

YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

93711

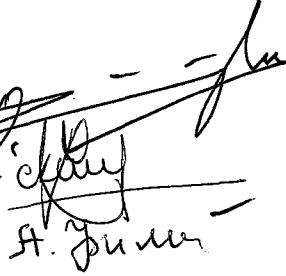
DEĞERLİK ETKİLEŞİM FORMÜLLERİ İLE
DOYMUŞ HİDROKARBON ÖZDECİKLERİNİN
ÖZDEĞERLERİNİN BULUNMASI VE KARARLILIĞININ
İNCELENMESİ

Kimyager Osman Azmi BARUT

F.B.E. Kimya Anabilim Dalı Fizikokimya Programında
Hazırlanan

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Tez Danışmanı: Prof. Dr. Oktay SİNANOĞLU
Jüri Üyeleri : Prof. Dr. Zekiye ÇINAR
Prof. Dr. Abbas AZİMOV



İSTANBUL, 1999

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
TEŞEKKÜR.....	iii
ÖZET.....	iv
ABSTRACT.....	v
1. GİRİŞ	1
1.1 Kimyasal Bağlar ve Kimyasal Bağ Kuramları.....	1
1.1.1 Lewis Simgeleri.....	1
1.1.2 Yükünel Bağ.....	1
1.1.3 Kovalent Bağ.....	2
1.1.4 Yankılaşım.....	3
1.1.5 Bağın Ucaysallığı ve Çiftucay Kolcuk	3
1.1.6 Bağ Erkesi. Bağ Uzunluğu.....	4
1.1.7 Değerbağ Kuramı.....	5
1.1.8 Katışık Yörüngeçler.....	5
1.1.9 Değerlik Kabuğu Eksicik Çiftleri İtmesi (DKEÇİ) Kuramı ve Özdecik Şekilleri.	7
1.1.10 Özdecik Yörüngeçleri Kuramı.....	8
1.1.11 Diğer Bağlar. Özdeciklerarası Etkileşmeler.....	9
1.1.12 Ögeciksel Yörüngeçlerin Doğrusal Bileşimi (LCAO).....	10
1.1.13 π Yaklaşımı.....	11
2. DEĞERLİK ETKİLEŞİM FORMÜLLERİ KURAMI (DEF).....	13
2.1 Değerlik Etkileşim Formülleri Kuramının Temel Kuralları.....	14
2.2 Değerli Etkileşim Formülleri Kuramının Matematik Temelleri.....	16
2.3 Özdeciklerin n_0 Özdeğerlerine Göre Sınıflandırılması İçin Basit Formüller ve Buna Göre Oluşturulan Çizelgeler.....	19
2.4 Değerlik Etkileşim Formülleri ile Resimli Yoldan Bazı Özdeciklerin Özdeğerlerinin Hesabı	23
2.5 Özdeğerlerin Hesabında Kolaylık ve Basitlik Açısından DEF Kuramı ile LCAO, Hückel Yaklaşımları ve π Yaklaşımının Karşılaştırılması İçin Benzen Özdeciğinin π özdeğerleri ve H_3 özdeciğinin özdeğerlerinin hesabı.....	31
3. SONUÇLAR.....	33
KAYNAKLAR.....	34
EKLER.....	36
EK.1 Bölüm 2.4 'deki Bazı Özdeciklerin Özdeğerlerin Hesabı ve Bilgisayar Yazılımı ile Özdeğerlerin Erkelerinin Bulunması.....	36
EK.2 Çalıştırılan Bilgisayar Programlarının Akış Şemaları.....	113
EK.3 Bölüm 2 'deki Özdeciksel Bağlaşım Düzesi ile Özdeciklerin Ögecikleşme Erkeleri Arasındaki İlişkileri Gösteren Çizelgeler.....	116
ÖZGEÇMİŞ.....	118

TEŞEKKÜR

Tez çalışmam süresince beni yönlendiren, bilgi, deneyim ve önerilerinden yararlandığım tez danışmanım Sayın Prof. Dr. Oktay SİNANOĞLU' na; kimya bölümü öğretim üyeleri Sayın Prof. Dr. Zekiye ÇINAR ve Sayın Doç. Dr. Abdülrezzak BOZDOĞAN' a; fizik bölümü öğretim üyesi Sayın Doç. Dr. Hasan TATLIPINAR' a; matematik bölümü öğretim üyesi Sayın Y. Doç. Dr. Ömer GÖK' e; pek çok konuda yardımcı olan matematik bölümünden Sayın Dr. Elif Tekin TARIM' a; fizik bölümü araştırma görevlisi Sayın Ercüment AKAT' a; matematik bölümü araştırma görevlileri Sayın Dr. Selmahan SELİM ve Sayın Işım DEMİRİZ' e; İstanbul Teknik Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Kimya Bölüm Başkanı Sayın Prof. Dr. Niyazi BIÇAK' a ve İstanbul Teknik Üniversitesi Fen- Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü Öğretim Üyesi Sayın Doç. Dr. Oya ATICI' ya; İTÜ Uçak ve Uzay Bilimleri Fakültesi Öğretim Üyesi Sayın Doç. Dr. Metin Orhan Kaya' ya; İstanbul Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Kimya Bölümü Araştırma görevlisi Sayın Adem ÇINARLI' ya teşekkür ederim.



ÖZET

Oktay Sinanođlu tarafından ortaya atılan Deđerlik Etkileşim Formülleri (DEF) kuramının kurallarından yola çıkılarak; basit bir resimli yolla bir özdecığın, bağlar (n_+), bağöner (n), bağlamaz (n_0) yörüngeçlerinin sayısını bulmak ve özdecığın kararlılığı (tepkime yeteneđi) hakkında fikir yürütmek mümkün olmaktadır.

Çalışmamızda, bu kuram yardımıyla pek çok özdecığın n_+ , n , n_0 sayılarını [DBD: düzey biçit dizini (LPI: level pattern indices)] hesapladık. Ayrıca, çeşitli çizelgeler oluşturduk ve karbon bileşiklerini içerdikleri n_+ , n , n_0 sayılarına göre sınıflandırdık. Özdeciksel bağlaşım düzesini ısıldevingen (termodinamik) sabitlerle karşılaştırarak, DEF kuramının doğruluđunu nitel olarak göstermeye çalıştık. Bundan başka, DEF kuramının kurallarını dikkate alarak oluşturduğumuz çizelgeleri kullanarak, basit resimli yolla dahi gerek kalmadan basit formüllerle n_+ , n , n_0 sayılarını bulmanın mümkün olduğunu gösterdik.

DEF kuramının nicel olarak kanıtlanması için ise; Oktay Sinanođlu'nun doktora öğrencisi Elif Tekin Tarım tarafından geliştirilen HAO isimli bilgisayar yazılımı kullanılarak, pek çok özdecığın n_+ , n , n_0 sayıları ve yazılımdaki özdeciklerle ilgili diđer hesaplar gösterildi.

ABSTRACT

Starting from the rules of the theory of “Valency Interaction Formulae” asserted by Oktay Sinanoğlu, it becomes possible to find out the number of the bonding (n_+), anti-bonding (n_-), and non-bonding (n_0) orbitals by a simple pictorial way to state about the stability (that is ability to reaction) of a molecule.

In our study, we calculated the n_+ , n_- , n_0 numbers of many molecules through the “Level Pattern Indices LPI ” and by the help of the above mentioned theory. Furthermore, we formed number tables and classified the carbon compounds according to their n_+ , n_- , n_0 numbers. We also tried to prove qualitatively the VIF theory, comparing the molecular binding orders with thermodynamic constants. Besides this, we showed that it is possible to find the n_+ , n_- , n_0 numbers by simple formulas and considering the rules of VIF , without even needing a simple pictorial way.

As for the quantitative proof of the VIF theory, the other calculations related with molecules and the n_+ , n_- , n_0 numbers of many molecules have been given by the use of the software named HAO and developed by Elif Tekin Tarım the doctoral student of Oktay Sinanoğlu.



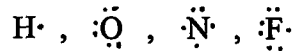
1.GİRİŞ

1.1 Kimyasal Bağlar ve Kimyasal Bağ Kuramları

İki ögeciğin (atomun) bir özdecik (molekül) oluşturmak üzere etkileşimi, kimyasal bağ olarak tanımlanır. Bir kimyasal bağ, ögecikleri ya da ögecik öbeklerini (gruplarını) belli bir uzaklıkta ve birarada tutmaya yetecek kuvvettir ve kimyasal bağlanma sonucu, ögeciklerden oluşan özdecikler arasında da özdecikler arası bağlanma kuvvetleri ortaya çıkar. Ögeciklerin ya da ögecik öbeklerinin arasındaki etkileşim, bunları ayırmak için en az 42 kJ mol^{-1} büyüklüğünde bir erke (enerji) gerektiriyorsa, bir kimyasal bağ oluşur. Özdeciklerarası etkileşimin erkesi daha düşüktür (Erdik ve Sarıkaya, 1984).

1.1.1 Lewis Simgeleri

Ögecikler, bağ oluşturmak üzere bir araya geldiklerinde, ekirdeklerine en uzakta bulunan eksicikler (elektronlar) etkileşir. Yani, bağlanma için en dış tabakanın (en yüksek erkeli tabaka), eksicikleri önemlidir; bu tabakaya *değerlik tabakası* ve bu tabakanın eksiciklerine de *değerlik eksicikleri* denir. *Lewis simgeleri*, ögecikleri göstermek için kullanılır ve sadece değerlik eksicikleri belirtilir. Bu simgelerde her eksicik bir nokta ile belirtildiğinden *eksicik-nokta simgeleri* olarak da bilinir. Bir ögenin (elementin) Lewis simgesi, ögenin simgesi etrafına değerlik eksiciği kadar nokta koyarak ya da çoğunlukla bir çift eksicik yerine bir çizgi çizerek ve tek eksicik için bir nokta koyarak yazılır. Örnek olarak,

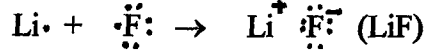


verilebilir (Erdik ve Sarıkaya, 1984).

1.1.2 Yükünel Bağ

Yükünel (iyonik) bağ, bir ögeciğin değerlik tabakasından bir ya da birkaç eksiciğin, diğer bir ögeciğin değerlik tabakasına geçmesiyle oluşur. Eksicik(ler) kaybeden ögecik artı (pozitif) yükün (iyon) yani artın (katyon) ve eksicik(ler) alan ögecik eksi (negatif) yükün yani eksin (anyon) haline geçer. Yani yükünler soy(asal) gaz eksicik düzenine ulaşırlar. Yükünel bağ, zıt

yüklü bu yükünler arasındaki çekme sonucu oluşur. Bir yükünel bağ oluşumunda, bir ögeciğin kaybettiği ya da kazandığı eksiciklerin sayısına değerlik (valens) denir. Örnek olarak,

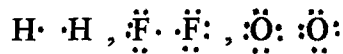


verilebilir (Erdik ve Sarıkaya, 1984).

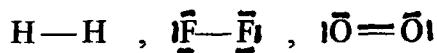
Ögeciklerin, yükünler oluşturarak soy gaz eksicik düzenine ulaşmaları *sekizli (oktet) kuralı* olarak bilinir. Sekizli kuralı, genel olarak A öbekleri öğelerine uygulanır; geçiş öğelerine uygulanamaz. Yükünel bağ oluşumunda etken yani yürütücü kuvvet, bileşik oluşturmak üzere yükün haline geçerek bağlanan ögeciklerin erkelerinin azalmasıdır. Genel olarak bir dizgenin (sistemin) erkesinin azalması kararlılığını artırır. Tepkimeyi yürüten kuvvet zıt yüklü yükünlerin birbirini çekmesidir ve bu kıvılcım (elektrostatik) çekme sırasında açığa çıkan erkeye *kırılca (kristal) erkesi* denir (Erdik ve Sarıkaya, 1984).

1.1.3 Kovalent Bağ

Çoğu zaman, bir yükünel bileşiğin oluşması ile daha kararlı bir durum elde edilemez. Örneğin, bir artının oluşması için gerekli erke (yükünleşme erkesi), bir eksinin oluşması sırasında salınan erke ve yükünel bileşiğin oluşması sırasında salınan erke (sırasıyla eksicik ilgisi ve kırılca erkesi) toplamı ile karşılanamaz. Bu durumda bir kovalent bağ oluşur. *Kovalent bağ*, bir eksicik çiftinin ögecikler arasında ortaklaşa kullanılmasıyla oluşur. Bağlayıcı kuvvet, ortaklaşa kullanılan eksicikler ile artı ögecik çekirdekleri arasındaki çekme kuvvetidir. Yükünel bağda olduğu gibi, kovalent bağın da kararlılığı, bağın oluşması ile bağlanan ögecik çiftinin erke düzeyindeki düşmedir. Yükünel bağdan farklı olarak; soy gaz eksicik dizilişine sahip olmak için her ikisinin de eksicik alması gerekli iki ögecik etkileştiğinde, eksicik alışverişiyle değil eksiciklerin ortaklaşa kullanılmasıyla kovalent bağ oluşumu gerçekleşir. Kovalent bağ, bir çift nokta (. .) ya da daha uygun olarak bir çizgi (—) ile gösterilir. Örnek olarak,



ya da

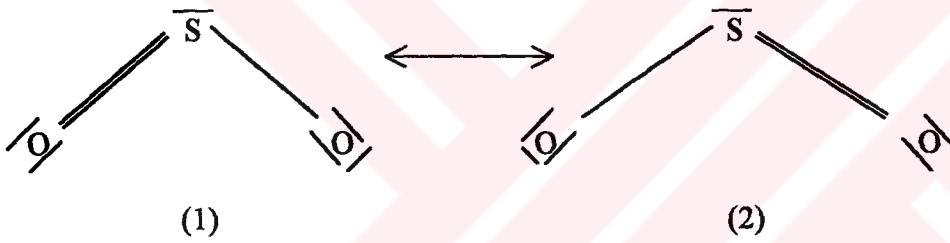


verilebilir (Erdik ve Sarıkaya,1984).

Yükünel bağ da olduđu gibi, kovalent bağların sayısı da öđeciklerin, çođunlukla, soy gaz eksicik dizilişine sahip olmak için gereksinme duyduđu eksicik sayısı ile belirlenir. Bir öđeciđin oluşturduđu kovalent bağların sayısına, yani çiftleştii eksiciklerin sayısına *kovalens* ya da *kovalens sayısı* denir (Erdik ve Sarıkaya, 1984).

1.1.4 Yankılaşım

Çođu zaman, bir özdecik ya da yükün için tek bir eksicik-nokta formülü yeterli değildir, yani özdecik ya da yükün için tek bir Lewis yapısı yazılamaz. Örneđin, kükürt dioksit, SO₂ özdecii için aşıđıdaki formüller yazılabilir:



Bu Lewis formüllerinde S ve O öđeciklerinin yerleri aynı olmakla birlikte eksicik çiftlerinin düzeni deđiştir. Her iki formülde de O öđeciklerinden biri tek bağ ile, diđeri çift bağ ile bađlıdır. Diđer taraftan, deneysel sonuçlar, her iki S — O bađının da özdeş özellikte olduđunu göstermiştir; yani her iki S—O bađının da özdeş uzunlukta olduđu bulunmuştur. Öyleyse, SO₂ için çizilen yapılardan hiçbirisi uygun değildir. Fakat, SO₂ için hem sekizli kuralını sađlayan ve hem de denel sonuçlara uyan tek bir formül verilemez. Bu durumda, özdeciiğin yapısı için olanaklı ve kabul edilebilir bütün Lewis yapıları çizilerek aralarına çift başı oklar konur ve bu yapılara *yankılaşım (rezonans) yapıları* denir. Özdecik ise, Lewis yapılarının *yankılaşım hibritidir*. Özdecik ya da yükün yapılarının hem sekizli kuralını sađlayan hem de denel sonuçlara uygun tek bir Lewis formülü ile gösterilememesi özelliđi *yankılaşım* olarak bilinir (Erdik ve Sarıkaya, 1984).

1.1.5 Bađın Ucaysallađı ve Çiftucay Kolcuk

Kimyasal bağların çođu, kovalent bağ ve yükünel bağ arasında özellikler taşıır. Bađlarda,

çoğunlukla, eksicikler bir ögecik tarafından daha kuvvetle çekilir ve bağdaki eksicik yoğunluğu ögeciklerden biri tarafına kayar. Bu özellik, *bağın kısmi yükümsel karakteri* ya da *bağın ucaysallığı (polarlığı)* olarak tanımlanır. İki ögecik arasındaki bağın eksicik çiftinin dağılımı için uç (ekstrem) durumlar ucaysal olmayan (apolar) kovalent bağ ve yükün bağıdır; bu iki uç arasında ucaysal kovalent bağlar bulunur. Ucaysal kovalent bağlar ve hatta yükün bağları içeren özdecikler, *ucaysal özdecikler* ve ucaysal olmayan kovalent bağları içeren özdecikler *ucaysal olmayan özdecikler* olarak adlandırılır; dolayısıyla kimyasal bileşiklerin bağ türlerini belirtmek için çoğunlukla ucaysal bileşik ve ucaysal olmayan bileşik terimleri kullanılır (Erdik ve Sarıkaya, 1984).

Ucaysal bir bağın, bağda yüklerinin bulunmasından dolayı bir *bağ çiftucay (dipol) kolcuğu (momenti)* vardır; yani bağ çiftucaysaldır. Bir bağın çiftucay kolcuğu, μ ; δ^+ yükü, δ^- yükünden, d uzaklığı ile ayrılmışsa $\mu=qd$ olur. Belli bir uzaklık ile ayrılmış δ^+ ve δ^- yükleri bir çiftucay oluşturur. İki ögecikli özdeciklerin eğer ucaysal ise çiftucay kolcuklarının büyük olacağı, ucaysal olmayan kovalent ise hiç çiftucay kolcukları olmayacağı sonucu çıkarılabilir. Bir bağın çiftucay kolcuğu, bağın tamamen yükümsel olduğu ve yükünlerin bir esicik yükü taşıdıkları (gerçekte doğru değil) kabul edilerek hesaplanır (Erdik ve Sarıkaya, 1984).

1.1.6 Bağ Erkesi. Bağ Uzunluğu

Kovalent bağlı ikiögecikli bir özdeciği yüksüz ögeciklerine ayırmak için verilmesi gerekli erke, *bağ bozunma erkesi (bağ erkesi)* olarak tanımlanır.

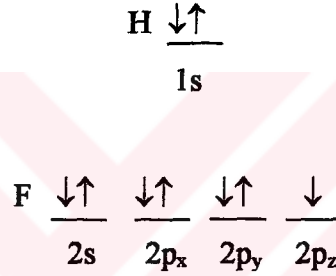


Bağ erkesi; bağ derecesinin artmasıyla artar ve bağın kovalent ya da yükümsel oluşunun bir ölçüsüdür ve bağın yükümsel karakteri arttıkça bağ erkesi de artar. Çok ögecikli özdeciklerde de bağ erkeleri ölçülebilir. Özdeş bağ içeren çeşitli özdecikler üzerinde çalışılarak bir bağ için *ortalama bağ erkesi* bulunur.

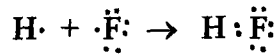
Bağlı iki ögecik arasındaki uzaklık *bağ uzunluğu* olarak tanımlanır. Bağ uzunluğu, bağ derecesinin artmasıyla yani bağ bağ erkesinin artmasıyla azalır (Erdik ve Sarıkaya, 1984).

1.1.7 Değerbağ Kuramı

Kimyasal bağlar için nicem düzeneğine (kuvantum mekaniğine) dayalı olarak geliştirilen iki önemli kuramdan biri *değerbağ (valens bond) kuramı* olarak bilinir. Bu kuram, iki ögeciğin bağ yapmak üzere bir araya geldiklerinde ögecik yörüngeçlerinin (orbitallerinin) uygun bir durumda üstüste geldiğini ve dönüleri (spinleri) zıt bir çift eksicığın bu üstüste çakışmış yörüngeçleri doldurarak bir kovalent bağ oluşturduğunu kabul eder. Kuramın temel ilkeleri; **a)** Ögecik yörüngeçleri ne kadar üstüste çakışırsa bağ o kadar güçlüdür, **b)** Bir ögecik birden fazla kovalent bağ yaptığı zaman, bağlar arasındaki açılar, bağlanma için kullanılan yörüngeçler arasındaki açılara eşit olmalıdır, **c)** Bir takım üstüste çakışmış yörüngeçde bir çift eksicığın ortaklaşa kullanılmasıyla bir tek bağ, iki ya da üç takım üstüste çakışmış yörüngeçde iki ya da üç çift eksicik çiftinin ortaklaşa kullanılmasıyla çift ve üçlü bağlar oluşur. Örnek olarak,



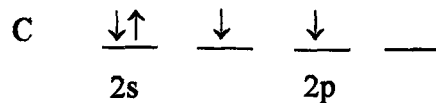
H' nin yarı dolu 1s yörüngeçi ile F'un 2p alt tabakasındaki yörüngeçlerinden yarı dolu olanının üstüste çakışması ile oluşan bağ verilebilir. Yani,



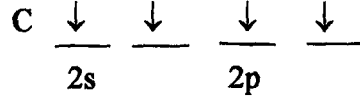
HF özdeciği oluşur. İki ögecikli bir özdecik için tek şekil, doğrusal olacağından, HF özdeciği doğrusaldır. (Erdik ve Sarıkaya, 1984)

1.1.8 Katışık Yörüngeçler

Yarı yarıya dolu ögecik yörüngeçlerinin üstüste kaynaşması taslamı (modeli) ile bütün özdecik yapıları açıklanamaz. Bu taslama göre C ögeciğinin H ögeciği ile iki tane bağ yapması gerekir ama C, H ile dört tane özdeş tür bağ yapar ve hidrokarbonların en basit bileşiği olan CH₄ (metan) özdeciğini oluşturur. Yani,

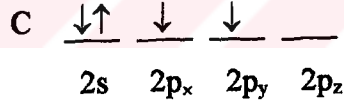


yukarıdaki gösterilişe göre 2p alt tabakasında ikitane çiftleşmemiş eksicik bulunur. Öyleyse beklenen yapı CH₂ olmalıdır. Fakat CH₂, kararlı değildir. Yukarıda bahsedilen CH₄ bileşiğinin yapısını açıklamak için eksicikleri tabaka içinde aşağıdaki gibi yayalım:

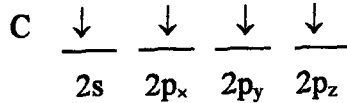


Bu durumda üç tane C—H bağı, C'un üç tane 2p yörüngeciyle üç tane H'in 1s yörüngeçinin üstüste çakışmasıyla, bir tane C—H bağı ise, C'un 2s yörüngeciyle bir tane H'in 1s yörüngeçinin üstüste çakışmasından oluşacaktır. Öyleyse, dördüncü C—H bağının diğer üçünden farklı olması beklenir, çünkü değişik tür yörüngeçlerden oluşmuştur. Gerçekte ise, bütün C—H bağları özdeştir ve özdeğin yapısı dörtyüzlüdür (tetrahedraldir). C ögeciği dörtyüzlünün merkezinde ve H ögecikleri köşelerinde bulunur. Denel sonuçlar, H—C—H bağ açısının da 109,5° olduğunu göstermiştir. Bu durum, Pauling tarafından geliştirilen *katışıklaşma (hibridleşme)* ve *katışık (hibrid) yörüngeçler* ile açıklanabilir:

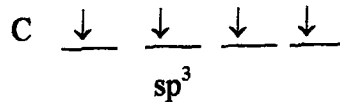
Aşağıda, dört tane özdeş tür bağı oluşturmak için yararlı (fakat varsayımsal (hipotetik)) bir işlem verilmiştir. Dört tane çiftleşmemiş eksicik elde edebilmek için, s eksiciklerinden biri p yörüngeçine çıkarılmış ve böylece C ögeciği için uyarılmış bir durum elde edilmiştir. Bu işlem için gerekli enerji 96 kkal / mol dür. Temel durum,



Uyarılmış durum,



Katışıklaşmış durum



olduğu görülür. Dört tane yarı yarıya dolmuş yörüngeçin dört tane özdeş tür yörüngeç vermek üzere kaynaşması (katışıklaşması), sp³ katışıklaşması (bir tane s ve üç tane p yörüngeçinin

katışıklaşması) olarak adlandırılır ve kuramsal olarak 55 kkal /mol lük bir erke gerektirir. Fakat, katışıklaşma erkesi gerçek değildir; çünkü, gerçekte, katışıklaşmış durumda bir C ögeciği yoktur. Katışıklaşma, yalnız bağ oluşması sırasında olur ve bu sırada dizge, varsayımsal katışıklaşma için gerekli olandan daha fazla erke açığa çıkmasıyla kararlı hale geçer. Diğer tür katışıklaşmalar da benzer şekilde oluşur (Erdik ve Sarıkaya, 1984).

1.1.9 Değerlik Kabuğu Eksicik Çiftleri İtmesi (DKEÇİ) Kuramı ve Özdecik Şekilleri

Kimyasal bağlanma kuramlarının amaçlarından biri, özdeciklerin şekillerinin bulunmasıdır. Değerbağ kuramından yararlanarak ve katışıklaşmış yörüngeçlerin türünü gözönüne alarak özdecik şekilleri yani geometrileri yukarıda verilen örneklerdeki gibi bulunabilir. Bu şekillerin daha kolay bulunmasını sağlayan bir kuram da *değerlik kabuğu eksicik çiftleri itmesi (VSEPR: valence shell electron pair repulsion) kuramı* olarak bilinir ve katışıklaşma türünün bilinmesini de gerektirmediğinden çok yararlıdır. Bu kuramın uygulanmasıyla, özdeciklerin Lewis formülleri yazılarak, şekilleri bulunabilir. Önce kuramı kısaca açıklayalım: Katışıklaşma kuramı, bir özdecikteki değerlik eksiciklerinin ögecikler etrafında bakışık olarak dağılacağı sonucunu verir. Bu eksiciklerin bir küre yüzeyi üzerinde birbirlerinden olabildiğince uzak eksicik çiftleri halinde bulunduğunu kabul edebiliriz. Kuramı uygularken merkez ögeciğinin ortaklanmış (bağ yapmış) ve ortaklanmamış bütün eksicik çiftleri gözönüne alınır. Eksicik çiftlerinin bir kısmı ortaklanmamışsa, özdecik şekli biraz değişir ve değişik şekilde adlandırılır. Özdecik şekilleri, eksicik çiftlerinin aralarında çekme en az olacak şekilde düzenlenmeleri yani değerlik tabakası eksicik çiftlerinin sayısına bağlı olarak elde edilir (Erdik ve Sarıkaya, 1984).

Geçiş (transisyon) metallerinin, eğer d yörüngeçleri tamamen boş (d^0) ve tamamen dolu (d^{10}) değil ise, bileşiklerin şekilleri bu kuram ile bulunamaz. Çünkü, bu metallerde d yörüngeçleri kısmen dolu ise çok çeşitli sayıda değerlik eksicikleri olacağı için eksicik çiftlerinin dağılması küresel bakışım (simetri) göstermeyebilir. Geçiş metalleri ve yükünleri d^0 ve d^{10} dizilişinde ise d yörüngeçlerinin özdecik geometrisi üzerinde etkisi olmayacağından, bunların bileşiklerinin şekilleri, eksicik çiftleri itmesi kuramından yararlanarak bulunabilir (Erdik ve Sarıkaya, 1984).

Eksicik çiftleri itmesi kuramı, çok sayıda özdeciklerin ve yükünlerin şekillerinin çabuk ve başarıyla bulunmasında kullanılır. Kuramın uygulanmasında önemli nokta, özdeciklerin ve yükünlerin Lewis formüllerinin yazılmasıdır (Erdik ve Sarıkaya, 1984).

1.1.10 Özdecik Yörüngeçleri Kuramı

Bu kuram, özdecığı, artı çekirdekler takımı ve özdecik etrafındaki yörüngeçlerden ibaret görür. Özdecik yörüngeçlerini dolduran eksicikler, öğeciklere ait olmayıp özdecığın tümüne aittir. Bir başka ifadeyle; bir özdecikte öğecik çekirdeklerinin etrafında özdecik yörüngeçleri takımı bulunur. Bir özdecikteki ve bir yükündeki özdecik yörüngeçlerinin gerçek şekli bilinmez. Yaklaşık doğru kabul edilen bir şekil, öğecik yörüngeçlerinin birleştirilmesiyle elde edilir. Bu işlem, öğecik yörüngeçlerine ait dalga işlevlerinin (fonksiyonlarının) toplanmasıyla ya da çıkarılmasıyla elde edilir. İki dalga işlevi toplanırsa, oluşan özdecik yörüngeçinde eksicik yoğunluğunun en fazla olduğu yer iki çekirdeğin arasındır. Bu tür bir yörüngeçde eksicikler çekirdekleri birarada tutar, yani bu yörüngeçlerin erke düzeyi, kendisini oluşturan öğecik yörüngeçlerinin erke düzeyinden daha düşüktür ve böylece kararlı bir özdecik oluşur. Bu tür yörüngeçlere *bağlar (bonding) özdecik yörüngeçleri* denir. Eğer iki dalga işlevi birbirinden çıkarılırsa, oluşan özdecik yörüngeçinde eksicik yoğunluğunun en fazla olduğu bölge iki çekirdeğin arası değildir. Eğer, özdecığın eksicikleri, bu tür bir yörüngeçde bulunursa, çekirdekleri birarada tutamaz, hatta çekirdeklerin birbirini itmesine neden olur. Bu yörüngeçlerin erke düzeyi, kendisini oluşturan öğecik yörüngeçlerinin erke düzeyinden daha yüksektir. Sonuç olarak, özdecığın kararlılığı azaldığından bu tür yörüngeçlere *bağönler (antibonding) özdecik yörüngeçleri* denir. Bazı özdeciklerde ise, bazı özdecik yörüngeçlerinin erkesi, kendisini oluşturan öğecik yörüngeçlerinin erke düzeylerinin ortalamasına eşit olmaktadır. Bu durumda, özdecığın oluşmasına erke bakımından bir katkı sağlamadığından, böyle özdecik yörüngeçlerine bağlamaz (non-bonding) özdecik yörüngeçleri denir (Erdik ve Sarıkaya, 1984).

Özdecik yörüngeçleri kuramının başarısı, O₂ özdecığındeki bağlanmanın açıklanmasında görülür. Deneyle, O₂ özdecığınde iki tane çiftleşmemiş eksicik bulunduğunu ve dizilmiktatıs (paramagnetik) olduğunu göstermiştir. Deneyle gösterdiği gibi özdecikte iki tane çiftleşmemiş eksicik bulunduğunu, ancak özdecik yörüngeçleri kuramı açıklar. Özdecik yörüngeçleri kuramı, iki öğecikli özdeciklerin yapısını başarıyla açıkladığı gibi, çok öğecikli özdeciklerin yapısını açıklamak için de kullanılır (Erdik ve Sarıkaya, 1984).

1.1.11 Diğer Bağlar. Özdeciklerarası Etkileşmeler

Yukarıdaki bilgiler ögecikler içinde ve özdecikleri (intramoleküler) oluşan bağlar ve çekim kuvveti ile ilgiliydi. Şimdi özdeciklerarası (intermoleküler) çekim kuvvetlerini kısaca inceleyeceğiz. Bu kuvvetler, özdeğin (maddenin) gaz, sıvı ya da katı halde oluşunu belirlediği gibi kimyasal tepkimelerde de önemli rol oynar. Özdecikiçi etkileşmeler yani yükünel ve kovalent bağlar çok güçlü olduğu halde,özdeciklerarası ve ögeciklerarası etkileşmeler oldukça zayıftır.Özdeciklerarası etkileşmeleri üç alt bölümde inceleyebiliriz: **a) Çiftucay-çiftucay etkileşmeleri:** Bu etkileşmeler, ucaysalözdecikler arasında görülür. Bu özdecikler devamlı çiftucay özelliğindedir ve kıvı (elektrik.) alanında yönlenir. İki ucaysal özdecik birbirine yanaşırken öyle yönlenir ki, birinin artı kutbu, diğerinin eksi kutbuna yanaşır. Bu yolla iki çiftucay arasında bir elektrostatik çekme oluşur. Fakat bu çekme, zıt yüklü yükünel arasındaki çekmeden, çok daha zayıftır. Çünkü; birincisi, çiftucayların ucunda kısmi yükünel bulunur, ikincisi,ögecikler ve özdecikler aynı zamanda devamlı hareket halindedir ve çarpışmalar çiftucayların düzgün yönlenmesini engeller, üçüncüsü, çiftucayların özdeş yüklü uçları arasında da itme kuvvetleri vardır. Çiftucay-çiftucay etkileşmeleri, yükünel ve kovalent bağların %1'i kadar güçlüdür. Gaz halinde, mormal basınçlarda özdecikler birbirinden uzak olduğundan çiftucay-çiftucay etkileşmeleri çok zayıftır. Gazın basıncı arttıkça, özdecikler birbirine çok yaklaşır; eğer gazın sıcaklığı da azalırsa devimsel erke (kinetik enerji) de azalır. Bu iki etkinin birleşmesiyle çiftucay-çiftucay etkileşmeleri artacağından gazın sıvılaşması, hatta katılaşması olanaklıdır. **b) Hidrojen bağı:** Bazı özdeciklerarası çekim kuvvetleri, çiftucay-çiftucay etkileşmelerinden beklenenden daha yüksektir. Bu tür etkileşmeler, diğer kovalent hidrürler ile karşılaştırıldığı zaman erime ve kaynama noktaları çok daha yüksek olan NH₃, H₂O ve HF'de görülebilir. Bu özdeciklerin aynı öbektaki diğer hidrürlerden çok daha yüksek erime ve kaynama noktalarına sahip oluşları, özdecikler arasında çiftucay-çiftucay etkileşmesinden daha güçlü bir kuvvet olduğunu gösterir. Bu özdeciklerin ortak özellikleri, yapılarında en az bir tane ortaklanmamış eksicik çifti içeren ve eksiçekerliği (elektronegatifliği) yüksek bir ögeciğe bağılı en az bir tane H ögeciği içermesidir. Kovalent bağılı O, F ve N ögecikleri, diğer özdeciğin H ögeciklerini çeker. H ögeciği, iki özdecik arasında köprü ödevini görerek özdeciklerarası etkileşmeyi artırır.



H-Bağı

H ögeciğinin küçüklüğü nedeniyle, iki özdecik birbirine o kadar yaklaşır ki, aralarındaki etkileşme, bir çiftucay-çiftucay etkileşmesinden çok bir bağ olarak göz önüne alınır. Bu özel bağ türüne *hidrojen bağı* denir; tipik bir kovalent bağ türünün yaklaşık % 10'u kadar güçlü olup erkesi 12-42 kJ mol⁻¹ dür. c) **London kuvvetleri (van der Waals kuvvetleri)**: Bu zayıf kuvvetlerin, gaz özdecikleri arasında olduğu 1873 yılında J. van der Waals tarafından ortaya konulmuş ve bu kuvvetlerin nasıl oluştuğuna ilişkin açıklama 1928 yılında F. London tarafından verilmiştir. Bu kuvvetleri kısaca şöyle açıklayabiliriz: Sürekli çiftucay olma özelliği taşımayan ucaysal olmayan özdecikler arasındaki etkileşmeler de göz önüne alınmalıdır. Çünkü, O₂, N₂ ve F₂ gibi tüm ucaysal olmayan özdecikler, hatta tek ögecikli asal gazlar bile sıvılaştırılabilir. Bu maddelerin kaynama noktaları çok düşüktür ve özdeciklerarası etkileşmeler çiftucay-çiftucay etkileşmelerinden daha zayıftır. London kuvvetlerinin bir ögecik ya da özdecikte eksiciklerin serbest hareketleri sonucu ortaya çıktığı düşünülür. Ögecik içinde eksicik yoğunluğu, ortalama olarak küresel bakışık (simetrik) olduğu halde, herhangi bir anda ögecikde yük dağılımı değişebilir. Ögeciğin bir tarafında, diğer tarafından daha fazla oluşu sonucu komşu ögecikdeki yük dağılımı da değişir. Böylece geçici çiftucaylar oluşur ve bu çiftucaylar kaybolmadan yeni çiftucaylar oluşturur. Çiftucaylar arasındaki çekme güçlü olmakla beraber oluşma süreleri kısa olduğundan London kuvvetleri özdeciklerarası en zayıf etkileşmelerdir. Ucaysal olmayan özdecikler arasındaki çekme kuvvetleri, London kuvvetleridir ve ucaysal özdecikler arasında da diğer kuvvetlere — çiftucay-çiftucay etkileşmesi ve H- bağı — ek olarak bulunur. H₂O ve NH₃' de çiftucay-çiftucay etkileşme erkesi aynı zamanda H-bağı erkesini de içerir (Erdik ve Sarıkaya, 1984).

1.1.12 Ögeciksel Yörüngeçlerin Doğrusal Bileşimi (LCAO)

Bir özdecikte bulunan çekirdekler birbirinden çok uzak mesafede iseler, kovalent bağları oluşturan eksicikler ögeciksel yörüngeçlerde bulunur. Bu nedenle, ögeciksel yörüngeçlerin doğrusal bileşimi (LCAO: atomik orbitallerin lineer kombinasyonu) yönteminde özdeciciğin dalga işlevi, kendisini oluşturan ögeciklerin dalga işlevlerinin toplamı olarak yazılır.

$$\Psi = c_1 X_1 + c_2 X_2 + \dots + c_n X_n \quad (1.1)$$

Bu eşitlikte; ψ özdeciksel dalga işlevi, X_1, X_2, \dots, X_n ögeciksel dalga işlevleri, c_1, c_2, \dots, c_n de katsayılarıdır.

Özdeciksel yörüngeçler için şu kurallar geçerlidir: **a)** Özdecikdeki her esicik, çekirdekleri birarada tutan özdeciksel yörüngeçi belirleyen bir dalga işlevi ile gösterilir. **b)** Her dalga işlevi belirli nicem (kuvantum) sayıları ile tanımlanır. **c)** Her dalga işlevi belirli bir erkeye sahiptir. **d)** Her eksiciğin dönü nicem sayısı $+1/2$ ya da $-1/2$ 'dir. **e)** Pauli ilkesi, Aufbau ilkesi ve Hund kuralı özdecikler için de geçerlidir ve özdeciklerin elektronik yapılarının açıklanması için kullanılır.

Özdeciksel dalga işlevi (1) denklemi ile gösterilmiştir. Katsayı belirtkeni (determinantı) ise;

$$\begin{vmatrix} H_{11} - ES_{11} & H_{12} - ES_{12} & \cdots & H_{1n} - ES_{1n} \\ H_{21} - ES_{21} & H_{22} - ES_{22} & \cdots & H_{2n} - ES_{2n} \\ H_{31} - ES_{31} & H_{32} - ES_{32} & \cdots & H_{3n} - ES_{3n} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ H_{n1} - ES_{n1} & H_{n2} - ES_{n2} & \cdots & H_{nn} - ES_{nn} \end{vmatrix} = 0 \quad (1.2)$$

dır. Bu belirtkene özdeciksel dizgenin *kök (seküler) belirtkeni* denir.

Bu belirtkendeki S , *kaplaşım (overlap) tümlevleri (integralleri)*, H *Coulomb tümlevleri*, β ise *yankılaşım tümlevleri* olarak bilinir. Bu tümlevler Hückel yaklaşımları ile bulunur. Hückel yaklaşımları kök belirtkeninde yer alan tümlevlerin yaklaşık değerlerini verir. Bu tümlev aşağıda verilmiştir:

$$S_{ij} = \int X_i X_j \cdot d\tau \quad (1.3)$$

Eksiciklerin, i ve j ögeciğinin ögecik yörüngeçindeki erkesini gösteren tümlevlere Coulomb tümlevleri adı verilir. Bu tümlev şöyle yazılır:

$$H_{ij} = \int X_i H X_j \cdot d\tau \quad (1.4)$$

(Çınar, 1988).

1.1.13 π Yaklaşımı

Özdeciksel yörüngeç dalga işlevleri ve erke düzeyleri ögeciksel yörüngeçlerin doğrusal bileşimleri yöntemi ile hesaplanabilir. Ancak, karmaşık yapıdaki özdecikler için yapılan hesaplar giderek zorlaşır ve sonuçta bulunan değerler gerçek değerinden uzaklaşır. Bu nedenle,

hesapları kolaylaştırmak ve daha güvenilir değerler elde edebilmek için π yaklaşımı geliştirilmiştir. Bu yaklaşımda, özdecikdeki σ bağlarının tamamının yerelleşmiş (lokalize) olduğu kabul edilir. Bu bağlar birleştirdikleri ögecikler arasında sabit kalan bağlardır. π bağları ise hareketli eksiciklerden oluşmuştur. π bağları, σ bağlarından farklı olarak, sadece birleştirdikleri ögecikleri değil, özdecikdeki tüm ögecikleri etkileyen yaygın (delokalize) bağlardır. π yaklaşımına göre σ bağlarının özdecığın elektronik özelliklerine hiçbir katkısı yoktur. Elektronik özellikler π bağlarından kaynaklanır (Çınar, 1988).



2. DEĞERLİK ETKİLEŞİM FORMÜLLERİ KURAMI (DEF)

Modern nicem kimyasında özdecik yapı ve özelliklerinin aydınlatılması değerbağ kuramı ve özdeciksel yörüngeçler kuramı yardımıyla yapılmaktadır. Ayrıca katışık öğecik yörüngeçleri ve değerlik kabuğu eksicik çiftleri itmesi kuramları kullanılarak özdecik geometrileri oldukça iyi bir şekilde tahmin edilebilmektedir. Buna rağmen, özdecığın kararlı olup olmayacağı hakkında önceden fikir yürütmek mümkün olmamaktadır. Öğecik yörüngemsileri kuramı, bakışım ve öbek kuramı ile birleştirilince kararlı özdecikler arasındaki tepkimelerin olabilirliği konusunda, önceden fikir yürütmeye yardımcı olmaktadır. Bunun için özdecik yörüngeçlerinin ve bakışımalarının bilinmesi gerekmekte, bakışık olmayan hallere uygulanamamaktadır (Pamuk, 1989).

Değerlik etkileşim formülleri (VIF: valency interaction formulae) kuramı değerbağ kuramı ve özdeciksel yörüngeçler kuramına dayanmakta; fakat, aşağıda da açıklayacağımız gibi çok daha basit bir şekilde özdecığın kararlılığı ya da tepkimenin olabilirliği konusunda önceden fikir yürütmeyi sağlamaktadır. Kuramın çıkarılışı ve ayrıntıları nicem düzeneği ve öbek kuramı bilgilerini gerektirmekteyse de, günlük uygulama için çok basit kimya bilgisi yeterli olmaktadır. DEF kuramının amacı, bir özdecığın ya da tepkime ürünlerinin toplam bağlar, bağlamaz ve bağönler yörüngeçlerinin sayısını bularak özdecığın kararlılığı ya da tepkimenin olabilirliği hakkında önceden fikir yürütmektir. Özdecikdeki bağlar, bağlamaz ve bağönler yörüngeçlerinin toplam sayısına , sırasıyla n_+ , n_0 , n_- , bunlardaki toplam eksicik sayısına da N_+ , N_0 , N_- dersek, düzey biçit dizini (level pattern indices),

$$DBD (LPI) = \{ n_+, n_0, n_- \}$$

ve eksicik sayı dizini,

$$ESD (ECI) = \{ N_+, N_0, N_- \}$$

olur (Sinanoğlu, 1985; Pamuk, 1989).

DEF kuramında, özdecığı oluşturan her öğeciğin n_a ile gösterilen bir değerlik kabuk büyüklüğü (valency shell size) vardır. Bu büyüklük öğeciklerin değerlik kabuğundaki öğecik yörüngeçlerinin toplam sayısına eşittir. Örnek olarak H öğeciği için $n_a = 1$, baş öbek öğeleri (Li, Be, B, C, O, F, Ne vb.) için $n_a = 4$, geçiş metalleri için $n_a = 9$ dur. Özdeciklerdeki bütün

öğeciklere ait değerlik kabuk büyüklükleri toplamı, toplam öğecik değerlik sayısına, dolayısıyla da toplam özdecik yörüngeç sayısına eşittir:

$$n = n_+ + n_0 + n_- \quad (2.1)$$

Özdecikdeki toplam eksicik sayısı ise,

$$N = N_+ + N_0 + N_- \quad (2.2)$$

toplama eşittir (Pamuk, 1989).

DBD ve ESD, özdecik yapı değiştirdiği, parçalandığı ya da birleşerek yeni ürünler verdiği zaman değişmemektedir. Özdecikdeki her öğecik değerlik kabuk büyüklüğüne (n_a) eşit sayıda *değerlik noktası (DN (VP: valency point))* içerir. Bunlar saf ya da katışık öğecik yörüngeçlerine karşılık gelir. İki öğecik arasındaki etkileşmeler DN ve DN' noktaları arasına çizilen bir *etkileşim çizgisi (interaction line)* ile gösterilir. Bu çizgiler bir başa karşılık gelmez. Bunlar bir çift değerlik noktasının arasındaki tek-eksicik etkileşiminin gösterimidir. Özdeciksel yörüngeç kuramındaki etkileşme tümlevlerine karşılık gelen DÇ: değerlik çizgisi (VL:valency line) belirli bir kuvvete sahiptir. Özdeciklerdeki tüm öğecikler özdeş olduğu takdirde, DÇ kuvvetleri $\kappa = 1$ alınır. Ayrıca, DN ları kendi kendileriyle de etkileşebildiği için, DN larının kuvvetinden de söz edilir. Eğer, özdecik, eksicikerliği farklı bir öğecik içeriyorsa, bunun DN kuvveti farklı olmaktadır. Bu farklılık DN ndan başlayıp yine aynı noktada sonlanan bir çizgi, yani bir *kulak (loop)* ile gösterilir ve kuvveti de ξ ile gösterilir (Sinanoğlu, 1985; Pamuk, 1989).

Baş öbek öğelerinden oluşan bir özdecikde öğecikler arasında etkileşmeye girmeyen DN öğecik içinde birbirleriyle birleştirilebilmektedir. Böylece aşağıda gösterilen dörtyüzlü yapı ortaya çıkmaktadır (Sinanoğlu, 1985; Pamuk, 1989).

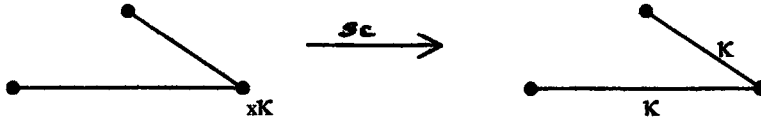
Değerlik noktalarının öğecik-içi ya da öğecikler-arası birleştirilmesi ile elde edilen yapısal formüllere DEF adı verilir (Sinanoğlu, 1985)

2.1 Değerlik Etkileşim Formülleri Kuramının Temel Kuralları

Bir özdecige ait DBD değeri ona ait YF:Yapısal formül (SF:Structural formula) DEF nün indirgenmesi ile kolayca bulunabilir. Bu indirgemeye ait kurallar şunlardır: **a) Kappa kuralı:** Bir çizitin (grafik) herhangi bir köşesini (noktasını) artı, eksi değerli fakat sıfır olmayan herhangi

herhangi bir sayıyla çarptığımızda, o köşeden çıkan tüm çizgilerin şiddetleri de aynı kapa sayısı (κ) sayısı ile çarpılmış olur. Bu çarpma işlemi DEF'i çarpıtır, değiştirir, vb.; fakat DBD'yi etkilemez (Şekil 2.1). **b) Yıldız kuralı:** Verilmiş çizitin herhangi bir köşesini kaldırıp başka bir köşe üzerine oturtabiliriz. Bu suretle, ilk köşeye varan tüm çizgiler, kalkıp yeni köşeye bağlanır, çizitte yeni çizgiler meydana gelir ancak, eski çizgileri de silmeyiz. Elde edilen yeni çizitte eskisine nazaran daha çok çizgi vardır. Yeni çizitte iki çizgi üstüste gelip çakışırsa çizgilerin şiddetini cebirsel olarak toplarız; yeni çizitteki çizginin şiddeti artar (Şekil 2.2). Bu iki kuralla ilgili gösterimler aşağıda verilmiştir:

a)



Şekil 2.1

b)



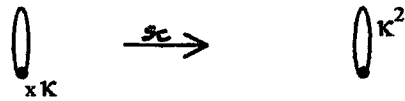
Şekil 2.2

(Sinanoğlu, 1984d; Sinanoğlu, 1999).

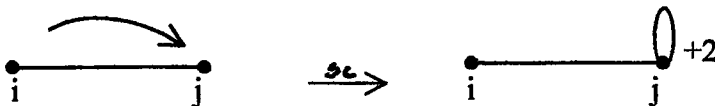
Kappa ve yıldız kurallarından türetilen kulak kuralları ise şunlardır: **a)** Her tepeden kulak için iki çizgi çıktığından, o tepeli κ sayısı ile çarpmak o kulağın kuvvetini κ^2 ile çarpmak demektir. **b)** Tepe noktaları i ve j bir çizgi ile birleştirilmiş olsun. i nin j ye taşınması j de 2 kuvvetinde bir kulak oluşturur. **c)** Eğer, i ve j bir çizgi ile birleştirilmemiş ve i üzerinde ξ kuvvetinde bir kulak varsa, i tepesi j de ξ kuvvetinde bir kulak oluşturur. **d)** Eğer, i ve j bir çizgi ile birleştirilmiş ve i de bir kulak varsa, i nin j ye taşınmasıyla j de $2\kappa + \xi$ değerinde bir kulak elde edilir.

Kappa ve yıldız kurallarından türetilen kulak kurallarıyla ilgili gösterimler aşağıdadır:

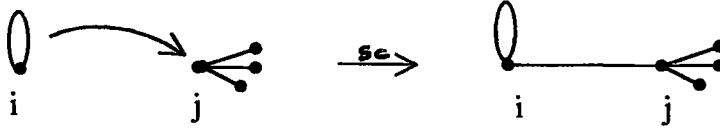
a)



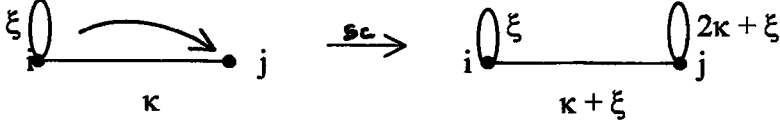
b)



c)



d)



(Sinanoğlu, 1985; Pamuk, 1989).

2.2 Değerlik Etkileşim Formüllerinin Kuramının Matematik Temelleri

Kuramın matematik temellerinin ayrıntısına girmeyeceğiz. Sadece temel bağıntıları ve ilgili açıklamaları vermekle yetineceğiz. Geniş bilgi ilgili kaynaklardan edinilebilir (Sinanoğlu, 1984a, b, c, d, e, f; Sinanoğlu, 1985; Sinanoğlu 1992; Sinanoğlu ve diğerleri, 1994; Sinanoğlu, 1999).

DEF kuramı *doğrusal eşdeğişirlik (linear covariance)* ilkesine dayanır. Bu ilke nicem düzeneği ve nokta-öbek kuramı bilgisine dayanır. Denklemleri çözmek, fiziksel nicelikleri hesaplamak için bir yöneyler (vektörler) tabanı seçip belli bir temsil üzerinde çalışmak zorundayız. Bunun için D.O: dikey-olağan (O.N: ortonormal) ya da D.O olmayan (non-O.N) temelleri kapsayan genel doğrusal denklem temsillerini doğrusal eşdeğişirlik ilkesine göre yazacağız. O zaman temsil ne olursa olsun denklemler özdeş görünümde olacaktır (Sinanoğlu, 1999).

Önce, bir eksiciğin Hamilton etkisi ile DEF taslamamı (modelini) veren denklemi yazalım:

$$h = \beta_{ij} A_{ij} \quad (2.3)$$

Bu denklemde,

$$\beta_{ij} = \langle e_i | h | e_j \rangle \quad (2.4)$$

ve

$$2 A_{ij} = |e_i\rangle\langle e_j| + |e_j\rangle\langle e_i| \quad (2.5)$$

dir.

β_{ij} ögeciklerarası çizgilerin kuvvetidir. Standart kuvvet $\beta_{ij}/\beta_0 \cong 1$ alınabilir. A_{ij} ise, DEF kuramında ögecikler arasındaki bir çizgiyi temsil eder. Kulak çizgilerine karşılık gelen öz enerji, $\alpha_{ii} = \beta_{ii}$ ile gösterilir. Eğer, bunların tümü aynı ya da birbirine çok yakınsa, o zaman bu “standart” $\{\alpha_i = \alpha_0\}$ kulakları DEF çiziminde gösterilmez (Sinanoğlu, 1984f).

Özişlevler (eigenvalues) denklemini soyut (eşdeğişmez) biçimde yazarsak:

$$(h-\lambda I)|\psi\rangle = 0 \quad (2.6)$$

(2.6) denklemindeki birim işler I 'yi eşdeğişir olarak yazabiliriz:

$$I = |e_\mu\rangle\langle e^\mu| \quad (2.7)$$

(2.7) denkleminde, V_n yöney uzayında $\{|e_\mu\rangle\}$ eşdeğişir (covariant) taban yöneyleridir; $\{|e^\mu\rangle\}$ tersdeğişir (contravariant) taban yöneyleri, ölçek gereyi (metrik tensor) kullanılarak bulunur (Sinanoğlu, 1992).

Yani,

$$|e^\mu\rangle = \Delta^{\mu\nu}|e_\nu\rangle \quad (2.8)$$

Son denklemdaki ölçek gereyi, eşdeğişir yöneylerin çarpımı olarak tanımlanır:

$$\Delta_{\mu\nu} = \langle e_\mu | e_\nu \rangle \quad (2.9)$$

Bu ölçek gereyi D.O değildir.

Ve

$$\Delta^{\mu\nu} \Delta_{\nu\rho} = I^\mu{}_\rho \quad (2.10)$$

dir.

Ölçek gereyi hesaplanmış kaplaşım dizeyi (overlap matrisi) $S_{\mu\nu}$ dür. Bu, AO'ler arası $\langle e_\mu | e_\nu \rangle$ tümlevleridir. Yöneylein doğrusal bağımsız olması için S dizeyinin tersi var olmalı (S^{-1}) ve $|S| \neq 0$ olmalıdır. Burada,

$$S^{-1} = \Delta_{\mu\nu} \quad (2.11)$$

dir.

(2.6) denklemine D.O bir taban seçip I'yı birkaç yerine uygularsak:

$$(h_{\mu\nu} - \lambda \delta_{\mu\nu}) c^\nu = 0 \quad (2.12)$$

denklemi elde edilir. Birim işler I, Kronecker delta δ oldu (Sinanoğlu, 1999).

(2.12) denklemindeki D.O tabanlar, özdeciklerde, özdeciksel yörüngeçler ya da ögeciksel dikeyleştirilmiş yörüngeçler (OAO: orthogonalized atomic orbitals) olabilir. MO \rightarrow OAO dönüştürümü birimsel ya da dikey olduğu için denklem (2.12) in vereceği özdeğerler değişmez. Taban diye olağan ögecik yörüngeçleri (AO) alındığında, dönüştürüm D.O olmayacağı için denklem (2.12)' in biçimi değişecektir (Sinanoğlu, 1999).

Taban için D.O olmayan yöneyleler kullanılacaksa, son denklemi eşdeğişir biçimde yazmamız gerekir. Denklem (2.12) yerine şu denklem yazılır:

$$(h_{\mu\nu} - \lambda \Delta_{\mu\nu}) c^\nu = 0 \quad (2.13)$$

(Sinanoğlu, 1992; Sinanoğlu 1999).

Son denklem doğrusal dönüşümler altında değişmezdir. Ayrıca, D.O ve D.O olmayan taban yapılar için doğrudur. Son denklemden bulacağımız özdeğerler denklem (2.12)'deki MO tabanındaki özdeğerlerden farklı olacak, çünkü MO'den AO tabanına dönüştürüm D.O değildi. Çünkü özdeğerler, sadece D.O'dan D.O'a bir dönüşüm söz konusu ise değişmezdir (Sinanoğlu, 1999).

2.3 Özdeciklerin Özdeğerlerine Göre Sınıflandırılması İçin Basit Formüller ve Buna Göre Oluşturulan Çizelgeler

Çalışmamızda hidrokarbonları (hk) incelerken, bu özdeciklerin kendi aralarında sınıflandırılabilmesini ve bu sınıflarla ilgili basit sayısal bağıntılar kurulabileceğini fark ettik. Şimdi bununla ilgili temel kuralı verelim:

Temel kural: Halka yapılı hk'ları; tek karbon sayılı doymuş, çift karbon sayılı doymuş, tek karbon sayılı tek çift bağlı, çift karbon sayılı tek çift bağlı, eşlenik (konjuge) çift bağ içeren özdecikler olarak sınıflandırmak mümkündür. Bu sınıflandırma özdeciklerin DBD'si yani ESD'si ile doğrudan ilişkilidir. Bu ilişkiler bazı sayısal bağıntılarla gösterilmiştir. Ayrıca, sınıflar arasındaki ilişkiler de bu sayısal bağıntılar yardımıyla gösterilebilir. sınıflandırma yardımıyla önce ESD ve sonra özdeğerlerin türü (n_+ , n , n_0) bulunabileceği gibi, tersi de mümkündür.

Bu temel kuralı bu şekilde tanımlamamızdaki amaç, karbon sayılarına göre özdecikleri sınıflandırıp kararlılıklarını yani tepkime yeteneklerini DBD dolayısıyla ESD ile ilişkilendirmek daha kolay olduğundan, ayrıca, DBD'ler arasındaki sayısal ilişkileri daha kolay anlatabilmek içindir.

