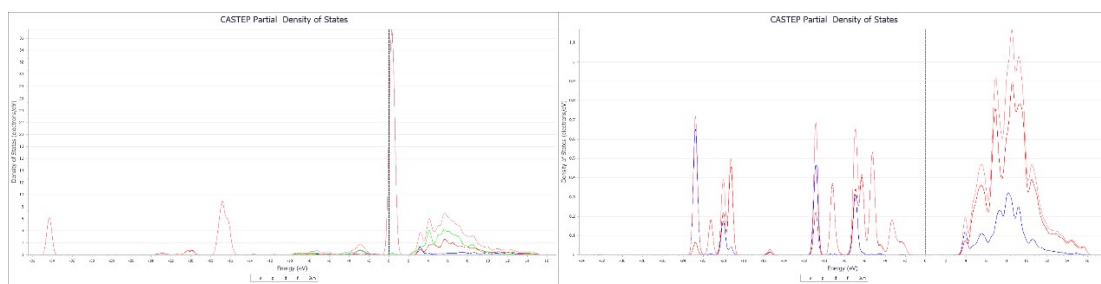


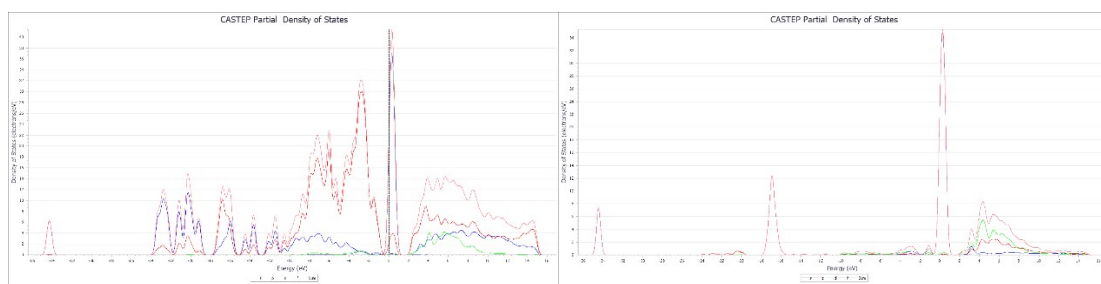
## DFT calculation results

### 1. Results of DOS and PDOS



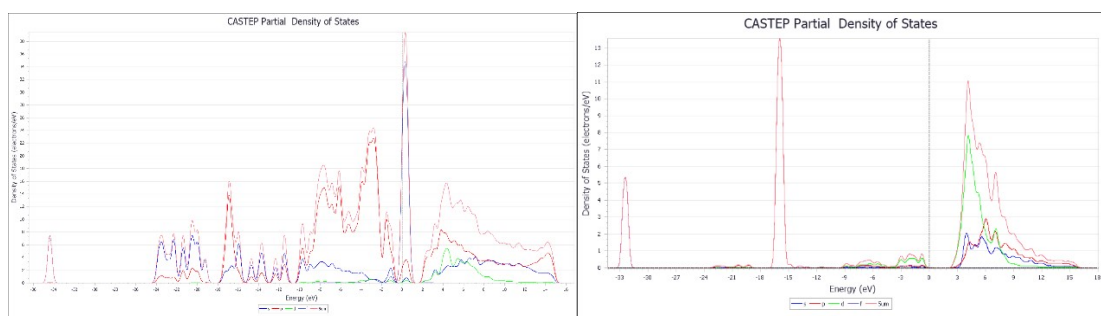
A. Ce-TDA HPO<sub>4</sub> (Ce) PDOS

b. Ce-TDA HPO<sub>4</sub> PDOS (P)



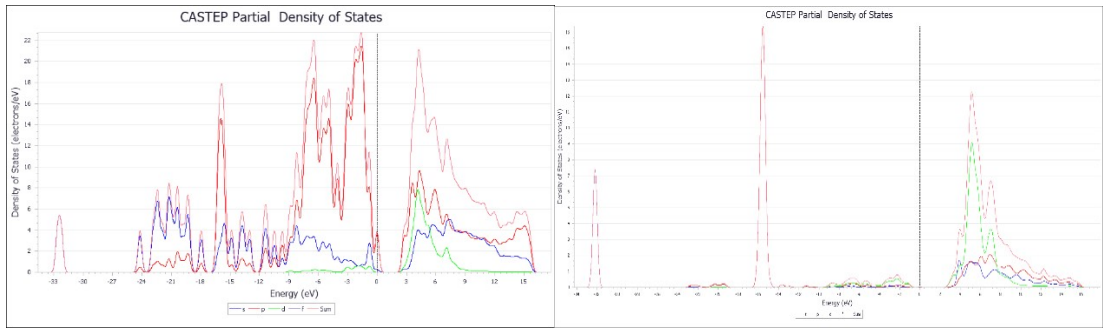
c. Ce-TDA HPO<sub>4</sub> PDOS

d. Ce-TDA PDOS (Ce)



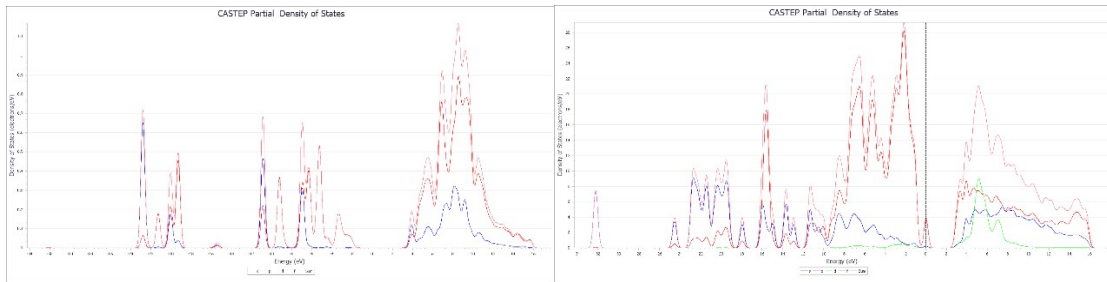
e. Ce-TDA PDOS

f. La-TDA PDOS (La)



g. La-TDA PDOS

h. La-TDA-HPO<sub>4</sub> PDOS (La)

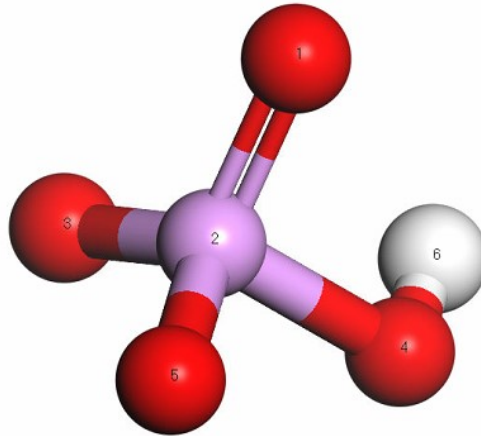


i. La-TDA-HPO<sub>4</sub> PDOS (P)

j. La-TDA-HPO<sub>4</sub> PDOS

Fig. 1 Results of DOS and PDOS

## 2. Optimized structure and results of phosphate ions



Charge partitioning by Hirshfeld method: ( -1.99995)

O	1 charge	-0.6409
P	2 charge	0.2677
O	3 charge	-0.6410
O	4 charge	-0.4278

O	5 charge	-0.6291
H	6 charge	0.0713

### Mulliken Population analysis

#### Population analysis for representation 1 a

	spin up	down	charge	spin
O ( 1) 10 0	1.000	1.000	2.001	0.000
O ( 1) 20 0	0.925	0.925	1.851	0.000
O ( 1) 20 0	-0.004	-0.004	-0.008	0.000
O ( 1) 21-1	0.763	0.763	1.527	0.000
O ( 1) 21-1	-0.000	-0.000	-0.000	0.000
O ( 1) 21 0	0.883	0.883	1.766	0.000
O ( 1) 21 0	0.003	0.003	0.005	0.000
O ( 1) 21 1	0.892	0.892	1.785	0.000
O ( 1) 21 1	0.004	0.004	0.007	0.000
O ( 1) 32-2	0.003	0.003	0.006	0.000
O ( 1) 32-1	0.003	0.003	0.007	0.000
O ( 1) 32 0	0.002	0.002	0.003	0.000
O ( 1) 32 1	0.001	0.001	0.001	0.000
O ( 1) 32 2	0.003	0.003	0.007	0.000

P ( 2) 10 0	1.000	1.000	2.000	0.000
P ( 2) 20 0	0.998	0.998	1.996	0.000
P ( 2) 30 0	0.367	0.367	0.734	0.000
P ( 2) 30 0	0.039	0.039	0.078	0.000
P ( 2) 21-1	0.999	0.999	1.998	0.000
P ( 2) 31-1	0.277	0.277	0.553	0.000
P ( 2) 31-1	0.070	0.070	0.139	0.000
P ( 2) 21 0	0.999	0.999	1.999	0.000
P ( 2) 31 0	0.280	0.280	0.560	0.000
P ( 2) 31 0	0.062	0.062	0.124	0.000
P ( 2) 21 1	1.000	1.000	1.999	0.000
P ( 2) 31 1	0.292	0.292	0.585	0.000
P ( 2) 31 1	0.029	0.029	0.057	0.000
P ( 2) 32-2	0.062	0.062	0.124	0.000
P ( 2) 32-1	0.091	0.091	0.181	0.000
P ( 2) 32 0	0.077	0.077	0.155	0.000
P ( 2) 32 1	0.070	0.070	0.140	0.000
P ( 2) 32 2	0.078	0.078	0.155	0.000
O ( 3) 10 0	1.000	1.000	2.001	0.000
O ( 3) 20 0	0.926	0.926	1.851	0.000
O ( 3) 20 0	-0.004	-0.004	-0.008	0.000
O ( 3) 21-1	0.908	0.908	1.815	0.000
O ( 3) 21-1	0.003	0.003	0.006	0.000
O ( 3) 21 0	0.790	0.790	1.580	0.000
O ( 3) 21 0	0.000	0.000	0.001	0.000

O ( 3) 21 1	0.839	0.839	1.677	0.000
O ( 3) 21 1	0.003	0.003	0.005	0.000
O ( 3) 32-2	0.001	0.001	0.002	0.000
O ( 3) 32-1	0.002	0.002	0.004	0.000
O ( 3) 32 0	0.003	0.003	0.007	0.000
O ( 3) 32 1	0.004	0.004	0.008	0.000
O ( 3) 32 2	0.001	0.001	0.003	0.000
O ( 4) 10 0	1.000	1.000	2.000	0.000
O ( 4) 20 0	0.909	0.909	1.817	0.000
O ( 4) 20 0	-0.014	-0.014	-0.028	0.000
O ( 4) 21-1	0.803	0.803	1.606	0.000
O ( 4) 21-1	-0.003	-0.003	-0.006	0.000
O ( 4) 21 0	0.842	0.842	1.684	0.000
O ( 4) 21 0	-0.001	-0.001	-0.002	0.000
O ( 4) 21 1	0.829	0.829	1.659	0.000
O ( 4) 21 1	-0.001	-0.001	-0.002	0.000
O ( 4) 32-2	0.002	0.002	0.004	0.000
O ( 4) 32-1	0.004	0.004	0.009	0.000
O ( 4) 32 0	0.001	0.001	0.002	0.000
O ( 4) 32 1	0.001	0.001	0.002	0.000
O ( 4) 32 2	0.004	0.004	0.008	0.000
O ( 5) 10 0	1.000	1.000	2.001	0.000
O ( 5) 20 0	0.924	0.924	1.848	0.000
O ( 5) 20 0	-0.004	-0.004	-0.007	0.000
O ( 5) 21-1	0.813	0.813	1.626	0.000

O ( 5) 21-1	0.001	0.001	0.002	0.000
O ( 5) 21 0	0.828	0.828	1.655	0.000
O ( 5) 21 0	0.001	0.001	0.003	0.000
O ( 5) 21 1	0.890	0.890	1.781	0.000
O ( 5) 21 1	0.003	0.003	0.006	0.000
O ( 5) 32-2	0.002	0.002	0.004	0.000
O ( 5) 32-1	0.004	0.004	0.008	0.000
O ( 5) 32 0	0.003	0.003	0.005	0.000
O ( 5) 32 1	0.002	0.002	0.003	0.000
O ( 5) 32 2	0.002	0.002	0.004	0.000
H ( 6) 10 0	0.327	0.327	0.655	0.000
H ( 6) 10 0	0.049	0.049	0.097	0.000
H ( 6) 21-1	0.013	0.013	0.027	0.000
H ( 6) 21 0	0.012	0.012	0.024	0.000
H ( 6) 21 1	0.009	0.009	0.018	0.000

