

# **The Free Energy Barrier of Molecular Motions in Bistable [2]Rotaxane Molecular Electronic Devices : Supplementary Materials**

Hyungjun Kim,<sup>1</sup> William A. Goddard III,<sup>1,\*</sup> Seung Soon Jang,<sup>2,\*</sup>  
William R. Dichtel,<sup>3,4</sup> James R. Heath,<sup>3</sup> and J. Fraser Stoddart<sup>5</sup>

<sup>1</sup> Materials and Process Simulation Center (MC 139-74)  
California Institute of Technology, Pasadena, CA 91125

<sup>2</sup> School of Materials Science and Engineering  
Georgia Institute of Technology, Atlanta, GA 30332-0245

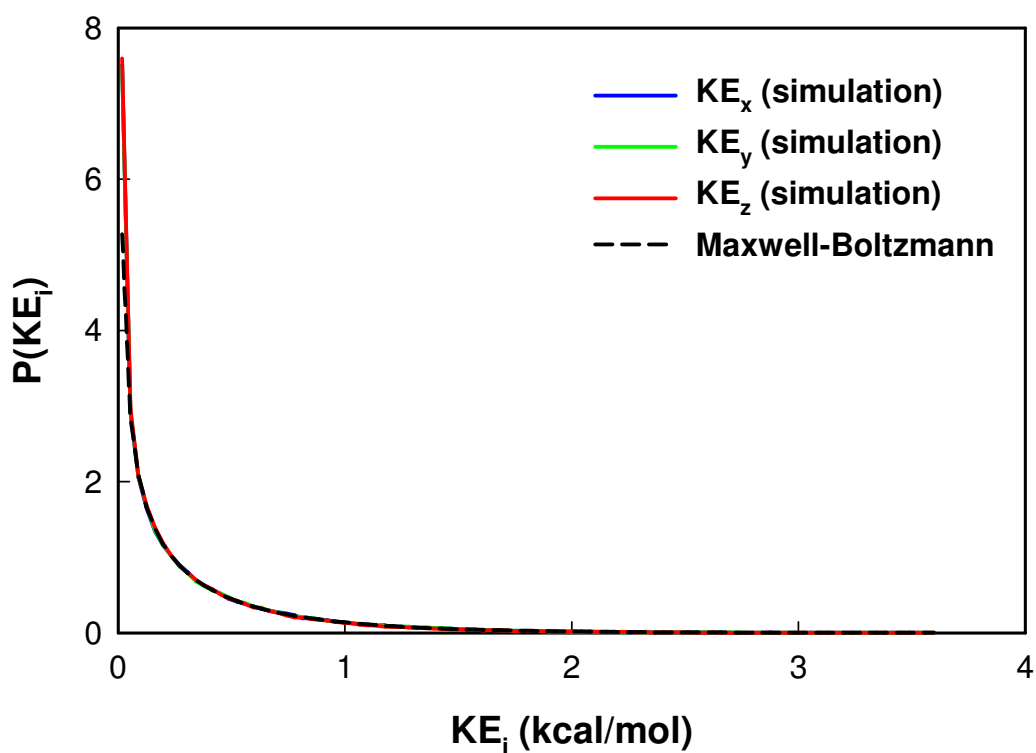
<sup>3</sup> Division of Chemistry and Chemical Engineering (MC 127-72),  
California Institute of Technology, Pasadena, CA, 91125

<sup>4</sup> Department of Chemistry and Biochemistry  
University of California, Los Angeles, California, 90095-1569

<sup>5</sup> Department of Chemistry, Northwestern University, Evanston, IL 60208

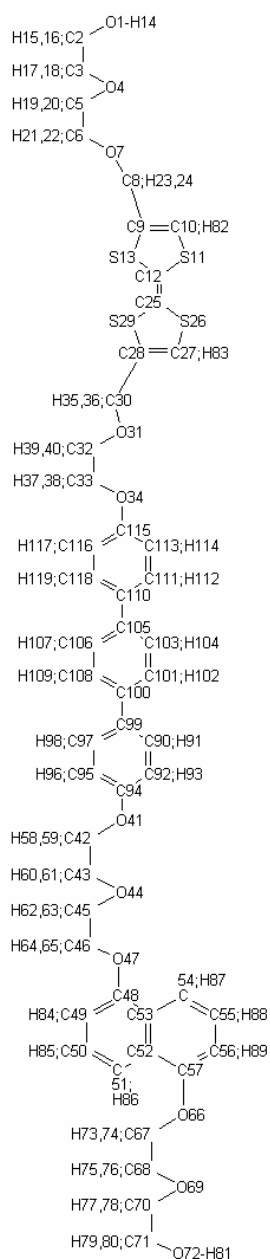
---

\* To whom correspondence should be addressed. E-mail: [wag@wag.caltech.edu](mailto:wag@wag.caltech.edu) and [SeungSoon.Jang@mse.gatech.edu](mailto:SeungSoon.Jang@mse.gatech.edu)

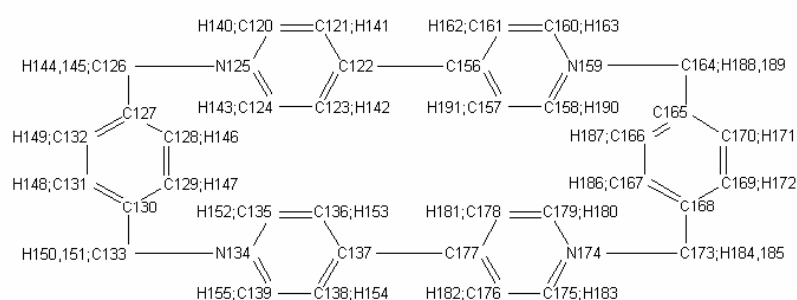


**Figure S1.** The probability density functions of  $KE_x$  ( $=1/2 mv_x^2$ ; blue line),  $KE_y$  ( $=1/2 mv_y^2$ ; green line), and  $KE_z$  ( $=1/2 mv_z^2$ ; red line) are computed from the simulation of the CBPQT4+ ring@TTF, which are identical to each other. The simulation results are compared with the Maxwell-Boltzmann distribution of  $KE_i$ ,  $\sqrt{1/(\pi KE_i k_B T)} \exp(-KE_i / k_B T)$ , when  $T=300K$ . ( $i \in \{x,y,z\}$ ; black dashed line)

### a) Backbone



### b) CBPQT<sup>4+</sup> ring



**Figure S2.** Structures of a) backbone part and b) CBPQT<sup>4+</sup> ring part with numbered atoms. The assigned numbers on the atoms are associated with the partial charge distribution data shown in Table S1, S2, and S3.

**Table S1a.** Partial charge distribution of neutral rotaxane when the center of mass of the CBPQT<sup>4+</sup> ring is located at z=10.92 Å.

O1	-0.5382	C25	-0.3287	C49	-0.1555	H73	0.1454	C97	-0.1001	C121	-0.1305	H145	0.1753	C169	-0.0964
C2	0.0386	S26	0.2392	C50	-0.0636	H74	0.1450	H98	0.1234	C122	0.1089	H146	0.1392	C170	-0.0997
C3	0.0644	C27	-0.2631	C51	-0.0545	H75	0.1133	C99	0.0338	C123	-0.1530	H147	0.1390	H171	0.1167
O4	-0.5061	C28	-0.1531	C52	-0.0662	H76	0.1136	C100	0.0458	C124	0.1503	H148	0.1206	H172	0.1187
C5	0.0809	S29	0.2279	C53	-0.0660	H77	0.1135	C101	-0.1075	N125	-0.4090	H149	0.1203	C173	-0.1699
C6	0.0400	C30	0.0921	C54	-0.0541	H78	0.1132	H102	0.1251	C126	-0.1694	H150	0.1758	N174	-0.4127
O7	-0.5162	O31	-0.5111	C55	-0.0641	H79	0.1038	C103	-0.1094	C127	0.0979	H151	0.1747	C175	0.1642
C8	0.0910	C32	0.0469	C56	-0.1512	H80	0.1037	H104	0.1219	C128	-0.1228	H152	0.1676	C176	-0.1350
C9	-0.1521	C33	0.0546	C57	0.4161	H81	0.3257	C105	0.0442	C129	-0.1221	H153	0.1396	C177	0.1107
C10	-0.2770	O34	-0.5323	H58	0.1162	H82	0.1725	C106	-0.1097	C130	0.0930	H154	0.1467	C178	-0.1538
S11	0.2519	H35	0.1195	H59	0.1165	H83	0.1836	H107	0.1160	C131	-0.1025	H155	0.1713	C179	0.1485
C12	-0.3314	H36	0.0993	H60	0.1121	H84	0.1514	C108	-0.1073	C132	-0.0962	C156	0.1030	H180	0.1752
S13	0.2401	H37	0.1066	H61	0.1123	H85	0.1541	H109	0.1246	C133	-0.1670	C157	-0.1264	H181	0.1518
H14	0.3251	H38	0.1120	H62	0.1132	H86	0.1684	C110	0.0278	N134	-0.4094	C158	0.1579	H182	0.1386
H15	0.0985	H39	0.1190	H63	0.1133	H87	0.1615	C111	-0.1017	C135	0.1581	N159	-0.4091	H183	0.1589
H16	0.1002	H40	0.1108	H64	0.1406	H88	0.1557	H112	0.1217	C136	-0.1275	C160	0.1412	H184	0.1691
H17	0.1048	O41	-0.5246	H65	0.1408	H89	0.1626	C113	-0.1234	C137	0.1055	C161	-0.1499	H185	0.1802
H18	0.1024	C42	0.0409	O66	-0.4800	C90	-0.1002	H114	0.1130	C138	-0.1411	H162	0.1514	H186	0.1291
H19	0.0961	C43	0.0594	C67	0.0066	H91	0.1229	C115	0.3105	C139	0.1509	H163	0.1743	H187	0.1321
H20	0.0861	O44	-0.5104	C68	0.0661	C92	-0.1185	C116	-0.1241	H140	0.1670	C164	-0.1660	H188	0.1761
H21	0.1065	C45	0.0615	O69	-0.4963	H93	0.1330	H117	0.1181	H141	0.1414	C165	0.0905	H189	0.1751
H22	0.1183	C46	0.0157	C70	0.0609	C94	0.3278	C118	-0.1012	H142	0.1502	C166	-0.1151	H190	0.1627
H23	0.0908	O47	-0.4889	C71	0.0341	C95	-0.1183	H119	0.1243	H143	0.1742	C167	-0.1154	H191	0.1373
H24	0.1188	C48	0.4122	O72	-0.5288	H96	0.1323	C120	0.1554	H144	0.1770	C168	0.0977	Total	4.0000

**Table S1b.** Partial charge distribution of neutral rotaxane when the center of mass of the CBPQT<sup>4+</sup> ring is located at  $z=15.66 \text{ \AA}$ .

O1	-0.5354	C25	-0.3661	C49	-0.1546	H73	0.1468	C97	-0.1017	C121	-0.1304	H145	0.1792	C169	-0.1051
C2	0.0359	S26	0.2715	C50	-0.0629	H74	0.1463	H98	0.1198	C122	0.0989	H146	0.1450	C170	-0.1064
C3	0.0682	C27	-0.2746	C51	-0.0530	H75	0.1147	C99	0.0329	C123	-0.1558	H147	0.1434	H171	0.1284
O4	-0.5076	C28	-0.1462	C52	-0.0660	H76	0.1150	C100	0.0439	C124	0.1486	H148	0.1146	H172	0.1268
C5	0.0749	S29	0.2325	C53	-0.0659	H77	0.1150	C101	-0.1090	N125	-0.4095	H149	0.1142	C173	-0.1644
C6	0.0423	C30	0.0856	C54	-0.0525	H78	0.1147	H102	0.1232	C126	-0.1559	H150	0.1758	N174	-0.4130
O7	-0.5133	O31	-0.5186	C55	-0.0634	H79	0.1052	C103	-0.1117	C127	0.0860	H151	0.1745	C175	0.1411
C8	0.0915	C32	0.0514	C56	-0.1501	H80	0.1052	H104	0.1156	C128	-0.1116	H152	0.1764	C176	-0.1341
C9	-0.1370	C33	0.0644	C57	0.4175	H81	0.3271	C105	0.0401	C129	-0.1133	H153	0.1486	C177	0.1040
C10	-0.2477	O34	-0.5377	H58	0.1154	H82	0.1991	C106	-0.1119	C130	0.0935	H154	0.1513	C178	-0.1543
S11	0.2436	H35	0.0999	H59	0.1155	H83	0.1581	H107	0.1071	C131	-0.1146	H155	0.1754	C179	0.1551
C12	-0.3058	H36	0.1066	H60	0.1123	H84	0.1531	C108	-0.1087	C132	-0.1144	C156	0.0879	H180	0.1804
S13	0.2640	H37	0.1000	H61	0.1123	H85	0.1562	H109	0.1218	C133	-0.1607	C157	-0.1168	H181	0.1553
H14	0.3230	H38	0.1023	H62	0.1136	H86	0.1702	C110	0.0280	N134	-0.4175	C158	0.1067	H182	0.1366
H15	0.0995	H39	0.0950	H63	0.1137	H87	0.1636	C111	-0.1035	C135	0.1631	N159	-0.4037	H183	0.1650
H16	0.0994	H40	0.0979	H64	0.1415	H88	0.1582	H112	0.1217	C136	-0.1311	C160	0.1531	H184	0.1748
H17	0.1030	O41	-0.5256	H65	0.1416	H89	0.1648	C113	-0.1255	C137	0.0930	C161	-0.1407	H185	0.1796
H18	0.1033	C42	0.0421	O66	-0.4785	C90	-0.1019	H114	0.0988	C138	-0.1571	H162	0.1581	H186	0.1417
H19	0.0962	C43	0.0589	C67	0.0052	H91	0.1192	C115	0.3010	C139	0.1475	H163	0.1819	H187	0.1407
H20	0.0964	O44	-0.5101	C68	0.0654	C92	-0.1191	C116	-0.1266	H140	0.1764	C164	-0.1597	H188	0.1802
H21	0.1134	C45	0.0616	O69	-0.4937	H93	0.1309	H117	0.1045	H141	0.1533	C165	0.0778	H189	0.1741
H22	0.1142	C46	0.0145	C70	0.0596	C94	0.3255	C118	-0.1029	H142	0.1507	C166	-0.1225	H190	0.1709
H23	0.1231	O47	-0.4874	C71	0.0336	C95	-0.1190	H119	0.1247	H143	0.1779	C167	-0.1207	H191	0.1437
H24	0.1247	C48	0.4136	O72	-0.5257	H96	0.1302	C120	0.1602	H144	0.1764	C168	0.0821	Total	4.0000

**Table S1c.** Partial charge distribution of neutral rotaxane when the center of mass of the CBPQT<sup>4+</sup> ring is located at  $z=18.75 \text{ \AA}$ .

