

**ELEKTRON KORELASYON YÖNTEMLERİ İÇİN
MOLEKÜL İÇİ KÜME YAKLAŞIMI**

**CLUSTER-IN-MOLECULE APPROACH FOR ELECTRON
CORRELATION METHODS**

YAVUZ ALAGÖZ

PROF. DR. UĞUR BOZKAYA

Tez Danışmanı

Hacettepe Üniversitesi

Lisansüstü Eğitim-Öğretim ve Sınav Yönetmeliğinin

Kimya Anabilim Dalı için öngördüğü

YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak hazırlanmıştır.

2022

ÖZET

ELEKTRON KORELASYON YÖNTEMLERİ İÇİN MOLEKÜL İÇİ KÜME YAKLAŞIMI

Yavuz Alagöz

Yüksek Lisans, Kimya Bölümü

Danışman: Prof. Dr. Uğur BOZKAYA

Haziran 2022, 156 sayfa

Molekül içi küme (*Cluster-in-Molecule*, CIM) yaklaşımı, fragmantasyon temelli bir lokal korelasyon yöntemidir. Lokal korelasyon yöntemlerinin arkasındaki temel ilke, uzak lokalize moleküler orbitaller (*Localized Molecular Orbital*, LMO) arasındaki etkileşimin korelasyon enerjisine katkısının ihmal edilebilir olmasıdır. Bu tez çalışmasının amacı, Møller-Plesset (MP), yüksek maliyetli tekli ve ikili uyarılmış bağlanmış küme (*Coupled Cluster Singles and Doubles*, CCSD) ve pertürbatif üçlü uyarılmaları içeren CCSD [*CCSD with perturbative triples*, CCSD(T)] yöntemlerine CIM ve yoğunluk fit edilmesi (*Density Fitting*, DF) yaklaşımlarının uygulanmasıyla, doğrusal-ölçekli (linear-scaling), yani sistem boyutuyla doğrusal maliyet artışı gösteren CIM-DF-MP2, CIM-DF-MP2.5, CIM-DF-MP3, CIM-DF-CCSD ve CIM-DF-CCSD(T) yöntemlerinin geliştirilmesi ve kimyasal sistemlere uygulanabilmesi için bilgisayar ortamında C++ programlama dili ile programlanmasıdır.

Anahtar Kelimeler: Elektron korelasyonu, lokal korelasyon, bağlanmış küme teorisi, Moller-Plesset pertürbasyon teorisi, molekül içi küme

ABSTRACT

CLUSTER-IN-MOLECULE APPROACH FOR ELECTRON CORRELATION METHODS

Yavuz Alagöz

Master of Science, Department of Chemistry

Supervisor: Prof. Dr. Uğur BOZKAYA

June 2022, 156 pages

The Cluster-in-Molecule approach is a fragmentation-based local correlation method. Basic principle of local correlation methods is that the contribution of the interaction between distant localized molecular orbitals (LMOs) to the correlation energy is negligible. The aim of this thesis study is to develop linear-scaling CIM-DF-MP2, CIM-DF-MP2.5, CIM-DF-MP3, CIM-DF-CCSD and CIM-DF-CCSD(T) methods by applying CIM and density-fitting (DF) approaches to the Møller-Pleset (MP), high cost coupled-cluster singles and doubles (CCSD) and CCSD with perturbative triples [CCSD(T)] methods, and programming with C++.

Keywords: Electron correlation, local correlation, coupled cluster theory, Moller-Plesset perturbation theory, cluster-in-molecule

TEŐEKKÜR

Lisansüstü eğitimim boyunca beni yetiřtiren, bilgi birikimi ile bana rehberlik eden saygı deęer hocam Prof. Dr. Uęur Bozkaya'ya,

Hayatım boyunca beni destekleyen, aldığım kararlara saygı duyan ve her zaman arkamda olan sevgili annem Filiz Alagöz ve babam Mustafa Alagöz'e,

Eđitim hayatımda erken dönemden beri öngörüsü ve deneyimleriyle beni yönlendiren sevgili ablam Nilüfer Alagöz'e,

Desteklerini benden esirgemeyen deęerli hocalarım Öğr. Gör. Aslı Ünal, Dr. Abdurrahman Atalay ve Dr. Öğr. Üyesi Hilal Medetalibeyođlu'na,

Her zaman yanımda olan, her konuda bana yardım eden başta Betül Ermiş olmak üzere deęerli çalışma arkadaşlarım Ali Kaan Uyar ve Hacı Hüseyin Eskihoran'a,

Bana olan inancı ve maddi manevi desteęi için deęerli arkadaşım Tolga Çalışkan'a,

Bu süreçte motivasyon kaynađım olan ve her türlü desteęi veren sevgilim, müstakbel hayat arkadaşım Alev Arslan'a yürekten teşekkür ederim.

* * *

Bu tezde yer alan nümerik hesaplamaların büyük bir kısmı TÜBİTAK ULAKBİM, Yüksek Başarım ve Grid Hesaplama Merkezi'nde (TRUBA kaynaklarında) gerçekleştirilmiştir.

* * *

Bu tez 120Z743 no.lu TÜBİTAK-COST projesi desteęiyle gerçekleştirilmiştir.

