

Table 1														
Bond	Avogadro	Psi4	Experimental (ED)		Experimental (X-Ray)		D Avogadro-Psi4		D Avogadro-ED	D Psi4-ED	D Avogadro-Xray		D Psi4-Xray	
O1-C3	1,22741	1,196526	1,209	0,005	1,22	0,004	0,0308839999999999	0,0184099999999998	0,0124740000000001	0,0074099999999992		0,023474		
O2-C4	1,23474	1,193785	1,204	0,005	1,223	0,004	0,0409549999999999	0,03074	0,0102149999999999	0,0117399999999999		0,029215		
N1-C2	1,37379	1,3643	1,376	0,003	1,371	0,003	0,00849	0,00220999999999982	0,0116999999999998	0,00279000000000007	0,0066999999999993			
N1-C4	1,39529	1,370782	1,383	0,003	1,372	0,004	0,024508	0,0122899999999999	0,0122180000000001	0,0232899999999998	0,00121800000000016		Mean D	Variance D
N1-C6	1,45144	1,455512	1,458	0,013	1,467	0,004	0,00407199999999985	0,0065599999999999	0,00248800000000005	0,01556	0,01148800000000002	Avogadro-Psi4	0,0176045333333333	0,0127236440876557
N2-C1	1,36534	1,381427	1,373	0,003	1,386	0,003	0,016087	0,00766	0,0084269999999996	0,0206599999999999	0,00457299999999994	Avogadro-ED	0,0130473333333333	0,0087820071466488
N2-C5	1,36992	1,325002	1,362	0,003	1,337	0,004	0,044918	0,00791999999999993	0,0369980000000001	0,0329200000000001	0,011998	Avogadro-Xray	0,015114	0,00872881009727476
N2-C7	1,44084	1,4483	1,456	0,013	1,462	0,004	0,00746000000000002	0,01516000000000001	0,00770000000000004	0,02116000000000001	0,0137	Psi4-ED	0,0141306666666667	0,00932034238079472
N3-C3	1,39799	1,392548	1,408	0,003	1,421	0,004	0,00544200000000017	0,0100999999999999	0,015452	0,02301	0,02845200000000001	Psi4-Xray	0,01294160000000001	0,00911709500099362
N3-C4	1,41085	1,389176	1,41	0,003	1,388	0,004	0,021674	0,000850000000000017	0,020824	0,02285	0,00117600000000007			
N3-C8	1,44978	1,462484	1,464	0,013	1,466	0,004	0,01270399999999998	0,01421999999999999	0,001516000000000007	0,0162199999999999	0,00351600000000007			
N4-C2	1,36218	1,344212	1,359	0,003	1,354	0,004	0,017968	0,00317999999999996	0,014788	0,00817999999999985	0,00978800000000013			
N4-C5	1,3184	1,308199	1,297	0,011	1,328	0,004	0,01020100000000001	0,02140000000000001	0,011199	0,00960000000000005	0,01980100000000002			
C1-C2	1,36179	1,352507	1,382	0,003	1,365	0,004	0,00928300000000015	0,02020999999999998	0,029493	0,00320999999999994	0,01248300000000001			
C1-C3	1,42111	1,429532	1,446	0,018	1,413	0,004	0,00842199999999993	0,0248899999999999	0,0164679999999999	0,00811000000000006	0,016532			
C5-H1	1,0829	1,069727	1,085	0,011	1,085	0,004	0,01317299999999999	0,00209999999999999	0,0152729999999999	0,00209999999999999	0,0152729999999999			