O1	-0.5336	C25	-0.3276	C49	-0.1537	H73	0.1479	C97	-0.1044	C121	-0.1257	H145	0.1794	C169	-0.1082
C2	0.0349	S26	0.2626	C50	-0.0622	H74	0.1474	H98	0.1124	C122	0.0874	H146	0.1468	C170	-0.1069
C3	0.0686	C27	-0.2950	C51	-0.0510	H75	0.1102	C99	0.0293	C123	-0.1464	H147	0.1486	H171	0.1133
O4	-0.5057	C28	-0.1555	C52	-0.0662	H76	0.1105	C100	0.0429	C124	0.1496	H148	0.1172	H172	0.1131
C5	0.0723	S29	0.2815	C53	-0.0659	H77	0.1105	C101	-0.1114	N125	-0.4116	H149	0.1170	C173	-0.1727
C6	0.0434	C30	0.0756	C54	-0.0507	H78	0.1103	H102	0.1216	C126	-0.1591	H150	0.1800	N174	-0.4059
O7	-0.5136	O31	-0.5159	C55	-0.0625	H79	0.1001	C103	-0.1140	C127	0.0627	H151	0.1800	C175	0.1519
C8	0.0891	C32	0.0604	C56	-0.1484	H80	0.1000	H104	0.1048	C128	-0.1156	H152	0.1734	C176	-0.1312
C9	-0.1367	C33	0.0561	C57	0.4201	H81	0.3230	C105	0.0307	C129	-0.1181	H153	0.1379	C177	0.0871
C10	-0.2433	O34	-0.5499	H58	0.1132	H82	0.2039	C106	-0.1140	C130	0.0637	H154	0.1528	C178	-0.1492
S11	0.3179	H35	0.1088	H59	0.1134	H83	0.1603	H107	0.0939	C131	-0.1034	H155	0.1830	C179	0.1455
C12	-0.2980	H36	0.1023	H60	0.1121	H84	0.1541	C108	-0.1110	C132	-0.1026	C156	0.0841	H180	0.1841
S13	0.3122	H37	0.0927	H61	0.1120	H85	0.1579	H109	0.1198	C133	-0.1607	C157	-0.1294	H181	0.1566
H14	0.3227	H38	0.0929	H62	0.1138	H86	0.1736	C110	0.0338	N134	-0.4152	C158	0.1561	H182	0.1349
H15	0.0999	H39	0.0951	H63	0.1138	H87	0.1652	C111	-0.1041	C135	0.1586	N159	-0.4072	H183	0.1777
H16	0.1000	H40	0.0956	H64	0.1418	H88	0.1605	H112	0.1252	C136	-0.1229	C160	0.1460	H184	0.1778
H17	0.1039	O41	-0.5280	H65	0.1421	H89	0.1681	C113	-0.1390	C137	0.0931	C161	-0.1474	H185	0.1818
H18	0.1041	C42	0.0441	O66	-0.4753	C90	-0.1047	H114	0.0777	C138	-0.1515	H162	0.1563	H186	0.1399
H19	0.0987	C43	0.0584	C67	0.0019	H91	0.1124	C115	0.3001	C139	0.1520	H163	0.1841	H187	0.1401
H20	0.0989	O44	-0.5104	C68	0.0699	C92	-0.1206	C116	-0.1395	H140	0.1781	C164	-0.1716	H188	0.1838
H21	0.1137	C45	0.0619	O69	-0.5035	H93	0.1272	H117	0.0780	H141	0.1399	C165	0.0753	H189	0.1774
H22	0.1146	C46	0.0136	C70	0.0620	C94	0.3214	C118	-0.1031	H142	0.1530	C166	-0.1068	H190	0.1782
H23	0.1281	O47	-0.4860	C71	0.0369	C95	-0.1206	H119	0.1263	H143	0.1822	C167	-0.1067	H191	0.1354
H24	0.1291	C48	0.4151	O72	-0.5375	H96	0.1261	C120	0.1532	H144	0.1819	C168	0.0784	Total	4.0000

**Table S1d.** Partial charge distribution of neutral rotaxane when the center of mass of the CBPQT<sup>4+</sup> ring is located at  $z=23.27 \text{ \AA}$ .

O1	-0.5279	C25	-0.3086	C49	-0.1582	H73	0.1443	C97	-0.1072	C121	-0.1336	H145	0.1741	C169	-0.1167
C2	0.0329	S26	0.3543	C50	-0.0650	H74	0.1439	H98	0.1019	C122	0.0917	H146	0.1418	C170	-0.1121
C3	0.0686	C27	-0.2483	C51	-0.0574	H75	0.1106	C99	0.0222	C123	-0.1462	H147	0.1403	H171	0.1147
O4	-0.5049	C28	-0.1425	C52	-0.0664	H76	0.1108	C100	0.0446	C124	0.1463	H148	0.1170	H172	0.1171
C5	0.0712	S29	0.3447	C53	-0.0660	H77	0.1112	C101	-0.1131	N125	-0.4239	H149	0.1248	C173	-0.1604
C6	0.0422	C30	0.0685	C54	-0.0571	H78	0.1109	H102	0.1231	C126	-0.1481	H150	0.1767	N174	-0.4187
O7	-0.5141	O31	-0.5163	C55	-0.0652	H79	0.1008	C103	-0.1230	C127	0.0648	H151	0.1780	C175	0.1537
C8	0.0877	C32	0.0676	C56	-0.1524	H80	0.1008	H104	0.0839	C128	-0.1201	H152	0.1617	C176	-0.1241
C9	-0.1360	C33	0.0476	C57	0.4143	H81	0.3234	C105	0.0307	C129	-0.1195	H153	0.1407	C177	0.0941
C10	-0.2406	O34	-0.5518	H58	0.1111	H82	0.2112	C106	-0.1282	C130	0.0670	H154	0.1543	C178	-0.1423
S11	0.3762	H35	0.1321	H59	0.1109	H83	0.1521	H107	0.0635	C131	-0.1020	H155	0.1797	C179	0.1488
C12	-0.3078	H36	0.1294	H60	0.1107	H84	0.1439	C108	-0.1150	C132	-0.1022	C156	0.0788	H180	0.1737
S13	0.3603	H37	0.0980	H61	0.1110	H85	0.1487	H109	0.1213	C133	-0.1533	C157	-0.1126	H181	0.1489
H14	0.3242	H38	0.1011	H62	0.1130	H86	0.1662	C110	0.0159	N134	-0.4168	C158	0.1456	H182	0.1451
H15	0.1026	H39	0.1051	H63	0.1132	H87	0.1568	C111	-0.1167	C135	0.1442	N159	-0.4189	H183	0.1687
H16	0.1025	H40	0.1004	H64	0.1367	H88	0.1526	H112	0.0892	C136	-0.1185	C160	0.1430	H184	0.1770
H17	0.1048	O41	-0.5293	H65	0.1368	H89	0.1612	C113	-0.1346	C137	0.0906	C161	-0.1573	H185	0.1787
H18	0.1053	C42	0.0434	O66	-0.4814	C90	-0.1076	H114	0.0981	C138	-0.1525	H162	0.1414	H186	0.1414
H19	0.1001	C43	0.0614	C67	0.0072	H91	0.0998	C115	0.2978	C139	0.1483	H163	0.1713	H187	0.1392
H20	0.1007	O44	-0.5120	C68	0.0681	C92	-0.1219	C116	-0.1389	H140	0.1590	C164	-0.1596	H188	0.1775
H21	0.1158	C45	0.0601	O69	-0.4995	H93	0.1270	H117	0.1061	H141	0.1242	C165	0.0909	H189	0.1745
H22	0.1164	C46	0.0206	C70	0.0622	C94	0.3204	C118	-0.1235	H142	0.1558	C166	-0.1188	H190	0.1586
H23	0.1342	O47	-0.4929	C71	0.0362	C95	-0.1215	H119	0.1059	H143	0.1781	C167	-0.1157	H191	0.1389
H24	0.1349	C48	0.4084	O72	-0.5357	H96	0.1268	C120	0.1535	H144	0.1783	C168	0.0885	Total	4.0000

**Table S1e.** Partial charge distribution of neutral rotaxane when the center of mass of the CBPQT<sup>4+</sup> ring is located at z=28.17 Å.

O1	-0.5279	C25	-0.3052	C49	-0.1814	H73	0.1186	C97	-0.1307	C121	-0.1208	H145	0.1859	C169	-0.1017
C2	0.0336	S26	0.4090	C50	-0.0854	H74	0.1186	H98	0.0822	C122	0.1032	H146	0.1403	C170	-0.1042
C3	0.0642	C27	-0.2440	C51	-0.0911	H75	0.0976	C99	0.0113	C123	-0.1394	H147	0.1347	H171	0.1225
O4	-0.4978	C28	-0.1406	C52	-0.0708	H76	0.0977	C100	0.0256	C124	0.1505	H148	0.1268	H172	0.1199
C5	0.0698	S29	0.4042	C53	-0.0635	H77	0.0989	C101	-0.1375	N125	-0.4077	H149	0.1277	C173	-0.1670
C6	0.0368	C30	0.0737	C54	-0.1008	H78	0.0985	H102	0.1047	C126	-0.1678	H150	0.1751	N174	-0.4116
O7	-0.5149	O31	-0.5186	C55	-0.0796	H79	0.0953	C103	-0.1342	C127	0.0696	H151	0.1877	C175	0.1652
C8	0.0870	C32	0.0555	C56	-0.1795	H80	0.0954	H104	0.1000	C128	-0.1174	H152	0.1696	C176	-0.1240
C9	-0.1348	C33	0.0403	C57	0.3787	H81	0.3163	C105	0.0210	C129	-0.1136	H153	0.1413	C177	0.1034
C10	-0.2362	O34	-0.5223	H58	0.1055	H82	0.2260	C106	-0.1352	C130	0.0801	H154	0.1621	C178	-0.1446
S11	0.4294	H35	0.1449	H59	0.1010	H83	0.1864	H107	0.1008	C131	-0.1037	H155	0.1885	C179	0.1510
C12	-0.3105	H36	0.1428	H60	0.1089	H84	0.0799	C108	-0.1374	C132	-0.1027	C156	0.0998	H180	0.1850
S13	0.4158	H37	0.1076	H61	0.1103	H85	0.0904	H109	0.1023	C133	-0.1756	C157	-0.1168	H181	0.1518
H14	0.3259	H38	0.1057	H62	0.1115	H86	0.1230	C110	0.0149	N134	-0.4041	C158	0.1546	H182	0.1500
H15	0.1039	H39	0.1262	H63	0.1122	H87	0.0956	C111	-0.1266	C135	0.1486	N159	-0.4006	H183	0.1732
H16	0.1038	H40	0.1250	H64	0.1088	H88	0.0966	H112	0.0905	C136	-0.1203	C160	0.1550	H184	0.1879
H17	0.1086	O41	-0.5175	H65	0.1074	H89	0.1142	C113	-0.1250	C137	0.0971	C161	-0.1441	H185	0.1819
H18	0.1090	C42	0.0313	O66	-0.5197	C90	-0.1319	H114	0.1350	C138	-0.1463	H162	0.1600	H186	0.1463
H19	0.1038	C43	0.0775	C67	0.0387	H91	0.0784	C115	0.3213	C139	0.1520	H163	0.1897	H187	0.1459
H20	0.1045	O44	-0.5162	C68	0.0682	C92	-0.1264	C116	-0.1267	H140	0.1695	C164	-0.1759	H188	0.1892
H21	0.1215	C45	0.0451	O69	-0.5108	H93	0.1392	H117	0.1326	H141	0.1472	C165	0.0742	H189	0.1865
H22	0.1221	C46	0.0596	C70	0.0763	C94	0.3322	C118	-0.1282	H142	0.1656	C166	-0.1125	H190	0.1828
H23	0.1439	O47	-0.5225	C71	0.0350	C95	-0.1244	H119	0.0858	H143	0.1915	C167	-0.1173	H191	0.1540
H24	0.1448	C48	0.3625	O72	-0.5416	H96	0.1421	C120	0.1648	H144	0.1884	C168	0.0697	Total	4.0000



**Table S1f.** Partial charge distribution of neutral rotaxane when the center of mass of the CBPQT<sup>4+</sup> ring is located at z=32.22 Å.

O1	-0.5161	C25	-0.3055	C49	-0.1725	H73	0.1357	C97	-0.1262	C121	-0.1251	H145	0.1745	C169	-0.1091
C2	0.0282	S26	0.4047	C50	-0.0767	H74	0.1350	H98	0.0980	C122	0.0894	H146	0.1440	C170	-0.1080
C3	0.0666	C27	-0.2433	C51	-0.0753	H75	0.1040	C99	0.0160	C123	-0.1407	H147	0.1420	H171	0.1173
O4	-0.4995	C28	-0.1396	C52	-0.0682	H76	0.1045	C100	0.0354	C124	0.1447	H148	0.1305	H172	0.1207
C5	0.0678	S29	0.3949	C53	-0.0640	H77	0.1053	C101	-0.1447	N125	-0.4183	H149	0.1399	C173	-0.1633
C6	0.0406	C30	0.0786	C54	-0.0816	H78	0.1053	H102	0.0451	C126	-0.1515	H150	0.1733	N174	-0.4158
O7	-0.5148	O31	-0.5159	C55	-0.0736	H79	0.0980	C103	-0.1122	C127	0.0801	H151	0.1778	C175	0.1536
C8	0.0862	C32	0.0525	C56	-0.1652	H80	0.0978	H104	0.1207	C128	-0.1184	H152	0.1813	C176	-0.1322
C9	-0.1360	C33	0.0441	C57	0.3991	H81	0.3209	C105	0.0481	C129	-0.1211	H153	0.1505	C177	0.0938
C10	-0.2385	O34	-0.5289	H58	0.0984	H82	0.2178	C106	-0.1156	C130	0.0788	H154	0.1502	C178	-0.1458
S11	0.4169	H35	0.1408	H59	0.0976	H83	0.1966	H107	0.1196	C131	-0.1258	H155	0.1780	C179	0.1469
C12	-0.3088	H36	0.1388	H60	0.1013	H84	0.1093	C108	-0.1253	C132	-0.1260	C156	0.0906	H180	0.1777
S13	0.4024	H37	0.1123	H61	0.0996	H85	0.1272	H109	0.0851	C133	-0.1541	C157	-0.1265	H181	0.1549
H14	0.3290	H38	0.1120	H62	0.1145	H86	0.1531	C110	0.0170	N134	-0.4439	C158	0.1447	H182	0.1367
H15	0.1095	H39	0.1213	H63	0.1132	H87	0.1252	C111	-0.1064	C135	0.1598	N159	-0.4128	H183	0.1681
H16	0.1093	H40	0.1201	H64	0.1203	H88	0.1311	H112	0.1043	C136	-0.1196	C160	0.1442	H184	0.1750
H17	0.1086	O41	-0.5425	H65	0.1215	H89	0.1473	C113	-0.1209	C137	0.0851	C161	-0.1504	H185	0.1762
H18	0.1090	C42	0.0439	O66	-0.4966	C90	-0.1211	H114	0.1273	C138	-0.1548	H162	0.1499	H186	0.1408
H19	0.1043	C43	0.0756	C67	0.0159	H91	0.0996	C115	0.3169	C139	0.1430	H163	0.1747	H187	0.1407
H20	0.1049	O44	-0.5151	C68	0.0707	C92	-0.0891	C116	-0.1220	H140	0.1665	C164	-0.1609	H188	0.1777
H21	0.1192	C45	0.0478	O69	-0.5089	H93	0.0664	H117	0.1270	H141	0.1388	C165	0.0777	H189	0.1741
H22	0.1198	C46	0.0446	C70	0.0674	C94	0.2924	C118	-0.1066	H142	0.1528	C166	-0.1205	H190	0.1665
H23	0.1404	O47	-0.5135	C71	0.0366	C95	-0.1345	H119	0.0998	H143	0.1788	C167	-0.1185	H191	0.1461
H24	0.1412	C48	0.3821	O72	-0.5391	H96	0.0991	C120	0.1553	H144	0.1788	C168	0.0792	Total	4.0000

**Table S1g.** Partial charge distribution of neutral rotaxane when the center of mass of the CBPQT<sup>4+</sup> ring is located at z=36.84 Å.