#### Summarized population analysis

	spin up	down	charge	spin
O ( 1) 10	1.000	1.000	2.001	0.000
O ( 1) 20	0.922	0.922	1.843	0.000
O ( 1) 21	2.545	2.545	5.090	0.000
O ( 1) 32	0.012	0.012	0.023	0.000
O ( 3) 10	1.000	1.000	2.001	0.000
O ( 3) 20	0.921	0.921	1.843	0.000

O ( 3) 21	2.542	2.542	5.084	0.000
O ( 3) 32	0.012	0.012	0.023	0.000
O ( 4) 10	1.000	1.000	2.000	0.000
O ( 4) 20	0.894	0.894	1.789	0.000
O ( 4) 21	2.469	2.469	4.937	0.000
O ( 4) 32	0.013	0.013	0.025	0.000
O ( 5) 10	1.000	1.000	2.001	0.000
O ( 5) 20	0.920	0.920	1.840	0.000
O ( 5) 21	2.537	2.537	5.074	0.000
O ( 5) 32	0.012	0.012	0.024	0.000
P ( 2) 10	1.000	1.000	2.000	0.000
P ( 2) 20	0.998	0.998	1.996	0.000
P ( 2) 30	0.406	0.406	0.813	0.000
P ( 2) 21	2.998	2.998	5.996	0.000
P ( 2) 31	1.010	1.010	2.019	0.000
P ( 2) 32	0.378	0.378	0.756	0.000
H ( 6) 10	0.376	0.376	0.752	0.000
H ( 6) 21	0.034	0.034	0.069	0.000

Mulliken atomic charges:

	charge	spin
O ( 1)	-0.957	0.000
P ( 2)	1.420	0.000
O ( 3)	-0.951	0.000
O ( 4)	-0.752	0.000

O ( 5) -0.939 0.000

H ( 6) 0.179 0.000

#### Mulliken bond orders

O 1 P 2 1.1020

O 1 O 3 -0.1423

P 2 O 3 1.1053

O 1 O 4 -0.1450

P 2 O 4 0.4481

O 3 O 4 -0.1346

O 1 O 5 -0.1267

P 2 O 5 1.1122

O 3 O 5 -0.1296

O 4 O 5 -0.1177

O 4 H 6 0.6186

#### Mayer bond orders

O 1 P 2 1.4997

P 2 O 3 1.5101

P 2 O 4 0.6770

P 2 O 5 1.5291

O 4 H 6 0.9918

#### Mayer total valence

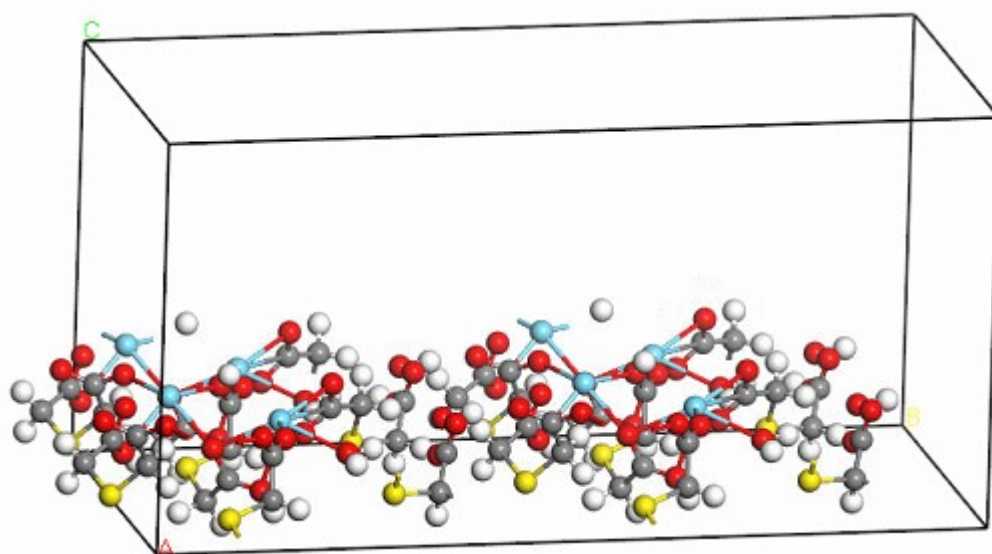
O 1 1.5450



P	2	5.2313
O	3	1.5486
O	4	1.6668
O	5	1.5652
H	6	1.0705

### 3. 2D La-TDA nanosheet

Surface optimization



Orbital Populations

Ion	Atom	Orbital	Charge
-----			
H	1	S	0.493
H	2	S	0.689
H	3	S	0.663
H	4	S	0.681
H	5	S	0.680
H	6	S	0.709
H	7	S	0.713

H	8	S	0.784
H	9	S	0.753
H	10	S	1.452
H	11	S	0.517
H	12	S	0.574
H	13	S	0.684
H	14	S	0.684
H	15	S	0.733
H	16	S	0.708
C	1	S	0.916
C	1	Px	0.762
C	1	Py	0.853
C	1	Pz	0.804
C	2	S	1.364
C	2	Px	1.187
C	2	Py	1.015
C	2	Pz	1.128
C	3	S	1.360
C	3	Px	1.133
C	3	Py	1.108
C	3	Pz	1.075
C	4	S	0.976
C	4	Px	0.835
C	4	Py	0.891
C	4	Pz	0.729

C	5	S	0.983
C	5	Px	0.816
C	5	Py	0.898
C	5	Pz	0.742
C	6	S	1.352
C	6	Px	1.019
C	6	Py	1.095
C	6	Pz	1.188
C	7	S	1.332
C	7	Px	1.155
C	7	Py	1.108
C	7	Pz	1.036
C	8	S	0.939
C	8	Px	0.813
C	8	Py	0.735
C	8	Pz	0.858
C	9	S	0.984
C	9	Px	0.869
C	9	Py	0.776
C	9	Pz	0.815
C	10	S	1.361
C	10	Px	0.934
C	10	Py	1.265
C	10	Pz	1.130
C	11	S	1.348

C	11	Px	1.252
C	11	Py	1.030
C	11	Pz	1.045
C	12	S	0.949
C	12	Px	0.770
C	12	Py	0.786
C	12	Pz	0.882
O	1	S	1.873
O	1	Px	1.606
O	1	Py	1.647
O	1	Pz	1.367
O	2	S	1.823
O	2	Px	1.271
O	2	Py	1.752
O	2	Pz	1.419
O	3	S	1.830
O	3	Px	1.756
O	3	Py	1.427
O	3	Pz	1.513
O	4	S	1.832
O	4	Px	1.672
O	4	Py	1.553
O	4	Pz	1.583
O	5	S	1.833
O	5	Px	1.512

O	5	Py	1.738
O	5	Pz	1.531
O	6	S	1.832
O	6	Px	1.684
O	6	Py	1.675
O	6	Pz	1.446
O	7	S	1.832
O	7	Px	1.510
O	7	Py	1.586
O	7	Pz	1.705
O	8	S	1.809
O	8	Px	1.644
O	8	Py	1.463
O	8	Pz	1.674
O	9	S	1.806
O	9	Px	1.516
O	9	Py	1.630
O	9	Pz	1.711
O	10	S	1.818
O	10	Px	1.728
O	10	Py	1.649
O	10	Pz	1.440
O	11	S	1.834
O	11	Px	1.541
O	11	Py	1.446

O	11	Pz	1.743
O	12	S	1.850
O	12	Px	1.539
O	12	Py	1.578
O	12	Pz	1.947
O	13	S	1.808
O	13	Px	1.584
O	13	Py	1.541
O	13	Pz	1.662
O	14	S	1.796
O	14	Px	1.466
O	14	Py	1.564
O	14	Pz	1.807
S	1	S	1.803
S	1	Px	1.569
S	1	Py	1.129
S	1	Pz	1.350
S	2	S	1.794
S	2	Px	1.131
S	2	Py	1.574
S	2	Pz	1.380
S	3	S	1.796
S	3	Px	1.200
S	3	Py	1.197
S	3	Pz	1.637

La	1	S	1.998
La	1	Px	1.991
La	1	Py	1.994
La	1	Pz	1.996
La	1	S	0.134
La	1	Dzz	0.192
La	1	Dzy	0.221
La	1	Dzx	0.192
La	1	Dxx-yy	0.176
La	1	Dxy	0.300
La	1	Px	-0.007
La	1	Py	-0.015
La	1	Pz	-0.018
La	1	S	-0.060
La	2	S	1.999
La	2	Px	1.991
La	2	Py	1.994
La	2	Pz	1.996
La	2	S	0.142
La	2	Dzz	0.159
La	2	Dzy	0.268
La	2	Dzx	0.187
La	2	Dxx-yy	0.162
La	2	Dxy	0.230
La	2	Px	-0.031

La	2	Py	-0.033
La	2	Pz	0.020
La	2	S	-0.060

-----

Total: 188.000

-----

### Atomic Populations (Mulliken)

-----

Species	Ion	s	p	d	f	Total	Charge (e)
H	1	0.49	0.00	0.00	0.00	0.49	0.51
H	2	0.69	0.00	0.00	0.00	0.69	0.31
H	3	0.66	0.00	0.00	0.00	0.66	0.34
H	4	0.68	0.00	0.00	0.00	0.68	0.32
H	5	0.68	0.00	0.00	0.00	0.68	0.32
H	6	0.71	0.00	0.00	0.00	0.71	0.29
H	7	0.71	0.00	0.00	0.00	0.71	0.29
H	8	0.78	0.00	0.00	0.00	0.78	0.22
H	9	0.75	0.00	0.00	0.00	0.75	0.25
H	10	1.45	0.00	0.00	0.00	1.45	-0.45
H	11	0.52	0.00	0.00	0.00	0.52	0.48
H	12	0.57	0.00	0.00	0.00	0.57	0.43
H	13	0.68	0.00	0.00	0.00	0.68	0.32
H	14	0.68	0.00	0.00	0.00	0.68	0.32



H	15	0.73	0.00	0.00	0.00	0.73	0.27
H	16	0.71	0.00	0.00	0.00	0.71	0.29
C	1	0.92	2.42	0.00	0.00	3.34	0.66
C	2	1.36	3.33	0.00	0.00	4.69	-0.69
C	3	1.36	3.32	0.00	0.00	4.67	-0.67
C	4	0.98	2.46	0.00	0.00	3.43	0.57
C	5	0.98	2.46	0.00	0.00	3.44	0.56
C	6	1.35	3.30	0.00	0.00	4.65	-0.65
C	7	1.33	3.30	0.00	0.00	4.63	-0.63
C	8	0.94	2.41	0.00	0.00	3.35	0.65
C	9	0.98	2.46	0.00	0.00	3.44	0.56
C	10	1.36	3.33	0.00	0.00	4.69	-0.69
C	11	1.35	3.33	0.00	0.00	4.67	-0.67
C	12	0.95	2.44	0.00	0.00	3.39	0.61
O	1	1.87	4.62	0.00	0.00	6.49	-0.49
O	2	1.82	4.44	0.00	0.00	6.26	-0.26
O	3	1.83	4.70	0.00	0.00	6.53	-0.53
O	4	1.83	4.81	0.00	0.00	6.64	-0.64
O	5	1.83	4.78	0.00	0.00	6.61	-0.61
O	6	1.83	4.81	0.00	0.00	6.64	-0.64
O	7	1.83	4.80	0.00	0.00	6.63	-0.63
O	8	1.81	4.78	0.00	0.00	6.59	-0.59
O	9	1.81	4.86	0.00	0.00	6.66	-0.66
O	10	1.82	4.82	0.00	0.00	6.64	-0.64
O	11	1.83	4.73	0.00	0.00	6.56	-0.56

