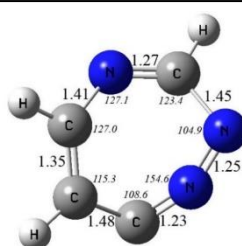
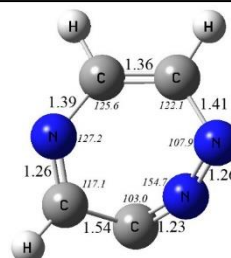


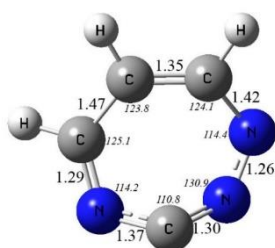
1a, C₁, Min
 $\angle N_2N_1C_6C_5 = 117/96$



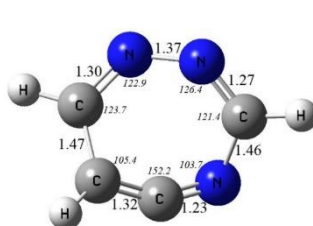
2a, C₁, Min
 $\angle N_2N_1C_6C_5 = 113/57$



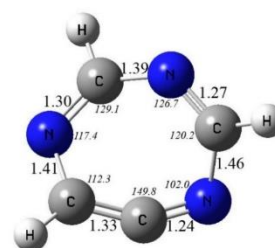
3a, C₁, Min
 $\angle N_2N_1C_6N_5 = 115/94$



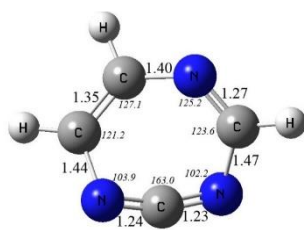
4a, C₁, TS
 $\angle N_2N_1N_6C_5 = 110/91$



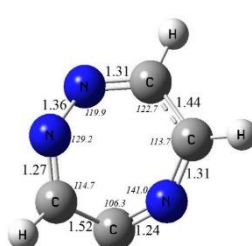
5a, C₁, Min
 $\angle N_2N_1C_6C_5 = 117/55$



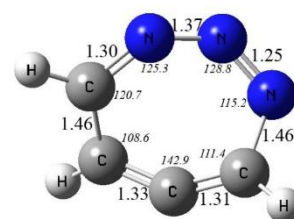
6a, C₁, Min
 $\angle N_2N_1C_6C_5 = 119/96$



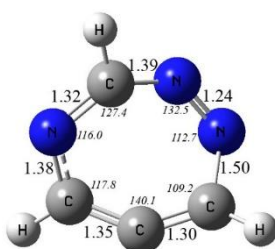
7a, C₁, Min
 $\angle N_2N_1C_6C_5 = 114/54$



