

Supporting Information: DFT Calculation Results

Functionalizing Molecular Wires: A Tunable Class of α,ω -diphenyl- μ,ν -dicyano-oligoenes

Jeffrey S. Meisner¹, Danielle F. Sedbrook¹, Markrete Krikorian¹, Aaron Sattler¹, Jun Chen²,
Matthew E. Carnes¹, Christopher B. Murray^{2,3}, Michael Steigerwald¹, and Colin Nuckolls^{1*}

¹*Columbia University, Department of Chemistry, 3000 Broadway, Havemeyer Hall, New York, New York 10027*

²*University of Pennsylvania, Department of Materials Science and Engineering, 3231 Walnut Street, Philadelphia, PA 19104*

³*University of Pennsylvania, Department of Chemistry, 231 S. 34th Street, Philadelphia, PA 19104*

Corresponding Author's email address: cn37@columbia.edu.

α,ω -diphenyl-oligoene Series (DPOn):

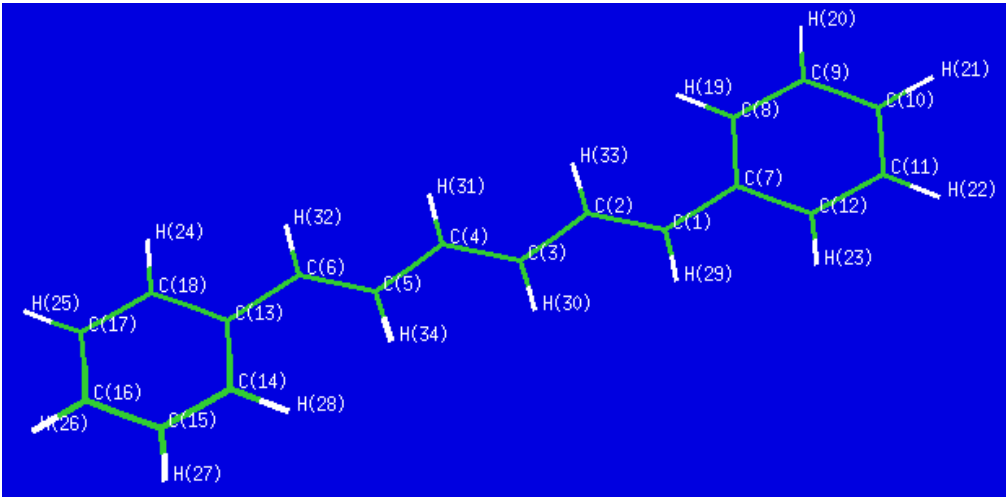
I. DPO3	S283
II. DPO5	S288
III. DPO7	S293
IV. DPO9	S299
V. DPO11	S305
VI. DPO13	S312
VII. DPO15	S319

α,ω -diphenyl- μ,ν -dicyano-oligoene Series (DPDCn):

VIII. DPDC3	S327
IX. DPDC5	S332
X. DPDC7	S338
XI. DPDC9	S344
XII. DPDC11	S351
XIII. DPDC13	S358
XIV. DPDC15	S366

α,ω -diphenyl-oligoene Series (DPOn):

DPO3



final geometry:

angstroms			
atom	x	y	z
C1	0.2639357739	-0.0045845578	-0.1806805468
C2	0.2807805026	-0.0019002222	1.1736092721
C3	1.4859075458	-0.0030603202	1.9566268003
C4	1.5181685464	-0.0001035078	3.3149372916
C5	2.7257553496	-0.0023191867	4.0940227597
C6	2.7510621393	0.0013705327	5.4479611439
C7	-0.9020386405	-0.0043846758	-1.0599649108
C8	-2.2319192227	-0.0016965938	-0.5920006510
C9	-3.2997549733	-0.0019110874	-1.4819850414
C10	-3.0750592389	-0.0047430685	-2.8618802365
C11	-1.7661961674	-0.0073228581	-3.3431798079
C12	-0.6962302123	-0.0071434489	-2.4529630024
C13	3.9253244806	-0.0013419265	6.3162972632
C14	5.2501270585	-0.0220463788	5.8346313761
C15	6.3274346958	-0.0234093366	6.7130483384
C16	6.1175451577	-0.0043629054	8.0951435668
C17	4.8138423461	0.0157874421	8.5900361479
C18	3.7343764119	0.0169534844	7.7112196326
H19	-2.4320654598	0.0005350516	0.4748481869
H20	-4.3164389799	0.0001402303	-1.0992188937
H21	-3.9129806966	-0.0049246081	-3.5527442902
H22	-1.5777007740	-0.0095027827	-4.4130677389
H23	0.3220220560	-0.0091726496	-2.8342280505
H24	2.7203423893	0.0326874053	8.1031689595
H25	4.6368098472	0.0304530146	9.6617738445
H26	6.9628209884	-0.0057327910	8.7770103887
H27	7.3398909800	-0.0399805421	6.3194891628
H28	5.4390349315	-0.0383040764	4.7658532635
H29	1.2252448105	-0.0073250412	-0.6936723388
H30	2.4300908700	-0.0068609272	1.4111814987
H31	0.5749260229	0.0039297217	3.8618834552
H32	1.7935082482	0.0080716467	5.9685092754

H33	-0.6556647085	0.0010842712	1.7290221234
H34	3.6594724525	-0.0067635386	3.5339054746

Final total energy: -695.549672

HOMO energy: -0.18543

LUMO energy: -0.06770

bond lengths (angstroms):

C1	-C2	:	1.354397	C1	-C7	:	1.460355
C1	-H29	:	1.089625	C2	-C3	:	1.437167
C2	-H33	:	1.088771	C3	-C4	:	1.358697
C3	-H30	:	1.090416	C4	-C5	:	1.437096
C4	-H31	:	1.090354	C5	-C6	:	1.354180
C5	-H34	:	1.088843	C6	-C13	:	1.460448
C6	-H32	:	1.089920	C7	-C8	:	1.409816
C7	-C12	:	1.408122	C8	-C9	:	1.390088
C8	-H19	:	1.085463	C9	-C10	:	1.398073
C9	-H20	:	1.086352	C10	-C11	:	1.394553
C10	-H21	:	1.086004	C11	-C12	:	1.391874
C11	-H22	:	1.086368	C12	-H23	:	1.087292
C13	-C14	:	1.409799	C13	-C18	:	1.408050
C14	-C15	:	1.390040	C14	-H28	:	1.085466
C15	-C16	:	1.398071	C15	-H27	:	1.086384
C16	-C17	:	1.394620	C16	-H26	:	1.086018
C17	-C18	:	1.391965	C17	-H25	:	1.086360
C18	-H24	:	1.087261				

bond angles:

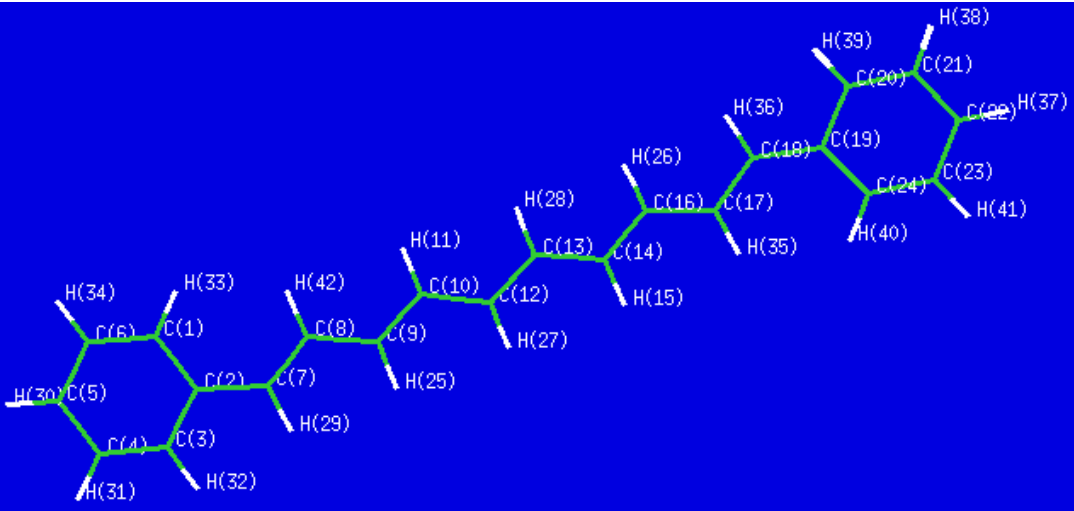
C7	-C1	-C2	:	127.733172	H29	-C1	-C2	:	117.373669
H29	-C1	-C7	:	114.893158	C3	-C2	-C1	:	123.725750
H33	-C2	-C1	:	119.960065	H33	-C2	-C3	:	116.314184
C4	-C3	-C2	:	124.373676	H30	-C3	-C2	:	116.972059
H30	-C3	-C4	:	118.654263	C5	-C4	-C3	:	124.188644
H31	-C4	-C3	:	118.747289	H31	-C4	-C5	:	117.064064
C6	-C5	-C4	:	123.898774	H34	-C5	-C4	:	116.213026
H34	-C5	-C6	:	119.888193	C13	-C6	-C5	:	127.552151
H32	-C6	-C5	:	117.459115	H32	-C6	-C13	:	114.988708
C8	-C7	-C1	:	123.593104	C12	-C7	-C1	:	118.616229
C12	-C7	-C8	:	117.790667	C9	-C8	-C7	:	120.804331
H19	-C8	-C7	:	120.011776	H19	-C8	-C9	:	119.183894
C10	-C9	-C8	:	120.560756	H20	-C9	-C8	:	119.559915
H20	-C9	-C10	:	119.879329	C11	-C10	-C9	:	119.438386
H21	-C10	-C9	:	120.256840	H21	-C10	-C11	:	120.304774
C12	-C11	-C10	:	120.049653	H22	-C11	-C10	:	120.181742
H22	-C11	-C12	:	119.768605	C11	-C12	-C7	:	121.356206
H23	-C12	-C7	:	118.931935	H23	-C12	-C11	:	119.711859
C14	-C13	-C6	:	123.535731	C18	-C13	-C6	:	118.683018
C18	-C13	-C14	:	117.781244	C15	-C14	-C13	:	120.824052
H28	-C14	-C13	:	120.010880	H28	-C14	-C15	:	119.165033
C16	-C15	-C14	:	120.553983	H27	-C15	-C14	:	119.562054
H27	-C15	-C16	:	119.883955	C17	-C16	-C15	:	119.428754
H26	-C16	-C15	:	120.252998	H26	-C16	-C17	:	120.318242
C18	-C17	-C16	:	120.060518	H25	-C17	-C16	:	120.173020
H25	-C17	-C18	:	119.766461	C17	-C18	-C13	:	121.351433
H24	-C18	-C13	:	118.933732	H24	-C18	-C17	:	119.714830

torsional angles:

C1	-C2	-C3	-C4	: 179.984705
C1	-C2	-C3	-H30	: -0.033129
C1	-C7	-C8	-C9	:-179.987721
C1	-C7	-C8	-H19	: 0.009784
C1	-C7	-C12	-C11	: 179.989576
C1	-C7	-C12	-H23	: -0.010047
C2	-C1	-C7	-C8	: -0.023714
C2	-C1	-C7	-C12	: 179.982498
C2	-C3	-C4	-C5	: 179.949833
C2	-C3	-C4	-H31	: -0.032006
C3	-C2	-C1	-C7	: 179.966372
C3	-C2	-C1	-H29	: -0.027938
C3	-C4	-C5	-C6	: 179.963304
C3	-C4	-C5	-H34	: -0.006437
C4	-C3	-C2	-H33	: -0.030365
C4	-C5	-C6	-C13	: 179.957084
C4	-C5	-C6	-H32	: -0.104545
C5	-C4	-C3	-H30	: -0.032055
C5	-C6	-C13	-C14	: -0.660280
C5	-C6	-C13	-C18	: 179.371863
C6	-C5	-C4	-H31	: -0.054576
C6	-C13	-C14	-C15	: 179.993369
C6	-C13	-C14	-H28	: -0.074970
C6	-C13	-C18	-C17	:-179.981163
C6	-C13	-C18	-H24	: -0.007252
C7	-C1	-C2	-H33	: -0.018036
C7	-C8	-C9	-C10	: -0.002898
C7	-C8	-C9	-H20	: 179.996933
C7	-C12	-C11	-C10	: -0.000229
C7	-C12	-C11	-H22	:-179.998727
C8	-C7	-C1	-H29	: 179.970717
C8	-C7	-C12	-C11	: -0.004574
C8	-C7	-C12	-H23	: 179.995802
C8	-C9	-C10	-C11	: -0.002057
C8	-C9	-C10	-H21	: 179.998351
C9	-C8	-C7	-C12	: 0.006114
C9	-C10	-C11	-C12	: 0.003601
C9	-C10	-C11	-H22	:-179.997907
C10	-C9	-C8	-H19	: 179.999576
C10	-C11	-C12	-H23	: 179.999391
C11	-C10	-C9	-H20	: 179.998114
C12	-C7	-C1	-H29	: -0.023071
C12	-C7	-C8	-H19	:-179.996380
C12	-C11	-C10	-H21	:-179.996807
C13	-C6	-C5	-H34	: -0.074228
C13	-C14	-C15	-C16	: 0.006762
C13	-C14	-C15	-H27	: 179.973441
C13	-C18	-C17	-C16	: -0.027729
C13	-C18	-C17	-H25	: 179.982494
C14	-C13	-C6	-H32	: 179.400053
C14	-C13	-C18	-C17	: 0.049120
C14	-C13	-C18	-H24	:-179.976968
C14	-C15	-C16	-C17	: 0.015867

C14	-C15	-C16	-H26	: 179.987082
C15	-C14	-C13	-C18	: -0.038503
C15	-C16	-C17	-C18	: -0.005519
C15	-C16	-C17	-H25	: 179.984216
C16	-C15	-C14	-H28	: -179.925469
C16	-C17	-C18	-H24	: 179.998560
C17	-C16	-C15	-H27	: -179.950705
C18	-C13	-C6	-H32	: -0.567804
C18	-C13	-C14	-H28	: 179.893157
C18	-C17	-C16	-H26	: -179.976714
H19	-C8	-C9	-H20	: -0.000594
H20	-C9	-C10	-H21	: -0.001478
H21	-C10	-C11	-H22	: 0.001685
H22	-C11	-C12	-H23	: 0.000894
H24	-C18	-C17	-H25	: 0.008784
H25	-C17	-C16	-H26	: 0.013020
H26	-C16	-C15	-H27	: 0.020509
H27	-C15	-C14	-H28	: 0.041210
H29	-C1	-C2	-H33	: 179.987653
H30	-C3	-C2	-H33	: 179.951802
H30	-C3	-C4	-H31	: 179.986106
H31	-C4	-C5	-H34	: 179.975683
H32	-C6	-C5	-H34	: 179.864144

DPO5



final geometry:

angstroms				
atom	x	y	z	
C1	0.0163039242	0.1219747686	-0.0673436152	
C2	-0.0085225022	0.0327573420	1.3394044852	
C3	1.2281652926	0.0277622743	2.0151536824	
C4	2.4340563544	0.1067926781	1.3260253541	
C5	2.4386373964	0.1949561000	-0.0664502972	
C6	1.2221635666	0.2016768150	-0.7560710395	
C7	-1.2273925745	-0.0458213317	2.1394122170	
C8	-2.5220745548	-0.0755638252	1.7330084304	
C9	-3.6172353688	-0.1302657674	2.6633129539	
C10	-4.9394996950	-0.1484464518	2.3406592999	
H11	-5.2259598542	-0.1329738331	1.2888015646	
C12	-5.9969997976	-0.1691722514	3.3089618126	
C13	-7.3236911053	-0.1670426561	3.0018602554	
C14	-8.3990347696	-0.1501244239	3.9509391929	
H15	-8.1404595019	-0.1449038033	5.0098093437	
C16	-9.7086465941	-0.1271896249	3.5811443959	
C17	-10.8526826619	-0.0752358489	4.4519640030	
C18	-12.1171930038	-0.0409162234	3.9599415262	
C19	-13.3925375702	0.0365112569	4.6655798476	
C20	-14.5725403118	0.0353519105	3.8947235862	
C21	-15.8284975173	0.1147893073	4.4872461346	
C22	-15.9409912943	0.1990059155	5.8753939020	
C23	-14.7823096266	0.2020903106	6.6579105658	
C24	-13.5264523406	0.1217647553	6.0657110556	
H25	-3.3502400723	-0.1490357981	3.7208598062	
H26	-9.9307884880	-0.1366332309	2.5131983006	
H27	-5.7048785956	-0.1761414153	4.3596010925	
H28	-7.6070501723	-0.1637118598	1.9485975437	
H29	-1.0553408716	-0.0805637198	3.2153609162	
H30	3.3766516813	0.2581255376	-0.6098741162	
H31	3.3705438937	0.1005141580	1.8766062495	
H32	1.2329036894	-0.0391237539	3.1002994805	
H33	-0.9152428914	0.1314672898	-0.6252853745	
H34	1.2153398055	0.2707070232	-1.8402835395	

H35	-10.6703758260	-0.0570809794	5.5257378770
H36	-12.2148203007	-0.0684199026	2.8744718254
H37	-16.9183749240	0.2626086644	6.3443190664
H38	-16.7191992849	0.1120465674	3.8652480157
H39	-14.4921871411	-0.0281680882	2.8123028671
H40	-12.6406998495	0.1294266602	6.6937112609
H41	-14.8602594194	0.2690742759	7.7394202869
H42	-2.7681299376	-0.0480118771	0.6721011399

Final total energy..... -850.37013

HOMO energy: -0.17577

LUMO energy: -0.07707

bond lengths (angstroms):

C1 -C2 : 1.409793	C1 -C6 : 1.390969
C1 -H33 : 1.085895	C2 -C3 : 1.409276
C2 -C7 : 1.460079	C3 -C4 : 1.391157
C3 -H32 : 1.087216	C4 -C5 : 1.395271
C4 -H31 : 1.086364	C5 -C6 : 1.398367
C5 -H30 : 1.085896	C6 -H34 : 1.086429
C7 -C8 : 1.357295	C7 -H29 : 1.090172
C8 -C9 : 1.437997	C8 -H42 : 1.089416
C9 -C10 : 1.361183	C9 -H25 : 1.090891
C10 -H11 : 1.090277	C10 -C12 : 1.433996
C12 -C13 : 1.361773	C12 -H27 : 1.090517
C13 -C14 : 1.434364	C13 -H28 : 1.090718
C14 -H15 : 1.089997	C14 -C16 : 1.361013
C16 -C17 : 1.438695	C16 -H26 : 1.090846
C17 -C18 : 1.357295	C17 -H35 : 1.089291
C18 -C19 : 1.459597	C18 -H36 : 1.090198
C19 -C20 : 1.409478	C19 -C24 : 1.409102
C20 -C21 : 1.390979	C20 -H39 : 1.087256
C21 -C22 : 1.395242	C21 -H38 : 1.086388
C22 -C23 : 1.398172	C22 -H37 : 1.085917
C23 -C24 : 1.390802	C23 -H41 : 1.086382
C24 -H40 : 1.085818	

bond angles:

C6 -C1 -C2 : 120.861549	H33 -C1 -C2 : 119.877325
H33 -C1 -C6 : 119.260952	C3 -C2 -C1 : 117.596138
C7 -C2 -C1 : 124.391456	C7 -C2 -C3 : 118.011177
C4 -C3 -C2 : 121.529732	H32 -C3 -C2 : 118.857363
H32 -C3 -C4 : 119.612898	C5 -C4 -C3 : 120.053380
H31 -C4 -C3 : 119.726044	H31 -C4 -C5 : 120.220549
C6 -C5 -C4 : 119.315660	H30 -C5 -C4 : 120.394253
H30 -C5 -C6 : 120.290083	C5 -C6 -C1 : 120.643514
H34 -C6 -C1 : 119.493678	H34 -C6 -C5 : 119.862781
C8 -C7 -C2 : 129.301951	H29 -C7 -C2 : 114.251271
H29 -C7 -C8 : 116.446206	C9 -C8 -C7 : 122.247604
H42 -C8 -C7 : 120.429185	H42 -C8 -C9 : 117.320335
C10 -C9 -C8 : 125.942238	H25 -C9 -C8 : 116.194906
H25 -C9 -C10 : 117.860197	H11 -C10 -C9 : 118.928998
C12 -C10 -C9 : 123.813927	C12 -C10 -H11 : 117.251696
C13 -C12 -C10 : 124.482180	H27 -C12 -C10 : 116.943021
H27 -C12 -C13 : 118.571345	C14 -C13 -C12 : 125.534122
H28 -C13 -C12 : 118.091119	H28 -C13 -C14 : 116.368879
H15 -C14 -C13 : 117.709251	C16 -C14 -C13 : 122.806618
C16 -C14 -H15 : 119.480800	C17 -C16 -C14 : 126.963589
H26 -C16 -C14 : 117.503747	H26 -C16 -C17 : 115.528263
C18 -C17 -C16 : 121.488463	H35 -C17 -C16 : 117.657055
H35 -C17 -C18 : 120.853091	C19 -C18 -C17 : 129.801114
H36 -C18 -C17 : 116.341500	H36 -C18 -C19 : 113.856231

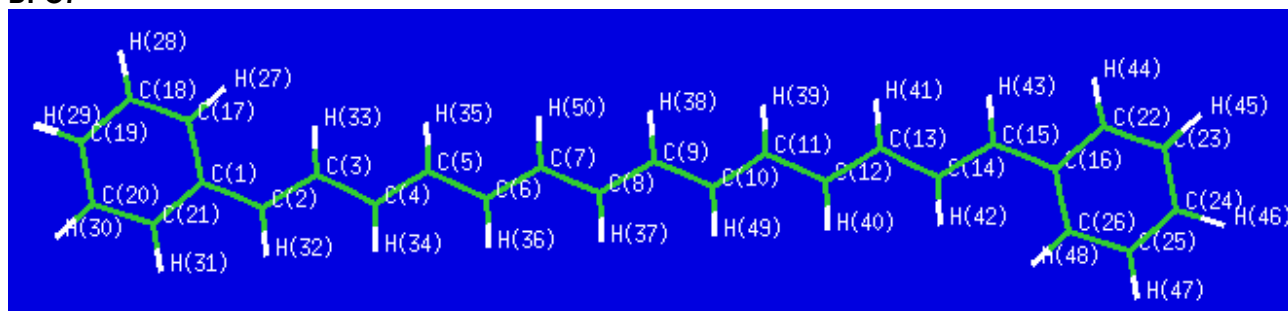
C20	-C19	-C18	: 117.843819	C24	-C19	-C18	: 124.514697
C24	-C19	-C20	: 117.639972	C21	-C20	-C19	: 121.527589
H39	-C20	-C19	: 118.858795	H39	-C20	-C21	: 119.613578
C22	-C21	-C20	: 120.003746	H38	-C21	-C20	: 119.752780
H38	-C21	-C22	: 120.243440	C23	-C22	-C21	: 119.349930
H37	-C22	-C21	: 120.379968	H37	-C22	-C23	: 120.270072
C24	-C23	-C22	: 120.655236	H41	-C23	-C22	: 119.856907
H41	-C23	-C24	: 119.487810	C23	-C24	-C19	: 120.823507
H40	-C24	-C19	: 119.840416	H40	-C24	-C23	: 119.335561

torsional angles:

C1	-C2	-C3	-C4	: -0.042043
C1	-C2	-C3	-H32	: 179.927330
C1	-C2	-C7	-C8	: 1.384365
C1	-C2	-C7	-H29	: -178.327221
C1	-C6	-C5	-C4	: 0.018483
C1	-C6	-C5	-H30	: -179.958080
C2	-C1	-C6	-C5	: 0.002891
C2	-C1	-C6	-H34	: -179.936435
C2	-C3	-C4	-C5	: 0.064369
C2	-C3	-C4	-H31	: -179.995337
C2	-C7	-C8	-C9	: -178.826512
C2	-C7	-C8	-H42	: 0.539868
C3	-C2	-C1	-C6	: 0.008349
C3	-C2	-C1	-H33	: -179.838947
C3	-C2	-C7	-C8	: -179.029471
C3	-C2	-C7	-H29	: 1.258943
C3	-C4	-C5	-C6	: -0.051498
C3	-C4	-C5	-H30	: 179.925040
C4	-C3	-C2	-C7	: -179.656709
C4	-C5	-C6	-H34	: 179.957586
C5	-C4	-C3	-H32	: -179.904777
C5	-C6	-C1	-H33	: 179.851117
C6	-C1	-C2	-C7	: 179.596091
C6	-C5	-C4	-H31	: -179.991494
C7	-C2	-C1	-H33	: -0.251206
C7	-C2	-C3	-H32	: 0.312664
C7	-C8	-C9	-C10	: 179.255058
C7	-C8	-C9	-H25	: -0.135986
C8	-C9	-C10	-H11	: 0.785725
C8	-C9	-C10	-C12	: -178.346206
C9	-C8	-C7	-H29	: 0.879791
C9	-C10	-C12	-C13	: 178.955998
C9	-C10	-C12	-H27	: -0.356292
C10	-C9	-C8	-H42	: -0.130006
C10	-C12	-C13	-C14	: -178.167295
C10	-C12	-C13	-H28	: 0.915711
H11	-C10	-C9	-H25	: -179.832328
H11	-C10	-C12	-C13	: -0.189394
H11	-C10	-C12	-H27	: -179.501683
C12	-C10	-C9	-H25	: 1.035741
C12	-C13	-C14	-H15	: -0.417548
C12	-C13	-C14	-C16	: 178.914270
C13	-C14	-C16	-C17	: -178.318199
C13	-C14	-C16	-H26	: 0.880440

C14	-C13	-C12	-H27	:	1.134629
C14	-C16	-C17	-C18	:	179.219199
C14	-C16	-C17	-H35	:	-0.355131
H15	-C14	-C13	-H28	:	-179.514631
H15	-C14	-C16	-C17	:	1.002260
H15	-C14	-C16	-H26	:	-179.799101
C16	-C14	-C13	-H28	:	-0.182814
C16	-C17	-C18	-C19	:	-178.788659
C16	-C17	-C18	-H36	:	0.792026
C17	-C18	-C19	-C20	:	-178.986299
C17	-C18	-C19	-C24	:	1.472817
C18	-C17	-C16	-H26	:	0.006890
C18	-C19	-C20	-C21	:	-179.593741
C18	-C19	-C20	-H39	:	0.334465
C18	-C19	-C24	-C23	:	179.518797
C18	-C19	-C24	-H40	:	-0.218031
C19	-C18	-C17	-H35	:	0.772156
C19	-C20	-C21	-C22	:	0.041580
C19	-C20	-C21	-H38	:	179.974324
C19	-C24	-C23	-C22	:	0.046119
C19	-C24	-C23	-H41	:	-179.874742
C20	-C19	-C18	-H36	:	1.424581
C20	-C19	-C24	-C23	:	-0.022945
C20	-C19	-C24	-H40	:	-179.759773
C20	-C21	-C22	-C23	:	-0.018287
C20	-C21	-C22	-H37	:	179.918673
C21	-C20	-C19	-C24	:	-0.020777
C21	-C22	-C23	-C24	:	-0.025087
C21	-C22	-C23	-H41	:	179.895483
C22	-C21	-C20	-H39	:	-179.886095
C22	-C23	-C24	-H40	:	179.784260
C23	-C22	-C21	-H38	:	-179.950698
C24	-C19	-C18	-H36	:	-178.116302
C24	-C19	-C20	-H39	:	179.907429
C24	-C23	-C22	-H37	:	-179.962118
H25	-C9	-C8	-H42	:	-179.521051
H26	-C16	-C17	-H35	:	-179.567440
H27	-C12	-C13	-H28	:	-179.782365
H29	-C7	-C8	-H42	:	-179.753829
H30	-C5	-C4	-H31	:	-0.014956
H30	-C5	-C6	-H34	:	-0.018977
H31	-C4	-C3	-H32	:	0.035517
H33	-C1	-C6	-H34	:	-0.088209
H35	-C17	-C18	-H36	:	-179.647159
H37	-C22	-C21	-H38	:	-0.013738
H37	-C22	-C23	-H41	:	-0.041548
H38	-C21	-C20	-H39	:	0.046650
H40	-C24	-C23	-H41	:	-0.136601

DPO7



final geometry:

angstroms			
atom	x	y	z
C1	-0.0704590910	0.1452901882	-0.0068445096
C2	-0.0892360394	0.0524084180	1.4492038362
C3	0.9726244166	-0.0225477331	2.2885196922
C4	0.8602944166	-0.0937659836	3.7166856229
C5	1.9252863220	-0.1463176660	4.5637558553
C6	1.8300036493	-0.1894787560	5.9900293113
C7	2.9067206997	-0.2089696859	6.8268423335
C8	2.8276132845	-0.2178701129	8.2531535101
C9	3.9121344308	-0.2003639910	9.0806793071
C10	3.8412435818	-0.1739951647	10.5070598868
C11	4.9263876852	-0.1204794662	11.3313665480
C12	4.8508813506	-0.0625892426	12.7583596638
C13	5.9278430399	0.0206982727	13.5878215699
C14	5.8353556035	0.1021121246	15.0172338255
C15	6.9060927478	0.2035869671	15.8417952335
C16	6.9012486201	0.3046939259	17.2973523779
C17	1.1131410930	0.1743027414	-0.7720322386
C18	1.0651330732	0.2682554979	-2.1582450492
C19	-0.1630392986	0.3362684977	-2.8232956090
C20	-1.3443851323	0.3089168549	-2.0818377362
C21	-1.2969321458	0.2146166759	-0.6946507366
C22	8.1337202332	0.3976194058	17.9717583160
C23	8.1957196138	0.4989194523	19.3575082667
C24	7.0222388935	0.5099841926	20.1107632407
C25	5.7872756478	0.4196819675	19.4613401753
C26	5.7252257297	0.3185742349	18.0759903726
H27	2.0786210173	0.1239717704	-0.2785946417
H28	1.9908676914	0.2892964054	-2.7265554132
H29	-0.1952943621	0.4100105104	-3.9064239371
H30	-2.3057517234	0.3615339151	-2.5848699724
H31	-2.2218953510	0.1940330402	-0.1237467205
H32	-1.0831837221	0.0489699528	1.8958001695
H33	1.9839685905	-0.0223917760	1.8852256990
H34	-0.1459519923	-0.0950986165	4.1366108218
H35	2.9290729432	-0.1426260725	4.1375530824
H36	0.8290978641	-0.1937703304	6.4226831890
H37	1.8317013482	-0.2250794616	8.6971129127
H38	4.9063745490	-0.1903081841	8.6328491185
H39	5.9201447670	-0.1074128043	10.8825625750
H40	3.8552962962	-0.0759690220	13.2031552485
H41	6.9256198423	0.0366533704	13.1484549316

H42	4.8305994290	0.0850378659	15.4364582022
H43	7.8941974253	0.2163005801	15.3819652360
H44	9.0526769862	0.3891352889	17.3915167921
H45	9.1614014057	0.5694874335	19.8500324212
H46	7.0653367351	0.5887023764	21.1930172657
H47	4.8684099006	0.4291422614	20.0412425083
H48	4.7546497406	0.2508291931	17.5940957588
H49	2.8479033937	-0.1842303044	10.9563047251
H50	3.9047514114	-0.2020405922	6.3878273811

Final total energy: -1005.193166 hartrees

HOMO energy: -0.17018

LUMO energy: -0.08455

bond lengths (angstroms):

