



**ANALISIS HUBUNGAN KUANTITATIF STRUKTUR
DAN AKTIVITAS *CALCIUM CHANNEL BLOCKER*
SENYAWA TURUNAN DIHIDROPIRIDIN**

Skripsi

disusun sebagai salah satu syarat
untuk memperoleh gelar Sarjana
Sains Program Studi Kimia

oleh

Moh Syaifudin
4311411032

**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 perundang-undangan.

Semarang, 7 Mei 2015



Moh Syaifudin

4311411032

PENGESAHAN

Skripsi yang berjudul

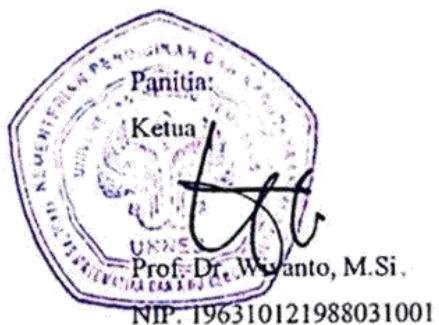
Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas *Calcium Channel Blocker* Senyawa Turunan Dihidropiridin

disusun oleh

Moh Syaifudin

4311411032

telah dipertahankan dihadapan Panitia Ujian Skripsi FMIPA UNNES pada tanggal 7 Mei 2015.



Sekretaris

Dra. Woro Sumarni, M.Si.

NIP. 196507231993032001

Ketua Penguji

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

Anggota Penguji/
Pembimbing Utama

Drs. Kasmui, M.Si.
NIP. 196602271991021001

Anggota Penguji/
Pembimbing Pendamping

Drs. Subiyanto HS, M.Si.
NIP. 195104211975011002

MOTTO DAN PERSEMBAHAN

MOTTO:

Jangan mencari apa yang tidak atau belum ada pada dirimu. Tapi bersyukurlah dengan apa yang ada, dan manfaatkan dengan sebaik-baiknya untuk kemajuan dan kesuksesanmu.

PERSEMBAHAN:

Untuk Ibu tercinta, Hj. Watimah

Ayah tercinta, H. Nur Sanusi

Adekku Ahmad Syafi'i

Para guru di semua jenjang pendidikan

Almamaterku

PRAKATA

Puji syukur kehadirat Allah SWT atas segala limpahan rahmat, inayah, taufik dan hidayah-Nya sehingga saya dapat menyelesaikan penyusunan skripsi ini. Sholawat dan salam semoga selalu tercurah kepada Rasululloh SAW, karena beliaulah sesungguhnya teladan umat manusia. Skripsi dengan judul “Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas *Calcium Channel Blocker* Senyawa Turunan Dihidropiridin”. Penulisan skripsi ini dapat terselesaikan tidak lepas dari bantuan dan dukungan dari berbagai pihak. Pada kesempatan ini penulis menyampaikan terima kasih yang setulusnya kepada:

1. Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Negeri Semarang.
2. Ketua Jurusan Kimia FMIPA Unnes beserta jajarannya.
3. Kepala Laboratorium Kimia FMIPA Unnes yang memberikan izin penelitian.
4. Bapak Drs. Kasmui, M.Si., Dosen Pembimbing I yang menjadi inspirator dan memberikan bimbingan dan arahan dalam penulisan skripsi.
5. Bapak Drs. Subiyanto Hadisaputro, M.Si., Dosen Pembimbing II yang memberikan bimbingan dan arahan dalam penulisan skripsi.
6. Bapak Agung Tri Prasetya, S.Si, M.Si., Dosen Penguji yang memberikan saran, evaluasi dan pengarahan dalam penulisan skripsi.
7. Bapak/Ibu Dosen Jurusan Kimia yang telah membekali ilmu pengetahuan selama penulis mengikuti pendidikan di kampus Unnes.

8. Teknisi dan laboran di Laboratorium Kimia FMIPA Unnes yang telah membantu dalam penelitian.
9. Sahabat tercinta, Grandys Perwira, Lailatul Isnaeni dan Muzdalifah Noor yang selalu bersama suka maupun duka dalam menyelesaikan penelitian dan penulisan skripsi ini.
10. Teman-teman seperjuangan dan segenap Keluarga Besar Jurusan Kimia FMIPA Unnes.
11. Keluarga Besar *Computational Chemistry Club* Unnes, Keluarga Besar BEM FMIPA Unnes 2012.
12. Teman-teman Rumah Triha, Rumah Yusuf dan IKLAS Semarang.
13. Semua pihak yang tidak dapat disebutkan satu persatu.

Akhirnya penulis berharap semoga skripsi ini dapat bermanfaat dan memberikan kontribusi positif bagi khazanah perkembangan ilmu pengetahuan.

Semarang, 7 Mei 2015

Penulis

ABSTRAK

Syaifudin, M. 2015. *Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas Calcium Channel Blocker Senyawa Turunan Dihidropiridin*. Skripsi, Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Semarang. Pembimbing Utama Drs. Kasmui, M. Si. dan Pembimbing Pendamping Drs. Subiyanto HS, M.Si.

Kata kunci: dihidropiridin, CCB, HKSA, DFT, deskriptor

Saat ini hipertensi tetap menjadi masalah kesehatan yang cukup sulit diatasi. Data *World Health Organization* pada tahun 1996 menunjukkan bahwa hipertensi meningkatkan morbiditas dan mortalitas terutama di negara-negara maju. Kimia Komputasi sebagai salah satu cabang ilmu kimia berkembang dengan pesat seiring dengan perkembangan sains komputasi khususnya untuk pemecahan masalah perhitungan molekular yang berbasis kimia kuantum. Salah satu aplikasi dari kimia komputasi dalam bidang kimia medisinal adalah kajian analisis hubungan kuantitatif struktur dan aktivitas (HKSA). Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur dan Aktivitas (HKSA) *calcium channel blocker (CCB)* model senyawa turunan dihidropiridin menggunakan deskriptor sterik, hidrofobik dan elektronik. Optimasi model senyawa turunan dihidropiridin menggunakan metode DFT dengan basis set 6-31G memakai program *Gaussian09W*, dan nilai deskriptor diperoleh berdasarkan perhitungan kimia komputasi menggunakan program *Gaussian09W* dan *MarvinBeans*. Data deskriptor yang digunakan untuk menghitung nilai pIC_{50} dan dibandingkan dengan data eksperimen. Hasil perhitungan diperoleh menggunakan program *IBM SPSS 21* dan dianalisis menggunakan metode regresi multilinear dan diperoleh persamaan HKSA:

$$pIC_{50} = 42.881 + (-219.745) \text{ Energi HOMO} + (-896.757) \text{ Energi LUMO} + (-4.521) \text{ Momen dipol} + (8.151) \text{ Log P} + (-0.436) \text{ Platt Index} + (-2.314) \text{ Balaban Index} + (0.356) \text{ Harary Index} + (-0.005) \text{ Hyperwiener Index} + (0.013) \text{ Szeged Index} + (-6.302) \text{ Wiener polarity} + (1.901) \text{ Refractivity} \quad (n = 14; R = 0,995; R^2 = 0,990387; SE = 0,20893; PRESS = 0,087304)$$

Berdasarkan persamaan HKSA tersebut, didapatkan prediksi turunan senyawa dihidropiridin yang sangat berpotensi sebagai *calcium channel blocker* dengan substituen fenil dan sikloheksil. Senyawa turunan yang berpotensi memiliki nilai IC_{50} yang lebih baik yaitu 3-etil 5-fenil 4-(4,5-dibromo-1H-imidazol-2-il)-2,6-dimetil-1,4-dihidropiridin-3,5-dikarboksilat.

ABSTRACT

Syaifudin, M. 2015. *Analysis of Quantitative Structure Activity Relationships Calcium Channel Blocker Compounds of Dihydropyridine Derivatives*. Final Project, Department of Chemistry, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Semarang State University. Primary Supervisor Drs. Kasmui, M. Si. and Secondary Supervisor Drs. Subiyanto HS, M.Si.

Keyword: dihydropyridine, CCB, QSAR, DFT, descriptor

Currently hypertension remains a health problem that is quite difficult to overcome. Data from the World Health Organization in 1996 showed that hypertension increases morbidity and mortality, especially in developed countries. Computational Chemistry as one branch of chemistry developed rapidly along with the development of computing science, especially for problem-solving calculations based molecular quantum chemistry. One application of computational chemistry in the field of medicinal chemistry is the study of quantitative analysis of the structure and activity relationship (QSAR). Analysis of Quantitative Structure Activity Relationship (QSAR) calcium channel blocker (CCB) models dihydropyridine derivatives using descriptors steric, hydrophobic and electronics. Optimization of an analogs dihydropyridine using DFT methode with 631G for basis set using Gaussian09W program. Descriptor values obtained by using Gaussian09W program and Marvin Beans. pIC_{50} is determined from descriptor values and compared with experimental data. QSAR equation was obtained using IBM SPSS 21 using multilinear regression analysis methode. The equation was: $\text{pIC}_{50} = 42.881 + (-219.745) \text{ Energi HOMO} + (-896.757) \text{ Energi LUMO} + (-4.521)$

Moment dipole + (8.151) Log P + (-0.436) Platt Index + (-2.314) Balaban Index + (0.356) Harary Index + (-0.005) Hyperwiener Index + (0.013) Szeged Index + (-6.302) Wiener polarity + (1.901) Refractifity ($n = 14$; $R = 0,995$; $R^2 = 0,990387$; $SE = 0,20893$; $PRESS = 0,087304$)

Of the QSAR equation, the potential of dihydropyridine prediction compound with phenyl and cyclohexyl group substituent is 3-ethyl 5-phenyl 4-(4,5-dibromo-1H-imidazol-2-yl)-2,6-dimethyl-1,4-dihydropyridine-3,5-dicarboxylate.

DAFTAR ISI

	Halaman
HALAMAN JUDUL	i
PERNYATAAN	ii
PENGESAHAN	iii
MOTTO DAN PERSEMBAHAN	iv
PRAKATA	v
ABSTRAK	vii
ABSTRACT	viii
DAFTAR ISI	ix
DAFTAR TABEL	x
DAFTAR GAMBAR	xi
DAFTAR LAMPIRAN	xii
 BAB	
1. PENDAHULUAN	1
1.1. Latar Belakang	1
1.2. Rumusan Masalah	4
1.3. Tujuan Penelitian	4
1.4. Manfaat Penelitian	4
2. TINJAUAN PUSTAKA	6
2.1. Hipertensi	6
2.2. <i>Calcium Channel Blocker</i>	7
2.3. Dihidropiridin (DHP)	9
2.4. Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur Aktivitas (HKSA)	11
2.5. Analisis Statistika dalam HKSA	12

2.6. Deskriptor HKSA	14
2.7. <i>Density Functional Theory</i> (DFT)	15
2.8. Pemodelan Molekul	16
2.9. Optimasi Geometri	17
2.10. Aktivitas Penghambatan 50% (IC ₅₀)	18
3. METODOLOGI PENELITIAN	19
3.1. Lokasi Penelitian	19
3.2. Variabel Penelitian	19
3.3. Alat dan Bahan.....	19
3.4. Prosedur Penelitian.....	21
3.5. Analisis Data.....	23
4. HASIL DAN PEMBAHASAN.....	25
4.1. Hasil Optimasi Geometri	25
4.2. Rekapitulasi Data Deskriptor Senyawa Kajian	26
4.3. Analisis Statistika HKSA Senyawa Kajian	30
4.4. Rekapitulasi Data Deskriptor Senyawa Baru	37
4.5. Prediksi Aktivitas <i>Calcium Channel Blocker</i> Seri Senyawa Baru.....	39
5. SIMPULAN DAN SARAN.....	42
5.1. Simpulan	42
5.2. Saran	42
DAFTAR PUSTAKA	44
LAMPIRAN	46

DAFTAR TABEL

Tabel	Halaman
2.1 Aktivitas Percobaan dan Korespondensi Senyawa Turunan dihidropiridin	11
4.1. Perbandingan panjang ikatan struktur senyawa dihidropiridin antara metode DFT basis set 6-31G dengan MP2 basis set 6-311G	25
4.2. Rekapitulasi hasil perhitungan deskriptor sterik	27
4.3. Rekapitulasi hasil perhitungan deskriptor sterik (lanjutan)	27
4.4. Hasil perhitungan deskriptor hidrofobik senyawa kajian	29
4.5. Hasil perhitungan deskriptor elektronik senyawa kajian	30
4.6. Nilai korelasi antar variabel	32
4.7. Model persamaan HKSA hasil analisis	34
4.8. Nilai koefisien persamaan HKSA hasil analisis	34
4.9. Data pIC ₅₀ prediksi dan uji PRESS	35
4.10. Gugus pengganti pada struktur dihidropiridin yang akan dieksplorasi.....	37
4.11. Korelasi muatan bersih dengan pIC ₅₀	38
4.12. Hasil perhitungan deskriptor sterik senyawa baru	38
4.13. Hasil perhitungan deskriptor hidrofobik senyawa baru	39
4.14. Hasil perhitungan elektronik senyawa baru	39
4.15. Rekapitulasi hasil perhitungan aktivitas <i>calcium channel blocker</i> seri senyawa baru	40

DAFTAR GAMBAR

Gambar	Halaman
2.1. Struktur dihidropiridin	10
2.2. Struktur turunan dihidropiridin asimetris	11
4.1. Struktur dihidropiridin dengan penomoran atom	25
4.2. Hubungan antara aktivitas <i>calcium channel blocker</i> hasil eksperimen (pIC_{50} eksperimen) dengan aktivitas <i>calcium channel blocker</i> prediksi (pIC_{50} prediksi) menggunakan model persamaan 1	36
4.3. Struktur dasar senyawa dihidropiridin yang akan dieksplorasi	37
4.4. Struktur dasar senyawa dihidropiridin yang akan dieksplorasi	40

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran	Halaman
1. <i>Gaussian Output File</i> Hasil Optimasi Metode DFT 6-31G	46
2. <i>Gaussian Output File</i> Hasil Optimasi Metode MP2 6-311G	67
3. <i>Gaussian Output File</i> Hasil Perhitungan Energi HOMO LUMO	89
4. Visualisasi Perhitungan Log P	102
5. Visualisasi Perhitungan <i>Refractivity</i>	103
6. Visualisasi Perhitungan MSA	104
7. Visualisasi Perhitungan <i>Polarizability</i>	105
8. Visualisasi Perhitungan <i>Topology Analysis</i>	106
9. Hasil Analisis Regresi Multilinier Menggunakan <i>SPSS Statistics 21</i>	107
10. Ploting Data Menggunakan <i>SPSS Statistics 21</i>	108

BAB 1

PENDAHULUAN

1.1. Latar Belakang

Hipertensi atau tekanan darah tinggi, kadang-kadang disebut juga dengan hipertensi arteri, adalah kondisi medis kronis dengan tekanan darah di arteri meningkat. Peningkatan ini menyebabkan jantung harus bekerja lebih keras dari biasanya untuk mengedarkan darah melalui pembuluh darah. Tekanan darah melibatkan dua pengukuran, sistolik dan diastolik, tergantung apakah otot jantung berkontraksi (*sistole*) atau berelaksasi di antara denyut (*diastole*). Tekanan darah normal pada saat istirahat adalah dalam kisaran sistolik (bacaan atas) 100–140 mmHg dan diastolik (bacaan bawah) 60–90 mmHg. Tekanan darah tinggi terjadi bila terus-menerus berada pada 140/90 mmHg atau lebih.

Hipertensi terbagi menjadi hipertensi primer (esensial) atau hipertensi sekunder. Sekitar 90–95% kasus tergolong "hipertensi primer", yang berarti tekanan darah tinggi tanpa penyebab medis yang jelas (Carretero *et al.*, 2000: 329).

Hingga saat ini hipertensi tetap menjadi masalah kesehatan yang cukup sulit diatasi. Data *World Health Organization* pada tahun 1996 menunjukkan bahwa hipertensi meningkatkan morbiditas dan mortalitas terutama di negara maju. Dari data epidemiologi beberapa peneliti, prevalensi hipertensi di Indonesia diperkirakan sebesar 6-15% dan diperkirakan diseluruh dunia saat ini lebih dari 1 miliar orang mempunyai tekanan darah tinggi dan sekitar 7,1 juta kematian berkaitan dengan hipertensi (Darnindro & Abdul, 2008: 57).

Sejak dipublikasikannya penelitian tentang obat antihipertensi pada tahun 1967 diuretik tiazid telah menjadi pilihan utama dalam penanganan hipertensi karena perannya dalam menurunkan tekanan darah dan menurunkan kejadian penyakit kardiovaskular. Beberapa penelitian lain membuktikan menurunkan tekanan darah dengan obat antihipertensi lain seperti ACE-*inhibitor*, ARB, *beta-blocker* (BB), dan *calcium channel blocker* (CCB) juga dapat menurunkan komplikasi hipertensi (Darnindro & Abdul, 2008: 58).

Kimia komputasi sebagai salah satu cabang ilmu kimia berkembang dengan pesat seiring dengan perkembangan sains komputasi khususnya untuk pemecahan masalah perhitungan molekular yang berbasis kimia kuantum. Salah satu aplikasi dari kimia komputasi dalam bidang kimia medisinal adalah kajian analisis hubungan kuantitatif struktur dan aktivitas (HKSA). Kajian HKSA menerapkan metode khemometri terhadap satu seri senyawa dengan struktur induk tertentu menggunakan data hasil perhitungan komputasi yang dikaitkan dengan suatu data aktivitas biologis (Kubinyi, 1993). Senyawa yang akan disintetis dapat didesain terlebih dahulu dengan metode analisis HKSA berdasarkan model hubungan antara struktur dan aktivitas seri senyawa tersebut. Menggunakan hubungan tersebut, aktivitas teoritik senyawa baru dapat diprediksi sehingga fokus riset dapat dipersempit, biaya dan waktu dapat lebih efisien. Salah satu pemanfaatan metode analisis ini adalah untuk desain dan pengembangan senyawa obat baru.

Namun dalam pengembangan obat baru secara laboratorium ada beberapa langkah eksperimen yang perlu dilakukan, seperti: desain, sintesis, purifikasi dan identifikasi. Kesemuanya itu harus dilalui sebelum sampai pada tahap uji aktivitas.

Kelemahannya adalah jika semua tahap tersebut telah dikerjakan, namun hasil yang diperoleh (senyawa yang diteliti) ternyata mempunyai aktivitas yang tidak lebih baik. Sehingga waktu, biaya dan tenaga yang telah dikeluarkan dalam serangkaian kerja laboratorium menjadi terbuang. Aplikasi kimia komputasi dalam hal ini dapat berperan penting dalam kimia medisinal terutama dalam hal perancangan obat, prediksi teoritis tentang sifat-sifat kimia dan aktivitas suatu molekul. Rancangan obat diterapkan dalam upaya untuk mendapat-kan obat baru dengan efektivitas yang lebih tinggi berdasarkan penalaran yang rasional dengan semaksimal mungkin mengurangi faktor coba-coba (Sardjoko, 1993). Hal ini dapat membantu mengurangi kegagalan riset-riset eksperimental di laboratorium serta dapat mengefisiensikan tenaga, waktu, biaya riset dan dapat mengurangi hewan uji yang digunakan serta untuk melindungi lingkungan dari toksisitas. Penggunaan komputer sangat berperan guna membantu mempercepat penyelesaian perhitungan-perhitungan numeris untuk menghitung sifat molekul yang kompleks dan hasil perhitungannya berkorelasi secara signifikan dengan eksperimen.

Sebelumnya telah dilakukan penelitian oleh Hemmateenejad (2007) untuk aktivitas *calcium channel blocker*. Dengan menggunakan metode semiempiris AM1. Pemodelan HKSA memerlukan parameter untuk menentukan nilai aktivitas suatu senyawa. Adapun yang digunakan oleh Hemmateenejad adalah momen dipol, muatan lokal dan energi HOMO LUMO. Parameter kimia termasuk molar volume (V) area permukaan molekul (SA), *hydrophobicity* ($\log P$), hidrasi energi (HE) dan molekul *polarizability* (MP). Konstanta substituen klasik termasuk konstan hidrofobik Hansch (π), Hammett elektronik konstanta (ρ) dan Taftbidang efek (FI)

dan resonansi (R) substituen konstanta juga digunakan sebagai deskriptor dalam studi ini.

1.2. Rumusan Masalah

Berdasarkan uraian dalam latar belakang, rumusan masalah pada penelitian ini adalah :

1. Bagaimana model persamaan HKSA senyawa turunan dihidropiridin terhadap aktivitas *calcium channel blocker* menggunakan analisis regresi multilinear?
2. Bagaimana hasil prediksi aktivitas *calcium channel blocker* dari senyawa baru hasil modifikasi turunan dihidropiridin?

1.3. Tujuan Penelitian

Berdasarkan permasalahan yang ada, maka penelitian ini bertujuan untuk:

1. Menentukan model persamaan HKSA senyawa turunan dihidropiridin terhadap aktivitas *calcium channel blocker* menggunakan metode analisis regresi multilinear.
2. Menentukan harga prediksi aktivitas penghambatan 50% (IC₅₀) senyawa baru hasil modifikasi turunan dihidropiridin.

1.4. Manfaat Penelitian

Manfaat yang ingin diperoleh dari penelitian ini adalah:

1. Memberikan informasi tentang model persamaan HKSA senyawa turunan dihidropiridin terhadap aktivitas *calcium channel blocker* menggunakan metode analisis regresi multilinear.

2. Memberikan informasi tentang prediksi aktivitas penghambatan 50% (IC_{50}) senyawa baru hasil modifikasi turunan dihidropiridin.

BAB 2

TINJAUAN PUSTAKA

2.1. Hipertensi

Hipertensi atau tekanan darah tinggi, kadang-kadang disebut juga dengan hipertensi arteri, adalah kondisi medis kronis dengan tekanan darah di arteri meningkat. Peningkatan ini menyebabkan jantung harus bekerja lebih keras dari biasanya untuk mengedarkan darah melalui pembuluh darah. Tekanan darah melibatkan dua pengukuran, sistolik dan diastolik, tergantung apakah otot jantung berkontraksi (*sistole*) atau berelaksasi di antara denyut (*diastole*). Tekanan darah normal pada saat istirahat adalah dalam kisaran sistolik (bacaan atas) 100–140 mmHg dan diastolik (bacaan bawah) 60–90 mmHg. Tekanan darah tinggi terjadi bila terus-menerus berada pada 140/90 mmHg atau lebih.

Hipertensi terbagi menjadi hipertensi primer (esensial) dan hipertensi sekunder. Sekitar 90–95% kasus tergolong "hipertensi primer", yang berarti tekanan darah tinggi tanpa penyebab medis yang jelas (Oscar, 2000: 329). Hampir semua masyarakat kontemporer, tekanan darah meningkat seiring penuaan dan risiko untuk menjadi hipertensi di kemudian hari cukup tinggi.

Hipertensi diakibatkan oleh interaksi gen yang kompleks dan faktor lingkungan. Berbagai gen yang sering ditemukan sedikit berpengaruh pada tekanan darah, sudah diidentifikasi, demikian juga beberapa gen yang jarang yang berpengaruh besar pada tekanan darah tetapi dasar genetik dari hipertensi masih belum sepenuhnya dimengerti. Beberapa faktor lingkungan mempengaruhi tekanan

darah. Faktor gaya hidup yang menurunkan tekanan darah di antaranya mengurangi asupan garam dalam makanan, meningkatkan konsumsi buah-buahan dan produk rendah lemak (pendekatan diet untuk menghentikan hipertensi (diet DASH)). Olahraga, penurunan berat badan dan menurunkan asupan alkohol juga membantu menurunkan tekanan darah (Whelton *et al.*, 2002).

Hipertensi sekunder terjadi akibat suatu penyebab yang diketahui. Penyakit ginjal adalah penyebab sekunder tersering dari hipertensi. Hipertensi juga bisa disebabkan oleh kondisi endokrin, seperti sindrom *cushing*, hipertiroidisme, hipotiroidisme, akromegali, sindrom Conn atau hiperaldosteronisme, hiperparatiroidisme, dan feokromositoma. Penyebab lain dari hipertensi sekunder di antaranya obesitas, henti nafas saat tidur, kehamilan, koarktasio aorta, konsumsi akar manis (*licorice*) yang berlebihan, serta obat resep, obat herbal, dan obat-obat terlarang (O'Brien *et al.*, 2007).

2.2. Calcium Channel Blocker

Calcium channel blockers (CCB), *calcium channel* antagonis atau antagonis kalsium adalah obat yang mengganggu pergerakan kalsium (Ca^{2+}) melalui saluran kalsium. *calcium channel blocker* digunakan sebagai obat antihipertensi, yakni sebagai obat untuk menurunkan tekanan darah pada penderita hipertensi. *calcium channel blocker* sangat efektif terhadap kekakuan pembuluh besar, salah satu penyebab umum dari peningkatan tekanan darah sistolik pada pasien usia lanjut. *calcium channel blocker* juga sering digunakan untuk mengubah denyut jantung, untuk mencegah vasospasme serebral, dan untuk mengurangi nyeri dada yang disebabkan oleh angina pektoris. N-type, L-type, dan T-type tergantung pada

tegangan saluran kalsium yang hadir dalam zona glomerulosa dari adrenal manusia, dan *calcium channel blocker* dapat langsung mempengaruhi biosintesis aldosteron dalam sel adrenocortical, dengan dampak akibat pada pengobatan klinis hipertensi dengan agen ini (Felizola *et al.*, 2014).

Berdasarkan struktur kimianya, *calcium channel blocker* dapat dibedakan atas 5 golongan obat: 1. Dihidropiridin (DHP): Amilodipin, Felodipin, Isradipin, Nicardipin, Nifedipin, Nimodipin, Nisoldipin, Nitrendipin; 2. Difenilalkilamin: Verapamil; 3. Benzotiazepin: Diltiazem; 4. Piperazin: Sinarizin; 5. Bepridil.

Beberapa tipe penyakit kanal kalsium adalah tipe L (tempat ditemukan: Otot,saraf), tipe T (tempat ditemukan: jantung, saraf), tipe N (tempat ditemukan: saraf), tipe P (tempat ditemukan saraf purkinje cerebral).

Cara kerja kanal kalsium tipe L merupakan tipe yang dominan pada otot jantung dan otot polos dan diketahui terdiri dari beberapa reseptor obat. Telah dibuktikan bahwa ikatan nifedipine dan dihidropiridin lainnya terdapat pada satu situs, sedangkan verapamil dan diltiazem diduga mengadakan ikatan pada reseptor yang berkaitan erat, tetapi tidak identik pada regio lainnya. Ikatan obat pada reseptor verapamil atau diltiazem juga mempengaruhi pengikatan dihidropiridin. Region reseptor tersebut bersifat stereoselektif, karena terdapat perbedaan yang mencolok baik dalam afinitas pengikatan stereoisomer maupun potensi farmakologis pada enantiomer verapamil, diltiazem dan kongener nifedipin yang secara optis aktif.

Penyekatan oleh obat tersebut menyerupai penyekatan pada kanal natrium oleh anastetika lokal: obat tersebut beraaksi dari sisi dalam membran dan mengikat

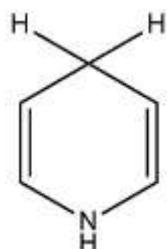
lebih efektif pada kanal di dalam membrane yang terdepolarisasi. Pengikatan obat tersebut diduga mengubah cara kerja kanal, dari terjadinya pembukaan secara konsisten setelah depolarisasi, ke cara lain yang jarang terjadi pembukaan tersebut. Hasilnya adalah penurunan mencolok pada arus kalsium transmembran yang dihubungkan dengan relaksasi otot polos yang berlangsung lama dan di dalam otot jantung dengan penurunan kontraktilitas di seluruh jantung dan penurunan kecepatan pacemaker pada nodus sinus dan penurunan kecepatan konduksi pada nodus atrioventrikuler. Respons otot polos terhadap aliran masuk kalsium melalui kanal kalsium yang dioperasikan reseptor juga menurun pada penggunaan obat tersebut, tetapi tidak begitu mencolok. Penyekatan tersebut berubah secara parsial dengan peningkatan konsentrasi kalsium, meskipun kadar kalsium yang diperlukan tidak dapat diperoleh dengan mudah. Penyekatan juga dapat berubah secara parsial dengan penggunaan obat yang dapat meningkatkan aliran kalsium transmembran, seperti simpatomimetika.