8a, C₁, Min
 $\angle C_2N_1C_6N_5 = 117/60$

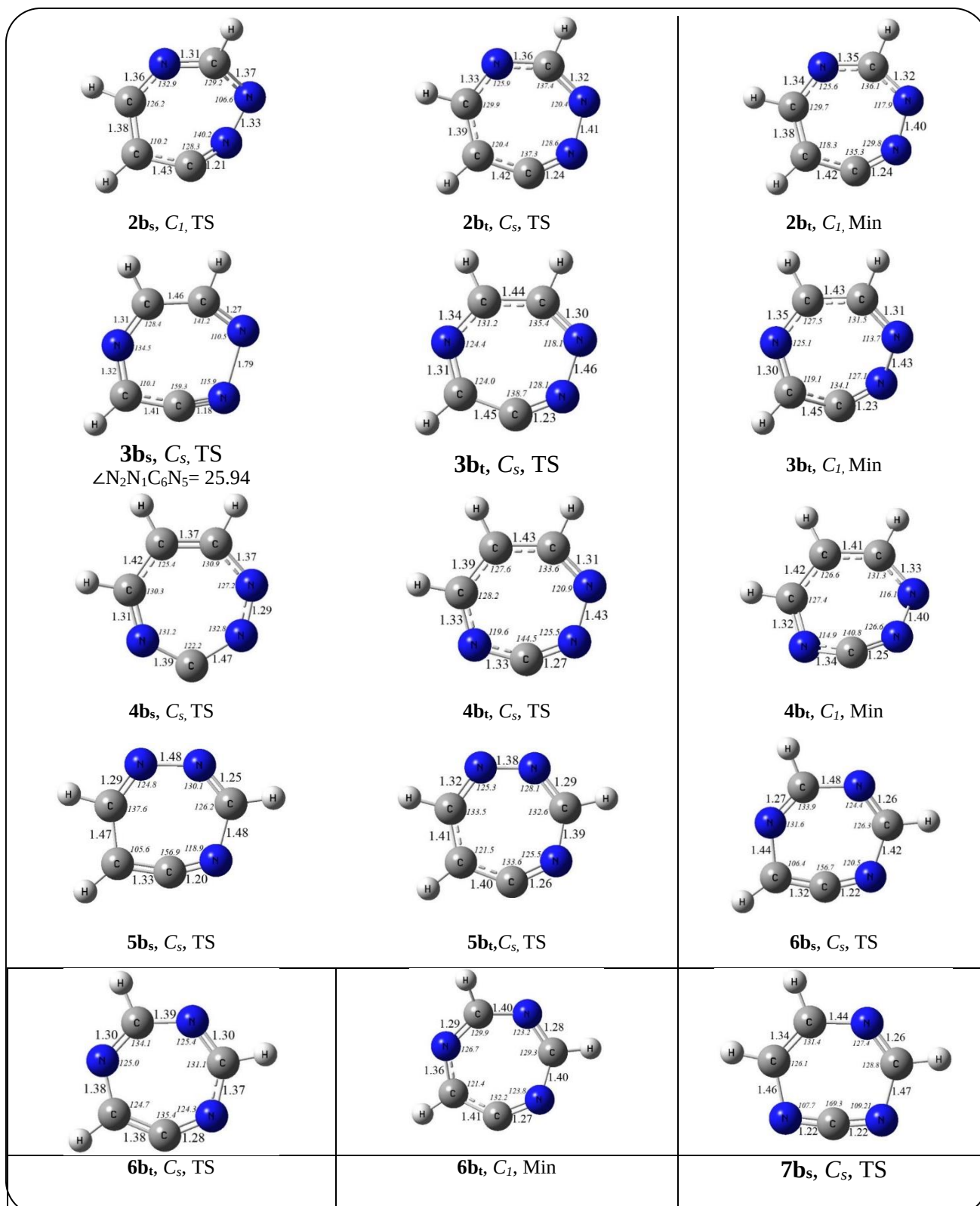


9a, C₁, Min
 $\angle N_2C_1C_6C_5 = 111/22$



10a, C₁, Min
 $\angle N_2C_1C_6N_5 = 111/83$

شکل ۱ - پارامترهای هندسی بهینه‌سازی شده در روش B3LYP/6-311++G** شامل طول پیوند برحسب آنگسترم (Å) و زاویه‌ی پیوند برحسب درجه (°) برای گونه‌های تری‌آزاسیکلوپنتا-۱-۴,۲,۶-تتران (1a-10a).



شکل ۲- پارامترهای هندسی بهینه‌سازی شده در روش B3LYP/6-311++G** شامل طول پیوند برحسب آنگسترم (Å) و زاویه‌ی پیوند برحسب درجه (°) برای حالت‌های الکترونی یک‌تایی (1b_s-9b_s) و سه‌تایی (1b_t-9b_t) از گونه‌های تری‌آزاسیکلوپنتا-۵,۳,۱-تری‌ان-۷-ایلیدن.

7bt, C_1, Min	7bt, C_s, TS	8bs, C_s, TS
8bt, C_1, Min	8bt, C_s, TS	9bs, C_1, TS
9bt, C_s, TS	9bt, C_1, Min	10bs, C_1, TS
10bt, C_s, TS	10bt, C_1, Min	

شکل ۲- پارامترهای هندسی بهینه‌سازی شده در روش B3LYP/6-311++G** شامل طول پیوند برحسب آنگسترم (Å) و زاویه‌ی پیوند برحسب درجه (°) برای حالت‌های الکترونی یک‌تایی (1b_s-9b_s) و سه‌تایی (1b_t-9b_t) از گونه‌های تری‌آزاسیکلوپنتا-۱،۳،۵-تری‌ان-۷-یلیدن. (ادامه)

جدول ۱ - مرتبه‌ی پیوندهای مهم به‌دست آمده از روش B3LYP/6-311++G** برای گونه‌های تری‌آزاسیکلوپنتا-۱،۲،۴-تتران (1a-10a) و حالت‌های الکترونی یک‌تایی (s) و سه‌تایی (t) از گونه‌های تری‌آزاسیکلوپنتا-۱،۳،۵-تری‌ان-۷-ایلیدن (2b-10b).