C1	-C2	: 1.459129	C1	-C17	: 1.409703
C1	-C21	: 1.407878	C2	-C3	: 1.355587
C2	-H32	: 1.089675	C3	-C4	: 1.434346
C3	-H33	: 1.088790	C4	-C5	: 1.361799
C4	-H34	: 1.090354	C5	-C6	: 1.430104
C5	-H35	: 1.090527	C6	-C7	: 1.363802
C6	-H36	: 1.090422	C7	-C8	: 1.428531
C7	-H50	: 1.090343	C8	-C9	: 1.364292
C8	-H37	: 1.090409	C9	-C10	: 1.428385
C9	-H38	: 1.090489	C10	-C11	: 1.363775
C10	-H49	: 1.090252	C11	-C12	: 1.430161
C11	-H39	: 1.090481	C12	-C13	: 1.361907
C12	-H40	: 1.090510	C13	-C14	: 1.434713
C13	-H41	: 1.090347	C14	-C15	: 1.355240
C14	-H42	: 1.088841	C15	-C16	: 1.459073
C15	-H43	: 1.089934	C16	-C22	: 1.407993
C16	-C26	: 1.410496	C17	-C18	: 1.390222
C17	-H27	: 1.085433	C18	-C19	: 1.398329
C18	-H28	: 1.086464	C19	-C20	: 1.395022
C19	-H29	: 1.086115	C20	-C21	: 1.391198
C20	-H30	: 1.086294	C21	-H31	: 1.087158
C22	-C23	: 1.390830	C22	-H44	: 1.086846
C23	-C24	: 1.394479	C23	-H45	: 1.086325
C24	-C25	: 1.398227	C24	-H46	: 1.085969
C25	-C26	: 1.390420	C25	-H47	: 1.086596
C26	-H48	: 1.085739			

bond angles:

C17	-C1	-C2	: 123.625992	C21	-C1	-C2	: 118.648433
C21	-C1	-C17	: 117.725246	C3	-C2	-C1	: 127.682502
H32	-C2	-C1	: 114.892513	H32	-C2	-C3	: 117.424316
C4	-C3	-C2	: 123.909682	H33	-C3	-C2	: 119.884814
H33	-C3	-C4	: 116.203516	C5	-C4	-C3	: 124.056714
H34	-C4	-C3	: 117.116573	H34	-C4	-C5	: 118.823767
C6	-C5	-C4	: 124.709534	H35	-C5	-C4	: 118.464370
H35	-C5	-C6	: 116.821013	C7	-C6	-C5	: 124.040232
H36	-C6	-C5	: 117.193006	H36	-C6	-C7	: 118.761886
C8	-C7	-C6	: 124.680817	H50	-C7	-C6	: 118.392532
H50	-C7	-C8	: 116.919724	C9	-C8	-C7	: 124.160806
H37	-C8	-C7	: 117.202421	H37	-C8	-C9	: 118.630998
C10	-C9	-C8	: 124.506108	H38	-C9	-C8	: 118.411028
H38	-C9	-C10	: 117.076025	C11	-C10	-C9	: 124.389526
H49	-C10	-C9	: 117.162961	H49	-C10	-C11	: 118.442201
C12	-C11	-C10	: 124.240666	H39	-C11	-C10	: 118.478086
H39	-C11	-C12	: 117.276246	C13	-C12	-C11	: 124.640204
H40	-C12	-C11	: 117.044239	H40	-C12	-C13	: 118.312155

C14	-C13	-C12	: 124.006574	H41	-C13	-C12	: 118.627448
H41	-C13	-C14	: 117.363388	C15	-C14	-C13	: 124.020823
H42	-C14	-C13	: 116.243841	H42	-C14	-C15	: 119.734270
C16	-C15	-C14	: 127.555096	H43	-C15	-C14	: 117.415769
H43	-C15	-C16	: 115.028750	C22	-C16	-C15	: 118.652558
C26	-C16	-C15	: 123.652274	C26	-C16	-C22	: 117.694949
C18	-C17	-C1	: 120.906063	H27	-C17	-C1	: 119.941222
H27	-C17	-C18	: 119.152686	C19	-C18	-C17	: 120.520693
H28	-C18	-C17	: 119.568177	H28	-C18	-C19	: 119.911123
C20	-C19	-C18	: 119.343479	H29	-C19	-C18	: 120.243905
H29	-C19	-C20	: 120.412612	C21	-C20	-C19	: 120.159865
H30	-C20	-C19	: 120.156760	H30	-C20	-C21	: 119.683371
C20	-C21	-C1	: 121.344651	H31	-C21	-C1	: 118.927337
H31	-C21	-C20	: 119.728005	C23	-C22	-C16	: 121.403476
H44	-C22	-C16	: 118.939703	H44	-C22	-C23	: 119.656817
C24	-C23	-C22	: 120.083503	H45	-C23	-C22	: 119.741503
H45	-C23	-C24	: 120.174993	C25	-C24	-C23	: 119.462814
H46	-C24	-C23	: 120.364567	H46	-C24	-C25	: 120.172607
C26	-C25	-C24	: 120.456261	H47	-C25	-C24	: 119.897952
H47	-C25	-C26	: 119.645771	C25	-C26	-C16	: 120.898962
H48	-C26	-C16	: 119.980228	H48	-C26	-C25	: 119.120777

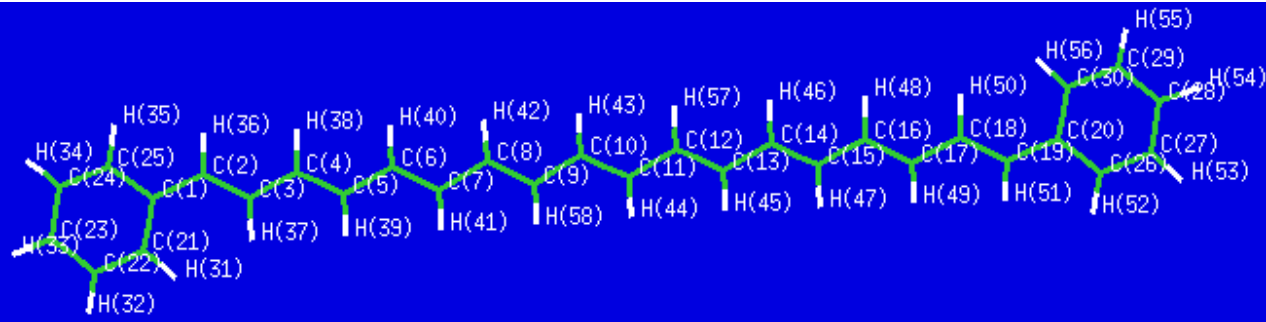
torsional angles:

C1	-C2	-C3	-C4	: 179.135057
C1	-C2	-C3	-H33	: -0.332030
C1	-C17	-C18	-C19	: 0.008663
C1	-C17	-C18	-H28	: 179.977364
C1	-C21	-C20	-C19	: 0.019513
C1	-C21	-C20	-H30	: -179.957195
C2	-C1	-C17	-C18	: -179.788420
C2	-C1	-C17	-H27	: 0.149586
C2	-C1	-C21	-C20	: 179.785178
C2	-C1	-C21	-H31	: -0.184464
C2	-C3	-C4	-C5	: -178.839000
C2	-C3	-C4	-H34	: 0.527756
C3	-C2	-C1	-C17	: -0.177000
C3	-C2	-C1	-C21	: -179.963552
C3	-C4	-C5	-C6	: 178.631355
C3	-C4	-C5	-H35	: -0.520531
C4	-C3	-C2	-H32	: -0.550441
C4	-C5	-C6	-C7	: -178.327235
C4	-C5	-C6	-H36	: 0.857520
C5	-C4	-C3	-H33	: 0.646026
C5	-C6	-C7	-C8	: 178.333526
C5	-C6	-C7	-H50	: -0.677341
C6	-C5	-C4	-H34	: -0.725300
C6	-C7	-C8	-C9	: -178.120372
C6	-C7	-C8	-H37	: 0.991238
C7	-C6	-C5	-H35	: 0.837298
C7	-C8	-C9	-C10	: 178.291347
C7	-C8	-C9	-H38	: -0.727429
C8	-C7	-C6	-H36	: -0.839283
C8	-C9	-C10	-C11	: -178.163739
C8	-C9	-C10	-H49	: 0.982483
C9	-C8	-C7	-H50	: 0.903732

C9	-C10	-C11	-C12	: 178.466427
C9	-C10	-C11	-H39	: -0.696244
C10	-C9	-C8	-H37	: -0.808447
C10	-C11	-C12	-C13	: -178.482504
C10	-C11	-C12	-H40	: 0.833080
C11	-C10	-C9	-H38	: 0.866992
C11	-C12	-C13	-C14	: 178.837662
C11	-C12	-C13	-H41	: -0.560410
C12	-C11	-C10	-H49	: -0.669682
C12	-C13	-C14	-C15	: -179.049518
C12	-C13	-C14	-H42	: 0.572779
C13	-C12	-C11	-H39	: 0.689408
C13	-C14	-C15	-C16	: 179.314902
C13	-C14	-C15	-H43	: -0.446966
C14	-C13	-C12	-H40	: -0.469930
C14	-C15	-C16	-C22	: 179.780095
C14	-C15	-C16	-C26	: -0.394369
C15	-C14	-C13	-H41	: 0.355573
C15	-C16	-C22	-C23	: 179.877009
C15	-C16	-C22	-H44	: -0.144260
C15	-C16	-C26	-C25	: -179.875822
C15	-C16	-C26	-H48	: 0.058368
C16	-C15	-C14	-H42	: -0.294961
C16	-C22	-C23	-C24	: 0.009294
C16	-C22	-C23	-H45	: -179.980411
C16	-C26	-C25	-C24	: 0.006431
C16	-C26	-C25	-H47	: 179.960809
C17	-C1	-C2	-H32	: 179.515252
C17	-C1	-C21	-C20	: -0.014038
C17	-C1	-C21	-H31	: -179.983680
C17	-C18	-C19	-C20	: -0.003393
C17	-C18	-C19	-H29	: 179.973725
C18	-C17	-C1	-C21	: -0.000033
C18	-C19	-C20	-C21	: -0.010522
C18	-C19	-C20	-H30	: 179.966075
C19	-C18	-C17	-H27	: -179.929825
C19	-C20	-C21	-H31	: 179.988916
C20	-C19	-C18	-H28	: -179.971987
C21	-C1	-C2	-H32	: -0.271300
C21	-C1	-C17	-H27	: 179.937973
C21	-C20	-C19	-H29	: -179.987601
C22	-C16	-C15	-H43	: -0.453200
C22	-C16	-C26	-C25	: -0.048731
C22	-C16	-C26	-H48	: 179.885459
C22	-C23	-C24	-C25	: -0.052735
C22	-C23	-C24	-H46	: 179.987692
C23	-C22	-C16	-C26	: 0.041026
C23	-C24	-C25	-C26	: 0.045048
C23	-C24	-C25	-H47	: -179.909214
C24	-C23	-C22	-H44	: -179.969287
C24	-C25	-C26	-H48	: -179.928316
C25	-C24	-C23	-H45	: 179.936925
C26	-C16	-C15	-H43	: 179.372337
C26	-C16	-C22	-H44	: -179.980243
C26	-C25	-C24	-H46	: -179.995300
H27	-C17	-C18	-H28	: 0.038876

H28	-C18	-C19	-H29	:	0.005131
H29	-C19	-C20	-H30	:	-0.011003
H30	-C20	-C21	-H31	:	0.012207
H32	-C2	-C3	-H33	:	179.982472
H33	-C3	-C4	-H34	:	-179.987218
H34	-C4	-C5	-H35	:	-179.877186
H35	-C5	-C6	-H36	:	-179.977947
H36	-C6	-C7	-H50	:	-179.850150
H37	-C8	-C7	-H50	:	-179.984658
H37	-C8	-C9	-H38	:	-179.827224
H38	-C9	-C10	-H49	:	-179.986786
H39	-C11	-C10	-H49	:	-179.832354
H39	-C11	-C12	-H40	:	-179.995009
H40	-C12	-C13	-H41	:	-179.868002
H41	-C13	-C14	-H42	:	179.977870
H42	-C14	-C15	-H43	:	179.943171
H44	-C22	-C23	-H45	:	0.041008
H45	-C23	-C24	-H46	:	-0.022648
H46	-C24	-C25	-H47	:	0.050437
H47	-C25	-C26	-H48	:	0.026061

DPO9



final geometry:

angstroms			
atom	x	y	z
C1	-0.0011750393	-0.0296692541	-0.0023206387
C2	0.0195664490	-0.0076153987	1.4567000657
C3	1.1027336347	0.0159595469	2.2730233735
C4	1.0160377858	0.0447841354	3.7043307128
C5	2.0875533231	0.0637296577	4.5460251669
C6	1.9839581628	0.1000069001	5.9717434570
C7	3.0443129384	0.1140803612	6.8307609130
C8	2.9195726497	0.1559833125	8.2530619674
C9	3.9689814355	0.1637529965	9.1266730763
C10	3.8312883212	0.2092779491	10.5470242125
C11	4.8775018859	0.2106306659	11.4251161593
C12	4.7431798391	0.2581776619	12.8456397580
C13	5.7966360309	0.2542486184	13.7143570917
C14	5.6820929427	0.3030232019	15.1372055210
C15	6.7498657140	0.2955521292	15.9869917755
C16	6.6629583190	0.3459898471	17.4133389085
C17	7.7459833659	0.3375158701	18.2402660329
C18	7.6852303851	0.3911052724	19.6722526655
C19	8.7856016795	0.3820168689	20.4654789955
C20	8.8449450110	0.4370829410	21.9221958955
C21	1.1606889238	0.0153446751	-0.7997591468
C22	1.0748722891	-0.0054195780	-2.1868371762
C23	-0.1694653403	-0.0718408047	-2.8205675042
C24	-1.3302062220	-0.1170374911	-2.0484056260
C25	-1.2452854713	-0.0952974338	-0.6596295597
C26	10.1074355381	0.4003970213	22.5459952585
C27	10.2326100497	0.4517765437	23.9307906359
C28	9.0946141171	0.5419913327	24.7322425282
C29	7.8324737175	0.5796369416	24.1322804725
C30	7.7065117002	0.5281380950	22.7489197749
H31	2.1382126179	0.0715230848	-0.3306459522
H32	1.9838345440	0.0323427065	-2.7807166342
H33	-0.2308579302	-0.0872377588	-3.9047246236
H34	-2.3032879906	-0.1682560012	-2.5285775110
H35	-2.1537591931	-0.1299175866	-0.0634487534
H36	-0.9624751341	-0.0120717812	1.9297099499
H37	2.1046890279	0.0134694675	1.8474055483
H38	0.0154946650	0.0540807689	4.1377073211
H39	3.0904153233	0.0519233639	4.1182122398
H40	0.9780435557	0.1189308158	6.3923301678

H41	4.0530504970	0.0923674841	6.4174163589
H42	1.9079934674	0.1841794662	8.6593154381
H43	2.8175066888	0.2454256687	10.9469069829
H44	5.8910251442	0.1723372327	11.0245741367
H45	6.8052202881	0.2105544857	13.3019565759
H46	4.6775602453	0.3496340646	15.5584686875
H47	7.7506343368	0.2480879434	15.5563949927
H48	5.6666555644	0.3955301950	17.8534004164
H49	8.7386655165	0.2876202016	17.7917464623
H50	6.6927456697	0.4422972102	20.1166960844
H51	9.7550670049	0.3272684696	19.9709017445
H52	10.9980788616	0.3309534206	21.9263566110
H53	11.2190809096	0.4221132459	24.3847567754
H54	9.1872338780	0.5827731353	25.8135018469
H55	6.9414140229	0.6511476902	24.7496309660
H56	6.7160463692	0.5611198927	22.3054104158
H57	3.7320255105	0.3004031460	13.2513194011
H58	4.9822098553	0.1329330755	8.7249613190

Final total energy: -1160.015207 hartrees

HOMO energy: -0.16589

LUMO energy: -0.08866

bond lengths (angstroms):

C1	-C2	:	1.459335	C1	-C21	:	1.409916
C1	-C25	:	1.408607	C2	-C3	:	1.356536
C2	-H36	:	1.090029	C3	-C4	:	1.434220
C3	-H37	:	1.088610	C4	-C5	:	1.362701
C4	-H38	:	1.090407	C5	-C6	:	1.429937
C5	-H39	:	1.090365	C6	-C7	:	1.364720
C6	-H40	:	1.090466	C7	-C8	:	1.428375
C7	-H41	:	1.090356	C8	-C9	:	1.365473
C8	-H42	:	1.090472	C9	-C10	:	1.427736
C9	-H58	:	1.090392	C10	-C11	:	1.365873
C10	-H43	:	1.090397	C11	-C12	:	1.427652
C11	-H44	:	1.090472	C12	-C13	:	1.365451
C12	-H57	:	1.090317	C13	-C14	:	1.428285
C13	-H45	:	1.090516	C14	-C15	:	1.364673
C14	-H46	:	1.090285	C15	-C16	:	1.429882
C15	-H47	:	1.090506	C16	-C17	:	1.362653
C16	-H48	:	1.090288	C17	-C18	:	1.434276
C17	-H49	:	1.090448	C18	-C19	:	1.356506
C18	-H50	:	1.088658	C19	-C20	:	1.458965
C19	-H51	:	1.089710	C20	-C26	:	1.408671
C20	-C30	:	1.409891	C21	-C22	:	1.389885
C21	-H31	:	1.085714	C22	-C23	:	1.397999
C22	-H32	:	1.086430	C23	-C24	:	1.394846
C23	-H33	:	1.086003	C24	-C25	:	1.391540
C24	-H34	:	1.086313	C25	-H35	:	1.087177
C26	-C27	:	1.391390	C26	-H52	:	1.087207
C27	-C28	:	1.394811	C27	-H53	:	1.086319
C28	-C29	:	1.397988	C28	-H54	:	1.085985
C29	-C30	:	1.390038	C29	-H55	:	1.086381
C30	-H56	:	1.085730				

bond angles:

C21	-C1	-C2	:	123.592079	C25	-C1	-C2	:	118.671982
C25	-C1	-C21	:	117.735644	C3	-C2	-C1	:	127.825035
H36	-C2	-C1	:	114.896618	H36	-C2	-C3	:	117.278311
C4	-C3	-C2	:	123.547688	H37	-C3	-C2	:	119.973812
H37	-C3	-C4	:	116.478500	C5	-C4	-C3	:	124.691659
H38	-C4	-C3	:	116.889749	H38	-C4	-C5	:	118.418458
C6	-C5	-C4	:	124.002562	H39	-C5	-C4	:	118.732312
H39	-C5	-C6	:	117.265089	C7	-C6	-C5	:	124.859112
H40	-C6	-C5	:	116.860955	H40	-C6	-C7	:	118.279879
C8	-C7	-C6	:	124.001742	H41	-C7	-C6	:	118.684918
H41	-C7	-C8	:	117.313340	C9	-C8	-C7	:	124.758368
H42	-C8	-C7	:	116.919266	H42	-C8	-C9	:	118.322355
C10	-C9	-C8	:	124.231674	H58	-C9	-C8	:	118.573143
H58	-C9	-C10	:	117.195175	C11	-C10	-C9	:	124.451947
H43	-C10	-C9	:	117.100763	H43	-C10	-C11	:	118.447289
C12	-C11	-C10	:	124.585522	H44	-C11	-C10	:	118.407881

H44	-C11	-C12	: 117.006587	C13	-C12	-C11	: 124.080167
H57	-C12	-C11	: 117.307225	H57	-C12	-C13	: 118.612604
C14	-C13	-C12	: 124.877320	H45	-C13	-C12	: 118.233263
H45	-C13	-C14	: 116.889415	C15	-C14	-C13	: 123.876025
H46	-C14	-C13	: 117.403696	H46	-C14	-C15	: 118.720258
C16	-C15	-C14	: 124.988684	H47	-C15	-C14	: 118.190839
H47	-C15	-C16	: 116.820472	C17	-C16	-C15	: 123.836452
H48	-C16	-C15	: 117.371918	H48	-C16	-C17	: 118.791553
C18	-C17	-C16	: 124.888689	H49	-C17	-C16	: 118.307907
H49	-C17	-C18	: 116.803367	C19	-C18	-C17	: 123.313062
H50	-C18	-C17	: 116.613519	H50	-C18	-C19	: 120.073377
C20	-C19	-C18	: 128.068130	H51	-C19	-C18	: 117.168487
H51	-C19	-C20	: 114.763383	C26	-C20	-C19	: 118.529889
C30	-C20	-C19	: 123.715180	C30	-C20	-C26	: 117.754806
C22	-C21	-C1	: 120.870061	H31	-C21	-C1	: 119.948432
H31	-C21	-C22	: 119.180936	C23	-C22	-C21	: 120.534936
H32	-C22	-C21	: 119.561167	H32	-C22	-C23	: 119.903789
C24	-C23	-C22	: 119.425424	H33	-C23	-C22	: 120.233989
H33	-C23	-C24	: 120.340568	C25	-C24	-C23	: 120.078915
H34	-C24	-C23	: 120.149451	H34	-C24	-C25	: 119.771603
C24	-C25	-C1	: 121.354964	H35	-C25	-C1	: 118.922974
H35	-C25	-C24	: 119.722054	C27	-C26	-C20	: 121.358795
H52	-C26	-C20	: 118.912425	H52	-C26	-C27	: 119.728773
C28	-C27	-C26	: 120.056966	H53	-C27	-C26	: 119.775272
H53	-C27	-C28	: 120.167747	C29	-C28	-C27	: 119.455277
H54	-C28	-C27	: 120.327399	H54	-C28	-C29	: 120.217324
C30	-C29	-C28	: 120.524982	H55	-C29	-C28	: 119.894383
H55	-C29	-C30	: 119.580575	C29	-C30	-C20	: 120.849171
H56	-C30	-C20	: 119.936976	H56	-C30	-C29	: 119.213707

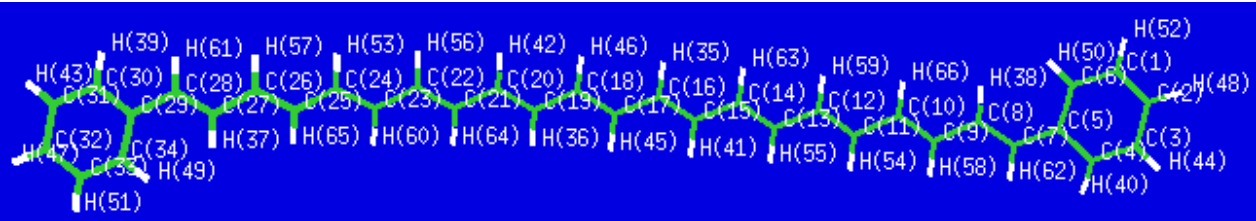
torsional angles:

C1	-C2	-C3	-C4	: 179.601638
C1	-C2	-C3	-H37	: -0.402522
C1	-C21	-C22	-C23	: -0.012759
C1	-C21	-C22	-H32	: 179.867686
C1	-C25	-C24	-C23	: -0.083447
C1	-C25	-C24	-H34	: 179.980376
C2	-C1	-C21	-C22	: -179.836086
C2	-C1	-C21	-H31	: -0.113291
C2	-C1	-C25	-C24	: 179.894440
C2	-C1	-C25	-H35	: -0.136760
C2	-C3	-C4	-C5	: 179.740458
C2	-C3	-C4	-H38	: -0.395053
C3	-C2	-C1	-C21	: -2.184076
C3	-C2	-C1	-C25	: 178.018246
C3	-C4	-C5	-C6	: 179.632943
C3	-C4	-C5	-H39	: -0.295193
C4	-C3	-C2	-H36	: -0.471597
C4	-C5	-C6	-C7	: 179.727153
C4	-C5	-C6	-H40	: -0.358811
C5	-C4	-C3	-H37	: -0.255517
C5	-C6	-C7	-C8	: 179.730856
C5	-C6	-C7	-H41	: -0.264071
C6	-C5	-C4	-H38	: -0.229639
C6	-C7	-C8	-C9	: 179.651357

C6	-C7	-C8	-H42	:	-0.387165
C7	-C6	-C5	-H39	:	-0.343740
C7	-C8	-C9	-C10	:	179.831656
C7	-C8	-C9	-H58	:	-0.202070
C8	-C7	-C6	-H40	:	-0.182062
C8	-C9	-C10	-C11	:	179.663958
C8	-C9	-C10	-H43	:	-0.350249
C9	-C8	-C7	-H41	:	-0.353653
C9	-C10	-C11	-C12	:	179.897863
C9	-C10	-C11	-H44	:	-0.141655
C10	-C9	-C8	-H42	:	-0.129325
C10	-C11	-C12	-C13	:	179.756500
C10	-C11	-C12	-H57	:	-0.265510
C11	-C10	-C9	-H58	:	-0.302742
C11	-C12	-C13	-C14	:	179.915431
C11	-C12	-C13	-H45	:	-0.101846
C12	-C11	-C10	-H43	:	-0.087753
C12	-C13	-C14	-C15	:	179.873231
C12	-C13	-C14	-H46	:	-0.180125
C13	-C12	-C11	-H44	:	-0.204487
C13	-C14	-C15	-C16	:	179.880657
C13	-C14	-C15	-H47	:	-0.094158
C14	-C13	-C12	-H57	:	-0.062292
C14	-C15	-C16	-C17	:	-179.986352
C14	-C15	-C16	-H48	:	-0.087928
C15	-C14	-C13	-H45	:	-0.109702
C15	-C16	-C17	-C18	:	179.813487
C15	-C16	-C17	-H49	:	-0.113998
C16	-C15	-C14	-H46	:	-0.065329
C16	-C17	-C18	-C19	:	-179.939026
C16	-C17	-C18	-H50	:	-0.013704
C17	-C16	-C15	-H47	:	-0.011225
C17	-C18	-C19	-C20	:	179.766174
C17	-C18	-C19	-H51	:	-0.224907
C18	-C17	-C16	-H48	:	-0.083585
C18	-C19	-C20	-C26	:	179.306112
C18	-C19	-C20	-C30	:	-0.825647
C19	-C18	-C17	-H49	:	-0.010553
C19	-C20	-C26	-C27	:	179.885359
C19	-C20	-C26	-H52	:	-0.084199
C19	-C20	-C30	-C29	:	-179.867897
C19	-C20	-C30	-H56	:	-0.008096
C20	-C19	-C18	-H50	:	-0.156674
C20	-C26	-C27	-C28	:	-0.020516
C20	-C26	-C27	-H53	:	-179.976165
C20	-C30	-C29	-C28	:	-0.000480
C20	-C30	-C29	-H55	:	179.910281
C21	-C1	-C2	-H36	:	177.887684
C21	-C1	-C25	-C24	:	0.084851
C21	-C1	-C25	-H35	:	-179.946349
C21	-C22	-C23	-C24	:	0.015945
C21	-C22	-C23	-H33	:	179.965590
C22	-C21	-C1	-C25	:	-0.036642
C22	-C23	-C24	-C25	:	0.031537
C22	-C23	-C24	-H34	:	179.967471
C23	-C22	-C21	-H31	:	-179.737652

C23	-C24	-C25	-H35	: 179.947998
C24	-C23	-C22	-H32	:-179.864091
C25	-C1	-C2	-H36	: -1.909995
C25	-C1	-C21	-H31	: 179.686153
C25	-C24	-C23	-H33	:-179.918053
C26	-C20	-C19	-H51	: -0.702626
C26	-C20	-C30	-C29	: 0.001294
C26	-C20	-C30	-H56	: 179.861095
C26	-C27	-C28	-C29	: 0.020974
C26	-C27	-C28	-H54	:-179.975079
C27	-C26	-C20	-C30	: 0.009206
C27	-C28	-C29	-C30	: -0.010654
C27	-C28	-C29	-H55	:-179.921135
C28	-C27	-C26	-H52	: 179.948797
C28	-C29	-C30	-H56	:-179.861281
C29	-C28	-C27	-H53	: 179.976447
C30	-C20	-C19	-H51	: 179.165615
C30	-C20	-C26	-H52	:-179.960352
C30	-C29	-C28	-H54	: 179.985403
H31	-C21	-C22	-H32	: 0.142793
H32	-C22	-C23	-H33	: 0.085554
H33	-C23	-C24	-H34	: 0.017881
H34	-C24	-C25	-H35	: 0.011821
H36	-C2	-C3	-H37	: 179.524243
H37	-C3	-C4	-H38	: 179.608973
H38	-C4	-C5	-H39	: 179.842225
H39	-C5	-C6	-H40	: 179.570297
H40	-C6	-C7	-H41	: 179.823012
H41	-C7	-C8	-H42	: 179.607825
H42	-C8	-C9	-H58	: 179.836949
H43	-C10	-C9	-H58	: 179.683050
H43	-C10	-C11	-H44	: 179.872730
H44	-C11	-C12	-H57	: 179.773503
H45	-C13	-C12	-H57	: 179.920431
H45	-C13	-C14	-H46	: 179.836942
H46	-C14	-C15	-H47	: 179.959856
H47	-C15	-C16	-H48	: 179.887199
H48	-C16	-C17	-H49	: 179.988930
H49	-C17	-C18	-H50	: 179.914768
H50	-C18	-C19	-H51	: 179.852245
H52	-C26	-C27	-H53	: -0.006852
H53	-C27	-C28	-H54	: -0.019606
H54	-C28	-C29	-H55	: 0.074923
H55	-C29	-C30	-H56	: 0.049479

DPO11



final geometry:

angstroms				
atom	x	y	z	
C1	0.1757747976	0.0217251870	0.2552688024	
C2	0.2576219401	0.0121502934	1.6508916533	
C3	1.5102908262	-0.0033722528	2.2641768354	
C4	2.6658835273	-0.0090838996	1.4888016257	
C5	2.6041565511	0.0004473396	0.0815873958	
C6	1.3290191918	0.0159556639	-0.5203531192	
C7	3.8524422865	-0.0058511114	-0.6739313406	
C8	4.0032592174	0.0012925273	-2.0216296948	
C9	5.2742169521	-0.0048643486	-2.6855481590	
C10	5.4280303640	0.0024257364	-4.0393860504	
C11	6.6869690376	-0.0027516707	-4.7157636854	
C12	6.8269729299	0.0049894049	-6.0735017445	
C13	8.0785414436	0.0007708704	-6.7589559862	
C14	8.2134125663	0.0090070072	-8.1185104875	
C15	9.4652293643	0.0055822710	-8.8014254579	
C16	9.6119272284	0.0142475205	-10.1604335094	
C17	10.8744575902	0.0113435593	-10.8229207066	
C18	11.0513480433	0.0202395563	-12.1783490825	
C19	12.3307956873	0.0176290296	-12.8082062718	
C20	12.5446599038	0.0265576491	-14.1579157437	
C21	13.8409290954	0.0241631669	-14.7540317383	
C22	14.0865200293	0.0330024289	-16.0976780991	
C23	15.3960125468	0.0307825206	-16.6665774958	
C24	15.6666534011	0.0393918999	-18.0042554448	
C25	16.9873504257	0.0373202362	-18.5520000821	
C26	17.2768487941	0.0455222626	-19.8834523751	
C27	18.6088145633	0.0434798834	-20.4159197978	
C28	18.8947903575	0.0511641694	-21.7415963629	
C29	20.2119619185	0.0498010325	-22.3702128890	
C30	20.2894538006	0.0584113385	-23.7765967890	
C31	21.5158114198	0.0575269520	-24.4343183757	
C32	22.7023896506	0.0479462929	-23.7012470333	
C33	22.6464805158	0.0393061599	-22.3044622108	
C34	21.4221556621	0.0401434079	-21.6467302194	
H35	8.7171205313	0.0244313829	-10.7831081449	
H36	13.2007358762	0.0078560359	-12.1510099811	
H37	19.4180581748	0.0352035379	-19.6876361109	
H38	3.1247158495	0.0128355200	-2.6643784668	
H39	19.3681424127	0.0659625265	-24.3538362132	
H40	3.6396541083	-0.0211655754	1.9723434766	
H41	10.3646666036	-0.0046376134	-8.1855134092	
H42	11.6831973014	0.0363655562	-14.8260147563	
H43	21.5451835828	0.0643348425	-25.5202159935	
H44	1.5878433442	-0.0109937011	3.3477432183	