O1	-0.5259	C25	-0.3059	C49	-0.1820	H73	0.1240	C97	-0.1144	C121	-0.1372	H145	0.1807	C169	-0.1108
C2	0.0323	S26	0.4327	C50	-0.0869	H74	0.1231	H98	0.1205	C122	0.0815	H146	0.1424	C170	-0.1091
C3	0.0659	C27	-0.2407	C51	-0.0839	H75	0.0996	C99	0.0365	C123	-0.1454	H147	0.1427	H171	0.1262
O4	-0.5007	C28	-0.1385	C52	-0.0727	H76	0.1003	C100	0.0308	C124	0.1515	H148	0.1253	H172	0.1276
C5	0.0700	S29	0.4198	C53	-0.0569	H77	0.1025	C101	-0.1142	N125	-0.4075	H149	0.1276	C173	-0.1593
C6	0.0375	C30	0.0813	C54	-0.1058	H78	0.1025	H102	0.0814	C126	-0.1642	H150	0.1799	N174	-0.4069
O7	-0.5148	O31	-0.5156	C55	-0.0757	H79	0.0962	C103	-0.1122	C127	0.0767	H151	0.1839	C175	0.1585
C8	0.0867	C32	0.0471	C56	-0.1772	H80	0.0960	H104	0.1176	C128	-0.1154	H152	0.1779	C176	-0.1230
C9	-0.1354	C33	0.0490	C57	0.3883	H81	0.3197	C105	0.0409	C129	-0.1149	H153	0.1526	C177	0.0831
C10	-0.2366	O34	-0.5321	H58	0.0928	H82	0.2261	C106	-0.1129	C130	0.0805	H154	0.1653	C178	-0.1460
S11	0.4426	H35	0.1446	H59	0.0914	H83	0.2109	H107	0.1191	C131	-0.1101	H155	0.1893	C179	0.1575
C12	-0.3096	H36	0.1424	H60	0.0863	H84	0.0702	C108	-0.1163	C132	-0.1092	C156	0.0815	H180	0.1815
S13	0.4262	H37	0.1114	H61	0.0882	H85	0.1056	H109	0.1021	C133	-0.1681	C157	-0.1198	H181	0.1602
H14	0.3257	H38	0.1115	H62	0.0897	H86	0.1420	C110	0.0234	N134	-0.4067	C158	0.1592	H182	0.1481
H15	0.1046	H39	0.1225	H63	0.0874	H87	0.0611	C111	-0.1060	C135	0.1594	N159	-0.4103	H183	0.1745
H16	0.1044	H40	0.1210	H64	0.0967	H88	0.0977	H112	0.1081	C136	-0.1348	C160	0.1536	H184	0.1823
H17	0.1074	O41	-0.5477	H65	0.1013	H89	0.1290	C113	-0.1234	C137	0.0778	C161	-0.1467	H185	0.1749
H18	0.1079	C42	0.0541	O66	-0.5145	C90	-0.1145	H114	0.1189	C138	-0.1459	H162	0.1589	H186	0.1429
H19	0.1030	C43	0.0649	C67	0.0296	H91	0.1232	C115	0.3113	C139	0.1519	H163	0.1835	H187	0.1428
H20	0.1037	O44	-0.5206	C68	0.0709	C92	-0.1426	C116	-0.1241	H140	0.1765	C164	-0.1576	H188	0.1767
H21	0.1210	C45	0.0525	O69	-0.5108	H93	0.0764	H117	0.1201	H141	0.1508	C165	0.0704	H189	0.1818
H22	0.1216	C46	0.0640	C70	0.0707	C94	0.3055	C118	-0.1059	H142	0.1658	C166	-0.1177	H190	0.1738
H23	0.1443	O47	-0.5284	C71	0.0368	C95	-0.1391	H119	0.1077	H143	0.1912	C167	-0.1177	H191	0.1484
H24	0.1451	C48	0.3469	O72	-0.5395	H96	0.0788	C120	0.1592	H144	0.1839	C168	0.0713	Total	4.0000

**Table S1h.** Partial charge distribution of neutral rotaxane when the center of mass of the CBPQT<sup>4+</sup> ring is located at z=40.99 Å.

O1	-0.5159	C25	-0.3067	C49	-0.2057	H73	0.1285	C97	-0.1074	C121	-0.1407	H145	0.1784	C169	-0.1095
C2	0.0293	S26	0.4372	C50	-0.1201	H74	0.1299	H98	0.1154	C122	0.1034	H146	0.1440	C170	-0.1101
C3	0.0656	C27	-0.2398	C51	-0.0974	H75	0.0984	C99	0.0306	C123	-0.1451	H147	0.1421	H171	0.1204
O4	-0.4982	C28	-0.1378	C52	-0.0737	H76	0.0972	C100	0.0343	C124	0.1507	H148	0.1211	H172	0.1186
C5	0.0681	S29	0.4222	C53	-0.0859	H77	0.1048	C101	-0.1161	N125	-0.4068	H149	0.1236	C173	-0.1667
C6	0.0382	C30	0.0830	C54	-0.1223	H78	0.1039	H102	0.0952	C126	-0.1588	H150	0.1776	N174	-0.4123
O7	-0.5149	O31	-0.5150	C55	-0.0841	H79	0.0983	C103	-0.1145	C127	0.0678	H151	0.1795	C175	0.1620
C8	0.0862	C32	0.0449	C56	-0.1764	H80	0.0986	H104	0.1093	C128	-0.1213	H152	0.1755	C176	-0.1338
C9	-0.1359	C33	0.0527	C57	0.3881	H81	0.3235	C105	0.0378	C129	-0.1142	H153	0.1455	C177	0.0897
C10	-0.2370	O34	-0.5347	H58	0.0980	H82	0.2251	C106	-0.1147	C130	0.0560	H154	0.1612	C178	-0.1567
S11	0.4443	H35	0.1443	H59	0.1029	H83	0.2156	H107	0.1088	C131	-0.0953	H155	0.1857	C179	0.1517
C12	-0.3093	H36	0.1422	H60	0.0919	H84	0.0971	C108	-0.1159	C132	-0.0939	C156	0.0751	H180	0.1839
S13	0.4266	H37	0.1101	H61	0.0905	H85	0.0844	H109	0.1023	C133	-0.1551	C157	-0.1250	H181	0.1558
H14	0.3285	H38	0.1100	H62	0.0818	H86	0.1464	C110	0.0249	N134	-0.4097	C158	0.1635	H182	0.1555
H15	0.1087	H39	0.1215	H63	0.0878	H87	0.0796	C111	-0.1069	C135	0.1526	N159	-0.4120	H183	0.1814
H16	0.1086	H40	0.1201	H64	0.0986	H88	0.1095	H112	0.1088	C136	-0.1444	C160	0.1484	H184	0.1799
H17	0.1092	O41	-0.5413	H65	0.1036	H89	0.1429	C113	-0.1250	C137	0.1113	C161	-0.1473	H185	0.1782
H18	0.1097	C42	0.0691	O66	-0.5147	C90	-0.1074	H114	0.1113	C138	-0.1486	H162	0.1564	H186	0.1428
H19	0.1051	C43	0.0524	C67	0.0211	H91	0.1173	C115	0.3060	C139	0.1524	H163	0.1830	H187	0.1434
H20	0.1057	O44	-0.5140	C68	0.0755	C92	-0.1276	C116	-0.1258	H140	0.1737	C164	-0.1629	H188	0.1813
H21	0.1211	C45	0.0620	O69	-0.5085	H93	0.0948	H117	0.1125	H141	0.1477	C165	0.0803	H189	0.1788
H22	0.1217	C46	0.0478	C70	0.0660	C94	0.2948	C118	-0.1068	H142	0.1610	C166	-0.1216	H190	0.1755
H23	0.1443	O47	-0.5228	C71	0.0380	C95	-0.1273	H119	0.1087	H143	0.1858	C167	-0.1119	H191	0.1561
H24	0.1451	C48	0.3500	O72	-0.5385	H96	0.0913	C120	0.1526	H144	0.1826	C168	0.0896	Total	4.0000

**Table S1i.** Partial charge distribution of neutral rotaxane when the center of mass of the CBPQT<sup>4+</sup> ring is located at z=44.83 Å.

O1	-0.5296	C25	-0.3069	C49	-0.1992	H73	0.1190	C97	-0.1067	C121	-0.1320	H145	0.1826	C169	-0.0994
C2	0.0335	S26	0.4410	C50	-0.0908	H74	0.1297	H98	0.1129	C122	0.1098	H146	0.1255	C170	-0.1127
C3	0.0666	C27	-0.2394	C51	-0.1154	H75	0.0725	C99	0.0297	C123	-0.1509	H147	0.1247	H171	0.1292
O4	-0.5019	C28	-0.1376	C52	-0.0789	H76	0.0790	C100	0.0374	C124	0.1546	H148	0.1343	H172	0.1299
C5	0.0705	S29	0.4254	C53	-0.0754	H77	0.1015	C101	-0.1153	N125	-0.4184	H149	0.1336	C173	-0.1640
C6	0.0376	C30	0.0834	C54	-0.1167	H78	0.1005	H102	0.1010	C126	-0.1620	H150	0.1766	N174	-0.4194
O7	-0.5147	O31	-0.5149	C55	-0.0857	H79	0.1032	C103	-0.1137	C127	0.0903	H151	0.1762	C175	0.1631
C8	0.0867	C32	0.0439	C56	-0.2003	H80	0.1046	H104	0.1087	C128	-0.1069	H152	0.1653	C176	-0.1351
C9	-0.1358	C33	0.0534	C57	0.3667	H81	0.3303	C105	0.0376	C129	-0.1129	H153	0.1377	C177	0.1139
C10	-0.2369	O34	-0.5346	H58	0.1090	H82	0.2265	C106	-0.1140	C130	0.0864	H154	0.1493	C178	-0.1508
S11	0.4468	H35	0.1449	H59	0.1099	H83	0.2178	H107	0.1069	C131	-0.1154	H155	0.1721	C179	0.1538
C12	-0.3092	H36	0.1428	H60	0.1027	H84	0.1290	C108	-0.1150	C132	-0.1010	C156	0.1067	H180	0.1757
S13	0.4292	H37	0.1103	H61	0.1022	H85	0.0905	H109	0.1047	C133	-0.1634	C157	-0.1263	H181	0.1493
H14	0.3239	H38	0.1099	H62	0.0802	H86	0.1196	C110	0.0263	N134	-0.4077	C158	0.1539	H182	0.1343
H15	0.1026	H39	0.1218	H63	0.0799	H87	0.1169	C111	-0.1053	C135	0.1470	N159	-0.4089	H183	0.1643
H16	0.1025	H40	0.1205	H64	0.1206	H88	0.0888	H112	0.1111	C136	-0.1273	C160	0.1478	H184	0.1832
H17	0.1065	O41	-0.5400	H65	0.1318	H89	0.1270	C113	-0.1251	C137	0.1112	C161	-0.1356	H185	0.1714
H18	0.1070	C42	0.0608	O66	-0.5288	C90	-0.1068	H114	0.1105	C138	-0.1376	H162	0.1505	H186	0.1324
H19	0.1024	C43	0.0493	C67	0.0243	H91	0.1138	C115	0.3058	C139	0.1432	H163	0.1734	H187	0.1302
H20	0.1030	O44	-0.5028	C68	0.0856	C92	-0.1262	C116	-0.1251	H140	0.1624	C164	-0.1640	H188	0.1758
H21	0.1206	C45	0.0826	O69	-0.5018	H93	0.1019	H117	0.1120	H141	0.1362	C165	0.0799	H189	0.1804
H22	0.1212	C46	0.0252	C70	0.0601	C94	0.3007	C118	-0.1065	H142	0.1550	C166	-0.1072	H190	0.1686
H23	0.1443	O47	-0.5302	C71	0.0404	C95	-0.1259	H119	0.1110	H143	0.1799	C167	-0.1069	H191	0.1425
H24	0.1451	C48	0.3608	O72	-0.5371	H96	0.1003	C120	0.1656	H144	0.1720	C168	0.0867	Total	4.0000

**Table S2a.** Partial charge distribution of +1 oxidized rotaxane when the center of mass of the CBPQT<sup>4+</sup> ring is located at z=10.92 Å.