گونه‌ها	مرتبه‌ی پیوند		گونه‌ها	مرتبه‌ی پیوند	
	N ₁ -C ₇	C ₆ -C ₇		N ₁ -C ₇	N ₆ -C ₇
1a	۱/۳۸	۰/۹۶	7a	۱/۴۳	۱/۴۱
2a	۱/۴۴	۰/۹۵	7b _s	۱/۴۳	۱/۴۵
2b _s	۱/۵۲	۱/۰۵	7b _t (C _s)	۱/۲۲	۱/۲۴
2b _t (C _s)	۱/۴۱	۱/۰۸	7b _t (C ₁)	۱/۱۹	۱/۲۹
2b _t (C ₁)	۱/۴۳	۱/۰۷		N ₁ -C ₇	C ₆ -C ₇
3a	۱/۴۵	۰/۸۴	8a	۱/۴۰	۰/۸۷
3b _s	۱/۷۳	۱/۰۶	8b _s	۱/۵۳	۱/۲۲
3b _t (C _s)	۱/۴۸	۱/۰۳	8b _t (C _s)	۱/۴۱	۰/۹۸
3b _t (C ₁)	۱/۴۹	۱/۰۲	8b _t (C ₁)	۱/۴۳	۱/۰۱
	N ₁ -C ₇	N ₆ -C ₇		C ₁ -C ₇	C ₆ -C ₇
4a	۱/۲۲	۱/۰۲	9a	۱/۴۴	۱/۳۶
4b _s	۰/۹۴	۱/۰۷	9b _s	۱/۰۹	۱/۲۴
4b _t (C _s)	۱/۳۷	۱/۱۲	9b _t (C _s)	۱/۰۷	۱/۲۶
4b _t (C ₁)	۱/۴۲	۱/۱۰	9b _t (C ₁)	۱/۰۸	۱/۴۱
	N ₁ -C ₇	C ₆ -C ₇	10a	۱/۴۷	۱/۳۱
5a	۱/۴۳	۱/۳۷	10b _s	۱/۱۰	۱/۲۲
5b _s	۱/۵۲	۱/۲۹	10b _t (C _s)	۱/۱۳	۱/۲۲
5b _t (C _s)	۱/۳۳	۱/۱۳	10b _t (C ₁)	۱/۲۰	۱/۱۴
6a	۱/۴۱	۱/۳۵			
6b _s	۱/۴۲	۱/۳۴			
6b _t (C _s)	۱/۳۵	۱/۲۲			
6b _t (C ₁)	۱/۳۳	۱/۱۳			

جدول ۲- هیبریداسیون NBO به دست آمده از روش B3LYP/6-311++G** برای گونه‌های تری‌آزاسیکلوپنتا-۱،۲،۴-تتران (1a-10a) و حالت‌های الکترونی یک‌تایی (s) سه‌تایی (t) از گونه‌های تری‌آزاسیکلوپنتا-۱،۳،۵-تری‌ان-۷-ایلیدن (2b-10b).

