

Electronic Structure Calculations

The gas phase global minima of cyclobutane and n-butane have been found by first applying a geometry optimization at the MP2 level of theory.¹ All atoms were described by a polarized correlation consistent basis set of triple zeta quality augmented with a set of diffuse functions (aug-cc-pvtz).² After the relevant stationary points were localized on the energy surface, they were further characterized as minima states by normal mode analysis based on the analytical energy second derivatives. All calculations have been done using the Gaussian03 set of programs.³

- 1 C. Møller and M. S. Plesset, *Phys. Rev.*, 1934, **46**, 618.
- 2 T.H. Dunning, Jr., *J. Chem. Phys.*, 1989, **90**, 1007.
- 3 M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, J. A. Montgomery, Jr., T. Vreven, K. N. Kudin, J. C. Burant, J. M. Millam, S. S. Iyengar, J. Tomasi, V. Barone, B. Mennucci, M. Cossi, G. Scalmani, N. Rega, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, M. Klene, X. Li, J. E. Knox, H. P. Hratchian, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, P. Y. Ayala, K. Morokuma, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, V. G. Zakrzewski, S. Dapprich, A. D. Daniels, M. C. Strain, O. Farkas, D. K. Malick, A. D. Rabuck, K. Raghavachari, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, Q. Cui, A. G. Baboul, S. Clifford, J. Cioslowski, B. B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R. L. Martin, D. J. Fox, T. Keith, M. A. Al-Laham, C. Y. Peng, A. Nanayakkara, M. Challacombe, P. M. W. Gill, B. Johnson, W. Chen, M. W. Wong, C. Gonzalez, and J. A. Pople, Revision D.02, Gaussian, Inc., Wallingford CT, **2004**.

Optimized Structures (Cartesian Coordinates, unit: 10⁻¹⁰ m)

Cyclobutane

E = -97986.1477517 a.u.

C	0.00000	1.06907	0.14749
C	0.00000	-1.06907	0.14749
C	-1.06907	0.00000	-0.14749
C	1.06907	0.00000	-0.14749
H	0.00000	1.97718	-0.44733
H	0.00000	1.32898	1.20363
H	0.00000	-1.97718	-0.44733
H	0.00000	-1.32898	1.20363
H	-1.97718	0.00000	0.44733
H	-1.32898	0.00000	-1.20363
H	1.97718	0.00000	0.44733
H	1.32898	0.00000	-1.20363

n-butane

E = -98742.5760322 a.u.

C	0.69993	1.80873	0.00000
C	0.69993	0.29166	0.00000
C	-0.69993	-0.29166	0.00000
C	-0.69993	-1.80873	0.00000
H	1.71033	2.21089	0.00000
H	-1.71033	-2.21089	0.00000
H	0.18567	2.19314	0.87899
H	0.18567	2.19314	-0.87899
H	-0.18567	-2.19314	0.87899
H	-0.18567	-2.19314	-0.87899
H	1.23877	-0.07719	-0.87416
H	1.23877	-0.07719	0.87416
H	-1.23877	0.07719	-0.87416
H	-1.23877	0.07719	0.87416