O1	-0.5374	C25	-0.3310	C49	-0.1512	H73	0.1519	C97	-0.0909	C121	-0.1317	H145	0.1823	C169	-0.0971
C2	0.0394	S26	0.2497	C50	-0.0588	H74	0.1514	H98	0.1431	C122	0.1110	H146	0.1469	C170	-0.1002
C3	0.0616	C27	-0.2626	C51	-0.0466	H75	0.1168	C99	0.0421	C123	-0.1532	H147	0.1452	H171	0.1218
O4	-0.5052	C28	-0.1540	C52	-0.0661	H76	0.1171	C100	0.0541	C124	0.1519	H148	0.1186	H172	0.1212
C5	0.0829	S29	0.2401	C53	-0.0671	H77	0.1193	C101	-0.0975	N125	-0.4077	H149	0.1218	C173	-0.1747
C6	0.0353	C30	0.0903	C54	-0.0439	H78	0.1191	H102	0.1466	C126	-0.1712	H150	0.1853	N174	-0.4084
O7	-0.5164	O31	-0.5120	C55	-0.0603	H79	0.1230	C103	-0.1017	C127	0.0969	H151	0.1816	C175	0.1714
C8	0.0927	C32	0.0465	C56	-0.1435	H80	0.1230	H104	0.1446	C128	-0.1219	H152	0.1803	C176	-0.1317
C9	-0.1515	C33	0.0470	C57	0.4246	H81	0.3399	C105	0.0567	C129	-0.1218	H153	0.1503	C177	0.1167
C10	-0.2775	O34	-0.5247	H58	0.1252	H82	0.1811	C106	-0.1020	C130	0.0899	H154	0.1542	C178	-0.1522
S11	0.2587	H35	0.1257	H59	0.1257	H83	0.1865	H107	0.1386	C131	-0.1031	H155	0.1818	C179	0.1564
C12	-0.3311	H36	0.1027	H60	0.1181	H84	0.1578	C108	-0.0973	C132	-0.0964	C156	0.1058	H180	0.1891
S13	0.2507	H37	0.1114	H61	0.1182	H85	0.1651	H109	0.1461	C133	-0.1727	C157	-0.1276	H181	0.1639
H14	0.3272	H38	0.1184	H62	0.1180	H86	0.1778	C110	0.0290	N134	-0.4048	C158	0.1595	H182	0.1434
H15	0.0995	H39	0.1252	H63	0.1182	H87	0.1695	C111	-0.0947	C135	0.1653	N159	-0.4078	H183	0.1669
H16	0.1011	H40	0.1155	H64	0.1440	H88	0.1680	H112	0.1344	C136	-0.1252	C160	0.1422	H184	0.1751
H17	0.1060	O41	-0.5109	H65	0.1442	H89	0.1741	C113	-0.1187	C137	0.1114	C161	-0.1505	H185	0.1891
H18	0.1040	C42	0.0286	O66	-0.4718	C90	-0.0908	H114	0.1312	C138	-0.1392	H162	0.1584	H186	0.1308
H19	0.0955	C43	0.0606	C67	-0.0012	H91	0.1425	C115	0.3246	C139	0.1589	H163	0.1816	H187	0.1362
H20	0.0862	O44	-0.5109	C68	0.0653	C92	-0.1101	C116	-0.1194	H140	0.1723	C164	-0.1681	H188	0.1831
H21	0.1097	C45	0.0575	O69	-0.4994	H93	0.1579	H117	0.1370	H141	0.1453	C165	0.0897	H189	0.1804
H22	0.1212	C46	0.0132	C70	0.0593	C94	0.3479	C118	-0.0939	H142	0.1544	C166	-0.1148	H190	0.1638
H23	0.0940	O47	-0.4878	C71	0.0207	C95	-0.1098	H119	0.1375	H143	0.1790	C167	-0.1156	H191	0.1374
H24	0.1214	C48	0.4187	O72	-0.4878	H96	0.1573	C120	0.1569	H144	0.1823	C168	0.0949	Total	5.0000

**Table S2b.** Partial charge distribution of +1 oxidized rotaxane when the center of mass of the CBPQT<sup>4+</sup> ring is located at z=15.66 Å.

O1	-0.4907	C25	-0.3683	C49	-0.1507	H73	0.1522	C97	-0.0941	C121	-0.1283	H145	0.1870	C169	-0.1049
C2	0.0201	S26	0.2822	C50	-0.0585	H74	0.1517	H98	0.1382	C122	0.1036	H146	0.1508	C170	-0.1067
C3	0.0653	C27	-0.2754	C51	-0.0459	H75	0.1175	C99	0.0413	C123	-0.1539	H147	0.1494	H171	0.1294
O4	-0.5034	C28	-0.1483	C52	-0.0663	H76	0.1178	C100	0.0483	C124	0.1542	H148	0.1144	H172	0.1288
C5	0.0709	S29	0.2428	C53	-0.0669	H77	0.1199	C101	-0.1009	N125	-0.4064	H149	0.1135	C173	-0.1673
C6	0.0396	C30	0.0855	C54	-0.0433	H78	0.1197	H102	0.1407	C126	-0.1591	H150	0.1828	N174	-0.4099
O7	-0.5136	O31	-0.5192	C55	-0.0598	H79	0.1253	C103	-0.1071	C127	0.0841	H151	0.1801	C175	0.1459
C8	0.0912	C32	0.0505	C56	-0.1434	H80	0.1253	H104	0.1346	C128	-0.1115	H152	0.1802	C176	-0.1335
C9	-0.1368	C33	0.0603	C57	0.4247	H81	0.3417	C105	0.0505	C129	-0.1132	H153	0.1510	C177	0.1083
C10	-0.2459	O34	-0.5334	H58	0.1238	H82	0.2073	C106	-0.1073	C130	0.0919	H154	0.1561	C178	-0.1531
S11	0.2609	H35	0.0995	H59	0.1242	H83	0.1612	H107	0.1255	C131	-0.1145	H155	0.1812	C179	0.1590
C12	-0.3060	H36	0.1100	H60	0.1177	H84	0.1585	C108	-0.1007	C132	-0.1147	C156	0.0940	H180	0.1886
S13	0.2820	H37	0.1037	H61	0.1177	H85	0.1657	H109	0.1392	C133	-0.1630	C157	-0.1150	H181	0.1625
H14	0.3395	H38	0.1057	H62	0.1179	H86	0.1782	C110	0.0269	N134	-0.4148	C158	0.1129	H182	0.1374
H15	0.1215	H39	0.0978	H63	0.1180	H87	0.1702	C111	-0.0989	C135	0.1671	N159	-0.3998	H183	0.1679
H16	0.1214	H40	0.1019	H64	0.1443	H88	0.1687	H112	0.1306	C136	-0.1308	C160	0.1590	H184	0.1808
H17	0.1113	O41	-0.5132	H65	0.1445	H89	0.1746	C113	-0.1230	C137	0.0977	C161	-0.1393	H185	0.1869
H18	0.1115	C42	0.0305	O66	-0.4718	C90	-0.0941	H114	0.1114	C138	-0.1556	H162	0.1668	H186	0.1457
H19	0.1018	C43	0.0601	C67	-0.0012	H91	0.1377	C115	0.3097	C139	0.1516	H163	0.1925	H187	0.1445
H20	0.1019	O44	-0.5107	C68	0.0647	C92	-0.1118	C116	-0.1240	H140	0.1826	C164	-0.1637	H188	0.1881
H21	0.1178	C45	0.0579	O69	-0.4978	H93	0.1539	H117	0.1170	H141	0.1572	C165	0.0764	H189	0.1810
H22	0.1187	C46	0.0125	C70	0.0592	C94	0.3429	C118	-0.0981	H142	0.1576	C166	-0.1223	H190	0.1766
H23	0.1280	O47	-0.4862	C71	0.0194	C95	-0.1116	H119	0.1337	H143	0.1865	C167	-0.1204	H191	0.1470
H24	0.1299	C48	0.4194	O72	-0.4806	H96	0.1531	C120	0.1656	H144	0.1827	C168	0.0817	Total	5.0000

**Table S2c.** Partial charge distribution of +1 oxidized rotaxane when the center of mass of the CBPQT<sup>4+</sup> ring is located at z=18.75 Å.

O1	-0.4694	C25	-0.3207	C49	-0.1498	H73	0.1538	C97	-0.1005	C121	-0.1249	H145	0.1867	C169	-0.1077
C2	0.0155	S26	0.2837	C50	-0.0585	H74	0.1532	H98	0.1221	C122	0.0927	H146	0.1506	C170	-0.1063
C3	0.0589	C27	-0.2968	C51	-0.0453	H75	0.1222	C99	0.0352	C123	-0.1435	H147	0.1515	H171	0.1130
O4	-0.4810	C28	-0.1570	C52	-0.0660	H76	0.1226	C100	0.0440	C124	0.1561	H148	0.1190	H172	0.1126
C5	0.0593	S29	0.3045	C53	-0.0671	H77	0.1233	C101	-0.1071	N125	-0.4085	H149	0.1185	C173	-0.1774
C6	0.0403	C30	0.0754	C54	-0.0426	H78	0.1230	H102	0.1302	C126	-0.1631	H150	0.1864	N174	-0.4027
O7	-0.5144	O31	-0.5167	C55	-0.0597	H79	0.1121	C103	-0.1124	C127	0.0607	H151	0.1878	C175	0.1594
C8	0.0864	C32	0.0590	C56	-0.1431	H80	0.1119	H104	0.1125	C128	-0.1159	H152	0.1739	C176	-0.1306
C9	-0.1356	C33	0.0573	C57	0.4253	H81	0.3337	C105	0.0350	C129	-0.1188	H153	0.1381	C177	0.0921
C10	-0.2392	O34	-0.5496	H58	0.1178	H82	0.2145	C106	-0.1123	C130	0.0630	H154	0.1610	C178	-0.1481
S11	0.3563	H35	0.1119	H59	0.1184	H83	0.1659	H107	0.1002	C131	-0.1028	H155	0.1920	C179	0.1515
C12	-0.3035	H36	0.1059	H60	0.1156	H84	0.1603	C108	-0.1067	C132	-0.1020	C156	0.0886	H180	0.1924
S13	0.3465	H37	0.0924	H61	0.1155	H85	0.1664	H109	0.1279	C133	-0.1647	C157	-0.1274	H181	0.1622
H14	0.3463	H38	0.0924	H62	0.1167	H86	0.1787	C110	0.0336	N134	-0.4124	C158	0.1640	H182	0.1392
H15	0.1300	H39	0.0947	H63	0.1167	H87	0.1724	C111	-0.1020	C135	0.1654	N159	-0.4032	H183	0.1845
H16	0.1301	H40	0.0963	H64	0.1445	H88	0.1703	H112	0.1303	C136	-0.1209	C160	0.1527	H184	0.1863
H17	0.1213	O41	-0.5207	H65	0.1448	H89	0.1758	C113	-0.1384	C137	0.0972	C161	-0.1458	H185	0.1893
H18	0.1214	C42	0.0381	O66	-0.4717	C90	-0.1007	H114	0.0788	C138	-0.1494	H162	0.1632	H186	0.1456
H19	0.1155	C43	0.0585	C67	-0.0020	H91	0.1223	C115	0.3010	C139	0.1568	H163	0.1936	H187	0.1454
H20	0.1156	O44	-0.5109	C68	0.0616	C92	-0.1159	C116	-0.1392	H140	0.1808	C164	-0.1765	H188	0.1917
H21	0.1220	C45	0.0602	O69	-0.4809	H93	0.1399	H117	0.0782	H141	0.1413	C165	0.0740	H189	0.1860
H22	0.1230	C46	0.0108	C70	0.0526	C94	0.3315	C118	-0.1010	H142	0.1621	C166	-0.1055	H190	0.1858
H23	0.1376	O47	-0.4847	C71	0.0312	C95	-0.1158	H119	0.1314	H143	0.1920	C167	-0.1056	H191	0.1405
H24	0.1388	C48	0.4206	O72	-0.5125	H96	0.1387	C120	0.1613	H144	0.1899	C168	0.0767	Total	5.0000

**Table S2d.** Partial charge distribution of +1 oxidized rotaxane when the center of mass of the CBPQT<sup>4+</sup> ring is located at z=23.27□.

O1	-0.4773	C25	-0.3072	C49	-0.1512	H73	0.1523	C97	-0.1066	C121	-0.1309	H145	0.1785	C169	-0.1157
C2	0.0164	S26	0.3874	C50	-0.0596	H74	0.1519	H98	0.1029	C122	0.1013	H146	0.1449	C170	-0.1109
C3	0.0622	C27	-0.2490	C51	-0.0474	H75	0.1178	C99	0.0216	C123	-0.1426	H147	0.1437	H171	0.1128
O4	-0.4917	C28	-0.1455	C52	-0.0662	H76	0.1181	C100	0.0461	C124	0.1529	H148	0.1178	H172	0.1159
C5	0.0641	S29	0.3775	C53	-0.0674	H77	0.1215	C101	-0.1123	N125	-0.4153	H149	0.1264	C173	-0.1641
C6	0.0371	C30	0.0695	C54	-0.0444	H78	0.1212	H102	0.1261	C126	-0.1504	H150	0.1829	N174	-0.4101
O7	-0.5149	O31	-0.5174	C55	-0.0605	H79	0.1327	C103	-0.1229	C127	0.0644	H151	0.1841	C175	0.1624
C8	0.0863	C32	0.0639	C56	-0.1443	H80	0.1327	H104	0.0832	C128	-0.1194	H152	0.1665	C176	-0.1213
C9	-0.1382	C33	0.0484	C57	0.4241	H81	0.3481	C105	0.0294	C129	-0.1188	H153	0.1428	C177	0.1037
C10	-0.2393	O34	-0.5525	H58	0.1121	H82	0.2267	C106	-0.1286	C130	0.0661	H154	0.1620	C178	-0.1390
S11	0.4225	H35	0.1391	H59	0.1119	H83	0.1657	H107	0.0615	C131	-0.1016	H155	0.1884	C179	0.1564
C12	-0.3165	H36	0.1361	H60	0.1135	H84	0.1583	C108	-0.1143	C132	-0.1020	C156	0.0892	H180	0.1806
S13	0.4034	H37	0.0987	H61	0.1138	H85	0.1644	H109	0.1244	C133	-0.1568	C157	-0.1099	H181	0.1545
H14	0.3436	H38	0.1019	H62	0.1157	H86	0.1773	C110	0.0159	N134	-0.4089	C158	0.1530	H182	0.1509
H15	0.1274	H39	0.1090	H63	0.1159	H87	0.1716	C111	-0.1181	C135	0.1539	N159	-0.4097	H183	0.1758
H16	0.1272	H40	0.1037	H64	0.1430	H88	0.1694	H112	0.0914	C136	-0.1153	C160	0.1498	H184	0.1839
H17	0.1169	O41	-0.5282	H65	0.1430	H89	0.1741	C113	-0.1373	C137	0.1007	C161	-0.1540	H185	0.1841
H18	0.1174	C42	0.0433	O66	-0.4732	C90	-0.1071	H114	0.0975	C138	-0.1484	H162	0.1422	H186	0.1463
H19	0.1105	C43	0.0586	C67	-0.0007	H91	0.1009	C115	0.2941	C139	0.1561	H163	0.1747	H187	0.1442
H20	0.1111	O44	-0.5118	C68	0.0638	C92	-0.1212	C116	-0.1409	H140	0.1606	C164	-0.1625	H188	0.1815
H21	0.1235	C45	0.0609	O69	-0.5000	H93	0.1295	H117	0.1058	H141	0.1223	C165	0.0908	H189	0.1806
H22	0.1241	C46	0.0118	C70	0.0605	C94	0.3217	C118	-0.1256	H142	0.1615	C166	-0.1177	H190	0.1642
H23	0.1446	O47	-0.4865	C71	0.0099	C95	-0.1208	H119	0.1084	H143	0.1848	C167	-0.1147	H191	0.1429
H24	0.1454	C48	0.4187	O72	-0.4819	H96	0.1291	C120	0.1612	H144	0.1835	C168	0.0879	Total	5.0000



**Table S2e.** Partial charge distribution of +1 oxidized rotaxane when the center of mass of the CBPQT<sup>4+</sup> ring is located at z=28.17□.