O	12	1.85	5.06	0.00	0.00	6.91	-0.91
O	13	1.81	4.79	0.00	0.00	6.60	-0.60
O	14	1.80	4.84	0.00	0.00	6.63	-0.63
S	1	1.80	4.05	0.00	0.00	5.85	0.15
S	2	1.79	4.09	0.00	0.00	5.88	0.12
S	3	1.80	4.03	0.00	0.00	5.83	0.17
La	1	2.07	5.94	1.08	0.00	9.10	1.90
La	2	2.08	5.94	1.01	0.00	9.02	1.98

---

Bond	Population	Length (A)
H 11 -- O 12	0.56	0.99277
H 12 -- O 12	0.53	1.00926
H 1 -- O 1	0.48	1.03689
H 15 -- C 11	0.87	1.10031
H 13 -- C 10	0.82	1.10129
H 7 -- C 6	0.82	1.10199
H 6 -- C 6	0.82	1.10231
H 5 -- C 3	0.82	1.10244
H 3 -- C 2	0.78	1.10365
H 8 -- C 7	0.87	1.10477
H 2 -- C 2	0.82	1.10564
H 4 -- C 3	0.80	1.10588
H 16 -- C 11	0.84	1.10621

H 9 -- C 7	0.86	1.10691
H 14 -- C 10	0.82	1.10759
C 1 -- O 3	1.12	1.21497
C 8 -- O 8	1.00	1.24390
C 9 -- O 11	0.97	1.26284
C 12 -- O 13	0.94	1.26612
C 12 -- O 14	0.89	1.27805
C 4 -- O 5	0.92	1.27921
C 5 -- O 6	0.90	1.28648
C 5 -- O 7	0.90	1.28655
C 4 -- O 4	0.89	1.28796
C 9 -- O 10	0.83	1.30522
C 8 -- O 9	0.80	1.30908
C 1 -- O 2	0.58	1.37724
O 1 -- O 2	0.21	1.42488
C 5 -- C 6	0.69	1.49887
C 3 -- C 4	0.67	1.50443
C 1 -- C 2	0.69	1.50539
C 9 -- C 10	0.69	1.51038
C 11 -- C 12	0.72	1.52843
C 7 -- C 8	0.70	1.52931
H 11 -- H 12	-0.11	1.57608
H 1 -- O 8	0.12	1.67032
H 4 -- H 5	-0.09	1.76377
H 8 -- H 9	-0.08	1.77041

H 15 -- H 16	-0.08	1.79132
H 13 -- H 14	-0.08	1.79534
H 2 -- H 3	-0.09	1.79781
C 7 -- S 2	0.54	1.81082
H 6 -- H 7	-0.09	1.81557
C 10 -- S 3	0.52	1.82265
C 2 -- S 1	0.48	1.82684
C 3 -- S 1	0.50	1.82821
C 6 -- S 2	0.48	1.83175
C 11 -- S 3	0.51	1.83189
H 1 -- O 2	-0.11	1.91245
H 16 -- C 12	-0.11	2.12778
H 4 -- C 4	-0.11	2.13229
H 9 -- C 8	-0.14	2.13319
H 14 -- C 9	-0.11	2.13623
H 2 -- C 1	-0.14	2.13885
H 7 -- C 5	-0.12	2.14642
H 5 -- C 4	-0.12	2.14807
H 6 -- C 5	-0.14	2.15686
H 8 -- C 8	-0.12	2.16482
H 3 -- C 1	-0.12	2.17369
H 13 -- C 9	-0.13	2.17740
H 15 -- C 12	-0.12	2.18006
O 10 -- O 11	-0.20	2.22671
O 13 -- O 14	-0.18	2.24026

O 4 -- O 5	-0.20	2.24558
O 6 -- O 7	-0.20	2.24674
O 8 -- O 9	-0.19	2.24748
H 1 -- H 6	-0.04	2.26232
O 2 -- O 3	-0.17	2.29799
H 11 -- O 2	0.01	2.30917
H 16 -- O 4	0.00	2.31558
C 1 -- O 1	-0.16	2.31858
H 8 -- S 2	-0.14	2.32181
H 12 -- S 1	0.10	2.32871
H 7 -- S 2	-0.12	2.33563
H 14 -- S 3	-0.10	2.33759
C 2 -- O 2	-0.21	2.34518
O 9 -- La 1	0.25	2.34627
C 7 -- O 9	-0.22	2.36992
H 10 -- La 2	0.31	2.37197
H 3 -- S 1	-0.10	2.37652
O 14 -- La 2	0.19	2.38575
C 6 -- O 6	-0.20	2.38825
H 3 -- O 2	-0.01	2.39193
C 11 -- O 14	-0.21	2.39588
C 3 -- O 5	-0.19	2.39694
C 3 -- O 4	-0.21	2.41197
C 10 -- O 10	-0.20	2.41368
C 11 -- O 13	-0.20	2.41846

C 6 -- O 7	-0.19	2.41973
H 15 -- S 3	-0.13	2.42065
H 9 -- S 2	-0.12	2.42573
C 10 -- O 11	-0.18	2.42689
C 2 -- O 3	-0.16	2.43195
H 2 -- S 1	-0.12	2.43429
H 16 -- S 3	-0.08	2.43864
H 9 -- O 6	-0.01	2.44523
H 13 -- S 3	-0.11	2.44743
C 7 -- O 8	-0.19	2.44788
H 6 -- O 1	-0.00	2.44790
H 4 -- S 1	-0.11	2.44952
H 6 -- S 2	-0.12	2.44954
O 13 -- La 1	0.19	2.46525
H 5 -- S 1	-0.11	2.46548
H 1 -- C 1	-0.06	2.47219
O 6 -- La 1	0.10	2.49566
O 4 -- La 2	0.12	2.50633
H 2 -- H 7	-0.02	2.50896
O 7 -- La 1	0.12	2.52166
H 10 -- La 1	0.15	2.52424
O 5 -- La 2	0.09	2.52831
H 1 -- O 3	-0.00	2.53018
H 15 -- O 14	-0.02	2.53036
H 8 -- O 9	-0.02	2.53095

H 5 -- O 3	-0.01	2.53403
O 10 -- La 1	0.16	2.53565
H 7 -- O 7	-0.02	2.56829
O 10 -- La 2	0.09	2.57111
H 6 -- O 6	-0.02	2.59004
H 13 -- O 11	-0.01	2.59102
H 10 -- O 10	-0.04	2.60114
O 11 -- La 2	0.05	2.60299
O 1 -- O 3	-0.02	2.61649
O 12 -- La 2	0.08	2.64226
H 8 -- S 3	-0.02	2.64681
H 2 -- H 4	0.00	2.66106
H 9 -- C 5	-0.03	2.66281
H 4 -- O 5	-0.02	2.68369
H 11 -- O 1	-0.01	2.69377
O 1 -- O 8	-0.09	2.70306
H 5 -- O 5	-0.01	2.70646
H 2 -- O 3	-0.02	2.71445
C 4 -- S 1	-0.16	2.72281
H 9 -- O 9	-0.01	2.74035
C 5 -- S 2	-0.12	2.74859
H 14 -- O 10	-0.01	2.74898
C 1 -- S 1	-0.13	2.75860
H 12 -- O 14	-0.01	2.77119
C 9 -- S 3	-0.13	2.78236

H 1 -- C 8	-0.03	2.78861
C 12 -- S 3	-0.14	2.79346
H 16 -- C 10	-0.05	2.79367
O 4 -- S 1	-0.02	2.80108
H 16 -- O 13	-0.01	2.82135
C 2 -- C 3	-0.12	2.82135
O 12 -- O 14	-0.02	2.83238
H 13 -- H 16	-0.00	2.83684
H 14 -- O 7	-0.00	2.84623
C 4 -- La 2	-0.35	2.86893
C 5 -- La 1	-0.34	2.86993
C 6 -- C 7	-0.12	2.88626
C 8 -- S 2	-0.13	2.90001
H 4 -- C 2	-0.03	2.90647
H 11 -- O 5	-0.00	2.90715
C 10 -- C 11	-0.11	2.91153
C 9 -- La 2	-0.29	2.91880
H 5 -- C 1	-0.02	2.92990
H 16 -- C 9	-0.01	2.93623
H 16 -- O 14	-0.00	2.94496
O 4 -- O 11	-0.02	2.94578
H 11 -- C 1	-0.02	2.94583
H 10 -- O 13	-0.02	2.95409
H 6 -- O 8	-0.00	2.95759
H 9 -- O 10	-0.00	2.95860



H 9 -- C 6	-0.03	2.98989
H 4 -- O 1	0.00	2.99529
H 2 -- C 3	-0.03	2.99567

---

#### Hirshfeld Analysis

-----

Species	Ion	Hirshfeld Charge (e)
---------	-----	----------------------

---

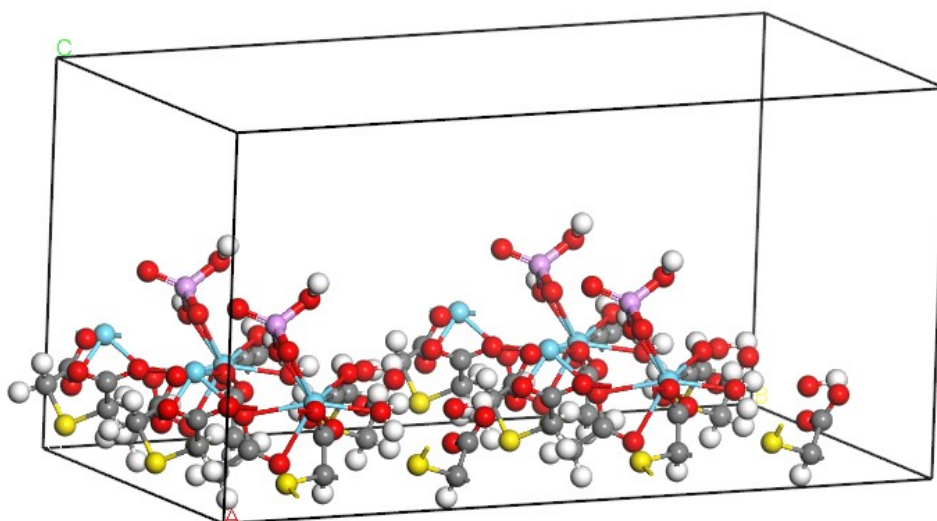
H	1	0.10
H	2	0.06
H	3	0.06
H	4	0.06
H	5	0.06
H	6	0.03
H	7	0.05
H	8	0.02
H	9	0.04
H	10	-0.23
H	11	0.14
H	12	0.11
H	13	0.06
H	14	0.07
H	15	0.05
H	16	0.05

C	1	0.16
C	2	-0.08
C	3	-0.08
C	4	0.17
C	5	0.17
C	6	-0.09
C	7	-0.09
C	8	0.18
C	9	0.19
C	10	-0.06
C	11	-0.07
C	12	0.20
O	1	-0.14
O	2	-0.04
O	3	-0.21
O	4	-0.24
O	5	-0.25
O	6	-0.25
O	7	-0.26
O	8	-0.23
O	9	-0.28
O	10	-0.22
O	11	-0.22
O	12	-0.24
O	13	-0.23

O	14	-0.24
S	1	0.08
S	2	0.02
S	3	0.13
La	1	0.61
La	2	0.65

---

#### 4. 2D La-TDA nanosheet adsorption



#### Orbital Populations

Ion	Atom	Orbital	Charge
H	1	S	0.507
H	2	S	0.658
H	3	S	0.640
H	4	S	0.658
H	5	S	0.675

H	6	S	0.690
H	7	S	0.671
H	8	S	0.712
H	9	S	0.731
H	10	S	0.502
H	11	S	0.501
H	12	S	0.620
H	13	S	0.664
H	14	S	0.673
H	15	S	0.690
H	16	S	0.701
H	17	S	0.450
C	1	S	0.880
C	1	Px	0.754
C	1	Py	0.875
C	1	Pz	0.829
C	2	S	1.365
C	2	Px	1.269
C	2	Py	0.976
C	2	Pz	1.143
C	3	S	1.349
C	3	Px	1.100
C	3	Py	1.171
C	3	Pz	1.103
C	4	S	0.946

C	4	Px	0.873
C	4	Py	0.858
C	4	Pz	0.755
C	5	S	0.960
C	5	Px	0.819
C	5	Py	0.920
C	5	Pz	0.735
C	6	S	1.347
C	6	Px	1.131
C	6	Py	1.091
C	6	Pz	1.145
C	7	S	1.333
C	7	Px	1.111
C	7	Py	1.142
C	7	Pz	1.121
C	8	S	0.912
C	8	Px	0.840
C	8	Py	0.724
C	8	Pz	0.860
C	9	S	0.949
C	9	Px	0.857
C	9	Py	0.838
C	9	Pz	0.794
C	10	S	1.354
C	10	Px	0.941