Yukarıdaki temel kuraldan yola çıkarak iki alt kural türetebiliriz:

Alt kural 1: Doymuş hk' lar ve tek çift bağ içeren hk sınıflarında karbon sayısının türü (tek ya da çift olması) ile n_0 arasında doğrudan bir ilişki vardır. Buna göre:

Tek karbon sayılı halkalı doymuş özdecikler = $\{C_3H_6, C_5H_{10}, C_7H_{14}, C_9H_{18}, \dots, C_xH_{2x}\}$

Burada i.özdecik için $n_0=0$, $n_+=n$ ve $n_i=n_{i-1}+12$ ilişkisi vardır (n_i :i.özdecğin toplam özdeğer sayısı).

Tek karbon sayılı tek çift bağlı halkalı bileşikler = $\{C_3H_4, C_5H_8, C_7H_{12}, C_9H_{16}, \dots, C_xH_{2x-2}\}$

Burada i.özdecik için $n_0=0$, $n_+=n$ ve $n_i=n_{i-1}+12$ ilişkisi vardır.

Çift karbon sayılı halkalı doymuş özdecikler = $\{C_4H_8, C_6H_{12}, C_8H_{16}, C_{10}H_{20}, \dots, C_xH_{2x}\}$

Burada i.özdecik için $n_0=2$, $n_+=n$ ve $n_i=n_{i-1}+12$ ilişkisi vardır.

Çift karbon sayılı tek çift bağlı halkalı bileşikler = $\{C_4H_6, C_6H_{10}, C_8H_{14}, C_{10}H_{18}, \dots, C_xH_{2x-2}\}$

Burada i.özdecik için $n_0=2$, $n_+=n$ ve $n_i=n_{i-1}+12$ ilişkisi vardır.

Aynı temel kuraldan yola çıkılarak düz zincirli hk'lar için de benzer şeyler söylenebilir.

Düz zincirli doymuşHK'lar (alkanlar) = $\{CH_4, C_2H_6, C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12}, \dots, C_xH_{2x+2}\}$

Burada i.özdecik için $n_0=0$, $n_+=n$ ve $n_i=n_{i-1}+6$ ilişkisi vardır.

Eşlenik çift bağ içeren özdecikler için ilginç olan şöyle bir alt kural verebiliriz:

Alt kural 2: Dört ve dördün tam katları kadar karbona sahip özdecikler özdeş sayıda n_0 sayısına, dördün kesirli katları kadar karbona sahip özdecikler özdeş sayıda n_0 sayısına sahiptir.

Yani eşlenik çifte bağ içeren halkalı bileşikler = $\{C_4H_4, C_6H_6, C_8H_8, C_{10}H_{10}, \dots, C_xH_x\}$ olmak üzere;

i.özdecik için,

karbon sayısı 4 ve 4 ün tam katları ise $n_0=4$, $n_+=n$ ve $n_i=n_{i-2}+20$,

karbon sayısı 4 ün kesirli (1.5, 2.5, 3.5,...) katları ise $n_0=2$, $n_+=n$ ve $n_i=n_{i-2}+20$ ilişkisi vardır.

Görülüyor ki; karbon kimyası ile sayıların dili arasında doğal ve ilginç ilişkiler var. Bundan başka, DEF resimlerini çizmeden toplam özdeğerleri ve özdeğerlerin türünü, toplam değerlik eksicikleri sayısını hesaplamak mümkün olmaktadır. Tüm anlatılanlardan da anlaşılacağı gibi, DEF kuramı kendi kendini sadeleştiren yalın ve derin bir kuramdır.

Yukarıda verilen temel kural ve alt kurallardan yola çıkarak, özdecik sınıflarıyla özdeğerler dolayısıyla özdeğerlere karşılık gelen yörüngeçlerde bulunan eksicik sayıları ile ilgili ilişkileri göstermek için çizelgeler oluşturduk. Oluşturduğumuz çizelgeler Çizelge 2.1, 2.2, 2.3, 2.4, 2.5 ve 2.6 da verilmiştir.

Çizelge 2.1.

Tek karbon sayılı halkalı doymuş bileşikler (halkaalkanlar)	$n = DBD$	$N=ESD$
C_3H_6	$\{n_+ = n = 9, n_0 = 0\}$	$\{N_+ = 18, N_- = N_0 = 0\}$
C_5H_{10}	$\{n_+ = n = 15, n_0 = 0\}$	$\{N_+ = 30, N_- = N_0 = 0\}$
C_7H_{14}	$\{n_+ = n = 21, n_0 = 0\}$	$\{N_+ = 42, N_- = N_0 = 0\}$
C_9H_{18}	$\{n_+ = n = 27, n_0 = 0\}$	$\{N_+ = 54, N_- = N_0 = 0\}$

Çizelge 2.2

Çift karbon sayılı halkalı doymuş bileşikler (halkaalkanlar)	n = DBD	N=ESD
C_4H_8	$\{n_+ = n = 11, n_0 = 2\}$	$\{N_+ = 22, N = 0, N_0 = 2\}$
C_6H_{12}	$\{n_+ = n = 17, n_0 = 2\}$	$\{N_+ = 34, N = 0, N_0 = 2\}$
C_8H_{16}	$\{n_+ = n = 23, n_0 = 2\}$	$\{N_+ = 46, N = 0, N_0 = 2\}$
$C_{10}H_{20}$	$\{n_+ = n = 29, n_0 = 2\}$	$\{N_+ = 58, N = 0, N_0 = 2\}$

Çizelge 2.3

Tek karbon sayılı, tek çift bağ içeren halkalı bileşikler (halkaalkanlar)	n = DBD	N=ESD
C_3H_4	$\{n_+ = n = 8, n_0 = 0\}$ $\{n_+^\pi = n^\pi = 1, n_0^\pi = 0\}$ $\{n_+^\sigma = n^\sigma = 7, n_0^\sigma = 0\}$	$\{N_+ = 16, N = N_0 = 0\}$ $\{N_+^\pi = 2, N^\pi = N_0^\pi = 0\}$ $\{N_+^\sigma = 14, N^\sigma = N_0^\sigma = 0\}$
C_5H_8	$\{n_+ = n = 14, n_0 = 0\}$ $\{n_+^\pi = n^\pi = 1, n_0^\pi = 0\}$ $\{n_+^\sigma = n^\sigma = 13, n_0^\sigma = 0\}$	$\{N_+ = 28, N = N_0 = 0\}$ $\{N_+^\pi = 2, N^\pi = N_0^\pi = 0\}$ $\{N_+^\sigma = 26, N^\sigma = N_0^\sigma = 0\}$
C_7H_{12}	$\{n_+ = n = 20, n_0 = 0\}$ $\{n_+^\pi = n^\pi = 1, n_0^\pi = 0\}$ $\{n_+^\sigma = n^\sigma = 19, n_0^\sigma = 0\}$	$\{N_+ = 40, N = N_0 = 0\}$ $\{N_+^\pi = 2, N^\pi = N_0^\pi = 0\}$ $\{N_+^\sigma = 38, N^\sigma = N_0^\sigma = 0\}$
C_9H_{16}	$\{n_+ = n = 26, n_0 = 0\}$ $\{n_+^\pi = n^\pi = 1, n_0^\pi = 0\}$ $\{n_+^\sigma = n^\sigma = 25, n_0^\sigma = 0\}$	$\{N_+ = 52, N = 0, N_0 = 0\}$ $\{N_+^\pi = 2, N^\pi = N_0^\pi = 0\}$ $\{N_+^\sigma = 50, N^\sigma = N_0^\sigma = 0\}$

Çizelge 2.4

Çift karbon sayılı, tek çift bağlı halkalı doymuş bileşikler	n = DBD	N=ESD
C_4H_6	$\{n_+ = n = 10, n_0 = 2\}$ $\{n_+^\pi = n^\pi = 1, n_0^\pi = 0\}$ $\{n_+^\sigma = n^\sigma = 9, n_0^\sigma = 2\}$	$\{N_+ = 20, N = 0, N_0 = 2\}$ $\{N_+^\pi = 2, N^\pi = N_0^\pi = 0\}$ $\{N_+^\sigma = 18, N^\sigma = 0, N_0^\sigma = 2\}$
C_6H_{10}	$\{n_+ = n = 16, n_0 = 2\}$ $\{n_+^\pi = n^\pi = 1, n_0^\pi = 0\}$ $\{n_+^\sigma = n^\sigma = 15, n_0^\sigma = 2\}$	$\{N_+ = 32, N = 0, N_0 = 2\}$ $\{N_+^\pi = 2, N^\pi = N_0^\pi = 0\}$ $\{N_+^\sigma = 30, N^\sigma = 0, N_0^\sigma = 2\}$
C_8H_{14}	$\{n_+ = n = 22, n_0 = 2\}$ $\{n_+^\pi = n^\pi = 1, n_0^\pi = 0\}$ $\{n_+^\sigma = n^\sigma = 21, n_0^\sigma = 2\}$	$\{N_+ = 44, N = 0, N_0 = 2\}$ $\{N_+^\pi = 2, N^\pi = N_0^\pi = 0\}$ $\{N_+^\sigma = 42, N^\sigma = 0, N_0^\sigma = 2\}$
$C_{10}H_{18}$	$\{n_+ = n = 28, n_0 = 2\}$ $\{n_+^\pi = n^\pi = 1, n_0^\pi = 0\}$ $\{n_+^\sigma = n^\sigma = 27, n_0^\sigma = 2\}$	$\{N_+ = 56, N = 0, N_0 = 2\}$ $\{N_+^\pi = 2, N^\pi = N_0^\pi = 0\}$ $\{N_+^\sigma = 54, N^\sigma = 0, N_0^\sigma = 2\}$

Çizelge 2.5

Eşlenik çifte bağ içeren halkalı bileşikler	n = DBD	N=ESD
C ₄ H ₄	{n ₊ = n ₋ =8, n ₀ =4}	{N ₊ = 16, N ₋ = 0, N ₀ = 4}
	{n ₊ ^π = n ₋ ^π =1, n ₀ ^π =2}	{N ₊ ^π = 2, N ₋ ^π = 0, N ₀ ^π = 2}
	{n ₊ ^σ = n ₋ ^σ =7, n ₀ ^σ =2}	{N ₊ ^σ = 14, N ₋ ^σ = 0, N ₀ ^σ = 2}
C ₈ H ₈	{n ₊ = n ₋ =18, n ₀ =4}	{N ₊ =36, N ₋ = 0, N ₀ = 4}
	{n ₊ ^π = n ₋ ^π =3, n ₀ ^π =2}	{N ₊ ^π = 6, N ₋ ^π = 0, N ₀ ^π =2}
	{n ₊ ^σ = n ₋ ^σ =15, n ₀ ^σ =2}	{N ₊ ^σ =30, N ₋ ^σ = 0, N ₀ ^σ =2}
C ₆ H ₆	{n ₊ = n ₋ =14, n ₀ =2}	{N ₊ =28, N ₋ = 0, N ₀ = 2}
	{n ₊ ^π = n ₋ ^π =3, n ₀ ^π =0}	{N ₊ ^π = 6, N ₋ ^π = N ₀ ^π =0}
	{n ₊ ^σ = n ₋ ^σ =11, n ₀ ^σ =2}	{N ₊ ^σ =22, N ₋ ^σ =0, N ₀ ^σ =2}
C ₁₀ H ₁₀	{n ₊ = n ₋ =24, n ₀ =2}	{N ₊ = 48, N ₋ = 0, N ₀ = 2}
	{n ₊ ^π = n ₋ ^π =5, n ₀ ^π =0}	{N ₊ ^π = 10, N ₋ ^π = N ₀ ^π =0}
	{n ₊ ^σ = n ₋ ^σ =19, n ₀ ^σ =2}	{N ₊ ^σ = 38, N ₋ ^σ =0, N ₀ ^σ =2}

Çizelge 2.6

Düz zincirli alkanlar	n = DBD	N=ESD
CH ₄	{n ₊ = n ₋ =4, n ₀ =0}	{N ₊ =8, N ₋ =N ₀ =0}
C ₂ H ₆	{n ₊ = n ₋ =7, n ₀ =0}	{N ₊ =14, N ₋ =N ₀ =0}
C ₃ H ₈	{n ₊ = n ₋ =10, n ₀ =0}	{N ₊ =20, N ₋ =N ₀ =0}
C ₄ H ₁₀	{n ₊ = n ₋ =13, n ₀ =0}	{N ₊ =26, N ₋ =N ₀ =0}
C ₅ H ₁₂	{n ₊ = n ₋ =16, n ₀ =0}	{N ₊ =32, N ₋ =N ₀ =0}

Sınıflarda özdeciklerin tepkime yeteneğini anlamak için ögecikleşme ısıları ile “özdeciksel bağlaşım düzeyini (molecular binding order)” karşılaştırdık ve kuramın nitel olarak doğrulandığını gördük (Çizelge 2.7, 2.8).

Çizelge 2.7

Düz zincirli özdecikler	n = DBD	N=ESD	(N ₊ - N ₋)/2 (özdeciksel bağlaşım düzeyi)	ΔH ⁰ _{ögecikleşme} (kJ mol ⁻¹)
CH ₄	{n ₊ = n ₋ =4, n ₀ =0}	{N ₊ =8, N ₋ =N ₀ =0}	4	1658.17
C ₂ H ₆	{n ₊ = n ₋ =7, n ₀ =0}	{N ₊ =14, N ₋ =N ₀ =0}	7	2815.82
C ₃ H ₈	{n ₊ = n ₋ =10, n ₀ =0}	{N ₊ =20, N ₋ =N ₀ =0}	10	3982.79
C ₄ H ₁₀	{n ₊ = n ₋ =13, n ₀ =0}	{N ₊ =26, N ₋ =N ₀ =0}	13	5152.89
C ₅ H ₁₂	{n ₊ = n ₋ =16, n ₀ =0}	{N ₊ =32, N ₋ =N ₀ =0}	16	6321.1

Çizelge 2.8

Halkalı doymuş özdecikler	n = DBD	N=ESD	(N ₊ - N ₋)/2 (özdeciksel bağlaşım düzeyi)	ΔH ⁰ _{ögecikleşme} (kJ mol ⁻¹)
C ₃ H ₆	{n ₊ = n ₋ =9, n ₀ =0}	{N ₊ =18, N ₋ =N ₀ =0}	9	3390.23
C ₄ H ₈	{n ₊ = n ₋ =11, n ₀ =2}	{N ₊ =22, N ₋ = 0, N ₀ =2}	11	4564.68
C ₅ H ₁₀	{n ₊ = n ₋ =15, n ₀ =0}	{N ₊ =30, N ₋ =N ₀ =0}	15	5816.3

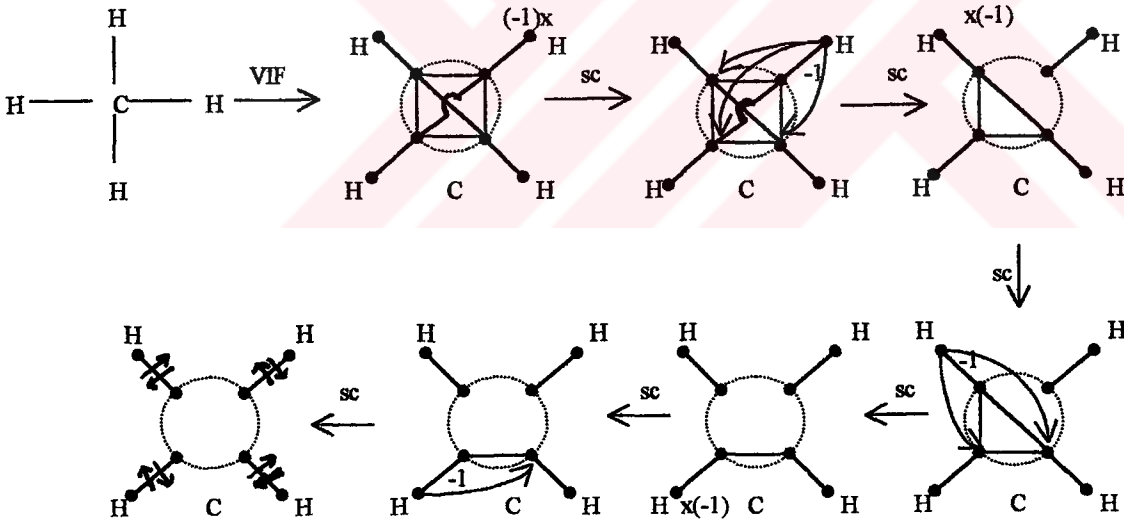
NOT1: Çizelge 2.7 ve 2.8 de özdeciksel bağlaşım düzeyi (molecular binding order) ile ögeçikleşme erkelerini karşılaştırdık. Her ikisi arasında dogrusal bir ilişki olduğunu gördük. Yani ögeçikleşme erkelerini artması ile kararlılık artıyor; zaten özdeciksel bağlaşım düzeyi de, özdecikler küçükten büyüğe doğru gittikçe artıyor.

NOT2: Karbon sayısına m dersek; çizelge 2.1 ve 2.2 için $\frac{1}{2}(6m-n_0)=(n_+=n_-)$, çizelge 2.3 ve 2.4 için $\frac{1}{2}(6m-n_0)-1=(n_+=n_-)$, çizelge 2.5 için $\frac{1}{2}(5m-n_0)=(n_+=n_-)$ dir.

Aşağıda bazı özdeciklerin DBD'lerinin nasıl bulunduğuna ilişkin kuralların uygulanışı gösterilmiştir. Bu özdeciklerle ilgili bilgisayar yazılımı kullanılarak elde edilen DBD'leri yani kuramın nicel olarak doğrulanması ekler bölümünde verilmiştir.

2.4 Değerlik Etkileşim Formülleri ile Resimli Yoldan Bazı Özdeciklerin Özdeğerlerinin Hesabı

1)CH₄ (Metan) :

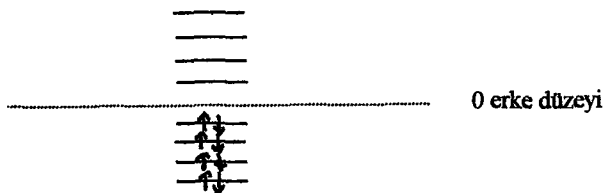


$$1 \text{ C} : 1 \times 4 e^- = 4 e^-$$

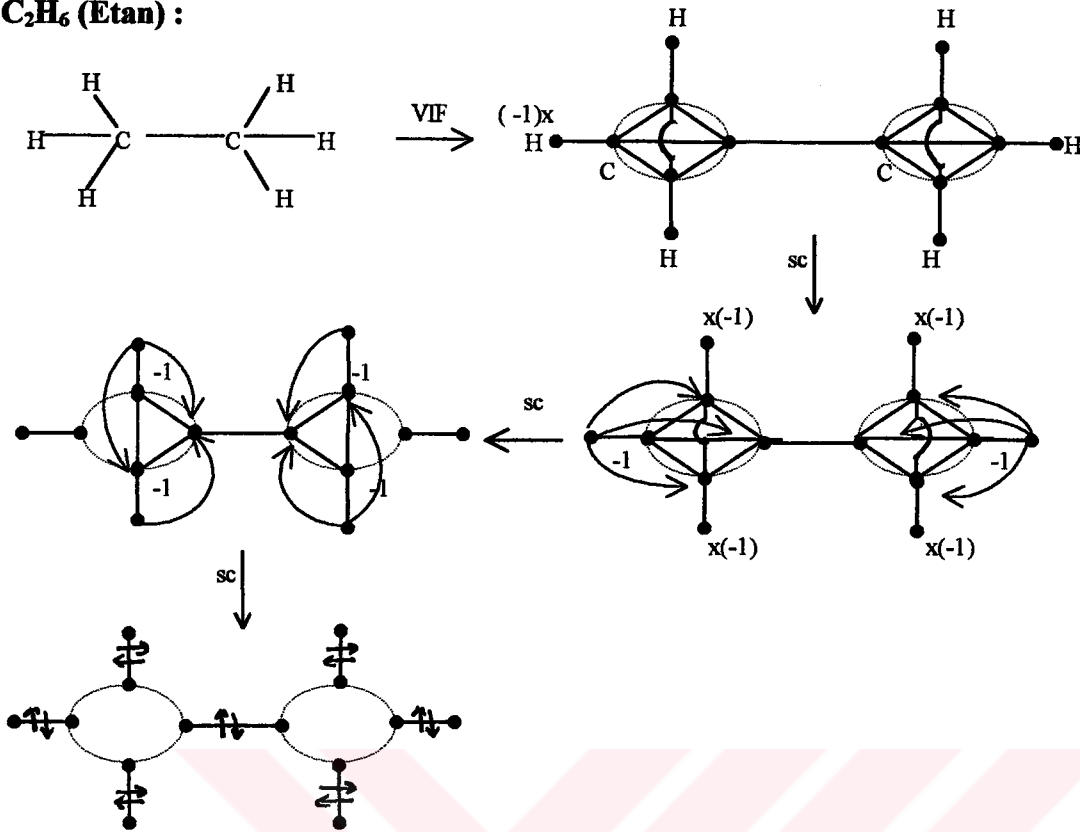
$$\text{DBD} = \{n_+ = n_- = 4, n_0 = 0\}$$

$$4 \text{ H} : 4 \times 1 e^- = \frac{4 e^-}{8 e^-}$$

$$\text{ESD} = \{N_+ = 8, N_- = N_0 = 0\}$$



2) C_2H_6 (Etan) :



$2 C : 2 \times 4 e^- = 8 e^-$

$6 H : 6 \times 1 e^- = \frac{6 e^-}{14 e^-}$

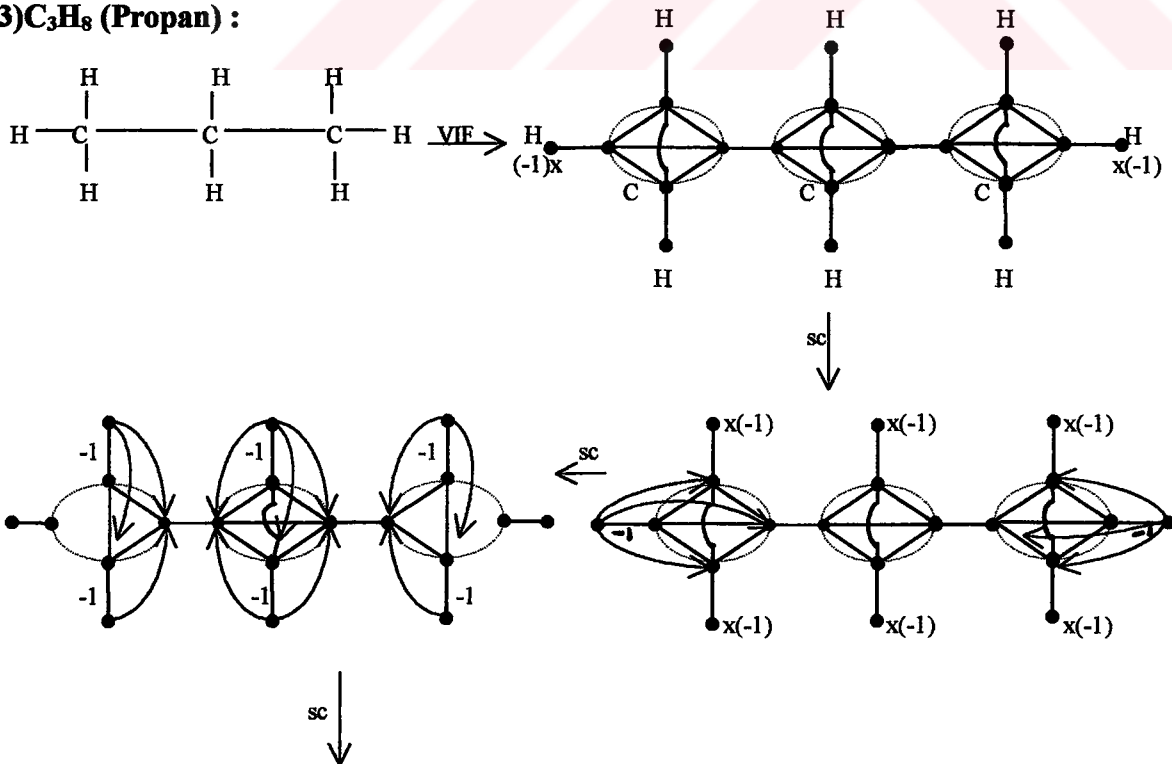
$DBD = \{n_+ = n = 7, n_0 = 0\}$

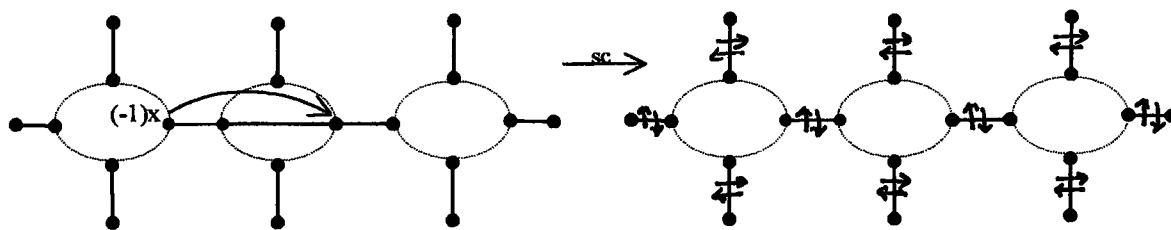
$C-H : 12 e^-$

$ESD = \{N_+ = 14, N_0 = 0\}$

$C-C : 14 - 12 = 2 e^-$

3) C_3H_8 (Propan) :





$$3 \text{ C} : 3 \times 4 e^- = 12 e^-$$

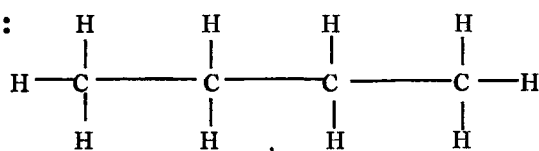
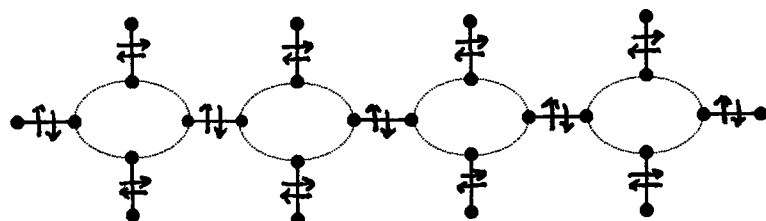
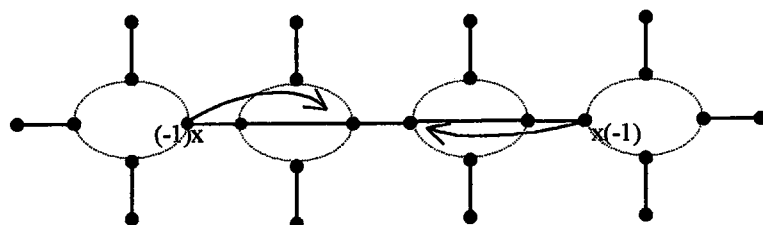
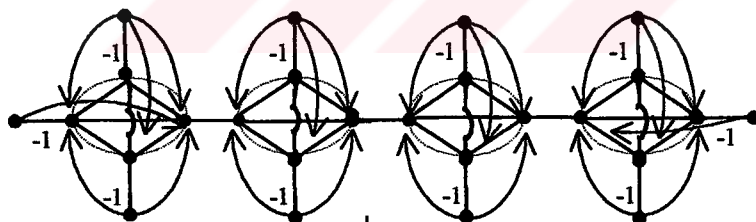
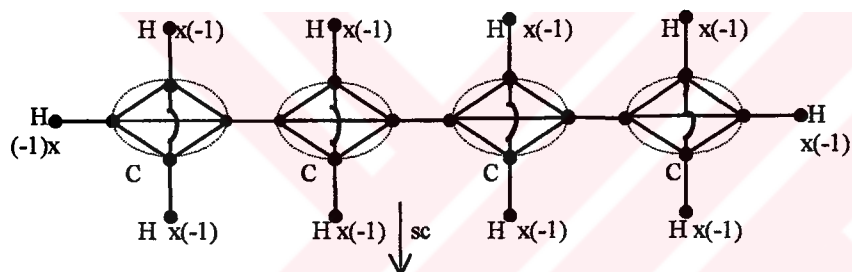
$$8 \text{ H} : 8 \times 1 e^- = \frac{8 e^-}{20 e^-}$$

$$\text{DBD} = \{n_+ = n = 10, n_0 = 0\}$$

$$\text{ESD} = \{N_+ = 20, N = N_0 = 0\}$$

$$\text{C-H} : 16 e^-$$

$$\text{C-C} : 20 - 16 = 4 e^-$$

4) C_4H_{10} (Butan) :
 $\downarrow \text{VIF}$


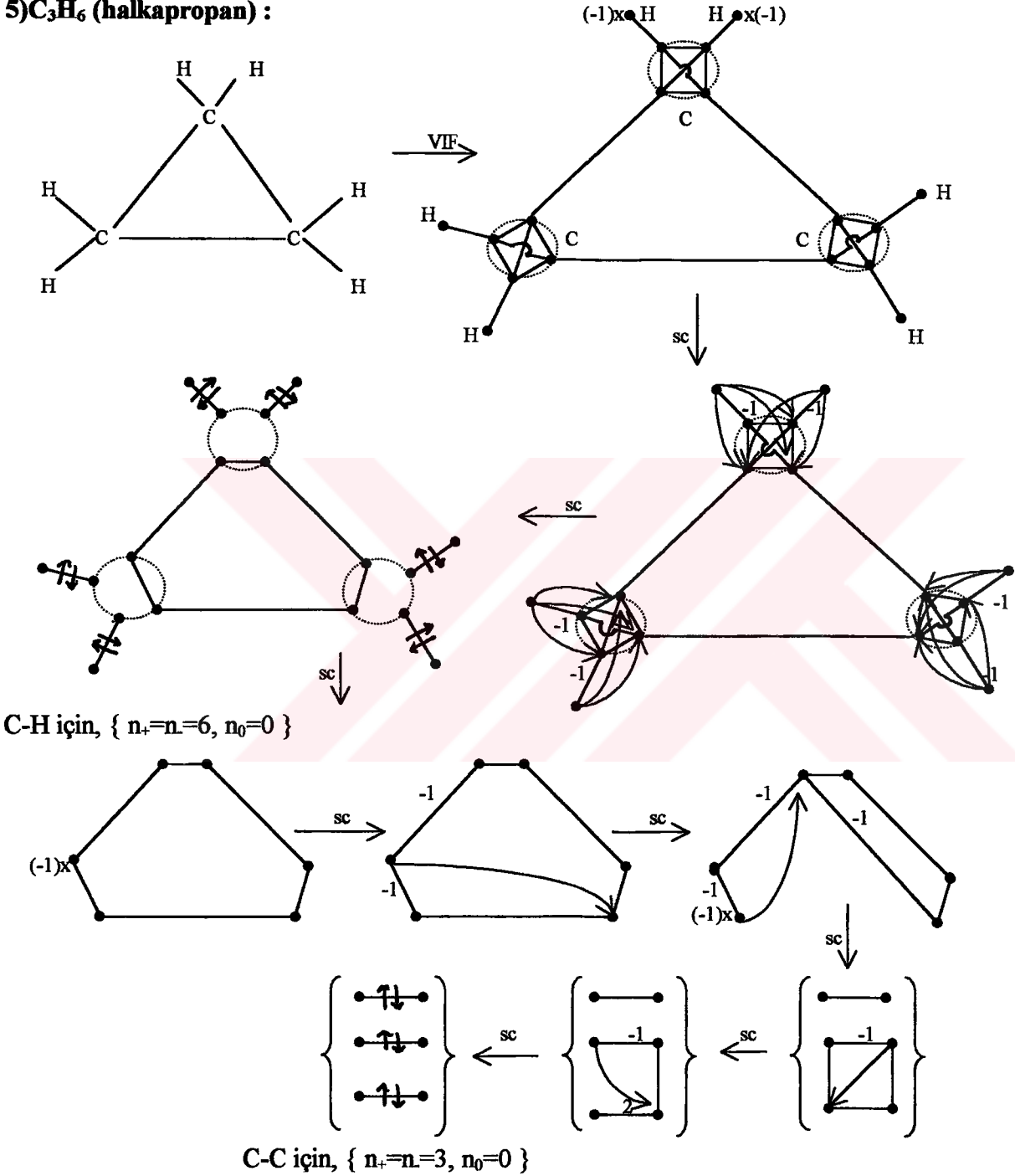
$$4 \text{ C} : 4 \times 4 e^- = 16 e^-$$

$$10 \text{ H} : 10 \times 1 e^- = \frac{10 e^-}{26 e^-}$$

$$\text{DBD} = \{n_+ = n = 13, n_0 = 0\} \quad \text{C-H} : 20 e^-$$

$$\text{ESD} = \{N_+ = 26, N_- = N_0 = 0\} \quad \text{C-C} : 26 - 20 = 6 e^-$$

5) C_3H_6 (halkapropan) :



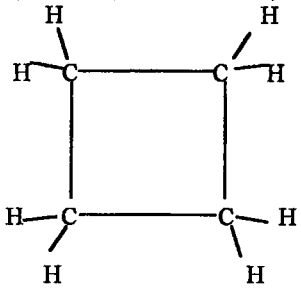
$$3 \text{ C} : 3 \times 4 e^- = 12 e^-$$

$$6 \text{ H} : 6 \times 1 e^- = \frac{6 e^-}{18 e^-}$$

$$\text{DBD} = \{n_+ = n = 9, n_0 = 0\} \quad \text{C-H} : 12 e^-$$

$$\text{ESD} = \{N_+ = 18, N_- = N_0 = 0\} \quad \text{C-C} : 18 - 12 = 6 e^-$$

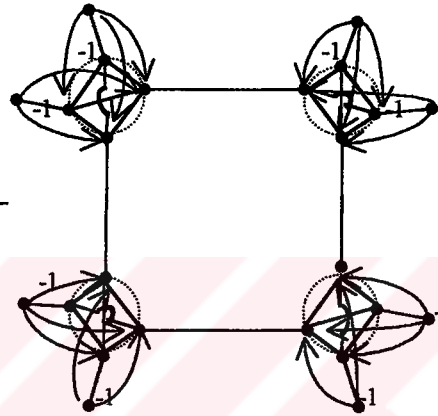
6) C_4H_8 (halkabutan) :



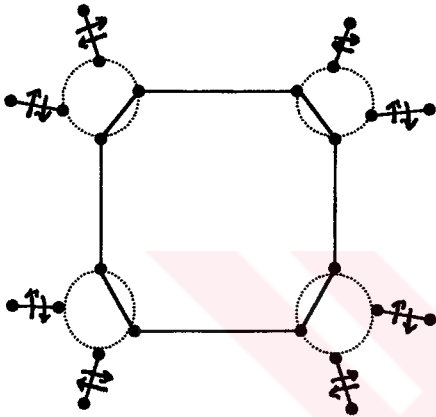
VIF \rightarrow



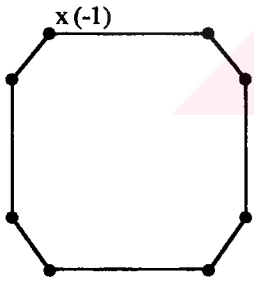
sc \downarrow



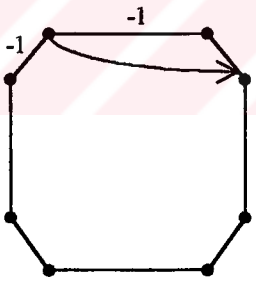
sc \leftarrow



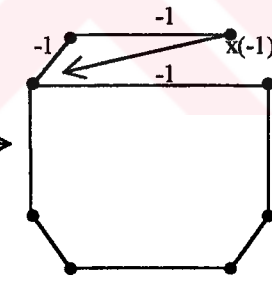
C-H için, $\{n_+ = n_- = 8, n_0 = 0\}$ dir.



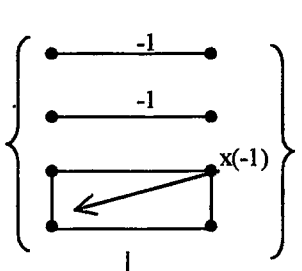
sc \rightarrow



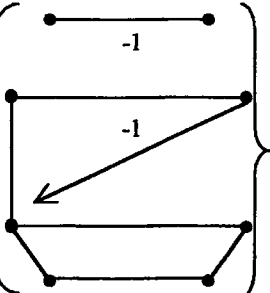
sc \rightarrow



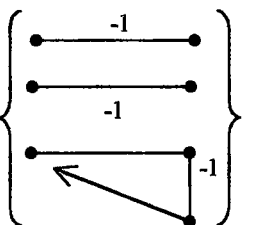
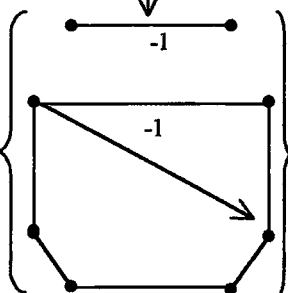
sc \downarrow



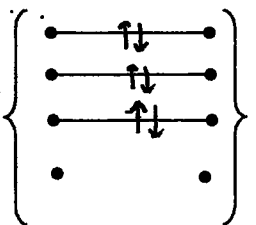
sc \leftarrow



sc \leftarrow



sc \rightarrow



C-C için, $\{n_+ = n_- = 3, n_0 = 2\}$

$$4 \text{ C} : 4 \times 4 e^- = 16 e^-$$

$$\text{DBD} = \{n_+ = n_- = 11, n_0 = 2\}$$

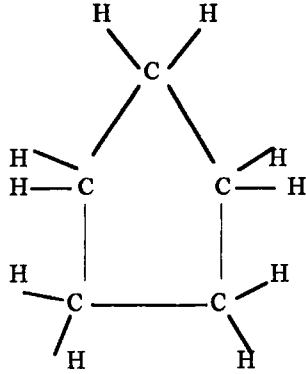
$$\text{C-H} : 16 e^-$$

$$8 \text{ H} : 8 \times 1 e^- = \frac{8 e^-}{24 e^-}$$

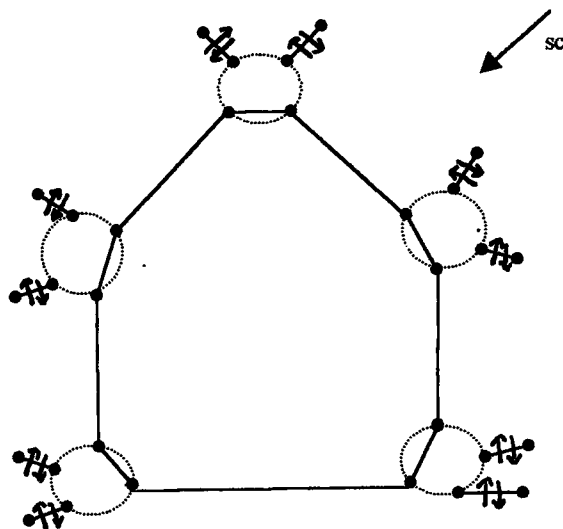
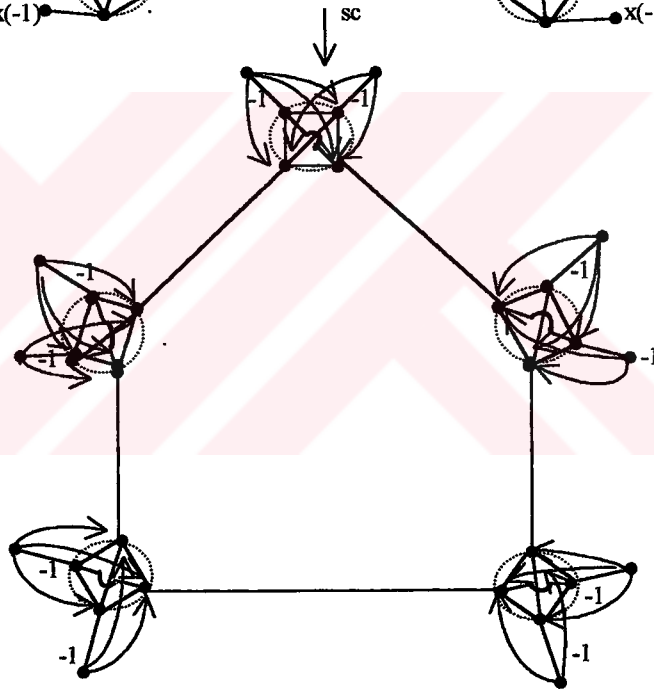
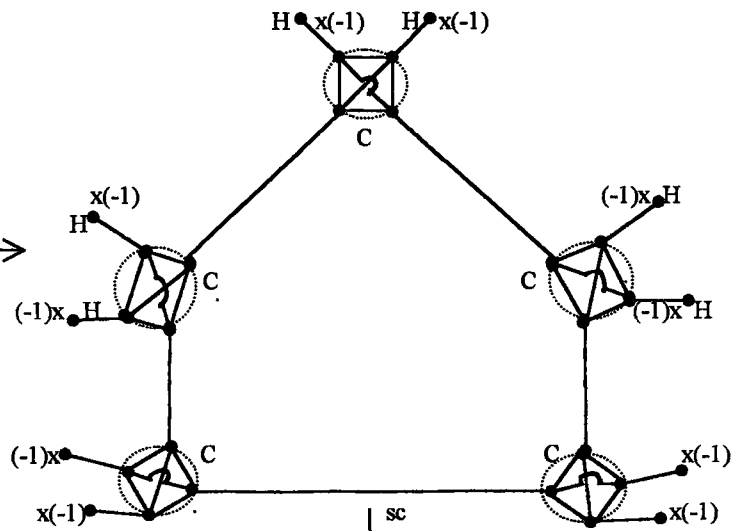
$$\text{ESD} = \{N_+ = 22, N_- = 0, N_0 = 2\}$$

$$\text{C-C} : 24 - 16 = 8 e^-$$

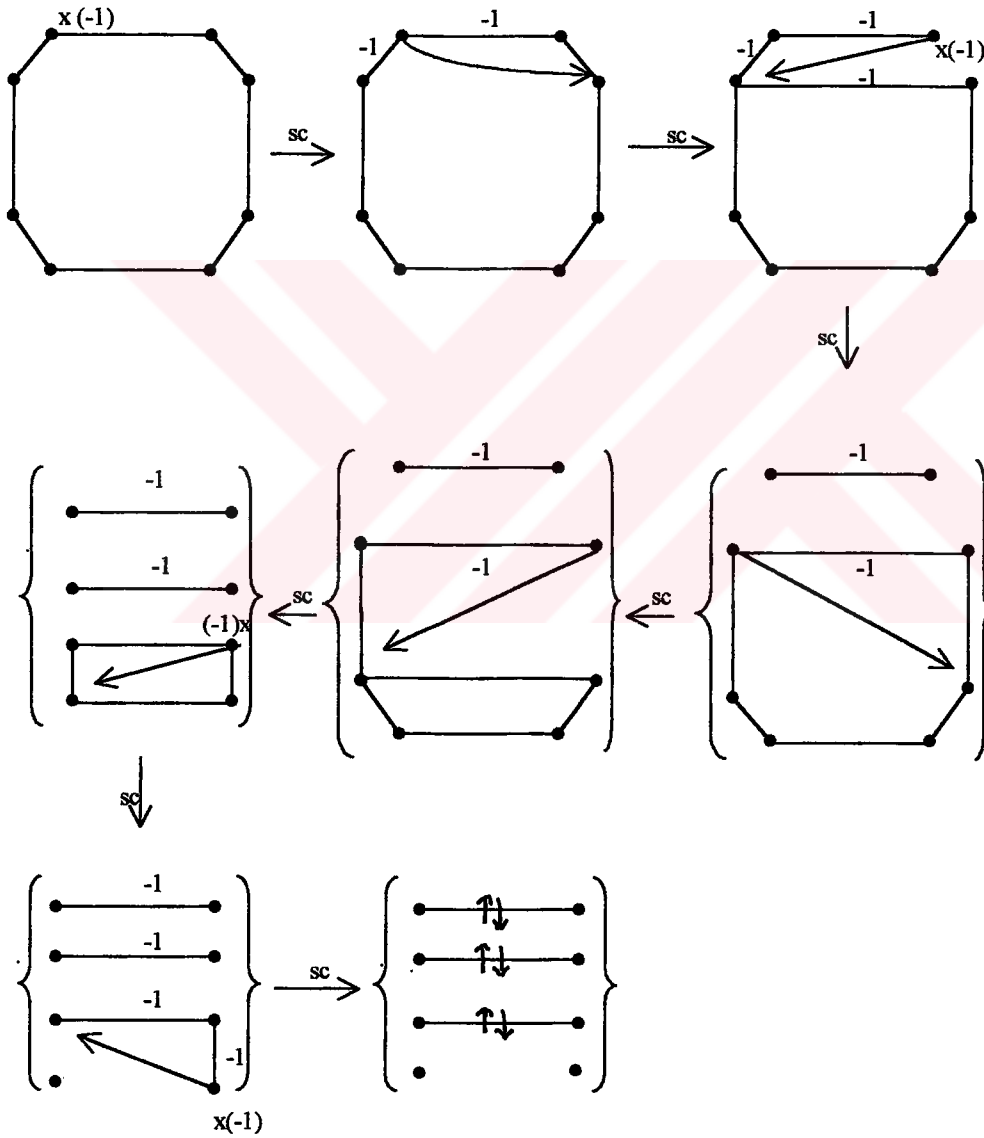
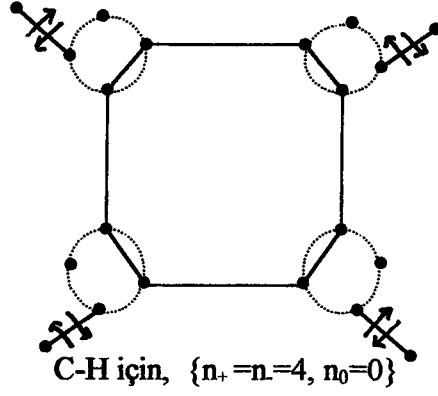
7) C_5H_{10} (halkapentan) :



VIF \rightarrow



$$\text{C-H} = \{n_+ = n_- = 10, n_0 = 0\}$$



$$4 \text{ C} : 4 \times 4 e^- = 16 e^-$$

$$4 \text{ H} : 4 \times 1 e^- = 4 e^-$$

$$20 e^-$$

$$\text{DBD} = \{n_+ = n_- = 8, n_0 = 4\}$$

$$\text{C-H} : 8 e^-$$

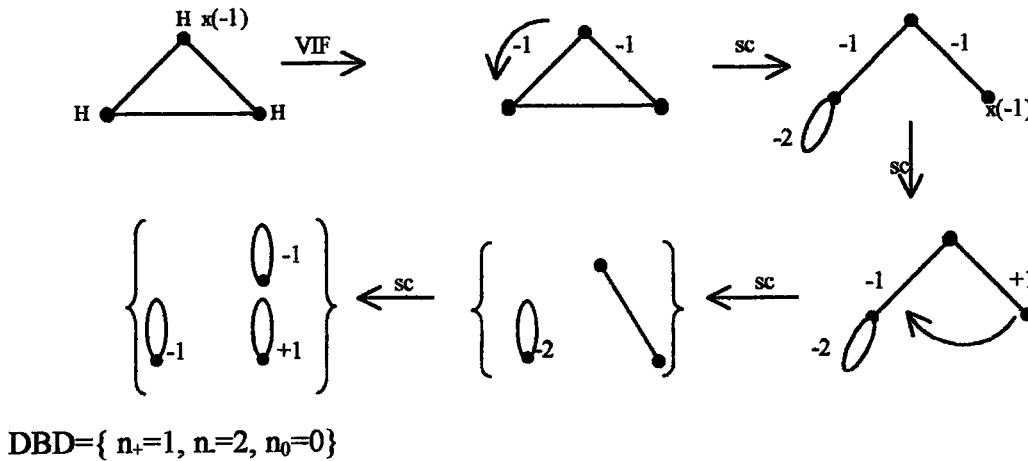
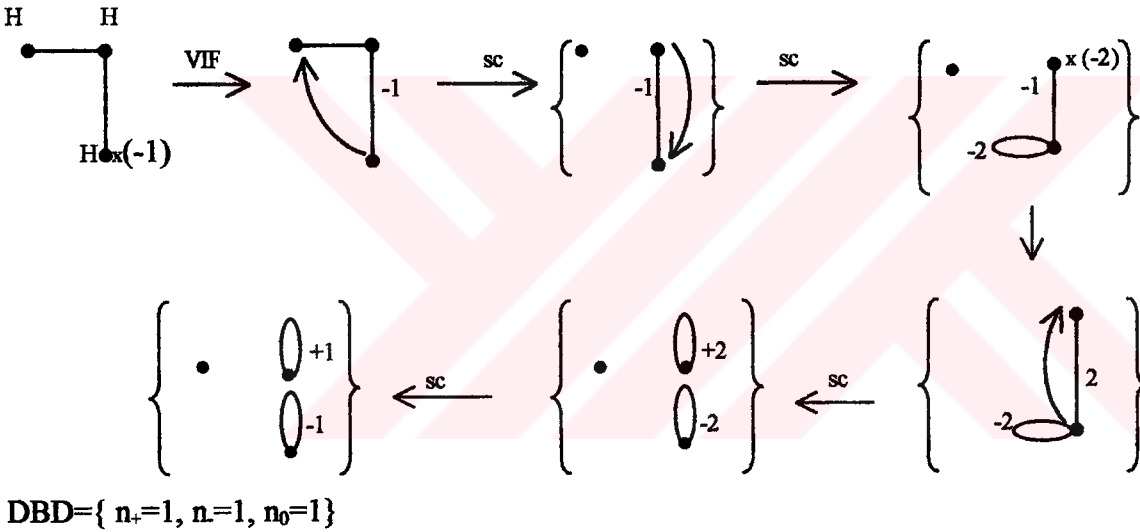
$$\text{ESD} = \{N_+ = 16, N_- = 0, N_0 = 4\} \text{ C-C} : 20 - 8 = 12 e^-$$

NOT: Metandan sonra çizilen özdeciklerin erke düzeyleri, metan özdecığının erke düzeyinin gösterildiği şekildedir. Aynı işlem diğerleri için de geçerlidir.

2.5 Özdeğerlerin Hesabında Kolaylık ve Basitlik Açısından DEF Kuramı ile LCAO, Hückel Yaklaşımları ve π Yaklaşımının Karşılaştırılması İçin Benzen Özdeğeri ve H_3 Özdeğeri ve H_3 Özdeğeri ve H_3 Özdeğeri Hesabı

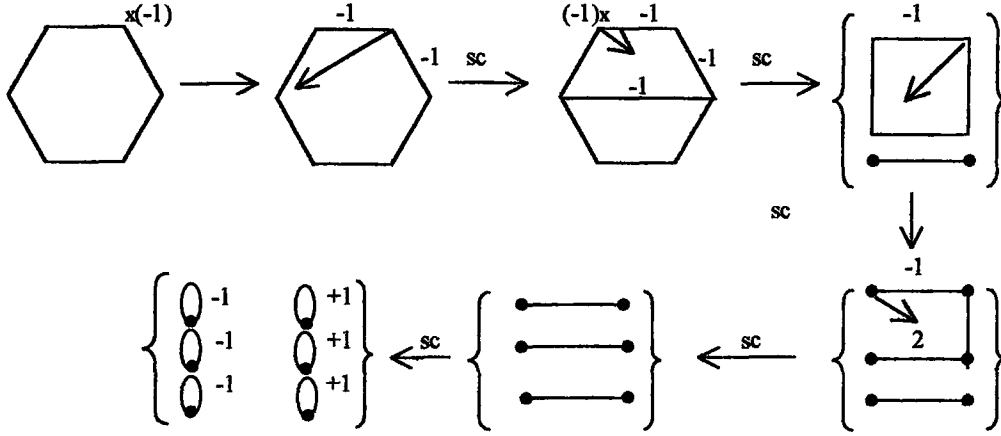
Klasik yöntemlerle özdeğerlerin hesaplanması uzun işlemler dizisini gerektirmektedir. Oysa, DEF kurallarıyla basit resimli yoldan gidilerek özdeş sonuçlara varmak mümkündür. Örneğin, benzenin π özdeğeri ile H_3 özdeğeri hesaplanması klasik yöntemlerle ilgili kaynaklarda verilmiştir (Pekin ve Altınata, 1977; Çınar, 1988).

Aşağıda DEF kurallarıyla her iki özdeğeri hesaplanmış ve klasik yöntemlerle karşılaştırma açısından verilmiştir.



Yukarıda görüldüğü gibi H_3 özdeğeri için iki durum söz konusudur.

Aşağıda benzen özdeğeri için π dizgesinin DEF kurallarıyla hesabı gösterilmiştir.



DBD={ $n_+ = n_- = 3, n_0 = 0$ } olarak elde edilir.

CH₄ özdeği için EHTD (kulaklı) ve EHTD (kulaksız) özdeğerleri arasında ihmal edilebilecek düzeyde farklılık görülmektedir. Bunun nedeni, karbon ve hidrojen atomlarının öz-enerjileri arasındaki farkın ihmal edilebilir olmasıdır ($\alpha_C = -13.9$ eV, $\alpha_H = -13.6$ eV). α_{ort} , HAO programında katışık AO hamilton düzeyinin köşegen elemanlarının toplamının ortalaması alınarak bulunur ($\alpha_{ort} = -13.7485$ eV). HyperChem, EHT ve HAO programlarından elde edilen özdeğerler Çizelge 2.9 da gösterilmiştir.

Çizelge 2.9. Çizelgedeki özdeğerler eV cinsindedir.

HyperChem E_i	EHT (E_i)	HAO (E_i)	$E_i = E_i - \alpha_{ort}$	EHTD(kulaklı)	EHTD(kulaksız)
29.382587	29.09358	29.0934953	42.8420046	23.2887846	23.2805671
3.741033	3.66876	3.66869969	17.4172046	23.2842569	23.2773641
3.741032	3.66867	3.66860134	17.4171046	23.2823815	23.2714778
3.741031	3.66859	3.66850130	17.4170046	14.7561365	14.7357932
-15.512504	-15.51159	-15.5114995	-1.76299536	-4.28236742	-4.31197760
-15.512505	-15.51159	-15.5115012	-1.76299536	-4.28336246	-4.31241642
-15.512505	-15.51161	-15.5116003	-1.76309536	-4.28434059	-4.31288718
-24.492725	-24.48785	-24.4878013	-10.7392954	-7.65182052	-7.50671107

SONUÇLAR

Bu çalışmada DEF ile çeşitli özdecikler incelenmiş; özdecikler, içerdikleri karbon sayısına göre çeşitli sınıflara ayrılarak kümelendirilip basit sayısal bağıntılar verilmiştir. Bu sınıflandırma ve ortaya konan sayısal bağıntılar yardımıyla özdeciklerin özdeğerlerinin dolayısıyla toplam değerlik eksicikleri sayısını kolaylıkla bulmak; ayrıca, ısıldevingen sabitlerle özdeciksel bağlaşım düzesi kıyaslanarak, özdeciklerin kararlılığı yani tepkime yeteneği arasındaki ilişkinin gösterilmesi amaçlanmıştır.

Yaptığımız sınıflandırma ve sayısal bağıntılarla elde ettiğimiz nitel doğrulama, bir tür laboratuvar ortamı sayılabilecek bilgisayar programı yardımıyla nicel olarak da doğrulanmıştır.



KAYNAKLAR

- Çınar, Z., (1988), Kuantum Kimyası, Aksoy Matbaacılık A.Ş., İstanbul.
- Erdik, E. ve Sarıkaya, Y., (1984), Temel Üniversite Kimyası, Hacettepe Taş Kitapçılık Ltd. Şirketi, Ankara.
- Pamuk, Ö.,(1989), “Sinanoğlu'nun Yapısal Elektronik Yöntemi”, TÜBİTAK Bilim ve Teknik Dergisi, 22(254): 23-27.
- Pekin, B., (1985), Fizikokimya I, Çağlayan Yayınevi, Beyoğlu, İstanbul.
- Pekin, B. ve Altınata, T., (1977), Fizikokimya Problemleri, Çağlayan Yayınevi, Beyoğlu, İstanbul.
- Sinanoğlu, O., (1984a),“A Principle of Linear Covariance for Quantum Mechanics and The Electronic Structure Theory of Molecules and Other Atom Clusters”, Theoretica Chimica Acta (Berl.), 65 : 233-242.
- Sinanoğlu, O., (1984b), “On the Algebraic Construction of Chemistry from Quantum Mechanics. A Fundamental Valency Vector Field Defined on the Eucliden 3- Space and its Relation to the Hilbert Space”, Theoretica Chimica Acta (Berl), 65: 243-248.
- Sinanoğlu, O., (1984c),“Non-Unitary Classification of Molecular Electronic Structures and Other Atom Cluster”, Theoretica Chimica Acta (Berl.), 65: 249-254.
- Sinanoğlu, O., (1984d), “Structural Covariance of Graphs”, Theoretica Chimica Acta (Berl.), 65 : 255-265.
- Sinanoğlu, O., (1984e), “Deformational Covariance of Graphs”, Theoretica Chimica Acta (Berl.), 65 : 267-270.
- Sinanoğlu, O., (1984f), “A Theorem for Qualitative Deductions in Organic or Inorganic Chemistry Regarding the Realitive Stabilities, Distortions and Reactions of Molecules”, Chemical Pyhics Letters, 103 (4) : 315-322.
- Sinanoğlu, O., (1985), “New Method for Qualitative Quantum Chemical Deductions on Organic or Inorganic Molecules or Clusters Directly from Structural Formulas or ORTEP Diagrams”, Theoretica Chimica Acta, 65:251-270.
- Sinanoğlu, O., (1988a), “The New Pictorial Structural Covariance Method for Qualitative Quantum Chemistry II: Arenes With or Without Polyene Side Chains and Polyene Bridges”, Journal of Mathematical Chemistry, 2:117-136.
- Sinanoğlu, O., (1988b), “The New Pictorial Structural Covariance Method for Qualitative Quantum Chemistry III: Fused Polycyclics and Their Ions”, Journal of Mathematical Chemistry, 2:137-154.
- Sinanoğlu, O., (1988c), “Ten Classes of Bicyclo[p.q.o] Pi-Hydrocabons, and Their Anions and Cations. Electronic Rules Directly From Structural Formulas”, Tetrahedron Letters, 29(8):889-892.