C6-H2	1,09461	1,080486	1,085	0,011	1,085	0,004	0,014124	0,00961000000000012	0,00451399999999991	0,00961000000000012	0,00451399999999991			
C6-H3	1,09311	1,073845	1,085	0,011	1,085	0,004	0,01826500000000001	0,00811000000000006	0,011155	0,00811000000000006	0,011155			
C6-H4	1,09464	1,080486	1,085	0,011	1,085	0,004	0,014154	0,00964000000000009	0,00451399999999991	0,00964000000000009	0,00451399999999991			
C7-H5	1,09305	1,079701	1,085	0,011	1,085	0,004	0,01334900000000001	0,00805000000000011	0,00529899999999994	0,00805000000000011	0,00529899999999994			
C7-H6	1,09282	1,078965	1,085	0,011	1,085	0,004	0,013855	0,00781999999999994	0,00603500000000001	0,00781999999999994	0,00603500000000001			
C7-H7	1,09282	1,078969	1,085	0,011	1,085	0,004	0,01385099999999998	0,00781999999999994	0,00603099999999999	0,00781999999999994	0,00603099999999999			
C8-H8	1,09277	1,073582	1,085	0,011	1,085	0,004	0,019188	0,00777000000000005	0,01141799999999999	0,00777000000000005	0,01141799999999999			
C8-H9	1,095	1,078996	1,085	0,011	1,085	0,004	0,01600399999999999	0,01	0,00600399999999999	0,01	0,00600399999999999			
C8-H10	1,09497	1,07899	1,085	0,011	1,085	0,004	0,01598000000000001	0,00997000000000003	0,00601000000000007	0,00997000000000003	0,00601000000000007			

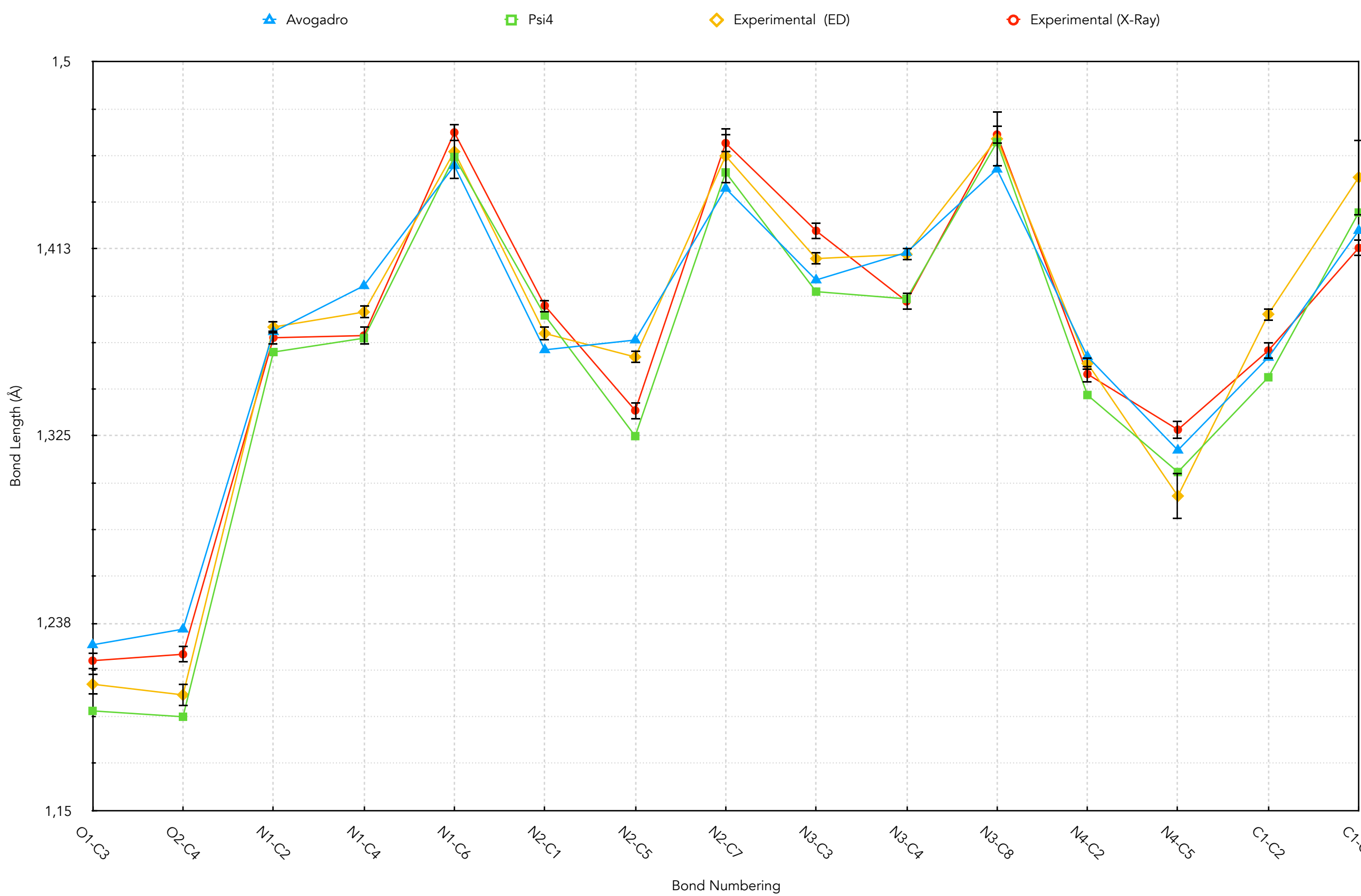


Table 1													
Bond	Avogadro	Psi4	Experimental (ED)	Exp. Error (ED)	Experimental (X-Ray)	Exp. Error (X-Ray)	D Avogadro-Psi4	D Avogadro-ED	D Psi4-ED	D Avogadro-Xray	D Psi4-Xray		
O2-C4	1,23474	1,193785	1,204	0,005	1,223	0,004	0,0409549999999999	0,03074	0,0102149999999999	0,0117399999999999	0,029215		
O1-C3	1,22741	1,196526	1,209	0,005	1,22	0,004	0,0308839999999999	0,0184099999999998	0,0124740000000001	0,00740999999999992	0,023474		
N4-C5	1,3184	1,308199	1,297	0,011	1,328	0,004	0,0102010000000001	0,0214000000000001	0,011199	0,00960000000000005	0,0198010000000002		
N2-C5	1,36992	1,325002	1,362	0,003	1,337	0,004	0,044918	0,00791999999999993	0,0369980000000001	0,0329200000000001	0,011998	Avogadro-Xray	
N4-C2	1,36218	1,344212	1,359	0,003	1,354	0,004	0,017968	0,00317999999999996	0,014788	0,00817999999999985	0,00978800000000013		
C1-C2	1,36179	1,352507	1,382	0,003	1,365	0,004	0,00928300000000015	0,0202099999999998	0,029493	0,00320999999999994	0,0124930000000001		
N1-C2	1,37379	1,3643	1,376	0,003	1,371	0,003	0,00949	0,00220999999999982	0,01169999999999998	0,00279000000000007	0,00669999999999993		
N1-C4	1,39529	1,370782	1,383	0,003	1,372	0,004	0,024508	0,0122899999999999	0,01221800000000001	0,0232899999999998	0,00121800000000016		