O1	-0.4928	C25	-0.3046	C49	-0.1541	H73	0.1543	C97	-0.1288	C121	-0.1220	H145	0.1850	C169	-0.1009
C2	0.0234	S26	0.4139	C50	-0.0587	H74	0.1539	H98	0.0887	C122	0.1014	H146	0.1400	C170	-0.1037
C3	0.0599	C27	-0.2438	C51	-0.0484	H75	0.1127	C99	0.0142	C123	-0.1415	H147	0.1348	H171	0.1237
O4	-0.4841	C28	-0.1407	C52	-0.0655	H76	0.1129	C100	0.0258	C124	0.1478	H148	0.1240	H172	0.1212
C5	0.0624	S29	0.4096	C53	-0.0675	H77	0.1139	C101	-0.1343	N125	-0.4094	H149	0.1230	C173	-0.1658
C6	0.0370	C30	0.0736	C54	-0.0430	H78	0.1136	H102	0.1045	C126	-0.1666	H150	0.1750	N174	-0.4128
O7	-0.5153	O31	-0.5188	C55	-0.0610	H79	0.1016	C103	-0.1331	C127	0.0705	H151	0.1866	C175	0.1636
C8	0.0854	C32	0.0549	C56	-0.1402	H80	0.1015	H104	0.1012	C128	-0.1168	H152	0.1679	C176	-0.1239
C9	-0.1351	C33	0.0401	C57	0.4263	H81	0.3260	C105	0.0236	C129	-0.1133	H153	0.1395	C177	0.1022
C10	-0.2356	O34	-0.5219	H58	0.1073	H82	0.2266	C106	-0.1334	C130	0.0800	H154	0.1579	C178	-0.1448
S11	0.4361	H35	0.1461	H59	0.1030	H83	0.1881	H107	0.1035	C131	-0.1032	H155	0.1848	C179	0.1494
C12	-0.3111	H36	0.1439	H60	0.1173	H84	0.1474	C108	-0.1352	C132	-0.1022	C156	0.0961	H180	0.1838
S13	0.4220	H37	0.1078	H61	0.1186	H85	0.1624	H109	0.1016	C133	-0.1749	C157	-0.1184	H181	0.1511
H14	0.3384	H38	0.1059	H62	0.1194	H86	0.1809	C110	0.0147	N134	-0.4049	C158	0.1498	H182	0.1447
H15	0.1202	H39	0.1271	H63	0.1201	H87	0.1669	C111	-0.1260	C135	0.1483	N159	-0.4024	H183	0.1668
H16	0.1200	H40	0.1257	H64	0.1384	H88	0.1700	H112	0.0908	C136	-0.1216	C160	0.1512	H184	0.1852
H17	0.1174	O41	-0.5212	H65	0.1373	H89	0.1804	C113	-0.1250	C137	0.0953	C161	-0.1455	H185	0.1821
H18	0.1179	C42	0.0389	O66	-0.4639	C90	-0.1297	H114	0.1357	C138	-0.1466	H162	0.1578	H186	0.1414
H19	0.1128	C43	0.0634	C67	-0.0075	H91	0.0843	C115	0.3218	C139	0.1509	H163	0.1864	H187	0.1374
H20	0.1134	O44	-0.5154	C68	0.0711	C92	-0.1272	C116	-0.1265	H140	0.1669	C164	-0.1733	H188	0.1880
H21	0.1246	C45	0.0541	O69	-0.4999	H93	0.1343	H117	0.1336	H141	0.1448	C165	0.0757	H189	0.1782
H22	0.1252	C46	0.0205	C70	0.0572	C94	0.3257	C118	-0.1270	H142	0.1545	C166	-0.1127	H190	0.1710
H23	0.1465	O47	-0.4931	C71	0.0379	C95	-0.1257	H119	0.0866	H143	0.1841	C167	-0.1171	H191	0.1443
H24	0.1473	C48	0.4154	O72	-0.5359	H96	0.1366	C120	0.1617	H144	0.1849	C168	0.0705	Total	5.0000

**Table S2f.** Partial charge distribution of +1 oxidized rotaxane when the center of mass of the CBPQT<sup>4+</sup> ring is located at z=32.22□.

O1	-0.4888	C25	-0.3055	C49	-0.1591	H73	0.1520	C97	-0.1275	C121	-0.1238	H145	0.1815	C169	-0.1070
C2	0.0209	S26	0.4325	C50	-0.0615	H74	0.1511	H98	0.0994	C122	0.0918	H146	0.1477	C170	-0.1063
C3	0.0612	C27	-0.2413	C51	-0.0541	H75	0.1187	C99	0.0162	C123	-0.1400	H147	0.1457	H171	0.1174
O4	-0.4864	C28	-0.1392	C52	-0.0651	H76	0.1194	C100	0.0346	C124	0.1501	H148	0.1262	H172	0.1212
C5	0.0626	S29	0.4228	C53	-0.0661	H77	0.1210	C101	-0.1438	N125	-0.4156	H149	0.1336	C173	-0.1661
C6	0.0371	C30	0.0786	C54	-0.0505	H78	0.1210	H102	0.0426	C126	-0.1551	H150	0.1796	N174	-0.4137
O7	-0.5154	O31	-0.5166	C55	-0.0636	H79	0.1235	C103	-0.1115	C127	0.0779	H151	0.1805	C175	0.1586
C8	0.0853	C32	0.0495	C56	-0.1444	H80	0.1232	H104	0.1242	C128	-0.1164	H152	0.1832	C176	-0.1316
C9	-0.1355	C33	0.0437	C57	0.4206	H81	0.3422	C105	0.0484	C129	-0.1181	H153	0.1505	C177	0.0963
C10	-0.2355	O34	-0.5276	H58	0.0989	H82	0.2275	C106	-0.1146	C130	0.0784	H154	0.1504	C178	-0.1443
S11	0.4472	H35	0.1464	H59	0.0988	H83	0.2056	H107	0.1231	C131	-0.1234	H155	0.1791	C179	0.1514
C12	-0.3107	H36	0.1442	H60	0.1052	H84	0.1360	C108	-0.1252	C132	-0.1205	C156	0.0930	H180	0.1823
S13	0.4314	H37	0.1131	H61	0.1028	H85	0.1570	H109	0.0837	C133	-0.1566	C157	-0.1251	H181	0.1597
H14	0.3394	H38	0.1130	H62	0.1188	H86	0.1749	C110	0.0170	N134	-0.4416	C158	0.1505	H182	0.1343
H15	0.1225	H39	0.1248	H63	0.1174	H87	0.1543	C111	-0.1060	C135	0.1656	N159	-0.4109	H183	0.1678
H16	0.1223	H40	0.1234	H64	0.1322	H88	0.1622	H112	0.1050	C136	-0.1168	C160	0.1495	H184	0.1790
H17	0.1169	O41	-0.5431	H65	0.1335	H89	0.1736	C113	-0.1203	C137	0.0869	C161	-0.1488	H185	0.1821
H18	0.1173	C42	0.0453	O66	-0.4710	C90	-0.1240	H114	0.1299	C138	-0.1544	H162	0.1559	H186	0.1412
H19	0.1123	C43	0.0711	C67	-0.0009	H91	0.1012	C115	0.3175	C139	0.1468	H163	0.1816	H187	0.1412
H20	0.1129	O44	-0.5149	C68	0.0642	C92	-0.0937	C116	-0.1215	H140	0.1717	C164	-0.1648	H188	0.1839
H21	0.1246	C45	0.0499	O69	-0.4920	H93	0.0693	H117	0.1298	H141	0.1432	C165	0.0763	H189	0.1797
H22	0.1252	C46	0.0298	C70	0.0569	C94	0.2897	C118	-0.1063	H142	0.1565	C166	-0.1187	H190	0.1686
H23	0.1473	O47	-0.5010	C71	0.0213	C95	-0.1365	H119	0.1007	H143	0.1827	C167	-0.1169	H191	0.1470
H24	0.1481	C48	0.4068	O72	-0.4864	H96	0.0984	C120	0.1604	H144	0.1832	C168	0.0781	Total	5.0000

**Table S2g.** Partial charge distribution of +1 oxidized rotaxane when the center of mass of the CBPQT<sup>4+</sup> ring is located at z=36.84 Å.

O1	-0.4780	C25	-0.3059	C49	-0.1708	H73	0.1457	C97	-0.1141	C121	-0.1377	H145	0.1861	C169	-0.1115
C2	0.0175	S26	0.4552	C50	-0.0703	H74	0.1447	H98	0.1227	C122	0.0804	H146	0.1496	C170	-0.1092
C3	0.0589	C27	-0.2386	C51	-0.0652	H75	0.1199	C99	0.0371	C123	-0.1468	H147	0.1497	H171	0.1291
O4	-0.4819	C28	-0.1377	C52	-0.0665	H76	0.1207	C100	0.0304	C124	0.1499	H148	0.1126	H172	0.1299
C5	0.0596	S29	0.4418	C53	-0.0610	H77	0.1233	C101	-0.1140	N125	-0.4076	H149	0.1137	C173	-0.1610
C6	0.0362	C30	0.0814	C54	-0.0741	H78	0.1233	H102	0.0808	C126	-0.1646	H150	0.1855	N174	-0.4067
O7	-0.5155	O31	-0.5159	C55	-0.0691	H79	0.1265	C103	-0.1116	C127	0.0770	H151	0.1835	C175	0.1615
C8	0.0846	C32	0.0445	C56	-0.1540	H80	0.1262	H104	0.1197	C128	-0.1148	H152	0.1824	C176	-0.1219
C9	-0.1353	C33	0.0490	C57	0.4100	H81	0.3451	C105	0.0416	C129	-0.1141	H153	0.1570	C177	0.0846
C10	-0.2343	O34	-0.5312	H58	0.0939	H82	0.2313	C106	-0.1124	C130	0.0807	H154	0.1618	C178	-0.1451
S11	0.4658	H35	0.1491	H59	0.0920	H83	0.2184	H107	0.1214	C131	-0.1084	H155	0.1857	C179	0.1586
C12	-0.3100	H36	0.1467	H60	0.0901	H84	0.1078	C108	-0.1160	C132	-0.1080	C156	0.0831	H180	0.1874
S13	0.4476	H37	0.1121	H61	0.0930	H85	0.1442	H109	0.1027	C133	-0.1689	C157	-0.1190	H181	0.1657
H14	0.3433	H38	0.1122	H62	0.0941	H86	0.1674	C110	0.0234	N134	-0.4066	C158	0.1610	H182	0.1364
H15	0.1279	H39	0.1253	H63	0.0937	H87	0.1083	C111	-0.1057	C135	0.1597	N159	-0.4106	H183	0.1700
H16	0.1276	H40	0.1237	H64	0.1124	H88	0.1394	H112	0.1091	C136	-0.1349	C160	0.1547	H184	0.1841
H17	0.1205	O41	-0.5481	H65	0.1158	H89	0.1627	C113	-0.1230	C137	0.0777	C161	-0.1469	H185	0.1794
H18	0.1210	C42	0.0559	O66	-0.4831	C90	-0.1141	H114	0.1205	C138	-0.1475	H162	0.1640	H186	0.1426
H19	0.1160	C43	0.0590	C67	0.0074	H91	0.1261	C115	0.3116	C139	0.1513	H163	0.1891	H187	0.1423
H20	0.1167	O44	-0.5199	C68	0.0615	C92	-0.1430	C116	-0.1237	H140	0.1805	C164	-0.1589	H188	0.1812
H21	0.1267	C45	0.0565	O69	-0.4869	H93	0.0746	H117	0.1218	H141	0.1545	C165	0.0704	H189	0.1830
H22	0.1272	C46	0.0451	C70	0.0559	C94	0.3033	C118	-0.1055	H142	0.1606	C166	-0.1188	H190	0.1685
H23	0.1502	O47	-0.5189	C71	0.0194	C95	-0.1395	H119	0.1087	H143	0.1857	C167	-0.1193	H191	0.1350
H24	0.1511	C48	0.3783	O72	-0.4767	H96	0.0770	C120	0.1590	H144	0.1823	C168	0.0710	Total	5.0000

**Table S2h.** Partial charge distribution of +1 oxidized rotaxane when the center of mass of the CBPQT<sup>4+</sup> ring is located at z=40.99 Å.