Definition of Internal Sets of Coordinates

Cyclobutane

Definition of Natural Internal Coordinates

Number	Type	Atom 1	Atom 2	Atom 3	Atom 4	Coefficient 1	Coefficient 2
1.	STRE	3	1	0	0	1.00000	1.000000
2.	STRE	3	2	0	0	1.00000	1.000000
3.	STRE	4	1	0	0	1.00000	1.000000
4.	STRE	4	2	0	0	1.00000	1.000000
5.	STRE	5	1	0	0	1.00000	1.000000
6.	STRE	6	1	0	0	1.00000	1.000000
7.	STRE	7	2	0	0	1.00000	1.000000
8.	STRE	8	2	0	0	1.00000	1.000000
9.	STRE	9	3	0	0	1.00000	1.000000
10.	STRE	10	3	0	0	1.00000	1.000000
11.	STRE	11	4	0	0	1.00000	1.000000
12.	STRE	12	4	0	0	1.00000	1.000000
13.	BEND	4	3	1	0	1.00000	1.000000
	BEND	1	2	3	0	-1.00000	1.000000
	BEND	3	4	2	0	1.00000	1.000000
	BEND	2	1	4	0	-1.00000	1.000000
14.	TORS	4	1	3	2	2.00000	1.000000
	TORS	1	3	2	4	-2.00000	1.000000
	TORS	3	2	4	1	2.00000	1.000000
	TORS	2	4	1	3	-2.00000	1.000000
15.	BEND	5	6	1	0	4.00000	1.000000
	BEND	5	3	1	0	-1.00000	1.000000
	BEND	5	4	1	0	-1.00000	1.000000
	BEND	6	3	1	0	-1.00000	1.000000
	BEND	6	4	1	0	-1.00000	1.000000
16.	BEND	5	3	1	0	1.00000	1.000000
	BEND	5	4	1	0	1.00000	1.000000
	BEND	6	3	1	0	-1.00000	1.000000
	BEND	6	4	1	0	-1.00000	1.000000
17.	BEND	5	3	1	0	1.00000	1.000000
	BEND	5	4	1	0	-1.00000	1.000000
	BEND	6	3	1	0	1.00000	1.000000
	BEND	6	4	1	0	-1.00000	1.000000
18.	BEND	5	3	1	0	1.00000	1.000000
	BEND	5	4	1	0	-1.00000	1.000000
	BEND	6	3	1	0	-1.00000	1.000000
	BEND	6	4	1	0	1.00000	1.000000
19.	BEND	7	8	2	0	4.00000	1.000000
	BEND	7	3	2	0	-1.00000	1.000000
	BEND	7	4	2	0	-1.00000	1.000000
	BEND	8	3	2	0	-1.00000	1.000000
	BEND	8	4	2	0	-1.00000	1.000000
20.	BEND	7	3	2	0	1.00000	1.000000
	BEND	7	4	2	0	1.00000	1.000000
	BEND	8	3	2	0	-1.00000	1.000000
	BEND	8	4	2	0	-1.00000	1.000000
21.	BEND	7	3	2	0	1.00000	1.000000
	BEND	7	4	2	0	-1.00000	1.000000
	BEND	8	3	2	0	1.00000	1.000000
	BEND	8	4	2	0	-1.00000	1.000000
22.	BEND	7	3	2	0	1.00000	1.000000
	BEND	7	4	2	0	-1.00000	1.000000
	BEND	8	3	2	0	-1.00000	1.000000
	BEND	8	4	2	0	1.00000	1.000000
23.	BEND	9	10	3	0	4.00000	1.000000
	BEND	9	1	3	0	-1.00000	1.000000
	BEND	9	2	3	0	-1.00000	1.000000
	BEND	10	1	3	0	-1.00000	1.000000
	BEND	10	2	3	0	-1.00000	1.000000
24.	BEND	9	1	3	0	1.00000	1.000000
	BEND	9	2	3	0	1.00000	1.000000
	BEND	10	1	3	0	-1.00000	1.000000
	BEND	10	2	3	0	-1.00000	1.000000
25.	BEND	9	1	3	0	1.00000	1.000000
	BEND	9	2	3	0	-1.00000	1.000000
	BEND	10	1	3	0	1.00000	1.000000
	BEND	10	2	3	0	-1.00000	1.000000
26.	BEND	9	1	3	0	1.00000	1.000000
	BEND	9	2	3	0	-1.00000	1.000000
	BEND	10	1	3	0	-1.00000	1.000000
	BEND	10	2	3	0	1.00000	1.000000

27.	BEND	11	12	4	0	4.000000	1.000000
	BEND	11	1	4	0	-1.000000	1.000000
	BEND	11	2	4	0	-1.000000	1.000000
	BEND	12	1	4	0	-1.000000	1.000000
	BEND	12	2	4	0	-1.000000	1.000000
28.	BEND	11	1	4	0	1.000000	1.000000
	BEND	11	2	4	0	1.000000	1.000000
	BEND	12	1	4	0	-1.000000	1.000000
	BEND	12	2	4	0	-1.000000	1.000000
29.	BEND	11	1	4	0	1.000000	1.000000
	BEND	11	2	4	0	-1.000000	1.000000
	BEND	12	1	4	0	1.000000	1.000000
	BEND	12	2	4	0	-1.000000	1.000000
30.	BEND	11	1	4	0	1.000000	1.000000
	BEND	11	2	4	0	-1.000000	1.000000
	BEND	12	1	4	0	-1.000000	1.000000
	BEND	12	2	4	0	1.000000	1.000000