Sinanođlu, O., (1989), "Are Oxygen Rings (O_n) and Their Negative Ions (O_n^-) Unsatisfiable ?", *International Journal of Quantum Chemistry*, 36:545-552.

Sinanođlu, O., (1992), "Nonorthogonality and the MO Energy Level Patterns of Molecules Deduced Directly from Structural Formulas by New VIF Methods as Compared with Machine Computations", *International Journal of Quantum Chemistry:Quantum Chemistry Symposium*, 26 : 137-151.

Sinanođlu, O., Alia, J. ve Hastings M.,(1994), " Valency Interaction in $AH_m^{0\pm}$ (Hybridized of Main Group Elements, Radicals, Cations, Anions) and MO Level Patterns Directly from the Pictorial "VIF" Method Compared with Computer Calculations", *Journal of Phys. Chem.*,98 : 5867-5877.

Sinanođlu, O., (1999), "Theory of Transformations of Molecules into Other Molecules via Non-Unitary Classifications of Molecular Electronic Hamiltonians and Using the New Principle of Linear Covariance for Quantum Mechanics", *Balkan Physics Letters*, 7:155-163.

Sinanođlu, O., (TFD Bülteni Nisan 2000 sayısında yayınlanacak), "Sonlu Yöney Uzayları Üzerine Kurulan Cebirsel Yapılar, Hermit İşlemleri ve Onları Temsil Eden Çizimlerin Cebirsel, Topolojik Sınıflara Ayrılması, Sınıf Deđişmezleri; Yeni Eşdeđişim İlkesi; Nicem Fizik ve Kimyasına Uygulamalar".

Tarım, E. T., (1999), Yapısal Deđiştirim İlkesinde En Üst ve En Alt Özdeđerlerin Bulunması, Örüt Kuramı ve Nicem Kimyasında Uygulamalar, Doktora Tezi, YTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü.

EK.1 Bölüm 2.4 deki Bazı Özdeciklerin Özdeğerlerin Hesabı ve Bilgisayar Yazılımı İle Özdeğerlerin Erkelerinin Bulunması

CH4.LOG

```
HyperChem log start -- Thu Sep 03 11:19:31 1998.
PrintLevel=2
Geometry optimization, MolecularMechanics, molecule = .
mmpplus
PolakRibiere optimizer
Energy=0.000000 Gradient=0.000004 Converged=NO (1 cycles 4 points).
Energy=0.000000 Gradient=0.000001 Converged=NO (2 cycles 7 points).
Energy=0.000000 Gradient=0.000000 Converged=NO (3 cycles 11 points).
Energy=0.000000 Gradient=0.000000 Converged=YES (3 cycles 11 points).
Bond=6.16594e-019 Angle=6.23669e-008 Dihedral=0 Vdw=0 Stretch-bend=0
Electrostatic=0.
Single Point, SemiEmpirical, molecule = .
ExtendedHuckel
Extended-Huckel Calculation:
Singlet State Calculation
Number of Electrons = 8
Starting Extended-Huckel calculation with 8 orbitals
Charge on the System = 0
Total Orbitals = 8
Number of Double Occupied Levels = 4
Unweighted Huckel Constant = 1.7500000
d Orbitals on Si...Cl If Any Not Included
Energy=-3276.056699
```

RESULTS

```
----- RESULTS -----
Sum of One-Electron Energies = -3276.0566992 (kcal/mol)
Sum of One-Electron Energies = -5.220892271 (a.u.)
```

EIGENVALUES (eV)

```
-24.492725   -15.512505   -15.512505   -15.512504    3.741031
 3.741032    3.741033    29.382587
```

ATOMIC ORBITAL ELECTRON POPULATIONS

```
1.253170    0.955319    0.955319    0.955319    0.970218
0.970218    0.970218    0.970218
```

NET CHARGES ANE COORDINATES

Atom	Z	Charge	Coordinates (a.u.)		
			x	y	z
1	6	-0.119127	-0.25051	-0.06535	0.00000
2	1	0.029782	-0.25051	2.03792	0.00000
3	1	0.029782	1.73247	-0.76643	0.00000
4	1	0.029782	-1.24199	-0.76643	1.71732
5	1	0.029782	-1.24201	-0.76645	-1.71730

Alpha: Orbital Index = 1 Orbital Energy = -24.492725 (eV)

HyperChem log stop -- Thu Sep 03 11:20:49 1998.

CH4.INP

```
ch4
4 1 0 0 0 00000 1.75
  -1.132770 1.080098 .000000
  .918209 -0.406208 .000000
  -0.658255 -0.406208 .910180
  -0.658265 -0.406218 -0.910169
  -1.132770 -0.034635 .000000
c
```

CH4.OUT

ch4

Extended Hueckel calculation

input geometry

Atom	x	y	z		S		P		
				n	exp	coul	n	exp	coul
H 1	-.133	1.080	.000	1	1.300	-13.600			
H 2	.918	-.406	.000	1	1.300	-13.600			
H 3	-.658	-.406	.910	1	1.300	-13.600			
H 4	-.658	-.406	-.910	1	1.300	-13.600			
C 5	-.133	-.035	.000	2	1.625	-21.400	2	1.625	-11.400

Charge = 0 iprint = 0 Hueckel constant = 1.750

Distance matrix

	1	2	3	4	5
1	.0000	1.8203	1.8203	1.8204	1.1147
2	1.8203	.0000	1.8203	1.8204	1.1147
3	1.8203	1.8203	.0000	1.8203	1.1147
4	1.8204	1.8204	1.8203	.0000	1.1147
5	1.1147	1.1147	1.1147	1.1147	.0000

Overlap matrix

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1.0000	.1387	.1387	.1387	.4786	.0000	.4828	.0000
2	.1387	1.0000	.1387	.1387	.4786	.4552	-.1609	.0000
3	.1387	.1387	1.0000	.1387	.4786	-.2276	-.1609	.3942
4	.1387	.1387	.1387	1.0000	.4786	-.2276	-.1609	-.3942
5	.4786	.4786	.4786	.4786	1.0000	.0000	.0000	.0000
6	.0000	.4552	-.2276	-.2276	.0000	1.0000	.0000	.0000
7	.4828	-.1609	-.1609	-.1609	.0000	.0000	1.0000	.0000
8	.0000	.0000	.3942	-.3942	.0000	.0000	.0000	1.0000

starting main calculations

Results of calculation ch4

Energy levels (eV)

E(1) =	29.09358	.0000	E(5) =	-15.51159	2.0000
E(2) =	3.66876	.0000	E(6) =	-15.51159	2.0000
E(3) =	3.66867	.0000	E(7) =	-15.51161	2.0000
E(4) =	3.66859	.0000	E(8) =	-24.48785	2.0000

Sum of one-electron energies = -142.04528138 eV.

Wave Functions

MO's in columns, AO's in rows

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.6864	.2130	-.6346	-.7889	.3919	.2629	-.2634	.1697
2	.6864	.7947	.6458	.1473	-.1321	-.4471	-.2733	.1697
3	.6864	-.1557	-.5567	.8581	-.4337	.3195	.0432	.1697
4	.6864	-.8520	.5455	-.2165	.1740	-.1353	.4934	.1697
5	-1.5540	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.6458
6	.0000	-1.0021	-.5027	.1338	-.0016	-.3799	-.3816	.0000
7	.0000	-.2324	.6925	.8609	.3904	.2620	-.2624	.0000
8	.0000	-.4654	.7365	-.7181	-.3708	.2774	-.2747	.0000

Reduced overlap population matrix, atom by atom

	1	2	3	4	5
1	.6418	-.0380	-.0380	-.0380	.7718
2	-.0380	.6418	-.0380	-.0380	.7718
3	-.0380	-.0380	.6418	-.0380	.7718
4	-.0380	-.0380	-.0380	.6418	.7718
5	.7718	.7718	.7718	.7718	2.5737

Reduced charge matrix, MO's in columns, atoms in rows

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.3135	.0303	.2693	.4162	.4122	.1856	.1863	.1865
2	.3135	.4224	.2789	.0145	.0469	.5368	.2005	.1865
3	.3135	.0162	.2072	.4924	.5051	.2740	.0050	.1865
4	.3135	.4855	.1990	.0314	.0813	.0491	.6537	.1865
5	.7461	1.0455	1.0455	1.0455	.9545	.9545	.9545	1.2539

Atom	Net chg.	Atomic orbital occupation for given MO occupation								
		S	Px	Py	Pz	Dx ² -y ²	Dz ²	Dxy	Dxz	Dyz
H	1	.029	.971							
H	2	.029	.971							
H	3	.029	.971							
H	4	.029	.971							
C	5	-.117	1.254	.955	.955	.955				

Reduced energy matrix, atom by atom

	1	2	3	4	5
1	-8.7279	.9050	.9050	.9050	-18.7204
2	.9050	-8.7279	.9050	.9050	-18.7204
3	.9050	.9050	-8.7279	.9050	-18.7204
4	.9050	.9050	.9050	-8.7279	-18.7204
5	-18.7204	-18.7204	-18.7204	-18.7204	-37.6823

CH4.HAO

ch4

Atom sembollerini, sıra numaralarını, x, y ve z koordinatları

H	1	-.1330	1.0800	.0000
H	2	.9180	-.4060	.0000
H	3	-.6580	-.4060	.9100
H	4	-.6580	-.4060	-.9100
C	5	-.1330	-.0350	.0000

5 atomu için dörtyüzlü melezleme dizeyi

.5000	.8660	.0000	.0000
.5000	-.2887	.8165	.0000
.5000	-.2887	-.4082	.7071
.5000	-.2887	-.4082	-.7071

5 atomu için döndürülmüş melezleme dizeyi

.5000	.0000	.8660	.0000
.5000	.8165	-.2887	.0000
.5000	-.4082	-.2887	-.7071
.5000	-.4082	-.2887	.7071

Ortalamayı köşegeninden çıkarıyor.

$h'_{uv} = h_{uv} - (\text{ortalama}) \cdot S_{uv}$

Ortalama = -13.748500 eV

h_{VIF} de en yakın olmayan komşular arası çizgiler ihmal edildi.

Tüm atom içi çizgiler .0000 küçük olacak şekilde $S_{uv} \cdot (\text{ortalama})$ ya eşitlenmiştir.

Atom içi çizgileri değışmedi.

melezi 1,2 atomlarına yönelttim.

Uzaklık Dizeyi (ang.)

	1	2	3	4	5
1	.0000	1.8203	1.8203	1.8204	1.1147
2	1.8203	.0000	1.8203	1.8204	1.1147
3	1.8203	1.8203	.0000	1.8203	1.1147
4	1.8204	1.8204	1.8203	.0000	1.1147
5	1.1147	1.1147	1.1147	1.1147	.0000

AO da Overlap dizeyi

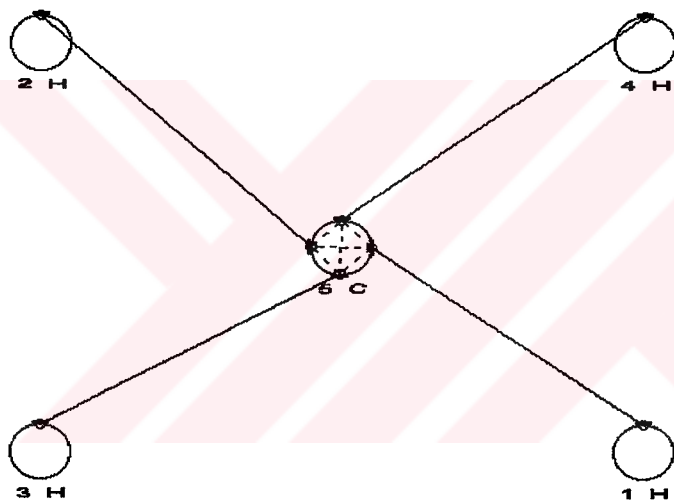
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1.0000	.1387	.1387	.1387	.4786	.0000	.4828	.0000
2	.1387	1.0000	.1387	.1387	.4786	.4552	-.1609	.0000
3	.1387	.1387	1.0000	.1387	.4786	-.2276	-.1609	.3942
4	.1387	.1387	.1387	1.0000	.4786	-.2276	-.1609	-.3942
5	.4786	.4786	.4786	.4786	1.0000	.0000	.0000	.0000
6	.0000	.4552	-.2276	-.2276	.0000	1.0000	.0000	.0000
7	.4828	-.1609	-.1609	-.1609	.0000	.0000	1.0000	.0000
8	.0000	.0000	.3942	-.3942	.0000	.0000	.0000	1.0000

Melezlenmiş AO da Overlap Dizeyi

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1.0000	.1387	.1387	.1387	.6574	.0999	.0999	.0999
2	.1387	1.0000	.1387	.1387	.1000	.6574	.0999	.0999
3	.1387	.1387	1.0000	.1387	.1000	.0999	.0999	.6574
4	.1387	.1387	.1387	1.0000	.1000	.0999	.6574	.0999
5	.6574	.1000	.1000	.1000	1.0000	.0000	.0000	.0000
6	.0999	.6574	.0999	.0999	.0000	1.0000	.0000	.0000
7	.0999	.0999	.0999	.6574	.0000	.0000	1.0000	.0000

8	.0999	.0999	.6574	.0999	.0000	.0000	.0000	1.0000
AO da Hamilton Dizeyi								
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	-13.5974	-3.3002	-3.3008	-3.3005	-14.6511	.0002	-10.5604	-.0004
2	-3.3002	-13.5988	-3.3010	-3.3005	-14.6521	-9.9564	3.5204	.0001
3	-3.3008	-3.3010	-13.5991	-3.3016	-14.6534	4.9793	3.5210	-8.6230
4	-3.3005	-3.3005	-3.3016	-13.5994	-14.6531	4.9783	3.5214	8.6230
5	-14.6511	-14.6521	-14.6534	-14.6531	-21.3975	.0009	.0016	-.0002
6	.0002	-9.9564	4.9793	4.9783	.0009	-11.3979	-.0010	.0012
7	-10.5604	3.5204	3.5210	3.5214	.0016	-.0010	-11.3991	-.0005
8	-.0004	.0001	-8.6230	8.6230	-.0002	.0012	-.0005	-11.3989
Melezlenmis AO da Hamilton Dizeyi								
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	-13.5974	-3.3002	-3.3008	-3.3005	-16.4711	-4.2769	-4.2769	-4.2774
2	-3.3002	-13.5988	-3.3010	-3.3005	-4.2773	-16.4717	-4.2777	-4.2776
3	-3.3008	-3.3010	-13.5991	-3.3016	-4.2774	-4.2775	-4.2785	-16.4733
4	-3.3005	-3.3005	-3.3016	-13.5994	-4.2769	-4.2783	-16.4728	-4.2781
5	-16.4711	-4.2773	-4.2774	-4.2769	-13.8973	-2.4995	-2.4986	-2.4994
6	-4.2769	-16.4717	-4.2775	-4.2783	-2.4995	-13.8971	-2.5009	-2.4994
7	-4.2769	-4.2777	-4.2785	-16.4728	-2.4986	-2.5009	-13.8988	-2.5005
8	-4.2774	-4.2776	-16.4733	-4.2781	-2.4994	-2.4994	-2.5005	-13.9001
VIF(kulakli) e Karsilik Hamilton Dizeyi								
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.1511	.0000	.0000	.0000	-7.4326	.0000	.0000	.0000
2	.0000	.1497	.0000	.0000	.0000	-7.4332	.0000	.0000
3	.0000	.0000	.1494	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.4350
4	.0000	.0000	.0000	.1491	.0000	.0000	-7.4344	.0000
5	-7.4326	.0000	.0000	.0000	-.1488	-2.4995	-2.4986	-2.4994
6	.0000	-7.4332	.0000	.0000	-2.4995	-.1486	-2.5009	-2.4994
7	.0000	.0000	.0000	-7.4344	-2.4986	-2.5009	-.1503	-2.5005
8	.0000	.0000	-7.4350	.0000	-2.4994	-2.4994	-2.5005	-.1516
VIF(kulaksiz) e Karsilik Hamilton Dizeyi								
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.4326	.0000	.0000	.0000
2	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.4332	.0000	.0000
3	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.4350
4	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.4344	.0000
5	-7.4326	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.4995	-2.4986	-2.4994
6	.0000	-7.4332	.0000	.0000	-2.4995	.0000	-2.5009	-2.4994
7	.0000	.0000	.0000	-7.4344	-2.4986	-2.5009	.0000	-2.5005
8	.0000	.0000	-7.4350	.0000	-2.4994	-2.4994	-2.5005	.0000
h'=h-(alfa)*S								
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.1511	-1.3933	-1.3939	-1.3936	-7.4326	-2.9030	-2.9030	-2.9035
2	-1.3933	.1497	-1.3941	-1.3936	-2.9030	-7.4332	-2.9041	-2.9040
3	-1.3939	-1.3941	.1494	-1.3947	-2.9031	-2.9038	-2.9047	-7.4350
4	-1.3936	-1.3936	-1.3947	.1491	-2.9026	-2.9046	-7.4344	-2.9043
5	-7.4326	-2.9030	-2.9031	-2.9026	-.1488	-2.4995	-2.4986	-2.4994
6	-2.9030	-7.4332	-2.9038	-2.9046	-2.4995	-.1486	-2.5009	-2.4994
7	-2.9030	-2.9041	-2.9047	-7.4344	-2.4986	-2.5009	-.1503	-2.5005
8	-2.9035	-2.9040	-7.4350	-2.9043	-2.4994	-2.4994	-2.5005	-.1516
Satirlarda AO lar, Sütünlarda MO lar.								
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.6867	.2130	-.6345	-.7888	.3919	.2629	-.2634	.1697
2	.6867	.7947	.6457	.1473	-.1321	-.4471	-.2733	.1697
3	.6867	-.1557	-.5566	.8580	-.4337	.3195	.0432	.1697
4	.6867	-.8520	.5454	-.2165	.1740	-.1353	.4934	.1697
5	-1.5546	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.6459
6	.0000	-1.0021	-.5026	.1338	-.0016	-.3799	-.3816	.0000
7	.0000	-.2324	.6924	.8608	.3904	.2620	-.2624	.0000
8	.0000	-.4654	.7364	-.7180	-.3708	.2774	-.2747	.0000
Satirlarda Melezlenmis AO lar, Sütünlarda Melezlenmis MO lar.								
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.6867	.2130	-.6345	-.7888	.3919	.2629	-.2634	.1697
2	.6867	.7947	.6457	.1473	-.1321	-.4471	-.2733	.1697
3	.6867	-.1557	-.5566	.8580	-.4337	.3195	.0432	.1697
4	.6867	-.8520	.5454	-.2165	.1740	-.1353	.4934	.1697
5	-.7773	-.2013	.5997	.7454	.3381	.2269	-.2273	.3230
6	-.7773	-.7511	-.6103	-.1393	-.1140	-.3858	-.2358	.3230
7	-.7773	.8052	-.5154	.2046	.1502	-.1167	.4258	.3230
8	-.7773	.1471	.5260	-.8108	-.3743	.2756	.0373	.3230

EHT den gelen özdegerler	HAO dan gelen özdegerler	Ei-alfa
29.0935000	29.0934953	42.8420046
3.66870000	3.66869969	17.4172046
3.66860000	3.66860134	17.4171046
3.66850000	3.66850130	17.4170046
-15.5115000	-15.5114995	-1.76299536
-15.5115000	-15.5115012	-1.76299536
-15.5116000	-15.5116003	-1.76309536
-24.4878000	-24.4878013	-10.7392954
EHTD (kulakli)	EHTD (kulaksiz)	
23.2887846	23.2805671	
23.2842569	23.2773641	
23.2823815	23.2714778	
14.7561365	14.7357932	
-4.28236742	-4.31197760	
-4.28336246	-4.31241642	
-4.28434059	-4.31288718	
-7.65182052	-7.50671107	



C2H6.LOG

HyperChem log start -- Mon Aug 17 14:18:05 1998.
 Single Point, MolecularMechanics, molecule = AC2H6.HIN.
 mmplus
 Total Energy=36.524242 Gradient=73.896347.
 Bond=30.6801 Angle=0.0225845 Dihedral=2.66494e-010 Vdw=5.64254 Stretch-
 bend=0.179042 Electrostatic=0.
 Geometry optimization, MolecularMechanics, molecule = AC2H6.HIN.
 mmplus
 PolakRibiere optimizer
 Energy=0.815747 Gradient=0.000034 Converged=YES (15 cycles 44 points).
 Bond=0.0287261 Angle=0.0967306 Dihedral=4.94741e-011 Vdw=0.67875 Stretch-
 bend=0.0115408 Electrostatic=0.
 Single Point, SemiEmpirical, molecule = AC2H6.HIN.
 ExtendedHuckel
 Extended-Huckel Calculation:
 Singlet State Calculation
 Number of Electrons = 14
 Starting Extended-Huckel calculation with 14 orbitals
 Charge on the System = 0
 Total Orbitals = 14

Number of Double Occupied Levels = 7
 Unweighted Huckel Constant = 1.7500000
 d Orbitals on Si...Cl If Any Not Included
 Energy=-5716.685861

----- RESULTS -----

Sum of One-Electron Energies = -5716.6858605 (kcal/mol)
 Sum of One-Electron Energies = -9.110404296 (a.u.)

EIGENVALUES (eV)

-26.470825	-21.533985	-16.063702	-16.063700	-14.752046
-14.752043	-14.310750	2.008418	2.008460	2.828016
5.854662	5.854722	22.017767	36.810467	

ATOMIC ORBITAL ELECTRON POPULATIONS

1.228241	0.941060	0.942183	0.942644	1.228241
0.941060	0.942183	0.942645	0.981957	0.981958
0.981957	0.981958	0.981956	0.981957	

NET CHARGES ANE COORDINATES

Atom	Z	Charge	Coordinates (a.u.)		
			x	y	z
1	6	-0.054128	-1.89665	4.64008	85.03767
2	6	-0.054129	0.65049	3.26572	85.03768
3	1	0.018043	-3.49468	3.26760	85.03767
4	1	0.018042	-2.09383	5.86383	83.33446
5	1	0.018043	-2.09383	5.86384	86.74088
6	1	0.018042	0.84766	2.04196	83.33447
7	1	0.018044	0.84767	2.04198	86.74089
8	1	0.018043	2.24851	4.63820	85.03767

Alpha: Orbital Index = 1 Orbital Energy = -26.470825 (eV)
 HyperChem log stop -- Mon Aug 17 14:22:34 1998.

C2H6.INP

c2h6

6	2	0	0	0	00000	1.75		
		-1.852180			1.731828		45.069960	
		-1.109730			3.107830		44.167260	
		-1.109730			3.107835		45.972660	
		.449260			1.082239		44.167270	
		.449265			1.082249		45.972670	
		1.191710			2.458246		45.069960	
		-1.005224			2.459242		45.069960	
		.344760			1.730832		45.069970	

C C

C2H6.OUT

c2h6

Extended Hueckel calculation
 input geometry

Atom	x	y	z	n	S	coul	n	P	coul
					exp			exp	
H 1	-1.852	1.732	45.070	1	1.300	-13.600			
H 2	-1.110	3.108	44.167	1	1.300	-13.600			
H 3	-1.110	3.108	45.973	1	1.300	-13.600			
H 4	.449	1.082	44.167	1	1.300	-13.600			
H 5	.449	1.082	45.973	1	1.300	-13.600			
H 6	1.192	2.458	45.070	1	1.300	-13.600			
C 7	-1.005	2.459	45.070	2	1.625	-21.400	2	1.625	-11.400
C 8	.345	1.731	45.070	2	1.625	-21.400	2	1.625	-11.400

Charge = 0 iprint = 0 Hueckel constant = 1.750

Distance matrix

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.0000	1.8054	1.8054	2.5561	2.5561	3.1294	1.1165	2.1969
2	1.8054	.0000	1.8054	2.5561	3.1294	2.5561	1.1164	2.1969
3	1.8054	1.8054	.0000	3.1294	2.5561	2.5561	1.1165	2.1969
4	2.5561	2.5561	3.1294	.0000	1.8054	1.8054	2.1969	1.1164
5	2.5561	3.1294	2.5561	1.8054	.0000	1.8054	2.1969	1.1164

6	3.1294	2.5561	2.5561	1.8054	1.8054	.0000	2.1969	1.1164
7	1.1165	1.1164	1.1165	2.1969	2.1969	2.1969	.0000	1.5340
8	2.1969	2.1969	2.1969	1.1164	1.1164	1.1164	1.5340	.0000

Overlap matrix

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1.0000	.1422	.1422	.0383	.0383	.0130	.4776	-.3658
2	.1422	1.0000	.1422	.0383	.0130	.0383	.4776	-.0451
3	.1422	.1422	1.0000	.0130	.0383	.0383	.4776	-.0451
4	.0383	.0383	.0130	1.0000	.1422	.1422	.0966	.0821
5	.0383	.0130	.0383	.1422	1.0000	.1422	.0966	.0821
6	.0130	.0383	.0383	.1422	.1422	1.0000	.0966	.1240
7	.4776	.4776	.4776	.0966	.0966	.0966	1.0000	.0000
8	-.3658	-.0451	-.0451	.0821	.0821	.1240	.0000	1.0000
9	-.3142	.2801	.2801	-.0777	-.0777	-.0001	.0000	.0000
10	.0000	-.3899	.3899	-.0510	.0510	.0000	.0000	.0000
11	.0966	.0966	.0966	.4776	.4776	.4776	.3432	.3232
12	-.1240	-.0821	-.0821	.0451	.0451	.3658	-.3232	-.2115
13	.0001	.0777	.0777	-.2801	-.2801	.3142	.1744	.2188
14	.0000	-.0510	.0510	-.3899	.3899	.0000	.0000	.0000
	9	10	11	12	13	14		
1	-.3142	.0000	.0966	-.1240	.0001	.0000		
2	.2801	-.3899	.0966	-.0821	.0777	-.0510		
3	.2801	.3899	.0966	-.0821	.0777	.0510		
4	-.0777	-.0510	.4776	.0451	-.2801	-.3899		
5	-.0777	.0510	.4776	.0451	-.2801	.3899		
6	-.0001	.0000	.4776	.3658	.3142	.0000		
7	.0000	.0000	.3432	-.3232	.1744	.0000		
8	.0000	.0000	.3232	-.2115	.2188	.0000		
9	1.0000	.0000	-.1744	.2188	.0760	.0000		
10	.0000	1.0000	.0000	.0000	.0000	.1940		
11	-.1744	.0000	1.0000	.0000	.0000	.0000		
12	.2188	.0000	.0000	1.0000	.0000	.0000		
13	.0760	.0000	.0000	.0000	1.0000	.0000		
14	.0000	.1940	.0000	.0000	.0000	1.0000		

starting main calculations

Results of calculation c2h6

Energy levels (eV)

E(1) =	36.41053	.0000	E(8) =	-14.31139	2.0000
E(2) =	21.79809	.0000	E(9) =	-14.75510	2.0000
E(3) =	5.76654	.0000	E(10) =	-14.75511	2.0000
E(4) =	5.76637	.0000	E(11) =	-16.06030	2.0000
E(5) =	2.75310	.0000	E(12) =	-16.06031	2.0000
E(6) =	1.94503	.0000	E(13) =	-21.53478	2.0000
E(7) =	1.94494	.0000	E(14) =	-26.46252	2.0000

Sum of one-electron energies = -247.87903395 eV.

Wave Functions

MO's in columns, AO's in rows

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.4590	-.5429	.4489	-.4967	-.2926	.4421	.5420	-.1393
2	.4590	-.5429	-.6546	-.1404	-.2927	-.6904	.1118	-.1393
3	.4590	-.5429	.2057	.6371	-.2925	.2484	-.6539	-.1393
4	-.4591	-.5429	.2057	.6371	.2925	-.2484	.6539	-.1393
5	-.4591	-.5429	-.6546	-.1404	.2927	.6904	-.1118	-.1393
6	-.4591	-.5429	.4489	-.4967	.2926	-.4421	-.5420	-.1393
7	-1.2907	.9041	.0000	.0000	-.0636	.0000	.0000	.0700
8	-.2477	-.3990	.2841	-.3143	-.9007	.2171	.2661	.4769
9	.1337	.2153	.5265	-.5825	.4860	.4022	.4932	-.2573
10	.0000	.0000	-.6619	-.5982	-.0001	-.5604	.4570	.0000
11	1.2908	.9041	.0000	.0000	.0636	.0000	.0000	.0700
12	-.2477	.3990	-.2841	.3143	-.9007	.2171	.2660	-.4769
13	.1337	-.2153	-.5265	.5825	.4860	.4021	.4932	.2573
14	.0000	.0000	.6619	.5982	-.0001	-.5603	.4570	.0000
	9	10	11	12	13	14		
1	-.2010	.3467	.0527	-.3253	.1904	-.0846		
2	-.1997	-.3474	.2554	.2083	.1904	-.0846		
3	.4007	.0008	-.3081	.1170	.1904	-.0846		
4	.4007	.0008	.3081	-.1170	-.1904	-.0846		
5	-.1997	-.3474	-.2554	-.2083	-.1904	-.0846		
6	-.2010	.3467	-.0527	.3253	-.1904	-.0846		
7	.0000	.0000	.0000	.0000	.4087	-.4870		
8	.0915	-.1577	-.0284	.1756	-.1035	-.0242		
9	.1695	-.2923	-.0527	.3255	.0558	.0131		
10	.3321	.1926	-.3698	-.0599	.0000	.0000		

11	.0000	.0000	.0000	.0000	-.4087	-.4870
12	-.0915	.1577	-.0284	.1756	-.1035	.0242
13	-.1695	.2923	-.0527	.3255	.0558	-.0131
14	-.3321	-.1926	-.3698	-.0599	.0000	.0000

Reduced overlap population matrix, atom by atom

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.6640	-.0408	-.0408	-.0055	-.0055	.0022	.7742	-.0472
2	-.0408	.6640	-.0408	-.0055	.0022	-.0055	.7742	-.0472
3	-.0408	-.0408	.6640	.0022	-.0055	-.0055	.7742	-.0472
4	-.0055	-.0055	.0022	.6640	-.0408	-.0408	-.0472	.7742
5	-.0055	.0022	-.0055	-.0408	.6640	-.0408	-.0472	.7742
6	.0022	-.0055	-.0055	-.0408	-.0408	.6640	-.0472	.7742
7	.7742	.7742	.7742	-.0472	-.0472	-.0472	2.5857	.7539
8	-.0472	-.0472	-.0472	.7742	.7742	.7742	.7539	2.5857

Reduced charge matrix, MO's in columns, atoms in rows

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.1249	.2149	.1254	.1535	.0499	.1395	.2097	.0517
2	.1249	.2149	.2665	.0123	.0499	.3402	.0089	.0517
3	.1249	.2149	.0263	.2525	.0499	.0440	.3051	.0517
4	.1249	.2149	.0263	.2525	.0499	.0440	.3051	.0517
5	.1249	.2149	.2666	.0123	.0499	.3402	.0089	.0517
6	.1249	.2149	.1254	.1535	.0499	.1395	.2097	.0517
7	.6253	.3552	.5817	.5818	.8503	.4763	.4763	.8448
8	.6253	.3552	.5818	.5818	.8503	.4763	.4763	.8448
	9	10	11	12	13	14		
1	.0976	.2902	.0081	.3094	.1585	.0667		
2	.0963	.2915	.1907	.1268	.1585	.0667		
3	.3878	.0000	.2775	.0400	.1585	.0667		
4	.3878	.0000	.2775	.0400	.1585	.0667		
5	.0963	.2915	.1907	.1268	.1585	.0667		
6	.0976	.2902	.0081	.3094	.1585	.0667		
7	.4182	.4182	.5237	.5237	.5244	.8000		
8	.4182	.4182	.5237	.5237	.5244	.8000		

Atom Net chg.

Atomic orbital occupation for given MO occupation

		S	Px	Py	Pz	Dx2-y2	Dz2	Dxy	Dxz	Dyz
H	1	.018	.982							
H	2	.018	.982							
H	3	.018	.982							
H	4	.018	.982							
H	5	.018	.982							
H	6	.018	.982							
C	7	-.053	1.229	.941	.942	.942				
C	8	-.053	1.229	.941	.942	.942				

Reduced energy matrix, atom by atom

	1	2	3	4	5	6
1	-9.0309	.9715	.9715	.1301	.1301	-.0524
2	.9715	-9.0308	.9715	.1301	-.0524	.1301
3	.9715	.9715	-9.0309	-.0524	.1301	.1301
4	.1301	.1301	-.0524	-9.0309	.9715	.9715
5	.1301	-.0524	.1301	.9715	-9.0308	.9715
6	-.0524	.1301	.1301	.9715	.9715	-9.0308
7	-18.7616	-18.7617	-18.7616	1.1904	1.1904	1.1904
8	1.1904	1.1904	1.1904	-18.7616	-18.7617	-18.7617
	7	8				
1	-18.7616	1.1904				
2	-18.7617	1.1904				
3	-18.7616	1.1904				
4	1.1904	-18.7616				
5	1.1904	-18.7617				
6	1.1904	-18.7617				
7	-37.6608	-19.3974				
8	-19.3974	-37.6608				

C2H6.HAO

c2h6

Atom sembolleri, sira numaralari,

x, y ve z koordinatlari

H	1	-1.8520	1.7320	45.0700
H	2	-1.1100	3.1080	44.1670
H	3	-1.1100	3.1080	45.9730
H	4	.4490	1.0820	44.1670

12	.0000	.0000	.0000	-7.2929	.0000	.0000	.0000	.0000
13	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.2929	.0000	.0000	.0000
14	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.2903	.0000	.0000
	9	10	11	12	13	14		
1	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000		
2	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000		
3	.0000	-7.4015	.0000	.0000	.0000	.0000		
4	.0000	.0000	.0000	-7.2929	.0000	.0000		
5	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.2929	.0000		
6	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.2903		
7	-2.4996	-2.4987	.0000	.0000	.0000	.0000		
8	-2.5005	-2.5000	.0000	.0000	.0000	.0000		
9	-.1301	-2.4994	-7.8179	.0000	.0000	.0000		
10	-2.4994	-.1286	.0000	.0000	.0000	.0000		
11	-7.8179	.0000	-.1298	-2.5003	-2.5003	-2.4995		
12	.0000	.0000	-2.5003	-.1294	-2.5002	-2.4991		
13	.0000	.0000	-2.5003	-2.5002	-.1295	-2.4995		
14	.0000	.0000	-2.4995	-2.4991	-2.4995	-.1272		

VIF(kulaksiz) e Karsilik Hamilton Dizeyi

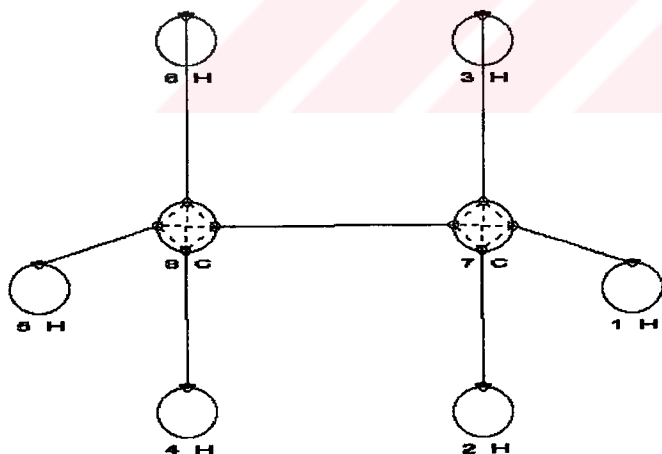
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.4077	.0000
2	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.4087
3	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
4	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
5	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
6	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
7	-7.4077	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.4997
8	.0000	-7.4087	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.4997	.0000
9	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.4996	-2.5005
10	.0000	.0000	-7.4015	.0000	.0000	.0000	-2.4987	-2.5000
11	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
12	.0000	.0000	.0000	-7.2929	.0000	.0000	.0000	.0000
13	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.2929	.0000	.0000	.0000
14	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.2903	.0000	.0000

	9	10	11	12	13	14		
1	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000		
2	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000		
3	.0000	-7.4015	.0000	.0000	.0000	.0000		
4	.0000	.0000	.0000	-7.2929	.0000	.0000		
5	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.2929	.0000		
6	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.2903		
7	-2.4996	-2.4987	.0000	.0000	.0000	.0000		
8	-2.5005	-2.5000	.0000	.0000	.0000	.0000		
9	.0000	-2.4994	-7.8179	.0000	.0000	.0000		
10	-2.4994	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000		
11	-7.8179	.0000	.0000	-2.5003	-2.5003	-2.4995		
12	.0000	.0000	-2.5003	.0000	-2.5002	-2.4991		
13	.0000	.0000	-2.5003	-2.5002	.0000	-2.4995		
14	.0000	.0000	-2.4995	-2.4991	-2.4995	.0000		

h'=h-(alfa)*S

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.1723	-1.4245	-1.4245	-.3834	-.3823	-.1287	-7.4077	-2.8964
2	-1.4245	.1704	-1.4255	-.3839	-.1306	-.3824	-2.9852	-7.4087
3	-1.4245	-1.4255	.1718	-.1293	-.3839	-.3833	-2.9843	-3.0257
4	-.3834	-.3839	-.1293	.1720	-1.4255	-1.4244	-.7339	-.7361
5	-.3823	-.1306	-.3839	-1.4255	.1711	-1.4248	-.7326	-.1635
6	-.1287	-.3824	-.3833	-1.4244	-1.4248	.1728	-.1528	-.7528
7	-7.4077	-2.9852	-2.9843	-.7339	-.7326	-.1528	-.1269	-2.4997
8	-2.8964	-7.4087	-3.0257	-.7361	-.1635	-.7528	-2.4997	-.1289
9	-2.8956	-2.8530	-2.6863	-1.5963	-1.5761	-1.5690	-2.4996	-2.5005
10	-2.8961	-2.8537	-7.4015	-.1929	-.7888	-.7830	-2.4987	-2.5000
11	-1.3905	-1.3920	-1.6857	-1.4566	-3.7066	-3.7048	-2.5887	-2.6473
12	-1.1375	-1.1372	-.5240	-6.9592	-2.2795	-2.2749	-1.8765	-1.8963
13	-.6573	-.0745	-.5248	-3.8403	-7.2929	-2.8257	-.7197	.4517
14	-.0729	-.6578	-.5259	-3.8409	-2.8216	-7.2903	.4658	-.7596
	9	10	11	12	13	14		
1	-2.8956	-2.8961	-1.3905	-1.1375	-.6573	-.0729		
2	-2.8530	-2.8537	-1.3920	-1.1372	-.0745	-.6578		
3	-2.6863	-7.4015	-1.6857	-.5240	-.5248	-.5259		
4	-1.5963	-.1929	-1.4566	-6.9592	-3.8403	-3.8409		
5	-1.5761	-.7888	-3.7066	-2.2795	-7.2929	-2.8216		
6	-1.5690	-.7830	-3.7048	-2.2749	-2.8257	-7.2903		
7	-2.4996	-2.4987	-2.5887	-1.8765	-.7197	.4658		
8	-2.5005	-2.5000	-2.6473	-1.8963	.4517	-.7596		
9	-.1301	-2.4994	-7.8179	-5.0374	-2.3819	-2.3729		

10	-2.4994	-.1286	-3.4284	-.7746	-.5621	-.5501	
11	-7.8179	-3.4284	-.1298	-2.5003	-2.5003	-2.4995	
12	-5.0374	-.7746	-2.5003	-.1294	-2.5002	-2.4991	
13	-2.3819	-.5621	-2.5003	-2.5002	-.1295	-2.4995	
14	-2.3729	-.5501	-2.4995	-2.4991	-2.4995	-.1272	
EHT den gelen özdegerler			HAO dan gelen özdegerler				Ei-alfa
	36.4105000			36.4105014			50.1814436
	21.7980000			21.7979990			35.5689436
	5.76650000			5.76649819			19.5374436
	5.76630000			5.76629901			19.5372436
	2.75310000			2.75309722			16.5240436
	1.94500000			1.94499839			15.7159436
	1.94490000			1.94489951			15.7158436
	-14.3113000			-14.3113001			-.540356358
	-14.7551000			-14.7550998			-.984156358
	-14.7551000			-14.7551000			-.984156358
	-16.0603000			-16.0602982			-2.28935636
	-16.0603000			-16.0603008			-2.28935636
	-21.5347000			-21.5347021			-7.76375636
	-26.4625000			-26.4624989			-12.6915564
EHTD (kulakli)			EHTD (kulaksiz)				
	25.5256883			25.4957271			
	24.9342864			24.9482599			
	23.5590093			23.6886477			
	21.0431752			20.9513092			
	20.3175755			20.2349003			
	17.0655320			17.0054303			
	12.7157161			12.7839050			
	-3.82468013			-3.85319376			
	-3.83904026			-3.87153387			
	-4.26804775			-4.26776300			
	-4.76332653			-4.80512788			
	-4.83866282			-4.88276793			
	-7.48768315			-7.38170201			
	-8.92425712			-8.75125082			



C3H8.LOG

HyperChem log start -- Thu Apr 02 16:30:53 1998.
 PrintLevel=2
 Single Point, SemiEmpirical, molecule = PROPAN.HIN.
 ExtendedHuckel
 Extended-Huckel Calculation:
 Singlet State Calculation
 Number of Electrons = 20
 Starting Extended-Huckel calculation with 20 orbitals

Charge on the System = 0
 Total Orbitals = 20
 Number of Double Occupied Levels = 10
 Unweighted Huckel Constant = 1.7500000
 d Orbitals on Si...Cl If Any Not Included
 Energy=-8156.103963

----- RESULTS -----

Sum of One-Electron Energies = -8156.1039632 (kcal/mol)
 Sum of One-Electron Energies = -12.997986315 (a.u.)

EIGENVALUES (eV)

-27.383350	-23.701136	-20.380476	-16.347799	-15.896319
-15.367978	-15.279974	-14.512751	-14.166111	-13.801708
1.428453	1.437077	1.960192	3.803982	5.100445
5.145488	6.876883	18.975960	29.081314	40.082172

ATOMIC ORBITAL ELECTRON POPULATIONS

1.229876	0.943653	0.944431	0.943401	1.204264
0.930579	0.930770	0.928483	1.229875	0.943271
0.944814	0.943401	0.982917	0.982918	0.984534
0.991223	0.991223	0.982917	0.982917	0.984533

NET CHARGES ANE COORDINATES

Atom	Z	Charge	Coordinates (a.u.)		
			x	y	z
1	6	-0.061360	-3.64762	0.10588	-0.04981
2	6	0.005903	-1.18882	1.56035	0.44267
3	6	-0.061362	1.14680	-0.08520	-0.04806
4	1	0.017083	-3.79377	-1.58225	1.20070
5	1	0.017082	-3.75148	-0.55412	-2.04694
6	1	0.015466	-5.33030	1.32033	0.31272
7	1	0.008777	-1.16250	2.23924	2.44051
8	1	0.008777	-1.12042	3.26505	-0.79923
9	1	0.017083	1.19929	-0.75139	-2.04514
10	1	0.017083	1.15719	-1.77961	1.20246
11	1	0.015467	2.92052	0.99146	0.31580

HyperChem log stop -- Thu Apr 02 16:32:53 1998.

C3H8.INP

propan

8 3 0 0

-2.010698	-.838592	.636371
-1.988284	-.293684	-1.084878
-2.825059	.699775	.165742
-.616125	1.186797	1.293470
-.593823	1.730476	-.423592
.635624	-.398237	-1.083924
.613311	-.943193	.637304
1.547876	.525474	.167374
-1.933239	.056116	-.026399
-.630075	.826985	.234615
.607804	-.045156	-.025472

C C C

C3H8.OUT

propan

Extended Hueckel calculation

input geometry

Atom	x	y	z		S		P	
				n	exp	coul	n	exp
								coul
H 1	-2.011	-.839	.636	1	1.300	-13.600		
H 2	-1.988	-.294	-1.085	1	1.300	-13.600		
H 3	-2.825	.700	.166	1	1.300	-13.600		
H 4	-.616	1.187	1.293	1	1.300	-13.600		
H 5	-.594	1.730	-.424	1	1.300	-13.600		
H 6	.636	-.398	-1.084	1	1.300	-13.600		
H 7	.613	-.943	.637	1	1.300	-13.600		
H 8	1.548	.525	.167	1	1.300	-13.600		

C 9	-1.933	.056	-.026	2	1.625	-21.400	2	1.625	-11.400
C 10	-.630	.827	.235	2	1.625	-21.400	2	1.625	-11.400
C 11	.608	-.045	-.025	2	1.625	-21.400	2	1.625	-11.400

Charge = 0 iprint = 0 Hueckel constant = 1.750

Distance matrix

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.0000	1.8056	1.8031	2.5454	3.1195	3.1869	2.6261	3.8398
2	1.8056	.0000	1.8031	3.1195	2.5454	2.6260	3.1869	3.8397
3	1.8031	1.8031	.0000	2.5275	2.5275	3.8397	3.8398	4.3764
4	2.5454	3.1195	2.5275	.0000	1.8012	3.1195	2.5454	2.5275
5	3.1195	2.5454	2.5275	1.8012	.0000	2.5454	3.1195	2.5275
6	3.1869	2.6260	3.8397	3.1195	2.5454	.0000	1.8056	1.8031
7	2.6261	3.1869	3.8398	2.5454	3.1195	1.8056	.0000	1.8031
8	3.8398	3.8397	4.3764	2.5275	2.5275	1.8031	1.8031	.0000
9	1.1161	1.1161	1.1165	2.1807	2.1807	2.8149	2.8150	3.5180
10	2.2004	2.2004	2.1997	1.1184	1.1184	2.2004	2.2004	2.1998
11	2.8150	2.8149	3.5180	2.1807	2.1807	1.1161	1.1161	1.1165
	9	10	11					
1	1.1161	2.2004	2.8150					
2	1.1161	2.2004	2.8149					
3	1.1165	2.1997	3.5180					
4	2.1807	1.1184	2.1807					
5	2.1807	1.1184	2.1807					
6	2.8149	2.2004	1.1161					
7	2.8150	2.2004	1.1161					
8	3.5180	2.1998	1.1165					
9	.0000	1.5364	2.5431					
10	1.5364	.0000	1.5364					
11	2.5431	1.5364	.0000					

Overlap matrix

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1.0000	.1421	.1427	.0391	.0133	.0116	.0337	.0032
2	.1421	1.0000	.1427	.0133	.0390	.0337	.0116	.0032
3	.1427	.1427	1.0000	.0403	.0404	.0032	.0032	.0011
4	.0391	.0133	.0403	1.0000	.1431	.0133	.0391	.0403
5	.0133	.0390	.0404	.1431	1.0000	.0390	.0133	.0403
6	.0116	.0337	.0032	.0133	.0390	1.0000	.1421	.1427
7	.0337	.0116	.0032	.0391	.0133	.1421	1.0000	.1427
8	.0032	.0032	.0011	.0403	.0403	.1427	.1427	1.0000
9	.4778	.4778	.4776	.0994	.0994	.0315	.0315	.0079
10	-.0335	-.0238	-.3852	.0769	.0782	.0389	.0386	.0110
11	-.3866	-.1512	.2780	.0660	.0977	-.0069	-.0151	.0015
12	.2864	-.4574	.0830	.0770	-.0232	-.0160	.0100	.0006
13	.0961	.0961	.0962	.4765	.4765	.0961	.0961	.0962
14	-.0774	-.0761	-.1232	.0060	.0156	.0709	.0697	.1222
15	-.0934	-.0628	-.0071	.1549	.3890	-.0687	-.0992	-.0169
16	.0225	-.0740	-.0039	.4559	-.2834	-.0739	.0226	-.0038
17	.0315	.0315	.0079	.0994	.0994	.4778	.4778	.4776
18	-.0396	-.0393	-.0108	-.0714	-.0701	.0120	.0024	.4060
19	-.0120	-.0038	.0023	.0719	.1037	-.1526	-.3881	.2465
20	.0100	-.0160	.0006	.0770	-.0232	-.4574	.2864	.0833
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	.4778	-.0335	-.3866	.2864	.0961	-.0774	-.0934	.0225
2	.4778	-.0238	-.1512	-.4574	.0961	-.0761	-.0628	-.0740
3	.4776	-.3852	.2780	.0830	.0962	-.1232	-.0071	-.0039
4	.0994	.0769	.0660	.0770	.4765	.0060	.1549	.4559
5	.0994	.0782	.0977	-.0232	.4765	.0156	.3890	-.2834
6	.0315	.0389	-.0069	-.0160	.0961	.0709	-.0687	-.0739
7	.0315	.0386	-.0151	.0100	.0961	.0697	-.0992	.0226
8	.0079	.0110	.0015	.0006	.0962	.1222	-.0169	-.0038
9	1.0000	.0000	.0000	.0000	.3421	-.3107	-.1838	-.0622
10	.0000	1.0000	.0000	.0000	.3107	-.1827	-.2224	-.0753
11	.0000	.0000	1.0000	.0000	.1838	-.2224	.0616	-.0445
12	.0000	.0000	.0000	1.0000	.0622	-.0753	-.0445	.1781
13	.3421	.3107	.1838	.0622	1.0000	.0000	.0000	.0000
14	-.3107	-.1827	-.2224	-.0753	.0000	1.0000	.0000	.0000
15	-.1838	-.2224	.0616	-.0445	.0000	.0000	1.0000	.0000
16	-.0622	-.0753	-.0445	.1781	.0000	.0000	.0000	1.0000
17	.0696	.0922	-.0037	.0000	.3421	.2951	-.2079	-.0620
18	-.0922	-.1177	.0057	-.0001	-.2951	-.1460	.2390	.0713
19	.0037	.0057	.0261	.0000	.2079	.2390	.0248	-.0502
20	.0000	-.0001	.0000	.0264	.0620	.0713	-.0502	.1782

	17	18	19	20
1	.0315	-.0396	-.0120	.0100
2	.0315	-.0393	-.0038	-.0160
3	.0079	-.0108	.0023	.0006
4	.0994	-.0714	.0719	.0770
5	.0994	-.0701	.1037	-.0232
6	.4778	.0120	-.1526	-.4574
7	.4778	.0024	-.3881	.2864
8	.4776	.4060	.2465	.0833
9	.0696	-.0922	.0037	.0000
10	.0922	-.1177	.0057	-.0001
11	-.0037	.0057	.0261	.0000
12	.0000	-.0001	.0000	.0264
13	.3421	-.2951	.2079	.0620
14	.2951	-.1460	.2390	.0713
15	-.2079	.2390	.0248	-.0502
16	-.0620	.0713	-.0502	.1782
17	1.0000	.0000	.0000	.0000
18	.0000	1.0000	.0000	.0000
19	.0000	.0000	1.0000	.0000
20	.0000	.0000	.0000	1.0000

starting main calculations

Results of calculation propan

Energy levels (eV)

E(1) =	39.63130	.0000	E(11) =	-13.80475	2.0000
E(2) =	28.77627	.0000	E(12) =	-14.16929	2.0000
E(3) =	18.78150	.0000	E(13) =	-14.51702	2.0000
E(4) =	6.77978	.0000	E(14) =	-15.28047	2.0000
E(5) =	5.06081	.0000	E(15) =	-15.36776	2.0000
E(6) =	5.01358	.0000	E(16) =	-15.89324	2.0000
E(7) =	3.72951	.0000	E(17) =	-16.34324	2.0000
E(8) =	1.88968	.0000	E(18) =	-20.38232	2.0000
E(9) =	1.37647	.0000	E(19) =	-23.69940	2.0000
E(10) =	1.36570	.0000	E(20) =	-27.37303	2.0000

Sum of one-electron energies = -353.66102742 eV.

