



**ANALISIS HUBUNGAN KUANTITATIF STRUKTUR
DAN AKTIVITAS ANTIOKSIDAN SENYAWA
ANALOG KALKON**

Skripsi

Disusun sebagai salah satu syarat
Untuk memperoleh gelar Sarjana Sains
Program Studi Kimia

oleh

Lailatul Isnaeni

4311411021

**JURUSAN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS NEGERI SEMARANG
2015**

PERNYATAAN

Saya menyatakan bahwa skripsi ini bebas plagiat, dan apabila di kemudian hari terbukti terdapat plagiat dalam skripsi ini, maka saya bersedia menerima sanksi sesuai ketentuan peraturan perundang-undangan.

Semarang, 5 Mei 2015



Lailatul Isnaeni

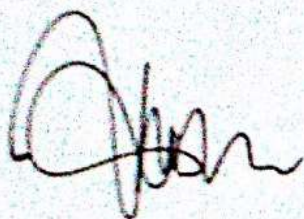
4311411021

PERSETUJUAN PEMBIMBING

Skripsi ini telah disetujui oleh pembimbing untuk diajukan ke sidang Panitia
Ujian Skripsi Jurusan Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Negeri Semarang.

Semarang, 5 Mei 2015

Pembimbing I



Drs. Kasmui, M. Si
NIP. 196602271991021001

Pembimbing II



Samuel Budi Wardhana. K., S.Si, M.Sc
NIP. 198204182006041002

PENGESAHAN

Skripsi yang berjudul

Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas Antioksidan
Senyawa Analog Kalkon

disusun oleh

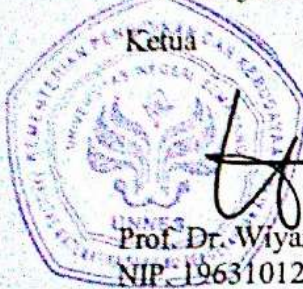
Nama : Lailatul Isnaeni

NIM : 4311411021

telah dipertahankan di hadapan Sidang Panitia Ujian Skripsi Jurusan Kimia
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Negeri Semarang
pada tanggal 5 Mei 2015.

Panitia Ujian:

Ketua



Prof. Dr. Wiyanto, M.Si
NIP. 196310121988031001

Sekretaris

Dra. Woro Sumarni, M.Si
NIP. 196507231993032001

Ketua Penguji

Agung Tri Prasetya, S.Si, M.Si
NIP. 196904041994021001

Anggota Penguji/

Pembimbing I

Drs. Kamui, M.Si
NIP. 196602271991021001

Anggota Penguji/

Pembimbing II

Samuel Budi Wardhana, K., S.Si, M.Sc
NIP. 198204182006041002

MOTTO DAN PERSEMBAHAN

MOTTO

- Sesungguhnya Allah tidak mengubah keadaan sesuatu kaum sehingga mereka mengubah keadaan yang ada pada diri mereka sendiri. (*QS. Ar- Rad 13:11*)
- Maka sesungguhnya bersama kesulitan ada kemudahan. Sesungguhnya bersama kesulitan ada kemudahan. (*QS. Al-Insyirah : 5-6*)
- Maka apabila engkau telah selesai dari suatu urusan, tetaplah bekerja keras untuk urusan yang lain, dan hanya kepada Tuhan-mulah engkau berharap. (*QS. Al – Insyirah : 7-8*)
- Sebaik-baik manusia adalah orang yang paling bermanfaat bagi orang lain. (HR. Ad-Daruquthni dan Ath-Thabarani)
- Hari ini harus lebih baik dari kemarin, dan besok harus lebih baik dari hari ini.

PERSEMBAHAN

- Ibu dan Ayah tercinta yang selalu menjadi motivasi dalam hidup.
- Kakak serta keponakan tercinta.
- Teman-teman yang selalu setia menemani
- Almamater

PRAKATA

Puji syukur kehadiran Allah SWT yang senantiasa memberikan rahmat serta karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi ini. Sholawat beserta salam semoga selalu tercurah kepada Rasulullah SAW. Dengan perjuangan dan rasa syukur penulis dapat menyelesaikan penyusunan skripsi yang berjudul “Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas Antioksidan Senyawa Analog Kalkon”.

Penulisan skripsi ini dapat terselesaikan tidak lepas dari bantuan, dukungan, serta bimbingan dari berbagai pihak. Pada kesempatan ini, penulis ingin mengucapkan terima kasih kepada:

1. Ibu, Ayah, Kakak, dan keponakan tercinta yang menjadi motivator dalam penulisan skripsi.
2. Rektor Universitas Negeri Semarang.
3. Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Negeri Semarang.
4. Ketua Jurusan Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Negeri Semarang.
5. Kepala Laboratorium Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Negeri Semarang yang telah memberikan izin penelitian.

6. Bapak Drs. Kasmui, M.Si. selaku Dosen Pembimbing I yang telah memberikan ilmu, arahan, serta bimbingan dalam pelaksanaan penelitian serta penyusunan skripsi.
7. Bapak Samuel Budi Wardhana K., S.Si, M.Sc selaku Dosen Pembimbing II yang telah memberikan ilmu, arahan, serta bimbingan dalam pelaksanaan penelitian serta penyusunan skripsi.
8. Bapak Agung Tri Prasetya, S. Si, M. Si. Selaku Dosen Penguji yang telah memberikan evaluasi serta saran dalam penulisan skripsi.
9. Bapak/Ibu Dosen Jurusan Kimia.
10. Sahabat serta teman seperjuangan tercinta, Muzda, Udin, Grandys, Inoo, Ida, Yanti, Mini, Ririn, Fina, Ihda yang telah memberikan semangat, doa, serta membantu kelancaran penyelesaian skripsi.
11. Teman-teman seperjuangan Jurusan Kimia 2011 dan teman-teman Kos Rizkia 1.
12. Keluarga besar *Computational Chemistry Club (Triple-C)*.
13. Semua pihak yang tidak dapat disebutkan satu persatu.

Akhir kata penulis berharap semoga skripsi ini dapat bermanfaat bagi perkembangan ilmu pengetahuan. Tidak lupa penulis mohon maaf atas kesalahan yang mungkin terdapat di dalamnya.

Semarang, 5 Mei 2015

Penulis

ABSTRAK

Isnaeni, L. 2015. *Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas Antioksidan Senyawa Analog Kalkon*. Skripsi, Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Semarang. Pembimbing Utama Drs. Kasmui, M.Si dan Pembimbing Pendamping Samuel Budi Wardana K., S.Si, M.Sc.

Kata kunci: antioksidan, HKSA, kalkon, DFT, deskriptor

Analisis HKSA terhadap 13 senyawa analog kalkon telah dilakukan berdasarkan analisis regresi multilinear. Jenis deskriptor yang digunakan adalah deskriptor sterik, hidrofobik dan elektronik. Terhadap setiap senyawa dilakukan optimasi geometri dengan metode DFT B3LYP *basis set* 6-311G, kemudian dihitung nilai deskriptornya menggunakan *software Gaussian 09* dan *MarvinBeans-6.0.0*. Data aktivitas antioksidan IC_{50} diperoleh dari literatur dan dinyatakan sebagai $\log 1/IC_{50}$. Data perhitungan deskriptor diolah menggunakan *IBM SPSS 21*. Diperoleh persamaan HKSA:

$$\begin{aligned} \text{Log } 1/IC_{50} = & -13,715 + 56,583 \text{ Energi HOMO} + 0,654 \text{ Celah HOMO-LUMO} - \\ & 4,018 \text{ IPs} + 0,003 \text{ PSA} - 0,225 \log P + 0,036 \text{ Indeks Platt} + 1,221 \\ & \text{Indeks Balaban} - 0,046 \text{ Indeks Harrary} - 3,643E-05 \text{ Indeks Hyper-} \\ & \text{Wiener} + 0,299 \text{ Refraktivitas} - 0,773 \text{ Polarisabilitas} \end{aligned}$$

Dengan $n = 13$; $R = 0,998$; $R^2 = 0,995$; $SE = 0,017014694$; $PRESS = 0,00028939$

Dari persamaan HKSA didapatkan prediksi senyawa yang berpotensi sebagai antioksidan, yaitu senyawa 2,4,5,2',5'-pentametoksikalkon; 2'-hidroksi-2,4,5,5'-tetrametoksikalkon dan 2'-nitro-5'-hidroksi-2,4,5-trimetoksikalkon dengan nilai $\log 1/IC_{50}$ masing-masing sebesar -0,0329263210179302; -0,3947818814234920, -0,3400535864346010.

ABSTRACT

Isnaeni, L. 2015. *Quantitative Structure Activity Relationship Analysis of Chalcone Analogue Compounds Antioxidant Activity*. Undergraduate Thesis, Department of Chemistry, Mathematics and Natural Sciences Faculty, Semarang State University. Primary Supervisor Drs. Kasmui, M.Si, Companion Supervisor Samuel Budi Wardana K., S.Si, M.Sc.

Keyword: antioxidant, QSAR, chalcone, DFT, descriptor

QSAR analysis of 13 derivatives chalcone compounds has been conducted by multilinear regression analysis. Type of descriptors used are steric, hydrophobic and electronic. Against each compound were geometry optimized with DFT method B3LYP 6-311G basis set, then the descriptors value calculated using the Gaussian 09 software and MarvinBeans-6.0.0. IC₅₀ antioxidant activity data obtained from the literature and expressed as log 1/IC₅₀. Descriptors calculation data processed using IBM SPSS 21. QSAR equation was obtained:

$$\text{Log } 1/\text{IC}_{50} = -13,715 + 56,583 \text{ HOMO energy} + 0,654 \text{ HOMO-LUMO Gap} - 4,018 \text{ IPs} + 0,003 \text{ PSA} - 0,225 \log P + 0,036 \text{ Platt index} + 1,221 \text{ Balaban index} - 0,046 \text{ Harrary index} - 3,643\text{E-}05 \text{ Hyper-Wiener indeks} + 0,299 \text{ Refractivity} - 0,773 \text{ Polarizability}$$

n = 13; R = 0,998; R² = 0,995; SE = 0,017014694; PRESS = 0,00028939

From the QSAR equation, the prediction obtained compounds that potential as antioxidant are compounds 2,4,5,2',5'-pentametoksikalkon; 2'-hidroksi-2,4,5,5'-tetrametoksikalkon and 2'-nitro-5'-hidroksi-2,4,5-trimetoksikalkon with each value of Log 1/IC₅₀ are -0,0329263210179302; -0,3947818814234920, -0,3400535864346010.

DAFTAR ISI

	Halaman
HALAMAN JUDUL.....	i
PERNYATAAN KEASLIAN TULISAN	ii
PERSETUJUAN PEMBIMBING.....	iii
HALAMAN PENGESAHAN.....	iv
MOTTO DAN PERSEMBAHAN	v
PRAKATA.....	vi
ABSTRAK	viii
DAFTAR ISI.....	x
DAFTAR TABEL.....	xii
DAFTAR GAMBAR	xiii
DAFTAR LAMPIRAN.....	xiv
 BAB	
1. PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang Masalah.....	1
1.2 Rumusan Masalah	5
1.3 Tujuan	5
1.4 Manfaat Penelitian	6
2. TINJAUAN PUSTAKA	7
2.1 Oksidan dan Radikal Bebas	7
2.2 Antioksidan	8
2.3 Senyawa Analog Kalkon.....	11
2.4 Metode Kimia Komputasi.....	15
2.5 Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur Aktivitas (HKSA)	20
2.6 Analisis Statistik dalam HKSA.....	22
2.7 Deskriptor HKSA.....	24
2.8 Aktivitas Penghambatan 50% (IC ₅₀).....	29

3. METODE PENELITIAN.....	30
3.1 Lokasi Penelitian.....	30
3.2 Variabel Penelitian.....	30
3.3 Alat dan Bahan.....	30
3.4 Prosedur Penelitian.....	31
4. HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	36
4.1 Analisis Optimasi Geometri.....	36
4.2 Rekapitulasi Data Deskriptor Seri Senyawa Kalkon Kajian.....	38
4.3 Analisis Statistika HKSA Seri Senyawa Kalkon Kajian.....	44
4.4 Rekapitulasi Data Deskriptor Seri Senyawa Kalkon Eksplorasi.....	50
4.5 Prediksi Aktivitas Antioksidan Seri Senyawa Kalkon Eksplorasi.....	55
5. SIMPULAN DAN SARAN	57
5.1 Simpulan	57
5.2 Saran.....	58
DAFTAR PUSTAKA	59
LAMPIRAN.....	63

DAFTAR TABEL

Tabel	Halaman
2.1 Seri senyawa analog 2,4,5-trimetoksikalkon dan harga Log 1/IC ₅₀ yang diuji menggunakan DPPH	13
2.2 Seri senyawa kalkon eksplorasi	14
2.3 Koefisien korelasi	23
4.1 Perbandingan panjang ikatan struktur senyawa analog kalkon hasil optimasi geometri dengan metode DFT B3LYP 6-311G dan metode MP2	37
4.2 Hasil perhitungan deskriptor sterik seri senyawa kalkon kajian.....	39
4.3 Hasil perhitungan deskriptor hidrofobik seri senyawa kalkon kajian.....	41
4.4 Hasil perhitungan deskriptor elektronik seri senyawa kalkon kajian.....	43
4.5 Korelasi antar variabel	45
4.6 Model persamaan HKSA hasil analisis.....	47
4.7 Nilai koefisien persamaan HKSA hasil analisis	47
4.8 Data log 1/IC ₅₀ prediksi dan uji PRESS	48
4.9 Hasil perhitungan deskriptor sterik seri senyawa kalkon eksplorasi	51
4.10 Hasil perhitungan deskriptor hidrofobik seri senyawa kalkon eksplorasi	52
4.11 Hasil perhitungan deskriptor elektronik seri senyawa kalkon eksplorasi	54
4.12 Hasil prediksi aktivitas antioksidan seri senyawa eksplorasi	55

DAFTAR GAMBAR

Gambar	Halaman
2.1 Gambar struktur dasar senyawa kalkon	12
2.2 Gambar struktur dasar 2,4,5-trimetoksikalkon	12
2.3 Gambar alur sintesis 2,4,5-trimetoksikalkon	13
2.4 Diagram alir untuk perhitungan komputasi	16
4.1 Struktur Senyawa 2,4,5-trimetoksikalkon.....	37
4.2 Hubungan antara aktivitas antioksidan hasil eksperimen (Log 1/IC ₅₀ eksperimen) dengan aktivitas antioksidan prediksi (Log 1/IC ₅₀ prediksi)	50

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran	Halaman
1. <i>Gaussian Output File</i> Optimasi Struktur Metode DFT B3LYP 6-311G	63
2. <i>Gaussian Output File</i> Optimasi Struktur Metode MP2	76
3. Visualisasi Struktur Senyawa Kalkon Hasil Optimasi Geometri.....	85
4. <i>Gaussian Output File</i> Perhitungan Energi HOMO-LUMO.....	86
5. <i>Gaussian Output File</i> Perhitungan Potensial Ionisasi (IPs).....	104
6. Visualisasi Perhitungan Deskriptor Sterik	114
7. Visualisasi Perhitungan Deskriptor Hidrofobik	115
8. Visualisasi Perhitungan Deskriptor Polarisabilitas	116
9. Hasil Analisis Regresi Multilinear IBM SPSS 21.....	117

BAB 1

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Perkembangan zaman dewasa ini telah membuat sebagian besar masyarakat mengalami perubahan pola hidup. Dalam hal pola makan, sebagian besar masyarakat lebih memilih makanan cepat saji. Pola makan yang seperti ini, dapat menyebabkan munculnya beragam penyakit, seperti kanker, diabetes mellitus, aterosklerosis, katarak, dan penyakit jantung koroner (Rohmatussolihat, 2009). Meningkatnya jumlah penggunaan kendaraan bermotor serta aktivitas industri juga merupakan penyumbang polusi udara yang signifikan terhadap lingkungan. Udara yang tercemar ini jika kita hirup akan masuk ke dalam tubuh dan mengakibatkan timbulnya radikal bebas. Keberadaan radikal bebas yang bersifat sangat reaktif dan tidak stabil dalam tubuh dapat mengakibatkan kerusakan seluler, jaringan dan genetik (mutasi).

Telah banyak dilakukan penelitian mengenai radikal bebas. Hal ini dikarenakan sebagian besar penyakit disebabkan oleh adanya reaksi radikal bebas yang berlebihan di dalam tubuh. Radikal bebas tersebut dapat mengoksidasi asam nukleat, protein, lemak bahkan DNA sel dan menginisiasi timbulnya penyakit degeneratif (Leong dan Shui, 2002). Untuk mengatasi kelebihan senyawa radikal bebas dalam tubuh, maka dibutuhkan suatu senyawa yang mampu menangkal aktivitas radikal bebas tersebut. Antioksidan adalah zat yang dapat menunda dan

mencegah terjadinya reaksi antioksidasi radikal bebas dalam oksidasi lipid (Kochhar dan Rossell, 1990).

Pada dasarnya, tubuh dapat menghasilkan antioksidan atau biasa disebut dengan antioksidan endogen. Contoh dari antioksidan endogen antara lain superoksida dismutase (SOD), katalase, dan peroksidase. Akan tetapi, apabila jumlah radikal bebas terus bertambah sedangkan antioksidan endogen jumlahnya tetap, maka kelebihan radikal bebas tidak dapat dinetralkan. Akibatnya radikal bebas akan bereaksi dengan komponen sel dan menimbulkan kerusakan sel (Arnelia, 2002). Oleh karena itu, diperlukan antioksidan dari luar tubuh (antioksidan eksogen). Antioksidan eksogen dapat diperoleh dari konsumsi makanan sehari-hari, terutama sayur-sayuran, buah-buahan atau dapat berupa obat-obatan (suplemen). Menurut Atun (2005), senyawa-senyawa bioaktif yang dapat digunakan sebagai antioksidan adalah senyawa golongan fenol seperti flavonoid, oligoresveratrol, maupun asam fenolat.

Flavonoid termasuk senyawa fenolik alam yang potensial sebagai antioksidan dan mempunyai bioaktivitas sebagai obat. Senyawa-senyawa ini dapat ditemukan pada batang, daun, bunga, dan buah. Flavonoid dalam tubuh manusia berfungsi sebagai antioksidan sehingga sangat baik untuk pencegahan kanker (Waji dan Sugrani, 2009).

Kalkon (trans-1,3-diaril-2-propena-1-on) merupakan salah satu senyawa flavonoid, yaitu senyawa yang kerangka karbonnya terdiri atas gugus C6-C3-C6. Kalkon adalah aglikon flavonoid yang pertama kali terbentuk dalam biosintesis semua varian flavonoid melalui jalur prazat dari alur 'sikimat' dan alur 'asetat

malonat'. Kalkon umumnya terdapat dalam tanaman yang termasuk keluarga *Heliantheaetribae*, *Coreopsidinae*, dan *Compositae* (Markham, 1988: 1).

Kalkon dan turunannya telah menarik banyak perhatian karena banyaknya potensi aplikasi farmakologi. Senyawa ini telah ditunjukkan memiliki spektrum yang luas dari aktivitas farmakologi. Perubahan struktur pada kalkon dan turunannya telah menawarkan keragaman yang tinggi dan berguna untuk pengembangan agen obat baru yang memiliki peningkatan potensi dan toksisitas yang lebih rendah. Sintesis kalkon dan turunannya memiliki aktivitas farmakologi yang penting (Rahman, 2011). Shenvi *et al.* (2013) telah melakukan sintesis terhadap 20 senyawa turunan kalkon dan menemukan senyawa turunan yang memiliki aktivitas antioksidan yang baik. Diduga, masih terdapat senyawa turunan kalkon yang memiliki aktivitas yang baik dan belum disintesis. Oleh karena itu, perlu dilakukan prediksi senyawa baru menggunakan pendekatan kimia komputasi.

Proses mendesain obat baru merupakan proses panjang dan kompleks. Hal ini menjadi tantangan bagi peneliti untuk menghasilkan strategi dan upaya efektif dan ekonomis untuk penemuan obat baru. Salah satu strategi yang banyak dikembangkan untuk desain molekul obat baru adalah pemanfaatan metode kimia komputasi (*computational chemistry*). Desain obat (*drugs design*) adalah proses iterasi yang dimulai dengan penentuan senyawa yang menunjukkan sifat biologi yang penting dan diakhiri dengan langkah optimasi. Sebelum memasuki tahap yang lebih luas mengenai proses biokimia, hipotesis desain obat pada umumnya didasarkan pada pengujian kemiripan struktural dan perbedaan antara molekul

aktif dan tak aktif. Untuk itu dikembangkan pendekatan teoritis yang dapat menghitung secara kuantitatif hubungan antara struktur senyawa terhadap perubahan aktivitas biologis (Pranowo, 2011: 87).

Aplikasi hubungan kuantitatif struktur aktivitas dalam bidang kimia medisinal adalah dalam rangka mendukung riset untuk menemukan senyawa obat baru yang memiliki efektivitas yang relatif lebih baik. Menurut Tahir (2003), untuk dapat menemukan senyawa antioksidan baru perlu dikembangkan desain molekul baik dengan cara sintesis langsung maupun percobaan dengan pendekatan pemodelan menggunakan konsep-konsep kimia komputasi. Salah satu aplikasi kimia komputasi yang dapat diterapkan adalah kajian *Quantitative Structure-Activity Relationship* (QSAR) atau hubungan kuantitatif struktur aktivitas (HKSA). Kajian ini mempelajari korelasi secara kuantitatif antara struktur molekul dan nilai aktivitas biologis yang terukur secara eksperimen.

Dalam penelitian ini, dikaji senyawa analog kalkon beserta data aktivitas penghambatan 50% (IC_{50}) hasil eksperimen yang telah dilakukan oleh Shenvi *et al.* pada tahun 2013. Data eksperimen digunakan sebagai pembanding dan bahan kajian untuk memperoleh persamaan HKSA. Nilai aktivitas penghambatan 50% (IC_{50}) senyawa turunan kalkon merupakan dasar prediksi dari aktivitas senyawa baru yang berkhasiat sebagai antioksidan. Digunakan deskriptor sterik, deskriptor hidrofobik dan deskriptor teoritik untuk menentukan persamaan HKSA yang baik sehingga dapat digunakan untuk meramalkan aktivitas penghambatan 50% (IC_{50}) dari senyawa baru hasil modifikasi. Perhitungan dilakukan menggunakan metode

DFT dengan basis sets 6-311G. Untuk mendapatkan persamaan HKSA, digunakan analisis regresi multilinear menggunakan metode *backward*.

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang di atas, rumusan masalah pada penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Apa saja deskriptor yang mempengaruhi aktivitas antioksidan senyawa analog kalkon?
2. Bagaimana model persamaan HKSA senyawa analog kalkon terhadap aktivitas antioksidan menggunakan analisis regresi multilinear?
3. Bagaimana hasil prediksi aktivitas antioksidan dari senyawa baru hasil modifikasi analog kalkon?

1.3 Tujuan

Berdasarkan permasalahan yang ada, maka penelitian ini bertujuan untuk:

1. Menentukan deskriptor yang mempengaruhi aktivitas antioksidan senyawa analog kalkon.
2. Menentukan model persamaan HKSA senyawa analog kalkon terhadap aktivitas antioksidan menggunakan metode analisis regresi multilinear.
3. Menentukan harga prediksi aktivitas penghambatan 50% (IC_{50}) dari senyawa baru hasil modifikasi analog kalkon.

1.4 Manfaat Penelitian

Manfaat yang ingin diperoleh dari penelitian ini adalah:

1. Memberikan informasi tentang deskriptor yang mempengaruhi aktivitas antioksidan senyawa analog kalkon.
2. Memberikan informasi tentang model persamaan HKSA senyawa analog kalkon terhadap aktivitas antioksidan menggunakan metode analisis regresi multilinear.
3. Memberikan informasi tentang prediksi aktivitas penghambatan 50% (IC_{50}) senyawa baru hasil modifikasi analog kalkon.

BAB 2

TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Oksidan dan Radikal Bebas

Radikal bebas adalah suatu atom, gugus, atau molekul yang memiliki satu atau lebih elektron yang tidak berpasangan pada orbit paling luar, termasuk atom hidrogen, logam-logam transisi, dan molekul oksigen. Adanya elektron tidak berpasangan ini, menyebabkan radikal bebas secara kimiawi menjadi sangat aktif. Radikal bebas dapat bermuatan positif (kation), negatif (anion), atau tidak bermuatan (Gutteridge dan Halliwell, 2000).

Menurut Suryohudoyo (1993) dalam kepustakaan kedokteran, pengertian oksidan dan radikal bebas (*free radicals*) sering disamakan karena keduanya memiliki sifat-sifat yang mirip. Sifat radikal bebas yang mirip dengan oksidan terletak pada kecenderungannya untuk menarik elektron. Oksidan dalam pengertian ilmu kimia adalah senyawa penerima elektron (*electron acceptor*), yaitu senyawa-senyawa yang dapat menarik elektron. Oksidan dapat mengganggu integritas sel karena dapat bereaksi dengan komponen-komponen sel yang penting untuk mempertahankan kehidupan sel, baik komponen struktural (misalnya molekul-molekul penyusun membran) maupun komponen-komponen fungsional (misalnya enzim-enzim dan DNA).

2.2 Antioksidan

Antioksidan adalah zat yang mampu menunda, memperlambat atau mencegah proses oksidasi (Schuler, 1990: 99). Namun dalam arti biologis, pengertian antioksidan didefinisikan lebih luas, yaitu merupakan senyawa-senyawa yang dapat meredam dampak negatif oksidan, termasuk enzim-enzim dan protein-protein pengikat logam. Dalam arti khusus, antioksidan adalah zat yang dapat menunda atau mencegah terjadinya reaksi antioksidasi radikal bebas dalam oksidasi lipid (Kochhar dan Rossell, 1990: 20).

Aktivitas antioksidan dapat dipengaruhi oleh adanya ikatan rangkap, hidrogen alilik, dan benzik. Senyawa-senyawa bioaktif yang dapat digunakan sebagai antioksidan adalah senyawa golongan fenol seperti flavonoid, oligoresveratrol, maupun asam fenolat (Atun, 2005).

Rajalakshmi dan Narasimhan (1996: 67-70) menggolongkan antioksidan menjadi tiga tipe yaitu :

1. Antioksidan primer

Senyawa-senyawa yang berfungsi sebagai antioksidan primer mampu memutus rantai reaksi pembentukan radikal bebas dengan memberikan ion hidrogen atau elektron pada radikal bebas sehingga menjadi produk yang stabil. Senyawa yang digolongkan sebagai antioksidan primer adalah kelompok senyawa polifenol, asam askorbat (vitamin C), kelompok senyawa asam galat, BHT, BHA, TBHQ, PG, dan tokoferol.

2. Antioksidan Sinergis

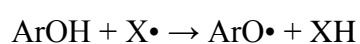
Antioksidan sinergis dapat diklasifikasikan sebagai penangkap oksigen dan khelator. Fungsi sinergis dengan berbagai mekanisme. Mereka mungkin berperan sebagai donor hidrogen untuk radikal fenoksil, sehingga menghasilkan antioksidan primer. Penangkap Oksigen seperti asam askorbat, askorbil palmitat, dan sulfit bereaksi dengan oksigen bebas dan menghapusnya dalam sistem tertutup. Khelator seperti asam EDTA, asam sitrat, dan fosfat bukan antioksidan, tetapi mereka memiliki efektivitas tinggi sebagai sinergis dengan antioksidan primer maupun penangkap oksigen. Elektron tak berpasangan dalam struktur molekulnya mempromosikan proses khelasi.

3. Antioksidan Sekunder

Antioksidan sekunder berfungsi untuk mencegah terbentuknya radikal bebas, menginaktifkan singlet oksigen, menyerap radiasi ultraviolet dan bekerja sinergis dengan antioksidan primer. Senyawa yang digolongkan sebagai antioksidan sekunder adalah asam tiodipropionat, dilauril dan distearil ester.

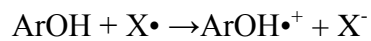
Menurut Urbaniak *et al.* (2012), ada empat mekanisme antioksidan yang dikenal untuk menggambarkan reaksi antioksidan, yaitu: mekanisme transfer atom hidrogen, mekanisme transfer elektron tunggal, mekanisme transfer elektron tunggal diikuti oleh transfer proton, dan mekanisme proton tersambung kehilangan transfer elektron.

(1) Mekanisme Transfer Atom Hidrogen (*Hydrogen Atom Transfer*)



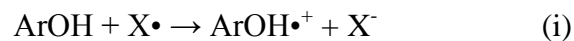
Pada mekanisme ini, antioksidan bereaksi secara langsung dengan radikal bebas yang dinetralkan, dan terbentuk radikal antioksidan.

(2) Mekanisme Transfer Elektron Tunggal (*Single Electron Transfer*)



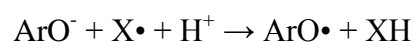
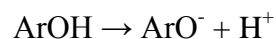
Pada mekanisme ini, molekul antioksidan fenolik bereaksi dengan radikal bebas kationik dari antioksidan fenolik dan bentuk anion dari radikal.

(3) Mekanisme Transfer Elektron Tunggal diikuti oleh Transfer Proton (*Single Electron Transfer followed by Proton Transfer*)



Mekanisme ini adalah reaksi dua langkah. Pada langkah pertama molekul antioksidan fenolik bereaksi dengan radikal bebas sehingga terbentuk radikal kationik dari antioksidan fenolik dan bentuk anion dari radikal. Reaksi ini merupakan tahapan termodinamika yang penting dalam mekanisme dua langkah ini. Pada langkah kedua bentuk radikal kationik dari antioksidan fenolik terurai menjadi proton radikal dan fenolik.

(4) Mekanisme Proton tersambung kehilangan Transfer Elektron (*Sequential Proton Loss Electron Transfer*)



Mekanisme ini juga terdiri dari dua langkah reaksi. Pada langkah pertama antioksidan fenolik terdisosiasi menjadi bentuk anionik dan kationik. Anionik

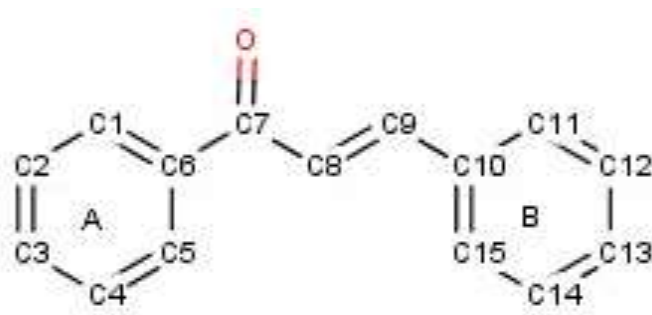
dari fenolik antioksidan kemudian bereaksi dengan radikal bebas. Dalam reaksi ini bentuk radikal antioksidan fenolik dan molekul netral muncul.

2.3 Senyawa Analog Kalkon

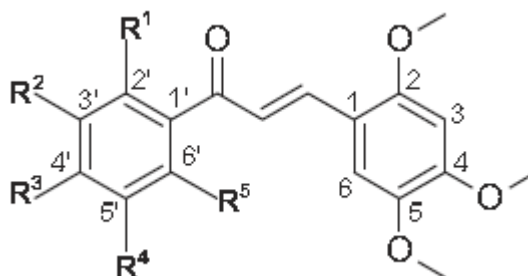
Kalkon dikenal sebagai intermediet untuk sintesis berbagai macam senyawa heterosiklik (Prashar *et al.*, 2012). Kalkon (trans-1,3-diaril-2-propen-1-on) merupakan produk biosintesis dari jalur sikimat, dari keluarga flavonoid rantai terbuka dan isoflavonoid, yang berlimpah dalam tanaman yang dapat dimakan. Kalkon juga merupakan prekursor penting dalam sintesis banyak senyawa heterosiklik biologis penting seperti benzothiazepin, pyrazolin, 1,4-diketon, dan flavon. Kalkon dan turunannya telah menarik banyak perhatian karena berbagai aplikasi farmakologis. Mereka telah diketahui memiliki banyak aktivitas farmakologi diantaranya, antimalaria, antikanker, antiprotozoal (antileishmanial dan antitrypanosomal), anti-inflamasi, antibakteri, antifilarial, antijamur, antimikroba, larvisida, antikonvulsan, antioksidan serta dilaporkan juga memiliki aktivitas penghambatan enzim, terutama mamalia alpha-amilase, siklo-oksigenase (COX), monoamin oksidase (MAO). Aktivitas anti radikal dari kalkon dan sejumlah senyawa terkait ditentukan dengan metode *chemiluminescence* menggunakan *scavenging* radikal peroksida $ROO^{\bullet} + ArOH \rightarrow ROOH + OAr^{\bullet}$ (Rahman, 2011).

Sivakumar *et al.* (2011) telah melakukan sintesis 25 turunan kalkon dan dievaluasi aktivitas antioksidannya serta analisis QSAR. Aktivitas antioksidan dievaluasi melalui empat metode yaitu penghambatan radikal superoksida,

penghambatan hidrogen peroksida, daya pengurangan, dan tes penghambatan radikal DPPH (*2,2-diphenyl-1-picrylhydrazyl free radical*). Dari hasil evaluasi tersebut diperoleh 2 senyawa turunan kalkon (3-tiometil, 7-hidroksikalkon dan 3-metoksi, 6-hidroksikalkon) yang memiliki aktivitas penghambatan radikal DPPH yang lebih baik dari BHT dan asam askorbat. Shenvi *et al.* (2013) juga telah berhasil melakukan sintesis senyawa analog 2,4,5-trimetoksikalkon kemudian dilakukan pengujian terhadap aktivitas antikanker dan aktivitas antioksidan. Pengujian aktivitas antioksidan dilakukan dengan beberapa metode, yaitu DPPH, NO (*nitric oxide scavenging*) and PhNHNH₂ (*phenyl hydrazineinduced haemolysis of erythrocytes*) assay.