H45	11.7617140304	0.0013257729	-10.1894132946
H46	10.1719054315	0.0302805376	-12.8225488566
H47	23.6616391962	0.0472064310	-24.2103213799
H48	-0.6468733913	0.0167675974	2.2518784775
H49	21.4048406347	0.0333386332	-20.5612094140
H50	1.2397074251	0.0234954267	-1.6021384198
H51	23.5657469261	0.0318476494	-21.7255337129
H52	-0.7962454480	0.0337791226	-0.2297090451
H53	14.8332029445	0.0485471329	-18.7070708018
H54	7.5851022393	-0.0135647090	-4.0982672758
H55	8.9808957963	-0.0096850950	-6.1475137909
H56	13.2403925507	0.0425586246	-16.7851083212
H57	16.4540387217	0.0542180615	-20.5987548625
H58	6.1644103279	-0.0161227070	-2.0566321761
H59	5.9260149676	0.0156211743	-6.6870237419
H60	16.2354013234	0.0215985837	-15.9704690442
H61	18.0546950673	0.0593231903	-22.4355185348
H62	4.7576330904	-0.0176521768	-0.0673937559
H63	7.3113475223	0.0193492644	-8.7302769469
H64	14.6943763802	0.0146587384	-14.0751911440
H65	17.8150295174	0.0285588165	-17.8419935837
H66	4.5335856429	0.0134613936	-4.6624300315

Final total energy: -1314.837227 hartrees

HOMO energy: -0.16343

LUMO energy: -0.09254

bond lengths (angstroms):

C1	-C2	:	1.398054	C1	-C6	:	1.389818
C1	-H52	:	1.086357	C2	-C3	:	1.394826
C2	-H48	:	1.085964	C3	-C4	:	1.391630
C3	-H44	:	1.086365	C4	-C5	:	1.408600
C4	-H40	:	1.087285	C5	-C6	:	1.410159
C5	-C7	:	1.459132	C6	-H50	:	1.085492
C7	-C8	:	1.356130	C7	-H62	:	1.089678
C8	-C9	:	1.433931	C8	-H38	:	1.088622
C9	-C10	:	1.362567	C9	-H58	:	1.090003
C10	-C11	:	1.429140	C10	-H66	:	1.090109
C11	-C12	:	1.364959	C11	-H54	:	1.089983
C12	-C13	:	1.426986	C12	-H59	:	1.090068
C13	-C14	:	1.366253	C13	-H55	:	1.090052
C14	-C15	:	1.425984	C14	-H63	:	1.089994
C15	-C16	:	1.366930	C15	-H41	:	1.090156
C16	-C17	:	1.425791	C16	-H35	:	1.090186
C17	-C18	:	1.366951	C17	-H45	:	1.090255
C18	-C19	:	1.426083	C18	-H46	:	1.090190
C19	-C20	:	1.366577	C19	-H36	:	1.090320
C20	-C21	:	1.426770	C20	-H42	:	1.090216
C21	-C22	:	1.365935	C21	-H64	:	1.090544
C22	-C23	:	1.427733	C22	-H56	:	1.090222
C23	-C24	:	1.364809	C23	-H60	:	1.090516
C24	-C25	:	1.429779	C24	-H53	:	1.090263
C25	-C26	:	1.362586	C25	-H65	:	1.090522
C26	-C27	:	1.434454	C26	-H57	:	1.090298
C27	-C28	:	1.356193	C27	-H37	:	1.088734
C28	-C29	:	1.459487	C28	-H61	:	1.089658
C29	-C30	:	1.408544	C29	-C34	:	1.409996
C30	-C31	:	1.391600	C30	-H39	:	1.087234
C31	-C32	:	1.394795	C31	-H43	:	1.086316
C32	-C33	:	1.397930	C32	-H47	:	1.085964
C33	-C34	:	1.389814	C33	-H51	:	1.086400
C34	-H49	:	1.085680				

bond angles:

C6	-C1	-C2	:	120.563779	H52	-C1	-C2	:	119.874877
H52	-C1	-C6	:	119.561343	C3	-C2	-C1	:	119.444131
H48	-C2	-C1	:	120.242509	H48	-C2	-C3	:	120.313360
C4	-C3	-C2	:	120.054443	H44	-C3	-C2	:	120.181635
H44	-C3	-C4	:	119.763922	C5	-C4	-C3	:	121.346065
H40	-C4	-C3	:	119.732587	H40	-C4	-C5	:	118.921348
C6	-C5	-C4	:	117.784044	C7	-C5	-C4	:	118.669648
C7	-C5	-C6	:	123.546306	C5	-C6	-C1	:	120.807536
H50	-C6	-C1	:	119.200503	H50	-C6	-C5	:	119.991961
C8	-C7	-C5	:	127.566784	H62	-C7	-C5	:	114.992230

H62	-C7	-C8	: 117.440986	C9	-C8	-C7	: 123.964290
H38	-C8	-C7	: 119.805629	H38	-C8	-C9	: 116.230075
C10	-C9	-C8	: 124.060754	H58	-C9	-C8	: 117.178543
H58	-C9	-C10	: 118.760703	C11	-C10	-C9	: 124.726933
H66	-C10	-C9	: 118.379692	H66	-C10	-C11	: 116.893369
C12	-C11	-C10	: 124.132345	H54	-C11	-C10	: 117.243487
H54	-C11	-C12	: 118.624168	C13	-C12	-C11	: 124.593773
H59	-C12	-C11	: 118.367898	H59	-C12	-C13	: 117.038323
C14	-C13	-C12	: 124.371695	H55	-C13	-C12	: 117.170008
H55	-C13	-C14	: 118.458297	C15	-C14	-C13	: 124.277711
H63	-C14	-C13	: 118.480928	H63	-C14	-C15	: 117.241355
C16	-C15	-C14	: 124.773142	H41	-C15	-C14	: 116.983525
H41	-C15	-C16	: 118.243332	C17	-C16	-C15	: 123.846516
H35	-C16	-C15	: 118.674080	H35	-C16	-C17	: 117.479399
C18	-C17	-C16	: 125.120841	H45	-C17	-C16	: 116.785482
H45	-C17	-C18	: 118.093677	C19	-C18	-C17	: 123.644170
H46	-C18	-C17	: 118.789660	H46	-C18	-C19	: 117.566166
C20	-C19	-C18	: 125.212495	H36	-C19	-C18	: 116.720137
H36	-C19	-C20	: 118.067367	C21	-C20	-C19	: 123.698461
H42	-C20	-C19	: 118.793140	H42	-C20	-C21	: 117.508397
C22	-C21	-C20	: 125.052800	H64	-C21	-C20	: 116.804397
H64	-C21	-C22	: 118.142802	C23	-C22	-C21	: 123.838788
H56	-C22	-C21	: 118.735577	H56	-C22	-C23	: 117.425633
C24	-C23	-C22	: 124.918418	H60	-C23	-C22	: 116.848543
H60	-C23	-C24	: 118.233039	C25	-C24	-C23	: 123.962020
H53	-C24	-C23	: 118.703558	H53	-C24	-C25	: 117.334422
C26	-C25	-C24	: 124.791242	H65	-C25	-C24	: 116.850162
H65	-C25	-C26	: 118.358596	C27	-C26	-C25	: 124.055169
H57	-C26	-C25	: 118.736418	H57	-C26	-C27	: 117.208412
C28	-C27	-C26	: 123.961707	H37	-C27	-C26	: 116.224442
H37	-C27	-C28	: 119.813850	C29	-C28	-C27	: 127.684909
H61	-C28	-C27	: 117.384937	H61	-C28	-C29	: 114.930155
C30	-C29	-C28	: 118.665524	C34	-C29	-C28	: 123.614859
C34	-C29	-C30	: 117.719616	C31	-C30	-C29	: 121.358496
H39	-C30	-C29	: 118.916444	H39	-C30	-C31	: 119.725059
C32	-C31	-C30	: 120.086009	H43	-C31	-C30	: 119.754091
H43	-C31	-C32	: 120.159901	C33	-C32	-C31	: 119.417146
H47	-C32	-C31	: 120.336703	H47	-C32	-C33	: 120.246151
C34	-C33	-C32	: 120.536845	H51	-C33	-C32	: 119.910829
H51	-C33	-C34	: 119.552326	C33	-C34	-C29	: 120.881889
H49	-C34	-C29	: 119.959563	H49	-C34	-C33	: 119.158548

torsional angles:

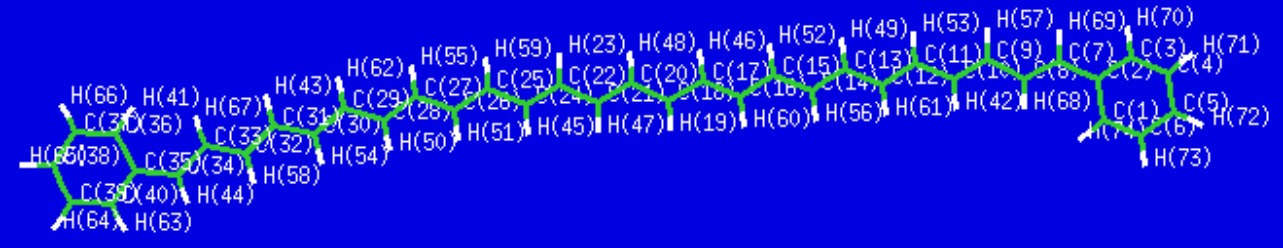
C1	-C2	-C3	-C4	: 0.006580
C1	-C2	-C3	-H44	: -179.996509
C1	-C6	-C5	-C4	: 0.007405
C1	-C6	-C5	-C7	: -179.977759
C2	-C1	-C6	-C5	: -0.004375
C2	-C1	-C6	-H50	: 179.992663
C2	-C3	-C4	-C5	: -0.003419
C2	-C3	-C4	-H40	: 179.998269
C3	-C2	-C1	-C6	: -0.002732
C3	-C2	-C1	-H52	: 179.997059
C3	-C4	-C5	-C6	: -0.003536
C3	-C4	-C5	-C7	: 179.982372

C4	-C3	-C2	-H48	:-179.993350
C4	-C5	-C6	-H50	:-179.989610
C4	-C5	-C7	-C8	: 179.993909
C4	-C5	-C7	-H62	: -0.007775
C5	-C4	-C3	-H44	: 179.999658
C5	-C6	-C1	-H52	: 179.995833
C5	-C7	-C8	-C9	: 179.955748
C5	-C7	-C8	-H38	: -0.016921
C6	-C1	-C2	-H48	: 179.997198
C6	-C5	-C4	-H40	: 179.994790
C6	-C5	-C7	-C8	: -0.021051
C6	-C5	-C7	-H62	: 179.977266
C7	-C5	-C4	-H40	: -0.019303
C7	-C5	-C6	-H50	: 0.025226
C7	-C8	-C9	-C10	:-179.993271
C7	-C8	-C9	-H58	: 0.009314
C8	-C9	-C10	-C11	: 179.960831
C8	-C9	-C10	-H66	: -0.010544
C9	-C8	-C7	-H62	: -0.042533
C9	-C10	-C11	-C12	:-179.983588
C9	-C10	-C11	-H54	: 0.015586
C10	-C9	-C8	-H38	: -0.019709
C10	-C11	-C12	-C13	: 179.958835
C10	-C11	-C12	-H59	: -0.011405
C11	-C10	-C9	-H58	: -0.041792
C11	-C12	-C13	-C14	:-179.977234
C11	-C12	-C13	-H55	: 0.019269
C12	-C11	-C10	-H66	: -0.011827
C12	-C13	-C14	-C15	: 179.960483
C12	-C13	-C14	-H63	: -0.010348
C13	-C12	-C11	-H54	: -0.040328
C13	-C14	-C15	-C16	:-179.974063
C13	-C14	-C15	-H41	: 0.020903
C14	-C13	-C12	-H59	: -0.006635
C14	-C15	-C16	-C17	: 179.964374
C14	-C15	-C16	-H35	: -0.008310
C15	-C14	-C13	-H55	: -0.035978
C15	-C16	-C17	-C18	:-179.977628
C15	-C16	-C17	-H45	: 0.015250
C16	-C15	-C14	-H63	: -0.002901
C16	-C17	-C18	-C19	: 179.969203
C16	-C17	-C18	-H46	: -0.007698
C17	-C16	-C15	-H41	: -0.030534
C17	-C18	-C19	-C20	:-179.985496
C17	-C18	-C19	-H36	: 0.004465
C18	-C17	-C16	-H35	: -0.004642
C18	-C19	-C20	-C21	: 179.972652
C18	-C19	-C20	-H42	: -0.010139
C19	-C18	-C17	-H45	: -0.023591
C19	-C20	-C21	-C22	:-179.993691
C19	-C20	-C21	-H64	: -0.003194
C20	-C19	-C18	-H46	: -0.008333
C20	-C21	-C22	-C23	: 179.978239
C20	-C21	-C22	-H56	: -0.008127
C21	-C20	-C19	-H36	: -0.017186
C21	-C22	-C23	-C24	: 179.996860

C21	-C22	-C23	-H60	: -0.010386
C22	-C21	-C20	-H42	: -0.010695
C22	-C23	-C24	-C25	: 179.982576
C22	-C23	-C24	-H53	: -0.010327
C23	-C22	-C21	-H64	: -0.012142
C23	-C24	-C25	-C26	: 179.985960
C23	-C24	-C25	-H65	: -0.017764
C24	-C23	-C22	-H56	: -0.016609
C24	-C25	-C26	-C27	: 179.990863
C24	-C25	-C26	-H57	: -0.008668
C25	-C24	-C23	-H60	: -0.010086
C25	-C26	-C27	-C28	: 179.974936
C25	-C26	-C27	-H37	: -0.026080
C26	-C25	-C24	-H53	: -0.021048
C26	-C27	-C28	-C29	: -179.998619
C26	-C27	-C28	-H61	: -0.002027
C27	-C26	-C25	-H65	: -0.005361
C27	-C28	-C29	-C30	: 179.976866
C27	-C28	-C29	-C34	: -0.015888
C28	-C27	-C26	-H57	: -0.025526
C28	-C29	-C30	-C31	: -179.996384
C28	-C29	-C30	-H39	: 0.008673
C28	-C29	-C34	-C33	: 179.997860
C28	-C29	-C34	-H49	: -0.008330
C29	-C28	-C27	-H37	: 0.002431
C29	-C30	-C31	-C32	: 0.001393
C29	-C30	-C31	-H43	: -179.997935
C29	-C34	-C33	-C32	: -0.005115
C29	-C34	-C33	-H51	: 179.995984
C30	-C29	-C28	-H61	: -0.019797
C30	-C29	-C34	-C33	: 0.005042
C30	-C29	-C34	-H49	: 179.998852
C30	-C31	-C32	-C33	: -0.001297
C30	-C31	-C32	-H47	: 179.999159
C31	-C30	-C29	-C34	: -0.003201
C31	-C32	-C33	-C34	: 0.003154
C31	-C32	-C33	-H51	: -179.997949
C32	-C31	-C30	-H39	: 179.996295
C32	-C33	-C34	-H49	: -179.998973
C33	-C32	-C31	-H43	: 179.998028
C34	-C29	-C28	-H61	: 179.987449
C34	-C29	-C30	-H39	: -179.998144
C34	-C33	-C32	-H47	: -179.997302
H35	-C16	-C15	-H41	: 179.996782
H35	-C16	-C17	-H45	: 179.988237
H36	-C19	-C18	-H46	: 179.981628
H36	-C19	-C20	-H42	: -179.999977
H37	-C27	-C26	-H57	: 179.973458
H37	-C27	-C28	-H61	: 179.999023
H38	-C8	-C7	-H62	: 179.984798
H38	-C8	-C9	-H58	: 179.982875
H39	-C30	-C31	-H43	: -0.003032
H40	-C4	-C3	-H44	: 0.001346
H41	-C15	-C14	-H63	: 179.992066
H42	-C20	-C21	-H64	: 179.979802
H43	-C31	-C32	-H47	: -0.001516

H44	-C3	-C2	-H48	:	0.003560
H45	-C17	-C18	-H46	:	179.999508
H47	-C32	-C33	-H51	:	0.001595
H48	-C2	-C1	-H52	:	-0.003010
H49	-C34	-C33	-H51	:	0.002125
H50	-C6	-C1	-H52	:	-0.007129
H53	-C24	-C23	-H60	:	179.997011
H53	-C24	-C25	-H65	:	179.975228
H54	-C11	-C10	-H66	:	179.987347
H54	-C11	-C12	-H59	:	179.989432
H55	-C13	-C12	-H59	:	179.989869
H55	-C13	-C14	-H63	:	179.993191
H56	-C22	-C21	-H64	:	-179.998508
H56	-C22	-C23	-H60	:	179.976145
H57	-C26	-C25	-H65	:	179.995108
H58	-C9	-C10	-H66	:	179.986833

DPO13



final geometry:

angstroms			
atom	x	y	z
C1	-0.1161583897	-0.0359749208	0.0993952798
C2	-0.0402995352	-0.2581481179	1.4901240851
C3	1.2388222534	-0.4116724682	2.0583393024
C4	2.3897718455	-0.3475352727	1.2776915117
C5	2.2942524481	-0.1273489406	-0.0964877558
C6	1.0328220662	0.0277590310	-0.6788480655
C7	-1.2153745734	-0.3319321445	2.3539814952
C8	-2.5093100390	-0.2084799292	1.9689249812
C9	-3.6438985927	-0.2788970108	2.8422467855
C10	-4.9234194712	-0.1363655647	2.3965202049
C11	-6.1011263881	-0.1858668685	3.2021928018
C12	-7.3582525476	-0.0253992236	2.6951678288
C13	-8.5606564874	-0.0610049960	3.4596671079
C14	-9.8087760332	0.1079731023	2.9300643579
C15	-11.0109560227	0.0739583806	3.6933645566
C16	-12.2673331405	0.2390315482	3.1816761547
C17	-13.4498067103	0.1931961624	3.9743918292
C18	-14.7225327513	0.3419299341	3.5006442040
H19	-14.8715928850	0.5150071503	2.4347595809
C20	-15.8813525132	0.2740035646	4.3263741874
C21	-17.1657857724	0.3969033915	3.8786835970
C22	-18.3171037943	0.3018304515	4.7128519401
H23	-18.1523373660	0.1320496166	5.7769697453
C24	-19.5994366052	0.3937829787	4.2528890385
C25	-20.7712682554	0.2710797760	5.0547900268
C26	-22.033177138	0.3318843796	4.5372702324
C27	-23.2481501947	0.1838043517	5.2679803297
C28	-24.4720458161	0.2164751605	4.6638590422
C29	-25.7349197866	0.0464785161	5.3037340732
C30	-26.9117747462	0.0562292172	4.6129239551
C31	-28.2123020470	-0.1316153042	5.1706189694
C32	-29.3495859461	-0.1395157642	4.4199759610
C33	-30.6719936032	-0.3420507834	4.9309281295
C34	-31.7778040949	-0.3603223271	4.1456420770
C35	-33.1612811848	-0.5668286044	4.5561644993
C36	-33.5533393002	-0.7812770955	5.8937257467
C37	-34.8904518369	-0.9747572831	6.2193954458
C38	-35.8732879884	-0.9605850218	5.2251143791
C39	-35.5038362917	-0.7496172484	3.8968434067
C40	-34.1659876929	-0.5554575504	3.5688643305
H41	-32.8073258752	-0.7967393585	6.6821657232
H42	-5.0740326974	0.0354617016	1.3300765918
H43	-28.2862973634	-0.2842622935	6.2469867729
H44	-31.6341678447	-0.2068107654	3.0763547188

H45	-19.7520466737	0.5603329286	3.1859442180
H46	-13.3179614527	0.0192155342	5.0428065011
H47	-17.3340781922	0.5677318728	2.8150279888
H48	-15.7195334439	0.1008831855	5.3907017917
H49	-8.4690119871	-0.2331006775	4.5322817546
H50	-24.4978804448	0.3738680122	3.5848325374
H51	-22.1333594025	0.4936107415	3.4632734620
H52	-10.9111729317	-0.0991996604	4.7652780183
H53	-5.9802666521	-0.3574274907	4.2717757360
H54	-26.8658881210	0.2102829469	3.5344496450
H55	-23.1854489103	0.0239283376	6.3441858447
H56	-9.9004889675	0.2805023749	1.8573891154
H57	-3.4630808002	-0.4498007171	3.9034293401
H58	-29.2581665561	0.0121726014	3.3442853886
H59	-20.6417585275	0.1060886548	6.1243972955
H60	-12.3815391119	0.4123491022	2.1114433840
H61	-7.4612152858	0.1466301766	1.6232601369
H62	-25.7488347450	-0.1093020137	6.3822790143
H63	-33.8826604705	-0.3915445285	2.5320630653
H64	-36.2584834570	-0.7362912675	3.1156488936
H65	-36.9164033426	-1.1127914426	5.4858883223
H66	-35.1715722608	-1.1384848727	7.2558439553
H67	-30.7630600782	-0.4914556811	6.0053314998
H68	-2.7375218034	-0.0381172958	0.9179129043
H69	-1.0103042745	-0.5015259144	3.4109109331
H70	1.3224005749	-0.5833099405	3.1287799324
H71	3.3633903047	-0.4695228610	1.7439098586
H72	3.1900307245	-0.0762259868	-0.7079991208
H73	0.9464280609	0.2005162330	-1.7479517332
H74	-1.0826784888	0.0892434543	-0.3784042661

Final total energy: -1469.658033 hartrees

HOMO energy: -0.16068

LUMO energy: -0.09420

bond lengths (angstroms):

C1	-C2	:	1.410405	C1	-C6	:	1.389202
C1	-H74	:	1.085418	C2	-C3	:	1.408045
C2	-C7	:	1.460306	C3	-C4	:	1.392196
C3	-H70	:	1.087331	C4	-C5	:	1.394982
C4	-H71	:	1.086358	C5	-C6	:	1.398002
C5	-H72	:	1.085808	C6	-H73	:	1.086412
C7	-C8	:	1.355647	C7	-H69	:	1.089915
C8	-C9	:	1.433506	C8	-H68	:	1.088912
C9	-C10	:	1.362410	C9	-H57	:	1.089959
C10	-C11	:	1.427779	C10	-H42	:	1.090647
C11	-C12	:	1.364987	C11	-H53	:	1.089976
C12	-C13	:	1.425308	C12	-H61	:	1.090496
C13	-C14	:	1.366322	C13	-H49	:	1.090192
C14	-C15	:	1.424437	C14	-H56	:	1.090326
C15	-C16	:	1.366586	C15	-H52	:	1.090385
C16	-C17	:	1.424339	C16	-H60	:	1.090174
C17	-C18	:	1.366159	C17	-H46	:	1.090487
C18	-H19	:	1.090085	C18	-C20	:	1.424538
C20	-C21	:	1.365760	C20	-H48	:	1.090390
C21	-C22	:	1.424924	C21	-H47	:	1.090352
C22	-H23	:	1.090101	C22	-C24	:	1.365430
C24	-C25	:	1.425234	C24	-H45	:	1.090596
C25	-C26	:	1.365391	C25	-H59	:	1.089979
C26	-C27	:	1.425371	C26	-H51	:	1.090703
C27	-C28	:	1.365266	C27	-H55	:	1.089821
C28	-C29	:	1.425900	C28	-H50	:	1.090751
C29	-C30	:	1.364662	C29	-H62	:	1.089826
C30	-C31	:	1.427473	C30	-H54	:	1.090388
C31	-C32	:	1.362697	C31	-H43	:	1.089653
C32	-C33	:	1.432081	C32	-H58	:	1.090173
C33	-C34	:	1.356401	C33	-H67	:	1.088558
C34	-C35	:	1.457801	C34	-H44	:	1.089758
C35	-C36	:	1.410237	C35	-C40	:	1.408661
C36	-C37	:	1.389736	C36	-H41	:	1.085547
C37	-C38	:	1.398128	C37	-H66	:	1.086306
C38	-C39	:	1.394742	C38	-H65	:	1.085937
C39	-C40	:	1.391081	C39	-H64	:	1.086248
C40	-H63	:	1.087244				

bond angles:

C6	-C1	-C2	:	121.006553	H74	-C1	-C2	:	120.008173
H74	-C1	-C6	:	118.985243	C3	-C2	-C1	:	117.642625
C7	-C2	-C1	:	123.228938	C7	-C2	-C3	:	119.128315
C4	-C3	-C2	:	121.313069	H70	-C3	-C2	:	118.967889
H70	-C3	-C4	:	119.719041	C5	-C4	-C3	:	120.200854
H71	-C4	-C3	:	119.676732	H71	-C4	-C5	:	120.122411

C6	-C5	-C4	: 119.317650	H72	-C5	-C4	: 120.379753
H72	-C5	-C6	: 120.302586	C5	-C6	-C1	: 120.519240
H73	-C6	-C1	: 119.525311	H73	-C6	-C5	: 119.955427
C8	-C7	-C2	: 126.542564	H69	-C7	-C2	: 115.474900
H69	-C7	-C8	: 117.982385	C9	-C8	-C7	: 125.305271
H68	-C8	-C7	: 119.237935	H68	-C8	-C9	: 115.456487
C10	-C9	-C8	: 122.606906	H57	-C9	-C8	: 118.004247
H57	-C9	-C10	: 119.388415	C11	-C10	-C9	: 125.904076
H42	-C10	-C9	: 117.779862	H42	-C10	-C11	: 116.315604
C12	-C11	-C10	: 123.092582	H53	-C11	-C10	: 117.886483
H53	-C11	-C12	: 119.020683	C13	-C12	-C11	: 125.083854
H61	-C12	-C11	: 118.074645	H61	-C12	-C13	: 116.841288
C14	-C13	-C12	: 124.030451	H49	-C13	-C12	: 117.435791
H49	-C13	-C14	: 118.533722	C15	-C14	-C13	: 124.076293
H56	-C14	-C13	: 118.538248	H56	-C14	-C15	: 117.385456
C16	-C15	-C14	: 124.916381	H52	-C15	-C14	: 116.958336
H52	-C15	-C16	: 118.125182	C17	-C16	-C15	: 123.433220
H60	-C16	-C15	: 118.887663	H60	-C16	-C17	: 117.678838
C18	-C17	-C16	: 125.233729	H46	-C17	-C16	: 116.746544
H46	-C17	-C18	: 118.018724	H19	-C18	-C17	: 118.930650
C20	-C18	-C17	: 123.479536	C20	-C18	-H19	: 117.588286
C21	-C20	-C18	: 124.801442	H48	-C20	-C18	: 116.913249
H48	-C20	-C21	: 118.282291	C22	-C21	-C20	: 124.192331
H47	-C21	-C20	: 118.621709	H47	-C21	-C22	: 117.182252
H23	-C22	-C21	: 117.369379	C24	-C22	-C21	: 123.856597
C24	-C22	-H23	: 118.768489	C25	-C24	-C22	: 125.228138
H45	-C24	-C22	: 118.116031	H45	-C24	-C25	: 116.649925
C26	-C25	-C24	: 122.880043	H59	-C25	-C24	: 117.870092
H59	-C25	-C26	: 119.242647	C27	-C26	-C25	: 126.075603
H51	-C26	-C25	: 117.684634	H51	-C26	-C27	: 116.233066
C28	-C27	-C26	: 122.324301	H55	-C27	-C26	: 118.193177
H55	-C27	-C28	: 119.475537	C29	-C28	-C27	: 126.337222
H50	-C28	-C27	: 117.543557	H50	-C28	-C29	: 116.113718
C30	-C29	-C28	: 122.395825	H62	-C29	-C28	: 118.193871
H62	-C29	-C30	: 119.405281	C31	-C30	-C29	: 125.942674
H54	-C30	-C29	: 117.736171	H54	-C30	-C31	: 116.317851
C32	-C31	-C30	: 123.087279	H43	-C31	-C30	: 117.789599
H43	-C31	-C32	: 119.120541	C33	-C32	-C31	: 125.096149
H58	-C32	-C31	: 118.212333	H58	-C32	-C33	: 116.690083
C34	-C33	-C32	: 123.240929	H67	-C33	-C32	: 116.667551
H67	-C33	-C34	: 120.090613	C35	-C34	-C33	: 127.775052
H44	-C34	-C33	: 117.304559	H44	-C34	-C35	: 114.920141
C36	-C35	-C34	: 123.536469	C40	-C35	-C34	: 118.578241
C40	-C35	-C36	: 117.885173	C37	-C36	-C35	: 120.724813
H41	-C36	-C35	: 119.999253	H41	-C36	-C37	: 119.275933
C38	-C37	-C36	: 120.549693	H66	-C37	-C36	: 119.574435
H66	-C37	-C38	: 119.875869	C39	-C38	-C37	: 119.510606
H65	-C38	-C37	: 120.202050	H65	-C38	-C39	: 120.287344
C40	-C39	-C38	: 120.026502	H64	-C39	-C38	: 120.180328
H64	-C39	-C40	: 119.793171	C39	-C40	-C35	: 121.303204
H63	-C40	-C35	: 118.928307	H63	-C40	-C39	: 119.768483

torsional angles:

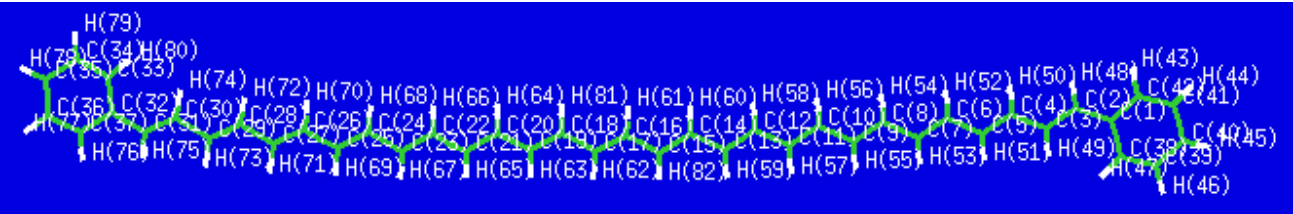
C1	-C2	-C3	-C4	: -0.027014
C1	-C2	-C3	-H70	: 179.962255