Cyclobutane

Definition of Primitive Internal Coordinates

Number	Type	Atom 1	Atom 2	Atom 3	Atom 4	Coefficient 1	Coefficient 2
1.	STRE	3	1	0	0	1.000000	1.000000
2.	STRE	3	2	0	0	1.000000	1.000000
3.	STRE	4	1	0	0	1.000000	1.000000
4.	STRE	4	2	0	0	1.000000	1.000000
5.	STRE	5	1	0	0	1.000000	1.000000
6.	STRE	6	1	0	0	1.000000	1.000000
7.	STRE	7	2	0	0	1.000000	1.000000
8.	STRE	8	2	0	0	1.000000	1.000000
9.	STRE	9	3	0	0	1.000000	1.000000
10.	STRE	10	3	0	0	1.000000	1.000000
11.	STRE	11	4	0	0	1.000000	1.000000
12.	STRE	12	4	0	0	1.000000	1.000000
13.	BEND	4	3	1	0	1.000000	1.000000
14.	TORS	4	1	3	2	1.000000	1.000000
15.	BEND	5	6	1	0	1.000000	1.000000
16.	BEND	5	3	1	0	1.000000	1.000000
17.	BEND	5	4	1	0	1.000000	1.000000
18.	BEND	6	3	1	0	1.000000	1.000000
19.	BEND	7	8	2	0	1.000000	1.000000
20.	BEND	7	1	2	0	1.000000	1.000000
21.	BEND	7	3	2	0	1.000000	1.000000
22.	BEND	8	3	2	0	1.000000	1.000000
23.	BEND	9	10	3	0	1.000000	1.000000
24.	BEND	9	1	3	0	1.000000	1.000000
25.	BEND	9	2	3	0	1.000000	1.000000
26.	BEND	10	1	3	0	1.000000	1.000000
27.	BEND	11	12	4	0	1.000000	1.000000
28.	BEND	11	1	4	0	1.000000	1.000000
29.	BEND	11	2	4	0	1.000000	1.000000
30.	BEND	12	2	4	0	1.000000	1.000000

n-butane

Definition of Natural Internal Coordinates

Number	Type	Atom 1	Atom 2	Atom 3	Atom 4	Coefficient 1	Coefficient 2
1.	STRE	2	1	0	0	1.000000	1.000000
2.	STRE	3	2	0	0	1.000000	1.000000
3.	STRE	4	3	0	0	1.000000	1.000000
4.	STRE	5	1	0	0	1.000000	1.000000
5.	STRE	6	4	0	0	1.000000	1.000000
6.	STRE	7	1	0	0	1.000000	1.000000
7.	STRE	8	1	0	0	1.000000	1.000000
8.	STRE	9	4	0	0	1.000000	1.000000
9.	STRE	10	4	0	0	1.000000	1.000000
10.	STRE	11	2	0	0	1.000000	1.000000
11.	STRE	12	2	0	0	1.000000	1.000000
12.	STRE	13	3	0	0	1.000000	1.000000
13.	STRE	14	3	0	0	1.000000	1.000000
14.	BEND	7	8	1	0	1.000000	1.000000
	BEND	5	8	1	0	1.000000	1.000000
	BEND	5	7	1	0	1.000000	1.000000
	BEND	2	5	1	0	-1.000000	1.000000
	BEND	2	7	1	0	-1.000000	1.000000
	BEND	2	8	1	0	-1.000000	1.000000
	BEND	7	8	1	0	2.000000	1.000000
15.	BEND	5	8	1	0	-1.000000	1.000000
	BEND	5	7	1	0	-1.000000	1.000000
	BEND	5	8	1	0	1.000000	1.000000
16.	BEND	5	8	1	0	1.000000	1.000000
	BEND	5	7	1	0	-1.000000	1.000000

Supplementary material (ESI) for Chemical Society Reviews
This journal is © The Royal Society of Chemistry 2008