C	10	Py	1.252
C	10	Pz	1.185
C	11	S	1.334
C	11	Px	1.265
C	11	Py	1.016
C	11	Pz	1.112
C	12	S	0.921
C	12	Px	0.817
C	12	Py	0.778
C	12	Pz	0.866
O	1	S	1.859
O	1	Px	1.687
O	1	Py	1.660
O	1	Pz	1.296
O	2	S	1.802
O	2	Px	1.328
O	2	Py	1.717
O	2	Pz	1.402
O	3	S	1.822
O	3	Px	1.729
O	3	Py	1.472
O	3	Pz	1.526
O	4	S	1.819
O	4	Px	1.714
O	4	Py	1.499

O	4	Pz	1.608
O	5	S	1.823
O	5	Px	1.511
O	5	Py	1.742
O	5	Pz	1.530
O	6	S	1.825
O	6	Px	1.661
O	6	Py	1.649
O	6	Pz	1.480
O	7	S	1.821
O	7	Px	1.512
O	7	Py	1.633
O	7	Pz	1.665
O	8	S	1.802
O	8	Px	1.645
O	8	Py	1.461
O	8	Pz	1.667
O	9	S	1.789
O	9	Px	1.557
O	9	Py	1.611
O	9	Pz	1.683
O	10	S	1.803
O	10	Px	1.717
O	10	Py	1.685
O	10	Pz	1.422

O	11	S	1.822
O	11	Px	1.505
O	11	Py	1.467
O	11	Pz	1.779
O	12	S	1.836
O	12	Px	1.641
O	12	Py	1.604
O	12	Pz	1.828
O	13	S	1.797
O	13	Px	1.653
O	13	Py	1.585
O	13	Pz	1.586
O	14	S	1.789
O	14	Px	1.472
O	14	Py	1.530
O	14	Pz	1.831
O	15	S	1.899
O	15	Px	1.701
O	15	Py	1.628
O	15	Pz	1.752
O	16	S	1.837
O	16	Px	1.557
O	16	Py	1.832
O	16	Pz	1.722
O	17	S	1.859



O	17	Px	1.765
O	17	Py	1.699
O	17	Pz	1.660
O	18	S	1.880
O	18	Px	1.659
O	18	Py	1.791
O	18	Pz	1.666
P	1	S	0.922
P	1	Px	0.608
P	1	Py	0.619
P	1	Pz	0.636
S	1	S	1.789
S	1	Px	1.553
S	1	Py	1.150
S	1	Pz	1.298
S	2	S	1.780
S	2	Px	1.125
S	2	Py	1.584
S	2	Pz	1.360
S	3	S	1.779
S	3	Px	1.183
S	3	Py	1.128
S	3	Pz	1.699
La	1	S	1.999
La	1	Px	1.989

La	1	Py	1.992
La	1	Pz	1.996
La	1	S	0.134
La	1	Dzz	0.217
La	1	Dzy	0.225
La	1	Dzx	0.197
La	1	Dxx-yy	0.177
La	1	Dxy	0.273
La	1	Px	0.012
La	1	Py	-0.039
La	1	Pz	-0.022
La	1	S	-0.066
La	2	S	2.000
La	2	Px	1.991
La	2	Py	1.994
La	2	Pz	1.996
La	2	S	0.115
La	2	Dzz	0.214
La	2	Dzy	0.212
La	2	Dzx	0.183
La	2	Dxx-yy	0.208
La	2	Dxy	0.208
La	2	Px	-0.029
La	2	Py	-0.042
La	2	Pz	-0.007

La 2 S -0.072

-----  
Total: 218.000  
-----

Atomic Populations (Mulliken)

-----

Species	Ion	s	p	d	f	Total	Charge (e)
H	1	0.51	0.00	0.00	0.00	0.51	0.49
H	2	0.66	0.00	0.00	0.00	0.66	0.34
H	3	0.64	0.00	0.00	0.00	0.64	0.36
H	4	0.66	0.00	0.00	0.00	0.66	0.34
H	5	0.68	0.00	0.00	0.00	0.68	0.32
H	6	0.69	0.00	0.00	0.00	0.69	0.31
H	7	0.67	0.00	0.00	0.00	0.67	0.33
H	8	0.71	0.00	0.00	0.00	0.71	0.29
H	9	0.73	0.00	0.00	0.00	0.73	0.27
H	10	0.50	0.00	0.00	0.00	0.50	0.50
H	11	0.50	0.00	0.00	0.00	0.50	0.50
H	12	0.62	0.00	0.00	0.00	0.62	0.38
H	13	0.66	0.00	0.00	0.00	0.66	0.34
H	14	0.67	0.00	0.00	0.00	0.67	0.33
H	15	0.69	0.00	0.00	0.00	0.69	0.31
H	16	0.70	0.00	0.00	0.00	0.70	0.30

H	17	0.45	0.00	0.00	0.00	0.45	0.55
C	1	0.88	2.46	0.00	0.00	3.34	0.66
C	2	1.36	3.39	0.00	0.00	4.75	-0.75
C	3	1.35	3.37	0.00	0.00	4.72	-0.72
C	4	0.95	2.49	0.00	0.00	3.43	0.57
C	5	0.96	2.47	0.00	0.00	3.43	0.57
C	6	1.35	3.37	0.00	0.00	4.71	-0.71
C	7	1.33	3.37	0.00	0.00	4.71	-0.71
C	8	0.91	2.42	0.00	0.00	3.34	0.66
C	9	0.95	2.49	0.00	0.00	3.44	0.56
C	10	1.35	3.38	0.00	0.00	4.73	-0.73
C	11	1.33	3.39	0.00	0.00	4.73	-0.73
C	12	0.92	2.46	0.00	0.00	3.38	0.62
O	1	1.86	4.64	0.00	0.00	6.50	-0.50
O	2	1.80	4.45	0.00	0.00	6.25	-0.25
O	3	1.82	4.73	0.00	0.00	6.55	-0.55
O	4	1.82	4.82	0.00	0.00	6.64	-0.64
O	5	1.82	4.78	0.00	0.00	6.61	-0.61
O	6	1.83	4.79	0.00	0.00	6.62	-0.62
O	7	1.82	4.81	0.00	0.00	6.63	-0.63
O	8	1.80	4.77	0.00	0.00	6.58	-0.58
O	9	1.79	4.85	0.00	0.00	6.64	-0.64
O	10	1.80	4.82	0.00	0.00	6.63	-0.63
O	11	1.82	4.75	0.00	0.00	6.57	-0.57
O	12	1.84	5.07	0.00	0.00	6.91	-0.91

O	13	1.80	4.82	0.00	0.00	6.62	-0.62
O	14	1.79	4.83	0.00	0.00	6.62	-0.62
O	15	1.90	5.08	0.00	0.00	6.98	-0.98
O	16	1.84	5.11	0.00	0.00	6.95	-0.95
O	17	1.86	5.12	0.00	0.00	6.98	-0.98
O	18	1.88	5.12	0.00	0.00	7.00	-1.00
P	1	0.92	1.86	0.00	0.00	2.79	2.21
S	1	1.79	4.00	0.00	0.00	5.79	0.21
S	2	1.78	4.07	0.00	0.00	5.85	0.15
S	3	1.78	4.01	0.00	0.00	5.79	0.21
La	1	2.07	5.93	1.09	0.00	9.08	1.92
La	2	2.04	5.90	1.02	0.00	8.97	2.03

=====

Bond	Population	Length (A)
------	------------	------------

=====

H 17 -- O 17	0.52	0.99274
H 11 -- O 12	0.55	1.00151
H 10 -- O 16	0.56	1.00974
H 12 -- O 12	0.51	1.02494
H 1 -- O 1	0.44	1.06424
H 15 -- C 11	0.84	1.09936
H 3 -- C 2	0.78	1.10255
H 13 -- C 10	0.82	1.10590
H 6 -- C 6	0.83	1.10856

H 16 -- C 11	0.85	1.11011
H 5 -- C 3	0.82	1.11042
H 7 -- C 6	0.79	1.11279
H 8 -- C 7	0.83	1.11426
H 2 -- C 2	0.80	1.11468
H 4 -- C 3	0.81	1.11469
H 9 -- C 7	0.85	1.11793
H 14 -- C 10	0.81	1.12064
C 1 -- O 3	1.12	1.20755
C 8 -- O 8	0.99	1.23861
C 9 -- O 11	0.99	1.25163
C 12 -- O 14	0.92	1.26304
C 4 -- O 5	0.95	1.26488
C 12 -- O 13	0.93	1.26857
C 5 -- O 6	0.92	1.27174
C 4 -- O 4	0.91	1.27731
C 5 -- O 7	0.90	1.27794
C 9 -- O 10	0.86	1.29297
C 8 -- O 9	0.82	1.29557
C 1 -- O 2	0.62	1.35146
O 1 -- O 2	0.21	1.40105
C 1 -- C 2	0.70	1.48976
C 11 -- C 12	0.74	1.49138
C 5 -- C 6	0.70	1.49499
C 3 -- C 4	0.67	1.49505

C 9 -- C 10	0.72	1.49721
O 15 -- P 1	0.77	1.50274
C 7 -- C 8	0.71	1.50733
O 18 -- P 1	0.67	1.51721
H 1 -- O 8	0.17	1.55278
O 17 -- P 1	0.45	1.60378
O 16 -- P 1	0.37	1.63189
H 11 -- H 12	-0.10	1.64134
H 4 -- H 5	-0.09	1.74697
H 15 -- H 16	-0.09	1.77355
C 7 -- S 2	0.55	1.78608
C 11 -- S 3	0.53	1.78967
H 8 -- H 9	-0.07	1.79260
C 6 -- S 2	0.50	1.79377
C 10 -- S 3	0.54	1.79751
C 2 -- S 1	0.48	1.80188
C 3 -- S 1	0.50	1.80530
H 13 -- H 14	-0.09	1.80551
H 6 -- H 7	-0.08	1.80755
H 2 -- H 3	-0.08	1.84477
H 1 -- O 2	-0.11	1.95029
H 12 -- S 1	0.17	2.00785
H 16 -- O 4	0.01	2.06893
H 16 -- C 12	-0.11	2.08982
H 4 -- C 4	-0.11	2.12271

H 8 -- C 8	-0.12	2.12335
H 15 -- C 12	-0.13	2.13478
H 6 -- C 5	-0.15	2.13655
H 7 -- C 5	-0.12	2.14548
H 9 -- C 8	-0.14	2.15151
H 14 -- C 9	-0.09	2.15414
H 5 -- C 4	-0.12	2.15530
H 2 -- C 1	-0.14	2.15950
H 3 -- C 1	-0.12	2.16201
H 13 -- C 9	-0.13	2.16263
H 17 -- P 1	-0.12	2.20413
O 6 -- O 7	-0.21	2.21465
O 10 -- O 11	-0.21	2.21519
O 4 -- O 5	-0.21	2.22262
O 8 -- O 9	-0.19	2.23180
O 13 -- O 14	-0.19	2.23189
O 2 -- O 3	-0.18	2.26643
C 1 -- O 1	-0.18	2.27474
H 10 -- P 1	-0.08	2.27571
H 11 -- O 1	0.03	2.28102
O 9 -- La 1	0.26	2.30831
H 3 -- S 1	-0.12	2.31564
H 8 -- S 2	-0.13	2.31727
C 2 -- O 2	-0.23	2.32569
H 14 -- S 3	-0.10	2.34494