C1	-C2	-C7	-C8	: 0.256782
C1	-C2	-C7	-H69	:-179.597848
C1	-C6	-C5	-C4	: 0.003488
C1	-C6	-C5	-H72	:-179.958581
C2	-C1	-C6	-C5	: -0.021742
C2	-C1	-C6	-H73	:-179.967910
C2	-C3	-C4	-C5	: 0.009801
C2	-C3	-C4	-H71	: 179.991135
C2	-C7	-C8	-C9	:-179.669557
C2	-C7	-C8	-H68	: 0.119440
C3	-C2	-C1	-C6	: 0.032906
C3	-C2	-C1	-H74	:-179.903378
C3	-C2	-C7	-C8	:-179.873384
C3	-C2	-C7	-H69	: 0.271987
C3	-C4	-C5	-C6	: 0.002456
C3	-C4	-C5	-H72	: 179.964495
C4	-C3	-C2	-C7	:-179.904103
C4	-C5	-C6	-H73	: 179.949425
C5	-C4	-C3	-H70	:-179.979388
C5	-C6	-C1	-H74	: 179.915183
C6	-C1	-C2	-C7	: 179.904552
C6	-C5	-C4	-H71	:-179.978794
C7	-C2	-C1	-H74	: -0.031732
C7	-C2	-C3	-H70	: 0.085166
C7	-C8	-C9	-C10	: 179.463820
C7	-C8	-C9	-H57	: -0.295481
C8	-C9	-C10	-C11	:-179.611520
C8	-C9	-C10	-H42	: 0.132282
C9	-C8	-C7	-H69	: 0.181832
C9	-C10	-C11	-C12	: 179.497236
C9	-C10	-C11	-H53	: -0.317739
C10	-C9	-C8	-H68	: -0.332261
C10	-C11	-C12	-C13	:-179.715535
C10	-C11	-C12	-H61	: 0.111031
C11	-C10	-C9	-H57	: 0.144575
C11	-C12	-C13	-C14	: 179.715765
C11	-C12	-C13	-H49	: -0.214134
C12	-C11	-C10	-H42	: -0.249888
C12	-C13	-C14	-C15	:-179.932024
C12	-C13	-C14	-H56	: 0.046081
C13	-C12	-C11	-H53	: 0.097443
C13	-C14	-C15	-C16	:-179.913634
C13	-C14	-C15	-H52	: -0.032217
C14	-C13	-C12	-H61	: -0.112731
C14	-C15	-C16	-C17	: 179.716959
C14	-C15	-C16	-H60	: -0.086528
C15	-C14	-C13	-H49	: -0.002843
C15	-C16	-C17	-C18	:-179.420764
C15	-C16	-C17	-H46	: 0.206143
C16	-C15	-C14	-H56	: 0.108028
C16	-C17	-C18	-H19	: -0.287080
C16	-C17	-C18	-C20	: 179.251946
C17	-C16	-C15	-H52	: -0.163192
C17	-C18	-C20	-C21	:-178.877903
C17	-C18	-C20	-H48	: 0.477169
C18	-C17	-C16	-H60	: 0.384941

C18	-C20	-C21	-C22	: 178.770478
C18	-C20	-C21	-H47	: -0.508054
H19	-C18	-C17	-H46	:-179.909672
H19	-C18	-C20	-C21	: 0.666892
H19	-C18	-C20	-H48	:-179.978035
C20	-C18	-C17	-H46	: -0.370646
C20	-C21	-C22	-H23	: 0.771133
C20	-C21	-C22	-C24	:-178.360627
C21	-C22	-C24	-C25	: 178.409391
C21	-C22	-C24	-H45	: -0.674349
C22	-C21	-C20	-H48	: -0.576488
C22	-C24	-C25	-C26	:-177.996525
C22	-C24	-C25	-H59	: 1.017547
H23	-C22	-C21	-H47	:-179.940799
H23	-C22	-C24	-C25	: -0.710987
H23	-C22	-C24	-H45	:-179.794728
C24	-C22	-C21	-H47	: 0.927441
C24	-C25	-C26	-C27	: 178.279267
C24	-C25	-C26	-H51	: -0.739968
C25	-C26	-C27	-C28	:-177.870196
C25	-C26	-C27	-H55	: 1.162487
C26	-C25	-C24	-H45	: 1.099281
C26	-C27	-C28	-C29	: 178.404186
C26	-C27	-C28	-H50	: -0.705468
C27	-C26	-C25	-H59	: -0.721865
C27	-C28	-C29	-C30	:-178.068710
C27	-C28	-C29	-H62	: 1.110425
C28	-C27	-C26	-H51	: 1.161598
C28	-C29	-C30	-C31	: 178.724222
C28	-C29	-C30	-H54	: -0.587617
C29	-C28	-C27	-H55	: -0.616502
C29	-C30	-C31	-C32	:-178.525040
C29	-C30	-C31	-H43	: 0.884553
C30	-C29	-C28	-H50	: 1.052112
C30	-C31	-C32	-C33	: 179.100371
C30	-C31	-C32	-H58	: -0.448263
C31	-C30	-C29	-H62	: -0.445315
C31	-C32	-C33	-C34	:-179.087364
C31	-C32	-C33	-H67	: 0.565847
C32	-C31	-C30	-H54	: 0.795436
C32	-C33	-C34	-C35	: 179.505675
C32	-C33	-C34	-H44	: -0.303040
C33	-C32	-C31	-H43	: -0.301741
C33	-C34	-C35	-C36	: 0.243757
C33	-C34	-C35	-C40	:-179.629042
C34	-C33	-C32	-H58	: 0.467458
C34	-C35	-C36	-C37	:-179.859464
C34	-C35	-C36	-H41	: 0.127178
C34	-C35	-C40	-C39	: 179.851437
C34	-C35	-C40	-H63	: -0.121175
C35	-C34	-C33	-H67	: -0.136156
C35	-C36	-C37	-C38	: 0.012259
C35	-C36	-C37	-H66	: 179.991873
C35	-C40	-C39	-C38	: 0.016542
C35	-C40	-C39	-H64	:-179.984220
C36	-C35	-C34	-H44	:-179.943664

C36	-C35	-C40	-C39	:	-0.028608
C36	-C35	-C40	-H63	:	179.998780
C36	-C37	-C38	-C39	:	-0.024815
C36	-C37	-C38	-H65	:	179.974909
C37	-C36	-C35	-C40	:	0.014159
C37	-C38	-C39	-C40	:	0.010497
C37	-C38	-C39	-H64	:	-179.988738
C38	-C37	-C36	-H41	:	-179.974478
C38	-C39	-C40	-H63	:	179.988928
C39	-C38	-C37	-H66	:	179.995633
C40	-C35	-C34	-H44	:	0.183536
C40	-C35	-C36	-H41	:	-179.999199
C40	-C39	-C38	-H65	:	-179.989228
H41	-C36	-C37	-H66	:	0.005135
H42	-C10	-C9	-H57	:	179.888378
H42	-C10	-C11	-H53	:	179.935137
H43	-C31	-C30	-H54	:	-179.794972
H43	-C31	-C32	-H58	:	-179.850375
H44	-C34	-C33	-H67	:	-179.944871
H45	-C24	-C25	-H59	:	-179.886646
H46	-C17	-C16	-H60	:	-179.988152
H47	-C21	-C20	-H48	:	-179.855020
H49	-C13	-C12	-H61	:	179.957371
H49	-C13	-C14	-H56	:	179.975263
H50	-C28	-C27	-H55	:	-179.726155
H50	-C28	-C29	-H62	:	-179.768753
H51	-C26	-C25	-H59	:	-179.741100
H51	-C26	-C27	-H55	:	-179.805720
H52	-C15	-C14	-H56	:	179.989445
H52	-C15	-C16	-H60	:	-179.966679
H53	-C11	-C12	-H61	:	179.924010
H54	-C30	-C29	-H62	:	-179.757155
H57	-C9	-C8	-H68	:	179.908438
H58	-C32	-C33	-H67	:	-179.879331
H63	-C40	-C39	-H64	:	-0.011834
H64	-C39	-C38	-H65	:	0.011537
H65	-C38	-C37	-H66	:	-0.004643
H68	-C8	-C7	-H69	:	179.970829
H70	-C3	-C4	-H71	:	0.001945
H71	-C4	-C5	-H72	:	-0.016755
H72	-C5	-C6	-H73	:	-0.012644
H73	-C6	-C1	-H74	:	-0.030986

DPO15



final geometry:

angstroms			
atom	x	y	z
C1	-0.0510348764	-0.0076449271	0.0400482352
C2	-0.0718001018	-0.0102797611	1.5000061528
C3	0.9897367409	-0.0178112697	2.3450309810
C4	0.8754699505	-0.0170924628	3.7752798248
C6	1.8359030298	-0.0184659793	6.0550066774
C5	1.9381407375	-0.0213884184	4.6289865952
C7	2.9057256452	-0.0188769752	6.9036139604
C8	2.8079617401	-0.0144261712	8.3278460600
C9	3.8781696884	-0.0107232689	9.1778793312
C10	3.7751918478	-0.0052031250	10.6003673066
C11	4.8392259620	0.0027114946	11.4591946784
C12	4.7172376759	0.0093148006	12.8793635345
C13	5.7645044182	0.0213674672	13.7590436820
C14	5.6078407131	0.0295597673	15.1761146088
C15	6.6312474522	0.0454861803	16.0839004942
C16	6.4384600882	0.0557739699	17.4964231596
C17	7.4407263632	0.0748817260	18.4276740321
C18	7.2192808532	0.0880565885	19.8359215402
C19	8.2042593200	0.1096415923	20.7852704590
C20	7.9589556015	0.1260051468	22.1894681362
C21	8.9289638955	0.1498404751	23.1532846254
C22	8.6642011165	0.1694430715	24.5538509181
C23	9.6221480550	0.1944789785	25.5290493829
C24	9.3393671963	0.2168089633	26.9266511705
C25	10.2824802302	0.2418345548	27.9152621781
C26	9.9756074108	0.2662835595	29.3091359370
C27	10.8992504973	0.2910548975	30.3138888506
C28	10.5647644506	0.3171897450	31.7034548254
C29	11.4669558177	0.3417893427	32.7242203123
C30	11.1026185188	0.3692327627	34.1111702942
C31	11.9926269462	0.3937907050	35.1342807372
C32	11.6988971888	0.4233987020	36.5640907960
C33	10.3905808884	0.4247999103	37.0906449735
C34	10.1739986458	0.4551937092	38.4630235769
C35	11.2524375471	0.4851997872	39.3519515992
C36	12.5537954065	0.4836081868	38.8500642983
C37	12.7720391355	0.4531212367	37.4759136055
C38	1.1341726391	-0.0105846534	-0.7239192545
C39	1.0887856019	-0.0069128446	-2.1129955372
C40	-0.1378795134	0.0003553839	-2.7833012438
C41	-1.3211730051	0.0033045006	-2.0447640019
C42	-1.2765836594	-0.0006569336	-0.6538795472
H43	-2.2030941155	0.0019639672	-0.0850441720
H44	-2.2811677508	0.0087758476	-2.5530837050

H45	-0.1681013785	0.0034720559	-3.8688509418
H46	2.0158257993	-0.0095108329	-2.6794947732
H47	2.0989717436	-0.0153707153	-0.2270350962
H48	-1.0665881870	-0.0050550836	1.9455717917
H49	2.0015493294	-0.0236360957	1.9432433844
H50	-0.1315699711	-0.0118500269	4.1932669255
H51	2.9431186004	-0.0258143247	4.2065302270
H52	0.8325340223	-0.0147794899	6.4816909257
H53	3.9083323064	-0.0213805910	6.4749770400
H54	1.8052483996	-0.0129788454	8.7561947305
H55	4.8810611616	-0.0108431564	8.7508126025
H56	2.7702281738	-0.0065605852	11.0234901253
H57	5.8461816762	0.0050438498	11.0419932102
H58	3.7057468494	0.0050513504	13.2860147623
H59	6.7804869045	0.0257547084	13.3635197034
H60	4.5860679904	0.0229968229	15.5567830161
H61	5.4076830115	0.0481957881	17.8519374079
H62	8.4746397801	0.0807207686	18.0821649305
H63	9.2439424307	0.1149778996	20.4575378615
H64	6.9162803689	0.1199561131	22.5077949772
H65	9.9732977818	0.1545081658	22.8412997560
H66	7.6173498027	0.1652276687	24.8589474131
H67	10.6704061455	0.1979284431	25.2305338588
H68	8.2884162090	0.2149240116	27.2173379337
H69	11.3356857959	0.2436226568	27.6335223014
H70	8.9195300571	0.2664987132	29.5807667409
H71	11.9575435497	0.2912779578	30.0529120213
H72	9.5031748944	0.3188482858	31.9530223220
H73	12.5306839844	0.3407517791	32.4862266499
H74	10.0350356643	0.3714429471	34.3246257884
H75	13.0525779974	0.3921092864	34.8798678942
H76	13.7891332898	0.4521818239	37.0915363904
H77	13.4008644133	0.5060914540	39.5298478788
H78	11.0775949952	0.5092212736	40.4234616487
H79	9.1570692042	0.4553306746	38.8452106106
H80	9.5367856000	0.4011108391	36.4212204792
H81	6.1820611585	0.0808689908	20.1709918222
H82	7.6573031265	0.0511375516	15.7161067494

Final total energy: -1624.481322 hartrees

HOMO energy: -0.15985

LUMO energy: -0.09683

bond lengths (angstroms):

C1	-C2	:	1.460108	C1	-C38	:	1.410096
C1	-C42	:	1.408387	C2	-C3	:	1.356829
C2	-H48	:	1.090027	C3	-C4	:	1.434806
C3	-H49	:	1.088684	C4	-C5	:	1.363122
C4	-H50	:	1.090353	C5	-C6	:	1.429683
C5	-H51	:	1.090169	C6	-C7	:	1.365524
C6	-H52	:	1.090331	C7	-C8	:	1.427591
C7	-H53	:	1.090393	C8	-C9	:	1.366717
C8	-H54	:	1.090375	C9	-C10	:	1.426221
C9	-H55	:	1.090035	C10	-C11	:	1.367412
C10	-H56	:	1.090407	C11	-C12	:	1.425414
C11	-H57	:	1.089964	C12	-C13	:	1.367754
C12	-H58	:	1.090182	C13	-C14	:	1.425728
C13	-H59	:	1.090266	C14	-C15	:	1.368097
C14	-H60	:	1.090399	C15	-C16	:	1.425655
C15	-H82	:	1.089997	C16	-C17	:	1.368258
C16	-H61	:	1.090389	C17	-C18	:	1.425613
C17	-H62	:	1.090132	C18	-C19	:	1.368178
C18	-H81	:	1.090022	C19	-C20	:	1.425557
C19	-H63	:	1.090128	C20	-C21	:	1.367635
C20	-H64	:	1.090202	C21	-C22	:	1.425507
C21	-H65	:	1.089949	C22	-C23	:	1.367224
C22	-H66	:	1.090412	C23	-C24	:	1.426098
C23	-H67	:	1.089940	C24	-C25	:	1.366543
C24	-H68	:	1.090413	C25	-C26	:	1.427464
C25	-H69	:	1.090240	C26	-C27	:	1.365012
C26	-H70	:	1.090451	C27	-C28	:	1.429496
C27	-H71	:	1.089997	C28	-C29	:	1.362540
C28	-H72	:	1.090532	C29	-C30	:	1.434268
C29	-H73	:	1.090027	C30	-C31	:	1.356272
C30	-H74	:	1.088715	C31	-C32	:	1.459969
C31	-H75	:	1.090057	C32	-C33	:	1.410302
C32	-C37	:	1.408523	C33	-C34	:	1.389696
C33	-H80	:	1.085199	C34	-C35	:	1.397900
C34	-H79	:	1.086376	C35	-C36	:	1.394785
C35	-H78	:	1.085947	C36	-C37	:	1.391708
C36	-H77	:	1.086341	C37	-H76	:	1.087303
C38	-C39	:	1.389822	C38	-H47	:	1.085244
C39	-C40	:	1.397880	C39	-H46	:	1.086431
C40	-C41	:	1.394858	C40	-H45	:	1.085975
C41	-C42	:	1.391605	C41	-H44	:	1.086282
C42	-H43	:	1.087199				

bond angles:

C38	-C1	-C2	:	123.619707	C42	-C1	-C2	:	118.704595
C42	-C1	-C38	:	117.675676	C3	-C2	-C1	:	127.706259
H48	-C2	-C1	:	114.941587	H48	-C2	-C3	:	117.352148

C4	-C3	-C2	: 123.952543	H49	-C3	-C2	: 119.821953
H49	-C3	-C4	: 116.225461	C5	-C4	-C3	: 124.208854
H50	-C4	-C3	: 117.109269	H50	-C4	-C5	: 118.681853
C6	-C5	-C4	: 124.675488	H51	-C5	-C4	: 118.423311
H51	-C5	-C6	: 116.901130	C7	-C6	-C5	: 124.321341
H52	-C6	-C5	: 117.138688	H52	-C6	-C7	: 118.539948
C8	-C7	-C6	: 124.495173	H53	-C7	-C6	: 118.429924
H53	-C7	-C8	: 117.074848	C9	-C8	-C7	: 124.532479
H54	-C8	-C7	: 117.058574	H54	-C8	-C9	: 118.408921
C10	-C9	-C8	: 124.318750	H55	-C9	-C8	: 118.474807
H55	-C9	-C10	: 117.206407	C11	-C10	-C9	: 124.768502
H56	-C10	-C9	: 116.972722	H56	-C10	-C11	: 118.258752
C12	-C11	-C10	: 123.999786	H57	-C11	-C10	: 118.586548
H57	-C11	-C12	: 117.413644	C13	-C12	-C11	: 125.120868
H58	-C12	-C11	: 116.809475	H58	-C12	-C13	: 118.069642
C14	-C13	-C12	: 123.722171	H59	-C13	-C12	: 118.700291
H59	-C13	-C14	: 117.577523	C15	-C14	-C13	: 125.266368
H60	-C14	-C13	: 116.738696	H60	-C14	-C15	: 117.994928
C16	-C15	-C14	: 123.804014	H82	-C15	-C14	: 118.707193
H82	-C15	-C16	: 117.488788	C17	-C16	-C15	: 125.126670
H61	-C16	-C15	: 116.796565	H61	-C16	-C17	: 118.076757
C18	-C17	-C16	: 123.963531	H62	-C17	-C16	: 118.626440
H62	-C17	-C18	: 117.410028	C19	-C18	-C17	: 125.011720
H81	-C18	-C17	: 116.833617	H81	-C18	-C19	: 118.154651
C20	-C19	-C18	: 124.040723	H63	-C19	-C18	: 118.559951
H63	-C19	-C20	: 117.399325	C21	-C20	-C19	: 124.912634
H64	-C20	-C19	: 116.880068	H64	-C20	-C21	: 118.207264
C22	-C21	-C20	: 124.118711	H65	-C21	-C20	: 118.550281
H65	-C21	-C22	: 117.331007	C23	-C22	-C21	: 124.813566
H66	-C22	-C21	: 116.946814	H66	-C22	-C23	: 118.239573
C24	-C23	-C22	: 124.081483	H67	-C23	-C22	: 118.591573
H67	-C23	-C24	: 117.326944	C25	-C24	-C23	: 124.919268
H68	-C24	-C23	: 116.894181	H68	-C24	-C25	: 118.186496
C26	-C25	-C24	: 123.942716	H69	-C25	-C24	: 118.671065
H69	-C25	-C26	: 117.386219	C27	-C26	-C25	: 125.001670
H70	-C26	-C25	: 116.836267	H70	-C26	-C27	: 118.161993
C28	-C27	-C26	: 123.884287	H71	-C27	-C26	: 118.733742
H71	-C27	-C28	: 117.381970	C29	-C28	-C27	: 125.004040
H72	-C28	-C27	: 116.760610	H72	-C28	-C29	: 118.235279
C30	-C29	-C28	: 123.820607	H73	-C29	-C28	: 118.853787
H73	-C29	-C30	: 117.325606	C31	-C30	-C29	: 124.271856
H74	-C30	-C29	: 116.022543	H74	-C30	-C31	: 119.705523
C32	-C31	-C30	: 127.381229	H75	-C31	-C30	: 117.516431
H75	-C31	-C32	: 115.102333	C33	-C32	-C31	: 123.525634
C37	-C32	-C31	: 118.759343	C37	-C32	-C33	: 117.715011
C34	-C33	-C32	: 120.884576	H80	-C33	-C32	: 119.969032
H80	-C33	-C34	: 119.146372	C35	-C34	-C33	: 120.545017
H79	-C34	-C33	: 119.558041	H79	-C34	-C35	: 119.896941
C36	-C35	-C34	: 119.403242	H78	-C35	-C34	: 120.245960
H78	-C35	-C36	: 120.350796	C37	-C36	-C35	: 120.107896
H77	-C36	-C35	: 120.153951	H77	-C36	-C37	: 119.738153
C36	-C37	-C32	: 121.344239	H76	-C37	-C32	: 118.935553
H76	-C37	-C36	: 119.720208	C39	-C38	-C1	: 120.933245
H47	-C38	-C1	: 119.945917	H47	-C38	-C39	: 119.120833
C40	-C39	-C38	: 120.525973	H46	-C39	-C38	: 119.556372
H46	-C39	-C40	: 119.917654	C41	-C40	-C39	: 119.376200

H45	-C40	-C39	: 120.249314	H45	-C40	-C41	: 120.374485
C42	-C41	-C40	: 120.133030	H44	-C41	-C40	: 120.129062
H44	-C41	-C42	: 119.737908	C41	-C42	-C1	: 121.355871
H43	-C42	-C1	: 118.932944	H43	-C42	-C41	: 119.711182

torsional angles:

C1	-C2	-C3	-C4	: 179.866435
C1	-C2	-C3	-H49	: -0.055862
C1	-C38	-C39	-C40	: 0.026616
C1	-C38	-C39	-H46	: -179.986622
C1	-C42	-C41	-C40	: 0.001221
C1	-C42	-C41	-H44	: -179.994338
C2	-C1	-C38	-C39	: -179.955528
C2	-C1	-C38	-H47	: 0.019218
C2	-C1	-C42	-C41	: 179.944439
C2	-C1	-C42	-H43	: -0.037118
C2	-C3	-C4	-C5	: -179.835121
C2	-C3	-C4	-H50	: 0.107954
C3	-C2	-C1	-C38	: -0.109877
C3	-C2	-C1	-C42	: 179.945436
C3	-C4	-C5	-C6	: 179.890131
C3	-C4	-C5	-H51	: -0.009300
C4	-C3	-C2	-H48	: -0.104065
C4	-C5	-C6	-C7	: -179.800244
C4	-C5	-C6	-H52	: 0.142939
C5	-C4	-C3	-H49	: 0.089730
C5	-C6	-C7	-C8	: 179.924993
C5	-C6	-C7	-H53	: 0.013323
C6	-C5	-C4	-H50	: -0.052110
C6	-C7	-C8	-C9	: -179.790811
C6	-C7	-C8	-H54	: 0.149520
C7	-C6	-C5	-H51	: 0.100579
C7	-C8	-C9	-C10	: 179.947481
C7	-C8	-C9	-H55	: 0.018652
C8	-C7	-C6	-H52	: -0.017451
C8	-C9	-C10	-C11	: -179.786811
C8	-C9	-C10	-H56	: 0.156324
C9	-C8	-C7	-H53	: 0.121952
C9	-C10	-C11	-C12	: 179.943265
C9	-C10	-C11	-H57	: -0.001343
C10	-C9	-C8	-H54	: 0.007894
C10	-C11	-C12	-C13	: -179.790397
C10	-C11	-C12	-H58	: 0.164206
C11	-C10	-C9	-H55	: 0.142845
C11	-C12	-C13	-C14	: 179.910560
C11	-C12	-C13	-H59	: -0.044186
C12	-C11	-C10	-H56	: 0.000802
C12	-C13	-C14	-C15	: -179.803164
C12	-C13	-C14	-H60	: 0.164734
C13	-C12	-C11	-H57	: 0.154810
C13	-C14	-C15	-C16	: 179.880554
C13	-C14	-C15	-H82	: -0.095037
C14	-C13	-C12	-H58	: -0.043522
C14	-C15	-C16	-C17	: -179.838422
C14	-C15	-C16	-H61	: 0.129073

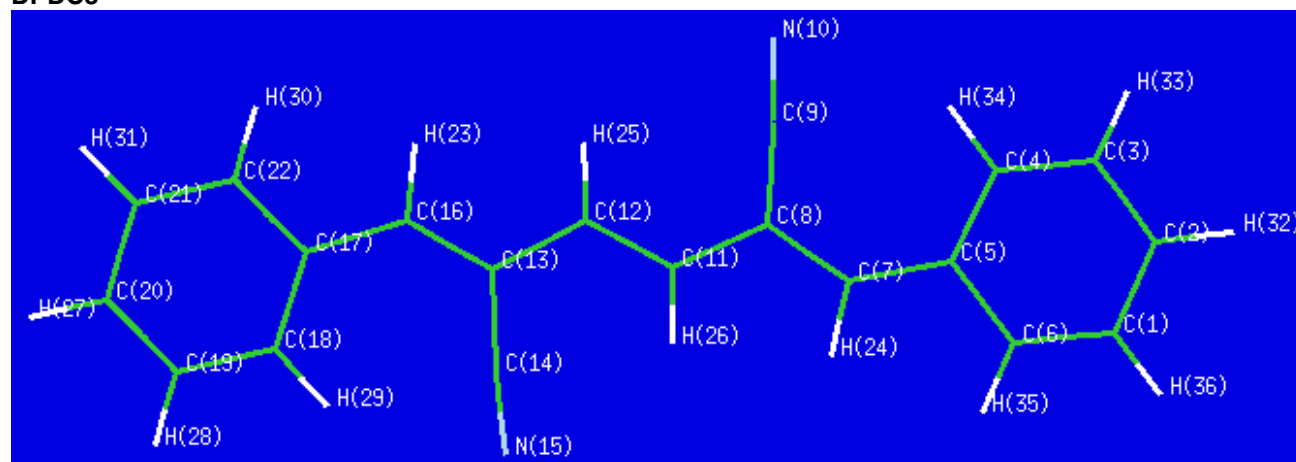
C15	-C14	-C13	-H59	:	0.152054
C15	-C16	-C17	-C18	:	179.843142
C15	-C16	-C17	-H62	:	-0.144493
C16	-C15	-C14	-H60	:	-0.086978
C16	-C17	-C18	-C19	:	-179.875325
C16	-C17	-C18	-H81	:	0.083206
C17	-C16	-C15	-H82	:	0.137445
C17	-C18	-C19	-C20	:	179.830215
C17	-C18	-C19	-H63	:	-0.159426
C18	-C17	-C16	-H61	:	-0.123974
C18	-C19	-C20	-C21	:	-179.887850
C18	-C19	-C20	-H64	:	0.043236
C19	-C18	-C17	-H62	:	0.112449
C19	-C20	-C21	-C22	:	179.829916
C19	-C20	-C21	-H65	:	-0.158903
C20	-C19	-C18	-H81	:	-0.127816
C20	-C21	-C22	-C23	:	-179.942318
C20	-C21	-C22	-H66	:	-0.023346
C21	-C20	-C19	-H63	:	0.101902
C21	-C22	-C23	-C24	:	179.856728
C21	-C22	-C23	-H67	:	-0.135240
C22	-C21	-C20	-H64	:	-0.100332
C22	-C23	-C24	-C25	:	179.993588
C22	-C23	-C24	-H68	:	-0.093685
C23	-C22	-C21	-H65	:	0.046626
C23	-C24	-C25	-C26	:	179.884909
C23	-C24	-C25	-H69	:	-0.105051
C24	-C23	-C22	-H66	:	-0.061284
C24	-C25	-C26	-C27	:	179.977867
C24	-C25	-C26	-H70	:	-0.120494
C25	-C24	-C23	-H67	:	-0.014351
C25	-C26	-C27	-C28	:	179.906367
C25	-C26	-C27	-H71	:	-0.086777
C26	-C25	-C24	-H68	:	-0.026785
C26	-C27	-C28	-C29	:	179.980280
C26	-C27	-C28	-H72	:	-0.118379
C27	-C26	-C25	-H69	:	-0.032054
C27	-C28	-C29	-C30	:	179.927831
C27	-C28	-C29	-H73	:	-0.077817
C28	-C27	-C26	-H70	:	0.005920
C28	-C29	-C30	-C31	:	179.997723
C28	-C29	-C30	-H74	:	-0.104866
C29	-C28	-C27	-H71	:	-0.026490
C29	-C30	-C31	-C32	:	179.950043
C29	-C30	-C31	-H75	:	-0.020412
C30	-C29	-C28	-H72	:	0.027820
C30	-C31	-C32	-C33	:	0.283783
C30	-C31	-C32	-C37	:	-179.676287
C31	-C30	-C29	-H73	:	0.003291
C31	-C32	-C33	-C34	:	-179.929993
C31	-C32	-C33	-H80	:	0.120508
C31	-C32	-C37	-C36	:	179.928647
C31	-C32	-C37	-H76	:	-0.063110
C32	-C31	-C30	-H74	:	0.056180
C32	-C33	-C34	-C35	:	0.005388
C32	-C33	-C34	-H79	:	-179.980827

C32	-C37	-C36	-C35	:	0.001031
C32	-C37	-C36	-H77	:	179.997450
C33	-C32	-C31	-H75	:	-179.745153
C33	-C32	-C37	-C36	:	-0.033751
C33	-C32	-C37	-H76	:	179.974491
C33	-C34	-C35	-C36	:	-0.038869
C33	-C34	-C35	-H78	:	179.979266
C34	-C33	-C32	-C37	:	0.030466
C34	-C35	-C36	-C37	:	0.035597
C34	-C35	-C36	-H77	:	-179.960807
C35	-C34	-C33	-H80	:	179.955297
C35	-C36	-C37	-H76	:	179.992725
C36	-C35	-C34	-H79	:	179.947299
C37	-C32	-C31	-H75	:	0.294777
C37	-C32	-C33	-H80	:	-179.919034
C37	-C36	-C35	-H78	:	-179.982558
C38	-C1	-C2	-H48	:	179.861226
C38	-C1	-C42	-C41	:	-0.003550
C38	-C1	-C42	-H43	:	-179.985107
C38	-C39	-C40	-C41	:	-0.028621
C38	-C39	-C40	-H45	:	179.983441
C39	-C38	-C1	-C42	:	-0.010310
C39	-C40	-C41	-C42	:	0.014771
C39	-C40	-C41	-H44	:	-179.989687
C40	-C39	-C38	-H47	:	-179.948334
C40	-C41	-C42	-H43	:	179.982637
C41	-C40	-C39	-H46	:	179.984664
C42	-C1	-C2	-H48	:	-0.083462
C42	-C1	-C38	-H47	:	179.964435
C42	-C41	-C40	-H45	:	-179.997307
H43	-C42	-C41	-H44	:	-0.012923
H44	-C41	-C40	-H45	:	-0.001765
H45	-C40	-C39	-H46	:	-0.003274
H46	-C39	-C38	-H47	:	0.038428
H48	-C2	-C3	-H49	:	179.973638
H49	-C3	-C4	-H50	:	-179.967195
H50	-C4	-C5	-H51	:	-179.951542
H51	-C5	-C6	-H52	:	-179.956238
H52	-C6	-C7	-H53	:	-179.929121
H53	-C7	-C8	-H54	:	-179.937718
H54	-C8	-C9	-H55	:	-179.920934
H55	-C9	-C10	-H56	:	-179.914020
H56	-C10	-C11	-H57	:	-179.943806
H57	-C11	-C12	-H58	:	-179.890587
H58	-C12	-C13	-H59	:	-179.998268
H59	-C13	-C14	-H60	:	-179.880048
H60	-C14	-C15	-H82	:	179.937431
H61	-C16	-C15	-H82	:	-179.895060
H61	-C16	-C17	-H62	:	179.888391
H62	-C17	-C18	-H81	:	-179.929020
H63	-C19	-C18	-H81	:	179.882544
H63	-C19	-C20	-H64	:	-179.967013
H64	-C20	-C21	-H65	:	179.910850
H65	-C21	-C22	-H66	:	179.965598
H66	-C22	-C23	-H67	:	179.946748
H67	-C23	-C24	-H68	:	179.898376