Gambar 2.1 Gambar struktur dasar senyawa kalkon
Sumber: Rahman *et al.*, 2011



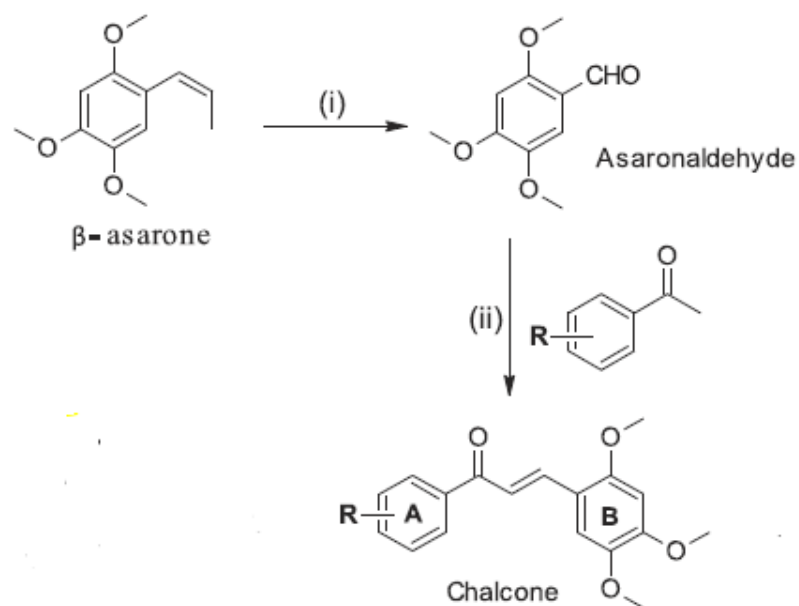
Gambar 2.2 Gambar struktur dasar 2,4,5-trimetoksikalkon (senyawa analog 2,4,5-trimetoksikalkon berdasarkan substitusi R_x dapat dilihat pada tabel 2.1)

Sumber: Shenvi *et al.*, 2013

Tabel 2.1 Seri senyawa analog 2, 4, 5-trimetoksikalkon dan harga IC₅₀ yang diuji menggunakan DPPH

Senyawa	R ₁	R ₂	R ₃	R ₄	R ₅	Log 1/IC ₅₀ (μg/ml)
1	OH	H	H	OH	H	-0.42373725
2	H	NO ₂	H	H	H	-0.63437649
3	H	OCH ₃	OH	H	H	-0.63447727
4	H	H	CH ₃	H	H	-0.63508611
5	H	H	Br	H	H	-0.63528264
6	H	H	OCH ₃	H	H	-0.642860053
7	H	NO ₂	Cl	H	H	-0.650501795
8	H	H	Cl	H	H	-0.662096445
9	H	H	F	H	H	-0.673020907
10	H	H	NO ₂	H	H	-0.677059177
11	OCH ₃	H	OCH ₃	H	OCH ₃	-0.700963178
12	OH	H	H	Cl	H	-0.705264862
13	H	CF ₃	H	H	H	-0.712060142

Sumber: Shenvi *et al.*, 2013

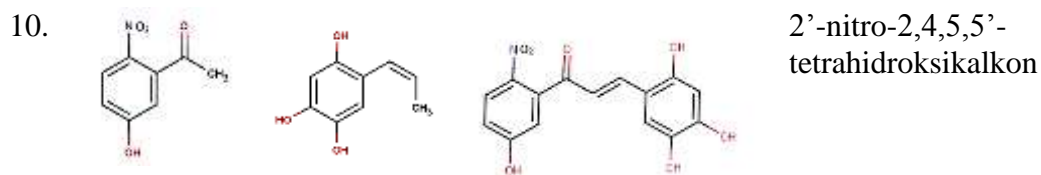


Gambar 2.3 Gambar alur sintesis 2,4,5-trimetoksikalkon

Sumber: Shenvi *et al.*, 2013

Tabel 2.2 Seri senyawa kalkon eksplorasi

No.	Cincin A	Cincin B	Senyawa	Nama Senyawa
1.				2,4,5,2',5'- pentametoksikalkon
2.				2'-hidroksi- 2,4,5,5'- tetrametoksikalkon
3.				2'-kloro-5'- hidroksi-2,4,5- trimetoksikalkon
4.				2'-hidroksi-5'- nitro-2,4,5- trimetoksikalkon
5.				2'-nitro-5'- hidroksi-2,4,5- trimetoksikalkon
6.				2',5'-dimetoksi- 2,4,5- trihidroksikalkon
7.				5'-metoksi- 2,4,5,2'- tetrahidroksikalkon
8.				2'-kloro-2,4,5,5'- tetrahidroksikalkon
9.				5'-nitro-2,4,5,2'- tetrahidroksikalkon



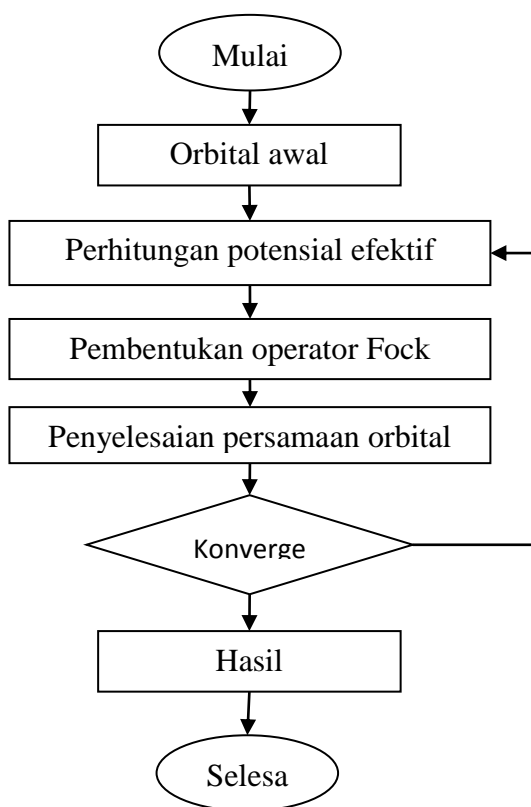
2.4 Metode Kimia Komputasi

Dalam eksperimen komputer, model masih tetap menggunakan hasil dari pakar kimia teori, tetapi perhitungan dilakukan dengan komputer berdasarkan atas suatu algoritma yang dituliskan dalam bahasa pemrograman. Keuntungan metode ini adalah dimungkinkannya menghitung sifat molekul yang kompleks dan hasil perhitungannya berkorelasi secara signifikan dengan data eksperimen. Kimia komputasi menjelaskan sistem kimia pada variasi skala ukuran yaitu skala kuantum, skala atom atau molekul, skala meso dan jembatan antar skala.

Perlu diingat bahwa tidak semua aspek kimia dapat diselesaikan secara eksak. Hampir setiap aspek kimia dijelaskan secara kualitatif atau kuantitatif melalui prosedur pendekatan komputasi. Perhitungan kualitatif atau pendekatan kuantitatif baru dapat memberikan pengetahuan yang berguna dalam ilmu kimia apabila sifat fisika atau kimia suatu senyawa dapat dijabarkan dari data yang dihitung oleh komputer. Sebagai contoh adalah penjabaran *eigenvalue*. *Eigenvalue* digambarkan sebagai energi orbital. Energi orbital adalah energi yang diperlukan untuk mengeluarkan elektron dari orbital molekul. Oleh karena itu, data *eigenvalue* dapat digunakan untuk menentukan besarnya energi HOMO/LUMO dari suatu molekul.

Metode kimia komputasi dapat dibedakan menjadi 2 bagian besar yaitu metode mekanika molekuler dan metode struktur elektronik yang terdiri dari *ab*

initio, *density functional theory* (DFT) dan semiempiris. Metode yang sekarang berkembang pesat adalah teori kerapatan fungsional dan post SCF (Pranowo, 2011: 17).



Gambar 2.4 Diagram alir untuk perhitungan kimia komputasi
Sumber: Pranowo, 2011: 45

2.4.1 *Density Functional Theory* (DFT)

Ada banyak bidang dalam ilmu fisika dan teknik di mana kunci kemajuan ilmu pengetahuan adalah memahami dan mengendalikan sifat materi pada tingkat atomik dan molekul. Teori fungsi kerapatan (*density functional theory*) adalah

pendekatan yang sukses secara fenomenal untuk menemukan penyelesaian persamaan fundamental yang menggambarkan perilaku kuantum atom dan molekul, persamaan Schrödinger, dalam nilai praktis. Pendekatan ini berkembang secara pesat dari spesialisasi seni prediksi yang dipraktekkan oleh sejumlah kecil fisikawan dan kimiawan pada potongan teori mekanika kuantum sebagai alat yang digunakan secara regular oleh banyak peneliti dalam kimia, fisika, ilmu material, teknik kimia, geologi dan disiplin ilmu lainnya (Sholl *et al.*, 2009: 1). Metode DFT mirip dengan *ab initio*, keduanya merupakan metode non-empirik, artinya tanpa memerlukan data dari hasil penelitian. Oleh karena itu metode DFT dapat digunakan pada berbagai molekul yang belum dikenal. Kualitas hasil penelitian dari DFT juga sepadan dengan hasil penelitian menggunakan metode *ab initio* (Ramachandran *et al.*, 2008: 192).

Mengingat fakta bahwa DFT lebih baru dari metode *ab initio* lain, sangat mungkin bahwa kebijaksanaan konvensional dimana teknik yang terbaik akan bergeser dengan penciptaan teknik-teknik baru dalam waktu yang tidak jauh. Metode B3LYP dengan *basis sets* 6 31*G atau lebih tinggi adalah pilihan untuk perhitungan beberapa molekul organik (Young, 2001: 46).

Menurut Jensen (2007: 232) dasar dari DFT adalah bukti yang ditunjukkan oleh Hohenberg dan Kohn bahwa energi elektron dalam keadaan *groudstate* secara keseluruhan ditentukan oleh kerapatan elektron. Dengan kata lain ada persesuaian antara kerapatan elektron dalam suatu sistem dengan energi sistem. Pentingnya teorema Hohenberg-Kohn ini mungkin bisa diilustrasikan dengan cara membandingkannya dengan pendekatan fungsi gelombang (pendekatan *ab initio*).

Fungsi gelombang untuk sistem yang memiliki sejumlah N elektron maka fungsinya memiliki variabel sebanyak $4N$, tiga koordinat spasial dan satu koordinat *spin* untuk tiap elektron. Sementara kerapatan elektron merupakan kuadrat dari fungsi gelombang, mengintegrasikan N dikurangi 1 ($N - 1$) koordinat elektron, dan tiap kerapatan *spin*-nya hanya bergantung pada tiga koordinat spasial.

Pendekatan kimia komputasi dalam memprediksi sifat suatu obat, baru-baru ini juga mulai marak menggunakan DFT. Pendekatan berdasarkan pada tingkat elektron mengindikasikan kecenderungan bahwa DFT cocok diaplikasikan dalam perhitungan kimia komputasi untuk memprediksikan sifat suatu antioksidan. Perhitungan dilakukan menggunakan *unrestricted* untuk mendeskripsikan polarisasi spin dalam molekul yang dibutuhkan dalam perhitungan DFT tersebut (Marcovic *et al.*, 2013).

2.4.2 *Basis Set*

Dalam penelitian menggunakan metode kimia komputasi, perhitungan dilakukan dengan menyertakan *basis set*, *basis set* dalam ilmu kimia adalah kumpulan fungsi matematika yang digunakan untuk menyusun gugus orbit suatu molekul. Kumpulan fungsi-fungsi matematika yang ada disusun dalam kombinasi linier dengan menyertakan nilai koefisien didalamnya. Fungsi yang digunakan umumnya adalah gugus-gugus orbit atom penyusun molekul tersebut. Ada 2 tipe fungsi basis yang biasa digunakan dalam perhitungan struktur elektronik, yakni *slater type orbitals* (STO) dan *gaussian type orbital* (GTO). Untuk tipe GTO memiliki kesulitan dalam merepresentasikan sifat-sifat pada daerah di dekat inti

atom. Dalam penggunaannya faktor yang terpenting dari *basis set* adalah banyaknya fungsi yang dipakai, baik itu STO maupun GTO. Fungsi STO dan GTO bisa saja digabungkan dalam satu basis set untuk efisiensi waktu dan ketepatan perhitungan.

Basis set diklasifikasikan menurut jumlah fungsi primitifnya dan cara pembentukan fungsi *gaussian* terluaskan. *Basis set* minimal harus berisi satu fungsi basis untuk mewakili masing-masing (kulit dalam dan kulit valensi) orbital atomik. *Basis set* terkecil disebut sebagai *basis set* minimum yang tersusun atas beberapa fungsi minimum yang dibutuhkan untuk dapat menyatakan konfigurasi elektron pada setiap atom. *Basis set* yang besar dapat terdiri dari puluhan hingga ratusan fungsi untuk setiap atomnya.

Basis set 3-21G merupakan basis set dengan valensi yang terbagi. Pada basis set ini orbital-orbital sekitar inti merupakan perluasan dari tiga PGTO. Bagian dalam dari orbital valensinya adalah perluasan dari dua PGTO, dan bagian luar dari orbital valensi direpresentasikan oleh satu buah PGTO. Basis set 6-311G juga merupakan basis set dengan valensi terbagi dimana orbital-orbitalnya sekitar intinya merupakan perluasan dari enam PGTO. Valensinya terbagi ke dalam tiga fungsi, yang direpresentasikan oleh tiga, satu, dan satu PGTO berturut-turut (Jensen, 2007: 193 - 203).

Dalam penelitian ini, digunakan *basis set* 6-311G yang merujuk pada penelitian yang telah dilakukan Lu *et al.* (2005). Lu melakukan analisis menggunakan kimia komputasi dan eksperimen laboratorium dengan hasil yang memuaskan. Analisis kimia komputasi dilakukan dengan optimasi menggunakan

metode AM1 dan perhitungan nilai deskriptor menggunakan metode DFT. Tahap optimasi dan perhitungan nilai deskriptor dihitung menggunakan *basis set* 6-311G. Diperoleh harga R grafik sebesar 0,99643.

2.5 Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas (HKSA)

Analisis hubungan kuantitatif dari struktur dan aktivitas (HKSA) merupakan suatu kajian untuk mengembangkan hubungan struktur kimia dengan aktivitas biologis (utamanya aktivitas obat) dari struktur suatu seri senyawa. Asumsi mendasar dari HKSA adalah bahwa terdapat hubungan kuantitatif antara sifat mikroskopis (struktur molekul dan sifat makroskopis/empiris (aktivitas biologis) dari suatu molekul (Rozaq, 2008). Young (2001: 243) menuliskan salah satu keuntungan dari analisis HKSA dalam teknik pemodelan molekul adalah dapat mengetahui perhitungan sistem biologi yang kompleks tanpa memerlukan banyak informasi dari segi ikatannya. Penggunaan kajian HKSA dapat dilakukan sebagai pendekatan awal untuk penyelesaian kemungkinan molekul dengan prediksi yang lebih akurat.

Mayuresh *et al.* (2010) menyebutkan keuntungan HKSA antara lain:

1. Mengukur hubungan antara struktur dan aktivitas memberikan pemahaman tentang pengaruh struktur pada aktivitas, yang mungkin tidak langsung diperoleh pada sejumlah besar data yang diturunkan.

2. Potensial untuk membuat prediksi yang mengarahkan sintesis analog baru.

Dapat dilakukan interpolasi, tetapi tidak menggunakan ekstrapolasi di luar jangkauan kumpulan data.

Hubungan Kuantitatif Struktur Aktivitas (HKSA) didasarkan pada pengetahuan bahwa zat dengan struktur kimia yang mirip (analog) mungkin memiliki aktivitas biologis yang mirip pula. HKSA adalah perbandingan kuantitatif dari struktur senyawa kimia dan efek mereka dalam sistem biologi. Dari asumsi ini, pengaruh struktur kimia pada sistem biologi dikombinasikan dengan asumsi bagaimana perubahan struktur kimia mempengaruhi besar dan jenis efek biologis. Apabila diketahui efek toksik suatu senyawa pada sistem biologis, senyawa analog yang tidak diketahui dengan struktur kimia terkait dapat diperkirakan (Hansen, 2004: 15).

Kajian HKSA yang utama adalah menentukan struktur kimia yang berpengaruh terhadap aktivitas biologis serta menunjukkan hubungan kuantitatif antara sifat-sifat molekul dengan aktivitas biologisnya, sehingga diperoleh model persamaan matematis HKSA. Persamaan ini selanjutnya dapat digunakan untuk memprediksi aktivitas senyawa baru, yang memiliki aktivitas biologis yang diduga relatif lebih baik. Secara umum HKSA menyatakan bentuk persamaan linier sebagai berikut :

$$\text{Aktivitas biologi} = \text{tetapan} + (C_1 \cdot P_1) + (C_2 \cdot P_2) + (C_3 \cdot P_3) + \dots$$

P_i adalah parameter yang dihitung untuk setiap molekul dalam. C_i merupakan koefisien yang dihitung dengan variasi fitting dalam parameter dan aktivitas biologis.

Persamaan HKSA merupakan model linear yang menyatakan kaitan antara variasi aktivitas biologi dengan variasi sifat yang dihitung (atau diukur) untuk suatu seri senyawa tertentu (Pranowo, 2011: 88 - 90).

2.6 Analisis Statistik dalam HKSA

Dalam kajian HKSA terdapat banyak metode pengolahan statistika yang dapat dipergunakan untuk memberikan hasil pembahasan yang memuaskan. Metode dasar yang sering digunakan adalah metode regresi multilinier yang merupakan suatu metode yang mengkorelasikan beberapa variabel bebas dengan variabel tergantung (Kubinyi, 1993: 91). Metode statistik yang banyak digunakan dalam kajian HKSA adalah berupa teknik-teknik untuk pengolahan statistik sehingga diperoleh hasil statistika yang akurat.

2.6.1 Korelasi antar variabel

Analisis korelasi bertujuan untuk mengukur kekuatan asosiasi (hubungan) linear antara dua variabel. Korelasi tidak menunjukkan hubungan fungsional atau dengan kata lain analisis korelasi tidak membedakan antara variabel dependen dan variabel independen (Ghozali, 2013: 96). Korelasi antar variabel digunakan untuk melihat bagaimana hubungan antar variabel. Hal ini dilakukan terutama dengan melihat tingkat pengaruh tiap-tiap deskriptor molekuler terhadap aktivitas antioksidan. Korelasi akan semakin kuat apabila memiliki nilai yang mendekati -1 atau 1.

Sudjana (2005: 369) menyebutkan bahwa harga r bergerak antara -1 dan +1 dengan tanda negatif menyatakan adanya korelasi tak langsung atau korelasi

negative dan tanda positif menyatakan korelasi langsung atau korelasi positif. Batas-batas nilai koefisien korelasi diinterpretasikan sebagai berikut (Nugroho, 2005: 36):

Tabel 2. 3 koefisien korelasi	
Nilai Interval	Kriteria
0,00 – 0,20	Sangat lemah
0,21 – 0,40	Lemah
0,41 – 0,70	Kuat
0,71 – 0,90	Sangat kuat
0,91 – 0,99	Sangat kuat sekali
1.00	Sempurna

2.6.2 Analisa regresi multilinier

Dalam kajian HKSA analisa regresi multilinier menghubungkan variabel bebas (berupa parameter yang dipilih) dengan suatu variabel tidak bebas (aktivitas biologi). Rozaq (2008) menyatakan bahwa untuk pemilihan prediktor yang penting agar dihasilkan efek terhadap aktivitas biologis dalam mempelajari HKSA biasanya digunakan analisa regresi linier. Analisa regresi multiliner digunakan untuk mendapatkan persamaan matematis HKSA dan aktivitas biologi prediksi.

Parameter statistik yang dapat digunakan sebagai faktor uji adalah berupa nilai R (korelasi), R^2 (koefisien determinasi), dan SE (standar error). Koefisien korelasi, yang dinyatakan dengan r , merupakan ukuran kekuatan hubungan antara variabel tergantung (aktivitas antioksidan) dengan variabel bebas (deskriptor molekuler). Nilai r berjarak dari -1 hingga +1. Nilai -1 menandakan bahwa hubungan variabel bebas dan variabel tergantung negatif sempurna, sedangkan nilai +1 menyatakan hubungan positif sempurna. Jadi, jika r mendekati ± 1 , maka hubungan linier antara variabel bebas dan variabel tergantung semakin kuat. Jika $r = 0$, slope akan sama dengan nol, dan variabel bebas tidak dapat digunakan untuk

memprediksi variabel tergantung. Harga r dapat dihitung dengan rumus yang tertulis pada persamaan berikut:

$$r = \frac{\sum_{i=1}^n X_i Y_i - \left[\left(\sum_{i=1}^n X_i \right) \left(\frac{\sum_{i=1}^n Y_i}{n} \right) \right]}{\sqrt{\sum_{i=1}^n X_i^2 - \frac{\left(\sum_{i=1}^n X_i \right)^2}{n}}} \sqrt{\sum_{i=1}^n Y_i^2 - \frac{\left(\sum_{i=1}^n Y_i \right)^2}{n}}$$

Kadang-kadang dalam suatu set data, terdapat beberapa data di sekitar garis linier. Untuk mengukur data yang menyebar tersebut digunakan suatu perkiraan standard error (SE) seperti pada persamaan berikut:

$$S_{YIX} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2}{n - 2}}$$

dengan Y_i adalah nilai Y yang diteliti untuk nilai-nilai X_i dan \hat{Y}_i yang diberikan dalam data. *Standard error* (SE) merupakan nilai toleransi yang terjadi pada koefisien regresi prediksi. Nilai yang semakin kecil pada SE berarti nilai koefisien tidak mudah berubah (Wibowo, 2012: 126).

2.7 Deskriptor HKSA

Deskriptor HKSA memegang peranan penting dalam suatu kajian HKSA. Deskriptor merupakan parameter-parameter yang digunakan dalam model HKSA. Kajian HKSA menggunakan deskriptor untuk menjelaskan struktur dari masing-masing senyawa yang dikaji. Deskriptor-deskriptor yang digunakan dalam kajian ini dapat berupa deskriptor konstitusional, topologikal, elektrostatik, kimia kuantum, dan geometrik (Rozaq, 2008). Markovic *et al.* (2012) telah melakukan kajian mengenai aktivitas radikal bebas dari morin menggunakan deskriptor

elektronik dengan hasil yang memuaskan. Selain itu, Xue *et al.* (2013) juga menggunakan deskriptor elektronik untuk analisis aktivitas antioksidan 6 senyawa turunan kalkon dengan hasil yang baik. Dalam kajian HKSA, deskriptor sterik diterjemahkan dalam parameter topologi. Deskriptor elektronik merupakan deskriptor yang tidak kalah penting dalam kajian antioksidan. Hal tersebut didasarkan pada keterkaitan proses transfer elektron dengan mekanisme antioksidan dalam menangkap radikal bebas sangatlah kuat. Digunakan deskriptor hidrofobik karena parameter hidrofobik dapat digunakan sebagai rujukan dalam penelitian lanjutan secara eksperimental maupun penerapan dalam kajian biomedis.

2.7.1 Deskriptor Sterik

Parameter sterik merupakan turunan dari hubungan energi bebas linier atau pertimbangan geometri (Kubinyi, 1993: 21). Parameter sterik (topologi) didasarkan pada perhitungan molekuler graf. Perhitungan dilakukan dengan menyederhanakan molekul berdasarkan puncak/simpul (vertices) dan tepi/sisi (edges). Notasi G adalah grafik molekuler (G) yang berfungsi merepresentasikan senyawa kimia. G secara sederhana dianggap tidak bermasa dan terhubung oleh grafik yang terdiri atas kumpulan puncak $V(G)$ dan kumpulan tepi $E(G)$. Puncak adalah atom dan tepi adalah ikatan antar atom. Grafik molekuler menekankan bahwa senyawa organik yang berisi heteroatom dapat direpresentasikan dalam bentuk grafik. Dalam hal ini, grafik hanya menggambarkan konektivitas molekul dan tidak terpengaruh adanya heteroatom, jenis ikatan dan mengesampingkan ikatan hidrogen. Dalam penelitian ini, digunakan indeks Platt, indeks Wiener,

indeks Randic, indeks Balaban, indeks Harary, indeks Hyper-Wiener dan indeks Szaged (Rifai *et al.*, 2014). Parameter sterik juga mencakup refraktivitas molar suatu senyawa. Refraktivitas adalah kombinasi volume (MV) dan polarisabilitas dalam molekul, dan telah berhasil digunakan dalam banyak studi QSAR (Mayuresh *et al.*, 2010).

2.7.2 Deskriptor Hidrofobik

Parameter hidrofobik/hidrofilik adalah sifat yang sangat penting dalam aplikasi biomedis. Sebagai contoh aplikasinya adalah untuk memperkirakan distribusi obat dalam tubuh. Obat-obat yang bersifat hidrofobik dengan koefisien partisi tinggi akan terdistribusi pada komponen yang bersifat hidrofobik pula, misalnya lapisan lemak. Sedangkan obat-obat yang bersifat hidrofilik dengan koefisien partisi rendah akan terdistribusi pada kompartemen hidrofilik, misalnya serum darah. Dalam penelitian ini, digunakan deskriptor hidrofobik berupa Log P dan *Polar Surface Area (PSA)*.

Koefisien partisi oktanol/air yang dinyatakan dalam log P merupakan standar kuantitas untuk menentukan sifat hidrofobik/hidrofilik suatu molekul. Log P adalah indeks lipofilisitas, dan dinyatakan sebagai log (kelarutan dalam oktanol/kelarutan dalam air murni). Sehingga semakin tinggi nilai log P, lipofilisitas semakin tinggi. Lipofilisitas mengacu pada kemampuan dari senyawa kimia untuk larut dalam lemak, minyak, lemak, dan pelarut non-polar. Koefisien distribusi sebuah obat mempengaruhi seberapa mudah obat dapat mencapai target yang diinginkan dalam tubuh, seberapa kuat efek yang akan terjadi setelah mencapai target, dan berapa lama itu akan tetap dalam tubuh dalam kondisi aktif.

Log P adalah salah satu kriteria yang digunakan dalam kimia farmasi untuk menghitung efisiensi lipofilik, fungsi potensi. Sehingga, parameter log P memiliki fungsi mengevaluasi kualitas senyawa penelitian.

Baru-baru ini, pendekatan untuk memprediksi penyerapan telah dikembangkan dengan melibatkan kuantitas yang berasal dari permukaan molekul yang dikenal sebagai *polar surface area*. *Polar surface area* molekul didefinisikan sebagai daerah permukaan yang timbul dari atom oksigen atau nitrogen atau atom hidrogen yang terikat pada atom oksigen atau nitrogen. *Polar surface area* menunjukkan korelasi terhadap transportasi molekul melalui membran pasif, sehingga memungkinkan estimasi sifat pengangkutan obat. *Polar surface area* dalam kimia farmasi biasanya digunakan untuk optimalisasi kemampuan obat yang diserap oleh sel. Selain itu, luas permukaan kutub jelas berkaitan dengan kapasitas senyawa untuk membentuk ikatan hidrogen (Clark, 1999).

2.7.3 Deskriptor Elektronik

Penggunaan struktur elektronik sebagai prediktor dalam studi HKSA cenderung disukai karena dapat ditentukan secara teoritik dan hasil yang diperoleh cukup memuaskan. Dalam hal ini, metode kimia kuantum dapat digunakan untuk meminimalkan energi potensial dalam struktur molekul serta memperkirakan muatan atom, energi molekular orbital, dan deskriptor elektronik lainnya yang dapat menunjang studi HKSA. Dalam penelitian ini, digunakan deskriptor elektronik berupa energi HOMO, energi LUMO, selisih antara energi HOMO dan LUMO, serta potensi ionisasi (*ionization potential*). HOMO (*Highest Occupied*

Molecular Orbitals) adalah orbital tertinggi pada pita valensi yang ditempati elektron. Sedangkan LUMO (*Lowest Unoccupied Molecular Orbitals*) adalah orbital terendah pada pita konduksi yang tidak ditempati electron (Pamungkas *et al.*, 2013). Energi HOMO berhubungan langsung dengan potensial ionisasi dan karakterisis kerentanan molekul terhadap serangan elektrofil. Energi LUMO secara langsung berkaitan dengan afinitas elektron dan ciri kerentanan molekul terhadap serangan nukleofil. Baik energi HOMO maupun LUMO sangat penting dalam reaksi radikal. Selisih antara energi HOMO dan LUMO (celah HOMO-LUMO) penting dalam penentuan ukuran stabilitas molekul. Molekul dengan celah HOMO-LUMO yang besar berarti molekul tersebut memiliki stabilitas yang tinggi, sehingga memiliki reaktivitas yang rendah dalam reaksi-reaksi kimia (Karelson *et al.*, 1996).

Menurut Velkov (2009), apabila suatu radikal bebas bereaksi dengan suatu antioksidan, energi HOMO menjadi deskriptor yang penting untuk diperhitungkan. Energi HOMO yang tinggi memberikan kemampuan yang lebih kuat untuk memberikan elektron pada spesies yang lain. Interaksi antara sebuah orbital kosong dan sebuah pasangan elektron terjadi secara efektif antara sebuah HOMO dari suatu spesies dan sebuah LUMO dari spesies yang lain.

Potensial ionisasi (*ionization potential*) didefinisikan sebagai energi minimum yang diperlukan untuk menghilangkan elektron dari molekul terisolasi (atau atom) dalam keadaan dasar untuk membentuk suatu ion (Hoelz *et al.*, 2010). Parameter potensi ionisasi dapat berhubungan dengan jalur transfer elektron seperti yang ditunjukkan pada mekanisme penangkapan radikal bebas dimana

nilai potensial ionisasi yang rendah dapat mendukung proses transfer elektron dalam molekul.

Polarisabilitas atom merupakan kemudahan suatu molekul untuk membentuk dipol sesaat atau untuk mengimbangi suatu dipol. Polarisabilitas atom juga telah digunakan untuk menggambarkan reaktivitas Kimia (Karelson *et al.*, 1996).

2.8 Aktivitas Penghambatan 50% (IC₅₀)

Half maximal inhibitory concentration (IC₅₀) adalah ukuran efektivitas penghambatan suatu senyawa dalam fungsi biologis atau biokimia. Ukuran kuantitatif ini menunjukkan berapa banyak obat tertentu atau bahan lainnya (inhibitor) yang dibutuhkan untuk menghambat proses biologis tertentu (atau komponen proses, yaitu suatu enzim, sel, reseptor sel atau mikroorganisme) hingga setengahnya. Dengan kata lain, itu adalah setengah maksimal (50%) konsentrasi penghambatan (IC) dari suatu zat (50% IC, atau IC₅₀). Hal ini umumnya digunakan sebagai ukuran potensi antagonis obat dalam penelitian farmakologi (Burger, 1998 dalam Rifai, 2014).

BAB 3

METODE PENELITIAN

3.1 Lokasi Penelitian

Penelitian ini dilakukan di Laboratorium Jurusan Kimia FMIPA UNNES.

3.2 Variabel Penelitian

3.2.1 Variabel Bebas

Variabel bebas adalah variabel yang harganya divariasi. Dalam penelitian, variabel bebas adalah senyawa turunan kalkon dan jenis deskriptor.

3.2.2 Variabel Terikat

Variabel terikat adalah variabel yang menjadi titik pusat penelitian. Dalam penelitian, variabel terikat adalah $\text{Log } 1/\text{IC}_{50}$.

3.3 Alat dan Bahan

3.3.1 Perangkat Keras

Penelitian ini menggunakan komputer di laboratorium kimia komputasi jurusan kimia FMIPA UNNES. Adapun spesifikasi komputer yang digunakan adalah sebagai berikut:

1. *Processor Intel® Core™2 Quad CPU @2.66GHz 2.67 GHz.*
2. *Harddisk 250 GB.*

3. *Random Access Memory* (RAM) 4 GB.
4. Monitor HP 17 inchi.

3.3.2 Perangkat Lunak

Penelitian ini menggunakan sejumlah perangkat lunak dengan kegunaan sebagai berikut:

1. Sistem operasi Windows Vista™ Business 32-bit.
2. *Gaussian-09* digunakan untuk optimasi geometri struktur molekul serta perhitungan nilai deskriptor elektronik.
3. *MarvinBeans-6.0.0* yang dikeluarkan oleh ChemAxon digunakan Menghitung nilai deskriptor sterik dan hidrofobik.
4. *GaussView-3.07* digunakan untuk pemodelan struktur molekul.
5. *IBM SPSS 21* digunakan untuk analisis statistika dan menentukan persamaan HKSA.
6. *Microsoft Excel 2013* digunakan untuk rekapitulasi hasil perhitungan.

3.3.3 Bahan

Bahan kajian dalam penelitian ini adalah senyawa analog kalkon beserta data IC₅₀ yang telah diuji secara eksperimental oleh Shenvi *et al.* (2011) yang dapat dilihat pada Tabel 2.1.

3.4 Prosedur Penelitian

3.4.1 Menggambar Struktur Kimia Senyawa Analog Kalkon dan *Input File*

Struktur kimia senyawa analog kalkon yang digunakan dalam penelitian ini digambar menggunakan *software Gauss View-3.07*. Diawali dengan

menggambar struktur dasar yang tersaji dalam gambar pada Tabel 2.1, kemudian disubstitusi pada R_1 , R_2 , R_3 , R_4 , dan R_5 seperti pada Tabel 2.1. Langkah selanjutnya yaitu memilih metode perhitungan dan *basis sets*. Klik menu *Calculate*, kemudian pilih menu *Gaussian* maka akan muncul kotak dialog. Tetapkan *Job Type* pada *Optimization*, lanjutkan dengan memilih metode pada kotak dialog *Method*. Tetapkan metode pada *Ground State*, *DFT*, *Unrestricted*, dan *B3LYP*. Atur pula *basis sets* pada 6-311G, *charge* pada 0 dan spin pada *singlet*, kemudian klik tombol *Retain*. Simpan dengan cara klik menu *File*, kemudian pilih menu *Save*. Ketik nama *file* pada kotak *File name*, tetapkan *Files of type* pada *Gaussian input file (*.gjf, *.com)* dan *Save as* pada *Gaussian input file*, kemudian klik tombol *Save*.

3.4.2 Optimasi Geometri Struktur

Struktur sampel dioptimasi menggunakan *software Gaussian-09* dengan metode *Density Functional Theory (DFT) B3LYP* pada basis sets 6-311G. Kemudian deskriptor dihitung pada struktur geometri yang telah optimal menggunakan metode yang sama pada basis sets 6-311G (Markovic *et al.*, 2013). Struktur senyawa induk kalkon ($C_{18}H_{18}O_4$) juga dioptimasi menggunakan metode MP2 6-311G sebagai pembanding hasil optimasi.