گونه‌ها		هیبریداسیون پیوندهای π								جفت الکترون غیر پیوندی	
1a	$\pi_{(1)N1-N2}$		$\pi_{(1)N3-C4}$		$\pi_{(1)C5-C6}$		$\pi_{(1)C7-N1}$		پیوندی		
	N ₁	N ₂	N ₃	C ₄	C ₅	C ₆	C ₇	N ₁	Lp _{1C7}	Lp _{1N2}	
	s ¹ p ^{36.20}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{85.48}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{77.23}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{29.67}	s ¹ p ^{1.41}	s ⁰ p ¹⁰⁰	
2a	$\pi_{(1)N1-N2}$		$\pi_{(1)C3-N4}$		$\pi_{(1)C5-C6}$		$\pi_{(1)C7-N1}$		Lp		
	N ₁	N ₂	C ₃	N ₄	C ₅	C ₆	C ₇	N ₁	Lp _{1C7}		
	s ¹ p ^{72.38}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{69.23}	s ¹ p ^{48.62}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{28.29}	s ¹ p ^{1.47}		
2b _s	$\pi_{(1)C3-N4}$		$\pi_{(1)C5-C6}$		$\pi_{(1)C7-N1}$		$\pi_{(2)C7-N1}$		Lp		
	C ₃	N ₄	C ₅	C ₆	C ₇	N ₁	C ₇	N ₁	Lp _{2N2}		
	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{80.27}	s ¹ p ^{31.03}	s ¹ p ^{22.63}	s ¹ p ^{29.36}	s ¹ p ^{65.90}	s ¹ p ^{99.99}		
2b _t (C _s)	$\pi_{(1)N2-C3}$		$\pi_{(1)C5-C6}$		$\pi_{(1)C6-C7}$		Lp				
	N ₂	C ₃	C ₅	C ₆	C ₆	C ₇	Lp ^{*b} _{2N4}		Lp ^{*b} _{1C7}		
	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰		s ¹ p ^{14.22}		
2b _t (C _I)	-N ₂ , $\pi_{(1)N}$		$\pi_{(1)C3-N4}$		$\pi_{(1)C5-C6}$		Lp				
	N ₁	N ₂	C ₅	N ₄	C ₅	C ₆	Lp ^{*b} _{1C7}		Lp ^{*b} _{2C7}		
	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}		s ¹ p ^{14.73}		
گونه‌ها	π هیبریداسیون پیوندهای								جفت الکترون غیر پیوندی		
3a	$\pi_{(1)N2-C3}$		$\pi_{(1)C3-C4}$		$\pi_{(1)N5-C6}$		$\pi_{(1)C7-N1}$		پیوندی		
	N ₂	C ₃	C ₃	C ₄	N ₅	C ₆	C ₇	N ₁	Lp _{1C7}		
	s ¹ p ^{99.12}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{68.72}	s ¹ p ^{48.45}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{18.69}	s ¹ p ^{1.09}		
3b _s	$\pi_{(1)N2-C3}$		$\pi_{(1)N5-C6}$		$\pi_{(1)C7-N1}$		$\pi_{(2)C7-N1}$		Lp _{1C4}		
	N ₂	C ₃	N ₅	C ₆	C ₇	N ₁	C ₇	N ₁			
	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ¹ p ^{19.47}	s ¹ p ^{19.97}	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰		
3b _t (C _s)	$\pi_{(1)N2-C3}$		$\pi_{(1)C5-N6}$		$\pi_{(1)C7-N1}$		$\pi_{(2)C7-N1}$		Lp ^{*b} _{1C4}		
	N ₂	C ₃	C ₅	N ₆	C ₇	N ₁	C ₇	N ₁			
	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ¹ p ^{28.04}	s ¹ p ^{10.34}	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰		
3b _t (C _I)	$\pi_{(1)N2-C3}$		$\pi_{(1)N5-C6}$		$\pi_{(1)C7-N1}$		$\pi_{(1)C7-N1}$		Lp ^{*b} _{1C4}		
	N ₂	C ₃	N ₅	C ₆	C ₇	N ₁	C ₇	N ₁			
	s ¹ p ^{99.99}	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{44.43}	s ¹ p ^{25.66}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{53.32}	s ¹ p ^{99.99}		
گونه‌ها	π هیبریداسیون پیوندهای						جفت الکترون غیر پیوندی				
4a	$\pi_{(1)N1-N2}$		$\pi_{(1)C3-C4}$		$\pi_{(1)C5-N6}$						
	N ₁	N ₂	C ₃	C ₄	C ₅	N ₆	Lp _{1C7}		Lp ^{*b} _{2C7}		
	s ¹ p ^{40.81}	s ¹ p ^{83.94}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{27.96}	s ¹ p ^{19.72}	s ¹ p ^{1.27}		s ¹ p ^{99.99}		

جدول ۲- هیبریداسیون NBO به دست آمده از روش B3LYP/6-311++G** برای گونه های تری آزاسیکلو هپتا-۱،۲،۳،۴-تتران (1a-10a) و حالت های الکترونی یک تایی (s) سه تایی (t) از گونه های تری آزاسیکلو هپتا-۱،۲،۳،۴-تری ان-۷-یلیدن (2b-10b) (ادامه).