H68	-C24	-C25	-H69	: 179.983255
H69	-C25	-C26	-H70	: 179.869585
H70	-C26	-C27	-H71	:-179.987224
H71	-C27	-C28	-H72	: 179.874851
H72	-C28	-C29	-H73	:-179.977827
H73	-C29	-C30	-H74	: 179.900701
H74	-C30	-C31	-H75	:-179.914275
H76	-C37	-C36	-H77	: -0.010856
H77	-C36	-C35	-H78	: 0.021038
H78	-C35	-C34	-H79	: -0.034565
H79	-C34	-C33	-H80	: -0.030918

α,ω -diphenyl- μ,ν -dicyano-oligoene (DPDCn) Series:

DPDC3



final geometry:

angstroms				
atom	x	y	z	
C1	0.0381824916	-0.1227603836	-0.2673295124	
C2	-0.2117708504	-0.6567283298	0.9975668046	
C3	0.8459437885	-0.8475952316	1.8909054414	
C4	2.1475446870	-0.5114388428	1.5347028258	
C5	2.4182916768	0.0291818696	0.2593850383	
C6	1.3362597060	0.2145640979	-0.6287728769	
C7	3.7295080231	0.4183500785	-0.2316873774	
C8	4.9798793012	0.3898709402	0.3206839049	
C9	5.2494922254	-0.0870492097	1.6447285370	
N10	5.5276665244	-0.4619501885	2.7110929237	
C11	6.1152606212	0.8622925178	-0.4568587258	
C12	7.4081776482	0.9023809817	-0.0653453624	
C13	8.4928584952	1.3910825136	-0.9093782547	
C14	8.1050839066	1.8418707965	-2.2153216392	
N15	7.7128822233	2.1902684475	-3.2543543146	
C16	9.7883969479	1.4163822232	-0.4757024823	
C17	11.0205697875	1.8492569924	-1.1218434294	
C18	11.1194781809	2.3458119328	-2.4398994431	
C19	12.3500002450	2.7322988710	-2.9580994685	
C20	13.5106560124	2.6370557537	-2.1868494556	
C21	13.4332011212	2.1474417956	-0.8824679209	
C22	12.2051938427	1.7589988316	-0.3596609423	
H23	9.9297509456	1.0476423746	0.5385878616	
H24	3.7084729765	0.8120977016	-1.2461391016	
H25	7.6929352388	0.5591145947	0.9262003426	
H26	5.8603420128	1.2122263831	-1.4541124432	
H27	14.4676714308	2.9414896019	-2.6000853122	
H28	12.4031549256	3.1112564405	-3.9742670771	
H29	10.2401366793	2.4309301300	-3.0631843680	
H30	12.1501325940	1.3778835930	0.6569136791	
H31	14.3286351384	2.0680884280	-0.2732973270	
H32	-1.2239867829	-0.9230947522	1.2872675723	
H33	0.6538467648	-1.2629739733	2.8756649088	
H34	2.9496325789	-0.6689066653	2.2451647884	

H35	1.5294538228	0.6301711788	-1.6142993694
H36	-0.7763419456	0.0297764742	-0.9689999963

Final total energy: -880.026574 hartrees

HOMO energy: -0.21161

LUMO energy: -0.09611

bond lengths (angstroms):

C1	-C2	:	1.395550	C1	-C6	:	1.389041
C1	-H36	:	1.085845	C2	-C3	:	1.397585
C2	-H32	:	1.086029	C3	-C4	:	1.390700
C3	-H33	:	1.085906	C4	-C5	:	1.411386
C4	-H34	:	1.083004	C5	-C6	:	1.412085
C5	-C7	:	1.453235	C6	-H35	:	1.086883
C7	-C8	:	1.367243	C7	-H24	:	1.088390
C8	-C9	:	1.432912	C8	-C11	:	1.454938
C9	-N10	:	1.164072	C11	-C12	:	1.351490
C11	-H26	:	1.087176	C12	-C13	:	1.458682
C12	-H25	:	1.087236	C13	-C14	:	1.434945
C13	-C16	:	1.366431	C14	-N15	:	1.163955
C16	-C17	:	1.457096	C16	-H23	:	1.088455
C17	-C18	:	1.411957	C17	-C22	:	1.411525
C18	-C19	:	1.389996	C18	-H29	:	1.081189
C19	-C20	:	1.396789	C19	-H28	:	1.085832
C20	-C21	:	1.395397	C20	-H27	:	1.085966
C21	-C22	:	1.390042	C21	-H31	:	1.085904
C22	-H30	:	1.087062				

bond angles:

C6	-C1	-C2	:	119.745360	H36	-C1	-C2	:	120.337691
H36	-C1	-C6	:	119.916948	C3	-C2	-C1	:	119.739757
H32	-C2	-C1	:	120.169308	H32	-C2	-C3	:	120.090935
C4	-C3	-C2	:	120.770286	H33	-C3	-C2	:	119.869253
H33	-C3	-C4	:	119.360461	C5	-C4	-C3	:	120.236295
H34	-C4	-C3	:	119.340178	H34	-C4	-C5	:	120.423526
C6	-C5	-C4	:	118.139862	C7	-C5	-C4	:	125.520866
C7	-C5	-C6	:	116.339268	C5	-C6	-C1	:	121.368431
H35	-C6	-C1	:	119.664220	H35	-C6	-C5	:	118.967349
C8	-C7	-C5	:	133.082454	H24	-C7	-C5	:	113.228750
H24	-C7	-C8	:	113.688794	C9	-C8	-C7	:	123.525998
C11	-C8	-C7	:	119.405603	C11	-C8	-C9	:	117.068372
N10	-C9	-C8	:	176.989041	C12	-C11	-C8	:	126.967346
H26	-C11	-C8	:	114.314742	H26	-C11	-C12	:	118.717896
C13	-C12	-C11	:	123.620621	H25	-C12	-C11	:	120.357081
H25	-C12	-C13	:	116.022286	C14	-C13	-C12	:	115.525276
C16	-C13	-C12	:	121.842313	C16	-C13	-C14	:	122.632304
N15	-C14	-C13	:	175.957874	C17	-C16	-C13	:	131.799332
H23	-C16	-C13	:	114.368857	H23	-C16	-C17	:	113.831743
C18	-C17	-C16	:	125.286671	C22	-C17	-C16	:	116.824397
C22	-C17	-C18	:	117.888887	C19	-C18	-C17	:	120.518161
H29	-C18	-C17	:	120.587670	H29	-C18	-C19	:	118.894142
C20	-C19	-C18	:	120.717360	H28	-C19	-C18	:	119.292274
H28	-C19	-C20	:	119.990363	C21	-C20	-C19	:	119.600285
H27	-C20	-C19	:	120.202118	H27	-C20	-C21	:	120.197581

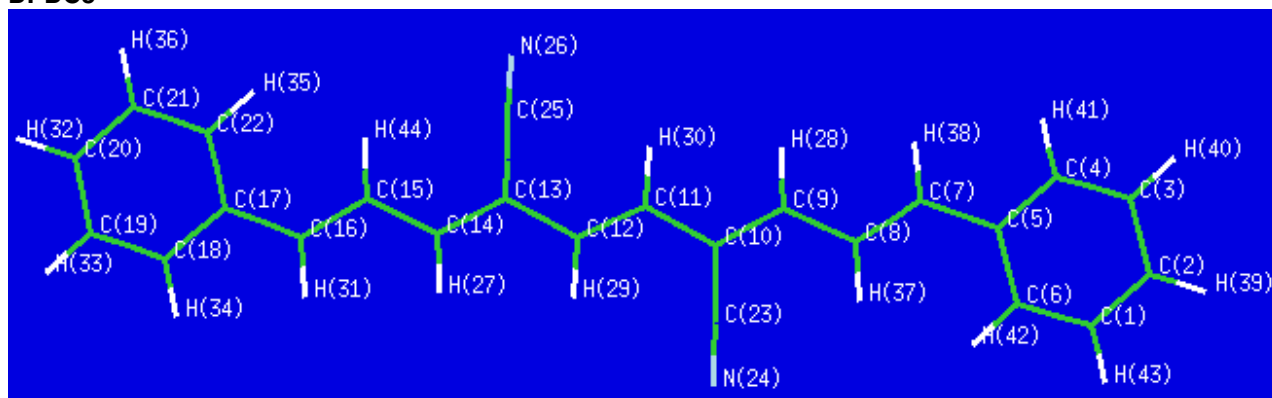
C22	-C21	-C20	: 119.911762	H31	-C21	-C20	: 120.282198
H31	-C21	-C22	: 119.806038	C21	-C22	-C17	: 121.363413
H30	-C22	-C17	: 119.003748	H30	-C22	-C21	: 119.632820

torsional angles:

C1	-C2	-C3	-C4	: -0.000219
C1	-C2	-C3	-H33	: -179.997425
C1	-C6	-C5	-C4	: -0.017565
C1	-C6	-C5	-C7	: 179.960127
C2	-C1	-C6	-C5	: -0.006699
C2	-C1	-C6	-H35	: 179.989223
C2	-C3	-C4	-C5	: -0.024626
C2	-C3	-C4	-H34	: 179.987319
C3	-C2	-C1	-C6	: 0.015819
C3	-C2	-C1	-H36	: -179.990527
C3	-C4	-C5	-C6	: 0.032998
C3	-C4	-C5	-C7	: -179.942439
C4	-C3	-C2	-H32	: -179.998206
C4	-C5	-C6	-H35	: 179.986485
C4	-C5	-C7	-C8	: -0.030917
C4	-C5	-C7	-H24	: 179.955720
C5	-C4	-C3	-H33	: 179.972594
C5	-C6	-C1	-H36	: 179.999621
C5	-C7	-C8	-C9	: -0.042298
C5	-C7	-C8	-C11	: 179.896028
C6	-C1	-C2	-H32	: -179.986195
C6	-C5	-C4	-H34	: -179.979078
C6	-C5	-C7	-C8	: 179.993251
C6	-C5	-C7	-H24	: -0.020111
C7	-C5	-C4	-H34	: 0.045485
C7	-C5	-C6	-H35	: -0.035823
C7	-C8	-C9	-N10	: -179.949241
C7	-C8	-C11	-C12	: -179.978082
C7	-C8	-C11	-H26	: -0.025894
C8	-C11	-C12	-C13	: 179.909171
C8	-C11	-C12	-H25	: -0.050135
C9	-C8	-C7	-H24	: 179.971111
C9	-C8	-C11	-C12	: -0.035821
C9	-C8	-C11	-H26	: 179.916368
N10	-C9	-C8	-C11	: 0.111096
C11	-C8	-C7	-H24	: -0.090563
C11	-C12	-C13	-C14	: 0.062118
C11	-C12	-C13	-C16	: 179.945939
C12	-C13	-C14	-N15	: 1.360596
C12	-C13	-C16	-C17	: 179.942251
C12	-C13	-C16	-H23	: -0.160563
C13	-C12	-C11	-H26	: -0.041148
C13	-C16	-C17	-C18	: -1.248127
C13	-C16	-C17	-C22	: 178.831136
C14	-C13	-C12	-H25	: -179.976958
C14	-C13	-C16	-C17	: -0.182238
C14	-C13	-C16	-H23	: 179.714947
N15	-C14	-C13	-C16	: -178.522211
C16	-C13	-C12	-H25	: -0.093137
C16	-C17	-C18	-C19	: 179.976028

C16	-C17	-C18	-H29	:	-0.083873
C16	-C17	-C22	-C21	:	-179.938052
C16	-C17	-C22	-H30	:	0.010966
C17	-C18	-C19	-C20	:	0.011914
C17	-C18	-C19	-H28	:	179.991092
C17	-C22	-C21	-C20	:	-0.072942
C17	-C22	-C21	-H31	:	179.943250
C18	-C17	-C16	-H23	:	178.854257
C18	-C17	-C22	-C21	:	0.135150
C18	-C17	-C22	-H30	:	-179.915832
C18	-C19	-C20	-C21	:	0.053432
C18	-C19	-C20	-H27	:	-179.993012
C19	-C18	-C17	-C22	:	-0.104001
C19	-C20	-C21	-C22	:	-0.023155
C19	-C20	-C21	-H31	:	179.960575
C20	-C19	-C18	-H29	:	-179.929188
C20	-C21	-C22	-H30	:	179.978356
C21	-C20	-C19	-H28	:	-179.925601
C22	-C17	-C16	-H23	:	-1.066480
C22	-C17	-C18	-H29	:	179.836099
C22	-C21	-C20	-H27	:	-179.976714
H25	-C12	-C11	-H26	:	179.999546
H27	-C20	-C19	-H28	:	0.027955
H27	-C20	-C21	-H31	:	0.007017
H28	-C19	-C18	-H29	:	0.049990
H30	-C22	-C21	-H31	:	-0.005453
H32	-C2	-C1	-H36	:	0.007458
H32	-C2	-C3	-H33	:	0.004588
H33	-C3	-C4	-H34	:	-0.015461
H35	-C6	-C1	-H36	:	-0.004457

DPDC5



final geometry:

angstroms			
atom	x	y	z
C1	-0.1162094820	-0.0069872294	0.0075163409
C2	-0.0971985878	0.0551256162	1.4043488578
C3	1.1240553839	0.1004591200	2.0769409569
C4	2.3145713883	0.0838401412	1.3573900706
C5	2.3153503036	0.0218035298	-0.0498604949
C6	1.0716494531	-0.0236013473	-0.7129172555
C7	3.5961934258	0.0084899811	-0.7437397582
C8	3.8160788025	-0.0425768383	-2.0833050998
C9	5.1321719836	-0.0471446615	-2.6403519872
C10	5.4473262951	-0.0953593792	-3.9762893570
C11	6.8163323676	-0.0917403839	-4.4464336255
C12	7.1972279364	-0.1338986058	-5.7470852309
C13	8.5693978625	-0.1259842123	-6.2079260596
C14	8.9030445836	-0.1689513257	-7.5393040282
C15	10.2298178425	-0.1623663843	-8.0702239561
C16	10.4844024034	-0.2085424413	-9.4032722639
C17	11.7861634243	-0.2037394032	-10.0578137895
C18	11.8332372278	-0.2764519445	-11.4634862502
C19	13.0464418358	-0.2775817909	-12.1445604870
C20	14.2446453825	-0.2043562558	-11.4342009295
C21	14.2176642251	-0.1304677267	-10.0382588868
C22	13.0072780005	-0.1302707711	-9.3564651336
C23	4.3955218310	-0.1505472314	-4.9509694692
N24	3.5540482242	-0.1966854697	-5.7541516885
C25	9.6110730655	-0.0707111669	-5.2219269690
N26	10.4438745279	-0.0252934473	-4.4098672882
H27	8.0799789576	-0.2133159652	-8.2504122342
H28	5.9669642668	-0.0073327401	-1.9424402754
H29	6.4382401775	-0.1762378124	-6.5251467709
H30	7.5779565851	-0.0501786756	-3.6708158762
H31	9.6294346747	-0.2589597250	-10.0772067483
H32	15.1937345768	-0.2042497639	-11.9617497767
H33	13.0572219538	-0.3353392913	-13.2288788118
H34	10.9015384182	-0.3335477252	-12.0204068243
H35	13.0099184544	-0.0715733850	-8.2726988053
H36	15.1475334032	-0.0723760513	-9.4803697847
H37	2.9814102474	-0.0798848027	-2.7782705864
H38	4.4705502530	0.0456153114	-0.0946658394

H39	-1.0288392745	0.0678339467	1.9619880112
H40	1.1488472140	0.1487768212	3.1615009654
H41	3.2646135822	0.1195135516	1.8843673351
H42	1.0343280881	-0.0723702119	-1.7965716567
H43	-1.0644270195	-0.0426095752	-0.5205492836
H44	11.0480052084	-0.1138829669	-7.3569537537

Final total energy: -1034.854828 hartrees

HOMO energy: -0.19793

LUMO energy: -0.10237

bond lengths (angstroms):

C1 -C2 : 1.398342	C1 -C6 : 1.389356
C1 -H43 : 1.085928	C2 -C3 : 1.394954
C2 -H39 : 1.085853	C3 -C4 : 1.391171
C3 -H40 : 1.085919	C4 -C5 : 1.408618
C4 -H41 : 1.086995	C5 -C6 : 1.410141
C5 -C7 : 1.456779	C6 -H42 : 1.085393
C7 -C8 : 1.358452	C7 -H38 : 1.089576
C8 -C9 : 1.429134	C8 -H37 : 1.086757
C9 -C10 : 1.373454	C9 -H28 : 1.088827
C10 -C11 : 1.447490	C10 -C23 : 1.435040
C11 -C12 : 1.355933	C11 -H30 : 1.087833
C12 -C13 : 1.447511	C12 -H29 : 1.087766
C13 -C14 : 1.373220	C13 -C25 : 1.435387
C14 -C15 : 1.429072	C14 -H27 : 1.088614
C15 -C16 : 1.357926	C15 -H44 : 1.086525
C16 -C17 : 1.457062	C16 -H31 : 1.089816
C17 -C18 : 1.408339	C17 -C22 : 1.410109
C18 -C19 : 1.391305	C18 -H34 : 1.086960
C19 -C20 : 1.394871	C19 -H33 : 1.085909
C20 -C21 : 1.398157	C20 -H32 : 1.085854
C21 -C22 : 1.389200	C21 -H36 : 1.085943
C22 -H35 : 1.085358	C23 -N24 : 1.164177
C25 -N26 : 1.164071	

bond angles:

C6 -C1 -C2 : 120.456608	H43 -C1 -C2 : 119.939422
H43 -C1 -C6 : 119.603969	C3 -C2 -C1 : 119.668843
H39 -C2 -C1 : 120.122487	H39 -C2 -C3 : 120.208670
C4 -C3 -C2 : 119.962325	H40 -C3 -C2 : 120.198076
H40 -C3 -C4 : 119.839599	C5 -C4 -C3 : 121.179705
H41 -C4 -C3 : 119.788582	H41 -C4 -C5 : 119.031709
C6 -C5 -C4 : 118.078450	C7 -C5 -C4 : 118.472511
C7 -C5 -C6 : 123.449033	C5 -C6 -C1 : 120.654066
H42 -C6 -C1 : 119.264778	H42 -C6 -C5 : 120.081154
C8 -C7 -C5 : 127.759477	H38 -C7 -C5 : 114.929567
H38 -C7 -C8 : 117.310914	C9 -C8 -C7 : 122.245080
H37 -C8 -C7 : 120.501929	H37 -C8 -C9 : 117.252873
C10 -C9 -C8 : 126.196473	H28 -C9 -C8 : 117.135124
H28 -C9 -C10 : 116.668347	C11 -C10 -C9 : 122.198869
C23 -C10 -C9 : 119.591692	C23 -C10 -C11 : 118.209424
C12 -C11 -C10 : 125.250989	H30 -C11 -C10 : 115.510951
H30 -C11 -C12 : 119.238019	C13 -C12 -C11 : 124.855413
H29 -C12 -C11 : 119.427852	H29 -C12 -C13 : 115.716703
C14 -C13 -C12 : 122.603119	C25 -C13 -C12 : 117.998910
C25 -C13 -C14 : 119.397970	C15 -C14 -C13 : 125.847062
H27 -C14 -C13 : 116.801164	H27 -C14 -C15 : 117.351717

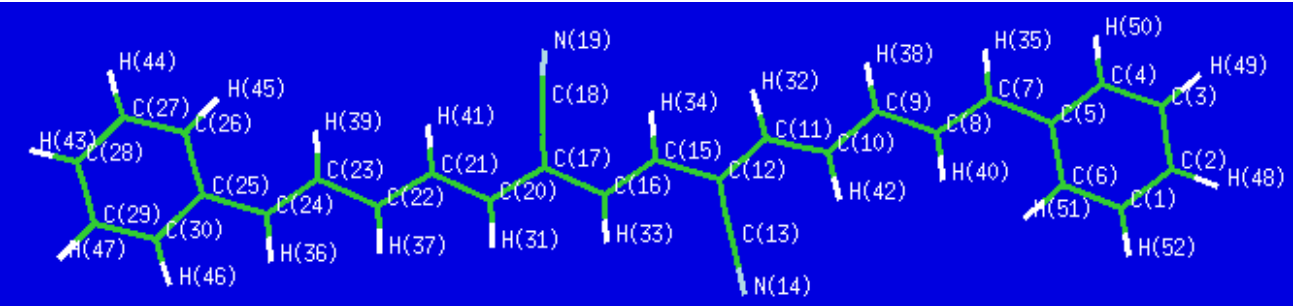
C16	-C15	-C14	: 122.589108	H44	-C15	-C14	: 117.093556
H44	-C15	-C16	: 120.316840	C17	-C16	-C15	: 127.472165
H31	-C16	-C15	: 117.487631	H31	-C16	-C17	: 115.039803
C18	-C17	-C16	: 118.558897	C22	-C17	-C16	: 123.395441
C22	-C17	-C18	: 118.045658	C19	-C18	-C17	: 121.183687
H34	-C18	-C17	: 119.042381	H34	-C18	-C19	: 119.773901
C20	-C19	-C18	: 119.980591	H33	-C19	-C18	: 119.835042
H33	-C19	-C20	: 120.184366	C21	-C20	-C19	: 119.647092
H32	-C20	-C19	: 120.225111	H32	-C20	-C21	: 120.127791
C22	-C21	-C20	: 120.452597	H36	-C21	-C20	: 119.948825
H36	-C21	-C22	: 119.598574	C21	-C22	-C17	: 120.690329
H35	-C22	-C17	: 120.103719	H35	-C22	-C21	: 119.205915
N24	-C23	-C10	: 179.152182	N26	-C25	-C13	: 179.149764

torsional angles:

C1	-C2	-C3	-C4	: 0.004838
C1	-C2	-C3	-H40	: -179.997744
C1	-C6	-C5	-C4	: 0.014070
C1	-C6	-C5	-C7	: -179.956406
C2	-C1	-C6	-C5	: -0.001078
C2	-C1	-C6	-H42	: 179.982384
C2	-C3	-C4	-C5	: 0.008622
C2	-C3	-C4	-H41	: 179.985348
C3	-C2	-C1	-C6	: -0.008586
C3	-C2	-C1	-H43	: 179.989954
C3	-C4	-C5	-C6	: -0.017896
C3	-C4	-C5	-C7	: 179.954080
C4	-C3	-C2	-H39	: 179.996583
C4	-C5	-C6	-H42	: -179.969257
C4	-C5	-C7	-C8	: -179.731967
C4	-C5	-C7	-H38	: 0.190537
C5	-C4	-C3	-H40	: -179.988805
C5	-C6	-C1	-H43	: -179.999623
C5	-C7	-C8	-C9	: 179.863616
C5	-C7	-C8	-H37	: -0.008116
C6	-C1	-C2	-H39	: 179.999663
C6	-C5	-C4	-H41	: -179.994795
C6	-C5	-C7	-C8	: 0.238400
C6	-C5	-C7	-H38	: -179.839097
C7	-C5	-C4	-H41	: -0.022818
C7	-C5	-C6	-H42	: 0.060267
C7	-C8	-C9	-C10	: -179.927227
C7	-C8	-C9	-H28	: -0.016851
C8	-C9	-C10	-C11	: 179.808953
C8	-C9	-C10	-C23	: -0.146896
C9	-C8	-C7	-H38	: -0.057292
C9	-C10	-C11	-C12	: -179.815392
C9	-C10	-C11	-H30	: 0.110056
C9	-C10	-C23	-N24	: -176.491045
C10	-C9	-C8	-H37	: -0.051544
C10	-C11	-C12	-C13	: 179.811853
C10	-C11	-C12	-H29	: -0.121229
C11	-C10	-C9	-H28	: -0.101792
C11	-C10	-C23	-N24	: 3.551351
C11	-C12	-C13	-C14	: -179.939335

C11	-C12	-C13	-C25	:	0.056896
C12	-C11	-C10	-C23	:	0.141041
C12	-C13	-C14	-C15	:	179.897512
C12	-C13	-C14	-H27	:	-0.192045
C12	-C13	-C25	-N26	:	-1.164141
C13	-C12	-C11	-H30	:	-0.111040
C13	-C14	-C15	-C16	:	179.921159
C13	-C14	-C15	-H44	:	-0.334685
C14	-C13	-C12	-H29	:	-0.004027
C14	-C13	-C25	-N26	:	178.832214
C14	-C15	-C16	-C17	:	179.827182
C14	-C15	-C16	-H31	:	-0.415836
C15	-C14	-C13	-C25	:	-0.098667
C15	-C16	-C17	-C18	:	179.127671
C15	-C16	-C17	-C22	:	-0.852543
C16	-C15	-C14	-H27	:	0.011157
C16	-C17	-C18	-C19	:	-179.910704
C16	-C17	-C18	-H34	:	0.025305
C16	-C17	-C22	-C21	:	179.960496
C16	-C17	-C22	-H35	:	-0.109410
C17	-C16	-C15	-H44	:	0.091033
C17	-C18	-C19	-C20	:	-0.069786
C17	-C18	-C19	-H33	:	179.943137
C17	-C22	-C21	-C20	:	-0.031528
C17	-C22	-C21	-H36	:	179.946527
C18	-C17	-C16	-H31	:	-0.634382
C18	-C17	-C22	-C21	:	-0.019813
C18	-C17	-C22	-H35	:	179.910281
C18	-C19	-C20	-C21	:	0.016888
C18	-C19	-C20	-H32	:	-179.956852
C19	-C18	-C17	-C22	:	0.070579
C19	-C20	-C21	-C22	:	0.033350
C19	-C20	-C21	-H36	:	-179.944629
C20	-C19	-C18	-H34	:	179.994666
C20	-C21	-C22	-H35	:	-179.962243
C21	-C20	-C19	-H33	:	-179.996081
C22	-C17	-C16	-H31	:	179.385404
C22	-C17	-C18	-H34	:	-179.993411
C22	-C21	-C20	-H32	:	-179.992885
C23	-C10	-C9	-H28	:	179.942359
C23	-C10	-C11	-H30	:	-179.933511
C25	-C13	-C12	-H29	:	179.992204
C25	-C13	-C14	-H27	:	179.811775
H27	-C14	-C15	-H44	:	179.755313
H28	-C9	-C8	-H37	:	179.858832
H29	-C12	-C11	-H30	:	179.955878
H31	-C16	-C15	-H44	:	179.848016
H32	-C20	-C19	-H33	:	0.030179
H32	-C20	-C21	-H36	:	0.029137
H33	-C19	-C18	-H34	:	0.007590
H35	-C22	-C21	-H36	:	0.015812
H37	-C8	-C7	-H38	:	-179.929024
H39	-C2	-C1	-H43	:	-0.001797
H39	-C2	-C3	-H40	:	-0.005999
H40	-C3	-C4	-H41	:	-0.012079
H42	-C6	-C1	-H43	:	-0.016161

DPDC7



final geometry:

angstroms			
atom	x	y	z
C1	0.0758788280	-0.0963861364	-0.1259788144
C2	-0.0010154487	-0.1261026227	1.2691602386
C3	1.1715276728	-0.0953052956	2.0234684011
C4	2.4106114462	-0.0361143624	1.3908297581
C5	2.5070182105	-0.0052728190	-0.0118206090
C6	1.3090832837	-0.0368575468	-0.7567592075
C7	3.8177626736	0.0478662714	-0.6504145160
C8	4.0077008268	0.0844900955	-1.9910243664
C9	5.2477631261	0.1104392573	-2.6968638262
C10	5.2529066684	0.1223500341	-4.0617289000
C11	6.4117517755	0.1147927644	-4.8752304006
C12	6.4118759274	0.1022248826	-6.2529128979
C13	5.1633648911	0.1127970051	-6.9577744888
N14	4.1369937483	0.1218181781	-7.5076247676
C15	7.6541347974	0.0674140456	-6.9742741256
C16	7.8519345917	0.0403046056	-8.3161981898
C17	9.1785863179	-0.0011965258	-8.8892561238
C18	10.2758951120	-0.0232050524	-7.9629024707
N19	11.1329879155	-0.0419034352	-7.1756901390
C20	9.4464635203	-0.0182985792	-10.2370344449
C21	10.7538989871	-0.0457944348	-10.8025034664
C22	10.9984852476	-0.0485910648	-12.1431265934
C23	12.3064019178	-0.0563923320	-12.7273097480
C24	12.4993415940	-0.0447949656	-14.0700319766
C25	13.7536129439	-0.0349691506	-14.8106351404
C26	15.0277077250	-0.0382114769	-14.2066158174
C27	16.1788618750	-0.0230967302	-14.9859326027
C28	16.0924252165	-0.0042749374	-16.3815178882
C29	14.8398553387	-0.0012424228	-16.9951107542
C30	13.6873138685	-0.0166098988	-16.2174965040
H31	8.5964043583	-0.0032649747	-10.9167757062
H32	7.3822315259	0.1065337226	-4.3839162652
H33	7.0117396999	0.0483591698	-9.0058581491
H34	8.5318832618	0.0583134866	-6.3336937345
H35	4.6825023331	0.0509709734	0.0113840405
H36	11.6062899897	-0.0359339287	-14.6944155544
H37	10.1517321381	-0.0364290332	-12.8299320659
H38	6.1842634225	0.1073386954	-2.1406389854
H39	13.1539790211	-0.0652811078	-12.0451897306
H40	3.1333798866	0.0847426368	-2.6362908565

H41	11.5978783058	-0.0575651724	-10.1159027669
H42	4.2921052200	0.1245128870	-4.5724540265
H43	16.9961191052	0.0077294511	-16.9835750433
H44	17.1526150450	-0.0256876346	-14.5047968688
H45	15.1166993436	-0.0516310944	-13.1247310177
H46	12.7121147903	-0.0133386367	-16.6978271791
H47	14.7612730485	0.0132559366	-18.0782833274
H48	-0.9673785229	-0.1733307534	1.7621393935
H49	1.1213532040	-0.1181465813	3.1081767838
H50	3.3204316703	-0.0137153235	1.9849285082
H51	1.3373876195	-0.0176080699	-1.8402973007
H52	-0.8315412700	-0.1208032974	-0.7222925819

Final total energy: -1189.672379 hartrees

HOMO energy: -0.18875

LUMO energy: -0.10648

bond lengths (angstroms):