H 1 -- H 6	-0.03	2.34522
H 14 -- O 7	0.00	2.34580
C 7 -- O 9	-0.22	2.35039
H 10 -- O 13	0.01	2.35120
H 7 -- S 2	-0.11	2.35555
C 11 -- O 14	-0.22	2.35686
C 3 -- O 5	-0.21	2.35756
O 14 -- La 2	0.17	2.37254
C 11 -- O 13	-0.22	2.37949
C 6 -- O 6	-0.20	2.38851
C 10 -- O 11	-0.19	2.39286
C 10 -- O 10	-0.20	2.39632
H 1 -- O 3	-0.00	2.39633
H 3 -- O 2	-0.01	2.39719
O 18 -- La 2	0.18	2.40027
C 2 -- O 3	-0.17	2.40077
C 6 -- O 7	-0.20	2.40595
O 16 -- O 18	-0.14	2.41058
C 7 -- O 8	-0.21	2.41327
O 16 -- O 17	-0.13	2.41504
C 3 -- O 4	-0.20	2.41505
H 6 -- S 2	-0.13	2.41632
H 2 -- S 1	-0.12	2.41653
H 15 -- S 3	-0.13	2.41752
H 16 -- S 3	-0.08	2.42667

H 9 -- S 2	-0.13	2.43267
H 5 -- S 1	-0.13	2.43671
H 4 -- S 1	-0.09	2.43762
H 1 -- C 1	-0.06	2.44238
H 13 -- S 3	-0.11	2.44322
O 7 -- La 1	0.14	2.44995
O 12 -- La 2	0.10	2.46045
O 10 -- La 1	0.20	2.46433
O 13 -- La 1	0.20	2.46759
H 11 -- O 5	-0.01	2.46809
O 6 -- La 1	0.10	2.47038
H 2 -- H 4	-0.01	2.47139
H 15 -- O 14	-0.02	2.47708
H 11 -- O 2	-0.02	2.49152
H 6 -- O 6	-0.02	2.49354
O 4 -- La 2	0.12	2.50400
H 4 -- O 3	0.00	2.51669
O 5 -- La 2	0.09	2.52942
O 15 -- O 16	-0.14	2.53041
O 17 -- O 18	-0.14	2.53559
H 13 -- O 11	-0.02	2.54861
H 16 -- C 9	-0.02	2.55786
H 1 -- C 8	-0.04	2.56281
H 9 -- O 9	-0.02	2.56619
O 1 -- O 3	-0.02	2.57627

O 11 -- La 2	0.05	2.58019
H 6 -- O 8	-0.00	2.58286
O 16 -- La 2	0.07	2.58875
H 4 -- O 5	-0.02	2.60320
O 1 -- O 8	-0.12	2.60939
O 15 -- O 18	-0.11	2.62698
O 10 -- La 2	0.07	2.63020
H 5 -- H 12	-0.02	2.63754
H 12 -- O 14	-0.02	2.64251
O 5 -- O 12	-0.04	2.64534
H 7 -- O 7	-0.02	2.64975
C 1 -- S 1	-0.15	2.66406
H 4 -- C 2	-0.06	2.66532
O 15 -- O 17	-0.10	2.67098
H 8 -- O 9	-0.02	2.67229
H 5 -- O 5	-0.01	2.69290
H 2 -- O 3	-0.02	2.69315
H 16 -- C 10	-0.06	2.69793
C 9 -- S 3	-0.16	2.70251
C 12 -- S 3	-0.16	2.70952
H 10 -- O 17	-0.01	2.72478
C 5 -- S 2	-0.14	2.73486
H 6 -- O 1	-0.01	2.73517
C 4 -- S 1	-0.15	2.74418
C 6 -- C 7	-0.15	2.75476

O 5 -- O 16	-0.03	2.75721
C 2 -- C 3	-0.14	2.76296
H 9 -- C 5	-0.01	2.76551
O 12 -- O 14	-0.02	2.77292
H 5 -- O 3	-0.01	2.77546
H 14 -- O 10	-0.01	2.78790
C 10 -- C 11	-0.14	2.79001
H 12 -- C 1	-0.02	2.79092
H 10 -- O 15	-0.01	2.80385
H 12 -- O 2	-0.00	2.80838
H 17 -- O 18	-0.01	2.81451
O 13 -- O 16	-0.03	2.81608
H 16 -- O 13	-0.01	2.81817
C 8 -- S 2	-0.14	2.81909
C 5 -- La 1	-0.37	2.82495
H 8 -- S 3	-0.01	2.83553
H 1 -- S 2	0.00	2.83593
H 4 -- C 1	-0.02	2.86178
H 12 -- C 3	-0.03	2.86200
H 12 -- C 2	-0.04	2.86695
O 10 -- O 16	-0.03	2.87244
C 4 -- La 2	-0.39	2.87290
H 13 -- H 16	-0.01	2.88187
H 16 -- O 14	-0.01	2.88291
O 3 -- O 8	-0.02	2.89202

O 4 -- S 1	-0.02	2.89369
H 9 -- O 6	-0.01	2.89720
H 2 -- C 3	-0.04	2.92616
H 16 -- O 11	-0.00	2.92866
O 13 -- S 3	-0.04	2.93241
H 9 -- C 6	-0.03	2.95584
H 6 -- C 7	-0.03	2.95588
O 4 -- O 16	-0.01	2.95593
C 3 -- O 3	-0.03	2.96006
C 9 -- La 2	-0.29	2.96163
O 15 -- La 1	0.11	2.96296
O 7 -- S 3	-0.04	2.96755
O 10 -- S 3	-0.04	2.96998
H 6 -- C 8	-0.01	2.97487
H 1 -- C 6	-0.02	2.97725
O 7 -- O 9	-0.01	2.97766
O 4 -- O 11	-0.01	2.99155
C 10 -- O 7	-0.04	2.99337
H 16 -- O 10	-0.00	2.99404

---



---

#### Hirshfeld Analysis

-----

Species	Ion	Hirshfeld Charge (e)
---------	-----	----------------------

---



---

H	1	0.08
H	2	0.07
H	3	0.06
H	4	0.07
H	5	0.06
H	6	0.05
H	7	0.06
H	8	0.04
H	9	0.05
H	10	0.19
H	11	0.14
H	12	0.08
H	13	0.06
H	14	0.07
H	15	0.06
H	16	0.05
H	17	0.19
C	1	0.15
C	2	-0.09
C	3	-0.09
C	4	0.16
C	5	0.16
C	6	-0.10
C	7	-0.10
C	8	0.18

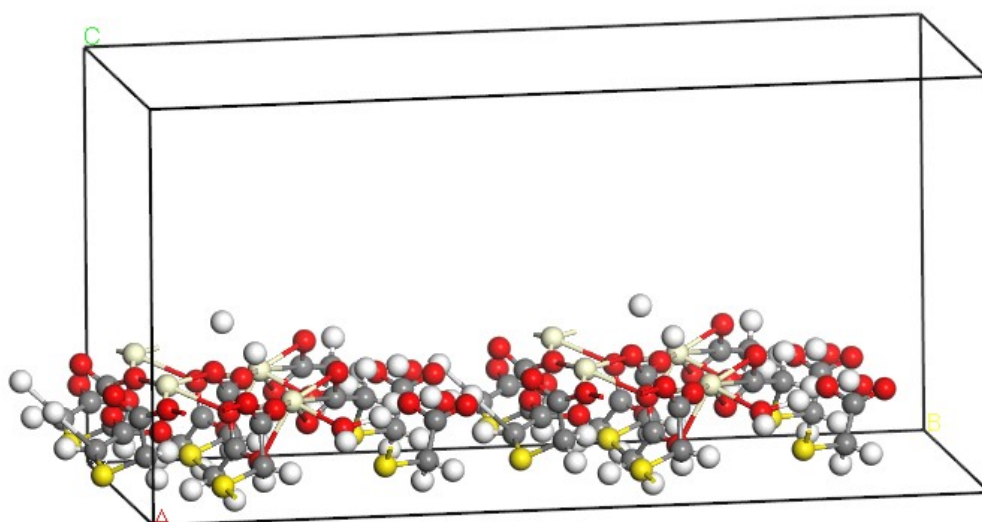
C	9	0.18
C	10	-0.08
C	11	-0.10
C	12	0.19
O	1	-0.15
O	2	-0.04
O	3	-0.21
O	4	-0.23
O	5	-0.23
O	6	-0.24
O	7	-0.24
O	8	-0.20
O	9	-0.26
O	10	-0.21
O	11	-0.22
O	12	-0.24
O	13	-0.23
O	14	-0.23
O	15	-0.33
O	16	-0.17
O	17	-0.21
O	18	-0.31
P	1	0.44
S	1	0.13
S	2	0.03

S	3	0.14
La	1	0.58
La	2	0.54

---

## 5. 2D Ce-TDA nanosheet

Surface optimization



### Orbital Populations

Ion	Atom	Orbital	Charge
H	1	S	0.508
H	2	S	0.650
H	3	S	0.645
H	4	S	0.648
H	5	S	0.648
H	6	S	0.489



H	7	S	0.646
H	8	S	0.726
H	9	S	0.687
H	10	S	1.255
H	11	S	0.590
H	12	S	0.618
H	13	S	0.641
H	14	S	0.642
H	15	S	0.682
H	16	S	0.670
C	1	S	0.888
C	1	Px	0.804
C	1	Py	0.758
C	1	Pz	0.873
C	2	S	1.375
C	2	Px	1.222
C	2	Py	1.040
C	2	Pz	1.140
C	3	S	1.355
C	3	Px	1.117
C	3	Py	1.138
C	3	Pz	1.117
C	4	S	0.957
C	4	Px	0.841
C	4	Py	0.885

C	4	Pz	0.737
C	5	S	0.959
C	5	Px	0.786
C	5	Py	0.842
C	5	Pz	0.972
C	6	S	1.228
C	6	Px	1.039
C	6	Py	1.176
C	6	Pz	1.125
C	7	S	1.340
C	7	Px	1.188
C	7	Py	1.128
C	7	Pz	1.057
C	8	S	0.900
C	8	Px	0.786
C	8	Py	0.770
C	8	Pz	0.884
C	9	S	0.945
C	9	Px	0.831
C	9	Py	0.827
C	9	Pz	0.817
C	10	S	1.362
C	10	Px	0.971
C	10	Py	1.271
C	10	Pz	1.158

C	11	S	1.350
C	11	Px	1.256
C	11	Py	1.056
C	11	Pz	1.064
C	12	S	0.920
C	12	Px	0.775
C	12	Py	0.781
C	12	Pz	0.890
O	1	S	1.866
O	1	Px	1.775
O	1	Py	1.448
O	1	Pz	1.941
O	2	S	1.788
O	2	Px	1.549
O	2	Py	1.538
O	2	Pz	1.761
O	3	S	1.825
O	3	Px	1.615
O	3	Py	1.488
O	3	Pz	1.630
O	4	S	1.824
O	4	Px	1.651
O	4	Py	1.516
O	4	Pz	1.602
O	5	S	1.824

O	5	Px	1.503
O	5	Py	1.717
O	5	Pz	1.520
O	6	S	1.831
O	6	Px	1.425
O	6	Py	1.712
O	6	Pz	1.572
O	7	S	1.827
O	7	Px	1.729
O	7	Py	1.416
O	7	Pz	1.650
O	8	S	1.823
O	8	Px	1.581
O	8	Py	1.479
O	8	Pz	1.669
O	9	S	1.789
O	9	Px	1.469
O	9	Py	1.595
O	9	Pz	1.714
O	10	S	1.805
O	10	Px	1.704
O	10	Py	1.615
O	10	Pz	1.436
O	11	S	1.819
O	11	Px	1.464

O	11	Py	1.500
O	11	Pz	1.766
O	12	S	1.853
O	12	Px	1.536
O	12	Py	1.656
O	12	Pz	1.758
O	13	S	1.793
O	13	Px	1.576
O	13	Py	1.505
O	13	Pz	1.658
O	14	S	1.783
O	14	Px	1.460
O	14	Py	1.542
O	14	Pz	1.774
S	1	S	1.784
S	1	Px	1.394
S	1	Py	1.224
S	1	Pz	1.430
S	2	S	1.750
S	2	Px	0.989
S	2	Py	1.386
S	2	Pz	1.514
S	3	S	1.776
S	3	Px	1.122
S	3	Py	1.222

S	3	Pz	1.640
Ce	1	S	1.997
Ce	1	Px	1.979
Ce	1	Py	1.984
Ce	1	Pz	1.993
Ce	1	Fxxx	0.159
Ce	1	Fyyy	0.329
Ce	1	Fzzz	0.194
Ce	1	Fxyz	0.078
Ce	1	Fz(xx-yy)	0.193
Ce	1	Fy(zz-xx)	0.118
Ce	1	Fx(yy-zz)	0.085
Ce	1	S	0.101
Ce	1	Dzz	0.233
Ce	1	Dzy	0.242
Ce	1	Dzx	0.249
Ce	1	Dxx-yy	0.262
Ce	1	Dxy	0.229
Ce	1	Px	-0.020
Ce	1	Py	-0.030
Ce	1	Pz	-0.046
Ce	2	S	1.995
Ce	2	Px	1.985
Ce	2	Py	1.986
Ce	2	Pz	1.988