Setelah dibuat *Gaussian input file (*.gjf)*, maka dapat dilakukan perhitungan menggunakan *software Gaussian-09*. Langkah awal yaitu membuka *file* dalam format *Gaussian input file (*.gjf)* dengan cara klik menu *File*, kemudian pilih menu *Open*. Seleksi *file Gaussian input file (*.gjf)* yang akan dilakukan perhitungan, kemudian klik tombol *Open*. Setelah informasi dari

Gaussian input file (.gjf)* terbaca pada *software Gaussian-09*, jalankan perhitungan dengan cara klik menu *File*, kemudian pilih menu *Load*. Sebelum perhitungan dimulai, muncul peringatan untuk menyimpan *file Gaussian output file (*.out)*. Tempatkan *Gaussian output file (*.out)* pada direktori yang diinginkan, kemudian klik tombol *Save*.

3.4.3 Perhitungan Nilai Deskriptor

Nilai deskriptor dihitung menggunakan *software MarvinBeans-6.0.0* dan *Gaussian-09*. Deskriptor sterik dan hidrofobik dihitung menggunakan *software MarvinBeans-6.0.0*. Langkah awal yaitu membuka *file Gaussian output file (*.out)* hasil optimasi menggunakan *software MarvinBeans-6.0.0*. dengan cara klik menu *File*, kemudian pilih menu *Open*. Klik menu *Calculate*, kemudian pilih deskriptor yang akan dihitung, kemudian klik tombol *Ok*.

Deskriptor elektronik dihitung menggunakan *software Gaussian-09*. Untuk menghitung energi HOMO-LUMO, langkah perhitungan yaitu membuka *Gaussian output file (*.out)* hasil optimasi pada *software GaussView-3.07* dengan *Job Type Frequency*. Atur pula *Guess Method* dengan memilih *Mix HOMO and LUMO* orbital dan menambahkan perintah *Pop=Reg* untu menampilkan *eigenvalues*. Potensial ionisasi dihitung dengan metode OVGF dan menambahkan perintah *Tran=Full* untuk menampilkan hasil perhitungan potensial ionisasi.

3.4.4 Analisis Statistika Kajian HKSA

Analisis dalam penentuan HKSA dilakukan menggunakan metode analisis regresi multilinear. Data deskriptor dan $\log 1/IC_{50}$ eksperimen di preparasi menggunakan *Microsoft excel 2013* terlebih dahulu, kemudian disimpan sebagai

workbook. Analisis regresi multilinear dilakukan menggunakan *IBM SPSS 21*. Klik menu *file* → *open* → *data*, pada *file type* pilih format excel (.xls, .xlsx, .xlsm) kemudian seleksi *workbook* yang telah dipreparasi dan pilih *range* data yang akan dianalisis. Setelah *input* data, klik menu *Analyze* → *Regression* → *Linear* akan muncul kotak dialog *Linear Regression*. Pada form *Dependent* diisi dengan nilai $\log 1/IC_{50}$, pada form *Independent* diisi dengan nilai deskriptor yang dihitung. Pada form *Method* pilih *backward*, selanjutnya klik menu *Statistics*. Muncul kotak dialog *Linear Regression: Statistics*, beri tanda centang pada pilihan *Estimates*, *Model fit*, *descriptive*, dan *Durbin-watson* kemudian klik menu *Continue*. Pada kotak dialog *Linear Regression* klik menu *Plots*, masukkan *DEPENDNT* pada *Y* dan **ADJPRED* pada *X*. Centang pilihan *Histogram* dan *Normal probability plot* kemudian klik menu *continue* untuk kembali ke kotak dialog *Linear Regression*. Klik menu *Save* maka akan muncul kotak dialog *Linear Regression: Save*, beri tanda centang pada pilihan *Unstandarized* pada *Predicted Values* dan *Residuals* kemudian klik menu *continue* untuk kembali ke kotak dialog *Linear Regression*. Terakhir, klik *OK* untuk menjalankan analisis.

Prosedur analisis dilakukan dengan menggunakan variabel bebas dan variabel terikat dari senyawa kajian untuk mencari persamaan regresi. Dipilih beberapa kombinasi persamaan yang memiliki korelasi antar variabel bebas yang kuat sebagai model persamaan alternatif. Kemudian dilakukan analisis dari model persamaan regresi multilinear alternatif dengan pertimbangan r , R^2 , *SE* (*Standard Error*) dan *PRESS* (*Predicted Residual Sum of Square*) untuk mendapatkan model persamaan terpilih. Harga *PRESS* digunakan untuk menghitung kualitas dan

kemampuan memprediksi dari persamaan kajian HKSA yang dihasilkan dan dihitung dari rumus:

$$PRESS = \sum_i^n \left(\log \frac{1}{IC_{50 \text{ eksperimen}}} - \log \frac{1}{IC_{50 \text{ prediksi}}} \right)^2$$

Analisis untuk menentukan gugus yang lebih baik dilakukan dengan membandingkan harga IC_{50} dari molekul sampel. Harga IC_{50} dari masing-masing struktur dihitung menggunakan persamaan terpilih yang telah diuji.

BAB 5

SIMPULAN DAN SARAN

5.1 Simpulan

Berdasarkan kajian HKSA senyawa analog kalkon menggunakan deskriptor sterik, hidrofobik dan elektronik dapat disimpulkan bahwa:

1. Deskriptor yang mempengaruhi aktivitas antioksidan senyawa analog kalkon antara lain: Energi HOMO, Celah HOMO-LUMO, IPs, Polarisabilitas, PSA, Log P, Indeks Platt, Indeks Balaban, Indeks Harrary, Indeks Hyper-Wiener, Refraktivitas.

2. Didapatkan persamaan HKSA terpilih dengan rumus:

$$\text{Log } 1/\text{IC}_{50} = -13.715 + 56.583 \text{ Energi HOMO} + 0.654 \text{ Celah HOMO-LUMO} - 4.018 \text{ IPs} + 0.003 \text{ PSA} - 0.225 \text{ logP} + 0.036 \text{ Indeks Platt} + 1.221 \text{ Indeks Balaban} - 0.046 \text{ Indeks Harrary} - 3.643\text{E-}05 \text{ Indeks Hyper-Wiener} + 0.299 \text{ Refraktivitas} - 0.773 \text{ Polarisabilitas}$$

$n= 13$; $R= 0.998$; $R^2= 0.995$; $SE= 0.017014694$; $PRESS= 0.00028939$

3. Didapatkan senyawa baru yang diprediksi lebih berpotensi sebagai antioksidan dibandingkan dengan senyawa kajian. Senyawa baru yang sangat potensial sebagai antioksidan adalah senyawa 2,4,5,2',5'-pentametoksikalkon; 2'-hidroksi-2,4,5,5'-tetrametoksikalkon dan 2'-nitro-5'-hidroksi-2,4,5-trimetoksikalkon dengan nilai Log $1/\text{IC}_{50}$ masing-masing sebesar -0.0329263210179302; -0.3947818814234920, -0.3400535864346010.

5.2 Saran

Berdasarkan penelitian yang penulis lakukan, dapat diberikan saran sebagai berikut:

1. Berdasarkan hasil prediksi, disarankan untuk mensintesis senyawa 2,4,5,2',5'-pentametoksikalkon; 2'-hidroksi-2,4,5,5'-tetrametoksikalkon dan 2'-nitro-5'-hidroksi-2,4,5-trimetoksikalkon secara eksperimen.
2. Perlu dilakukan kajian HKSA menggunakan *basis set* yang lebih tinggi sehingga diperoleh hasil prediksi yang lebih akurat.
3. Perlu adanya pembuktian secara eksperimen di laboratorium untuk membuktikan prediksi potensi antioksidan senyawa 2,4,5,2',5'-pentametoksikalkon; 2'-hidroksi-2,4,5,5'-tetrametoksikalkon dan 2'-nitro-5'-hidroksi-2,4,5-trimetoksikalkon.

DAFTAR PUSTAKA

- Arnelia. 2002. *Fitokimia, Komponen Ajaib Cegah PJK, Diabetes Mellitus & Kanker*. <http://kimianet.lipi.go.id/utama.cgi?artikel>. [diakses 23-10-2014].
- Atun, S. 2005. Hubungan Struktur dan Aktivitas Antioksidan Beberapa Senyawa Reveratrol dan Turunannya. *Laporan Penelitian*. Yogyakarta: FMIPA Universitas Negeri Yogyakarta.
- Clarck, D. E., 1999. Rapid Calculation of Polar Molecular Surface Area and Its Application to the Prediction of Transport Phenomena. *Journal of Pharmaceutical Sciences*, 88(8): 807-814.
- Ghozali, I. 2013. *Aplikasi Analisis Multivariate dengan Program SPSS IBM 21 Update PLS Regresi*. Semarang: Badan Penerbit Universitas Diponegoro.
- Gutteridge, J. M. C. & B. Halliwell. 2000. Free Radical and Antioxidants in Year 2000: A Historical look to the Future. *Annals of the New York Academy of Sciences*, 899(2000): 136-147.
- Hansen, C. 2004. *Quantitative Structure-Activity Relationships (QSAR) and Pesticides*. Denmark: Denmark Teknologisk Institut.
- Hoelz, L.V.B., B.A.C. Horta, J.Q. Araújo, M.G. Albuquerque, R.B. Alencastro, & J.F.M. Silva. 2010. Quantitative structure-activity relationships of antioxidant phenolic compounds. *Journal of Chemical and Pharmaceutical Research*, 2(5): 291-306
- Jensen, F. 2007. *Introduction of Computational Chemistry (2nd ed)*. West Sussex: John Wiley & Sons, Ltd.
- Karelson, M., V.S. Lobanov, & A.R. Katritzky. 1996. Quantum-Chemical Descriptors in QSAR/QSPR Studies. *Chem Reviews*, 96 (3): 1027-1043.
- Kochhar, S.P. & J. B. Rossell. 1990. Detection, Estimation, and Evaluation of Antioxidant in Food System. In *Food Antioxidants*. Edited by B. J. F. Hudson. Netherlands: Elsevier Science Publisher Ltd. pp. 19-64.

- Kubinyi, H. 1993. *QSAR: Hans Analysis and Related Approaches*. Weinheim:VCH Verlagsgesellschaft.
- Leong, L. P. & G. Shui. 2002. An Investigation of Antioxidant Capacity of Fruits in Singapore Markets, *Food Chemistry*, 76: 69-75.
- Lu, Z., G. Nie, P. S. Belton, H. Tang, & B. Zhao. 2005. Structure–activity relationship analysis of antioxidant ability and neuroprotective effect of gallic acid derivatives. *Neurochemistry International*. 48 (2006): 263–274.
- Markovic, Z., J. Doovic, M. Dekic, M. Radulovic, & M. Ilic. 2013. DFT study of free radical scavenging activity of erodiol. *Chemical Paper*. 67 (11):1453-1461.
- Markovic, Z., D. Milencovic, J. Dorovic, J. M. D. Markovic, V. Stephanic, B. Lucic, & D. Amic. PM6 dan DFT Study of Free Radical Scavenging Activity of Morin. *Food Chemistry*, 134 (2012): 1754-1760
- Markham, M. J., 1998. *Cara Mengidentifikasi Flavonoid*. Bandung: ITB.
- Mayuresh, S., J. Tukaram, C. Ujjawala, Mahanthesh M.C., & B. Manish. 2010. QSAR-A Novel Tool in Drug Design. *International Journal of Pharmaceutical Applications*. 1 (2): 62-75.
- Pamungkas, G. & I.G.M. Sanjaya. 2013. Kajian Teoritis untuk Menentukan Celah Energi Porfirin Terkonjugasi Logam Kalsium Menggunakan Teori Fungsional Kerapatan (DFT). *Journal of Chemistry*. 2(1). 54-61.
- Pranowo, H. D. 2011. *Pengantar Kimia Komputasi*. Bandung: Lubuk Agung.
- Prashar, H., A. Chawla, A. K. Sharma & R. Kharb. Chalcone as a Versatile Moiety for Diverse Pharmacological Activities. *International Journal of Pharmaceutical Science and Research*. 3 (7): 1913-1927.
- Rahman, M.A. 2011. Chalcone: A Valuable Insight into the Recent Advances and Potential Pharmacological Activities. *Chemical Sciences Journal*, 2011: CSJ-29.
- Rajalakshmi, D & S. Narasimhan. 1996. Food antioxidant: Sources and Methods of Evaluation. In *Food Antioxidants: Technological: Toxicological and*

Health Perspectives. Edited by D. L. Madhavi, S. S. Deshpande, D. K. Salunkhe. New York: Marcel Dekker, Inc. pp. 65-154.

Ramachandran, K. I., G. Deepa, & K. Nambori. 2008. *Computational Chemistry and Molecular Modeling: Principle and Applications*. India: Amrita Vishwa Vidyapeetham University.

Rifai, A. A., Kasmui, & Subiyanto H. 2014. Kajian HKSA Senyawa Turunan Deoksibenzoin terhadap Aktivitas Antioksidan Menggunakan Analisis Regresi Multilinear. *Indonesian Journal of Chemical Science*, 3(3): 222-226.

Rohmatussolihat. 2009. Antioksidan, Penyelamat sel-sel Tubuh Manusia. *Bio Trends/Vol.4/No.1/Tahun 2009*.

Rozaq, A. 2008. *Penggunaan Deskriptor Sterik Untuk Analisis HKSA Antimalaria Senyawa Analog 1,10-Fenantrolin Berdasarkan Analisis MLR dan PCR*. Skripsi. Yogyakarta: UGM.

Sastrohamidjojo, H. 1996. *Sintesis Bahan Alam*. Yogyakarta: Gadjah Mada University Press.

Schuler, P. 1990. Natural Antioxidants Exploited Commercially. In *Food Antioxidants*. Edited by B. J. F. Hudson. Netherlands: Elsevier Science Publisher Ltd. pp. 99-170.

Shenvi, S., K. Kumar, K. S. Hatti, K. Rijesh, L. Diwakar, & G. C. Reddy. 2013. Synthesis, anticancer and antioxidant activities of 2,4,5-trimethoxy chalcones and analogues from asaronaldehyde: Structure-activity relationship. *European Journal of Medicinal Chemistry*. 62: 435-442.

Sholl, D. S. & J. A. Steckel. 2009. *Density Functional Theory: A Practical Introduction*. Canada: A John Wiley & Sons, Inc., Publication.

Sivakumar, P. M., P. K. Prabhakar, & M. Doble. 2011. Synthesis, Antioxydant Evaluation, and Quantitative Structure-Activity Relationship studies of Chalcones. *Med Chem Res*, 20: 482-492.

Suryohudoyo, P. 1993. *Oksidan, Antioksidan, dan Radikal Bebas*. Surabaya: Laboratorium Biokimia fakultas Kedokteran Universitas Airlangga.

- Sudjana. 2005. *Metoda Statistika*. Bandung: PT Tarsito Bandung.
- Tahir, I, N. F. Fatimah, & R. Armunanto. 2003. Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas Antitoxoplasma Senyawa Analog Kuinolon Menggunakan Deskriptor Teoritik. *Sains dan Terapan Kimia*, 6 (2): 139-153.
- Urbaniak, A., M. Molski, & M. Szeląg. 2012. Quantum-chemical Calculations of the Antioxidant Properties of trans-p-coumaric Acid and trans-sinapinic Acid. *Computational Methods in Sciences and Technology*, 18 (2): 117-128.
- Velkov, Z. 2009. Quantum-chemical Approach to the Modeling of Antioxidant Activity (Theoretical descriptors of antioxidants). *Journal of South-West University*, 2(1): 41-45.
- Waji, R.A., & A. Sugrani. 2009. *Makalah Kimia Organik Bahan Alam Flavonoid (Quercetin)*. Makasar : Universitas Hasanuddin.
- Wibowo, A.E. 2012. *Aplikasi Praktis SPSS dalam Penelitian*. Yogyakarta: Gava Media.
- Young, D.C. 2001. *Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems*. New York: A John Wiley & Sons, Inc.
- Xue, Y., Y. Zheng, L. Zhang, W. Wu, D. Yu, & Y. Liu. 2013. Theoretical study on the antioxidant properties of 2'-hydroxychalcones: H-atom vs. Electron transfer mechanism. *J Mol Model*. 19, 3851:3862.

LAMPIRAN

Lampiran 1. *Gaussian Output File* Optimasi Struktur Metode DFT B3LYP 6-311G

```

*****
Gaussian 09: IA32W-G09RevA.02 11-Jun-2009
      30-Jan-2015
*****
%chk=KALKON_utama
%mem=200MW
%nproc=1
Will use up to   1 processors via shared memory.
-----
# opt ub3lyp/6-311g geom=connectivity
-----
1/14=-1,18=20,19=15,26=3,38=1,57=2/1,3;
2/9=110,12=2,17=6,18=5,40=1/2;
3/5=4,6=6,11=2,16=1,25=1,30=1,71=1,74=-5,116=2/1,2,3;
4//1;
5/5=2,38=5/2;
6/7=2,8=2,9=2,10=2,28=1/1;
7//1,2,3,16;
1/14=-1,18=20,19=15/3(2);
2/9=110/2;
99//99;
2/9=110/2;
3/5=4,6=6,11=2,16=1,25=1,30=1,71=1,74=-5,116=2/1,2,3;
4/5=5,16=3/1;
5/5=2,38=5/2;
7//1,2,3,16;
1/14=-1,18=20,19=15/3(-5);
2/9=110/2;
6/7=2,8=2,9=2,10=2,19=2,28=1/1;
99/9=1/99;
-----
KALKON utama
-----
Symbolic Z-matrix:
Charge =  0 Multiplicity = 1
C
C      1  B1
C      2  B2      1  A1
C      3  B3      2  A2      1  D1      0
C      4  B4      3  A3      2  D2      0
C      1  B5      2  A4      3  D3      0
H      1  B6      2  A5      3  D4      0
H      3  B7      2  A6      1  D5      0
H      4  B8      3  A7      2  D6      0
H      5  B9      4  A8      3  D7      0
H      6  B10     1  A9      2  D8      0
C      2  B11     1  A10     6  D9      0
C      12 B12     2  A11     1  D10     0
C      13 B13     12 A12     2  D11     0

```

C	14	B14	13	A13	12	D12	0
C	15	B15	14	A14	13	D13	0
C	15	B16	14	A15	13	D14	0
C	16	B17	15	A16	14	D15	0
H	16	B18	15	A17	14	D16	0
C	17	B19	15	A18	14	D17	0
C	20	B20	17	A19	15	D18	0
H	20	B21	17	A20	15	D19	0
O	12	B22	2	A21	1	D20	0
H	13	B23	12	A22	2	D21	0
H	14	B24	13	A23	12	D22	0
O	17	B25	15	A24	14	D23	0
O	21	B26	20	A25	17	D24	0
O	18	B27	16	A26	15	D25	0
C	26	B28	17	A27	15	D26	0
H	29	B29	26	A28	17	D27	0
H	29	B30	26	A29	17	D28	0
H	29	B31	26	A30	17	D29	0
C	27	B32	21	A31	20	D30	0
H	33	B33	27	A32	21	D31	0
H	33	B34	27	A33	21	D32	0
H	33	B35	27	A34	21	D33	0
C	28	B36	18	A35	16	D34	0
H	37	B37	28	A36	18	D35	0
H	37	B38	28	A37	18	D36	0
H	37	B39	28	A38	18	D37	0

Variables:

B1	1.3552
B2	1.54
B3	1.3552
B4	1.54
B5	1.54
B6	1.07
B7	1.07
B8	1.07
B9	1.07
B10	1.07
B11	1.54
B12	1.54
B13	1.3552
B14	1.54
B15	1.3552
B16	1.54
B17	1.54
B18	1.07
B19	1.3552
B20	1.54
B21	1.07
B22	1.2584
B23	1.07
B24	1.07
B25	1.43
B26	1.43
B27	1.43
B28	1.43
B29	1.07
B30	1.07

B31	1.07
B32	1.43
B33	1.07
B34	1.07
B35	1.07
B36	1.43
B37	1.07
B38	1.07
B39	1.07
A1	120.
A2	120.00001
A3	120.
A4	119.99999
A5	120.
A6	119.99999
A7	120.
A8	120.
A9	120.
A10	120.00003
A11	119.99994
A12	120.00007
A13	119.99993
A14	119.99994
A15	120.00004
A16	120.00001
A17	120.
A18	119.99999
A19	120.
A20	120.
A21	120.00003
A22	119.99997
A23	120.00005
A24	120.
A25	120.00002
A26	120.
A27	109.47123
A28	109.47122
A29	109.47123
A30	109.47121
A31	109.47119
A32	109.47122
A33	109.47122
A34	109.47121
A35	109.47124
A36	109.47123
A37	109.47122
A38	109.47121
D1	0.
D2	0.
D3	0.
D4	180.
D5	-180.
D6	-180.
D7	180.
D8	180.
D9	-180.
D10	180.

```

D11      -180.
D12      -180.
D13       0.
D14      -180.
D15      -180.
D16       0.
D17      180.
D18       0.
D19      -180.
D20       0.
D21       0.
D22       0.
D23       0.
D24      -180.
D25      180.
D26     -150.00046
D27     -59.99997
D28      60.00004
D29      -180.
D30     -90.00056
D31      59.99999
D32      180.
D33     -60.00001
D34     -89.99906
D35      180.
D36     -60.00002
D37      59.99998

```

12 tetrahedral angles replaced.

```

      Item      Value  Threshold Converged?
Maximum Force    0.000017  0.000450  YES
RMS   Force     0.000005  0.000300  YES
Maximum Displacement 0.001130  0.001800  YES
RMS   Displacement 0.000306  0.001200  YES
Predicted change in Energy=-1.500133D-08
Optimization completed.
-- Stationary point found.

```

```

-----
! Optimized Parameters !
! (Angstroms and Degrees) !

```

```

-----
! Name Definition      Value      Derivative Info.      !
-----
! R1  R(1,2)          1.4068    -DE/DX = 0.0          !
! R2  R(1,6)          1.3922    -DE/DX = 0.0          !
! R3  R(1,7)          1.0802    -DE/DX = 0.0          !
! R4  R(2,3)          1.4058    -DE/DX = 0.0          !
! R5  R(2,12)         1.4976    -DE/DX = 0.0          !
! R6  R(3,4)          1.3966    -DE/DX = 0.0          !
! R7  R(3,8)          1.0802    -DE/DX = 0.0          !
! R8  R(4,5)          1.3966    -DE/DX = 0.0          !
! R9  R(4,9)          1.0819    -DE/DX = 0.0          !
! R10 R(5,6)          1.3996    -DE/DX = 0.0          !
! R11 R(5,10)         1.082     -DE/DX = 0.0          !
! R12 R(6,11)         1.0819    -DE/DX = 0.0          !
! R13 R(12,13)        1.472     -DE/DX = 0.0          !
! R14 R(12,23)        1.2582    -DE/DX = 0.0          !

```


! R15	R(13,14)	1.3515	-DE/DX = 0.0	!
! R16	R(13,24)	1.0804	-DE/DX = 0.0	!
! R17	R(14,15)	1.4575	-DE/DX = 0.0	!
! R18	R(14,25)	1.0822	-DE/DX = 0.0	!
! R19	R(15,16)	1.4077	-DE/DX = 0.0	!
! R20	R(15,17)	1.4201	-DE/DX = 0.0	!
! R21	R(16,18)	1.3874	-DE/DX = 0.0	!
! R22	R(16,19)	1.0803	-DE/DX = 0.0	!
! R23	R(17,20)	1.3964	-DE/DX = 0.0	!
! R24	R(17,26)	1.3876	-DE/DX = 0.0	!
! R25	R(18,21)	1.4042	-DE/DX = 0.0	!
! R26	R(18,28)	1.4072	-DE/DX = 0.0	!
! R27	R(20,21)	1.3946	-DE/DX = 0.0	!
! R28	R(20,22)	1.0782	-DE/DX = 0.0	!
! R29	R(21,27)	1.3975	-DE/DX = 0.0	!
! R30	R(26,29)	1.4531	-DE/DX = 0.0	!
! R31	R(27,33)	1.4738	-DE/DX = 0.0	!
! R32	R(28,37)	1.4717	-DE/DX = 0.0	!
! R33	R(29,30)	1.0917	-DE/DX = 0.0	!
! R34	R(29,31)	1.0918	-DE/DX = 0.0	!
! R35	R(29,32)	1.0843	-DE/DX = 0.0	!
! R36	R(33,34)	1.091	-DE/DX = 0.0	!
! R37	R(33,35)	1.0852	-DE/DX = 0.0	!
! R38	R(33,36)	1.0875	-DE/DX = 0.0	!
! R39	R(37,38)	1.0856	-DE/DX = 0.0	!
! R40	R(37,39)	1.0895	-DE/DX = 0.0	!
! R41	R(37,40)	1.0912	-DE/DX = 0.0	!
! A1	A(2,1,6)	120.7625	-DE/DX = 0.0	!
! A2	A(2,1,7)	117.8631	-DE/DX = 0.0	!
! A3	A(6,1,7)	121.3742	-DE/DX = 0.0	!
! A4	A(1,2,3)	118.6627	-DE/DX = 0.0	!
! A5	A(1,2,12)	117.6456	-DE/DX = 0.0	!
! A6	A(3,2,12)	123.6887	-DE/DX = 0.0	!
! A7	A(2,3,4)	120.5546	-DE/DX = 0.0	!
! A8	A(2,3,8)	120.7458	-DE/DX = 0.0	!
! A9	A(4,3,8)	118.6947	-DE/DX = 0.0	!
! A10	A(3,4,5)	120.1763	-DE/DX = 0.0	!
! A11	A(3,4,9)	119.7378	-DE/DX = 0.0	!
! A12	A(5,4,9)	120.0858	-DE/DX = 0.0	!
! A13	A(4,5,6)	119.7627	-DE/DX = 0.0	!
! A14	A(4,5,10)	120.0747	-DE/DX = 0.0	!
! A15	A(6,5,10)	120.1625	-DE/DX = 0.0	!
! A16	A(1,6,5)	120.0801	-DE/DX = 0.0	!
! A17	A(1,6,11)	119.8875	-DE/DX = 0.0	!
! A18	A(5,6,11)	120.0324	-DE/DX = 0.0	!
! A19	A(2,12,13)	119.9595	-DE/DX = 0.0	!
! A20	A(2,12,23)	119.1092	-DE/DX = 0.0	!
! A21	A(13,12,23)	120.9297	-DE/DX = 0.0	!
! A22	A(12,13,14)	120.7958	-DE/DX = 0.0	!
! A23	A(12,13,24)	118.2839	-DE/DX = 0.0	!
! A24	A(14,13,24)	120.919	-DE/DX = 0.0	!
! A25	A(13,14,15)	127.1448	-DE/DX = 0.0	!
! A26	A(13,14,25)	116.9336	-DE/DX = 0.0	!
! A27	A(15,14,25)	115.9212	-DE/DX = 0.0	!
! A28	A(14,15,16)	123.2553	-DE/DX = 0.0	!
! A29	A(14,15,17)	119.5163	-DE/DX = 0.0	!
! A30	A(16,15,17)	117.224	-DE/DX = 0.0	!

! A31	A(15,16,18)	122.1259	-DE/DX = 0.0	!
! A32	A(15,16,19)	120.492	-DE/DX = 0.0	!
! A33	A(18,16,19)	117.3809	-DE/DX = 0.0	!
! A34	A(15,17,20)	121.007	-DE/DX = 0.0	!
! A35	A(15,17,26)	116.0164	-DE/DX = 0.0	!
! A36	A(20,17,26)	122.9712	-DE/DX = 0.0	!
! A37	A(16,18,21)	119.5328	-DE/DX = 0.0	!
! A38	A(16,18,28)	119.3072	-DE/DX = 0.0	!
! A39	A(21,18,28)	121.1428	-DE/DX = 0.0	!
! A40	A(17,20,21)	120.1468	-DE/DX = 0.0	!
! A41	A(17,20,22)	122.2468	-DE/DX = 0.0	!
! A42	A(21,20,22)	117.6059	-DE/DX = 0.0	!
! A43	A(18,21,20)	119.9265	-DE/DX = 0.0	!
! A44	A(18,21,27)	122.077	-DE/DX = 0.0	!
! A45	A(20,21,27)	117.9434	-DE/DX = 0.0	!
! A46	A(17,26,29)	119.736	-DE/DX = 0.0	!
! A47	A(21,27,33)	116.7127	-DE/DX = 0.0	!
! A48	A(18,28,37)	115.3073	-DE/DX = 0.0	!
! A49	A(26,29,30)	111.1165	-DE/DX = 0.0	!
! A50	A(26,29,31)	111.124	-DE/DX = 0.0	!
! A51	A(26,29,32)	104.9084	-DE/DX = 0.0	!
! A52	A(30,29,31)	109.9906	-DE/DX = 0.0	!
! A53	A(30,29,32)	109.8237	-DE/DX = 0.0	!
! A54	A(31,29,32)	109.7626	-DE/DX = 0.0	!
! A55	A(27,33,34)	109.7563	-DE/DX = 0.0	!
! A56	A(27,33,35)	105.1159	-DE/DX = 0.0	!
! A57	A(27,33,36)	110.6716	-DE/DX = 0.0	!
! A58	A(34,33,35)	109.977	-DE/DX = 0.0	!
! A59	A(34,33,36)	110.2976	-DE/DX = 0.0	!
! A60	A(35,33,36)	110.9051	-DE/DX = 0.0	!
! A61	A(28,37,38)	105.4402	-DE/DX = 0.0	!
! A62	A(28,37,39)	110.6568	-DE/DX = 0.0	!
! A63	A(28,37,40)	110.1445	-DE/DX = 0.0	!
! A64	A(38,37,39)	110.4776	-DE/DX = 0.0	!
! A65	A(38,37,40)	109.9337	-DE/DX = 0.0	!
! A66	A(39,37,40)	110.0974	-DE/DX = 0.0	!
! D1	D(6,1,2,3)	0.3336	-DE/DX = 0.0	!
! D2	D(6,1,2,12)	179.7269	-DE/DX = 0.0	!
! D3	D(7,1,2,3)	-179.5247	-DE/DX = 0.0	!
! D4	D(7,1,2,12)	-0.1313	-DE/DX = 0.0	!
! D5	D(2,1,6,5)	-0.2384	-DE/DX = 0.0	!
! D6	D(2,1,6,11)	179.8046	-DE/DX = 0.0	!
! D7	D(7,1,6,5)	179.6148	-DE/DX = 0.0	!
! D8	D(7,1,6,11)	-0.3422	-DE/DX = 0.0	!
! D9	D(1,2,3,4)	-0.1291	-DE/DX = 0.0	!
! D10	D(1,2,3,8)	179.0608	-DE/DX = 0.0	!
! D11	D(12,2,3,4)	-179.4832	-DE/DX = 0.0	!
! D12	D(12,2,3,8)	-0.2934	-DE/DX = 0.0	!
! D13	D(1,2,12,13)	173.1385	-DE/DX = 0.0	!
! D14	D(1,2,12,23)	-6.41	-DE/DX = 0.0	!
! D15	D(3,2,12,13)	-7.5012	-DE/DX = 0.0	!
! D16	D(3,2,12,23)	172.9503	-DE/DX = 0.0	!
! D17	D(2,3,4,5)	-0.1702	-DE/DX = 0.0	!
! D18	D(2,3,4,9)	179.6989	-DE/DX = 0.0	!
! D19	D(8,3,4,5)	-179.3765	-DE/DX = 0.0	!
! D20	D(8,3,4,9)	0.4927	-DE/DX = 0.0	!
! D21	D(3,4,5,6)	0.2689	-DE/DX = 0.0	!

! D22	D(3,4,5,10)	-179.8549	-DE/DX = 0.0	!
! D23	D(9,4,5,6)	-179.5998	-DE/DX = 0.0	!
! D24	D(9,4,5,10)	0.2765	-DE/DX = 0.0	!
! D25	D(4,5,6,1)	-0.0658	-DE/DX = 0.0	!
! D26	D(4,5,6,11)	179.8911	-DE/DX = 0.0	!
! D27	D(10,5,6,1)	-179.9419	-DE/DX = 0.0	!
! D28	D(10,5,6,11)	0.015	-DE/DX = 0.0	!
! D29	D(2,12,13,14)	177.6256	-DE/DX = 0.0	!
! D30	D(2,12,13,24)	-2.7838	-DE/DX = 0.0	!
! D31	D(23,12,13,14)	-2.8343	-DE/DX = 0.0	!
! D32	D(23,12,13,24)	176.7563	-DE/DX = 0.0	!
! D33	D(12,13,14,15)	179.4328	-DE/DX = 0.0	!
! D34	D(12,13,14,25)	-0.8038	-DE/DX = 0.0	!
! D35	D(24,13,14,15)	-0.1469	-DE/DX = 0.0	!
! D36	D(24,13,14,25)	179.6164	-DE/DX = 0.0	!
! D37	D(13,14,15,16)	-3.9601	-DE/DX = 0.0	!
! D38	D(13,14,15,17)	176.8319	-DE/DX = 0.0	!
! D39	D(25,14,15,16)	176.2745	-DE/DX = 0.0	!
! D40	D(25,14,15,17)	-2.9335	-DE/DX = 0.0	!
! D41	D(14,15,16,18)	179.9961	-DE/DX = 0.0	!
! D42	D(14,15,16,19)	-0.4072	-DE/DX = 0.0	!
! D43	D(17,15,16,18)	-0.7789	-DE/DX = 0.0	!
! D44	D(17,15,16,19)	178.8178	-DE/DX = 0.0	!
! D45	D(14,15,17,20)	-179.0925	-DE/DX = 0.0	!
! D46	D(14,15,17,26)	0.0875	-DE/DX = 0.0	!
! D47	D(16,15,17,20)	1.6523	-DE/DX = 0.0	!
! D48	D(16,15,17,26)	-179.1677	-DE/DX = 0.0	!
! D49	D(15,16,18,21)	-0.9886	-DE/DX = 0.0	!
! D50	D(15,16,18,28)	-179.4954	-DE/DX = 0.0	!
! D51	D(19,16,18,21)	179.4028	-DE/DX = 0.0	!
! D52	D(19,16,18,28)	0.8959	-DE/DX = 0.0	!
! D53	D(15,17,20,21)	-0.7547	-DE/DX = 0.0	!
! D54	D(15,17,20,22)	178.9596	-DE/DX = 0.0	!
! D55	D(26,17,20,21)	-179.8764	-DE/DX = 0.0	!
! D56	D(26,17,20,22)	-0.1621	-DE/DX = 0.0	!
! D57	D(15,17,26,29)	179.0338	-DE/DX = 0.0	!
! D58	D(20,17,26,29)	-1.8039	-DE/DX = 0.0	!
! D59	D(16,18,21,20)	1.925	-DE/DX = 0.0	!
! D60	D(16,18,21,27)	179.2189	-DE/DX = 0.0	!
! D61	D(28,18,21,20)	-179.5963	-DE/DX = 0.0	!
! D62	D(28,18,21,27)	-2.3024	-DE/DX = 0.0	!
! D63	D(16,18,28,37)	-108.1312	-DE/DX = 0.0	!
! D64	D(21,18,28,37)	73.3867	-DE/DX = 0.0	!
! D65	D(17,20,21,18)	-1.0653	-DE/DX = 0.0	!
! D66	D(17,20,21,27)	-178.4699	-DE/DX = 0.0	!
! D67	D(22,20,21,18)	179.2074	-DE/DX = 0.0	!
! D68	D(22,20,21,27)	1.8028	-DE/DX = 0.0	!
! D69	D(18,21,27,33)	63.4326	-DE/DX = 0.0	!
! D70	D(20,21,27,33)	-119.2221	-DE/DX = 0.0	!
! D71	D(17,26,29,30)	-60.2296	-DE/DX = 0.0	!
! D72	D(17,26,29,31)	62.5959	-DE/DX = 0.0	!
! D73	D(17,26,29,32)	-178.8512	-DE/DX = 0.0	!
! D74	D(21,27,33,34)	63.7961	-DE/DX = 0.0	!
! D75	D(21,27,33,35)	-177.9723	-DE/DX = 0.0	!
! D76	D(21,27,33,36)	-58.1734	-DE/DX = 0.0	!
! D77	D(18,28,37,38)	-179.8598	-DE/DX = 0.0	!
! D78	D(18,28,37,39)	-60.3872	-DE/DX = 0.0	!