Tipe kanal kalsium lainnya kurang sensitif terhadap penyekatan oleh penyekatan kanal kalsium. Oleh karena itu, jaringan dengan tipe kanal tersebut memainkan peran utama neuron dan sebagian besar kelenjar sekresi-kurang dipengaruhi oleh obat tersebut dibandingkan dengan otot jantung dan otot polos.

2.3. Dihidropiridin (DHP)

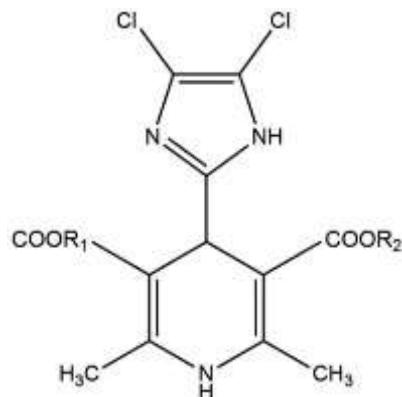
Dihidropiridin atau nama sistematisnya 1,4-dihidropiridin adalah molekul yang didasarkan pada piridin, dan induk dari kelas molekul yang telah semi jenuh dengan dua substituen mengganti satu ikatan rangkap. Mereka sangat terkenal di farmakologi sebagai *L-type calcium channel blocker*, digunakan dalam pengobatan

hipertensi. Dibandingkan dengan beberapa *calcium channel blocker* L-type lain (misalnya molekul dari kelas *phenylalkylamine* seperti Verapamil) yang memiliki tindakan signifikan pada jantung, pembuluh darah yang relatif selektif dalam mekanisme aksi mereka ketika menurunkan tekanan darah.



Gambar 2.1. Struktur dihidropiridin

Data biologis yang digunakan dalam penelitian ini adalah aktivitas antagonis saluran kalsium di usus penyerapan hamster (IC_{50}) dari serangkaian C-3 dan C-5 digantikan turunan 4-(4,5-dikloroimidazolil)-1,4-dihidropiridin. Sintesis dan penentuan aktivitas senyawa ini telah dilaporkan oleh Amini *et al* (2002). Studi mereka menunjukkan bahwa gugus 4-(4,5-dikloroimidazolil) adalah bioisoester dari gugus nitrofenil dan 2,3-diklorofenil. Tabel 2.1 adalah daftar struktur utama dan aktivitas antagonis saluran kalsium senyawa asimetris. Data biologis dikonversi ke skala logaritmik (pIC_{50}) dan kemudian digunakan untuk analisis HKSA selanjutnya sebagai variabel terikat.



Gambar 2.2. Struktur turunan dihidropiridin asimetris

Tabel 2.1. Aktivitas percobaan dan korespondensi senyawa turunan dihidropiridin asimetris

No	R ₁	R ₂	(pIC ₅₀) _{EXP}
1	CH ₃	CH ₂ CH ₃	7,23
2	CH ₃	CH(CH ₃) ₂	7,83
3	CH ₃	C(CH ₃) ₃	6,63
4	CH ₃	C ₆ H ₁₁ (cyclohexyl)	8,79
5	CH ₃	CH ₂ C ₆ H ₅	9,04
6	CH ₃	CH ₂ CH ₂ C ₆ H ₅	8,41
7	CH ₂ CH ₃	CH(CH ₃) ₂	8,73
8	CH ₂ CH ₃	C(CH ₃) ₃	7,43
9	CH ₂ CH ₃	C ₆ H ₁₁ (cyclohexyl)	9,31
10	CH ₂ CH ₃	CH ₂ C ₆ H ₅	8,89
11	CH ₂ CH ₃	CH ₂ CH ₂ C ₆ H ₅	8,39
12	CH(CH ₃) ₂	C ₆ H ₁₁ (cyclohexyl)	7,38
13	CH(CH ₃) ₂	CH ₂ C ₆ H ₅	9,14
14	CH(CH ₃) ₂	CH ₂ CH ₂ C ₆ H ₅	8,81

Sumber: Hemmateenejad *et al.*, 2007

2.4. 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) 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.

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 (Pranowo, 2000).

2.5. Analisis Statistik dalam HKSA

Pada 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). Metode statistik yang banyak digunakan dalam kajian HKSA adalah berupa teknik-teknik untuk pengolahan statistik sehingga diperoleh hasil statistika yang akurat.

2.5.1. Analisis Regresi Multilinier

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

Parameter statistik yang dapat digunakan sebagai faktor uji adalah berupa nilai R, R^2 , F, dan SE. Koefisien korelasi, yang dinyatakan dengan r, merupakan ukuran kekuatan hubungan antara variabel tergantung (aktivitas antagonis saluran kalsium) dengan variabel bebas (deskriptor). 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. F merupakan ukuran perbedaan tingkat signifikansi dari model regresi.

Signifikansi dari persamaan regresi terjadi apabila nilai F_{hitung} lebih besar dari pada F_{kritis} untuk batas konfidensi yang ditentukan. Untuk analisis HKSA, tingkat konfidensi yang biasa digunakan adalah 95% atau 99%.

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), dengan Y_i adalah nilai Y yang diteliti untuk nilai-nilai X_i dan yang diberikan dalam data (Fatimah, 2008). *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).

2.6. Deskriptor 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:

1. Deskriptor Sterik: indeks Platt, indeks Randic, indeks Balaban, indeks Harary, indeks Hyper-Wiener, indeks Szaged dan indeks Wiener.
2. Deskriptor Hidrofobik: *molecular surface area* (MSA) atau bisa disebut *van der waals surface area* (VSA), momen dipol, *polarizability*, *refractivity*, wiener polarity dan koefisien partisi oktanol/air (Log P).
3. Deskriptor Elektronik: energi HOMO, energi LUMO, celah HOMO-LUMO (Gap).

Penentuan deskriptor merupakan langkah pertama yang sangat penting. Deskriptor memberikan kontribusi yang positif dalam HKSA dengan parameter-

parameter tersebut. Apabila terdapat hubungan yang kuat antara deskriptor dan aktivitas, maka aktivitas akan dapat diprediksi, tetapi jika hubungannya lemah, maka tidak bisa diprediksi. Oleh karena itu deskriptor yang dipilih haruslah mempunyai hubungan yang erat terhadap aktivitas dari senyawa yang diteliti dan nilai parameter-parameter tersebut.

2.7. Density Functional Theory (DFT)

Metode kimia komputasi dapat dibedakan menjadi 2 bagian besar yaitu mekanika molekuler dan struktur elektronik yang terdiri dari ab initio dan semiempiris. Metode yang sekarang berkembang pesat adalah teori kerapatan fungsional (*density functional theory*, DFT). Banyaknya aspek dinamika dan struktur molekul dapat dimodelkan menggunakan metode klasik dalam bentuk dinamika dan mekanika molekul. Medan gaya (*force field*) didasarkan pada hasil empiris yang merupakan nilai dari rata-rata dari sejumlah besar data dalam besar data parameter molekul. Pada penelitian ini menggunakan metode DFT karena metode untuk pemodelan senyawa turunan dihidropiridin ini umumnya menggunakan metode semiempiris seperti AM1 seperti yang dilakukan Hemmateenejad *et al.* (2007). Namun reabilitas metode semiempiris agak rendah dibanding dengan menggunakan ab initio atau DFT. Model HKSA yang dihasilkan dari persamaan semi empiris menghasilkan kajian statistik yang bagus dengan menggunakan metode semiempiris pada penelitian Hemmateenejad *et al.* (2007), dan Tahir (2008). Dengan pertimbangan reabilitas pendekatan kimia komputasi dalam memprediksi sifat suatu obat, baru-baru ini juga mulai marak menggunakan metode DFT, seperti penelitian Stefan Dochev *et al.*, (2013) HKSA untuk turunan

dihidropiridin yang menggunakan yang telah menggunaaka metode DFT dengan kajian statitika dengan yang bagus.

Pada perhitungan menggunakan DFT menggunakan basis set yang merupakan 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. Dalam kimia komputasi, perhitungan kimia kuantum umumnya dilakukan dalam satu set perhitungan yang terdiri atas fungsi gelombang yang ada dan disusun secara linier. Saat ini terdapat sekitar ratusan komposisi atau kombinasi linier orbital Gaussian. 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 6-31G merupakan basis set yang cukup besar dan umum digunakan untuk senyawa organik. Sehingga yang pada penelitian ini menggunakan metode 6-31G untuk mendapatkan reabilitas yang tinggi .

2.8. Pemodelan Molekul

Pemodelan molekul merupakan suatu cara untuk menggambarkan atau menampilkan perilaku molekul atau sistem molekul sebagai pendekatan dengan keadaan yang sebenarnya. Pemodelan molekul dilakukan dengan menggunakan metode-metode mekanika kuantum, mekanika molekuler, minimasi, simulasi,

analisis konformasi serta beberapa metode kimia komputasi lain yang memprediksi perilaku molekul (Permana, 2009). Model yang umum dikenal ada dua, yaitu :

1. Model molekul dalam bentuk tongkat (*stick*) yang dibuat oleh Dreiding, dan
2. Model molekul berupa pengisian ruang (*space filling*) yang dibuat oleh Corey, Pauling dan Koltum. Model ini sering disebut sebagai model CPK.

2.9. Optimasi Geometri

Inti prosedur optimasi struktur molekul adalah membandingkan energy struktur yang didapatkan dengan struktur sebelumnya. Energi struktur yang lebih rendah dari sebelumnya menunjukkan kestabilan struktur dibandingkan sebelumnya. Prosedur ini diulang sampai mendapatkan energi struktur yang tidak jauh berbeda dengan sebelumnya.

Penentuan struktur yang stabil dari molekul merupakan langkah perhitungan yang paling umum terjadi pada pemodelan molekul. Energi relatif dari struktur teroptimasi yang berbeda akan menentukan kestabilan konformasi, keseimbangan isomerisasi, panas reaksi, produk reaksi, dan berbagai aspek kimia lainnya. Ada 4 jenis metode optimasi yang sering digunakan, yaitu :

1. *Steepest descent*, dikhususkan untuk perhitungan yang cepat agar menghilangkan sterik yang berlebihan dan masalah tolakan pada struktur awal.
2. *Conjugate gradient Fletcher-Reeves* untuk mencapai konvergensi yang efisien.
3. *Conjugate gradient Polak-Ribiere* hampir sama dengan metode *Fletcher-Reeves*, yaitu untuk mencapai konvergensi yang efisien.

4. *Black-diagonal newton-rephson* (hanya untuk MM^+), yang memindahkan satu atom pada suatu waktu dengan menggunakan informasi turunan keduanya (Pranowo, 2000).

2.10. 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 (ataukomponen 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 dilakukan di Laboratorium Kimia FMIPA UNNES Gedung D8 Ruang 355b.

3.2. Variabel Penelitian

3.2.1. Variabel Bebas

Variabel bebas adalah variabel yang harganya divariasi. Variabel bebas yang dipelajari dalam penelitian ini adalah jenis deskriptor dan senyawa model turunan dihidropiridin.

3.2.2. Variabel Terikat

Variabel terikat adalah variabel yang nilainya tergantung dari variable bebas. Variabel terikat yang dipelajari dalam penelitian ini adalah hasil eksperimen aktivitas *calcium channel blocker* dari senyawa turunan dihidropiridin.

3.3. Alat dan Bahan

3.3.1. Perangkat Keras

Perangkat keras yang digunakan dalam penelitian ini adalah seperangkat komputer dengan spesifikasi sebagai berikut

- (1) *Prosesor* tipe Intel Quad Core,
- (2) *Harddisk* 250 GB,
- (3) *Random Acces Memory* (RAM) 4 GB, dan
- (4) *Monitor* Hp LE1851w.

3.3.2. Perangkat Lunak

Perangkat lunak yang digunakan dalam penelitian ini adalah sebagai berikut

- (1) *Hyperchem 8.0.8* sebagai software untuk pemodelan molekul.
- (2) *GaussView 3.07* sebagai software pemodelan molekul, pengonversi format *.pdb ke *.gjf serta membuat file input untuk Gaussian-09W.
- (3) *Gaussian 09W* sebagai software untuk optimasi geometri struktur molekul serta perhitungan nilai deskriptor elektronik.
- (4) *MarvinBeans 15.2.0* yang dikeluarkan oleh *ChemAxon* digunakan menghitung nilai deskriptor sterik dan hidrofobik.
- (5) Sistem operasi yang digunakan adalah *Windows Vista® Business OA (EM)-(SEA)* untuk pemodelan dan untuk perhitungannya.
- (6) *IBM SPSS Statistics 21* for *Windows* sebagai software untuk menganalisis korelasi dan menghitung regresi linear.

3.3.3. Bahan Penelitian

Bahan yang digunakan dalam penelitian ini adalah aktivitas *calcium channel blocker* (dalam pIC₅₀) senyawa turunan dihidropiridin disajikan pada Tabel 2.1. halaman 11. Adapun senyawa prediksi dari turunan dihidropiridin yang akan dieksplorasi, dipertimbahkan gugus pada atom mana yang berpengaruh dengan nilai IC₅₀-nya. Yaitu dengan menggunakan muatan bersih pada atom-atomnya. Pada Tabel 2.1 diketahui gugus yang memiliki pIC₅₀ yang bagus adalah gugus R₁ dengan gugus fenil dan sikloheksil. Gugus C₁ pada atom C₁₀ dan C₁₁ divariasi dengan diganti dengan halogen lainnya (F dan Br). Untuk mengetahui pengaruh keelektronegatifan terhadap aktivitas *calcium channel blocker*. Dan pada gugus R₂

divariasi dengan gugus etil, metil, isopropyl, hidroksimetil, hidroksietil dan hidroksipropan-2-il. Untuk mengetahui pengaruh gugus-gugus tersebut.

3.4. Prosedur Penelitian

3.4.1. Menggambar Struktur Kimia Senyawa Turunan Dihidropiridin

Struktur kimia senyawa turunan dihidropiridin yang digunakan dalam penelitian ini digambar menggunakan *software HyperChem 8.0.8*. Diawali dengan menggambar struktur dasar yang tersaji dalam Gambar 2.2, kemudian disubstitusi pada R seperti pada Tabel 2.1. File disimpan dalam format protein data bank (*.pdb) agar mampu dibaca oleh *software GaussView 3.07* yang digunakan dalam tahap optimasi geometri struktur.

3.4.2. Optimasi Geometri Struktur

Struktur sampel dioptimasi menggunakan software Gaussian 09W dengan metode *Density Functional Theory* (DFT) B3LYP pada basis sets 6-31G. Kemudian deskriptor dihitung pada struktur geometri yang telah optimal menggunakan metode yang sama pada basis sets 6-31G (Markovic *et al.* 2013).

Proses optimasi ini tidak secara langsung menggunakan software Gaussian 09W, namun terlebih dahulu dipreparasi menggunakan *software GaussView 3.07*. Tahap ini dilakukan untuk mempermudah penulisan *Gaussian input file* (*.gjf). Langkah awal yaitu membuka struktur sampel dalam format *protein data bank* (*.pdb) dengan cara klik menu *File*, kemudian pilih menu *Open*. Seleksi file *protein data bank* (*.pdb) yang akan dioptimasi, kemudian klik tombol *Open*. 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 6-31G, *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*.

Setelah dibuat *Gaussian input file* (*.gjf), maka dapat dilakukan perhitungan menggunakan *software Gaussian 09W*. 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 09W*, 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 *directory* yang diinginkan, kemudian klik tombol *Save*.

3.4.3. Pengambilan Nilai Deskriptor

Nilai deskriptor dihitung menggunakan *software MarvinBeans 15.2.0* dan *Gaussian 09W*. Deskriptor sterik dan hidrofobik dihitung menggunakan *software MarvinBeans 15.2.0*. Langkah awal yaitu membuka file *Gaussian output file* (*.out) hasil optimasi menggunakan *software MarvinBeans 15.2.0*. 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 09W*. 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 orbitals* dan menambahkan perintah *Pop=Reg* untuk menampilkan eigenvalues.

3.5. Analisis Data

3.5.1. Analisis Regresi Multilinear

Untuk mendapatkan persamaan HKSA, terlebih dahulu data disajikan data Tabel yang meliputi masing-masing aktivitas *calcium channel blocker* (dalam pIC₅₀) sebagai variabel tak bebas dan nilai HKSA properties sebagai variabel bebas. Korelasi parameter dihitung dengan aktivitas senyawa berdasarkan analisis regresi multilinear menggunakan program SPSS for Windows metode backward pada 14 data yang telah dipisahkan (data *fitting*). Hasil perhitungan digunakan untuk menunjukkan urutan variabel bebas penting yang berfungsi sebagai deskriptor. Variasi dari beberapa variabel bebas membentuk beberapa alternatif model persamaan. Untuk setiap model persamaan alternatif dapat dilakukan perhitungan terhadap beberapa parameter statistik seperti R, R², SE dan F. Selain parameter statistik tersebut, dari hasil perhitungan juga diperoleh nilai koefisien setiap variabel bebas yang terlibat dalam model persamaan. Nilai koefisien yang diperoleh digunakan untuk menghitung aktivitas teoritis.

Data aktivitas teoritis dibandingkan dengan aktivitas eksperimen senyawa. Untuk mengetahui kualitas dan kemampuan memprediksi dari setiap model

persamaan, maka dihitung harga PRESS-nya sehingga dapat dipilih model persamaan terbaiknya. Untuk data fitting dilakukan perhitungan PRESS terhadap model tiap model persamaan sehingga didapatkan nilai $\text{PRESS}_{\text{internal}}$, dan untuk data uji diperoleh $\text{PRESS}_{\text{eksternal}}$ (Tahir *et al*, 2004).

BAB 5

SIMPULAN DAN SARAN

5.1. Simpulan

Berdasarkan kajian HKSA senyawa turunan deoksibenzoin menggunakan deskriptor sterik, hidrofobik dan elektronik dapat disimpulkan bahwa:

1. Didapatkan persamaan HKSA terpilih yang dibangun berdasarkan deskriptor sterik, hidrofobik dan elektronik dengan rumus:

$$\begin{aligned} pIC_{50} = & 42,881 + (-219,745) \text{ Energi HOMO} + (-896,757) \text{ Energi LUMO} + (-4,521) \text{ Momen Dipol} \\ & + (8,151) \text{ Log P} + (-0,436) \text{ Indeks Platt} + (-2,314) \text{ Indeks Balaban} \\ & + (0,356) \text{ Indeks Harary} + (-0,005) \text{ Indeks Hyper Wiener} + (0,013) \text{ Indeks Szeged} \\ & + (-6,302) \text{ Wiener Polarity} + (1,901) \text{ Refractivity} \\ n = & 14; R = 0,995; R^2 = 0,990387; SE = 0,20893; PRESS = 0,087304 \end{aligned}$$

2. Dari 12 senyawa baru yang telah dilakukan perhitungan dengan persamaan HKSA, terdapat 7 senyawa (senyawa 1, 2, 3, 4, 5, 6, dan 11) yang nilai pIC_{50} nya lebih tinggi dari senyawa yang sudah dilakukan eksperimen. Adapun senyawa 11 adalah yang memiliki pIC_{50} terbaik dari 7 senyawa baru, yaitu 3- etil 5- fenil 4-(4,5-dibromo-1H-imidazol-2-il)-2,6-dimetil-1,4- dihidropiridin - 3,5- dikarboksilat dengan nilai pIC_{50} prediksi sebesar 27,116. Nilai pIC_{50} untuk senyawa ke 11 pada senyawa prediksi meningkat hampir 3 kali lipat, dibandingkan senyawa ke 9 dari senyawa yang sudah dilakukan eksperimen. Yaitu dengan perbandingan pIC_{50} -nya $7,66 \times 10^{-28}$: 9,31.

5. 2. Saran

Berdasarkan keunggulan dan hambatan dalam kajian HKSA senyawa turunan dihidropiridin menggunakan deskriptor sterik, hidrofobik dan elektronik dapat diberikan saran sebagai berikut:

1. Berdasarkan hasil prediksi, disarankan untuk mensintesis senyawa 3-etil 5-fenil 4-(4,5-dibromo-1H-imidazol-2-il)-2,6-dimetil-1,4- dihidropiridin -3,5-dikarboksilat secara eksperimental.
2. Perlu adanya kajian HKSA menggunakan basis set yang lebih besar dan/atau analisis statistika lain sehingga diperoleh hasil prediksi yang lebih akurat.
3. Perlu adanya kajian eksperimental untuk membuktikan potensi aktivitas *calcium channel blocker* dari senyawa 3-etil 5- fenil 4-(4,5-dibromo-1H-imidazol-2-il)-2,6-dimetil-1,4- dihidropiridin -3,5- dikarboksilat

DAFTAR PUSTAKA

- Amini, M., A.A. Golabchifar, A.R. Dehpour, M. Pirali, A. Shafiee & Arznelm.
2.Synthesis and Calcium Channel Antagonist Activity of New 1,4-Dihydropyridine Derivatives Containing Dichloroimidazolyl Substituents .
Forsch./Drug Res. 52 (2002) 21.
- Armunanto, R. & S. Sudiono. 2004. Relation Of Electronic Structures With Their Antimalarial Activities On Artemisinin Derivatives. Indonesian Journal of Chemistry, 2004, 4 (3),212-217
- Carretero, O.A. & S. Oparil. (January 2000)."Essential hypertension. Part I: Definition and etiology".Circulation 101 (3): 329–35.
- Darnindro, N & A. Muthalib. 2008. Tatalaksana Hipertensi pada Pasien dengan Sindrom Nefrotik. Depok: Fakultas Kedokteran Universitas Indonesia.
- Hemmategenejad, B., R. Miri, N. Edraki, M. Khoshneviszadeh & A. Shafiee. 2007. Molecular Modeling and QSAR Analysis of Some 4,5-Dichloroimidazolyl-1,4-DHP Based Calcium Channel Blockers. Journal Of The Iranian Chemical Society Vol. 4, No. 2, June 2007: 182-193.
- Fatimah, N.F. 2008. Aplikasi Metode MLR Dan PCR Pada Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur Dan Aktivitas Antitoksoplasma Senyawa Turunan Kuinolon Berdasarkan Deskriptor Teoritik. Skripsi. Yogyakarta : UGM.
- Felizola, SJA., T. Maekawa, Y. Nakamura, F. Satoh, Y. Ono, K. Kikuchi, S. Aritomi, K. Ikeda, M. Yoshimura, K. Tojo, H. Sasano. 2014. "Voltage-gated calcium channels in the human adrenal and primary aldosteronism.". J Steroid Biochem Mol Biol. 144 (part B): 410–6.
- Kubinyi, H., 1993, QSAR : Hansch Analysis and Related Approach, VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim
- O'Brien, E., D.G. Beevers & Y.H.L. Gregory. 2007. ABC of hypertension. London: BMJ Books.
- Permana, E.H. 2009. Eritromisin F dan $\Delta^{6,7}$ Anhidroeritromisin F Suatu Kajian Menggunakan Semiempiris Austin Model 1 (AM1). Semarang : Skripsi UNNES.
- Pranowo, H.D. 2000. Kimia Komputasi. Yogyakarta: Pusat Kimia komputasi Indonesia-Austria Universitas Gadjah Mada.

- Rifai, A.A., Kasmui, dan Subiyanto. 2014. Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur Aktivitas Antioksidan Senyawa Analog Deoksibenzoin dengan Regresi Multilinear. *Skripsi*. Semarang: Universitas Negeri Semarang.
- Rozaq, A. 2008. Penggunaan Deskriptor Sterik Untuk Analisis HKSA Antimalaria Senyawa Analog 1,10-Fenantrolin Berdasarkan Analisis MLR dan PCR. *Skripsi*. Yogyakarta : UGM.
- Sardjoko. 1993. Rancangan Obat. Yogyakarta: UGM Press.
- Tahir, I. 2000. Analisis Hubungan Kuantitatif Struktur dan Karakter Aroma Senyawa Nitrobenzena, Makalah Seminar Jurnal Nusantara Kimia - UNNES, Semarang 17 Oktober 2000.
- Tahir, I., B. Setiaji & M.U. Yahya. 2001. Berkala Ilmiah MIPA, 1, XI, 1-29.
- Whelton. PK, J. He, LJ. Appel, J.A. Cutler, S. Havas, & T.A. Kotchen. (2002). "Primary prevention of hypertension: Clinical and public health advisory from The National High Blood Pressure Education Program". *JAMA* 288 (15): 1882-8.
- 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. ISBNs: 0-471-33368-9 (Hardback); 0-471-22065-5 (Electronic).

LAMPIRAN

Lampiran 1. Gaussian Output File Hasil Optimasi Metode DFT 6-31G

Entering Link 1 = C:\G09W\l1.exe PID= 5308.

Copyright (c) 1988,1990,1992,1993,1995,1998,2003,2009, Gaussian, Inc.
All Rights Reserved.

This is part of the Gaussian(R) 09 program. It is based on the Gaussian(R) 03 system (copyright 2003, Gaussian, Inc.), the Gaussian(R) 98 system (copyright 1998, Gaussian, Inc.), the Gaussian(R) 94 system (copyright 1995, Gaussian, Inc.), the Gaussian 92(TM) system (copyright 1992, Gaussian, Inc.), the Gaussian 90(TM) system (copyright 1990, Gaussian, Inc.), the Gaussian 88(TM) system (copyright 1988, Gaussian, Inc.), the Gaussian 86(TM) system (copyright 1986, Carnegie Mellon University), and the Gaussian 82(TM) system (copyright 1983, Carnegie Mellon University). Gaussian is a federally registered trademark of Gaussian, Inc.

This software contains proprietary and confidential information, including trade secrets, belonging to Gaussian, Inc.

This software is provided under written license and may be used, copied, transmitted, or stored only in accord with that written license.

The following legend is applicable only to US Government contracts under FAR:

RESTRICTED RIGHTS LEGEND

Use, reproduction and disclosure by the US Government is subject to restrictions as set forth in subparagraphs (a) and (c) of the Commercial Computer Software - Restricted Rights clause in FAR 52.227-19.

Gaussian, Inc.
340 Quinnipiac St., Bldg. 40, Wallingford CT 06492

Warning -- This program may not be used in any manner that competes with the business of Gaussian, Inc. or will provide assistance to any competitor of Gaussian, Inc. The licensee of this program is prohibited from giving any competitor of Gaussian, Inc. access to this program. By using this program, the user acknowledges that Gaussian, Inc. is engaged in the business of creating and licensing software in the field of computational chemistry and represents and warrants to the licensee that it is not a competitor of Gaussian, Inc. and that it will not use this program in any manner prohibited above.