4b _s	$\pi_{(1)N1-N2}$		$\pi_{(1)C3-C4}$		$\pi_{(1)C5-N6}$		Lp _{1C7}	Lp* _{2C7}	
	N ₁	N ₂	C ₃	C ₄	C ₅	N ₆			
	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰			
4b _i (C _s)	$\pi_{(1)C3-C4}$		$\pi_{(1)C5-N6}$		$\pi_{(1)C7-N1}$		Lp* ^b _{2N2}	Lp* _{1C7}	
	C ₃	C ₄	C ₅	N ₆	C ₇	N ₁			
	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰			
4b _i (C ₁)	$\pi_{(1)C3-C4}$		$\pi_{(1)C5-N6}$		$\pi_{(1)C7-N1}$		Lp* _{2N2}	Lp* _{1C7}	
	C ₃	C ₄	C ₅	N ₆	C ₇	N ₁			
	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99} d ^{13.15}	s ¹ p ^{99.99}			
هیبریداسیون پیوندهای π									
5a	$\pi_{(1)C2-N3}$		$\pi_{(1)N4-C5}$		$\pi_{(1)C6-C7}$		$\pi_{(1)C7-N1}$		
	C ₂	N ₃	N ₄	C ₅	C ₆	C ₇	C ₇	N ₁	
	s ¹ p ^{38.61}	s ¹ p ^{45.27}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{58.39}	s ¹ p ^{39.46}	s ¹ p ^{99.99}	
5b _s	$\pi_{(1)C2-N3}$		$\pi_{(1)N4-C5}$		$\pi_{(1)C6-C7}$		$\pi_{(1)C7-N1}$		Lp
	C ₂	N ₃	N ₄	C ₅	C ₆	C ₇	C ₇	N ₁	Lp _{1N1}
	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{19.26}	s ⁰ p ¹⁰⁰
5b _i (C _s)	$\pi_{(1)N1-C2}$		$\pi_{(1)N3-N4}$		$\pi_{(1)C5-C6}$		Lp		
	N ₁	C ₂	N ₃	N ₄	C ₅	C ₆	Lp* ^b _{1C7}	Lp* ^b _{2C7}	
	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ¹ p ^{20.44}	
گونه‌ها	هیبریداسیون پیوندهای π								
6a	$\pi_{(1)C2-N3}$		$\pi_{(1)C4-N5}$		$\pi_{(1)C6-C7}$		$\pi_{(1)C7-N1}$		
	C ₂	N ₃	C ₄	N ₅	C ₆	C ₇	C ₇	N ₁	
	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{55.45}	s ¹ p ^{28.60}	s ¹ p ^{99.99}	
6b _s	$\pi_{(1)C2-N3}$		$\pi_{(1)C4-N5}$		$\pi_{(1)C6-C7}$		$\pi_{(1)C7-N1}$		Lp
	C ₂	N ₃	C ₄	N ₅	C ₆	C ₇	C ₇	N ₁	Lp _{1N1}
	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{21.29}	s ⁰ p ¹⁰⁰
6b _i (C _s)	$\pi_{(1)C2-N3}$		$\pi_{(1)C4-N5}$		$\pi_{(1)C7-N1}$		Lp		
	C ₂	N ₃	C ₄	N ₅	C ₇	N ₁	Lp* ^b _{1C6}	Lp* ^b _{1C7}	
	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ¹ p ^{18.60}	
6b _i (C ₁)	$\pi_{(1)C2-N3}$		$\pi_{(1)N5-C6}$		$\pi_{(1)C7-N1}$		$\pi_{(2)C7-N1}$		Lp
	C ₂	N ₃	N ₅	C ₆	C ₇	N ₁	C ₇	N ₁	Lp* ^b _{1C4}
	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ¹ p ^{44.97}	s ¹ p ^{24.26}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}

جدول ۲- هیبریداسیون NBO به دست آمده از روش B3LYP/6-311++G** برای گونه های تری آزاسیکلوهپتا-۱،۲،۳-تتران (1a-10a) و حالت های الکترونی یک تایی (s) سه تایی (t) از گونه های تری آزاسیکلوهپتا-۱،۳،۵-تریان-۷-یلیدن (2b-10b) (ادامه).