C1	-C2	:	1.397572	C1	-C6	:	1.386442
C1	-H52	:	1.086093	C2	-C3	:	1.394556
C2	-H48	:	1.085871	C3	-C4	:	1.392503
C3	-H49	:	1.086108	C4	-C5	:	1.406298
C4	-H50	:	1.086843	C5	-C6	:	1.411021
C5	-C7	:	1.458999	C6	-H51	:	1.084079
C7	-C8	:	1.354493	C7	-H35	:	1.088927
C8	-C9	:	1.427108	C8	-H40	:	1.086649
C9	-C10	:	1.364927	C9	-H38	:	1.089233
C10	-C11	:	1.415897	C10	-H42	:	1.088110
C11	-C12	:	1.377740	C11	-H32	:	1.087791
C12	-C13	:	1.433779	C12	-C15	:	1.436935
C13	-N14	:	1.164412	C15	-C16	:	1.356694
C15	-H34	:	1.086678	C16	-C17	:	1.445726
C16	-H33	:	1.087025	C17	-C18	:	1.436211
C17	-C20	:	1.374248	C18	-N19	:	1.163899
C20	-C21	:	1.424745	C20	-H31	:	1.088520
C21	-C22	:	1.362755	C21	-H41	:	1.088053
C22	-C23	:	1.432472	C22	-H37	:	1.090340
C23	-C24	:	1.356563	C23	-H39	:	1.088004
C24	-C25	:	1.456635	C24	-H36	:	1.089713
C25	-C26	:	1.410024	C25	-C30	:	1.408542
C26	-C27	:	1.390223	C26	-H45	:	1.085622
C27	-C28	:	1.398386	C27	-H44	:	1.086137
C28	-C29	:	1.394789	C28	-H43	:	1.085946
C29	-C30	:	1.390421	C29	-H47	:	1.086116
C30	-H46	:	1.087079				

bond angles:

C6	-C1	-C2	:	120.266522	H52	-C1	-C2	:	120.108718
H52	-C1	-C6	:	119.624735	C3	-C2	-C1	:	119.552623
H48	-C2	-C1	:	120.204839	H48	-C2	-C3	:	120.242532
C4	-C3	-C2	:	120.222927	H49	-C3	-C2	:	120.058971
H49	-C3	-C4	:	119.718088	C5	-C4	-C3	:	121.002287
H50	-C4	-C3	:	119.829811	H50	-C4	-C5	:	119.167894
C6	-C5	-C4	:	117.896896	C7	-C5	-C4	:	119.930189
C7	-C5	-C6	:	122.171439	C5	-C6	-C1	:	121.058729
H51	-C6	-C1	:	118.601995	H51	-C6	-C5	:	120.339063
C8	-C7	-C5	:	124.067610	H35	-C7	-C5	:	116.584802
H35	-C7	-C8	:	119.346384	C9	-C8	-C7	:	127.724500
H40	-C8	-C7	:	118.353155	H40	-C8	-C9	:	113.919066
C10	-C9	-C8	:	119.868104	H38	-C9	-C8	:	119.634909
H38	-C9	-C10	:	120.492074	C11	-C10	-C9	:	125.279128
H42	-C10	-C9	:	117.777389	H42	-C10	-C11	:	116.938217
C12	-C11	-C10	:	125.074923	H32	-C11	-C10	:	118.081492
H32	-C11	-C12	:	116.839572	C13	-C12	-C11	:	119.435598

C15	-C12	-C11	: 120.151752	C15	-C12	-C13	: 120.410575
N14	-C13	-C12	: 178.731407	C16	-C15	-C12	: 128.541084
H34	-C15	-C12	: 113.739375	H34	-C15	-C16	: 117.719019
C17	-C16	-C15	: 121.764311	H33	-C16	-C15	: 120.977551
H33	-C16	-C17	: 117.258124	C18	-C17	-C16	: 116.479505
C20	-C17	-C16	: 124.609144	C20	-C17	-C18	: 118.911267
N19	-C18	-C17	: 177.604665	C21	-C20	-C17	: 124.636197
H31	-C20	-C17	: 117.389695	H31	-C20	-C21	: 117.972898
C22	-C21	-C20	: 123.723577	H41	-C21	-C20	: 117.488274
H41	-C21	-C22	: 118.786502	C23	-C22	-C21	: 124.407571
H37	-C22	-C21	: 118.702706	H37	-C22	-C23	: 116.887985
C24	-C23	-C22	: 122.240021	H39	-C23	-C22	: 117.106744
H39	-C23	-C24	: 120.651952	C25	-C24	-C23	: 128.738894
H36	-C24	-C23	: 116.785027	H36	-C24	-C25	: 114.475129
C26	-C25	-C24	: 124.073020	C30	-C25	-C24	: 117.864697
C30	-C25	-C26	: 118.061933	C27	-C26	-C25	: 120.534182
H45	-C26	-C25	: 120.066165	H45	-C26	-C27	: 119.399627
C28	-C27	-C26	: 120.558045	H44	-C27	-C26	: 119.604591
H44	-C27	-C28	: 119.837362	C29	-C28	-C27	: 119.641747
H43	-C28	-C27	: 120.132949	H43	-C28	-C29	: 120.225303
C30	-C29	-C28	: 119.890253	H47	-C29	-C28	: 120.247026
H47	-C29	-C30	: 119.862721	C29	-C30	-C25	: 121.313827
H46	-C30	-C25	: 118.920212	H46	-C30	-C29	: 119.765922

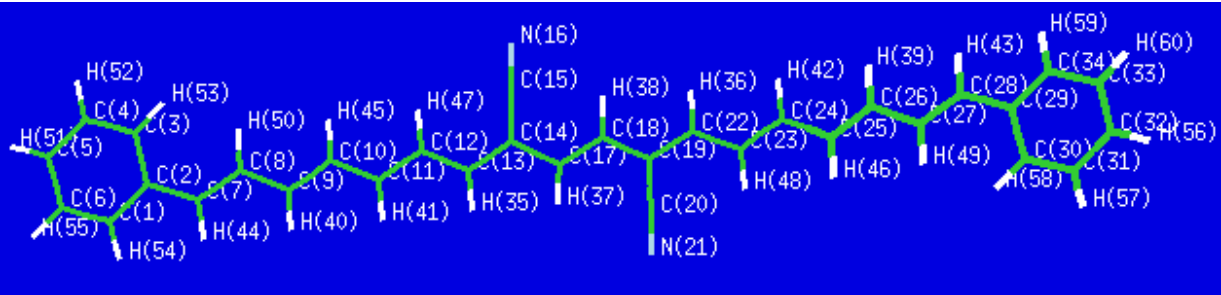
torsional angles:

C1	-C2	-C3	-C4	: -0.036450
C1	-C2	-C3	-H49	: -179.993428
C1	-C6	-C5	-C4	: 0.001399
C1	-C6	-C5	-C7	: 179.558875
C2	-C1	-C6	-C5	: 0.009508
C2	-C1	-C6	-H51	: 179.842328
C2	-C3	-C4	-C5	: 0.048095
C2	-C3	-C4	-H50	: -179.919025
C3	-C2	-C1	-C6	: 0.007933
C3	-C2	-C1	-H52	: 179.949783
C3	-C4	-C5	-C6	: -0.030138
C3	-C4	-C5	-C7	: -179.597915
C4	-C3	-C2	-H48	: 179.934535
C4	-C5	-C6	-H51	: -179.828531
C4	-C5	-C7	-C8	: -179.789335
C4	-C5	-C7	-H35	: 0.613572
C5	-C4	-C3	-H49	: -179.994780
C5	-C6	-C1	-H52	: -179.932623
C5	-C7	-C8	-C9	: -178.646533
C5	-C7	-C8	-H40	: 0.651019
C6	-C1	-C2	-H48	: -179.963063
C6	-C5	-C4	-H50	: 179.937197
C6	-C5	-C7	-C8	: 0.661951
C6	-C5	-C7	-H35	: -178.935143
C7	-C5	-C4	-H50	: 0.369419
C7	-C5	-C6	-H51	: -0.271055
C7	-C8	-C9	-C10	: 178.825274
C7	-C8	-C9	-H38	: -0.372525
C8	-C9	-C10	-C11	: -178.357280
C8	-C9	-C10	-H42	: 0.779686

C9	-C8	-C7	-H35	:	0.940114
C9	-C10	-C11	-C12	:	178.747225
C9	-C10	-C11	-H32	:	-0.498956
C10	-C9	-C8	-H40	:	-0.498470
C10	-C11	-C12	-C13	:	0.773403
C10	-C11	-C12	-C15	:	-178.704898
C11	-C10	-C9	-H38	:	0.833541
C11	-C12	-C13	-N14	:	0.133552
C11	-C12	-C15	-C16	:	179.439957
C11	-C12	-C15	-H34	:	-0.288193
C12	-C11	-C10	-H42	:	-0.396258
C12	-C15	-C16	-C17	:	-179.636845
C12	-C15	-C16	-H33	:	0.320003
C13	-C12	-C11	-H32	:	-179.971972
C13	-C12	-C15	-C16	:	-0.033209
C13	-C12	-C15	-H34	:	-179.761359
N14	-C13	-C12	-C15	:	179.610475
C15	-C12	-C11	-H32	:	0.549727
C15	-C16	-C17	-C18	:	0.490015
C15	-C16	-C17	-C20	:	-179.402853
C16	-C17	-C18	-N19	:	2.435192
C16	-C17	-C20	-C21	:	179.344865
C16	-C17	-C20	-H31	:	-0.245736
C17	-C16	-C15	-H34	:	0.082047
C17	-C20	-C21	-C22	:	-179.300356
C17	-C20	-C21	-H41	:	0.226215
C18	-C17	-C16	-H33	:	-179.468365
C18	-C17	-C20	-C21	:	-0.545590
C18	-C17	-C20	-H31	:	179.863809
N19	-C18	-C17	-C20	:	-177.665536
C20	-C17	-C16	-H33	:	0.638766
C20	-C21	-C22	-C23	:	179.046608
C20	-C21	-C22	-H37	:	-0.458030
C21	-C22	-C23	-C24	:	-179.295248
C21	-C22	-C23	-H39	:	0.294942
C22	-C21	-C20	-H31	:	0.288053
C22	-C23	-C24	-C25	:	179.219577
C22	-C23	-C24	-H36	:	-0.403248
C23	-C22	-C21	-H41	:	-0.474191
C23	-C24	-C25	-C26	:	0.102562
C23	-C24	-C25	-C30	:	-179.677470
C24	-C23	-C22	-H37	:	0.217593
C24	-C25	-C26	-C27	:	-179.754754
C24	-C25	-C26	-H45	:	0.186395
C24	-C25	-C30	-C29	:	179.755420
C24	-C25	-C30	-H46	:	-0.173281
C25	-C24	-C23	-H39	:	-0.356379
C25	-C26	-C27	-C28	:	0.007381
C25	-C26	-C27	-H44	:	179.990738
C25	-C30	-C29	-C28	:	0.018776
C25	-C30	-C29	-H47	:	-179.970558
C26	-C25	-C24	-H36	:	179.732614
C26	-C25	-C30	-C29	:	-0.038102
C26	-C25	-C30	-H46	:	-179.966802
C26	-C27	-C28	-C29	:	-0.027425
C26	-C27	-C28	-H43	:	179.983385

C27	-C26	-C25	-C30	:	0.024876
C27	-C28	-C29	-C30	:	0.014396
C27	-C28	-C29	-H47	:	-179.996312
C28	-C27	-C26	-H45	:	-179.934157
C28	-C29	-C30	-H46	:	179.946882
C29	-C28	-C27	-H44	:	179.989258
C30	-C25	-C24	-H36	:	-0.047418
C30	-C25	-C26	-H45	:	179.966025
C30	-C29	-C28	-H43	:	-179.996424
H31	-C20	-C21	-H41	:	179.814623
H32	-C11	-C10	-H42	:	-179.642438
H33	-C16	-C15	-H34	:	-179.961105
H35	-C7	-C8	-H40	:	-179.762334
H36	-C24	-C23	-H39	:	-179.979204
H37	-C22	-C21	-H41	:	-179.978828
H37	-C22	-C23	-H39	:	179.807782
H38	-C9	-C8	-H40	:	-179.696269
H38	-C9	-C10	-H42	:	179.970508
H43	-C28	-C27	-H44	:	0.000067
H43	-C28	-C29	-H47	:	-0.007131
H44	-C27	-C26	-H45	:	0.049199
H46	-C30	-C29	-H47	:	-0.042452
H48	-C2	-C1	-H52	:	-0.021213
H48	-C2	-C3	-H49	:	-0.022443
H49	-C3	-C4	-H50	:	0.038100
H51	-C6	-C1	-H52	:	-0.099803

DPDC9



final geometry:

angstroms				
atom	x	y	z	
C1	0.1960386397	0.2858460312	0.3519596121	
C2	0.1948422846	0.2390581649	1.6992741428	
C3	1.3814750432	0.0789003086	2.5024865347	
C4	1.3966531730	0.0465999345	3.8622464284	
C5	2.5888453871	-0.0943257407	4.6415591165	
C6	2.6271119244	-0.1016665843	6.0067373826	
C7	3.8367461520	-0.2154273783	6.7498529646	
C8	3.9541249676	-0.1948233960	8.1215082920	
C9	5.2297405595	-0.2827936665	8.7948134666	
C10	5.4077420935	-0.2148811336	10.1394099157	
C11	6.6833477181	-0.2694344571	10.8158013080	
C12	6.7994744236	-0.1426954576	12.1818078799	
C13	8.0102577153	-0.1542718794	12.9312956106	
C14	8.0469062065	0.0081139443	14.2869742143	
C15	9.2429339321	0.0245794738	15.0728105109	
C16	9.2604002158	0.2070774818	16.4207645875	
C17	10.4548191019	0.2389596172	17.2278642124	
C18	10.4602096186	0.4296149020	18.5624408184	
C19	2.7755291655	-0.0633001522	8.9283110972	
N20	1.8311337202	0.0418608332	9.6009917298	
C21	7.8622584985	-0.4465250334	10.0186992416	
N22	8.8066247366	-0.5920683319	9.3535126823	
H23	1.1496330358	0.1935718346	-0.1692860668	
H24	-0.7522343985	0.3312623256	2.2311314888	
H25	2.3272284393	-0.0152865567	1.9684943321	
H26	0.4555401022	0.1421391391	4.4026651345	
H27	3.5270212914	-0.1914045917	4.0948496798	
H28	1.6965569216	-0.0026298301	6.5622034637	
H29	4.7611600885	-0.3153213683	6.1840700533	
H30	6.0967345684	-0.3963504788	8.1482865572	
H31	4.5399879694	-0.0941670936	10.7836318637	
H32	5.8727485697	-0.0091257388	12.7370074855	
H33	8.9439631252	-0.2881115986	12.3885543471	
H34	7.1051168010	0.1438079096	14.8191124658	
H35	10.1872660610	-0.1116308041	14.5469451301	
H36	8.3119231340	0.3443954500	16.9403955855	
H37	11.4038303187	0.1010499365	16.7095339265	
H38	9.5049772081	0.5674876821	19.0704713763	
C39	-1.0171136675	0.4599419857	-0.5056506262	
C40	11.6838331619	0.4711819400	19.4223889894	
H41	11.6471442329	-0.3022209700	20.2007610103	
H42	12.5957730128	0.3225537373	18.8369833781	

H43	11.7665729300	1.4324295628	19.9463817690
H44	-0.9370012829	1.3624919050	-1.1257393132
H45	-1.1348073930	-0.3818050830	-1.2002412954
H46	-1.9285660189	0.5381220628	0.0936880158

Final total energy: -1344.499258 hartrees

HOMO energy: -0.18270

LUMO energy: -0.10794

bond lengths (angstroms):

C1	-C2	:	1.408511	C1	-C6	:	1.391560
C1	-H54	:	1.087115	C2	-C3	:	1.409929
C2	-C7	:	1.458727	C3	-C4	:	1.389495
C3	-H53	:	1.085541	C4	-C5	:	1.398020
C4	-H52	:	1.086203	C5	-C6	:	1.394816
C5	-H51	:	1.085911	C6	-H55	:	1.086127
C7	-C8	:	1.356858	C7	-H44	:	1.089934
C8	-C9	:	1.432842	C8	-H50	:	1.088248
C9	-C10	:	1.363835	C9	-H40	:	1.090260
C10	-C11	:	1.427048	C10	-H45	:	1.089792
C11	-C12	:	1.367455	C11	-H41	:	1.090297
C12	-C13	:	1.421442	C12	-H47	:	1.088593
C13	-C14	:	1.378091	C13	-H35	:	1.088721
C14	-C15	:	1.433976	C14	-C17	:	1.442605
C15	-N16	:	1.164277	C17	-C18	:	1.359086
C17	-H37	:	1.087392	C18	-C19	:	1.442340
C18	-H38	:	1.087331	C19	-C20	:	1.433747
C19	-C22	:	1.378110	C20	-N21	:	1.164284
C22	-C23	:	1.421302	C22	-H36	:	1.088367
C23	-C24	:	1.367629	C23	-H48	:	1.088486
C24	-C25	:	1.426817	C24	-H42	:	1.090333
C25	-C26	:	1.363929	C25	-H46	:	1.089704
C26	-C27	:	1.432685	C26	-H39	:	1.090287
C27	-C28	:	1.356947	C27	-H49	:	1.088163
C28	-C29	:	1.458657	C28	-H43	:	1.089968
C29	-C30	:	1.410014	C29	-C34	:	1.408471
C30	-C31	:	1.389410	C30	-H58	:	1.085497
C31	-C32	:	1.398066	C31	-H57	:	1.086200
C32	-C33	:	1.394959	C32	-H56	:	1.085934
C33	-C34	:	1.391533	C33	-H60	:	1.086126
C34	-H59	:	1.087107				

bond angles:

C6	-C1	-C2	:	121.264169	H54	-C1	-C2	:	118.981327
H54	-C1	-C6	:	119.754442	C3	-C2	-C1	:	117.873161
C7	-C2	-C1	:	118.653843	C7	-C2	-C3	:	123.472629
C4	-C3	-C2	:	120.808088	H53	-C3	-C2	:	120.025099
H53	-C3	-C4	:	119.166179	C5	-C4	-C3	:	120.482266
H52	-C4	-C3	:	119.588901	H52	-C4	-C5	:	119.928728
C6	-C5	-C4	:	119.532881	H51	-C5	-C4	:	120.185174
H51	-C5	-C6	:	120.281878	C5	-C6	-C1	:	120.039203
H55	-C6	-C1	:	119.797964	H55	-C6	-C5	:	120.162813
C8	-C7	-C2	:	127.556195	H44	-C7	-C2	:	115.050316
H44	-C7	-C8	:	117.393455	C9	-C8	-C7	:	123.655814
H50	-C8	-C7	:	119.961475	H50	-C8	-C9	:	116.382552
C10	-C9	-C8	:	124.044894	H40	-C9	-C8	:	117.244831
H40	-C9	-C10	:	118.709764	C11	-C10	-C9	:	124.239425

H45	-C10	-C9	: 118.656146	H45	-C10	-C11	: 117.103436
C12	-C11	-C10	: 123.933483	H41	-C11	-C10	: 117.332399
H41	-C11	-C12	: 118.733597	C13	-C12	-C11	: 123.522667
H47	-C12	-C11	: 118.772448	H47	-C12	-C13	: 117.704115
C14	-C13	-C12	: 125.731810	H35	-C13	-C12	: 117.540532
H35	-C13	-C14	: 116.727262	C15	-C14	-C13	: 119.330151
C17	-C14	-C13	: 122.746641	C17	-C14	-C15	: 117.922926
N16	-C15	-C14	: 179.009352	C18	-C17	-C14	: 124.947265
H37	-C17	-C14	: 115.762094	H37	-C17	-C18	: 119.290437
C19	-C18	-C17	: 125.194249	H38	-C18	-C17	: 119.187140
H38	-C18	-C19	: 115.618508	C20	-C19	-C18	: 118.064843
C22	-C19	-C18	: 122.505155	C22	-C19	-C20	: 119.429876
N21	-C20	-C19	: 179.036825	C23	-C22	-C19	: 126.060107
H36	-C22	-C19	: 116.580401	H36	-C22	-C23	: 117.359492
C24	-C23	-C22	: 123.205697	H48	-C23	-C22	: 117.871314
H48	-C23	-C24	: 118.922987	C25	-C24	-C23	: 124.194042
H42	-C24	-C23	: 118.601397	H42	-C24	-C25	: 117.204528
C26	-C25	-C24	: 124.077612	H46	-C25	-C24	: 117.226171
H46	-C25	-C26	: 118.696199	C27	-C26	-C25	: 124.129346
H39	-C26	-C25	: 118.668221	H39	-C26	-C27	: 117.202378
C28	-C27	-C26	: 123.622760	H49	-C27	-C26	: 116.394620
H49	-C27	-C28	: 119.982519	C29	-C28	-C27	: 127.557420
H43	-C28	-C27	: 117.399569	H43	-C28	-C29	: 115.042794
C30	-C29	-C28	: 123.450201	C34	-C29	-C28	: 118.672163
C34	-C29	-C30	: 117.877631	C31	-C30	-C29	: 120.814875
H58	-C30	-C29	: 120.018476	H58	-C30	-C31	: 119.166617
C32	-C31	-C30	: 120.472210	H57	-C31	-C30	: 119.593762
H57	-C31	-C32	: 119.934023	C33	-C32	-C31	: 119.537109
H56	-C32	-C31	: 120.181675	H56	-C32	-C33	: 120.281202
C34	-C33	-C32	: 120.040148	H60	-C33	-C32	: 120.165280
H60	-C33	-C34	: 119.794571	C33	-C34	-C29	: 121.257967
H59	-C34	-C29	: 119.002630	H59	-C34	-C33	: 119.739342

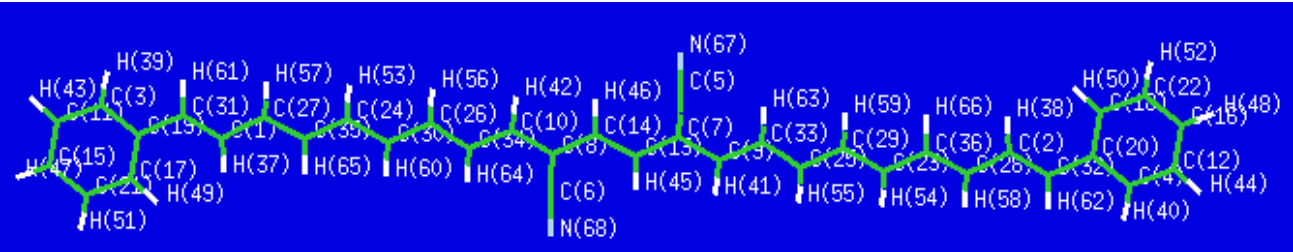
torsional angles:

C1	-C2	-C3	-C4	: -0.141430
C1	-C2	-C3	-H53	: 179.566456
C1	-C2	-C7	-C8	: 177.585710
C1	-C2	-C7	-H44	: -2.345640
C1	-C6	-C5	-C4	: -0.007551
C1	-C6	-C5	-H51	: -179.913692
C2	-C1	-C6	-C5	: -0.112548
C2	-C1	-C6	-H55	: 179.937955
C2	-C3	-C4	-C5	: 0.026832
C2	-C3	-C4	-H52	: 179.908394
C2	-C7	-C8	-C9	: 179.413216
C2	-C7	-C8	-H50	: -0.436644
C3	-C2	-C1	-C6	: 0.184739
C3	-C2	-C1	-H54	: -179.905788
C3	-C2	-C7	-C8	: -2.639488
C3	-C2	-C7	-H44	: 177.429162
C3	-C4	-C5	-C6	: 0.049891
C3	-C4	-C5	-H51	: 179.956125
C4	-C3	-C2	-C7	: -179.917875
C4	-C5	-C6	-H55	: 179.941761
C5	-C4	-C3	-H53	: -179.683530

C5	-C6	-C1	-H54	: 179.978669
C6	-C1	-C2	-C7	: 179.972236
C6	-C5	-C4	-H52	: -179.831268
C7	-C2	-C1	-H54	: -0.118291
C7	-C2	-C3	-H53	: -0.209990
C7	-C8	-C9	-C10	: -179.997636
C7	-C8	-C9	-H40	: -0.262029
C8	-C9	-C10	-C11	: 179.267036
C8	-C9	-C10	-H45	: -0.359238
C9	-C8	-C7	-H44	: -0.656831
C9	-C10	-C11	-C12	: -179.805215
C9	-C10	-C11	-H41	: -0.071585
C10	-C9	-C8	-H50	: -0.142835
C10	-C11	-C12	-C13	: 179.278258
C10	-C11	-C12	-H47	: -0.394824
C11	-C10	-C9	-H40	: -0.464955
C11	-C12	-C13	-C14	: -179.902654
C11	-C12	-C13	-H35	: -0.139990
C12	-C11	-C10	-H45	: -0.173621
C12	-C13	-C14	-C15	: -0.443454
C12	-C13	-C14	-C17	: 179.359180
C13	-C12	-C11	-H41	: -0.451881
C13	-C14	-C15	-N16	: -177.614471
C13	-C14	-C17	-C18	: -179.897468
C13	-C14	-C17	-H37	: -0.063459
C14	-C13	-C12	-H47	: -0.226315
C14	-C17	-C18	-C19	: 179.650129
C14	-C17	-C18	-H38	: -0.227782
C15	-C14	-C13	-H35	: 179.792162
C15	-C14	-C17	-C18	: -0.092206
C15	-C14	-C17	-H37	: 179.741803
N16	-C15	-C14	-C17	: 2.573400
C17	-C14	-C13	-H35	: -0.405204
C17	-C18	-C19	-C20	: -0.253039
C17	-C18	-C19	-C22	: 179.877121
C18	-C19	-C20	-N21	: -2.826718
C18	-C19	-C22	-C23	: 179.897335
C18	-C19	-C22	-H36	: -0.111398
C19	-C18	-C17	-H37	: -0.178464
C19	-C22	-C23	-C24	: 179.893146
C19	-C22	-C23	-H48	: -0.088892
C20	-C19	-C18	-H38	: 179.628752
C20	-C19	-C22	-C23	: 0.029207
C20	-C19	-C22	-H36	: -179.979525
N21	-C20	-C19	-C22	: 177.047248
C22	-C19	-C18	-H38	: -0.241088
C22	-C23	-C24	-C25	: -179.984494
C22	-C23	-C24	-H42	: -0.053030
C23	-C24	-C25	-C26	: 179.781045
C23	-C24	-C25	-H46	: -0.169508
C24	-C23	-C22	-H36	: -0.098061
C24	-C25	-C26	-C27	: -179.929179
C24	-C25	-C26	-H39	: -0.016551
C25	-C24	-C23	-H48	: -0.002636
C25	-C26	-C27	-C28	: 179.759877
C25	-C26	-C27	-H49	: -0.124100

C26	-C25	-C24	-H42	:	-0.151298
C26	-C27	-C28	-C29	:	-179.946290
C26	-C27	-C28	-H43	:	-0.125066
C27	-C26	-C25	-H46	:	0.020695
C27	-C28	-C29	-C30	:	-1.150121
C27	-C28	-C29	-C34	:	178.822516
C28	-C27	-C26	-H39	:	-0.153929
C28	-C29	-C30	-C31	:	179.908996
C28	-C29	-C30	-H58	:	-0.156794
C28	-C29	-C34	-C33	:	-179.880783
C28	-C29	-C34	-H59	:	0.029413
C29	-C28	-C27	-H49	:	-0.066275
C29	-C30	-C31	-C32	:	0.002440
C29	-C30	-C31	-H57	:	179.977929
C29	-C34	-C33	-C32	:	-0.061138
C29	-C34	-C33	-H60	:	179.953428
C30	-C29	-C28	-H43	:	179.025069
C30	-C29	-C34	-C33	:	0.093389
C30	-C29	-C34	-H59	:	-179.996415
C30	-C31	-C32	-C33	:	0.031946
C30	-C31	-C32	-H56	:	179.989142
C31	-C30	-C29	-C34	:	-0.063845
C31	-C32	-C33	-C34	:	-0.002912
C31	-C32	-C33	-H60	:	179.982468
C32	-C31	-C30	-H58	:	-179.932323
C32	-C33	-C34	-H59	:	-179.970682
C33	-C32	-C31	-H57	:	-179.943460
C34	-C29	-C28	-H43	:	-1.002294
C34	-C29	-C30	-H58	:	179.870365
C34	-C33	-C32	-H56	:	-179.960065
H35	-C13	-C12	-H47	:	179.536349
H36	-C22	-C23	-H48	:	179.919902
H37	-C17	-C18	-H38	:	179.943625
H39	-C26	-C25	-H46	:	179.933323
H39	-C26	-C27	-H49	:	179.962094
H40	-C9	-C8	-H50	:	179.592772
H40	-C9	-C10	-H45	:	179.908771
H41	-C11	-C10	-H45	:	179.560009
H41	-C11	-C12	-H47	:	179.875037
H42	-C24	-C23	-H48	:	179.928828
H42	-C24	-C25	-H46	:	179.898149
H43	-C28	-C27	-H49	:	179.754949
H44	-C7	-C8	-H50	:	179.493309
H51	-C5	-C4	-H52	:	0.074965
H51	-C5	-C6	-H55	:	0.035619
H52	-C4	-C3	-H53	:	0.198032
H54	-C1	-C6	-H55	:	0.029172
H56	-C32	-C31	-H57	:	0.013736
H56	-C32	-C33	-H60	:	0.025315
H57	-C31	-C30	-H58	:	0.043166
H59	-C34	-C33	-H60	:	0.043884

DPDC11



final geometry:

angstroms			
atom	x	y	z
C1	-11.5596556375	2.1321136710	-0.2237190568
C2	11.5596556375	-2.1321136710	0.2237190568
C3	-15.2992366101	1.9754701035	0.0970934069
C4	15.2992366101	-1.9754701035	-0.0970934069
C5	1.5983947691	-1.8906199282	0.7889341316
C6	-1.5983947691	1.8906199282	-0.7889341316
C7	1.8045681034	-0.6150266305	0.1671700931
C8	-1.8045681034	0.6150266305	-0.1671700931
C9	3.0906744061	-0.2038817456	-0.1179974105
C10	-3.0906744061	0.2038817456	0.1179974105
C11	-16.4884936245	2.6555731434	-0.1475192009
C12	16.4884936245	-2.6555731434	0.1475192009
C13	0.6420620873	0.1825237890	-0.1313851967
C14	-0.6420620873	-0.1825237890	0.1313851967
C15	-16.4626435737	3.9144054140	-0.7478133337
C16	16.4626435737	-3.9144054140	0.7478133337
C17	-14.0475176641	3.8059882283	-0.8560762681
C18	14.0475176641	-3.8059882283	0.8560762681
C19	-14.0532133857	2.5326867686	-0.2503326080
C20	14.0532133857	-2.5326867686	0.2503326080
C21	-15.2355095994	4.4841352260	-1.0999210370
C22	15.2355095994	-4.4841352260	1.0999210370
C23	7.9844319544	-0.8897732044	-0.1265253567
C24	-7.9844319544	0.8897732044	0.1265253567
C25	5.5363462480	-0.5172763993	-0.1377170203
C26	-5.5363462480	0.5172763993	0.1377170203
C27	-10.4215986368	1.3175063719	0.0860354048
C28	10.4215986368	-1.3175063719	-0.0860354048
C29	6.7043116764	-1.2830689953	0.1446240491
C30	-6.7043116764	1.2830689953	-0.1446240491
C31	-12.8418065074	1.7698518783	0.0317354907
C32	12.8418065074	-1.7698518783	-0.0317354907
C33	4.2693566754	-0.9475364588	0.1529603761
C34	-4.2693566754	0.9475364588	-0.1529603761
C35	-9.1337616286	1.6834870334	-0.1712502808
C36	9.1337616286	-1.6834870334	0.1712502808
H37	-11.3509797636	3.0924395275	-0.6913630857
H38	11.3509797636	-3.0924395275	0.6913630857
H39	-15.3253122360	0.9945862552	0.5651668455
H40	15.3253122360	-0.9945862552	-0.5651668455
H41	3.2019836857	0.7712267454	-0.5890478363
H42	-3.2019836857	-0.7712267454	0.5890478363