Cite this work as: Gaussian
09, Revision A.02,
M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria,
M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A.
Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H. P. Hratchian, A. F.
Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada,
M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y.
Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J. A. Montgomery, Jr.,
J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers,
K. N. Kudin, V. N. Staroverov, R. Kobayashi, J. Normand,
K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi,

M. Cossi, N. Rega, J. M. Millam, M. Kleine, J. E. Knox, J. B. Cross,
 V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann,
 O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski,
 R. L. Martin, K. Morokuma, V. G. Zakrzewski, G. A. Voth,
 P. Salvador, J. J. Dannenberg, S. Dapprich, A. D. Daniels,
 O. Farkas, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, J. Cioslowski,
 and D. J. Fox, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.

```
*****
Gaussian 09: IA32W-G09RevA.02 11-Jun-2009
          06-Apr-2015
*****
%chk=D:/Moh Syaifudin/Skripsi/Optimasi DFT/opt dft 631g dhp 1.chk
%mem=6MW
%nproc=1
Will use up to    1 processors via shared memory.
-----
# opt ub3lyp/6-31g 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=1,6=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=1,6=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;
-----
opt dft 631g dhp 1
-----
Symbolic Z-matrix:
Charge =  0 Multiplicity = 1
C
C      1     B1
C      1     B2      2     A1
C      3     B3      1     A2      2     D1      0
C      4     B4      3     A3      1     D2      0
N      5     B5      4     A4      3     D3      0
C      2     B6      1     A5      3     D4      0
C      5     B7      4     A6      3     D5      0
C      4     B8      3     A7      1     D6      0
C      1     B9      2     A8      6     D7      0
O      9     B10     4     A9      3     D8      0
O     10     B11     1     A10     2     D9      0
O     10     B12     1     A11     2     D10     0
O     9     B13     4     A12     3     D11     0
C     3     B14     1     A13     2     D12     0
N     15     B15     3     A14     1     D13     0
N     15     B16     3     A15     1     D14     0
C     17     B17     15    A16     3     D15     0
C     16     B18     15    A17     3     D16     0
Cl    18     B19     17    A18     15    D17     0
Cl    19     B20     16    A19     15    D18     0
H     3     B21     1     A20     2     D19     0
H     6     B22     5     A21     4     D20     0
H     7     B23     2     A22     1     D21     0
H     7     B24     2     A23     1     D22     0
```

H	7	B25	2	A24	1	D23	0
H	8	B26	5	A25	4	D24	0
H	8	B27	5	A26	4	D25	0
H	8	B28	5	A27	4	D26	0
C	13	B29	10	A28	1	D27	0
C	14	B30	9	A29	4	D28	0
H	16	B31	15	A30	3	D29	0
C	31	B32	14	A31	9	D30	0
H	30	B33	13	A32	10	D31	0
H	30	B34	13	A33	10	D32	0
H	30	B35	13	A34	10	D33	0
H	31	B36	14	A35	9	D34	0
H	31	B37	14	A36	9	D35	0
H	33	B38	31	A37	14	D36	0
H	33	B39	31	A38	14	D37	0
H	33	B40	31	A39	14	D38	0
Variables:							
B1			1.37204				
B2			1.49516				
B3			1.50358				
B4			1.37319				
B5			1.38803				
B6			1.49357				
B7			1.49524				
B8			1.45781				
B9			1.4599				
B10			1.24102				
B11			1.23812				
B12			1.37301				
B13			1.36999				
B14			1.51125				
B15			1.40244				
B16			1.36078				
B17			1.39537				
B18			1.39544				
B19			1.67405				
B20			1.66985				
B21			1.13271				
B22			0.99435				
B23			1.12089				
B24			1.11657				
B25			1.12135				
B26			1.11983				
B27			1.11731				
B28			1.12055				
B29			1.42823				
B30			1.44099				
B31			0.99251				
B32			1.50911				
B33			1.11782				
B34			1.11647				
B35			1.11643				
B36			1.12117				
B37			1.12113				
B38			1.11624				
B39			1.11614				
B40			1.11616				
A1			121.01588				
A2			111.68928				
A3			120.79391				
A4			120.18602				
A5			122.11042				
A6			122.64166				
A7			114.44244				
A8			120.76239				
A9			126.94334				
A10			128.70134				
A11			114.22411				

A12	116.36246
A13	110.32365
A14	121.63538
A15	126.82238
A16	105.4634
A17	106.77023
A18	123.88765
A19	124.12154
A20	108.98286
A21	119.39365
A22	109.22094
A23	113.27605
A24	108.79639
A25	109.21235
A26	113.15943
A27	109.04357
A28	116.30337
A29	116.28436
A30	125.77992
A31	106.18164
A32	103.49413
A33	109.94597
A34	110.02983
A35	108.67395
A36	108.6455
A37	108.93042
A38	110.64947
A39	110.63997
D1	22.64901
D2	-22.24786
D3	7.68476
D4	173.02667
D5	-173.44992
D6	158.46349
D7	173.52883
D8	5.65571
D9	4.61005
D10	-173.74333
D11	-173.32488
D12	-98.6691
D13	-156.40616
D14	23.88465
D15	179.52446
D16	-179.23375
D17	179.76575
D18	179.74557
D19	143.15916
D20	-173.19911
D21	59.51357
D22	-178.73524
D23	-57.33392
D24	49.89215
D25	170.98135
D26	-67.77827
D27	-178.61342
D28	178.45471
D29	-4.30638
D30	-179.46893
D31	178.61669
D32	-62.08443
D33	59.28914
D34	-58.7621
D35	59.84495
D36	179.69164
D37	-60.38043
D38	59.75711

Input orientation:

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	6	0	-0.027031	-0.025197	-0.003638
2	6	0	-0.015739	-0.017647	1.358738
3	6	0	1.275659	-0.007999	-0.788296
4	6	0	2.439024	-0.574240	0.040617
5	6	0	2.387628	-0.549293	1.409681
6	7	0	1.202570	-0.174337	2.020979
7	6	0	-1.213148	0.110221	2.262937
8	6	0	3.484346	-0.926975	2.373665
9	6	0	3.567910	-1.045683	-0.745544
10	6	0	-1.288064	0.041469	-0.737132
11	8	0	3.664027	-0.884465	-1.988235
12	8	0	-2.435570	0.093329	-0.253340
13	8	0	-1.087534	0.023583	-2.106100
14	8	0	4.552703	-1.716072	-0.054052
15	6	0	1.578182	1.390241	-1.284075
16	7	0	2.494955	1.635651	-2.282811
17	7	0	1.033384	2.532120	-0.847894
18	6	0	1.620432	3.530661	-1.592549
19	6	0	2.527074	3.004803	-2.480475
20	17	0	1.205695	5.252464	-1.370775
21	17	0	3.590932	3.769843	-3.681923
22	1	0	1.158687	-0.635338	-1.677708
23	1	0	1.194625	-0.104627	3.027014
24	1	0	-1.883090	-0.748234	2.157325
25	1	0	-0.902791	0.187775	3.310963
26	1	0	-1.806590	0.987783	1.998688
27	1	0	4.448769	-0.534575	2.052887
28	1	0	3.262419	-0.543727	3.375812
29	1	0	3.593407	-2.014656	2.435408
30	6	0	-2.288245	0.125094	-2.941016
31	6	0	5.712451	-2.199340	-0.843013
32	1	0	3.071397	0.912581	-2.702667
33	6	0	6.659473	-2.868390	0.135337
34	1	0	-1.918407	0.091603	-3.964146
35	1	0	-2.964303	-0.708357	-2.737327
36	1	0	-2.806234	1.065342	-2.740584
37	1	0	5.340307	-2.887232	-1.607267
38	1	0	6.164370	-1.342260	-1.350372
39	1	0	7.533410	-3.255373	-0.400514
40	1	0	7.008228	-2.159021	0.892286
41	1	0	6.170039	-3.704857	0.643635

Distance matrix (angstroms):					
	1	2	3	4	5
1 C	0.000000				
2 C	1.362444	0.000000			
3 C	1.520850	2.505506	0.000000		
4 C	2.526822	2.841320	1.536601	0.000000	
5 C	2.846528	2.461994	2.522018	1.370255	0.000000
6 N	2.373444	1.395490	2.815144	2.368664	1.385149
7 C	2.561752	1.505893	3.939309	4.329613	3.758801
8 C	4.335266	3.756001	3.964948	2.580742	1.508210
9 C	3.809910	4.281052	2.516551	1.454198	2.506883
10 C	1.460364	2.452545	2.564710	3.856835	4.297501
11 O	4.277952	5.049186	2.812889	2.390212	3.645184
12 O	2.424348	2.909759	3.750956	4.928867	5.142163
13 O	2.355291	3.627058	2.705973	4.171618	4.976510
14 O	4.882168	5.074573	3.767711	2.404243	2.862069
15 C	2.493931	3.392226	1.514065	2.520922	3.416623
16 N	3.783313	4.722061	2.534135	3.207034	4.291852
17 N	2.894326	3.531459	2.552343	3.523457	4.052867
18 C	4.228817	4.896697	3.645244	4.493054	5.123280
19 C	4.673229	5.508236	3.675117	4.378722	5.271087
20 Cl	5.589489	6.059391	5.293075	6.120753	6.541276

21	C1	6.404823	7.263706	5.292037	5.835688	6.784343
22	H	2.140259	3.313733	1.094664	2.143743	3.324104
23	H	3.268578	2.062933	3.817394	3.269194	2.058336
24	H	2.938962	2.158355	4.382046	4.815744	4.340228
25	H	3.434952	2.154122	4.646278	4.737463	3.871046
26	H	2.863961	2.151179	4.273069	4.929421	4.505662
27	H	4.951923	4.547624	4.291646	2.844271	2.159221
28	H	4.744475	3.884800	4.644784	3.435467	2.151968
29	H	4.797339	4.263003	4.448696	3.023644	2.157153
30	C	3.709969	4.865444	4.165733	5.632608	6.422394
31	C	6.194602	6.513037	4.948747	3.759931	4.341859
32	H	4.214788	5.185629	2.781539	3.183731	4.417694
33	C	7.267213	7.360835	6.166067	4.804611	5.025020
34	H	4.390509	5.653776	4.505331	5.955559	6.915974
35	H	4.070298	5.094002	4.718739	6.077080	6.772454
36	H	4.050200	5.075842	4.650305	6.159224	6.841633
37	H	6.290563	6.761578	5.047976	4.059914	4.825583
38	H	6.471614	6.876600	5.098596	4.050051	4.744521
39	H	8.231149	8.400446	7.060826	5.773720	6.089232
40	H	7.406129	7.357933	6.349299	4.910651	4.920251
41	H	7.236196	7.236763	6.298582	4.907633	4.985082
		6	7	8	9	10
6	N	0.000000				
7	C	2.444425	0.000000			
8	C	2.428446	4.811910	0.000000		
9	C	3.742689	5.765898	3.122585	0.000000	
10	C	3.722500	3.001792	5.778480	4.976189	0.000000
11	O	4.757819	6.545892	4.365806	1.256786	5.190936
12	O	4.298865	2.797544	6.556491	6.130367	1.246401
13	O	4.724038	4.371701	6.471008	4.966650	1.383693
14	O	4.231559	6.476791	2.767286	1.377461	6.137598
15	C	3.675918	4.691616	4.730963	3.191044	3.214607
16	N	4.844473	6.061418	5.406358	3.271693	4.386544
17	N	3.947654	4.537595	5.324565	4.385770	3.406572
18	C	5.192225	5.881611	6.251043	5.045098	4.622288
19	C	5.667833	6.698344	6.319645	4.527666	5.135744
20	C1	6.399545	6.745171	7.576183	6.755563	5.811610
21	C1	7.333752	8.474277	7.664307	5.640226	6.810078
22	H	3.727563	4.659414	4.680529	2.615658	2.707275
23	H	1.008479	2.535221	2.519115	4.555245	4.511528
24	H	3.141536	1.094039	5.374766	6.182922	3.058688
25	H	2.495542	1.095763	4.622571	6.161480	4.069020
26	H	3.225843	1.091840	5.639229	6.367970	2.940934
27	H	3.266281	5.702384	1.089490	2.977979	6.405254
28	H	2.492990	4.657987	1.095641	4.163035	6.161628
29	H	3.045427	5.258119	1.094878	3.325359	6.174254
30	C	6.074277	5.313867	7.916785	6.362812	2.421665
31	C	5.713327	7.933783	4.114655	2.437105	7.351166
32	H	5.194876	6.607445	5.415130	2.812767	4.860768
33	C	6.371134	8.681991	4.342884	3.695399	8.508338
34	H	6.755216	6.266921	8.390178	6.461617	3.288383
35	H	6.347399	5.360900	8.231348	6.837455	2.715289
36	H	6.346637	5.337172	8.348429	7.004736	2.714217
37	H	6.135538	8.179913	4.809888	2.697269	7.298611
38	H	6.111425	8.342271	4.606891	2.682421	7.604574
39	H	7.445532	9.742868	5.432534	4.552688	9.423422
40	H	6.238476	8.638239	4.016238	3.969609	8.736453
41	H	6.247991	8.466900	4.233507	3.971410	8.459596
		11	12	13	14	15
11	O	0.000000				
12	O	6.416466	0.000000			
13	O	4.838985	2.292332	0.000000		
14	O	2.285253	7.221469	6.248966	0.000000	
15	C	3.165577	4.342189	3.106368	4.473245	0.000000
16	N	2.793652	5.550458	3.932457	4.520591	1.377742
17	N	4.460237	4.281920	3.517689	5.573413	1.338262
18	C	4.881207	5.482689	4.460539	6.204305	2.162946
19	C	4.081834	6.169655	4.700342	5.681317	2.222291

20	C1	6.639770	6.412811	5.756804	7.841985	3.881112
21	C1	4.953434	7.847972	6.197235	6.646933	3.932346
22	H	2.536773	3.934268	2.379750	3.914536	2.105681
23	H	5.644361	4.896757	5.619035	4.833881	4.579000
24	H	6.926379	2.612426	4.405157	6.873597	5.328856
25	H	7.077219	3.881056	5.422699	6.686582	5.358687
26	H	7.023426	2.503457	4.277384	7.208688	4.732355
27	H	4.131454	7.287460	6.946896	2.417836	4.804217
28	H	5.389842	6.785549	7.021061	3.847492	5.318970
29	H	4.566283	6.929757	6.833076	2.684551	5.430379
30	C	6.112000	2.691898	1.465979	7.650035	4.392643
31	C	2.690069	8.484946	7.264749	1.483584	5.492887
32	H	2.022621	6.082522	4.294522	4.014878	2.114298
33	C	4.173513	9.573017	8.567594	2.408772	6.780132
34	H	6.001708	3.746671	2.036495	7.773789	4.592970
35	H	6.672849	2.663165	2.111029	8.044926	5.210587
36	H	6.799416	2.696031	2.107548	8.313103	4.631423
37	H	2.639342	8.436891	7.073813	2.098669	5.705683
38	H	2.620718	8.787683	7.418003	2.101821	5.338921
39	H	4.807722	10.517416	9.379833	3.372550	7.604417
40	H	4.594080	9.776036	8.904799	2.668588	6.842456
41	H	4.600157	9.449195	8.610150	2.656653	7.124692
		16	17	18	19	20
16	N	0.000000				
17	N	2.235807	0.000000			
18	C	2.198252	1.377033	0.000000		
19	C	1.383720	2.262710	1.373659	0.000000	
20	C1	3.946560	2.775494	1.784880	2.833629	0.000000
21	C1	2.777311	4.013070	2.881937	1.777796	3.637158
22	H	2.703544	3.276749	4.192375	3.970837	5.895984
23	H	5.737043	4.689707	5.893810	6.463467	6.931025
24	H	6.675701	5.319576	6.681703	7.419165	7.615541
25	H	6.703083	5.151779	6.448718	7.296600	7.212175
26	H	6.103626	4.307373	5.577427	6.550718	6.214069
27	H	5.227384	5.429918	6.149377	6.063949	7.465173
28	H	6.112177	5.680592	6.631845	6.886864	7.768915
29	H	6.065717	6.164979	7.132153	7.106190	8.543959
30	C	5.059053	4.605232	5.356679	5.629576	6.400250
31	C	5.208882	6.654353	7.080913	6.317516	8.724607
32	H	1.015577	3.196340	3.192492	2.173258	4.908092
33	C	6.593712	7.860352	8.326186	7.642878	9.897492
34	H	4.968776	4.937633	5.474940	5.518181	6.566588
35	H	5.958561	5.481984	6.348195	6.633909	7.401873
36	H	5.351394	4.525084	5.195301	5.680963	5.958519
37	H	5.385988	6.963879	7.418021	6.587325	9.132667
38	H	4.816846	6.449056	6.667187	5.779620	8.251016
39	H	7.269882	8.714675	9.079345	8.281271	10.647285
40	H	6.697045	7.793189	8.220415	7.623735	9.680958
41	H	7.112760	8.216433	8.834713	8.249290	10.437248
		21	22	23	24	25
21	C1	0.000000				
22	H	5.416485	0.000000			
23	H	8.109479	4.734697	0.000000		
24	H	9.191015	4.896185	3.262348	0.000000	
25	H	9.051255	5.460224	2.136651	1.779883	0.000000
26	H	8.315193	4.994324	3.355310	1.744928	1.782956
27	H	7.221631	4.975151	3.423920	6.336323	5.544703
28	H	8.278069	5.474682	2.142485	5.291767	4.229453
29	H	8.419156	4.974746	3.122877	5.627892	5.082626
30	C	6.956857	3.749073	6.913794	5.188442	6.403957
31	C	6.942002	4.886674	6.306797	8.294575	8.167941
32	H	3.064768	2.665531	6.114428	7.136160	7.244534
33	C	8.249458	6.207438	6.772351	9.030995	8.752861
34	H	6.630378	3.901891	7.655443	6.178915	7.346288
35	H	7.994850	4.257602	7.133638	5.012806	6.452496
36	H	7.008864	4.443267	7.116242	5.303844	6.404252
37	H	7.188961	4.749940	6.812204	8.421694	8.521792
38	H	6.179993	5.065940	6.737330	8.798774	8.603129

39 H	8.698531	7.009486	7.864817	10.074659	9.838690
40 H	8.231205	6.568379	6.524996	9.090994	8.598934
41 H	9.012957	6.318562	6.587631	8.711243	8.502479
	26	27	28	29	30
26 H	0.000000				
27 H	6.438169	0.000000			
28 H	5.471457	1.776974	0.000000		
29 H	6.193975	1.751744	1.776949	0.000000	
30 C	5.037549	8.411991	8.435610	8.250957	0.000000
31 C	8.646907	3.571355	5.151912	3.908005	8.591609
32 H	6.775187	5.158169	6.253418	5.936416	5.422427
33 C	9.487695	3.743115	5.238770	3.926825	9.924039
34 H	6.030841	8.782808	9.006642	8.704637	1.088438
35 H	5.162076	8.827796	8.727522	8.453825	1.092329
36 H	4.844173	8.841503	8.765156	8.788213	1.092040
37 H	8.893637	4.441460	5.885636	4.489573	8.309501
38 H	8.954413	3.895872	5.603195	4.625376	8.725250
39 H	10.535470	4.789252	6.313084	5.010535	10.693298
40 H	9.424835	3.246021	4.775789	3.750077	10.311925
41 H	9.353269	3.872912	5.090362	3.564584	9.952930
	31	32	33	34	35
31 C	0.000000				
32 H	4.485257	0.000000			
33 C	1.517118	5.935006	0.000000		
34 H	8.556862	5.211860	9.957276	0.000000	
35 H	9.005416	6.249665	10.273023	1.799700	0.000000
36 H	9.318096	5.879739	10.646350	1.798196	1.780731
37 H	1.093513	4.559214	2.185685	8.192513	8.659739
38 H	1.093723	4.059494	2.186672	8.615049	9.255169
39 H	2.151024	6.525435	1.095745	10.641361	11.052147
40 H	2.166086	6.152809	1.094444	10.408413	10.711204
41 H	2.164738	6.489996	1.094344	10.053244	10.190491
	36	37	38	39	40
36 H	0.000000				
37 H	9.125425	0.000000			
38 H	9.391537	1.769750	0.000000		
39 H	11.447827	2.530115	2.537026	0.000000	
40 H	10.950704	3.091928	2.531543	1.774580	0.000000
41 H	10.713599	2.534467	3.091595	1.775124	1.775950
	41				
41 H	0.000000				

Stoichiometry C15H17Cl2N3O4

Framework group C1[X(C15H17Cl2N3O4)]

Deg. of freedom 117

Full point group C1 NOp 1

Largest Abelian subgroup C1 NOp 1

Largest concise Abelian subgroup C1 NOp 1

Standard orientation:

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	6	0	-0.347603	2.085395	0.157990
2	6	0	0.094589	2.730906	-0.957374
3	6	0	0.206782	0.719592	0.532454
4	6	0	1.607241	0.499274	-0.00267
5	6	0	1.999835	1.187328	-1.178324
6	7	0	1.186431	2.204848	-1.649137
7	6	0	-0.457348	4.010059	-1.529079
8	6	0	3.268787	0.997580	-1.971074
9	6	0	2.396915	-0.517040	0.616646
10	6	0	-1.425780	2.649640	0.965346
11	8	0	1.941812	-1.261381	1.521274
12	8	0	-2.028507	3.722561	0.767670
13	8	0	-1.729435	1.846330	2.050285
14	8	0	3.714095	-0.622615	0.227685
15	6	0	-0.750814	-0.375299	0.112196
16	7	0	-0.669835	-1.656774	0.611631

17	7	0	-1.759512	-0.268235	-0.760738
18	6	0	-2.336050	-1.517564	-0.815486
19	6	0	-1.680760	-2.391437	0.017508
20	17	0	-3.741863	-1.872297	-1.856472
21	17	0	-1.939802	-4.114777	0.369013
22	1	0	0.288803	0.660220	1.622425
23	1	0	1.457403	2.664948	-2.504655
24	1	0	-0.306832	4.848494	-0.842572
25	1	0	0.022064	4.247575	-2.485345
26	1	0	-1.536372	3.934469	-1.677773
27	1	0	3.495089	-0.058624	-2.113230
28	1	0	3.182276	1.475823	-2.953026
29	1	0	4.125815	1.434048	-1.447856
30	6	0	-2.827036	2.300626	2.909345
31	6	0	4.530648	-1.658172	0.907307
32	1	0	0.068192	-1.967917	1.236052
33	6	0	5.915834	-1.597529	0.291490
34	1	0	-2.901269	1.543908	3.688167
35	1	0	-2.598046	3.281673	3.331592
36	1	0	-3.752621	2.364366	2.333340
37	1	0	4.535248	-1.438089	1.978434
38	1	0	4.045677	-2.627843	0.763189
39	1	0	6.566239	-2.339318	0.768334
40	1	0	5.878974	-1.813201	-0.780861
41	1	0	6.362926	-0.608459	0.430909

Rotational constants (GHZ): 0.2005949 0.1629856 0.1145658

Standard basis: 6-31G (6D, 7F)

There are 258 symmetry adapted basis functions of A symmetry.

Integral buffers will be 262144 words long.

Raffenetti 2 integral format.

Two-electron integral symmetry is turned on.

258 basis functions, 644 primitive gaussians, 258 cartesian basis functions
97 alpha electrons 97 beta electrons

nuclear repulsion energy 2436.4706084567 Hartrees.

NAtoms= 41 NActive= 41 NUniq= 41 SFac= 7.50D-01 NATFMM= 80 NAOKFM=F Big=F

One-electron integrals computed using PRISM.

NBasis= 258 RedAO= T NBF= 258

NBsUse= 258 1.00D-06 NBFU= 258

Initial guess read from the read-write file.

B after Tr= 0.000000 0.000000 0.000000

Rot= 1.000000 0.000000 0.000000 0.000000 Ang= 0.00 deg.

Initial guess orbital symmetries:

Alpha Orbitals:

Occupied (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A)

Virtual (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)
(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

Beta Orbitals:


```

Eigenvalues --- 1000.000001000.000001000.000001000.000001000.00000
En-DIIS/RFO-DIIS IScMMF= 0 using points: 21 20 19 18 17
RFO step: Lambda= 0.0000000D+00.
DIIS coeffs: 1.16730 -0.06208 -0.22360 0.05029 0.06809
Iteration 1 RMS(Cart)= 0.00023675 RMS(Int)= 0.00000003
Iteration 2 RMS(Cart)= 0.00000004 RMS(Int)= 0.00000001
Variable Old X -DE/DX Delta X Delta X Delta X New X
              (DIIS) (GDIIS) (Total)
R1 2.57465 0.00000 0.00000 0.00000 -0.00001 2.57464
R2 2.87399 0.00000 0.00002 0.00000 0.00001 2.87400
R3 2.75969 -0.00001 -0.00002 0.00000 -0.00002 2.75967
R4 2.63709 0.00000 0.00000 -0.00001 0.00000 2.63709
R5 2.84572 0.00000 0.00001 0.00000 0.00001 2.84573
R6 2.90376 -0.00001 0.00001 -0.00002 -0.00001 2.90374
R7 2.86117 -0.00001 0.00000 -0.00001 0.00000 2.86117
R8 2.06862 0.00000 0.00001 0.00000 0.00001 2.06862
R9 2.58941 -0.00001 0.00000 0.00000 -0.00001 2.58940
R10 2.74804 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 2.74803
R11 2.61755 0.00001 0.00001 0.00000 0.00001 2.61756
R12 2.85010 0.00000 0.00002 -0.00001 0.00001 2.85012
R13 1.90575 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 1.90575
R14 2.06743 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 2.06743
R15 2.07069 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 2.07069
R16 2.06328 0.00000 0.00001 -0.00001 0.00000 2.06328
R17 2.05884 0.00000 0.00001 0.00000 0.00001 2.05885
R18 2.07046 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 2.07046
R19 2.06902 0.00000 -0.00001 0.00000 -0.00001 2.06901
R20 2.37498 -0.00001 -0.00001 -0.00001 -0.00001 2.37497
R21 2.60302 0.00000 0.00000 0.00001 0.00001 2.60303
R22 2.35536 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 2.35536
R23 2.61480 0.00000 0.00001 0.00000 0.00001 2.61481
R24 2.77030 -0.00001 -0.00003 -0.00002 -0.00005 2.77025
R25 2.80357 -0.00002 -0.00002 -0.00003 -0.00005 2.80352
R26 2.60355 0.00000 0.00001 0.00000 0.00000 2.60356
R27 2.52895 0.00000 -0.00001 0.00000 -0.00001 2.52894
R28 2.61485 -0.00001 -0.00001 -0.00001 -0.00002 2.61484
R29 1.91916 -0.00001 -0.00002 0.00000 -0.00002 1.91914
R30 2.60221 0.00000 0.00002 0.00000 0.00003 2.60224
R31 2.59584 -0.00001 0.00000 -0.00001 -0.00001 2.59583
R32 3.37293 0.00000 0.00000 -0.00002 -0.00001 3.37292
R33 3.35955 0.00001 0.00002 0.00001 0.00003 3.35958
R34 2.05685 0.00000 0.00001 -0.00001 0.00000 2.05685
R35 2.06420 0.00000 0.00001 0.00000 0.00001 2.06421
R36 2.06366 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 2.06366
R37 2.86694 0.00000 0.00001 0.00000 0.00001 2.86694
R38 2.06644 0.00000 0.00001 0.00000 0.00001 2.06645
R39 2.06684 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 2.06684
R40 2.07066 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 2.07066
R41 2.06820 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 2.06820
R42 2.06801 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 2.06801
A1 2.10452 0.00000 0.00000 0.00001 0.00001 2.10453
A2 2.10499 0.00000 -0.00001 0.00000 -0.00001 2.10498
A3 2.07144 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 2.07144
A4 2.07276 0.00000 0.00000 0.00000 0.00000 2.07276
A5 2.20718 -0.00001 0.00000 -0.00001 -0.00001 2.20717
A6 2.00290 0.00001 0.00000 0.00001 0.00001 2.00291
A7 1.94552 0.00000 0.00001 -0.00001 0.00000 1.94552
A8 1.92894 0.00001 -0.00002 0.00002 0.00000 1.92894
A9 1.89778 0.00000 0.00000 0.00001 0.00001 1.89779
A10 1.94516 -0.00001 0.00001 -0.00002 -0.00001 1.94515
A11 1.88390 0.00000 -0.00001 0.00000 -0.00001 1.88389
A12 1.85933 0.00000 0.00001 0.00000 0.00001 1.85934
A13 2.09887 0.00000 0.00000 0.00001 0.00001 2.09888
A14 1.99936 0.00000 -0.00001 0.00000 -0.00001 1.99936