O1	-0.4992	C25	-0.3052	C49	-0.2062	H73	0.1302	C97	-0.0937	C121	-0.1396	H145	0.1771	C169	-0.1085
C2	0.0230	S26	0.4336	C50	-0.1216	H74	0.1316	H98	0.1388	C122	0.1037	H146	0.1400	C170	-0.1091
C3	0.0623	C27	-0.2415	C51	-0.0954	H75	0.0984	C99	0.0306	C123	-0.1447	H147	0.1386	H171	0.1123
O4	-0.4923	C28	-0.1401	C52	-0.0744	H76	0.0972	C100	0.0635	C124	0.1508	H148	0.1248	H172	0.1116
C5	0.0644	S29	0.4192	C53	-0.0847	H77	0.1055	C101	-0.1005	N125	-0.4065	H149	0.1268	C173	-0.1672
C6	0.0370	C30	0.0748	C54	-0.1236	H78	0.1047	H102	0.1441	C126	-0.1595	H150	0.1769	N174	-0.4123
O7	-0.5151	O31	-0.5161	C55	-0.0831	H79	0.0988	C103	-0.0929	C127	0.0680	H151	0.1839	C175	0.1629
C8	0.0858	C32	0.0531	C56	-0.1755	H80	0.0991	H104	0.1535	C128	-0.1229	H152	0.1668	C176	-0.1334
C9	-0.1350	C33	0.0254	C57	0.3903	H81	0.3248	C105	0.0547	C129	-0.1157	H153	0.1349	C177	0.0901
C10	-0.2353	O34	-0.5065	H58	0.1096	H82	0.2279	C106	-0.0931	C130	0.0555	H154	0.1655	C178	-0.1570
S11	0.4466	H35	0.1482	H59	0.1145	H83	0.2015	H107	0.1532	C131	-0.0949	H155	0.1898	C179	0.1527
C12	-0.3107	H36	0.1457	H60	0.0992	H84	0.0939	C108	-0.1002	C132	-0.0938	C156	0.0757	H180	0.1804
S13	0.4285	H37	0.1284	H61	0.0979	H85	0.0850	H109	0.1506	C133	-0.1555	C157	-0.1247	H181	0.1503
H14	0.3362	H38	0.1296	H62	0.0878	H86	0.1508	C110	0.0440	N134	-0.4102	C158	0.1650	H182	0.1579
H15	0.1181	H39	0.1305	H63	0.0936	H87	0.0754	C111	-0.0867	C135	0.1532	N159	-0.4120	H183	0.1842
H16	0.1180	H40	0.1284	H64	0.0988	H88	0.1119	H112	0.1508	C136	-0.1427	C160	0.1494	H184	0.1839
H17	0.1145	O41	-0.5271	H65	0.1039	H89	0.1475	C113	-0.1067	C137	0.1120	C161	-0.1477	H185	0.1776
H18	0.1149	C42	0.0499	O66	-0.5136	C90	-0.0934	H114	0.1653	C138	-0.1479	H162	0.1495	H186	0.1473
H19	0.1097	C43	0.0587	C67	0.0182	H91	0.1407	C115	0.3524	C139	0.1527	H163	0.1791	H187	0.1477
H20	0.1104	O44	-0.5158	C68	0.0765	C92	-0.1192	C116	-0.1075	H140	0.1651	C164	-0.1639	H188	0.1805
H21	0.1237	C45	0.0544	O69	-0.5080	H93	0.1348	H117	0.1665	H141	0.1364	C165	0.0805	H189	0.1829
H22	0.1243	C46	0.0506	C70	0.0643	C94	0.3263	C118	-0.0862	H142	0.1657	C166	-0.1211	H190	0.1792
H23	0.1465	O47	-0.5233	C71	0.0386	C95	-0.1188	H119	0.1508	H143	0.1905	C167	-0.1112	H191	0.1594
H24	0.1473	C48	0.3478	O72	-0.5380	H96	0.1314	C120	0.1535	H144	0.1872	C168	0.0898	Total	5.0000

**Table S2i.** Partial charge distribution of +1 oxidized rotaxane when the center of mass of the CBPQT<sup>4+</sup> ring is located at z=44.83 Å.

O1	-0.4636	C25	-0.2904	C49	-0.1990	H73	0.1223	C97	-0.0948	C121	-0.1319	H145	0.1880	C169	-0.0988
C2	0.0124	S26	0.4261	C50	-0.0934	H74	0.1326	H98	0.1313	C122	0.1041	H146	0.1238	C170	-0.1125
C3	0.0579	C27	-0.2396	C51	-0.1192	H75	0.0692	C99	0.0345	C123	-0.1509	H147	0.1226	H171	0.1317
O4	-0.4846	C28	-0.1349	C52	-0.0826	H76	0.0779	C100	0.0589	C124	0.1581	H148	0.1412	H172	0.1327
C5	0.0538	S29	0.4100	C53	-0.0780	H77	0.1025	C101	-0.1036	N125	-0.4267	H149	0.1397	C173	-0.1673
C6	0.0414	C30	0.0771	C54	-0.1208	H78	0.1021	H102	0.1321	C126	-0.1657	H150	0.1805	N174	-0.4234
O7	-0.5150	O31	-0.5155	C55	-0.0885	H79	0.1047	C103	-0.0992	C127	0.0880	H151	0.1841	C175	0.1675
C8	0.0830	C32	0.0512	C56	-0.2005	H80	0.1057	H104	0.1396	C128	-0.1059	H152	0.1679	C176	-0.1352
C9	-0.1320	C33	0.0356	C57	0.3654	H81	0.3330	C105	0.0546	C129	-0.1111	H153	0.1411	C177	0.1129
C10	-0.2355	O34	-0.5181	H58	0.1172	H82	0.2157	C106	-0.0993	C130	0.0847	H154	0.1586	C178	-0.1504
S11	0.4373	H35	0.1435	H59	0.1186	H83	0.2003	H107	0.1383	C131	-0.1145	H155	0.1815	C179	0.1584
C12	-0.2964	H36	0.1413	H60	0.1086	H84	0.1308	C108	-0.1033	C132	-0.1001	C156	0.1016	H180	0.1835
S13	0.4175	H37	0.1212	H61	0.1078	H85	0.0945	H109	0.1361	C133	-0.1656	C157	-0.1273	H181	0.1549
H14	0.3483	H38	0.1219	H62	0.0840	H86	0.1219	C110	0.0370	N134	-0.4121	C158	0.1589	H182	0.1408
H15	0.1349	H39	0.1256	H63	0.0830	H87	0.1165	C111	-0.0929	C135	0.1512	N159	-0.4164	H183	0.1729
H16	0.1346	H40	0.1239	H64	0.1211	H88	0.0935	H112	0.1355	C136	-0.1263	C160	0.1525	H184	0.1918
H17	0.1242	O41	-0.5292	H65	0.1339	H89	0.1350	C113	-0.1141	C137	0.1089	C161	-0.1361	H185	0.1777
H18	0.1247	C42	0.0492	O66	-0.5292	C90	-0.0947	H114	0.1455	C138	-0.1370	H162	0.1583	H186	0.1386
H19	0.1199	C43	0.0512	C67	0.0195	H91	0.1325	C115	0.3377	C139	0.1461	H163	0.1840	H187	0.1358
H20	0.1204	O44	-0.5034	C68	0.0889	C92	-0.1198	C116	-0.1149	H140	0.1673	C164	-0.1687	H188	0.1837
H21	0.1240	C45	0.0793	O69	-0.4997	H93	0.1289	H117	0.1467	H141	0.1412	C165	0.0775	H189	0.1897
H22	0.1246	C46	0.0252	C70	0.0566	C94	0.3262	C118	-0.0925	H142	0.1672	C166	-0.1065	H190	0.1814
H23	0.1432	O47	-0.5309	C71	0.0416	C95	-0.1194	H119	0.1356	H143	0.1925	C167	-0.1065	H191	0.1532
H24	0.1440	C48	0.3580	O72	-0.5359	H96	0.1270	C120	0.1700	H144	0.1806	C168	0.0845	Total	5.0000

**Table S3a.** Partial charge distribution of +2 oxidized rotaxane when the center of mass of the CBPQT<sup>4+</sup> ring is located at z=10.92 Å.

O1	-0.4596	C25	-0.3297	C49	-0.1448	H73	0.1605	C97	-0.0890	C121	-0.1310	H145	0.1870	C169	-0.0978
C2	0.0112	S26	0.2671	C50	-0.0570	H74	0.1600	H98	0.1477	C122	0.1127	H146	0.1497	C170	-0.1009
C3	0.0601	C27	-0.2613	C51	-0.0393	H75	0.1526	C99	0.0436	C123	-0.1525	H147	0.1491	H171	0.1214
O4	-0.5032	C28	-0.1534	C52	-0.0648	H76	0.1532	C100	0.0567	C124	0.1549	H148	0.1198	H172	0.1226
C5	0.0762	S29	0.2547	C53	-0.0642	H77	0.1534	C101	-0.0954	N125	-0.4061	H149	0.1228	C173	-0.1764
C6	0.0345	C30	0.0905	C54	-0.0415	H78	0.1531	H102	0.1515	C126	-0.1737	H150	0.1899	N174	-0.4069
O7	-0.5166	O31	-0.5123	C55	-0.0562	H79	0.1677	C103	-0.0997	C127	0.0954	H151	0.1862	C175	0.1722
C8	0.0915	C32	0.0442	C56	-0.1448	H80	0.1678	H104	0.1501	C128	-0.1221	H152	0.1827	C176	-0.1327
C9	-0.1514	C33	0.0456	C57	0.4249	H81	0.3747	C105	0.0591	C129	-0.1217	H153	0.1514	C177	0.1176
C10	-0.2763	O34	-0.5221	H58	0.1280	H82	0.1856	C106	-0.1000	C130	0.0888	H154	0.1580	C178	-0.1521
S11	0.2751	H35	0.1293	H59	0.1286	H83	0.1931	H107	0.1437	C131	-0.1042	H155	0.1862	C179	0.1577
C12	-0.3321	H36	0.1063	H60	0.1244	H84	0.1679	C108	-0.0952	C132	-0.0977	C156	0.1078	H180	0.1938
S13	0.2665	H37	0.1132	H61	0.1245	H85	0.1747	H109	0.1514	C133	-0.1743	C157	-0.1274	H181	0.1680
H14	0.3545	H38	0.1204	H62	0.1238	H86	0.1779	C110	0.0305	N134	-0.4037	C158	0.1623	H182	0.1435
H15	0.1376	H39	0.1284	H63	0.1239	H87	0.1767	C111	-0.0926	C135	0.1664	N159	-0.4063	H183	0.1691
H16	0.1391	H40	0.1186	H64	0.1506	H88	0.1773	H112	0.1390	C136	-0.1257	C160	0.1454	H184	0.1794
H17	0.1185	O41	-0.5087	H65	0.1508	H89	0.1737	C113	-0.1172	C137	0.1125	C161	-0.1501	H185	0.1940
H18	0.1161	C42	0.0274	O66	-0.4813	C90	-0.0889	H114	0.1361	C138	-0.1401	H162	0.1623	H186	0.1345
H19	0.1033	C43	0.0556	C67	0.0039	H91	0.1472	C115	0.3280	C139	0.1597	H163	0.1873	H187	0.1400
H20	0.0933	O44	-0.5029	C68	0.0341	C92	-0.1086	C116	-0.1179	H140	0.1757	C164	-0.1709	H188	0.1880
H21	0.1135	C45	0.0554	O69	-0.4294	H93	0.1625	H117	0.1421	H141	0.1460	C165	0.0882	H189	0.1862
H22	0.1258	C46	0.0061	C70	0.0396	C94	0.3505	C118	-0.0918	H142	0.1607	C166	-0.1152	H190	0.1690
H23	0.0969	O47	-0.4769	C71	-0.0059	C95	-0.1083	H119	0.1421	H143	0.1861	C167	-0.1159	H191	0.1410
H24	0.1266	C48	0.4245	O72	-0.3868	H96	0.1617	C120	0.1602	H144	0.1879	C168	0.0939	Total	6.0000

**Table S3b.** Partial charge distribution of +2 oxidized rotaxane when the center of mass of the CBPQT<sup>4+</sup> ring is located at z=15.66 Å.

O1	-0.4118	C25	-0.3665	C49	-0.1464	H73	0.1600	C97	-0.0898	C121	-0.1283	H145	0.1896	C169	-0.1049
C2	-0.0008	S26	0.2876	C50	-0.0571	H74	0.1594	H98	0.1472	C122	0.1048	H146	0.1525	C170	-0.1068
C3	0.0505	C27	-0.2751	C51	-0.0409	H75	0.1521	C99	0.0460	C123	-0.1534	H147	0.1511	H171	0.1288
O4	-0.4609	C28	-0.1483	C52	-0.0654	H76	0.1527	C100	0.0523	C124	0.1553	H148	0.1144	H172	0.1285
C5	0.0477	S29	0.2488	C53	-0.0652	H77	0.1523	C101	-0.0960	N125	-0.4058	H149	0.1136	C173	-0.1689
C6	0.0412	C30	0.0854	C54	-0.0423	H78	0.1520	H102	0.1493	C126	-0.1604	H150	0.1854	N174	-0.4098
O7	-0.5142	O31	-0.5195	C55	-0.0564	H79	0.1701	C103	-0.1033	C127	0.0836	H151	0.1830	C175	0.1471
C8	0.0866	C32	0.0501	C56	-0.1465	H80	0.1703	H104	0.1443	C128	-0.1117	H152	0.1806	C176	-0.1336
C9	-0.1374	C33	0.0576	C57	0.4244	H81	0.3757	C105	0.0568	C129	-0.1134	H153	0.1505	C177	0.1091
C10	-0.2447	O34	-0.5305	H58	0.1278	H82	0.2056	C106	-0.1036	C130	0.0914	H154	0.1585	C178	-0.1533
S11	0.2712	H35	0.1005	H59	0.1285	H83	0.1630	H107	0.1350	C131	-0.1145	H155	0.1841	C179	0.1599
C12	-0.3073	H36	0.1114	H60	0.1213	H84	0.1655	C108	-0.0957	C132	-0.1148	C156	0.0951	H180	0.1917
S13	0.2908	H37	0.1058	H61	0.1214	H85	0.1726	H109	0.1481	C133	-0.1643	C157	-0.1149	H181	0.1645
H14	0.3667	H38	0.1080	H62	0.1211	H86	0.1762	C110	0.0275	N134	-0.4148	C158	0.1142	H182	0.1376
H15	0.1570	H39	0.0998	H63	0.1211	H87	0.1755	C111	-0.0957	C135	0.1679	N159	-0.3991	H183	0.1691
H16	0.1568	H40	0.1040	H64	0.1485	H88	0.1758	H112	0.1360	C136	-0.1310	C160	0.1602	H184	0.1837
H17	0.1359	O41	-0.5065	H65	0.1487	H89	0.1723	C113	-0.1210	C137	0.0987	C161	-0.1393	H185	0.1901
H18	0.1362	C42	0.0258	O66	-0.4837	C90	-0.0896	H114	0.1188	C138	-0.1556	H162	0.1687	H186	0.1478
H19	0.1282	C43	0.0591	C67	0.0046	H91	0.1468	C115	0.3156	C139	0.1524	H163	0.1956	H187	0.1465
H20	0.1282	O44	-0.5105	C68	0.0344	C92	-0.1073	C116	-0.1221	H140	0.1830	C164	-0.1654	H188	0.1913
H21	0.1259	C45	0.0568	O69	-0.4322	H93	0.1643	H117	0.1245	H141	0.1564	C165	0.0761	H189	0.1841
H22	0.1269	C46	0.0079	C70	0.0408	C94	0.3521	C118	-0.0948	H142	0.1604	C166	-0.1223	H190	0.1783
H23	0.1331	O47	-0.4802	C71	-0.0071	C95	-0.1071	H119	0.1392	H143	0.1900	C167	-0.1204	H191	0.1474
H24	0.1350	C48	0.4241	O72	-0.3773	H96	0.1634	C120	0.1670	H144	0.1857	C168	0.0815	Total	6.0000

**Table S3c.** Partial charge distribution of +2 oxidized rotaxane when the center of mass of the CBPQT<sup>4+</sup> ring is located at z=18.75□.