	هیبریداسیون پیوندهای π									
7a	$\pi_{(1)C2-N3}$		$\pi_{(1)C4-C5}$		$\pi_{(1)N6-C7}$		$\pi_{(1)C7-N1}$			
	C ₂	N ₃	C ₄	C ₅	N ₆	C ₇	C ₇		N ₁	
	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.04}	s ¹ p ^{65.33}		s ¹ p ^{99.99}	
7b _s	$\pi_{(1)C2-N3}$		$\pi_{(1)C4-C5}$		$\pi_{(1)N6-C7}$		$\pi_{(1)C7-N1}$		Lp	
	C ₂	N ₃	C ₄	C ₅	N ₆	C ₇	N ₆	C ₇	Lp _{1N1}	Lp _{2N1}
	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ¹ p ^{14.47}	s ¹ p ^{24.37}	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ¹ p ^{99.99}
7b _t (C _s)	$\pi_{(1)C2-N3}$		$\pi_{(1)C5-N6}$		$\pi_{(1)C7-C1}$		Lp			
	C ₂	N ₃	C ₅	N ₆	C ₇	C ₁	Lp ^{*b} _{1C4}		Lp ^{*b} _{1C7}	
	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰		s ¹ p ^{19.09}	
7b _t (C _i)	$\pi_{(1)N1-C2}$		$\pi_{(1)N3-C4}$		$\pi_{(1)N6-C7}$		Lp			
	N ₁	C ₂	N ₃	C ₄	N ₆	C ₇	Lp ^{*b} _{1C5}		Lp ^{*b} _{1C7}	
	s ¹ p ^{99.99}	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ¹ p ^{99.99}	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}		s ¹ p ^{22.99}	
گونه‌ها	π هیبریداسیون پیوندهای								جفت الکترون غیر پیوندی	
8a	$\pi_{(1)N1-C2}$		$\pi_{(1)C3-N4}$		$\pi_{(1)N5-C6}$		$\pi_{(1)C7-N1}$			
	N ₁	C ₂	C ₃	N ₄	N ₅	C ₆	C ₇	N ₁	Lp _{1C7}	
	s ¹ p ^{77.76}	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ¹ p ^{95.65}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{10.79}	s ¹ p ^{10.19}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{42.40}	s ¹ p ^{1.20}	
8b _s	$\pi_{(1)C2-C3}$		$\pi_{(1)N4-N5}$		$\pi_{(1)C7-N1}$		$\pi_{(2)C7-N1}$		Lp	
	C ₂	C ₃	N ₄	N ₅	C ₇	N ₁	C ₇	N ₁	Lp _{1C6}	
	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{20.82}	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	
8b _t (C _s)	$\pi_{(1)C3-N4}$		$\pi_{(1)N5-C6}$		$\pi_{(1)C7-N1}$		Lp			
	C ₃	N ₄	N ₅	C ₆	C ₇	N ₁	Lp ^{*b} _{1C2}		Lp ^{*b} _{1C7}	
	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰		s ¹ p ^{20.32}	
8b _t (C _i)	$\pi_{(1)N4-N5}$		$\pi_{(1)N5-C6}$		$\pi_{(1)C7-N1}$					
	N ₄	N ₅	N ₅	C ₆	C ₇	N ₁	Lp _{1N1}	Lp ^{*b} _{1C2}	Lp _{1C3}	Lp ^{*b} _{1C7}
	s ¹ p ^{2.79}	s ¹ p ^{1.67}	s ¹ p ^{63.06}	s ¹ p ^{27.39}	s ¹ p ^{73.55}	s ¹ p ^{29.24}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}
9a	$\pi_{(1)N2-N3}$		$\pi_{(1)N4-C5}$		$\pi_{(1)C6-C7}$		$\pi_{(1)C7-C1}$			
	N ₂	N ₃	N ₄	C ₅	C ₆	C ₇	C ₇		C ₁	
	s ¹ p ^{48.55}	s ¹ p ^{48.87}	s ¹ p ^{86.77}	s ¹ p ^{53.28}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{39.13}	s ¹ p ^{23.58}		s ¹ p ^{99.99}	
9b _s	$\pi_{(1)C1-N2}$		$\pi_{(1)N3-N4}$			$\pi_{(1)C6-C7}$				
	C ₁	N ₂	N ₃		N ₄		C ₆		C ₇	
	s ¹ p ^{53.67}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}		s ¹ p ^{99.99} d ^{12.33}		s ¹ p ^{14.86}		s ¹ p ^{90.56}	
9b _t (C _s)	$\pi_{(1)C1-N2}$		$\pi_{(1)N3-N4}$		$\pi_{(1)C6-C7}$		Lp			
	C ₁	N ₂	N ₃	N ₄	C ₆	C ₇	Lp ^{*b} _{1C5}		Lp ^{*b} _{1C7}	
	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰		s ¹ p ^{15.70}	