17.	BEND	2	5	1	0	2.000000	1.000000
	BEND	2	7	1	0	-1.000000	1.000000
	BEND	2	8	1	0	-1.000000	1.000000
18.	BEND	2	7	1	0	1.000000	1.000000
	BEND	2	8	1	0	-1.000000	1.000000
19.	BEND	1	3	2	0	1.000000	1.000000
20.	BEND	11	12	2	0	4.000000	1.000000
	BEND	11	1	2	0	-1.000000	1.000000
	BEND	11	3	2	0	-1.000000	1.000000
	BEND	12	1	2	0	-1.000000	1.000000
	BEND	12	3	2	0	-1.000000	1.000000
21.	BEND	11	1	2	0	1.000000	1.000000
	BEND	11	3	2	0	1.000000	1.000000
	BEND	12	1	2	0	-1.000000	1.000000
	BEND	12	3	2	0	-1.000000	1.000000
22.	BEND	11	1	2	0	1.000000	1.000000
	BEND	11	3	2	0	-1.000000	1.000000
	BEND	12	1	2	0	1.000000	1.000000
	BEND	12	3	2	0	-1.000000	1.000000
23.	BEND	11	1	2	0	1.000000	1.000000
	BEND	11	3	2	0	-1.000000	1.000000
	BEND	12	1	2	0	-1.000000	1.000000
	BEND	12	3	2	0	1.000000	1.000000
24.	BEND	2	4	3	0	1.000000	1.000000
25.	BEND	13	14	3	0	4.000000	1.000000
	BEND	13	2	3	0	-1.000000	1.000000
	BEND	13	4	3	0	-1.000000	1.000000
	BEND	14	2	3	0	-1.000000	1.000000
	BEND	14	4	3	0	-1.000000	1.000000
26.	BEND	13	2	3	0	1.000000	1.000000
	BEND	13	4	3	0	1.000000	1.000000
	BEND	14	2	3	0	-1.000000	1.000000
	BEND	14	4	3	0	-1.000000	1.000000
27.	BEND	13	2	3	0	1.000000	1.000000
	BEND	13	4	3	0	-1.000000	1.000000
	BEND	14	2	3	0	1.000000	1.000000
	BEND	14	4	3	0	-1.000000	1.000000
28.	BEND	13	2	3	0	1.000000	1.000000
	BEND	13	4	3	0	-1.000000	1.000000
	BEND	14	2	3	0	-1.000000	1.000000
	BEND	14	4	3	0	1.000000	1.000000
29.	BEND	9	10	4	0	1.000000	1.000000
	BEND	6	10	4	0	1.000000	1.000000
	BEND	6	9	4	0	1.000000	1.000000
	BEND	3	6	4	0	-1.000000	1.000000
	BEND	3	9	4	0	-1.000000	1.000000
	BEND	3	10	4	0	-1.000000	1.000000
30.	BEND	9	10	4	0	2.000000	1.000000
	BEND	6	10	4	0	-1.000000	1.000000
	BEND	6	9	4	0	-1.000000	1.000000
31.	BEND	6	10	4	0	1.000000	1.000000
	BEND	6	9	4	0	-1.000000	1.000000
32.	BEND	3	6	4	0	2.000000	1.000000
	BEND	3	9	4	0	-1.000000	1.000000
	BEND	3	10	4	0	-1.000000	1.000000
33.	BEND	3	9	4	0	1.000000	1.000000
	BEND	3	10	4	0	-1.000000	1.000000
34.	TORS	3	2	1	5	1.000000	0.333333
	TORS	11	2	1	5	1.000000	0.333333
	TORS	12	2	1	5	1.000000	0.333333
	TORS	3	2	1	7	1.000000	0.333333
	TORS	11	2	1	7	1.000000	0.333333
	TORS	12	2	1	7	1.000000	0.333333
	TORS	3	2	1	8	1.000000	0.333333
	TORS	11	2	1	8	1.000000	0.333333
	TORS	12	2	1	8	1.000000	0.333333
35.	TORS	4	3	2	1	1.000000	0.333333
	TORS	13	3	2	1	1.000000	0.333333
	TORS	14	3	2	1	1.000000	0.333333
	TORS	4	3	2	11	1.000000	0.333333
	TORS	13	3	2	11	1.000000	0.333333
	TORS	14	3	2	11	1.000000	0.333333
	TORS	4	3	2	12	1.000000	0.333333
	TORS	13	3	2	12	1.000000	0.333333
	TORS	14	3	2	12	1.000000	0.333333
36.	TORS	6	4	3	2	1.000000	0.333333
	TORS	9	4	3	2	1.000000	0.333333
	TORS	10	4	3	2	1.000000	0.333333