İÇİNDEKİLER

ÖZET	i
ABSTRACT	ii
İÇİNDEKİLER	iv
ŞEKİLLER DİZİNİ	vi
ÇİZELGELER DİZİNİ.....	vii
SİMGELER VE KISALTMALAR	ix
1. GİRİŞ	1
1.1. Çok Parçacık Problemi ve Elektron Korelasyonu	1
1.2. Lokal Korelasyon	3
1.3. Molekül İçi Küme Yaklaşımı	4
1.4. Moleküler İntegraller ve Yoğunluk Fit Edilmesi	5
1.5. Tez Kapsamı	6
2. YÖNTEM	7
2.1. Yoğunluk Fit Edilmesi Tekniği	7
2.2. İkinci ve Üçüncü Dereceden Møller-Plesset Pertürbasyon Teorisi.....	9
2.3. Tekli ve İkili Uyarılmış Bağlanmış Küme (Coupled-Cluster Singles and Doubles) Teorisi	12
2.4. Pertürbatif Üçlü Uyarılma Düzeltmesi	14
2.5. Molekül İçi Küme (Cluster-in-Molecule) Yaklaşımı	16
2.6. Tek Çevreli CIM (Single-Environment CIM) Algoritması	18
3. HESAPLAMALAR.....	36
3.1. CIM-DF-MP2 Süre Karşılaştırmaları.....	36
3.2. CIM-DF-MP Yöntemlerinin Doğruluğu	38
3.3. CIM-DF-CC Yöntemlerinin Doğruluğu	42
3.4. Çevresel LMO Seçiminde Kullanılan Parametre ζ 'nın Etkisi	44
4. SONUÇLAR VE TARTIŞMA	49
5. KAYNAKLAR	51

EKLER.....	60
EK 1 – CCSD Ara Terimler	60
1-indisli ve 2-indisli Ara Tensörler	60
F ve \mathcal{F} Matrisleri.....	61
W Tensörleri	62
EK 2 – Çevresel LMO Seçiminde kullanılan Parametrenin İncelenmesinde Kullanılan Set için Toplam Enerjiler	63
EK 3 – Hesaplamalarda ve Örneklerde Ele Alınan Yapıların Molekül Geometrileri ..	63

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 1.1. Schrödinger eşitliği için çeşitli teorilere dayanan çözümler ve korelasyon enerjisinin grafiksel gösterimi.	2
Şekil 2.1. C ₁₀ H ₂₄ molekülü için sıralı şekilde ilk 5 indirgenebilir LMO alanı temsili.	21
Şekil 2.2. Birbirini içeren indirgenebilir LMO alanlarından indirgenemez LMO alanı oluşturma temsili.	24
Şekil 2.3. İndirgenemez LMO alanındaki LMO'lar ile ilişkili atomlar.	25
Şekil 2.4. Genişletilmiş alt sistem { \bar{P} } ile ilişkili atomlar.	25
Şekil 2.5. Genişletilmiş alt sistem { \bar{P} } ile ilişkili dolu LMO'lar.	26
Şekil 2.6. Alt sistemin orbital katsayılarının elde edilmesi için şematik gösterim. ...	32
Şekil 3.1. C _n H _{2n+2} (n=10-15,20) alkan seti için CIM-MP2/cc-pVTZ ve CIM-DF-MP2/cc-pVTZ seviyesinde gerçekleştirilen tek nokta enerji hesabına ait toplam hesap süreleri.	37
Şekil 3.2. C _n H _{2n+2} (n=10-15,20) alkan seti için CIM-DF-MP2/cc-pVTZ seviyesinde gerçekleştirilen tek nokta enerji hesabına ait toplam hesap süreleri.	38

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 2.1. Açık zincirli $C_{10}H_{24}$ molekülü için merkezi orbital grupları.	19
Çizelge 2.2. Açık zincirli $C_{10}H_{24}$ molekülü için indirgenebilir LMO alanları.....	20
Çizelge 2.3. Açık zincirli $C_{10}H_{24}$ molekülü için indirgenemez LMO alanları ve onları oluşturulan indirgenebilir LMO alanları.	23
Çizelge 3.1. C_nH_{2n+2} ($n=10-15,20$) alkan seti için CIM-DF-MP2/cc-pVTZ ve CIM-MP2/cc-pVTZ seviyesinde gerçekleştirilen tek nokta enerji hesabına ait korelasyon enerjisi ve hata değerleri.....	39
Çizelge 3.2. İsimleri verilen alkanlar için CIM-DF-MP2/cc-pVTZ seviyesinde gerçekleştirilen tek nokta enerji hesabına ait enerji ve hata değerleri....	40
Çizelge 3.3. C_nH_{2n+2} ($n=10-15,20$) alkan seti için CIM-DF-MP2.5/cc-pVTZ seviyesinde gerçekleştirilen tek nokta enerji hesabına ait enerji ve hata değerleri.....	41
Çizelge 3.4. C_nH_{2n+2} ($n=10-15,20$) alkan seti için CIM-DF-MP3/cc-pVTZ seviyesinde gerçekleştirilen tek nokta enerji hesabına ait enerji ve hata değerleri.....	41
Çizelge 3.5. $(H_2O)_n$ ($n=5-25$) su kümeleri için CIM-DF-CCSD/6-311G(d,p) ve CIM-CCSD/6-311G(d,p) seviyesinde gerçekleştirilen tek nokta enerji hesabına ait korelasyon enerjisi ve hata değerleri.....	42
Çizelge 3.6. $(H_2O)_n$ ($n=5-25$) su kümeleri için CIM-DF-CCSD(T)/6-311G(d,p) ve CIM-CCSD(T)/6-311G(d,p) seviyesinde gerçekleştirilen tek nokta enerji hesabına ait pertürbatif üçlü uyarılma korelasyon enerji düzeltmeleri ve hata değerleri.....	43
Çizelge 3.7. Çevresel LMO seçiminde kullanılan parametrenin incelenmesinde kullanılan molekül seti için IUPAC adları ve baz fonksiyon sayıları	44