جدول ۲- هیبریداسیون NBO به دست آمده از روش B3LYP/6-311++G** برای گونه‌های تری‌آزاسیکلوپنتا-۱،۲،۳،۴-تتران(1a-10a) و حالت‌های الکترونی یک‌تایی (s) سه‌تایی (t) از گونه‌های تری‌آزاسیکلوپنتا-۱،۲،۳،۴-تری‌ان-۷-ایلیدن (2b-10b) (ادامه).

9b _i (C _i)	$\pi_{(1)C1-N2}$		$\pi_{(1)N4-C5}$		$\pi_{(1)C6-C7}$		Lp	
	C ₁	N ₂	N ₄	C ₅	C ₆	C ₇	Lp* ^b _{1N3}	Lp* ^b _{1C7}
	s ¹ p ^{79.54}	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ¹ p ^{18.29}	s ¹ p ^{16.15}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{92.12}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{22.13}
10a	$\pi_{(1)N2-N3}$		$\pi_{(1)C4-N5}$		$\pi_{(1)C6-C7}$		$\pi_{(1)C7-C1}$	
	N ₂	N ₃	C ₄	N ₅	C ₆	C ₇	C ₇	C ₁
	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{31.02}	s ¹ p ^{30.48}	s ⁰ p ¹⁰⁰
10b _s	$\pi_{(1)C1-N2}$		$\pi_{(1)C4-N5}$		Lp			
	C ₁	N ₂	C ₄	N ₅	Lp _{2N3}	Lp* _{1C6}	Lp _{1C7}	Lp* _{2C7}
	s ¹ p ^{63.20}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99} d ^{12.13}	s ¹ p ^{99.99}	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ¹ p ^{1.60}	s ¹ p ^{99.99}
10b _i (C _s)	$\pi_{(1)C1-N2}$		$\pi_{(1)N3-C4}$		$\pi_{(1)N5-C6}$		Lp	
	C ₁	N ₂	N ₃	C ₄	N ₅	C ₆	Lp* ^b _{1C7}	Lp* ^b _{2C7}
	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ⁰ p ¹⁰⁰	s ¹ p ^{16.81}
10b _i (C _i)	$\pi_{(1)N2-N3}$		$\pi_{(1)N5-C6}$		$\pi_{(1)C7-C1}$		Lp	
	N ₂	N ₃	N ₅	C ₆	C ₇	C ₁	Lp* _{1C4}	Lp* _{1C7}
	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{99.99}	s ¹ p ^{39.95}	s ¹ p ^{20.01}

^a در بیشتر موارد میزان اربیتال d ناچیز بوده و از جدول حذف شده است.

^b اربیتال مولکولی ضد پیوند

جدول ۳ - مقادیر NICS برحسب (ppm) برای گونه‌های یک‌تایی (s) تری‌آزاسیکلوپنتا-۱،۲،۳،۴-تری‌ان-۷-ایلیدن (2b_s-10b_s) که توسط روش B3LYP/6-311++G** در ۱ Å بالای حلقه محاسبه شده است.

گونه‌ها	NICS(1)
2b _s	۷/۸۷
3b _s	۶/۱۹
4b _s	-۱۰/۶۵
5b _s	۱۵/۵۱
6b _s	۲۲/۶۵
7b _s	۱۵/۶۰
8b _s	۲۲/۷۵
9b _s	-۶/۸۳
10b _s	-۸/۳۳