```

A15	2.18360	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	2.18360
A16	2.06912	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	2.06913
A17	2.22278	-0.00001	0.00001	-0.00002	-0.00002	2.22277
A18	1.99088	0.00001	0.00000	0.00002	0.00002	1.99089
A19	2.17473	0.00000	0.00001	-0.00001	0.00000	2.17473
A20	2.04740	0.00000	0.00000	0.00001	0.00001	2.04741
A21	2.05523	0.00000	0.00000	0.00001	0.00001	2.05524
A22	1.94156	0.00000	-0.00001	0.00000	-0.00001	1.94155
A23	1.93379	0.00000	0.00001	0.00000	0.00001	1.93380
A24	1.93383	0.00000	-0.00001	0.00001	0.00001	1.93384
A25	1.89790	0.00000	0.00001	-0.00002	-0.00001	1.89789
A26	1.84884	0.00000	-0.00001	0.00000	0.00000	1.84884
A27	1.90555	0.00000	0.00001	0.00000	0.00001	1.90556
A28	1.94476	0.00000	-0.00002	0.00001	-0.00001	1.94476
A29	1.92808	0.00000	0.00000	0.00001	0.00001	1.92810
A30	1.93612	0.00000	0.00000	-0.00002	-0.00001	1.93611
A31	1.89929	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	1.89929
A32	1.86109	0.00000	0.00001	-0.00001	0.00000	1.86108
A33	1.89240	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	1.89241
A34	2.15596	0.00001	0.00000	0.00001	0.00002	2.15597
A35	2.02794	-0.00001	-0.00002	0.00000	-0.00002	2.02792
A36	2.09917	0.00000	0.00002	-0.00001	0.00001	2.09918
A37	2.21672	0.00000	-0.00001	0.00001	0.00000	2.21672
A38	1.95109	0.00000	0.00000	-0.00001	-0.00001	1.95108
A39	2.11529	0.00000	0.00001	0.00000	0.00001	2.11530
A40	2.03071	0.00000	0.00001	-0.00001	0.00000	2.03072
A41	2.03806	-0.00001	0.00002	-0.00002	0.00000	2.03806
A42	2.13510	0.00000	0.00003	0.00000	0.00002	2.13512
A43	2.21419	0.00000	-0.00002	0.00001	-0.00002	2.21418
A44	1.93389	0.00000	0.00000	0.00000	-0.00001	1.93389
A45	1.87051	0.00000	0.00000	0.00001	0.00001	1.87052
A46	2.15383	0.00000	0.00006	0.00000	0.00005	2.15388
A47	2.25525	0.00000	-0.00004	0.00001	-0.00003	2.25522
A48	1.84307	0.00000	0.00001	-0.00001	0.00000	1.84308
A49	1.93193	0.00000	-0.00002	0.00001	-0.00001	1.93191
A50	2.13325	0.00000	-0.00002	-0.00001	-0.00003	2.13322
A51	2.21801	0.00000	0.00004	0.00000	0.00004	2.21805
A52	1.84536	0.00000	0.00001	0.00000	0.00001	1.84537
A53	2.13676	0.00000	0.00005	0.00000	0.00005	2.13681
A54	2.30106	0.00000	-0.00006	0.00001	-0.00006	2.30101
A55	1.82856	0.00000	0.00001	0.00000	0.00001	1.82857
A56	1.92611	0.00000	0.00001	0.00001	0.00002	1.92613
A57	1.92153	0.00000	0.00001	0.00001	0.00002	1.92155
A58	1.94132	0.00000	-0.00001	0.00000	-0.00002	1.94131
A59	1.93927	0.00000	-0.00001	0.00000	-0.00001	1.93926
A60	1.90620	0.00000	-0.00001	0.00000	-0.00001	1.90619
A61	1.86365	0.00000	0.00001	0.00000	0.00001	1.86366
A62	1.88657	0.00000	0.00001	0.00000	0.00001	1.88658
A63	1.89065	0.00000	0.00001	0.00001	0.00002	1.89067
A64	1.96678	0.00000	-0.00001	-0.00001	-0.00002	1.96676
A65	1.96796	0.00000	-0.00001	0.00000	-0.00001	1.96795
A66	1.88533	0.00000	0.00000	0.00000	-0.00001	1.88532
A67	1.91585	0.00000	-0.00001	0.00000	-0.00001	1.91585
A68	1.93809	0.00000	0.00000	0.00000	-0.00001	1.93808
A69	1.93631	0.00000	0.00000	0.00001	0.00001	1.93632
A70	1.88912	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	1.88913
A71	1.89010	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	1.89010
A72	1.89304	0.00000	0.00001	0.00000	0.00000	1.89304
D1	-0.14792	0.00000	0.00002	-0.00003	0.00000	-0.14792
D2	3.02352	0.00000	0.00001	0.00001	0.00003	3.02355
D3	3.06644	0.00000	0.00002	-0.00006	-0.00004	3.06640
D4	-0.04531	0.00000	0.00001	-0.00002	-0.00001	-0.04532
D5	0.42513	0.00000	-0.00006	0.00003	-0.00003	0.42510
D6	-1.74825	0.00000	-0.00007	0.00005	-0.00002	-1.74826
D7	2.49988	0.00000	-0.00007	0.00003	-0.00003	2.49985
D8	-2.78784	0.00000	-0.00006	0.00006	0.00001	-2.78784
D9	1.32196	0.00000	-0.00006	0.00008	0.00002	1.32198
D10	-0.71309	0.00000	-0.00007	0.00006	0.00000	-0.71309

D11	-0.01577	0.00000	0.00006	0.00003	0.00009	-0.01568
D12	3.14032	0.00000	0.00008	0.00001	0.00010	3.14041
D13	-3.08596	0.00000	0.00006	0.00000	0.00006	-3.08591
D14	0.07012	0.00000	0.00008	-0.00002	0.00006	0.07019
D15	-0.18735	0.00000	0.00003	0.00000	0.00003	-0.18732
D16	3.07297	0.00000	-0.00012	-0.00004	-0.00016	3.07281
D17	2.92781	0.00000	0.00004	-0.00003	0.00001	2.92782
D18	-0.09506	0.00000	-0.00011	-0.00007	-0.00018	-0.09524
D19	1.12786	0.00000	-0.00038	0.00035	-0.00002	1.12783
D20	-3.04188	0.00000	-0.00037	0.00033	-0.00004	-3.04192
D21	-0.92397	0.00000	-0.00036	0.00034	-0.00002	-0.92398
D22	-1.98493	0.00000	-0.00038	0.00039	0.00001	-1.98492
D23	0.12853	0.00000	-0.00038	0.00037	-0.00001	0.12852
D24	2.24644	0.00000	-0.00037	0.00038	0.00001	2.24645
D25	-0.42651	0.00000	0.00005	-0.00001	0.00004	-0.42647
D26	2.76809	0.00000	0.00007	-0.00003	0.00004	2.76813
D27	1.73774	0.00000	0.00004	-0.00001	0.00003	1.73777
D28	-1.35085	0.00000	0.00006	-0.00003	0.00003	-1.35081
D29	-2.50952	0.00000	0.00006	-0.00002	0.00004	-2.50948
D30	0.68509	0.00000	0.00007	-0.00004	0.00004	0.68512
D31	-2.85250	0.00000	-0.00011	-0.00008	-0.00019	-2.85269
D32	0.29240	0.00000	-0.00012	-0.00013	-0.00025	0.29215
D33	1.25710	0.00000	-0.00012	-0.00007	-0.00019	1.25692
D34	-1.88119	0.00000	-0.00013	-0.00011	-0.00024	-1.88143
D35	-0.79374	0.00000	-0.00011	-0.00006	-0.00018	-0.79392
D36	2.35115	0.00000	-0.00012	-0.00011	-0.00023	2.35092
D37	0.14967	0.00000	-0.00001	0.00000	-0.00001	0.14966
D38	-3.02422	0.00000	-0.00001	-0.00002	-0.00002	-3.02425
D39	-3.05087	0.00000	-0.00003	0.00002	-0.00001	-3.05088
D40	0.05842	0.00000	-0.00002	0.00000	-0.00002	0.05840
D41	0.12518	0.00000	-0.00009	-0.00001	-0.00010	0.12508
D42	-3.00002	0.00000	-0.00009	-0.00003	-0.00012	-3.00014
D43	-2.96043	0.00000	-0.00007	-0.00003	-0.00010	-2.96053
D44	0.19755	0.00000	-0.00007	-0.00005	-0.00012	0.19743
D45	0.18418	0.00000	-0.00004	0.00001	-0.00002	0.18416
D46	-3.07662	0.00000	0.00011	0.00005	0.00017	-3.07646
D47	-2.92929	0.00000	-0.00004	0.00003	-0.00001	-2.92930
D48	0.09309	0.00000	0.00011	0.00007	0.00018	0.09327
D49	0.74787	0.00000	0.00028	0.00008	0.00036	0.74823
D50	2.86135	0.00000	0.00026	0.00010	0.00036	2.86172
D51	-1.32279	0.00000	0.00027	0.00010	0.00037	-1.32242
D52	-2.42479	0.00000	0.00028	0.00006	0.00035	-2.42445
D53	-0.31132	0.00000	0.00027	0.00008	0.00035	-0.31096
D54	1.78773	0.00000	0.00028	0.00008	0.00036	1.78809
D55	-3.13860	0.00000	0.00001	0.00002	0.00003	-3.13857
D56	0.01881	0.00000	0.00001	0.00000	0.00001	0.01882
D57	-3.11217	0.00000	0.00001	0.00001	0.00001	-3.11216
D58	0.04295	0.00000	0.00003	-0.00001	0.00002	0.04297
D59	-3.14024	0.00000	-0.00012	0.00000	-0.00011	-3.14035
D60	-1.04901	0.00000	-0.00012	0.00000	-0.00012	-1.04913
D61	1.05650	0.00000	-0.00012	0.00001	-0.00011	1.05639
D62	3.12045	0.00000	-0.00009	-0.00018	-0.00028	3.12018
D63	-1.04235	0.00000	-0.00010	-0.00019	-0.00029	-1.04264
D64	0.99640	0.00000	-0.00009	-0.00019	-0.00028	0.99611
D65	-3.13693	0.00000	-0.00004	-0.00003	-0.00006	-3.13699
D66	-0.07881	0.00000	0.00019	0.00005	0.00023	-0.07857
D67	0.00184	0.00000	-0.00003	0.00001	-0.00002	0.00182
D68	3.05996	0.00000	0.00020	0.00008	0.00028	3.06024
D69	3.13981	0.00000	0.00002	0.00005	0.00007	3.13988
D70	0.00120	0.00000	0.00001	0.00001	0.00002	0.00122
D71	-0.00408	0.00000	0.00003	-0.00003	0.00001	-0.00408
D72	3.13477	0.00000	-0.00001	-0.00001	-0.00003	3.13474
D73	-3.05572	0.00000	-0.00022	-0.00011	-0.00032	-3.05604
D74	0.08314	0.00000	-0.00026	-0.00009	-0.00036	0.08278
D75	-0.00389	0.00000	0.00001	-0.00003	-0.00002	-0.00391
D76	3.13922	0.00000	0.00002	-0.00006	-0.00004	3.13918
D77	0.00500	0.00000	-0.00003	0.00003	0.00001	0.00500
D78	-3.13350	0.00000	0.00003	0.00002	0.00005	-3.13345

D79	-3.13821	0.00000	-0.00003	0.00007	0.00003	-3.13818
D80	0.00648	0.00000	0.00002	0.00005	0.00007	0.00655
D81	3.13068	0.00000	0.00002	-0.00001	0.00001	3.13069
D82	-1.06428	0.00000	0.00002	-0.00001	0.00001	-1.06428
D83	1.04237	0.00000	0.00002	-0.00001	0.00001	1.04238
D84	1.06194	0.00000	0.00001	-0.00001	0.00000	1.06194
D85	-3.13302	0.00000	0.00001	-0.00001	0.00000	-3.13302
D86	-1.02637	0.00000	0.00001	-0.00001	0.00000	-1.02637
D87	-1.07809	0.00000	0.00003	0.00001	0.00004	-1.07805
D88	1.01014	0.00000	0.00003	0.00000	0.00003	1.01017
D89	3.11679	0.00000	0.00003	0.00000	0.00004	3.11682

Item	Value	Threshold	Converged?
------	-------	-----------	------------

Maximum Force	0.000017	0.000450	YES
RMS Force	0.000003	0.000300	YES
Maximum Displacement	0.001197	0.001800	YES
RMS Displacement	0.000237	0.001200	YES

Predicted change in Energy=-7.640776D-09

Optimization completed.

-- Stationary point found.

Mulliken atomic charges:

1
1 C 0.064597
2 C 0.356369
3 C -0.285702
4 C 0.040506
5 C 0.357687
6 N -0.782672
7 C -0.440127
8 C -0.437559
9 C 0.486780
10 C 0.474643
11 O -0.502265
12 O -0.462510
13 O -0.528106
14 O -0.537783
15 C 0.472823
16 N -0.686536
17 N -0.392932
18 C -0.168580
19 C 0.029224
20 Cl 0.134505
21 Cl 0.177981
22 H 0.198215
23 H 0.324684
24 H 0.191414
25 H 0.116443
26 H 0.208712
27 H 0.188739
28 H 0.130424
29 H 0.187180
30 C -0.158336
31 C -0.009088
32 H 0.380069
33 C -0.419271
34 H 0.161523
35 H 0.165109
36 H 0.174000
37 H 0.168726
38 H 0.165706
39 H 0.147486
40 H 0.152697
41 H 0.155225

Sum of Mulliken atomic charges = 0.00000

Mulliken charges with hydrogens summed into heavy atoms: 1

1 C 0.064597
2 C 0.356369

3 C -0.087487
 4 C 0.040506
 5 C 0.357687
 6 N -0.457988
 7 C 0.076442
 8 C 0.068783
 9 C 0.486780
 10 C 0.474643
 11 O -0.502265
 12 O -0.462510
 13 O -0.528106
 14 O -0.537783
 15 C 0.472823
 16 N -0.306467
 17 N -0.392932
 18 C -0.168580
 19 C 0.029224
 20 Cl 0.134505
 21 Cl 0.177981
 30 C 0.342295
 31 C 0.325345
 33 C 0.036137

Sum of Mulliken atomic spin densities = 0.00000
 Electronic spatial extent (au): <R**2>= 9944.3716
 Charge= 0.0000 electrons
 Dipole moment (field-independent basis, Debye):
 X= 7.5487 Y= 2.0214 Z= -0.5720 Tot=
 7.8355
 Quadrupole moment (field-independent basis, Debye-Ang):
 XX= -142.8744 YY= -154.5168 ZZ= -143.1918
 XY= -2.4334 XZ= -13.9054 YZ= -8.5720
 Traceless Quadrupole moment (field-independent basis, Debye-Ang):
 XX= 3.9866 YY= -7.6558 ZZ= 3.6692
 XY= -2.4334 XZ= -13.9054 YZ= -8.5720
 Octapole moment (field-independent basis, Debye-Ang**2):
 XXX= 108.1752 YYY= -11.1662 ZZZ= 13.6264 XYY=
 58.5122
 XXY= -17.3463 XXZ= 34.4817 XZZ= -1.7701 YZZ= 39.9011
 YYZ= -19.5835 XYZ= -17.7229
 Hexadecapole moment (field-independent basis, Debye-Ang**3):
 XXXX= -5930.1228 YYYY= -4891.7833 ZZZZ= -1560.8977 XXXY=
 -229.9914
 XXXZ= -21.2413 YYYYX= 66.9276 YYYZ= -121.4254 ZZZX=
 -120.2947
 ZZZY= 11.7290 XXYY= -1866.5978 XXZZ= -1240.4731 YYZZ=
 -978.5486
 XXYZ= -20.8192 YYXZ= -29.2477 ZZXY= -32.7107
 N-N= 2.436470608457D+03 E-N=-1.425484064743D+04 KE= 2.939348422488D+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 N(14)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
7 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
8 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
9 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
10 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
11 O(17)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
12 O(17)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
13 O(17)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
14 O(17)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
15 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
16 N(14)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000

17 N(14)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
18 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
19 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
20 Cl(35)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
21 Cl(35)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
22 H(1)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
23 H(1)	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 H(1)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
27 H(1)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
28 H(1)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
29 H(1)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
30 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
31 C(13)	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 H(1)	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
41 H(1)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000

Center	Spin Dipole Couplings		
	3XX-RR	3YY-RR	3ZZ-RR
1 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
2 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
3 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
4 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
5 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
6 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
7 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
8 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
9 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
10 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
11 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
12 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
13 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
14 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
15 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
16 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
17 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
18 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
19 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
20 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
21 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
22 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
23 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
24 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
25 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
26 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
27 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
28 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
29 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
30 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
31 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
32 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
33 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
34 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
35 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
36 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
37 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
38 Atom	0.00000	0.00000	0.00000
39 Atom	0.00000	0.00000	0.00000

40	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
41	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
<hr/>				
		XY	XZ	YZ
<hr/>				
1	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
2	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
3	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
4	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
5	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
6	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
7	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
8	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
9	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
10	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
11	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
12	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
13	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
14	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
15	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
16	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
17	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
18	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
19	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
20	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
21	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
22	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
23	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
24	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
25	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
26	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
27	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
28	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
29	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
30	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
31	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
32	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
33	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
34	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
35	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
36	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
37	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
38	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
39	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
40	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
41	Atom	0.000000	0.000000	0.000000

Anisotropic Spin Dipole Couplings in Principal Axis System

Atom	a.u.	MegaHertz	Gauss	10(-4) cm-1	Axes
1 C(13)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.8987 0.2125 -0.3835
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.3708 0.0984 0.9235
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	-0.2340 0.9722 -0.0097
2 C(13)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.7804 0.2208 0.5850
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	-0.1354 0.9730 -0.1867
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	-0.6104 0.0664 0.7893
3 C(13)	Baa	0.0000	0.000	0.000	-0.2197 0.9754 0.0146
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.9724 0.2178 0.0838
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	-0.0786 -0.0326 0.9964
	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.9762 -0.2037 -0.0746

4 C(13)	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0079	-0.3101	0.9507
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.2168	0.9286	0.3011
5 C(13)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.3286	0.7622	0.5577
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.1021	-0.6157	0.7813
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9389	-0.1998	-0.2802
6 N(14)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0309	0.7443	-0.6672
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.4132	0.6173	0.6695
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9101	0.2549	0.3266
7 C(13)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0657	0.1831	0.9809
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.1811	0.9689	-0.1687
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9813	0.1666	-0.0968
8 C(13)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.8299	-0.5379	-0.1481
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.4693	0.8166	-0.3361
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.3018	0.2094	0.9301
9 C(13)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0548	-0.2948	0.9540
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9940	-0.0743	-0.0800
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0945	0.9527	0.2890
10 C(13)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9007	0.0801	-0.4269
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.1204	0.9904	-0.0681
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.4174	0.1128	0.9017
11 O(17)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.4935	-0.4873	0.7204
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.5536	0.8148	0.1719
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.6708	0.3140	0.6719
12 O(17)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.0967	-0.0272	0.9949
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.3509	0.9364	-0.0085
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9314	0.3499	0.1001
13 O(17)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.0869	-0.0059	0.9962
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.7350	-0.6754	0.0601
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.6724	0.7375	0.0630
14 O(17)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9761	0.1969	-0.0926
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.1092	0.8115	0.5741
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.1881	-0.5502	0.8135
15 C(13)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.5517	0.1632	0.8179
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.5460	0.6707	-0.5021
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.6305	0.7236	0.2809
16 N(14)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9519	0.2967	-0.0767
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.3012	0.9520	-0.0554
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0565	0.0758	0.9955
17 N(14)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.4797	0.7360	-0.4777
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.8714	0.4633	-0.1612
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.1026	0.4936	0.8636
18 C(13)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.3736	0.7200	0.5848
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.1157	-0.6617	0.7408
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9204	0.2091	0.3305
19 C(13)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.6903	0.5046	-0.5186
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.5789	0.0450	0.8142
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.4341	0.8622	0.2610
20 C1(35)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.4914	0.6125	0.6192
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.1056	-0.6638	0.7404
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.8645	-0.4292	-0.2615
	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.4630	0.0026	0.8864

21 C1(35)	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0130	0.9999	0.0038
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.8863	-0.0133	0.4630
22 H(1)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.3941	0.7496	-0.5318
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9068	-0.4114	0.0921
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.1497	0.5185	0.8419
23 H(1)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9403	-0.2138	-0.2649
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0594	-0.6634	0.7459
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.3352	0.7171	0.6111
24 H(1)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.7550	0.3491	0.5550
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.3177	0.9353	-0.1560
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.5735	-0.0586	0.8171
25 H(1)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.6154	0.6144	-0.4938
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.7667	-0.6121	0.1937
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.1832	0.4978	0.8477
26 H(1)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.4088	0.7418	0.5316
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9124	0.3191	0.2563
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.0205	-0.5898	0.8073
27 H(1)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.8363	0.3695	-0.4051
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.0029	0.7417	0.6707
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.5483	-0.5597	0.6214
28 H(1)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.3626	-0.5298	0.7667
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.4596	0.8173	0.3474
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.8107	0.2265	0.5398
29 H(1)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.1829	0.9294	0.3206
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.6454	-0.3595	0.6740
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.7417	-0.0836	0.6656
30 C(13)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0333	0.8876	-0.4594
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.2153	0.4425	0.8706
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9760	-0.1279	-0.1764
31 C(13)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0963	0.0898	0.9913
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9130	-0.4046	-0.0520
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.3964	0.9101	-0.1210
32 H(1)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.1550	-0.5799	0.7998
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.3751	0.7835	0.4954
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9139	0.2232	0.3390
33 C(13)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.7160	-0.4235	0.5551
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.5502	0.1471	0.8220
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.4297	0.8939	0.1277
34 H(1)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.3268	-0.6284	0.7059
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.3129	0.6328	0.7083
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.8918	-0.4523	0.0101
35 H(1)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.0626	0.9902	0.1245
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0690	-0.1201	0.9904
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9957	0.0706	-0.0608
36 H(1)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.8927	-0.4494	-0.0342
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.3756	0.7837	-0.4947
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.2491	0.4287	0.8684
37 H(1)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.2245	0.0497	0.9732
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.2867	0.9511	-0.1148
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9313	0.3048	0.1993
	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.4558	0.8894	0.0340

38 H(1)	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.4662	-0.2711	0.8421
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.7582	-0.3680	-0.5382
39 H(1)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0455	0.6499	0.7586
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9833	0.1048	-0.1488
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.1762	0.7527	-0.6343
40 H(1)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	-0.1220	0.9234	-0.3639
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9916	0.0976	-0.0848
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0428	0.3712	0.9276
41 H(1)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0074	-0.3327	0.9430
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.9671	-0.2374	-0.0913
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.2543	0.9127	0.3200

In the beginning the Universe was created.
This has made a lot of people very angry
and been widely regarded as a bad move.

-D.Adams

Job cpu time: 0 days 3 hours 6 minutes 20.0 seconds.
File lengths (MBytes): RWF= 81 Int= 0 D2E= 0 Chk= 7 Scr= 1
Normal termination of Gaussian 09 at Mon Apr 06 16:40:26 2015.

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

Entering Link 1 = C:\G09W\l1.exe PID= 5064.

Copyright (c) 1988,1990,1992,1993,1995,1998,2003,2009, Gaussian, Inc.
All Rights Reserved.

This is part of the Gaussian(R) 09 program. It is based on the Gaussian(R) 03 system (copyright 2003, Gaussian, Inc.), the Gaussian(R) 98 system (copyright 1998, Gaussian, Inc.), the Gaussian(R) 94 system (copyright 1995, Gaussian, Inc.), the Gaussian 92(TM) system (copyright 1992, Gaussian, Inc.), the Gaussian 90(TM) system (copyright 1990, Gaussian, Inc.), the Gaussian 88(TM) system (copyright 1988, Gaussian, Inc.), the Gaussian 86(TM) system (copyright 1986, Carnegie Mellon University), and the Gaussian 82(TM) system (copyright 1983, Carnegie Mellon University). Gaussian is a federally registered trademark of Gaussian, Inc.

This software contains proprietary and confidential information, including trade secrets, belonging to Gaussian, Inc.

This software is provided under written license and may be used, copied, transmitted, or stored only in accord with that written license.

The following legend is applicable only to US Government contracts under FAR:

RESTRICTED RIGHTS LEGEND

Use, reproduction and disclosure by the US Government is subject to restrictions as set forth in subparagraphs (a) and (c) of the Commercial Computer Software - Restricted Rights clause in FAR 52.227-19.

Gaussian, Inc.
340 Quinnipiac St., Bldg. 40, Wallingford CT 06492

Warning -- This program may not be used in any manner that competes with the business of Gaussian, Inc. or will provide assistance to any competitor of Gaussian, Inc. The licensee of this program is prohibited from giving any competitor of Gaussian, Inc. access to this program. By using this program, the user acknowledges that Gaussian, Inc. is engaged in the business of creating and licensing software in the field of computational chemistry and represents and warrants to the licensee that it is not a competitor of Gaussian, Inc. and that it will not use this program in any manner prohibited above.

