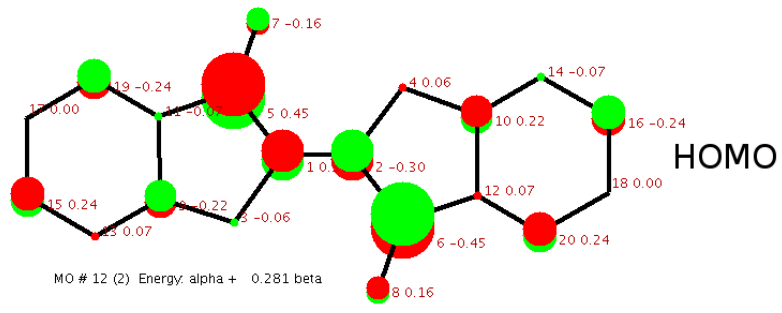
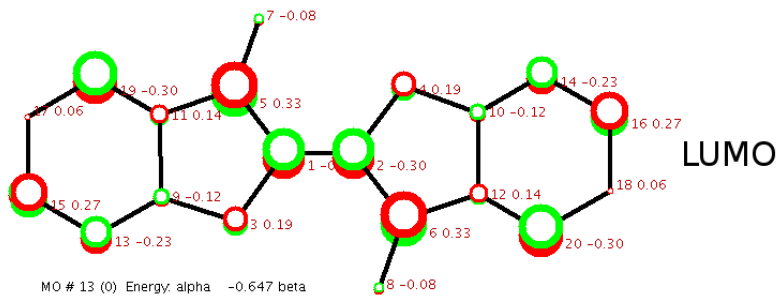
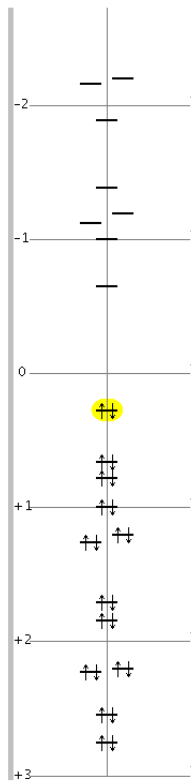
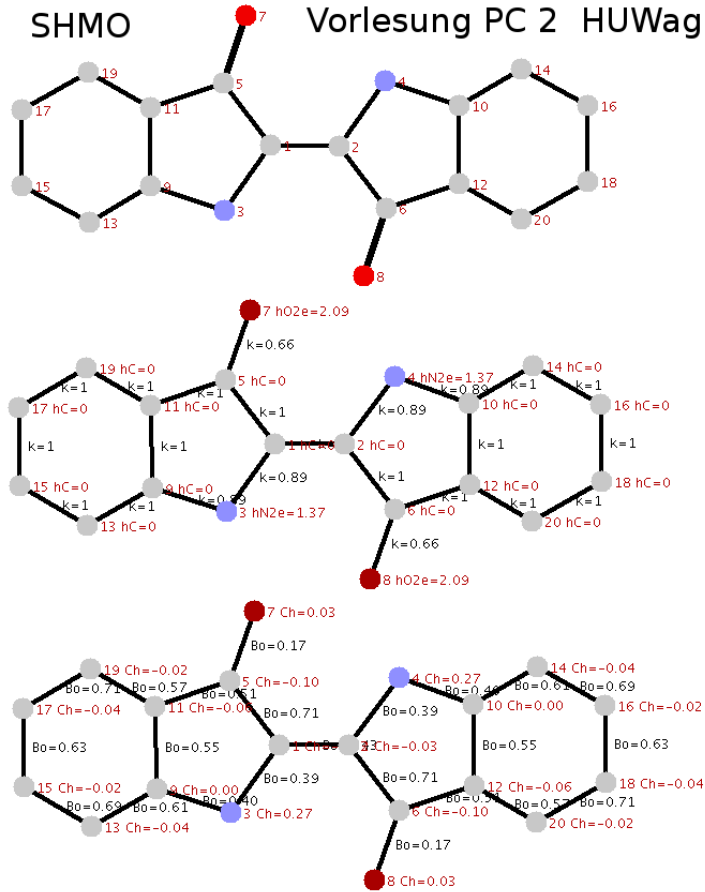


Leuko-Indigo SHMO Vorlesung PC 2 HUWagner



Simple Hueckel Molecular Orbital Calculation - Data Table
 SHMO Version 20100131 R.Cannings & H-U.Wagner