! D79 D(18,28,37,40) 61.5812 -DE/DX = 0.0 !

 GradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGrad

Input orientation:

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	6	0	-0.113129	-0.114449	0.012670
2	6	0	0.012016	0.044976	1.404763
3	6	0	1.296630	0.207740	1.952038
4	6	0	2.424416	0.208044	1.128355
5	6	0	2.286013	0.042468	-0.251511
6	6	0	1.011770	-0.118307	-0.807614
7	1	0	-1.106728	-0.230656	-0.394866
8	1	0	1.430466	0.347893	3.014685
9	1	0	3.406394	0.339233	1.563051
10	1	0	3.161120	0.040619	-0.887893
11	1	0	0.899370	-0.245130	-1.876133
12	6	0	-1.244291	0.044785	2.219938
13	6	0	-1.166800	0.055652	3.689874
14	6	0	-2.288925	0.103750	4.441595
15	6	0	-2.373965	0.108922	5.896591
16	6	0	-1.251144	-0.018835	6.735912
17	6	0	-3.642593	0.231411	6.522832
18	6	0	-1.359202	-0.010801	8.119083
19	1	0	-0.262790	-0.134509	6.315447
20	6	0	-3.758360	0.258765	7.914141
21	6	0	-2.621088	0.149511	8.713857
22	1	0	-4.709468	0.367548	8.410272
23	8	0	-2.356014	0.026596	1.631078
24	1	0	-0.190674	0.017410	4.151359
25	1	0	-3.231923	0.146890	3.912462
26	8	0	-4.733557	0.337820	5.672079
27	8	0	-2.793266	0.149527	10.100679
28	8	0	-0.195902	-0.132037	8.901607
29	6	0	-6.072233	0.445781	6.226755
30	1	0	-6.319003	-0.428830	6.831764
31	1	0	-6.179053	1.354206	6.822895
32	1	0	-6.728348	0.493643	5.364763
33	6	0	-2.138449	1.236988	10.849563
34	1	0	-2.565857	2.196725	10.555418
35	1	0	-2.360826	1.036164	11.892550
36	1	0	-1.065308	1.232171	10.673716
37	6	0	-0.034150	-1.421255	9.592772
38	1	0	0.898799	-1.339790	10.141797
39	1	0	-0.864262	-1.597900	10.275940
40	1	0	0.031827	-2.231945	8.865357

 Sum of Mulliken atomic spin densities = 0.00000

Electronic spatial extent (au): <R**2>= 10764.8622

Charge= 0.0000 electrons

Dipole moment (field-independent basis, Debye):

X= 3.6839 Y= -2.3092 Z= -0.2095 Tot= 4.3529

Quadrupole moment (field-independent basis, Debye-Ang):

XX= -108.0440 YY= -118.2771 ZZ= -131.5459

XY= 13.4892 XZ= -2.2857 YZ= -2.3875
 Traceless Quadrupole moment (field-independent basis, Debye-Ang):
 XX= 11.2450 YY= 1.0119 ZZ= -12.2569
 XY= 13.4892 XZ= -2.2857 YZ= -2.3875
 Octapole moment (field-independent basis, Debye-Ang**2):
 XXX= 4.8053 YYY= 20.3083 ZZZ= 2.3814 XYY= 78.9995
 XXY= -45.3480 XXZ= -28.5480 XZZ= 42.3540 YZZ= -2.9316
 YYZ= 10.2341 XYZ= -12.8190
 Hexadecapole moment (field-independent basis, Debye-Ang**3):
 XXXX= -10338.7895 YYYY= -2337.2664 ZZZZ= -319.5937 XXXY= -41.4902
 XXXZ= -229.3568 YYYX= 155.8536 YYYZ= -34.4838 ZZZX= -18.1931
 ZZZY= -7.6326 XXYY= -2095.6528 XXZZ= -2041.9058 YYZZ= -483.0200
 XXYZ= 37.7821 YYXZ= 65.1693 ZZXZ= -58.7560
 N-N= 1.636428040294D+03 E-N=-8.400398046665D+03 KE= 1.491503300224D+03

Isotropic Fermi Contact Couplings

Atom	a.u.	MegaHertz	Gauss	10(-4) cm-1
1 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
2 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
3 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
4 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
5 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
6 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
7 H(1)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
8 H(1)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
9 H(1)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
10 H(1)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
11 H(1)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
12 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
13 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
14 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
15 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
16 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
17 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
18 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
19 H(1)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
20 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
21 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
22 H(1)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
23 O(17)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
24 H(1)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
25 H(1)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
26 O(17)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
27 O(17)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
28 O(17)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
29 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
30 H(1)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
31 H(1)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
32 H(1)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
33 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
34 H(1)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
35 H(1)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
36 H(1)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
37 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
38 H(1)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
39 H(1)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
40 H(1)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000

----- Anisotropic Spin Dipole Couplings in Principal Axis System -----								
Atom	a.u.	MegaHertz	Gauss	10(-4) cm-1	Axes			
Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0204	-0.1503	0.9884	
1 C(13) Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.6295	0.7700	0.1041	
Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.7767	-0.6201	-0.1104	
Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.5625	0.6385	0.5253	
2 C(13) Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.5033	-0.2397	0.8302	
Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.6560	0.7314	-0.1865	
Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0652	-0.1868	0.9802	
3 C(13) Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.3250	0.9327	0.1562	
Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9435	-0.3083	-0.1215	
Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9860	-0.1547	-0.0617	
4 C(13) Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.1631	0.9722	0.1681	
Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0340	-0.1758	0.9838	
Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0492	-0.2864	0.9568	
5 C(13) Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.5084	0.8318	0.2229	
Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.8597	-0.4755	-0.1865	
Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.6585	0.7365	0.1546	
6 C(13) Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.7508	-0.6289	-0.2021	
Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0516	-0.2492	0.9671	
Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.1160	0.9679	0.2228	
7 H(1) Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.0350	-0.2282	0.9730	
Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9926	0.1051	0.0603	
Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.1949	0.8456	0.4969	
8 H(1) Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.0718	-0.4930	0.8671	
Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9782	-0.2047	-0.0354	
Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9932	-0.1043	0.0514	
9 H(1) Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.0725	-0.2102	0.9750	
Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0909	0.9721	0.2163	
Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.1281	-0.2464	0.9607	
10 H(1) Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.7764	-0.5778	-0.2517	
Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.6171	0.7781	0.1172	
Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.3081	0.9217	0.2358	
11 H(1) Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9511	0.3040	0.0543	
Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0217	-0.2410	0.9703	
Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.4651	0.8710	0.1581	
12 C(13) Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.7302	-0.4784	0.4878	
Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.5005	0.1115	0.8585	
Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9992	0.0039	-0.0406	
13 C(13) Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0381	0.2673	0.9629	
Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.0146	0.9636	-0.2670	

Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.1266	-0.0144	0.9919
14 C(13) Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9905	0.0514	0.1272
Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.0528	0.9986	0.0077
Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9612	0.1298	-0.2433
15 C(13) Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.2706	-0.2743	0.9228
Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.0530	0.9529	0.2988
Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9320	-0.2146	-0.2922
16 C(13) Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.0435	0.7339	-0.6779
Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.3599	0.6445	0.6746
Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.4195	-0.2461	0.8738
17 C(13) Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.7284	0.4832	0.4858
Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.5418	0.8402	-0.0234
Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9581	0.2733	-0.0857
18 C(13) Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.2004	-0.4257	0.8824
Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.2047	0.8626	0.4627
Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.7184	-0.6952	0.0259
19 H(1) Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.6821	0.6965	-0.2227
Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.1367	0.1776	0.9746
Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0377	0.9848	0.1696
20 C(13) Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.1371	-0.1733	0.9753
Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9898	-0.0135	-0.1416
Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.5498	-0.0541	0.8335
21 C(13) Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.8302	-0.0748	-0.5524
Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0922	0.9957	0.0038
Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.3456	0.1023	0.9328
22 H(1) Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.8166	-0.4571	0.3526
Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.4624	0.8835	0.0745
Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9258	0.3763	0.0356
23 O(17) Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.3763	0.9265	-0.0084
Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.0362	-0.0056	0.9993
Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.5957	0.7959	-0.1083
24 H(1) Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0022	0.1332	0.9911
Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.8032	-0.5906	0.0776
Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.1461	0.9866	0.0734
25 H(1) Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.1207	-0.0558	0.9911
Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9819	0.1536	-0.1109
Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.2889	0.9571	0.0228
26 O(17) Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0151	-0.0284	0.9995
Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9572	-0.2884	-0.0227
Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.1442	0.4208	0.8956
27 O(17) Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.6656	-0.6285	0.4024
Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.7323	0.6541	-0.1895
Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.7189	-0.6040	-0.3440


```

28 O(17) Bbb 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.1290 -0.3704 0.9199
      Bcc 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.6830 0.7057 0.1883

      Baa 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.8611 -0.4994 0.0951
29 C(13) Bbb 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.1168 0.3765 0.9190
      Bcc 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.4948 0.7803 -0.3825

      Baa 0.0000 0.000 0.000 0.000 -0.1705 0.3695 0.9135
30 H(1) Bbb 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.5227 0.8198 -0.2340
      Bcc 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.8353 -0.4375 0.3329

      Baa 0.0000 0.000 0.000 0.000 -0.1768 -0.3524 0.9190
31 H(1) Bbb 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.6474 0.6617 0.3783
      Bcc 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.7414 -0.6618 -0.1112

      Baa 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.7204 -0.5420 0.4327
32 H(1) Bbb 0.0000 0.000 0.000 0.000 -0.3942 0.1934 0.8985
      Bcc 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.5707 0.8178 0.0744

      Baa 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.9921 0.1159 0.0489
33 C(13) Bbb 0.0000 0.000 0.000 0.000 -0.0752 0.8583 -0.5076
      Bcc 0.0000 0.000 0.000 0.000 -0.1008 0.4999 0.8602

      Baa 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.9387 -0.0006 0.3447
34 H(1) Bbb 0.0000 0.000 0.000 0.000 -0.1488 0.9014 0.4067
      Bcc 0.0000 0.000 0.000 0.000 -0.3109 -0.4331 0.8460

      Baa 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.6553 -0.5374 0.5308
35 H(1) Bbb 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.0839 0.7501 0.6560
      Bcc 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.7507 0.3853 -0.5366

      Baa 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.0188 0.9236 -0.3828
36 H(1) Bbb 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.3428 0.3537 0.8703
      Bcc 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.9392 -0.1476 -0.3100

      Baa 0.0000 0.000 0.000 0.000 -0.3759 0.5610 0.7375
37 C(13) Bbb 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.7075 -0.3402 0.6194
      Bcc 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.5984 0.7546 -0.2691

      Baa 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.0082 0.9881 0.1537
38 H(1) Bbb 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.9142 -0.0697 0.3992
      Bcc 0.0000 0.000 0.000 0.000 -0.4051 -0.1373 0.9039

      Baa 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.9273 -0.1318 0.3503
39 H(1) Bbb 0.0000 0.000 0.000 0.000 -0.1432 0.7398 0.6574
      Bcc 0.0000 0.000 0.000 0.000 -0.3458 -0.6598 0.6671

      Baa 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.8183 0.4493 -0.3584
40 H(1) Bbb 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.1869 0.3815 0.9053
      Bcc 0.0000 0.000 0.000 0.000 -0.5435 0.8078 -0.2282

```

```

1|1|UNPC-LABKOMPUTASI|FOpt|UB3LYP|6-311G|C18H18O4|KOMPUTASI|30-Jan-201
5|0|# opt ub3lyp/6-311g geom=connectivity|KALKON utama|[0,1|C,-0.1131287
839,-0.1144488049,0.0126697931|C,0.0120156079,0.0449757185,1.404762552
7|C,1.2966304208,0.2077396524,1.9520380268|C,2.4244157569,0.2080443263
,1.1283553361|C,2.2860130967,0.0424684085,-0.2515110471|C,1.011769917,
-0.118306678,-0.8076139609|H,-1.1067280115,-0.2306564065,-0.394865877|

```

H,1.4304664528,0.3478930325,3.0146847164|H,3.4063944693,0.339232512,1.
 5630514575|H,3.1611196432,0.0406185588,-0.8878928096|H,0.899370408,-0.
 245130024,-1.8761333992|C,-1.2442911198,0.0447845511,2.2199375132|C,-1
 .1668000052,0.0556524619,3.689873906|C,-2.2889245753,0.1037497714,4.44
 15954678|C,-2.3739654283,0.1089215585,5.8965905444|C,-1.2511443725,-0.
 0188347352,6.7359119566|C,-3.6425931513,0.2314109795,6.5228319954|C,-1
 .359201952,-0.0108013572,8.119082569|H,-0.2627898224,-0.1345094301,6.3
 154469884|C,-3.7583595717,0.2587653248,7.9141409767|C,-2.6210879544,0.
 1495107517,8.7138572563|H,-4.7094680151,0.3675482129,8.4102722947|O,-2
 .3560135441,0.0265956455,1.631077854|H,-0.1906735773,0.0174097557,4.15
 13587818|H,-3.2319225254,0.1468901834,3.91246193|O,-4.7335568257,0.337
 8203964,5.6720788004|O,-2.7932661357,0.1495271601,10.1006791868|O,-0.1
 959024617,-0.1320367728,8.9016070131|C,-6.0722327378,0.4457807655,6.22
 67547504|H,-6.3190026922,-0.428830081,6.8317640073|H,-6.1790526589,1.3
 542057545,6.8228950589|H,-6.7283484949,0.4936432648,5.3647627937|C,-2.
 1384494891,1.2369880723,10.8495625587|H,-2.5658574612,2.1967253239,10.
 5554178348|H,-2.3608255475,1.0361635952,11.8925496272|H,-1.0653082648,
 1.2321710612,10.6737157289|C,-0.034150441,-1.4212546226,9.5927718596|H
 ,0.8987986858,-1.339790135,10.1417967818|H,-0.864261647,-1.5979000659,
 10.2759396279|H,0.0318273966,-2.2319451811,8.8653568971||Version=IA32W
 -G09RevA.02|State=1-A|HF=-997.5603413|S2=0.|S2-1=0.|S2A=0.|RMSD=4.770e
 -009|RMSF=8.146e-006|Dipole=0.3193622,0.0190906,1.6823976|Quadrupole=8
 .0290947,-8.5833038,0.5542091,-3.7387133,-9.862706,1.7014093|PG=C01 [X
 (C18H18O4)]||@

Lampiran 2. *Gaussian Output File* Optimasi Struktur Metode MP2 6-311G

```

*****
Gaussian 09: IA32W-G09RevA.02 11-Jun-2009
      19-Mar-2015
*****
%chk=MP2 KALKON_utama.chk
%mem=200MW
%nproc=1
Will use up to 1 processors via shared memory.

-----
# opt rmp2/6-311g geom=connectivity
-----
1/18=20,19=15,38=1,57=2/1,3;
2/9=110,12=2,17=6,18=5,40=1/2;
3/5=4,6=6,11=1,16=1,25=1,30=1,71=1,116=1/1,2,3;
4//1;
5/5=2,38=5/2;
8/6=4,10=2/1;
9/15=2,16=-3/6;
10/5=1/2;
6/7=2,8=2,9=2,10=2/1;
7/12=2/1,2,3,16;
1/18=20,19=15/3(2);
2/9=110/2;
99//99;
2/9=110/2;
3/5=4,6=6,11=1,16=1,25=1,30=1,71=1,116=1/1,2,3;
4/5=5,16=3/1;
5/5=2,38=5/2;
8/6=4,10=2/1;
9/15=2,16=-3/6;
10/5=1/2;
7/12=2/1,2,3,16;
1/18=20,19=15/3(-8);
2/9=110/2;
6/7=2,8=2,9=2,10=2/1;
99//99;
-----
MP2 KALKON utama
-----
Symbolic Z-matrix:
Charge = 0 Multiplicity = 1
C
C      1  B1
C      2  B2      1  A1
C      3  B3      2  A2      1  D1      0
C      4  B4      3  A3      2  D2      0
C      1  B5      2  A4      3  D3      0
H      1  B6      6  A5      5  D4      0
H      3  B7      2  A6      1  D5      0
H      4  B8      3  A7      2  D6      0
H      5  B9      4  A8      3  D7      0
H      6  B10     1  A9      2  D8      0
C      2  B11     1  A10     6  D9      0
C      12 B12     2  A11     1  D10     0

```

C	13	B13	12	A12	2	D11	0
C	14	B14	13	A13	12	D12	0
C	15	B15	14	A14	13	D13	0
C	15	B16	14	A15	13	D14	0
C	16	B17	15	A16	14	D15	0
H	16	B18	15	A17	14	D16	0
C	17	B19	15	A18	14	D17	0
C	20	B20	17	A19	15	D18	0
H	20	B21	17	A20	15	D19	0
O	12	B22	2	A21	1	D20	0
H	13	B23	12	A22	2	D21	0
H	14	B24	13	A23	12	D22	0
O	17	B25	15	A24	14	D23	0
O	21	B26	20	A25	17	D24	0
O	18	B27	16	A26	15	D25	0
C	26	B28	17	A27	15	D26	0
H	29	B29	26	A28	17	D27	0
H	29	B30	26	A29	17	D28	0
H	29	B31	26	A30	17	D29	0
C	27	B32	21	A31	20	D30	0
H	33	B33	27	A32	21	D31	0
H	33	B34	27	A33	21	D32	0
H	33	B35	27	A34	21	D33	0
C	28	B36	18	A35	16	D34	0
H	37	B37	28	A36	18	D35	0
H	37	B38	28	A37	18	D36	0
H	37	B39	28	A38	18	D37	0

Variables:

B1	1.40677
B2	1.40579
B3	1.39655
B4	1.39664
B5	1.39222
B6	1.0802
B7	1.08017
B8	1.08187
B9	1.08203
B10	1.08187
B11	1.4976
B12	1.47202
B13	1.3515
B14	1.45749
B15	1.40766
B16	1.42007
B17	1.38741
B18	1.08029
B19	1.39639
B20	1.39459
B21	1.07823
B22	1.25818
B23	1.08039
B24	1.08217
B25	1.38755
B26	1.39747
B27	1.40723
B28	1.45306
B29	1.09173

B30	1.0918
B31	1.08435
B32	1.47383
B33	1.09101
B34	1.08517
B35	1.08746
B36	1.47172
B37	1.08557
B38	1.0895
B39	1.09119
A1	118.66274
A2	120.55461
A3	120.17632
A4	120.7625
A5	121.37418
A6	120.74586
A7	119.73778
A8	120.07466
A9	119.88751
A10	117.64555
A11	119.95954
A12	120.79575
A13	127.14474
A14	123.25531
A15	119.51625
A16	122.12595
A17	120.49196
A18	121.00706
A19	120.14671
A20	122.24682
A21	119.10924
A22	118.28394
A23	116.93361
A24	116.01641
A25	117.94342
A26	119.3072
A27	119.73603
A28	111.11654
A29	111.12397
A30	104.90847
A31	116.71269
A32	109.75634
A33	105.11593
A34	110.67155
A35	115.30732
A36	105.44029
A37	110.65688
A38	110.14447
D1	-0.12914
D2	-0.17017
D3	0.3336
D4	179.61479
D5	179.06075
D6	179.69892
D7	-179.85492
D8	179.80457
D9	179.7269

D10	173.13849
D11	177.62554
D12	179.43283
D13	-3.95998
D14	176.8319
D15	179.99605
D16	-0.40727
D17	-179.09245
D18	-0.75473
D19	178.95961
D20	-6.40992
D21	-2.78375
D22	-0.80374
D23	0.08759
D24	-178.46984
D25	-179.49551
D26	179.03381
D27	-60.22958
D28	62.59593
D29	-178.85125
D30	-119.22213
D31	63.796
D32	-177.97237
D33	-58.17339
D34	-108.13119
D35	-179.85977
D36	-60.38714
D37	61.58122

GradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGrad
 Berny optimization.
 Initialization pass.

Input orientation:

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	6	0	0.350304	-0.754426	0.194160
2	6	0	-0.071708	-0.126374	1.387108
3	6	0	0.733358	0.882450	1.963854
4	6	0	1.894966	1.319633	1.302647
5	6	0	2.320347	0.677881	0.124348
6	6	0	1.515671	-0.321796	-0.457791
7	1	0	-0.289857	-1.512906	-0.247796
8	1	0	0.397511	1.400490	2.858940
9	1	0	2.508254	2.098578	1.748258
10	1	0	3.218419	1.017883	-0.384492
11	1	0	1.842780	-0.818135	-1.367752
12	6	0	-1.331887	-0.597609	2.038001
13	6	0	-1.452286	-0.485938	3.513560
14	6	0	-2.653419	-0.594583	4.134911
15	6	0	-2.838117	-0.573770	5.594097
16	6	0	-1.859556	-1.070962	6.482417
17	6	0	-4.010151	0.006017	6.150264
18	6	0	-2.066923	-1.069451	7.868472

19	1	0	-0.980563	-1.582489	6.098298
20	6	0	-4.223104	0.017199	7.538377
21	6	0	-3.213244	-0.447133	8.398180
22	1	0	-5.094703	0.472753	7.995671
23	8	0	-2.260212	-1.103496	1.333148
24	1	0	-0.543531	-0.310378	4.086276
25	1	0	-3.545443	-0.714095	3.523125
26	8	0	-4.938641	0.493084	5.212051
27	8	0	-3.466439	-0.414175	9.790602
28	8	0	-1.055668	-1.594596	8.712178
29	6	0	-6.205239	1.031341	5.728023
30	1	0	-6.751091	0.266602	6.289863
31	1	0	-6.026516	1.910106	6.355840
32	1	0	-6.756807	1.311626	4.833469
33	6	0	-2.521551	0.444370	10.553780
34	1	0	-2.571618	1.468268	10.170555
35	1	0	-2.881487	0.403420	11.580395
36	1	0	-1.505477	0.054889	10.474468
37	6	0	-1.463016	-2.835348	9.423501
38	1	0	-0.573151	-3.147463	9.967528
39	1	0	-2.289536	-2.627771	10.106184
40	1	0	-1.751554	-3.596362	8.691934

Item	Value	Threshold	Converged?
Maximum Force	0.000016	0.000450	YES
RMS Force	0.000003	0.000300	YES
Maximum Displacement	0.000784	0.001800	YES
RMS Displacement	0.000148	0.001200	YES

Predicted change in Energy=-4.847286D-09
Optimization completed.
-- Stationary point found.

! Optimized Parameters !
! (Angstroms and Degrees) !

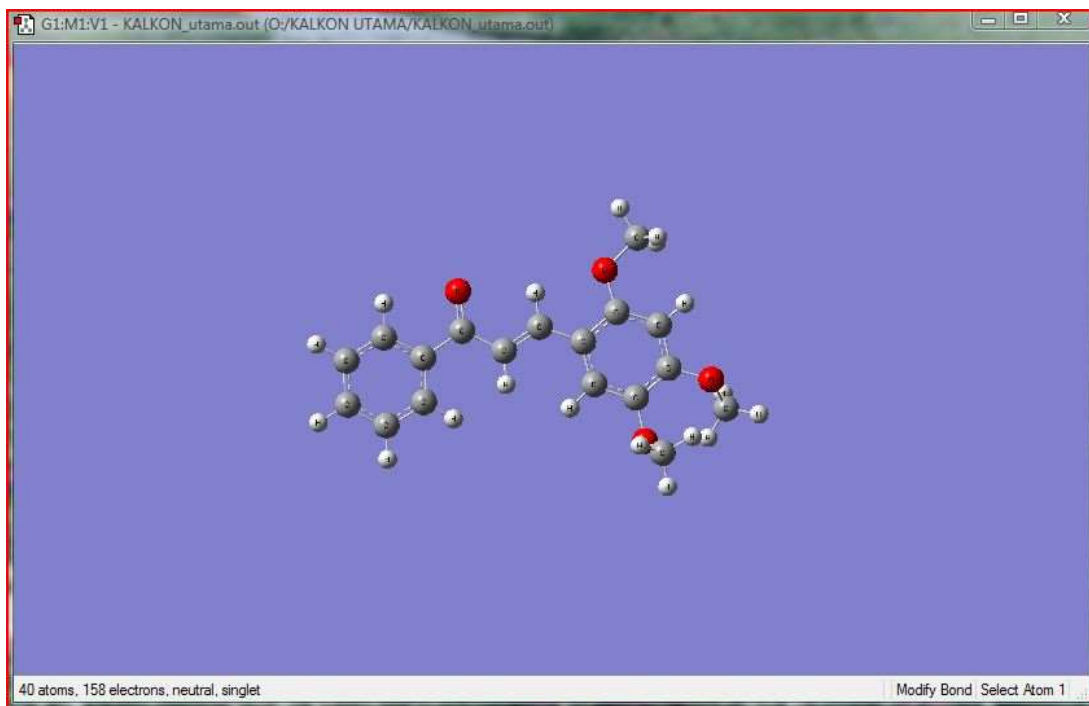
! Name	Definition	Value	Derivative Info.	!
! R1	R(1,2)	1.4127	-DE/DX = 0.0	!
! R2	R(1,6)	1.4037	-DE/DX = 0.0	!
! R3	R(1,7)	1.0865	-DE/DX = 0.0	!
! R4	R(2,3)	1.4137	-DE/DX = 0.0	!
! R5	R(2,12)	1.4946	-DE/DX = 0.0	!
! R6	R(3,4)	1.4063	-DE/DX = 0.0	!
! R7	R(3,8)	1.0874	-DE/DX = 0.0	!
! R8	R(4,5)	1.4075	-DE/DX = 0.0	!
! R9	R(4,9)	1.0869	-DE/DX = 0.0	!
! R10	R(5,6)	1.4092	-DE/DX = 0.0	!
! R11	R(5,10)	1.0868	-DE/DX = 0.0	!
! R12	R(6,11)	1.0869	-DE/DX = 0.0	!
! R13	R(12,13)	1.4847	-DE/DX = 0.0	!
! R14	R(12,23)	1.2706	-DE/DX = 0.0	!
! R15	R(13,14)	1.3567	-DE/DX = 0.0	!
! R16	R(13,24)	1.0884	-DE/DX = 0.0	!
! R17	R(14,15)	1.471	-DE/DX = 0.0	!
! R18	R(14,25)	1.0882	-DE/DX = 0.0	!
! R19	R(15,16)	1.4121	-DE/DX = 0.0	!

! R20	R(15,17)	1.421	-DE/DX = 0.0	!
! R21	R(16,18)	1.4015	-DE/DX = 0.0	!
! R22	R(16,19)	1.0871	-DE/DX = 0.0	!
! R23	R(17,20)	1.4044	-DE/DX = 0.0	!
! R24	R(17,26)	1.407	-DE/DX = 0.0	!
! R25	R(18,21)	1.4078	-DE/DX = 0.0	!
! R26	R(18,28)	1.4178	-DE/DX = 0.0	!
! R27	R(20,21)	1.4052	-DE/DX = 0.0	!
! R28	R(20,22)	1.0846	-DE/DX = 0.0	!
! R29	R(21,27)	1.4156	-DE/DX = 0.0	!
! R30	R(26,29)	1.4698	-DE/DX = 0.0	!
! R31	R(27,33)	1.4874	-DE/DX = 0.0	!
! R32	R(28,37)	1.4871	-DE/DX = 0.0	!
! R33	R(29,30)	1.0947	-DE/DX = 0.0	!
! R34	R(29,31)	1.0947	-DE/DX = 0.0	!
! R35	R(29,32)	1.0877	-DE/DX = 0.0	!
! R36	R(33,34)	1.0944	-DE/DX = 0.0	!
! R37	R(33,35)	1.0887	-DE/DX = 0.0	!
! R38	R(33,36)	1.0911	-DE/DX = 0.0	!
! R39	R(37,38)	1.0887	-DE/DX = 0.0	!
! R40	R(37,39)	1.0919	-DE/DX = 0.0	!
! R41	R(37,40)	1.0943	-DE/DX = 0.0	!
! A1	A(2,1,6)	120.2124	-DE/DX = 0.0	!
! A2	A(2,1,7)	118.5458	-DE/DX = 0.0	!
! A3	A(6,1,7)	121.0251	-DE/DX = 0.0	!
! A4	A(1,2,3)	119.4494	-DE/DX = 0.0	!
! A5	A(1,2,12)	118.6506	-DE/DX = 0.0	!
! A6	A(3,2,12)	121.8362	-DE/DX = 0.0	!
! A7	A(2,3,4)	120.0279	-DE/DX = 0.0	!
! A8	A(2,3,8)	119.995	-DE/DX = 0.0	!
! A9	A(4,3,8)	119.6076	-DE/DX = 0.0	!
! A10	A(3,4,5)	120.0987	-DE/DX = 0.0	!
! A11	A(3,4,9)	119.7415	-DE/DX = 0.0	!
! A12	A(5,4,9)	119.9615	-DE/DX = 0.0	!
! A13	A(4,5,6)	119.7819	-DE/DX = 0.0	!
! A14	A(4,5,10)	119.9377	-DE/DX = 0.0	!
! A15	A(6,5,10)	120.0268	-DE/DX = 0.0	!
! A16	A(1,6,5)	120.0571	-DE/DX = 0.0	!
! A17	A(1,6,11)	119.8651	-DE/DX = 0.0	!
! A18	A(5,6,11)	119.8647	-DE/DX = 0.0	!
! A19	A(2,12,13)	118.5216	-DE/DX = 0.0	!
! A20	A(2,12,23)	119.9974	-DE/DX = 0.0	!
! A21	A(13,12,23)	121.4677	-DE/DX = 0.0	!
! A22	A(12,13,14)	121.3963	-DE/DX = 0.0	!
! A23	A(12,13,24)	117.8646	-DE/DX = 0.0	!
! A24	A(14,13,24)	120.7388	-DE/DX = 0.0	!
! A25	A(13,14,15)	124.3573	-DE/DX = 0.0	!
! A26	A(13,14,25)	118.4916	-DE/DX = 0.0	!
! A27	A(15,14,25)	117.1488	-DE/DX = 0.0	!
! A28	A(14,15,16)	122.1447	-DE/DX = 0.0	!
! A29	A(14,15,17)	119.8416	-DE/DX = 0.0	!
! A30	A(16,15,17)	117.972	-DE/DX = 0.0	!
! A31	A(15,16,18)	121.2823	-DE/DX = 0.0	!
! A32	A(15,16,19)	120.2467	-DE/DX = 0.0	!
! A33	A(18,16,19)	118.0076	-DE/DX = 0.0	!
! A34	A(15,17,20)	121.0096	-DE/DX = 0.0	!
! A35	A(15,17,26)	115.1231	-DE/DX = 0.0	!