Cite this work as: Gaussian
09, Revision A.02,
M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria,
M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A.
Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H. P. Hratchian, A. F.
Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada,
M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y.
Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J. A. Montgomery, Jr.,
J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers,
K. N. Kudin, V. N. Staroverov, R. Kobayashi, J. Normand,
K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M.
Cossi, N. Rega, J. M. Millam, M. Klene, J. E. Knox, J. B. Cross, V.
Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann,

O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski,
 R. L. Martin, K. Morokuma, V. G. Zakrzewski, G. A. Voth,
 P. Salvador, J. J. Dannenberg, S. Dapprich, A. D. Daniels,
 O. Farkas, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, J. Cioslowski,
 and D. J. Fox, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.

```
*****
Gaussian 09: IA32W-G09RevA.02 11-Jun-2009
          10-Apr-2015
*****
%chk=D:/Moh Syaifudin/Skripsi/Optimasi MP2/opt mp2 631g dhp 1.chk
%mem=6MW
%nproc=1
Will use up to    1 processors via shared memory.
-----
# opt ump2/6-31g 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=1,6=6,11=2,16=1,25=1,30=1,71=1,116=2/1,2,3;
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=1,6=6,11=2,16=1,25=1,30=1,71=1,116=2/1,2,3;
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;
-----
opt mp2 631g dhp 1
-----
Symbolic Z-matrix:
Charge =  0 Multiplicity = 1
C
C           1     B1
C           1     B2      2     A1
C           3     B3      1     A2      2     D1      0
C           4     B4      3     A3      1     D2      0
N           5     B5      4     A4      3     D3      0
C           2     B6      1     A5      3     D4      0
C           5     B7      4     A6      3     D5      0
C           4     B8      3     A7      1     D6      0
C           1     B9      2     A8      6     D7      0
O           9     B10     4     A9      3     D8      0
O          10     B11     1     A10     2     D9      0
O          10     B12     1     A11     2     D10     0
O          9     B13     4     A12     3     D11     0
C          3     B14     1     A13     2     D12     0
N          15     B15     3     A14     1     D13     0
N          15     B16     3     A15     1     D14     0
C          17     B17     15    A16     3     D15     0
C          18     B18     17    A17     15    D16     0
C1         18     B19     17    A18     15    D17     0
C1         19     B20     18    A19     17    D18     0
```

H	3	B21	1	A20	2	D19	0
H	6	B22	5	A21	4	D20	0
H	7	B23	2	A22	1	D21	0
H	7	B24	2	A23	1	D22	0
H	7	B25	2	A24	1	D23	0
H	8	B26	5	A25	4	D24	0
H	8	B27	5	A26	4	D25	0
H	8	B28	5	A27	4	D26	0
C	13	B29	10	A28	1	D27	0
C	14	B30	9	A29	4	D28	0
H	16	B31	15	A30	3	D29	0
C	31	B32	14	A31	9	D30	0
H	30	B33	13	A32	10	D31	0
H	30	B34	13	A33	10	D32	0
H	30	B35	13	A34	10	D33	0
H	31	B36	14	A35	9	D34	0
H	31	B37	14	A36	9	D35	0
H	33	B38	31	A37	14	D36	0
H	33	B39	31	A38	14	D37	0
H	33	B40	31	A39	14	D38	0

Variables:

B1	1.35662
B2	1.52369
B3	1.53834
B4	1.36489
B5	1.39426
B6	1.51909
B7	1.52148
B8	1.47141
B9	1.47987
B10	1.25811
B11	1.24592
B12	1.4005
B13	1.39047
B14	1.50894
B15	1.38937
B16	1.35583
B17	1.39361
B18	1.37824
B19	1.80732
B20	1.79953
B21	1.09423
B22	1.01731
B23	1.09696
B24	1.09712
B25	1.08788
B26	1.08504
B27	1.09718
B28	1.09682
B29	1.48786
B30	1.50171
B31	1.02247
B32	1.53063
B33	1.08878
B34	1.09234
B35	1.09199
B36	1.09236
B37	1.09291
B38	1.09493
B39	1.09301
B40	1.09263
A1	120.38774
A2	111.4575
A3	120.22368
A4	118.91996
A5	126.54064
A6	127.45551
A7	113.05735

A8	122.90075
A9	123.82921
A10	129.77643
A11	109.11119
A12	116.13536
A13	108.12627
A14	121.77204
A15	126.95622
A16	104.48649
A17	111.24744
A18	122.58321
A19	131.13945
A20	108.81002
A21	118.08854
A22	110.16004
A23	109.43913
A24	108.95721
A25	109.62937
A26	109.26086
A27	109.79801
A28	113.74533
A29	114.42022
A30	122.4987
A31	104.88624
A32	104.11285
A33	110.67461
A34	110.37459
A35	108.7743
A36	109.17738
A37	110.002
A38	109.99597
A39	109.79845
D1	24.97498
D2	-25.12603
D3	8.15491
D4	173.53416
D5	-171.51733
D6	158.82606
D7	179.34615
D8	12.84096
D9	-2.21782
D10	177.80604
D11	-165.35689
D12	-97.02828
D13	-169.53111
D14	9.41252
D15	-179.30083
D16	0.00931
D17	-179.84825
D18	-179.51117
D19	145.46288
D20	-177.89223
D21	120.17476
D22	-120.11417
D23	-0.39625
D24	-2.30449
D25	118.69873
D26	-122.15351
D27	-176.98489
D28	-179.19031
D29	-3.2229
D30	178.68589
D31	178.63584
D32	-61.6575
D33	59.15657
D34	-60.62937
D35	57.69631
D36	178.9324

D37 -61.00962
 D38 58.84217

Input orientation:

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	6	0	0.047775	0.031741	-0.048406
2	6	0	0.044275	0.060666	1.321817
3	6	0	1.364837	0.101959	-0.813874
4	6	0	2.494062	-0.538606	0.010435
5	6	0	2.454703	-0.493084	1.385554
6	7	0	1.273424	-0.063032	1.997591
7	6	0	-1.175553	0.156419	2.220039
8	6	0	3.540750	-0.925545	2.356022
9	6	0	3.621090	-1.048319	-0.781876
10	6	0	-1.211166	0.066312	-0.814498
11	8	0	3.822867	-0.742256	-1.995999
12	8	0	-2.384314	0.036787	-0.359556
13	8	0	-0.962440	0.127058	-2.191700
14	8	0	4.462488	-1.938658	-0.120379
15	6	0	1.668235	1.535519	-1.189030
16	7	0	2.674446	1.879530	-2.084464
17	7	0	1.021534	2.640694	-0.734369
18	6	0	1.652067	3.711142	-1.370366
19	6	0	2.670597	3.265348	-2.201470
20	17	0	1.150645	5.413226	-1.093092
21	17	0	3.820637	4.150585	-3.253416
22	1	0	1.251429	-0.468480	-1.747659
23	1	0	1.267900	0.033004	3.006418
24	1	0	-1.753683	-0.776908	2.212365
25	1	0	-0.861287	0.367011	3.253019
26	1	0	-1.845441	0.952854	1.881563
27	1	0	4.535562	-0.712377	1.958072
28	1	0	3.417290	-0.385814	3.307046
29	1	0	3.486814	-2.004289	2.555438
30	6	0	-2.176448	0.211886	-3.046965
31	6	0	5.627862	-2.450129	-0.917723
32	1	0	3.301554	1.205695	-2.520522
33	6	0	6.410663	-3.361226	0.022937
34	1	0	-1.777990	0.258723	-4.061451
35	1	0	-2.803420	-0.673509	-2.901090
36	1	0	-2.745086	1.112965	-2.797310
37	1	0	5.234060	-2.978926	-1.793666
38	1	0	6.213315	-1.590295	-1.265258
39	1	0	7.276542	-3.784611	-0.505438
40	1	0	6.773148	-2.799863	0.892698
41	1	0	5.778153	-4.184981	0.374793

Distance matrix (angstroms):

	1	2	3	4	5
1 C	0.000000				
2 C	1.370533	0.000000			
3 C	1.524967	2.511328	0.000000		
4 C	2.512584	2.842588	1.537842	0.000000	
5 C	2.850436	2.474038	2.525741	1.376435	0.000000
6 N	2.386902	1.408112	2.817785	2.380108	1.398197
7 C	2.580295	1.517877	3.957421	4.339526	3.781135
8 C	4.347245	3.777239	3.979774	2.597509	1.519318
9 C	3.804351	4.295228	2.532754	1.468931	2.523192
10 C	1.474118	2.477903	2.576249	3.843846	4.311815
11 O	4.317812	5.092184	2.855175	2.415155	3.656345
12 O	2.451917	2.953918	3.777140	4.926106	5.171292
13 O	2.371356	3.655500	2.704672	4.152097	4.985798
14 O	4.835012	5.059430	3.773658	2.419082	2.896328
15 C	2.487622	3.334186	1.512576	2.534305	3.370793
16 N	3.802534	4.672133	2.547398	3.204455	4.209348

17 N	2.867994	3.440855	2.563075	3.582042	4.045814
18 C	4.226029	4.812362	3.663111	4.547079	5.090662
19 C	4.687334	5.438852	3.692893	4.403835	5.199919
20 Cl	5.591786	5.975428	5.322912	6.200552	6.536723
21 Cl	6.439834	7.205631	5.326696	5.865240	6.704437
22 H	2.141603	3.340494	1.100098	2.154055	3.356412
23 H	3.289476	2.082283	3.822144	3.287266	2.076648
24 H	3.001707	2.174225	4.433474	4.790471	4.298219
25 H	3.440669	2.154862	4.643867	4.753194	3.901664
26 H	2.856133	2.163410	4.277300	4.955488	4.563771
27 H	4.971911	4.601530	4.289560	2.826873	2.169295
28 H	4.773577	3.939252	4.629522	3.426855	2.151793
29 H	4.769948	4.199635	4.504590	3.100132	2.172009
30 C	3.737777	4.903135	4.188016	5.632459	6.449168
31 C	6.168692	6.518901	4.969639	3.786304	4.382242
32 H	4.251659	5.165707	2.807446	3.178109	4.342860
33 C	7.211356	7.343523	6.176914	4.827743	5.072729
34 H	4.414688	5.686779	4.522023	5.955369	6.939076
35 H	4.094447	5.146001	4.725695	6.046362	6.786437
36 H	4.065168	5.084789	4.674143	6.169261	6.863931
37 H	6.245607	6.773421	5.042096	4.088708	4.900171
38 H	6.490425	6.890260	5.155115	4.070171	4.728408
39 H	8.187093	8.392301	7.081583	5.802999	6.136785
40 H	7.357601	7.324241	6.370462	4.919578	4.920681
41 H	7.127206	7.197203	6.266430	4.920778	5.069227
	6	7	8	9	10
6 N	0.000000				
7 C	2.468832	0.000000			
8 C	2.452177	4.840729	0.000000		
9 C	3.769319	5.785385	3.141326	0.000000	
10 C	3.754698	3.036083	5.797989	4.959250	0.000000
11 O	4.786414	6.600515	4.365005	1.268259	5.233661
12 O	4.352603	2.851268	6.588386	6.117245	1.258619
13 O	4.752407	4.416981	6.486020	4.937394	1.400800
14 O	4.263085	6.454023	2.829939	1.392204	6.057396
15 C	3.586892	4.648742	4.704311	3.264297	3.254196
16 N	4.732820	6.026638	5.323237	3.341433	4.471975
17 N	3.851907	4.441548	5.349302	4.513178	3.408637
18 C	5.072563	5.789862	6.241151	5.184192	4.668177
19 C	5.537356	6.633857	6.252318	4.639656	5.217816
20 Cl	6.289419	6.634912	7.601908	6.924704	5.851944
21 Cl	7.198329	8.418669	7.570418	5.759943	6.924496
22 H	3.767197	4.692907	4.721239	2.623785	2.687222
23 H	1.013403	2.569842	2.551015	4.588892	4.554807
24 H	3.117550	1.097903	5.298467	6.158517	3.188611
25 H	2.513569	1.100072	4.674745	6.194776	4.093596
26 H	3.282195	1.094360	5.724033	6.401685	2.908093
27 H	3.326373	5.782757	1.092454	2.907995	6.427937
28 H	2.532790	4.750769	1.100454	4.147256	6.214028
29 H	2.996459	5.149642	1.098346	3.474130	6.141243
30 C	6.117576	5.361548	7.948105	6.350606	2.436570
31 C	5.758334	7.932597	4.171066	2.451664	7.288033
32 H	5.112370	6.604422	5.327296	2.864537	4.957151
33 C	6.416274	8.645910	4.428569	3.712005	8.398904
34 H	6.791660	6.311143	8.418756	6.450894	3.301669
35 H	6.402376	5.437343	8.243133	6.775388	2.726991
36 H	6.365725	5.343426	8.379981	7.018641	2.716604
37 H	6.209888	8.186780	4.929866	2.711574	7.195359
38 H	6.114020	8.354261	4.549523	2.692030	7.620397
39 H	7.493513	9.715856	5.506210	4.574499	9.325573
40 H	6.241634	8.583897	4.012827	3.975874	8.653250
41 H	6.317952	8.402780	4.422122	3.978624	8.266709
	11	12	13	14	15
11 O	0.000000				
12 O	6.466370	0.000000			
13 O	4.867562	2.320911	0.000000		
14 O	2.314831	7.130097	6.163391	0.000000	
15 C	3.237575	4.399702	3.147945	4.584732	0.000000

16 N	2.863644	5.653501	4.038514	4.651160	1.390183
17 N	4.569850	4.303559	3.518285	5.760869	1.358805
18 C	4.993650	5.551126	4.511750	6.432820	2.183227
19 C	4.175025	6.274423	4.800824	5.884173	2.240998
20 Cl	6.770965	6.476118	5.797899	8.121863	3.913274
21 Cl	5.051831	7.987439	6.339860	6.877992	3.966497
22 H	2.597868	3.924379	2.335177	3.888491	2.121746
23 H	5.670366	4.966736	5.657180	4.885662	4.474327
24 H	6.986374	2.770302	4.564976	6.740336	5.350357
25 H	7.122075	3.934381	5.450942	6.711073	5.243634
26 H	7.073796	2.480359	4.248894	7.222090	4.702549
27 H	4.017898	7.336030	6.939256	2.414345	4.814442
28 H	5.330462	6.876131	7.048494	3.905253	5.192823
29 H	4.735187	6.865371	6.846445	2.848903	5.464294
30 C	6.164956	2.701117	1.487444	7.567378	4.470516
31 C	2.708785	8.407809	7.190061	1.501818	5.624735
32 H	2.083604	6.193966	4.410581	4.122549	2.132929
33 C	4.199023	9.436335	8.451946	2.416532	6.923698
34 H	6.052904	3.757781	2.044121	7.700915	4.664491
35 H	6.688168	2.671996	2.129167	7.882029	5.273201
36 H	6.871822	2.689044	2.125230	8.272090	4.716197
37 H	2.652376	8.318102	6.942779	2.115980	5.784540
38 H	2.639583	8.796984	7.436333	2.120731	5.516727
39 H	4.837931	10.390212	9.274991	3.387435	7.760425
40 H	4.613294	9.668187	8.827213	2.665924	7.013506
41 H	4.614776	9.218918	8.403342	2.649932	7.215337
	16	17	18	19	20
16 N	0.000000				
17 N	2.265888	0.000000			
18 C	2.215851	1.395680	0.000000		
19 C	1.390754	2.293902	1.388117	0.000000	
20 Cl	3.973889	2.798621	1.795938	2.855194	0.000000
21 Cl	2.799623	4.057135	2.905457	1.792436	3.659251
22 H	2.766147	3.278197	4.215697	4.020132	5.918875
23 H	5.595097	4.566643	5.729967	6.287901	6.765095
24 H	6.717718	5.297648	6.676652	7.442850	7.594663
25 H	6.578591	4.961241	6.235050	7.115196	6.957071
26 H	6.084200	4.232193	5.515049	6.512556	6.141663
27 H	5.150130	5.553443	6.241840	6.049974	7.634807
28 H	5.895082	5.588599	6.463687	6.650735	7.624156
29 H	6.105136	6.202927	7.172474	7.145870	8.590051
30 C	5.219063	4.634036	5.450990	5.790711	6.476195
31 C	5.369348	6.867922	7.346638	6.562019	9.050335
32 H	1.018560	3.232345	3.212620	2.177630	4.936322
33 C	6.772443	8.101807	8.637356	7.927646	10.290982
34 H	5.134168	4.957882	5.561153	5.682363	6.630004
35 H	6.098517	5.505352	6.435810	6.780039	7.480096
36 H	5.519701	4.558191	5.302984	5.858106	6.047588
37 H	5.499162	7.102649	7.600452	6.762293	9.359129
38 H	5.023384	6.718460	6.994374	6.083142	8.643470
39 H	7.466934	8.970066	9.411118	8.590296	11.066714
40 H	6.896345	8.082579	8.587207	7.949313	10.149420
41 H	7.242875	8.393182	9.078487	8.473573	10.756118
	21	22	23	24	25
21 Cl	0.000000				
22 H	5.495807	0.000000			
23 H	7.915583	4.780482	0.000000		
24 H	9.231900	4.980724	3.227451	0.000000	
25 H	8.863946	5.492576	2.169289	1.785464	0.000000
26 H	8.288422	4.978157	3.435741	1.763498	1.786802
27 H	7.163737	4.957566	3.511728	6.294714	5.654021
28 H	7.986318	5.499803	2.210353	5.300023	4.344639
29 H	8.469752	5.086482	3.045902	5.393233	5.001566
30 C	7.177813	3.728462	6.966992	5.368146	6.437663
31 C	7.231248	4.875335	6.369779	8.190502	8.212212
32 H	3.078792	2.757389	6.004833	7.203218	7.167037
33 C	8.594768	6.174196	6.846164	8.839052	8.787175
34 H	6.866158	3.880700	7.699556	6.358765	7.372486

35 H	8.202082	4.220692	7.209262	5.221117	6.536637
36 H	7.248716	4.424349	7.138181	5.445304	6.380566
37 H	7.413405	4.708058	6.916860	8.350193	8.591716
38 H	6.529578	5.109941	6.733457	8.730894	8.619505
39 H	9.080859	6.988693	7.937953	9.898368	9.878575
40 H	8.614889	6.549520	6.542224	8.862319	8.595627
41 H	9.299325	6.229640	6.712617	8.468777	8.549092
	26	27	28	29	30
26 H	0.000000				
27 H	6.595154	0.000000			
28 H	5.614301	1.782388	0.000000		
29 H	6.134471	1.767981	1.785835	0.000000	
30 C	4.994896	8.423523	8.486495	8.268669	0.000000
31 C	8.675630	3.533142	5.195835	4.104353	8.516293
32 H	6.777451	5.025891	6.042089	6.008635	5.592254
33 C	9.498897	3.778512	5.347778	4.099236	9.794381
34 H	5.983794	8.777166	9.038867	8.753434	1.090938
35 H	5.141649	8.801910	8.793234	8.432776	1.094668
36 H	4.767269	8.885571	8.802521	8.786680	1.094358
37 H	8.893006	4.438545	6.003512	4.787223	8.165027
38 H	9.017408	3.738375	5.493132	4.711998	8.764158
39 H	10.552343	4.797966	6.401616	5.186575	10.573096
40 H	9.452027	3.240279	4.787326	3.767975	10.231659
41 H	9.315948	4.013699	5.348406	3.841988	9.711670
	31	32	33	34	35
31 C	0.000000				
32 H	4.620143	0.000000			
33 C	1.525686	6.082147	0.000000		
34 H	8.489261	5.391937	9.840747	0.000000	
35 H	8.841755	6.398981	10.033598	1.807486	0.000000
36 H	9.291648	6.053682	10.573548	1.806393	1.790437
37 H	1.096350	4.666257	2.197861	8.049476	8.434597
38 H	1.096745	4.227482	2.198770	8.665940	9.209667
39 H	2.160780	6.690609	1.099173	10.534625	10.817751
40 H	2.170626	6.304485	1.096817	10.345071	10.517835
41 H	2.168616	6.601195	1.096560	9.824564	9.833882
	36	37	38	39	40
36 H	0.000000				
37 H	9.023173	0.000000			
38 H	9.481969	1.779452	0.000000		
39 H	11.387359	2.545661	2.553977	0.000000	
40 H	10.932664	3.101195	2.536383	1.782672	0.000000
41 H	10.525021	2.540240	3.100246	1.783333	1.782356
	41				
41 H	0.000000				

Stoichiometry C15H17C12N3O4
 Framework group C1[X(C15H17C12N3O4)]

Deg. of freedom 117

Full point group C1 NOp 1

Largest Abelian subgroup C1 NOp 1

Largest concise Abelian subgroup C1 NOp 1

Standard orientation:

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	6	0	-0.190022	2.059608	0.112001
2	6	0	0.175428	2.593202	-1.096338
3	6	0	0.267436	0.658004	0.501572
4	6	0	1.629103	0.345003	-0.140964
5	6	0	1.963085	0.902466	-1.354333
6	7	0	1.146016	1.917741	-1.860858
7	6	0	-0.320127	3.897130	-1.694792
8	6	0	3.179671	0.592812	-2.210115
9	6	0	2.427078	-0.663452	0.568975
10	6	0	-1.133137	2.761794	1.001099
11	8	0	1.954023	-1.440167	1.452951
12	8	0	-1.631010	3.906082	0.837248


```

LinEq1: Iter= 1 NonCon= 1 RMS=7.39D-04 Max=1.26D-02
LinEq1: Iter= 2 NonCon= 1 RMS=2.90D-04 Max=9.80D-03
LinEq1: Iter= 3 NonCon= 1 RMS=1.35D-04 Max=4.39D-03
LinEq1: Iter= 4 NonCon= 1 RMS=4.51D-05 Max=1.33D-03
LinEq1: Iter= 5 NonCon= 1 RMS=2.14D-05 Max=7.32D-04
LinEq1: Iter= 6 NonCon= 1 RMS=6.68D-06 Max=2.47D-04
LinEq1: Iter= 7 NonCon= 1 RMS=2.55D-06 Max=5.41D-05
LinEq1: Iter= 8 NonCon= 1 RMS=9.33D-07 Max=1.93D-05
LinEq1: Iter= 9 NonCon= 1 RMS=4.47D-07 Max=1.25D-05
LinEq1: Iter= 10 NonCon= 1 RMS=1.43D-07 Max=4.69D-06
LinEq1: Iter= 11 NonCon= 1 RMS=5.23D-08 Max=1.34D-06
LinEq1: Iter= 12 NonCon= 1 RMS=2.15D-08 Max=6.23D-07
LinEq1: Iter= 13 NonCon= 1 RMS=7.23D-09 Max=1.72D-07
LinEq1: Iter= 14 NonCon= 1 RMS=3.10D-09 Max=5.90D-08
LinEq1: Iter= 15 NonCon= 1 RMS=1.09D-09 Max=2.07D-08
LinEq1: Iter= 16 NonCon= 1 RMS=4.49D-10 Max=1.25D-08
LinEq1: Iter= 17 NonCon= 1 RMS=1.76D-10 Max=4.79D-09
LinEq1: Iter= 18 NonCon= 1 RMS=6.61D-11 Max=1.87D-09
LinEq1: Iter= 19 NonCon= 0 RMS=2.51D-11 Max=8.64D-10
Linear equations converged to 1.000D-10 1.000D-09 after 19 iterations.
End of Minotr Frequency-dependent properties file 721 does not exist.
End of Minotr Frequency-dependent properties file 722 does not exist.
Calling FoFJK, ICntrl= 2127 FMM=F ISym2X=0 I1Cent= 0 IOpClx= 1 NMat=1 NMatS=1
NMatT=0.
***** Axes restored to original set *****
-----


| Center<br>Number | Atomic<br>Number | Forces (Hartrees/Bohr) |              |              |
|------------------|------------------|------------------------|--------------|--------------|
|                  |                  | X                      | Y            | Z            |
| 1                | 6                | -0.000015447           | -0.000000595 | -0.000017779 |
| 2                | 6                | 0.000025532            | 0.000007489  | 0.000018885  |
| 3                | 6                | 0.000000374            | -0.000000487 | 0.000001445  |
| 4                | 6                | -0.000011367           | -0.000004554 | 0.000013338  |
| 5                | 6                | 0.000012201            | -0.000006686 | -0.000008959 |
| 6                | 7                | -0.000025659           | 0.000006921  | -0.000004244 |
| 7                | 6                | -0.000006888           | -0.000004477 | -0.000005057 |
| 8                | 6                | -0.000000596           | -0.000000033 | -0.000000192 |
| 9                | 6                | 0.000006585            | 0.000004149  | -0.000007421 |
| 10               | 6                | 0.000017166            | -0.000003754 | 0.000005868  |
| 11               | 8                | -0.000005025           | -0.000003621 | 0.000001098  |
| 12               | 8                | -0.000008820           | -0.000000722 | 0.000009851  |
| 13               | 8                | 0.000007734            | 0.000002020  | -0.000005888 |
| 14               | 8                | -0.000003034           | 0.000000086  | 0.000004130  |
| 15               | 6                | 0.000010366            | -0.000003254 | -0.000001766 |
| 16               | 7                | -0.000021296           | 0.000000901  | -0.000019580 |
| 17               | 7                | -0.000005266           | 0.000000468  | -0.000003830 |
| 18               | 6                | 0.000000220            | 0.000004940  | 0.000003320  |
| 19               | 6                | 0.000011299            | 0.000003555  | 0.000006603  |
| 20               | 17               | 0.000001076            | -0.000001997 | 0.000000952  |
| 21               | 17               | -0.000003325           | -0.000001267 | -0.000003121 |
| 22               | 1                | 0.000002172            | -0.000001609 | -0.000001657 |
| 23               | 1                | 0.000001596            | -0.000005833 | -0.000001324 |
| 24               | 1                | -0.000005876           | 0.000002825  | 0.000002761  |
| 25               | 1                | 0.000001083            | 0.000002453  | 0.000000310  |
| 26               | 1                | 0.000001862            | -0.000001255 | 0.000002484  |
| 27               | 1                | 0.000002648            | 0.000000760  | -0.000000257 |
| 28               | 1                | 0.000000403            | 0.000001401  | 0.000000689  |
| 29               | 1                | -0.000002344           | -0.000000272 | -0.000001851 |
| 30               | 6                | -0.000001048           | 0.000000159  | 0.000000304  |
| 31               | 6                | 0.000006269            | -0.000001577 | 0.000001073  |
| 32               | 1                | 0.000006295            | 0.000007149  | 0.000011001  |
| 33               | 6                | -0.00000127            | -0.000000125 | -0.000001152 |
| 34               | 1                | 0.000000853            | -0.000000050 | -0.000000233 |
| 35               | 1                | -0.000000322           | -0.000000615 | -0.000000756 |
| 36               | 1                | -0.000000096           | -0.000000426 | 0.000000553  |
| 37               | 1                | 0.000000093            | -0.000000299 | 0.000000152  |
| 38               | 1                | -0.000000195           | -0.000000459 | -0.000000421 |
| 39               | 1                | 0.000000734            | -0.000000625 | -0.000000099 |


```


R3	2.78568	-0.00002	0.00000	-0.00005	-0.00005	2.78563
R4	2.66095	-0.00002	-0.00001	-0.00004	-0.00005	2.66090
R5	2.86837	0.00001	0.00000	0.00003	0.00003	2.86840
R6	2.90610	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	2.90610
R7	2.85835	0.00001	0.00000	0.00002	0.00002	2.85838
R8	2.07888	0.00000	0.00000	0.00001	0.00000	2.07889
R9	2.60108	-0.00001	0.00000	-0.00001	-0.00001	2.60107
R10	2.77588	0.00000	0.00000	0.00000	0.00001	2.77588
R11	2.64221	0.00001	0.00000	0.00001	0.00001	2.64222
R12	2.87110	0.00000	0.00001	-0.00001	0.00000	2.87110
R13	1.91505	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	1.91505
R14	2.07474	0.00000	-0.00001	-0.00001	-0.00002	2.07472
R15	2.07884	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	2.07884
R16	2.06804	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	2.06804
R17	2.06444	0.00000	0.00000	0.00001	0.00001	2.06445
R18	2.07956	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	2.07956
R19	2.07557	0.00000	0.00000	0.00000	-0.00001	2.07557
R20	2.39666	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	2.39666
R21	2.63088	0.00001	0.00000	0.00002	0.00002	2.63090
R22	2.37844	0.00001	0.00000	0.00002	0.00002	2.37846
R23	2.64713	0.00001	0.00000	0.00000	0.00000	2.64713
R24	3.93744	0.00001	0.00016	0.00021	0.00037	3.93781
R25	2.81086	0.00000	0.00000	0.00001	0.00001	2.81087
R26	2.83802	0.00001	-0.00001	0.00002	0.00001	2.83804
R27	2.62706	0.00000	0.00000	-0.00001	-0.00001	2.62706
R28	2.56777	0.00000	0.00000	0.00001	0.00001	2.56778
R29	2.62814	0.00000	0.00000	0.00001	0.00001	2.62815
R30	1.92480	0.00000	0.00000	-0.00001	-0.00001	1.92479
R31	2.63745	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	2.63745
R32	2.62316	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	2.62316
R33	3.39383	0.00000	0.00000	-0.00001	-0.00001	3.39382
R34	3.38721	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	3.38721
R35	2.06157	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	2.06157
R36	2.06862	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	2.06862
R37	2.06804	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	2.06803
R38	2.88313	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	2.88313
R39	2.07180	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	2.07180
R40	2.07255	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	2.07255
R41	2.07714	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	2.07714
R42	2.07268	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	2.07268
R43	2.07220	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	2.07220
A1	2.09795	0.00000	0.00001	0.00001	0.00002	2.09797
A2	2.11402	0.00000	-0.00001	0.00002	0.00000	2.11403
A3	2.06650	0.00000	0.00001	-0.00003	-0.00002	2.06648
A4	2.06658	0.00000	0.00001	0.00000	0.00001	2.06659
A5	2.20808	0.00000	-0.00001	-0.00001	-0.00003	2.20805
A6	2.00760	0.00000	0.00001	0.00002	0.00002	2.00763
A7	1.92404	0.00000	0.00001	-0.00001	0.00000	1.92404
A8	1.91918	0.00000	-0.00002	-0.00004	-0.00006	1.91911
A9	1.88932	0.00000	0.00001	0.00001	0.00002	1.88934
A10	1.96106	0.00001	0.00001	0.00004	0.00005	1.96111
A11	1.89093	0.00000	0.00000	-0.00001	-0.00001	1.89092
A12	1.87716	0.00000	0.00000	0.00001	0.00001	1.87717
A13	2.09524	0.00000	0.00001	0.00003	0.00004	2.09528
A14	2.00292	-0.00001	-0.00001	-0.00002	-0.00003	2.00289
A15	2.18008	0.00000	0.00001	-0.00002	0.00000	2.18007
A16	2.06195	0.00000	0.00000	0.00000	0.00001	2.06196
A17	2.22470	0.00000	0.00000	-0.00001	-0.00001	2.22468
A18	1.99530	0.00000	-0.00001	0.00001	0.00000	1.99531
A19	2.15847	0.00000	0.00001	0.00001	0.00002	2.15849
A20	2.05405	0.00000	0.00000	0.00001	0.00001	2.05407
A21	2.05953	0.00000	0.00000	-0.00002	-0.00002	2.05951
A22	1.94487	0.00001	0.00001	0.00007	0.00009	1.94496
A23	1.91576	0.00000	0.00000	-0.00002	-0.00002	1.91574
A24	1.93351	0.00000	-0.00002	-0.00002	-0.00004	1.93347
A25	1.89624	0.00000	0.00001	0.00001	0.00002	1.89627
A26	1.86939	0.00000	0.00000	-0.00002	-0.00001	1.86938
A27	1.90284	0.00000	0.00000	-0.00003	-0.00003	1.90281