Çizelge 3.8. Farklı ζ değerleri için CIM-DF-MP2/cc-pVTZ enerjilerine karşılık DF-MP2/cc-pVTZ enerjilerinin mutlak hataları ve ortalama mutlak hataları	45
Çizelge 3.9. Farklı $C_{50}H_{102}$ izomerleri için SECIM alt sistemleri detayları.	46
Çizelge 3.10.Farklı $C_{60}H_{122}$ izomerleri için SECIM alt sistemleri detayları.	47
Çizelge 3.11.Farklı $C_{70}H_{142}$ izomerleri için SECIM alt sistemleri detayları.	48
Çizelge 5.1. Farklı ζ değerleri için CIM-DF-MP2/cc-pVTZ enerjilerine karşılık DF-MP2/cc-pVTZ enerjileri.	63

SİMGELER VE KISALTMALAR

Kısaltmalar

2-RDM	İki Elektron İndirgenmiş Yoğunluk Matrisi (<i>Two-Electron Reduced-Density-Matrix</i>)
AO	Atomik Orbital
CC	Coupled-Cluster
CCD	İkili Uyarılmış Bağlanmış Küme Teorisi (<i>Coupled-Cluster Doubles Theory</i>)
CCSD	Tekli ve İkili Uyarılmış Bağlanmış Küme Teorisi (<i>Coupled-Cluster Singles and Doubles Theory</i>)
CCSD(T)	Pertürbatif Üçlü Uyarılma Katkılarını içeren Tekli ve İkili Uyarılmış Bağlanmış Küme Teorisi (<i>Coupled-Cluster Singles and Doubles with Perturbative Triples Theory</i>)
CEPA	Bağlanmış Elektron Çifti Teorisi (<i>Coupled Electron Pair Theory</i>)
CI	Konfigürasyon Etkileşimi (<i>Configuration Interaction</i>)
CIM	Molekül İçi Küme (<i>Cluster-in-Molecule</i>)
DF	Yoğunluk Fit Edilmesi (<i>Density-Fitting</i>)
ERI	Elektron İtme İntegrali (<i>Electron Repulsion Integral</i>)
HF	Hartree-Fock

LMO	Lokalize Moleküler Orbital
MAE	Ortalama Mutlak Hata (<i>Mean Absolute Error</i>)
MO	Moleküler Orbital
MP	Møller-Plesset
MP2	İkinci Dereceden Møller-Plesset Pertürbasyon Teorisi
MP3	Üçüncü Dereceden Møller-Plesset Pertürbasyon Teorisi
MP4(SDQ)	Dördüncü Dereceden Møller-Plesset Pertürbasyon Teorisi (Yalnızca tekli, ikili ve dörtlü uyarılma düzeylerinden katkıları içeren)
MPI	Mesaj İletme Arayüzü (<i>Message Passing Interface</i>)
PAO	Yansıtılmış Atomik Orbital (<i>Projected Atomic Orbital</i>)
RI	Bire Çözümleme (<i>Resolution of the Identity</i>)
SCF	Kendi İçinde Uyumlu Alan Teorisi (<i>Self-Consistent Field Theory</i>)
SCMO	Yarı Kanonik Moleküler Orbital (<i>Semi-Canonical Molecular Orbital</i>)
SECIM	Tek Çevreli Molekül İçi Küme Algoritması (<i>Single-Environment Cluster-in-Molecule Algortihm</i>)

Simgeler

N_{aux}	İlgili sistemin yardımcı baz fonksiyon sayısı
N_{bf}	İlgili sistemin baz fonksiyon sayısı
N_{occ}	Tüm sistemin dolu MO'larının sayısı

N_{vir}	Tüm sistemin boş MO'larının sayısı
η	PAO'lardan oluşturulan boş orbitallerin uygun olanlarının seçiminde kullanılan parametre
$\{\bar{P}\}$	Genişletilmiş alt sistem
N_{ao}^P	Alt sistemdeki atomlar ile ilişkili atomik orbital sayısı
$N_{ao}^{\bar{P}}$	Genişletilmiş alt sistemdeki atomlar ile ilişkili atomik orbital sayısı
N_{occ}^P	Alt sistemin dolu LMO'larının sayısı
$N_{occ}^{\bar{P}}$	Genişletilmiş alt sistemin dolu LMO'larının sayısı
N_{vir}^P	Alt sistemin boş LMO'larının sayısı
$N_{vir}^{\bar{P}}$	Genişletilmiş alt sistemin boş LMO'larının sayısı
$\Omega(P)$	Alt sistemdeki atomlar ile ilişkili AO'lardan oluşan AO alanı
$\Omega(\bar{P})$	Genişletilmiş alt sistemdeki atomlar ile ilişkili AO'lardan oluşan AO alanı
$\Omega(i)$	i LMO'su ile ilişkili atomların AO'larından oluşan AO alanı
$\{P\}$	Alt sistem
ζ	Çevresel orbital seçiminde kullanılan parametre

1. GİRİŞ

Hesaplamalı bilimlerin önemi, gelişmekte olan bilgisayar teknolojisi, yeni matematiksel yaklaşımlar ve teoriler sayesinde gün geçtikçe artmaktadır. Kimyanın maddeler ve onların etkileşimlerini inceleme çabası kuantum ölçeklerine indikçe, gereken işlemler de bir o kadar karmaşıklaşmaktadır. Bu noktada devreye giren hesaplamalı kimya alanında bilişim yoluyla çözüme ulaşmak adına büyük ilerlemeler kaydedilmektedir. Tamamen kuantum mekaniği kullanılarak, hiçbir ampirik veriden yararlanmadan geliştirilen *ab-initio* yöntemler sayesinde moleküler özellikler ve tepkime mekanizmaları yüksek hassasiyetle aydınlatılabilmektedir.