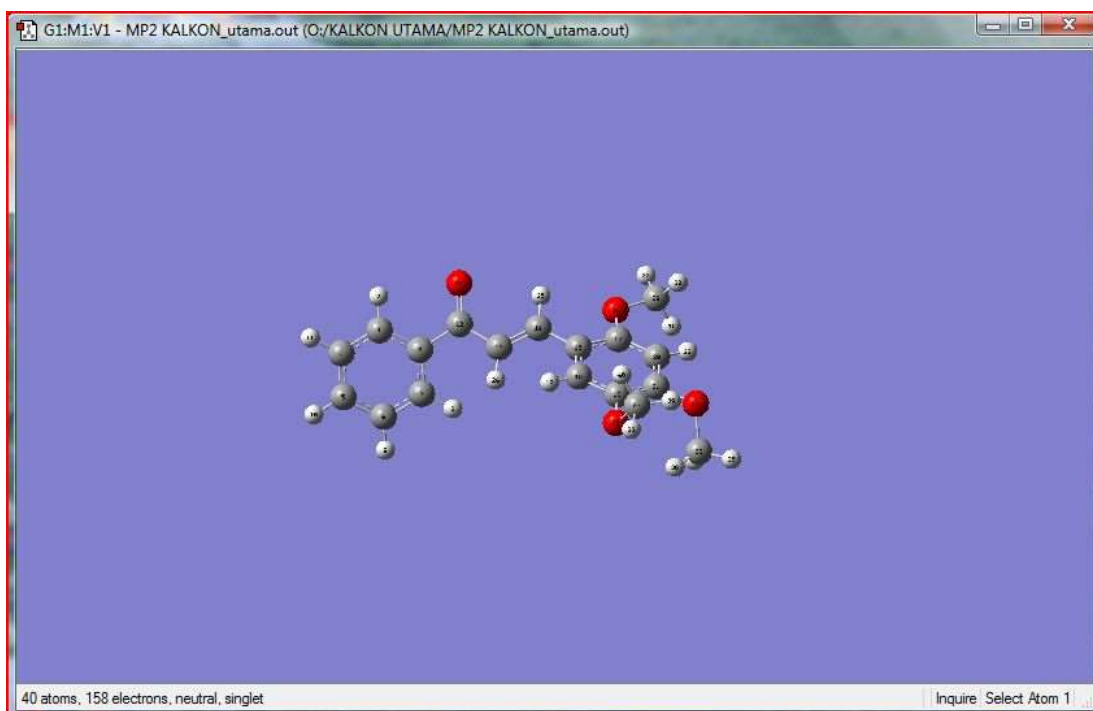
! A36	A(20,17,26)	123.7987	-DE/DX = 0.0	!
! A37	A(16,18,21)	119.5432	-DE/DX = 0.0	!
! A38	A(16,18,28)	118.8544	-DE/DX = 0.0	!
! A39	A(21,18,28)	121.3716	-DE/DX = 0.0	!
! A40	A(17,20,21)	119.5486	-DE/DX = 0.0	!
! A41	A(17,20,22)	122.8159	-DE/DX = 0.0	!
! A42	A(21,20,22)	117.2792	-DE/DX = 0.0	!
! A43	A(18,21,20)	120.0666	-DE/DX = 0.0	!
! A44	A(18,21,27)	121.7369	-DE/DX = 0.0	!
! A45	A(20,21,27)	117.7489	-DE/DX = 0.0	!
! A46	A(17,26,29)	117.4762	-DE/DX = 0.0	!
! A47	A(21,27,33)	113.8598	-DE/DX = 0.0	!
! A48	A(18,28,37)	113.4721	-DE/DX = 0.0	!
! A49	A(26,29,30)	110.7342	-DE/DX = 0.0	!
! A50	A(26,29,31)	110.7705	-DE/DX = 0.0	!
! A51	A(26,29,32)	104.0434	-DE/DX = 0.0	!
! A52	A(30,29,31)	110.3554	-DE/DX = 0.0	!
! A53	A(30,29,32)	110.4422	-DE/DX = 0.0	!
! A54	A(31,29,32)	110.3417	-DE/DX = 0.0	!
! A55	A(27,33,34)	109.3472	-DE/DX = 0.0	!
! A56	A(27,33,35)	104.6025	-DE/DX = 0.0	!
! A57	A(27,33,36)	110.3808	-DE/DX = 0.0	!
! A58	A(34,33,35)	110.5042	-DE/DX = 0.0	!
! A59	A(34,33,36)	110.5563	-DE/DX = 0.0	!
! A60	A(35,33,36)	111.2861	-DE/DX = 0.0	!
! A61	A(28,37,38)	104.734	-DE/DX = 0.0	!
! A62	A(28,37,39)	110.3527	-DE/DX = 0.0	!
! A63	A(28,37,40)	109.4312	-DE/DX = 0.0	!
! A64	A(38,37,39)	111.1482	-DE/DX = 0.0	!
! A65	A(38,37,40)	110.4996	-DE/DX = 0.0	!
! A66	A(39,37,40)	110.5226	-DE/DX = 0.0	!
! D1	D(6,1,2,3)	-4.0133	-DE/DX = 0.0	!
! D2	D(6,1,2,12)	178.8355	-DE/DX = 0.0	!
! D3	D(7,1,2,3)	-178.7192	-DE/DX = 0.0	!
! D4	D(7,1,2,12)	4.1297	-DE/DX = 0.0	!
! D5	D(2,1,6,5)	4.4568	-DE/DX = 0.0	!
! D6	D(2,1,6,11)	179.1459	-DE/DX = 0.0	!
! D7	D(7,1,6,5)	179.0294	-DE/DX = 0.0	!
! D8	D(7,1,6,11)	-6.2814	-DE/DX = 0.0	!
! D9	D(1,2,3,4)	4.4668	-DE/DX = 0.0	!
! D10	D(1,2,3,8)	177.4628	-DE/DX = 0.0	!
! D11	D(12,2,3,4)	-178.4761	-DE/DX = 0.0	!
! D12	D(12,2,3,8)	-5.48	-DE/DX = 0.0	!
! D13	D(1,2,12,13)	150.0364	-DE/DX = 0.0	!
! D14	D(1,2,12,23)	-28.6581	-DE/DX = 0.0	!
! D15	D(3,2,12,13)	-27.0435	-DE/DX = 0.0	!
! D16	D(3,2,12,23)	154.262	-DE/DX = 0.0	!
! D17	D(2,3,4,5)	-5.3788	-DE/DX = 0.0	!
! D18	D(2,3,4,9)	179.7383	-DE/DX = 0.0	!
! D19	D(8,3,4,5)	-178.4021	-DE/DX = 0.0	!
! D20	D(8,3,4,9)	6.715	-DE/DX = 0.0	!
! D21	D(3,4,5,6)	5.7841	-DE/DX = 0.0	!
! D22	D(3,4,5,10)	180.0006	-DE/DX = 0.0	!
! D23	D(9,4,5,6)	-179.3443	-DE/DX = 0.0	!
! D24	D(9,4,5,10)	-5.1278	-DE/DX = 0.0	!
! D25	D(4,5,6,1)	-5.3196	-DE/DX = 0.0	!
! D26	D(4,5,6,11)	179.9913	-DE/DX = 0.0	!

Sum of Mulliken charges with hydrogens summed into heavy atoms = 0.00000
Electronic spatial extent (au): <R**2>= 10615.9999
Charge= 0.0000 electrons
Dipole moment (field-independent basis, Debye):
X= -3.6120 Y= -2.0823 Z= 2.7027 Tot= 4.9686
Quadrupole moment (field-independent basis, Debye-Ang):
XX= -111.7698 YY= -125.3881 ZZ= -127.1636
XY= -14.0878 XZ= 2.2353 YZ= 5.9808
Traceless Quadrupole moment (field-independent basis, Debye-Ang):
XX= 9.6707 YY= -3.9476 ZZ= -5.7231
XY= -14.0878 XZ= 2.2353 YZ= 5.9808
Octapole moment (field-independent basis, Debye-Ang**2):
XXX= 5.7658 YYY= 49.3154 ZZZ= 8.6916 XYY= -97.1796
XXY= -82.1313 XXZ= 39.1620 XZZ= -40.8238 YZZ= -24.6978
YYZ= 13.3328 XYZ= -16.3934
Hexadecapole moment (field-independent basis, Debye-Ang**3):
XXXX= -10334.4391 YYYY= -2067.4559 ZZZZ= -767.5722 XXXY= -93.8449
XXXZ= -193.8625 YYYYX= -78.3726 YYYZ= 91.1718 ZZZX= -2.3182
ZZZY= 8.1425 XXYY= -2107.9363 XXZZ= -1876.9073 YYZZ= -482.8086
XXYZ= -26.6802 YYXZ= 54.6735 ZZXY= 15.6781
N-N= 1.631777412893D+03 E-N=-5.583325713521D+03 KE= 9.901153468245D+02
1|1|UNPC-LABKOMPUTASI|FOpt|RMP2-FC|6-311G|C18H18O4|KOMPUTASI|21-Mar-20
15|0|/# opt rmp2/6-311g geom=connectivity||MP2 KALKON 5||0,1|C,0.35030
4096,-0.7544264754,0.1941601632|C,-0.0717079469,-0.1263739995,1.387107
6378|C,0.7333579231,0.8824499564,1.9638538736|C,1.8949658565,1.3196334
222,1.3026467957|C,2.3203472224,0.6778809432,0.124348452|C,1.515671076
8,-0.3217959082,-0.4577907687|H,-0.289857391,-1.512906151,-0.247796115
7|H,0.3975114537,1.4004896881,2.8589404629|H,2.5082537148,2.0985775223
,1.7482580879|H,3.2184190956,1.0178828695,-0.384492106|H,1.8427801307,
-0.8181349486,-1.367751571|C,-1.3318870048,-0.5976091398,2.0380005761|
C,-1.4522860043,-0.4859381461,3.5135603479|C,-2.6534187504,-0.59458273
75,4.1349110446|C,-2.8381174048,-0.5737695196,5.5940966644|C,-1.859555
9435,-1.0709620118,6.482417426|C,-4.01015076,0.0060166902,6.1502637005
|C,-2.0669226307,-1.0694513511,7.8684716|H,-0.9805631127,-1.5824885645
,6.0982983512|C,-4.2231039435,0.0171992386,7.5383765621|C,-3.213243972
7,-0.4471327332,8.3981801357|H,-5.0947029251,0.4727530254,7.9956710486
|O,-2.2602123626,-1.1034959702,1.3331484525|H,-0.5435309713,-0.3103778
34,4.0862755385|H,-3.5454432947,-0.7140946756,3.5231251726|O,-4.938640
5094,0.4930841955,5.2120505265|O,-3.4664386027,-0.4141746726,9.7906021
893|O,-1.0556679168,-1.5945964174,8.7121778867|C,-6.2052391277,1.03134
14556,5.7280227565|H,-6.7510908212,0.2666024753,6.2898630517|H,-6.0265
155532,1.9101058857,6.3558395387|H,-6.7568067173,1.3116263059,4.833468
5435|C,-2.5215514154,0.4443695322,10.5537795353|H,-2.5716184651,1.4682
680733,10.1705546817|H,-2.8814866961,0.4034199921,11.5803949905|H,-1.5
054768185,0.0548890189,10.4744682069|C,-1.463015726,-2.8353478263,9.42
35009634|H,-0.5731505228,-3.1474628179,9.967527869|H,-2.2895359097,-2.
6277706544,10.1061840124|H,-1.7515538855,-3.5963618101,8.6919338964||V
ersion=IA32W-G09RevA.02|State=1-A|HF=-991.2899782|MP2=-993.5255717|RMS
D=3.404e-009|RMSF=5.908e-006|Dipole=0.2016155,0.6150434,1.3507097|PG=C
01 [X(C18H18O4)]||@

Lampiran 3. Visualisasi Struktur Senyawa Kalkon Hasil Optimasi Geometri



Struktur Teroptimasi Metode DFT B3LYP 6-311G



Struktur Teroptimasi MP2 6-311G

Lampiran 4. *Gaussian Output File* Perhitungan Energi HOMO-LUMO

```

*****
Gaussian 09: IA32W-G09RevA.02 11-Jun-2009
07-Feb-2015
*****
%chk=HOMO LUMO_1.chk
%mem=200MW
%nproc=1
Will use up to 1 processors via shared memory.

-----
# freq ub3lyp/6-311g guess=mix pop=reg
-----
1/10=4,30=1,38=1/1,3;
2/12=2,17=6,18=5,40=1/2;
3/5=4,6=6,11=2,16=1,25=1,30=1,71=2,74=-5,116=2/1,2,3;
4/13=-1/1;
5/5=2,38=5,98=1/2;
8/6=4,10=90,11=11/1;
11/6=1,8=1,9=11,15=111,16=1/1,2,10;
10/6=1/2;
6/18=1,28=1/1;
7/8=1,10=1,25=1/1,2,3,16;
1/10=4,30=1/3;
99//99;
-----
HOMO LUMO 1
-----
Symbolic Z-matrix:
Charge = 0 Multiplicity = 1
C
C      1  B1
C      2  B2      1  A1
C      3  B3      2  A2      1  D1      0
C      4  B4      3  A3      2  D2      0
C      1  B5      2  A4      3  D3      0
H      3  B6      2  A5      1  D4      0
H      5  B7      4  A6      3  D5      0
H      6  B8      1  A7      2  D6      0
C      2  B9      1  A8      6  D7      0
C      10 B10      2  A9      1  D8      0
C      11 B11      10 A10      2  D9      0
C      12 B12      11 A11      10 D10      0
C      13 B13      12 A12      11 D11      0
C      13 B14      12 A13      11 D12      0
C      14 B15      13 A14      12 D13      0
H      14 B16      13 A15      12 D14      0
C      15 B17      13 A16      12 D15      0
C      18 B18      15 A17      13 D16      0
H      18 B19      15 A18      13 D17      0
O      10 B20      2  A19      1  D18      0
H      12 B21      11 A20      10 D19      0
H      11 B22      10 A21      2  D20      0
O      15 B23      13 A22      12 D21      0
O      19 B24      18 A23      15 D22      0
O      16 B25      14 A24      13 D23      0

```

O	1	B26	6	A25	5	D24	0
H	27	B27	1	A26	6	D25	0
O	4	B28	3	A27	2	D26	0
H	29	B29	4	A28	3	D27	0
C	24	B30	15	A29	13	D28	0
H	31	B31	24	A30	15	D29	0
H	31	B32	24	A31	15	D30	0
H	31	B33	24	A32	15	D31	0
C	25	B34	19	A33	18	D32	0
H	35	B35	25	A34	19	D33	0
H	35	B36	25	A35	19	D34	0
H	35	B37	25	A36	19	D35	0
C	26	B38	16	A37	14	D36	0
H	39	B39	26	A38	16	D37	0
H	39	B40	26	A39	16	D38	0
H	39	B41	26	A40	16	D39	0

Variables:

B1	1.40888
B2	1.39977
B3	1.3942
B4	1.39363
B5	1.39549
B6	1.08038
B7	1.08312
B8	1.08346
B9	1.50195
B10	1.47441
B11	1.3512
B12	1.4576
B13	1.40757
B14	1.41987
B15	1.38753
B16	1.0803
B17	1.39645
B18	1.39465
B19	1.07828
B20	1.2501
B21	1.08254
B22	1.08225
B23	1.38794
B24	1.39765
B25	1.40749
B26	1.39176
B27	0.97157
B28	1.39948
B29	0.97134
B30	1.45282
B31	1.09181
B32	1.0918
B33	1.08436
B34	1.47365
B35	1.08522
B36	1.09107
B37	1.08745
B38	1.4714
B39	1.08968
B40	1.08558

B41	1.09118
A1	118.55721
A2	121.16457
A3	120.00444
A4	120.08579
A5	120.51327
A6	120.71963
A7	119.72696
A8	122.08565
A9	116.9863
A10	121.19835
A11	127.14538
A12	123.15712
A13	119.59936
A14	122.10161
A15	120.43501
A16	121.00935
A17	120.1408
A18	122.20584
A19	120.73969
A20	116.91818
A21	116.89323
A22	116.01504
A23	117.94441
A24	119.36418
A25	121.82422
A26	111.72837
A27	116.75136
A28	111.86613
A29	119.69403
A30	111.09557
A31	111.1274
A32	104.92111
A33	116.69122
A34	105.11946
A35	109.76134
A36	110.67112
A37	115.18263
A38	110.66376
A39	105.46914
A40	110.13312
D1	1.51397
D2	-1.04603
D3	-0.87796
D4	179.70237
D5	-179.75337
D6	179.43932
D7	176.64603
D8	134.70751
D9	176.27012
D10	179.114
D11	2.00244
D12	-178.64583
D13	179.93333
D14	0.16788
D15	179.17036
D16	0.71078

D17	-179.15028
D18	-46.46748
D19	-0.63134
D20	-5.2589
D21	-0.15724
D22	178.28814
D23	179.66945
D24	-177.70719
D25	-4.80451
D26	179.10864
D27	-178.80399
D28	179.80858
D29	-61.68897
D30	61.10271
D31	179.73712
D32	119.33257
D33	178.07858
D34	-63.69396
D35	58.27564
D36	107.00652
D37	61.23864
D38	-179.27601
D39	-60.69482

Input orientation:

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	6	0	0.000000	0.000000	0.000000
2	6	0	0.000000	0.000000	1.408881
3	6	0	1.229473	0.000000	2.078021
4	6	0	2.433284	0.031520	1.375434
5	6	0	2.426801	0.041749	-0.018144
6	6	0	1.207341	0.018502	-0.699553
7	1	0	1.266356	0.004835	3.157765
8	1	0	3.355208	0.062165	-0.575633
9	1	0	1.200720	0.009192	-1.782949
10	6	0	-1.271346	0.054975	2.206696
11	6	0	-1.387504	-0.874649	3.345196
12	6	0	-2.461284	-0.846663	4.164926
13	6	0	-2.717022	-1.711202	5.310246
14	6	0	-1.815105	-2.700811	5.744392
15	6	0	-3.920273	-1.559501	6.048617
16	6	0	-2.080397	-3.511179	6.838996
17	1	0	-0.878126	-2.851650	5.228277
18	6	0	-4.203130	-2.383080	7.140300
19	6	0	-3.292575	-3.364220	7.531831
20	1	0	-5.116635	-2.293683	7.706168
21	8	0	-2.171301	0.873584	1.919098
22	1	0	-3.221389	-0.105921	3.951789
23	1	0	-0.587704	-1.592108	3.474932
24	8	0	-4.783386	-0.565646	5.608528
25	8	0	-3.605474	-4.138325	8.652668
26	8	0	-1.140519	-4.487605	7.218779

27	8	0	-1.226318	-0.070593	-0.654340
28	1	0	-1.122089	-0.027627	-1.619350
29	8	0	3.607078	0.048111	2.137328
30	1	0	4.400543	0.088642	1.578518
31	6	0	-6.039879	-0.344103	6.303386
32	1	0	-6.675650	-1.230549	6.257993
33	1	0	-5.869496	-0.060227	7.343779
34	1	0	-6.512516	0.474224	5.771600
35	6	0	-3.731389	-5.591043	8.439612
36	1	0	-3.938735	-6.004206	9.421449
37	1	0	-4.565414	-5.794192	7.766133
38	1	0	-2.809783	-6.000684	8.032944
39	6	0	-0.384847	-4.185870	8.444723
40	1	0	-1.056434	-4.096276	9.298159
41	1	0	0.292452	-5.023254	8.580854
42	1	0	0.184360	-3.263625	8.317664

Alpha Molecular Orbital Coefficients:

		83	84	85	86	87
		O	O	O	O	O
Eigenvalues --		-0.26749	-0.24691	-0.23801	-0.21739	-0.21567
1 1 C 1S		0.00099	0.00017	-0.00253	0.00084	-0.00022
2 2S		0.00155	0.00027	-0.00391	0.00138	-0.00035
3 2PX		-0.00497	-0.00121	0.02206	0.02317	-0.03951
4 2PY		-0.00306	-0.00046	0.00039	-0.03315	0.05241
5 2PZ		0.00434	-0.00054	-0.00864	0.04949	-0.07881
6 3S		-0.00363	-0.00077	0.00951	-0.00398	0.00101
7 3PX		-0.00693	-0.00147	0.03081	0.03984	-0.06780
8 3PY		-0.00418	-0.00009	-0.00083	-0.05495	0.08882
9 3PZ		0.00757	-0.00112	-0.01044	0.08524	-0.13522
10 4S		-0.03719	0.00600	-0.00125	-0.01884	0.01449
11 4PX		-0.02804	-0.00937	0.01223	0.00412	-0.04656
12 4PY		-0.00065	-0.00726	0.02897	-0.03719	0.05424
13 4PZ		0.02106	0.00011	0.00105	0.07182	-0.10224
14 2 C 1S		-0.00271	-0.00077	0.01861	0.00120	-0.00104
15 2S		-0.00432	-0.00115	0.03089	0.00223	-0.00169
16 2PX		0.06603	0.00347	-0.06520	0.01282	-0.02428
17 2PY		-0.05246	0.00191	-0.05323	-0.02230	0.03269
18 2PZ		0.10157	0.00035	0.01413	0.03019	-0.05242
19 3S		0.00976	0.00060	-0.09058	-0.01156	0.00355
20 3PX		0.11112	0.00605	-0.12167	0.01995	-0.03995
21 3PY		-0.08739	0.00213	-0.10211	-0.03974	0.05464
22 3PZ		0.16424	-0.00024	0.02819	0.04883	-0.08599
23 4S		0.07254	0.04720	-0.27421	0.04257	0.04620
24 4PX		0.08726	0.02647	-0.20412	0.02036	-0.01673
25 4PY		-0.03766	0.01689	-0.15313	-0.02682	0.06028
26 4PZ		0.17785	0.00102	0.03429	0.07625	-0.11185
27 3 C 1S		0.00040	-0.00051	-0.00529	-0.00193	-0.00088
28 2S		0.00075	-0.00081	-0.00853	-0.00310	-0.00142
29 2PX		0.05007	0.00348	0.02184	-0.01083	0.02472
30 2PY		-0.07246	-0.00242	0.00861	0.02199	-0.02714
31 2PZ		0.10560	-0.00194	0.02853	-0.03587	0.04150
32 3S		-0.00399	0.00175	0.02500	0.00790	0.00368
33 3PX		0.08398	0.00690	0.03356	-0.01570	0.04072
34 3PY		-0.11422	-0.00369	0.00925	0.03676	-0.04385
35 3PZ		0.17080	-0.00314	0.04352	-0.05804	0.06891
36 4S		0.05150	0.02589	0.01816	0.06121	0.01411

37	4PX	0.05926	-0.01968	0.05470	-0.05566	0.02387
38	4PY	-0.11053	-0.01957	-0.00497	0.01022	-0.07385
39	4PZ	0.16405	-0.00270	0.02760	-0.06967	0.06821
40 4	C 1S	-0.00116	0.00016	0.00544	0.00114	0.00034
41	2S	-0.00199	0.00024	0.00889	0.00180	0.00056
42	2PX	0.00686	-0.00096	-0.01652	-0.02886	0.03622
43	2PY	-0.00220	-0.00080	-0.01331	0.03084	-0.05126
44	2PZ	0.00639	0.00092	0.00881	-0.05153	0.08019
45	3S	0.00740	-0.00005	-0.02691	-0.00377	-0.00180
46	3PX	0.01225	-0.00143	-0.02736	-0.04860	0.06185
47	3PY	-0.00396	-0.00178	-0.01863	0.05265	-0.08755
48	3PZ	0.01034	0.00107	0.01735	-0.08803	0.13599
49	4S	-0.01813	-0.02861	-0.02299	-0.05508	-0.01897
50	4PX	-0.00673	-0.01482	-0.02425	-0.06309	0.03157
51	4PY	-0.01492	-0.01015	-0.01892	0.02109	-0.07076
52	4PZ	0.00636	0.00270	0.01085	-0.06289	0.10798
53 5	C 1S	0.00009	-0.00017	-0.00036	-0.00021	-0.00048
54	2S	0.00008	-0.00030	-0.00041	-0.00035	-0.00078
55	2PX	-0.04455	0.00104	-0.00143	-0.01379	0.02737
56	2PY	0.05595	-0.00065	0.00747	0.01868	-0.03336
57	2PZ	-0.09022	-0.00066	-0.01274	-0.03198	0.05307
58	3S	0.00037	0.00101	0.00073	0.00133	0.00210
59	3PX	-0.07046	0.00180	-0.00438	-0.02258	0.04448
60	3PY	0.08940	-0.00131	0.01049	0.02999	-0.05463
61	3PZ	-0.14471	-0.00132	-0.01955	-0.05263	0.08651
62	4S	-0.01183	-0.00241	-0.00278	-0.01300	0.00750
63	4PX	-0.06614	0.00412	-0.00236	-0.02161	0.05045
64	4PY	0.08672	0.00230	0.02202	0.04106	-0.05481
65	4PZ	-0.13879	0.00008	-0.01878	-0.06145	0.10845
66 6	C 1S	-0.00155	-0.00048	0.00485	-0.00058	0.00024
67	2S	-0.00256	-0.00081	0.00794	-0.00101	0.00041
68	2PX	-0.04097	0.00070	-0.02417	0.01910	-0.02742
69	2PY	0.06153	0.00119	-0.00174	-0.02230	0.03283
70	2PZ	-0.09113	-0.00039	-0.01052	0.03649	-0.05310
71	3S	0.00790	0.00263	-0.02285	0.00358	-0.00132
72	3PX	-0.06473	0.00137	-0.03909	0.03219	-0.04580
73	3PY	0.09984	0.00220	-0.00534	-0.03579	0.05315
74	3PZ	-0.14546	-0.00034	-0.02001	0.05963	-0.08640
75	4S	0.00534	-0.00718	-0.04389	-0.00901	-0.01505
76	4PX	-0.06552	-0.00359	-0.02965	0.03057	-0.05253
77	4PY	0.08075	-0.00312	-0.00443	-0.05820	0.07263
78	4PZ	-0.14712	-0.00248	-0.01345	0.06279	-0.09803
79 7	H 1S	-0.00337	0.00258	0.01432	0.00497	0.00182
80	2S	-0.00398	0.00446	0.02186	0.00890	0.00323
81	3S	-0.01125	-0.00204	0.00793	-0.01213	-0.00998
82 8	H 1S	0.00128	-0.00050	-0.00610	-0.00078	-0.00143
83	2S	0.00390	0.00045	-0.00796	0.00190	-0.00204
84	3S	0.00223	0.00020	-0.00761	0.00116	-0.00248
85 9	H 1S	-0.00211	0.00000	0.01020	0.00042	-0.00033
86	2S	-0.00091	0.00090	0.02043	0.00401	-0.00159
87	3S	-0.00360	-0.00119	0.02330	-0.00021	0.00022
88 10	C 1S	-0.00014	0.00005	0.00023	0.00036	0.00007
89	2S	-0.00020	0.00011	0.00037	0.00066	0.00011
90	2PX	-0.01910	-0.00141	0.05265	0.00132	0.00261
91	2PY	0.00625	-0.00111	0.00403	0.00458	-0.00347
92	2PZ	-0.01808	-0.00501	0.00031	0.00707	0.00358
93	3S	0.00294	-0.00049	0.00035	-0.00238	-0.00063

94	3PX	-0.02523	-0.00063	0.06982	0.00463	0.00364
95	3PY	0.00373	-0.00087	0.00536	0.00714	-0.00043
96	3PZ	-0.02489	-0.00645	0.00176	0.01723	0.00402
97	4S	-0.04979	-0.01785	-0.02112	-0.02281	-0.01686
98	4PX	0.00974	0.02342	-0.26324	-0.01643	0.03080
99	4PY	-0.00666	0.01051	-0.00288	0.00979	0.01265
100	4PZ	-0.04758	-0.02327	0.00034	-0.02363	0.01090
101 11	C 1S	0.00822	0.00071	-0.01829	-0.00023	-0.00102
102	2S	0.01353	0.00110	-0.03008	-0.00039	-0.00182
103	2PX	0.02894	0.00560	-0.06908	0.00318	-0.00246
104	2PY	0.00334	0.01678	0.04471	0.02419	0.01757
105	2PZ	0.00010	0.07174	-0.00732	0.08965	0.06276
106	3S	-0.03806	-0.00140	0.08024	0.00165	0.00799
107	3PX	0.05156	0.01007	-0.12902	0.00594	-0.00340
108	3PY	0.00073	0.02666	0.08595	0.03874	0.02968
109	3PZ	0.00071	0.11528	-0.01497	0.14435	0.10135
110	4S	-0.11982	-0.03900	0.44288	0.01081	-0.02738
111	4PX	-0.01582	-0.00337	-0.16735	-0.01823	-0.00627
112	4PY	-0.01128	0.01554	0.15080	0.04042	0.02265
113	4PZ	0.01702	0.12180	-0.02787	0.16496	0.10256
114 12	C 1S	-0.00319	-0.00074	-0.00085	-0.00047	0.00112
115	2S	-0.00512	-0.00118	-0.00132	-0.00075	0.00184
116	2PX	-0.01499	0.00344	0.01184	-0.00160	0.00278
117	2PY	-0.00618	0.01167	0.02037	0.01149	0.00723
118	2PZ	0.01141	0.06093	-0.00084	0.03836	0.03154
119	3S	0.01325	0.00302	0.00215	0.00172	-0.00521
120	3PX	-0.02387	0.00522	0.01618	-0.00315	0.00411
121	3PY	-0.00949	0.02013	0.02841	0.01796	0.01224
122	3PZ	0.01952	0.09981	0.00039	0.06020	0.04849
123	4S	0.08384	0.03085	0.03750	0.03457	0.00057
124	4PX	-0.03286	-0.00314	0.12920	0.00470	-0.00509
125	4PY	-0.02752	-0.00193	0.04359	0.01445	0.00374
126	4PZ	0.01294	0.08131	-0.01100	0.06268	0.06217
127 13	C 1S	0.00130	0.00129	-0.00271	-0.00028	-0.00089
128	2S	0.00209	0.00212	-0.00448	-0.00045	-0.00145
129	2PX	0.00824	-0.00253	-0.01245	0.00011	-0.00295
130	2PY	0.00192	-0.00151	-0.00012	-0.02354	-0.01519
131	2PZ	0.01100	-0.02603	0.00424	-0.08952	-0.06213
132	3S	-0.00575	-0.00603	0.01386	0.00065	0.00396
133	3PX	0.01304	-0.00556	-0.01837	0.00020	-0.00518
134	3PY	0.00295	-0.00167	0.00494	-0.03924	-0.02563
135	3PZ	0.01751	-0.04328	0.00551	-0.14818	-0.10235
136	4S	-0.02075	-0.03924	-0.02614	0.02664	0.02577
137	4PX	0.01424	0.00579	0.03357	0.01829	0.00237
138	4PY	-0.00902	0.01892	-0.06716	-0.06324	-0.02748
139	4PZ	0.02400	-0.03198	0.02442	-0.15026	-0.11200
140 14	C 1S	0.00121	-0.00264	-0.00251	0.00061	0.00059
141	2S	0.00199	-0.00426	-0.00424	0.00104	0.00101
142	2PX	-0.00357	0.00802	-0.00645	-0.00343	-0.00142
143	2PY	0.00106	-0.03355	-0.00079	0.00008	-0.00125
144	2PZ	0.00523	-0.12603	-0.00481	-0.01184	-0.01112
145	3S	-0.00558	0.00976	0.01420	-0.00276	-0.00306
146	3PX	-0.00600	0.01456	-0.00935	-0.00723	-0.00441
147	3PY	0.00127	-0.05358	-0.00135	-0.00034	-0.00205
148	3PZ	0.00881	-0.20545	-0.00768	-0.01989	-0.01878
149	4S	-0.02264	0.08015	-0.04614	-0.05567	-0.02120
150	4PX	-0.00469	0.02355	-0.02626	-0.02134	-0.00574

151	4PY	-0.00358	-0.02733	-0.02576	-0.03046	-0.01537
152	4PZ	0.00729	-0.20602	-0.00359	-0.00764	-0.01041
153	15 C 1S	-0.00158	0.00111	0.00203	0.00067	0.00062
154	2S	-0.00258	0.00185	0.00331	0.00108	0.00101
155	2PX	-0.00371	-0.00117	0.00852	-0.00345	-0.00151
156	2PY	-0.00396	0.01489	0.00466	-0.01730	-0.01159
157	2PZ	-0.00194	0.05600	0.00353	-0.07601	-0.05278
158	3S	0.00730	-0.00572	-0.00924	-0.00275	-0.00273
159	3PX	-0.00482	-0.00220	0.01405	-0.00592	-0.00299
160	3PY	-0.00684	0.02562	0.01022	-0.02919	-0.01967
161	3PZ	-0.00294	0.09449	0.00550	-0.12894	-0.08942
162	4S	0.02026	-0.02808	-0.01316	-0.03658	-0.02902
163	4PX	-0.01618	-0.00329	-0.02425	-0.02167	-0.00765
164	4PY	-0.00537	0.01708	0.03071	-0.00979	-0.00866
165	4PZ	-0.00424	0.05549	-0.00263	-0.10200	-0.06975
166	16 C 1S	-0.00059	0.00322	0.00078	-0.00010	-0.00022
167	2S	-0.00100	0.00528	0.00128	-0.00002	-0.00029
168	2PX	0.00605	-0.01214	0.00270	0.00101	-0.00021
169	2PY	0.00195	-0.01149	-0.00135	0.00869	0.00603
170	2PZ	-0.00614	-0.08284	-0.00710	0.08225	0.05522
171	3S	0.00274	-0.01676	-0.00455	0.00012	0.00130
172	3PX	0.01063	-0.01818	0.00446	-0.00164	-0.00277
173	3PY	0.00373	-0.02013	-0.00232	0.01459	0.01015
174	3PZ	-0.00996	-0.13623	-0.01174	0.13672	0.09197
175	4S	0.01482	-0.02943	0.02564	0.00066	-0.00862
176	4PX	0.00146	0.01742	-0.00790	-0.02490	-0.01405
177	4PY	-0.00110	-0.05804	0.00599	0.07293	0.04318
178	4PZ	-0.00911	-0.10247	-0.01145	0.11285	0.07634
179	17 H 1S	0.00302	-0.00064	0.00321	-0.00104	-0.00135
180	2S	0.00448	0.00067	-0.00334	-0.00574	-0.00394
181	3S	0.00385	-0.00147	-0.00835	-0.01420	-0.00720
182	18 C 1S	0.00189	-0.00203	-0.00094	-0.00151	-0.00121
183	2S	0.00310	-0.00326	-0.00153	-0.00252	-0.00202
184	2PX	0.00118	0.00239	-0.00502	0.00265	0.00117
185	2PY	0.00134	0.02346	0.00206	-0.00722	-0.00458
186	2PZ	-0.01551	0.13109	0.00392	-0.00921	-0.00489
187	3S	-0.00893	0.00749	0.00437	0.00673	0.00561
188	3PX	0.00199	0.00297	-0.00899	0.00360	0.00137
189	3PY	0.00301	0.03767	0.00390	-0.01454	-0.00918
190	3PZ	-0.02523	0.21188	0.00621	-0.01311	-0.00674
191	4S	-0.02100	0.03584	0.04167	0.07036	0.04285
192	4PX	0.00135	-0.00739	-0.02045	-0.02231	-0.01415
193	4PY	0.00692	0.03953	-0.00004	-0.02287	-0.01446
194	4PZ	-0.02589	0.23032	0.00845	-0.02615	-0.01607
195	19 C 1S	-0.00075	0.00228	-0.00057	0.00049	0.00040
196	2S	-0.00122	0.00381	-0.00098	0.00070	0.00058
197	2PX	-0.00189	0.00158	-0.00118	-0.00558	-0.00369
198	2PY	-0.00846	0.01733	-0.00119	0.02113	0.01508
199	2PZ	-0.00850	0.03487	-0.00166	0.07624	0.05369
200	3S	0.00379	-0.01233	0.00361	-0.00237	-0.00203
201	3PX	-0.00298	0.00311	-0.00201	-0.00939	-0.00639
202	3PY	-0.01292	0.02833	-0.00115	0.03161	0.02258
203	3PZ	-0.01424	0.05832	-0.00302	0.12733	0.08960
204	4S	0.01152	-0.01695	-0.00821	-0.01001	-0.00237
205	4PX	-0.00342	-0.00213	0.00924	0.04042	0.02518
206	4PY	0.00598	0.00875	-0.00673	-0.00998	-0.00432
207	4PZ	-0.01375	0.03687	-0.00189	0.13018	0.09190