A28	1.94198	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	1.94198
A29	1.90945	0.00000	0.00000	0.00001	0.00001	1.90946
A30	1.93953	0.00000	0.00000	-0.00002	-0.00003	1.93950
A31	1.89786	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	1.89786
A32	1.87811	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	1.87811
A33	1.89578	0.00000	0.00000	0.00001	0.00001	1.89579
A34	2.15878	-0.00001	0.00000	-0.00002	-0.00002	2.15876
A35	2.01454	0.00000	0.00001	-0.00001	0.00000	2.01454
A36	2.10952	0.00001	-0.00002	0.00004	0.00002	2.10954
A37	2.22388	0.00000	-0.00001	0.00000	-0.00001	2.22387
A38	1.93940	-0.00001	0.00001	-0.00003	-0.00002	1.93938
A39	2.11986	0.00001	0.00000	0.00003	0.00003	2.11989
A40	2.00739	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	2.00739
A41	2.02029	0.00001	-0.00001	0.00004	0.00003	2.02032
A42	2.14060	0.00001	0.00002	0.00006	0.00007	2.14067
A43	2.20483	0.00000	-0.00002	-0.00004	-0.00005	2.20478
A44	1.93771	0.00000	0.00000	-0.00002	-0.00002	1.93769
A45	1.87420	0.00000	0.00000	0.00002	0.00002	1.87421
A46	2.16238	0.00000	0.00001	-0.00001	0.00001	2.16239
A47	2.24579	0.00000	-0.00001	-0.00003	-0.00004	2.24575
A48	1.83001	0.00000	0.00000	0.00001	0.00001	1.83002
A49	1.93693	0.00000	0.00000	-0.00001	-0.00001	1.93693
A50	2.12987	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	2.12987
A51	2.21638	0.00000	0.00000	0.00001	0.00001	2.21639
A52	1.84592	0.00000	0.00000	-0.00001	0.00000	1.84592
A53	2.14090	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	2.14090
A54	2.29635	0.00000	0.00000	0.00001	0.00001	2.29636
A55	1.81218	0.00000	0.00000	-0.00001	-0.00001	1.81217
A56	1.92273	0.00000	0.00000	0.00001	0.00000	1.92273
A57	1.91758	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	1.91758
A58	1.94748	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	1.94748
A59	1.94612	0.00000	0.00000	0.00000	0.00001	1.94613
A60	1.91555	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	1.91555
A61	1.84853	0.00000	0.00000	0.00001	0.00001	1.84854
A62	1.88570	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	1.88570
A63	1.89174	0.00000	0.00000	0.00001	0.00001	1.89174
A64	1.97019	0.00000	0.00000	-0.00001	-0.00001	1.97018
A65	1.97106	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	1.97105
A66	1.89305	0.00000	0.00000	-0.00001	-0.00001	1.89304
A67	1.91540	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	1.91541
A68	1.93140	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	1.93140
A69	1.92889	0.00000	0.00000	0.00001	0.00000	1.92889
A70	1.89440	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	1.89440
A71	1.89576	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	1.89576
A72	1.89723	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	1.89723
D1	-0.17717	0.00000	0.00000	-0.00009	-0.00009	-0.17726
D2	3.01305	0.00000	-0.00002	-0.00018	-0.00020	3.01285
D3	3.07021	0.00000	-0.00001	-0.00009	-0.00010	3.07011
D4	-0.02276	0.00000	-0.00003	-0.00018	-0.00021	-0.02297
D5	0.53089	0.00000	-0.00005	-0.00002	-0.00007	0.53082
D6	-1.64070	0.00000	-0.00005	-0.00004	-0.00008	-1.64079
D7	2.59636	0.00000	-0.00004	-0.00003	-0.00007	2.59629
D8	-2.71364	0.00000	-0.00004	-0.00002	-0.00006	-2.71370
D9	1.39795	0.00000	-0.00003	-0.00004	-0.00007	1.39788
D10	-0.64817	0.00000	-0.00003	-0.00003	-0.00006	-0.64823
D11	-0.08635	0.00000	0.00010	0.00003	0.00013	-0.08622
D12	3.06531	0.00000	0.00009	0.00002	0.00011	3.06542
D13	-3.12401	0.00000	0.00009	0.00003	0.00012	-3.12389
D14	0.02764	0.00000	0.00007	0.00002	0.00010	0.02774
D15	-0.24573	0.00000	0.00005	0.00014	0.00020	-0.24554
D16	3.05911	0.00000	0.00001	0.00013	0.00014	3.05925
D17	2.85274	0.00000	0.00007	0.00022	0.00029	2.85302
D18	-0.12560	0.00000	0.00002	0.00021	0.00023	-0.12537
D19	1.24280	0.00000	-0.00018	-0.00027	-0.00045	1.24235
D20	-2.93899	0.00000	-0.00017	-0.00021	-0.00038	-2.93937
D21	-0.83665	0.00000	-0.00018	-0.00028	-0.00046	-0.83712
D22	-1.85160	0.00000	-0.00020	-0.00036	-0.00055	-1.85215
D23	0.24980	0.00000	-0.00018	-0.00030	-0.00048	0.24932

	Item	Value	Threshold	Converged?
D24	2.35214	0.00000	-0.00019	-0.00037
D25	-0.53692	0.00000	0.00005	0.00010
D26	2.70622	0.00000	0.00001	0.00015
D27	1.61038	0.00000	0.00004	0.00007
D28	-1.42966	0.00000	-0.00001	0.00012
D29	-2.60140	0.00000	0.00004	0.00009
D30	0.64174	0.00000	-0.00001	0.00015
D31	-2.94173	0.00000	0.00005	0.00019
D32	0.18884	0.00000	0.00005	0.00016
D33	1.19142	0.00000	0.00005	0.00020
D34	-1.96119	0.00000	0.00005	0.00017
D35	-0.88805	0.00000	0.00005	0.00018
D36	2.24252	0.00000	0.00005	0.00016
D37	0.18663	0.00000	-0.00001	-0.00005
D38	-3.01160	0.00000	-0.00002	-0.00005
D39	-3.06746	0.00000	0.00004	-0.00011
D40	0.01750	0.00000	0.00002	-0.00011
D41	0.26534	0.00000	-0.00002	-0.00024
D42	-2.84803	0.00000	-0.00004	-0.00019
D43	-2.76904	0.00000	-0.00007	-0.00019
D44	0.40077	0.00000	-0.00009	-0.00013
D45	0.23848	0.00000	-0.00005	-0.00006
D46	-3.06684	0.00000	0.00000	-0.00005
D47	-2.85379	0.00000	-0.00004	-0.00007
D48	0.12407	0.00000	0.00001	-0.00005
D49	0.61499	0.00000	0.00010	0.00023
D50	2.71238	0.00000	0.00010	0.00023
D51	-1.47755	0.00000	0.00010	0.00024
D52	-2.58140	0.00000	0.00008	0.00023
D53	-0.48401	0.00000	0.00009	0.00024
D54	1.60924	0.00000	0.00008	0.00024
D55	-3.12774	0.00000	0.00000	-0.00001
D56	0.04121	0.00000	-0.00002	0.00004
D57	-3.10724	0.00000	0.00002	-0.00008
D58	0.04372	0.00000	0.00001	-0.00009
D59	3.13264	0.00000	-0.00002	-0.00018
D60	-1.06311	0.00000	-0.00002	-0.00019
D61	1.04932	0.00000	-0.00002	-0.00018
D62	3.11330	0.00000	-0.00001	-0.00002
D63	-1.05441	0.00000	-0.00001	-0.00002
D64	0.99358	0.00000	-0.00001	-0.00003
D65	3.13548	0.00000	0.00001	0.00008
D66	-0.04629	0.00000	-0.00003	-0.00030
D67	0.00340	0.00000	0.00001	0.00011
D68	3.10481	0.00000	-0.00003	-0.00027
D69	-3.13334	0.00000	0.00000	-0.00006
D70	-0.00169	0.00000	0.00000	-0.00009
D71	-0.00360	0.00000	-0.00002	-0.00008
D72	3.13447	0.00000	0.00000	0.00006
D73	-3.10247	0.00001	0.00003	0.00033
D74	0.03560	0.00001	0.00005	0.00047
D75	-0.00066	0.00000	-0.00001	0.00004
D76	-3.14131	0.00000	0.00000	0.00003
D77	0.00269	0.00000	0.00002	0.00003
D78	-3.13494	0.00000	-0.00001	-0.00013
D79	-3.13991	0.00000	0.00001	0.00004
D80	0.00564	0.00000	-0.00002	-0.00012
D81	3.12745	0.00000	0.00000	-0.00002
D82	-1.06546	0.00000	0.00000	-0.00002
D83	1.03708	0.00000	0.00000	-0.00002
D84	1.06746	0.00000	0.00000	-0.00002
D85	-3.12545	0.00000	0.00000	-0.00002
D86	-1.02291	0.00000	0.00000	-0.00002
D87	-1.08791	0.00000	0.00000	0.00000
D88	1.00236	0.00000	0.00000	0.00000
D89	3.10490	0.00000	0.00000	0.00000

RMS Force 0.000004 0.000300 YES
 Maximum Displacement 0.001732 0.001800 YES
 RMS Displacement 0.000344 0.001200 YES

Predicted change in Energy=-1.401035D-08

Optimization completed.

-- Stationary point found.

Mulliken atomic charges:

	1
1 C	-0.142642
2 C	0.492201
3 C	-0.265258
4 C	-0.179025
5 C	0.489875
6 N	-1.051844
7 C	-0.456850
8 C	-0.452245
9 C	0.839478
10 C	0.839184
11 O	-0.674911
12 O	-0.636240
13 O	-0.753037
14 O	-0.755542
15 C	0.635587
16 N	-0.920582
17 N	-0.534788
18 C	-0.130146
19 C	0.056537
20 Cl	0.154196
21 Cl	0.201604
22 H	0.272377
23 H	0.397960
24 H	0.215360
25 H	0.145024
26 H	0.243075
27 H	0.216798
28 H	0.161602
29 H	0.214228
30 C	-0.123261
31 C	0.021805
32 H	0.477345
33 C	-0.465556
34 H	0.185510
35 H	0.184515
36 H	0.193617
37 H	0.197945
38 H	0.191829
39 H	0.165394
40 H	0.170415
41 H	0.178469

Sum of Mulliken atomic charges = 0.00000

Mulliken charges with hydrogens summed into heavy atoms:

	1
1 C	-0.142642
2 C	0.492201
3 C	0.007119
4 C	-0.179025
5 C	0.489875
6 N	-0.653884
7 C	0.146608
8 C	0.140383
9 C	0.839478
10 C	0.839184
11 O	-0.674911
12 O	-0.636240
13 O	-0.753037
14 O	-0.755542
15 C	0.635587

16 N -0.443237
 17 N -0.534788
 18 C -0.130146
 19 C 0.056537
 20 Cl 0.154196
 21 Cl 0.201604
 30 C 0.440381
 31 C 0.411579
 33 C 0.048722

Sum of Mulliken atomic spin densities = 0.00000
 Electronic spatial extent (au): <R**2>= 10106.0473
 Charge= 0.0000 electrons
 Dipole moment (field-independent basis, Debye):
 X= 8.3879 Y= 1.3806 Z= -1.4505 Tot=
 8.6236
 Quadrupole moment (field-independent basis, Debye-Ang):
 XX= -147.7498 YY= -161.2553 ZZ= -142.0427
 XY= -4.8734 XZ= -14.6637 YZ= -7.6005
 Traceless Quadrupole moment (field-independent basis, Debye-Ang):
 XX= 2.5995 YY= -10.9060 ZZ= 8.3065
 XY= -4.8734 XZ= -14.6637 YZ= -7.6005
 Octapole moment (field-independent basis, Debye-Ang**2):
 XXX= 128.2082 YYY= -34.3446 ZZZ= 10.7870 XYY=
 56.7292
 XXY= -20.4257 XXZ= 35.8371 XZZ= 3.5899 YZZ=
 50.3064
 YYZ= -19.3289 XYZ= -20.6441
 Hexadecapole moment (field-independent basis, Debye-Ang**3):
 XXXX= -6301.9354 YYYY= -4961.1711 ZZZZ= -1612.6392 XXXY=
 -293.9011
 XXXZ= 1.1379 YYYYX= 61.3345 YYYZ= -122.3165 ZZZX=
 -145.6888
 ZZZY= 30.7016 XXYY= -1889.5218 XXZZ= -1304.8251 YYZZ=
 -967.1415
 XXYZ= -19.1092 YYXZ= -28.0570 ZZXY= -48.0659
 N-N= 2.418948102476D+03 E-N=-1.419368397485D+04 KE= 2.936859991198D+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 N(14)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
7 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
8 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
9 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
10 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
11 O(17)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
12 O(17)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
13 O(17)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
14 O(17)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
15 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
16 N(14)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
17 N(14)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
18 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
19 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
20 Cl(35)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
21 Cl(35)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
22 H(1)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
23 H(1)	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 H(1)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
27 H(1)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
28 H(1)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
29 H(1)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000

30 C(13)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
31 C(13)	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 H(1)	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
41 H(1)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
<hr/>				
Center		Spin Dipole Couplings		
		3XX-RR	3YY-RR	3ZZ-RR
<hr/>				
1 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
2 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
3 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
4 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
5 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
6 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
7 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
8 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
9 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
10 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
11 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
12 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
13 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
14 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
15 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
16 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
17 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
18 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
19 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
20 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
21 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
22 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
23 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
24 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
25 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
26 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
27 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
28 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
29 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
30 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
31 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
32 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
33 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
34 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
35 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
36 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
37 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
38 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
39 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
40 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
41 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
<hr/>				
		XY	XZ	YZ
<hr/>				
1 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
2 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
3 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
4 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
5 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
6 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
7 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	
8 Atom	0.00000	0.00000	0.00000	

9	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
10	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
11	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
12	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
13	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
14	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
15	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
16	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
17	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
18	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
19	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
20	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
21	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
22	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
23	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
24	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
25	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
26	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
27	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
28	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
29	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
30	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
31	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
32	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
33	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
34	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
35	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
36	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
37	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
38	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
39	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
40	Atom	0.000000	0.000000	0.000000
41	Atom	0.000000	0.000000	0.000000

Anisotropic Spin Dipole Couplings in Principal Axis System

Atom	a.u.	MegaHertz	Gauss	10(-4) cm-1	Axes		
1 C(13)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	1.0000	0.0000
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0000	1.0000
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0000	1.0000
2 C(13)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	1.0000	0.0000
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0000	1.0000
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0000	1.0000
3 C(13)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	1.0000	0.0000
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0000	1.0000
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0000	1.0000
4 C(13)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	1.0000	0.0000
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0000	1.0000
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0000	1.0000
5 C(13)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	1.0000	0.0000
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0000	1.0000
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0000	1.0000
6 N(14)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	1.0000	0.0000
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0000	1.0000
	Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0000	1.0000
7 C(13)	Baa	0.0000	0.000	0.000	0.000	1.0000	0.0000
	Bbb	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0000	1.0000

Bcc	0.0000	0.000	0.000	0.000	0.0000	0.0000	1.0000
-----	--------	-------	-------	-------	--------	--------	--------

WE HAVE LEFT UNDONE THOSE THINGS WHICH WE OUGHT TO HAVE DONE,
AND WE HAVE DONE THOSE THINGS WHICH WE OUGHT NOT TO HAVE DONE.

BOOK OF COMMON PRAYER

Job cpu time: 1 days 14 hours 21 minutes 10.0 seconds.
File lengths (MBytes): RWF= 12756 Int= 0 D2E= 0 Chk= 10 Scr= 1
Normal termination of Gaussian 09 at Sun Apr 12 00:55:59 2015.

Lampiran 3. Gaussian Output File Hasil Perhitungan Energi HOMO LUMO

Entering Link 1 = C:\G09W\l1.exe PID= 3476.

Copyright (c) 1988,1990,1992,1993,1995,1998,2003,2009, Gaussian, Inc.
All Rights Reserved.

This is part of the Gaussian(R) 09 program. It is based on the Gaussian(R) 03 system (copyright 2003, Gaussian, Inc.), the Gaussian(R) 98 system (copyright 1998, Gaussian, Inc.), the Gaussian(R) 94 system (copyright 1995, Gaussian, Inc.), the Gaussian 92(TM) system (copyright 1992, Gaussian, Inc.), the Gaussian 90(TM) system (copyright 1990, Gaussian, Inc.), the Gaussian 88(TM) system (copyright 1988, Gaussian, Inc.), the Gaussian 86(TM) system (copyright 1986, Carnegie Mellon University), and the Gaussian 82(TM) system (copyright 1983, Carnegie Mellon University). Gaussian is a federally registered trademark of Gaussian, Inc.

This software contains proprietary and confidential information, including trade secrets, belonging to Gaussian, Inc.

This software is provided under written license and may be used, copied, transmitted, or stored only in accord with that written license.

The following legend is applicable only to US Government contracts under FAR:

RESTRICTED RIGHTS LEGEND

Use, reproduction and disclosure by the US Government is subject to restrictions as set forth in subparagraphs (a) and (c) of the Commercial Computer Software - Restricted Rights clause in FAR 52.227-19.

Gaussian, Inc.
340 Quinnipiac St., Bldg. 40, Wallingford CT 06492

Warning -- This program may not be used in any manner that competes with the business of Gaussian, Inc. or will provide assistance to any competitor of Gaussian, Inc. The licensee of this program is prohibited from giving any competitor of Gaussian, Inc. access to this program. By using this program, the user acknowledges that Gaussian, Inc. is engaged in the business of creating and licensing software in the field of computational chemistry and represents and warrants to the licensee that it is not a competitor of Gaussian, Inc. and that it will not use this program in any manner prohibited above.

Cite this work as: Gaussian
09, Revision A.02,
M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria,
M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A.
Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H. P. Hratchian, A. F.
Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada,
M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y.
Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J. A. Montgomery, Jr.,
J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers,
K. N. Kudin, V. N. Staroverov, R. Kobayashi, J. Normand,
K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M.
Cossi, N. Rega, J. M. Millam, M. Klene, J. E. Knox, J. B. Cross, V.
Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann,
O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski,

R. L. Martin, K. Morokuma, V. G. Zakrzewski, G. A. Voth,
 P. Salvador, J. J. Dannenberg, S. Dapprich, A. D. Daniels,
 O. Farkas, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, J. Cioslowski,
 and D. J. Fox, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.

```
*****
Gaussian 09: IA32W-G09RevA.02 11-Jun-2009
05-Apr-2015
*****
%chk=/Moh Syaifudin/Skripsi/Homo Lumo DFT/h1 dft 631g dhp 1.chk
%mem=6MW
%nproc=1
Will use up to 1 processors via shared memory.
-----
# freq ub3lyp/6-31g guess=mix geom=connectivity pop=reg
-----
1/10=4,30=1,38=1,57=2/1,3;
2/12=2,17=6,18=5,40=1/2;
3/5=1,6=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;
-----
h1 dft 631g dhp 1
-----
Symbolic Z-matrix:
Charge = 0 Multiplicity = 1
C
C      1    B1
C      1    B2      2    A1
C      3    B3      1    A2      2    D1      0
C      4    B4      3    A3      1    D2      0
N      5    B5      4    A4      3    D3      0
C      2    B6      1    A5      3    D4      0
C      5    B7      4    A6      3    D5      0
C      4    B8      3    A7      1    D6      0
C      1    B9      2    A8      6    D7      0
O      9    B10     4    A9      3    D8      0
O      10   B11     1    A10     2    D9      0
O      10   B12     1    A11     2    D10     0
O      9    B13     4    A12     3    D11     0
C      3    B14     1    A13     2    D12     0
N      15   B15     3    A14     1    D13     0
N      15   B16     3    A15     1    D14     0
C      17   B17    15    A16     3    D15     0
C      18   B18    17    A17    15    D16     0
Cl     18   B19    17    A18    15    D17     0
Cl     19   B20    18    A19    17    D18     0
H      3    B21     1    A20     2    D19     0
H      6    B22     5    A21     4    D20     0
H      7    B23     2    A22     1    D21     0
H      7    B24     2    A23     1    D22     0
H      7    B25     2    A24     1    D23     0
H      8    B26     5    A25     4    D24     0
H      8    B27     5    A26     4    D25     0
H      8    B28     5    A27     4    D26     0
C      13   B29    10    A28     1    D27     0
C      14   B30     9    A29     4    D28     0
H      16   B31    15    A30     3    D29     0
C      31   B32    14    A31     9    D30     0
H      30   B33    13    A32    10    D31     0
H      30   B34    13    A33    10    D32     0
```

H	30	B35	13	A34	10	D33	0
H	31	B36	14	A35	9	D34	0
H	31	B37	14	A36	9	D35	0
H	33	B38	31	A37	14	D36	0
H	33	B39	31	A38	14	D37	0
H	33	B40	31	A39	14	D38	0
Variables:							
B1					1.35904		
B2					1.52016		
B3					1.53552		
B4					1.36714		
B5					1.38533		
B6					1.5041		
B7					1.50648		
B8					1.45219		
B9					1.45769		
B10					1.25464		
B11					1.2444		
B12					1.38415		
B13					1.37781		
B14					1.51186		
B15					1.3747		
B16					1.33674		
B17					1.37693		
B18					1.36834		
B19					1.78572		
B20					1.77967		
B21					1.08969		
B22					1.00588		
B23					1.08943		
B24					1.09179		
B25					1.08785		
B26					1.08445		
B27					1.09176		
B28					1.09109		
B29					1.4665		
B30					1.4846		
B31					1.01152		
B32					1.51471		
B33					1.08394		
B34					1.08799		
B35					1.08777		
B36					1.08871		
B37					1.08955		
B38					1.09181		
B39					1.09005		
B40					1.08987		
A1					120.28419		
A2					111.54328		
A3					119.95244		
A4					118.45283		
A5					126.47511		
A6					127.44873		
A7					114.5349		
A8					120.83872		
A9					123.33319		
A10					126.94789		
A11					111.76148		
A12					116.18529		
A13					110.52913		
A14					122.4573		
A15					126.84944		
A16					105.62831		
A17					110.69339		
A18					122.10763		
A19					131.79507		
A20					108.62042		
A21					117.7045		

A22	111.27326
A23	110.86426
A24	110.78889
A25	111.6143
A26	110.40225
A27	110.85075
A28	116.55318
A29	116.93893
A30	123.65174
A31	106.88082
A32	104.75469
A33	110.30647
A34	110.02366
A35	108.06422
A36	108.20234
A37	109.75924
A38	111.19644
A39	110.90062
D1	25.75951
D2	-25.66852
D3	8.64069
D4	172.49353
D5	-173.16928
D6	157.65179
D7	175.86036
D8	8.42536
D9	-1.12721
D10	179.55662
D11	-170.60375
D12	-98.70689
D13	-162.84343
D14	16.84713
D15	-179.76297
D16	-0.15414
D17	179.93339
D18	-179.6421
D19	144.76828
D20	-175.8576
D21	63.41786
D22	-175.42355
D23	-54.21632
D24	39.26517
D25	160.39617
D26	-79.58771
D27	-178.22321
D28	-179.79252
D29	-4.51576
D30	-176.41522
D31	-179.78383
D32	-60.03214
D33	60.76908
D34	-54.91097
D35	62.03128
D36	179.49567
D37	-60.86416
D38	59.96285

Population analysis using the SCF density.

Orbital symmetries:

Alpha Orbitals:

(A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

Virtual (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

Beta Orbital:

Occupied (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

Virtual (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

(A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A) (A)

Alpha Molecular Orbital Coefficients:

	93	94	95	96	97
	0	0	0	0	0
Eigenvalues --	-0.27487	-0.26784	-0.26081	-0.22241	-0.21958
11 C 1S	-0.00103	-0.01697	-0.01533	-0.00325	-0.00195
2 2S	0.00268	0.02640	0.03164	0.01264	0.01109
3 2PX	0.02334	0.01760	-0.19274	-0.07590	-0.19203
4 2PY	0.03058	0.06012	0.03166	-0.07565	-0.13730
5 2PZ	0.01746	0.10270	-0.01638	-0.06891	-0.16277
6 3S	-0.01361	0.14877	0.10731	-0.03017	0.00429
7 3PX	-0.01679	-0.01694	-0.16822	-0.08733	-0.13783
8 3PY	0.03348	0.03666	0.05271	-0.04880	-0.12267
9 3PZ	0.04594	0.08416	0.02366	-0.01864	-0.14689
102 C 1S	-0.00156	0.00167	0.00137	-0.00137	-0.00239
11 2S	0.00911	-0.01542	0.00019	0.00264	0.01288
12 2PX	0.03620	0.08306	-0.08731	-0.06273	-0.07924
13 2PY	0.02000	0.06549	-0.07078	-0.04941	-0.07993
14 2PZ	0.03161	0.03616	-0.07721	-0.03808	-0.05638
15 3S	0.01535	0.03663	-0.00387	0.03246	-0.03443
16 3PX	0.02483	0.04385	-0.06563	-0.05380	-0.08692
17 3PY	0.01404	0.02253	-0.05007	-0.06143	-0.03078
18 3PZ	0.03754	0.03317	-0.03010	-0.01436	-0.05412
193 C 1S	-0.00442	0.01823	0.00339	-0.00466	-0.00482
20 2S	0.00309	-0.01751	-0.01586	-0.00079	0.00227
21 2PX	-0.01297	0.05789	0.02871	-0.01079	0.05174

