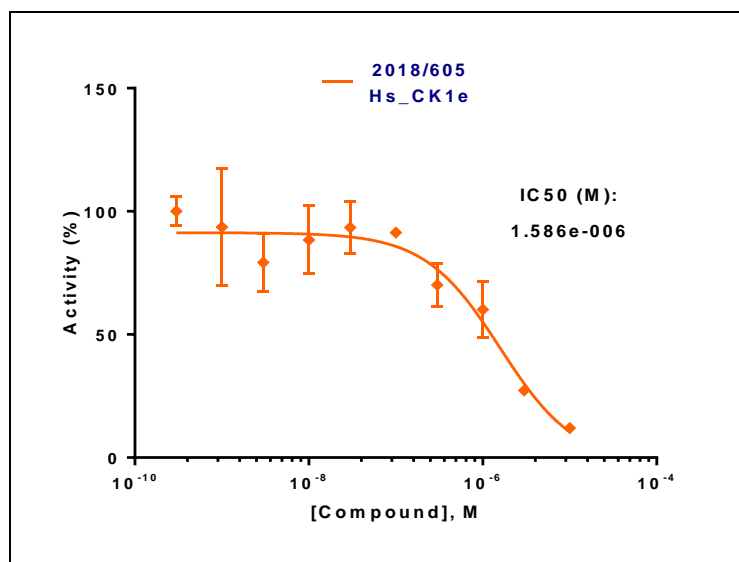
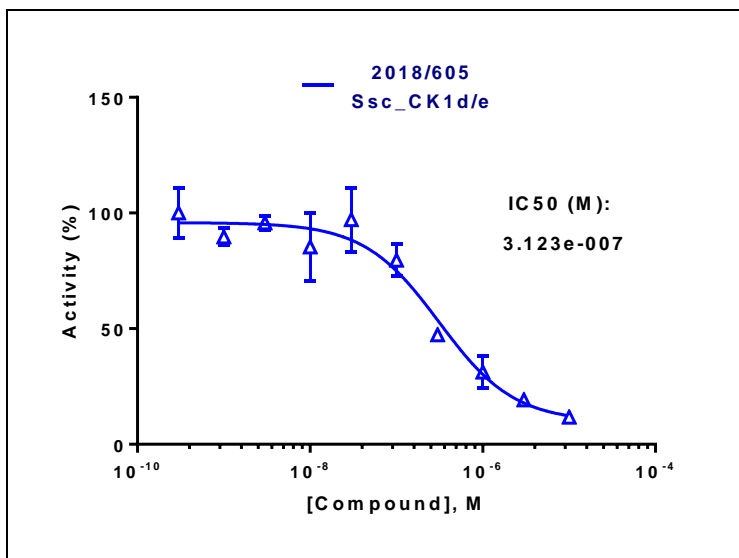


^{13}C NMR (126 MHz, $(\text{CD}_3)_2\text{SO}$)



Titration curves for IC₅₀ determination

Compound 9c



References

- 1 H. E. Gottlieb, V. Kotlyar, A. Nudelman, *J. Org. Chem.* **1997**, *62*, 7512-7515.
- 2 G. Le Douaron, L. Ferrié, J. E. Sepulveda-Diaz, M. Amar, A. Harfouche, B. Séon-Méniel, R. Raisman-Vozari, P. P. Michel, B. Figadère, *J. Med. Chem.* **2016**, *59*, 6169-6186.
- 3 S. Ancizu, N. Castrillo, S. Perez-Silanes, I. Aldana, A. Monge, P. Delagrangé, D.-H. Caignard, S. Galiano, *Molecules* **2012**, *17*, 7737-7757.
- 4 M. I. Shahin, D. A. Abou El Ella, N. S. M. Ismail, K. A. M. Abouzid, *Bioorg. Chem.* **2014**, *56*, 16-26.
- 5 E. Ford, A. Brewster, G. Jones, J. Bailey, N. Sumner, *Tetrahedron Lett.* **2000**, *41*, 3197-3198.
- 6 F. Lassagne, C. Duguépéroux, C. Roca, C. Perez, A. Martinez, B. Baratte, T. Robert, S. Ruchaud, S. Bach, W. Erb, T. Roisnel, F. Mongin, *Org. Biomol. Chem.* **2020**, *18*, 154-162.
- 7 G. M. Sheldrick, *Acta Crystallogr., Sect. A* **2015**, *71*, 3-8.
- 8 G. M. Sheldrick, *Acta Crystallogr., Sect. C* **2015**, *71*, 3-8.
- 9 L. J. Farrugia, *J. Appl. Crystallogr.* **1997**, *30*, 565.
- 10 X. Hui, F. Schmidt, M. A. Fakhfakh, X. Franck, B. Figadere, *Heterocycles* **2007**, *72*, 353-361.
- 11 F. Lassagne, F. Chevallier, F. Mongin, *Synth. Commun.* **2014**, *44*, 141-149.
- 12 S. Kano, S. Shibuya, Y. Yuasa, *J. Heterocycl. Chem.* **1980**, *17*, 1559-1561.
- 13 C. Musante, V. Parrini, *Sperimentale, Sez. Chim. Biol.* **1952**, *3*, 140-153.
- 14 F. Kipnis, J. Ornfelt, *J. Am. Chem. Soc.* **1946**, *68*, 2734.
- 15 J. Salon, V. Milata, A. Gatial, N. Pronayova, J. Lesko, P. Cernuchova, Z. Rappoport, G. Vo-Thanh, A. Loupy, *Eur. J. Org. Chem.* **2005**, 4870-4878.
- 16 H. Gilman, H. S. Broadbent, *J. Am. Chem. Soc.* **1948**, *70*, 2619-2621.
- 17 X. Liu, C. Qiu, Q. Shen, M. Liu, H. Sheng, G. Du, J. Wang, L. Ding, PCT Int. Appl. 2020, WO 2020200191 A1 20201008.
- 18 For a facile synthesis of mono- and dialkoxyquinoxalines, see: H. V. S. Krishnan, S. K. Chowdary, P. K. Dubey, A. Naidu, V. Sunkara, *Heterocycl. Commun.* **2000**, *6*, 333-338.