208	20	H 1S	0.00281	-0.00084	-0.00305	0.00088	0.00021
209		2S	0.00414	-0.00051	-0.00463	0.00337	0.00152
210		3S	0.00713	-0.00339	-0.00183	0.00250	0.00088
211	21	O 1S	0.00004	0.00026	-0.00180	-0.00003	0.00066
212		2S	-0.00003	0.00041	-0.00301	-0.00009	0.00113
213		2PX	0.02087	0.01009	-0.27358	-0.02281	0.01494
214		2PY	-0.03634	-0.01077	-0.02035	-0.02407	0.00751
215		2PZ	-0.07355	-0.05890	0.00534	-0.08158	-0.02211
216		3S	0.00075	-0.00094	0.01068	0.00099	-0.00385
217		3PX	0.03012	0.01478	-0.39789	-0.03280	0.02129
218		3PY	-0.05561	-0.01555	-0.03021	-0.03612	0.01336
219		3PZ	-0.10692	-0.08560	0.00847	-0.11781	-0.03187
220		4S	0.01154	-0.00627	0.00220	-0.00348	-0.00978
221		4PX	0.03143	0.01196	-0.37567	-0.03373	0.02045
222		4PY	-0.05370	-0.01505	-0.02705	-0.03385	0.00962
223		4PZ	-0.10428	-0.08793	0.00505	-0.12553	-0.03800
224	22	H 1S	-0.00163	-0.00254	-0.00224	0.00110	-0.00182
225		2S	0.00056	-0.00089	-0.01454	0.00171	-0.00071
226		3S	0.00061	0.00258	-0.08039	-0.00872	0.00668
227	23	H 1S	-0.00605	0.00127	-0.02732	-0.00011	0.00141
228		2S	-0.00876	-0.00080	-0.05048	-0.00596	0.00182
229		3S	0.02342	0.00311	-0.02630	0.00553	0.01051
230	24	O 1S	-0.00014	0.00000	-0.00028	-0.00003	-0.00008
231		2S	-0.00023	0.00000	-0.00050	-0.00005	-0.00013
232		2PX	-0.00157	0.00138	-0.00299	0.00342	0.00171
233		2PY	0.00214	-0.02490	-0.00060	0.02005	0.01387
234		2PZ	0.00320	-0.09702	-0.00759	0.09343	0.06315
235		3S	0.00075	-0.00001	0.00265	0.00031	0.00044
236		3PX	-0.00218	0.00199	-0.00326	0.00504	0.00235
237		3PY	0.00300	-0.03539	-0.00135	0.02786	0.01944
238		3PZ	0.00426	-0.13779	-0.01069	0.13097	0.08849
239		4S	-0.00130	0.00140	-0.01116	-0.00134	0.00084
240		4PX	-0.00229	0.00270	-0.00842	0.00591	0.00371
241		4PY	0.00405	-0.04083	0.00592	0.03493	0.02343
242		4PZ	0.00599	-0.15671	-0.01386	0.16034	0.10865
243	25	O 1S	0.00091	-0.00327	0.00001	-0.00521	-0.00367
244		2S	0.00148	-0.00530	0.00001	-0.00854	-0.00601
245		2PX	0.00521	-0.00612	0.00143	0.00658	0.00434
246		2PY	0.02344	-0.04417	0.00388	-0.03914	-0.02722
247		2PZ	0.01261	-0.03313	0.00138	-0.04582	-0.03190
248		3S	-0.00458	0.01536	0.00022	0.02705	0.01900
249		3PX	0.00765	-0.00942	0.00197	0.00746	0.00478
250		3PY	0.03315	-0.06218	0.00554	-0.05472	-0.03804
251		3PZ	0.01771	-0.04733	0.00175	-0.06357	-0.04423
252		4S	-0.00572	0.02773	-0.00318	0.02265	0.01709
253		4PX	0.00757	-0.01071	0.00315	0.02293	0.01547
254		4PY	0.03714	-0.07231	0.00602	-0.06771	-0.04722
255		4PZ	0.02071	-0.05098	0.00322	-0.07955	-0.05552
256	26	O 1S	-0.00059	-0.00761	-0.00059	0.00582	0.00390
257		2S	-0.00097	-0.01241	-0.00097	0.00953	0.00638
258		2PX	-0.01270	0.04810	0.00045	-0.01810	-0.01111
259		2PY	-0.00489	0.00174	-0.00075	0.00509	0.00335
260		2PZ	0.00196	0.06474	0.00440	-0.04632	-0.03048
261		3S	0.00308	0.03802	0.00308	-0.02988	-0.01988
262		3PX	-0.01793	0.06788	0.00047	-0.02544	-0.01559
263		3PY	-0.00683	0.00442	-0.00081	0.00522	0.00341
264		3PZ	0.00255	0.09109	0.00608	-0.06428	-0.04225

265	4S	0.00244	0.04429	0.00418	-0.02693	-0.01953
266	4PX	-0.02013	0.07879	0.00205	-0.03095	-0.01921
267	4PY	-0.00890	-0.00596	-0.00287	0.02212	0.01443
268	4PZ	0.00400	0.10473	0.00763	-0.08010	-0.05288
269 27	O 1S	-0.00180	-0.00119	0.00356	-0.00075	-0.00091
270	2S	-0.00298	-0.00196	0.00579	-0.00128	-0.00145
271	2PX	0.00499	0.00361	-0.01210	-0.02419	0.04285
272	2PY	0.01307	0.00419	-0.02965	0.04248	-0.06218
273	2PZ	-0.00803	-0.00206	0.01441	-0.06114	0.09221
274	3S	0.01018	0.00631	-0.01785	0.00507	0.00362
275	3PX	0.00735	0.00529	-0.01562	-0.03315	0.05937
276	3PY	0.01846	0.00610	-0.04400	0.05943	-0.08667
277	3PZ	-0.01079	-0.00315	0.01957	-0.08547	0.12788
278	4S	0.00786	0.00944	-0.02956	0.00075	0.01498
279	4PX	0.00568	0.00343	-0.01739	-0.04396	0.07329
280	4PY	0.02218	0.00599	-0.04269	0.07413	-0.11036
281	4PZ	-0.01300	-0.00176	0.02097	-0.10423	0.16181
282 28	H 1S	-0.00345	-0.00232	0.00872	-0.00050	-0.00325
283	2S	-0.00512	-0.00500	0.00916	-0.00242	-0.00710
284	3S	-0.00423	-0.00220	0.00807	-0.00300	-0.00184
285 29	O 1S	0.00052	0.00014	-0.00227	-0.00023	0.00013
286	2S	0.00083	0.00022	-0.00371	-0.00037	0.00021
287	2PX	-0.00756	-0.00014	0.00009	0.02819	-0.04107
288	2PY	0.00772	-0.00026	0.01199	-0.03722	0.05594
289	2PZ	-0.01620	-0.00151	-0.00575	0.05840	-0.08896
290	3S	-0.00212	-0.00061	0.01085	0.00120	-0.00056
291	3PX	-0.01053	-0.00028	-0.00040	0.03870	-0.05696
292	3PY	0.01033	-0.00047	0.01798	-0.05143	0.07745
293	3PZ	-0.02235	-0.00209	-0.00679	0.08115	-0.12310
294	4S	-0.00797	-0.00149	0.02366	0.00188	-0.00069
295	4PX	-0.01084	0.00093	-0.00102	0.05209	-0.07167
296	4PY	0.01386	-0.00013	0.01928	-0.06567	0.09927
297	4PZ	-0.02911	-0.00313	-0.01075	0.10207	-0.15821
298 30	H 1S	0.00171	0.00024	-0.00685	-0.00101	0.00060
299	2S	0.00378	0.00039	-0.01352	-0.00190	0.00059
300	3S	0.00106	-0.00009	-0.01131	-0.00258	0.00026
301 31	C 1S	0.00011	-0.00020	0.00017	-0.00013	-0.00004
302	2S	0.00018	-0.00033	0.00026	-0.00022	-0.00007
303	2PX	-0.00003	-0.00009	0.00095	-0.00055	-0.00013
304	2PY	-0.00007	0.00171	0.00084	-0.00240	-0.00155
305	2PZ	0.00030	0.00812	0.00071	-0.01039	-0.00697
306	3S	-0.00063	0.00096	-0.00080	0.00071	0.00022
307	3PX	-0.00025	-0.00011	0.00141	-0.00086	-0.00018
308	3PY	-0.00024	0.00226	0.00093	-0.00305	-0.00191
309	3PZ	0.00052	0.00974	0.00094	-0.01313	-0.00879
310	4S	0.00033	0.00097	-0.00113	0.00048	0.00008
311	4PX	-0.00027	0.00032	0.00288	0.00097	0.00042
312	4PY	0.00021	-0.00759	-0.00103	0.00413	0.00356
313	4PZ	0.00154	-0.02611	-0.00138	0.01958	0.01335
314 32	H 1S	-0.00029	0.01767	0.00183	-0.01849	-0.01237
315	2S	-0.00068	0.04384	0.00383	-0.04779	-0.03214
316	3S	-0.00251	0.04959	0.00246	-0.03842	-0.02564
317 33	H 1S	0.00035	-0.01764	-0.00111	0.01790	0.01218
318	2S	0.00154	-0.04526	-0.00338	0.04626	0.03164
319	3S	0.00142	-0.04837	-0.00408	0.03692	0.02544
320 34	H 1S	-0.00031	0.00009	-0.00011	0.00055	0.00022
321	2S	-0.00076	0.00081	-0.00064	0.00147	0.00066

322	3S	-0.00011	-0.00015	0.00236	0.00092	-0.00014
323 35	C 1S	-0.00082	0.00411	-0.00002	0.00461	0.00330
324	2S	-0.00134	0.00677	-0.00003	0.00759	0.00543
325	2PX	-0.00332	0.01093	-0.00029	0.00741	0.00540
326	2PY	-0.00478	0.00785	-0.00042	-0.00462	-0.00321
327	2PZ	-0.00419	0.01190	-0.00036	0.01957	0.01368
328	3S	0.00402	-0.02005	0.00033	-0.02403	-0.01712
329	3PX	-0.00465	0.01722	-0.00021	0.01075	0.00780
330	3PY	-0.00690	0.00974	-0.00060	-0.00824	-0.00575
331	3PZ	-0.00612	0.02052	-0.00036	0.03114	0.02182
332	4S	0.00574	-0.04854	-0.00289	-0.02444	-0.01814
333	4PX	-0.00333	0.01293	0.00081	0.00339	0.00269
334	4PY	0.00024	0.00729	0.00072	-0.02716	-0.01873
335	4PZ	-0.00181	-0.00359	-0.00028	0.02190	0.01516
336 36	H 1S	-0.00011	0.00109	-0.00013	0.00073	0.00066
337	2S	0.00025	0.00345	0.00002	-0.00115	-0.00047
338	3S	0.00000	0.00169	-0.00048	0.01160	0.00829
339 37	H 1S	-0.00724	0.01460	-0.00084	0.01089	0.00756
340	2S	-0.01501	0.03257	-0.00154	0.02568	0.01795
341	3S	-0.01170	0.03505	-0.00131	0.03031	0.02139
342 38	H 1S	0.00612	-0.01099	0.00087	-0.00471	-0.00337
343	2S	0.01055	-0.01359	0.00245	-0.01761	-0.01230
344	3S	0.00719	0.01804	0.00361	-0.02726	-0.01829
345 39	C 1S	0.00020	0.00717	0.00053	-0.00548	-0.00367
346	2S	0.00031	0.01178	0.00088	-0.00903	-0.00607
347	2PX	0.00482	-0.00142	0.00092	-0.00625	-0.00434
348	2PY	0.00065	-0.01984	-0.00135	0.01422	0.00956
349	2PZ	-0.00160	-0.02170	-0.00175	0.01789	0.01194
350	3S	-0.00102	-0.03543	-0.00276	0.02846	0.01931
351	3PX	0.00707	0.00057	0.00147	-0.01056	-0.00729
352	3PY	0.00116	-0.03114	-0.00186	0.02198	0.01482
353	3PZ	-0.00247	-0.03615	-0.00294	0.02947	0.01974
354	4S	0.00241	-0.06483	-0.00293	0.03382	0.02137
355	4PX	0.00446	0.00840	0.00138	-0.02357	-0.01575
356	4PY	-0.00113	-0.02252	-0.00161	0.01702	0.01070
357	4PZ	-0.00340	-0.00660	-0.00200	0.02248	0.01556
358 40	H 1S	0.00482	-0.00889	0.00030	0.00141	0.00080
359	2S	0.00725	-0.01366	0.00044	0.00860	0.00574
360	3S	-0.00004	0.00788	-0.00055	0.01942	0.01346
361 41	H 1S	-0.00094	0.00201	0.00011	-0.00202	-0.00147
362	2S	-0.00276	0.00319	-0.00004	-0.00175	-0.00140
363	3S	0.00012	0.00661	0.00104	-0.01464	-0.01049
364 42	H 1S	-0.00286	0.01709	0.00045	-0.00729	-0.00462
365	2S	-0.00601	0.04005	0.00107	-0.01697	-0.01053
366	3S	-0.00349	0.04797	0.00179	-0.02406	-0.01528
		88	89	90	91	92
		V	V	V	V	V
Eigenvalues --		-0.07698	-0.02614	-0.00656	0.00254	0.02064
1 1	C 1S	-0.00478	0.00150	-0.00146	0.00195	-0.00314
2	2S	-0.00802	0.00254	-0.00255	0.00339	-0.00538
3	2PX	0.02627	-0.01169	0.01777	-0.06590	-0.02370
4	2PY	-0.02115	0.01106	-0.01949	0.08119	0.04379
5	2PZ	0.02014	-0.01074	0.02479	-0.10963	-0.07693
6	3S	0.02223	-0.00690	0.00892	-0.00928	0.01463
7	3PX	0.04926	-0.02035	0.03007	-0.11271	-0.03380
8	3PY	-0.03729	0.01742	-0.03348	0.13479	0.06315
9	3PZ	0.03012	-0.01384	0.04097	-0.17720	-0.12903

10	4S	0.18704	-0.08344	-0.01697	-0.12672	0.19807
11	4PX	0.14674	-0.08534	0.05372	-0.22524	-0.02389
12	4PY	-0.06055	0.02022	-0.02385	0.21235	0.09710
13	4PZ	-0.01629	0.00083	0.07202	-0.25699	-0.24995
14 2	C 1S	0.00048	0.00058	0.00055	-0.00082	-0.00121
15	2S	0.00031	0.00105	0.00083	-0.00118	-0.00211
16	2PX	-0.01116	0.04844	0.01212	0.00359	0.04007
17	2PY	0.01745	-0.06154	-0.01634	0.00220	-0.04381
18	2PZ	-0.01819	0.09796	0.02625	0.00167	0.06611
19	3S	0.01120	-0.00361	0.00022	-0.00219	0.00904
20	3PX	-0.01585	0.07470	0.02060	0.00971	0.06437
21	3PY	0.03043	-0.10142	-0.02674	0.00348	-0.07524
22	3PZ	-0.02858	0.15650	0.03790	0.00863	0.10426
23	4S	-0.18836	-0.03933	-0.05956	0.14911	0.00216
24	4PX	0.01629	0.09942	-0.02584	-0.00436	0.19332
25	4PY	-0.09358	-0.05046	-0.09493	0.15407	-0.21485
26	4PZ	-0.17101	0.36616	0.09572	0.05241	0.07995
27 3	C 1S	0.00775	-0.00089	0.00206	-0.00443	0.00949
28	2S	0.01276	-0.00159	0.00343	-0.00731	0.01575
29	2PX	0.00769	-0.04706	-0.01868	0.03696	0.00903
30	2PY	-0.03248	0.06211	0.02004	-0.04077	-0.01391
31	2PZ	0.03726	-0.08484	-0.03781	0.07701	0.01718
32	3S	-0.03387	0.00555	-0.00883	0.01759	-0.04246
33	3PX	0.00642	-0.06964	-0.03076	0.05852	0.01506
34	3PY	-0.06016	0.09818	0.02667	-0.05034	-0.02752
35	3PZ	0.05375	-0.13005	-0.05815	0.12116	0.02210
36	4S	-0.29682	0.11363	-0.09135	0.23035	-0.34383
37	4PX	0.12159	-0.15959	0.01262	0.06723	0.10041
38	4PY	-0.02764	0.25415	0.10028	-0.16448	-0.05973
39	4PZ	0.08330	-0.19788	-0.14303	0.28610	0.02340
40 4	C 1S	-0.00358	0.00029	-0.00118	0.00187	-0.00515
41	2S	-0.00571	0.00029	-0.00190	0.00298	-0.00845
42	2PX	0.01138	-0.00735	0.01071	-0.05094	-0.03786
43	2PY	0.00140	0.01100	-0.01043	0.06294	0.05413
44	2PZ	0.00420	-0.01386	0.01709	-0.09787	-0.10184
45	3S	0.01263	0.00238	0.00425	-0.00727	0.02337
46	3PX	0.01930	-0.01189	0.01718	-0.08198	-0.06121
47	3PY	0.00257	0.02011	-0.01599	0.10286	0.07977
48	3PZ	0.00657	-0.02265	0.02724	-0.15679	-0.17204
49	4S	0.17372	-0.04372	0.09034	-0.08393	0.02291
50	4PX	0.09226	-0.00880	0.06854	-0.20132	0.00689
51	4PY	0.06427	-0.00419	0.00214	0.13539	0.26009
52	4PZ	0.02028	-0.06734	0.05200	-0.28177	-0.28656
53 5	C 1S	0.00134	-0.00005	0.00050	-0.00169	0.00766
54	2S	0.00220	-0.00008	0.00081	-0.00277	0.01256
55	2PX	-0.02057	0.04624	0.01123	0.00102	0.04953
56	2PY	0.02500	-0.06096	-0.01372	-0.00526	-0.02879
57	2PZ	-0.03892	0.09837	0.02191	0.00865	0.06628
58	3S	-0.00621	-0.00045	-0.00172	0.00744	-0.03582
59	3PX	-0.03218	0.06986	0.01626	0.00210	0.06727
60	3PY	0.03963	-0.09036	-0.02038	-0.00726	-0.04782
61	3PZ	-0.05922	0.14725	0.03219	0.01384	0.09506
62	4S	-0.00384	0.03317	-0.02320	0.02054	-0.12236
63	4PX	-0.07177	0.16948	0.02986	-0.00676	0.26195
64	4PY	0.04880	-0.19540	-0.06692	0.00450	-0.13407
65	4PZ	-0.10922	0.30946	0.07058	0.03212	0.17831
66 6	C 1S	0.00183	-0.00047	0.00060	-0.00094	0.00061

67	2S	0.00298	-0.00077	0.00097	-0.00140	0.00073
68	2PX	0.00487	-0.03968	-0.02197	0.04452	0.00070
69	2PY	-0.01242	0.05343	0.02631	-0.05346	-0.00939
70	2PZ	0.01656	-0.08165	-0.04341	0.08904	-0.00643
71	3S	-0.00873	0.00318	-0.00288	0.00127	0.00195
72	3PX	0.00666	-0.05910	-0.03231	0.06511	-0.00044
73	3PY	-0.02046	0.08169	0.03906	-0.07736	-0.02017
74	3PZ	0.02378	-0.12160	-0.06529	0.13420	-0.01436
75	4S	0.01588	-0.02947	0.02716	0.00659	-0.02729
76	4PX	0.01676	-0.14111	-0.06044	0.15902	-0.04799
77	4PY	-0.01111	0.16064	0.08185	-0.17840	-0.02103
78	4PZ	0.07041	-0.27228	-0.15148	0.28300	-0.00365
79 7	H 1S	-0.00634	0.00101	-0.00033	-0.00128	-0.00703
80	2S	-0.01510	0.01137	-0.00864	0.00742	-0.02179
81	3S	0.04713	0.06526	-0.01611	-0.03402	0.02216
82 8	H 1S	0.00195	0.00083	0.00031	0.00017	-0.00317
83	2S	-0.00382	0.00406	-0.00313	0.00358	-0.00736
84	3S	0.00452	0.00199	0.00458	-0.03318	0.25637
85 9	H 1S	0.00415	-0.00261	0.00111	-0.00418	0.00580
86	2S	-0.00017	-0.00284	0.00341	-0.00593	-0.00039
87	3S	0.00953	-0.00640	0.01601	-0.02678	0.05031
88 10	C 1S	-0.00071	0.00133	-0.00012	0.00087	0.00207
89	2S	-0.00146	0.00262	-0.00001	0.00125	0.00326
90	2PX	-0.00425	0.00007	0.00001	0.00286	-0.00030
91	2PY	-0.02389	0.01108	-0.00660	0.01361	-0.01621
92	2PZ	-0.11003	0.04751	-0.03150	0.06581	-0.08055
93	3S	0.00846	-0.01472	-0.00499	0.00485	-0.00244
94	3PX	-0.01162	0.00478	0.00077	0.00313	0.00082
95	3PY	-0.04270	0.00845	-0.01410	0.02167	-0.04062
96	3PZ	-0.19221	0.08333	-0.04873	0.10890	-0.13789
97	4S	0.03297	0.02822	0.10600	-0.17882	-0.13240
98	4PX	-0.07351	0.04569	-0.03388	0.09282	-0.01310
99	4PY	-0.02049	-0.02898	-0.05687	0.02797	-0.03810
100	4PZ	-0.13630	0.07794	-0.08742	0.14364	-0.13153
101 11	C 1S	-0.00038	0.00255	0.00053	0.00313	0.00432
102	2S	-0.00050	0.00451	0.00104	0.00484	0.00721
103	2PX	-0.00348	0.00775	0.00315	-0.00327	0.00804
104	2PY	-0.02051	-0.02499	-0.00625	0.00588	-0.00023
105	2PZ	-0.08093	-0.06425	-0.01009	-0.03180	-0.01829
106	3S	-0.00325	-0.01537	-0.00579	-0.00551	-0.01997
107	3PX	-0.01267	0.01840	0.00428	0.00004	0.01318
108	3PY	-0.03212	-0.04128	-0.01379	0.01218	-0.00305
109	3PZ	-0.12578	-0.09941	-0.02372	-0.04990	-0.02519
110	4S	0.12205	-0.08203	0.03166	-0.24249	-0.02323
111	4PX	0.03673	0.00242	0.05405	-0.13381	-0.01097
112	4PY	-0.00774	-0.13969	-0.00004	-0.02512	0.00878
113	4PZ	-0.26757	-0.14683	0.00122	-0.06424	-0.10890
114 12	C 1S	0.00063	-0.00242	-0.00083	-0.00197	-0.00306
115	2S	0.00091	-0.00391	-0.00141	-0.00309	-0.00516
116	2PX	0.00494	-0.00361	0.00188	-0.00346	-0.00474
117	2PY	0.03297	0.00314	0.00440	-0.00997	0.01983
118	2PZ	0.12502	0.01510	0.01853	-0.02709	0.08362
119	3S	0.00007	0.00847	0.00494	0.00486	0.01627
120	3PX	0.00934	-0.00604	0.00397	-0.00768	-0.01139
121	3PY	0.05036	0.00381	0.00569	-0.01512	0.02661
122	3PZ	0.19504	0.02714	0.02684	-0.04151	0.12781
123	4S	-0.11800	0.13548	-0.03357	0.19777	0.03569

124	4PX	0.03818	-0.02740	0.02150	-0.06658	0.01758
125	4PY	0.11849	-0.00733	0.03495	-0.10541	0.09398
126	4PZ	0.31683	0.03080	0.05166	-0.06263	0.27681
127	13 C 1S	-0.00038	0.00141	0.00185	-0.00021	0.00010
128	2S	-0.00061	0.00233	0.00313	-0.00035	0.00008
129	2PX	-0.00038	0.00644	0.00015	-0.00064	0.00071
130	2PY	0.01058	0.01557	-0.00054	0.01619	-0.02194
131	2PZ	0.04649	0.07436	-0.01025	0.06462	-0.08388
132	3S	0.00167	-0.00681	-0.00952	0.00194	0.00060
133	3PX	0.00044	0.00871	-0.00138	-0.00319	0.00442
134	3PY	0.01788	0.02311	0.00138	0.02700	-0.03394
135	3PZ	0.07566	0.11828	-0.01697	0.10152	-0.13094
136	4S	-0.00065	-0.00152	-0.07497	-0.05230	0.00533
137	4PX	-0.03362	0.07222	-0.01705	0.03064	-0.03214
138	4PY	0.02648	0.05933	0.00215	0.07658	-0.13051
139	4PZ	0.10687	0.21714	-0.04258	0.19073	-0.26733
140	14 C 1S	0.00019	-0.00007	-0.00081	0.00101	-0.00076
141	2S	0.00034	-0.00009	-0.00127	0.00177	-0.00139
142	2PX	-0.00050	-0.00174	0.00332	0.00386	-0.00216
143	2PY	-0.01638	-0.01534	0.02708	0.00300	0.00236
144	2PZ	-0.08015	-0.06957	0.12940	0.01328	0.01187
145	3S	-0.00150	0.00009	0.00214	-0.00759	0.00660
146	3PX	-0.00214	-0.00296	0.00707	0.00311	-0.00165
147	3PY	-0.02623	-0.02390	0.04098	0.00537	0.00302
148	3PZ	-0.12500	-0.10273	0.19476	0.02276	0.01511
149	4S	-0.02856	-0.05309	0.07015	0.02286	0.00775
150	4PX	0.00241	-0.05512	0.03987	0.03626	0.02037
151	4PY	-0.02106	-0.04292	0.14271	0.05056	-0.04821
152	4PZ	-0.20945	-0.23193	0.41491	0.01894	0.07496
153	15 C 1S	0.00086	0.00024	-0.00014	0.00099	-0.00147
154	2S	0.00148	0.00034	-0.00014	0.00169	-0.00246
155	2PX	-0.00058	-0.00217	-0.00234	-0.00158	0.00115
156	2PY	-0.01437	-0.00344	-0.03613	-0.01497	0.00226
157	2PZ	-0.06492	-0.00859	-0.15093	-0.06208	0.01313
158	3S	-0.00544	0.00035	-0.00101	-0.00531	0.00672
159	3PX	-0.00333	-0.00382	-0.00530	-0.00144	0.00437
160	3PY	-0.02335	-0.00630	-0.05750	-0.02391	0.00163
161	3PZ	-0.10985	-0.01529	-0.24401	-0.09940	0.01783
162	4S	-0.00121	-0.08105	0.00962	-0.08073	0.11942
163	4PX	0.00107	-0.00756	-0.01364	-0.03926	-0.00264
164	4PY	-0.04202	0.02870	-0.11398	-0.02034	-0.01113
165	4PZ	-0.11755	-0.02327	-0.40396	-0.17781	0.05905
166	16 C 1S	0.00091	0.00114	0.00185	0.00183	-0.00236
167	2S	0.00162	0.00199	0.00307	0.00303	-0.00400
168	2PX	-0.00140	-0.00031	-0.00135	-0.00238	0.00323
169	2PY	-0.00078	-0.00077	-0.02095	-0.01118	0.00856
170	2PZ	-0.00017	0.00051	-0.13864	-0.07563	0.06360
171	3S	-0.00617	-0.00750	-0.01188	-0.00956	0.01372
172	3PX	-0.00209	0.00013	-0.00202	-0.00356	0.00465
173	3PY	-0.00081	-0.00130	-0.02768	-0.01468	0.01067
174	3PZ	0.00144	-0.00062	-0.21847	-0.12123	0.10311
175	4S	-0.00323	0.03971	0.01952	-0.00997	-0.02437
176	4PX	-0.03505	-0.05427	0.04310	0.00137	0.05264
177	4PY	0.01165	0.04004	-0.16345	-0.07613	0.03659
178	4PZ	-0.00733	0.00879	-0.39323	-0.20235	0.17268
179	17 H 1S	-0.00054	0.00085	0.00210	0.00167	-0.00066
180	2S	0.00295	-0.00312	0.01897	0.01181	-0.00736

181	3S	0.02553	0.00119	0.02061	0.04278	-0.03680
182	18 C 1S	-0.00066	-0.00005	0.00102	0.00023	-0.00028
183	2S	-0.00108	-0.00002	0.00180	0.00050	-0.00057
184	2PX	0.00057	0.00114	-0.00050	-0.00061	0.00171
185	2PY	-0.00896	-0.01598	0.02766	-0.00288	0.01594
186	2PZ	-0.03061	-0.06082	0.12141	-0.00492	0.05575
187	3S	0.00231	-0.00196	-0.00701	-0.00409	0.00457
188	3PX	0.00112	0.00182	-0.00060	-0.00075	0.00231
189	3PY	-0.01476	-0.02606	0.04531	-0.00377	0.02369
190	3PZ	-0.04484	-0.09115	0.18350	-0.00704	0.08370
191	4S	0.02679	0.07250	-0.06742	0.02999	-0.03251
192	4PX	-0.01562	-0.03946	-0.02164	-0.06562	0.07269
193	4PY	-0.03777	-0.07956	0.10972	-0.00654	0.07442
194	4PZ	-0.09911	-0.18947	0.38920	-0.02049	0.18762
195	19 C 1S	0.00058	0.00051	0.00132	0.00152	-0.00177
196	2S	0.00094	0.00085	0.00233	0.00261	-0.00301
197	2PX	-0.00319	-0.00295	-0.00185	-0.00423	0.00674
198	2PY	0.02224	0.01764	0.00211	0.01740	-0.02331
199	2PZ	0.09246	0.07732	0.00502	0.07071	-0.09330
200	3S	-0.00408	-0.00338	-0.00834	-0.00994	0.01158
201	3PX	-0.00618	-0.00568	-0.00728	-0.01166	0.01609
202	3PY	0.03560	0.02727	0.00429	0.02633	-0.03596
203	3PZ	0.15027	0.12379	0.00777	0.11199	-0.14650
204	4S	0.01929	-0.01230	0.01106	0.01633	-0.01045
205	4PX	0.03562	0.04980	-0.02011	0.02709	-0.04213
206	4PY	0.01330	-0.00418	0.06870	0.05719	-0.04152
207	4PZ	0.22204	0.21878	-0.01042	0.20047	-0.29211
208	20 H 1S	0.00043	0.00127	0.00131	0.00164	-0.00153
209	2S	0.00479	0.01085	0.00634	0.01230	-0.01601
210	3S	0.00605	0.02080	0.02968	0.03880	-0.05668
211	21 O 1S	0.00047	-0.00380	-0.00113	0.00001	-0.00364
212	2S	0.00079	-0.00638	-0.00191	0.00019	-0.00598
213	2PX	0.00769	-0.01534	-0.00478	0.00369	-0.00749
214	2PY	0.02972	-0.02724	0.00106	-0.01202	-0.00466
215	2PZ	0.12813	-0.04084	0.02646	-0.05187	0.05815
216	3S	-0.00238	0.02107	0.00656	-0.00458	0.01706
217	3PX	0.01065	-0.02195	-0.00714	0.00588	-0.01060
218	3PY	0.04289	-0.04414	-0.00066	-0.01609	-0.01120
219	3PZ	0.17855	-0.05494	0.03516	-0.06983	0.07978
220	4S	-0.01399	0.05409	0.01095	0.04379	0.07375
221	4PX	0.01915	-0.02543	-0.00378	-0.00259	-0.00971
222	4PY	0.05595	-0.05631	0.00624	-0.04212	-0.02530
223	4PZ	0.24123	-0.08105	0.06305	-0.11223	0.12857
224	22 H 1S	0.00042	0.00396	0.00115	-0.00497	-0.00067
225	2S	-0.00085	0.00647	0.00038	-0.00230	-0.00193
226	3S	-0.00248	-0.01425	-0.00648	-0.00450	-0.04485
227	23 H 1S	-0.00023	-0.00420	-0.00090	-0.00302	-0.00431
228	2S	0.01706	-0.02134	-0.00056	-0.00614	0.00222
229	3S	-0.01156	-0.09474	-0.02539	0.10716	0.03844
230	24 O 1S	-0.00002	-0.00027	0.00022	-0.00093	0.00000
231	2S	-0.00002	-0.00046	0.00038	-0.00153	-0.00001
232	2PX	0.00126	0.00146	0.00153	0.00114	-0.00250
233	2PY	0.00564	-0.00163	0.01705	0.00577	0.00001
234	2PZ	0.02797	0.00036	0.07376	0.02868	-0.00782
235	3S	-0.00032	0.00159	-0.00174	0.00471	0.00037
236	3PX	0.00135	0.00274	0.00176	0.00189	-0.00289
237	3PY	0.00720	-0.00263	0.02268	0.00763	-0.00039