TORS	6	4	3	13	1.00000	0.333333
TORS	9	4	3	13	1.00000	0.333333
TORS	10	4	3	13	1.00000	0.333333
TORS	6	4	3	14	1.00000	0.333333
TORS	9	4	3	14	1.00000	0.333333
TORS	10	4	3	14	1.00000	0.333333

n-butane

Definition of Primitive Internal Coordinates

Number	Type	Atom 1	Atom 2	Atom 3	Atom 4	Coefficient 1	Coefficient 2
1.	STRE	2	1	0	0	1.00000	1.000000
2.	STRE	3	2	0	0	1.00000	1.000000
3.	STRE	4	3	0	0	1.00000	1.000000
4.	STRE	5	1	0	0	1.00000	1.000000
5.	STRE	6	4	0	0	1.00000	1.000000
6.	STRE	7	1	0	0	1.00000	1.000000
7.	STRE	8	1	0	0	1.00000	1.000000
8.	STRE	9	4	0	0	1.00000	1.000000
9.	STRE	10	4	0	0	1.00000	1.000000
10.	STRE	11	2	0	0	1.00000	1.000000
11.	STRE	12	2	0	0	1.00000	1.000000
12.	STRE	13	3	0	0	1.00000	1.000000
13.	STRE	14	3	0	0	1.00000	1.000000
14.	BEND	7	8	1	0	1.00000	1.000000
15.	BEND	5	8	1	0	2.00000	1.000000
16.	BEND	5	7	1	0	1.00000	1.000000
17.	BEND	2	5	1	0	2.00000	1.000000
18.	BEND	2	7	1	0	1.00000	1.000000
19.	BEND	1	3	2	0	1.00000	1.000000
20.	BEND	11	12	2	0	4.00000	1.000000
21.	BEND	11	1	2	0	1.00000	1.000000
22.	BEND	11	3	2	0	1.00000	1.000000
23.	BEND	12	1	2	0	1.00000	1.000000
24.	BEND	2	4	3	0	1.00000	1.000000
25.	BEND	13	14	3	0	4.00000	1.000000
26.	BEND	13	2	3	0	1.00000	1.000000
27.	BEND	13	4	3	0	1.00000	1.000000
28.	BEND	14	2	3	0	1.00000	1.000000
29.	BEND	9	10	4	0	1.00000	1.000000
30.	BEND	6	10	4	0	2.00000	1.000000
31.	BEND	6	9	4	0	1.00000	1.000000
32.	BEND	3	6	4	0	2.00000	1.000000
33.	BEND	3	9	4	0	1.00000	1.000000
34.	TORS	3	2	1	5	1.00000	0.333333
35.	TORS	4	3	2	1	1.00000	0.333333
36.	TORS	6	4	3	2	1.00000	0.333333

Corresponding Hessian and Compliance Matrices

The elements of the hessian are given in units of N cm^{-1} (stretchings), aJ rad^{-2} (bendings, torsions) and $10^{-8} \text{ N rad}^{-1}$ (mixed couplings). The elements of the compliance matrix are given in units of cm N^{-1} (stretchings), $\text{rad}^2 \text{ aJ}^{-1}$ (bendings, torsions) and 10^8 rad N^{-1} (mixed couplings).

Cyclobutane

Natural Internal Coordinates

Hessian Matrix (lower triangle)

[illegible]

Cyclobutane

Natural Internal Coordinates

Compliance Matrix (lower triangle)

[illegible]

Supplementary material (ESI) for Chemical Society Reviews
This journal is © The Royal Society of Chemistry 2008

0.049	0.031	-0.021	0.018	-0.049	-0.031	0.021	0.000	0.000	-0.024	-0.020	0.000	0.000	1.415	
0.001	-0.001	0.031	-0.031	-0.004	0.003	0.004	-0.003	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.023
-0.167	-0.021	0.153	0.023	0.167	0.021	-0.153	0.000	0.000	-0.020	-0.042	0.000	0.000	0.083	1.387

Cyclobutane

Primitive Internal Coordinates

Hessian Matrix (lower triangle)