Wave Functions

MO's in columns, AO's in rows

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.3198	.4913	-.4101	-.4009	-.0970	.4212	-.5997	-.0312
2	.3198	.4913	-.4101	.4008	-.0970	.4214	.5997	-.0310
3	.3177	.5148	-.3657	.0000	.6244	-.4834	.0001	-.5157
4	-.4451	.0000	-.5912	.5708	-.3308	.0006	.0000	.0000
5	-.4451	.0000	-.5912	-.5708	-.3308	.0006	.0000	.0001
6	.3198	-.4914	-.4101	.4009	-.0986	-.4210	-.5997	.0310
7	.3198	-.4913	-.4101	-.4009	-.0986	-.4209	.5997	.0310
8	.3177	-.5149	-.3657	.0000	.6262	.4811	-.0001	.5158
9	-.9744	-1.1023	.5585	.0000	-.0099	-.0097	.0000	-.0662
10	-.2517	.0832	-.3592	-.0082	.6966	-.1034	-.0098	-.7823
11	-.1288	-.0153	-.2937	-.1987	-.2856	.7915	-.2406	-.0886
12	-.0440	-.0038	-.0977	.6274	-.0813	.2493	.7598	-.0381
13	1.3528	.0000	.8440	.0000	-.0803	.0002	.0000	.0000
14	-.0083	-.5879	.0160	.0117	.0319	.5386	.0000	-.8558
15	-.2090	.0234	.4030	.2848	.7788	-.0229	.0000	.0340
16	-.0663	-.0002	.1278	-.8996	.2470	-.0003	.0000	-.0003
17	-.9744	1.1023	.5585	.0000	-.0098	.0098	.0000	.0662
18	.2406	.0842	.3348	-.0081	-.7177	-.1632	.0099	-.7728
19	-.1484	.0087	-.3213	-.1987	-.2322	-.7799	.2406	.1503
20	-.0439	.0038	-.0974	.6274	-.0828	-.2491	-.7598	.0375
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	.4263	-.3575	.0177	-.1710	.2447	.3150	-.2156	-.0967
2	-.4304	-.3527	.0177	-.1710	-.2447	-.3151	-.2155	-.0967
3	.0021	.3713	.2469	.1265	.0000	.0000	.2989	.3552
4	.6095	.4010	.0000	-.2532	-.3762	.0000	.0000	.0726
5	-.6049	.4080	.0000	-.2532	.3762	.0000	.0000	.0726
6	-.4304	-.3526	-.0177	-.1710	-.2447	.3151	.2155	-.0967
7	.4264	-.3575	-.0177	-.1710	.2447	-.3150	.2156	-.0967
8	.0021	.3711	-.2469	.1265	.0000	-.0001	-.2989	.3552
9	-.0003	-.0469	-.0672	.0498	.0000	.0000	-.0048	.0086
10	.0055	-.1194	-.4090	.1762	-.0031	-.0049	-.0967	-.2934
11	.1476	-.6190	-.1017	.2951	-.0749	-.1179	.3503	.2026
12	-.4783	-.1946	-.0375	.0957	.2368	.3725	.1096	.0604
13	.0002	.0350	.0000	.0716	.0000	.0000	.0000	-.0581
14	.0084	-.0258	.5251	-.0184	.0050	.0000	-.1679	.0083

15	.2051	-.6522	-.0209	-.4626	.1221	.0000	.0067	.2089
16	-.6607	-.2027	.0002	-.1467	-.3857	.0000	-.0001	.0663
17	-.0003	-.0469	.0672	.0498	.0000	.0000	.0048	.0086
18	.0066	.0701	-.3997	-.1522	-.0031	.0048	-.1242	.3086
19	.1476	-.6266	.1340	.3082	-.0749	.1179	-.3415	.1786
20	-.4783	-.1945	.0372	.0956	.2368	-.3725	-.1097	.0606
	17	18	19	20				
1	-.2071	-.1517	.1403	-.0497				
2	.2071	-.1517	.1403	-.0497				
3	.0000	-.1336	.1464	-.0482				
4	-.2578	.2445	.0000	-.0656				
5	.2578	.2445	.0000	-.0656				
6	.2071	-.1517	-.1403	-.0497				
7	-.2071	-.1517	-.1403	-.0497				
8	.0000	-.1336	-.1464	-.0482				
9	.0000	-.2419	.4627	-.3630				
10	.0034	.1133	-.0119	-.0147				
11	.0820	.0855	-.0017	-.0085				
12	-.2590	.0285	-.0007	-.0029				
13	.0000	.4136	.0000	-.4713				
14	.0043	.0048	-.1040	.0006				
15	.1048	.1207	.0041	.0153				
16	-.3310	.0383	.0000	.0049				
17	.0000	-.2419	-.4627	-.3630				
18	.0034	-.1062	-.0117	.0140				
19	.0820	.0942	.0026	-.0097				
20	-.2590	.0285	.0007	-.0029				

Reduced overlap population matrix, atom by atom

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.6652	-.0407	-.0416	-.0057	.0022	-.0003	.0001	.0001
2	-.0407	.6652	-.0416	.0022	-.0057	.0001	-.0003	.0001
3	-.0416	-.0416	.6682	-.0058	-.0058	.0001	.0001	.0000
4	-.0057	.0022	-.0058	.6830	-.0427	.0022	-.0057	-.0058
5	.0022	-.0057	-.0058	-.0427	.6830	-.0057	.0022	-.0058
6	-.0003	.0001	.0001	.0022	-.0057	.6652	-.0407	-.0416
7	.0001	-.0003	.0001	-.0057	.0022	-.0407	.6652	-.0416
8	.0001	.0001	.0000	-.0058	-.0058	-.0416	-.0416	.6682
9	.7756	.7756	.7745	-.0493	-.0493	-.0072	-.0072	.0020
10	-.0465	-.0465	-.0485	.7768	.7768	-.0465	-.0465	-.0485
11	-.0072	-.0072	.0020	-.0493	-.0493	.7756	.7756	.7745
	9	10	11					
1	.7756	-.0465	-.0072					
2	.7756	-.0465	-.0072					
3	.7745	-.0485	.0020					
4	-.0493	.7768	-.0493					
5	-.0493	.7768	-.0493					
6	-.0072	-.0465	.7756					
7	-.0072	-.0465	.7756					
8	.0020	-.0485	.7745					
9	2.6046	.7553	-.0586					
10	.7553	2.6029	.7553					
11	-.0586	.7553	2.6046					

Reduced charge matrix, MO's in columns, atoms in rows

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.0592	.1579	.1267	.0962	.0057	.1120	.2414	-.0004
2	.0592	.1579	.1267	.0962	.0058	.1121	.2413	-.0004
3	.0570	.1734	.1041	.0000	.2494	.1506	.0000	.1727
4	.1103	.0000	.2641	.1960	.0583	.0000	.0000	.0000
5	.1103	.0000	.2641	.1960	.0583	.0000	.0000	.0000
6	.0592	.1579	.1267	.0962	.0059	.1119	.2413	-.0004
7	.0592	.1579	.1267	.0962	.0059	.1118	.2414	-.0004
8	.0570	.1734	.1041	.0000	.2509	.1491	.0000	.1728
9	.3770	.3857	.2359	.3022	.4406	.5285	.5173	.5168
10	.6747	.2501	.2852	.6189	.4768	.1973	.0000	.6224
11	.3770	.3857	.2358	.3021	.4424	.5267	.5173	.5167
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	.1319	.0860	.0015	.0730	.1397	.2586	.1197	.0279
2	.1343	.0836	.0015	.0730	.1397	.2587	.1195	.0279
3	.0000	.1079	.1414	.0299	.0000	.0000	.2398	.3555
4	.2709	.1089	.0000	.1575	.3315	.0000	.0000	.0187
5	.2670	.1128	.0000	.1575	.3314	.0000	.0000	.0187
6	.1343	.0836	.0015	.0730	.1397	.2587	.1195	.0279
7	.1319	.0860	.0015	.0730	.1397	.2586	.1197	.0279

8	.0000	.1078	.1414	.0299	.0000	.0000	.2398	.3555
9	.2380	.3978	.4910	.3435	.1663	.4827	.4681	.4707
10	.4535	.4276	.7292	.6462	.4457	.0000	.1059	.1985
11	.2380	.3978	.4910	.3435	.1663	.4827	.4681	.4707
	17	18	19	20				
1	.1310	.0929	.1094	.0296				
2	.1309	.0929	.1094	.0296				
3	.0000	.0678	.1228	.0277				
4	.2036	.2305	.0000	.0498				
5	.2036	.2305	.0000	.0498				
6	.1309	.0929	.1094	.0296				
7	.1310	.0929	.1094	.0296				
8	.0000	.0678	.1228	.0277				
9	.2936	.2607	.6108	.4729				
10	.4820	.5104	.0952	.7807				
11	.2935	.2607	.6108	.4729				

Atom	Net chg.	Atomic orbital occupation for given MO occupation								
		S	Px	Py	Pz	Dx2-y2	Dz2	Dxy	Dxz	Dyz
H 1	.017	.983								
H 2	.017	.983								
H 3	.015	.985								
H 4	.008	.992								
H 5	.008	.992								
H 6	.017	.983								
H 7	.017	.983								
H 8	.015	.985								
C 9	-.060	1.231	.943	.944	.943					
C 10	.006	1.205	.930	.930	.928					
C 11	-.060	1.231	.943	.944	.943					

Reduced energy matrix, atom by atom

	1	2	3	4	5	6				
1	-9.0464	.9675	.9896	.1347	-.0519	.0066				
2	.9675	-9.0464	.9896	-.0519	.1347	-.0035				
3	.9896	.9896	-9.0871	.1374	.1374	-.0019				
4	.1347	-.0519	.1374	-9.2885	1.0155	-.0519				
5	-.0519	.1347	.1374	1.0155	-9.2886	.1347				
6	.0066	-.0035	-.0019	-.0519	.1347	-9.0464				
7	-.0035	.0066	-.0019	.1347	-.0519	.9675				
8	-.0019	-.0019	.0010	.1374	.1374	.9896				
9	-18.8081	-18.8081	-18.7616	1.2427	1.2427	.1789				
10	1.1712	1.1712	1.2088	-18.8221	-18.8220	1.1712				
11	.1788	.1789	-.0458	1.2426	1.2427	-18.8081				
	7	8	9	10	11					
1	-.0035	-.0019	-18.8081	1.1712	.1788					
2	.0066	-.0019	-18.8081	1.1712	.1789					
3	-.0019	.0010	-18.7616	1.2088	-.0458					
4	.1347	.1374	1.2427	-18.8221	1.2426					
5	-.0519	.1374	1.2427	-18.8220	1.2427					
6	.9675	.9896	.1789	1.1712	-18.8081					
7	-9.0464	.9896	.1788	1.1712	-18.8080					
8	.9896	-9.0870	-.0458	1.2088	-18.7617					
9	.1788	-.0458	-37.9218	-19.4000	1.5403					
10	1.1712	1.2088	-19.4000	-37.7074	-19.3999					
11	-18.8080	-18.7617	1.5403	-19.3999	-37.9218					

C3H8.HAO

propan

Atom	sembolleri	sira numaralari,	x,y ve z koordinatlari
H 1	-2.0110	-.8390	.6360
H 2	-1.9880	-.2940	-1.0850
H 3	-2.8250	.7000	.1660
H 4	-.6160	1.1870	1.2930
H 5	-.5940	1.7300	-.4240
H 6	.6360	-.3980	-1.0840
H 7	.6130	-.9430	.6370
H 8	1.5480	.5250	.1670
C 9	-1.9330	.0560	-.0260
C 10	-.6300	.8270	.2350
C 11	.6080	-.0450	-.0250

9 atomu için dörtyüzlü melezleme dizeyi
.5000 .8660 .0000 .0000
.5000 -.2887 .8165 .0000
.5000 -.2887 -.4082 .7071
.5000 -.2887 -.4082 -.7071

9 atomu için döndürülmüş melezleme dizeyi
.5000 -.0605 -.6946 .5137
.5000 -.0405 -.2493 -.8284
.5000 .7540 .4009 .1442
.5000 -.6529 .5429 .1704

10 atomu için dörtyüzlü melezleme dizeyi
.5000 .8660 .0000 .0000
.5000 -.2887 .8165 .0000
.5000 -.2887 -.4082 .7071
.5000 -.2887 -.4082 -.7071

10 atomu için döndürülmüş melezleme dizeyi
.5000 -.8642 -.0500 -.0272
.5000 .2487 .2773 .7818
.5000 .2762 .5552 -.6045
.5000 .3393 -.7825 -.1502

11 atomu için dörtyüzlü melezleme dizeyi
.5000 .8660 .0000 .0000
.5000 -.2887 .8165 .0000
.5000 -.2887 -.4082 .7071
.5000 -.2887 -.4082 -.7071

11 atomu için döndürülmüş melezleme dizeyi
.5000 -.4774 .7050 -.1585
.5000 .1356 -.4292 -.7399
.5000 -.4187 -.5126 .5585
.5000 .7605 .2368 .3399

Ortalamayı kösegenden cikariyor.

$h_{uv} = h_{uv} - (\text{ortalama}) * S_{uv}$

Ortalama= -13.780130 eV

h_{VIF} de en yakin olmayan komsular arasi cizgiler ihmal edildi.

Tüm atom içi çizgiler .0000 küçük olacak şekilde $S_{uv} * (\text{ortalama})$ ya esitlenmiştir.

Atomici çizgileri degismedi.

AO da Hamilton Dizeyi

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	-13.5993	-3.3814	-3.3945	-.9306	-.3172	-.2765	-.8005	-.0751
2	-3.3814	-13.5977	-3.3958	-.3175	-.9303	-.8007	-.2766	-.0757
3	-3.3945	-3.3958	-13.5996	-.9618	-.9616	-.0765	-.0749	-.0272
4	-.9306	-.3175	-.9618	-13.6018	-3.4079	-.3180	-.9301	-.9619
5	-.3172	-.9303	-.9616	-3.4079	-13.6010	-.9303	-.3163	-.9614
6	-.2765	-.8007	-.0765	-.3180	-.9303	-13.5972	-3.3820	-3.3947
7	-.8005	-.2766	-.0749	-.9301	-.3163	-3.3820	-13.6001	-3.3945
8	-.0751	-.0757	-.0272	-.9619	-.9614	-3.3947	-3.3945	-13.5985
9	-14.6325	-14.6312	-14.6267	-3.0460	-3.0446	-.9639	-.9619	-.2409
10	.7298	.5191	8.4245	-1.6831	-1.7109	-.8528	-.8448	-.2403
11	8.4568	3.3054	-6.0819	-1.4443	-2.1379	.1479	.3307	-.0353
12	-6.2649	10.0053	-1.8147	-1.6852	.5067	.3506	-.2208	-.0145
13	-2.9429	-2.9429	-2.9466	-14.5963	-14.5942	-2.9439	-2.9423	-2.9465
14	1.6933	1.6648	2.6939	-.1304	-.3404	-1.5513	-1.5248	-2.6724
15	2.0426	1.3739	.1567	-3.3874	-8.5095	1.5026	2.1713	.3708
16	-.4910	1.6182	.0852	-9.9724	6.2000	1.6160	-.4932	.0824
17	-.9632	-.9632	-.2422	-3.0453	-3.0439	-14.6321	-14.6331	-14.6255
18	.8684	.8611	.2367	1.5635	1.5341	-.2618	-.0502	-8.8796
19	.2623	.0803	-.0553	-1.5737	-2.2683	3.3354	8.4884	-5.3926
20	-.2197	.3510	-.0135	-1.6834	.5081	10.0042	-6.2655	-1.8219
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	-14.6325	.7298	8.4568	-6.2649	-2.9429	1.6933	2.0426	-.4910
2	-14.6312	.5191	3.3054	10.0053	-2.9429	1.6648	1.3739	1.6182
3	-14.6267	8.4245	-6.0819	-1.8147	-2.9466	2.6939	.1567	.0852
4	-3.0460	-1.6831	-1.4443	-1.6852	-14.5963	-.1304	-3.3874	-9.9724
5	-3.0446	-1.7109	-2.1379	.5067	-14.5942	-.3404	-8.5095	6.2000
6	-.9639	-.8528	.1479	.3506	-2.9439	-1.5513	1.5026	1.6160
7	-.9619	-.8448	.3307	-.2208	-2.9423	-1.5248	2.1713	-.4932
8	-.2409	-.2403	-.0353	-.0145	-2.9465	-2.6724	.3708	.0824
9	-21.4008	-.0021	-.0014	-.0005	-12.8155	8.9180	5.2767	1.7876
10	-.0021	-11.4003	.0005	-.0006	-8.9190	3.6454	4.4368	1.5021
11	-.0014	.0005	-11.4001	-.0005	-5.2765	4.4352	-1.2292	.8882
12	-.0005	-.0006	-.0005	-11.4002	-1.7869	1.5022	.8892	-3.5531
13	-12.8155	-8.9190	-5.2765	-1.7869	-21.4037	.0020	.0011	.0004
14	8.9180	3.6454	4.4352	1.5022	.0020	-11.3984	-.0001	-.0003
15	5.2767	4.4368	-1.2292	.8892	.0011	-.0001	-11.4019	.0006

16	1.7876	1.5021	.8882	-3.5531	.0004	-.0003	.0006	-11.4006
17	-2.6107	-2.6469	.1031	-.0024	-12.8150	-8.4699	5.9702	1.7796
18	2.6466	2.3484	-.1152	.0006	8.4707	2.9123	-4.7676	-1.4214
19	-.1087	-.1140	-.5230	.0003	-5.9698	-4.7656	-.4946	1.0024
20	.0006	.0015	.0005	-.5269	-1.7798	-1.4214	1.0025	-3.5548

	17	18	19	20
1	-.9632	.8684	.2623	-.2197
2	-.9632	.8611	.0803	.3510
3	-.2422	.2367	-.0553	-.0135
4	-3.0453	1.5635	-1.5737	-1.6834
5	-3.0439	1.5341	-2.2683	.5081
6	-14.6321	-.2618	3.3354	10.0042
7	-14.6331	-.0502	8.4884	-6.2655
8	-14.6255	-8.8796	-5.3926	-1.8219
9	-2.6107	2.6466	-.1087	.0006
10	-2.6469	2.3484	-.1140	.0015
11	.1031	-.1152	-.5230	.0005
12	-.0024	.0006	.0003	-.5269
13	-12.8150	8.4707	-5.9698	-1.7798
14	-8.4699	2.9123	-4.7656	-1.4214
15	5.9702	-4.7676	-.4946	1.0025
16	1.7796	-1.4214	1.0024	-3.5548
17	-21.4020	.0020	-.0017	-.0003
18	.0020	-11.3989	-.0002	.0009
19	-.0017	-.0002	-11.4006	.0009
20	-.0003	.0009	.0009	-11.4000

Melezlenmis AO da Hamilton Dizeyi

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	-13.5993	-3.3814	-3.3945	-.9306	-.3172	-.2765	-.8005	-.0751
2	-3.3814	-13.5977	-3.3958	-.3175	-.9303	-.8007	-.2766	-.0757
3	-3.3945	-3.3958	-13.5996	-.9618	-.9616	-.0765	-.0749	-.0272
4	-.9306	-.3175	-.9618	-13.6018	-3.4079	-.3180	-.9301	-.9619
5	-.3172	-.9303	-.9616	-3.4079	-13.6010	-.9303	-.3163	-.9614
6	-.2765	-.8007	-.0765	-.3180	-.9303	-13.5972	-3.3820	-3.3947
7	-.8005	-.2766	-.0749	-.9301	-.3163	-3.3820	-13.6001	-3.3945
8	-.0751	-.0757	-.0272	-.9619	-.9614	-3.3947	-3.3945	-13.5985
9	-16.4527	-4.5027	-4.5314	-1.2837	.3265	-.3530	-.7729	-.0888
10	-4.2639	-16.4488	-4.6357	.3012	-1.3398	-.7747	-.3463	-.0899
11	-4.2791	-4.1557	-3.6618	-3.6141	-3.5963	-1.0151	-1.0172	-.3179
12	-4.2692	-4.1552	-16.4244	-1.4954	-1.4796	.2149	.2124	.0149
13	-3.0235	-3.0228	-3.8114	-6.7452	-6.7459	-.2504	-.2486	.8153
14	-.8679	.5887	-.6933	-16.0667	-4.8939	-.1776	-1.6338	-1.9705
15	.4272	-1.2271	-.6938	-3.1865	-15.8638	-2.0430	-.3885	-2.0552
16	-2.4216	-2.2247	-.6947	-3.1942	-1.6848	-3.4168	-3.6136	-2.6825
17	-.6765	-.8917	-.2709	-3.1117	-3.9339	-6.4250	-.3157	-6.5866
18	-.3139	-.6591	-.0553	.6102	-.7165	-16.1850	-6.3303	-4.8541
19	-1.1023	-.6873	-.1994	-2.3107	-.7178	-3.3288	-15.1461	-1.8481
20	.1663	.3116	.0412	-1.2783	-.7196	-3.3252	-7.4742	-15.9622

	9	10	11	12	13	14	15	16
1	-16.4527	-4.2639	-4.2791	-4.2692	-3.0235	-.8679	.4272	-2.4216
2	-4.5027	-16.4488	-4.1557	-4.1552	-3.0228	.5887	-1.2271	-2.2247
3	-4.5314	-4.6357	-3.6618	-16.4244	-3.8114	-.6933	-.6938	-.6947
4	-1.2837	.3012	-3.6141	-1.4954	-6.7452	-16.0667	-3.1865	-3.1942
5	.3265	-1.3398	-3.5963	-1.4796	-6.7459	-4.8939	-15.8638	-1.6848
6	-.3530	-.7747	-1.0151	.2149	-.2504	-.1776	-2.0430	-3.4168
7	-.7729	-.3463	-1.0172	.2124	-.2486	-1.6338	-.3885	-3.6136
8	-.0888	-.0899	-.3179	.0149	.8153	-1.9705	-2.0552	-2.6825
9	-13.8990	-2.4995	-2.5014	-2.4992	-3.3674	-1.3419	2.0069	-3.5396
10	-2.4995	-13.8997	-2.5004	-2.4994	-3.5182	2.2041	-2.1065	-3.0808
11	-2.5014	-2.5004	-13.9024	-2.5009	-16.0367	-2.4444	-3.2218	-9.3081
12	-2.4992	-2.4994	-2.5009	-13.9002	-5.9309	-1.0764	-.8698	.3696
13	-3.3674	-3.5182	-16.0367	-5.9309	-13.9015	-2.5014	-2.5018	-2.5026
14	-1.3419	2.2041	-2.4444	-1.0764	-2.5014	-13.9001	-2.4997	-2.5003
15	2.0069	-2.1065	-3.2218	-.8698	-2.5018	-2.4997	-13.9010	-2.4994
16	-3.5396	-3.0808	-9.3081	.3696	-2.5026	-2.5003	-2.4994	-13.9020
17	-.9455	-1.2231	-3.3199	.1975	.0659	-5.8301	-8.6846	-14.3070
18	-.3732	-.7981	-1.0116	.3822	-.2171	1.8917	-1.6423	-2.7934
19	-1.4503	-.9342	-2.7682	.4381	-.9179	-4.0765	-1.1643	-9.6172
20	.3332	.5120	.5798	-.0611	2.1988	-2.9192	-1.5241	-1.7231

	17	18	19	20
1	-.6765	-.3139	-1.1023	.1663
2	-.8917	-.6591	-.6873	.3116
3	-.2709	-.0553	-.1994	.0412
4	-3.1117	.6102	-2.3107	-1.2783
5	-3.9339	-.7165	-.7178	-.7196

6	-6.4250	-16.1850	-3.3288	-3.3252
7	-.3157	-6.3303	-15.1461	-7.4742
8	-6.5866	-4.8541	-1.8481	-15.9622
9	-.9455	-.3732	-1.4503	.3332
10	-1.2231	-.7981	-.9342	.5120
11	-3.3199	-1.0116	-2.7682	.5798
12	.1975	.3822	.4381	-.0611
13	.0659	-.2171	-.9179	2.1988
14	-5.8301	1.8917	-4.0765	-2.9192
15	-8.6846	-1.6423	-1.1643	-1.5241
16	-14.3070	-2.7934	-9.6172	-1.7231
17	-13.9026	-2.5010	-2.5010	-2.5017
18	-2.5010	-13.8989	-2.4997	-2.4999
19	-2.5010	-2.4997	-13.9016	-2.5001
20	-2.5017	-2.4999	-2.5001	-13.8983

VIF(kulakli) e Karsilik Hamilton Dizeyi

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.1808	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
2	.0000	.1825	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
3	.0000	.0000	.1805	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
4	.0000	.0000	.0000	.1783	.0000	.0000	.0000	.0000
5	.0000	.0000	.0000	.0000	.1792	.0000	.0000	.0000
6	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.1830	.0000	.0000
7	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.1800	.0000
8	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.1817
9	-7.4049	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
10	.0000	-7.4027	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
11	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
12	.0000	.0000	-7.3936	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
13	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
14	.0000	.0000	.0000	-7.2594	.0000	.0000	.0000	.0000
15	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.1842	.0000	.0000	.0000
16	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
17	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
18	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.3045	.0000	.0000
19	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.2324	.0000
20	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.2221
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	-7.4049	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
2	.0000	-7.4027	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
3	.0000	.0000	.0000	-7.3936	.0000	.0000	.0000	.0000
4	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.2594	.0000	.0000
5	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.1842	.0000
6	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
7	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
8	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
9	-.1189	-2.4995	-2.5014	-2.4992	.0000	.0000	.0000	.0000
10	-2.4995	-.1196	-2.5004	-2.4994	.0000	.0000	.0000	.0000
11	-2.5014	-2.5004	-.1223	-2.5009	-7.7970	.0000	.0000	.0000
12	-2.4992	-2.4994	-2.5009	-.1200	.0000	.0000	.0000	.0000
13	.0000	.0000	-7.7970	.0000	-.1214	-2.5014	-2.5018	-2.5026
14	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.5014	-.1199	-2.4997	-2.5003
15	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.5018	-2.4997	-.1208	-2.4994
16	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.5026	-2.5003	-2.4994	-.1218
17	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.1218
18	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
19	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
20	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
	17	18	19	20				
1	.0000	.0000	.0000	.0000				
2	.0000	.0000	.0000	.0000				
3	.0000	.0000	.0000	.0000				
4	.0000	.0000	.0000	.0000				
5	.0000	.0000	.0000	.0000				
6	.0000	-7.3045	.0000	.0000				
7	.0000	.0000	-7.2324	.0000				
8	.0000	.0000	.0000	-7.2221				
9	.0000	.0000	.0000	.0000				
10	.0000	.0000	.0000	.0000				
11	.0000	.0000	.0000	.0000				
12	.0000	.0000	.0000	.0000				
13	.0000	.0000	.0000	.0000				
14	.0000	.0000	.0000	.0000				
15	.0000	.0000	.0000	.0000				
16	-7.1218	.0000	.0000	.0000				

17 -.1225 -2.5010 -2.5010 -2.5017
 18 -2.5010 -.1188 -2.4997 -2.4999
 19 -2.5010 -2.4997 -.1215 -2.5001
 20 -2.5017 -2.4999 -2.5001 -.1182

VIF(kulaksız) e Karsilik Hamilton Dizeyi

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
2	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
3	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
4	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
5	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
6	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
7	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
8	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
9	-7.4049	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
10	.0000	-7.4027	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
11	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
12	.0000	.0000	-7.3936	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
13	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
14	.0000	.0000	.0000	-7.2594	.0000	.0000	.0000	.0000
15	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.1842	.0000	.0000	.0000
16	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
17	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
18	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.3045	.0000	.0000
19	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.2324	.0000
20	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.2221

	9	10	11	12	13	14	15	16
1	-7.4049	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
2	.0000	-7.4027	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
3	.0000	.0000	.0000	-7.3936	.0000	.0000	.0000	.0000
4	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.2594	.0000	.0000
5	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.1842	.0000
6	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
7	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
8	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
9	.0000	-2.4995	-2.5014	-2.4992	.0000	.0000	.0000	.0000
10	-2.4995	.0000	-2.5004	-2.4994	.0000	.0000	.0000	.0000
11	-2.5014	-2.5004	.0000	-2.5009	-7.7970	.0000	.0000	.0000
12	-2.4992	-2.4994	-2.5009	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
13	.0000	.0000	-7.7970	.0000	.0000	-2.5014	-2.5018	-2.5026
14	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.5014	.0000	-2.4997	-2.5003
15	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.5018	-2.4997	.0000	-2.4994
16	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.5026	-2.5003	-2.4994	.0000
17	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.1218
18	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
19	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
20	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000

	17	18	19	20
1	.0000	.0000	.0000	.0000
2	.0000	.0000	.0000	.0000
3	.0000	.0000	.0000	.0000
4	.0000	.0000	.0000	.0000
5	.0000	.0000	.0000	.0000
6	.0000	-7.3045	.0000	.0000
7	.0000	.0000	-7.2324	.0000
8	.0000	.0000	.0000	-7.2221
9	.0000	.0000	.0000	.0000
10	.0000	.0000	.0000	.0000
11	.0000	.0000	.0000	.0000
12	.0000	.0000	.0000	.0000
13	.0000	.0000	.0000	.0000
14	.0000	.0000	.0000	.0000
15	.0000	.0000	.0000	.0000
16	-7.1218	.0000	.0000	.0000
17	.0000	-2.5010	-2.5010	-2.5017
18	-2.5010	.0000	-2.4997	-2.4999
19	-2.5010	-2.4997	.0000	-2.5001
20	-2.5017	-2.4999	-2.5001	.0000

h'=h-(alfa)*S

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.1808	-1.4232	-1.4281	-.3918	-.1340	-.1166	-.3361	-.0310
2	-1.4232	.1825	-1.4294	-.1342	-.3929	-.3363	-.1167	-.0316
3	-1.4281	-1.4294	.1805	-.4064	-.4049	-.0324	-.0308	-.0120
4	-.3918	-.1342	-.4064	.1783	-1.4360	-.1347	-.3912	-.4066
5	-.1340	-.3929	-.4049	-1.4360	.1792	-.3929	-.1330	-.4061

6	-.1166	-.3363	-.0324	-.1347	-.3929	.1830	-1.4238	-1.4283
7	-.3361	-.1167	-.0308	-.3912	-.1330	-1.4238	.1800	-1.4280
8	-.0310	-.0316	-.0120	-.4066	-.4061	-1.4283	-1.4280	.1817
9	-7.4049	-2.9818	-2.9925	-.7495	-.1532	-.2156	-.3727	-.0537
10	-2.8946	-7.4027	-3.0321	-.1625	-.7693	-.3730	-.2131	-.0536
11	-2.9017	-2.8555	-2.6723	-1.6126	-1.6053	-.4638	-.4626	-.1397
12	-2.8954	-2.8541	-7.3936	-.8278	-.8218	-.0072	-.0073	-.0170
13	-1.3838	-1.3835	-1.6751	-3.8109	-3.8105	-.3575	-.3566	.0361
14	-.5855	-.0472	-.5218	-7.2594	-3.1243	-.3312	-.8684	-.9945
15	-.1073	-.7186	-.5217	-2.4932	-7.1842	-1.0211	-.4084	-1.0250
16	-1.1607	-1.0880	-.5232	-2.4967	-1.9370	-1.5294	-1.6026	-1.2582
17	-.3373	-.4181	-.1244	-1.4268	-1.7298	-3.6955	-1.4350	-3.7541
18	-.2018	-.3299	-.0407	-.0486	-.5393	-7.3045	-3.6587	-3.1121
19	-.4951	-.3398	-.0943	-1.1292	-.5395	-2.5483	-6.9222	-2.0000
20	-.0240	.0295	-.0072	-.7465	-.5397	-2.5475	-4.0821	-7.2221
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	-7.4049	-2.8946	-2.9017	-2.8954	-1.3838	-.5855	-.1073	-1.1607
2	-2.9818	-7.4027	-2.8555	-2.8541	-1.3835	-.0472	-.7186	-1.0880
3	-2.9925	-3.0321	-2.6723	-7.3936	-1.6751	-.5218	-.5217	-.5232
4	-.7495	-.1625	-1.6126	-.8278	-3.8109	-7.2594	-2.4932	-2.4967
5	-.1532	-.7693	-1.6053	-.8218	-3.8105	-3.1243	-7.1842	-1.9370
6	-.2156	-.3730	-.4638	-.0072	-.3575	-.3312	-1.0211	-1.5294
7	-.3727	-.2131	-.4626	-.0073	-.3566	-.8684	-.4084	-1.6026
8	-.0537	-.0536	-.1397	-.0170	.0361	-.9945	-1.0250	-1.2582
9	-.1189	-2.4995	-2.5014	-2.4992	-2.5750	-.5678	.3870	-1.9280
10	-2.4995	-.1196	-2.5004	-2.4994	-2.6345	.5152	-.8995	-1.7985
11	-2.5014	-2.5004	-.1223	-2.5009	-7.7970	-2.2136	-2.5355	-5.0165
12	-2.4992	-2.4994	-2.5009	-.1200	-3.4330	-.5526	-.5704	-.7858
13	-2.5750	-2.6345	-7.7970	-3.4330	-.1214	-2.5014	-2.5018	-2.5026
14	-.5678	.5152	-2.2136	-.5526	-2.5014	-.1199	-2.4997	-2.5003
15	.3870	-.8995	-2.5355	-.5704	-2.5018	-2.4997	-.1208	-2.4994
16	-1.9280	-1.7985	-5.0165	-.7858	-2.5026	-2.5003	-2.4994	-.1218
17	-.6348	-.7218	-1.5861	-.1043	-1.1207	-3.5778	-4.5701	-7.1218
18	-.2745	-.4056	-.6871	.1373	.1636	.1789	-1.0231	-2.1919
19	-.7614	-.6015	-1.3835	.0024	-.7394	-2.3520	-1.5600	-4.9879
20	.1110	.1668	-.0294	.1661	.8452	-1.3712	-1.0501	-1.9251
	17	18	19	20				
1	-.3373	-.2018	-.4951	-.0240				
2	-.4181	-.3299	-.3398	.0295				
3	-.1244	-.0407	-.0943	-.0072				
4	-1.4268	-.0486	-1.1292	-.7465				
5	-1.7298	-.5393	-.5395	-.5397				
6	-3.6955	-7.3045	-2.5483	-2.5475				
7	-1.4350	-3.6587	-6.9222	-4.0821				
8	-3.7541	-3.1121	-2.0000	-7.2221				
9	-.6348	-.2745	-.7614	.1110				
10	-.7218	-.4056	-.6015	.1668				
11	-1.5861	-.6871	-1.3835	-.0294				
12	-.1043	.1373	.0024	.1661				
13	-1.1207	.1636	-.7394	.8452				
14	-3.5778	.1789	-2.3520	-1.3712				
15	-4.5701	-1.0231	-1.5600	-1.0501				
16	-7.1218	-2.1919	-4.9879	-1.9251				
17	-.1225	-2.5010	-2.5010	-2.5017				
18	-2.5010	-.1188	-2.4997	-2.4999				
19	-2.5010	-2.4997	-.1215	-2.5001				
20	-2.5017	-2.4999	-2.5001	-.1182				

EHT den gelen özdegerler

HAO dan gelen özdegerler

Ei-alfa

39.6313000	39.6313011	53.4114256
28.7762000	28.7761979	42.5563256
18.7815000	18.7814985	32.5616256
6.77970000	6.77969986	20.5598256
5.06080000	5.06080087	18.8409256
5.01350000	5.01350013	18.7936256
3.72950000	3.72950064	17.5096256
1.88960000	1.88959928	15.6697256
1.37640000	1.37640124	15.1565256
1.36570000	1.36570040	15.1458256
-13.8047000	-13.8047002	-.245743820E-01
-14.1692000	-14.1692002	-.389074382
-14.5170000	-14.5169995	-.736874382
-15.2804000	-15.2804005	-1.50027438
-15.3677000	-15.3677013	-1.58757438
-15.8932000	-15.8931993	-2.11307438
-16.3432000	-16.3432000	-2.56307438

-20.3823000
-23.6994000
-27.3730000

-20.3822982
-23.6994000
-27.3729996

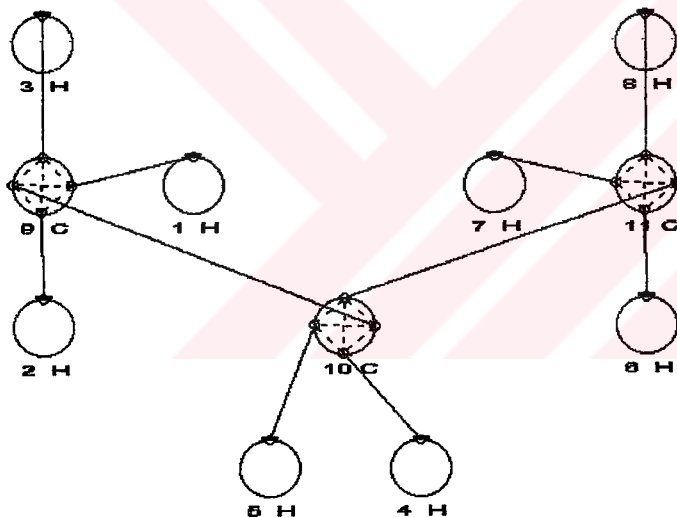
-6.60217438
-9.91927438
-13.5928744

EHTD (kulakli)

26.2579888
25.0015483
23.8423267
22.5216763
21.9899016
20.4154376
19.5157523
17.5105775
14.9190469
10.8264031
-3.59049834
-3.82596714
-4.01274570
-4.33366184
-4.51530152
-4.58614656
-4.91703120
-7.30475436
-8.75526291
-9.62352487

EHTD (kulaksiz)

26.2467720
25.0678363
23.8186925
22.5220970
21.9194203
20.3669118
19.4541606
17.4322306
14.9291066
10.9546165
-3.62662164
-3.83678925
-4.01520232
-4.36611279
-4.54603361
-4.62501505
-4.96344633
-7.21878936
-8.61395829
-9.42876295



C4H10.LOG

HyperChem log start -- Mon Aug 17 15:28:37 1998.

Geometry optimization, MolecularMechanics, molecule = AC4H10.HIN.

mmplus

PolakRibiere optimizer

Energy=2.171378 Gradient=0.000079 Converged=NO (99 cycles 225 points).

Energy=2.171378 Gradient=0.000079 Converged=YES (99 cycles 225 points).

Bond=0.156882 Angle=0.290983 Dihedral=0.00732898 Vdw=1.66381 Stretch-
bend=0.0523747 Electrostatic=0.

Single Point, SemiEmpirical, molecule = AC4H10.HIN.
 ExtendedHuckel
 Extended-Huckel Calculation:
 Singlet State Calculation
 Number of Electrons = 26
 Starting Extended-Huckel calculation with 26 orbitals
 Charge on the System = 0
 Total Orbitals = 26
 Number of Double Occupied Levels = 13
 Unweighted Huckel Constant = 1.7500000
 d Orbitals on Si...Cl If Any Not Included
 Energy=-10595.473717

----- RESULTS -----

Sum of One-Electron Energies = -10595.4737175 (kcal/mol)
 Sum of One-Electron Energies = -16.885491284 (a.u.)

EIGENVALUES (eV)

-27.854282	-25.199003	-21.914488	-19.973045	-16.499882
-15.734693	-15.698160	-15.507901	-14.829008	-14.677530
-14.436677	-13.990318	-13.412120	0.907124	1.146295
1.650296	2.780337	3.882937	4.316981	5.046319
5.811096	7.398809	17.711973	24.092394	33.861618
41.744484				

ATOMIC ORBITAL ELECTRON POPULATIONS

1.230139	0.944315	0.946070	0.943212	1.205967
0.932996	0.933645	0.929064	1.205967	0.932996
0.933645	0.929064	1.230139	0.944316	0.946070
0.943212	0.982971	0.982971	0.984594	0.992028
0.992028	0.992028	0.992028	0.982971	0.982971
0.984594				

NET CHARGES AND COORDINATES

Atom	Z	Charge	Coordinates (a.u.)		
			x	y	z
1	6	-0.063736	-5.57084	0.10138	0.01188
2	6	-0.001673	-3.31730	1.92558	-0.03136
3	6	-0.001673	-0.78195	0.51256	0.05299
4	6	-0.063736	1.47159	2.33676	0.00975
5	1	0.017029	-5.56640	-1.07035	1.76171
6	1	0.017029	-5.52596	-1.20099	-1.64241
7	1	0.015406	-7.39546	1.15245	-0.05013
8	1	0.007972	-3.45085	3.23463	1.61747
9	1	0.007972	-3.41051	3.10431	-1.77835
10	1	0.007972	-0.64840	-0.79649	-1.59584
11	1	0.007972	-0.68874	-0.66617	1.79998
12	1	0.017029	1.42671	3.63913	1.66405
13	1	0.017029	1.46715	3.50849	-1.74008
14	1	0.015406	3.29621	1.28568	0.07176

Alpha: Orbital Index = 1 Orbital Energy = -27.854282 (eV)
 HyperChem log stop -- Mon Aug 17 15:29:32 1998.

C4H10.INP

c4h10

10	4	0	0	0	0000	1.75	
		-2.950192					.933706
		-2.928759					-.870477
		-3.919594					-.026569
		-1.828950				1.714354	.857259
		-1.807570				1.645284	-.942525
		-.343652				-.422140	-.845795
		-.365032				-.353070	.953989
		.756156				1.928739	.881946
		.777589				1.859500	-.922242
		1.746991				.681410	.038033
		-2.952545				.053731	.006296
		-1.758169				1.020557	-.016621
		-.414433				.271657	.028085
		.779943				1.238483	.005167

C C C C

C4H10.OUT

c4h10

Extended Hueckel calculation

input geometry

Atom	x	y	z	n	S exp	coul	n	P exp	coul
H 1	-2.950	-.567	.934	1	1.300	-13.600			
H 2	-2.929	-.637	-.870	1	1.300	-13.600			
H 3	-3.920	.611	-.027	1	1.300	-13.600			
H 4	-1.829	1.714	.857	1	1.300	-13.600			
H 5	-1.808	1.645	-.943	1	1.300	-13.600			
H 6	-.344	-.422	-.846	1	1.300	-13.600			
H 7	-.365	-.353	.954	1	1.300	-13.600			
H 8	.756	1.929	.882	1	1.300	-13.600			
H 9	.778	1.860	-.922	1	1.300	-13.600			
H 10	1.747	.681	.038	1	1.300	-13.600			
C 11	-2.953	.054	.006	2	1.625	-21.400	2	1.625	-11.400
C 12	-1.758	1.021	-.017	2	1.625	-21.400	2	1.625	-11.400
C 13	-.414	.272	.028	2	1.625	-21.400	2	1.625	-11.400
C 14	.780	1.238	.005	2	1.625	-21.400	2	1.625	-11.400

Charge = 0 iprint = 0 Hueckel constant = 1.750

Distance matrix

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.0000	1.8056	1.8027	2.5434	3.1179	3.1594	2.5941	4.4688
2	1.8056	.0000	1.8027	3.1179	2.5434	2.5941	3.1594	4.8198
3	1.8027	1.8027	.0000	2.5238	2.5238	3.8112	3.8112	4.9422
4	2.5434	3.1179	2.5238	.0000	1.8012	3.1098	2.5351	2.5941
5	3.1179	2.5434	2.5238	1.8012	.0000	2.5351	3.1098	3.1594
6	3.1594	2.5941	3.8112	3.1098	2.5351	.0000	1.8012	3.1179
7	2.5941	3.1594	3.8112	2.5351	3.1098	1.8012	.0000	2.5434
8	4.4688	4.8198	4.9422	2.5941	3.1594	3.1179	2.5434	.0000
9	4.8198	4.4688	4.9422	3.1594	2.5941	2.5434	3.1179	1.8056
10	4.9422	4.9422	5.6674	3.8112	3.8112	2.5238	2.5238	1.8027
11	1.1161	1.1161	1.1165	2.1781	2.1781	2.7855	2.7855	4.2470
12	2.2012	2.2012	2.1999	1.1180	1.1180	2.1840	2.1840	2.8203
13	2.8203	2.8203	3.5220	2.1840	2.1840	1.1180	1.1180	2.2012
14	4.2470	4.2470	4.7414	2.7855	2.7855	2.1781	2.1781	1.1161
	9	10	11	12	13	14		
1	4.8198	4.9422	1.1161	2.2012	2.8203	4.2470		
2	4.4688	4.9422	1.1161	2.2012	2.8203	4.2470		
3	4.9422	5.6674	1.1165	2.1999	3.5220	4.7414		
4	3.1594	3.8112	2.1781	1.1180	2.1840	2.7855		
5	2.5941	3.8112	2.1781	1.1180	2.1840	2.7855		
6	2.5434	2.5238	2.7855	2.1840	1.1180	2.1781		
7	3.1179	2.5238	2.7855	2.1840	1.1180	2.1781		
8	1.8056	1.8027	4.2470	2.8203	2.2012	1.1161		
9	.0000	1.8027	4.2470	2.8203	2.2012	1.1161		
10	1.8027	.0000	4.7414	3.5220	2.1999	1.1165		
11	4.2470	4.7414	.0000	1.5368	2.5475	3.9160		
12	2.8203	3.5220	1.5368	.0000	1.5390	2.5475		
13	2.2012	2.1999	2.5475	1.5390	.0000	1.5368		
14	1.1161	1.1165	3.9160	2.5475	1.5368	.0000		

Overlap matrix

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1.0000	.1421	.1428	.0392	.0133	.0123	.0357	.0009
2	.1421	1.0000	.1428	.0133	.0392	.0357	.0123	.0004
3	.1428	.1428	1.0000	.0406	.0406	.0034	.0034	.0003
4	.0392	.0133	.0406	1.0000	.1431	.0135	.0398	.0357
5	.0133	.0392	.0406	.1431	1.0000	.0398	.0135	.0123
6	.0123	.0357	.0034	.0135	.0398	1.0000	.1431	.0133
7	.0357	.0123	.0034	.0398	.0135	.1431	1.0000	.0392
8	.0009	.0004	.0003	.0357	.0123	.0133	.0392	1.0000
9	.0004	.0009	.0003	.0123	.0357	.0392	.0133	.1421
10	.0003	.0003	.0001	.0034	.0034	.0406	.0406	.1428
11	.4778	.4778	.4776	.0998	.0998	.0333	.0333	.0017
12	.0010	.0103	-.4176	.0659	.0672	.0421	.0418	.0022
13	-.2684	-.2983	.2406	.0974	.0934	-.0077	-.0066	.0011
14	.4008	-.3789	-.0142	.0499	-.0557	-.0138	.0153	.0005
15	.0959	.0959	.0961	.4767	.4767	.0988	.0988	.0312
16	-.0667	-.0655	-.1213	-.0305	-.0213	.0820	.0808	.0376
17	-.0888	-.0927	-.0230	.2989	.2691	-.0836	-.0796	.0136

18	.0532	-.0478	-.0006	.3765	-.3989	-.0481	.0563	.0134
19	.0312	.0312	.0078	.0988	.0988	.4767	.4767	.0959
20	-.0379	-.0376	-.0109	-.0820	-.0808	.0305	.0213	.0655
21	-.0126	-.0136	.0011	.0836	.0796	-.2989	-.2691	.0927
22	.0136	-.0134	-.0002	.0481	-.0563	-.3765	.3989	.0478
23	.0017	.0017	.0006	.0333	.0333	.0998	.0998	.4778
24	-.0022	-.0022	-.0009	-.0421	-.0418	-.0659	-.0672	-.0103
25	-.0011	-.0011	-.0001	.0077	.0066	-.0974	-.0934	.2983
26	.0005	-.0005	.0000	.0138	-.0153	-.0499	.0557	.3789
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	.0004	.0003	.4778	.0010	-.2684	.4008	.0959	-.0667
2	.0009	.0003	.4778	.0103	-.2983	-.3789	.0959	-.0655
3	.0003	.0001	.4776	-.4176	.2406	-.0142	.0961	-.1213
4	.0123	.0034	.0998	.0659	.0974	.0499	.4767	-.0305
5	.0357	.0034	.0998	.0672	.0934	-.0557	.4767	-.0213
6	.0392	.0406	.0333	.0421	-.0077	-.0138	.0988	.0820
7	.0133	.0406	.0333	.0418	-.0066	.0153	.0988	.0808
8	.1421	.1428	.0017	.0022	.0011	.0005	.0312	.0376
9	1.0000	.1428	.0017	.0022	.0011	-.0005	.0312	.0379
10	.1428	1.0000	.0006	.0009	.0001	.0000	.0078	.0109
11	.0017	.0006	1.0000	.0000	.0000	.0000	.3419	-.2846
12	.0022	.0009	.0000	1.0000	.0000	.0000	.2846	-.1224
13	.0011	.0001	.0000	.0000	1.0000	.0000	.2304	-.2554
14	-.0005	.0000	.0000	.0000	.0000	1.0000	-.0055	.0061
15	.0312	.0078	.3419	.2846	.2304	-.0055	1.0000	.0000
16	.0379	.0109	-.2846	-.1224	-.2554	.0061	.0000	1.0000
17	.0126	-.0011	-.2304	-.2554	-.0137	.0049	.0000	.0000
18	-.0136	.0002	.0055	.0061	.0049	.1929	.0000	.0000
19	.0959	.0961	.0691	.0912	.0078	.0008	.3409	.3191
20	.0667	.1213	-.0912	-.1161	-.0122	-.0012	-.3191	-.2052
21	.0888	.0230	-.0078	-.0122	.0251	-.0001	.1778	.2215
22	-.0532	.0006	-.0008	-.0012	-.0001	.0261	-.0106	-.0132
23	.4778	.4776	.0044	.0062	.0020	.0000	.0691	.0912
24	-.0010	.4176	-.0062	-.0085	-.0031	.0000	-.0912	-.1161
25	.2684	-.2406	-.0020	-.0031	.0001	.0000	-.0078	-.0122
26	-.4008	.0142	.0000	.0000	.0000	.0011	-.0008	-.0012
	17	18	19	20	21	22	23	24
1	-.0888	.0532	.0312	-.0379	-.0126	.0136	.0017	-.0022
2	-.0927	-.0478	.0312	-.0376	-.0136	-.0134	.0017	-.0022
3	-.0230	-.0006	.0078	-.0109	.0011	-.0002	.0006	-.0009
4	.2989	.3765	.0988	-.0820	.0836	.0481	.0333	-.0421
5	.2691	-.3989	.0988	-.0808	.0796	-.0563	.0333	-.0418
6	-.0836	-.0481	.4767	.0305	-.2989	-.3765	.0998	-.0659
7	-.0796	.0563	.4767	.0213	-.2691	.3989	.0998	-.0672
8	.0136	.0134	.0959	.0655	.0927	.0478	.4778	-.0103
9	.0126	-.0136	.0959	.0667	.0888	-.0532	.4778	-.0010
10	-.0011	.0002	.0961	.1213	.0230	.0006	.4776	.4176
11	-.2304	.0055	.0691	-.0912	-.0078	-.0008	.0044	-.0062
12	-.2554	.0061	.0912	-.1161	-.0122	-.0012	.0062	-.0085
13	-.0137	.0049	.0078	-.0122	.0251	-.0001	.0020	-.0031
14	.0049	.1929	.0008	-.0012	-.0001	.0261	.0000	.0000
15	.0000	.0000	.3409	-.3191	.1778	-.0106	.0691	-.0912
16	.0000	.0000	.3191	-.2052	.2215	-.0132	.0912	-.1161
17	1.0000	.0000	-.1778	.2215	.0688	.0074	.0078	-.0122
18	.0000	1.0000	.0106	-.0132	.0074	.1919	.0008	-.0012
19	-.1778	.0106	1.0000	.0000	.0000	.0000	.3419	-.2846
20	.2215	-.0132	.0000	1.0000	.0000	.0000	.2846	-.1224
21	.0688	.0074	.0000	.0000	1.0000	.0000	.2304	-.2554
22	.0074	.1919	.0000	.0000	.0000	1.0000	-.0055	.0061
23	.0078	.0008	.3419	.2846	.2304	-.0055	1.0000	.0000
24	-.0122	-.0012	-.2846	-.1224	-.2554	.0061	.0000	1.0000
25	.0251	-.0001	-.2304	-.2554	-.0137	.0049	.0000	.0000
26	-.0001	.0261	.0055	.0061	.0049	.1929	.0000	.0000
	25	26						
1	-.0011	.0005						
2	-.0011	-.0005						
3	-.0001	.0000						
4	.0077	.0138						
5	.0066	-.0153						
6	-.0974	-.0499						
7	-.0934	.0557						
8	.2983	.3789						
9	.2684	-.4008						
10	-.2406	.0142						
11	-.0020	.0000						

12	-.0031	.0000
13	.0001	.0000
14	.0000	.0011
15	-.0078	-.0008
16	-.0122	-.0012
17	.0251	-.0001
18	-.0001	.0261
19	-.2304	.0055
20	-.2554	.0061
21	-.0137	.0049
22	.0049	.1929
23	.0000	.0000
24	.0000	.0000
25	1.0000	.0000
26	.0000	1.0000

starting main calculations

Results of calculation c4h10

Energy levels (eV)					
E(1) =	41.26744	.0000	E(14) =	-13.41677	2.0000
E(2) =	33.49278	.0000	E(15) =	-13.99423	2.0000
E(3) =	23.84076	.0000	E(16) =	-14.44123	2.0000
E(4) =	17.52844	.0000	E(17) =	-14.67789	2.0000
E(5) =	7.29696	.0000	E(18) =	-14.83195	2.0000
E(6) =	5.71966	.0000	E(19) =	-15.50698	2.0000
E(7) =	4.96335	.0000	E(20) =	-15.69656	2.0000
E(8) =	4.23211	.0000	E(21) =	-15.73234	2.0000
E(9) =	3.80698	.0000	E(22) =	-16.49475	2.0000
E(10) =	2.71168	.0000	E(23) =	-19.97435	2.0000
E(11) =	1.57967	.0000	E(24) =	-21.91638	2.0000
E(12) =	1.08736	.0000	E(25) =	-25.19420	2.0000
E(13) =	-.84660	.0000	E(26) =	-27.84286	2.0000

Sum of one-electron energies = -459.44097956 eV.

Wave Functions

MO's in columns, AO's in rows

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	-.2348	.4029	.4521	.3004	.2935	-.2625	-.4955	.2102
2	-.2348	.4029	.4521	.3004	-.2936	-.2625	.4956	.2101
3	-.2271	.4243	.4515	.2556	.0000	.5206	.0000	.2301
4	.3768	-.2403	.2797	.5234	-.4797	-.2548	.3197	-.2665
5	.3768	-.2403	.2797	.5235	.4797	-.2549	-.3197	-.2665
6	-.3768	-.2403	-.2797	.5235	-.4797	.2549	-.3198	-.2665
7	-.3768	-.2403	-.2797	.5235	.4797	.2549	.3197	-.2665
8	.2348	.4029	-.4521	.3004	-.2935	.2625	-.4955	.2102
9	.2348	.4029	-.4521	.3004	.2935	.2625	.4956	.2102
10	.2270	.4243	-.4515	.2556	.0000	-.5206	.0000	.2301
11	.7437	-1.0500	-.8259	-.3729	.0000	-.0019	.0000	.0091
12	.2113	-.0709	.2240	.2502	.0059	.4289	-.0085	.5527
13	.1308	-.1156	.1643	.3013	-.0192	-.5369	.0276	.4143
14	-.0025	.0036	-.0036	-.0086	-.4995	.0257	.7167	-.0094
15	-1.1876	.6216	-.5298	-.6761	.0000	-.0135	.0000	-.0685
16	-.1067	-.4001	-.3896	.1427	-.0097	-.4445	.0055	.4198
17	.1969	-.1004	-.0960	-.4460	.0315	.5111	-.0177	.6704
18	-.0088	-.0009	-.0009	.0188	.8195	-.0249	-.4614	-.0207
19	1.1876	.6216	.5298	-.6761	.0000	.0135	.0000	-.0685
20	-.1067	.4001	-.3896	-.1427	.0097	-.4445	.0055	-.4197
21	.1969	.1005	-.0960	.4460	-.0314	.5111	-.0177	-.6704
22	-.0088	.0009	-.0009	-.0188	-.8195	-.0249	-.4614	.0208
23	-.7437	-1.0500	.8259	-.3729	.0000	.0019	.0000	.0091
24	.2113	.0709	.2239	-.2502	-.0059	.4289	-.0085	-.5527
25	.1308	.1156	.1643	-.3013	.0192	-.5369	.0275	-.4143
26	-.0025	-.0036	-.0036	.0086	.4995	.0257	.7167	.0093
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	.3413	.5166	.1123	.3245	-.2676	.0069	-.1222	.1714
2	.3412	-.5166	.1123	-.3244	-.2677	.0069	-.1222	-.1714
3	-.6794	.0000	.3294	-.0001	.3635	.2054	.1157	.0000
4	-.0510	.3190	-.0730	.5112	.3541	.0097	-.2189	-.3256
5	-.0509	-.3189	-.0730	-.5113	.3539	.0097	-.2189	.3256
6	-.0509	.3189	.0730	-.5112	-.3541	.0097	-.2189	-.3256
7	-.0509	-.3189	.0730	.5113	-.3539	.0097	-.2189	.3256
8	.3413	-.5166	-.1123	.3244	.2677	.0069	-.1222	-.1714
9	.3412	.5166	-.1123	-.3245	.2676	.0069	-.1222	.1714
10	-.6794	.0000	-.3294	.0001	-.3635	.2054	.1157	.0000
11	-.0050	.0000	.0689	.0000	-.0295	-.0678	.0411	.0000

12	-.5145	.0076	.6313	.0045	.0650	-.3361	.0889	-.0019
13	.6194	-.0246	.3275	-.0145	-.4697	-.1418	.2387	.0063
14	-.0299	-.6407	-.0051	-.3787	.0187	.0014	-.0081	.1632
15	.0544	.0000	.0104	.0000	.0518	.0192	.0708	.0000
16	.0762	.0046	.7508	.0068	.2767	.4667	.1288	.0040
17	-.0182	-.0149	.1650	-.0220	-.6033	.0223	-.4144	-.0129
18	.0016	-.3873	.0026	-.5767	.0263	.0047	.0174	-.3365
19	.0544	.0000	-.0104	.0000	-.0518	.0192	.0708	.0000
20	-.0762	-.0046	.7508	.0068	.2767	-.4667	-.1288	-.0040
21	.0182	.0149	.1650	-.0220	-.6033	-.0223	.4144	.0129
22	-.0016	.3873	.0026	-.5767	.0263	-.0047	-.0174	.3365
23	-.0050	.0000	-.0689	.0000	.0295	-.0678	.0411	.0000
24	.5145	-.0076	.6313	.0045	.0650	.3361	-.0889	.0019
25	-.6194	.0246	.3275	-.0145	-.4697	.1418	-.2387	-.0063
26	.0299	.6407	-.0051	-.3787	.0187	-.0014	.0081	-.1632
	17	18	19	20	21	22	23	24
1	.1775	.2784	.1097	.2664	-.1639	-.1559	-.1110	.1489
2	.1776	-.2784	.1097	-.2664	-.1640	.1559	-.1110	.1489
3	-.0710	.0000	-.3758	.0000	.3010	.0000	-.0827	.1547
4	.1234	-.1882	-.0028	.1310	.0773	-.2225	.2195	-.1065
5	.1234	.1882	-.0028	-.1310	.0773	.2225	.2195	-.1065
6	-.1234	.1882	.0028	.1310	.0773	.2225	-.2195	-.1065
7	-.1234	-.1882	.0028	-.1310	.0773	-.2225	-.2195	-.1065
8	-.1776	.2784	-.1097	-.2664	-.1640	-.1559	.1110	.1489
9	-.1775	-.2784	-.1097	.2664	-.1640	.1559	.1110	.1489
10	.0710	.0000	.3758	.0000	.3010	.0000	.0827	.1547
11	-.0271	.0000	.0022	.0000	-.0035	.0000	-.1509	.3503
12	-.1459	-.0038	.3372	-.0041	-.1981	.0024	.0753	-.0621
13	-.3234	.0123	-.1701	.0131	-.2781	-.0078	.0939	-.0435
14	.0107	.3204	.0105	.3416	-.0130	-.2044	-.0027	-.0009
15	-.0391	.0000	.0669	.0000	-.0072	.0000	.3271	-.2582
16	.2055	.0027	-.0770	-.0021	-.1509	.0035	-.0514	-.0962
17	.2795	-.0087	-.1159	.0068	.1362	-.0114	.1369	-.0279
18	-.0083	-.2270	.0035	.1774	-.0070	-.2968	-.0059	-.0001
19	.0391	.0000	-.0669	.0000	-.0072	.0000	-.3271	-.2582
20	.2055	.0027	-.0770	.0021	.1509	.0035	-.0514	.0962
21	.2795	-.0087	-.1159	-.0068	-.1362	-.0114	.1369	.0279
22	-.0083	-.2270	.0035	-.1774	.0070	-.2968	-.0059	.0001
23	.0271	.0000	-.0022	.0000	-.0035	.0000	.1509	.3503
24	-.1459	-.0038	.3372	.0041	-.1981	.0024	.0753	.0621
25	-.3234	.0123	-.1701	-.0131	-.2781	-.0078	.0939	.0435
26	.0107	.3204	.0105	-.3416	.0130	-.2044	-.0027	-.0009
	25	26						
1	.0979	-.0325						
2	.0979	-.0325						
3	.0999	-.0311						
4	.0522	-.0493						
5	.0522	-.0493						
6	-.0522	-.0493						
7	-.0522	-.0493						
8	-.0979	-.0325						
9	-.0979	-.0325						
10	-.0999	-.0311						
11	.4268	-.2777						
12	.0141	-.0074						
13	.0129	-.0060						
14	-.0003	.0001						
15	.2288	-.4080						
16	-.0486	-.0031						
17	-.0134	.0112						
18	-.0001	-.0005						
19	-.2288	-.4080						
20	-.0486	.0031						
21	-.0134	-.0112						
22	-.0001	.0005						
23	-.4268	-.2777						
24	.0141	.0074						
25	.0129	.0060						
26	-.0003	-.0001						

Reduced overlap population matrix, atom by atom

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.6653	-.0407	-.0416	-.0057	.0022	-.0003	.0001	.0000
2	-.0407	.6653	-.0416	.0022	-.0057	.0001	-.0003	.0000
3	-.0416	-.0416	.6683	-.0058	-.0058	.0001	.0001	.0000

4	-.0057	.0022	-.0058	.6839	-.0425	.0022	-.0058	.0001
5	.0022	-.0057	-.0058	-.0425	.6839	-.0058	.0022	-.0003
6	-.0003	.0001	.0001	.0022	-.0058	.6839	-.0425	.0022
7	.0001	-.0003	.0001	-.0058	.0022	-.0425	.6839	-.0057
8	.0000	.0000	.0000	.0001	-.0003	.0022	-.0057	.6653
9	.0000	.0000	.0000	-.0003	.0001	-.0057	.0022	-.0407
10	.0000	.0000	.0000	.0001	.0001	-.0058	-.0058	-.0416
11	.7756	.7756	.7744	-.0500	-.0500	-.0076	-.0076	.0001
12	-.0465	-.0465	-.0484	.7784	.7784	-.0485	-.0485	-.0072
13	-.0072	-.0072	.0020	-.0485	-.0485	.7784	.7784	-.0465
14	.0001	.0001	.0000	-.0076	-.0076	-.0500	-.0500	.7756
	9	10	11	12	13	14		
1	.0000	.0000	.7756	-.0465	-.0072	.0001		
2	.0000	.0000	.7756	-.0465	-.0072	.0001		
3	.0000	.0000	.7744	-.0484	.0020	.0000		
4	-.0003	.0001	-.0500	.7784	-.0485	-.0076		
5	.0001	.0001	-.0500	.7784	-.0485	-.0076		
6	-.0057	-.0058	-.0076	-.0485	.7784	-.0500		
7	.0022	-.0058	-.0076	-.0485	.7784	-.0500		
8	-.0407	-.0416	.0001	-.0072	-.0465	.7756		
9	.6653	-.0416	.0001	-.0072	-.0465	.7756		
10	-.0416	.6683	.0000	.0020	-.0484	.7744		
11	.0001	.0000	2.6084	.7558	-.0595	.0018		
12	-.0072	.0020	.7558	2.6220	.7562	-.0595		
13	-.0465	-.0484	-.0595	.7562	2.6220	.7558		
14	.7756	.7744	.0018	-.0595	.7558	2.6084		