Ce	2	Fxxx	0.170
Ce	2	Fyyy	0.141
Ce	2	Fzzz	0.067
Ce	2	Fxyz	0.270
Ce	2	Fz(xx-yy)	0.143
Ce	2	Fy(zz-xx)	0.177
Ce	2	Fx(yy-zz)	0.107
Ce	2	S	0.127
Ce	2	Dzz	0.242
Ce	2	Dzy	0.346
Ce	2	Dzx	0.226
Ce	2	Dxx-yy	0.167
Ce	2	Dxy	0.276
Ce	2	Px	-0.046
Ce	2	Py	-0.062
Ce	2	Pz	0.026

-----  
Total: 190.000  
-----

Atomic Populations (Mulliken)

-----  
Species            Ion    s        p        d        f        Total    Charge (e)  
=====

H                    1        0.51    0.00    0.00    0.00    0.51    0.49

H	2	0.65	0.00	0.00	0.00	0.65	0.35
H	3	0.65	0.00	0.00	0.00	0.65	0.35
H	4	0.65	0.00	0.00	0.00	0.65	0.35
H	5	0.65	0.00	0.00	0.00	0.65	0.35
H	6	0.49	0.00	0.00	0.00	0.49	0.51
H	7	0.65	0.00	0.00	0.00	0.65	0.35
H	8	0.73	0.00	0.00	0.00	0.73	0.27
H	9	0.69	0.00	0.00	0.00	0.69	0.31
H	10	1.26	0.00	0.00	0.00	1.26	-0.26
H	11	0.59	0.00	0.00	0.00	0.59	0.41
H	12	0.62	0.00	0.00	0.00	0.62	0.38
H	13	0.64	0.00	0.00	0.00	0.64	0.36
H	14	0.64	0.00	0.00	0.00	0.64	0.36
H	15	0.68	0.00	0.00	0.00	0.68	0.32
H	16	0.67	0.00	0.00	0.00	0.67	0.33
C	1	0.89	2.44	0.00	0.00	3.32	0.68
C	2	1.38	3.40	0.00	0.00	4.78	-0.78
C	3	1.36	3.37	0.00	0.00	4.73	-0.73
C	4	0.96	2.46	0.00	0.00	3.42	0.58
C	5	0.96	2.60	0.00	0.00	3.56	0.44
C	6	1.23	3.34	0.00	0.00	4.57	-0.57
C	7	1.34	3.37	0.00	0.00	4.71	-0.71
C	8	0.90	2.44	0.00	0.00	3.34	0.66
C	9	0.95	2.48	0.00	0.00	3.42	0.58
C	10	1.36	3.40	0.00	0.00	4.76	-0.76



C	11	1.35	3.38	0.00	0.00	4.73	-0.73
C	12	0.92	2.45	0.00	0.00	3.37	0.63
O	1	1.87	5.16	0.00	0.00	7.03	-1.03
O	2	1.79	4.85	0.00	0.00	6.63	-0.63
O	3	1.82	4.73	0.00	0.00	6.56	-0.56
O	4	1.82	4.77	0.00	0.00	6.59	-0.59
O	5	1.82	4.74	0.00	0.00	6.56	-0.56
O	6	1.83	4.71	0.00	0.00	6.54	-0.54
O	7	1.83	4.79	0.00	0.00	6.62	-0.62
O	8	1.82	4.73	0.00	0.00	6.55	-0.55
O	9	1.79	4.78	0.00	0.00	6.57	-0.57
O	10	1.81	4.75	0.00	0.00	6.56	-0.56
O	11	1.82	4.73	0.00	0.00	6.55	-0.55
O	12	1.85	4.95	0.00	0.00	6.80	-0.80
O	13	1.79	4.74	0.00	0.00	6.53	-0.53
O	14	1.78	4.78	0.00	0.00	6.56	-0.56
S	1	1.78	4.05	0.00	0.00	5.83	0.17
S	2	1.75	3.89	0.00	0.00	5.64	0.36
S	3	1.78	3.98	0.00	0.00	5.76	0.24
Ce	1	2.10	5.86	1.22	1.16	10.33	1.67
Ce	2	2.12	5.88	1.26	1.07	10.33	1.67

---



---

Bond

Population

Length (Å)

---



---

H 6 -- O 1	0.53	1.00594
H 1 -- O 1	0.51	1.01189
H 12 -- O 12	0.51	1.02265
H 11 -- O 2	0.47	1.09905
H 7 -- C 6	0.82	1.09951
H 15 -- C 11	0.84	1.10646
H 13 -- C 10	0.80	1.10728
H 2 -- C 2	0.81	1.10766
H 8 -- C 7	0.84	1.10932
H 3 -- C 2	0.77	1.10951
H 14 -- C 10	0.80	1.11112
H 5 -- C 3	0.79	1.11338
H 9 -- C 7	0.81	1.11460
H 16 -- C 11	0.82	1.11998
H 4 -- C 3	0.77	1.12561
C 1 -- O 3	1.07	1.21807
C 8 -- O 8	1.08	1.22044
C 12 -- O 13	0.93	1.25788
C 9 -- O 11	0.96	1.26034
C 12 -- O 14	0.90	1.26539
C 4 -- O 4	0.92	1.27601
C 4 -- O 5	0.89	1.28028
C 9 -- O 10	0.89	1.28169
C 5 -- O 7	0.77	1.31773
C 8 -- O 9	0.74	1.31891

C 5 -- O 6	0.77	1.31951
C 1 -- O 2	0.69	1.32418
H 11 -- O 12	0.22	1.35269
C 5 -- C 6	1.08	1.37936
C 3 -- C 4	0.71	1.47815
C 9 -- C 10	0.71	1.48642
C 11 -- C 12	0.74	1.49976
C 1 -- C 2	0.70	1.50692
C 7 -- C 8	0.68	1.51300
H 1 -- H 6	-0.16	1.57951
C 6 -- S 2	0.69	1.69550
H 11 -- H 12	-0.05	1.74007
C 7 -- S 2	0.53	1.77951
H 4 -- H 5	-0.09	1.78383
C 10 -- S 3	0.54	1.78825
H 1 -- O 2	0.06	1.79809
C 2 -- S 1	0.48	1.79905
H 2 -- H 3	-0.10	1.79928
C 3 -- S 1	0.50	1.80138
H 13 -- H 14	-0.08	1.80646
C 11 -- S 3	0.51	1.81222
H 15 -- H 16	-0.08	1.81275
H 8 -- H 9	-0.08	1.81462
H 11 -- C 1	-0.13	2.08002
H 10 -- Ce 2	0.32	2.09605

H 9 -- O 7	0.02	2.09793
H 14 -- C 9	-0.11	2.09945
H 7 -- C 5	-0.13	2.11718
H 5 -- C 4	-0.13	2.11873
H 9 -- C 8	-0.13	2.12026
H 13 -- C 9	-0.14	2.12111
H 2 -- C 1	-0.14	2.12151
H 16 -- C 12	-0.11	2.12311
H 4 -- C 4	-0.11	2.12828
H 15 -- C 12	-0.12	2.14395
H 3 -- C 1	-0.12	2.14770
H 12 -- S 1	0.14	2.16230
O 12 -- Ce 2	0.25	2.16275
O 9 -- Ce 1	0.30	2.17349
H 8 -- C 8	-0.10	2.18495
H 4 -- O 1	0.03	2.18715
O 6 -- O 7	-0.19	2.19411
O 6 -- Ce 1	0.20	2.20704
O 4 -- O 5	-0.20	2.21362
O 10 -- O 11	-0.19	2.21701
O 13 -- O 14	-0.18	2.22079
O 2 -- O 3	-0.19	2.22351
O 8 -- O 9	-0.18	2.24969
H 6 -- H 7	-0.04	2.26873
O 14 -- Ce 2	0.23	2.29570

O 13 -- Ce 1	0.19	2.30687
O 7 -- Ce 1	0.23	2.31284
O 5 -- Ce 2	0.11	2.31851
C 6 -- O 6	-0.20	2.34119
H 14 -- S 3	-0.10	2.34239
H 8 -- S 2	-0.13	2.35217
C 7 -- O 9	-0.22	2.35435
H 3 -- S 1	-0.11	2.35658
C 10 -- O 11	-0.20	2.35892
C 2 -- O 3	-0.22	2.36073
H 7 -- S 2	-0.13	2.36362
H 6 -- O 8	0.03	2.36364
C 11 -- O 14	-0.21	2.36626
C 3 -- O 5	-0.20	2.37236
H 7 -- O 1	-0.00	2.38142
C 11 -- O 13	-0.22	2.38217
O 11 -- Ce 2	0.06	2.39622
H 9 -- S 2	-0.11	2.39690
H 2 -- S 1	-0.13	2.39891
C 7 -- O 8	-0.20	2.40431
C 10 -- O 10	-0.20	2.40435
C 3 -- O 4	-0.20	2.40526
H 16 -- S 3	-0.09	2.40857
H 16 -- O 4	0.01	2.41149
C 6 -- O 7	-0.18	2.41469

H 15 -- S 3	-0.13	2.41512
H 1 -- H 11	-0.02	2.42271
C 2 -- O 2	-0.21	2.43256
H 13 -- S 3	-0.11	2.43566
O 2 -- O 12	-0.17	2.44036
H 5 -- S 1	-0.12	2.44272
H 2 -- O 3	-0.03	2.44314
H 4 -- S 1	-0.10	2.45148
O 10 -- Ce 1	0.15	2.45151
O 4 -- Ce 2	0.12	2.45686
H 14 -- O 7	-0.01	2.47375
H 6 -- C 6	-0.05	2.48073
H 1 -- C 1	-0.05	2.50289
H 15 -- O 14	-0.02	2.50569
H 10 -- O 10	-0.03	2.50880
H 13 -- O 11	-0.02	2.53904
H 7 -- O 6	-0.02	2.54726
H 1 -- H 4	-0.03	2.54873
H 8 -- O 9	-0.02	2.55116
O 10 -- Ce 2	0.06	2.56341
H 11 -- C 2	-0.04	2.58507
H 13 -- H 16	-0.01	2.60800
H 16 -- C 10	-0.06	2.62495
O 7 -- O 10	-0.04	2.62524
H 8 -- S 3	-0.03	2.63772

H 5 -- O 5	-0.01	2.64134
H 3 -- H 11	-0.01	2.67226
H 2 -- H 4	0.00	2.67277
O 6 -- O 9	-0.02	2.68010
C 5 -- Ce 1	-0.45	2.68432
H 12 -- O 2	-0.01	2.68989
H 4 -- O 5	-0.01	2.69183
C 4 -- S 1	-0.17	2.69187
H 9 -- C 5	-0.02	2.72495
C 2 -- C 3	-0.15	2.72554
H 3 -- O 2	-0.01	2.73863
O 9 -- O 13	-0.03	2.73992
H 12 -- O 14	-0.01	2.74136
C 8 -- S 2	-0.17	2.74192
C 4 -- Ce 2	-0.39	2.74408
C 9 -- S 3	-0.15	2.75022
H 6 -- S 2	-0.02	2.75022
H 5 -- C 1	-0.02	2.75320
C 6 -- C 7	-0.16	2.75482
C 9 -- O 7	-0.03	2.75538
H 9 -- O 9	-0.01	2.75898
C 12 -- S 3	-0.14	2.76965
O 10 -- O 13	-0.03	2.77086
H 16 -- C 9	-0.01	2.77776
H 14 -- O 11	-0.01	2.77849