22		2PY	-0.02523	0.01330	-0.08168	0.02518	0.03472
23		2PZ	-0.01616	0.00982	-0.02614	0.07610	0.04674
24		3S	0.06757	-0.19475	0.05324	0.07533	0.05813
25		3PX	-0.00574	0.08531	-0.02261	0.02208	-0.01242
26		3PY	0.00618	0.01514	-0.04732	0.02183	-0.02382
27		3PZ	-0.05071	0.03215	-0.06845	0.01106	0.03630
28	4	C 1S	-0.00546	-0.00413	-0.00815	0.01113	-0.01041
29		2S	0.00899	0.00586	0.01751	-0.02695	0.02693
30		2PX	-0.03553	-0.07422	-0.01048	0.03292	-0.15083
31		2PY	-0.04912	-0.07605	0.09717	-0.06353	-0.18235
32		2PZ	-0.02396	-0.05489	0.07387	-0.07403	-0.14319
33		3S	0.03067	0.01816	0.02265	-0.05906	0.04501
34		3PX	-0.00356	-0.06148	0.00374	0.05359	-0.12890
35		3PY	-0.05655	-0.04980	0.05986	-0.10038	-0.13610
36		3PZ	-0.00707	-0.05662	0.07590	-0.05175	-0.13138
37	5	C 1S	0.00200	0.00124	-0.00105	-0.00377	-0.00019
38		2S	-0.00116	-0.00474	0.00386	0.00713	0.00646
39		2PX	-0.02815	-0.04800	0.07012	-0.00507	-0.05798
40		2PY	-0.04066	-0.07644	0.08389	0.00514	-0.06082
41		2PZ	-0.04092	-0.06593	0.07215	0.02752	-0.05401
42		3S	-0.00796	-0.01672	0.02535	0.02617	-0.04617
43		3PX	-0.01653	-0.03447	0.04680	-0.02080	-0.01143
44		3PY	-0.02596	-0.05234	0.05605	0.00189	-0.08471
45		3PZ	-0.02181	-0.03864	0.05096	0.02302	-0.04593
46	6	N 1S	-0.00125	-0.00223	-0.00463	-0.00108	0.00019
47		2S	0.00269	0.00579	0.01009	0.00177	-0.00812
48		2PX	-0.00378	0.00524	-0.02679	0.07662	0.17980
49		2PY	-0.00025	0.02811	0.01790	0.06228	0.19203
50		2PZ	0.00244	0.01626	0.00748	0.05685	0.14302
51		3S	0.01268	0.00891	0.03465	0.00374	0.06370
52		3PX	-0.00183	0.01758	-0.02753	0.07046	0.17311
53		3PY	0.00164	0.01793	0.01787	0.06789	0.17296
54		3PZ	0.00461	0.00781	0.00787	0.04848	0.16175
55	7	C 1S	-0.00025	-0.00601	-0.00600	0.00089	0.00359
56		2S	-0.00031	0.01471	0.01218	-0.00283	-0.00875
57		2PX	-0.01393	-0.05435	-0.01728	0.01204	0.00711
58		2PY	-0.00339	-0.00165	0.05430	0.01113	0.02726
59		2PZ	-0.00823	0.01027	0.04558	0.00641	0.00441
60		3S	0.00876	0.02631	0.04565	0.00667	-0.02612
61		3PX	-0.00639	-0.00956	0.00143	0.01844	0.02343
62		3PY	-0.00230	0.01219	0.04199	0.00672	0.03011
63		3PZ	-0.00953	-0.01931	-0.01556	0.00883	0.00972
64	8	C 1S	0.00027	-0.00093	-0.00296	0.00474	0.00177
65		2S	-0.00050	0.00126	0.00642	-0.01026	-0.00616
66		2PX	0.00522	0.01004	-0.03171	0.01864	0.01755
67		2PY	0.01819	0.02387	-0.02322	-0.00416	0.00843
68		2PZ	0.01080	0.01882	-0.01116	-0.01995	0.00021
69		3S	-0.00206	0.00864	0.01075	-0.01533	-0.01286
70		3PX	-0.00061	0.00074	-0.01522	0.01280	0.01289
71		3PY	0.01073	0.01376	-0.00935	0.01118	0.04182
72		3PZ	0.00506	0.00964	-0.00551	-0.00856	-0.00819
73	9	C 1S	0.00032	0.00296	0.00642	-0.00095	0.00326
74		2S	-0.00168	-0.00940	-0.01303	-0.00027	-0.00799
75		2PX	0.00477	0.00452	0.01548	-0.00116	-0.01208
76		2PY	0.01101	-0.00804	-0.01598	-0.00964	-0.04942
77		2PZ	0.01207	-0.00363	0.02425	-0.01295	-0.03702
78		3S	-0.00976	0.00715	-0.04188	-0.01528	0.01220
79		3PX	0.02033	-0.00581	0.00099	0.00661	-0.01487
80		3PY	-0.01571	-0.00066	-0.00907	-0.02747	-0.02463
81		3PZ	0.02080	0.00300	0.00765	0.01884	-0.00524
82	10	C 1S	0.00016	-0.00329	-0.01056	0.00294	0.00057
83		2S	-0.00054	0.00193	0.03487	-0.00190	-0.00215
84		2PX	-0.00228	0.01160	0.03968	-0.02265	-0.02926
85		2PY	-0.00182	0.00341	-0.02327	-0.00382	-0.01632
86		2PZ	-0.00251	-0.01002	-0.03565	-0.00507	-0.01518
87		3S	-0.02211	0.01916	-0.00444	-0.04743	0.01654
88		3PX	-0.02345	-0.05850	-0.06233	-0.00732	0.00250
89		3PY	-0.00221	-0.04860	-0.04970	0.00972	-0.00665

90		3PZ	0.01884	0.10034	0.14411	-0.00161	-0.01001	
91	11	O	1S	0.00122	-0.00132	0.00126	0.00209	0.00135
92		2S	-0.00221	0.00321	-0.00291	-0.00399	-0.00184	
93		2PX	0.07916	0.01697	-0.03974	0.04690	0.06182	
94		2PY	0.02325	0.03301	-0.02195	0.01995	0.06075	
95		2PZ	0.06056	0.05136	-0.05100	0.03425	0.09576	
96		3S	-0.01344	0.00126	-0.00383	-0.02046	-0.01973	
97		3PX	0.05256	0.01123	-0.02950	0.02988	0.04706	
98		3PY	0.01567	0.02366	-0.01685	0.01386	0.04940	
99		3PZ	0.04495	0.03916	-0.03911	0.02925	0.08340	
100	12	O	1S	0.00001	0.00137	0.00113	-0.00037	0.00008
101		2S	-0.00007	-0.00407	-0.00676	0.00053	-0.00038	
102		2PX	-0.06723	-0.19941	-0.20222	0.07049	0.12060	
103		2PY	-0.03599	-0.08255	-0.03487	0.03358	0.07683	
104		2PZ	-0.01267	0.26280	0.42054	0.02201	0.06360	
105		3S	-0.00018	0.00508	0.01861	0.00503	0.00015	
106		3PX	-0.04634	-0.13179	-0.12903	0.05427	0.09225	
107		3PY	-0.02590	-0.05590	-0.02850	0.02345	0.05946	
108		3PZ	-0.01371	0.17295	0.28390	0.01785	0.05104	
109	13	O	1S	0.00174	0.00434	0.00618	-0.00101	0.00297
110		2S	-0.00364	0.00077	-0.00087	0.00170	-0.00785	
111		2PX	0.04696	0.01487	0.04847	-0.00813	0.04128	
112		2PY	0.02915	-0.14647	-0.16327	0.00231	0.05808	
113		2PZ	0.04569	0.07997	0.12740	-0.01182	0.03433	
114		3S	-0.01529	-0.10834	-0.13582	0.01339	-0.00999	
115		3PX	0.03640	0.00788	0.02969	-0.00323	0.03201	
116		3PY	0.01750	-0.13395	-0.15080	0.00811	0.04405	
117		3PZ	0.03553	0.08821	0.12969	-0.01217	0.02538	
118	14	O	1S	-0.00052	-0.00246	-0.00236	0.00170	-0.00410
119		2S	0.00243	0.00574	0.00429	-0.00356	0.00944	
120		2PX	0.00971	-0.00297	-0.02849	0.02241	0.01544	
121		2PY	-0.00439	0.02516	-0.01822	0.01952	0.07114	
122		2PZ	-0.03368	0.01811	-0.01582	0.01055	0.05314	
123		3S	-0.00619	0.01396	0.02025	-0.01105	0.02413	
124		3PX	0.01193	-0.00130	-0.02540	0.01792	0.01368	
125		3PY	-0.00368	0.01748	-0.01229	0.01734	0.05122	
126		3PZ	-0.02821	0.01444	-0.01066	0.00583	0.04262	
127	15	C	1S	-0.01191	0.02351	-0.01196	0.01204	0.03259
128		2S	0.03490	-0.07220	0.03427	-0.02991	-0.06740	
129		2PX	-0.08695	0.05673	-0.02359	0.13360	-0.15596	
130		2PY	0.04591	-0.04038	0.01480	-0.11536	-0.06380	
131		2PZ	0.04106	0.05408	-0.04266	-0.22689	0.04726	
132		3S	0.02435	0.01064	0.00043	-0.03757	-0.16479	
133		3PX	-0.05278	0.03557	-0.01816	0.08911	-0.14295	
134		3PY	-0.03838	0.10794	-0.09054	-0.08442	-0.06545	
135		3PZ	0.08557	-0.00551	0.01918	-0.15694	0.00127	
136	16	N	1S	0.00723	-0.01431	0.01033	-0.00187	-0.00750
137		2S	-0.01546	0.03171	-0.02054	0.00391	0.01717	
138		2PX	0.18600	0.01845	-0.02015	0.06159	-0.01320	
139		2PY	-0.12774	0.07537	-0.04288	-0.01712	0.04094	
140		2PZ	-0.20183	-0.06832	0.04339	-0.07047	0.03650	
141		3S	-0.06959	0.13472	-0.11312	0.00805	0.03555	
142		3PX	0.14066	0.03763	-0.02420	0.05766	-0.00717	
143		3PY	-0.12715	0.06940	-0.05100	-0.02098	0.03799	
144		3PZ	-0.17549	-0.04358	0.03451	-0.06200	0.04167	
145	17	N	1S	0.02867	-0.06336	0.03641	0.00089	-0.00103
146		2S	-0.05955	0.13185	-0.07762	-0.00153	0.00351	
147		2PX	-0.16739	-0.11810	0.07085	0.07134	-0.00195	
148		2PY	-0.04639	0.32090	-0.18342	-0.03509	0.00863	
149		2PZ	0.34958	-0.13099	0.07346	-0.06227	0.05383	
150		3S	-0.09758	0.23885	-0.12758	-0.00792	-0.01073	
151		3PX	-0.11101	-0.09178	0.06191	0.05121	-0.01425	
152		3PY	-0.02150	0.20014	-0.10983	-0.02052	0.01635	
153		3PZ	0.24695	-0.09063	0.05268	-0.05337	0.02986	
154	18	C	1S	-0.00715	0.01608	-0.00886	0.00118	0.00411
155		2S	0.02105	-0.04635	0.02680	-0.00121	-0.00629	
156		2PX	-0.06868	-0.05616	0.03071	-0.17180	0.06751	
157		2PY	0.09117	-0.11404	0.06611	0.07402	-0.04612	

158	2PZ	0.09379	0.04862	-0.02418	0.21488	-0.08596
159	3S	0.01940	-0.05950	0.02823	-0.00373	-0.02051
160	3PX	-0.04331	-0.04215	0.01905	-0.11051	0.04276
161	3PY	0.02023	0.01802	-0.00611	0.04517	-0.03901
162	3PZ	0.07435	-0.00555	0.00075	0.14599	-0.05670
163	19 C 1S	0.01036	-0.02216	0.01207	0.00317	0.00714
164	2S	-0.02358	0.04873	-0.02608	-0.00584	-0.01528
165	2PX	0.06867	-0.05023	0.02489	-0.20555	0.06206
166	2PY	-0.04433	0.04603	-0.02070	0.08462	-0.04424
167	2PZ	-0.03813	-0.04960	0.03876	0.24496	-0.11243
168	3S	-0.07149	0.15082	-0.07705	-0.02189	-0.03024
169	3PX	0.04028	-0.04883	0.02413	-0.14915	0.05716
170	3PY	-0.01515	0.01563	0.00089	0.06321	-0.02984
171	3PZ	-0.01987	-0.03842	0.02598	0.18251	-0.07813
172	20 C1 1S	0.00045	-0.00113	0.00073	0.00015	0.00038
173	2S	-0.00142	0.00374	-0.00247	-0.00064	-0.00145
174	2PX	-0.08870	0.00744	-0.00750	-0.06289	0.01781
175	2PY	0.02908	0.01207	-0.00600	0.02354	-0.01870
176	2PZ	0.08708	0.04041	-0.01999	0.07340	-0.03219
177	3S	0.00697	-0.01672	0.01058	0.00184	0.00472
178	3PX	0.23047	-0.02159	0.02069	0.16463	-0.04639
179	3PY	-0.07437	-0.03312	0.01659	-0.06145	0.04899
180	3PZ	-0.22464	-0.10577	0.05243	-0.19173	0.08430
181	4S	0.00005	-0.00191	-0.00025	0.00258	0.00026
182	4PX	0.12788	-0.00719	0.00834	0.10322	-0.03029
183	4PY	-0.04527	-0.01290	0.00544	-0.03822	0.03103
184	4PZ	-0.12821	-0.05944	0.02924	-0.11948	0.05204
185	21 C1 1S	0.00029	-0.00068	0.00042	0.00019	0.00046
186	2S	-0.00118	0.00279	-0.00174	-0.00085	-0.00190
187	2PX	0.04899	-0.02763	0.01197	-0.05989	0.01685
188	2PY	-0.02638	0.02552	-0.01271	0.02120	-0.01873
189	2PZ	-0.02782	-0.03038	0.02059	0.07177	-0.03013
190	3S	0.00351	-0.00817	0.00499	0.00210	0.00537
191	3PX	-0.12793	0.07181	-0.03102	0.15733	-0.04430
192	3PY	0.06990	-0.06829	0.03438	-0.05547	0.04946
193	3PZ	0.07277	0.07989	-0.05414	-0.18861	0.07901
194	4S	0.00863	-0.01531	0.01126	0.00302	0.00361
195	4PX	-0.06723	0.04241	-0.01849	0.10300	-0.02989
196	4PY	0.04129	-0.04517	0.02435	-0.03573	0.03258
197	4PZ	0.03538	0.04664	-0.03238	-0.12338	0.05222
198	22 H 1S	-0.01306	-0.00349	-0.01492	0.08107	0.06281
199	2S	-0.01545	0.01505	0.01378	0.09505	0.07336
200	23 H 1S	-0.00187	-0.00391	-0.00414	-0.00153	-0.00129
201	2S	-0.00196	-0.01314	-0.01206	-0.00374	0.00042
202	24 H 1S	-0.01147	-0.00706	0.05912	0.01618	0.02294
203	2S	-0.01786	-0.02836	0.04232	0.01982	0.02460
204	25 H 1S	0.00013	-0.02697	-0.03279	0.00023	-0.00099
205	2S	-0.00275	-0.05182	-0.06594	0.00110	0.00069
206	26 H 1S	0.01420	0.04605	-0.00429	-0.01642	-0.01672
207	2S	0.01414	0.04486	-0.03609	-0.01543	-0.00765
208	27 H 1S	-0.01412	-0.02077	0.02125	0.00366	-0.00723
209	2S	-0.00917	-0.02140	0.02322	0.01794	0.01780
210	28 H 1S	-0.00477	-0.01060	0.00993	0.00795	-0.00935
211	2S	-0.00650	-0.01556	0.01043	0.00998	-0.03061
212	29 H 1S	0.01683	0.02894	-0.03697	-0.00427	0.01828
213	2S	0.02047	0.03492	-0.04721	-0.00515	0.02041
214	30 C 1S	0.00040	0.00564	0.00718	-0.00047	-0.00119
215	2S	-0.00019	-0.01198	-0.01484	0.00094	0.00269
216	2PX	-0.00714	0.01290	0.00555	-0.00271	-0.01033
217	2PY	-0.00947	0.00352	-0.00979	-0.00046	-0.01363
218	2PZ	-0.00964	-0.00754	-0.02122	-0.00052	-0.01426
219	3S	-0.00359	-0.03162	-0.04354	0.00490	0.00455
220	3PX	0.00281	0.01728	0.01781	-0.00476	-0.00029
221	3PY	-0.00279	0.00634	0.00583	-0.00190	-0.00302
222	3PZ	-0.00118	-0.02610	-0.03906	0.00165	-0.00369
223	31 C 1S	0.00181	0.00102	0.00023	0.00042	0.00277
224	2S	-0.00267	-0.00198	-0.00115	-0.00007	-0.00546
225	2PX	0.00305	0.00379	0.00930	-0.00429	0.00583

226		2PY	-0.00119	-0.01343	0.00032	-0.00120	-0.02435
227		2PZ	0.00004	-0.00526	0.01276	-0.00801	-0.01056
228		3S	-0.01215	-0.00682	0.00234	-0.00331	-0.01988
229		3PX	0.00013	0.00191	0.00538	0.00063	0.00401
230		3PY	-0.00274	-0.00446	-0.00339	0.00324	-0.00269
231		3PZ	-0.00321	0.00120	0.00260	-0.00341	0.00857
232	32	H 1S	0.02168	-0.03308	0.01829	0.00468	0.00568
233		2S	0.00408	-0.04444	0.02607	-0.00677	-0.00336
234	33	C 1S	0.00017	-0.00039	-0.00082	0.00050	-0.00039
235		2S	-0.00045	0.00046	0.00167	-0.00074	-0.00015
236		2PX	-0.00013	-0.00308	-0.00573	0.00234	-0.00360
237		2PY	-0.00098	0.00243	0.00202	-0.00109	0.00154
238		2PZ	0.00227	0.00114	-0.00219	0.00160	0.00176
239		3S	0.00050	0.00311	0.00221	-0.00416	0.00586
240		3PX	-0.00219	-0.00416	-0.00061	0.00041	-0.00982
241		3PY	0.00122	-0.00163	0.00326	-0.00163	-0.00694
242		3PZ	0.00035	-0.00309	0.00353	-0.00322	-0.00964
243	34	H 1S	0.00007	-0.01342	-0.01538	0.00052	0.00210
244		2S	-0.00047	0.00332	0.00931	-0.00191	0.00240
245	35	H 1S	-0.01455	0.00579	-0.00816	0.00034	-0.01920
246		2S	-0.01855	0.02524	0.02208	0.00220	-0.01869
247	36	H 1S	0.01246	-0.00446	0.00712	0.00035	0.01594
248		2S	0.02237	0.01508	0.02659	-0.00792	0.01110
249	37	H 1S	0.00212	-0.00754	0.00879	-0.00619	-0.01782
250		2S	0.01333	-0.00425	0.00516	-0.00247	-0.01509
251	38	H 1S	-0.00258	0.00891	-0.00746	0.00552	0.01976
252		2S	-0.00410	0.00850	-0.00858	0.00826	0.02767
253	39	H 1S	0.00146	-0.00246	-0.00464	0.00261	-0.00233
254		2S	0.00316	-0.00255	-0.00687	0.00475	-0.00138
255	40	H 1S	-0.00161	-0.00149	0.00348	-0.00232	-0.00291
256		2S	-0.00091	-0.00567	0.00723	-0.00495	-0.01352
257	41	H 1S	-0.00070	0.00246	-0.00020	0.00013	0.00325
258		2S	-0.00065	0.00675	-0.00528	0.00335	0.01521
			98	99	100	101	102
			V	V	V	V	V
Eigenvalues --			-0.06696	-0.01529	0.01194	0.01863	0.04557
1	1	C 1S	-0.00471	0.00318	-0.00396	-0.00669	0.00875
2		2S	0.00449	-0.00938	0.01181	0.01513	-0.01764
3		2PX	0.13628	-0.06765	0.00290	0.01331	-0.03085
4		2PY	0.06213	-0.03761	-0.00981	-0.02727	0.03782
5		2PZ	0.10192	-0.03575	-0.00022	0.00807	-0.02686
6		3S	0.01403	0.01050	0.01717	0.00706	-0.09754
7		3PX	0.15536	-0.06585	0.00897	-0.03705	-0.08045
8		3PY	0.06729	-0.11739	-0.02300	-0.02360	0.10629
9		3PZ	0.13597	-0.07821	-0.01134	0.08458	-0.03118
10	2	C 1S	0.00297	0.00457	-0.00018	0.00417	-0.00100
11		2S	-0.00917	-0.01559	0.00801	-0.01325	-0.00018
12		2PX	-0.17160	0.20116	-0.01811	0.02397	-0.01187
13		2PY	-0.12092	0.17475	-0.01942	0.02001	0.01203
14		2PZ	-0.13283	0.17967	-0.01865	0.00660	0.00318
15		3S	-0.00760	-0.01701	-0.02251	0.04046	0.02807
16		3PX	-0.17894	0.23660	-0.01407	0.02420	0.00922
17		3PY	-0.14380	0.22076	0.00008	-0.03818	-0.00849
18		3PZ	-0.11937	0.21872	-0.01203	0.04665	-0.00471
19	3	C 1S	-0.00126	-0.00647	0.01231	-0.00065	0.00143
20		2S	0.00216	0.02154	-0.01530	-0.00683	-0.00524
21		2PX	0.02882	0.01624	0.03280	0.02400	0.01015
22		2PY	-0.00786	0.00595	0.03993	-0.00317	0.02943
23		2PZ	-0.00554	-0.00277	0.02222	-0.02047	0.00441
24		3S	0.02004	-0.00218	-0.12935	0.01278	0.01763
25		3PX	0.05442	0.01178	0.05754	0.15039	0.02548
26		3PY	-0.00408	-0.04495	0.08300	-0.00153	0.14348
27		3PZ	-0.03326	0.05907	0.05737	-0.17304	-0.02814
28	4	C 1S	0.00610	0.00044	-0.00264	0.02782	-0.00549
29		2S	-0.01250	-0.00537	0.00352	-0.06233	0.01252
30		2PX	-0.05054	-0.00585	0.00388	0.09217	0.02135
31		2PY	-0.12437	0.00376	0.02178	-0.03045	0.05474
32		2PZ	-0.10287	0.01747	0.01748	-0.05074	0.03600

33		3S	-0.01476	0.03695	0.03030	-0.24996	-0.00167
34		3PX	-0.02169	-0.02435	-0.00795	0.19794	0.04449
35		3PY	-0.14822	0.04312	0.03500	-0.11554	0.02757
36		3PZ	-0.18026	-0.04652	0.00514	-0.03122	0.07154
37 5	C	1S	0.00244	0.00907	0.00010	-0.00287	0.00218
38		2S	-0.00017	-0.02249	-0.00004	-0.00687	-0.00910
39		2PX	0.16460	0.11209	-0.02335	0.03292	-0.01487
40		2PY	0.23582	0.12252	-0.02365	0.00476	-0.02633
41		2PZ	0.18204	0.11193	-0.02840	0.02839	-0.03416
42		3S	-0.06568	-0.11298	-0.00979	0.09321	0.03791
43		3PX	0.19426	0.14771	-0.01444	-0.02581	-0.06140
44		3PY	0.25548	0.15857	-0.02402	0.01226	-0.03111
45		3PZ	0.17039	0.11312	-0.03735	0.03747	-0.01026
46 6	N	1S	-0.00132	-0.00423	0.00028	-0.00327	-0.01060
47		2S	0.00265	0.00919	-0.00107	0.00954	0.02164
48		2PX	-0.02048	-0.16232	0.01693	0.00263	0.01464
49		2PY	-0.05299	-0.17654	0.02004	-0.02622	0.03585
50		2PZ	-0.02381	-0.10701	0.00667	-0.00283	-0.02161
51		3S	0.01401	0.02884	0.01107	-0.00929	0.11117
52		3PX	-0.03870	-0.20365	0.01656	0.00079	0.03480
53		3PY	-0.05524	-0.23527	0.02988	-0.01338	0.07000
54		3PZ	-0.02197	-0.11772	0.01012	-0.02725	-0.08105
55 7	C	1S	-0.00338	-0.00335	-0.00134	-0.00464	0.00039
56		2S	0.00667	0.00778	0.00037	0.00746	-0.00327
57		2PX	0.02338	-0.00714	-0.00066	0.00549	0.00159
58		2PY	-0.00285	-0.01832	-0.00048	-0.01202	0.02039
59		2PZ	0.01754	0.00066	-0.00162	0.00123	-0.02015
60		3S	0.02845	0.01249	0.02017	0.06667	0.02998
61		3PX	-0.00098	-0.03251	-0.01220	0.01972	0.00604
62		3PY	-0.02735	-0.02184	-0.00653	-0.01917	0.04391
63		3PZ	-0.00233	0.00426	-0.01280	0.00229	-0.02972
64 8	C	1S	0.00102	-0.00362	-0.00092	0.00914	-0.00801
65		2S	-0.00170	0.01050	0.00080	-0.01362	0.00820
66		2PX	-0.00227	-0.01195	-0.00077	0.01919	-0.00184
67		2PY	-0.01615	-0.00502	-0.00062	-0.00312	0.00265
68		2PZ	-0.01342	0.02028	-0.00363	-0.00642	-0.02615
69		3S	-0.01293	0.00736	0.00793	-0.07830	0.13815
70		3PX	0.01753	-0.00951	-0.00903	0.03799	-0.01527
71		3PY	0.01103	-0.05197	-0.00811	0.00031	-0.01258
72		3PZ	0.00703	0.05112	-0.02057	0.02053	-0.06961
73 9	C	1S	0.00095	0.00185	0.00261	-0.00279	0.00246
74		2S	-0.00147	-0.00784	-0.00797	0.01082	-0.00161
75		2PX	-0.07621	-0.07342	-0.00909	0.04413	-0.02947
76		2PY	-0.18690	-0.19032	-0.01207	0.06205	-0.06307
77		2PZ	-0.19430	-0.19185	-0.02260	0.05312	-0.07287
78		3S	-0.00720	0.02587	-0.00972	-0.05735	-0.05966
79		3PX	-0.07972	-0.08644	-0.02503	0.08425	-0.02108
80		3PY	-0.15502	-0.15675	-0.00386	0.04999	-0.05174
81		3PZ	-0.12534	-0.17223	-0.02332	0.06512	-0.07398
82 10	C	1S	-0.00017	-0.00030	0.00001	-0.00174	0.00168
83		2S	-0.00424	0.00239	0.00395	0.00540	-0.00249
84		2PX	0.11678	-0.22568	-0.03366	-0.05237	0.02644
85		2PY	0.08027	-0.15471	-0.02538	-0.04042	0.02540
86		2PZ	0.09389	-0.17583	-0.02756	-0.04350	0.01232
87		3S	0.01040	0.02275	-0.00488	-0.03002	-0.04124
88		3PX	0.08544	-0.17735	-0.01726	-0.06464	0.01154
89		3PY	0.04733	-0.10896	-0.02462	-0.01779	0.03260
90		3PZ	0.06262	-0.16574	-0.02395	-0.02887	0.03299
91 11	O	1S	-0.00111	-0.00140	-0.00574	0.00003	-0.00700
92		2S	0.00396	0.00311	0.01372	-0.00083	0.01815
93		2PX	0.06100	0.04763	-0.01473	-0.02004	-0.01183
94		2PY	0.15261	0.12498	0.00251	-0.04626	0.03326
95		2PZ	0.16510	0.13096	0.00746	-0.06709	0.02388
96		3S	-0.00953	0.00416	0.03459	0.01686	0.04833
97		3PX	0.05465	0.04703	-0.01287	-0.02080	-0.00180
98		3PY	0.14314	0.12623	0.00534	-0.03283	0.04151
99		3PZ	0.15868	0.13315	0.00245	-0.06451	0.02079
100 12	O	1S	-0.00056	0.00057	-0.00073	-0.00017	0.00071