1.1. Çok Parçacık Problemi ve Elektron Korelasyonu

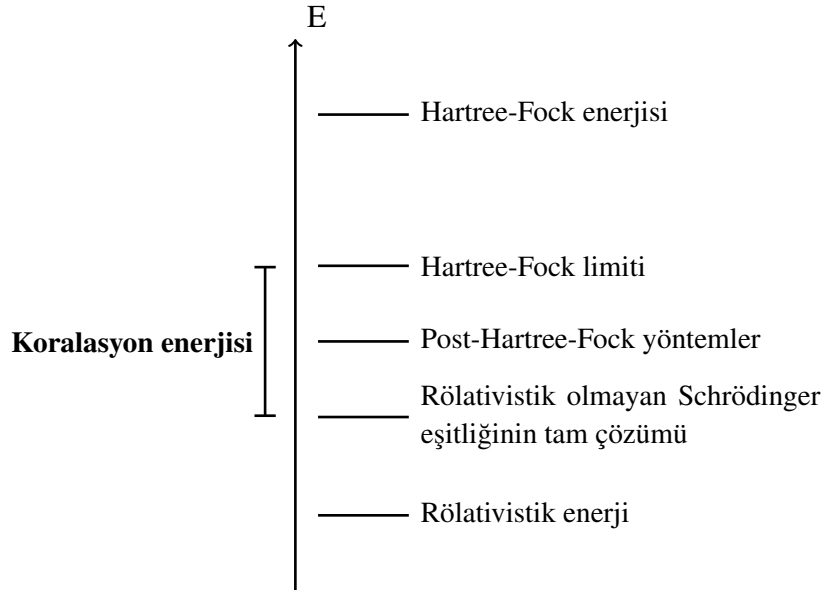
Atomlar ve moleküllerden oluşan sistemlerin kimyası, onları oluşturan elektronların ve atom çekirdeklerinin fiziğine bağlıdır. Bu fizik, kuantum mekaniği ile hassasiyetle açıklanabilmektedir. Bu nedenle ana problem kuantum mekaniğini elektronlara ve atom çekirdeklerine doğru bir şekilde uygulayabilmektir [1]. Hidrojen atomu ve H_2^+ iyonu gibi tek elektronlu sistemler için Schrödinger Eşitliğinin tam çözümü yapılabilmektedir (Tezin geri kalanında "Schrödinger eşitliği" ifadesi, "zamandan bağımsız, rölativistik olmayan Schrödinger eşitliği" için kullanılacaktır). Geri kalan tüm kimyasal sistemlerde ise pratikte ancak yaklaşık çözüme ulaşmak mümkündür. Altta yatan zorluk ise birçok parçacığın aynı anda birbirleriyle etkileşmesidir. Buna *çok parçacık problemi* (many-body problem) denir.

Birden fazla elektron içeren bir sistem için ilk yaklaşık çözüm helyum atomu için yapılmıştır. Hylleraas helyum için iyonlaşma potansiyeli hesaplamış ve sonucun deneysel sonuçla 0,01 eV hatayla tuttuğunu göstermiştir [2]. Bu çalışma, kuantum mekaniğinin çok parçacıklı sistemlerin fiziğini doğru bir şekilde tanımlayabildiğini gösteren önemli bir çalışmadır. Ancak bu yaklaşımla üç elektronlu bir atom için çözüme ulaşmak hâlâ pratik değildir.

Kuantum mekaniğinde çok parçacık problemini sistematik olarak çözmek için atılan en önemli adım Hartree tarafından öne sürülen kendi içinde uyumlu alan (*Self-Consistent Field*, SCF) yaklaşımıdır. Hartree, bu yaklaşımın zamanı geldiğinde çözüme ulaşmak

için kullanılacak ilk basamak olmasını umduğunu söylemiştir [3]. Kuantum mekaniğinin çok elektronlu sistemlere uygulanması çabası yaklaşık bir asırdır devam etmekte olup, Hartree'nin umduğu gibi bu yaklaşım üzerine temellenmiştir. Bunun üzerine Fock, N-elektronlu (N, elektron sayısı) dalga fonksiyonunu Hartree'nin yaklaşımı için optimize ederek çözüme bir adım daha yaklaşmıştır [4]. Hartree-Fock (HF) yöntemi olarak anılan bu yöntem, Hartree'nin self-consistent field teorisine atfen SCF ismini de miras almıştır. HF yöntemi, elektronların birbirleriyle etkileşimlerini ortalama olarak hesaba katmaktadır.

Elektronların birbiriyle etkileşimlerini hesaplamak için ilk girişim Wigner tarafından yapılmıştır [5]. Ancak Löwdin bunun için genişletilmiş bir şema sunmuş ve korelasyon enerjisini tanımlamıştır. Löwdin'e göre *elektron korelasyonu* HF yöntemi ile Schrödinger eşitliğinin tam çözümü arasında yer alan bir ara basamaktır ve *korelasyon enerjisi* ise parçacıkların hareketleri arasındaki korelasyonun ihmalinden kaynaklanan hatadır [6]. Başka bir deyişle korelasyon enerjisi Schrödinger eşitliğinin tam çözümünden gelen gerçek enerji ile HF yöntemiyle hesaplanan enerji arasındaki farktır.



Şekil 1.1. Schrödinger eşitliği için çeşitli teorilere dayanan çözümler ve korelasyon enerjisinin grafiksel gösterimi.

1.2. Lokal Korelasyon

Korelasyon enerjisini hesaplamak için başlıca MP, CC ve CI yöntemler olmak üzere çeşitli yöntemler geliştirilmiştir. Ancak bu yöntemler tüm sistem üzerine dağılmış kanonik HF orbitalleri ile çalışmaktadırlar. Bu, korelasyon enerjisini hesaplamak için gereken işlem yükünün, sistemin büyüklüğüyle üstel olarak artacağı anlamına gelmektedir. Ancak elektron korelasyonunun lokal olduğu gösterilmiştir [7]. Böylece lokalize orbitaller kullanarak korelasyon hesabı yapmanın yolu açılmıştır.