238	3PZ	0.03657	0.00046	0.09790	0.03910	-0.01294
239	4S	0.00622	0.00002	0.00338	0.00938	-0.00454
240	4PX	0.00388	0.00070	0.00498	0.00553	-0.00870
241	4PY	0.01119	-0.00315	0.03711	0.01381	0.00304
242	4PZ	0.06131	0.00012	0.16640	0.06019	-0.00785
243	25 O 1S	-0.00460	-0.00379	-0.00200	-0.00495	0.00663
244	2S	-0.00750	-0.00618	-0.00312	-0.00798	0.01071
245	2PX	0.00633	0.00549	-0.00222	0.00299	-0.00438
246	2PY	-0.02239	-0.01613	-0.00276	-0.01489	0.01908
247	2PZ	-0.02687	-0.01637	0.00487	-0.00733	0.00561
248	3S	0.02247	0.01838	0.00559	0.02109	-0.02863
249	3PX	0.00648	0.00549	-0.00287	0.00187	-0.00270
250	3PY	-0.03030	-0.02175	-0.00391	-0.02015	0.02568
251	3PZ	-0.03632	-0.02119	0.00388	-0.00987	0.00630
252	4S	0.03556	0.03172	0.05418	0.07416	-0.10012
253	4PX	0.02716	0.02733	-0.01402	0.01671	-0.02897
254	4PY	-0.04823	-0.03753	-0.00920	-0.03882	0.05118
255	4PZ	-0.04945	-0.03112	0.03047	-0.00103	-0.00465
256	26 O 1S	-0.00036	-0.00043	-0.00852	-0.00522	0.00524
257	2S	-0.00055	-0.00064	-0.01385	-0.00844	0.00841
258	2PX	0.00051	0.00013	0.01386	0.00858	-0.00789
259	2PY	0.00081	0.00047	-0.00782	-0.00392	0.00373
260	2PZ	-0.00071	-0.00171	0.02374	0.00880	-0.00111
261	3S	0.00068	0.00036	0.03973	0.02293	-0.02118
262	3PX	0.00067	0.00021	0.01924	0.01216	-0.01128
263	3PY	0.00071	0.00044	-0.00669	-0.00293	0.00290
264	3PZ	-0.00040	-0.00105	0.02887	0.01173	-0.00223
265	4S	0.01265	0.01963	0.09676	0.07227	-0.09271
266	4PX	0.00304	0.00246	0.03449	0.02178	-0.02312
267	4PY	0.00627	0.00586	-0.04926	-0.02526	0.02205
268	4PZ	-0.00548	-0.01162	0.04798	0.00641	0.01788
269	27 O 1S	0.00051	0.00092	0.00022	0.00036	-0.00156
270	2S	0.00088	0.00150	0.00033	0.00065	-0.00254
271	2PX	-0.00746	0.00411	-0.00517	0.02535	0.01438
272	2PY	0.00831	-0.00452	0.00746	-0.03192	-0.02568
273	2PZ	-0.01333	0.00756	-0.01276	0.05600	0.03421
274	3S	-0.00373	-0.00430	-0.00010	-0.00311	0.00726
275	3PX	-0.00941	0.00575	-0.00673	0.03223	0.01793
276	3PY	0.01025	-0.00605	0.00890	-0.03966	-0.03582
277	3PZ	-0.01688	0.01114	-0.01588	0.07222	0.04552
278	4S	-0.00317	-0.01078	-0.01404	0.00654	0.02138
279	4PX	-0.02015	0.01414	-0.01079	0.06198	0.03166
280	4PY	0.01959	-0.00981	0.02075	-0.08013	-0.05687
281	4PZ	-0.03104	0.01057	-0.03240	0.13462	0.07680
282	28 H 1S	0.00181	0.00177	0.00144	-0.00270	-0.00231
283	2S	0.00487	0.00787	0.00590	-0.00893	-0.00351
284	3S	0.01259	0.00844	0.00703	-0.00962	-0.01161
285	29 O 1S	0.00105	-0.00098	0.00061	-0.00238	0.01173
286	2S	0.00177	-0.00163	0.00102	-0.00393	0.01926
287	2PX	-0.00225	0.00213	-0.00314	0.01774	0.05143
288	2PY	0.00070	-0.00401	0.00479	-0.02976	-0.01409
289	2PZ	-0.00409	0.00953	-0.00895	0.04763	0.03570
290	3S	-0.00619	0.00536	-0.00331	0.01212	-0.05747
291	3PX	-0.00148	0.00195	-0.00346	0.02054	0.07682
292	3PY	0.00002	-0.00442	0.00590	-0.03731	-0.01972
293	3PZ	-0.00608	0.01226	-0.01199	0.06245	0.03905
294	4S	-0.00608	0.00541	-0.00714	0.03298	-0.18553

295	4PX	-0.01180	0.00489	-0.00999	0.04750	0.12025
296	4PY	0.00389	-0.01329	0.01198	-0.07594	-0.01361
297	4PZ	-0.00608	0.02330	-0.02004	0.11247	0.10698
298 30	H 1S	0.00233	-0.00184	0.00116	-0.00461	0.02112
299	2S	0.00500	-0.00473	0.00292	-0.01052	0.04603
300	3S	0.01752	-0.02057	0.01412	-0.05671	0.37014
301 31	C 1S	0.00002	0.00008	0.00022	0.00083	-0.00119
302	2S	0.00006	0.00011	0.00036	0.00135	-0.00192
303	2PX	-0.00018	-0.00009	-0.00127	0.00020	0.00161
304	2PY	0.00132	0.00232	-0.00090	0.00360	-0.00286
305	2PZ	0.00560	0.00886	-0.00225	0.00858	-0.01518
306	3S	-0.00055	-0.00001	-0.00057	-0.00355	0.00411
307	3PX	0.00021	-0.00065	-0.00118	0.00058	0.00179
308	3PY	0.00266	0.00308	-0.00027	0.00558	-0.00441
309	3PZ	0.00883	0.01259	0.00150	0.01417	-0.02232
310	4S	-0.00008	-0.00238	-0.00911	-0.01756	0.04033
311	4PX	0.00020	0.00238	-0.00556	0.00235	0.00501
312	4PY	0.00548	0.00900	0.00876	0.02145	-0.01770
313	4PZ	0.03427	0.03599	0.03848	0.05920	-0.08125
314 32	H 1S	-0.00296	0.00140	-0.01335	-0.00412	0.00068
315	2S	-0.01565	0.00148	-0.05453	-0.02038	0.00437
316	3S	-0.03891	-0.05262	-0.01649	-0.06887	0.10103
317 33	H 1S	0.00271	-0.00183	0.01296	0.00396	-0.00019
318	2S	0.01382	-0.00302	0.05534	0.02039	-0.00583
319	3S	0.04022	0.05119	0.02597	0.08166	-0.13228
320 34	H 1S	0.00028	0.00044	0.00047	0.00047	-0.00108
321	2S	0.00111	0.00151	0.00107	0.00176	-0.00398
322	3S	0.00183	0.00186	0.00119	0.00016	-0.01569
323 35	C 1S	0.00752	0.00730	0.00407	0.01018	-0.01536
324	2S	0.01242	0.01202	0.00660	0.01665	-0.02506
325	2PX	0.00919	0.00666	0.00322	0.00704	-0.00698
326	2PY	-0.00806	-0.00663	-0.00705	-0.00980	0.01119
327	2PZ	0.01711	0.01463	0.00225	0.01524	-0.02069
328	3S	-0.03700	-0.03478	-0.01411	-0.04400	0.06545
329	3PX	0.01453	0.01043	0.00687	0.01168	-0.01198
330	3PY	-0.01442	-0.01153	-0.01493	-0.01837	0.02066
331	3PZ	0.03122	0.02610	0.01260	0.03137	-0.04013
332	4S	-0.10026	-0.11617	-0.13431	-0.21952	0.34530
333	4PX	0.00386	-0.00199	0.04505	0.01999	-0.00664
334	4PY	-0.03228	-0.03200	-0.01905	-0.04390	0.05957
335	4PZ	0.02736	0.03552	-0.02205	0.03115	-0.05964
336 36	H 1S	0.00389	0.00395	-0.00248	0.00268	-0.00491
337	2S	0.01133	0.01266	-0.01350	0.00484	-0.01132
338	3S	0.04006	0.05947	-0.01406	0.07438	-0.15944
339 37	H 1S	0.00429	0.00254	0.00202	0.00319	-0.00398
340	2S	0.01893	0.01628	0.01041	0.02148	-0.02907
341	3S	0.04018	0.03206	0.10245	0.09297	-0.12212
342 38	H 1S	-0.00375	-0.00355	0.00417	-0.00095	0.00229
343	2S	-0.01363	-0.01421	0.02035	-0.00380	0.01311
344	3S	0.00341	0.00686	0.06748	0.05259	-0.07761
345 39	C 1S	0.00107	0.00150	0.01499	0.01097	-0.01313
346	2S	0.00169	0.00246	0.02464	0.01798	-0.02144
347	2PX	0.00272	0.00366	0.00816	0.00886	-0.00988
348	2PY	-0.00089	-0.00084	-0.02134	-0.01201	0.00966
349	2PZ	0.00099	0.00155	-0.02820	-0.01356	0.01096
350	3S	-0.00300	-0.00604	-0.06972	-0.04846	0.05548
351	3PX	0.00534	0.00744	0.01514	0.01708	-0.01970

352	3PY	-0.00208	-0.00358	-0.03424	-0.02236	0.02054
353	3PZ	-0.00048	-0.00068	-0.05130	-0.02885	0.02604
354	4S	-0.03766	-0.04800	-0.25340	-0.23150	0.31755
355	4PX	-0.00058	0.00304	0.04615	0.03534	-0.03909
356	4PY	-0.00879	-0.00362	-0.03916	-0.02536	0.02179
357	4PZ	0.01746	0.01995	-0.09080	-0.03029	0.02129
358 40	H 1S	0.00186	0.00236	-0.00548	-0.00059	-0.00110
359	2S	0.00848	0.00720	-0.02124	-0.00505	0.00135
360	3S	0.02734	0.02757	0.04218	0.05858	-0.09342
361 41	H 1S	-0.00064	-0.00087	0.00877	0.00411	-0.00334
362	2S	-0.00185	-0.00207	0.02405	0.01138	-0.00845
363	3S	-0.00818	-0.00410	0.13991	0.09141	-0.12515
364 42	H 1S	-0.00043	-0.00014	0.00254	0.00169	-0.00224
365	2S	0.00362	0.00211	0.02121	0.01480	-0.01670
366	3S	0.02815	0.04653	0.02279	0.08564	-0.13939

Lampiran 5. *Gaussian Output File* Perhitungan IPs

```

*****
Gaussian 09: IA32W-G09RevA.02 11-Jun-2009
09-Feb-2015
*****
%chk=IPs_1.chk
%mem=200MW
%nproc=1
Will use up to 1 processors via shared memory.

-----
# hf geom=connectivity ovgf tran=full
-----
1/38=1,57=2/1;
2/12=2,17=6,18=5,40=1/2;
3/11=9,16=1,25=1,30=1/1,2,3;
4//1;
5/5=2,38=5/2;
8/6=5,9=120000,10=1/1,4;
9//8;
6/7=2,8=2,9=2,10=2/1;
99/5=1,9=1/99;
-----
IPs 1
-----
Symbolic Z-matrix:
Charge = 0 Multiplicity = 1
C
C      1  B1
C      2  B2      1  A1
C      3  B3      2  A2      1  D1      0
C      4  B4      3  A3      2  D2      0
C      1  B5      2  A4      3  D3      0
H      3  B6      2  A5      1  D4      0
H      5  B7      4  A6      3  D5      0
H      6  B8      1  A7      2  D6      0
C      2  B9      1  A8      6  D7      0
C      10  B10      2  A9      1  D8      0
C      11  B11      10  A10      2  D9      0
C      12  B12      11  A11      10  D10      0
C      13  B13      12  A12      11  D11      0
C      13  B14      12  A13      11  D12      0
C      14  B15      13  A14      12  D13      0
H      14  B16      13  A15      12  D14      0
C      15  B17      13  A16      12  D15      0
C      18  B18      15  A17      13  D16      0
H      18  B19      15  A18      13  D17      0
O      10  B20      2  A19      1  D18      0
H      12  B21      11  A20      10  D19      0
H      11  B22      10  A21      2  D20      0
O      15  B23      13  A22      12  D21      0
O      19  B24      18  A23      15  D22      0
O      16  B25      14  A24      13  D23      0
O      1  B26      6  A25      5  D24      0
H      27  B27      1  A26      6  D25      0
O      4  B28      3  A27      2  D26      0

```

H	29	B29	4	A28	3	D27	0
C	24	B30	15	A29	13	D28	0
H	31	B31	24	A30	15	D29	0
H	31	B32	24	A31	15	D30	0
H	31	B33	24	A32	15	D31	0
C	25	B34	19	A33	18	D32	0
H	35	B35	25	A34	19	D33	0
H	35	B36	25	A35	19	D34	0
H	35	B37	25	A36	19	D35	0
C	26	B38	16	A37	14	D36	0
H	39	B39	26	A38	16	D37	0
H	39	B40	26	A39	16	D38	0
H	39	B41	26	A40	16	D39	0

Variables:

B1	1.40888
B2	1.39977
B3	1.3942
B4	1.39363
B5	1.39549
B6	1.08038
B7	1.08312
B8	1.08346
B9	1.50195
B10	1.47441
B11	1.3512
B12	1.4576
B13	1.40757
B14	1.41987
B15	1.38753
B16	1.0803
B17	1.39645
B18	1.39465
B19	1.07828
B20	1.2501
B21	1.08254
B22	1.08225
B23	1.38794
B24	1.39765
B25	1.40749
B26	1.39176
B27	0.97157
B28	1.39948
B29	0.97134
B30	1.45282
B31	1.09181
B32	1.0918
B33	1.08436
B34	1.47365
B35	1.08522
B36	1.09107
B37	1.08745
B38	1.4714
B39	1.08968
B40	1.08558
B41	1.09118
A1	118.55721
A2	121.16457

A3	120.00444
A4	120.08579
A5	120.51327
A6	120.71963
A7	119.72696
A8	122.08565
A9	116.9863
A10	121.19835
A11	127.14538
A12	123.15712
A13	119.59936
A14	122.10161
A15	120.43501
A16	121.00935
A17	120.1408
A18	122.20584
A19	120.73969
A20	116.91818
A21	116.89323
A22	116.01504
A23	117.94441
A24	119.36418
A25	121.82422
A26	111.72837
A27	116.75136
A28	111.86613
A29	119.69403
A30	111.09557
A31	111.1274
A32	104.92111
A33	116.69122
A34	105.11946
A35	109.76134
A36	110.67112
A37	115.18263
A38	110.66376
A39	105.46914
A40	110.13312
D1	1.51397
D2	-1.04603
D3	-0.87796
D4	179.70237
D5	-179.75337
D6	179.43932
D7	176.64603
D8	134.70751
D9	176.27012
D10	179.114
D11	2.00244
D12	-178.64583
D13	179.93333
D14	0.16788
D15	179.17036
D16	0.71078
D17	-179.15028
D18	-46.46748
D19	-0.63134

D20 -5.2589
 D21 -0.15724
 D22 178.28814
 D23 179.66945
 D24 -177.70719
 D25 -4.80451
 D26 179.10864
 D27 -178.80399
 D28 179.80858
 D29 -61.68897
 D30 61.10271
 D31 179.73712
 D32 119.33257
 D33 178.07858
 D34 -63.69396
 D35 58.27564
 D36 107.00652
 D37 61.23864
 D38 -179.27601
 D39 -60.69482

Input orientation:

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	6	0	0.000000	0.000000	0.000000
2	6	0	0.000000	0.000000	1.408881
3	6	0	1.229473	0.000000	2.078021
4	6	0	2.433284	0.031520	1.375434
5	6	0	2.426801	0.041749	-0.018144
6	6	0	1.207341	0.018502	-0.699553
7	1	0	1.266356	0.004835	3.157765
8	1	0	3.355208	0.062165	-0.575633
9	1	0	1.200720	0.009192	-1.782949
10	6	0	-1.271346	0.054975	2.206696
11	6	0	-1.387504	-0.874649	3.345196
12	6	0	-2.461284	-0.846663	4.164926
13	6	0	-2.717022	-1.711202	5.310246
14	6	0	-1.815105	-2.700811	5.744392
15	6	0	-3.920273	-1.559501	6.048617
16	6	0	-2.080397	-3.511179	6.838996
17	1	0	-0.878126	-2.851650	5.228277
18	6	0	-4.203130	-2.383080	7.140300
19	6	0	-3.292575	-3.364220	7.531831
20	1	0	-5.116635	-2.293683	7.706168
21	8	0	-2.171301	0.873584	1.919098
22	1	0	-3.221389	-0.105921	3.951789
23	1	0	-0.587704	-1.592108	3.474932
24	8	0	-4.783386	-0.565646	5.608528
25	8	0	-3.605474	-4.138325	8.652668
26	8	0	-1.140519	-4.487605	7.218779
27	8	0	-1.226318	-0.070593	-0.654340
28	1	0	-1.122089	-0.027627	-1.619350
29	8	0	3.607078	0.048111	2.137328
30	1	0	4.400543	0.088642	1.578518
31	6	0	-6.039879	-0.344103	6.303386
32	1	0	-6.675650	-1.230549	6.257993

33	1	0	-5.869496	-0.060227	7.343779
34	1	0	-6.512516	0.474224	5.771600
35	6	0	-3.731389	-5.591043	8.439612
36	1	0	-3.938735	-6.004206	9.421449
37	1	0	-4.565414	-5.794192	7.766133
38	1	0	-2.809783	-6.000684	8.032944
39	6	0	-0.384847	-4.185870	8.444723
40	1	0	-1.056434	-4.096276	9.298159
41	1	0	0.292452	-5.023254	8.580854
42	1	0	0.184360	-3.263625	8.317664

Summary of results for alpha spin-orbital 20 OVGf:

Koopmans theorem: -0.74696D+00 au -20.326 eV
 Converged second order pole: -0.62687D+00 au -17.058 eV 0.826 (PS)
 Converged third order pole: -0.72624D+00 au -19.762 eV 1.000 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.72624D+00 au -19.762 eV 0.000 (PS)
 WARNING: Wrong sign for derivative of propagator
 WARNING: Wrong sign for derivative of propagator
 WARNING: Pole strength too low for present methods
 WARNING : Pole strength too small - OVGf does not work!!!

Summary of results for alpha spin-orbital 21 OVGf:

Koopmans theorem: -0.71517D+00 au -19.461 eV
 Converged second order pole: -0.60101D+00 au -16.354 eV 0.846 (PS)
 Converged third order pole: -0.72524D+00 au -19.735 eV 0.000 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.72488D+00 au -19.725 eV 0.000 (PS)
 WARNING: Pole strength too low for present methods
 WARNING : Pole strength too small - OVGf does not work!!!

Summary of results for alpha spin-orbital 22 OVGf:

Koopmans theorem: -0.68087D+00 au -18.527 eV
 Converged second order pole: -0.57329D+00 au -15.600 eV 0.849 (PS)
 Converged third order pole: -0.68072D+00 au -18.523 eV 0.000 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.68056D+00 au -18.519 eV 0.000 (PS)
 WARNING: Wrong sign for derivative of propagator

Summary of results for alpha spin-orbital 23 OVGf:

Koopmans theorem: -0.66118D+00 au -17.992 eV
 Converged second order pole: -0.55644D+00 au -15.141 eV 0.852 (PS)
 Converged third order pole: -0.58709D+00 au -15.976 eV 0.871 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.57737D+00 au -15.711 eV 0.858 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 24 OVGf:

Koopmans theorem: -0.64713D+00 au -17.609 eV
 Converged second order pole: -0.54864D+00 au -14.929 eV 0.863 (PS)
 Converged third order pole: -0.57665D+00 au -15.691 eV 0.879 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.56802D+00 au -15.457 eV 0.868 (PS)
 WARNING: Wrong sign for derivative of propagator

Summary of results for alpha spin-orbital 25 OVGf:

Koopmans theorem: -0.63093D+00 au -17.169 eV
 Converged second order pole: -0.53103D+00 au -14.450 eV 0.865 (PS)
 Converged third order pole: -0.56032D+00 au -15.247 eV 0.883 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.55127D+00 au -15.001 eV 0.873 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 26 OVGf:

Koopmans theorem: -0.61508D+00 au -16.737 eV

Converged second order pole: -0.51391D+00 au -13.984 eV 0.863 (PS)
 Converged third order pole: -0.54408D+00 au -14.805 eV 0.880 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.53672D+00 au -14.605 eV 0.868 (PS)
 WARNING: Wrong sign for derivative of propagator

Summary of results for alpha spin-orbital 27 OVGf:
 Koopmans theorem: -0.61084D+00 au -16.622 eV
 Converged second order pole: -0.50888D+00 au -13.847 eV 0.866 (PS)
 Converged third order pole: -0.53798D+00 au -14.639 eV 0.889 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.52954D+00 au -14.410 eV 0.878 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 28 OVGf:
 Koopmans theorem: -0.60047D+00 au -16.340 eV
 Converged second order pole: -0.50853D+00 au -13.838 eV 0.877 (PS)
 Converged third order pole: -0.53281D+00 au -14.498 eV 0.888 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.52708D+00 au -14.343 eV 0.879 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 29 OVGf:
 Koopmans theorem: -0.59784D+00 au -16.268 eV
 Converged second order pole: -0.51443D+00 au -13.998 eV 0.892 (PS)
 Converged third order pole: -0.53308D+00 au -14.506 eV 0.892 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.53093D+00 au -14.447 eV 0.885 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 30 OVGf:
 Koopmans theorem: -0.58822D+00 au -16.006 eV
 Converged second order pole: -0.51101D+00 au -13.905 eV 0.893 (PS)
 Converged third order pole: -0.52866D+00 au -14.386 eV 0.901 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.52526D+00 au -14.293 eV 0.894 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 31 OVGf:
 Koopmans theorem: -0.58107D+00 au -15.812 eV
 Converged second order pole: -0.50693D+00 au -13.794 eV 0.901 (PS)
 Converged third order pole: -0.52101D+00 au -14.177 eV 0.903 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.51902D+00 au -14.123 eV 0.897 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 32 OVGf:
 Koopmans theorem: -0.57682D+00 au -15.696 eV
 Converged second order pole: -0.48920D+00 au -13.312 eV 0.876 (PS)
 Converged third order pole: -0.51285D+00 au -13.955 eV 0.891 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.50664D+00 au -13.786 eV 0.881 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 33 OVGf:
 Koopmans theorem: -0.56955D+00 au -15.498 eV
 Converged second order pole: -0.49236D+00 au -13.398 eV 0.892 (PS)
 Converged third order pole: -0.50477D+00 au -13.736 eV 0.883 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.50282D+00 au -13.683 eV 0.878 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 34 OVGf:
 Koopmans theorem: -0.56293D+00 au -15.318 eV
 Converged second order pole: -0.49463D+00 au -13.460 eV 0.911 (PS)
 Converged third order pole: -0.50537D+00 au -13.752 eV 0.912 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.50411D+00 au -13.718 eV 0.907 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 35 OVGf:
 Koopmans theorem: -0.55689D+00 au -15.154 eV
 Converged second order pole: -0.47081D+00 au -12.811 eV 0.882 (PS)
 Converged third order pole: -0.49174D+00 au -13.381 eV 0.898 (PS)

Outer Valence Approximation: -0.48506D+00 au -13.199 eV 0.890 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 36 OVGf:

Koopmans theorem: -0.54137D+00 au -14.731 eV
 Converged second order pole: -0.44487D+00 au -12.106 eV 0.864 (PS)
 Converged third order pole: -0.46845D+00 au -12.747 eV 0.873 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.46116D+00 au -12.549 eV 0.863 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 37 OVGf:

Koopmans theorem: -0.53790D+00 au -14.637 eV
 Converged second order pole: -0.45157D+00 au -12.288 eV 0.880 (PS)
 Converged third order pole: -0.47422D+00 au -12.904 eV 0.879 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.46984D+00 au -12.785 eV 0.871 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 38 OVGf:

Koopmans theorem: -0.53258D+00 au -14.492 eV
 Converged second order pole: -0.45666D+00 au -12.426 eV 0.898 (PS)
 Converged third order pole: -0.47768D+00 au -12.998 eV 0.904 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.47484D+00 au -12.921 eV 0.897 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 39 OVGf:

Koopmans theorem: -0.52969D+00 au -14.414 eV
 Converged second order pole: -0.45540D+00 au -12.392 eV 0.892 (PS)
 Converged third order pole: -0.46883D+00 au -12.758 eV 0.886 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.46625D+00 au -12.687 eV 0.881 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 40 OVGf:

Koopmans theorem: -0.51661D+00 au -14.058 eV
 Converged second order pole: -0.41630D+00 au -11.328 eV 0.859 (PS)
 Converged third order pole: -0.43857D+00 au -11.934 eV 0.854 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.43310D+00 au -11.785 eV 0.846 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 41 OVGf:

Koopmans theorem: -0.51291D+00 au -13.957 eV
 Converged second order pole: -0.42051D+00 au -11.443 eV 0.874 (PS)
 Converged third order pole: -0.44132D+00 au -12.009 eV 0.879 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.43537D+00 au -11.847 eV 0.872 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 42 OVGf:

Koopmans theorem: -0.49697D+00 au -13.523 eV
 Converged second order pole: -0.40620D+00 au -11.053 eV 0.876 (PS)
 Converged third order pole: -0.43049D+00 au -11.714 eV 0.883 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.42398D+00 au -11.537 eV 0.875 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 43 OVGf:

Koopmans theorem: -0.48770D+00 au -13.271 eV
 Converged second order pole: -0.38795D+00 au -10.557 eV 0.874 (PS)
 Converged third order pole: -0.41779D+00 au -11.369 eV 0.887 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.41088D+00 au -11.181 eV 0.878 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 44 OVGf:

Koopmans theorem: -0.47946D+00 au -13.047 eV
 Converged second order pole: -0.38253D+00 au -10.409 eV 0.869 (PS)
 Converged third order pole: -0.40879D+00 au -11.124 eV 0.876 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.40261D+00 au -10.956 eV 0.867 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 45 OVGf:

Koopmans theorem: -0.47471D+00 au -12.918 eV
 Converged second order pole: -0.36259D+00 au -9.866 eV 0.875 (PS)
 Converged third order pole: -0.39350D+00 au -10.708 eV 0.891 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.38747D+00 au -10.544 eV 0.883 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 46 OVGf:

Koopmans theorem: -0.46787D+00 au -12.731 eV
 Converged second order pole: -0.36258D+00 au -9.866 eV 0.876 (PS)
 Converged third order pole: -0.39495D+00 au -10.747 eV 0.897 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.38705D+00 au -10.532 eV 0.888 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 47 OVGf:

Koopmans theorem: -0.45192D+00 au -12.297 eV
 Converged second order pole: -0.36080D+00 au -9.818 eV 0.884 (PS)
 Converged third order pole: -0.38852D+00 au -10.572 eV 0.896 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.38221D+00 au -10.400 eV 0.888 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 48 OVGf:

Koopmans theorem: -0.43806D+00 au -11.920 eV
 Converged second order pole: -0.34699D+00 au -9.442 eV 0.881 (PS)
 Converged third order pole: -0.37024D+00 au -10.075 eV 0.885 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.36650D+00 au -9.973 eV 0.879 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 49 OVGf:

Koopmans theorem: -0.42824D+00 au -11.653 eV
 Converged second order pole: -0.34791D+00 au -9.467 eV 0.870 (PS)
 Converged third order pole: -0.36533D+00 au -9.941 eV 0.858 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.36317D+00 au -9.882 eV 0.852 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 50 OVGf:

Koopmans theorem: -0.42120D+00 au -11.461 eV
 Converged second order pole: -0.31609D+00 au -8.601 eV 0.882 (PS)
 Converged third order pole: -0.35386D+00 au -9.629 eV 0.902 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.34683D+00 au -9.438 eV 0.894 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 51 OVGf:

Koopmans theorem: -0.41883D+00 au -11.397 eV
 Converged second order pole: -0.32157D+00 au -8.750 eV 0.891 (PS)
 Converged third order pole: -0.34967D+00 au -9.515 eV 0.906 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.34433D+00 au -9.370 eV 0.899 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 52 OVGf:

Koopmans theorem: -0.41706D+00 au -11.349 eV
 Converged second order pole: -0.32140D+00 au -8.746 eV 0.889 (PS)
 Converged third order pole: -0.34902D+00 au -9.497 eV 0.901 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.34403D+00 au -9.361 eV 0.895 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 53 OVGf:

Koopmans theorem: -0.39884D+00 au -10.853 eV
 Converged second order pole: -0.27850D+00 au -7.578 eV 0.882 (PS)
 Converged third order pole: -0.32099D+00 au -8.734 eV 0.904 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.31377D+00 au -8.538 eV 0.896 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 54 OVGf:

Koopmans theorem: -0.38634D+00 au -10.513 eV
 Converged second order pole: -0.26964D+00 au -7.337 eV 0.881 (PS)
 Converged third order pole: -0.30676D+00 au -8.347 eV 0.896 (PS)

Outer Valence Approximation: -0.30058D+00 au -8.179 eV 0.889 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 55 OVGf:

Koopmans theorem: -0.37471D+00 au -10.196 eV
 Converged second order pole: -0.26765D+00 au -7.283 eV 0.876 (PS)
 Converged third order pole: -0.29384D+00 au -7.996 eV 0.883 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.28904D+00 au -7.865 eV 0.876 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 56 OVGf:

Koopmans theorem: -0.36540D+00 au -9.943 eV
 Converged second order pole: -0.26564D+00 au -7.228 eV 0.875 (PS)
 Converged third order pole: -0.29049D+00 au -7.905 eV 0.877 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.28647D+00 au -7.795 eV 0.871 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 57 OVGf:

Koopmans theorem: -0.33048D+00 au -8.993 eV
 Converged second order pole: -0.21041D+00 au -5.726 eV 0.888 (PS)
 Converged third order pole: -0.24261D+00 au -6.602 eV 0.901 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.23690D+00 au -6.446 eV 0.894 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 58 OVGf:

Koopmans theorem: -0.31824D+00 au -8.660 eV
 Converged second order pole: -0.24499D+00 au -6.667 eV 0.880 (PS)
 Converged third order pole: -0.25923D+00 au -7.054 eV 0.874 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.25713D+00 au -6.997 eV 0.870 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 59 OVGf:

Koopmans theorem: -0.31264D+00 au -8.507 eV
 Converged second order pole: -0.16622D+00 au -4.523 eV 0.845 (PS)
 Converged third order pole: -0.22987D+00 au -6.255 eV 0.858 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.21667D+00 au -5.896 eV 0.844 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 60 OVGf:

Koopmans theorem: -0.28541D+00 au -7.766 eV
 Converged second order pole: -0.24372D+00 au -6.632 eV 0.888 (PS)
 Converged third order pole: -0.24470D+00 au -6.659 eV 0.879 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.24333D+00 au -6.621 eV 0.880 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 61 OVGf:

Koopmans theorem: -0.26189D+00 au -7.126 eV
 Converged second order pole: -0.21192D+00 au -5.767 eV 0.888 (PS)
 Converged third order pole: -0.21603D+00 au -5.878 eV 0.880 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.21487D+00 au -5.847 eV 0.879 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 62 OVGf:

Koopmans theorem: -0.22524D+00 au -6.129 eV
 Converged second order pole: -0.17548D+00 au -4.775 eV 0.899 (PS)
 Converged third order pole: -0.18089D+00 au -4.922 eV 0.898 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.17929D+00 au -4.879 eV 0.897 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 63 OVGf:

Koopmans theorem: -0.21203D+00 au -5.770 eV
 Converged second order pole: -0.16750D+00 au -4.558 eV 0.889 (PS)
 Converged third order pole: -0.17290D+00 au -4.705 eV 0.883 (PS)
 Outer Valence Approximation: -0.17168D+00 au -4.672 eV 0.882 (PS)

Summary of results for alpha spin-orbital 64 OVGf:

Koopmans theorem: 0.18373D+00 au 4.999 eV
 Converged second order pole: 0.16438D+00 au 4.473 eV 0.888 (PS)
 Converged third order pole: 0.17740D+00 au 4.827 eV 0.875 (PS)
 Outer Valence Approximation: 0.17701D+00 au 4.817 eV 0.876 (PS)
 N-N= 1.913077716389D+03 E-N=-6.471307776978D+03 KE= 1.116184046623D+03
 1|1|UNPC-LABKOMPUTASI|SP|ROVGF-FC|STO-3G|C18H18O6|KOMPUTASI|09-Feb-201
 5|0|# hf geom=connectivity ovgf tran=full||IPs 1||0,1|C|C,1,1.408881
 39|C,2,1.39976823,1,118.55720762|C,3,1.39419611,2,121.16457282,1,1.513
 9713,0|C,4,1.39363017,3,120.00444397,2,-1.04603363,0|C,1,1.39548829,2,
 120.08578531,3,-0.87795815,0|H,3,1.08038444,2,120.51327403,1,179.70237
 191,0|H,5,1.08312155,4,120.7196255,3,-179.75336594,0|H,6,1.0834566,1,1
 19.72695553,2,179.43932279,0|C,2,1.50194914,1,122.08564568,6,176.64602
 626,0|C,10,1.47440632,2,116.98630221,1,134.70751344,0|C,11,1.35120111,
 10,121.19834833,2,176.27011567,0|C,12,1.45759665,11,127.14538364,10,17
 9.11400395,0|C,13,1.40757389,12,123.15712388,11,2.00243564,0|C,13,1.41
 986527,12,119.5993551,11,-178.64583104,0|C,14,1.38752725,13,122.101611
 86,12,179.93332784,0|H,14,1.08030407,13,120.43500971,12,0.16788219,0|C
 ,15,1.39644643,13,121.00935164,12,179.17035737,0|C,18,1.39464783,15,12
 0.14080054,13,0.71078052,0|H,18,1.07828053,15,122.20583784,13,-179.150
 27841,0|O,10,1.25010132,2,120.73969208,1,-46.4674847,0|H,12,1.08253707
 ,11,116.91818376,10,-0.6313351,0|H,11,1.0822474,10,116.89323042,2,-5.2
 5889882,0|O,15,1.38794437,13,116.01503878,12,-0.15723539,0|O,19,1.3976
 4744,18,117.94440592,15,178.28813505,0|O,16,1.40748522,14,119.36417593
 ,13,179.66944955,0|O,1,1.39176179,6,121.82421521,5,-177.70719051,0|H,2
 7,0.97157325,1,111.72837336,6,-4.80451101,0|O,4,1.39948208,3,116.75136
 446,2,179.10864473,0|H,29,0.97133821,4,111.86612999,3,-178.80399307,0|
 C,24,1.45281986,15,119.69402614,13,179.80858026,0|H,31,1.09181126,24,1
 11.09557123,15,-61.68896853,0|H,31,1.09180263,24,111.1273965,15,61.102
 71005,0|H,31,1.08436196,24,104.92111116,15,179.73712272,0|C,25,1.473647
 82,19,116.69122335,18,119.33257279,0|H,35,1.08521859,25,105.11945533,1
 9,178.07858343,0|H,35,1.09107344,25,109.76134298,19,-63.69396183,0|H,3
 5,1.087447,25,110.67111627,19,58.27564421,0|C,26,1.47140144,16,115.182
 62594,14,107.00651827,0|H,39,1.0896827,26,110.66376377,16,61.23863511,
 0|H,39,1.08557724,26,105.46913919,16,-179.27600816,0|H,39,1.09118116,2
 6,110.13312483,16,-60.69481591,0||Version=IA32W-G09RevA.02|State=I-A|H
 F=-1126.7402959|MP2=-1128.0072214|RMSD=3.685e-009|PG=C01 [X(C18H18O6)]
 ||@

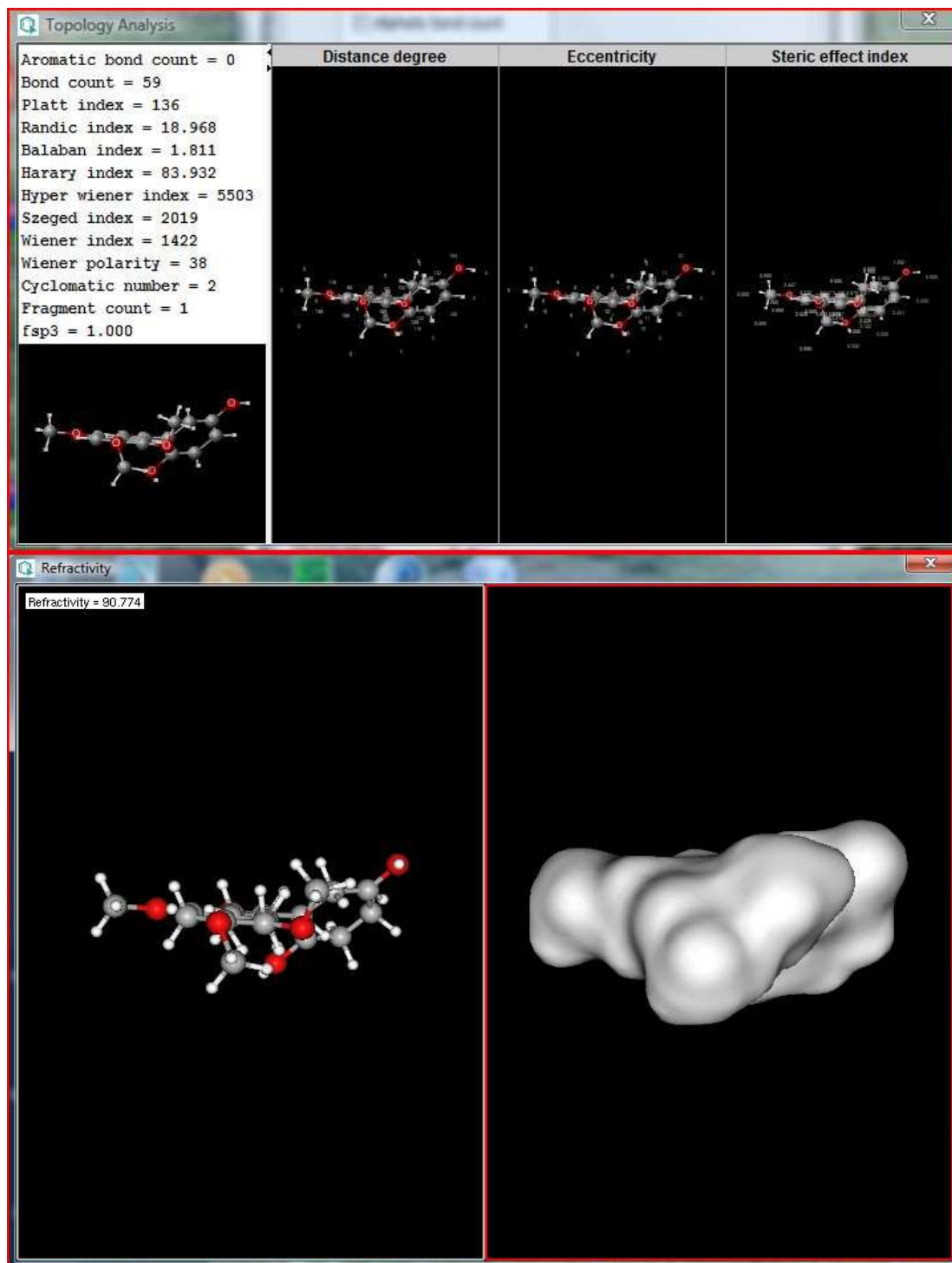
THE FIRST MORNING OF CREATION WROTE WHAT THE LAST DAWN OF
 RECKONING SHALL READ. -- OMAR KHAYYAM

Job cpu time: 0 days 0 hours 50 minutes 37.0 seconds.