Reduced charge matrix, MO's in columns, atoms in rows

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.0316	.0999	.1430	.0693	.0505	.0424	.1575	.0275
2	.0316	.0999	.1430	.0693	.0506	.0423	.1576	.0275
3	.0287	.1097	.1443	.0524	.0000	.1700	.0000	.0327
4	.0784	.0340	.0546	.2097	.1358	.0379	.0659	.0374
5	.0784	.0340	.0546	.2097	.1358	.0380	.0659	.0374
6	.0784	.0340	.0546	.2097	.1358	.0379	.0659	.0374
7	.0784	.0340	.0546	.2097	.1358	.0379	.0659	.0374
8	.0316	.0999	.1430	.0693	.0506	.0423	.1575	.0275
9	.0316	.0999	.1430	.0693	.0505	.0423	.1575	.0275
10	.0287	.1097	.1443	.0524	.0000	.1700	.0000	.0327
11	.2264	.3812	.2433	.1444	.1704	.3476	.3912	.3730
12	.5251	.2412	.2171	.2451	.4570	.3218	.1619	.4645
13	.5251	.2412	.2171	.2451	.4570	.3218	.1619	.4645
14	.2264	.3812	.2433	.1445	.1704	.3475	.3912	.3730
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	.0767	.1855	.0049	.0770	.0507	.0004	.0378	.0676
2	.0767	.1855	.0049	.0770	.0507	.0004	.0378	.0676
3	.3084	.0000	.0668	.0000	.1020	.0952	.0242	.0000
4	.0027	.0711	.0043	.1921	.0839	.0001	.1177	.2454
5	.0027	.0711	.0043	.1922	.0838	.0001	.1177	.2454
6	.0027	.0711	.0043	.1921	.0839	.0001	.1177	.2454
7	.0027	.0711	.0043	.1922	.0838	.0001	.1177	.2454
8	.0767	.1855	.0049	.0770	.0507	.0004	.0378	.0676
9	.0767	.1855	.0049	.0770	.0507	.0004	.0378	.0676
10	.3084	.0000	.0668	.0000	.1020	.0952	.0242	.0000
11	.5291	.3567	.4162	.1391	.2186	.3504	.1657	.0704
12	.0036	.1300	.4985	.3226	.4104	.5533	.4991	.3036
13	.0036	.1300	.4985	.3227	.4104	.5533	.4991	.3036
14	.5291	.3567	.4162	.1391	.2186	.3504	.1657	.0704
	17	18	19	20	21	22	23	24
1	.0777	.1895	.0322	.1963	.0740	.0760	.0496	.0993
2	.0777	.1895	.0322	.1963	.0740	.0760	.0496	.0993
3	.0111	.0000	.3812	.0000	.2538	.0000	.0242	.1099
4	.0394	.0869	.0002	.0477	.0165	.1551	.1828	.0488
5	.0394	.0869	.0002	.0477	.0165	.1551	.1828	.0488
6	.0394	.0869	.0002	.0477	.0165	.1551	.1828	.0488
7	.0394	.0869	.0002	.0477	.0165	.1551	.1828	.0488
8	.0777	.1895	.0322	.1963	.0740	.0760	.0496	.0993
9	.0777	.1895	.0322	.1963	.0740	.0760	.0496	.0993
10	.0111	.0000	.3812	.0000	.2538	.0000	.0242	.1099
11	.3793	.2971	.4735	.4025	.4075	.1725	.1323	.3631
12	.3755	.1502	.0805	.1094	.1575	.3653	.3787	.2308
13	.3755	.1502	.0805	.1094	.1575	.3653	.3787	.2308
14	.3793	.2971	.4735	.4025	.4075	.1725	.1323	.3631

	25	26
1	.0679	.0150
2	.0679	.0150
3	.0718	.0136
4	.0186	.0330
5	.0186	.0330
6	.0186	.0330
7	.0186	.0330
8	.0679	.0150
9	.0679	.0150
10	.0718	.0136
11	.5628	.2856
12	.1924	.6048
13	.1925	.6048
14	.5628	.2856

Atom	Net chg.	Atomic orbital occupation for given MO occupation								
		S	Px	Py	Pz	Dx2-y2	Dz2	Dxy	Dxz	Dyz
H 1	.017	.983								
H 2	.017	.983								
H 3	.015	.985								
H 4	.008	.992								
H 5	.008	.992								
H 6	.008	.992								
H 7	.008	.992								
H 8	.017	.983								
H 9	.017	.983								
H 10	.015	.985								
C 11	-.063	1.231	.944	.945	.943					
C 12	-.001	1.207	.933	.933	.928					
C 13	-.001	1.207	.933	.933	.928					
C 14	-.063	1.231	.944	.945	.943					

Reduced energy matrix, atom by atom

	1	2	3	4	5	6
1	-9.0480	.9679	.9912	.1357	-.0517	.0066
2	.9679	-9.0480	.9912	-.0517	.1357	-.0025
3	.9912	.9912	-9.0891	.1379	.1379	-.0018
4	.1357	-.0517	.1379	-9.3017	1.0106	-.0513
5	-.0517	.1357	.1379	1.0106	-9.3017	.1390
6	.0066	-.0025	-.0018	-.0513	.1390	-9.3017
7	-.0025	.0066	-.0018	.1390	-.0513	1.0106
8	-.0001	.0001	.0001	-.0025	.0066	-.0517
9	.0001	-.0001	.0001	.0066	-.0025	.1357
10	.0001	.0001	-.0001	-.0018	-.0018	.1379
11	-18.8101	-18.8101	-18.7590	1.2603	1.2603	.1893
12	1.1707	1.1707	1.2068	-18.8721	-18.8721	1.2240
13	.1785	.1786	-.0458	1.2240	1.2240	-18.8721
14	-.0021	-.0021	.0008	.1893	.1893	1.2603

	7	8	9	10	11	12
1	-.0025	-.0001	.0001	.0001	-18.8101	1.1707
2	.0066	.0001	-.0001	.0001	-18.8101	1.1707
3	-.0018	.0001	.0001	-.0001	-18.7590	1.2068
4	.1390	-.0025	.0066	-.0018	1.2603	-18.8721
5	-.0513	.0066	-.0025	-.0018	1.2603	-18.8721
6	1.0106	-.0517	.1357	.1379	.1893	1.2240
7	-9.3017	.1357	-.0517	.1379	.1893	1.2240
8	.1357	-9.0480	.9679	.9912	-.0021	.1785
9	-.0517	.9679	-9.0480	.9912	-.0021	.1785
10	.1379	.9912	.9912	-9.0892	.0008	-.0458
11	.1893	-.0021	-.0021	.0008	-37.9706	-19.4038
12	1.2240	.1785	.1785	-.0458	-19.4038	-37.9703
13	-18.8721	1.1707	1.1707	1.2068	1.5521	-19.3930
14	1.2603	-18.8101	-18.8101	-18.7589	-.0393	1.5521

	13	14
1	.1785	-.0021
2	.1786	-.0021
3	-.0458	.0008
4	1.2240	.1893
5	1.2240	.1893
6	-18.8721	1.2603
7	-18.8721	1.2603

8	1.1707	-18.8101
9	1.1707	-18.8101
10	1.2068	-18.7589
11	1.5521	-.0393
12	-19.3930	1.5521
13	-37.9703	-19.4038
14	-19.4038	-37.9706

C4H10.HAO

c4h10

Atom sembolleri,sira numaralari, x,y ve z koordinatlari

H	1	-2.9500	-.5670	.9340
H	2	-2.9290	-.6370	-.8700
H	3	-3.9200	.6110	-.0270
H	4	-1.8290	1.7140	.8570
H	5	-1.8080	1.6450	-.9430
H	6	-.3440	-.4220	-.8460
H	7	-.3650	-.3530	.9540
H	8	.7560	1.9290	.8820
H	9	.7780	1.8600	-.9220
H	10	1.7470	.6810	.0380
C	11	-2.9530	.0540	.0060
C	12	-1.7580	1.0210	-.0170
C	13	-.4140	.2720	.0280
C	14	.7800	1.2380	.0050

11 atomu için dörtyüzlü melezleme dizeyi
.5000 .8660 .0000 .0000
.5000 -.2887 .8165 .0000
.5000 -.2887 -.4082 .7071
.5000 -.2887 -.4082 -.7071

11 atomu için döndürülmüş melezleme dizeyi
.5000 .0023 -.4816 .7197
.5000 .0184 -.5178 -.6939
.5000 .6966 .5146 -.0053
.5000 -.7173 .4849 -.0206

12 atomu için dörtyüzlü melezleme dizeyi
.5000 .8660 .0000 .0000
.5000 -.2887 .8165 .0000
.5000 -.2887 -.4082 .7071
.5000 -.2887 -.4082 -.7071

12 atomu için döndürülmüş melezleme dizeyi
.5000 -.8509 -.1614 -.0039
.5000 .1861 .5522 .6406
.5000 .2312 .3489 -.7582
.5000 .4336 -.7398 .1215

13 atomu için dörtyüzlü melezleme dizeyi
.5000 .8660 .0000 .0000
.5000 -.2887 .8165 .0000
.5000 -.2887 -.4082 .7071
.5000 -.2887 -.4082 -.7071

13 atomu için döndürülmüş melezleme dizeyi
.5000 -.5527 .5444 -.3850
.5000 .1923 -.6474 -.5421
.5000 -.3642 -.3222 .7167
.5000 .7245 .4252 .2104

14 atomu için dörtyüzlü melezleme dizeyi
.5000 .8660 .0000 .0000
.5000 -.2887 .8165 .0000
.5000 -.2887 -.4082 .7071
.5000 -.2887 -.4082 -.7071

14 atomu için döndürülmüş melezleme dizeyi
.5000 -.4553 -.6327 .3774
.5000 .0916 .6595 .5538
.5000 -.4174 .2733 -.7079
.5000 .7811 -.3001 -.2233

Ortalamayı kösegenden cikariyor.

h'uv=huv-(ortalama)*Suv

Ortalama= -13.784710 eV

h_VIF de en yakin olmayan komsular arasi cizgiler ihmal edildi.

Tüm atom ici cizgiler .0000küçük olacak sekilde Suv*(ortalama) ya esitlenmistir.

Atomici cizgileri degismedi.

AO da Hamilton Dizeyi

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	-13.5994	-3.3787	-3.3968	-.9317	-.3156	-.2913	-.8478	-.0208
2	-3.3787	-13.5987	-3.3970	-.3161	-.9328	-.8480	-.2919	-.0079
3	-3.3968	-3.3970	-13.5984	-.9644	-.9649	-.0797	-.0803	-.0087
4	-.9317	-.3161	-.9644	-13.6023	-3.4056	-.3215	-.9477	-.8486
5	-.3156	-.9328	-.9649	-3.4056	-13.6017	-.9474	-.3224	-.2921
6	-.2913	-.8480	-.0797	-.3215	-.9474	-13.6013	-3.4051	-.3158
7	-.8478	-.2919	-.0803	-.9477	-.3224	-3.4051	-13.6018	-.9325
8	-.0208	-.0079	-.0087	-.8486	-.2921	-.3158	-.9325	-13.5988
9	-.0090	-.0206	-.0080	-.2915	-.8481	-.9323	-.3157	-3.3781
10	-.0079	-.0083	-.0016	-.0799	-.0808	-.9650	-.9647	-3.3973
11	-14.6289	-14.6283	-14.6221	-3.0547	-3.0551	-1.0169	-1.0183	-.0504
12	-.0217	-.2239	9.1366	-1.4428	-1.4703	-.9222	-.9143	-.0460
13	5.8715	6.5246	-5.2620	-2.1322	-2.0427	.1672	.1431	-.0241
14	-8.7686	8.2897	.3113	-1.0930	1.2187	.3006	-.3336	-.0127
15	-2.9352	-2.9361	-2.9409	-14.5996	-14.5992	-3.0257	-3.0268	-.9514
16	1.4584	1.4328	2.6517	.6663	.4647	-1.7955	-1.7679	-.8238
17	1.9414	2.0253	.5024	-6.5381	-5.8881	1.8290	1.7416	-.2975
18	-1.1642	1.0456	.0127	-8.2375	8.7266	1.0526	-1.2311	-.2938
19	-.9500	-.9510	-.2372	-3.0256	-3.0265	-14.5996	-14.5991	-2.9355
20	.8314	.8244	.2399	1.7952	1.7681	-.6670	-.4649	-1.4330
21	.2749	.2977	-.0227	-1.8294	-1.7414	6.5381	5.8877	-2.0260
22	-.2957	.2939	.0038	-1.0525	1.2306	8.2374	-8.7267	-1.0467
23	-.0494	-.0494	-.0176	-1.0176	-1.0188	-3.0553	-3.0545	-14.6283
24	.0464	.0460	.0181	.9222	.9144	1.4436	1.4704	.2238
25	.0223	.0243	.0016	-.1672	-.1428	2.1313	2.0421	-6.5249
26	-.0128	.0126	.0002	-.3004	.3339	1.0921	-1.2188	-8.2893
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	-.0090	-.0079	-14.6289	-.0217	5.8715	-8.7686	-2.9352	1.4584
2	-.0206	-.0083	-14.6283	-.2239	6.5246	8.2897	-2.9361	1.4328
3	-.0080	-.0016	-14.6221	9.1366	-5.2620	.3113	-2.9409	2.6517
4	-.2915	-.0799	-3.0547	-1.4428	-2.1322	-1.0930	-14.5996	.6663
5	-.8481	-.0808	-3.0551	-1.4703	-2.0427	1.2187	-14.5992	.4647
6	-.9323	-.9650	-1.0169	-.9222	.1672	.3006	-3.0257	-1.7955
7	-.3157	-.9647	-1.0183	-.9143	.1431	-.3336	-3.0268	-1.7679
8	-3.3781	-3.3973	-.0504	-.0460	-.0241	-.0127	-.9514	-.8238
9	-13.5984	-3.3967	-.0499	-.0457	-.0229	.0132	-.9500	-.8306
10	-3.3967	-13.5985	-.0175	-.0183	-.0021	.0001	-.2371	-.2396
11	-.0499	-.0175	-21.3945	.0006	.0003	.0006	-12.8008	8.1657
12	-.0457	-.0183	.0006	-11.4002	-.0009	-.0003	-8.1697	2.4406
13	-.0229	-.0021	.0003	-.0009	-11.4007	.0014	-6.6129	5.0933
14	.0132	.0001	.0006	-.0003	.0014	-11.4024	.1569	-.1219
15	-.9500	-.2371	-12.8008	-8.1697	-6.6129	.1569	-21.4020	-.0026
16	-.8306	-.2396	8.1657	2.4406	5.0933	-.1219	-.0026	-11.3991
17	-.2747	.0229	6.6090	5.0953	.2750	-.0977	.0008	.0021
18	.2957	-.0038	-.1576	-.1213	-.0982	-3.8506	-.0013	.0004
19	-2.9352	-2.9420	-2.5830	-2.6190	-.2269	-.0220	-12.7686	-9.1605
20	-1.4587	-2.6517	2.6208	2.3165	.2444	.0245	9.1605	4.0934
21	-1.9410	-.5023	.2258	.2425	-.5007	.0016	-5.1037	-4.4203
22	1.1640	-.0127	.0226	.0247	.0024	-.5209	.3041	.2638
23	-14.6277	-14.6226	-.1591	-.1756	-.0571	.0005	-2.5825	-2.6202
24	.0207	-9.1369	.1767	.1711	.0623	.0001	2.6198	2.3166
25	-5.8705	5.2618	.0568	.0627	-.0024	-.0005	.2271	.2445
26	8.7690	-.3110	-.0001	-.0007	.0004	-.0241	.0223	.0242
	17	18	19	20	21	22	23	24
1	1.9414	-1.1642	-.9500	.8314	.2749	-.2957	-.0494	.0464
2	2.0253	1.0456	-.9510	.8244	.2977	.2939	-.0494	.0460
3	.5024	.0127	-.2372	.2399	-.0227	.0038	-.0176	.0181
4	-6.5381	-8.2375	-3.0256	1.7952	-1.8294	-1.0525	-1.0176	.9222
5	-5.8881	8.7266	-3.0265	1.7681	-1.7414	1.2306	-1.0188	.9144
6	1.8290	1.0526	-14.5996	-.6670	6.5381	8.2374	-3.0553	1.4436
7	1.7416	-1.2311	-14.5991	-.4649	5.8877	-8.7267	-3.0545	1.4704
8	-.2975	-.2938	-2.9355	-1.4330	-2.0260	-1.0467	-14.6283	.2238
9	-.2747	.2957	-2.9352	-1.4587	-1.9410	1.1640	-14.6277	.0207
10	.0229	-.0038	-2.9420	-2.6517	-.5023	-.0127	-14.6226	-9.1369
11	6.6090	-.1576	-2.5830	2.6208	.2258	.0226	-.1591	.1767
12	5.0953	-.1213	-2.6190	2.3165	.2425	.0247	-.1756	.1711
13	.2750	-.0982	-.2269	.2444	-.5007	.0024	-.0571	.0623
14	-.0977	-3.8506	-.0220	.0245	.0016	-.5209	.0005	.0001
15	.0008	-.0013	-12.7686	9.1605	-5.1037	.3041	-2.5825	2.6198
16	.0021	.0004	-9.1605	4.0934	-4.4203	.2638	-2.6202	2.3166
17	-11.3998	.0006	5.1041	-4.4202	-1.3715	-.1475	-.2259	.2421
18	.0006	-11.4028	-.3039	.2637	-.1477	-3.8280	-.0224	.0244
19	5.1041	-.3039	-21.4022	.0017	-.0004	.0012	-12.8008	8.1695
20	-4.4202	.2637	.0017	-11.3994	.0020	.0001	-8.1666	2.4406

21	-1.3715	-.1477	-.0004	.0020	-11.4005	-.0004	-6.6094	5.0950
22	-.1475	-3.8280	.0012	.0001	-.0004	-11.4028	.1565	-.1215
23	-.2259	-.0224	-12.8008	-8.1666	-6.6094	.1565	-21.3944	-.0016
24	.2421	.0244	8.1695	2.4406	5.0950	-.1215	-.0016	-11.4004
25	-.5006	.0024	6.6122	5.0930	.2756	-.0983	-.0002	-.0011
26	.0021	-.5206	-.1573	-.1214	-.0973	-3.8504	.0004	.0002
25		26						
1	.0223	-.0128						
2	.0243	.0126						
3	.0016	.0002						
4	-.1672	-.3004						
5	-.1428	.3339						
6	2.1313	1.0921						
7	2.0421	-1.2188						
8	-6.5249	-8.2893						
9	-5.8705	8.7690						
10	5.2618	-.3110						
11	.0568	-.0001						
12	.0627	-.0007						
13	-.0024	.0004						
14	-.0005	-.0241						
15	.2271	.0223						
16	.2445	.0242						
17	-.5006	.0021						
18	.0024	-.5206						
19	6.6122	-.1573						
20	5.0930	-.1214						
21	.2756	-.0973						
22	-.0983	-3.8504						
23	-.0002	.0004						
24	-.0011	.0002						
25	-11.3999	.0008						
26	.0008	-11.4019						

Melezlenmis AO da Hamilton Dizeyi

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	-13.5994	-3.3787	-3.3968	-.9317	-.3156	-.2913	-.8478	-.0208
2	-3.3787	-13.5987	-3.3970	-.3161	-.9328	-.8480	-.2919	-.0079
3	-3.3968	-3.3970	-13.5984	-.9644	-.9649	-.0797	-.0803	-.0087
4	-.9317	-.3161	-.9644	-13.6023	-3.4056	-.3215	-.9477	-.8486
5	-.3156	-.9328	-.9649	-3.4056	-13.6017	-.9474	-.3224	-.2921
6	-.2913	-.8480	-.0797	-.3215	-.9474	-13.6013	-3.4051	-.3158
7	-.8478	-.2919	-.0803	-.9477	-.3224	-3.4051	-13.6018	-.9325
8	-.0208	-.0079	-.0087	-.8486	-.2921	-.3158	-.9325	-13.5988
9	-.0090	-.0206	-.0080	-.2915	-.8481	-.9323	-.3157	-3.3781
10	-.0079	-.0083	-.0016	-.0799	-.0808	-.9650	-.9647	-3.3973
11	-16.4535	-4.4907	-4.5313	-1.2904	.3300	-.3748	-.8203	-.0229
12	-4.2705	-16.4492	-4.6343	.3087	-1.3426	-.8206	-.3685	-.0047
13	-4.2621	-4.1562	-3.6563	-3.6238	-3.6092	-1.0664	-1.0706	-.0696
14	-4.2717	-4.1603	-16.4223	-1.5039	-1.4884	.2279	.2229	-.0036
15	-3.0171	-3.0180	-3.8078	-6.7794	-6.7793	-.2844	-.2853	.2744
16	-.8698	.5869	-.6913	-16.0634	-4.8743	-.1627	-1.6694	-.9815
17	.4296	-1.2229	-.6918	-3.1815	-15.8628	-2.0878	-.3810	-.5472
18	-2.4129	-2.2181	-.6909	-3.1749	-1.6821	-3.5164	-3.7178	-.6485
19	-.6710	-.8822	-.2650	-3.0956	-3.9122	-6.5433	-.4779	-1.3757
20	-.3328	-.6690	-.0598	.5874	-.7130	-16.1265	-6.4696	.1357
21	-1.0782	-.6610	-.1960	-2.3315	-.7141	-3.2597	-15.2811	-1.0434
22	.1820	.3102	.0464	-1.2114	-.7137	-3.2697	-6.9695	-3.5876
23	-.0648	-.0563	-.0180	-.9363	-.7094	-3.1212	-3.9487	-6.4161
24	-.0129	.0025	-.0060	-.7009	-.3349	.6150	-.7206	-16.1871
25	-.0289	-.0461	-.0161	-.7267	-1.1665	-2.3208	-.7201	-3.3230
26	.0077	.0011	.0048	.3288	.1731	-1.2837	-.7196	-3.3303
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	-.0090	-.0079	-16.4535	-4.2705	-4.2621	-4.2717	-3.0171	-.8698
2	-.0206	-.0083	-4.4907	-16.4492	-4.1562	-4.1603	-3.0180	.5869
3	-.0080	-.0016	-4.5313	-4.6343	-3.6563	-16.4223	-3.8078	-.6913
4	-.2915	-.0799	-1.2904	.3087	-3.6238	-1.5039	-6.7794	-16.0634
5	-.8481	-.0808	.3300	-1.3426	-3.6092	-1.4884	-6.7793	-4.8743
6	-.9323	-.9650	-.3748	-.8206	-1.0664	.2279	-.2844	-.1627
7	-.3157	-.9647	-.8203	-.3685	-1.0706	.2229	-.2853	-1.6694
8	-3.3781	-3.3973	-.0229	-.0047	-.0696	-.0036	.2744	-.9815
9	-13.5984	-3.3967	-.0046	-.0231	-.0686	-.0035	.2749	-.5919
10	-3.3967	-13.5985	-.0078	-.0081	-.0226	.0034	.0816	-.1529
11	-.0046	-.0078	-13.9007	-2.4978	-2.4974	-2.4981	-3.3690	-1.3491

12	-.0231	-.0081	-2.4978	-13.8995	-2.4985	-2.4999	-3.5044	2.2034
13	-.0686	-.0226	-2.4974	-2.4985	-13.8990	-2.4986	-16.0263	-2.4438
14	-.0035	.0034	-2.4981	-2.4999	-2.4986	-13.8986	-5.9284	-1.0740
15	.2749	.0816	-3.3690	-3.5044	-16.0263	-5.9284	-13.8972	-2.5014
16	-.5919	-.1529	-1.3491	2.2034	-2.4438	-1.0740	-2.5014	-13.9014
17	-.9870	-.1631	2.0087	-2.0969	-3.2170	-.8696	-2.4997	-2.4989
18	-.5960	-.2398	-3.5337	-3.0726	-9.3024	.3716	-2.4996	-2.5020
19	-2.1661	-.2739	-.9399	-1.2107	-3.3011	.2001	.0856	-5.8324
20	-1.1226	-1.6489	-.4009	-.8156	-1.0629	.3876	-.2665	1.8586
21	.5231	-.3526	-1.4208	-.8983	-2.7113	.4254	-.8502	-4.1608
22	-3.1048	-3.6085	.3533	.5107	.6104	-.0582	2.2063	-2.7963
23	-.3000	-6.5975	-.0780	-.0672	-.2696	.0229	.8120	-1.8660
24	-6.3277	-4.8506	-.0111	.0083	-.0471	-.0021	.4098	-1.0376
25	-15.1343	-1.8395	-.0301	-.0546	-.1961	.0055	.7814	-1.5555
26	-7.4935	-15.9577	.0150	.0064	.0503	.0111	-.0538	.6230
	17	18	19	20	21	22	23	24
1	.4296	-2.4129	-.6710	-.3328	-1.0782	.1820	-.0648	-.0129
2	-1.2229	-2.2181	-.8822	-.6690	-.6610	.3102	-.0563	.0025
3	-.6918	-.6909	-.2650	-.0598	-.1960	.0464	-.0180	-.0060
4	-3.1815	-3.1749	-3.0956	.5874	-2.3315	-1.2114	-.9363	-.7009
5	-15.8628	-1.6821	-3.9122	-.7130	-.7141	-.7137	-.7094	-3.3349
6	-2.0878	-3.5164	-6.5433	-16.1265	-3.2597	-3.2697	-3.1212	-.6150
7	-.3810	-3.7178	-.4779	-6.4696	-15.2811	-6.9695	-3.9487	-.7206
8	-.5472	-.6485	-1.3757	.1357	-1.0434	-3.5876	-6.4161	-16.1871
9	-.9870	-.5960	-2.1661	-1.1226	.5231	-3.1048	-.3000	-6.3277
10	-.1631	-.2398	-.2739	-1.6489	-.3526	-3.6085	-6.5975	-4.8506
11	2.0087	-3.5337	-.9399	-.4009	-1.4208	.3533	-.0780	-.0111
12	-2.0969	-3.0726	-1.2107	-.8156	-.8983	.5107	-.0672	.0083
13	-3.2170	-9.3024	-3.3011	-1.0629	-2.7113	.6104	-.2696	-.0471
14	-.8696	.3716	.2001	.3876	.4254	-.0582	.0229	-.0021
15	-2.4997	-2.4996	.0856	-.2665	-.8502	2.2063	.8120	.4098
16	-2.4989	-2.5020	-5.8324	1.8586	-4.1608	-2.7963	-1.8660	-1.0376
17	-13.9016	-2.5006	-8.6613	-1.6276	-1.1583	-1.5339	-1.6901	-.5802
18	-2.5006	-13.9035	-14.2769	-2.9311	-9.5468	-1.5825	-2.4946	-.5702
19	-8.6613	-14.2769	-13.9035	-2.5009	-2.5005	-2.5005	-5.1969	-1.0304
20	-1.6276	-2.9311	-2.5009	-13.9024	-2.4990	-2.5001	-4.3494	2.1108
21	-1.1583	-9.5468	-2.5005	-2.4990	-13.9010	-2.5010	-3.1208	-1.1356
22	-1.5339	-1.5825	-2.5005	-2.5001	-2.5010	-13.8979	-16.0585	-2.7010
23	-1.6901	-2.4946	-5.1969	-4.3494	-3.1208	-16.0585	-13.8990	-2.4983
24	-.5802	-.5702	-1.0304	2.1108	-1.1356	-2.7010	-2.4983	-13.8987
25	-2.0708	-1.8320	-5.9097	-2.7531	1.1036	-8.2246	-2.4972	-2.4978
26	.4234	.3711	1.0469	-2.5623	.7826	-3.2050	-2.4979	-2.4998
	25	26						
1	-.0289	.0077						
2	-.0461	.0011						
3	-.0161	.0048						
4	-.7267	.3288						
5	-1.1665	.1731						
6	-2.3208	-1.2837						
7	-.7201	-.7196						
8	-3.3230	-3.3303						
9	-15.1343	-7.4935						
10	-1.8395	-15.9577						
11	-.0301	.0150						
12	-.0546	.0064						
13	-.1961	.0503						
14	.0055	.0111						
15	.7814	-.0538						
16	-1.5555	.6230						
17	-2.0708	.4234						
18	-1.8320	.3711						
19	-5.9097	1.0469						
20	-2.7531	-2.5623						
21	1.1036	.7826						
22	-8.2246	-3.2050						
23	-2.4972	-2.4979						
24	-2.4978	-2.4998						
25	-13.8993	-2.4996						
26	-2.4996	-13.8996						
VIF(kulakli) e Karsilik Hamilton Dizeyi								
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.1853	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
2	.0000	.1860	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
3	.0000	.0000	.1863	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
4	.0000	.0000	.0000	.1824	.0000	.0000	.0000	.0000

5	.0000	.0000	.0000	.0000	.1830	.0000	.0000	.0000
6	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.1834	.0000	.0000
7	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.1829	.0000
8	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.1859
9	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
10	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
11	-7.4018	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
12	.0000	-7.3998	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
13	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
14	.0000	.0000	-7.3894	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
15	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
16	.0000	.0000	.0000	-7.2560	.0000	.0000	.0000	.0000
17	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.1819	.0000	.0000	.0000
18	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
19	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
20	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.2790	.0000	.0000
21	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-6.9667	.0000
22	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
23	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
24	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.3028
25	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
26	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	.0000	.0000	-7.4018	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
2	.0000	.0000	.0000	-7.3998	.0000	.0000	.0000	.0000
3	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.3894	.0000	.0000
4	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.2560
5	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
6	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
7	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
8	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
9	.1863	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
10	.0000	.1862	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
11	.0000	.0000	-.1160	-2.4978	-2.4974	-2.4981	.0000	.0000
12	.0000	.0000	-2.4978	-.1148	-2.4985	-2.4999	.0000	.0000
13	.0000	.0000	-2.4974	-2.4985	-.1143	-2.4986	-7.7864	.0000
14	.0000	.0000	-2.4981	-2.4999	-2.4986	-.1139	.0000	.0000
15	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.7864	.0000	-.1125	-2.5014
16	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.5014	-.1167
17	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.4997	-2.4989
18	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.4996	-2.5020
19	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
20	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
21	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
22	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
23	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
24	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
25	-6.9132	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
26	.0000	-7.2179	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
	17	18	19	20	21	22	23	24
1	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
2	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
3	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
4	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
5	-7.1819	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
6	.0000	.0000	.0000	-7.2790	.0000	.0000	.0000	.0000
7	.0000	.0000	.0000	.0000	-6.9667	.0000	.0000	.0000
8	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.3028
9	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
10	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
11	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
12	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
13	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
14	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
15	-2.4997	-2.4996	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
16	-2.4989	-2.5020	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
17	-.1169	-2.5006	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
18	-2.5006	-.1188	-7.1029	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
19	.0000	-7.1029	-.1188	-2.5009	-2.5005	-2.5005	.0000	.0000
20	.0000	.0000	-2.5009	-.1177	-2.4990	-2.5001	.0000	.0000
21	.0000	.0000	-2.5005	-2.4990	-.1163	-2.5010	.0000	.0000
22	.0000	.0000	-2.5005	-2.5001	-2.5010	-.1132	-7.7490	.0000
23	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.7490	-.1143	-2.4983
24	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.4983	-.1140
25	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.4972	-2.4978

26	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.4979	-2.4998
	25	26							
1	.0000	.0000							
2	.0000	.0000							
3	.0000	.0000							
4	.0000	.0000							
5	.0000	.0000							
6	.0000	.0000							
7	.0000	.0000							
8	.0000	.0000							
9	-6.9132	.0000							
10	.0000	-7.2179							
11	.0000	.0000							
12	.0000	.0000							
13	.0000	.0000							
14	.0000	.0000							
15	.0000	.0000							
16	.0000	.0000							
17	.0000	.0000							
18	.0000	.0000							
19	.0000	.0000							
20	.0000	.0000							
21	.0000	.0000							
22	.0000	.0000							
23	-2.4972	-2.4979							
24	-2.4978	-2.4998							
25	-.1146	-2.4996							
26	-2.4996	-.1149							

VIF(kulaksiz) e Karsilik Hamilton Dizeyi

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
2	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
3	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
4	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
5	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
6	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
7	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
8	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
9	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
10	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
11	-7.4018	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
12	.0000	-7.3998	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
13	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
14	.0000	.0000	-7.3894	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
15	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
16	.0000	.0000	.0000	-7.2560	.0000	.0000	.0000	.0000
17	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.1819	.0000	.0000	.0000
18	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
19	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
20	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.2790	.0000	.0000
21	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-6.9667	.0000
22	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
23	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
24	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.3028
25	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
26	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	.0000	.0000	-7.4018	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
2	.0000	.0000	.0000	-7.3998	.0000	.0000	.0000	.0000
3	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.3894	.0000	.0000
4	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.2560
5	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
6	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
7	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
8	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
9	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
10	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
11	.0000	.0000	.0000	-2.4978	-2.4974	-2.4981	.0000	.0000
12	.0000	.0000	-2.4978	.0000	-2.4985	-2.4999	.0000	.0000
13	.0000	.0000	-2.4974	-2.4985	.0000	-2.4986	-7.7864	.0000
14	.0000	.0000	-2.4981	-2.4999	-2.4986	.0000	.0000	.0000
15	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.7864	.0000	.0000	-2.5014
16	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.5014	.0000
17	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.4997	-2.4989
18	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.4996	-2.5020

19	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
20	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
21	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
22	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
23	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
24	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
25	-6.9132	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
26	.0000	-7.2179	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
	17	18	19	20	21	22	23	24
1	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
2	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
3	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
4	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
5	-7.1819	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
6	.0000	.0000	.0000	-7.2790	.0000	.0000	.0000	.0000
7	.0000	.0000	.0000	.0000	-6.9667	.0000	.0000	.0000
8	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.3028
9	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
10	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
11	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
12	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
13	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
14	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
15	-2.4997	-2.4996	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
16	-2.4989	-2.5020	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
17	.0000	-2.5006	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
18	-2.5006	.0000	-7.1029	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
19	.0000	-7.1029	.0000	-2.5009	-2.5005	-2.5005	.0000	.0000
20	.0000	.0000	-2.5009	.0000	-2.4990	-2.5001	.0000	.0000
21	.0000	.0000	-2.5005	-2.4990	.0000	-2.5010	.0000	.0000
22	.0000	.0000	-2.5005	-2.5001	-2.5010	.0000	-7.7490	.0000
23	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.7490	.0000	-2.4983
24	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.4983	.0000
25	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.4972	-2.4978
26	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.4979	-2.4998
	25	26						
1	.0000	.0000						
2	.0000	.0000						
3	.0000	.0000						
4	.0000	.0000						
5	.0000	.0000						
6	.0000	.0000						
7	.0000	.0000						
8	.0000	.0000						
9	-6.9132	.0000						
10	.0000	-7.2179						
11	.0000	.0000						
12	.0000	.0000						
13	.0000	.0000						
14	.0000	.0000						
15	.0000	.0000						
16	.0000	.0000						
17	.0000	.0000						
18	.0000	.0000						
19	.0000	.0000						
20	.0000	.0000						
21	.0000	.0000						
22	.0000	.0000						
23	-2.4972	-2.4979						
24	-2.4978	-2.4998						
25	.0000	-2.4996						
26	-2.4996	.0000						
h'=h-(alfa)*S								
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.1853	-1.4199	-1.4284	-.3913	-.1323	-.1218	-.3557	-.0084
2	-1.4199	.1860	-1.4286	-.1327	-.3924	-.3559	-.1224	-.0024
3	-1.4284	-1.4286	.1863	-.4048	-.4053	-.0329	-.0335	-.0046
4	-.3913	-.1327	-.4048	.1824	-1.4330	-.1354	-.3991	-.3565
5	-.1323	-.3924	-.4053	-1.4330	.1830	-.3988	-.1363	-.1226
6	-.1218	-.3559	-.0329	-.1354	-.3988	.1834	-1.4325	-.1324
7	-.3557	-.1224	-.0335	-.3991	-.1363	-1.4325	.1829	-.3921
8	-.0084	-.0024	-.0046	-.3565	-.1226	-.1324	-.3921	.1859
9	-.0035	-.0082	-.0039	-.1219	-.3559	-.3919	-.1323	-1.4193
10	-.0038	-.0041	-.0002	-.0331	-.0339	-.4053	-.4051	-1.4289
11	-7.4018	-2.9760	-2.9912	-.7520	-.1527	-.2297	-.3938	-.0134

12	-2.8951	-7.3998	-3.0299	-.1593	-.7716	-.3934	-.2277	-.0051
13	-2.8922	-2.8527	-2.6665	-1.6159	-1.6096	-.4862	-.4877	-.0290
14	-2.8959	-2.8554	-7.3894	-.8307	-.8249	-.0064	-.0093	-.0065
15	-1.3792	-1.3801	-1.6715	-3.8213	-3.8208	-.3767	-.3780	.0174
16	-.5862	-.0479	-.5205	-7.2560	-3.1174	-.3325	-.8899	-.4482
17	-.1051	-.7169	-.5203	-2.4904	-7.1819	-1.0449	-.4138	-.2870
18	-1.1559	-1.0833	-.5200	-2.4892	-1.9360	-1.5734	-1.6479	-.3250
19	-.3339	-.4116	-.1189	-1.4178	-1.7195	-3.7350	-1.4908	-.7718
20	-.2074	-.3321	-.0433	-.0546	-.5358	-7.2790	-3.7071	-.2142
21	-.4826	-.3292	-.0943	-1.1350	-.5373	-2.5194	-6.9667	-.6507
22	-.0158	.0311	-.0028	-.7199	-.5365	-2.5235	-3.8912	-1.5905
23	-.0270	-.0238	-.0074	-.4379	-.3547	-1.4299	-1.7348	-3.6888
24	-.0101	-.0023	-.0039	-.3492	-.2150	-.0468	-.5416	-7.3028
25	-.0135	-.0210	-.0072	-.3606	-.5223	-1.1338	-.5410	-2.5441
26	-.0012	-.0048	-.0003	.0307	-.0276	-.7488	-.5403	-2.5483
9	10	11	12	13	14	15	16	
1	-.0035	-.0038	-7.4018	-2.8951	-2.8922	-2.8959	-1.3792	-.5862
2	-.0082	-.0041	-2.9760	-7.3998	-2.8527	-2.8554	-1.3801	-.0479
3	-.0039	-.0002	-2.9912	-3.0299	-2.6665	-7.3894	-1.6715	-.5205
4	-.1219	-.0331	-.7520	-.1593	-1.6159	-.8307	-3.8213	-7.2560
5	-.3559	-.0339	-.1527	-.7716	-1.6096	-.8249	-3.8208	-3.1174
6	-.3919	-.4053	-.2297	-.3934	-.4862	-.0064	-.3767	-.3325
7	-.1323	-.4051	-.3938	-.2277	-.4877	-.0093	-.3780	-.8899
8	-1.4193	-1.4289	-.0134	-.0051	-.0290	-.0065	.0174	-.4482
9	.1863	-1.4283	-.0050	-.0139	-.0279	-.0061	.0181	-.3038
10	-1.4283	.1862	-.0043	-.0044	-.0091	-.0007	.0100	-.0778
11	-.0050	-.0043	-.1160	-2.4978	-2.4974	-2.4981	-2.5727	-.5721
12	-.0139	-.0044	-2.4978	-.1148	-2.4985	-2.4999	-2.6264	.5155
13	-.0279	-.0091	-2.4974	-2.4985	-.1143	-2.4986	-7.7864	-2.2130
14	-.0061	-.0007	-2.4981	-2.4999	-2.4986	-.1139	-3.4292	-.5520
15	.0181	.0100	-2.5727	-2.6264	-7.7864	-3.4292	-.1125	-2.5014
16	-.3038	-.0778	-.5721	.5155	-2.2130	-.5520	-2.5014	-.1167
17	-.4485	-.0820	.3875	-.8946	-2.5316	-.5681	-2.4997	-2.4989
18	-.3058	-.1094	-1.9229	-1.7917	-5.0107	-.7829	-2.4996	-2.5020
19	-1.0647	-.3663	-.6294	-.7133	-1.5747	-.1004	-1.1080	-3.5748
20	-.6796	-.8747	-.2857	-.4149	-.7052	.1341	.1378	.1565
21	-.0707	-.3954	-.7445	-.5834	-1.3577	.0023	-.7148	-2.3749
22	-1.4115	-1.5981	.1221	.1699	-.0128	.1718	.8638	-1.3207
23	-1.4263	-3.7545	-.0459	-.0423	-.1239	-.0065	.1420	-.9917
24	-3.6553	-3.1102	-.0080	-.0009	-.0368	.0024	.2003	-.5518
25	-6.9132	-1.9954	-.0238	-.0330	-.0947	-.0069	.1625	-.8651
26	-4.0881	-7.2179	.0080	.0044	.0009	.0132	.2230	.1260
17	18	19	20	21	22	23	24	
1	-.1051	-1.1559	-.3339	-.2074	-.4826	-.0158	-.0270	-.0101
2	-.7169	-1.0833	-.4116	-.3321	-.3292	.0311	-.0238	-.0023
3	-.5203	-.5200	-.1189	-.0433	-.0943	-.0028	-.0074	-.0039
4	-2.4904	-2.4892	-1.4178	-.0546	-1.1350	-.7199	-.4379	-.3492
5	-7.1819	-1.9360	-1.7195	-.5358	-.5373	-.5365	-.3547	-.2150
6	-1.0449	-1.5734	-3.7350	-7.2790	-2.5194	-2.5235	-1.4299	-.0468
7	-.4138	-1.6479	-1.4908	-3.7071	-6.9667	-3.8912	-1.7348	-.5416
8	-.2870	-.3250	-.7718	-.2142	-.6507	-1.5905	-3.6888	-7.3028
9	-.4485	-.3058	-1.0647	-.6796	-.0707	-1.4115	-1.4263	-3.6553
10	-.0820	-.1094	-.3663	-.8747	-.3954	-1.5981	-3.7545	-3.1102
11	.3875	-1.9229	-.6294	-.2857	-.7445	.1221	-.0459	-.0080
12	-.8946	-1.7917	-.7133	-.4149	-.5834	.1699	-.0423	-.0009
13	-2.5316	-5.0107	-1.5747	-.7052	-1.3577	-.0128	-.1239	-.0368
14	-.5681	-.7829	-.1004	.1341	.0023	.1718	-.0065	.0024
15	-2.4997	-2.4996	-1.1080	.1378	-.7148	.8638	.1420	.2003
16	-2.4989	-2.5020	-3.5748	.1565	-2.3749	-1.3207	-.9917	-.5518
17	-.1169	-2.5006	-4.5571	-1.0287	-1.5554	-1.0390	-.9415	-.4152
18	-2.5006	-.1188	-7.1029	-2.2399	-4.9568	-1.8627	-1.2224	-.4433
19	-4.5571	-7.1029	-.1188	-2.5009	-2.5005	-2.5005	-3.3884	-.7303
20	-1.0287	-2.2399	-2.5009	-.1177	-2.4990	-2.5001	-2.9388	.4240
21	-1.5554	-4.9568	-2.5005	-2.4990	-.1163	-2.5010	-2.2879	-.3069
22	-1.0390	-1.8627	-2.5005	-2.5001	-2.5010	-.1132	-7.7490	-2.2543
23	-.9415	-1.2224	-3.3884	-2.9388	-2.2879	-7.7490	-.1143	-2.4983
24	-.4152	-.4433	-.7303	.4240	-.3069	-2.2543	-2.4983	-.1140
25	-1.0287	-.9868	-2.9263	-1.7657	-.3000	-4.6471	-2.4972	-2.4978
26	.0598	.0131	-.1524	-1.0816	.2253	-2.4721	-2.4979	-2.4998
25	26							
1	-.0135	-.0012						
2	-.0210	-.0048						
3	-.0072	-.0003						
4	-.3606	.0307						
5	-.5223	-.0276						

6 -1.1338 -.7488
7 -.5410 -.5403
8 -2.5441 -2.5483
9 -6.9132 -4.0881
10 -1.9954 -7.2179
11 -.0238 .0080
12 -.0330 .0044
13 -.0947 .0009
14 -.0069 .0132
15 .1625 .2230
16 -.8651 .1260
17 -1.0287 .0598
18 -.9868 .0131
19 -2.9263 -.1524
20 -1.7657 -1.0816
21 -.3000 .2253
22 -4.6471 -2.4721
23 -2.4972 -2.4979
24 -2.4978 -2.4998
25 -.1146 -2.4996
26 -2.4996 -.1149

EHT den gelen özdegerler

HAO dan gelen özdegerler

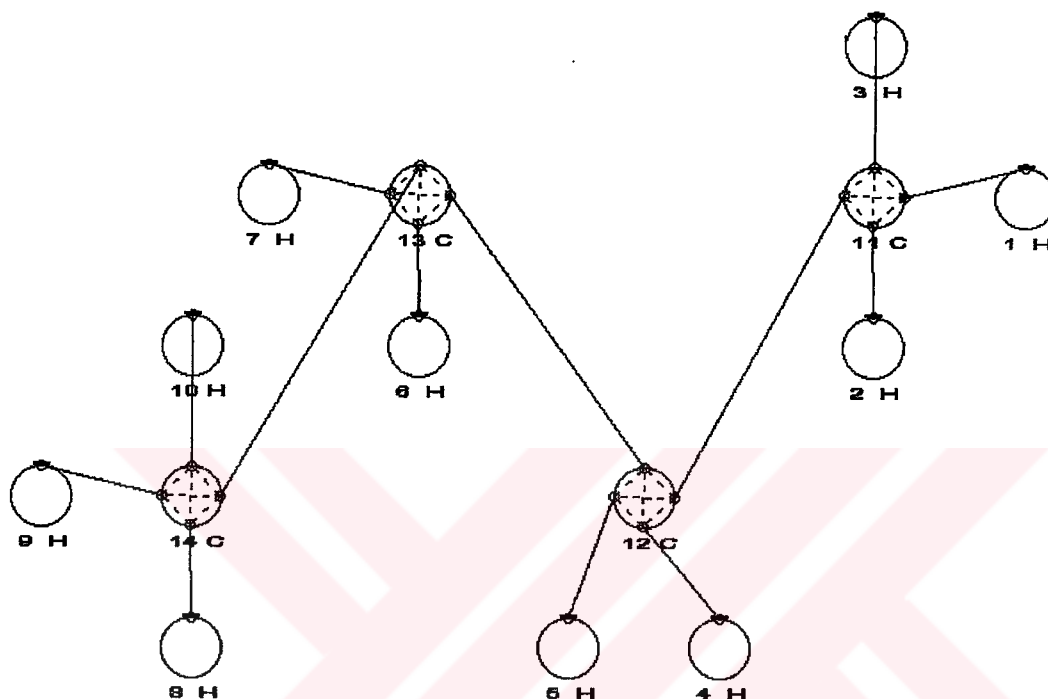
Ei-alfa

41.2674000	41.2673972	55.0521052
33.4927000	33.4927023	47.2774052
23.8407000	23.8407026	37.6254052
17.5284000	17.5283997	31.3131052
7.29690000	7.29690006	21.0816052
5.71960000	5.71960033	19.5043052
4.96330000	4.96330139	18.7480052
4.23210000	4.23209831	18.0168052
3.80690000	3.80690057	17.5916052
2.71160000	2.71160057	16.4963052
1.57960000	1.57960017	15.3643052
1.08730000	1.08729982	14.8720052
.846600000	.846599659	14.6313052
-13.4167000	-13.4167006	.368005162
-13.9942000	-13.9942006	-.209494838
-14.4412000	-14.4412006	-.656494838
-14.6778000	-14.6777995	-.893094838
-14.8319000	-14.8319006	-1.04719484
-15.5069000	-15.5069010	-1.72219484
-15.6965000	-15.6965013	-1.91179484
-15.7323000	-15.7323001	-1.94759484
-16.4947000	-16.4947011	-2.70999484
-19.9743000	-19.9743011	-6.18959484
-21.9163000	-21.9163018	-8.13159484
-25.1942000	-25.1941970	-11.4094948
-27.8428000	-27.8428014	-14.0580948

EHTD (kulakli)

EHTD (kulaksiz)

26.7157187	26.7278297
25.1645655	25.2125048
24.5296205	24.5686932
23.9982726	23.9568097
23.0276458	23.1203920
22.3935335	22.3375065
21.1408879	21.0360412
19.6039976	19.5184007
18.2246256	18.1654859
18.0103742	17.9253187
15.6451025	15.6258745
13.7375053	13.7485484
10.0838378	10.2305825
-3.35651484	-3.36539743
-3.67711719	-3.69706006
-3.96792873	-4.00451070
-4.13159775	-4.14008370
-4.23411372	-4.25815319
-4.34007517	-4.37872353
-4.67720864	-4.69834601
-4.73020774	-4.78150846
-5.00075238	-5.04864980
-7.44306863	-7.36553569
-7.81186684	-7.69872323
-9.51563783	-9.35178347



C3H6.LOG

HyperChem log start -- Wed Aug 26 13:27:05 1998.
 Geometry optimization, MolecularMechanics, molecule = .
 mmpplus
 PolakRibiere optimizer
 Energy=5.090641 Gradient=0.004823 Converged=NO (1 cycles 12 points).
 Energy=5.090641 Gradient=0.004823 Converged=YES (1 cycles 12 points).
 Bond=0.065239 Angle=1.02872 Dihedral=3.14915 Vdw=0.889096 Stretch-bend=-
 0.0415688 Electrostatic=0.
 Single Point, SemiEmpirical, molecule = .
 ExtendedHuckel
 Extended-Huckel Calculation:
 Singlet State Calculation
 Number of Electrons = 18
 Starting Extended-Huckel calculation with 18 orbitals
 Charge on the System = 0
 Total Orbitals = 18
 Number of Double Occupied Levels = 9
 Unweighted Huckel Constant = 1.7500000
 d Orbitals on Si...Cl If Any Not Included
 Energy=-7323.710778

RESULTS

Sum of One-Electron Energies = -7323.7107780 (kcal/mol)
 Sum of One-Electron Energies = -11.671441769 (a.u.)

EIGENVALUES (eV)

-28.369478	-21.040691	-21.040581	-16.697031	-15.388268
-14.930329	-14.930286	-13.196712	-13.196588	-3.353559

1.613417 6.811184 6.811759 9.859408 9.859871
 16.528967 38.203754 38.206188

ATOMIC ORBITAL ELECTRON POPULATIONS

1.181751 1.153367 0.787962 0.929518 1.181753
 0.907404 1.044600 0.918837 1.181757 0.855542
 1.085883 0.929435 0.973698 0.973697 0.973700
 0.973701 0.973697 0.973698

NET CHARGES ANE COORDINATES

Atom	Z	Charge	Coordinates (a.u.)		
			x	y	z
1	6	-0.052598	-0.80211	2.58609	-0.24839
2	6	-0.052595	-1.98355	0.09099	0.22044
3	6	-0.052617	0.77089	0.26940	-0.25137
4	1	0.026302	-0.61256	3.86979	1.34647
5	1	0.026303	-1.17005	3.49502	-2.05555
6	1	0.026300	-3.15977	-0.70521	-1.26617
7	1	0.026299	-2.60078	-0.33113	2.13573
8	1	0.026303	2.03621	-0.03008	1.34133
9	1	0.026302	1.47746	-0.40545	-2.06045

Alpha: Orbital Index = 1 Orbital Energy = -28.369478 (eV)

HyperChem log stop -- Wed Aug 26 13:35:18 1998.

C3H6.INP

c3h6

6 3 0 0 0 00000 1.75
 -.324657 2.050989 .713629
 -.620126 1.852360 -1.089442
 -1.674678 -.373761 -.671070
 -1.378413 -.175499 1.131937
 1.079191 -.015942 .710905
 .783054 -.214888 -1.092039
 -.425118 1.370628 -.131647
 -1.051281 .048225 .116833
 .408572 .142782 -.133226

C C C

C3H6.OUT

c3h6

Extended Hueckel calculation

input geometry

Atom	x	y	z		s		P		
				n	exp	coul	n	exp	coul
H 1	-.325	2.051	.714	1	1.300	-13.600			
H 2	-.620	1.852	-1.089	1	1.300	-13.600			
H 3	-1.675	-.374	-.671	1	1.300	-13.600			
H 4	-1.378	-.175	1.132	1	1.300	-13.600			
H 5	1.079	-.016	.711	1	1.300	-13.600			
H 6	.783	-.215	-1.092	1	1.300	-13.600			
C 7	-.425	1.371	-.132	2	1.625	-21.400	2	1.625	-11.400
C 8	-1.051	.048	.117	2	1.625	-21.400	2	1.625	-11.400
C 9	.409	.143	-.133	2	1.625	-21.400	2	1.625	-11.400

Charge = 0 iprint = 0 Hueckel constant = 1.750

Distance matrix

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.0000	1.8379	3.1015	2.4985	2.4986	3.1019	1.0897	2.2125
2	1.8379	.0000	2.4985	3.1019	3.1015	2.4985	1.0897	2.2127
3	3.1015	2.4985	.0000	1.8379	3.1019	2.4986	2.2125	1.0897
4	2.4985	3.1019	1.8379	.0000	2.4985	3.1015	2.2127	1.0897
5	2.4986	3.1015	3.1019	2.4985	.0000	1.8379	2.2126	2.2127
6	3.1019	2.4985	2.4986	3.1015	1.8379	.0000	2.2127	2.2126
7	1.0897	1.0897	2.2125	2.2127	2.2126	2.2127	.0000	1.4841
8	2.2125	2.2127	1.0897	1.0897	2.2127	2.2126	1.4841	.0000
9	2.2127	2.2125	2.2127	2.2125	1.0897	1.0897	1.4841	1.4841
9								
1	2.2127							
2	2.2125							
3	2.2127							
4	2.2125							
5	1.0897							

6 1.0897
 7 1.4841
 8 1.4841
 9 .0000

Overlap matrix

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1.0000	.1347	.0137	.0425	.0425	.0137	.4925	.0453
2	.1347	1.0000	.0425	.0137	.0137	.0425	.4925	-.0880
3	.0137	.0425	1.0000	.1347	.0137	.0425	.0941	-.0683
4	.0425	.0137	.1347	1.0000	.0425	.0137	.0940	-.0521
5	.0425	.0137	.0137	.0425	1.0000	.1347	.0941	.0822
6	.0137	.0425	.0425	.0137	.1347	1.0000	.0940	.0660
7	.4925	.4925	.0941	.0940	.0941	.0940	1.0000	.0000
8	.0453	-.0880	-.0683	-.0521	.0822	.0660	.0000	1.0000
9	.3069	.2173	-.0953	-.0845	-.0758	-.0866	.0000	.0000
10	.3813	-.4320	-.0295	.0690	.0461	-.0525	.0000	.0000
11	.0941	.0940	.4925	.4925	.0940	.0941	.3660	-.1623
12	.0397	.0236	-.2812	-.1476	.1164	.1003	.1623	.1148
13	.1095	.0986	-.1903	-.1009	-.0035	-.0144	.3427	-.2045
14	.0326	-.0659	-.3554	.4579	.0325	-.0661	-.0644	.0384
15	.0940	.0941	.0940	.0941	.4925	.4925	.3660	.2161
16	-.0401	-.0562	-.1138	-.0977	.3025	.1689	-.2161	.0400
17	.1043	.0934	-.0282	-.0174	-.0716	-.1613	.3182	.2527
18	.0463	-.0523	-.0294	.0692	.3808	-.4325	.0004	.0003
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	.3069	.3813	.0941	.0397	.1095	.0326	.0940	-.0401
2	.2173	-.4320	.0940	.0236	.0986	-.0659	.0941	-.0562
3	-.0953	-.0295	.4925	-.2812	-.1903	-.3554	.0940	-.1138
4	-.0845	.0690	.4925	-.1476	-.1009	.4579	.0941	-.0977
5	-.0758	.0461	.0940	.1164	-.0035	.0325	.4925	.3025
6	-.0866	-.0525	.0941	.1003	-.0144	-.0661	.4925	.1689
7	.0000	.0000	.3660	.1623	.3427	-.0644	.3660	-.2161
8	.0000	.0000	-.1623	.1148	-.2045	.0384	.2161	.0400
9	1.0000	.0000	-.3427	-.2045	-.2201	.0811	-.3182	.2527
10	.0000	1.0000	.0644	.0384	.0811	.1964	-.0004	.0003
11	-.3427	.0644	1.0000	.0000	.0000	.0000	.3660	-.3783
12	-.2045	.0384	.0000	1.0000	.0000	.0000	.3783	-.3145
13	-.2201	.0811	.0000	.0000	1.0000	.0000	.0245	-.0341
14	.0811	.1964	.0000	.0000	.0000	1.0000	-.0648	.0901
15	-.3182	-.0004	.3660	.3783	.0245	-.0648	1.0000	.0000
16	.2527	.0003	-.3783	-.3145	-.0341	.0901	.0000	1.0000
17	-.1606	-.0005	-.0245	-.0341	.2094	.0058	.0000	.0000
18	-.0005	.2116	.0648	.0901	.0058	.1962	.0000	.0000
	17	18						
1	.1043	.0463						
2	.0934	-.0523						
3	-.0282	-.0294						
4	-.0174	.0692						
5	-.0716	.3808						
6	-.1613	-.4325						
7	.3182	.0004						
8	.2527	.0003						
9	-.1606	-.0005						
10	-.0005	.2116						
11	-.0245	.0648						
12	-.0341	.0901						
13	.2094	.0058						
14	.0058	.1962						
15	.0000	.0000						
16	.0000	.0000						
17	1.0000	.0000						
18	.0000	1.0000						

starting main calculations

Results of calculation c3h6

Energy levels (eV)			
E(1) =	37.77868	.0000	E(10) = -13.19727 2.0000
E(2) =	37.77634	.0000	E(11) = -13.19738 2.0000
E(3) =	16.36600	.0000	E(12) = -14.93331 2.0000
E(4) =	9.74373	.0000	E(13) = -14.93336 2.0000
E(5) =	9.74329	.0000	E(14) = -15.38881 2.0000
E(6) =	6.71819	.0000	E(15) = -16.69228 2.0000
E(7) =	6.71762	.0000	E(16) = -21.04135 2.0000
E(8) =	1.55435	.0000	E(17) = -21.04145 2.0000
E(9) =	-3.39425	.0000	E(18) = -28.35936 2.0000

Sum of one-electron energies = -317.56912684 eV.