Dolu ve boş HF orbitallerinin kendi aralarında üniter dönüşümden etkilenmediği bilinmektedir [4]. Bu prensipten faydalanarak bir üniter dönüşüm ile moleküler orbitallerin (MO) atomların üzerine merkezlenmesiyle lokalize moleküler orbitaller (LMO) elde edilebilir [8]. Foster ve Boys, uygun bir lokalizasyon prosedürü sunmuştur [9].

Pulay, elektron korelasyonunun lokalliğinden ve LMO'lardan faydalanarak lokal korelasyon yöntemlerinin öncü çalışmasını yapmıştır. Bu çalışmada dolu MO'ları Boys prosedürü ile lokalize etmiş, lokalize boş MO'ları ise atomik orbitallerin (AO) dolu MO uzayına yansıtılması ve $l/2$ normu belirli bir toleransın altında kalan AO'ların dışarıda bırakılmasıyla oluşturmuştur [10]. Bunlara yansıtılmış atomik orbital (*Projected Atomic Orbital*, PAO) denmektedir. Pulay ve Saebø, PAO'ları MP2, MP3 ve MP4(SDQ) ve CEPA yöntemlerine uygulamıştır [10–14]. Özetle bu yaklaşımlar dolu uzayı LMO'lar, boş uzayı PAO'lar ile tarif eden lokal korelasyon yaklaşımlarıdır.

Förner vd. ise molekülü alt parçalara ayırarak elektron korelasyonunun lokalliğinden faydalanmıştır [15]. Bu yaklaşıma göre alt parçalardan ve birden fazla alt parçanın etkileşiminden gelen katkıların toplanmasıyla tüm sistemin korelasyon enerjisi yaklaşık olarak elde edilebilmektedir. Bu tür yaklaşımda CC veya MP denklemlerini yeniden formüle etmeye gerek yoktur. Yalnızca LMO bazında Fock matrisi diyagonal olmadığı için bir dönüşüm gerekebilmektedir.

1.3. Molekül İçi Küme Yaklaşımı

Molekül içi küme (*Cluster-in-Molecule*, CIM) yaklaşımı, elektron korelasyonlarının lokal olması özelliğinden yararlanarak bu hesapların düşük maliyet, yüksek hız ve doğrulukla gerçekleştirilmesini sağlayan fragmantasyon temelli bir yöntemdir.

Molekül içi küme yaklaşımı 2002 yılında Li vd. tarafından önerilmiştir [16]. Bu yaklaşım Förner vd.nin yaklaşımına benzer şekilde alt parçalar oluşturmaktadır ve alt parçalar için boş orbital uzayı, Pulay'ın PAO'larıyla sağlanmaktadır. Başta CCD yöntemi için uygulanmış olan CIM, daha sonra Li vd. tarafından MP2, CR-CC(2,3), CCSD ve CCSD(T) yöntemlerine de uygulanmıştır [17, 18]. Aynı zamanda CIM algoritmasında da geliştirmelerde bulunmuşlardır [19–22]. 2010 yılında DePrince ve Mazziotti CIM-2-RDM yöntemini geliştirmişlerdir [23]. CIM yaklaşımı için boş orbital uzayı seçimini MP2 hesabından gelen yoğunluk matrisinin elemanlarının büyüklüğüne göre eleyerek seçen LNO-CIM adı verilen bir yöntem de Rolik ve Kallay tarafından geliştirilmiştir [24]. 2014 yılında Guo vd. geliştirilmiş CIM algoritmasıyla CIM-RI-MP2 yöntemini sunmuşlardır [22]. 2018 yılında Guo vd. CIM ile DLPNO yaklaşımının bir kombinasyonu geliştirmişlerdir [25]. Daha sonra periyodik olarak tekrar eden birimlerden oluşan yapılara uygulanmıştır [26]. CIM ile ilk analitik gradient çalışması CIM-MP2 yöntemi için yapılmıştır [27]. Son olarak CIM-DLPNO kombinasyonu için uzak çiftlerin korelasyon düzeltmesi yapılmıştır [28].

Genel hatlarıyla CIM yaklaşımı, tüm sistem için HF hesaplaması gerçekleştirildikten sonra lokalize HF orbitallerinden yararlanarak belirli kümeler seçer. Kümeler seçilirken orbital yüklerinden, Fock matrisi elemanlarından ve atomlar arası mesafelerden yararlanır. Ardından her küme için dolu orbital uzayına ortogonal olacak şekilde boş orbitaller seçilir. Kümeleri oluşturma işleminden sonra korelasyon hesabına geçilir ve böylece her orbital için, onunla etkileşen orbitallerin katkısıyla enerjiler elde edilir. Kümelerin enerjilerinin bir araya getirilmesiyle de tüm sistemin korelasyon enerjisi yaklaşık olarak hesaplanmış olur.

1.4. Moleküler İntegraller ve Yoğunluk Fit Edilmesi

Moleküler yapı hesaplamaları üzerine geliştirilen modern yöntemlerde, moleküler orbitaller AO'lardan oluşturulmaktadır. Enerji, geçiş dipol momentleri, bağ kuvveti gibi tüm fiziksel ve kimyasal niceliklerin hesaplanması, sonunda bu AO'lar üzerinden çok sayıda integralin hesabına indirgenebilmektedir [29–33]. Bunlara moleküler integraller denmektedir. HF dahil tüm ab-initio yöntemlerde başlangıç noktası moleküler integrallerin hesabıdır. Ancak elektronlar arası itme integrali (*Electron Repulsion Integral*, ERI) olarak adlandırılan iki elektron integrallerinin çözümü oldukça maliyetlidir [34]. Ayrıca tekrar kullanılmak üzere 4-indisli tensörlerde saklanması, bellek ve depolama alanı sınırlarını da zorlamaktadır.