O 1 -- O 2	-0.06	2.77873
C 5 -- S 2	-0.16	2.78168
C 10 -- C 11	-0.14	2.79922
O 12 -- O 14	-0.02	2.80100
H 9 -- C 6	-0.04	2.81287
C 1 -- S 1	-0.12	2.81627
C 9 -- Ce 2	-0.33	2.81849
O 4 -- S 1	-0.02	2.82819
H 16 -- O 13	-0.01	2.86290
H 2 -- H 7	-0.01	2.86668
O 4 -- O 11	-0.02	2.86837
C 9 -- O 4	-0.02	2.87602
H 15 -- O 11	-0.00	2.87695
S 3 -- Ce 1	0.22	2.88108
H 4 -- C 2	-0.03	2.88580
H 16 -- O 14	-0.01	2.89020
H 1 -- O 3	-0.01	2.89316
O 4 -- O 10	-0.02	2.90393
H 12 -- C 2	-0.03	2.91064
H 12 -- Ce 2	-0.15	2.91107
H 16 -- O 10	-0.00	2.91117
C 10 -- O 7	-0.04	2.91978
O 10 -- S 3	-0.04	2.92558
H 9 -- O 8	-0.01	2.93455
H 11 -- S 1	-0.01	2.93765



H 5 -- C 2	-0.02	2.93982
C 7 -- O 7	-0.07	2.94763
H 2 -- C 3	-0.03	2.94862
O 5 -- O 12	-0.01	2.96167
C 6 -- O 1	-0.05	2.96667
O 8 -- S 2	-0.04	2.97569
O 13 -- S 3	-0.03	2.98325
H 14 -- O 10	0.00	2.98664
H 3 -- H 12	-0.01	2.99930

---

#### Hirshfeld Analysis

-----

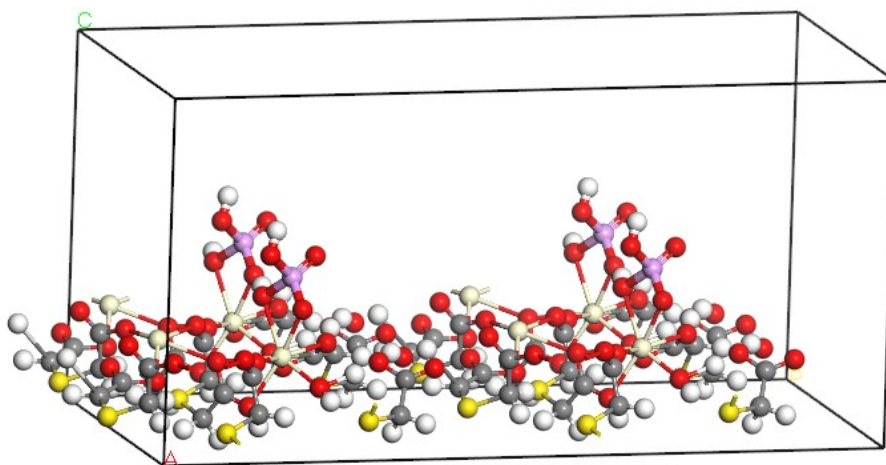
Species	Ion	Hirshfeld Charge (e)
H	1	0.09
H	2	0.06
H	3	0.07
H	4	0.06
H	5	0.07
H	6	0.10
H	7	0.05
H	8	0.04

H	9	0.04
H	10	-0.17
H	11	0.09
H	12	0.09
H	13	0.07
H	14	0.08
H	15	0.06
H	16	0.06
C	1	0.16
C	2	-0.09
C	3	-0.09
C	4	0.18
C	5	0.11
C	6	-0.09
C	7	-0.11
C	8	0.18
C	9	0.19
C	10	-0.08
C	11	-0.08
C	12	0.21
O	1	-0.30
O	2	-0.15
O	3	-0.24
O	4	-0.21
O	5	-0.21

O	6	-0.22
O	7	-0.22
O	8	-0.23
O	9	-0.23
O	10	-0.18
O	11	-0.20
O	12	-0.28
O	13	-0.20
O	14	-0.20
S	1	0.10
S	2	0.13
S	3	0.16
Ce	1	0.67
Ce	2	0.58

---

## 6. 2D Ce-TDA adsorption



## Orbital Populations

Ion	Atom	Orbital	Charge
H	1	S	0.502
H	2	S	0.649
H	3	S	0.643
H	4	S	0.656
H	5	S	0.654
H	6	S	0.478
H	7	S	0.645
H	8	S	0.724
H	9	S	0.679
H	10	S	0.471
H	11	S	0.595
H	12	S	0.638
H	13	S	0.643
H	14	S	0.652
H	15	S	0.695
H	16	S	0.667
H	17	S	0.433
C	1	S	0.887
C	1	Px	0.829
C	1	Py	0.732
C	1	Pz	0.871
C	2	S	1.375

C	2	Px	1.192
C	2	Py	1.070
C	2	Pz	1.142
C	3	S	1.356
C	3	Px	1.120
C	3	Py	1.169
C	3	Pz	1.079
C	4	S	0.953
C	4	Px	0.825
C	4	Py	0.844
C	4	Pz	0.799
C	5	S	0.959
C	5	Px	0.778
C	5	Py	0.846
C	5	Pz	0.971
C	6	S	1.229
C	6	Px	1.033
C	6	Py	1.170
C	6	Pz	1.125
C	7	S	1.341
C	7	Px	1.207
C	7	Py	1.116
C	7	Pz	1.056
C	8	S	0.894
C	8	Px	0.768

C	8	Py	0.790
C	8	Pz	0.883
C	9	S	0.939
C	9	Px	0.841
C	9	Py	0.827
C	9	Pz	0.814
C	10	S	1.363
C	10	Px	0.964
C	10	Py	1.267
C	10	Pz	1.166
C	11	S	1.349
C	11	Px	1.249
C	11	Py	1.069
C	11	Pz	1.060
C	12	S	0.925
C	12	Px	0.759
C	12	Py	0.799
C	12	Pz	0.888
O	1	S	1.866
O	1	Px	1.794
O	1	Py	1.449
O	1	Pz	1.916
O	2	S	1.789
O	2	Px	1.614
O	2	Py	1.476

O	2	Pz	1.734
O	3	S	1.824
O	3	Px	1.593
O	3	Py	1.512
O	3	Pz	1.631
O	4	S	1.823
O	4	Px	1.729
O	4	Py	1.459
O	4	Pz	1.602
O	5	S	1.824
O	5	Px	1.443
O	5	Py	1.730
O	5	Pz	1.549
O	6	S	1.831
O	6	Px	1.420
O	6	Py	1.717
O	6	Pz	1.571
O	7	S	1.828
O	7	Px	1.728
O	7	Py	1.419
O	7	Pz	1.637
O	8	S	1.822
O	8	Px	1.593
O	8	Py	1.474
O	8	Pz	1.670

O	9	S	1.788
O	9	Px	1.447
O	9	Py	1.602
O	9	Pz	1.727
O	10	S	1.809
O	10	Px	1.705
O	10	Py	1.615
O	10	Pz	1.447
O	11	S	1.818
O	11	Px	1.478
O	11	Py	1.493
O	11	Pz	1.757
O	12	S	1.844
O	12	Px	1.541
O	12	Py	1.673
O	12	Pz	1.725
O	13	S	1.794
O	13	Px	1.581
O	13	Py	1.509
O	13	Pz	1.661
O	14	S	1.786
O	14	Px	1.442
O	14	Py	1.538
O	14	Pz	1.771
O	15	S	1.908



O	15	Px	1.725
O	15	Py	1.667
O	15	Pz	1.726
O	16	S	1.870
O	16	Px	1.702
O	16	Py	1.760
O	16	Pz	1.577
O	17	S	1.867
O	17	Px	1.864
O	17	Py	1.792
O	17	Pz	1.491
O	18	S	1.854
O	18	Px	1.509
O	18	Py	1.851
O	18	Pz	1.751
P	1	S	0.901
P	1	Px	0.624
P	1	Py	0.580
P	1	Pz	0.598
S	1	S	1.781
S	1	Px	1.388
S	1	Py	1.252
S	1	Pz	1.385
S	2	S	1.751
S	2	Px	0.972

S	2	Py	1.349
S	2	Pz	1.527
S	3	S	1.773
S	3	Px	1.106
S	3	Py	1.235
S	3	Pz	1.650
Ce	1	S	1.997
Ce	1	Px	1.979
Ce	1	Py	1.985
Ce	1	Pz	1.993
Ce	1	Fxxx	0.170
Ce	1	Fyyy	0.309
Ce	1	Fzzz	0.218
Ce	1	Fxyz	0.083
Ce	1	Fz(xx-yy)	0.168
Ce	1	Fy(zz-xx)	0.127
Ce	1	Fx(yy-zz)	0.080
Ce	1	S	0.095
Ce	1	Dzz	0.232
Ce	1	Dzy	0.241
Ce	1	Dzx	0.242
Ce	1	Dxx-yy	0.264
Ce	1	Dxy	0.232
Ce	1	Px	-0.023
Ce	1	Py	-0.031

Ce	1	Pz	-0.042
Ce	2	S	1.995
Ce	2	Px	1.982
Ce	2	Py	1.987
Ce	2	Pz	1.989
Ce	2	Fxxx	0.174
Ce	2	Fyyy	0.140
Ce	2	Fzzz	0.100
Ce	2	Fxyz	0.139
Ce	2	Fz(xx-yy)	0.156
Ce	2	Fy(zz-xx)	0.172
Ce	2	Fx(yy-zz)	0.164
Ce	2	S	0.096
Ce	2	Dzz	0.265
Ce	2	Dzy	0.225
Ce	2	Dzx	0.258
Ce	2	Dxx-yy	0.213
Ce	2	Dxy	0.252
Ce	2	Px	-0.047
Ce	2	Py	-0.052
Ce	2	Pz	-0.042

---

Total: 220.000

---

## Atomic Populations (Mulliken)

-----

Species	Ion	s	p	d	f	Total	Charge (e)
H	1	0.50	0.00	0.00	0.00	0.50	0.50
H	2	0.65	0.00	0.00	0.00	0.65	0.35
H	3	0.64	0.00	0.00	0.00	0.64	0.36
H	4	0.66	0.00	0.00	0.00	0.66	0.34
H	5	0.65	0.00	0.00	0.00	0.65	0.35
H	6	0.48	0.00	0.00	0.00	0.48	0.52
H	7	0.65	0.00	0.00	0.00	0.65	0.35
H	8	0.72	0.00	0.00	0.00	0.72	0.28
H	9	0.68	0.00	0.00	0.00	0.68	0.32
H	10	0.47	0.00	0.00	0.00	0.47	0.53
H	11	0.60	0.00	0.00	0.00	0.60	0.40
H	12	0.64	0.00	0.00	0.00	0.64	0.36
H	13	0.64	0.00	0.00	0.00	0.64	0.36
H	14	0.65	0.00	0.00	0.00	0.65	0.35
H	15	0.70	0.00	0.00	0.00	0.70	0.30
H	16	0.67	0.00	0.00	0.00	0.67	0.33
H	17	0.43	0.00	0.00	0.00	0.43	0.57
C	1	0.89	2.43	0.00	0.00	3.32	0.68
C	2	1.37	3.40	0.00	0.00	4.78	-0.78
C	3	1.36	3.37	0.00	0.00	4.72	-0.72
C	4	0.95	2.47	0.00	0.00	3.42	0.58

C	5	0.96	2.60	0.00	0.00	3.55	0.45
C	6	1.23	3.33	0.00	0.00	4.56	-0.56
C	7	1.34	3.38	0.00	0.00	4.72	-0.72
C	8	0.89	2.44	0.00	0.00	3.33	0.67
C	9	0.94	2.48	0.00	0.00	3.42	0.58
C	10	1.36	3.40	0.00	0.00	4.76	-0.76
C	11	1.35	3.38	0.00	0.00	4.73	-0.73
C	12	0.92	2.45	0.00	0.00	3.37	0.63
O	1	1.87	5.16	0.00	0.00	7.02	-1.02
O	2	1.79	4.82	0.00	0.00	6.61	-0.61
O	3	1.82	4.74	0.00	0.00	6.56	-0.56
O	4	1.82	4.79	0.00	0.00	6.61	-0.61
O	5	1.82	4.72	0.00	0.00	6.55	-0.55
O	6	1.83	4.71	0.00	0.00	6.54	-0.54
O	7	1.83	4.78	0.00	0.00	6.61	-0.61
O	8	1.82	4.74	0.00	0.00	6.56	-0.56
O	9	1.79	4.78	0.00	0.00	6.56	-0.56
O	10	1.81	4.77	0.00	0.00	6.58	-0.58
O	11	1.82	4.73	0.00	0.00	6.55	-0.55
O	12	1.84	4.94	0.00	0.00	6.78	-0.78
O	13	1.79	4.75	0.00	0.00	6.55	-0.55
O	14	1.79	4.75	0.00	0.00	6.54	-0.54
O	15	1.91	5.12	0.00	0.00	7.03	-1.03
O	16	1.87	5.04	0.00	0.00	6.91	-0.91
O	17	1.87	5.15	0.00	0.00	7.01	-1.01