Wave Functions

MO's in columns, AO's in rows

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.4531	.2172	-.5290	-.7081	-.0898	-.5507	-.1541	-.5072
2	.4530	.2174	-.5291	.7080	.0900	-.5506	-.1544	.5072
3	-.4147	.2836	-.5290	-.4320	.5682	.4089	-.3997	.5072
4	-.4146	.2838	-.5290	.4317	-.5683	.4089	-.3999	-.5072
5	-.0384	-.5010	-.5291	.2763	.6581	.1418	.5540	-.5072
6	-.0383	-.5010	-.5290	-.2760	-.6582	.1417	.5540	.5072
7	-1.3674	-.6558	.6113	.0000	-.0001	.0400	.0112	.0000
8	.1607	-.4232	-.0358	.1766	.0224	-.0230	-.2622	.0887
9	.4345	.1759	.4404	.1187	.0150	1.1030	.2923	.0600
10	-.0743	.0502	-.0427	1.0769	.1368	-.1177	.0105	.5444
11	1.2516	-.8563	.6113	.0001	.0001	-.0297	.0290	.0000
12	.1704	-.4287	-.3602	-.1080	.1420	.5690	-.7530	.0897
13	.4288	.1663	-.2447	-.0724	.0951	.5981	-.2951	.0595
14	-.0753	.0519	.0861	-.6569	.8642	-.1593	.1563	.5444
15	.1158	1.5120	.6113	-.0002	.0001	-.0103	-.0402	.0000
16	.1608	-.4343	.3960	-.0691	-.1643	-.1521	-1.0203	.0896
17	.4233	.1761	-.1957	-.0462	-.1104	.3418	.4359	.0605
18	-.0729	.0519	-.0434	-.4200	-1.0010	-.0128	.1195	.5442
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	.0003	-.1189	.0767	.3494	-.1883	.1867	-.2136	-.2010
2	-.0003	-.1190	.0764	-.3495	.1882	.1867	.2136	-.2011
3	-.0003	.1257	.0649	.3377	.2085	.1867	.2136	.2400
4	.0003	.1259	.0646	-.3378	-.2084	.1867	-.2136	.2400
5	.0003	-.0070	-.1413	-.0116	.3967	.1867	-.2136	-.0390
6	-.0003	-.0067	-.1413	.0117	-.3967	.1867	.2136	-.0390
7	.0000	.0383	-.0246	.0000	.0000	-.0265	.0000	-.3690
8	-.7903	.3661	.5288	.0617	-.0333	-.0299	-.0469	-.0697
9	-.0512	-.2002	.1784	.0415	-.0225	.3676	-.0315	-.1190
10	.1350	-.0379	-.1062	.3773	-.2033	-.0356	-.2859	.0245
11	.0000	-.0405	-.0208	.0000	.0000	-.0265	.0000	.4405
12	.4513	-.3606	.2272	-.0599	-.0371	-.3007	-.0469	-.0850
13	-.6647	.1165	-.5481	-.0400	-.0247	-.2042	-.0315	-.1141
14	-.0012	.0465	.0228	-.3647	-.2251	.0718	-.2859	.0265
15	.0000	.0022	.0454	.0000	.0000	-.0265	.0000	-.0715
16	.3389	.2638	-.2513	-.0020	.0704	.3306	-.0469	-.0734
17	.7158	.5872	.0894	-.0014	.0474	-.1633	-.0315	-.1033
18	-.1348	-.1082	.0314	-.0126	.4283	-.0363	-.2859	.0234
	17	18						
1	-.1611	.0395						
2	-.1611	.0395						
3	-.0936	.0395						
4	-.0936	.0395						
5	.2546	.0395						
6	.2546	.0395						
7	-.2956	.4040						
8	.1060	.0005						
9	-.0848	-.0062						
10	-.0080	.0006						
11	-.1717	.4040						
12	.1105	.0051						
13	-.0695	.0035						
14	-.0105	-.0012						
15	.4674	.4040						
16	.1215	-.0056						
17	-.0814	.0028						
18	-.0110	.0006						

Reduced overlap population matrix, atom by atom

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.6519	-.0433	.0014	-.0068	-.0068	.0014	.7924	-.0473
2	-.0433	.6519	-.0068	.0014	.0014	-.0068	.7924	-.0472
3	.0014	-.0068	.6519	-.0433	.0014	-.0068	-.0473	.7924
4	-.0068	.0014	-.0433	.6520	-.0068	.0014	-.0472	.7924
5	-.0068	.0014	.0014	-.0068	.6519	-.0433	-.0473	-.0472
6	.0014	-.0068	-.0068	.0014	-.0433	.6519	-.0472	-.0473
7	.7924	.7924	-.0473	-.0472	-.0473	-.0472	2.6780	.6763
8	-.0473	-.0472	.7924	.7924	-.0472	-.0473	.6763	2.6780
9	-.0472	-.0473	-.0472	-.0473	.7924	.7924	.6762	.6762
	9							
1	-.0472							
2	-.0473							

3 -.0472
 4 -.0473
 5 .7924
 6 .7924
 7 .6762
 8 .6762
 9 2.6780

Reduced charge matrix, MO's in columns, atoms in rows

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.1283	.0295	.2149	.2724	.0044	.1777	.0139	.1850
2	.1283	.0295	.2149	.2724	.0044	.1776	.0140	.1850
3	.1075	.0503	.2149	.1014	.1754	.0980	.0936	.1850
4	.1075	.0503	.2149	.1013	.1755	.0980	.0937	.1850
5	.0009	.1569	.2149	.0415	.2353	.0118	.1798	.1850
6	.0009	.1569	.2149	.0414	.2354	.0118	.1798	.1850
7	.7467	.2710	.2369	.7674	.0124	.8444	.1057	.2967
8	.6465	.3712	.2369	.2855	.4942	.4848	.4653	.2967
9	.1333	.8844	.2369	.1167	.6631	.0959	.8542	.2967
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	.0000	.0301	.0125	.3021	.0878	.0929	.1484	.1672
2	.0000	.0302	.0125	.3022	.0877	.0929	.1484	.1673
3	.0000	.0337	.0090	.2822	.1076	.0929	.1484	.2383
4	.0000	.0338	.0089	.2824	.1075	.0929	.1484	.2384
5	.0000	.0001	.0425	.0003	.3895	.0929	.1484	.0063
6	.0000	.0001	.0426	.0003	.3896	.0929	.1484	.0063
7	.6667	.4402	.8079	.4290	.1246	.4808	.3700	.4572
8	.6667	.3659	.8821	.4009	.1527	.4808	.3700	.6118
9	.6667	1.0660	.1820	.0005	.5531	.4808	.3699	.1072
	17	18						
1	.1074	.0255						
2	.1073	.0255						
3	.0362	.0255						
4	.0362	.0255						
5	.2683	.0255						
6	.2683	.0255						
7	.3270	.6156						
8	.1723	.6156						
9	.6769	.6156						

Atom	Net chg.	Atomic orbital occupation for given MO occupation								
		S	Px	Py	Pz	Dx2-y2	Dz2	Dxy	Dxz	Dyz
H	1	.026	.974							
H	2	.026	.974							
H	3	.026	.974							
H	4	.026	.974							
H	5	.026	.974							
H	6	.026	.974							
C	7	-.052	1.183	1.153	.787	.929				
C	8	-.052	1.183	.907	1.044	.918				
C	9	-.052	1.183	.855	1.086	.929				

Reduced energy matrix, atom by atom

	1	2	3	4	5	6
1	-8.8665	1.0310	-.0344	.1616	.1616	-.0344
2	1.0310	-8.8664	.1616	-.0344	-.0344	.1616
3	-.0344	.1616	-8.8665	1.0310	-.0344	.1616
4	.1616	-.0344	1.0310	-8.8665	.1616	-.0344
5	.1616	-.0344	-.0344	.1616	-8.8664	1.0310
6	-.0344	.1616	.1616	-.0344	1.0310	-8.8665
7	-19.5130	-19.5131	1.1875	1.1870	1.1874	1.1870
8	1.1875	1.1870	-19.5129	-19.5128	1.1870	1.1874
9	1.1870	1.1875	1.1870	1.1874	-19.5130	-19.5130
	7	8	9			
1	-19.5130	1.1875	1.1870			
2	-19.5131	1.1870	1.1875			
3	1.1875	-19.5129	1.1870			
4	1.1870	-19.5128	1.1874			
5	1.1874	1.1870	-19.5130			
6	1.1870	1.1874	-19.5130			
7	-38.3197	-16.8124	-16.8115			
8	-16.8124	-38.3197	-16.8116			
9	-16.8115	-16.8116	-38.3201			

C3H6.HAO

C3H6

Atom sembolleri, sıra numaraları, x, y ve z koordinatları

H	1	-1.3760	.0600	-.9190
H	2	-1.3760	.0600	.9190
H	3	-1.3760	2.5590	.9190
H	4	-1.3760	2.5590	-.9190
H	5	.7880	1.3090	.9190
H	6	.7880	1.3090	-.9190
C	7	-1.0830	.5670	.0000
C	8	-1.0830	2.0510	.0000
C	9	.2020	1.3090	.0000

7 atomu için dörtyüzlü melezleme dizeyi

.5000	.8660	.0000	.0000
.5000	-.2887	.8165	.0000
.5000	-.2887	-.4082	.7071
.5000	-.2887	-.4082	-.7071

7 atomu için döndürülmüş melezleme dizeyi

.5000	-.2329	-.4029	-.7304
.5000	-.2669	-.4619	.6822
.5000	-.3623	.7862	.0241
.5000	.8621	.0786	.0241

8 atomu için dörtyüzlü melezleme dizeyi

.5000	.8660	.0000	.0000
.5000	-.2887	.8165	.0000
.5000	-.2887	-.4082	.7071
.5000	-.2887	-.4082	-.7071

8 atomu için döndürülmüş melezleme dizeyi

.5000	-.2328	.4036	.7300
.5000	-.2663	.4617	-.6826
.5000	-.3630	-.7859	-.0237
.5000	.8621	-.0793	-.0237

9 atomu için dörtyüzlü melezleme dizeyi

.5000	.8660	.0000	.0000
.5000	-.2887	.8165	.0000
.5000	-.2887	-.4082	.7071
.5000	-.2887	-.4082	-.7071

9 atomu için döndürülmüş melezleme dizeyi

.5000	.4656	.0000	.7302
.5000	.5332	.0000	-.6824
.5000	-.4994	.7071	-.0239
.5000	-.4994	-.7071	-.0239

Ortalamayı köşegeninden çıkarıyor.

h'uv=huv-(ortalama)*Suv

Ortalama= -13.799690 ev

h_VIF de en yakın olmayan komsular arası çizgiler ihmal edildi.

Tüm atom içi çizgiler 1.0000küçük olacak şekilde Suv*(ortalama) ya eşitlenmiştir.

Atom içi çizgileri değişmedi.

C3H6 molekülü için b->1.49 alındı.

AO da Hamilton Dizeyi

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	-13.5998	-3.2075	-.3293	-1.0136	-.3290	-1.0144	-15.0848	2.8884
2	-3.2075	-13.5998	-1.0136	-.3293	-1.0144	-.3290	-15.0848	2.8884
3	-.3293	-1.0136	-13.5986	-3.2054	-1.0145	-.3308	-2.8797	.3479
4	-1.0136	-.3293	-3.2054	-13.5986	-.3308	-1.0145	-2.8797	.3479
5	-.3290	-1.0144	-1.0145	-.3308	-13.6017	-3.2091	-2.8825	-2.2374
6	-1.0144	-.3290	-.3308	-1.0145	-3.2091	-13.6017	-2.8825	-2.2374
7	-15.0848	-15.0848	-2.8797	-2.8797	-2.8825	-2.8825	-21.3981	-.0009
8	2.8884	2.8884	.3479	.3479	-2.2374	-2.2374	-.0009	-11.4008
9	5.0024	5.0024	-2.3800	-2.3800	-.8890	-.8890	.0000	-.0014
10	9.0667	-9.0667	-1.0968	1.0968	-1.0978	1.0978	.0000	.0000
11	-2.8803	-2.8803	-15.0832	-15.0832	-2.8818	-2.8818	-13.7090	-.0011
12	.3497	.3497	2.8885	2.8885	-2.2374	-2.2374	.0005	-4.2238
13	2.3812	2.3812	-5.0024	-5.0024	.8891	.8891	11.0408	.0009
14	1.0975	-1.0975	-9.0676	9.0676	-1.0969	1.0969	.0000	.0000
15	-2.8805	-2.8805	-2.8811	-2.8811	-15.0876	-15.0876	-13.7108	-9.5640
16	1.8878	1.8878	1.8869	1.8869	-5.7761	-5.7761	9.5602	3.9169
17	1.4931	1.4931	-1.4909	-1.4909	.0001	.0001	5.5216	4.6974
18	1.0978	-1.0978	-1.0968	1.0968	-9.0670	9.0670	.0000	.0000
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	5.0024	9.0667	-2.8803	.3497	2.3812	1.0975	-2.8805	1.8878

2	5.0024	-9.0667	-2.8803	.3497	2.3812	-1.0975	-2.8805	1.8878
3	-2.3800	-1.0968	-15.0832	2.8885	-5.0024	-9.0676	-2.8811	1.8869
4	-2.3800	1.0968	-15.0832	2.8885	-5.0024	9.0676	-2.8811	1.8869
5	-.8890	-1.0978	-2.8818	-2.2374	.8891	-1.0969	-15.0876	-5.7761
6	-.8890	1.0978	-2.8818	-2.2374	.8891	1.0969	-15.0876	-5.7761
7	.0000	.0000	-13.7090	.0005	11.0408	.0000	-13.7108	9.5602
8	-.0014	.0000	-.0011	-4.2238	.0009	.0000	-9.5640	3.9169
9	-11.3990	.0000	-11.0387	-.0018	6.6294	.0000	-5.5206	4.6986
10	.0000	-11.3976	.0000	.0000	.0000	-4.2196	.0000	.0000
11	-11.0387	.0000	-21.3953	-.0006	.0000	.0000	-13.7105	9.5607
12	-.0018	.0000	-.0006	-11.4029	.0013	.0000	-9.5639	3.9176
13	6.6294	.0000	.0000	.0013	-11.4003	.0000	5.5212	-4.6987
14	.0000	-4.2196	.0000	.0000	.0000	-11.3993	.0000	.0000
15	-5.5206	.0000	-13.7105	-9.5639	5.5212	.0000	-21.4029	.0012
16	4.6986	.0000	9.5607	3.9176	-4.6987	.0000	.0012	-11.4004
17	-1.5087	.0000	-5.5190	-4.6996	-1.5087	.0000	.0004	.0005
18	.0000	-4.2203	.0000	.0000	.0000	-4.2199	.0000	.0000

17

18

1	1.4931	1.0978
2	1.4931	-1.0978
3	-1.4909	-1.0968
4	-1.4909	1.0968
5	.0001	-9.0670
6	.0001	9.0670
7	5.5216	.0000
8	4.6974	.0000
9	-1.5087	.0000
10	.0000	-4.2203
11	-5.5190	.0000
12	-4.6996	.0000
13	-1.5087	.0000
14	.0000	-4.2199
15	.0004	.0000
16	.0005	.0000
17	-11.4001	.0000
18	.0000	-11.3977

Melezlenmis AO da Hamilton Dizeyi

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	-13.5998	-3.2075	-.3293	-1.0136	-.3290	-1.0144	-16.8525	-4.4384
2	-3.2075	-13.5998	-1.0136	-.3293	-1.0144	-.3290	-3.6086	-16.8093
3	-.3293	-1.0136	-13.5986	-3.2054	-1.0145	-.3308	.2392	-1.1817
4	-1.0136	-.3293	-3.2054	-13.5986	-.3308	-1.0145	-1.3629	.3148
5	-.3290	-1.0144	-1.0145	-.3308	-13.6017	-3.2091	.2398	-1.1823
6	-1.0144	-.3290	-.3308	-1.0145	-3.2091	-13.6017	-1.3638	.3155
7	-16.8525	-3.6086	.2392	-1.3629	.2398	-1.3638	-13.8982	-2.5007
8	-4.4384	-16.8093	-1.1817	.3148	-1.1823	.3155	-2.5007	-13.8983
9	-4.4377	-4.8742	-3.4635	-3.4107	-1.3559	-1.3030	-2.4996	-2.4996
10	-4.4409	-4.8774	-1.3534	-1.3006	-3.4665	-3.4136	-2.4992	-2.4990
11	.2406	-1.3618	-16.8524	-3.6129	-1.3621	.2395	1.9672	-2.2501
12	-1.1829	.3153	-4.4312	-16.8098	.3142	-1.1833	-2.2535	1.9215
13	-3.4645	-3.4124	-4.4434	-4.8739	-1.3014	-1.3535	-3.8728	-3.1510
14	-1.3537	-1.3016	-4.4394	-4.8699	-3.4142	-3.4663	-.6537	-.0317
15	.2404	-1.3628	-1.3629	.2390	-16.8540	-3.6125	1.9683	-2.2503
16	-1.1827	.3156	.3141	-1.1829	-4.4367	-16.8110	-2.2523	1.9225
17	-1.3535	-1.3010	-3.4109	-3.4634	-4.4422	-4.8757	-.6533	-.0304
18	-3.4651	-3.4126	-1.3024	-1.3549	-4.4423	-4.8759	-3.8705	-3.1471
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	-4.4377	-4.4409	.2406	-1.1829	-3.4645	-1.3537	.2404	-1.1827
2	-4.8742	-4.8774	-1.3618	.3153	-3.4124	-1.3016	-1.3628	.3156
3	-3.4635	-1.3534	-16.8524	-4.4312	-4.4434	-4.4394	-1.3629	.3141
4	-3.4107	-1.3006	-3.6129	-16.8098	-4.8739	-4.8699	.2390	-1.1829
5	-1.3559	-3.4665	-1.3621	.3142	-1.3014	-3.4142	-16.8540	-4.4367
6	-1.3030	-3.4136	.2395	-1.1833	-1.3535	-3.4663	-3.6125	-16.8110
7	-2.4996	-2.4992	1.9672	-2.2535	-3.8728	-.6537	1.9683	-2.2523
8	-2.4996	-2.4990	-2.2501	1.9215	-3.1510	-.0317	-2.2503	1.9225
9	-13.8978	-2.5004	-3.8656	-3.1492	-16.7538	-7.2973	-.6545	-.0339
10	-2.5004	-13.9011	-.6498	-.0327	-7.2860	-7.4775	-3.8715	-3.1515
11	-3.8656	-.6498	-13.8987	-2.4995	-2.4988	-2.4980	-2.5318	1.9534
12	-3.1492	-.0327	-2.4995	-13.8989	-2.4987	-2.4978	1.9536	-2.0092
13	-16.7538	-7.2860	-2.4988	-2.4987	-13.8984	-2.4990	-.5052	-.1699
14	-7.2973	-7.4775	-2.4980	-2.4978	-2.4990	-13.9016	-3.7239	-3.2886
15	-.6545	-3.8715	-2.5318	1.9536	-.5052	-3.7239	-13.8991	-2.5014
16	-.0339	-3.1515	1.9534	-2.0092	-.1699	-3.2886	-2.5014	-13.8992
17	-7.4763	-7.2912	-3.7202	-3.2902	-7.2918	-16.7630	-2.5004	-2.5002
18	-7.2962	-16.7550	-.5037	-.1725	-7.4787	-7.3003	-2.5010	-2.5009

	17	18						
1	-1.3535	-3.4651						
2	-1.3010	-3.4126						
3	-3.4109	-1.3024						
4	-3.4634	-1.3549						
5	-4.4422	-4.4423						
6	-4.8757	-4.8759						
7	-.6533	-3.8705						
8	-.0304	-3.1471						
9	-7.4763	-7.2962						
10	-7.2912	-16.7550						
11	-3.7202	-.5037						
12	-3.2902	-.1725						
13	-7.2918	-7.4787						
14	-16.7630	-7.3003						
15	-2.5004	-2.5010						
16	-2.5002	-2.5009						
17	-13.9015	-2.5014						
18	-2.5014	-13.9014						
h'=h-(alfa)*s								
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.1999	-1.3486	-.1403	-.4272	-.1400	-.4280	-7.5801	-2.9976
2	-1.3486	.1999	-.4272	-.1403	-.4280	-.1400	-2.6914	-7.5640
3	-.1403	-.4272	.2010	-1.3466	-.4280	-.1417	-.1711	-.6943
4	-.4272	-.1403	-1.3466	.2010	-.1417	-.4280	-.7612	-.1430
5	-.1400	-.4280	-.4280	-.1417	.1980	-1.3502	-.1714	-.6960
6	-.4280	-.1400	-.1417	-.4280	-1.3502	.1980	-.7631	-.1434
7	-7.5801	-2.6914	-.1711	-.7612	-.1714	-.7631	-.0985	-2.5007
8	-2.9976	-7.5640	-.6943	-.1430	-.6960	-.1434	-2.5007	-.0987
9	-2.9991	-3.1602	-1.5372	-1.5177	-.7610	-.7415	-2.4996	-2.4996
10	-3.0001	-3.1613	-.7598	-.7403	-1.5394	-1.5199	-2.4992	-2.4990
11	-.1704	-.7613	-7.5799	-2.6921	-.7615	-.1713	.4365	-.7938
12	-.6952	-.1427	-2.9941	-7.5641	-.1436	-.6954	-.7957	.5587
13	-1.5387	-1.5194	-3.0008	-3.1597	-.7402	-.7594	-2.7481	-2.4569
14	-.7592	-.7400	-2.9990	-3.1580	-1.5211	-1.5403	-.9318	-.6713
15	-.1701	-.7616	-.7616	-.1715	-7.5815	-2.6935	.4369	-.7940
16	-.6950	-.1422	-.1436	-.6952	-2.9976	-7.5655	-.7952	.5597
17	-.7601	-.7407	-1.5176	-1.5370	-3.0016	-3.1617	-.9312	-.6705
18	-1.5387	-1.5193	-.7421	-.7614	-3.0017	-3.1618	-2.7469	-2.4551
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	-2.9991	-3.0001	-.1704	-.6952	-1.5387	-.7592	-.1701	-.6950
2	-3.1602	-3.1613	-.7613	-.1427	-1.5194	-.7400	-.7616	-.1422
3	-1.5372	-.7598	-7.5799	-2.9941	-3.0008	-2.9990	-.7616	-.1436
4	-1.5177	-.7403	-2.6921	-7.5641	-3.1597	-3.1580	-.1715	-.6952
5	-.7610	-1.5394	-.7615	-.1436	-.7402	-1.5211	-7.5815	-2.9976
6	-.7415	-1.5199	-.1713	-.6954	-.7594	-1.5403	-2.6935	-7.5655
7	-2.4996	-2.4992	.4365	-.7957	-2.7481	-.9318	.4369	-.7952
8	-2.4996	-2.4990	-.7938	.5587	-2.4569	-.6713	-.7940	.5597
9	-.0981	-2.5004	-2.7443	-2.4557	-8.1041	-4.3654	-.9331	-.6737
10	-2.5004	-.1014	-.9295	-.6714	-4.3615	-3.5986	-2.7477	-2.4575
11	-2.7443	-.9295	-.0990	-2.4995	-2.4988	-2.4980	-.9490	.5008
12	-2.4557	-.6714	-2.4995	-.0992	-2.4987	-2.4978	.5004	-.6521
13	-8.1041	-4.3615	-2.4988	-2.4987	-.0988	-2.4990	-.8864	-.7148
14	-4.3654	-3.5986	-2.4980	-2.4978	-2.4990	-.1020	-2.7023	-2.4997
15	-.9331	-2.7477	-.9490	.5004	-.8864	-2.7023	-.0994	-2.5014
16	-.6737	-2.4575	.5008	-.6521	-.7148	-2.4997	-2.5014	-.0995
17	-3.5957	-4.3646	-2.6993	-2.4989	-4.3629	-8.1092	-2.5004	-2.5002
18	-4.3659	-8.1058	-.8857	-.7158	-3.5968	-4.3677	-2.5010	-2.5009
	17	18						
1	-.7601	-1.5387						
2	-.7407	-1.5193						
3	-1.5176	-.7421						
4	-1.5370	-.7614						
5	-3.0016	-3.0017						
6	-3.1617	-3.1618						
7	-.9312	-2.7469						
8	-.6705	-2.4551						
9	-3.5957	-4.3659						
10	-4.3646	-8.1058						
11	-2.6993	-.8857						
12	-2.4989	-.7158						
13	-4.3629	-3.5968						
14	-8.1092	-4.3677						
15	-2.5004	-2.5010						
16	-2.5002	-2.5009						

14	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
15	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.5815	.0000	.0000	.0000
16	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.5655	.0000	.0000
17	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
18	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
2	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
3	.0000	.0000	-7.5799	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
4	.0000	.0000	.0000	-7.5641	.0000	.0000	.0000	.0000
5	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.5815	.0000
6	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.5655
7	-2.4996	-2.4992	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
8	-2.4996	-2.4990	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
9	.0000	-2.5004	.0000	.0000	-8.1041	.0000	.0000	.0000
10	-2.5004	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
11	.0000	.0000	.0000	-2.4995	-2.4988	-2.4980	.0000	.0000
12	.0000	.0000	-2.4995	.0000	-2.4987	-2.4978	.0000	.0000
13	-8.1041	.0000	-2.4988	-2.4987	.0000	-2.4990	.0000	.0000
14	.0000	.0000	-2.4980	-2.4978	-2.4990	.0000	.0000	.0000
15	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.5014
16	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.5014	.0000
17	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-8.1092	-2.5004	-2.5002
18	.0000	-8.1058	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.5010	-2.5009

17	18	
1	.0000	.0000
2	.0000	.0000
3	.0000	.0000
4	.0000	.0000
5	.0000	.0000
6	.0000	.0000
7	.0000	.0000
8	.0000	.0000
9	.0000	.0000
10	.0000	-8.1058
11	.0000	.0000
12	.0000	.0000
13	.0000	.0000
14	-8.1092	.0000
15	-2.5004	-2.5010
16	-2.5002	-2.5009
17	.0000	-2.5014
18	-2.5014	.0000

EHT den gelen özdegerler

HAO dan gelen özdegerler

Ei-alfa

37.7783000	37.7783031	51.5779902
37.7778000	37.7778005	51.5774902
16.3662000	16.3662000	30.1658902
9.74360000	9.74360093	23.5432902
9.74350000	9.74349992	23.5431902
6.71810000	6.71810164	20.5177902
6.71800000	6.71799998	20.5176902
1.55430000	1.55430040	15.3539902
-3.39410000	-3.39410024	10.4055902
-13.1973000	-13.1972992	.602390247
-13.1973000	-13.1973008	.602390247
-14.9333000	-14.9332999	-1.13360975
-14.9333000	-14.9333000	-1.13360975
-15.3888000	-15.3888005	-1.58910975
-16.6922000	-16.6922005	-2.89250975
-21.0413000	-21.0413007	-7.24160975
-21.0414000	-21.0413994	-7.24170975
-28.3593000	-28.3592996	-14.5596098

EHTD (kulakli)

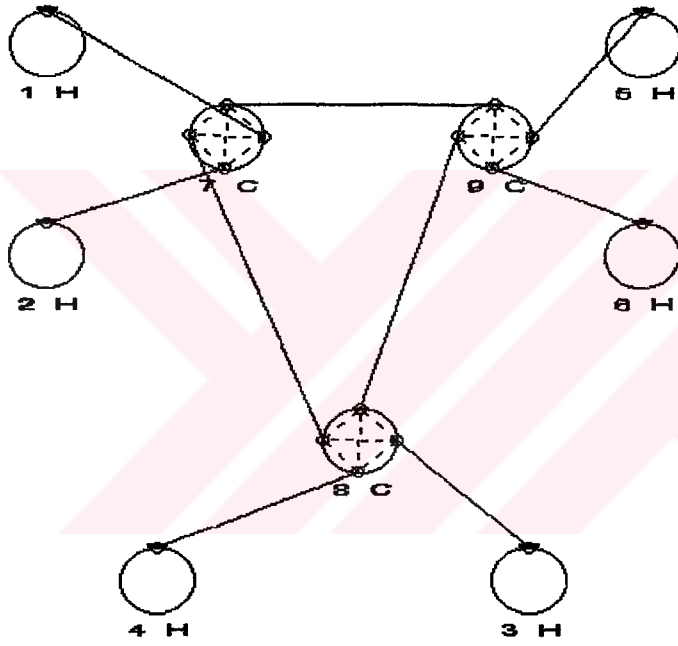
EHTD (kulaksiz)

30.0758943	29.9492114
30.0625822	29.9335662
29.0571101	29.1907848
29.0509552	29.1803232
20.7545879	20.5698316
20.3422699	20.5370987
18.7141345	18.5599215
14.5983324	14.6340714
14.5886850	14.6254943
-3.49849728	-3.55952063
-3.91706312	-3.94567594

-4.62789391
-4.62941840
-4.79341852
-4.79780435
-6.83282371
-9.86423460
-9.86839704

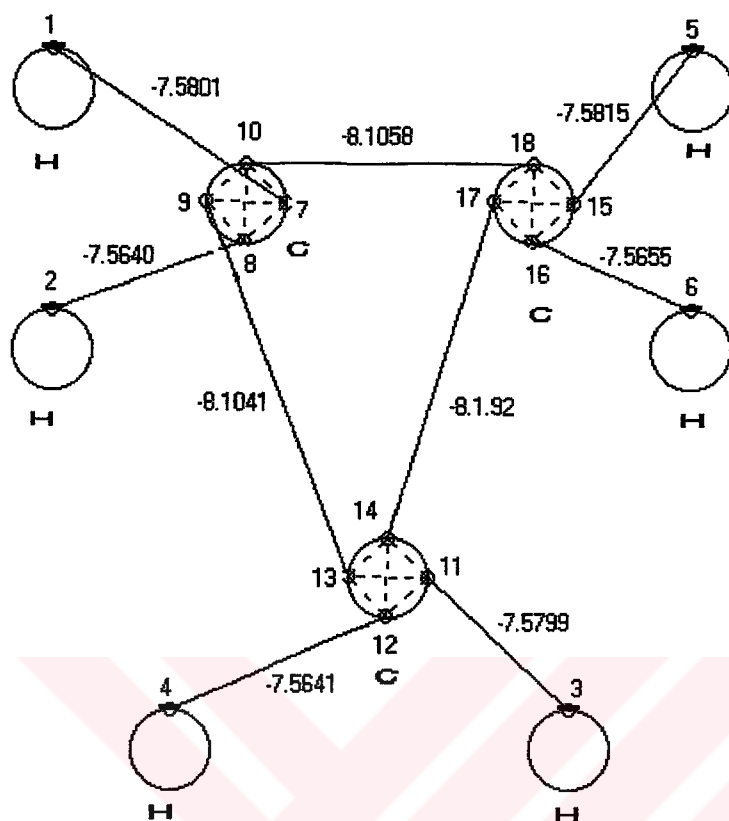
-4.61403604
-4.61537994
-4.85468863
-4.85862766
-6.76931534
-9.71201761
-9.71643047

Şekil 3.8



Şekil 3.8'de bilgisayar yazılımı ile elde edilen resim (nicel yolla), Şekil 3.9'da da hamilton düzeyindeki DN'ler arasındaki etkileşim değerlerini gösteren resim görülmektedir.

Şekil 3.9



C4H8.LOG

HyperChem log start -- Mon Aug 17 15:08:20 1998.
 Geometry optimization, MolecularMechanics, molecule = AC4H8.HIN.
 mmplus
 PolakRibiere optimizer
 Default parameters being used...
 Energy=37.624008 Gradient=0.000082 Converged=NO (14 cycles 37 points).
 Energy=37.624008 Gradient=0.000082 Converged=YES (14 cycles 37 points).
 Bond=0.693171 Angle=27.0993 Dihedral=7.83146 Vdw=2.75102 Stretch-bend=-
 0.750959 Electrostatic=0.
 Single Point, SemiEmpirical, molecule = AC4H8.HIN.
 ExtendedHuckel
 Extended-Huckel Calculation:
 Singlet State Calculation
 Number of Electrons = 24
 Starting Extended-Huckel calculation with 24 orbitals
 Charge on the System = 0
 Total Orbitals = 24
 Number of Double Occupied Levels = 12
 Unweighted Huckel Constant = 1.7500000
 d Orbitals on Si...Cl If Any Not Included
 Energy=-9760.980110

RESULTS

Sum of One-Electron Energies = -9760.9801101 (kcal/mol)
 Sum of One-Electron Energies = -15.555599397 (a.u.)

EIGENVALUES (eV)

-28.600451	-23.002892	-23.002890	-19.296377	-16.709557
-15.753570	-15.454629	-15.454627	-14.266479	-14.087556
-13.002453	-13.002449	-0.300996	0.669149	0.669155
1.173519	6.093113	6.093122	7.727725	11.309024
15.196871	25.484488	25.484507	48.779808	

ATOMIC ORBITAL ELECTRON POPULATIONS

1.216356	0.947739	0.950134	0.931594	1.216356
----------	----------	----------	----------	----------

0.950495	0.948079	0.930893	1.216356	0.950495
0.948079	0.930893	1.216356	0.947739	0.950134
0.931594	0.977089	0.977089	0.977089	0.977089
0.977089	0.977089	0.977089	0.977089	

NET CHARGES AND COORDINATES

Atom	Z	Charge	Coordinates (a.u.)		
			x	y	z
1	6	-0.045823	-3.66515	3.27121	0.06407
2	6	-0.045823	-0.71613	3.28968	-0.06372
3	6	-0.045823	-3.64037	0.32306	0.20952
4	6	-0.045823	-0.69136	0.34153	0.08173
5	1	0.022911	-4.55308	3.98790	-1.65743
6	1	0.022911	-4.40537	4.15853	1.77590
7	1	0.022911	0.15824	4.18712	1.57815
8	1	0.022911	0.01054	4.01649	-1.85519
9	1	0.022911	-4.51475	-0.57438	-1.43235
10	1	0.022911	-4.36704	-0.40375	2.00099
11	1	0.022911	0.04887	-0.54579	-1.63010
12	1	0.022911	0.19658	-0.37516	1.80323

Alpha: Orbital Index = 1 Orbital Energy = -28.600451 (eV)

HyperChem log stop -- Mon Aug 17 15:09:05 1998.

C4H8.INP

c4h8

```

8 4 0 0 0 00000 1.75
-2.413132 2.113587 -.878438
-2.334846 2.204021 .941227
.083867 2.219173 .836419
.005586 2.128740 -.983251
-2.392817 -.304421 -.759145
-2.314531 -.213987 1.060525
.025901 -.289269 -.863953
.104187 -.198835 .955712
-1.942529 1.733741 .033957
-.379549 1.743530 -.033772
-1.929396 .171222 .111046
-.366421 .181011 .043317

```

C C C C

C4H8.OUT

C4H8

Extended Hückel calculation

input geometry

Atom	x	y	z		n	S		n	P	
						exp	coul		exp	coul
H 1	-2.413	2.114	-.878	1	1	1.300	-13.600			
H 2	-2.335	2.204	.941	1	1	1.300	-13.600			
H 3	.084	2.219	.836	1	1	1.300	-13.600			
H 4	.006	2.129	-.983	1	1	1.300	-13.600			
H 5	-2.393	-.304	-.759	1	1	1.300	-13.600			
H 6	-2.315	-.214	1.061	1	1	1.300	-13.600			
H 7	.026	-.289	-.864	1	1	1.300	-13.600			
H 8	.104	-.199	.956	1	1	1.300	-13.600			
C 9	-1.943	1.734	.034	2	1	1.625	-21.400	2	1.625	-11.400
C 10	-.380	1.744	-.034	2	1	1.625	-21.400	2	1.625	-11.400
C 11	-1.929	.171	.111	2	1	1.625	-21.400	2	1.625	-11.400
C 12	-.366	.181	.043	2	1	1.625	-21.400	2	1.625	-11.400

Charge = 0 iprint = 0 Hueckel constant = 1.750

Distance matrix

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.0000	1.8236	3.0310	2.4210	2.4210	3.0310	3.4239	3.8792
2	1.8236	.0000	2.4210	3.0310	3.0310	2.4210	3.8792	3.4239
3	3.0310	2.4210	.0000	1.8236	3.8792	3.4239	3.0310	2.4210
4	2.4210	3.0310	1.8236	.0000	3.4239	3.8792	2.4210	3.0310
5	2.4210	3.0310	3.8792	3.4239	.0000	1.8236	2.4210	3.0310
6	3.0310	2.4210	3.4239	3.8792	1.8236	.0000	3.0310	2.4210
7	3.4239	3.8792	3.0310	2.4210	2.4210	3.0310	.0000	1.8236

8	3.8792	3.4239	2.4210	3.0310	3.0310	2.4210	1.8236	.0000
9	1.0946	1.0946	2.2329	2.2329	2.2329	2.2329	2.9620	2.9620
10	2.2329	2.2329	1.0946	1.0946	2.9620	2.9620	2.2329	2.2329
11	2.2329	2.2329	2.9620	2.9620	1.0946	1.0946	2.2329	2.2329
12	2.9620	2.9620	2.2329	2.2329	2.2329	2.2329	1.0946	1.0946
	9	10	11	12				
1	1.0946	2.2329	2.2329	2.9620				
2	1.0946	2.2329	2.2329	2.9620				
3	2.2329	1.0946	2.9620	2.2329				
4	2.2329	1.0946	2.9620	2.2329				
5	2.2329	2.9620	1.0946	2.2329				
6	2.2329	2.9620	1.0946	2.2329				
7	2.9620	2.2329	2.2329	1.0946				
8	2.9620	2.2329	2.2329	1.0946				
9	.0000	1.5645	1.5645	2.2125				
10	1.5645	.0000	2.2125	1.5645				
11	1.5645	2.2125	.0000	1.5645				
12	2.2125	1.5645	1.5645	.0000				

Overlap matrix

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1.0000	.1380	.0157	.0490	.0490	.0157	.0073	.0030
2	.1380	1.0000	.0490	.0157	.0157	.0490	.0030	.0073
3	.0157	.0490	1.0000	.1380	.0030	.0073	.0157	.0490
4	.0490	.0157	.1380	1.0000	.0073	.0030	.0490	.0157
5	.0490	.0157	.0030	.0073	1.0000	.1380	.0490	.0157
6	.0157	.0490	.0073	.0030	.1380	1.0000	.0157	.0490
7	.0073	.0030	.0157	.0490	.0490	.0157	1.0000	.1380
8	.0030	.0073	.0490	.0157	.0157	.0490	.1380	1.0000
9	.4898	.4898	.0908	.0908	.0908	.0908	.0237	.0237
10	-.2106	-.1756	.1062	.1021	-.0236	-.0195	.0216	.0224
11	.1700	.2105	.0254	.0207	-.1068	-.1021	-.0222	-.0212
12	-.4083	.4060	.0420	-.0533	-.0416	.0538	-.0098	.0101
13	.0908	.0908	.4898	.4898	.0237	.0237	.0908	.0908
14	-.1066	-.1025	.2074	.1723	-.0221	-.0212	.0212	.0253
15	.0194	.0241	.2129	.1724	-.0224	-.0215	-.1065	-.1018
16	-.0443	.0511	.3894	-.4249	-.0080	.0120	-.0435	.0519
17	.0908	.0908	.0238	.0237	.4898	.4898	.0908	.0908
18	-.0253	-.0212	.0221	.0212	-.2074	-.1723	.1025	.1066
19	-.1018	.1065	.0224	.0215	-.2129	-.1724	-.0241	-.0194
20	-.0519	.0435	.0080	-.0120	-.3894	.4249	-.0511	.0443
21	.0237	.0237	.0908	.0908	.0908	.0908	.4898	.4898
22	-.0224	-.0216	.0236	.0195	-.1062	-.1021	.1756	.2106
23	.0212	.0222	.1068	.1021	-.0254	-.0207	-.2105	-.1700
24	-.0101	.0098	.0416	-.0538	-.0420	.0533	-.4060	.4083
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	.4898	-.2106	.1700	-.4083	.0908	-.1066	.0194	-.0443
2	.4898	-.1756	.2105	.4060	.0908	-.1025	.0241	.0511
3	.0908	.1062	.0254	.0420	.4898	.2074	.2129	.3894
4	.0908	.1021	.0207	-.0533	.4898	.1723	.1724	-.4249
5	.0908	-.0236	-.1068	-.0416	.0237	-.0221	-.0224	-.0080
6	.0908	-.0195	-.1021	.0538	.0237	-.0212	-.0215	.0120
7	.0237	.0216	-.0222	-.0098	.0908	.0212	-.1065	-.0435
8	.0237	.0224	-.0212	.0101	.0908	.0253	-.1018	.0519
9	1.0000	.0000	.0000	.0000	.3296	-.3561	-.0022	.0154
10	.0000	1.0000	.0000	.0000	.3561	-.3258	-.0032	.0221
11	.0000	.0000	1.0000	.0000	.0022	-.0032	.1838	.0001
12	.0000	.0000	.0000	1.0000	-.0154	.0221	.0001	.1829
13	.3296	.3561	.0022	-.0154	1.0000	.0000	.0000	.0000
14	-.3561	-.3258	-.0032	.0221	.0000	1.0000	.0000	.0000
15	-.0022	-.0032	.1838	.0001	.0000	.0000	1.0000	.0000
16	.0154	.0221	.0001	.1829	.0000	.0000	.0000	1.0000
17	.3296	.0030	-.3560	.0176	.1238	-.1095	-.1111	.0102
18	-.0030	.1838	.0043	-.0002	.1095	-.0648	-.1194	.0110
19	.3560	.0043	-.3255	.0251	.1111	-.1194	-.0682	.0112
20	-.0176	-.0002	.0251	.1826	-.0102	.0110	.0112	.0518
21	.1238	.1114	-.1097	.0007	.3296	.0030	-.3560	.0176
22	-.1114	-.0688	.1199	-.0007	-.0030	.1838	.0043	-.0002
23	.1097	.1199	-.0652	.0007	.3560	.0043	-.3255	.0251
24	-.0007	-.0007	.0007	.0528	-.0176	-.0002	.0251	.1826
	17	18	19	20	21	22	23	24
1	.0908	-.0253	.1018	-.0519	.0237	-.0224	.0212	-.0101
2	.0908	-.0212	.1065	.0435	.0237	-.0216	.0222	.0098
3	.0238	.0221	.0224	.0080	.0908	.0236	.1068	.0416
4	.0237	.0212	.0215	-.0120	.0908	.0195	.1021	-.0538
5	.4898	-.2074	-.2129	-.3894	.0908	-.1062	-.0254	-.0420

6	.4898	-.1723	-.1724	.4249	.0908	-.1021	-.0207	.0533
7	.0908	.1025	-.0241	-.0511	.4898	.1756	-.2105	-.4060
8	.0908	.1066	-.0194	.0443	.4898	.2106	-.1700	.4083
9	.3296	-.0030	.3560	-.0176	.1238	-.1114	.1097	-.0007
10	.0030	.1838	.0043	-.0002	.1114	-.0688	.1199	-.0007
11	-.3560	.0043	-.3255	.0251	-.1097	.1199	-.0652	.0007
12	.0176	-.0002	.0251	.1826	.0007	-.0007	.0007	.0528
13	.1238	.1095	.1111	-.0102	.3296	-.0030	.3560	-.0176
14	-.1095	-.0648	-.1194	.0110	.0030	.1838	.0043	-.0002
15	-.1111	-.1194	-.0682	.0112	-.3560	.0043	-.3255	.0251
16	.0102	.0110	.0112	.0518	.0176	-.0002	.0251	.1826
17	1.0000	.0000	.0000	.0000	.3296	-.3561	-.0022	.0154
18	.0000	1.0000	.0000	.0000	.3561	-.3258	-.0032	.0221
19	.0000	.0000	1.0000	.0000	.0022	-.0032	.1838	.0001
20	.0000	.0000	.0000	1.0000	-.0154	.0221	.0001	.1829
21	.3296	.3561	.0022	-.0154	1.0000	.0000	.0000	.0000
22	-.3561	-.3258	-.0032	.0221	.0000	1.0000	.0000	.0000
23	-.0022	-.0032	.1838	.0001	.0000	.0000	1.0000	.0000
24	.0154	.0221	.0001	.1829	.0000	.0000	.0000	1.0000

starting main calculations

Results of calculation C4H8

Energy levels (eV)

E(1) =	48.21162	.0000	E(13) =	-13.00859	2.0000
E(2) =	25.20394	.0000	E(14) =	-13.00860	2.0000
E(3) =	25.20352	.0000	E(15) =	-14.08497	2.0000
E(4) =	15.04240	.0000	E(16) =	-14.27311	2.0000
E(5) =	11.17790	.0000	E(17) =	-15.45493	2.0000
E(6) =	7.62402	.0000	E(18) =	-15.45494	2.0000
E(7) =	6.00381	.0000	E(19) =	-15.75112	2.0000
E(8) =	6.00360	.0000	E(20) =	-16.70425	2.0000
E(9) =	1.11936	.0000	E(21) =	-19.30053	2.0000
E(10) =	.60444	.0000	E(22) =	-23.00222	2.0000
E(11) =	.60439	.0000	E(23) =	-23.00224	2.0000
E(12) =	-.36264	.0000	E(24) =	-28.58788	2.0000

Sum of one-electron energies = -423.26671234 eV.

Wave Functions

MO's in columns, AO's in rows

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.2917	-.5745	-.0008	.4568	-.4296	-.3652	-.6139	.0072
2	.2917	-.5745	-.0008	.4568	.4296	-.3652	.6139	-.0072
3	-.2917	-.0008	.5745	.4568	-.4295	.3652	.0072	.6139
4	-.2917	-.0008	.5745	.4568	.4295	.3652	-.0072	-.6139
5	-.2917	.0008	-.5745	.4568	.4295	.3652	.0071	.6139
6	-.2917	.0008	-.5745	.4568	-.4295	.3652	-.0071	-.6139
7	.2917	.5745	.0008	.4568	-.4295	-.3652	.6139	-.0072
8	.2917	.5745	.0008	.4568	.4296	-.3652	-.6139	.0072
9	-1.0429	1.0604	.0014	-.5133	.0000	.0297	.0000	.0000
10	-.2529	-.1117	.3250	.2664	-.0308	-.5148	-.0365	.0004
11	.2492	.1092	.3300	-.2625	-.0355	.5072	-.0421	.0005
12	-.0015	-.0006	-.0304	.0016	-.7150	-.0031	-.8481	.0099
13	1.0429	.0014	-1.0604	-.5133	.0000	-.0297	.0000	.0000
14	-.2487	.3308	-.1090	-.2620	.0308	-.5062	-.0004	-.0365
15	-.2523	-.3256	-.1114	-.2658	.0355	-.5136	-.0005	-.0421
16	.0232	.0019	.0102	.0245	.7150	.0473	-.0099	-.8481
17	1.0429	-.0014	1.0604	-.5133	.0000	-.0297	.0000	.0000
18	.2487	.3308	-.1090	.2620	.0308	.5062	.0004	.0365
19	.2523	-.3256	-.1114	.2658	.0355	.5136	.0005	.0421
20	-.0232	.0019	.0102	-.0245	.7150	-.0473	.0099	.8481
21	-1.0429	-1.0604	-.0014	-.5133	.0000	.0297	.0000	.0000
22	.2529	-.1117	.3250	-.2664	-.0308	.5148	.0365	-.0004
23	-.2492	.1092	.3300	.2625	-.0355	-.5072	.0421	-.0005
24	.0015	-.0006	-.0304	-.0016	-.7150	.0031	.8481	-.0099
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	.4335	.3093	-.0532	.0000	-.0155	-.1801	.0000	-.2594
2	-.4336	.3093	-.0532	.0000	-.0155	-.1801	.0000	.2594
3	-.4336	.0532	.3093	.0000	-.1801	.0155	.0000	-.2594
4	.4336	.0532	.3093	.0000	-.1801	.0155	.0000	.2594
5	.4336	-.0532	-.3093	.0000	.1801	-.0155	.0000	.2594
6	-.4336	-.0532	-.3093	.0000	.1801	-.0155	.0000	-.2594
7	.4336	-.3093	.0532	.0000	.0155	.1801	.0000	-.2594
8	-.4336	-.3093	.0532	.0000	.0155	.1801	.0000	.2594
9	.0000	.1530	-.0263	.0000	.0078	.0904	.0000	.0000
10	.0206	.5013	-.4769	-.5302	.3318	.2622	-.2901	.0117

11	.0238	-.6244	-.2890	-.5378	.2870	-.3111	-.2943	.0135
12	.4779	.0095	.0349	.0495	-.0285	.0042	.0271	.2723
13	.0000	.0263	.1530	.0000	.0904	-.0078	.0000	.0000
14	.0206	.2902	-.6235	-.5392	-.3106	-.2878	.2950	-.0117
15	.0238	-.4774	-.4999	.5311	-.2615	.3323	-.2906	-.0135
16	.4780	.0113	.0517	-.0032	.0264	-.0041	.0018	-.2723
17	.0000	-.0263	-.1530	.0000	-.0904	.0078	.0000	.0000
18	.0206	.2902	-.6235	.5391	-.3106	-.2878	-.2950	-.0117
19	.0238	-.4775	-.4998	-.5311	-.2615	.3323	.2906	-.0135
20	.4780	.0112	.0517	.0032	.0264	-.0041	-.0018	-.2723
21	.0000	-.1530	.0263	.0000	-.0078	-.0904	.0000	.0000
22	.0206	.5013	-.4770	.5301	.3318	.2622	.2901	.0117
23	.0238	-.6244	-.2891	.5378	.2870	-.3111	.2943	.0135
24	.4780	.0095	.0349	-.0495	-.0285	.0042	-.0271	.2723
	17	18	19	20	21	22	23	24
1	.0003	.3177	-.1550	.1861	.1929	.0076	.1745	.0304
2	-.0003	-.3177	-.1550	-.1861	.1929	.0076	.1745	.0304
3	-.3177	.0003	-.1550	-.1861	-.1929	.1745	-.0076	.0304
4	.3177	-.0003	-.1550	.1861	-.1929	.1745	-.0076	.0304
5	-.3177	.0003	-.1550	.1861	-.1929	-.1745	.0076	.0304
6	.3177	-.0003	-.1550	-.1861	-.1929	-.1745	.0076	.0304
7	-.0003	-.3177	-.1550	.1861	.1929	-.0076	-.1745	.0304
8	.0003	.3177	-.1550	-.1861	.1929	-.0076	-.1745	.0304
9	.0000	.0000	.0241	.0000	.2527	.0202	.4662	.3486
10	.0000	-.0162	.2215	-.0108	-.1036	.0754	-.0255	.0023
11	.0000	-.0188	-.2182	-.0124	.1021	.0784	.0185	-.0023
12	-.0004	-.3775	.0013	-.2504	-.0006	-.0071	.0002	.0000
13	.0000	.0000	.0241	.0000	-.2527	.4662	-.0202	.3486
14	-.0162	.0000	-.2178	-.0108	-.1019	.0185	-.0786	-.0023
15	-.0188	.0000	-.2210	-.0124	-.1034	.0255	.0755	-.0023
16	-.3775	.0004	.0204	-.2504	.0095	-.0021	-.0004	.0002
17	.0000	.0000	.0241	.0000	-.2527	-.4662	.0202	.3486
18	.0162	.0000	.2178	-.0108	.1019	.0185	-.0786	.0023
19	.0188	.0000	.2210	-.0124	.1034	.0255	.0755	.0023
20	.3775	-.0003	-.0204	-.2504	-.0095	-.0021	-.0004	-.0002
21	.0000	.0000	.0241	.0000	.2527	-.0202	-.4662	.3486
22	.0000	.0162	-.2215	-.0108	-.1036	.0754	-.0255	-.0023
23	.0000	.0188	.2182	-.0124	-.1021	.0784	.0185	.0023
24	.0004	.3775	-.0013	-.2504	.0006	-.0071	.0002	.0000

Reduced overlap population matrix, atom by atom

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.6564	-.0428	.0013	-.0088	-.0088	.0013	.0000	.0000
2	-.0428	.6564	-.0088	.0013	.0013	-.0088	.0000	.0000
3	.0013	-.0088	.6564	-.0428	.0000	.0000	.0013	-.0088
4	-.0088	.0013	-.0428	.6564	.0000	.0000	-.0088	.0013
5	-.0088	.0013	.0000	.0000	.6564	-.0428	-.0088	.0013
6	.0013	-.0088	.0000	.0000	-.0428	.6564	.0013	-.0088
7	.0000	.0000	.0013	-.0088	-.0088	.0013	.6564	-.0428
8	.0000	.0000	-.0088	.0013	.0013	-.0088	-.0428	.6564
9	.7926	.7926	-.0462	-.0462	-.0462	-.0462	-.0007	-.0007
10	-.0462	-.0462	.7926	.7926	-.0007	-.0007	-.0462	-.0462
11	-.0462	-.0462	-.0007	-.0007	.7926	.7926	-.0462	-.0462
12	-.0007	-.0007	-.0462	-.0462	-.0462	-.0462	.7926	.7926
	9	10	11	12				
1	.7926	-.0462	-.0462	-.0007				
2	.7926	-.0462	-.0462	-.0007				
3	-.0462	.7926	-.0007	-.0462				
4	-.0462	.7926	-.0007	-.0462				
5	-.0462	-.0007	.7926	-.0462				
6	-.0462	-.0007	.7926	-.0462				
7	-.0007	-.0462	-.0462	.7926				
8	-.0007	-.0462	-.0462	.7926				
9	2.7068	.6956	.6956	-.1132				
10	.6956	2.7068	-.1132	.6956				
11	.6956	-.1132	2.7068	.6956				
12	-.1132	.6956	.6956	2.7068				

Reduced charge matrix, MO's in columns, atoms in rows

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.0452	.2181	.0000	.1648	.0967	.0766	.2312	.0000
2	.0452	.2181	.0000	.1648	.0967	.0766	.2312	.0000
3	.0452	.0000	.2181	.1647	.0967	.0766	.0000	.2312
4	.0452	.0000	.2181	.1647	.0967	.0766	.0000	.2312
5	.0452	.0000	.2181	.1647	.0967	.0766	.0000	.2312

6	.0452	.0000	.2181	.1647	.0967	.0766	.0000	.2312
7	.0452	.2181	.0000	.1648	.0967	.0766	.2312	.0000
8	.0452	.2181	.0000	.1648	.0967	.0766	.2312	.0000
9	.4096	.3941	.1696	.1705	.3066	.3467	.5375	.0001
10	.4096	.1696	.3941	.1705	.3066	.3467	.0001	.5375
11	.4096	.1696	.3941	.1705	.3066	.3467	.0001	.5375
12	.4096	.3941	.1696	.1705	.3066	.3467	.5375	.0001
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	.1374	.0512	.0015	.0000	.0005	.0737	.0000	.1533
2	.1374	.0512	.0015	.0000	.0005	.0737	.0000	.1533
3	.1374	.0015	.0512	.0000	.0737	.0005	.0000	.1533
4	.1374	.0015	.0512	.0000	.0737	.0005	.0000	.1533
5	.1374	.0015	.0512	.0000	.0737	.0005	.0000	.1533
6	.1374	.0015	.0512	.0000	.0737	.0005	.0000	.1533
7	.1374	.0512	.0015	.0000	.0005	.0737	.0000	.1533
8	.1374	.0512	.0015	.0000	.0005	.0737	.0000	.1533
9	.2252	.5865	.3081	.5000	.4414	.4100	.5000	.1934
10	.2252	.3081	.5865	.5000	.4100	.4414	.5000	.1934
11	.2252	.3082	.5865	.5000	.4100	.4414	.5000	.1934
12	.2252	.5865	.3082	.5000	.4414	.4100	.5000	.1934
	17	18	19	20	21	22	23	24
1	.0000	.2688	.0682	.1126	.1281	.0003	.1546	.0171
2	.0000	.2688	.0682	.1126	.1281	.0003	.1546	.0171
3	.2688	.0000	.0682	.1126	.1281	.1546	.0003	.0171
4	.2688	.0000	.0682	.1126	.1281	.1546	.0003	.0171
5	.2688	.0000	.0682	.1126	.1281	.1546	.0003	.0171
6	.2688	.0000	.0682	.1126	.1281	.1546	.0003	.0171
7	.0000	.2688	.0682	.1126	.1281	.0003	.1546	.0171
8	.0000	.2688	.0682	.1126	.1281	.0003	.1546	.0171
9	.0000	.4624	.3637	.2748	.2437	.0900	.6001	.4658
10	.4624	.0000	.3637	.2748	.2437	.6001	.0900	.4658
11	.4624	.0000	.3637	.2748	.2437	.6001	.0900	.4658
12	.0000	.4624	.3637	.2748	.2437	.0900	.6001	.4658

Atom		Net chg.	Atomic orbital occupation for given MO occupation								
			S	Px	Py	Pz	Dx2-y2	Dz2	Dxy	Dxz	Dyz
H	1	.023	.977								
H	2	.023	.977								
H	3	.023	.977								
H	4	.023	.977								
H	5	.023	.977								
H	6	.023	.977								
H	7	.023	.977								
H	8	.023	.977								
C	9	-.045	1.217	.947	.950	.931					
C	10	-.045	1.217	.950	.948	.930					
C	11	-.045	1.217	.950	.948	.930					
C	12	-.045	1.217	.947	.950	.931					

Reduced energy matrix, atom by atom

	1	2	3	4	5	6					
1	-8.9273	1.0179	-.0305	.2093	.2093	-.0305					
2	1.0179	-8.9273	.2093	-.0305	-.0305	.2093					
3	-.0305	.2093	-8.9274	1.0179	.0006	.0000					
4	.2093	-.0305	1.0179	-8.9274	.0000	.0006					
5	.2093	-.0305	.0006	.0000	-8.9274	1.0179					
6	-.0305	.2093	.0000	.0006	1.0179	-8.9274					
7	.0000	.0006	-.0305	.2093	.2093	-.0305					
8	.0006	.0000	.2093	-.0305	-.0305	.2093					
9	-19.4066	-19.4066	1.1427	1.1427	1.1427	1.1427					
10	1.1427	1.1427	-19.4066	-19.4065	.0224	.0224					
11	1.1427	1.1427	.0224	.0224	-19.4065	-19.4065					
12	.0224	.0224	1.1427	1.1427	1.1427	1.1427					
	7	8	9	10	11	12					
1	.0000	.0006	-19.4066	1.1427	1.1427	.0224					
2	.0006	.0000	-19.4066	1.1427	1.1427	.0224					
3	-.0305	.2093	1.1427	-19.4066	.0224	1.1427					
4	.2093	-.0305	1.1427	-19.4065	.0224	1.1427					
5	.2093	-.0305	1.1427	.0224	-19.4065	1.1427					
6	-.0305	.2093	1.1427	.0224	-19.4065	1.1427					
7	-8.9273	1.0179	.0224	1.1427	1.1427	-19.4066					
8	1.0179	-8.9273	.0224	1.1427	1.1427	-19.4066					
9	.0224	.0224	-39.0953	-17.6234	-17.6234	3.1566					

10	1.1427	1.1427	-17.6234	-39.0953	3.1566	-17.6234
11	1.1427	1.1427	-17.6234	3.1566	-39.0953	-17.6235
12	-19.4066	-19.4066	3.1566	-17.6234	-17.6235	-39.0953

C4H8.HAO

C4H8

Atom sembolleri, sıra numaraları, x,y ve z koordinatları

H	1	-2.4130	2.1140	-.8780
H	2	-2.3350	2.2040	.9410
H	3	.0840	2.2190	.8360
H	4	.0060	2.1290	-.9830
H	5	-2.3930	-.3040	-.7590
H	6	-2.3150	-.2140	1.0610
H	7	.0260	-.2890	-.8640
H	8	.1040	-.1990	.9560
C	9	-1.9430	1.7340	.0340
C	10	-.3800	1.7440	-.0340
C	11	-1.9290	.1710	.1110
C	12	-.3660	.1810	.0430

9 atomu için dörtyüzlü melezleme dizeyi

.5000	.8660	.0000	.0000
.5000	-.2887	.8165	.0000
.5000	-.2887	-.4082	.7071
.5000	-.2887	-.4082	-.7071

9 atomu için döndürülmüş melezleme dizeyi

.5000	-.3720	.3008	-.7219
.5000	-.3410	.3996	.6885
.5000	.8521	.1521	-.0294
.5000	-.1391	-.8525	.0628

10 atomu için dörtyüzlü melezleme dizeyi

.5000	.8660	.0000	.0000
.5000	-.2887	.8165	.0000
.5000	-.2887	-.4082	.7071
.5000	-.2887	-.4082	-.7071

10 atomu için döndürülmüş melezleme dizeyi

.5000	.3672	.3759	.6884
.5000	.3352	.3350	-.7248
.5000	-.8543	.1415	.0152
.5000	.1518	-.8523	.0212

11 atomu için dörtyüzlü melezleme dizeyi

.5000	.8660	.0000	.0000
.5000	-.2887	.8165	.0000
.5000	-.2887	-.4082	.7071
.5000	-.2887	-.4082	-.7071

11 atomu için döndürülmüş melezleme dizeyi

.5000	-.3672	-.3759	-.6884
.5000	-.3352	-.3350	.7248
.5000	-.1518	.8523	-.0212
.5000	.8543	-.1415	-.0152

12 atomu için dörtyüzlü melezleme dizeyi

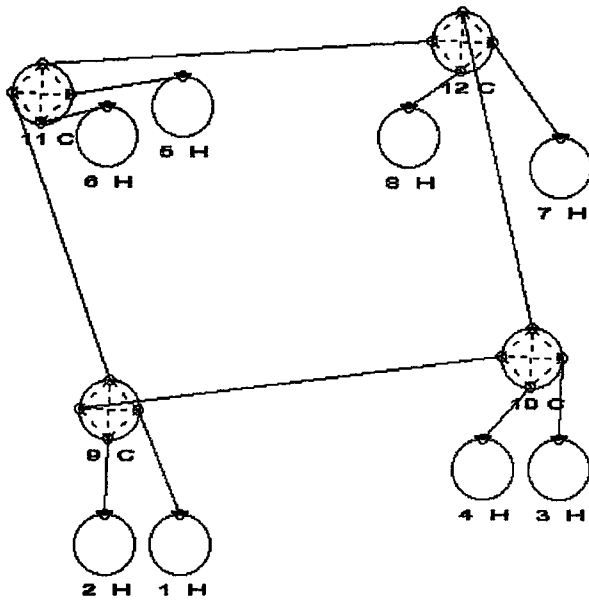
.5000	.8660	.0000	.0000
.5000	-.2887	.8165	.0000
.5000	-.2887	-.4082	.7071
.5000	-.2887	-.4082	-.7071

12 atomu için döndürülmüş melezleme dizeyi

.5000	.3103	-.3720	-.7179
.5000	.4002	-.3313	.6929
.5000	-.8508	-.1506	.0586
.5000	.1404	.8539	-.0336

Ortalama yi köşegenden çıkarıyor.
 $h_{uv} = h_{uv} - (\text{ortalama}) \cdot S_{uv}$
Ortalama = -13.800540 eV
h_VIF de en yakın olmayan komsular arası çizgiler ihmal edildi.
Tüm atom içi çizgiler .0000 küçük olacak şekilde $S_{uv} \cdot (\text{ortalama})$ ya eşitlenmiştir.
Atom içi çizgileri değişmedi.