N2-C1	1,36534	1,381427	1,373	0,003	1,386	0,003	0,016087	0,00766	0,00842699999999996	0,0206599999999999	0,00457299999999994	Avogadro-ED	Mean D 0,0096653333333328
N3-C4	1,41085	1,389176	1,41	0,003	1,388	0,004	0,021674	0,000850000000000017	0,020824	0,02285	0,00117600000000007		Variance D 0,00682769137584654
N3-C3	1,39799	1,392548	1,408	0,003	1,421	0,004	0,005442000000000017	0,0100099999999999	0,015452	0,02301	0,0284520000000001	Psi4-Xray	0,010748133333334
C1-C3	1,42111	1,429532	1,446	0,018	1,413	0,004	0,00842199999999993	0,0248899999999999	0,0164679999999999	0,00811000000000006	0,016532		
N2-C7	1,44084	1,4483	1,456	0,013	1,462	0,004	0,00746000000000002	0,0151600000000001	0,00770000000000004	0,0221600000000001	0,0137	Psi4-ED	0,0113606666666666
N1-C6	1,45144	1,455512	1,458	0,013	1,467	0,004	0,00407199999999995	0,0065599999999999	0,00248800000000005	0,01556	0,01148800000000002	Avogadro-Psi4	0,00758168960123821
N3-C8	1,44978	1,462484	1,464	0,013	1,466	0,004	0,01270399999999998	0,0142199999999999	0,00151600000000007	0,0162199999999999	0,00351600000000007		0,00503115019794537
C5-H1	1,0829	1,069727	1,085	0,011	1,085	0,004	0,01317299999999999	0,0020999999999999	0,0152729999999999	0,0020999999999999	0,0152729999999999		
C6-H2	1,09461	1,080486	1,085	0,011	1,085	0,004	0,014124	0,00961000000000012	0,00451399999999991	0,00961000000000012	0,00451399999999991		
C6-H3	1,09311	1,073845	1,085	0,011	1,085	0,004	0,01926500000000001	0,00811000000000006	0,011155	0,00811000000000006	0,011155		
C6-H4	1,09464	1,080486	1,085	0,011	1,085	0,004	0,014154	0,00964000000000009	0,00451399999999991	0,00964000000000009	0,00451399999999991		
C7-H5	1,09305	1,079701	1,085	0,011	1,085	0,004	0,01334900000000001	0,00805000000000011	0,00529899999999994	0,00805000000000011	0,00529899999999994		
C7-H6	1,09282	1,078965	1,085	0,011	1,085	0,004	0,013855	0,00781999999999994	0,00603500000000001	0,00781999999999994	0,00603500000000001		
C7-H7	1,09282	1,078969	1,085	0,011	1,085	0,004	0,01385099999999998	0,00781999999999994	0,0060309999999999	0,00781999999999994	0,0060309999999999		
C8-H8	1,09277	1,073582	1,085	0,011	1,085	0,004	0,019188	0,00777000000000005	0,0114179999999999	0,00777000000000005	0,0114179999999999		
C8-H9	1,095	1,078996	1,085	0,011	1,085	0,004	0,01600399999999999	0,01	0,00600399999999999	0,01	0,00600399999999999		
C8-H10	1,09497	1,07899	1,085	0,011	1,085	0,004	0,01598000000000001	0,00997000000000003	0,00601000000000007	0,00997000000000003	0,00601000000000007		