Moleküler integrallerin hesabında maliyeti düşürmek için çeşitli algoritmik tekniklerin yanı sıra perdeleme ve faktörizasyon teknikleri uygulanmaktadır [35–40]. Perdeleme teknikleri değeri sıfıra yaklaşan integralleri baştan öngörerek bunların ihmal edilmesi fikrine dayanır. Faktörizasyon tekniklerinde ise 4-indisli tensörler daha az indisli tensörler cinsinden ifade edilir. Ayrıca faktörizasyon teknikleri yaklaşık faktörizasyon yaparak bu maliyeti daha da azaltmanın yollarını sunmaktadır.

Yaklaşık faktörizasyon tekniklerinden yoğunluk fit edilmesi (*Density-Fitting*, DF) moleküler integral hesaplarının maliyetini önemli ölçüde düşüren modern yaklaşımlardan biridir [41–43]. DF tekniği, bire çözümü (*Resolution of the Identity*, RI) tekniği olarak da bilinmektedir. DF tekniği ile 4-indisli iki elektron integralleri 3-indisli tensörlere ayrıştırılır. Böylece ERI'lerin hesaplanması ve sonradan kullanılmak üzere saklanması için gerekli bellek ve depolama alanı gereksinimi büyük ölçüde azaltılmış olur. DF tekniği ile yaklaşık faktörizasyondan kaynaklanan hatanın oldukça makul olduğu pek çok çalışma ile gösterilmiştir [44–50].

1.5. Tez Kapsamı

Bu tez kapsamında CIM yaklaşımı detaylarıyla incelenmiş olup, Prof. Dr. Uğur Bozkaya ve araştırma grubu tarafından geliştirilmiş olan MacroQC paket programına entegre edilmiştir [51]. DF tekniği kullanılarak CIM-DF-MP ve CIM-DF-CC yöntemler geliştirilmiştir. Sonuçları etkileyen parametreler incelenmiş, yöntemin doğruluğu MacroQC ve GAMESS (30 SEP 2021 (R2) sürümü) [52] paket programı ile yapılan hesaplamalarla karşılaştırılarak gösterilmiştir. Ayrıca geliştirilen yöntemler için OpenMP ile çoklu iş parçacığı (multithreading) paralelizasyonu, MPI ile çoklu işlem (multiprocessing) paralelizasyonu ve OpenMP-MPI hibrit paralelizasyonu yapılmıştır.

2. YÖNTEM

Metnin geri kalanında aksi belirtilmediği sürece i, j, k, l, \dots dolu MO'ları tarif eden, a, b, c, d, \dots boş MO'ları tarif eden, p, q, r, s, \dots genel MO'ları tarif eden ve $\mu, \nu, \lambda, \sigma, \dots$ ise AO'ları tarif eden indisler olarak kullanılacaktır.

2.1. Yoğunluk Fit Edilmesi Tekniği

AO bazında iki elektron integralleri Mulliken notasyonuyla şu şekilde verilir:

$$(\mu\nu|\lambda\sigma) = \int \int \chi_\mu(\mathbf{r}_1)\chi_\nu(\mathbf{r}_1)\frac{1}{r_{12}}\chi_\lambda(\mathbf{r}_2)\chi_\sigma(\mathbf{r}_2)d\mathbf{r}_1d\mathbf{r}_2 \quad (1)$$

Aşağıdaki gibi yoğunluk tanımlarında bulunursak,

$$\rho_{\mu\nu}(\mathbf{r}) = \chi_\mu(\mathbf{r})\chi_\nu(\mathbf{r}) \quad (2)$$

$$\rho_{\lambda\sigma}(\mathbf{r}) = \chi_\lambda(\mathbf{r})\chi_\sigma(\mathbf{r}) \quad (3)$$

bu yoğunluklar yardımcı bir baz ile yaklaşık olarak ifade edilebilir [53]:

$$\rho_{\mu\nu}(\mathbf{r}) = \sum_P^{N_{aux}} d_P^{\mu\nu} \varphi_P(\mathbf{r}) \quad (4)$$

Burada $d_P^{\mu\nu}$ fit etme katsayıları, $\{\varphi_P(\mathbf{r})\}$ yardımcı baz seti ve N_{aux} ise yardımcı baz fonksiyon sayısıdır. Fit etme katsayıları Dunlap vd. yöntemi takip edilerek bulunabilir [42].

$$d_Q^{\mu\nu} = \sum_P^{N_{aux}} (\mu\nu|P)[\mathbf{J}^{-1}]_{PQ} \quad (5)$$

Burada,

$$(\mu\nu|P) = \int \int \chi_\mu(\mathbf{r}_1)\chi_\nu(\mathbf{r}_1)\frac{1}{r_{12}}\varphi_P(\mathbf{r}_2)d\mathbf{r}_1d\mathbf{r}_2 \quad (6)$$

ve

$$J_{PQ} = \int \int \varphi_P(\mathbf{r}_1) \frac{1}{r_{12}} \varphi_Q(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \quad (7)$$

Artık Eşitlik (1)'deki $(\mu\nu|\lambda\sigma)$ integralini şu şekilde yazabiliriz:

$$(\mu\nu|\lambda\sigma)_{\text{DF}} = \sum_{P,Q}^{N_{aux}} (\mu\nu|P)[\mathbf{J}^{-1}]_{PQ}(Q|\lambda\sigma) \quad (8)$$