EHT den gelen özdegerler	HAO dan gelen özdegerler	Ei-alfa
48.2116000	48.2116037	62.0121371
25.2039000	25.2039027	39.0044371
25.2035000	25.2035008	39.0040371
15.0424000	15.0423992	28.8429371
11.1779000	11.1779004	24.9784371
7.62400000	7.62399795	21.4245371
6.00380000	6.00379952	19.8043371
6.00360000	6.00360015	19.8041371
1.11930000	1.11930007	14.9198371
.604400000	.604399243	14.4049371
.604300000	.604297276	14.4048371
-.362600000	-.362600706	13.4379371
-13.0085000	-13.0084995	.792037109
-13.0086000	-13.0085995	.791937109
-14.0849000	-14.0848999	-.284362891
-14.2731000	-14.2731006	-.472562891
-15.4549000	-15.4548985	-1.65436289
-15.4549000	-15.4549000	-1.65436289
-15.7511000	-15.7510992	-1.95056289
-16.7042000	-16.7042012	-2.90366289
-19.3005000	-19.3005007	-5.49996289
-23.0022000	-23.0021979	-9.20166289
-23.0022000	-23.0021984	-9.20166289
-28.5878000	-28.5878009	-14.7872629
EHTD (kulakli)	EHTD (kulaksiz)	
31.5534565	31.4514292	
30.5192223	30.6661347	
26.0390021	25.8956702	
26.0330959	25.8871865	
23.7578769	23.9834645	
23.3618371	23.3343285	
23.3582669	23.3305237	
20.3663990	20.1897166	
18.1837570	18.0281464	
16.0407087	16.1511761	
16.0329143	16.1419845	
12.8037220	12.8454609	
-3.47259293	-3.53252705	
-3.62520405	-3.65336767	
-3.82035139	-3.75279895	
-4.37138535	-4.43302628	
-4.37208744	-4.43358773	
-4.66031914	-4.66188631	
-4.66117145	-4.66271174	
-5.26269770	-5.32452502	
-6.58578020	-6.52482971	
-8.48119976	-8.35523044	
-9.42389511	-9.31245005	
-9.42734052	-9.31603377	



C5H10.LOG

HyperChem log start -- Wed Oct 27 13:27:45 1999.

Geometry optimization, MolecularMechanics, molecule = AC5H10.HIN.

mmplus

PolakRibiere optimizer

Energy=11.401362 Gradient=0.000004 Converged=YES (7 cycles 21 points).

Bond=0.326436 Angle=2.19811 Dihedral=6.32531 Vdw=2.64944 Stretch-bend=-0.0979314 Electrostatic=0.

Geometry optimization, MolecularMechanics, molecule = AC5H10.HIN.

mmplus

PolakRibiere optimizer

Energy=11.401362 Gradient=0.000015 Converged=NO (10 cycles 31 points).

Energy=11.401362 Gradient=0.000039 Converged=NO (20 cycles 57 points).

Energy=11.401362 Gradient=0.000009 Converged=NO (30 cycles 81 points).

Energy=11.401362 Gradient=0.000000 Converged=NO (40 cycles 110 points).

Energy=11.401362 Gradient=0.000000 Converged=YES (48 cycles 164 points).

Bond=0.326436 Angle=2.19811 Dihedral=6.32531 Vdw=2.64944 Stretch-bend=-0.0979315 Electrostatic=0.

Single Point, SemiEmpirical, molecule = AC5H10.HIN.

ExtendedHuckel

Extended-Huckel Calculation:

Singlet State Calculation

Number of Electrons = 30

Starting Extended-Huckel calculation with 30 orbitals

Charge on the System = 0

Total Orbitals = 30

Number of Double Occupied Levels = 15

Unweighted Huckel Constant = 1.7500000

d Orbitals on Si...Cl If Any Not Included

Energy=-12195.229737

RESULTS

Sum of One-Electron Energies = -12195.2297374 (kcal/mol)

Sum of One-Electron Energies = -19.434944668 (a.u.)

EIGENVALUES (eV)

-28.893980	-24.491890	-24.489132	-19.748705	-19.576050
-16.605711	-16.098684	-15.673738	-15.657026	-14.329493
-14.263722	-13.711019	-13.674175	-13.640439	-13.558656
0.021157	0.159822	0.249407	2.623404	3.084344

3.125594	6.003168	6.489476	6.657397	8.331486
13.780170	23.284021	23.294668	42.383198	42.441574

ATOMIC ORBITAL ELECTRON POPULATIONS

1.210605	0.937634	0.942673	0.925879	1.211465
0.934896	0.943051	0.930964	1.210605	0.948550
0.925072	0.932564	1.209392	0.954685	0.913583
0.936898	1.209392	0.910889	0.963632	0.930646
0.990561	0.992436	0.990243	0.990243	0.990561
0.992436	0.994047	0.991175	0.991175	0.994047

NET CHARGES AND COORDINATES

Atom	Z	Charge	Coordinates (a.u.)		
			x	y	z
1	6	-0.016791	-2.75376	0.14420	0.64445
2	6	-0.020375	-2.80790	3.04685	0.45289
3	6	-0.016791	-0.14286	3.85793	-0.38656
4	6	-0.014559	0.05500	-0.57175	0.53981
5	6	-0.014559	1.15461	1.41542	-1.26029
6	1	0.009439	-3.73763	-0.69525	-1.02294
7	1	0.007564	-3.69899	-0.57807	2.38590
8	1	0.009757	-3.29260	3.92064	2.31068
9	1	0.009757	-4.26379	3.66574	-0.94253
10	1	0.009439	0.91272	4.64222	1.26375
11	1	0.007564	-0.17382	5.33109	-1.89542
12	1	0.005953	0.37482	-2.54689	-0.12709
13	1	0.008825	0.92242	-0.35872	2.45120
14	1	0.008825	0.58826	0.97081	-3.24341
15	1	0.005953	3.25890	1.52597	-1.17096

Alpha: Orbital Index = 1 Orbital Energy = -28.893980 (eV)

HyperChem log stop -- Wed Oct 27 13:30:29 1999.

C5H10.INP

```

c5h10
10 5 0 0 0 00000 1.75
-1.980944 -0.368482 -0.542158
-1.960465 -0.306377 1.264527
-1.745078 2.077939 1.224660
-2.259809 1.942842 -0.499541
.483742 2.460377 .669787
-.092125 2.825478 -1.004573
.198655 -1.349852 -0.067358
.488883 -0.190122 1.299136
.311778 .514529 -1.719007
1.727217 .808764 -0.620609
-1.459493 .076426 .341558
-1.488187 1.614830 .240032
-.075716 2.044703 -0.204877
.029150 -0.303027 .286099
.611943 .750173 -0.667954
C C C C C

```

C5H10.OUT

```

c5h10
Extended Hückel calculation
input geometry

```

Atom	x	y	z		S		P		
				n	exp	coul	n	exp	coul
H 1	-1.981	-.368	-.542	1	1.300	-13.600			
H 2	-1.960	-.306	1.265	1	1.300	-13.600			
H 3	-1.745	2.078	1.225	1	1.300	-13.600			
H 4	-2.260	1.943	-.500	1	1.300	-13.600			
H 5	.484	2.460	.670	1	1.300	-13.600			
H 6	-.092	2.825	-1.005	1	1.300	-13.600			
H 7	.199	-1.350	-.067	1	1.300	-13.600			
H 8	.489	-.190	1.299	1	1.300	-13.600			
H 9	.312	.515	-1.719	1	1.300	-13.600			
H 10	1.727	.809	-.621	1	1.300	-13.600			
C 11	-1.459	.076	.342	2	1.625	-21.400	2	1.625	-11.400
C 12	-1.488	1.615	.240	2	1.625	-21.400	2	1.625	-11.400
C 13	-.076	2.045	-.205	2	1.625	-21.400	2	1.625	-11.400
C 14	.029	-.303	.286	2	1.625	-21.400	2	1.625	-11.400
C 15	.612	.750	-.668	2	1.625	-21.400	2	1.625	-11.400

Charge = 0 iprint = 0 Hueckel constant = 1.750

Distance matrix

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.0000	1.8079	3.0269	2.3285	3.9428	3.7394	2.4370	3.0858
2	1.8079	.0000	2.3944	2.8741	3.7394	4.2951	2.7431	2.4523
3	3.0269	2.3944	.0000	1.8045	2.3285	2.8741	4.1469	3.1844
4	2.3285	2.8741	1.8045	.0000	3.0269	2.3944	4.1319	3.9166
5	3.9428	3.7394	2.3285	3.0269	.0000	1.8079	3.8913	2.7242
6	3.7394	4.2951	2.8741	2.3944	1.8079	.0000	4.2891	3.8391
7	2.4370	2.7431	4.1469	4.1319	3.8913	4.2891	.0000	1.8156
8	3.0858	2.4523	3.1844	3.9166	2.7242	3.8391	1.8156	.0000
9	2.7242	3.8391	3.9166	3.1844	3.0858	2.4524	2.4933	3.1044
10	3.8913	4.2891	4.1319	4.1469	2.4370	2.7431	2.7023	2.4933
11	1.1184	1.1178	2.2062	2.1981	3.0931	3.3525	2.2251	2.1873
12	2.1882	2.2279	1.1180	1.1180	2.1882	2.2279	3.4248	2.8790
13	3.0931	3.3525	2.1981	2.2062	1.1184	1.1178	3.4084	2.7523
14	2.1750	2.2172	3.1141	3.3016	2.8267	3.3865	1.1178	1.1182
15	2.8267	3.3865	3.3016	3.1141	2.1750	2.2172	2.2230	2.1837

	9	10	11	12	13	14	15
1	2.7242	3.8913	1.1184	2.1882	3.0931	2.1750	2.8267
2	3.8391	4.2891	1.1178	2.2279	3.3525	2.2172	3.3865
3	3.9166	4.1319	2.2062	1.1180	2.1981	3.1141	3.3016
4	3.1844	4.1469	2.1981	1.1180	2.2062	3.3016	3.1141
5	3.0858	2.4370	3.0931	2.1882	1.1184	2.8267	2.1750
6	2.4524	2.7431	3.3525	2.2279	1.1178	3.3865	2.2172
7	2.4933	2.7023	2.2251	3.4248	3.4084	1.1178	2.2230
8	3.1044	2.4933	2.1873	2.8790	2.7523	1.1182	2.1837
9	.0000	1.8156	2.7523	2.8790	2.1873	2.1837	1.1182
10	1.8156	.0000	3.4084	3.4248	2.2251	2.2230	1.1178
11	2.7523	3.4084	.0000	1.5420	2.4673	1.5372	2.4008
12	2.8790	3.4248	1.5420	.0000	1.5420	2.4459	2.4459
13	2.1873	2.2251	2.4673	1.5420	.0000	2.4008	1.5372
14	2.1837	2.2230	1.5372	2.4459	2.4008	.0000	1.5359
15	1.1182	1.1178	2.4008	2.4459	1.5372	1.5359	.0000

Overlap matrix

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1.0000	.1416	.0158	.0578	.0026	.0039	.0476	.0142
2	.1416	1.0000	.0514	.0212	.0039	.0013	.0271	.0463
3	.0158	.0514	1.0000	.1424	.0578	.0212	.0017	.0117
4	.0578	.0212	.1424	1.0000	.0158	.0514	.0018	.0027
5	.0026	.0039	.0578	.0158	1.0000	.1416	.0029	.0281
6	.0039	.0013	.0212	.0514	.1416	1.0000	.0013	.0032
7	.0476	.0271	.0017	.0018	.0029	.0013	1.0000	.1398
8	.0142	.0463	.0117	.0027	.0281	.0032	.1398	1.0000
9	.0281	.0032	.0027	.0117	.0142	.0463	.0429	.0137
10	.0029	.0013	.0018	.0017	.0476	.0271	.0292	.0429
11	.4765	.4769	.0951	.0964	.0184	.0110	.0920	.0982
12	-.2245	-.2159	-.0158	-.0451	.0159	.0063	.0883	.1122
13	-.1916	-.1650	.1108	.1051	.0195	.0126	-.0760	-.0153
14	-.3805	.3978	.0489	-.0474	.0027	-.0062	-.0218	.0551
15	.0981	.0916	.4767	.4767	.0981	.0916	.0095	.0279
16	-.0283	-.0250	-.1107	-.3324	.1133	.0739	.0066	.0260
17	-.1140	-.1017	.1995	.1413	.0486	.0641	-.0115	-.0238
18	-.0450	.0542	.4242	-.3186	.0247	-.0659	-.0012	.0139
19	.0184	.0110	.0964	.0951	.4765	.4769	.0098	.0354
20	-.0156	-.0086	-.0940	-.1209	.2409	-.0071	.0011	.0098
21	-.0198	-.0108	.0019	-.0056	.1790	.3365	-.0137	-.0388
22	-.0028	.0067	.0805	-.0163	.3766	-.3447	.0006	.0261
23	.1003	.0933	.0177	.0122	.0308	.0103	.4769	.4766
24	-.1187	-.1077	-.0139	-.0118	.0067	-.0005	.0730	.1980
25	-.0039	-.0002	.0186	.0115	.0408	.0133	-.4511	.0486
26	-.0489	.0530	.0073	-.0040	.0057	-.0055	-.1523	.4363
27	.0308	.0103	.0122	.0177	.1003	.0933	.0924	.0988
28	-.0383	-.0109	-.0121	-.0225	-.0076	-.0381	-.0221	-.0071
29	-.0165	-.0045	.0068	.0093	.1010	.1123	-.1123	-.0545
30	.0019	.0082	.0097	.0013	.0790	-.0182	.0321	.1141
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	.0281	.0029	.4765	-.2245	-.1916	-.3805	.0981	-.0283
2	.0032	.0013	.4769	-.2159	-.1650	.3978	.0916	-.0250
3	.0027	.0018	.0951	-.0158	.1108	.0489	.4767	-.1107
4	.0117	.0017	.0964	-.0451	.1051	-.0474	.4767	-.3324
5	.0142	.0476	.0184	.0159	.0195	.0027	.0981	.1133
6	.0463	.0271	.0110	.0063	.0126	-.0062	.0916	.0739
7	.0429	.0292	.0920	.0883	-.0760	-.0218	.0095	.0066

8	.0137	.0429	.0982	.1122	-.0153	.0551	.0279	.0260
9	1.0000	.1398	.0354	.0307	.0076	-.0358	.0279	.0237
10	.1398	1.0000	.0098	.0129	.0030	-.0039	.0095	.0125
11	.0354	.0098	1.0000	.0000	.0000	.0000	.3396	.0068
12	.0307	.0129	.0000	1.0000	.0000	.0000	-.0068	.1911
13	.0076	.0030	.0000	.0000	1.0000	.0000	.3635	.0097
14	-.0358	-.0039	.0000	.0000	.0000	1.0000	-.0240	-.0006
15	.0279	.0095	.3396	-.0068	.3635	-.0240	1.0000	.0000
16	.0237	.0125	.0068	.1911	.0097	-.0006	.0000	1.0000
17	-.0145	-.0031	-.3635	.0097	-.3264	.0342	.0000	.0000
18	-.0258	-.0033	.0240	-.0006	.0342	.1890	.0000	.0000
19	.0982	.0920	.0798	.0587	.0835	-.0232	.3396	.3338
20	.0223	.0960	-.0587	-.0203	-.0729	.0202	-.3338	-.2451
21	-.0881	-.0658	-.0835	-.0729	-.0727	.0288	-.1016	-.1328
22	-.0872	-.0221	.0232	.0202	.0288	.0230	.1051	.1375
23	.0988	.0924	.3417	.3545	-.0904	-.0132	.0828	.0672
24	.0164	.0908	-.3545	-.2968	.1248	.0182	-.0672	-.0324
25	.0474	.0595	.0904	.1248	.1611	-.0046	.0850	.0820
26	-.1163	-.0485	.0132	.0182	-.0046	.1922	-.0020	-.0020
27	.4766	.4769	.0897	.1006	.0327	-.0490	.0828	.0930
28	-.1293	.4806	-.1006	-.0990	-.0438	.0657	-.0930	-.0919
29	-.1015	.0253	-.0327	-.0438	.0215	.0214	.0383	.0512
30	-.4527	.0204	.0490	.0657	.0214	.0037	.0402	.0537
	17	18	19	20	21	22	23	24
1	-.1140	-.0450	.0184	-.0156	-.0198	-.0028	.1003	-.1187
2	-.1017	.0542	.0110	-.0086	-.0108	.0067	.0933	-.1077
3	.1995	.4242	.0964	-.0940	.0019	.0805	.0177	-.0139
4	.1413	-.3186	.0951	-.1209	-.0056	-.0163	.0122	-.0118
5	.0486	.0247	.4765	.2409	.1790	.3766	.0308	.0067
6	.0641	-.0659	.4769	-.0071	.3365	-.3447	.0103	-.0005
7	-.0115	-.0012	.0098	.0011	-.0137	.0006	.4769	.0730
8	-.0238	.0139	.0354	.0098	-.0388	.0261	.4766	.1980
9	-.0145	-.0258	.0982	.0223	-.0881	-.0872	.0988	.0164
10	-.0031	-.0033	.0920	.0960	-.0658	-.0221	.0924	.0908
11	-.3635	.0240	.0798	-.0587	-.0835	.0232	.3417	-.3545
12	.0097	-.0006	.0587	-.0203	-.0729	.0202	.3545	-.2968
13	-.3264	.0342	.0835	-.0729	-.0727	.0288	-.0904	.1248
14	.0342	.1890	-.0232	.0202	.0288	.0230	-.0132	.0182
15	.0000	.0000	.3396	-.3338	-.1016	.1051	.0828	-.0672
16	.0000	.0000	.3338	-.2451	-.1328	.1375	.0672	-.0324
17	1.0000	.0000	.1016	-.1328	.1509	.0418	-.0850	.0820
18	.0000	1.0000	-.1051	.1375	.0418	.1480	.0020	-.0020
19	.1016	-.1051	1.0000	.0000	.0000	.0000	.0897	-.0051
20	-.1328	.1375	.0000	1.0000	.0000	.0000	.0051	.0354
21	.1509	.0418	.0000	.0000	1.0000	.0000	-.1140	.0077
22	.0418	.1480	.0000	.0000	.0000	1.0000	.0238	-.0016
23	-.0850	.0020	.0897	.0051	-.1140	.0238	1.0000	.0000
24	.0820	-.0020	-.0051	.0354	.0077	-.0016	.0000	1.0000
25	-.0712	.0025	.1140	.0077	-.1373	.0362	.0000	.0000
26	.0025	.0324	-.0238	-.0016	.0362	.0281	.0000	.0000
27	-.0383	-.0402	.3417	.1637	-.3082	-.1103	.3423	.1391
28	.0512	.0537	-.1637	.0884	.1967	.0704	-.1391	.1181
29	.0114	-.0221	.3082	.1967	-.1774	-.1325	-.2513	-.1360
30	-.0221	.0092	.1103	.0704	-.1325	.1455	.2277	.1232
	25	26	27	28	29	30		
1	-.0039	-.0489	.0308	-.0383	-.0165	.0019		
2	-.0002	.0530	.0103	-.0109	-.0045	.0082		
3	.0186	.0073	.0122	-.0121	.0068	.0097		
4	.0115	-.0040	.0177	-.0225	.0093	.0013		
5	.0408	.0057	.1003	-.0076	.1010	.0790		
6	.0133	-.0055	.0933	-.0381	.1123	-.0182		
7	-.4511	-.1523	.0924	-.0221	-.1123	.0321		
8	.0486	.4363	.0988	-.0071	-.0545	.1141		
9	.0474	-.1163	.4766	-.1293	-.1015	-.4527		
10	.0595	-.0485	.4769	.4806	.0253	.0204		
11	.0904	.0132	.0897	-.1006	-.0327	.0490		
12	.1248	.0182	.1006	-.0990	-.0438	.0657		
13	.1611	-.0046	.0327	-.0438	.0215	.0214		
14	-.0046	.1922	-.0490	.0657	.0214	.0037		
15	.0850	-.0020	.0828	-.0930	.0383	.0402		
16	.0820	-.0020	.0930	-.0919	.0512	.0537		
17	-.0712	.0025	-.0383	.0512	.0114	-.0221		
18	.0025	.0324	-.0402	.0537	-.0221	.0092		
19	.1140	-.0238	.3417	-.1637	.3082	.1103		
20	.0077	-.0016	.1637	.0884	.1967	.0704		

21	-.1373	.0362	-.3082	.1967	-.1774	-.1325
22	.0362	.0281	-.1103	.0704	-.1325	.1455
23	.0000	.0000	.3423	-.1391	-.2513	.2277
24	.0000	.0000	.1391	.1181	-.1360	.1232
25	1.0000	.0000	.2513	-.1360	-.0524	.2226
26	.0000	1.0000	-.2277	.1232	.2226	-.0083
27	.2513	-.2277	1.0000	.0000	.0000	.0000
28	-.1360	.1232	.0000	1.0000	.0000	.0000
29	-.0524	.2226	.0000	.0000	1.0000	.0000
30	.2226	-.0083	.0000	.0000	.0000	1.0000

starting main calculations

Results of calculation c5h10

Energy levels (eV)

E(1) =	41.95032	.0000	E(16) =	-13.56105	2.0000
E(2) =	41.88878	.0000	E(17) =	-13.64607	2.0000
E(3) =	23.03716	.0000	E(18) =	-13.67966	2.0000
E(4) =	23.02638	.0000	E(19) =	-13.71306	2.0000
E(5) =	13.63060	.0000	E(20) =	-14.26967	2.0000
E(6) =	8.22001	.0000	E(21) =	-14.33436	2.0000
E(7) =	6.56064	.0000	E(22) =	-15.65573	2.0000
E(8) =	6.39059	.0000	E(23) =	-15.67237	2.0000
E(9) =	5.91095	.0000	E(24) =	-16.09460	2.0000
E(10) =	3.05244	.0000	E(25) =	-16.60049	2.0000
E(11) =	3.01165	.0000	E(26) =	-19.57937	2.0000
E(12) =	2.54450	.0000	E(27) =	-19.75105	2.0000
E(13) =	.19059	.0000	E(28) =	-24.48673	2.0000
E(14) =	.10028	.0000	E(29) =	-24.48944	2.0000
E(15) =	-.03183	.0000	E(30) =	-28.88032	2.0000

Sum of one-electron energies = -528.82794865 eV.

Wave Functions

MO's in columns, AO's in rows

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	-.2254	-.3258	.1528	.4628	.4266	.4497	.1587	-.1928
2	-.2248	-.2995	.1557	.4793	.3423	-.3866	-.4006	-.4578
3	-.0083	.3861	.5037	.0009	.3702	.5044	-.0932	.4089
4	.0090	.3861	.5036	-.0082	.3702	-.5044	-.0932	.4089
5	.2248	-.3262	.1461	-.4650	.4266	-.4496	.1587	-.1928
6	.2243	-.2999	.1487	-.4815	.3424	.3866	-.4006	-.4578
7	.3560	.1129	-.4018	.2937	.3334	-.1324	-.5146	.2585
8	.3712	.1260	-.3718	.2771	.4933	.1985	.4620	.0092
9	-.3710	.1267	-.3758	-.2716	.4933	-.1985	.4620	.0092
10	-.3558	.1135	-.4061	-.2878	.3334	.1324	-.5146	.2584
11	.7324	1.0224	-.2730	-.8262	-.4244	-.0042	.0853	-.0185
12	.2616	.1022	-.2564	.2878	.2456	.1079	-.1146	-.5020
13	-.0696	.2520	.4371	-.0015	.2372	.0227	.0313	-.4799
14	-.0177	-.0485	-.0238	-.0307	.0925	.6897	.4448	.2395
15	-.0011	-1.2481	-.8819	.0064	-.4173	.0000	.0919	.0066
16	.1390	-.2161	.1930	-.3091	.2406	-.2383	-.0195	.6641
17	.1959	.1659	-.1533	-.4328	-.1851	-.0631	.0150	-.5108
18	-.0480	.0515	-.0457	.1096	-.0573	-.7967	.0047	-.1582
19	-.7307	1.0236	-.2610	.8301	-.4244	.0042	.0853	-.0185
20	-.1262	-.1992	-.4567	-.0651	-.1958	.1976	-.1822	.2716
21	.2282	-.1776	.1146	.2734	-.2756	-.0462	.1970	.6571
22	.0747	.0716	.1943	.0522	-.1044	.6684	-.3741	-.1847
23	-1.2035	-.3979	.6890	-.5083	-.4387	-.0069	.0717	.0021
24	.0600	.2602	-.1954	-.4031	-.2297	.0669	-.2268	-.1814
25	-.2570	-.0146	-.2361	-.0059	.1559	-.0772	-.4379	.2991
26	.1593	-.0674	.1812	.1333	-.3215	-.3101	-.5976	.0538
27	1.2029	-.3999	.6963	.4982	-.4387	.0069	.0718	.0021
28	-.2064	.0890	.1280	.1171	-.1016	-.1760	.5331	-.3332
29	-.0524	-.2536	.2833	-.4116	.0989	.1096	.2023	.0969
30	.2228	-.0161	-.1646	.0113	.4005	-.2522	.5247	.0688
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	.2038	-.6135	-.1015	-.0624	-.0290	.0972	.4833	.0268
2	.2429	.3891	.1691	-.0235	.4789	.0869	-.1137	.1327
3	-.0904	.0905	.4810	-.1709	.1784	.3145	-.3769	-.1465
4	.0905	.0894	-.4812	-.1709	-.1782	.3146	.3769	-.1465
5	-.2038	-.6133	.1029	.0624	.0291	.0972	-.4833	.0268
6	-.2430	.3887	-.1700	.0235	-.4789	.0873	.1137	.1327
7	-.5961	-.1958	.2344	-.0631	.0764	-.3275	.3250	-.0381
8	-.1486	.3311	-.5599	.0938	.2827	-.1233	-.3209	.0295
9	.1486	.3323	.5592	-.0938	-.2828	-.1231	.3209	.0295
10	.5962	-.1963	-.2340	.0631	-.0767	-.3274	-.3251	-.0381

11	.0004	-.0159	.0290	-.0011	.0644	.0054	.0433	-.0035
12	.4173	-.1902	.2429	.3762	.2736	.4916	.2532	-.2898
13	.2298	-.1421	-.1306	-.5933	.3876	-.3666	.2498	.1965
14	-.0524	-.6426	-.1850	-.0014	-.2866	.0124	.3257	.0435
15	.0000	.0449	.0000	.0000	.0000	.0757	.0000	.0268
16	.0918	.1725	-.2812	-.3638	.2105	.4786	.2922	.1812
17	.0893	-.1331	-.1902	-.5881	.3707	-.3684	.2790	-.1394
18	.0966	-.0418	-.5650	.3717	-.3147	-.1140	.3256	-.0432
19	-.0004	-.0160	-.0289	.0011	-.0644	.0055	-.0433	-.0035
20	.1104	.2773	-.2278	-.6343	.2209	.4431	.2734	-.2578
21	.4660	.0752	.2307	.1840	.4282	-.3530	.2343	.2246
22	.0208	.6216	-.0744	.2394	-.2741	-.2350	.3209	.0870
23	-.0075	-.0091	-.0009	.0079	.0394	-.0635	.0005	-.0098
24	.2992	-.1946	.2785	.5460	.2390	.5120	.2667	.3882
25	-.8020	-.1815	.1349	.1551	.2976	-.2857	.3067	.1317
26	.1472	-.2591	.5049	-.3788	-.4613	.0046	.1334	-.1535
27	.0075	-.0091	.0009	-.0079	-.0395	-.0635	-.0005	-.0098
28	-.7697	.2032	.2120	-.0812	.0937	.3744	.2679	.0042
29	.0202	.1757	.1853	.6375	.4093	-.3965	.3057	-.4336
30	.4019	.2583	.5200	-.2293	-.4268	-.2155	.1331	.0600
	17	18	19	20	21	22	23	24
1	-.2015	-.0153	.0268	.2538	-.2275	.2815	-.0897	-.0582
2	-.1607	.1275	.0661	-.2773	.1011	-.2273	.0520	-.1928
3	-.0980	.1537	-.0571	.3021	-.0633	.0179	.2713	-.1288
4	.0980	.1537	.0571	-.3022	-.0633	.0179	-.2713	-.1288
5	.2015	-.0152	-.0268	-.2538	-.2274	.2815	.0898	-.0582
6	.1607	.1275	-.0662	.2773	.1011	-.2273	-.0521	-.1928
7	-.0944	-.1738	-.2002	-.1249	.2281	.1254	.1827	-.2181
8	-.0730	-.1322	-.0308	.1061	-.3540	-.1772	-.2450	-.0253
9	.0731	-.1322	.0308	-.1062	-.3540	-.1772	.2450	-.0253
10	.0944	-.1737	.2002	.1249	.2281	.1254	-.1827	-.2181
11	.0905	-.0304	.0057	.0255	.0306	-.0038	-.0057	.0186
12	.3291	.0226	.2141	.0603	.1100	-.0574	.0638	.1856
13	.2412	-.2300	-.3350	.0138	.1004	-.0353	-.0365	.1504
14	.0150	.0700	.0282	-.2841	.1649	-.3145	.0881	-.1005
15	.0000	-.0908	.0000	.0000	.0423	.0037	.0000	.0199
16	-.2058	-.2924	.2354	.0760	.1313	-.0146	.1220	.1927
17	-.2637	.2250	.3536	.0000	-.1010	.0112	.0629	-.1482
18	-.0128	.0697	-.1537	.3189	-.0313	.0035	.3090	-.0459
19	-.0905	-.0304	-.0057	-.0255	.0306	-.0038	.0057	.0186
20	.1593	.1992	-.3501	-.0821	-.1179	.1116	-.0222	-.0717
21	.3718	.0595	.0990	.1233	-.0944	-.0064	.0296	-.2380
22	.0554	-.1228	.1626	-.2502	-.1630	.3016	.1086	.0733
23	.0548	.0814	.0188	.0161	.0101	-.0033	.0028	.0169
24	-.2679	.0279	-.2244	-.0170	-.1023	.0189	-.1108	-.0934
25	.1024	.3258	.1281	.1024	-.1172	-.0674	-.1392	.2535
26	-.0243	-.2638	.0406	.0788	-.2754	-.1999	-.2146	-.0205
27	-.0548	.0814	-.0189	-.0161	.0101	-.0033	-.0028	.0169
28	.1457	-.2218	.1792	.1219	.1671	.1247	-.1684	-.2505
29	-.2156	-.1767	-.1823	-.0044	.0673	-.0431	-.0950	.0111
30	-.1229	.3100	-.0556	.0457	.2599	.1657	-.2009	.1024
	25	26	27	28	29	30		
1	-.1598	.1822	-.1367	-.1147	.0352	-.0234		
2	.1800	.1895	-.1201	-.1174	.0375	-.0218		
3	.1754	-.2244	.0093	-.0003	.1236	-.0223		
4	-.1754	-.2244	-.0093	.0001	.1236	-.0223		
5	.1598	.1822	.1367	.1147	.0354	-.0234		
6	-.1800	.1895	.1201	.1173	.0377	-.0218		
7	-.1797	-.0761	.2083	-.0713	-.0985	-.0219		
8	.1385	-.0715	.2224	-.0673	-.0944	-.0241		
9	-.1385	-.0715	-.2224	.0675	-.0943	-.0241		
10	.1797	-.0761	-.2083	.0715	-.0984	-.0219		
11	.0219	.2668	-.1878	-.4203	.1336	-.3100		
12	-.0163	-.0547	.1211	-.0184	-.0433	-.0003		
13	.0467	-.1279	-.0182	.0143	.0581	-.0005		
14	.2267	.0106	.0133	-.0031	.0007	-.0006		
15	.0000	-.3231	.0000	-.0005	.4459	-.3078		
16	.0358	.1141	.0661	.0424	.0045	-.0004		
17	-.0274	-.0878	.0886	.0608	-.0034	.0003		
18	.2389	-.0272	-.0087	-.0183	-.0011	.0001		
19	-.0219	.2668	.1878	.4201	.1344	-.3100		
20	.1126	.1046	-.0390	.0165	-.0636	.0005		
21	-.0525	.0895	.1049	-.0125	.0241	.0003		
22	.1960	-.0225	.0514	-.0114	.0248	.0005		
23	-.0329	-.1060	.3140	-.2540	-.3523	-.3125		

24	.0494	-.1180	.0399	.0548	-.0348	.0004		
25	.1363	.0066	-.1039	.0166	-.0132	.0001		
26	.1567	.0235	.0950	-.0214	.0236	.0007		
27	.0329	-.1060	-.3140	.2548	-.3518	-.3125		
28	.1619	-.0381	-.0780	-.0024	-.0019	-.0002		
29	.0497	.1134	-.0132	.0605	.0415	-.0002		
30	.1299	.0137	.1231	-.0077	-.0148	-.0007		

Reduced overlap population matrix, atom by atom

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.6829	-.0439	.0016	-.0131	.0000	.0000	-.0086	.0021
2	-.0439	.6821	-.0103	.0004	.0000	.0000	-.0012	-.0086
3	.0016	-.0103	.6814	-.0436	-.0131	.0004	.0000	.0002
4	-.0131	.0004	-.0436	.6814	.0016	-.0103	.0000	.0000
5	.0000	.0000	-.0131	.0016	.6829	-.0439	.0001	.0001
6	.0000	.0000	.0004	-.0103	-.0439	.6821	.0000	.0001
7	-.0086	-.0012	.0000	.0000	.0001	.0000	.6835	-.0442
8	.0021	-.0086	.0002	.0000	.0001	.0001	-.0442	.6821
9	.0001	.0001	.0000	.0002	.0021	-.0086	-.0072	.0022
10	.0001	.0000	.0000	.0000	-.0086	-.0012	-.0018	-.0072
11	.7802	.7787	-.0484	-.0493	-.0008	.0014	-.0483	-.0470
12	-.0477	-.0479	.7800	.7800	-.0477	-.0479	.0020	-.0042
13	-.0008	.0014	-.0493	-.0484	.7802	.7787	.0020	-.0068
14	-.0488	-.0496	-.0007	.0013	-.0053	.0019	.7779	.7794
15	-.0053	.0019	.0013	-.0007	-.0488	-.0496	-.0491	-.0473
	9	10	11	12	13	14	15	
1	.0001	.0001	.7802	-.0477	-.0008	-.0488	-.0053	
2	.0001	.0000	.7787	-.0479	.0014	-.0496	.0019	
3	.0000	.0000	-.0484	.7800	-.0493	-.0007	.0013	
4	.0002	.0000	-.0493	.7800	-.0484	.0013	-.0007	
5	.0021	-.0086	-.0008	-.0477	.7802	-.0053	-.0488	
6	-.0086	-.0012	.0014	-.0479	.7787	.0019	-.0496	
7	-.0072	-.0018	-.0483	.0020	.0020	.7779	-.0491	
8	.0022	-.0072	-.0470	-.0042	-.0068	.7794	-.0473	
9	.6821	-.0442	-.0068	-.0042	-.0470	-.0473	.7794	
10	-.0442	.6835	.0020	.0020	-.0483	-.0491	.7779	
11	-.0068	.0020	2.6580	.7548	-.0782	.7594	-.0814	
12	-.0042	.0020	.7548	2.6618	.7548	-.0791	-.0791	
13	-.0470	-.0483	-.0782	.7548	2.6580	-.0814	.7594	
14	-.0473	-.0491	.7594	-.0791	-.0814	2.6548	.7598	
15	.7794	.7779	-.0814	-.0791	.7594	.7598	2.6548	

Reduced charge matrix, MO's in columns, atoms in rows

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.0285	.0571	.0161	.1506	.1443	.1167	.0103	.0202
2	.0279	.0513	.0172	.1610	.0991	.0857	.1089	.1209
3	.0000	.0820	.1782	.0000	.1127	.1464	.0083	.0973
4	.0000	.0820	.1782	.0000	.1127	.1464	.0083	.0973
5	.0283	.0572	.0147	.1520	.1443	.1167	.0103	.0202
6	.0278	.0514	.0157	.1625	.0991	.0857	.1089	.1209
7	.0720	.0075	.1131	.0607	.0958	.0100	.1747	.0396
8	.0768	.0085	.0979	.0538	.1856	.0229	.1149	.0000
9	.0767	.0086	.1000	.0517	.1856	.0229	.1149	.0000
10	.0719	.0075	.1155	.0583	.0958	.0100	.1747	.0396
11	.2280	.4037	.2163	.2520	.1337	.3210	.1561	.3764
12	.0398	.5797	.2620	.2211	.1147	.4583	.0030	.5105
13	.2272	.4046	.2160	.2523	.1337	.3209	.1561	.3764
14	.5479	.0992	.2294	.2123	.1714	.0683	.4254	.0903
15	.5473	.0997	.2299	.2117	.1714	.0683	.4254	.0902
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	.0244	.2541	.0081	.0026	.0017	.0067	.1678	.0014
2	.0351	.1061	.0179	.0003	.1581	.0051	.0126	.0355
3	.0050	.0043	.1586	.0205	.0241	.0626	.1094	.0458
4	.0050	.0042	.1588	.0205	.0240	.0627	.1094	.0458
5	.0244	.2539	.0083	.0026	.0017	.0067	.1678	.0014
6	.0351	.1059	.0181	.0003	.1581	.0052	.0126	.0355
7	.2121	.0256	.0384	.0029	.0027	.0703	.0803	.0026
8	.0119	.0761	.2128	.0059	.0544	.0071	.0800	.0021
9	.0119	.0766	.2122	.0059	.0544	.0071	.0799	.0021
10	.2121	.0258	.0383	.0029	.0027	.0703	.0803	.0026
11	.1637	.3964	.0866	.3749	.2871	.3580	.2298	.3250
12	.0198	.0419	.3610	.4751	.2726	.3489	.2720	.1352
13	.1637	.3960	.0870	.3749	.2871	.3580	.2298	.3250
14	.5378	.1162	.2973	.3552	.3357	.3156	.1841	.5201
15	.5379	.1169	.2965	.3552	.3357	.3156	.1841	.5201

	17	18	19	20	21	22	23	24
1	.0991	.0001	.0012	.1402	.1251	.2180	.0213	.0101
2	.0652	.0370	.0084	.1821	.0203	.1414	.0079	.1105
3	.0201	.0610	.0069	.2080	.0119	.0008	.2023	.0496
4	.0201	.0611	.0069	.2080	.0119	.0008	.2023	.0496
5	.0991	.0001	.0012	.1402	.1251	.2180	.0213	.0101
6	.0652	.0370	.0084	.1821	.0203	.1414	.0079	.1105
7	.0229	.0746	.0851	.0375	.1171	.0443	.0924	.1411
8	.0144	.0450	.0022	.0241	.2898	.0848	.1647	.0019
9	.0144	.0450	.0022	.0241	.2898	.0848	.1647	.0019
10	.0229	.0746	.0851	.0375	.1171	.0443	.0924	.1411
11	.4397	.1354	.4349	.2231	.1323	.3533	.0474	.2699
12	.2652	.3774	.5685	.2803	.0801	.0012	.3909	.2477
13	.4397	.1354	.4350	.2231	.1323	.3533	.0474	.2699
14	.2060	.4581	.1770	.0449	.2634	.1569	.2686	.2931
15	.2060	.4581	.1771	.0449	.2634	.1569	.2686	.2931
	25	26	27	28	29	30		
1	.0851	.1177	.0708	.0813	.0075	.0119		
2	.0992	.1280	.0509	.0869	.0089	.0105		
3	.0981	.1791	.0005	.0000	.0956	.0109		
4	.0981	.1791	.0005	.0000	.0956	.0109		
5	.0851	.1178	.0707	.0812	.0076	.0119		
6	.0992	.1280	.0509	.0867	.0090	.0105		
7	.0970	.0206	.1550	.0323	.0614	.0106		
8	.0661	.0180	.1841	.0274	.0545	.0126		
9	.0661	.0180	.1841	.0276	.0543	.0126		
10	.0970	.0206	.1550	.0324	.0612	.0106		
11	.2311	.2630	.1627	.5183	.1041	.3760		
12	.2520	.3496	.0655	.0580	.5773	.3709		
13	.2311	.2630	.1627	.5177	.1047	.3760		
14	.1974	.0988	.3433	.2246	.3797	.3821		
15	.1974	.0988	.3433	.2256	.3787	.3821		

Atom	Net chg.	Atomic orbital occupation for given MO occupation								
		S	Px	Py	Pz	Dx2-y2	Dz2	Dxy	Dxz	Dyz
H 1	.009	.991								
H 2	.007	.993								
H 3	.009	.991								
H 4	.009	.991								
H 5	.009	.991								
H 6	.007	.993								
H 7	.006	.994								
H 8	.009	.991								
H 9	.009	.991								
H 10	.006	.994								
C 11	-.016	1.212	.937	.942	.925					
C 12	-.020	1.212	.934	.943	.930					
C 13	-.016	1.212	.948	.925	.932					
C 14	-.014	1.210	.954	.913	.936					
C 15	-.014	1.210	.910	.963	.930					

Reduced energy matrix, atom by atom

	1	2	3	4	5	6
1	-9.2870	1.0449	-.0392	.3114	.0002	-.0007
2	1.0449	-9.2771	.2449	-.0088	-.0007	.0000
3	-.0392	.2449	-9.2673	1.0366	.3114	-.0088
4	.3114	-.0088	1.0366	-9.2673	-.0392	.2449
5	.0002	-.0007	.3114	-.0392	-9.2870	1.0449
6	-.0007	.0000	-.0088	.2449	1.0449	-9.2772
7	.2042	.0289	-.0005	.0005	-.0019	.0007
8	-.0500	.2048	-.0041	-.0005	-.0030	-.0019
9	-.0030	-.0019	-.0005	-.0041	-.0500	.2048
10	-.0019	.0007	.0005	-.0005	.2042	.0289
11	-18.9210	-18.9156	1.2108	1.2276	.0227	-.0329
12	1.1928	1.1957	-18.9223	-18.9222	1.1928	1.1957
13	.0227	-.0329	1.2276	1.2108	-18.9210	-18.9155
14	1.2273	1.2294	.0195	-.0299	.1323	-.0444
15	.1323	-.0444	-.0299	.0195	1.2273	1.2294
	7	8	9	10	11	12
1	.2042	-.0500	-.0030	-.0019	-18.9210	1.1928
2	.0289	.2048	-.0019	.0007	-18.9156	1.1957
3	-.0005	-.0041	-.0005	.0005	1.2108	-18.9223

4	.0005	-.0005	-.0041	-.0005	1.2276	-18.9222
5	-.0019	-.0030	-.0500	.2042	.0227	1.1928
6	.0007	-.0019	.2048	.0289	-.0329	1.1957
7	-9.2949	1.0526	.1702	.0440	1.2035	-.0469
8	1.0526	-9.2760	-.0513	.1702	1.1804	.1069
9	.1702	-.0513	-9.2760	1.0526	.1701	.1069
10	.0440	.1702	1.0526	-9.2949	-.0476	-.0469
11	1.2035	1.1804	.1701	-.0476	-38.4749	-19.3795
12	-.0469	.1069	.1069	-.0469	-19.3795	-38.5279
13	-.0476	.1701	1.1804	1.2035	2.0739	-19.3796
14	-18.9024	-18.9298	1.1901	1.2187	-19.4498	2.0997
15	1.2187	1.1901	-18.9299	-18.9024	2.1643	2.0997

	13	14	15
1	.0227	1.2273	.1323
2	-.0329	1.2294	-.0444
3	1.2276	.0195	-.0299
4	1.2108	-.0299	.0195
5	-18.9210	.1323	1.2273
6	-18.9155	-.0444	1.2294
7	-.0476	-18.9024	1.2187
8	.1701	-18.9298	1.1901
9	1.1804	1.1901	-18.9299
10	1.2035	1.2187	-18.9024
11	2.0739	-19.4498	2.1643
12	-19.3796	2.0997	2.0997
13	-38.4749	2.1643	-19.4498
14	2.1643	-38.4236	-19.4457
15	-19.4498	-19.4457	-38.4236

C5H10.HAO

c5h10

Atom sembolleri, sıra numaraları, x,y ve z koordinatları

H	1	-1.9810	-.3680	-.5420
H	2	-1.9600	-.3060	1.2650
H	3	-1.7450	2.0780	1.2250
H	4	-2.2600	1.9430	-.5000
H	5	.4840	2.4600	.6700
H	6	-.0920	2.8250	-1.0050
H	7	.1990	-1.3500	-.0670
H	8	.4890	-.1900	1.2990
H	9	.3120	.5150	-1.7190
H	10	1.7270	.8090	-.6210
C	11	-1.4590	.0760	.3420
C	12	-1.4880	1.6150	.2400
C	13	-.0760	2.0450	-.2050
C	14	.0290	-.3030	.2860
C	15	.6120	.7500	-.6680

11 atomu için dörtyüzlü melezleme dizeyi

.5000	.8660	.0000	.0000
.5000	-.2887	.8165	.0000
.5000	-.2887	-.4082	.7071
.5000	-.2887	-.4082	-.7071

11 atomu için döndürülmüş melezleme dizeyi

.5000	.8096	.1863	-.2447
.5000	-.4985	-.0971	-.7015
.5000	-.3100	.6453	.4874
.5000	-.0011	-.7345	.4588

12 atomu için dörtyüzlü melezleme dizeyi

.5000	.8660	.0000	.0000
.5000	-.2887	.8165	.0000
.5000	-.2887	-.4082	.7071
.5000	-.2887	-.4082	-.7071

12 atomu için döndürülmüş melezleme dizeyi

.5000	.5947	-.5430	.3186
.5000	-.3366	-.3335	-.7249
.5000	.3708	.7621	-.1780
.5000	-.6289	.1144	.5843

13 atomu için dörtyüzlü melezleme dizeyi

.5000	.8660	.0000	.0000
.5000	-.2887	.8165	.0000
.5000	-.2887	-.4082	.7071

.5000 -.2887 -.4082 -.7071
 13 atomu icin döndürülmüş melezleme dizeyi
 .5000 -.0124 .6045 -.6200
 .5000 .4300 .3015 .6886
 .5000 .3944 -.7111 -.2980
 .5000 -.8120 -.1950 .2294
 14 atomu icin dörtüzlü melezleme dizeyi
 .5000 .8660 .0000 .0000
 .5000 -.2887 .8165 .0000
 .5000 -.2887 -.4082 .7071
 .5000 -.2887 -.4082 -.7071
 14 atomu icin döndürülmüş melezleme dizeyi
 .5000 -.6004 .5891 -.2062
 .5000 .2228 .0937 .8316
 .5000 .6980 .1119 -.5002
 .5000 -.3204 -.7948 -.1252
 15 atomu icin dörtüzlü melezleme dizeyi
 .5000 .8660 .0000 .0000
 .5000 -.2887 .8165 .0000
 .5000 -.2887 -.4082 .7071
 .5000 -.2887 -.4082 -.7071
 15 atomu icin döndürülmüş melezleme dizeyi
 .5000 -.6578 -.2701 .4944
 .5000 -.2015 -.1116 -.8348
 .5000 .7103 -.4579 .1892
 .5000 .1490 .8396 .1512

Ortalamayi kösegenden cikariyor.

$h'_{uv} = h_{uv} - (\text{ortalama}) * S_{uv}$

Ortalama= -13.800570 eV

h_{VIF} de en yakin olmayan komsular arasi cizgiler ihmal edildi.

Tüm atom ici cizgiler .0000küçük olacak sekilde $S_{uv} * (\text{ortalama})$ ya esitlenmistir.

Atomici cizgileri degismedi.

