

Table 1

Bond	Avogadro	Psi4	Experimental (ED)		Experimental (X-Ray)		
N3-C4-N1	117,1888	117,714	116,5	1,1	117,4	0,2	
C4-N1-C2	119,2944	119,040	120,3		119,4	0,2	
N1-C2-C1	121,8393	122,378	121,5	1,3	122,0	0,3	
C2-C1-C3	123,2387	122,714	122,9	1	123,3	0,3	
C1-C3-N3	112,7677	111,674	111,0		111,2	0,3	
C3-N3-C4	125,6711	126,480	127,8		126,7	0,2	
C2-C1-N2	104,9550	105,288	104,7	1,4	104,8	0,2	
C1-N2-C5	107,0442	105,219	105,6		106,0	0,2	
N2-C5-N4	111,6393	114,257	114,2		113,7	0,2	
C5-N4-C2	104,4046	103,705	103,8		103,3	0,2	
N4-C2-C1	111,9569	111,531	111,6	1	112,1	0,3	
C4-N3-C8	116,2088	115,124	114,4		116,8	0,2	
N1-C4-O2	121,9119	122,100	122,2		121,0	0,3	
C2-N1-C6	120,0662	120,228	121,8		121,2	0,2	
C1-C3-O1	122,7251	125,735	125,9		127,9	0,3	
C1-N2-C7	126,7547	127,406	126,7		127,9	0,2	
N2-C5-H1	122,9207	121,802	121,2		0		

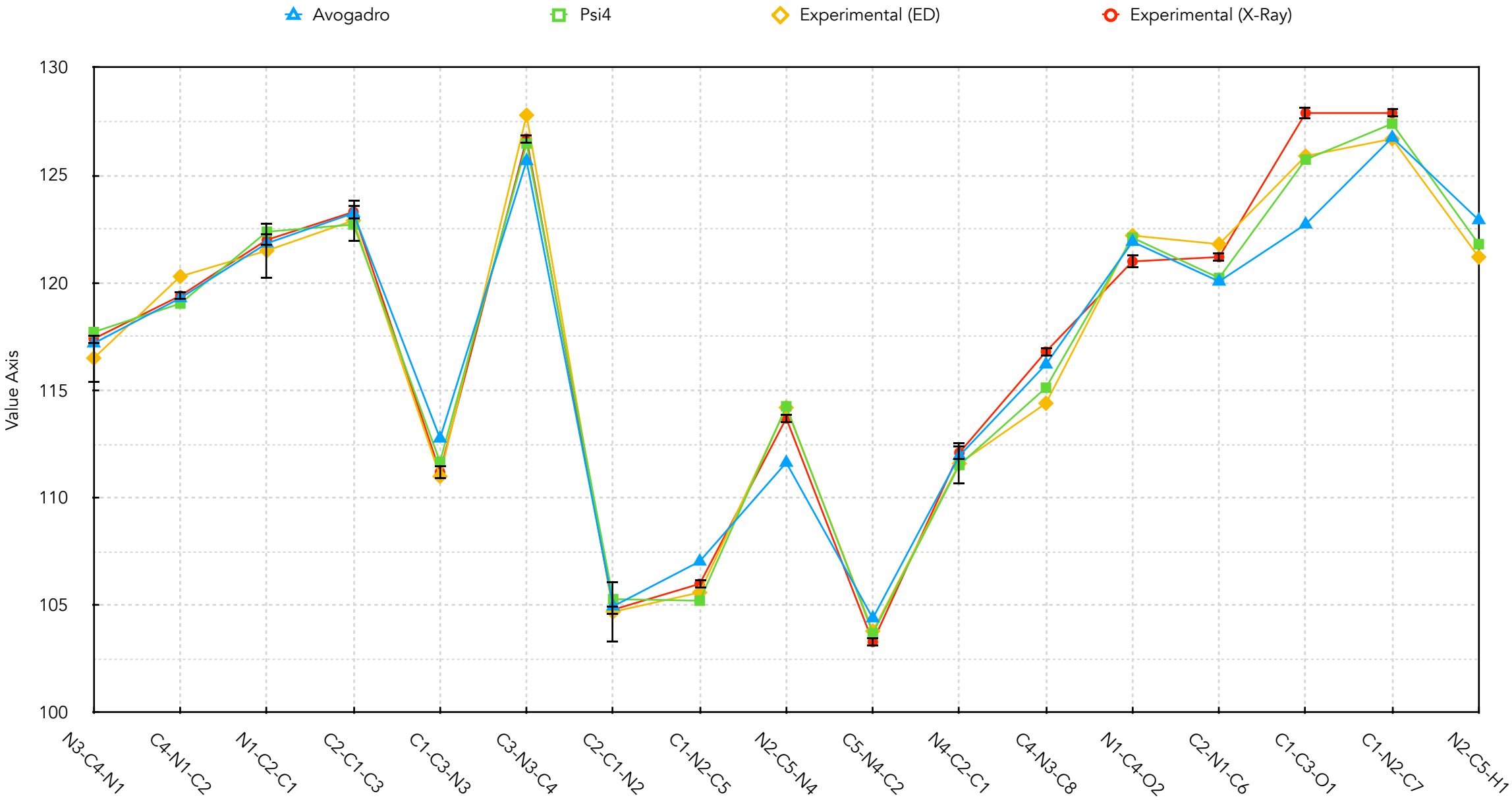


Table 1

Bond	Avogadro	Psi4	Experimental (ED)		Experimental (X-Ray)		
C5-N4-C2	104,4046	103,705	103,8		103,3	0,2	
C1-N2-C5	107,0442	105,219	105,6		106,0	0,2	
C2-C1-N2	104,9550	105,288	104,7	1,4	104,8	0,2	
N4-C2-C1	111,9569	111,531	111,6	1	112,1	0,3	
C1-C3-N3	112,7677	111,674	111,0		111,2	0,3	
N2-C5-N4	111,6393	114,257	114,2		113,7	0,2	
C4-N3-C8	116,2088	115,124	114,4		116,8	0,2	
N3-C4-N1	117,1888	117,714	116,5	1,1	117,4	0,2	
C4-N1-C2	119,2944	119,040	120,3		119,4	0,2	
C2-N1-C6	120,0662	120,228	121,8		121,2	0,2	
N1-C4-O2	121,9119	122,100	122,2		121,0	0,3	
N1-C2-C1	121,8393	122,378	121,5	1,3	122,0	0,3	
C2-C1-C3	123,2387	122,714	122,9	1	123,3	0,3	
C1-C3-O1	122,7251	125,735	125,9		127,9	0,3	
C3-N3-C4	125,6711	126,480	127,8		126,7	0,2	
C1-N2-C7	126,7547	127,406	126,7		127,9	0,2	
N2-C5-H1	122,9207	121,802	121,2		0		