O	18	1.85	5.11	0.00	0.00	6.96	-0.96
P	1	0.90	1.80	0.00	0.00	2.70	2.30
S	1	1.78	4.02	0.00	0.00	5.81	0.19
S	2	1.75	3.85	0.00	0.00	5.60	0.40
S	3	1.77	3.99	0.00	0.00	5.76	0.24
Ce	1	2.09	5.86	1.21	1.16	10.32	1.68
Ce	2	2.09	5.82	1.21	1.04	10.16	1.84

---

Bond	Population	Length (A)
H 10 -- O 18	0.54	0.99545
H 17 -- O 17	0.50	0.99637
H 6 -- O 1	0.52	0.99956
H 1 -- O 1	0.53	1.00884
H 12 -- O 12	0.50	1.03641
H 11 -- O 2	0.52	1.06429
H 7 -- C 6	0.82	1.10126
H 2 -- C 2	0.81	1.10607
H 13 -- C 10	0.80	1.10682
H 8 -- C 7	0.85	1.10755
H 15 -- C 11	0.85	1.10765
H 3 -- C 2	0.77	1.11100
H 14 -- C 10	0.80	1.11226
H 9 -- C 7	0.80	1.11416

H 5 -- C 3	0.79	1.11482
H 16 -- C 11	0.81	1.11758
H 4 -- C 3	0.78	1.12263
C 1 -- O 3	1.08	1.21743
C 8 -- O 8	1.08	1.21833
C 12 -- O 14	0.94	1.25599
C 9 -- O 11	0.95	1.26188
C 12 -- O 13	0.90	1.26992
C 4 -- O 5	0.91	1.27438
C 4 -- O 4	0.92	1.27505
C 9 -- O 10	0.91	1.27739
C 5 -- O 6	0.78	1.31465
C 8 -- O 9	0.75	1.31551
C 5 -- O 7	0.77	1.31756
C 1 -- O 2	0.69	1.32409
C 5 -- C 6	1.06	1.38469
O 15 -- P 1	0.87	1.46853
C 3 -- C 4	0.70	1.48385
H 11 -- O 12	0.16	1.49070
C 9 -- C 10	0.71	1.49366
C 11 -- C 12	0.74	1.49974
C 1 -- C 2	0.70	1.50771
C 7 -- C 8	0.68	1.50995
O 16 -- P 1	0.58	1.52972
H 1 -- H 6	-0.15	1.57571

O 17 -- P 1	0.41	1.59672
O 18 -- P 1	0.34	1.66183
C 6 -- S 2	0.71	1.68808
C 7 -- S 2	0.53	1.77951
H 11 -- H 12	-0.04	1.78548
C 10 -- S 3	0.54	1.79038
H 13 -- H 14	-0.09	1.79354
C 3 -- S 1	0.48	1.79740
C 2 -- S 1	0.49	1.79955
H 2 -- H 3	-0.09	1.80045
C 11 -- S 3	0.51	1.80967
H 4 -- H 5	-0.08	1.81030
H 15 -- H 16	-0.08	1.81779
H 8 -- H 9	-0.07	1.82465
H 1 -- O 2	0.04	1.87359
H 12 -- S 1	0.18	1.99476
H 11 -- C 1	-0.15	2.03197
H 4 -- O 1	0.04	2.06016
H 9 -- O 7	0.02	2.06528
H 14 -- C 9	-0.11	2.09836
O 12 -- Ce 2	0.33	2.10213
H 2 -- C 1	-0.15	2.10334
H 16 -- C 12	-0.11	2.10966
H 9 -- C 8	-0.13	2.11202
H 17 -- P 1	-0.15	2.11649



H 5 -- C 4	-0.12	2.12093
H 7 -- C 5	-0.13	2.12122
H 4 -- C 4	-0.12	2.12449
H 3 -- C 1	-0.11	2.14412
H 13 -- C 9	-0.13	2.14438
H 15 -- C 12	-0.12	2.15636
O 9 -- Ce 1	0.31	2.16542
H 8 -- C 8	-0.10	2.17685
O 6 -- O 7	-0.19	2.19775
O 4 -- O 5	-0.20	2.21088
O 2 -- O 3	-0.20	2.21528
O 6 -- Ce 1	0.20	2.22067
O 13 -- O 14	-0.18	2.22660
O 16 -- Ce 2	0.17	2.22664
O 10 -- O 11	-0.19	2.22776
H 10 -- P 1	-0.09	2.22885
O 8 -- O 9	-0.18	2.25065
O 13 -- Ce 1	0.21	2.29391
O 7 -- Ce 1	0.22	2.30604
O 14 -- Ce 2	0.20	2.32642
H 14 -- S 3	-0.10	2.33403
C 6 -- O 6	-0.20	2.34010
O 5 -- Ce 2	0.11	2.34249
C 10 -- O 11	-0.21	2.34297
H 16 -- O 4	0.02	2.34405

H 7 -- S 2	-0.13	2.34680
H 3 -- S 1	-0.11	2.35104
C 7 -- O 9	-0.23	2.35282
C 2 -- O 3	-0.22	2.35943
H 8 -- S 2	-0.13	2.36148
C 3 -- O 5	-0.21	2.36504
C 11 -- O 13	-0.22	2.36788
O 16 -- O 18	-0.16	2.36905
C 11 -- O 14	-0.21	2.37864
H 9 -- S 2	-0.11	2.38214
O 11 -- Ce 2	0.05	2.38314
C 7 -- O 8	-0.21	2.39041
H 2 -- S 1	-0.13	2.40272
H 5 -- S 1	-0.12	2.41129
C 3 -- O 4	-0.20	2.41355
C 6 -- O 7	-0.18	2.41421
C 10 -- O 10	-0.19	2.41567
H 16 -- S 3	-0.08	2.41676
H 2 -- O 3	-0.03	2.41978
H 13 -- S 3	-0.11	2.42843
H 15 -- S 3	-0.13	2.42870
H 14 -- O 7	-0.01	2.43301
C 2 -- O 2	-0.20	2.44331
H 1 -- H 4	-0.03	2.44527
H 4 -- S 1	-0.10	2.45055

O 16 -- O 17	-0.13	2.47043
H 7 -- O 1	-0.00	2.48074
H 17 -- O 15	-0.02	2.49018
H 6 -- O 8	0.02	2.49845
H 8 -- O 9	-0.02	2.50290
H 4 -- O 5	-0.02	2.50417
H 13 -- O 11	-0.02	2.50508
H 1 -- H 11	-0.01	2.50971
H 1 -- C 1	-0.05	2.51411
H 15 -- O 14	-0.02	2.51941
H 6 -- H 7	-0.02	2.52149
O 10 -- Ce 1	0.16	2.53038
O 4 -- Ce 2	0.11	2.53316
H 1 -- O 5	-0.00	2.54061
H 7 -- O 6	-0.02	2.54480
O 2 -- O 12	-0.13	2.54964
O 15 -- O 17	-0.13	2.55234
H 11 -- C 2	-0.04	2.55382
O 17 -- O 18	-0.10	2.56651
O 18 -- Ce 2	0.09	2.59359
H 11 -- O 5	-0.02	2.59633
O 15 -- O 18	-0.11	2.59839
H 10 -- O 15	-0.01	2.62820
O 15 -- O 16	-0.09	2.66109
C 5 -- Ce 1	-0.45	2.67443

H 6 -- C 6	-0.03	2.68952
H 16 -- C 10	-0.06	2.69084
O 6 -- O 9	-0.02	2.69244
O 7 -- O 10	-0.03	2.69562
H 9 -- C 5	-0.02	2.69585
C 4 -- S 1	-0.16	2.69690
H 12 -- O 2	-0.01	2.70938
H 3 -- H 11	-0.00	2.71122
C 12 -- S 3	-0.15	2.72669
H 2 -- H 4	0.00	2.73475
C 2 -- C 3	-0.15	2.73661
C 8 -- S 2	-0.16	2.73885
O 10 -- Ce 2	0.05	2.75062
O 9 -- O 13	-0.03	2.75339
H 16 -- O 13	-0.02	2.75559
C 6 -- C 7	-0.16	2.75580
H 2 -- H 7	-0.02	2.76701
H 13 -- H 16	-0.01	2.77515
H 9 -- C 6	-0.05	2.77680
H 5 -- C 1	-0.01	2.78200
C 9 -- S 3	-0.14	2.78239
H 12 -- C 2	-0.04	2.78490
H 1 -- O 3	-0.01	2.78902
C 5 -- S 2	-0.15	2.79248
H 14 -- O 11	-0.01	2.79499

H 3 -- O 2	-0.01	2.79893
H 16 -- C 9	-0.01	2.80120
C 4 -- Ce 2	-0.40	2.80616
H 6 -- S 2	-0.02	2.81497
O 1 -- O 2	-0.05	2.81944
H 9 -- O 9	-0.01	2.82835
C 10 -- C 11	-0.13	2.83293
H 8 -- S 3	-0.02	2.83522
O 10 -- O 13	-0.02	2.83730
C 1 -- S 1	-0.12	2.84356
H 5 -- O 5	-0.00	2.85454
H 9 -- O 8	-0.01	2.85560
S 3 -- Ce 1	0.23	2.87397
O 5 -- O 16	-0.01	2.88373
O 2 -- O 5	-0.01	2.88565
H 12 -- H 16	-0.01	2.88703
C 9 -- O 7	-0.02	2.89060
H 11 -- S 1	-0.01	2.89093
H 3 -- H 12	-0.01	2.89398
H 4 -- C 2	-0.03	2.89448
C 9 -- Ce 2	-0.31	2.89512
O 4 -- S 1	-0.02	2.90576
O 4 -- O 11	-0.01	2.91458
C 9 -- O 4	-0.02	2.91723
O 5 -- O 12	-0.01	2.92271

H 15 -- O 11	-0.00	2.92538
H 5 -- O 2	-0.00	2.92700
C 7 -- O 7	-0.07	2.92984
H 6 -- O 3	0.00	2.93614
H 14 -- O 10	-0.00	2.93623
O 12 -- O 14	-0.01	2.94240
H 4 -- H 6	-0.00	2.94595
H 5 -- C 2	-0.02	2.94976
O 13 -- S 3	-0.03	2.95038
H 5 -- O 4	-0.00	2.96052
C 10 -- O 7	-0.04	2.96132
H 16 -- O 14	-0.00	2.96405
H 5 -- H 12	-0.01	2.96850
O 12 -- S 1	-0.15	2.96988
H 16 -- O 10	-0.00	2.97414
H 11 -- Ce 2	-0.13	2.97713
O 4 -- O 10	-0.02	2.97849
O 14 -- O 16	-0.01	2.98939
O 8 -- S 2	-0.04	2.99076

---

#### Hirshfeld Analysis

-----

Species	Ion	Hirshfeld Charge (e)
---------	-----	----------------------

---

---

H	1	0.10
H	2	0.06
H	3	0.07
H	4	0.05
H	5	0.07
H	6	0.12
H	7	0.06
H	8	0.04
H	9	0.04
H	10	0.20
H	11	0.09
H	12	0.08
H	13	0.07
H	14	0.07
H	15	0.06
H	16	0.06
H	17	0.18
C	1	0.17
C	2	-0.09
C	3	-0.09
C	4	0.18
C	5	0.11
C	6	-0.09
C	7	-0.10

C	8	0.18
C	9	0.19
C	10	-0.08
C	11	-0.08
C	12	0.21
O	1	-0.28
O	2	-0.13
O	3	-0.24
O	4	-0.22
O	5	-0.18
O	6	-0.22
O	7	-0.22
O	8	-0.23
O	9	-0.23
O	10	-0.18
O	11	-0.20
O	12	-0.29
O	13	-0.21
O	14	-0.19
O	15	-0.36
O	16	-0.28
O	17	-0.23
O	18	-0.19
P	1	0.43
S	1	0.11



S	2	0.15
S	3	0.16
Ce	1	0.68
Ce	2	0.54

---

---