101	2S	0.00166	-0.00094	0.00078	0.00115	-0.00160	
102	2PX	-0.11249	0.16897	0.02445	0.03748	-0.02259	
103	2PY	-0.08023	0.11623	0.01362	0.02500	-0.00471	
104	2PZ	-0.09382	0.13620	0.01614	0.02853	-0.00936	
105	3S	0.00395	-0.01164	0.01172	-0.00419	-0.00796	
106	3PX	-0.10415	0.16547	0.02485	0.03839	-0.02337	
107	3PY	-0.07356	0.11644	0.00970	0.02583	-0.00530	
108	3PZ	-0.08626	0.13683	0.01712	0.02678	-0.01310	
109	13 O	1S	0.00100	-0.00120	-0.00011	-0.00298	-0.00204
110	2S	-0.00145	0.00075	-0.00040	0.00881	0.00345	
111	2PX	-0.07461	0.10910	0.01420	0.00520	-0.01254	
112	2PY	-0.05345	0.07617	0.00997	-0.00538	0.00126	
113	2PZ	-0.05644	0.08621	0.01200	0.00710	-0.01423	
114	3S	-0.01210	0.02016	0.00308	0.01568	0.02188	
115	3PX	-0.06204	0.09715	0.01338	0.00528	-0.01302	
116	3PY	-0.04810	0.07102	0.00953	0.00510	0.00242	
117	3PZ	-0.04626	0.07154	0.00862	0.01471	-0.01361	
118	14 O	1S	0.00040	0.00081	-0.00243	0.00969	-0.00355
119	2S	-0.00267	-0.00293	0.00493	-0.01990	0.00814	
120	2PX	0.03787	0.02909	-0.00390	0.00264	0.00746	
121	2PY	0.10103	0.08033	0.00405	-0.02045	0.01921	
122	2PZ	0.11174	0.08958	0.01131	-0.03564	0.02599	
123	3S	0.01041	-0.00023	0.02435	-0.08788	0.03046	
124	3PX	0.02521	0.02172	-0.00673	0.00478	0.00480	
125	3PY	0.09392	0.08023	0.00282	-0.01406	0.01353	
126	3PZ	0.10153	0.08394	0.01273	-0.04199	0.02613	
127	15 C	1S	-0.00122	0.00866	-0.03700	-0.00012	-0.01758
128	2S	-0.00339	-0.01559	0.07991	-0.00760	0.03378	
129	2PX	0.00798	-0.01021	-0.02941	0.24635	-0.04119	
130	2PY	-0.00469	-0.01283	-0.05124	-0.12303	0.06228	
131	2PZ	-0.01171	-0.01433	0.01591	-0.31436	-0.06957	
132	3S	0.04479	-0.06003	0.35097	0.03132	0.22412	
133	3PX	0.03899	-0.01266	0.02703	0.29570	-0.05307	
134	3PY	-0.05436	-0.00174	-0.07824	-0.12343	0.08908	
135	3PZ	0.03095	-0.02169	0.06877	-0.31824	-0.08589	
136	16 N	1S	0.00010	-0.00636	0.00883	0.00255	-0.03918
137	2S	0.00215	0.01208	-0.01702	-0.00309	0.09322	
138	2PX	-0.01331	0.01454	0.05357	-0.20470	-0.08848	
139	2PY	-0.00980	-0.00256	-0.00159	0.09586	-0.05291	
140	2PZ	0.04688	0.00399	0.02131	0.26202	-0.02479	
141	3S	-0.02861	0.07186	-0.06275	-0.05074	0.30447	
142	3PX	-0.00665	0.02400	0.08055	-0.27077	-0.08778	
143	3PY	-0.03766	-0.00314	-0.05848	0.12859	-0.10767	
144	3PZ	0.06976	0.00710	0.04917	0.34071	0.00800	
145	17 N	1S	-0.00721	0.00006	0.00295	0.00014	0.03634
146	2S	0.01455	-0.00102	0.00055	-0.00081	-0.08093	
147	2PX	-0.02255	0.01135	0.01431	-0.12555	0.05684	
148	2PY	0.02030	-0.00708	-0.09699	0.04960	0.06803	
149	2PZ	0.04296	-0.00032	0.03293	0.16311	-0.01148	
150	3S	0.06396	0.00713	0.02044	0.01089	-0.25686	
151	3PX	-0.00630	-0.00255	0.00182	-0.13522	0.05117	
152	3PY	0.02259	-0.00751	-0.11040	0.06082	0.03433	
153	3PZ	0.04565	0.01028	0.03034	0.18243	-0.01599	
154	18 C	1S	0.00214	-0.00068	-0.02708	0.00038	-0.12113
155	2S	-0.00577	0.00263	0.02326	-0.00241	0.21424	
156	2PX	-0.00037	0.01281	-0.19416	-0.09559	-0.30032	
157	2PY	-0.01641	-0.00651	0.01939	0.04558	-0.05135	
158	2PZ	-0.00651	-0.00873	-0.17137	0.10628	-0.14643	
159	3S	-0.01503	-0.00586	0.38113	0.00750	0.93731	
160	3PX	-0.01431	0.01531	-0.23129	-0.12566	-0.58727	
161	3PY	-0.00298	-0.01783	-0.07372	0.05880	-0.08838	
162	3PZ	-0.01165	-0.01498	-0.17281	0.15250	-0.33953	
163	19 C	1S	-0.00443	0.00411	-0.09123	-0.00731	0.09025
164	2S	0.00590	-0.00861	0.13119	0.00938	-0.17714	
165	2PX	0.02326	-0.02029	-0.05889	0.20587	0.06366	
166	2PY	-0.02553	0.00867	-0.40817	-0.11500	0.09350	
167	2PZ	-0.03282	0.01270	0.12191	-0.24707	-0.05128	
168	3S	0.05159	-0.02960	0.87501	0.07623	-0.64218	

169	3PX	0.02509	-0.01677	-0.07683	0.26971	0.08229
170	3PY	-0.01484	0.01783	-0.59683	-0.14784	0.34649
171	3PZ	-0.03925	0.01809	0.18269	-0.31544	-0.15311
172	20 C1 1S	-0.00009	0.00012	-0.01094	-0.00016	-0.02204
173	2S	0.00041	-0.00048	0.04935	0.00067	0.10062
174	2PX	0.00150	0.00057	0.07095	-0.01062	0.11888
175	2PY	-0.00181	-0.00151	0.01365	0.00561	0.02735
176	2PZ	0.00015	-0.00177	0.05083	0.01540	0.09399
177	3S	-0.00097	0.00139	-0.11531	-0.00176	-0.22917
178	3PX	-0.00454	-0.00139	-0.19265	0.02897	-0.32242
179	3PY	0.00472	0.00406	-0.03535	-0.01512	-0.07370
180	3PZ	-0.00057	0.00467	-0.13867	-0.04200	-0.25517
181	4S	-0.00688	0.00123	-0.24088	-0.00223	-0.56211
182	4PX	-0.00506	-0.00226	-0.29011	0.02867	-0.61438
183	4PY	0.00208	0.00511	-0.06649	-0.01690	-0.14456
184	4PZ	-0.00331	0.00617	-0.20475	-0.04239	-0.46574
185	21 C1 1S	-0.00096	0.00058	-0.02257	-0.00158	0.01234
186	2S	0.00415	-0.00245	0.10205	0.00690	-0.05597
187	2PX	0.00557	-0.00366	0.02725	0.02681	-0.00960
188	2PY	0.00732	-0.00305	0.16486	-0.00004	-0.07779
189	2PZ	-0.00700	0.00247	-0.03356	-0.03178	0.01196
190	3S	-0.01049	0.00661	-0.23775	-0.01738	0.13033
191	3PX	-0.01490	0.01008	-0.07335	-0.07303	0.02670
192	3PY	-0.01971	0.00841	-0.44912	0.00006	0.21242
193	3PZ	0.01895	-0.00676	0.09221	0.08652	-0.03222
194	4S	-0.01169	0.01048	-0.52672	-0.03140	0.33029
195	4PX	-0.01402	0.00902	-0.13870	-0.08260	0.06755
196	4PY	-0.02037	0.01372	-0.73585	-0.01517	0.43571
197	4PZ	0.01720	-0.00808	0.14078	0.09707	-0.07594
198	22 H 1S	-0.00020	0.00581	-0.01155	0.06532	0.01681
199	2S	0.01980	-0.02814	-0.04372	0.28133	0.07013
200	23 H 1S	-0.00033	0.00910	-0.00111	-0.00500	-0.02024
201	2S	0.00851	0.06295	-0.01777	-0.01666	-0.21502
202	24 H 1S	0.04967	-0.05996	0.00641	-0.00604	-0.00434
203	2S	0.10150	-0.11536	0.01878	-0.01780	-0.02672
204	25 H 1S	-0.00486	0.01147	-0.00249	-0.00169	0.00387
205	2S	-0.01355	0.03573	-0.01525	-0.02539	-0.04188
206	26 H 1S	-0.04852	0.04836	-0.00458	0.00504	-0.00242
207	2S	-0.09757	0.05996	-0.03063	0.00489	-0.00158
208	27 H 1S	0.04631	0.01683	-0.00519	-0.00013	-0.01142
209	2S	0.10078	-0.01037	-0.02077	0.02175	-0.07789
210	28 H 1S	0.02529	0.02020	-0.00607	0.01380	-0.00731
211	2S	0.05485	0.10084	-0.03236	0.08217	-0.12769
212	29 H 1S	-0.06940	-0.03517	0.01063	-0.01022	0.01229
213	2S	-0.15742	-0.08820	0.03634	-0.01919	0.03284
214	30 C 1S	-0.00085	0.00107	-0.00042	0.00218	0.00169
215	2S	0.00157	-0.00316	-0.00014	-0.00305	-0.00232
216	2PX	0.00929	-0.00456	0.00028	-0.00608	-0.00638
217	2PY	0.00372	0.00025	0.00040	0.00261	0.00137
218	2PZ	0.00233	0.00263	0.00049	0.00558	0.00241
219	3S	0.00694	-0.00665	0.00715	-0.02246	-0.01721
220	3PX	-0.01225	0.03753	0.00567	-0.00322	-0.01637
221	3PY	-0.01108	0.02907	0.00550	0.00185	0.00035
222	3PZ	-0.01530	0.03144	0.00386	0.01788	0.00083
223	31 C 1S	0.00016	-0.00061	-0.00052	-0.00541	-0.00148
224	2S	-0.00029	0.00092	-0.00005	0.01095	0.00201
225	2PX	-0.00318	-0.00182	0.00222	-0.01910	0.00436
226	2PY	-0.00519	0.00420	-0.00336	0.02061	-0.00272
227	2PZ	-0.00874	-0.00086	0.00395	-0.01509	0.01072
228	3S	-0.00205	0.00505	0.01210	0.04428	0.03016
229	3PX	0.01045	0.00377	0.00398	-0.02210	0.02265
230	3PY	0.03098	0.04051	-0.00471	0.01468	0.00319
231	3PZ	0.02077	0.03377	0.01166	-0.03819	0.03858
232	32 H 1S	-0.01069	-0.00621	-0.06193	-0.01149	-0.03109
233	2S	-0.06362	-0.06274	-0.20093	0.03522	-0.12935
234	33 C 1S	0.00015	-0.00056	-0.00017	0.00124	-0.00053
235	2S	-0.00014	0.00040	0.00018	-0.00078	0.00067
236	2PX	0.00029	-0.00056	0.00051	0.00366	0.00369

237	2PY	-0.00146	-0.00237	-0.00069	0.00177	-0.00162
238	2PZ	-0.00208	-0.00411	-0.00119	0.00086	-0.00502
239	3S	-0.00323	0.01083	0.00180	-0.01618	0.00721
240	3PX	-0.00291	-0.00394	0.00176	0.01039	0.01203
241	3PY	-0.01929	-0.02078	-0.00292	0.01289	-0.00811
242	3PZ	-0.01960	-0.02116	-0.00411	0.00627	-0.02116
243	34 H 1S	-0.00057	0.00020	-0.00041	-0.00194	0.00198
244	2S	-0.00154	0.00265	-0.00201	-0.00426	0.01064
245	35 H 1S	0.01912	-0.02727	-0.00359	0.00007	0.00176
246	2S	0.03344	-0.06966	-0.01358	0.00194	0.01240
247	36 H 1S	-0.01936	0.02757	0.00370	0.00284	-0.00362
248	2S	-0.03723	0.07697	0.00826	0.01679	-0.01248
249	37 H 1S	-0.02477	-0.01957	-0.00158	0.00708	-0.00484
250	2S	-0.04336	-0.05687	-0.01512	0.01634	-0.05456
251	38 H 1S	0.02559	0.01945	0.00147	-0.00610	0.00602
252	2S	0.05611	0.05931	-0.00326	-0.02884	0.01543
253	39 H 1S	0.00036	0.00018	-0.00158	0.00720	-0.00265
254	2S	-0.00013	-0.00287	-0.00568	0.02037	-0.01364
255	40 H 1S	-0.00079	0.00101	0.00115	-0.00367	0.00261
256	2S	-0.01971	-0.02494	-0.00345	0.00527	-0.02185
257	41 H 1S	0.00121	-0.00088	0.00035	-0.00269	-0.00012
258	2S	0.01839	0.01419	0.00397	-0.01664	0.00419

MORNING PEOPLE ARE USUALLY ADMIRE AS EARLY BIRDS.

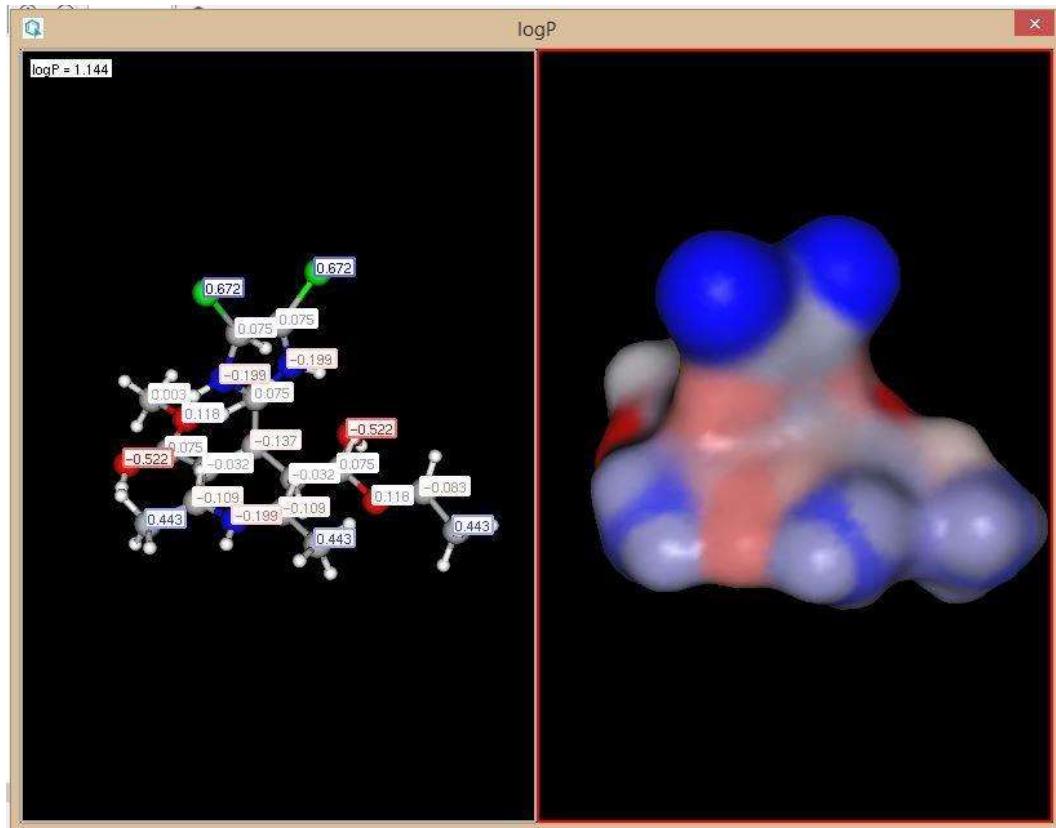
RECALL BEN FRANKLIN'S APHORISM THAT THE EARLY BIRD GETS THE WORM.

I IDENTIFY WITH THE WORM. -- CRAIG JAGGER, MINNEAPOLIS, KS.

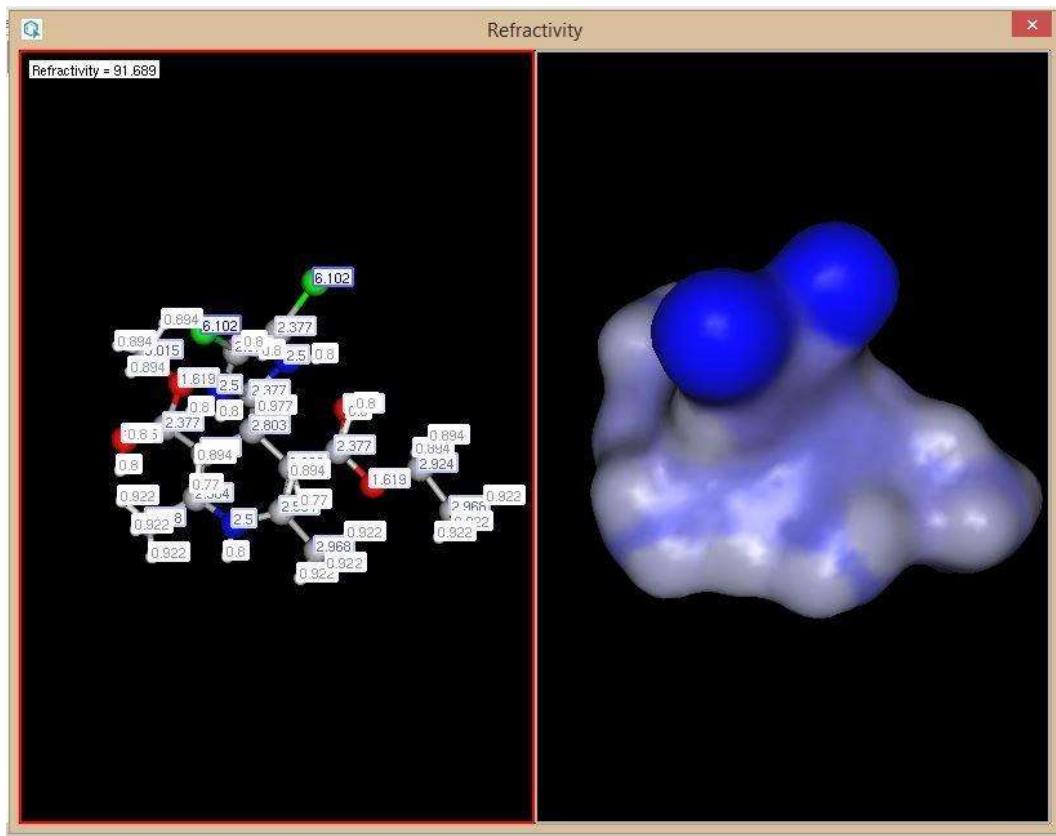
Job cpu time: 0 days 3 hours 54 minutes 55.0 seconds.

File lengths (MBytes): RWF= 787 Int= 0 D2E= 0 Chk= 6 Scr= 1
Normal termination of Gaussian 09 at Sun Apr 05 08:35:27 2015.

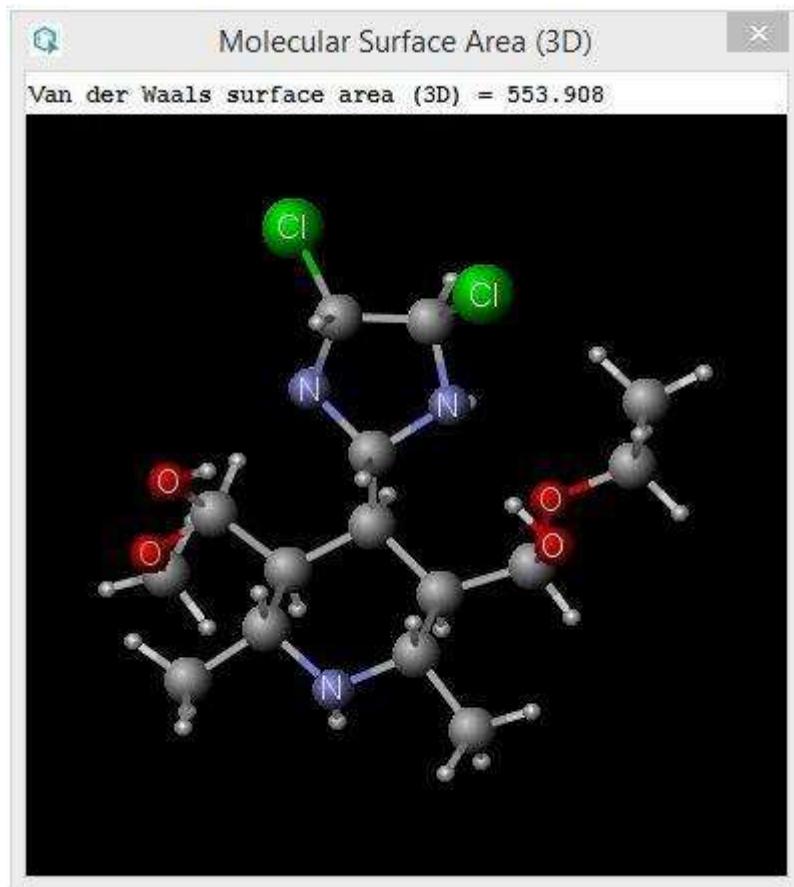
Lampiran 4. Visualisasi Perhitungan Log P.



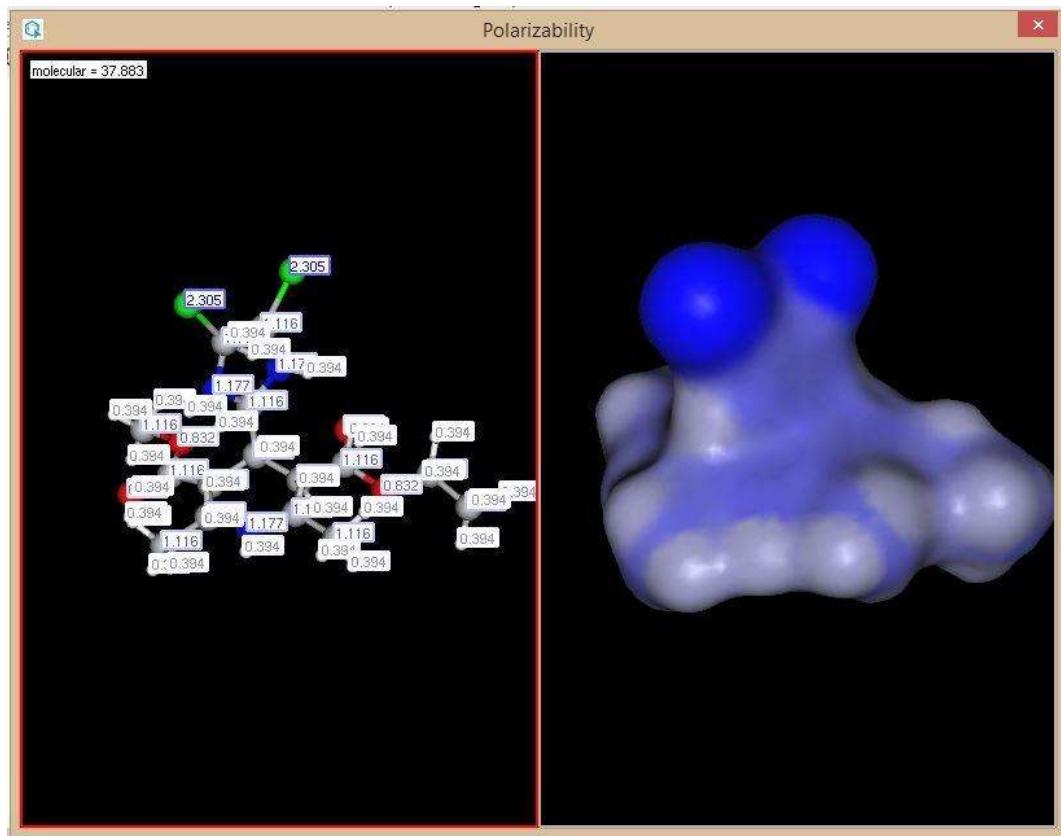
Lampiran 5. Visualisasi Perhitungan *Refractivity*.



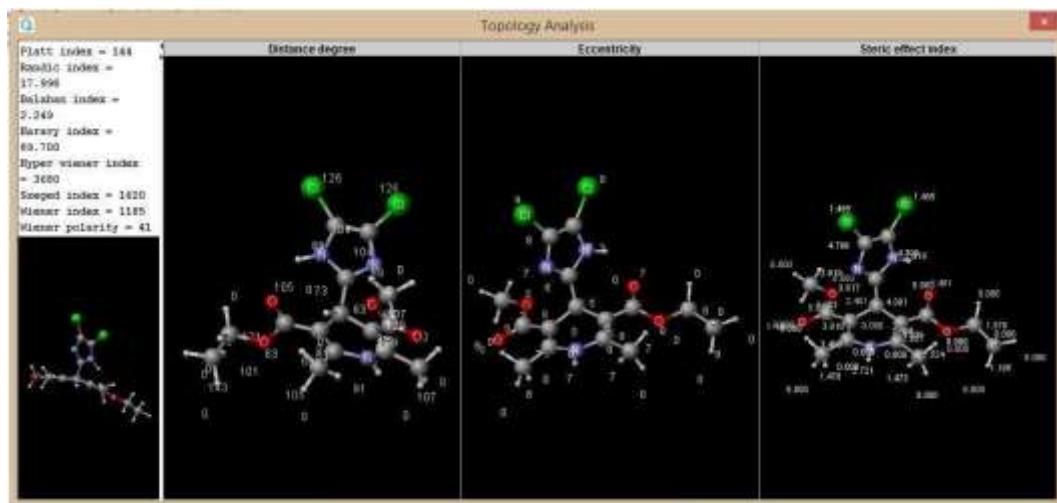
Lampiran 6. Visualisasi Perhitungan MSA.



Lampiran 7. Visualisasi Perhitungan *Polarizability*.



Lampiran 8. Visualisasi Perhitungan *Topology Analysis*.



Lampiran 9. Hasil Analisis Regresi Multilinier Menggunakan SPSS Statistics 21

Variables Entered/Removed^a

Model	Variables Entered	Variables Removed	Method
1	Refractility, Lumo, Homo, Momentdipol, Balabanindex, PlatIndex, Hyperwienerindex, Wienerpolarity, logP, Hararyindex, Szegedindex ^b		Enter
2		Hararyindex	Backward (criterion: Probability of F-to-remove >= 100)

a. Dependent Variable: PIC50

b. Tolerance = .000 limits reached.

Model Summary^c

Model	R	R Square	Adjusted R Square	Std. Error of the Estimate	Change Statistics					Durbin-Watson
					R Square Change	F Change	df1	df2	Sig. F Change	
1	.996 ^a	.990	.998	20893	.990	19.732	11	2	.052	
2	.993 ^b	.995	.940	20506	-.004	.990	1	2	.445	2.651

a. Predictors: (Constant), Refractility, Lumo, Homo, Momentdipol, Balabanindex, PlatIndex, Hyperwienerindex, Wienerpolarity, logP, Hararyindex, Szegedindex

b. Predictors: (Constant), Refractility, Lumo, Homo, Momentdipol, Balabanindex, PlatIndex, Hyperwienerindex, Wienerpolarity, logP, Szegedindex

c. Dependent Variable: PIC50

Coefficients^a

Model		Unstandardized Coefficients			t	Sig.	Correlations			Collinearity Statistics	
		B	Std. Error	Beta			Zero-order	Partial	Part	Tolerance	VIF
1	(Constant)	42.881	36.742		1.200	.359					
	Homo	-219.745	38.815	-.887	-5.661	.030	.168	-.970	-.392	.196	5.110
	Lumo	-895.757	213.758	-1.448	-4.195	.052	-.155	-.948	-.291	.040	24.784
	Momentdipol	-4.921	.812	-6.093	-5.531	.031	-.144	-.969	-.383	.003	304.620
	logP	8.151	2.069	8.591	2.841	.005	.669	.895	.197	.001	1902.041
	PlatIndex	-.436	.099	-10.384	-4.866	.040	.384	-.860	-.337	.001	944.094
	Balabanindex	-2.314	1.075	-.813	-2.152	.164	.217	-.836	-.189	.034	29.693
	Hararyindex	.356	.377	5.549	.944	.445	.561	.555	.065	.000	7195.260
	Hyperwienerindex	-.005	.001	-17.439	-4.586	.044	.549	-.958	-.318	.000	3016.248
	Szegedindex	.013	.007	11.784	1.916	.211	.503	.789	.126	.000	8755.758
	Wienerpolarity	-8.302	1.000	-26.513	-6.301	.024	.610	-.870	-.437	.000	3411.122
	Refractility	1.901	.318	24.018	5.572	.027	.554	.973	.414	.000	3365.725
2	(Constant)	32.197	33.278		.968	.405					
	Homo	-203.765	34.281	-.823	-5.944	.010	.168	-.960	-.404	.242	4.198
	Lumo	-895.516	209.812	-1.446	-4.268	.024	-.155	-.927	-.290	.040	24.780
	Momentdipol	-3.909	.488	-5.797	-9.006	.004	-.144	-.977	-.545	.008	112.842
	logP	7.284	2.080	7.656	2.731	.072	.569	.844	.180	.001	1097.703
	PlatIndex	-.367	.051	-8.727	-7.191	.006	.354	-.972	-.489	.003	316.120
	Balabanindex	-2.722	.866	-.956	-2.817	.067	.217	-.852	-.182	.040	24.892
	Hyperwienerindex	-.006	.001	-18.319	-6.073	.009	.549	-.962	-.413	.000	2194.800
	Szegedindex	.018	.008	15.805	3.137	.052	.583	.875	.213	.000	5343.884
	Wienerpolarity	-5.865	.885	-23.704	-6.771	.007	.610	-.989	-.401	.000	2846.617
	Refractility	2.012	.290	25.420	5.931	.095	.554	.970	.472	.000	2904.721

a. Dependent Variable: PIC50

Lampiran 10. Plotting Data Menggunakan SPSS Statistics 21