O1	-0.4309	C25	-0.3153	C49	-0.1456	H73	0.1594	C97	-0.0949	C121	-0.1244	H145	0.1908	C169	-0.1077
C2	0.0058	S26	0.3018	C50	-0.0552	H74	0.1588	H98	0.1370	C122	0.0941	H146	0.1534	C170	-0.1065
C3	0.0513	C27	-0.2962	C51	-0.0406	H75	0.1402	C99	0.0473	C123	-0.1429	H147	0.1535	H171	0.1134
O4	-0.4589	C28	-0.1575	C52	-0.0649	H76	0.1407	C100	0.0461	C124	0.1581	H148	0.1180	H172	0.1124
C5	0.0506	S29	0.3241	C53	-0.0661	H77	0.1424	C101	-0.1007	N125	-0.4080	H149	0.1177	C173	-0.1802
C6	0.0371	C30	0.0752	C54	-0.0381	H78	0.1422	H102	0.1408	C126	-0.1649	H150	0.1901	N174	-0.4006
O7	-0.5151	O31	-0.5172	C55	-0.0555	H79	0.1626	C103	-0.1100	C127	0.0604	H151	0.1918	C175	0.1628
C8	0.0845	C32	0.0582	C56	-0.1422	H80	0.1627	H104	0.1252	C128	-0.1167	H152	0.1735	C176	-0.1304
C9	-0.1335	C33	0.0553	C57	0.4293	H81	0.3718	C105	0.0445	C129	-0.1200	H153	0.1370	C177	0.0951
C10	-0.2348	O34	-0.5475	H58	0.1247	H82	0.2233	C106	-0.1099	C130	0.0627	H154	0.1643	C178	-0.1477
S11	0.3872	H35	0.1154	H59	0.1254	H83	0.1706	H107	0.1126	C131	-0.1025	H155	0.1960	C179	0.1541
C12	-0.3088	H36	0.1090	H60	0.1207	H84	0.1671	C108	-0.1003	C132	-0.1017	C156	0.0902	H180	0.1976
S13	0.3748	H37	0.0939	H61	0.1205	H85	0.1748	H109	0.1387	C133	-0.1670	C157	-0.1275	H181	0.1655
H14	0.3590	H38	0.0943	H62	0.1210	H86	0.1816	C110	0.0331	N134	-0.4107	C158	0.1669	H182	0.1384
H15	0.1468	H39	0.0970	H63	0.1210	H87	0.1781	C111	-0.0991	C135	0.1678	N159	-0.4024	H183	0.1861
H16	0.1467	H40	0.0981	H64	0.1488	H88	0.1786	H112	0.1350	C136	-0.1199	C160	0.1551	H184	0.1904
H17	0.1322	O41	-0.5092	H65	0.1491	H89	0.1776	C113	-0.1372	C137	0.0997	C161	-0.1454	H185	0.1941
H18	0.1324	C42	0.0293	O66	-0.4767	C90	-0.0947	H114	0.0855	C138	-0.1486	H162	0.1670	H186	0.1479
H19	0.1263	C43	0.0583	C67	0.0002	H91	0.1373	C115	0.3056	C139	0.1590	H163	0.1988	H187	0.1479
H20	0.1265	O44	-0.5105	C68	0.0462	C92	-0.1090	C116	-0.1382	H140	0.1806	C164	-0.1788	H188	0.1967
H21	0.1281	C45	0.0577	O69	-0.4574	H93	0.1569	H117	0.0853	H141	0.1409	C165	0.0735	H189	0.1900
H22	0.1291	C46	0.0079	C70	0.0473	C94	0.3490	C118	-0.0981	H142	0.1652	C166	-0.1056	H190	0.1873
H23	0.1449	O47	-0.4814	C71	-0.0048	C95	-0.1087	H119	0.1362	H143	0.1956	C167	-0.1057	H191	0.1394
H24	0.1462	C48	0.4242	O72	-0.4108	H96	0.1557	C120	0.1636	H144	0.1937	C168	0.0762	Total	6.0000



**Table S3d.** Partial charge distribution of +2 oxidized rotaxane when the center of mass of the CBPQT<sup>4+</sup> ring is located at z=23.27□.

O1	-0.3942	C25	-0.2988	C49	-0.1472	H73	0.1583	C97	-0.1063	C121	-0.1317	H145	0.1846	C169	-0.1150
C2	-0.0049	S26	0.4117	C50	-0.0578	H74	0.1578	H98	0.1039	C122	0.0991	H146	0.1496	C170	-0.1103
C3	0.0461	C27	-0.2473	C51	-0.0423	H75	0.1454	C99	0.0221	C123	-0.1428	H147	0.1485	H171	0.1129
O4	-0.4478	C28	-0.1435	C52	-0.0655	H76	0.1459	C100	0.0462	C124	0.1552	H148	0.1189	H172	0.1161
C5	0.0405	S29	0.4010	C53	-0.0660	H77	0.1460	C101	-0.1114	N125	-0.4192	H149	0.1281	C173	-0.1685
C6	0.0378	C30	0.0685	C54	-0.0428	H78	0.1457	H102	0.1301	C126	-0.1540	H150	0.1900	N174	-0.4119
O7	-0.5154	O31	-0.5181	C55	-0.0571	H79	0.1687	C103	-0.1229	C127	0.0630	H151	0.1912	C175	0.1672
C8	0.0821	C32	0.0633	C56	-0.1463	H80	0.1689	H104	0.0821	C128	-0.1190	H152	0.1742	C176	-0.1211
C9	-0.1358	C33	0.0482	C57	0.4249	H81	0.3742	C105	0.0299	C129	-0.1183	H153	0.1482	C177	0.1040
C10	-0.2359	O34	-0.5534	H58	0.1132	H82	0.2281	C106	-0.1290	C130	0.0643	H154	0.1716	C178	-0.1386
S11	0.4505	H35	0.1434	H59	0.1130	H83	0.1693	H107	0.0580	C131	-0.1011	H155	0.1991	C179	0.1602
C12	-0.3126	H36	0.1400	H60	0.1156	H84	0.1636	C108	-0.1133	C132	-0.1018	C156	0.0873	H180	0.1901
S13	0.4286	H37	0.0981	H61	0.1159	H85	0.1695	H109	0.1281	C133	-0.1612	C157	-0.1103	H181	0.1629
H14	0.3705	H38	0.1018	H62	0.1178	H86	0.1758	C110	0.0147	N134	-0.4108	C158	0.1555	H182	0.1584
H15	0.1639	H39	0.1111	H63	0.1180	H87	0.1755	C111	-0.1202	C135	0.1586	N159	-0.4137	H183	0.1848
H16	0.1635	H40	0.1049	H64	0.1462	H88	0.1746	H112	0.0939	C136	-0.1147	C160	0.1519	H184	0.1914
H17	0.1424	O41	-0.5266	H65	0.1463	H89	0.1721	C113	-0.1409	C137	0.1011	C161	-0.1546	H185	0.1908
H18	0.1429	C42	0.0419	O66	-0.4834	C90	-0.1068	H114	0.0968	C138	-0.1477	H162	0.1481	H186	0.1518
H19	0.1372	C43	0.0576	C67	0.0044	H91	0.1017	C115	0.2911	C139	0.1602	H163	0.1823	H187	0.1496
H20	0.1377	O44	-0.5116	C68	0.0400	C92	-0.1203	C116	-0.1441	H140	0.1666	C164	-0.1662	H188	0.1874
H21	0.1327	C45	0.0605	O69	-0.4467	H93	0.1331	H117	0.1060	H141	0.1261	C165	0.0895	H189	0.1875
H22	0.1332	C46	0.0079	C70	0.0452	C94	0.3230	C118	-0.1288	H142	0.1701	C166	-0.1171	H190	0.1724
H23	0.1512	O47	-0.4797	C71	-0.0046	C95	-0.1199	H119	0.1111	H143	0.1943	C167	-0.1142	H191	0.1490
H24	0.1520	C48	0.4231	O72	-0.3812	H96	0.1327	C120	0.1638	H144	0.1901	C168	0.0862	Total	6.0000

**Table S3e.** Partial charge distribution of +2 oxidized rotaxane when the center of mass of the CBPQT<sup>4+</sup> ring is located at z=28.17□.

O1	-0.4143	C25	-0.3044	C49	-0.1518	H73	0.1575	C97	-0.1302	C121	-0.1201	H145	0.1926	C169	-0.1004
C2	0.0009	S26	0.4414	C50	-0.0575	H74	0.1571	H98	0.0862	C122	0.1070	H146	0.1443	C170	-0.1035
C3	0.0491	C27	-0.2417	C51	-0.0451	H75	0.1261	C99	0.0133	C123	-0.1386	H147	0.1380	H171	0.1256
O4	-0.4490	C28	-0.1402	C52	-0.0653	H76	0.1264	C100	0.0237	C124	0.1549	H148	0.1268	H172	0.1230
C5	0.0454	S29	0.4370	C53	-0.0666	H77	0.1297	C101	-0.1385	N125	-0.4059	H149	0.1255	C173	-0.1701
C6	0.0360	C30	0.0735	C54	-0.0417	H78	0.1294	H102	0.1047	C126	-0.1714	H150	0.1803	N174	-0.4100
O7	-0.5160	O31	-0.5197	C55	-0.0586	H79	0.1474	C103	-0.1353	C127	0.0690	H151	0.1934	C175	0.1698
C8	0.0823	C32	0.0521	C56	-0.1415	H80	0.1475	H104	0.1035	C128	-0.1161	H152	0.1734	C176	-0.1230
C9	-0.1353	C33	0.0394	C57	0.4276	H81	0.3590	C105	0.0215	C129	-0.1124	H153	0.1438	C177	0.1068
C10	-0.2332	O34	-0.5200	H58	0.1076	H82	0.2323	C106	-0.1371	C130	0.0794	H154	0.1658	C178	-0.1430
S11	0.4651	H35	0.1519	H59	0.1033	H83	0.1968	H107	0.1037	C131	-0.1027	H155	0.1936	C179	0.1549
C12	-0.3124	H36	0.1495	H60	0.1195	H84	0.1507	C108	-0.1379	C132	-0.1020	C156	0.1012	H180	0.1919
S13	0.4493	H37	0.1083	H61	0.1209	H85	0.1667	H109	0.1040	C133	-0.1788	C157	-0.1158	H181	0.1572
H14	0.3650	H38	0.1065	H62	0.1216	H86	0.1810	C110	0.0145	N134	-0.4020	C158	0.1575	H182	0.1502
H15	0.1556	H39	0.1310	H63	0.1223	H87	0.1700	C111	-0.1267	C135	0.1539	N159	-0.3987	H183	0.1737
H16	0.1553	H40	0.1296	H64	0.1403	H88	0.1748	H112	0.0899	C136	-0.1202	C160	0.1581	H184	0.1925
H17	0.1383	O41	-0.5186	H65	0.1392	H89	0.1798	C113	-0.1243	C137	0.0995	C161	-0.1429	H185	0.1883
H18	0.1388	C42	0.0370	O66	-0.4704	C90	-0.1309	H114	0.1392	C138	-0.1449	H162	0.1663	H186	0.1464
H19	0.1337	C43	0.0631	C67	-0.0041	H91	0.0828	C115	0.3226	C139	0.1559	H163	0.1963	H187	0.1418
H20	0.1342	O44	-0.5159	C68	0.0583	C92	-0.1266	C116	-0.1260	H140	0.1745	C164	-0.1780	H188	0.1953
H21	0.1329	C45	0.0530	O69	-0.4865	H93	0.1388	H117	0.1371	H141	0.1511	C165	0.0743	H189	0.1853
H22	0.1335	C46	0.0183	C70	0.0546	C94	0.3277	C118	-0.1278	H142	0.1630	C166	-0.1119	H190	0.1792
H23	0.1543	O47	-0.4897	C71	0.0055	C95	-0.1249	H119	0.0851	H143	0.1940	C167	-0.1162	H191	0.1508
H24	0.1552	C48	0.4184	O72	-0.4303	H96	0.1410	C120	0.1697	H144	0.1921	C168	0.0696	Total	6.0000

**Table S3f.** Partial charge distribution of +2 oxidized rotaxane when the center of mass of the CBPQT<sup>4+</sup> ring is located at z=32.22□.