Leuko-Indigo

Number of Electrons = 24 Net Charge = 0

Total energy = 24 alpha + 37.018 beta

Lowest Unoccupied MO = LUMO # 13 Energy: alpha -0.647 beta

Highest Occupied MO = HOMO # 12 Energy: alpha + 0.281 beta

Orbital Energies / Coefficients Table

MO number		1	2	3	4	5	6	7	8
Occupancy		(2)	(2)	(2)	(2)	(2)	(2)	(2)	(2)
Energy		2.757	2.549	2.228	2.212	1.852	1.711	1.267	1.205
#									
1	C	0.330	0.149	-0.084	-0.048	-0.255	-0.127	0.209	0.067
2	C	0.330	-0.149	-0.084	0.048	-0.255	0.127	0.209	-0.067
3	N2e	0.361	0.311	-0.257	-0.287	-0.233	-0.399	-0.234	-0.114
4	N2e	0.361	-0.311	-0.257	0.287	-0.233	0.399	-0.234	0.114
5	C	0.259	0.252	0.126	0.101	-0.010	0.012	0.264	0.248
6	C	0.259	-0.252	0.126	-0.101	-0.010	-0.012	0.264	-0.248
7	O2e	0.256	0.363	0.603	0.549	0.027	-0.020	-0.212	-0.185
8	O2e	0.256	-0.363	0.603	-0.549	0.027	0.020	-0.212	0.185
9	C	0.233	0.262	-0.164	-0.223	0.129	-0.026	-0.182	-0.046
10	C	0.233	-0.262	-0.164	0.223	0.129	0.026	-0.182	0.046
11	C	0.214	0.255	-0.033	-0.091	0.219	0.160	0.265	0.355
12	C	0.214	-0.255	-0.033	0.091	0.219	-0.160	0.265	-0.355
13	C	0.106	0.137	-0.104	-0.148	0.227	0.150	-0.288	-0.308
14	C	0.106	-0.137	-0.104	0.148	0.227	-0.150	-0.288	0.308
15	C	0.059	0.088	-0.067	-0.104	0.291	0.283	-0.182	-0.326
16	C	0.059	-0.088	-0.067	0.104	0.291	-0.283	-0.182	0.326
17	C	0.057	0.087	-0.046	-0.082	0.312	0.334	0.057	-0.084
18	C	0.057	-0.087	-0.046	0.082	0.312	-0.334	0.057	0.084
19	C	0.098	0.134	-0.036	-0.078	0.287	0.289	0.254	0.224
20	C	0.098	-0.134	-0.036	0.078	0.287	-0.289	0.254	-0.224

MO number		9	10	11	12	13	14	15	16
Occupancy		(2)	(2)	(2)	(2)	(0)	(0)	(0)	(0)
Energy		1.000	0.783	0.665	0.281	-0.647	-1.000	-1.119	-1.192
#									
1	C	0.316	0.108	0.199	0.304	-0.304	0.196	-0.092	0.149
2	C	0.316	-0.108	0.199	-0.304	-0.304	-0.196	-0.092	-0.149
3	N2e	0.000	0.290	-0.346	-0.065	0.187	0.000	0.173	-0.156
4	N2e	0.000	-0.290	-0.346	0.065	0.187	0.0000	0.173	0.156
5	C	0.000	-0.065	0.241	0.447	0.334	0.000	0.041	0.110
6	C	0.000	0.065	0.241	-0.447	0.334	0.0000	0.041	-0.110
7	O2e	0.0000	0.033	-0.112	-0.163	-0.080	0.0000	-0.008	-0.022
8	O2e	0.0000	-0.033	-0.112	0.163	-0.080	0.000	-0.008	0.022
9	C	-0.316	-0.300	0.075	-0.225	-0.120	-0.196	-0.393	0.300
10	C	-0.316	0.300	0.075	0.225	-0.120	0.196	-0.393	-0.300
11	C	-0.316	-0.181	0.035	-0.071	0.141	-0.196	0.052	-0.266
12	C	-0.316	0.181	0.035	0.071	0.141	0.196	0.052	0.266
13	C	0.0000	-0.312	0.323	0.065	-0.230	0.392	0.233	0.047
14	C	0.0000	0.312	0.323	-0.065	-0.230	-0.392	0.233	-0.047
15	C	0.316	0.055	0.140	0.243	0.268	-0.196	0.132	-0.356
16	C	0.316	-0.055	0.140	-0.243	0.268	0.196	0.132	0.356
17	C	0.316	0.355	-0.230	0.003	0.056	-0.196	-0.381	0.377
18	C	0.316	-0.355	-0.230	-0.003	0.056	0.196	-0.381	-0.377
19	C	0.000	0.223	-0.293	-0.242	-0.305	0.392	0.294	-0.094
20	C	0.000	-0.223	-0.293	0.242	-0.305	-0.392	0.294	0.094

Unoccupied MOs number 17 to 20 not printed

Population Tables

Atoms

#	Symbol	hX	ElectronPop.	NetCharge
1	C	0.00	1.027	-0.027
2	C	0.00	1.027	-0.027
3	N2e	1.37	1.730	0.270
4	N2e	1.37	1.730	0.270
5	C	0.00	1.101	-0.101
6	C	0.00	1.101	-0.101
7	O2e	2.09	1.967	0.033
8	O2e	2.09	1.967	0.033
9	C	0.00	0.996	0.004
10	C	0.00	0.996	0.004
11	C	0.00	1.057	-0.057
12	C	0.00	1.057	-0.057
13	C	0.00	1.041	-0.041
14	C	0.00	1.041	-0.041
15	C	0.00	1.025	-0.025
16	C	0.00	1.025	-0.025
17	C	0.00	1.036	-0.036
18	C	0.00	1.036	-0.036
19	C	0.00	1.020	-0.020
20	C	0.00	1.020	-0.020

Bonds

i	j	X	--Y	kXY	BondOrder
1	2	C	--C	1.00	0.431
1	3	C	--N2e	0.89	0.394
2	4	C	--N2e	0.89	0.394
1	5	C	--C	1.00	0.715
2	6	C	--C	1.00	0.715
5	7	C	--O2e	0.66	0.171
6	8	C	--O2e	0.66	0.171
3	9	N2e	--C	0.89	0.404
4	10	N2e	--C	0.89	0.404
9	11	C	--C	1.00	0.549
10	12	C	--C	1.00	0.549
11	5	C	--C	1.00	0.505
6	12	C	--C	1.00	0.505
9	13	C	--C	1.00	0.611
10	14	C	--C	1.00	0.611
13	15	C	--C	1.00	0.692
14	16	C	--C	1.00	0.692
15	17	C	--C	1.00	0.627
16	18	C	--C	1.00	0.627
17	19	C	--C	1.00	0.705
18	20	C	--C	1.00	0.705
19	11	C	--C	1.00	0.572
12	20	C	--C	1.00	0.572