4.914														
-0.459	4.906													
0.786	-0.771	5.340												
-0.864	0.813	-0.976	5.504											
0.019	0.044	0.005	0.056	5.425										
0.062	-0.011	0.084	0.004	0.043	5.371									
-0.102	0.135	-0.091	0.182	0.009	0.001	5.425								
0.021	0.086	0.000	0.033	0.001	0.004	0.043	5.371							
0.122	0.025	0.036	-0.059	0.000	0.011	0.000	0.011	5.425						
0.135	0.064	0.012	-0.072	0.011	-0.012	0.011	-0.012	0.043	5.371					
0.026	-0.055	0.111	0.043	0.000	0.011	0.000	0.011	0.009	0.001	5.425				
0.020	-0.061	0.144	0.036	0.011	-0.012	0.011	-0.012	0.001	0.004	0.043	5.371			
2.271	-1.804	2.233	-2.779	-0.163	-0.081	-0.192	-0.004	0.141	0.115	0.152	0.084	6.953		
0.855	-0.627	0.979	-1.158	-0.100	0.025	-0.138	0.128	-0.007	0.054	-0.048	0.106	1.775	2.605	
0.122	0.056	-0.439	0.038	0.149	0.020	0.008	-0.009	-0.013	0.005	0.017	-0.045	0.701	-0.153	1.703
0.238	0.120	-0.333	0.090	0.061	-0.114	0.019	-0.002	0.003	-0.013	0.007	-0.039	0.434	-0.168	0.923
1.335														
0.110	0.135	-0.266	0.136	0.061	-0.114	0.019	-0.002	-0.017	0.002	0.027	-0.054	0.378	-0.212	0.940
0.662	1.363													
0.336	0.058	-0.442	0.048	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.022	0.038	0.022	-0.038	0.606	-0.069	1.099
0.881	0.907	1.637												
0.026	-0.018	0.038	-0.269	0.008	-0.009	0.149	0.020	-0.013	0.005	0.017	-0.045	0.269	-0.929	0.012
0.001	0.003	0.007	1.703											
-0.402	0.419	-0.365	0.489	0.024	-0.002	0.075	-0.139	-0.021	0.003	0.034	-0.066	-0.385	-1.657	0.004
0.003	0.034	0.009	1.155	2.058										
0.359	-0.177	0.346	-0.528	0.000	0.000	0.000	0.000	0.020	-0.015	-0.020	0.015	0.414	0.622	-0.002
0.023	-0.025	-0.003	-0.017	-0.861	1.374									
0.059	0.251	0.025	-0.334	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.022	0.038	0.022	-0.038	0.303	-0.770	0.007
0.004	0.007	0.010	1.099	1.114	-0.026	1.637								
-0.397	-0.386	-0.024	0.584	-0.013	0.005	0.017	-0.045	0.149	0.020	0.008	-0.009	-0.814	-0.361	-0.002
-0.019	-0.020	0.046	-0.064	-0.088	0.077	-0.179	1.703							
-0.093	-0.288	0.060	0.436	0.003	-0.013	0.007	-0.039	0.061	-0.114	0.019	-0.002	-0.523	-0.279	-0.019
0.000	-0.043	-0.018	-0.071	-0.078	0.040	-0.145	0.923	1.335						
-0.204	-0.184	0.046	0.456	-0.017	0.002	0.027	-0.054	0.061	-0.114	0.019	-0.002	-0.519	-0.263	-0.020
-0.043	-0.022	0.039	-0.069	-0.105	0.105	-0.201	0.940	0.662	1.363					
-0.134	-0.379	-0.031	0.543	-0.022	0.038	0.022	-0.038	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.732	-0.266	0.046
-0.018	0.039	0.168	-0.046	-0.047	0.056	-0.168	1.099	0.881	0.907	1.637				
-0.002	0.475	-0.885	0.189	0.017	-0.045	-0.013	0.005	0.008	-0.009	0.149	0.020	-0.692	-0.364	0.176
0.124	0.201	0.179	-0.064	-0.085	-0.002	-0.046	0.002	-0.005	-0.006	-0.007	1.703			
0.091	0.348	-0.485	0.161	0.027	-0.054	-0.017	0.002	0.019	-0.002	-0.114	-0.368	-0.263	0.201	
0.135	0.239	0.201	-0.072	-0.105	0.022	-0.039	-0.006	0.020	-0.005	-0.007	0.940	1.363		
0.042	0.378	-0.616	0.310	0.007	-0.039	0.003	-0.013	0.019	-0.002	0.061	-0.114	-0.428	-0.355	0.124
0.095	0.135	0.145	0.006	0.024	-0.043	0.018	-0.005	-0.002	0.020	-0.004	0.923	0.662	1.335	
0.032	0.435	-0.825	0.359	0.022	-0.038	-0.022	0.038	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.620	-0.116	0.179
0.145	0.201	0.168	-0.179	-0.247	0.056	-0.168	-0.007	-0.004	-0.007	-0.010	1.099	0.907	0.881	1.637

Cyclobutane

Primitive Internal Coordinates

Compliance Matrix (lower triangle)