Eşitlik (8) küçük bir düzenleme ile;

$$(\mu\nu|\lambda\sigma)_{\text{DF}} = \sum_{P,Q,R}^{N_{aux}} (\mu\nu|P)[\mathbf{J}^{-1/2}]_{PQ}[\mathbf{J}^{-1/2}]_{QR}(R|\lambda\sigma) \quad (9)$$

olarak yazılabilir. Buradan yola çıkarak *DF faktörü* olarak adlandırılan $b_{\mu\nu}^Q$ tanımlanabilir:

$$b_{\mu\nu}^Q = \sum_P^{N_{aux}} (\mu\nu|P)[\mathbf{J}^{-1/2}]_{PQ} \quad (10)$$

Böylece $(\mu\nu|\lambda\sigma)$ integrali şöyle yazılabilir:

$$(\mu\nu|\lambda\sigma)_{\text{DF}} = \sum_Q^{N_{aux}} b_{\mu\nu}^Q b_{\lambda\sigma}^Q \quad (11)$$

AO bazında antisimetrize edilmiş iki elektron integralleri de şu şekilde olur:

$$\langle \mu\nu || \lambda\sigma \rangle_{\text{DF}} = \sum_Q^{N_{aux}} (b_{\mu\lambda}^Q b_{\nu\sigma}^Q - b_{\mu\sigma}^Q b_{\nu\lambda}^Q) \quad (12)$$

Metnin geri kalanı için DF alt indisleri kullanılmayacak, ancak tüm integraller DF integralleri olarak ele alınacaktır.

2.2. İkinci ve Üçüncü Dereceden Møller-Plesset Pertürbasyon Teorisi

Toplam enerji operatörü Hamiltonian, ikinci kuantlaşmış (Second-Quantization) operatörler ile şu şekilde ifade edilir [54–57]:

$$\hat{H} = \sum_{p,q} h_{pq} \hat{p}^\dagger \hat{q} + \frac{1}{4} \sum_{p,q,r,s} \langle pq || rs \rangle \hat{p}^\dagger \hat{q}^\dagger \hat{s} \hat{r} \quad (13)$$

Burada, h_{pq} , tek elektron Hamiltonian operatörünün matris elemanı, \hat{p}^\dagger oluşturma (creation) operatörü, \hat{q} yok etme (annihilation) operatörü, $\langle pq || rs \rangle$ antisimetrize edilmiş iki elektron integralidir. Hamiltonian operatörü normal sıralanmış (normal-ordered) halde yazılırsa [56–58];

$$\hat{H}_N = \langle 0 | \hat{H} | 0 \rangle + \hat{f}_N + \hat{W}_N \quad (14)$$

$$\hat{f}_N = \sum_{p,q} f_{pq} \{ \hat{p}^\dagger \hat{q} \} \quad (15)$$

$$\hat{W}_N = \frac{1}{4} \sum_{p,q,r,s} \langle pq || rs \rangle \{ \hat{p}^\dagger \hat{q}^\dagger \hat{s} \hat{r} \} \quad (16)$$

Burada, \hat{f}_N normal sıralanmış Hamiltonian operatörünün bir elektronlu, \hat{W}_N ise iki elektronlu bileşenidir, f_{pq} Fock operatörünün matris elemanı, $\langle 0 |$ ise referans determinanttır (Fermi vakum).

İkinci ve üçüncü dereceden pertürbasyon enerji düzeltmesi aşağıdaki gibi yazılabilir [44, 46, 48, 58–60].

$$\Delta E^{(2)} = \langle 0 | (\hat{W}_N \hat{T}_2^{(1)})_c | 0 \rangle \quad (17)$$

$$\Delta E^{(3)} = \langle 0 | (\hat{W}_N \hat{T}_2^{(2)})_c | 0 \rangle \quad (18)$$

$$\hat{T}_2^{(1)} = \frac{1}{4} \sum_{i,j}^{N_{occ}} \sum_{a,b}^{N_{vir}} t_{ij}^{ab(1)} \hat{a}^\dagger \hat{b}^\dagger \hat{j} \hat{i} \quad (19)$$

$$\hat{T}_2^{(2)} = \frac{1}{4} \sum_{i,j}^{N_{occ}} \sum_{a,b}^{N_{vir}} t_{ij}^{ab(2)} \hat{a}^\dagger \hat{b}^\dagger \hat{j} \hat{i} \quad (20)$$

Burada $\Delta E^{(2)}$ ve $\Delta E^{(3)}$ ikinci ve üçüncü dereceden enerji düzeltmeleri, $\hat{T}_2^{(1)}$ ve $\hat{T}_2^{(2)}$ birinci ve ikinci dereceden ikili uyarma (doubles excitation) operatörleri, $t_{ij}^{ab(1)}$ ve $t_{ij}^{ab(2)}$ ise ikili uyarma katsayılarıdır (double excitation amplitudes). Alt indis olarak gösterilen c yalnızca bağlanmış (connected) diyagramlardan gelen katkıların alınacağını göstermektedir. Çiftli uyarma katsayıları ise aşağıdaki eşitlikler ile elde edilebilir [44, 46, 58–60].

$$\langle \Phi_{ij}^{ab} | (\hat{f}_N^d \hat{T}_2^{(1)} + \hat{W}_N)_c | 0 \rangle = 0 \quad (21)$$

$$\langle \Phi_{ij}^{ab} | (\hat{f}_N^d \hat{T}_2^{(2)} + \hat{W}_N \hat{T}_2^{(1)})_c | 0 \rangle = 0 \quad (22)$$