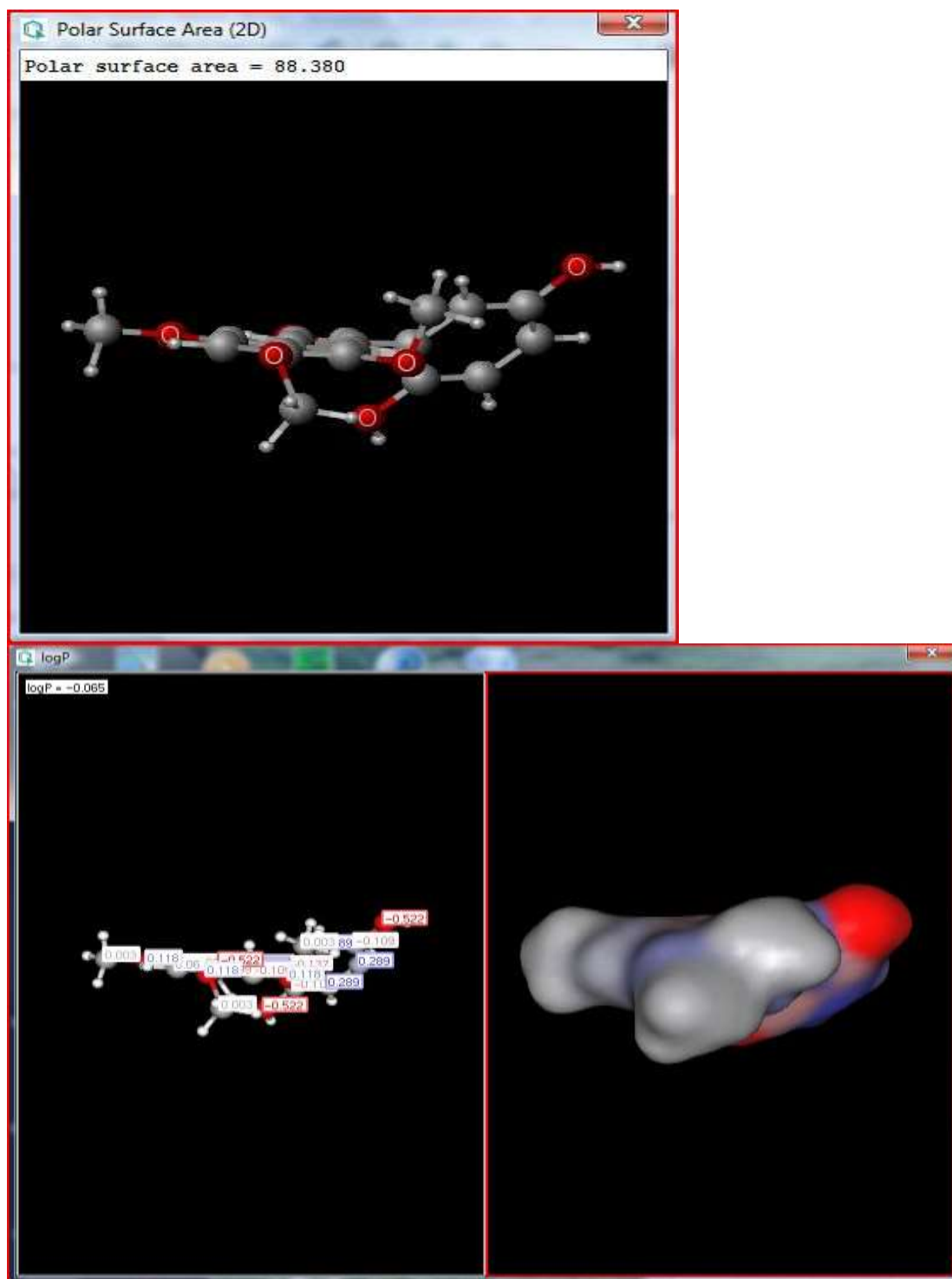
File lengths (MBytes): RWF= 3073 Int= 0 D2E= 0 Chk= 2 Scr= 1

Normal termination of Gaussian 09 at Mon Feb 09 14:49:31 2015.

Lampiran 6. Visualisasi Perhitungan Deskriptor Sterik



Lampiran 7. Visualisasi Perhitungan Deskriptor Hidrofobik



Lampiran 9. Hasil Analisis Regresi Multilinear IBM SPSS 21

```

GET DATA /TYPE=XLSX
  /FILE='J:\SKRIPSI\rekap-titul.xlsx'
  /SHEET=name 'Sheet1'
  /CELLRANGE=full
  /READNAMES=on
  /ASSUMEDSTRWIDTH=32767.
EXECUTE.
DATASET NAME DataSet1 WINDOW=FRONT.
NEW FILE.
DATASET NAME DataSet2 WINDOW=FRONT.
DATASET ACTIVATE DataSet2.
DATASET CLOSE DataSet1.
GET DATA /TYPE=XLSX
  /FILE='J:\SKRIPSI\rekap-titul.xlsx'
  /SHEET=name 'Sheet1'
  /CELLRANGE=full
  /READNAMES=on
  /ASSUMEDSTRWIDTH=32767.
EXECUTE.
DATASET NAME DataSet3 WINDOW=FRONT.
CORRELATIONS
  /VARIABLES=HOMO LUMO GAP Ips PSA logP Platt Balaban Harrary HyperWiener Szeged
Wiener Refractivity Polarizability log1IC50
  /PRINT=TWOTAIL NOSIG
  /MISSING=PAIRWISE.

```

Correlations

Notes		
Output Created		30-MAR-2015 14:43:53
Comments		
Input	Active Dataset	DataSet3
	Filter	<none>
	Weight	<none>
	Split File	<none>
Missing Value Handling	N of Rows in Working Data File	13
	Definition of Missing	User-defined missing values are treated as missing.
	Cases Used	Statistics for each pair of variables are based on all the cases with valid data for that pair.

Syntax		CORRELATIONS /VARIABLES=HOMO LUMO GAP Ips PSA logP Platt Balaban Harrary HyperWiener Szeged Wiener Refractivity Polarizability logIIC50 /PRINT=TWOTAIL NOSIG /MISSING=PAIRWISE.
Resources	Processor Time Elapsed Time	00:00:00,02 00:00:00,02

[DataSet3]

Correlations

		HOMO	LUMO	GAP	Ips	PSA	logP	Platt	Balaba n
HOMO	Pearson	1	.945**	.851**	.977**	-.160	-.124	.644*	.121
	Correlation								
	Sig. (2-tailed)		.000	.000	.000	.603	.686	.017	.693
LUMO	N	13	13	13	13	13	13	13	13
	Pearson	.945**	1	.976**	.929**	-.389	.106	.490	.310
	Correlation								
GAP	Sig. (2-tailed)	.000	.000	.000	.000	.189	.731	.089	.303
	N	13	13	13	13	13	13	13	13
	Pearson	.851**	.976**	1	.839**	-.519	.254	.357	.418
Ips	Correlation								
	Sig. (2-tailed)	.000	.000	.000	.000	.069	.403	.231	.155
	N	13	13	13	13	13	13	13	13
PSA	Pearson	.977**	.929**	.839**	1	-.220	-.061	.634*	.101
	Correlation								
	Sig. (2-tailed)	.000	.000	.000	.000	.471	.842	.020	.742
logP	N	13	13	13	13	13	13	13	13
	Pearson	-.160	-.389	-.519	-.220	1	-.934**	.143	-.417
	Correlation								
Platt	Sig. (2-tailed)	.603	.189	.069	.471	.000	.641	.156	.156
	N	13	13	13	13	13	13	13	13
	Pearson	-.124	.106	.254	-.061	-.934**	1	-.228	.412
Balaban	Correlation								
	Sig. (2-tailed)	.686	.731	.403	.842	.000	.453	.162	.162
	N	13	13	13	13	13	13	13	13
Harrary	Pearson	.644*	.490	.357	.634*	.143	-.228	1	.084
	Correlation								
	Sig. (2-tailed)	.017	.089	.231	.020	.641	.453	.784	.784
Harrary	N	13	13	13	13	13	13	13	13
	Pearson	.121	.310	.418	.101	-.417	.412	.084	1
	Correlation								
Harrary	Sig. (2-tailed)	.693	.303	.155	.742	.156	.162	.784	.784
	N	13	13	13	13	13	13	13	13
	Pearson	.168	.023	-.076	.157	.493	-.451	.774**	.158
Harrary	Correlation								
	Sig. (2-tailed)	.584	.941	.806	.610	.087	.122	.002	.606
	N	13	13	13	13	13	13	13	13

HyperWien	Pearson	.030	-.137	-.242	.031	.500	-.410	.734**	.022
	Correlation								
	Sig. (2-tailed)	.923	.654	.427	.921	.082	.164	.004	.943
Szege	N	13	13	13	13	13	13	13	13
	Pearson	.079	-.085	-.190	.073	.503	-.430	.757**	.059
	Correlation								
Wiener	Sig. (2-tailed)	.798	.782	.535	.812	.079	.143	.003	.847
	N	13	13	13	13	13	13	13	13
	Pearson	.087	-.073	-.176	.083	.499	-.428	.759**	.075
Refractivit	Correlation								
	Sig. (2-tailed)	.777	.813	.565	.788	.083	.145	.003	.808
	N	13	13	13	13	13	13	13	13
Polarizabili	Pearson	.271	.114	.003	.175	.393	-.365	.768**	.126
	Correlation								
	Sig. (2-tailed)	.371	.710	.993	.568	.184	.220	.002	.682
ty	N	13	13	13	13	13	13	13	13
	Pearson	.314	.141	.017	.200	.442	-.437	.757**	.068
	Correlation								
logIIC50	Sig. (2-tailed)	.296	.645	.957	.512	.130	.135	.003	.825
	N	13	13	13	13	13	13	13	13
	Pearson	.238	.189	.144	.218	.324	-.408	-.227	-.086
	Correlation								
	Sig. (2-tailed)	.434	.537	.638	.475	.280	.167	.456	.780
	N	13	13	13	13	13	13	13	13

Correlations

		Harray	HyperWien	Szege	Wiener	Refractiv	Polarizabil	logIIC50
HOMO	Pearson	.168	.030**	.079**	.087**	.271	.314	.238*
	Correlation							
	Sig. (2-tailed)	.584	.923	.798	.777	.371	.296	.434
LUMO	N	13	13	13	13	13	13	13
	Pearson	.023**	-.137	-.085**	-.073**	.114	.141	.189
	Correlation							
GAP	Sig. (2-tailed)	.941	.654	.782	.813	.710	.645	.537
	N	13	13	13	13	13	13	13
	Pearson	-.076**	-.242**	-.190	-.176**	.003	.017	.144
Ips	Correlation							
	Sig. (2-tailed)	.806	.427	.535	.565	.993	.957	.638
	N	13	13	13	13	13	13	13
PSA	Pearson	.157**	.031**	.073**	.083	.175	.200	.218*
	Correlation							
	Sig. (2-tailed)	.610	.921	.812	.788	.568	.512	.475
logP	N	13	13	13	13	13	13	13
	Pearson	.493	.500	.503	.499	.393	.442**	.324
	Correlation							
	Sig. (2-tailed)	.087	.082	.079	.083	.184	.130	.280
	N	13	13	13	13	13	13	13
	Pearson	-.451	-.410	-.430	-.428	-.365**	-.437	-.408
	Correlation							

Platt	Sig. (2-tailed)	.122	.164	.143	.145	.220	.135	.167
	N	13	13	13	13	13	13	13
	Pearson Correlation	.774*	.734	.757	.759*	.768	.757	-.227
Balaban	Sig. (2-tailed)	.002	.004	.003	.003	.002	.003	.456
	N	13	13	13	13	13	13	13
	Pearson Correlation	.158	.022	.059	.075	.126	.068	-.086
Harrary	Sig. (2-tailed)	.606	.943	.847	.808	.682	.825	.780
	N	13	13	13	13	13	13	13
	Pearson Correlation	1	.969	.984	.988	.818	.771	-.257**
HyperWiener	Sig. (2-tailed)		.000	.000	.000	.001	.002	.397
	N	13	13	13	13	13	13	13
	Pearson Correlation	.969	1	.997	.995	.789	.737	-.330**
Szedged	Sig. (2-tailed)	.000		.000	.000	.001	.004	.271
	N	13	13	13	13	13	13	13
	Pearson Correlation	.984	.997	1	1.000	.810	.760	-.310**
Wiener	Sig. (2-tailed)	.000	.000		.000	.001	.003	.303
	N	13	13	13	13	13	13	13
	Pearson Correlation	.988	.995	1.000	1	.809	.759	-.306**
Refractivity	Sig. (2-tailed)	.000	.000	.000		.001	.003	.309
	N	13	13	13	13	13	13	13
	Pearson Correlation	.818	.789	.810	.809	1	.989	-.296**
Polarizability	Sig. (2-tailed)	.001	.001	.001	.001		.000	.327
	N	13	13	13	13	13	13	13
	Pearson Correlation	.771	.737	.760	.759	.989	1	-.237**
logIIC50	Sig. (2-tailed)	.002	.004	.003	.003	.000		.435
	N	13	13	13	13	13	13	13
	Pearson Correlation	-.257	-.330	-.310	-.306	-.296	-.237	1
logIIC50	Sig. (2-tailed)	.397	.271	.303	.309	.327	.435	
	N	13	13	13	13	13	13	13

** . Correlation is significant at the 0.01 level (2-tailed).

* . Correlation is significant at the 0.05 level (2-tailed).

REGRESSION

/DESCRIPTIVES MEAN STDDEV CORR SIG N

/MISSING LISTWISE

/STATISTICS COEFF OUTS R ANOVA

/CRITERIA=PIN(.05) POUT(.10)

/NOORIGIN

/DEPENDENT logIIC50

/METHOD=BACKWARD HOMO LUMO GAP Ips PSA logP Platt Balaban Harrary HyperWiener

Szedged Wiener Refractivity Polarizability

```

/SCATTERPLOT=(log1IC50 ,*ADJPRED)
/RESIDUALS DURBIN HISTOGRAM(ZRESID) NORMPROB(ZRESID)
/SAVE PRED RESID.

```

Regression

Notes

Output Created	
Comments	
Input	Active Dataset Filter Weight Split File N of Rows in Working Data File
Missing Value Handling	Definition of Missing Cases Used
Syntax	
Resources	Processor Time Elapsed Time Memory Required Additional Memory Required for Residual Plots
Variables Created or Modified	PRE_1 RES_1

Notes

Output Created		30-MAR-2015 14:47:17
Comments		
Input	Active Dataset Filter Weight Split File N of Rows in Working Data File	DataSet3 <none> <none> <none>
Missing Value Handling	Definition of Missing Cases Used	13 User-defined missing values are treated as missing. Statistics are based on cases with no missing values for any variable used.

Syntax	REGRESSION /DESCRIPTIVES MEAN STDDEV CORR SIG N /MISSING LISTWISE /STATISTICS COEFF OUTS R ANOVA /CRITERIA=PIN(.05) POUT(.10) /NOORIGIN /DEPENDENT log1IC50 /METHOD=BACKWARD HOMO LUMO GAP Ips PSA logP Platt Balaban Harrary HyperWiener Szeged Wiener Refractivity Polarizability /SCATTERPLOT=(log1IC50 ,*ADJPRED) /RESIDUALS DURBIN HISTOGRAM(ZRESID) NORMPROB(ZRESID) /SAVE PRED RESID.	
	Processor Time	00:00:01,06
Resources	Elapsed Time	00:00:00,95
	Memory Required	8444 bytes
Variables Created or Modified	Additional Memory Required for Residual Plots	808 bytes
	PRE_1	Unstandardized Predicted Value
	RES_1	Unstandardized Residual

[DataSet3]

Descriptive Statistics

	Mean	Std. Deviation	N
log1IC50	-.6451374100	.07232689198	13
HOMO	-.2225838	.00690198	13
LUMO	-.0909331	.01655295	13
GAP	.1316508	.01027594	13
Ips	-5.8992	.12809	13
PSA	67.7792	19.07900	13
logP	1.56485	1.106749	13
Platt	141.23	11.271	13
Balaban	1.79669	.067137	13
Harrary	86.18562	8.166822	13
HyperWiener	6295.77	1225.866	13
Szeged	2209.00	345.343	13
Wiener	1554.31	254.638	13
Refractivity	94.52823	4.454391	13
Polarizability	37.79823	1.904688	13

		Correlations						
		log1IC50	HOMO	LUMO	GAP	Ips	PSA	logP
Pearson Correlation	log1IC50	1.000	.238	.189	.144	.218	.324	-.408
	HOMO	.238	1.000	.945	.851	.977	-.160	-.124
	LUMO	.189	.945	1.000	.976	.929	-.389	.106
	GAP	.144	.851	.976	1.000	.839	-.519	.254
	Ips	.218	.977	.929	.839	1.000	-.220	-.061
	PSA	.324	-.160	-.389	-.519	-.220	1.000	-.934
	logP	-.408	-.124	.106	.254	-.061	-.934	1.000
	Platt	-.227	.644	.490	.357	.634	.143	-.228
	Balaban	-.086	.121	.310	.418	.101	-.417	.412
	Harray	-.257	.168	.023	-.076	.157	.493	-.451
	HyperWiene r	-.330	.030	-.137	-.242	.031	.500	-.410
	Szeged	-.310	.079	-.085	-.190	.073	.503	-.430
	Wiener	-.306	.087	-.073	-.176	.083	.499	-.428
	Refractivity	-.296	.271	.114	.003	.175	.393	-.365
	Polarizabilit y	-.237	.314	.141	.017	.200	.442	-.437
	log1IC50	.	.217	.268	.319	.238	.140	.083
	HOMO	.217	.	.000	.000	.000	.301	.343
Sig. (1-tailed)	LUMO	.268	.000	.	.000	.000	.095	.365
	GAP	.319	.000	.000	.	.000	.035	.201
	Ips	.238	.000	.000	.000	.	.235	.421
	PSA	.140	.301	.095	.035	.235	.	.000
	logP	.083	.343	.365	.201	.421	.000	.
	Platt	.228	.009	.044	.115	.010	.320	.227
	Balaban	.390	.347	.151	.078	.371	.078	.081
	Harray	.198	.292	.470	.403	.305	.044	.061
	HyperWiene r	.135	.461	.327	.213	.461	.041	.082
	Szeged	.151	.399	.391	.267	.406	.040	.071
	Wiener	.155	.388	.406	.282	.394	.041	.072
	Refractivity	.163	.186	.355	.497	.284	.092	.110
	Polarizabilit y	.217	.148	.322	.478	.256	.065	.068
N	log1IC50	13	13	13	13	13	13	13
	HOMO	13	13	13	13	13	13	13
	LUMO	13	13	13	13	13	13	13
	GAP	13	13	13	13	13	13	13
	Ips	13	13	13	13	13	13	13
	PSA	13	13	13	13	13	13	13
	logP	13	13	13	13	13	13	13
	Platt	13	13	13	13	13	13	13
	Balaban	13	13	13	13	13	13	13

HOMO	13	13	13	13	13	13	13
LUMO	13	13	13	13	13	13	13
GAP	13	13	13	13	13	13	13
Ips	13	13	13	13	13	13	13
PSA	13	13	13	13	13	13	13
logP	13	13	13	13	13	13	13
Platt	13	13	13	13	13	13	13
Balaban	13	13	13	13	13	13	13
Harray	13	13	13	13	13	13	13
HyperWiener	13	13	13	13	13	13	13
Szeged	13	13	13	13	13	13	13
Wiener	13	13	13	13	13	13	13
Refractivity	13	13	13	13	13	13	13
Polarizability	13	13	13	13	13	13	13

Correlations

		Polarizability
Pearson Correlation	logIC50	-.237
	HOMO	.314
	LUMO	.141
	GAP	.017
	Ips	.200
	PSA	.442
	logP	-.437
	Platt	.757
	Balaban	.068
	Harray	.771
	HyperWiener	.737
	Szeged	.760
	Wiener	.759
	Refractivity	.989
	Polarizability	1.000
	logIC50	.217
	HOMO	.148
	LUMO	.322
Sig. (1-tailed)	GAP	.478
	Ips	.256
	PSA	.065
	logP	.068
	Platt	.001
	Balaban	.413
	Harray	.001
	HyperWiener	.002
	Szeged	.001

N	Wiener	.001
	Refractivity	.000
	Polarizability	.
	log1IC50	13
	HOMO	13
	LUMO	13
	GAP	13
	Ips	13
	PSA	13
	logP	13
	Platt	13
	Balaban	13
	Harray	13
	HyperWiener	13
	Szeged	13
	Wiener	13
	Refractivity	13
	Polarizability	13

Variables Entered/Removed^a

Model	Variables Entered	Variables Removed	Method
1	Polarizability, GAP, Balaban, logP, HyperWiener, Ips, PSA, Platt, Harray, HOMO, Refractivity ^b	.	Enter
2	.	GAP	Backward (criterion: Probability of F-to-remove >= ,100).
3	.	HyperWiener	Backward (criterion: Probability of F-to-remove >= ,100).

a. Dependent Variable: log1IC50

b. Tolerance = ,000 limits reached.

Model Summary^d

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate	Durbin-Watson
1	.998 ^a	.995	.945	.01701146942	
2	.998 ^b	.995	.971	.01241740987	
3	.996 ^c	.992	.966	.01333597945	2.350

a. Predictors: (Constant), Polarizability, GAP, Balaban, logP, HyperWiener, Ips, PSA, Platt, Harrary, HOMO, Refractivity

b. Predictors: (Constant), Polarizability, Balaban, logP, HyperWiener, Ips, PSA, Platt, Harrary, HOMO, Refractivity

c. Predictors: (Constant), Polarizability, Balaban, logP, Ips, PSA, Platt, Harrary, HOMO, Refractivity

d. Dependent Variable: logIIC50

ANOVA^a

Model		Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
1	Regression	.062	11	.006	19.629	.174 ^b
	Residual	.000	1	.000		
	Total	.063	12			
2	Regression	.062	10	.006	40.512	.024 ^c
	Residual	.000	2	.000		
	Total	.063	12			
3	Regression	.062	9	.007	38.885	.006 ^d
	Residual	.001	3	.000		
	Total	.063	12			

a. Dependent Variable: logIIC50

b. Predictors: (Constant), Polarizability, GAP, Balaban, logP, HyperWiener, Ips, PSA, Platt, Harrary, HOMO, Refractivity

c. Predictors: (Constant), Polarizability, Balaban, logP, HyperWiener, Ips, PSA, Platt, Harrary, HOMO, Refractivity

d. Predictors: (Constant), Polarizability, Balaban, logP, Ips, PSA, Platt, Harrary, HOMO, Refractivity

Coefficients^a

Model		Unstandardized Coefficients		Standardized Coefficients	t	Sig.
		B	Std. Error	Beta		
1	(Constant)	-13.715	3.636		-3.772	.165
	HOMO	56.583	13.521	5.400	4.185	.149
	GAP	.654	2.551	.093	.256	.840
	Ips	-4.018	.927	-7.116	-4.332	.144
	PSA	.003	.002	.794	1.471	.380
	logP	-.225	.065	-3.449	-3.459	.179
	Platt	.036	.008	5.571	4.275	.146
	Balaban	1.221	.191	1.134	6.395	.099

2	Harray	-.046	.008	-5.236	-5.596	.113
	HyperWiener	-3.643E-005	.000	-.618	-.729	.599
	Refractivity	.299	.055	18.395	5.455	.115
	Polarizability	-.773	.140	-20.362	-5.514	.114
	(Constant)	-13.525	2.599		-5.205	.035
	HOMO	58.574	8.075	5.590	7.254	.018
	Ips	-4.079	.654	-7.224	-6.237	.025
	PSA	.003	.001	.762	1.987	.185
	logP	-.224	.047	-3.433	-4.726	.042
	Platt	.036	.006	5.549	5.846	.028
	Balaban	1.214	.138	1.127	8.796	.013
	Harray	-.045	.005	-5.116	-8.651	.013
	HyperWiener	-4.108E-005	.000	-.696	-1.208	.350
	Refractivity	.299	.040	18.402	7.476	.017
	Polarizability	-.775	.102	-20.402	-7.576	.017
	(Constant)	-11.208	1.884		-5.950	.009
3	HOMO	55.184	8.131	5.266	6.787	.007
	Ips	-3.616	.569	-6.404	-6.353	.008
	PSA	.004	.001	.981	2.703	.074
	logP	-.191	.041	-2.923	-4.604	.019
	Platt	.030	.005	4.724	6.672	.007
	Balaban	1.206	.148	1.120	8.145	.004
	Harray	-.046	.006	-5.163	-8.145	.004
	Refractivity	.269	.034	16.559	7.979	.004
	Polarizability	-.698	.086	-18.369	-8.134	.004

a. Dependent Variable: log1IC50

Excluded Variables^a

Model		Beta In	t	Sig.	Partial Correlation	Collinearity Statistics
						Tolerance
1	LUMO	. ^b000
	Szeged	-10.569 ^b	.	.	-1.000	4.127E-005
	Wiener	32.306 ^b	.	.	1.000	4.417E-006
2	LUMO	.150 ^c	.256	.840	.248	.014
	Szeged	-6.556 ^c	-.985	.505	-.702	5.626E-005
	Wiener	21.274 ^c	1.814	.321	.876	8.324E-006
	GAP	.093 ^c	.256	.840	.248	.035
	LUMO	.304 ^d	.638	.589	.411	.016
3	Szeged	-1.003 ^d	-1.413	.293	-.707	.004
	Wiener	-1.150 ^d	-1.086	.391	-.609	.002
	GAP	.189 ^d	.638	.589	.411	.040
	HyperWiener	-.696 ^d	-1.208	.350	-.650	.007

a. Dependent Variable: log1IC50

b. Predictors in the Model: (Constant), Polarizability, GAP, Balaban, logP, HyperWiener, Ips, PSA, Platt, Harrary, HOMO, Refractivity

c. Predictors in the Model: (Constant), Polarizability, Balaban, logP, HyperWiener, Ips, PSA, Platt, Harrary, HOMO, Refractivity

d. Predictors in the Model: (Constant), Polarizability, Balaban, logP, Ips, PSA, Platt, Harrary, HOMO, Refractivity

Residuals Statistics^a

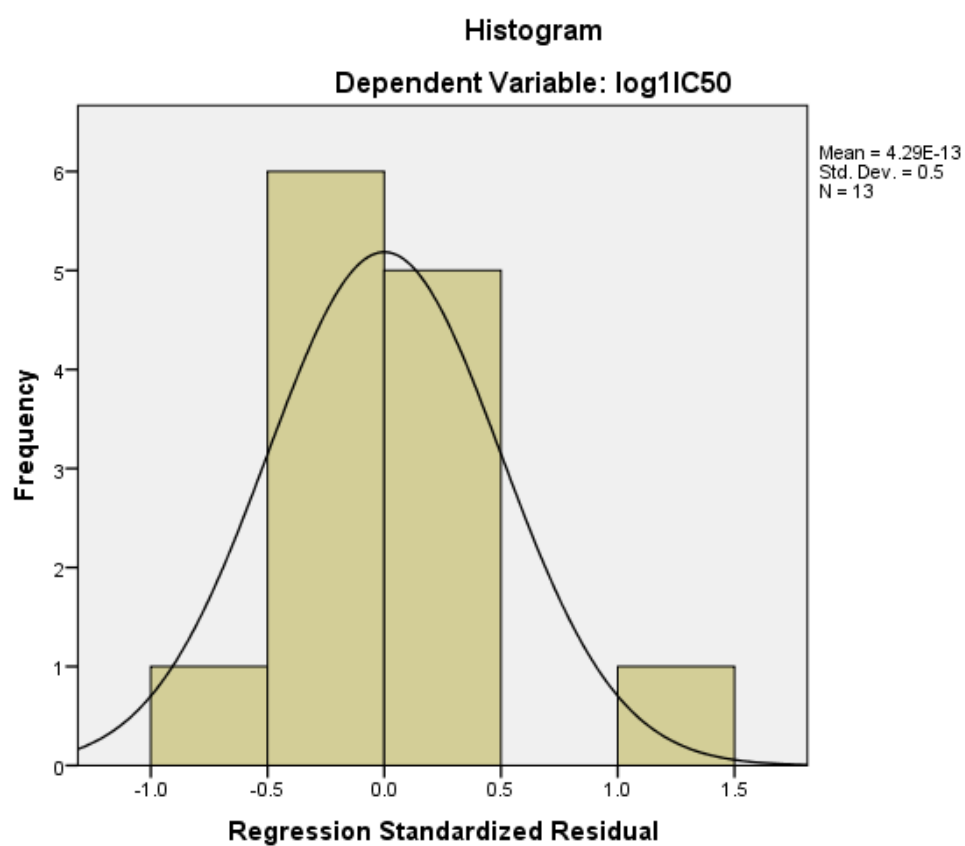
	Minimum	Maximum	Mean	Std. Deviation
Predicted Value	-.7121657133	-.4237657189	-.6451374100	.07201886709
Std. Predicted Value	-.931	3.074	.000	1.000
Standard Error of Predicted Value	.008	.013	.012	.002
Adjusted Predicted Value	-.7580333352	-.4246216118	-.6329355895	.07926530754
Residual	-.01203169581	.01754481345	.00000000000	.00666798973
Std. Residual	-.902	1.316	.000	.500
Stud. Residual	-1.319	1.690	-.162	.797
Deleted Residual	-.07428011298	.04597322270	-.01220182054	.03671757551
Stud. Deleted Residual	-1.660	6.284	.180	1.927
Mahal. Distance	3.134	11.049	8.308	3.074
Cook's Distance	.000	3.048	.722	1.061
Centered Leverage Value	.261	.921	.692	.256

Residuals Statistics^a

	N
Predicted Value	13
Std. Predicted Value	13
Standard Error of Predicted Value	13
Adjusted Predicted Value	13
Residual	13
Std. Residual	13
Stud. Residual	13
Deleted Residual	13
Stud. Deleted Residual	13
Mahal. Distance	13
Cook's Distance	13
Centered Leverage Value	13

a. Dependent Variable: log1IC50

Charts



Normal P-P Plot of Regression Standardized Residual
Dependent Variable: log1IC50