0.255														
-0.006	0.255													
-0.006	-0.010	0.255												
-0.010	-0.006	-0.006	0.255											
-0.005	0.002	-0.005	0.002	0.186										
-0.005	0.001	-0.005	0.001	-0.001	0.188									
0.002	-0.005	0.002	-0.005	0.000	0.000	0.186								
0.001	-0.005	0.001	-0.005	0.000	0.000	-0.001	0.188							
-0.005	-0.005	0.002	0.002	0.000	-0.001	0.000	-0.001	0.186						
-0.005	-0.005	0.001	0.001	-0.001	0.001	-0.001	-0.001	-0.001	0.188					
0.002	0.002	-0.005	-0.005	0.000	-0.001	0.000	-0.001	0.000	0.000	0.186				
0.001	0.001	-0.005	-0.005	-0.001	0.001	-0.001	0.001	0.000	0.000	-0.001	0.188			
-0.080	0.086	-0.080	0.086	0.010	0.007	0.002	0.000	-0.008	-0.004	-0.008	-0.004	0.345		
-0.030	-0.031	-0.031	0.033	0.006	0.001	0.004	0.000	0.006	0.002	0.004	0.000	-0.251	1.378	
0.059	-0.016	0.059	-0.016	-0.031	-0.027	0.001	0.002	0.003	0.001	0.003	0.001	-0.130	0.102	1.395
-0.035	-0.021	0.011	-0.015	-0.001	0.028	-0.003	0.000	-0.001	0.006	0.001	0.003	-0.033	0.162	-0.418
1.399														
0.011	-0.015	-0.035	-0.021	-0.001	0.028	-0.003	0.000	0.001	0.003	-0.001	0.006	-0.033	0.161	-0.418
-0.086	1.399													
-0.043	-0.013	0.065	-0.005	0.017	-0.016	0.002	-0.002	0.005	-0.005	-0.001	-0.003	-0.037	-0.128	-0.420
-0.414	-0.428	1.418												
-0.016	0.059	-0.016	0.059	0.001	0.003	-0.031	-0.027	0.003	0.001	0.003	0.001	-0.036	0.120	-0.010
0.023	0.023	-0.002	1.395											
0.019	-0.087	0.019	-0.087	-0.001	0.000	0.008	0.050	-0.001	0.006	-0.001	0.006	-0.182	1.121	0.108
0.097	0.097	-0.093	-0.676	2.734										
-0.021	-0.035	-0.015	0.011	-0.003	0.000	-0.001	0.028	-0.001	0.006	0.001	0.003	-0.025	0.169	0.023
-0.033	0.020	0.008	-0.418	1.171	1.399									
-0.013	-0.043	-0.005	0.065	0.002	-0.002	0.017	-0.016	0.005	-0.005	-0.001	-0.003	-0.012	-0.110	-0.002
0.008	-0.001	-0.003	-0.420	-0.802	-0.414	1.418								
0.059	0.059	-0.016	-0.016	0.003	0.001	0.003	0.001	-0.031	-0.027	0.001	0.003	0.039	0.102	-0.008
-0.012	0.026	-0.026	-0.008	0.116	-0.012	-0.026	1.395							
-0.035	0.011	-0.021	-0.015	-0.001	0.006	0.001	0.003	-0.001	0.028	-0.003	0.000	-0.019	0.162	-0.012
-0.072	0.050	0.105	0.026	0.156	0.050	-0.023	-0.418	1.399						
0.011	-0.035	-0.015	-0.021	0.001	0.003	-0.001	0.006	-0.001	0.028	-0.003	0.000	-0.052	0.161	0.026
0.050	0.030	-0.023	-0.012	0.095	-0.072	0.105	-0.418	-0.086	1.399					
-0.043	0.065	-0.013	-0.005	0.005	-0.005	-0.001	-0.003	0.017	0.002	-0.002	0.111	-0.127	-0.026	
0.105	-0.023	-0.198	-0.015	-0.158	-0.047	0.040	-0.420	-0.414	-0.428	1.418				
-0.016	-0.016	0.059	0.059	0.003	0.001	0.003	0.001	0.001	0.003	-0.031	-0.027	0.039	0.120	-0.008
0.026	-0.012	-0.015	-0.008	0.116	0.026	-0.015	-0.010	0.023	0.023	-0.002	1.395			
-0.021	-0.015	-0.035	0.011	-0.001	0.006	0.001	0.003	-0.003	0.000	-0.001	0.028	-0.019	0.169	-0.012
0.050	-0.072	-0.047	0.026	0.156	0.030	-0.052	0.023	-0.033	0.020	0.008	-0.418	1.399		
-0.015	-0.021	0.011	-0.035	0.001	0.003	-0.001	0.006	-0.003	0.000	-0.001	0.028	-0.052	0.157	0.026
0.030	0.050	-0.052	-0.012	0.095	0.050	-0.047	0.023	0.020	-0.033	-0.001	-0.418	-0.086	1.399	
-0.005	-0.013	0.065	-0.043	-0.001	-0.003	0.005	-0.005	0.002	-0.002	0.017	-0.016	0.039	-0.136	-0.015
-0.052	-0.047	0.052	-0.026	0.040	-0.023	0.040	-0.002	-0.001	0.008	0.010	-0.420	-0.428	-0.414	1.418