AO da Hamilton Dizeyi

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	-13.6002	-3.3706	-.3772	-1.3767	-.0629	-.0932	-1.1323	-.3377
2	-3.3706	-13.6006	-1.2216	-.5036	-.0932	-.0300	-.6434	-1.1011
3	-.3772	-1.2216	-13.6007	-3.3895	-1.3754	-.5061	-.0406	-.2782
4	-1.3767	-.5036	-3.3895	-13.6011	-.3773	-1.2225	-.0412	-.0632
5	-.0629	-.0932	-1.3754	-.3773	-13.6001	-3.3695	-.0685	-.6673
6	-.0932	-.0300	-.5061	-1.2225	-3.3695	-13.5997	-.0305	-.0760
7	-1.1323	-.6434	-.0406	-.0412	-.0685	-.0305	-13.6022	-3.3268
8	-.3377	-1.1011	-.2782	-.0632	-.6673	-.0760	-3.3268	-13.5999
9	-.6678	-.0782	-.0637	-.2782	-.3359	-1.1004	-1.0220	-.3261
10	-.0699	-.0330	-.0429	-.0401	-1.1306	-.6429	-.6964	-1.0227
11	-14.5944	-14.6050	-2.9127	-2.9551	-.5640	-.3381	-2.8196	-3.0106
12	4.9110	4.7224	.3463	.9854	-.3465	-.1362	-1.9344	-2.4550
13	4.1915	3.6103	-2.4258	-2.3006	-.4273	-.2763	1.6643	.3371
14	8.3219	-8.7024	-1.0690	1.0384	-.0573	.1348	.4765	-1.2066
15	-3.0059	-2.8054	-14.6009	-14.6013	-3.0046	-2.8072	-.2899	-.8522
16	.6198	.5457	2.4206	7.2701	-2.4789	-1.6170	-.1441	-.5709
17	2.4918	2.2250	-4.3643	-3.0914	-1.0625	-1.4024	.2503	.5195
18	.9830	-1.1863	-9.2786	6.9700	-.5404	1.4402	.0268	-.3055
19	-.5646	-.3391	-2.9544	-2.9140	-14.5929	-14.6035	-.3021	-1.0861
20	.3411	.1876	2.0572	2.6468	-5.2684	.1562	-.0244	-.2151
21	.4329	.2368	-.0419	.1233	-3.9162	-7.3628	.2993	.8491
22	.0598	-.1458	-1.7608	.3563	-8.2368	7.5389	-.0109	-.5703
23	-3.0753	-2.8597	-.5391	-.3716	-.9397	-.3146	-14.6051	-14.5976
24	2.5967	2.3565	.3030	.2588	-.1459	.0120	-1.5963	-4.3301
25	.0841	.0020	-.4062	-.2528	-.8906	-.2892	9.8698	-1.0642
26	1.0692	-1.1581	-.1614	.0897	-.1247	.1205	3.3326	-9.5443
27	-.9441	-.3184	-.3720	-.5408	-3.0712	-2.8572	-2.8302	-3.0292
28	.8361	.2388	.2631	.4917	.1648	.8342	.4832	.1569
29	.3609	.0966	-.1498	-.2052	-2.2096	-2.4574	2.4572	1.1925
30	-.0415	-.1802	-.2114	-.0277	-1.7265	.3993	-.7040	-2.4957
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	-.6678	-.0699	-14.5944	4.9110	4.1915	8.3219	-3.0059	.6198
2	-.0782	-.0330	-14.6050	4.7224	3.6103	-8.7024	-2.8054	.5457
3	-.0637	-.0429	-2.9127	.3463	-2.4258	-1.0690	-14.6009	2.4206
4	-.2782	-.0401	-2.9551	.9854	-2.3006	1.0384	-14.6013	7.2701
5	-.3359	-1.1306	-.5640	-.3465	-.4273	-.0573	-3.0046	-2.4789
6	-1.1004	-.6429	-.3381	-.1362	-.2763	.1348	-2.8072	-1.6170
7	-1.0220	-.6964	-2.8196	-1.9344	1.6643	.4765	-.2899	-.1441
8	-.3261	-1.0227	-3.0106	-2.4550	.3371	-1.2066	-.8522	-.5709
9	-13.5972	-3.3256	-1.0861	-.6724	-.1642	.7810	-.8516	-.5183
10	-3.3256	-13.6027	-.3036	-.2812	-.0647	.0834	-.2911	-.2733

11	-1.0861	-.3036	-21.4025	-.0015	.0012	-.0005	-12.7186	-.1977
12	-.6724	-.2812	-.0015	-11.3988	.0009	-.0007	.1948	-3.8124
13	-.1642	-.0647	.0012	.0009	-11.4023	.0007	-10.4332	-.1931
14	.7810	.0834	-.0005	-.0007	.0007	-11.4004	.6895	.0111
15	-.8516	-.2911	-12.7186	-.1948	-10.4332	.6895	-21.4034	-.0027
16	-.5183	-.2733	-.1977	-3.8124	-.1931	.0111	-.0027	-11.4000
17	.3168	.0697	10.4302	-.1926	6.5123	-.6800	-.0004	.0011
18	.5645	.0714	-.6885	.0139	-.6822	-3.7707	.0001	.0003
19	-3.0077	-2.8179	-2.9907	-1.6821	-2.3953	.6647	-12.7178	-9.5792
20	-.4875	-2.1010	1.6849	.4052	1.4559	-.4043	9.5801	4.8928
21	1.9263	1.4411	2.3956	1.4547	1.4494	-.5735	2.9130	2.6494
22	1.9078	.4844	-.6643	-.4032	-.5754	-.4578	-3.0173	-2.7421
23	-3.0277	-2.8311	-12.7989	-10.1741	2.5968	.3783	-3.1000	-1.9305
24	-.3572	-1.9863	10.1741	5.9208	-2.4904	-.3634	1.9313	.6486
25	-1.0367	-1.3021	-2.5937	-2.4871	-3.2144	.0926	-2.4380	-1.6359
26	2.5431	1.0609	-.3789	-.3637	.0926	-3.8343	.0577	.0377
27	-14.5931	-14.6032	-3.3629	-2.8859	-.9364	1.4054	-3.1003	-2.6699
28	2.8277	-10.5170	2.8870	1.9747	.8724	-1.3096	2.6691	1.8330
29	2.2194	-.5528	.9379	.8751	-.4282	-.4269	-1.1014	-1.0211
30	9.9026	-.4462	-1.4081	-1.3091	-.4248	-.0735	-1.1516	-1.0715
	17	18	19	20	21	22	23	24
1	2.4918	.9830	-.5646	.3411	.4329	.0598	-3.0753	2.5967
2	2.2250	-1.1863	-.3391	.1876	.2368	-.1458	-2.8597	2.3565
3	-4.3643	-9.2786	-2.9544	2.0572	-.0419	-1.7608	-.5391	.3030
4	-3.0914	6.9700	-2.9140	2.6468	.1233	.3563	-.3716	.2588
5	-1.0625	-.5404	-14.5929	-5.2684	-3.9162	-8.2368	-.9397	-.1459
6	-1.4024	1.4402	-14.6035	.1562	-7.3628	7.5389	-.3146	.0120
7	.2503	.0268	-.3021	-.0244	.2993	-.0109	-14.6051	-1.5963
8	.5195	-.3055	-1.0861	-.2151	.8491	-.5703	-14.5976	-4.3301
9	.3168	.5645	-3.0077	-.4875	1.9263	1.9078	-3.0277	-.3572
10	.0697	.0714	-2.8179	-2.1010	1.4411	.4844	-2.8311	-1.9863
11	10.4302	-.6885	-2.9907	1.6849	2.3956	-.6643	-12.7989	10.1741
12	-.1926	.0139	-1.6821	.4052	1.4547	-.4032	-10.1741	5.9208
13	6.5123	-.6822	-2.3953	1.4559	1.4494	-.5754	2.5968	-2.4904
14	-.6800	-3.7707	.6647	-.4043	-.5735	-.4578	.3783	-.3634
15	-.0004	.0001	-12.7178	9.5801	2.9130	-3.0173	-3.1000	1.9313
16	.0011	.0003	-9.5792	4.8928	2.6494	-2.7421	-1.9305	.6486
17	-11.3979	.0009	-2.9148	2.6507	-3.0097	-.8341	2.4379	-1.6358
18	.0009	-11.4002	3.0175	-2.7433	-.8348	-2.9513	-.0576	.0382
19	-2.9148	3.0175	-21.4010	.0025	-.0008	.0005	-3.3591	.1479
20	2.6507	-2.7433	.0025	-11.4014	.0005	.0006	-.1466	-.7059
21	-3.0097	-.8348	-.0008	.0005	-11.4006	.0000	3.2718	-.1547
22	-.8341	-2.9513	.0005	.0006	.0000	-11.3994	-.6810	.0323
23	2.4379	-.0576	-3.3591	-.1466	3.2718	-.6810	-21.4037	.0031
24	-1.6358	.0382	-.1479	-.7059	-.1547	.0323	.0031	-11.4000
25	1.4221	-.0495	-3.2704	-.1542	2.7395	-.7219	.0005	-.0013
26	-.0495	-.6480	.6831	.0319	-.7206	-.5624	.0002	-.0004
27	1.0995	1.1548	-12.7939	-4.6987	8.8454	3.1665	-12.8185	-3.9884
28	-1.0204	-1.0744	4.6987	-1.7652	-3.9229	-1.4046	3.9902	-2.3570
29	-.2268	.4416	-8.8483	-3.9237	3.5407	2.6428	7.2124	2.7136
30	.4419	-.1837	-3.1626	-1.4040	2.6418	-2.9018	-6.5339	-2.4575
	25	26	27	28	29	30		
1	.0841	1.0692	-.9441	.8361	.3609	-.0415		
2	.0020	-1.1581	-.3184	.2388	.0966	-.1802		
3	-.4062	-.1614	-.3720	.2631	-.1498	-.2114		
4	-.2528	.0897	-.5408	.4917	-.2052	-.0277		
5	-.8906	-.1247	-3.0712	.1648	-2.2096	-1.7265		
6	-.2892	.1205	-2.8572	.8342	-2.4574	.3993		
7	9.8698	3.3326	-2.8302	.4832	2.4572	-.7040		
8	-1.0642	-9.5443	-3.0292	.1569	1.1925	-2.4957		
9	-1.0367	2.5431	-14.5931	2.8277	2.2194	9.9026		
10	-1.3021	1.0609	-14.6032	-10.5170	-.5528	-.4462		
11	-2.5937	-.3789	-3.3629	2.8870	.9379	-1.4081		
12	-2.4871	-.3637	-2.8859	1.9747	.8751	-1.3091		
13	-3.2144	.0926	-.9364	.8724	-.4282	-.4248		
14	.0926	-3.8343	1.4054	-1.3096	-.4269	-.0735		
15	-2.4380	.0577	-3.1003	2.6691	-1.1014	-1.1516		
16	-1.6359	.0377	-2.6699	1.8330	-1.0211	-1.0715		
17	1.4221	-.0495	1.0995	-1.0204	-.2268	.4419		
18	-.0495	-.6480	1.1548	-1.0744	.4416	-.1837		
19	-3.2704	.6831	-12.7939	4.6987	-8.8483	-3.1626		
20	-.1542	.0319	-4.6987	-1.7652	-3.9237	-1.4040		
21	2.7395	-.7206	8.8454	-3.9229	3.5407	2.6418		
22	-.7219	-.5624	3.1665	-1.4046	2.6428	-2.9018		
23	.0005	.0002	-12.8185	3.9902	7.2124	-6.5339		

24	-.0013	-.0004	-3.9884	-2.3570	2.7136	-2.4575		
25	-11.3995	-.0008	-7.2113	2.7118	1.0462	-4.4405		
26	-.0008	-11.3999	6.5323	-2.4567	-4.4423	.1657		
27	-7.2113	6.5323	-21.3974	-.0017	-.0023	.0002		
28	2.7118	-2.4567	-.0017	-11.4023	.0002	-.0011		
29	1.0462	-4.4423	-.0023	.0002	-11.4025	.0012		
30	-4.4405	.1657	.0002	-.0011	.0012	-11.3994		

Melezlenmis AO da Hamilton Dizeyi

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	-13.6002	-3.3706	-.3772	-1.3767	-.0629	-.0932	-1.1323	-.3377
2	-3.3706	-13.6006	-1.2216	-.5036	-.0932	-.0300	-.6434	-1.1011
3	-.3772	-1.2216	-13.6007	-3.3895	-1.3754	-.5061	-.0406	-.2782
4	-1.3767	-.5036	-3.3895	-13.6011	-.3773	-1.2225	-.0412	-.0632
5	-.0629	-.0932	-1.3754	-.3773	-13.6001	-3.3695	-.0685	-.6673
6	-.0932	-.0300	-.5061	-1.2225	-3.3695	-13.5997	-.0305	-.0760
7	-1.1323	-.6434	-.0406	-.0412	-.0685	-.0305	-13.6022	-3.3268
8	-.3377	-1.1011	-.2782	-.0632	-.6673	-.0760	-3.3268	-13.5999
9	-.6678	-.0782	-.0637	-.2782	-.3359	-1.1004	-1.0220	-.3261
10	-.0699	-.0330	-.0429	-.0401	-1.1306	-.6429	-.6964	-1.0227
11	-4.5770	-.6773	-1.3662	-1.3624	-.6281	-.3638	-2.7825	-3.1348
12	-15.9898	-3.9025	-.6436	-2.4739	-.0276	-.1689	-.9413	.5322
13	-2.0589	-10.6777	-3.6500	-2.7614	-.4783	-.2395	.4959	-1.1148
14	-6.5630	-13.9525	-.1655	.6876	.0060	.0959	-2.4114	-2.3038
15	-2.1742	-2.6642	-6.4470	.9220	-2.5718	-1.1450	-.3580	-1.1450
16	-3.2552	-1.4687	.0662	-13.7691	.0783	-1.4355	-.1993	-.1857
17	.4510	.7065	-8.0775	-8.2016	-3.1350	-3.3283	-.0123	-.1875
18	-1.0333	-2.1845	-14.7435	-8.1540	-.3806	.2944	-.0100	-.1861
19	-.0619	.0617	-.4363	-1.6362	-4.4916	-16.4288	.0370	.3265
20	.0360	-.1179	-1.8178	-.0364	-16.4147	-4.2633	-.0788	-.7722
21	-.4734	-.2205	-.1113	-.6069	-4.1354	-4.2510	-.3703	-1.0618
22	-.6300	-.4015	-3.5434	-3.5486	-4.1441	-4.2639	-.1921	-.6648
23	-3.2675	-2.6047	-.6575	-.5086	-.8812	-.3597	-1.2169	-3.3584
24	-.0621	-1.8678	-.3744	-.0772	-.6895	-.0816	-3.9619	-16.3004
25	-.2505	.7946	-.0227	-.0783	-.6090	-.2416	-8.9790	-5.6661
26	-2.5704	-2.0415	-.0236	-.0791	.3003	.0536	-15.0525	-3.8704
27	-1.1400	-.4314	-.4231	-.5521	-1.9007	-1.1163	-2.7446	-3.1736
28	-.6462	-.0676	-.0458	-.3235	.1192	-1.6558	-1.1991	.4042
29	-.0513	-.0679	.0295	.1676	-.7335	.3647	-2.3303	-2.4215
30	-.0507	-.0698	-.3046	-.3736	-3.6273	-3.3071	.6135	-.8674
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	-.6678	-.0699	-4.5770	-15.9898	-2.0589	-6.5630	-2.1742	-3.2552
2	-.0782	-.0330	-.6773	-3.9025	-10.6777	-13.9525	-2.6642	-1.4687
3	-.0637	-.0429	-1.3662	-.6436	-3.6500	-.1655	-6.4470	.0662
4	-.2782	-.0401	-1.3624	-2.4739	-2.7614	.6876	.9220	-13.7691
5	-.3359	-1.1306	-.6281	-.0276	-.4783	.0060	-2.5718	.0783
6	-1.1004	-.6429	-.3638	-.1689	-.2395	.0959	-1.1450	-1.4355
7	-1.0220	-.6964	-2.7825	-.9413	.4959	-2.4114	-.3580	-.1993
8	-.3261	-1.0227	-3.1348	.5322	-1.1148	-2.3038	-1.1450	-.1857
9	-13.5972	-3.3256	-1.3091	-.7398	-.0599	-.0633	-.7262	-.7662
10	-3.3256	-13.6027	-.4119	-.0639	-.0658	-.0657	-.3232	-.1286
11	-1.3091	-.4119	-13.9003	-2.5010	-2.5011	-2.5019	-9.4228	-5.5544
12	-.7398	-.0639	-2.5010	-13.8998	-2.4997	-2.4999	-3.9334	-7.0044
13	-.0599	-.0658	-2.5011	-2.4997	-13.9003	-2.4994	-11.6377	-7.8792
14	-.0633	-.0657	-2.5019	-2.4999	-2.4994	-13.9035	.2747	1.8928
15	-.7262	-.3232	-9.4228	-3.9334	-11.6377	.2747	-13.9025	-2.5005
16	-.7662	-.1286	-5.5544	-7.0044	-7.8792	1.8928	-2.5005	-13.8989
17	-.4770	-.2064	-.5276	1.2179	1.3869	1.2010	-2.5024	-2.5025
18	.2662	.0760	-1.1223	-2.1348	-7.5025	-.1285	-2.5006	-2.4995
19	-1.5162	-.8120	.3373	-.1635	.2291	.2849	.0860	-2.0492
20	.1811	-1.5443	-.6807	.2820	-.5994	-.0138	-3.6103	1.5685
21	-3.6344	-3.4067	-2.9115	-.7319	-1.2808	.2516	-4.6796	-2.5909
22	-1.0459	.1272	-3.6771	-1.1677	-2.7401	.6190	-10.8198	-5.6275
23	-2.4343	-1.2087	-15.2429	-2.9419	-2.6906	-7.0398	-5.1010	-2.3511
24	.4244	-1.0978	-4.9810	1.9042	-2.1735	-4.1315	-1.9044	-.2398
25	-3.1514	-3.4785	-1.1636	-.4009	.9888	1.7786	-.7178	-.3278
26	-.8939	.1229	-7.1026	-2.2517	1.1035	-6.8507	-.3572	-.4245
27	-4.8605	-.4550	-5.8137	-1.4999	-1.0738	-.6723	-3.9235	-2.1272
28	-16.3811	-4.7480	-1.5891	-.9057	.0343	.0757	-.8532	-1.0559
29	-4.4305	-14.6031	-.6600	.1862	.2001	-.3799	.3125	.5403
30	-3.5142	-9.4003	-1.0095	-.0562	-.5731	.2853	-2.2700	-1.0677
	17	18	19	20	21	22	23	24
1	.4510	-1.0333	-.0619	.0360	-.4734	-.6300	-3.2675	-.0621
2	.7065	-2.1845	.0617	-.1179	-.2205	-.4015	-2.6047	-1.8678
3	-8.0775	-14.7435	-.4363	-1.8178	-.1113	-3.5434	-.6575	-.3744
4	-8.2016	-8.1540	-1.6362	-.0364	-.6069	-3.5486	-.5086	-.0772

5	-3.1350	-.3806	-4.4916	-16.4147	-4.1354	-4.1441	-.8812	-.6895
6	-3.3283	.2944	-16.4288	-4.2633	-4.2510	-4.2639	-.3597	-.0816
7	-.0123	-.0100	.0370	-.0788	-.3703	-.1921	-1.2169	-3.9619
8	-.1875	-.1861	.3265	-.7722	-1.0618	-.6648	-3.3584	-16.3004
9	-.4770	.2662	-1.5162	.1811	-3.6344	-1.0459	-2.4343	.4244
10	-.2064	.0760	-.8120	-1.5443	-3.4067	.1272	-1.2087	-1.0978
11	-.5276	-1.1223	.3373	-.6807	-2.9115	-3.6771	-15.2429	-4.9810
12	1.2179	-2.1348	-.1635	.2820	-.7319	-1.1677	-2.9419	1.9042
13	1.3869	-7.5025	.2291	-.5994	-1.2808	-2.7401	-2.6906	-2.1735
14	1.2010	-.1285	.2849	-.0138	.2516	.6190	-7.0398	-4.1315
15	-2.5024	-2.5006	.0860	-3.6103	-4.6796	-10.8198	-5.1010	-1.9044
16	-2.5025	-2.4995	-2.0492	1.5685	-2.5909	-5.6275	-2.3511	-.2398
17	-13.9006	-2.5005	-4.6359	-4.1428	-2.1638	-14.3962	-.6270	-.1778
18	-2.5005	-13.8994	.9071	-.6934	1.9293	.0472	-.2363	-.2783
19	-4.6359	.9071	-13.9010	-2.5005	-2.4996	-2.5015	.6044	.6098
20	-4.1428	-.6934	-2.5005	-13.8986	-2.4992	-2.5003	-1.2172	-1.0050
21	-2.1638	1.9293	-2.4996	-2.4992	-13.8998	-2.4997	-4.1011	-1.4150
22	-14.3962	.0472	-2.5015	-2.5003	-2.4997	-13.9031	-2.9576	-.9597
23	-.6270	-.2363	.6044	-1.2172	-4.1011	-2.9576	-13.9013	-2.5015
24	-.1778	-.2783	.6098	-1.0050	-1.4150	-.9597	-2.5015	-13.9003
25	-.3741	.4123	.2651	-.8187	-2.9043	-1.1104	-2.5009	-2.4998
26	.3838	-.0789	-.0346	.5910	.6985	.3185	-2.5031	-2.5003
27	-1.8726	.7679	-.0982	-2.2202	-9.9907	-5.0140	-11.5753	-3.2501
28	-.6059	.5076	-2.7501	1.5151	-5.0571	-1.1398	-2.5998	2.1418
29	.4868	-.0753	1.2615	-1.3471	-.6369	1.5099	-3.3355	-2.5530
30	-1.8238	.6588	-4.3229	-5.0871	-15.2826	-2.5157	-1.7086	-1.4212

	25	26	27	28	29	30		
1	-.2505	-2.5704	-1.1400	-.6462	-.0513	-.0507		
2	.7946	-2.0415	-.4314	-.0676	-.0679	-.0698		
3	-.0227	-.0236	-.4231	-.0458	.0295	-.3046		
4	-.0783	-.0791	-.5521	-.3235	.1676	-.3736		
5	-.6090	.3003	-1.9007	.1192	-.7335	-3.6273		
6	-.2416	.0536	-1.1163	-1.6558	.3647	-3.3071		
7	-8.9790	-15.0525	-2.7446	-1.1991	-2.3303	.6135		
8	-5.6661	-3.8704	-3.1736	.4042	-2.4215	-.8674		
9	-3.1514	-.8939	-4.8605	-16.3811	-4.4305	-3.5142		
10	-3.4785	.1229	-.4550	-4.7480	-14.6031	-9.4003		
11	-1.1636	-7.1026	-5.8137	-1.5891	-.6600	-1.0095		
12	-.4009	-2.2517	-1.4999	-.9057	.1862	-.0562		
13	.9888	1.1035	-1.0738	.0343	.2001	-.5731		
14	1.7786	-6.8507	-.6723	.0757	-.3799	.2853		
15	-.7178	-.3572	-3.9235	-.8532	.3125	-2.2700		
16	-.3278	-.4245	-2.1272	-1.0559	.5403	-1.0677		
17	-.3741	.3838	-1.8726	-.6059	.4868	-1.8238		
18	.4123	-.0789	.7679	.5076	-.0753	.6588		
19	.2651	-.0346	-.0982	-2.7501	1.2615	-4.3229		
20	-.8187	.5910	-2.2202	1.5151	-1.3471	-5.0871		
21	-2.9043	.6985	-9.9907	-5.0571	-.6369	-15.2826		
22	-1.1104	.3185	-5.0140	-1.1398	1.5099	-2.5157		
23	-2.5009	-2.5031	-11.5753	-2.5998	-3.3355	-1.7086		
24	-2.4998	-2.5003	-3.2501	2.1418	-2.5530	-1.4212		
25	-13.8986	-2.5002	-12.7393	-3.2449	-9.9395	-.6127		
26	-2.5002	-13.9029	-.8589	-1.4246	-.4002	2.2478		
27	-12.7393	-.8589	-13.8981	-2.4991	-2.4982	-2.4984		
28	-3.2449	-1.4246	-2.4991	-13.8988	-2.4979	-2.5007		
29	-9.9395	-.4002	-2.4982	-2.4979	-13.9017	-2.4997		
30	-.6127	2.2478	-2.4984	-2.5007	-2.4997	-13.9030		

VIF(kulakli) e Karsilik Hamilton Dizeyi

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.2004	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
2	.0000	.1999	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
3	.0000	.0000	.1998	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
4	.0000	.0000	.0000	.1994	.0000	.0000	.0000	.0000
5	.0000	.0000	.0000	.0000	.2004	.0000	.0000	.0000
6	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.2009	.0000	.0000
7	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.1983	.0000
8	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.2007
9	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
10	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
11	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
12	-7.2171	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
13	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
14	.0000	-7.2008	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
15	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
16	.0000	.0000	.0000	-6.7570	.0000	.0000	.0000	.0000

11	.0000	.0000	.0000	-2.5010	-2.5011	-2.5019	.0000	.0000
12	.0000	.0000	-2.5010	.0000	-2.4997	-2.4999	.0000	.0000
13	.0000	.0000	-2.5011	-2.4997	.0000	-2.4994	-7.0847	.0000
14	.0000	.0000	-2.5019	-2.4999	-2.4994	.0000	.0000	.0000
15	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.0847	.0000	.0000	-2.5005
16	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.5005	.0000
17	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.5024	-2.5025
18	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.5006	-2.4995
19	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
20	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
21	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
22	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
23	.0000	.0000	-7.3561	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
24	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
25	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
26	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
27	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
28	-7.3609	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
29	.0000	-7.3508	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
30	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
	17	18	19	20	21	22	23	24
1	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
2	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
3	.0000	-6.7578	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
4	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
5	.0000	.0000	.0000	-7.3734	.0000	.0000	.0000	.0000
6	.0000	.0000	-7.3801	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
7	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
8	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.3328
9	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
10	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
11	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.3561	.0000
12	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
13	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
14	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
15	-2.5024	-2.5006	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
16	-2.5025	-2.4995	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
17	.0000	-2.5005	.0000	.0000	.0000	-7.0849	.0000	.0000
18	-2.5005	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
19	.0000	.0000	.0000	-2.5005	-2.4996	-2.5015	.0000	.0000
20	.0000	.0000	-2.5005	.0000	-2.4992	-2.5003	.0000	.0000
21	.0000	.0000	-2.4996	-2.4992	.0000	-2.4997	.0000	.0000
22	-7.0849	.0000	-2.5015	-2.5003	-2.4997	.0000	.0000	.0000
23	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.5015
24	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.5015	.0000
25	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.5009	-2.4998
26	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-2.5031	-2.5003
27	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
28	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
29	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
30	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.4637	.0000	.0000	.0000
	25	26	27	28	29	30		
1	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000		
2	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000		
3	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000		
4	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000		
5	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000		
6	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000		
7	.0000	-6.8736	.0000	.0000	.0000	.0000		
8	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000		
9	.0000	.0000	.0000	-7.3609	.0000	.0000		
10	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.3508	.0000		
11	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000		
12	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000		
13	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000		
14	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000		
15	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000		
16	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000		
17	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000		
18	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000		
19	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000		
20	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000		
21	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	-7.4637		
22	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000		
23	-2.5009	-2.5031	.0000	.0000	.0000	.0000		

24	-2.4998	-2.5003	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
25	.0000	-2.5002	-7.3632	.0000	.0000	.0000	.0000
26	-2.5002	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
27	-7.3632	.0000	.0000	-2.4991	-2.4982	-2.4984	
28	.0000	.0000	-2.4991	.0000	-2.4979	-2.5007	
29	.0000	.0000	-2.4982	-2.4979	.0000	-2.4997	
30	.0000	.0000	-2.4984	-2.5007	-2.4997	.0000	

h'=h-(alfa)*S

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	.2004	-1.4164	-.1591	-.5791	-.0270	-.0394	-.4754	-.1417
2	-1.4164	.1999	-.5122	-.2111	-.0394	-.0121	-.2694	-.4622
3	-.1591	-.5122	.1998	-1.4243	-.5777	-.2135	-.0172	-.1167
4	-.5791	-.2111	-1.4243	.1994	-.1593	-.5132	-.0163	-.0260
5	-.0270	-.0394	-.5777	-.1593	.2004	-1.4154	-.0285	-.2795
6	-.0394	-.0121	-.2135	-.5132	-1.4154	.2009	-.0126	-.0319
7	-.4754	-.2694	-.0172	-.0163	-.0285	-.0126	.1983	-1.3975
8	-.1417	-.4622	-.1167	-.0260	-.2795	-.0319	-1.3975	.2007
9	-.2800	-.0340	-.0264	-.1167	-.1399	-.4614	-.4300	-.1370
10	-.0299	-.0150	-.0181	-.0166	-.4737	-.2689	-.2934	-.4307
11	-3.0048	-1.5663	-.7669	-.7708	-.2825	-.1642	-1.2829	-1.4290
12	-7.2171	-2.7565	-.5005	-1.1803	-.0623	-.0932	-.6011	-.0750
13	-2.0761	-5.2573	-1.6106	-1.2862	-.2275	-.1200	-.0704	-.6828
14	-3.7388	-6.4670	-.3225	-.0120	-.0479	.0047	-1.1456	-1.1239
15	-1.0731	-1.2370	-3.6962	-.9763	-1.2206	-.6765	-.1574	-.4996
16	-1.4719	-.7945	-1.2920	-6.3989	-.2419	-.7825	-.0995	-.1435
17	-.1054	.0078	-4.2983	-4.3444	-1.4278	-1.4820	-.0310	-.1464
18	-.6536	-1.0589	-6.7578	-4.3256	-.4112	-.1451	-.0296	-.1447
19	-.0735	-.0084	-.4280	-.8665	-2.9739	-7.3801	-.0150	.0221
20	-.0386	-.0743	-.9375	-.2758	-7.3734	-2.8902	-.0560	-.3832
21	-.2255	-.1130	-.3074	-.4868	-2.8413	-2.8836	-.1647	-.4907
22	-.2838	-.1790	-1.5751	-1.5740	-2.8453	-2.8901	-.0981	-.3433
23	-1.4845	-1.2210	-.2897	-.2217	-.4087	-.1607	-1.7651	-2.5565
24	-.3012	-.9471	-.1871	-.0603	-.3382	-.0580	-2.7780	-7.3328
25	-.3703	.0347	-.0562	-.0624	-.3083	-.1168	-4.6306	-3.4070
26	-1.2261	-1.0108	-.0566	-.0619	.0259	-.0095	-6.8736	-2.7444
27	-.5053	-.1887	-.1882	-.2515	-.9771	-.6693	-1.2689	-1.4459
28	-.3236	-.0538	-.0502	-.1681	-.2333	-.8693	-.6968	-.1249
29	-.1050	-.0538	-.0226	.0138	-.5478	-.1222	-1.1158	-1.1670
30	-.1041	-.0562	-.1462	-.1873	-1.6156	-1.4785	-.0286	-.5936
	9	10	11	12	13	14	15	16
1	-.2800	-.0299	-3.0048	-7.2171	-2.0761	-3.7388	-1.0731	-1.4719
2	-.0340	-.0150	-1.5663	-2.7565	-5.2573	-6.4670	-1.2370	-.7945
3	-.0264	-.0181	-.7669	-.5005	-1.6106	-.3225	-3.6962	-1.2920
4	-.1167	-.0166	-.7708	-1.1803	-1.2862	-.0120	-.9763	-6.3989
5	-.1399	-.4737	-.2825	-.0623	-.2275	-.0479	-1.2206	-.2419
6	-.4614	-.2689	-.1642	-.0932	-.1200	.0047	-.6765	-.7825
7	-.4300	-.2934	-1.2829	-.6011	-.0704	-1.1456	-.1574	-.0995
8	-.1370	-.4307	-1.4290	-.0750	-.6828	-1.1239	-.4996	-.1435
9	.2034	-1.3963	-.5814	-.3703	-.1201	-.1233	-.3440	-.3590
10	-1.3963	.1979	-.1793	-.0513	-.0529	-.0534	-.1463	-.0738
11	-.5814	-.1793	-.0997	-2.5010	-2.5011	-2.5019	-4.7710	-3.2540
12	-.3703	-.0513	-2.5010	-.0993	-2.4997	-2.4999	-2.8268	-3.4476
13	-.1201	-.0529	-2.5011	-2.4997	-.0997	-2.4994	-5.9294	-4.4443
14	-.1233	-.0534	-2.5019	-2.4999	-2.4994	-.1029	-.7350	.0904
15	-.3440	-.1463	-4.7710	-2.8268	-5.9294	-.7350	-.1019	-2.5005
16	-.3590	-.0738	-3.2540	-3.4476	-4.4443	.0904	-2.5005	-.0984
17	-.2523	-.1014	-.5539	.2349	-.4378	1.0269	-2.5024	-2.5025
18	.0221	.0015	-1.4826	-1.5443	-3.9246	-.1287	-2.5006	-2.4995
19	-.8313	-.5535	-.1513	-.0352	-.0518	.2571	-.9643	-1.0770
20	-.2042	-.8236	-.5544	.0130	-.3960	.0762	-2.1648	-.0261
21	-1.6122	-1.5127	-1.4347	-.4918	-.7991	-.0367	-2.5268	-1.3397
22	-.6572	-.2067	-1.7925	-.7480	-1.3701	-.0420	-5.6487	-3.5035
23	-1.1722	-.7018	-7.3561	-2.2589	-2.1320	-4.1832	-2.3609	-1.2636
24	-.1169	-.6607	-3.2170	.2130	-.9950	-2.3102	-1.0746	-.3093
25	-1.4356	-1.5395	-1.4820	.0605	.5370	.0704	-.6226	-.2537
26	-.6036	-.2098	-4.1735	-1.3690	-.2865	-3.4503	-.4849	-.2558
27	-3.1083	-1.4821	-2.6646	-.9777	-.8002	-.6405	-1.8644	-1.1528
28	-7.3609	-3.0679	-1.0115	-.4412	-.1072	-.0558	-.6472	-.5512
29	-2.9501	-6.7079	-.6339	-.0148	.0353	-.1053	-.1164	.1154
30	-2.6123	-4.7855	-.7774	-.1270	-.2399	.0617	-1.2164	-.6865
	17	18	19	20	21	22	23	24
1	-.1054	-.6536	-.0735	-.0386	-.2255	-.2838	-1.4845	-.3012
2	.0078	-1.0589	-.0084	-.0743	-.1130	-.1790	-1.2210	-.9471
3	-4.2983	-6.7578	-.4280	-.9375	-.3074	-1.5751	-.2897	-.1871
4	-4.3444	-4.3256	-.8665	-.2758	-.4868	-1.5740	-.2217	-.0603

5	-1.4278	-.4112	-2.9739	-7.3734	-2.8413	-2.8453	-.4087	-.3382
6	-1.4820	-.1451	-7.3801	-2.8902	-2.8836	-2.8901	-.1607	-.0580
7	-.0310	-.0296	-.0150	-.0560	-.1647	-.0981	-1.7651	-2.7780
8	-.1464	-.1447	.0221	-.3832	-.4907	-.3433	-2.5565	-7.3328
9	-.2523	.0221	-.8313	-.2042	-1.6122	-.6572	-1.1722	-.1169
10	-.1014	.0015	-.5535	-.8236	-1.5127	-.2067	-.7018	-.6607
11	-.5539	-1.4826	-.1513	-.5544	-1.4347	-1.7925	-7.3561	-3.2170
12	.2349	-1.5443	-.0352	.0130	-.4918	-.7480	-2.2589	.2130
13	-.4378	-3.9246	-.0518	-.3960	-.7991	-1.3701	-2.1320	-.9950
14	1.0269	-.1287	.2571	.0762	-.0367	-.0420	-4.1832	-2.3102
15	-2.5024	-2.5006	-.9643	-2.1648	-2.5268	-5.6487	-2.3609	-1.0746
16	-2.5025	-2.4995	-1.0770	-.0261	-1.3397	-3.5035	-1.2636	-.3093
17	-.1001	-2.5005	-2.7515	-2.6616	-2.0843	-7.0849	-.5978	-.1575
18	-2.5005	-.0988	.4079	-.1485	.6281	-1.1791	-.4433	-.1556
19	-2.7515	.4079	-.1005	-2.5005	-2.4996	-2.5015	-.0595	.2018
20	-2.6616	-.1485	-2.5005	-.0980	-2.4992	-2.5003	-.8257	-.5022
21	-2.0843	.6281	-2.4996	-2.4992	-.0992	-2.4997	-1.9937	-.9069
22	-7.0849	-1.1791	-2.5015	-2.5003	-2.4997	-.1025	-1.4812	-.6075
23	-.5978	-.4433	-.0595	-.8257	-1.9937	-1.4812	-.1007	-2.5015
24	-.1575	-.1556	.2018	-.5022	-.9069	-.6075	-2.5015	-.0998
25	-.1331	.1402	-.0013	-.5387	-1.4598	-.7479	-2.5009	-2.4998
26	.1258	.0174	.2305	.2187	-.0265	.0152	-2.5031	-2.5003
27	-1.0793	.0352	-.9405	-1.6578	-5.3087	-2.5206	-5.7638	-2.4524
28	-.4184	.2251	-1.2357	.0136	-3.2690	-.8058	-1.7696	.4372
29	.0928	.2178	.4345	-.4342	-1.4720	.4464	-2.5822	-1.5946
30	-.9243	.1401	-2.7631	-3.0638	-7.4637	-2.2727	-1.3030	-.4698
	25	26	27	28	29	30		
1	-.3703	-1.2261	-.5053	-.3236	-.1050	-.1041		
2	.0347	-1.0108	-.1887	-.0538	-.0538	-.0562		
3	-.0562	-.0566	-.1882	-.0502	-.0226	-.1462		
4	-.0624	-.0619	-.2515	-.1681	.0138	-.1873		
5	-.3083	.0259	-.9771	-.2333	-.5478	-1.6156		
6	-.1168	-.0095	-.6693	-.8693	-.1222	-1.4785		
7	-4.6306	-6.8736	-1.2689	-.6968	-1.1158	-.0286		
8	-3.4070	-2.7444	-1.4459	-.1249	-1.1670	-.5936		
9	-1.4356	-.6036	-3.1083	-7.3609	-2.9501	-2.6123		
10	-1.5395	-.2098	-1.4821	-3.0679	-6.7079	-4.7855		
11	-1.4820	-4.1735	-2.6646	-1.0115	-.6339	-.7774		
12	.0605	-1.3690	-.9777	-.4412	-.0148	-.1270		
13	.5370	-.2865	-.8002	-.1072	.0353	-.2399		
14	.0704	-3.4503	-.6405	-.0558	-.1053	.0617		
15	-.6226	-.4849	-1.8644	-.6472	-.1164	-1.2164		
16	-.2537	-.2558	-1.1528	-.5512	.1154	-.6865		
17	-.1331	.1258	-1.0793	-.4184	.0928	-.9243		
18	.1402	.0174	.0352	.2251	.2178	.1401		
19	-.0013	.2305	-.9405	-1.2357	.4345	-2.7631		
20	-.5387	.2187	-1.6578	.0136	-.4342	-3.0638		
21	-1.4598	-.0265	-5.3087	-3.2690	-1.4720	-7.4637		
22	-.7479	.0152	-2.5206	-.8058	.4464	-2.2727		
23	-2.5009	-2.5031	-5.7638	-1.7696	-2.5822	-1.3030		
24	-2.4998	-2.5003	-2.4524	.4372	-1.5946	-.4698		
25	-.0981	-2.5002	-6.5068	-2.3530	-5.0030	-1.3495		
26	-2.5002	-.1023	-1.4711	-.4170	-.6861	.9063		
27	-6.5068	-1.4711	-.0975	-2.4991	-2.4982	-2.4984		
28	-2.3530	-.4170	-2.4991	-.0982	-2.4979	-2.5007		
29	-5.0030	-.6861	-2.4982	-2.4979	-.1012	-2.4997		
30	-1.3495	.9063	-2.4984	-2.5007	-2.4997	-.1024		

EHT den gelen özdegerler

41.9503000
41.8887000
23.0371000
23.0263000
13.6306000
8.2200000
6.5606000
6.3905000
5.9109000
3.0524000
3.0116000
2.5445000
.1905000
.1002000
-.31800000E-01
-13.5610000

HAO dan gelen özdegerler

41.9502981
41.8887029
23.0371003
23.0262984
13.6305995
8.21999920
6.56059972
6.39050070
5.91090270
3.05239831
3.01159986
2.54450070
.190500364
.100200314
-.317997493E-01
-13.5609999

Ei-alfa

55.7508676
55.6892676
36.8376676
36.8268676
27.4311676
22.0205676
20.3611676
20.1910676
19.7114676
16.8529676
16.8121676
16.3450676
13.9910676
13.9007676
13.7687676
.239567627

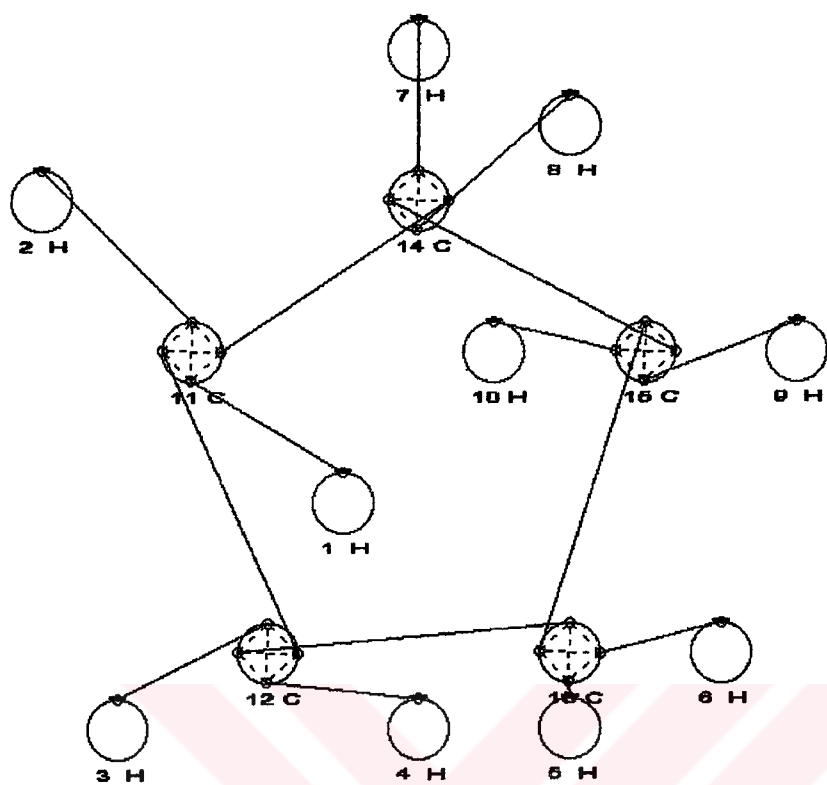
-13.6460000	-13.6459998	.154567627
-13.6796000	-13.6796001	.120967627
-13.7130000	-13.7129997	.875676270E-01
-14.2696000	-14.2695988	-.469032373
-14.3343000	-14.3342988	-.533732373
-15.6557000	-15.6556989	-1.85513237
-15.6723000	-15.6722986	-1.87173237
-16.0946000	-16.0945986	-2.29403237
-16.6004000	-16.6003989	-2.79983237
-19.5793000	-19.5793003	-5.77873237
-19.7510000	-19.7510003	-5.95043237
-24.4867000	-24.4866997	-10.6861324
-24.4894000	-24.4893992	-10.6888324
-28.8803000	-28.8802990	-15.0797324

EHTD (kulakli)

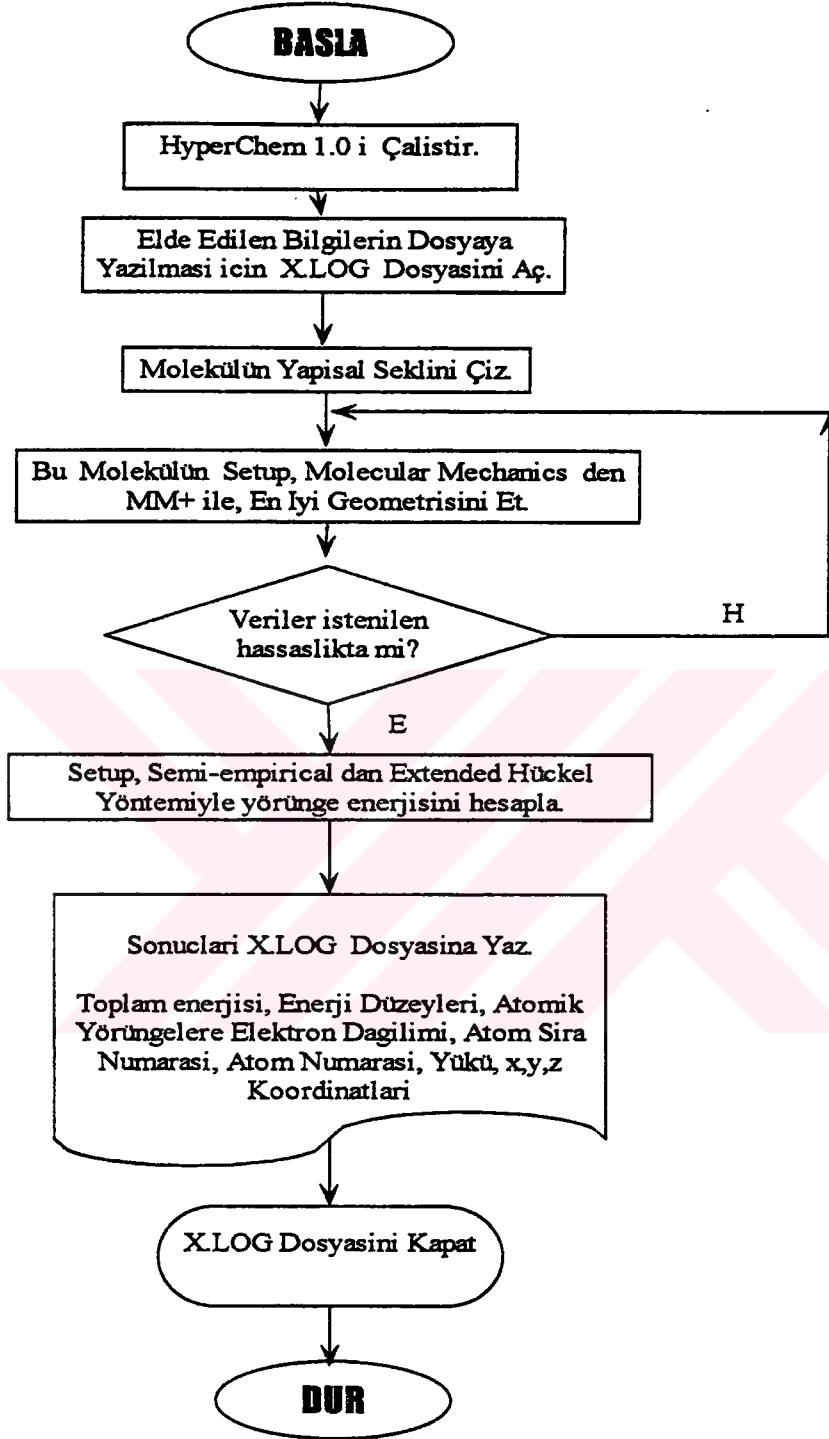
27.2810109
26.2591385
24.6554373
23.5638850
22.2557874
22.0201403
20.9539684
19.3559029
17.5389151
16.9082338
15.9174003
14.8119129
12.9970206
10.6349318
9.65935747
-3.09526411
-3.39452722
-3.83702225
-4.02268191
-4.08404755
-4.37304874
-4.59942686
-4.89316682
-4.97476388
-5.69644054
-6.97398569
-8.94445102
-9.92001447
-10.4205634
-11.8285549

EHTD (kulaksiz)

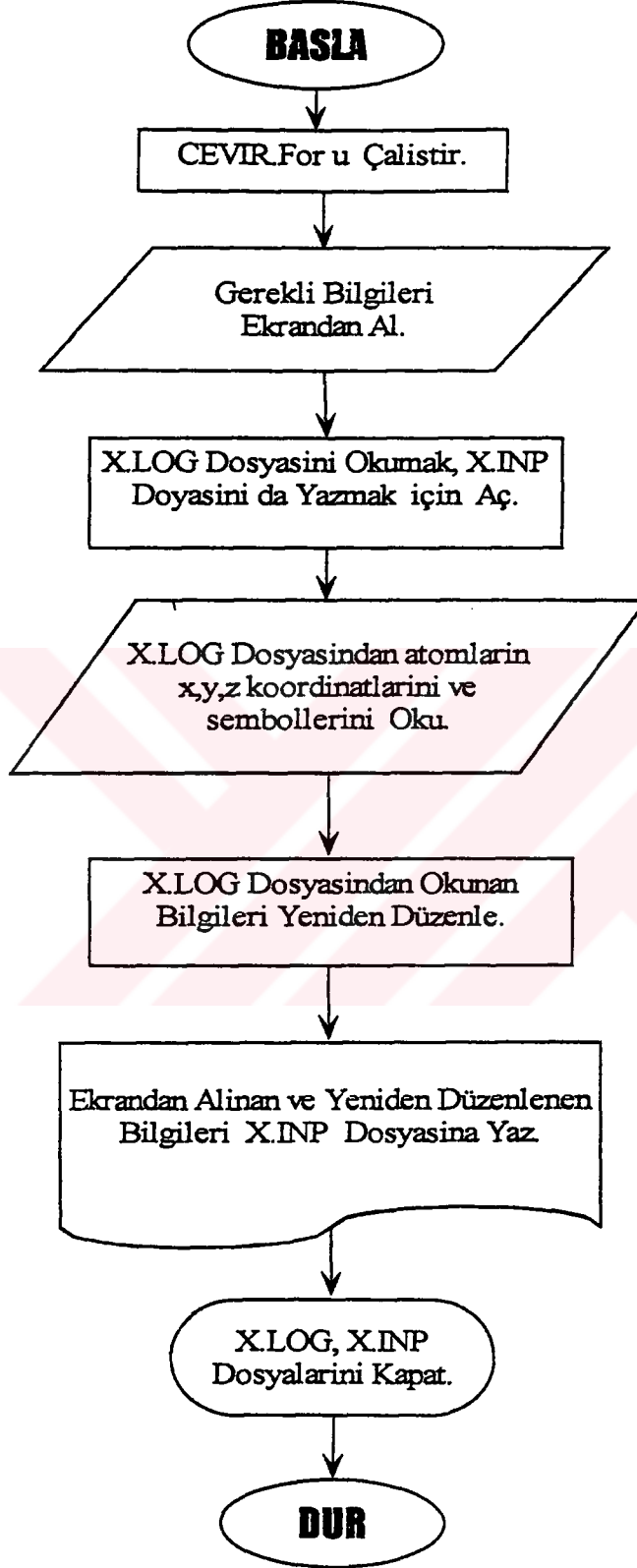
27.2117148
26.2021988
24.7395124
23.5375963
22.1688309
22.1108626
20.8330298
19.2845691
17.4251214
16.8606303
15.9705129
14.7516777
13.0769360
10.7175816
9.76218820
-3.12199130
-3.41951762
-3.86010299
-4.06907919
-4.09533698
-4.38732874
-4.60189429
-4.92176784
-5.03727328
-5.72374316
-6.91955980
-8.83524000
-9.79604565
-10.2502079
-11.6081672



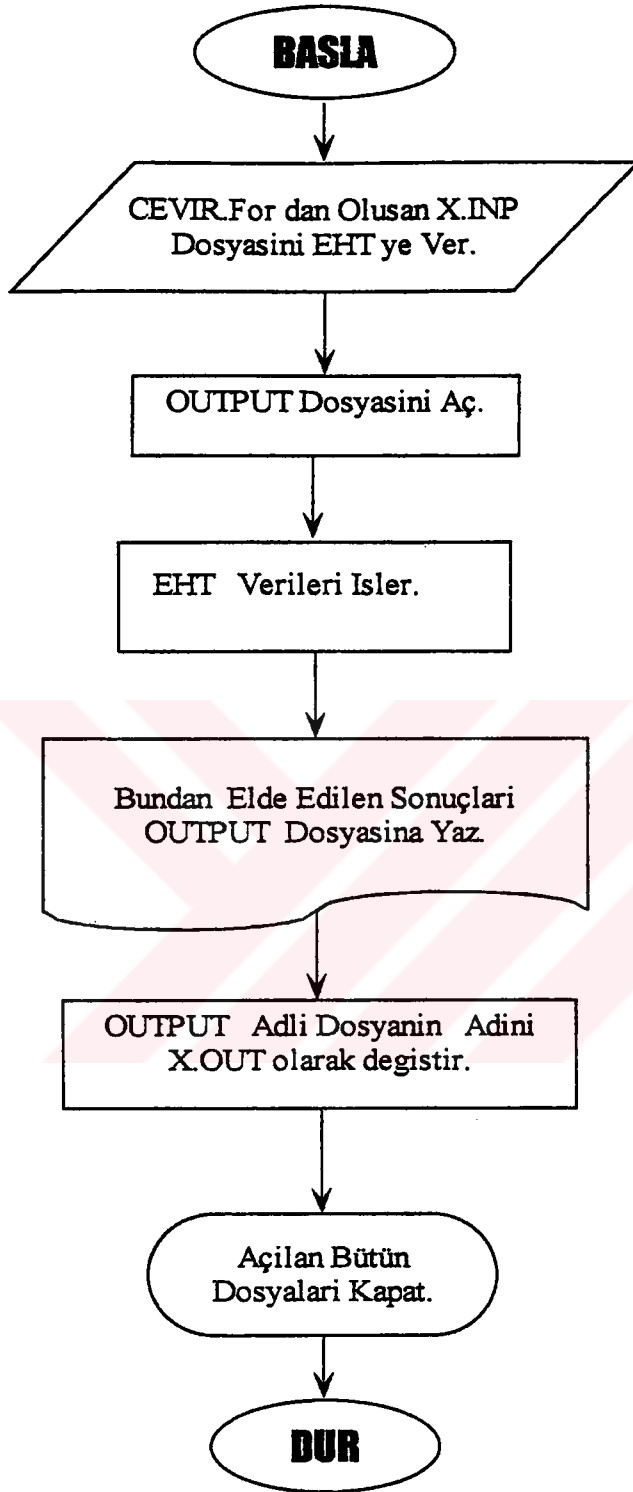
EK.2 Çalıştırılan Bilgisayar Programlarının Akış Şemaları



Akış Şeması I. HyperChem programının çalışması.

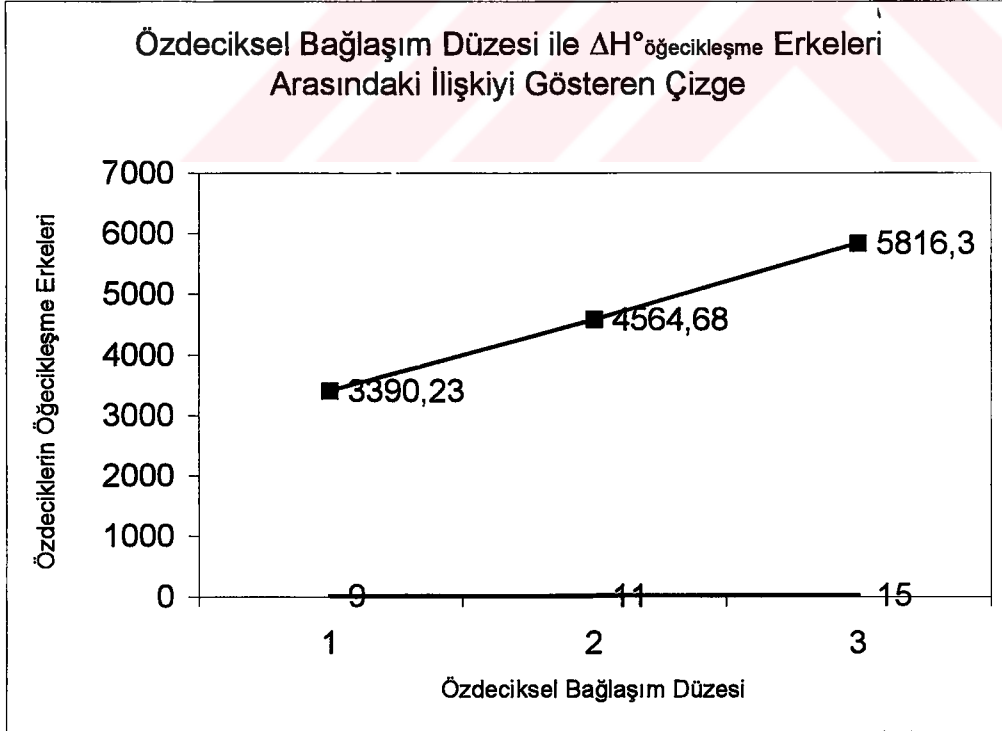
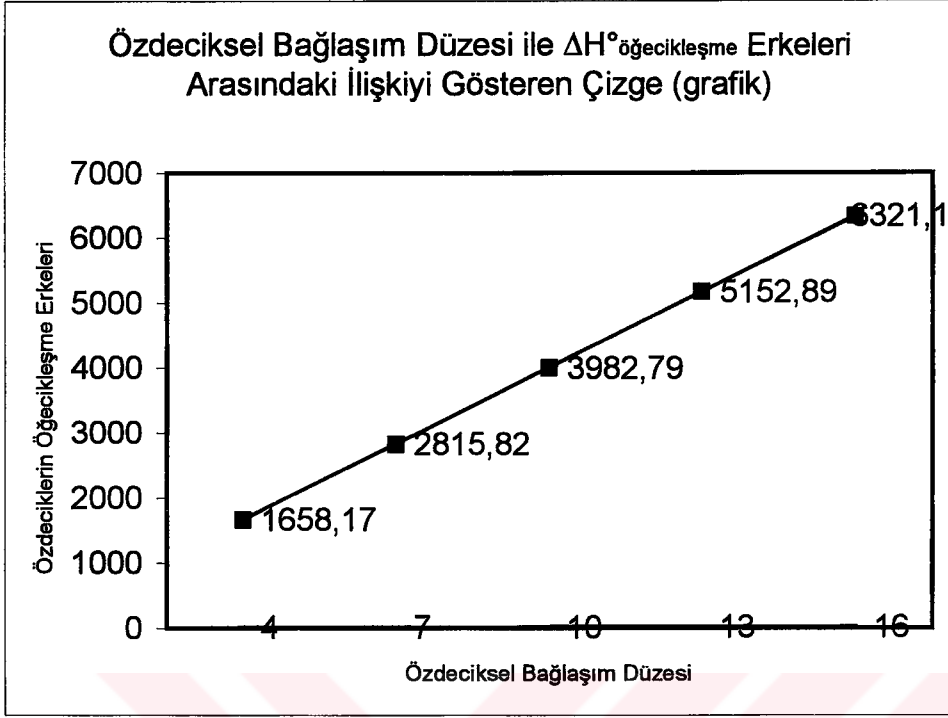


Akış Şeması II. CEVIR.FOR programının çalışması.



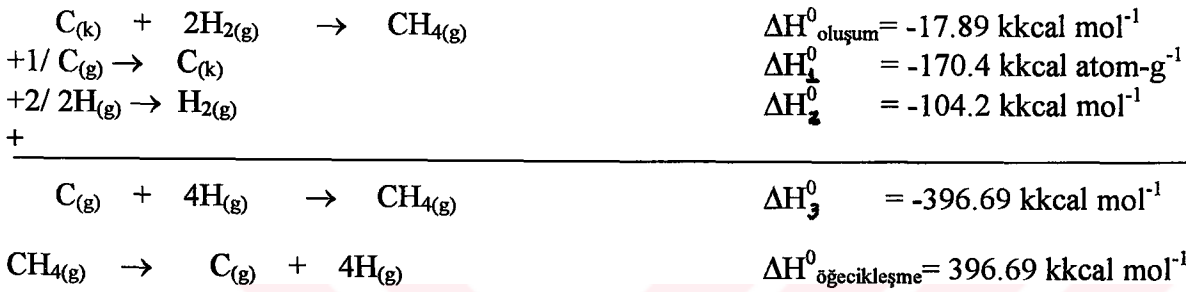
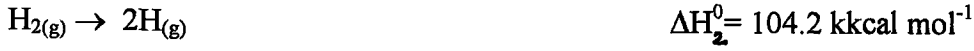
Akış Şeması III. EHT programının çalışması.

EK.3: Bölüm 2 deki özdeciksel bağlaşım düzeyi ile özdeciklerin öğecikleşme erkeleri arasındaki ilişkileri gösteren çizgeler:



İlk çizge Çizelge 2.7 için, ikincisi ise Çizelge 2.8 içindir.

Örnek olarak metan (CH₄) özdecığının öğecikleşme erkesinin nasıl hesaplandığını görelim:



Metanın ve diğör özdecıkların öğecikleşme erkesi hesabı için gereken veriler Pekin (1985) ve Lange's Handbook of Chemistry (Dean, 1979) dan alınmıştır. Bu veriler, kaynaklarda mol başına kkal türünden olup, mol başına kj enerji birimine dönüştürülmüştür.

ÖZGEÇMİŞ

Doğum Tarihi : 27.08.1964
Doğum Yeri : Malatya
Lise : 1978-1981 Malatya Turan Emeksiz Lisesi
Lisans : 1984-1990 İstanbul Üniversitesi Mühendislik
Fakültesi Kimya Bölümü
Çalıştığı Kurumlar : 1999-Devam ediyor YTÜ Kimya-Metalurji Fakültesi
Metalurji Bölümü Araştırma Görevlisi