H43	-17.4358750117	2.2028248269	0.1304456489
H44	17.4358750117	-2.2028248269	-0.1304456489
H45	0.8353397389	1.1437756659	-0.6021179099
H46	-0.8353397389	-1.1437756659	0.6021179099
H47	-17.3881945520	4.4486801451	-0.9406202819
H48	17.3881945520	-4.4486801451	0.9406202819
H49	-13.1070664958	4.2688933316	-1.1383974234
H50	13.1070664958	-4.2688933316	1.1383974234
H51	-15.2072376137	5.4640448473	-1.5678152572
H52	15.2072376137	-5.4640448473	1.5678152572
H53	-8.1495174303	-0.0804388403	0.5946226210
H54	8.1495174303	0.0804388403	-0.5946226210
H55	5.6693918655	0.4573369989	-0.6076996863
H56	-5.6693918655	-0.4573369989	0.6076996863
H57	-10.6106902461	0.3514641743	0.5537529104
H58	10.6106902461	-0.3514641743	-0.5537529104
H59	6.5520566702	-2.2548761648	0.6132331594
H60	-6.5520566702	2.2548761648	-0.6132331594
H61	-13.0058522699	0.8000849720	0.5013870966
H62	13.0058522699	-0.8000849720	-0.5013870966
H63	4.1501484730	-1.9219259191	0.6227514052
H64	-4.1501484730	1.9219259191	-0.6227514052
H65	-8.9544283439	2.6512209802	-0.6391930066
H66	8.9544283439	-2.6512209802	0.6391930066
N67	1.4102674640	-2.9226237176	1.2937235252
N68	-1.4102674640	2.9226237176	-1.2937235252

Final total energy: -1499.321022 hartrees

HOMO energy: -0.17812

LUMO energy: -0.10982

bond lengths (angstroms):

C1	-C27	: 1.433425	C1	-C31	: 1.356614
C1	-H37	: 1.088330	C2	-C28	: 1.433425
C2	-C32	: 1.356614	C2	-H38	: 1.088330
C3	-C11	: 1.391656	C3	-C19	: 1.408463
C3	-H39	: 1.087155	C4	-C12	: 1.391656
C4	-C20	: 1.408463	C4	-H40	: 1.087155
C5	-C7	: 1.433958	C5	-N67	: 1.164146
C6	-C8	: 1.433958	C6	-N68	: 1.164146
C7	-C9	: 1.380011	C7	-C13	: 1.441056
C8	-C10	: 1.380011	C8	-C14	: 1.441056
C9	-C33	: 1.419765	C9	-H41	: 1.088630
C10	-C34	: 1.419765	C10	-H42	: 1.088630
C11	-C15	: 1.394876	C11	-H43	: 1.086175
C12	-C16	: 1.394876	C12	-H44	: 1.086175
C13	-C14	: 1.360619	C13	-H45	: 1.087635
C14	-H46	: 1.087635	C15	-C21	: 1.398009
C15	-H47	: 1.085941	C16	-C22	: 1.398009
C16	-H48	: 1.085941	C17	-C19	: 1.410055
C17	-C21	: 1.389485	C17	-H49	: 1.085557
C18	-C20	: 1.410055	C18	-C22	: 1.389485
C18	-H50	: 1.085557	C19	-C31	: 1.459105
C20	-C32	: 1.459105	C21	-H51	: 1.086254
C22	-H52	: 1.086254	C23	-C29	: 1.366350
C23	-C36	: 1.428149	C23	-H54	: 1.089807
C24	-C30	: 1.366350	C24	-C35	: 1.428149
C24	-H53	: 1.089807	C25	-C29	: 1.424885
C25	-C33	: 1.369262	C25	-H55	: 1.090163
C26	-C30	: 1.424885	C26	-C34	: 1.369262
C26	-H56	: 1.090163	C27	-C35	: 1.363328
C27	-H57	: 1.089841	C28	-C36	: 1.363328
C28	-H58	: 1.089841	C29	-H59	: 1.089580
C30	-H60	: 1.089580	C31	-H61	: 1.089923
C32	-H62	: 1.089923	C33	-H63	: 1.088278
C34	-H64	: 1.088278	C35	-H65	: 1.089789
C36	-H66	: 1.089789			

bond angles:

C31	-C1	-C27	: 123.912001	H37	-C1	-C27	: 116.236508
H37	-C1	-C31	: 119.851486	C32	-C2	-C28	: 123.912001
H38	-C2	-C28	: 116.236508	H38	-C2	-C32	: 119.851486
C19	-C3	-C11	: 121.285783	H39	-C3	-C11	: 119.742989
H39	-C3	-C19	: 118.971228	C20	-C4	-C12	: 121.285783
H40	-C4	-C12	: 119.742989	H40	-C4	-C20	: 118.971228
N67	-C5	-C7	: 178.963814	N68	-C6	-C8	: 178.963814
C9	-C7	-C5	: 119.249986	C13	-C7	-C5	: 117.786061
C13	-C7	-C9	: 122.963950	C10	-C8	-C6	: 119.249986
C14	-C8	-C6	: 117.786061	C14	-C8	-C10	: 122.963950

C33	-C9	-C7	: 125.325131	H41	-C9	-C7	: 116.844100
H41	-C9	-C33	: 117.830769	C34	-C10	-C8	: 125.325131
H42	-C10	-C8	: 116.844100	H42	-C10	-C34	: 117.830769
C15	-C11	-C3	: 120.055859	H43	-C11	-C3	: 119.780492
H43	-C11	-C15	: 120.163649	C16	-C12	-C4	: 120.055859
H44	-C12	-C4	: 119.780492	H44	-C12	-C16	: 120.163649
C14	-C13	-C7	: 124.949348	H45	-C13	-C7	: 115.813950
H45	-C13	-C14	: 119.236701	C13	-C14	-C8	: 124.949348
H46	-C14	-C8	: 115.813950	H46	-C14	-C13	: 119.236701
C21	-C15	-C11	: 119.501128	H47	-C15	-C11	: 120.306240
H47	-C15	-C21	: 120.192632	C22	-C16	-C12	: 119.501128
H48	-C16	-C12	: 120.306240	H48	-C16	-C22	: 120.192632
C21	-C17	-C19	: 120.841088	H49	-C17	-C19	: 120.019058
H49	-C17	-C21	: 119.139855	C22	-C18	-C20	: 120.841088
H50	-C18	-C20	: 120.019058	H50	-C18	-C22	: 119.139855
C17	-C19	-C3	: 117.826229	C31	-C19	-C3	: 118.683280
C31	-C19	-C17	: 123.490489	C18	-C20	-C4	: 117.826229
C32	-C20	-C4	: 118.683280	C32	-C20	-C18	: 123.490489
C17	-C21	-C15	: 120.489914	H51	-C21	-C15	: 119.931627
H51	-C21	-C17	: 119.578460	C18	-C22	-C16	: 120.489914
H52	-C22	-C16	: 119.931627	H52	-C22	-C18	: 119.578460
C36	-C23	-C29	: 123.547589	H54	-C23	-C29	: 118.908725
H54	-C23	-C36	: 117.543671	C35	-C24	-C30	: 123.547589
H53	-C24	-C30	: 118.908725	H53	-C24	-C35	: 117.543671
C33	-C25	-C29	: 123.197231	H55	-C25	-C29	: 117.766196
H55	-C25	-C33	: 119.036567	C34	-C26	-C30	: 123.197231
H56	-C26	-C30	: 117.766196	H56	-C26	-C34	: 119.036567
C35	-C27	-C1	: 123.823919	H57	-C27	-C1	: 117.304997
H57	-C27	-C35	: 118.871075	C36	-C28	-C2	: 123.823919
H58	-C28	-C2	: 117.304997	H58	-C28	-C36	: 118.871075
C25	-C29	-C23	: 125.025350	H59	-C29	-C23	: 118.229114
H59	-C29	-C25	: 116.745528	C26	-C30	-C24	: 125.025350
H60	-C30	-C24	: 118.229114	H60	-C30	-C26	: 116.745528
C19	-C31	-C1	: 127.492599	H61	-C31	-C1	: 117.450735
H61	-C31	-C19	: 115.056663	C20	-C32	-C2	: 127.492599
H62	-C32	-C2	: 117.450735	H62	-C32	-C20	: 115.056663
C25	-C33	-C9	: 124.269322	H63	-C33	-C9	: 117.414205
H63	-C33	-C25	: 118.316469	C26	-C34	-C10	: 124.269322
H64	-C34	-C10	: 117.414205	H64	-C34	-C26	: 118.316469
C27	-C35	-C24	: 124.866413	H65	-C35	-C24	: 116.783310
H65	-C35	-C27	: 118.350271	C28	-C36	-C23	: 124.866413
H66	-C36	-C23	: 116.783310	H66	-C36	-C28	: 118.350271

torsional angles:

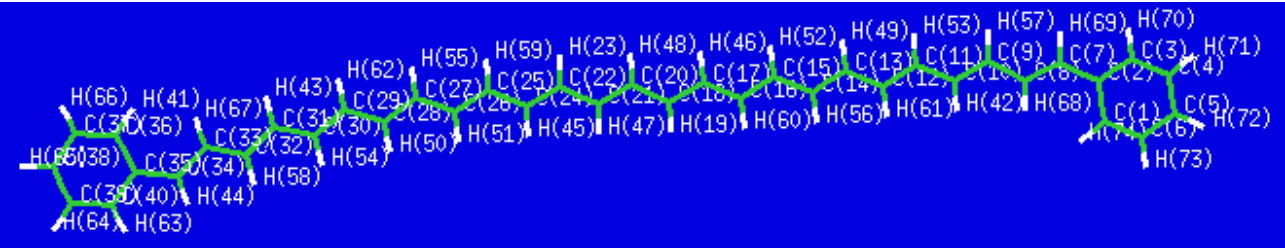
C1	-C27	-C35	-C24	: -179.939193
C1	-C27	-C35	-H65	: 0.031077
C1	-C31	-C19	-C3	: -179.916516
C1	-C31	-C19	-C17	: 0.100215
C2	-C28	-C36	-C23	: 179.939193
C2	-C28	-C36	-H66	: -0.031077
C2	-C32	-C20	-C4	: 179.916516
C2	-C32	-C20	-C18	: -0.100215
C3	-C11	-C15	-C21	: -0.003874
C3	-C11	-C15	-H47	: 179.996266
C3	-C19	-C17	-C21	: -0.004260

C3	-C19	-C17	-H49	: 179.998234
C3	-C19	-C31	-H61	: 0.104602
C4	-C12	-C16	-C22	: 0.003874
C4	-C12	-C16	-H48	:-179.996266
C4	-C20	-C18	-C22	: 0.004260
C4	-C20	-C18	-H50	:-179.998234
C4	-C20	-C32	-H62	: -0.104602
C5	-C7	-C9	-C33	: 0.055898
C5	-C7	-C9	-H41	:-179.945230
C5	-C7	-C13	-C14	: -0.033837
C5	-C7	-C13	-H45	: 179.975781
C6	-C8	-C10	-C34	: -0.055898
C6	-C8	-C10	-H42	: 179.945230
C6	-C8	-C14	-C13	: 0.033837
C6	-C8	-C14	-H46	:-179.975781
C7	-C9	-C33	-C25	:-179.897942
C7	-C9	-C33	-H63	: 0.077435
C7	-C13	-C14	-C8	: 180.000000
C7	-C13	-C14	-H46	: 0.009922
C8	-C10	-C34	-C26	: 179.897942
C8	-C10	-C34	-H64	: -0.077435
C8	-C14	-C13	-H45	: -0.009922
C9	-C7	-C5	-N67	: 179.322019
C9	-C7	-C13	-C14	: 179.984942
C9	-C7	-C13	-H45	: -0.005441
C9	-C33	-C25	-C29	: 179.992632
C9	-C33	-C25	-H55	: 0.021957
C10	-C8	-C6	-N68	:-179.322019
C10	-C8	-C14	-C13	:-179.984942
C10	-C8	-C14	-H46	: 0.005441
C10	-C34	-C26	-C30	:-179.992632
C10	-C34	-C26	-H56	: -0.021957
C11	-C3	-C19	-C17	: 0.000871
C11	-C3	-C19	-C31	:-179.983351
C11	-C15	-C21	-C17	: 0.000508
C11	-C15	-C21	-H51	: 179.996185
C12	-C4	-C20	-C18	: -0.000871
C12	-C4	-C20	-C32	: 179.983351
C12	-C16	-C22	-C18	: -0.000508
C12	-C16	-C22	-H52	:-179.996185
C13	-C7	-C5	-N67	: -0.659923
C13	-C7	-C9	-C33	:-179.963143
C13	-C7	-C9	-H41	: 0.035729
C14	-C8	-C6	-N68	: 0.659923
C14	-C8	-C10	-C34	: 179.963143
C14	-C8	-C10	-H42	: -0.035729
C15	-C11	-C3	-C19	: 0.003182
C15	-C11	-C3	-H39	:-179.996191
C15	-C21	-C17	-C19	: 0.003624
C15	-C21	-C17	-H49	:-179.998849
C16	-C12	-C4	-C20	: -0.003182
C16	-C12	-C4	-H40	: 179.996191
C16	-C22	-C18	-C20	: -0.003624
C16	-C22	-C18	-H50	: 179.998849
C17	-C19	-C3	-H39	:-179.999752
C17	-C19	-C31	-H61	:-179.878666

C17	-C21	-C15	-H47	:-179.999631
C18	-C20	-C4	-H40	: 179.999752
C18	-C20	-C32	-H62	: 179.878666
C18	-C22	-C16	-H48	: 179.999631
C19	-C3	-C11	-H43	: 179.998960
C19	-C17	-C21	-H51	:-179.992068
C19	-C31	-C1	-C27	:-179.929021
C19	-C31	-C1	-H37	: 0.047025
C20	-C4	-C12	-H44	:-179.998960
C20	-C18	-C22	-H52	: 179.992068
C20	-C32	-C2	-C28	: 179.929021
C20	-C32	-C2	-H38	: -0.047025
C21	-C15	-C11	-H43	:-179.999636
C21	-C17	-C19	-C31	: 179.979142
C22	-C16	-C12	-H44	: 179.999636
C22	-C18	-C20	-C32	:-179.979142
C23	-C29	-C25	-C33	:-179.864634
C23	-C29	-C25	-H55	: 0.106391
C23	-C36	-C28	-H58	: -0.025922
C24	-C30	-C26	-C34	: 179.864634
C24	-C30	-C26	-H56	: -0.106391
C24	-C35	-C27	-H57	: 0.025922
C25	-C29	-C23	-C36	: 179.955124
C25	-C29	-C23	-H54	: -0.001167
C25	-C33	-C9	-H41	: 0.103197
C26	-C30	-C24	-C35	:-179.955124
C26	-C30	-C24	-H53	: 0.001167
C26	-C34	-C10	-H42	: -0.103197
C27	-C1	-C31	-H61	: 0.049421
C27	-C35	-C24	-C30	: 179.931173
C27	-C35	-C24	-H53	: -0.025674
C28	-C2	-C32	-H62	: -0.049421
C28	-C36	-C23	-C29	:-179.931173
C28	-C36	-C23	-H54	: 0.025674
C29	-C23	-C36	-H66	: 0.039519
C29	-C25	-C33	-H63	: 0.017461
C30	-C24	-C35	-H65	: -0.039519
C30	-C26	-C34	-H64	: -0.017461
C31	-C1	-C27	-C35	:-179.986337
C31	-C1	-C27	-H57	: 0.048043
C31	-C19	-C3	-H39	: 0.016026
C31	-C19	-C17	-H49	: -0.018364
C32	-C2	-C28	-C36	: 179.986337
C32	-C2	-C28	-H58	: -0.048043
C32	-C20	-C4	-H40	: -0.016026
C32	-C20	-C18	-H50	: 0.018364
C33	-C25	-C29	-H59	: 0.101179
C34	-C26	-C30	-H60	: -0.101179
C35	-C24	-C30	-H60	: 0.010226
C35	-C27	-C1	-H37	: 0.036824
C36	-C23	-C29	-H59	: -0.010226
C36	-C28	-C2	-H38	: -0.036824
H37	-C1	-C27	-H57	:-179.928796
H37	-C1	-C31	-H61	:-179.974533
H38	-C2	-C28	-H58	: 179.928796
H38	-C2	-C32	-H62	: 179.974533

H39	-C3	-C11	-H43	:	-0.000412
H40	-C4	-C12	-H44	:	0.000412
H41	-C9	-C33	-H63	:	-179.921426
H42	-C10	-C34	-H64	:	179.921426
H43	-C11	-C15	-H47	:	0.000503
H44	-C12	-C16	-H48	:	-0.000503
H45	-C13	-C14	-H46	:	180.000000
H47	-C15	-C21	-H51	:	-0.003954
H48	-C16	-C22	-H52	:	0.003954
H49	-C17	-C21	-H51	:	0.005459
H50	-C18	-C22	-H52	:	-0.005459
H53	-C24	-C30	-H60	:	179.966516
H53	-C24	-C35	-H65	:	-179.996366
H54	-C23	-C29	-H59	:	-179.966516
H54	-C23	-C36	-H66	:	179.996366
H55	-C25	-C29	-H59	:	-179.927796
H55	-C25	-C33	-H63	:	-179.953214
H56	-C26	-C30	-H60	:	179.927796
H56	-C26	-C34	-H64	:	179.953214
H57	-C27	-C35	-H65	:	179.996192
H58	-C28	-C36	-H66	:	-179.996192

DPDC13



final geometry:

angstroms			
atom	x	y	z
H1	0.1242624540	0.0150421899	0.5865098031
C2	0.3850863448	0.0250929874	1.6402352085
C3	1.7396168862	0.0329418828	2.0318719685
C4	2.8508643276	0.0287933485	1.0878793636
C5	2.7911169950	0.0186572859	-0.2667712591
C6	3.9537327364	0.0151470650	-1.1041124963
C7	3.9303071067	0.0065608895	-2.4672861728
C8	5.1040714492	0.0032495473	-3.2804754163
C9	5.1114488082	-0.0034655099	-4.6468614969
C10	6.3064057372	-0.0063338274	-5.4241778506
C11	6.3608905734	-0.0108904201	-6.7914597214
C12	7.5847002125	-0.0131631903	-7.5184897030
C13	7.6968144209	-0.0152948449	-8.8844424189
C14	8.9548457411	-0.0170783218	-9.5417705311
C15	9.1802653906	-0.0168742075	-10.9036605620
C16	10.5138611047	-0.0183447485	-11.4505621737
C17	10.8343736617	-0.0151752019	-12.7723080024
C18	12.1807252979	-0.0160263006	-13.2882620706
C19	12.4677303978	-0.0090254524	-14.6382762487
C20	13.7697663125	-0.0083757132	-15.2038836318
C21	14.0222212360	0.0017101588	-16.5503309271
C22	15.3344236483	0.0036015386	-17.1043138010
C23	15.6141236702	0.0162742451	-18.4431385758
C24	16.9355246616	0.0191405779	-18.9804864866
C25	17.2301103182	0.0340946143	-20.3142291251
C26	18.5588291531	0.0377992166	-20.8403193241
C27	18.8648646870	0.0546502776	-22.1686956473
C28	20.2028826653	0.0590496104	-22.6846008122
C29	20.5029597499	0.0774153291	-24.0069253245
C30	21.8277895077	0.0837172452	-24.6194129957
C31	8.0671223050	-0.0154098135	-11.8070504246
N32	7.1735759637	-0.0142832887	-12.5536775094
C33	13.2625644502	-0.0237301017	-12.3457395004
N34	14.1286076973	-0.0298127726	-11.5675885368
H35	19.3768872159	0.0267165538	-20.1199023690
H36	2.9670613203	0.0015086118	-2.9763732436
H37	3.8408936490	0.0352413781	1.5428514767
H38	9.8416208745	-0.0183276713	-8.9103138109
H39	11.6184749817	-0.0037419973	-15.3193538636
H40	11.3172828141	-0.0219917590	-10.7175987718
H41	10.0391382471	-0.0118716965	-13.5138877841
H42	14.7846839025	0.0245291335	-19.1501864536
H43	7.2487417876	-0.0040182194	-4.8757690434

H44	8.5033703935	-0.0125345349	-6.9312713214
H45	13.1803293693	0.0085084092	-17.2429850149
H46	16.4080893468	0.0436738402	-21.0300804767
H47	6.0625857369	0.0070709656	-2.7614048088
H48	5.4305110136	-0.0133401830	-7.3583358152
H49	16.1681183091	-0.0050787035	-16.4024831994
H50	18.0501469521	0.0653507604	-22.8933150787
H51	4.9214762027	0.0203594998	-0.6023075016
H52	6.7948816566	-0.0161534140	-9.4931768626
H53	14.6160695512	-0.0155783421	-14.5197710290
H54	17.7607879165	0.0091647666	-18.2684979497
H55	4.1603256306	-0.0072575384	-5.1787292911
C56	-0.6285729693	0.0298331104	2.5905957180
C57	-0.3233536112	0.0425436466	3.9546503764
C58	1.0109571620	0.0503940621	4.3602802150
C59	2.0267117889	0.0455543140	3.4103918563
H60	3.0655784264	0.0517195343	3.7308904329
H61	1.2601892458	0.0602918914	5.4174918503
H62	-1.1196207648	0.0462458914	4.6930310020
H63	-1.6657762329	0.0235620060	2.2680805844
H64	1.8262640341	0.0122715197	-0.7699861521
H65	21.0043358502	0.0472498064	-21.9484500438
H66	19.6705725904	0.0886034971	-24.7099626625
C67	21.9222574169	0.1049098322	-26.0249210560
C68	23.1570655385	0.1120322585	-26.6675832122
C69	24.3346599261	0.0979372552	-25.9193023435
C70	24.2603743322	0.0766042548	-24.5229240838
C71	23.0280980037	0.0695687295	-23.8798414949
H72	21.0082216227	0.1156729900	-26.6137562199
H73	23.1996291224	0.1285689307	-27.7529154758
H74	25.2999830298	0.1034798874	-26.4162335614
H75	25.1721064445	0.0654034509	-23.9326750767
H76	22.9970329887	0.0526643376	-22.7949100974

Final total energy: -1654.143389 hartrees

HOMO energy: -0.17442

LUMO energy: -0.10994

bond lengths (angstroms):

H1	-C2	:	1.085572	C2	-C3	:	1.410033
C2	-C56	:	1.389501	C3	-C4	:	1.458084
C3	-C59	:	1.408155	C4	-C5	:	1.356005
C4	-H37	:	1.089587	C5	-C6	:	1.432769
C5	-H64	:	1.088213	C6	-C7	:	1.363402
C6	-H51	:	1.090121	C7	-C8	:	1.427939
C7	-H36	:	1.089513	C8	-C9	:	1.366422
C8	-H47	:	1.090045	C9	-C10	:	1.425535
C9	-H55	:	1.089740	C10	-C11	:	1.368375
C10	-H43	:	1.090300	C11	-C12	:	1.423477
C11	-H48	:	1.089477	C12	-C13	:	1.370548
C12	-H44	:	1.090312	C13	-C14	:	1.419411
C13	-H52	:	1.088137	C14	-C15	:	1.380420
C14	-H38	:	1.088627	C15	-C16	:	1.441382
C15	-C31	:	1.433598	C16	-C17	:	1.360055
C16	-H40	:	1.087536	C17	-C18	:	1.441829
C17	-H41	:	1.087360	C18	-C19	:	1.380203
C18	-C33	:	1.434846	C19	-C20	:	1.419581
C19	-H39	:	1.088636	C20	-C21	:	1.369947
C20	-H53	:	1.088251	C21	-C22	:	1.424351
C21	-H45	:	1.090228	C22	-C23	:	1.367788
C22	-H49	:	1.089811	C23	-C24	:	1.426482
C23	-H42	:	1.089934	C24	-C25	:	1.365970
C24	-H54	:	1.089994	C25	-C26	:	1.429083
C25	-H46	:	1.090070	C26	-C27	:	1.363277
C26	-H35	:	1.090111	C27	-C28	:	1.434040
C27	-H50	:	1.090391	C28	-C29	:	1.356070
C28	-H65	:	1.088294	C29	-C30	:	1.459573
C29	-H66	:	1.089612	C30	-C67	:	1.408839
C30	-C71	:	1.409931	C31	-N32	:	1.164422
C33	-N34	:	1.164297	C56	-C57	:	1.397843
C56	-H63	:	1.086207	C57	-C58	:	1.394626
C57	-H62	:	1.085938	C58	-C59	:	1.390708
C58	-H61	:	1.086237	C59	-H60	:	1.087199
C67	-C68	:	1.392055	C67	-H72	:	1.087338
C68	-C69	:	1.395296	C68	-H73	:	1.086292
C69	-C70	:	1.398516	C69	-H74	:	1.085735
C70	-C71	:	1.390003	C70	-H75	:	1.086174
C71	-H76	:	1.085508				

bond angles:

C3	-C2	-H1	:	120.030425	C56	-C2	-H1	:	119.251827
C56	-C2	-C3	:	120.717747	C4	-C3	-C2	:	123.524411
C59	-C3	-C2	:	117.892202	C59	-C3	-C4	:	118.583388
C5	-C4	-C3	:	127.822245	H37	-C4	-C3	:	114.969478
H37	-C4	-C5	:	117.208269	C6	-C5	-C4	:	123.236936

H64	-C5	-C4	: 120.070918	H64	-C5	-C6	: 116.692140
C7	-C6	-C5	: 124.777915	H51	-C6	-C5	: 116.828433
H51	-C6	-C7	: 118.393642	C8	-C7	-C6	: 123.730027
H36	-C7	-C6	: 118.842449	H36	-C7	-C8	: 117.427519
C9	-C8	-C7	: 125.023944	H47	-C8	-C7	: 116.847661
H47	-C8	-C9	: 118.128383	C10	-C9	-C8	: 123.353390
H55	-C9	-C8	: 118.905106	H55	-C9	-C10	: 117.741499
C11	-C10	-C9	: 125.326033	H43	-C10	-C9	: 116.757698
H43	-C10	-C11	: 117.916256	C12	-C11	-C10	: 122.995407
H48	-C11	-C10	: 119.072025	H48	-C11	-C12	: 117.932563
C13	-C12	-C11	: 125.405584	H44	-C12	-C11	: 116.699666
H44	-C12	-C13	: 117.894739	C14	-C13	-C12	: 122.279555
H52	-C13	-C12	: 119.324133	H52	-C13	-C14	: 118.396305
C15	-C14	-C13	: 126.985632	H38	-C14	-C13	: 116.958753
H38	-C14	-C15	: 116.055610	C16	-C15	-C14	: 121.696656
C31	-C15	-C14	: 119.663256	C31	-C15	-C16	: 118.640088
C17	-C16	-C15	: 125.928663	H40	-C16	-C15	: 115.327470
H40	-C16	-C17	: 118.743864	C18	-C17	-C16	: 124.598466
H41	-C17	-C16	: 119.369992	H41	-C17	-C18	: 116.031541
C19	-C18	-C17	: 122.969395	C33	-C18	-C17	: 117.968626
C33	-C18	-C19	: 119.061968	C20	-C19	-C18	: 125.481930
H39	-C19	-C18	: 116.727386	H39	-C19	-C20	: 117.790683
C21	-C20	-C19	: 124.098908	H53	-C20	-C19	: 117.568429
H53	-C20	-C21	: 118.332645	C22	-C21	-C20	: 123.507500
H45	-C21	-C20	: 118.827376	H45	-C21	-C22	: 117.665122
C23	-C22	-C21	: 124.687720	H49	-C22	-C21	: 117.018234
H49	-C22	-C23	: 118.294033	C24	-C23	-C22	: 123.928881
H42	-C23	-C22	: 118.647748	H42	-C23	-C24	: 117.423370
C25	-C24	-C23	: 124.583243	H54	-C24	-C23	: 117.082715
H54	-C24	-C25	: 118.334033	C26	-C25	-C24	: 124.055038
H46	-C25	-C24	: 118.598921	H46	-C25	-C26	: 117.346040
C27	-C26	-C25	: 124.573185	H35	-C26	-C25	: 117.027677
H35	-C26	-C27	: 118.399132	C28	-C27	-C26	: 124.058445
H50	-C27	-C26	: 118.680672	H50	-C27	-C28	: 117.260882
C29	-C28	-C27	: 123.870183	H65	-C28	-C27	: 116.342626
H65	-C28	-C29	: 119.787181	C30	-C29	-C28	: 127.597218
H66	-C29	-C28	: 117.403574	H66	-C29	-C30	: 114.999204
C67	-C30	-C29	: 118.657397	C71	-C30	-C29	: 123.543633
C71	-C30	-C67	: 117.798970	N32	-C31	-C15	: 179.180262
N34	-C33	-C18	: 179.122984	C57	-C56	-C2	: 120.541829
H63	-C56	-C2	: 119.571011	H63	-C56	-C57	: 119.887160
C58	-C57	-C56	: 119.523443	H62	-C57	-C56	: 120.227642
H62	-C57	-C58	: 120.248915	C59	-C58	-C57	: 120.007925
H61	-C58	-C57	: 120.175717	H61	-C58	-C59	: 119.816358
C58	-C59	-C3	: 121.316853	H60	-C59	-C3	: 118.911390
H60	-C59	-C58	: 119.771756	C68	-C67	-C30	: 121.340928
H72	-C67	-C30	: 118.949618	H72	-C67	-C68	: 119.709453
C69	-C68	-C67	: 120.066326	H73	-C68	-C67	: 119.741694
H73	-C68	-C69	: 120.191980	C70	-C69	-C68	: 119.392711
H74	-C69	-C68	: 120.322650	H74	-C69	-C70	: 120.284638
C71	-C70	-C69	: 120.604462	H75	-C70	-C69	: 119.878359
H75	-C70	-C71	: 119.517179	C70	-C71	-C30	: 120.796601
H76	-C71	-C30	: 120.003899	H76	-C71	-C70	: 119.199497

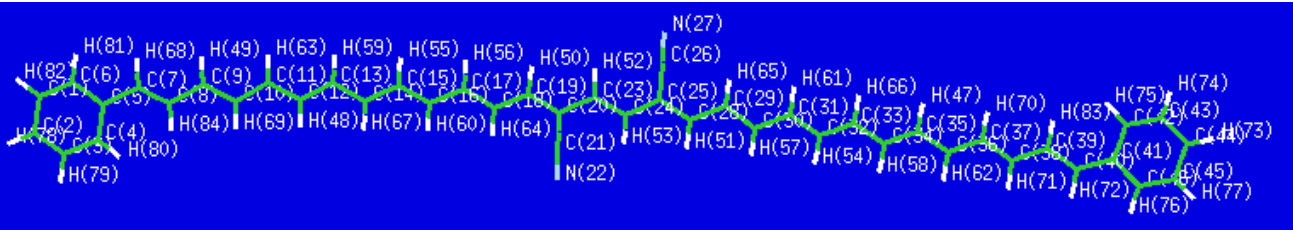
torsional angles:

H1	-C2	-C3	-C4	:	0.021524
H1	-C2	-C3	-C59	:-	179.983458
H1	-C2	-C56	-C57	:	179.991052
H1	-C2	-C56	-H63	:	-0.007301
C2	-C3	-C4	-C5	:	0.074942
C2	-C3	-C4	-H37	:-	179.959362
C2	-C3	-C59	-C58	:	-0.010401
C2	-C3	-C59	-H60	:	179.998515
C2	-C56	-C57	-C58	:	-0.004849
C2	-C56	-C57	-H62	:	179.997030
C3	-C2	-C56	-C57	:	0.002467
C3	-C2	-C56	-H63	:-	179.995886
C3	-C4	-C5	-C6	:-	179.986724
C3	-C4	-C5	-H64	:	-0.014430
C3	-C59	-C58	-C57	:	0.008214
C3	-C59	-C58	-H61	:-	179.991919
C4	-C3	-C2	-C56	:-	179.989979
C4	-C3	-C59	-C58	:	179.984869
C4	-C3	-C59	-H60	:	-0.006215
C4	-C5	-C6	-C7	:-	179.921754
C4	-C5	-C6	-H51	:	0.042062
C5	-C4	-C3	-C59	:-	179.920044
C5	-C6	-C7	-C8	:	179.998520
C5	-C6	-C7	-H36	:	-0.024930
C6	-C5	-C4	-H37	:	0.048242
C6	-C7	-C8	-C9	:-	179.905567
C6	-C7	-C8	-H47	:	0.052765
C7	-C6	-C5	-H64	:	0.105083
C7	-C8	-C9	-C10	:	179.987769
C7	-C8	-C9	-H55	:	-0.037195
C8	-C7	-C6	-H51	:	0.035225
C8	-C9	-C10	-C11	:-	179.890933
C8	-C9	-C10	-H43	:	0.066803
C9	-C8	-C7	-H36	:	0.117576
C9	-C10	-C11	-C12	:	179.979108
C9	-C10	-C11	-H48	:	-0.047419
C10	-C9	-C8	-H47	:	0.029925
C10	-C11	-C12	-C13	:-	179.876224
C10	-C11	-C12	-H44	:	0.085095
C11	-C10	-C9	-H55	:	0.133759
C11	-C12	-C13	-C14	:	179.979968
C11	-C12	-C13	-H52	:	-0.050687
C12	-C11	-C10	-H43	:	0.021816
C12	-C13	-C14	-C15	:-	179.875244
C12	-C13	-C14	-H38	:	0.097084
C13	-C12	-C11	-H48	:	0.150018
C13	-C14	-C15	-C16	:	179.977427
C13	-C14	-C15	-C31	:	-0.033979
C14	-C13	-C12	-H44	:	0.019067
C14	-C15	-C16	-C17	:-	179.838798
C14	-C15	-C16	-H40	:	0.138852
C14	-C15	-C31	-N32	:-	179.807630
C15	-C14	-C13	-H52	:	0.155139
C15	-C16	-C17	-C18	:	179.964248
C15	-C16	-C17	-H41	:	-0.044350
C16	-C15	-C14	-H38	:	0.004883

C16	-C15	-C31	-N32	:	0.181312
C16	-C17	-C18	-C19	:	-179.817194
C16	-C17	-C18	-C33	:	0.144806
C17	-C16	-C15	-C31	:	0.172495
C17	-C18	-C19	-C20	:	179.946130
C17	-C18	-C19	-H39	:	-0.063832
C17	-C18	-C33	-N34	:	-0.664552
C18	-C17	-C16	-H40	:	-0.012711
C18	-C19	-C20	-C21	:	-179.846551
C18	-C19	-C20	-H53	:	0.103272
C19	-C18	-C17	-H41	:	0.191145
C19	-C18	-C33	-N34	:	179.298975
C19	-C20	-C21	-C22	:	179.934114
C19	-C20	-C21	-H45	:	-0.078269
C20	-C19	-C18	-C33	:	-0.015473
C20	-C21	-C22	-C23	:	-179.862582
C20	-C21	-C22	-H49	:	0.095537
C21	-C20	-C19	-H39	:	0.163508
C21	-C22	-C23	-C24	:	179.943466
C21	-C22	-C23	-H42	:	-0.070415
C22	-C21	-C20	-H53	:	-0.015352
C22	-C23	-C24	-C25	:	-179.879836
C22	-C23	-C24	-H54	:	0.085495
C23	-C22	-C21	-H45	:	0.149667
C23	-C24	-C25	-C26	:	179.952084
C23	-C24	-C25	-H46	:	-0.061112
C24	-C23	-C22	-H49	:	-0.014161
C24	-C25	-C26	-C27	:	-179.898941
C24	-C25	-C26	-H35	:	0.072992
C25	-C24	-C23	-H42	:	0.133888
C25	-C26	-C27	-C28	:	179.958887
C25	-C26	-C27	-H50	:	-0.054223
C26	-C25	-C24	-H54	:	-0.012847
C26	-C27	-C28	-C29	:	-179.919433
C26	-C27	-C28	-H65	:	0.044221
C27	-C26	-C25	-H46	:	0.114102
C27	-C28	-C29	-C30	:	179.976141
C27	-C28	-C29	-H66	:	-0.048772
C28	-C27	-C26	-H35	:	-0.012690
C28	-C29	-C30	-C67	:	-179.941882
C28	-C29	-C30	-C71	:	0.064975
C29	-C28	-C27	-H50	:	0.093506
C29	-C30	-C67	-C68	:	179.992522
C29	-C30	-C67	-H72	:	-0.017736
C29	-C30	-C71	-C70	:	-179.997691
C29	-C30	-C71	-H76	:	0.020329
C30	-C29	-C28	-H65	:	0.013671
C30	-C67	-C68	-C69	:	0.007889
C30	-C67	-C68	-H73	:	-179.993544
C30	-C71	-C70	-C69	:	0.001708
C30	-C71	-C70	-H75	:	-179.999035
C31	-C15	-C14	-H38	:	179.993477
C31	-C15	-C16	-H40	:	-179.849855
C33	-C18	-C17	-H41	:	-179.846856
C33	-C18	-C19	-H39	:	179.974564
H35	-C26	-C25	-H46	:	-179.913965

H35	-C26	-C27	-H50	: 179.974199
H36	-C7	-C6	-H51	:-179.988225
H36	-C7	-C8	-H47	:-179.924093
H37	-C4	-C3	-C59	: 0.045652
H37	-C4	-C5	-H64	:-179.979464
H38	-C14	-C13	-H52	:-179.872534
H39	-C19	-C20	-H53	:-179.886670
H40	-C16	-C17	-H41	: 179.978691
H42	-C23	-C22	-H49	: 179.971958
H42	-C23	-C24	-H54	:-179.900781
H43	-C10	-C9	-H55	:-179.908505
H43	-C10	-C11	-H48	: 179.995289
H44	-C12	-C11	-H48	:-179.888663
H44	-C12	-C13	-H52	: 179.988412
H45	-C21	-C20	-H53	: 179.972264
H45	-C21	-C22	-H49	:-179.892214
H46	-C25	-C24	-H54	: 179.973957
H47	-C8	-C9	-H55	:-179.995039
H50	-C27	-C28	-H65	:-179.942840
H51	-C6	-C5	-H64	:-179.931101
C56	-C2	-C3	-C59	: 0.005038
C56	-C57	-C58	-C59	: -0.000441
C56	-C57	-C58	-H61	: 179.999693
C57	-C58	-C59	-H60	: 179.999223
C58	-C57	-C56	-H63	: 179.993499
C59	-C58	-C57	-H62	: 179.997680
H60	-C59	-C58	-H61	: -0.000910
H61	-C58	-C57	-H62	: -0.002187
H62	-C57	-C56	-H63	: -0.004622
H65	-C28	-C29	-H66	: 179.988758
H66	-C29	-C30	-C67	: 0.082521
H66	-C29	-C30	-C71	:-179.910622
C67	-C30	-C71	-C70	: 0.009111
C67	-C30	-C71	-H76	:-179.972869
C67	-C68	-C69	-C70	: 0.003293
C67	-C68	-C69	-H74	:-179.996416
C68	-C67	-C30	-C71	: -0.013938
C68	-C69	-C70	-C71	: -0.008052
C68	-C69	-C70	-H75	: 179.992694
C69	-C68	-C67	-H72	:-179.981776
C69	-C70	-C71	-H76	: 179.983831
C70	-C69	-C68	-H73	:-179.995268
C71	-C30	-C67	-H72	: 179.975804
C71	-C70	-C69	-H74	: 179.991656
H72	-C67	-C68	-H73	: 0.016791
H73	-C68	-C69	-H74	: 0.005024
H74	-C69	-C70	-H75	: -0.007598
H75	-C70	-C71	-H76	: -0.016912

DPDC15



final geometry:

angstroms			
atom	x	y	z
C1	0.0073500156	0.0047503020	-0.0006584579
C2	0.0086184680	0.0038894649	1.3945911631
C3	1.2276598240	0.0041060930	2.0794162974
C4	2.4297248283	0.0050837280	1.3820581493
C5	2.4489977482	0.0060203897	-0.0276970055
C6	1.2110167620	0.0059421132	-0.6999343693
C7	3.6763532591	0.0071987370	-0.8181254438
C8	4.9542547086	0.0013413434	-0.3627867723
C9	6.1079483170	0.0049499252	-1.2152200082
C10	7.3920582237	-0.0014454812	-0.7582132057
C11	8.5559246359	0.0035782093	-1.5879591414
C12	9.8324100370	-0.0044059632	-1.1026147599
C13	11.0142176653	0.0013568950	-1.9019562962
C14	12.2785448708	-0.0098907329	-1.3811202626
C15	13.4811758974	-0.0041049335	-2.1454994314
C16	14.7305306142	-0.0203793515	-1.5860435925
C17	15.9531473417	-0.0152059436	-2.3143465320
C18	17.1861732252	-0.0382654854	-1.7153087855
C19	18.4171147435	-0.0340755637	-2.4212245848
C20	19.6710488826	-0.0646928264	-1.8425396110
C21	19.7789292821	-0.1055443696	-0.4121018522
N22	19.8854384364	-0.1386923223	0.7468736445
C23	20.8909743748	-0.0603482652	-2.6096248690
C24	22.1424390981	-0.1008239056	-2.0764620686
C25	23.3717649400	-0.1017219497	-2.8267822626
C26	23.2921006393	-0.0442286500	-4.2569609854
N27	23.2103586155	0.0044148728	-5.4174303238
C28	24.6098999218	-0.1559179760	-2.2180632633
C29	25.8651377903	-0.1662182933	-2.8782703102
C30	27.0649077365	-0.2209714727	-2.2174191954
C31	28.3321115495	-0.2348836984	-2.8636308226
C32	29.5318572012	-0.2875561316	-2.2066050705
C33	30.7998528521	-0.3031920355	-2.8558248921
C34	32.0007589522	-0.3534724785	-2.2038456254
C35	33.2691234676	-0.3703627342	-2.8566534694
C36	34.4688985696	-0.4188715899	-2.2060208195
C37	35.7415172814	-0.4369713452	-2.8562043628
C38	36.9346648385	-0.4847438000	-2.1988298436
C39	38.2182334628	-0.5044120441	-2.8380425528
C40	39.3893495615	-0.5520724739	-2.1545722381
C41	40.7439688765	-0.5771483762	-2.6957936498
C42	41.0344019199	-0.5605714273	-4.0751820655
C43	42.3482422248	-0.5871265493	-4.5273490511

C44	43.4102261182	-0.6311240392	-3.6194408323
C45	43.1428048958	-0.6482032477	-2.2507162961
C46	41.8276727942	-0.6216005111	-1.7970137604
H47	33.2683087943	-0.3426974507	-3.9464315965
H48	9.9709068872	-0.0164435681	-0.0212571011
H49	5.9331435442	0.0136377185	-2.2913320768
H50	18.3783531861	-0.0056786598	-3.5089776549
H51	24.6149304734	-0.1954097295	-1.1300850184
H52	20.7724309035	-0.0234723420	-3.6903168184
H53	22.2527575614	-0.1391417329	-0.9949429498
H54	29.5267339031	-0.3196781072	-1.1167182035
H55	13.3908950595	0.0135520839	-3.2318290018
H56	15.8952026296	0.0073460416	-3.4028880618
H57	27.0577604953	-0.2563358296	-1.1276425539
H58	31.9997915854	-0.3827489835	-1.1138659837
H59	10.8914921776	0.0150680283	-2.9850841081
H60	14.8060676851	-0.0398261415	-0.4988001225
H61	28.3366257014	-0.2012100425	-3.9528686414
H62	34.4679079385	-0.4460308512	-1.1159712601
H63	8.4040174038	0.0143439221	-2.6674124115
H64	17.2311563344	-0.0628017844	-0.6276246343
H65	25.8673839220	-0.1291645967	-3.9662177646
H66	30.8013599175	-0.2728770389	-3.9454191131
H67	12.3861729477	-0.0251753517	-0.2963359487
H68	3.5280855166	0.0135712896	-1.8980389550
H69	7.5569860272	-0.0110362488	0.3195432887
H70	35.7444375883	-0.4110990509	-3.9460830988
H71	36.9263173992	-0.5104882763	-1.1087691597
H72	39.3305609791	-0.5749516344	-1.0662897432
H73	44.4350393301	-0.6520066881	-3.9779631268
H74	42.5481500360	-0.5737874586	-5.5950534299
H75	40.2259424666	-0.5275012104	-4.7984563085
H76	41.6253656432	-0.6354438898	-0.7289211182
H77	43.9594886034	-0.6824568962	-1.5354434123
H78	-0.9278704925	0.0031173125	1.9441549479
H79	1.2387093356	0.0036270407	3.1656305779
H80	3.3626231030	0.0058086777	1.9371898024
H81	1.2023455993	0.0067306820	-1.7871878016
H82	-0.9323219276	0.0046615801	-0.5457818862
H83	38.2218526904	-0.4793193766	-3.9266254332
H84	5.1468286064	-0.0064916566	0.7088391469

Final total energy: -1808.965556 hartrees

HOMO energy: -0.17184

LUMO energy: -0.11123

bond lengths (angstroms):

C1	-C2	:	1.395250	C1	-C6	:	1.392050
C1	-H82	:	1.086344	C2	-C3	:	1.398230
C2	-H78	:	1.085833	C3	-C4	:	1.389701
C3	-H79	:	1.086271	C4	-C5	:	1.409887
C4	-H80	:	1.085574	C5	-C6	:	1.408723
C5	-C7	:	1.459856	C6	-H81	:	1.087288
C7	-C8	:	1.356613	C7	-H68	:	1.090063
C8	-C9	:	1.434456	C8	-H84	:	1.088820
C9	-C10	:	1.363024	C9	-H49	:	1.090252
C10	-C11	:	1.429366	C10	-H69	:	1.090345
C11	-C12	:	1.365664	C11	-H63	:	1.090143
C12	-C13	:	1.426762	C12	-H48	:	1.090257
C13	-C14	:	1.367450	C13	-H59	:	1.090145
C14	-C15	:	1.425002	C14	-H67	:	1.090218
C15	-C16	:	1.368993	C15	-H55	:	1.090218
C16	-C17	:	1.423111	C16	-H60	:	1.090038
C17	-C18	:	1.371033	C17	-H56	:	1.090316
C18	-C19	:	1.418997	C18	-H64	:	1.088890
C19	-C20	:	1.381363	C19	-H50	:	1.088814
C20	-C21	:	1.435082	C20	-C23	:	1.441061
C21	-N22	:	1.164331	C23	-C24	:	1.360906
C23	-H52	:	1.087799	C24	-C25	:	1.440216
C24	-H53	:	1.087806	C25	-C26	:	1.433549
C25	-C28	:	1.380744	C26	-N27	:	1.164361
C28	-C29	:	1.418309	C28	-H51	:	1.088706
C29	-C30	:	1.370828	C29	-H65	:	1.088581
C30	-C31	:	1.422529	C30	-H57	:	1.090374
C31	-C32	:	1.368885	C31	-H61	:	1.089768
C32	-C33	:	1.424621	C32	-H54	:	1.090372
C33	-C34	:	1.367399	C33	-H66	:	1.090017
C34	-C35	:	1.426602	C34	-H58	:	1.090373
C35	-C36	:	1.365700	C35	-H47	:	1.090130
C36	-C37	:	1.429204	C36	-H62	:	1.090388
C37	-C38	:	1.363094	C37	-H70	:	1.090190
C38	-C39	:	1.434060	C38	-H71	:	1.090397
C39	-C40	:	1.356804	C39	-H83	:	1.088878
C40	-C41	:	1.458953	C40	-H72	:	1.090109
C41	-C42	:	1.409730	C41	-C46	:	1.408615
C42	-C43	:	1.389725	C42	-H75	:	1.085277
C43	-C44	:	1.397871	C43	-H74	:	1.086340
C44	-C45	:	1.394709	C44	-H73	:	1.085917
C45	-C46	:	1.391447	C45	-H77	:	1.086168
C46	-H76	:	1.087171				

bond angles:

C6 -C1 -C2 : 120.102577 H82 -C1 -C2 : 120.171000

H82	-C1	-C6	: 119.726423	C3	-C2	-C1	: 119.378199
H78	-C2	-C1	: 120.353795	H78	-C2	-C3	: 120.268005
C4	-C3	-C2	: 120.554420	H79	-C3	-C2	: 119.908936
H79	-C3	-C4	: 119.536644	C5	-C4	-C3	: 120.902719
H80	-C4	-C3	: 119.125321	H80	-C4	-C5	: 119.971947
C6	-C5	-C4	: 117.719192	C7	-C5	-C4	: 123.565179
C7	-C5	-C6	: 118.715629	C5	-C6	-C1	: 121.342891
H81	-C6	-C1	: 119.697729	H81	-C6	-C5	: 118.959379
C8	-C7	-C5	: 127.605534	H68	-C7	-C5	: 114.964147
H68	-C7	-C8	: 117.430320	C9	-C8	-C7	: 123.927195
H84	-C8	-C7	: 119.800234	H84	-C8	-C9	: 116.272571
C10	-C9	-C8	: 123.948607	H49	-C9	-C8	: 117.233367
H49	-C9	-C10	: 118.818024	C11	-C10	-C9	: 124.921924
H69	-C10	-C9	: 118.291893	H69	-C10	-C11	: 116.786182
C12	-C11	-C10	: 123.694021	H63	-C11	-C10	: 117.476102
H63	-C11	-C12	: 118.829877	C13	-C12	-C11	: 125.106242
H48	-C12	-C11	: 118.118100	H48	-C12	-C13	: 116.775655
C14	-C13	-C12	: 123.533730	H59	-C13	-C12	: 117.609571
H59	-C13	-C14	: 118.856694	C15	-C14	-C13	: 125.167292
H67	-C14	-C13	: 118.058648	H67	-C14	-C15	: 116.774048
C16	-C15	-C14	: 123.431470	H55	-C15	-C14	: 117.688935
H55	-C15	-C16	: 118.879581	C17	-C16	-C15	: 125.089310
H60	-C16	-C15	: 118.103664	H60	-C16	-C17	: 116.806999
C18	-C17	-C16	: 123.296568	H56	-C17	-C16	: 117.733075
H56	-C17	-C18	: 118.970331	C19	-C18	-C17	: 124.245868
H64	-C18	-C17	: 118.292443	H64	-C18	-C19	: 117.461635
C20	-C19	-C18	: 125.378862	H50	-C19	-C18	: 117.786989
H50	-C19	-C20	: 116.834106	C21	-C20	-C19	: 119.106692
C23	-C20	-C19	: 123.051437	C23	-C20	-C21	: 117.841753
N22	-C21	-C20	: 179.062635	C24	-C23	-C20	: 124.738918
H52	-C23	-C20	: 115.892070	H52	-C23	-C24	: 119.368909
C25	-C24	-C23	: 125.509849	H53	-C24	-C23	: 118.934679
H53	-C24	-C25	: 115.555217	C26	-C25	-C24	: 118.183273
C28	-C25	-C24	: 122.395107	C28	-C25	-C26	: 119.421618
N27	-C26	-C25	: 179.154282	C29	-C28	-C25	: 126.063624
H51	-C28	-C25	: 116.496004	H51	-C28	-C29	: 117.440329
C30	-C29	-C28	: 123.399477	H65	-C29	-C28	: 117.826578
H65	-C29	-C30	: 118.773932	C31	-C30	-C29	: 124.128216
H57	-C30	-C29	: 118.514176	H57	-C30	-C31	: 117.357608
C32	-C31	-C30	: 124.269197	H61	-C31	-C30	: 117.221818
H61	-C31	-C32	: 118.508985	C33	-C32	-C31	: 124.178662
H54	-C32	-C31	: 118.474867	H54	-C32	-C33	: 117.346470
C34	-C33	-C32	: 124.388671	H66	-C33	-C32	: 117.159095
H66	-C33	-C34	: 118.452233	C35	-C34	-C33	: 124.269054
H58	-C34	-C33	: 118.479121	H58	-C34	-C35	: 117.251824
C36	-C35	-C34	: 124.296803	H47	-C35	-C34	: 117.160464
H47	-C35	-C36	: 118.542730	C37	-C36	-C35	: 124.469930
H62	-C36	-C35	: 118.447171	H62	-C36	-C37	: 117.082899
C38	-C37	-C36	: 124.088267	H70	-C37	-C36	: 117.186085
H70	-C37	-C38	: 118.725641	C39	-C38	-C37	: 124.679338
H71	-C38	-C37	: 118.440409	H71	-C38	-C39	: 116.880251
C40	-C39	-C38	: 123.265053	H83	-C39	-C38	: 116.633031
H83	-C39	-C40	: 120.101913	C41	-C40	-C39	: 127.963036
H72	-C40	-C39	: 117.198856	H72	-C40	-C41	: 114.838109
C42	-C41	-C40	: 123.646451	C46	-C41	-C40	: 118.565753
C46	-C41	-C42	: 117.787773	C43	-C42	-C41	: 120.857693

H75	-C42	-C41	: 119.932879	H75	-C42	-C43	: 119.209408
C44	-C43	-C42	: 120.498178	H74	-C43	-C42	: 119.572183
H74	-C43	-C44	: 119.929637	C45	-C44	-C43	: 119.479421
H73	-C44	-C43	: 120.207787	H73	-C44	-C45	: 120.312791
C46	-C45	-C44	: 120.064850	H77	-C45	-C44	: 120.164083
H77	-C45	-C46	: 119.771066	C45	-C46	-C41	: 121.312084
H76	-C46	-C41	: 118.953567	H76	-C46	-C45	: 119.734347

torsional angles:

C1	-C2	-C3	-C4	: -0.003999
C1	-C2	-C3	-H79	: 179.988692
C1	-C6	-C5	-C4	: -0.010825
C1	-C6	-C5	-C7	: 179.995492
C2	-C1	-C6	-C5	: 0.013726
C2	-C1	-C6	-H81	: -179.992562
C2	-C3	-C4	-C5	: 0.006751
C2	-C3	-C4	-H80	: 179.965171
C3	-C2	-C1	-C6	: -0.006120
C3	-C2	-C1	-H82	: -179.995875
C3	-C4	-C5	-C6	: 0.000595
C3	-C4	-C5	-C7	: 179.993947
C4	-C3	-C2	-H78	: 179.999571
C4	-C5	-C6	-H81	: 179.995418
C4	-C5	-C7	-C8	: 0.332891
C4	-C5	-C7	-H68	: -179.667051
C5	-C4	-C3	-H79	: -179.985967
C5	-C6	-C1	-H82	: -179.996473
C5	-C7	-C8	-C9	: -179.908807
C5	-C7	-C8	-H84	: 0.084397
C6	-C1	-C2	-H78	: 179.990307
C6	-C5	-C4	-H80	: -179.957476
C6	-C5	-C7	-C8	: -179.673819
C6	-C5	-C7	-H68	: 0.326239
C7	-C5	-C4	-H80	: 0.035876
C7	-C5	-C6	-H81	: 0.001734
C7	-C8	-C9	-C10	: -179.973986
C7	-C8	-C9	-H49	: 0.044209
C8	-C9	-C10	-C11	: -179.921440
C8	-C9	-C10	-H69	: 0.072912
C9	-C8	-C7	-H68	: 0.091134
C9	-C10	-C11	-C12	: -179.931593
C9	-C10	-C11	-H63	: 0.064574
C10	-C9	-C8	-H84	: 0.032591
C10	-C11	-C12	-C13	: -179.947015
C10	-C11	-C12	-H48	: 0.072889
C11	-C10	-C9	-H49	: 0.060095
C11	-C12	-C13	-C14	: -179.853388
C11	-C12	-C13	-H59	: 0.120066
C12	-C11	-C10	-H69	: 0.073978
C12	-C13	-C14	-C15	: -179.973340
C12	-C13	-C14	-H67	: 0.069107
C13	-C12	-C11	-H63	: 0.056867
C13	-C14	-C15	-C16	: -179.770637
C13	-C14	-C15	-H55	: 0.185504
C14	-C13	-C12	-H48	: 0.126949

C14	-C15	-C16	-C17	:-179.995348
C14	-C15	-C16	-H60	: 0.066670
C15	-C14	-C13	-H59	: 0.053519
C15	-C16	-C17	-C18	:-179.688945
C15	-C16	-C17	-H56	: 0.250712
C16	-C15	-C14	-H67	: 0.187406
C16	-C17	-C18	-C19	:179.978569
C16	-C17	-C18	-H64	: 0.065400
C17	-C16	-C15	-H55	: 0.049005
C17	-C18	-C19	-C20	:-179.603127
C17	-C18	-C19	-H50	: 0.319089
C18	-C17	-C16	-H60	: 0.249763
C18	-C19	-C20	-C21	: 0.050450
C18	-C19	-C20	-C23	:179.923095
C19	-C18	-C17	-H56	: 0.039620
C19	-C20	-C21	-N22	:-179.478778
C19	-C20	-C23	-C24	:-179.433707
C19	-C20	-C23	-H52	: 0.447915
C20	-C19	-C18	-H64	: 0.310706
C20	-C23	-C24	-C25	:179.780029
C20	-C23	-C24	-H53	: -0.027837
C21	-C20	-C19	-H50	:-179.872431
C21	-C20	-C23	-C24	: 0.440454
C21	-C20	-C23	-H52	:-179.677924
N22	-C21	-C20	-C23	: 0.641943
C23	-C20	-C19	-H50	: 0.000214
C23	-C24	-C25	-C26	: 0.558648
C23	-C24	-C25	-C28	:-179.426669
C24	-C25	-C26	-N27	: 5.251597
C24	-C25	-C28	-C29	:179.738115
C24	-C25	-C28	-H51	: -0.183641
C25	-C24	-C23	-H52	: -0.097770
C25	-C28	-C29	-C30	:179.987754
C25	-C28	-C29	-H65	: -0.054203
C26	-C25	-C24	-H53	:-179.627736
C26	-C25	-C28	-C29	: -0.247027
C26	-C25	-C28	-H51	:179.831217
N27	-C26	-C25	-C28	:-174.762636
C28	-C25	-C24	-H53	: 0.386947
C28	-C29	-C30	-C31	:179.863480
C28	-C29	-C30	-H57	: -0.139129
C29	-C30	-C31	-C32	:179.901069
C29	-C30	-C31	-H61	: -0.105709
C30	-C29	-C28	-H51	: -0.091149
C30	-C31	-C32	-C33	:179.912759
C30	-C31	-C32	-H54	: -0.099762
C31	-C30	-C29	-H65	: -0.094187
C31	-C32	-C33	-C34	:179.884649
C31	-C32	-C33	-H66	: -0.124413
C32	-C31	-C30	-H57	: -0.096350
C32	-C33	-C34	-C35	:179.934684
C32	-C33	-C34	-H58	: -0.072710
C33	-C32	-C31	-H61	: -0.080382
C33	-C34	-C35	-C36	:179.913506
C33	-C34	-C35	-H47	: -0.104957
C34	-C33	-C32	-H54	: -0.102960

C34	-C35	-C36	-C37	: 179.949979
C34	-C35	-C36	-H62	: -0.046455
C35	-C34	-C33	-H66	: -0.056145
C35	-C36	-C37	-C38	: 179.963195
C35	-C36	-C37	-H70	: -0.069142
C36	-C35	-C34	-H58	: -0.079183
C36	-C37	-C38	-C39	: 179.950961
C36	-C37	-C38	-H71	: -0.031968
C37	-C36	-C35	-H47	: -0.031321
C37	-C38	-C39	-C40	: 179.993398
C37	-C38	-C39	-H83	: -0.027005
C38	-C37	-C36	-H62	: -0.040326
C38	-C39	-C40	-C41	: 179.940757
C38	-C39	-C40	-H72	: -0.062801
C39	-C38	-C37	-H70	: -0.016238
C39	-C40	-C41	-C42	: -0.319824
C39	-C40	-C41	-C46	: 179.738003
C40	-C39	-C38	-H71	: -0.023431
C40	-C41	-C42	-C43	: -179.953450
C40	-C41	-C42	-H75	: -0.004678
C40	-C41	-C46	-C45	: 179.954533
C40	-C41	-C46	-H76	: -0.029703
C41	-C40	-C39	-H83	: -0.038160
C41	-C42	-C43	-C44	: 0.009111
C41	-C42	-C43	-H74	: 179.991165
C41	-C46	-C45	-C44	: -0.005211
C41	-C46	-C45	-H77	: -179.994989
C42	-C41	-C40	-H72	: 179.683664
C42	-C41	-C46	-C45	: 0.008947
C42	-C41	-C46	-H76	: -179.975288
C42	-C43	-C44	-C45	: -0.005039
C42	-C43	-C44	-H73	: 179.983378
C43	-C42	-C41	-C46	: -0.010858
C43	-C44	-C45	-C46	: 0.003078
C43	-C44	-C45	-H77	: 179.992816
C44	-C43	-C42	-H75	: -179.940027
C44	-C45	-C46	-H76	: 179.978904
C45	-C44	-C43	-H74	: -179.987028
C46	-C41	-C40	-H72	: -0.258509
C46	-C41	-C42	-H75	: 179.937914
C46	-C45	-C44	-H73	: -179.985327
H47	-C35	-C34	-H58	: 179.902354
H47	-C35	-C36	-H62	: 179.972244
H48	-C12	-C11	-H63	: -179.923229
H48	-C12	-C13	-H59	: -179.899598
H49	-C9	-C8	-H84	: -179.949214
H49	-C9	-C10	-H69	: -179.945553
H50	-C19	-C18	-H64	: -179.767078
H51	-C28	-C29	-H65	: 179.866893
H52	-C23	-C24	-H53	: -179.905637
H54	-C32	-C31	-H61	: 179.907097
H54	-C32	-C33	-H66	: 179.887978
H55	-C15	-C14	-H67	: -179.856453
H55	-C15	-C16	-H60	: -179.888978
H56	-C17	-C16	-H60	: -179.810580
H56	-C17	-C18	-H64	: -179.873550

H57	-C30	-C29	-H65	: 179.903204
H57	-C30	-C31	-H61	: 179.896872
H58	-C34	-C33	-H66	: 179.936461
H59	-C13	-C14	-H67	: -179.904034
H62	-C36	-C37	-H70	: 179.927337
H63	-C11	-C10	-H69	: -179.929855
H68	-C7	-C8	-H84	: -179.915662
H70	-C37	-C38	-H71	: -179.999167
H71	-C38	-C39	-H83	: 179.956165
H72	-C40	-C39	-H83	: 179.958281
H73	-C44	-C43	-H74	: 0.001389
H73	-C44	-C45	-H77	: 0.004411
H74	-C43	-C42	-H75	: 0.042026
H76	-C46	-C45	-H77	: -0.010875
H78	-C2	-C1	-H82	: 0.000552
H78	-C2	-C3	-H79	: -0.007738
H79	-C3	-C4	-H80	: -0.027546
H81	-C6	-C1	-H82	: -0.002761