[illegible]

Supplementary material (ESI) for Chemical Society Reviews
This journal is © The Royal Society of Chemistry 2008

0.000	-0.009	0.000	-0.146	-0.055	0.000	-0.078	0.000	0.981						
0.000	0.044	0.043	0.000	0.001	0.000	0.000	0.001	0.001	0.001	0.001	-0.030	-0.030	-0.005	-0.009
0.000	-0.001	0.000	-0.055	-0.007	0.000	-0.023	0.000	-0.010	1.635					
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	-0.001	-0.006	0.006	0.006	-0.006	-0.030	0.030	0.000	0.000
-0.004	0.000	-0.010	0.000	0.000	0.000	0.130	0.000	-0.151	0.000	0.000	1.338			
0.009	-0.101	0.100	0.001	-0.001	-0.002	-0.002	0.003	0.003	-0.002	-0.002	-0.001	-0.001	0.018	-0.004
0.000	0.004	0.000	0.078	0.023	0.000	0.063	0.000	-0.003	0.012	0.000	1.639			
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.002	-0.002	0.003	-0.003	0.003	-0.003	-0.001	0.001	0.000	0.000
0.011	0.000	0.004	0.000	0.000	0.151	0.000	-0.170	0.000	0.000	-0.003	0.000	1.544		
0.001	-0.006	0.124	0.000	-0.026	0.000	0.000	-0.027	-0.027	0.003	0.003	0.002	0.002	0.000	-0.001
0.000	0.004	0.000	0.018	-0.005	0.000	-0.018	0.000	0.008	-0.002	0.000	-0.010	0.000	1.825	
0.000	0.004	0.001	0.000	0.041	0.000	0.000	-0.022	-0.022	-0.001	-0.001	-0.001	-0.001	-0.001	-0.002
0.000	0.002	0.000	-0.003	-0.009	0.000	0.004	0.000	-0.025	0.001	0.000	-0.006	0.000	-0.007	1.684
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.035	-0.035	0.002	-0.002	0.001	-0.001	0.000	0.000
0.000	0.000	-0.001	0.000	0.000	-0.004	0.000	-0.011	0.000	0.000	-0.011	0.000	0.001	0.000	0.000
1.684														
-0.002	-0.006	0.002	0.000	-0.024	-0.001	-0.001	0.013	0.013	0.000	0.000	0.002	0.002	0.004	0.002
0.000	-0.011	0.000	-0.009	-0.001	0.000	-0.004	0.000	-0.213	-0.063	0.000	-0.136	0.000	-0.018	0.001
0.000	1.567													
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.001	0.001	-0.022	0.022	0.002	-0.002	-0.005	0.005	0.000	0.000
-0.001	0.000	0.006	0.000	0.000	-0.010	0.000	-0.004	0.000	0.000	-0.203	0.000	0.241	0.000	0.000
0.005	0.000	1.537												
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.020	0.020	-0.003	0.003	-0.007	0.007	-0.010	0.010	0.000	0.000
-0.013	0.000	0.091	0.000	0.000	0.245	0.000	0.030	0.000	0.000	-0.092	0.000	-0.088	0.000	0.000
-0.005	0.000	0.032	11.922											
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.012	0.012	-0.012	0.012	-0.005	0.005	-0.005	0.005	0.000	0.000
-0.082	0.000	-0.082	0.000	0.000	-0.234	0.000	-0.024	0.000	0.000	-0.234	0.000	0.024	0.000	0.000
-0.082	0.000	-0.082	1.989	11.556										
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	-0.003	0.003	-0.020	0.020	-0.010	0.010	-0.007	0.007	0.000	0.000
-0.005	0.000	0.032	0.000	0.000	-0.092	0.000	0.088	0.000	0.000	0.245	0.000	-0.030	0.000	0.000
-0.013	0.000	0.091	0.421	1.989	11.922									

n-butane

Primitive Internal Coordinates

Hessian Matrix (lower triangle)

4.708																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																												
-------	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--

Supplementary material (ESI) for Chemical Society Reviews
This journal is © The Royal Society of Chemistry 2008