O1	-0.3980	C25	-0.3054	C49	-0.1606	H73	0.1530	C97	-0.1312	C121	-0.1218	H145	0.1901	C169	-0.1064
C2	-0.0036	S26	0.4775	C50	-0.0619	H74	0.1520	H98	0.1004	C122	0.0983	H146	0.1535	C170	-0.1059
C3	0.0410	C27	-0.2371	C51	-0.0552	H75	0.1212	C99	0.0139	C123	-0.1366	H147	0.1514	H171	0.1181
O4	-0.4305	C28	-0.1378	C52	-0.0648	H76	0.1219	C100	0.0341	C124	0.1581	H148	0.1289	H172	0.1219
C5	0.0350	S29	0.4663	C53	-0.0656	H77	0.1241	C101	-0.1447	N125	-0.4110	H149	0.1364	C173	-0.1715
C6	0.0356	C30	0.0791	C54	-0.0516	H78	0.1241	H102	0.0384	C126	-0.1602	H150	0.1881	N174	-0.4089
O7	-0.5164	O31	-0.5174	C55	-0.0640	H79	0.1284	C103	-0.1106	C127	0.0760	H151	0.1895	C175	0.1675
C8	0.0801	C32	0.0438	C56	-0.1442	H80	0.1282	H104	0.1281	C128	-0.1153	H152	0.1923	C176	-0.1300
C9	-0.1355	C33	0.0444	C57	0.4200	H81	0.3463	C105	0.0490	C129	-0.1167	H153	0.1559	C177	0.1033
C10	-0.2316	O34	-0.5262	H58	0.0979	H82	0.2354	C106	-0.1136	C130	0.0770	H154	0.1626	C178	-0.1408
S11	0.4917	H35	0.1553	H59	0.0982	H83	0.2215	H107	0.1265	C131	-0.1227	H155	0.1924	C179	0.1594
C12	-0.3105	H36	0.1530	H60	0.1059	H84	0.1306	C108	-0.1254	C132	-0.1198	C156	0.1003	H180	0.1931
S13	0.4727	H37	0.1141	H61	0.1026	H85	0.1558	H109	0.0825	C133	-0.1619	C157	-0.1232	H181	0.1689
H14	0.3719	H38	0.1141	H62	0.1208	H86	0.1749	C110	0.0169	N134	-0.4368	C158	0.1597	H182	0.1447
H15	0.1645	H39	0.1303	H63	0.1190	H87	0.1506	C111	-0.1056	C135	0.1749	N159	-0.4061	H183	0.1795
H16	0.1642	H40	0.1289	H64	0.1301	H88	0.1619	H112	0.1069	C136	-0.1145	C160	0.1576	H184	0.1890
H17	0.1486	O41	-0.5426	H65	0.1317	H89	0.1745	C113	-0.1195	C137	0.0939	C161	-0.1455	H185	0.1898
H18	0.1491	C42	0.0426	O66	-0.4707	C90	-0.1296	H114	0.1325	C138	-0.1511	H162	0.1655	H186	0.1489
H19	0.1453	C43	0.0742	C67	-0.0012	H91	0.1028	C115	0.3176	C139	0.1545	H163	0.1926	H187	0.1488
H20	0.1458	O44	-0.5155	C68	0.0623	C92	-0.0977	C116	-0.1208	H140	0.1808	C164	-0.1701	H188	0.1918
H21	0.1375	C45	0.0462	O69	-0.4876	H93	0.0721	H117	0.1326	H141	0.1502	C165	0.0743	H189	0.1895
H22	0.1380	C46	0.0337	C70	0.0546	C94	0.2893	C118	-0.1058	H142	0.1686	C166	-0.1174	H190	0.1805
H23	0.1590	O47	-0.5037	C71	0.0188	C95	-0.1412	H119	0.1023	H143	0.1962	C167	-0.1156	H191	0.1571
H24	0.1599	C48	0.4038	O72	-0.4743	H96	0.1001	C120	0.1697	H144	0.1924	C168	0.0763	Total	6.0000

**Table S3g.** Partial charge distribution of +2 oxidized rotaxane when the center of mass of the CBPQT<sup>4+</sup> ring is located at z=36.84 Å.

O1	-0.4047	C25	-0.3037	C49	-0.1695	H73	0.1516	C97	-0.1109	C121	-0.1370	H145	0.1938	C169	-0.1116
C2	-0.0006	S26	0.4528	C50	-0.0675	H74	0.1506	H98	0.1291	C122	0.0856	H146	0.1561	C170	-0.1090
C3	0.0421	C27	-0.2397	C51	-0.0619	H75	0.1285	C99	0.0365	C123	-0.1449	H147	0.1557	H171	0.1261
O4	-0.4281	C28	-0.1384	C52	-0.0653	H76	0.1293	C100	0.0373	C124	0.1550	H148	0.1126	H172	0.1255
C5	0.0343	S29	0.4388	C53	-0.0607	H77	0.1327	C101	-0.1113	N125	-0.4040	H149	0.1147	C173	-0.1650
C6	0.0397	C30	0.0780	C54	-0.0691	H78	0.1327	H102	0.0946	C126	-0.1681	H150	0.1941	N174	-0.4031
O7	-0.5154	O31	-0.5165	C55	-0.0678	H79	0.1427	C103	-0.1048	C127	0.0758	H151	0.1913	C175	0.1686
C8	0.0802	C32	0.0481	C56	-0.1493	H80	0.1425	H104	0.1333	C128	-0.1140	H152	0.1914	C176	-0.1202
C9	-0.1366	C33	0.0367	C57	0.4137	H81	0.3579	C105	0.0420	C129	-0.1134	H153	0.1610	C177	0.0892
C10	-0.2361	O34	-0.5186	H58	0.0956	H82	0.2245	C106	-0.1055	C130	0.0790	H154	0.1716	C178	-0.1430
S11	0.4640	H35	0.1505	H59	0.0906	H83	0.2121	H107	0.1354	C131	-0.1089	H155	0.1967	C179	0.1644
C12	-0.3073	H36	0.1480	H60	0.0877	H84	0.1096	C108	-0.1132	C132	-0.1080	C156	0.0873	H180	0.1945
S13	0.4451	H37	0.1205	H61	0.0942	H85	0.1519	H109	0.1178	C133	-0.1739	C157	-0.1181	H181	0.1742
H14	0.3682	H38	0.1213	H62	0.0939	H86	0.1731	C110	0.0320	N134	-0.4028	C158	0.1658	H182	0.1433
H15	0.1602	H39	0.1294	H63	0.0952	H87	0.1109	C111	-0.0991	C135	0.1685	N159	-0.4073	H183	0.1785
H16	0.1598	H40	0.1274	H64	0.1139	H88	0.1475	H112	0.1283	C136	-0.1334	C160	0.1582	H184	0.1932
H17	0.1473	O41	-0.5463	H65	0.1162	H89	0.1705	C113	-0.1149	C137	0.0839	C161	-0.1453	H185	0.1840
H18	0.1478	C42	0.0549	O66	-0.4767	C90	-0.1108	H114	0.1444	C138	-0.1450	H162	0.1708	H186	0.1498
H19	0.1441	C43	0.0603	C67	0.0026	H91	0.1321	C115	0.3285	C139	0.1584	H163	0.1946	H187	0.1500
H20	0.1445	O44	-0.5202	C68	0.0563	C92	-0.1414	C116	-0.1156	H140	0.1869	C164	-0.1616	H188	0.1854
H21	0.1339	C45	0.0546	O69	-0.4753	H93	0.0782	H117	0.1458	H141	0.1565	C165	0.0695	H189	0.1910
H22	0.1344	C46	0.0456	C70	0.0502	C94	0.3086	C118	-0.0989	H142	0.1682	C166	-0.1181	H190	0.1744
H23	0.1523	O47	-0.5189	C71	0.0096	C95	-0.1378	H119	0.1280	H143	0.1943	C167	-0.1187	H191	0.1395
H24	0.1531	C48	0.3799	O72	-0.4415	H96	0.0834	C120	0.1653	H144	0.1891	C168	0.0696	Total	6.0000

**Table S3h.** Partial charge distribution of +2 oxidized rotaxane when the center of mass of the CBPQT<sup>4+</sup> ring is located at z=40.99□.

O1	-0.4191	C25	-0.3040	C49	-0.2109	H73	0.1354	C97	-0.0927	C121	-0.1382	H145	0.1877	C169	-0.1084
C2	0.0021	S26	0.4539	C50	-0.1242	H74	0.1369	H98	0.1407	C122	0.1099	H146	0.1482	C170	-0.1090
C3	0.0476	C27	-0.2403	C51	-0.0933	H75	0.1091	C99	0.0312	C123	-0.1412	H147	0.1466	H171	0.1155
O4	-0.4442	C28	-0.1400	C52	-0.0743	H76	0.1078	C100	0.0630	C124	0.1589	H148	0.1245	H172	0.1148
C5	0.0424	S29	0.4385	C53	-0.0846	H77	0.1187	C101	-0.1008	N125	-0.4022	H149	0.1267	C173	-0.1729
C6	0.0379	C30	0.0753	C54	-0.1240	H78	0.1179	H102	0.1437	C126	-0.1650	H150	0.1871	N174	-0.4085
O7	-0.5156	O31	-0.5165	C55	-0.0823	H79	0.1301	C103	-0.0926	C127	0.0661	H151	0.1921	C175	0.1725
C8	0.0817	C32	0.0505	C56	-0.1732	H80	0.1305	H104	0.1551	C128	-0.1213	H152	0.1783	C176	-0.1312
C9	-0.1360	C33	0.0256	C57	0.3922	H81	0.3486	C105	0.0546	C129	-0.1141	H153	0.1445	C177	0.0957
C10	-0.2350	O34	-0.5059	H58	0.1088	H82	0.2290	C106	-0.0928	C130	0.0536	H154	0.1757	C178	-0.1537
S11	0.4681	H35	0.1522	H59	0.1145	H83	0.2092	H107	0.1548	C131	-0.0937	H155	0.2015	C179	0.1597
C12	-0.3100	H36	0.1497	H60	0.0996	H84	0.0942	C108	-0.1004	C132	-0.0937	C156	0.0818	H180	0.1937
S13	0.4479	H37	0.1289	H61	0.0980	H85	0.0890	H109	0.1512	C133	-0.1610	C157	-0.1220	H181	0.1627
H14	0.3635	H38	0.1302	H62	0.0847	H86	0.1551	C110	0.0436	N134	-0.4062	C158	0.1745	H182	0.1643
H15	0.1537	H39	0.1332	H63	0.0911	H87	0.0745	C111	-0.0868	C135	0.1621	N159	-0.4080	H183	0.1927
H16	0.1534	H40	0.1310	H64	0.0956	H88	0.1194	H112	0.1519	C136	-0.1412	C160	0.1571	H184	0.1930
H17	0.1398	O41	-0.5276	H65	0.1034	H89	0.1534	C113	-0.1065	C137	0.1184	C161	-0.1443	H185	0.1871
H18	0.1403	C42	0.0536	O66	-0.5123	C90	-0.0924	H114	0.1666	C138	-0.1446	H162	0.1621	H186	0.1530
H19	0.1357	C43	0.0548	C67	0.0160	H91	0.1429	C115	0.3521	C139	0.1606	H163	0.1929	H187	0.1533
H20	0.1362	O44	-0.5148	C68	0.0685	C92	-0.1190	C116	-0.1073	H140	0.1767	C164	-0.1694	H188	0.1902
H21	0.1322	C45	0.0583	O69	-0.4955	H93	0.1329	H117	0.1679	H141	0.1461	C165	0.0786	H189	0.1919
H22	0.1328	C46	0.0507	C70	0.0594	C94	0.3248	C118	-0.0863	H142	0.1765	C166	-0.1202	H190	0.1884
H23	0.1527	O47	-0.5229	C71	0.0172	C95	-0.1187	H119	0.1519	H143	0.2030	C167	-0.1102	H191	0.1665
H24	0.1536	C48	0.3445	O72	-0.4682	H96	0.1291	C120	0.1624	H144	0.1957	C168	0.0884	Total	6.0000

**Table S3i.** Partial charge distribution of +2 oxidized rotaxane when the center of mass of the CBPQT<sup>4+</sup> ring is located at z=44.83 Å.

O1	-0.4013	C25	-0.3058	C49	-0.2005	H73	0.1234	C97	-0.0914	C121	-0.1271	H145	0.1942	C169	-0.0987
C2	0.0005	S26	0.4296	C50	-0.0957	H74	0.1360	H98	0.1417	C122	0.1194	H146	0.1255	C170	-0.1122
C3	0.0300	C27	-0.2430	C51	-0.1217	H75	0.0672	C99	0.0338	C123	-0.1455	H147	0.1234	H171	0.1354
O4	-0.3817	C28	-0.1404	C52	-0.0845	H76	0.0757	C100	0.0618	C124	0.1663	H148	0.1467	H172	0.1357
C5	0.0182	S29	0.4136	C53	-0.0794	H77	0.1041	C101	-0.0997	N125	-0.4130	H149	0.1456	C173	-0.1737
C6	0.0434	C30	0.0761	C54	-0.1246	H78	0.1033	H102	0.1455	C126	-0.1702	H150	0.1871	N174	-0.4134
O7	-0.5101	O31	-0.5160	C55	-0.0919	H79	0.1058	C103	-0.0943	C127	0.0881	H151	0.1926	C175	0.1774
C8	0.0749	C32	0.0518	C56	-0.2023	H80	0.1073	H104	0.1535	C128	-0.1056	H152	0.1764	C176	-0.1316
C9	-0.1407	C33	0.0290	C57	0.3642	H81	0.3356	C105	0.0560	C129	-0.1107	H153	0.1487	C177	0.1240
C10	-0.2406	O34	-0.5105	H58	0.1219	H82	0.2103	C106	-0.0945	C130	0.0849	H154	0.1697	C178	-0.1467
S11	0.4336	H35	0.1474	H59	0.1233	H83	0.2033	H107	0.1521	C131	-0.1141	H155	0.1936	C179	0.1666
C12	-0.3053	H36	0.1451	H60	0.1116	H84	0.1345	C108	-0.0993	C132	-0.0994	C156	0.1171	H180	0.1945
S13	0.4126	H37	0.1258	H61	0.1113	H85	0.0982	H109	0.1499	C133	-0.1715	C157	-0.1226	H181	0.1639
H14	0.3707	H38	0.1269	H62	0.0834	H86	0.1232	C110	0.0395	N134	-0.4017	C158	0.1689	H182	0.1493
H15	0.1626	H39	0.1297	H63	0.0843	H87	0.1156	C111	-0.0888	C135	0.1603	N159	-0.4023	H183	0.1838
H16	0.1623	H40	0.1277	H64	0.1230	H88	0.0963	H112	0.1463	C136	-0.1224	C160	0.1611	H184	0.2012
H17	0.1619	O41	-0.5241	H65	0.1355	H89	0.1414	C113	-0.1093	C137	0.1208	C161	-0.1314	H185	0.1849
H18	0.1624	C42	0.0437	O66	-0.5287	C90	-0.0912	H114	0.1595	C138	-0.1332	H162	0.1647	H186	0.1437
H19	0.1620	C43	0.0507	C67	0.0149	H91	0.1429	C115	0.3468	C139	0.1545	H163	0.1924	H187	0.1414
H20	0.1621	O44	-0.5030	C68	0.0923	C92	-0.1164	C116	-0.1101	H140	0.1718	C164	-0.1737	H188	0.1904
H21	0.1364	C45	0.0797	O69	-0.4980	H93	0.1415	H117	0.1609	H141	0.1451	C165	0.0776	H189	0.1977
H22	0.1370	C46	0.0230	C70	0.0531	C94	0.3320	C118	-0.0882	H142	0.1765	C166	-0.1058	H190	0.1904
H23	0.1507	O47	-0.5312	C71	0.0425	C95	-0.1161	H119	0.1466	H143	0.2023	C167	-0.1067	H191	0.1605
H24	0.1514	C48	0.3563	O72	-0.5348	H96	0.1397	C120	0.1799	H144	0.1877	C168	0.0839	Total	6.0000