Yukarıda belirtilen $\langle \Phi_{ij}^{ab} |$ ikili uyarılmış Slater determinantını, \hat{f}_N^d ise \hat{f}_N 'in diyagonal bloğunu göstermektedir. Elde edilen ikili uyarma katsayıları açık halleriyle şu şekilde yazılabilir [44, 46, 58]:

$$t_{ij}^{ab(1)} D_{ij}^{ab} = \langle ij || ab \rangle + P_-(ab) \sum_{e \neq b}^{N_{vir}} t_{ij}^{ae(1)} f_{be} - P_-(ij) \sum_{m \neq j}^{N_{occ}} t_{im}^{ab(1)} f_{mj} \quad (23)$$

$$\begin{aligned}
t_{ij}^{ab(2)} D_{ij}^{ab} &= P_{-}(ab) \sum_{e \neq b}^{N_{vir}} t_{ij}^{ae(2)} f_{be} - P_{-}(ij) \sum_{m \neq j}^{N_{occ}} t_{im}^{ab(2)} f_{mj} \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{m,n}^{N_{occ}} t_{mn}^{ab(1)} \langle mn || ij \rangle + \frac{1}{2} \sum_{e,f}^{N_{vir}} t_{ij}^{ef(1)} \langle ab || ef \rangle \\
&+ P_{-}(ij) P_{-}(ab) \sum_m^{N_{occ}} \sum_e^{N_{vir}} t_{im}^{ae(1)} \langle mb || ej \rangle
\end{aligned} \tag{24}$$

$$D_{ij}^{ab} = f_{ii} + f_{jj} - f_{aa} - f_{bb} \tag{25}$$

$$P_{-}(pq) = 1 - \mathcal{P}(pq) \tag{26}$$

$\mathcal{P}(pq)$, p ve q indislerinin yerini deęiřtiren permütasyon operatörüdür. MP2, MP2.5 ve MP3 seviyesinde enerjiler řöyle verilir [44, 46, 58–60];

$$E_{mp2} = E_{ref} + \Delta E^{(2)} \tag{27}$$

$$E_{mp2.5} = E_{ref} + \Delta E^{(2)} + \frac{1}{2} \Delta E^{(3)} \tag{28}$$

$$E_{mp3} = E_{ref} + \Delta E^{(2)} + \Delta E^{(3)} \tag{29}$$

Son olarak enerjiler için açık ifadeler ařaęıdaki gibi olur [44, 46, 59].

$$\Delta E^{(2)} = \frac{1}{4} \sum_{i,j,a,b} t_{ij}^{ab(1)} \langle ij || ab \rangle \tag{30}$$

$$\Delta E^{(3)} = \frac{1}{4} \sum_{i,j,a,b} t_{ij}^{ab(2)} \langle ij || ab \rangle \tag{31}$$

2.3. Tekli ve İkili Uyarılmış Bağlanmış Küme (Coupled-Cluster Singles and Doubles) Teorisi

CCSD korelasyon enerjisi aşağıdaki gibi yazılabilir [54, 61].

$$\Delta E = \langle 0 | e^{-\hat{T}} \hat{H}_N e^{\hat{T}} | 0 \rangle \quad (32)$$

Burada \hat{T} küme uyarma operatörü, $\langle 0 |$ referans determinanttır, \hat{H}_N ise Eşitlik (14) ile verilen normal sıralanmış Hamiltonian operatörüdür. CCSD için \hat{T} şu şekildedir:

$$\hat{T} = \hat{T}_1 + \hat{T}_2 \quad (33)$$

$$\hat{T}_1 = \sum_i^{N_{occ}} \sum_a^{N_{vir}} t_i^a \hat{a}^\dagger \hat{i} \quad (34)$$

$$\hat{T}_2 = \frac{1}{4} \sum_{i,j}^{N_{occ}} \sum_{a,b}^{N_{vir}} t_{ij}^{ab} \hat{a}^\dagger \hat{b}^\dagger \hat{j} \hat{i} \quad (35)$$

Burada \hat{T}_1 ve \hat{T}_2 tekli ve ikili uyarma operatörleri, t_i^a ve t_{ij}^{ab} tekli ve ikili uyarma katsayılarıdır. \hat{a}^\dagger ve \hat{i} sırasıyla oluşturma (creation) ve yok etme (annihilation) operatörleridir. Uyarma katsayıları aşağıdaki eşitlikler ile elde edilebilir.

$$\langle \Phi_i^a | e^{-\hat{T}} \hat{H}_N e^{\hat{T}} | 0 \rangle = 0 \quad (36)$$

$$\langle \Phi_{ij}^{ab} | e^{-\hat{T}} \hat{H}_N e^{\hat{T}} | 0 \rangle = 0 \quad (37)$$

Elde edilen uyarma katsayı eşitlikleri DF yaklaşımı ile şu şekilde ifade edilir [47]:

$$\begin{aligned}
t_i^a D_i^a &= f_{ia} + \sum_e^{N_{vir}} t_i^e F_{ae} - \sum_m^{N_{occ}} t_m^a F_{mi} + \sum_m^{N_{occ}} \sum_e^{N_{vir}} t_{im}^{ae} F_{me} + \sum_Q^{N_{aux}} t_Q b_{ai}^Q \\
&- \sum_Q^{N_{aux}} \sum_m^{N_{occ}} (T_{ma}^Q + t_{ma}^Q) b_{mi}^Q + \sum_Q^{N_{aux}} \sum_e^{N_{vir}} T_{ie}^Q b_{ae}^Q
\end{aligned} \tag{38}$$

$$\begin{aligned}
t_{ij}^{ab} D_{ij}^{ab} &= \langle ij || ab \rangle + P_-(ab) \sum_e^{N_{vir}} t_{ij}^{ae} \mathcal{F}_{be} - P_-(ij) \sum_m^{N_{occ}} t_{im}^{ab} \mathcal{F}_{mj} \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{m,n}^{N_{occ}} \tau_{mn}^{ab} W_{mnij} + \frac{1}{2} \sum_{e,f}^{N_{vir}} \tau_{ij}^{ef} W_{abef} \\
&+ P_-(ij) P_-(ab) \sum_m^{N_{occ}} \sum_e^{N_{vir}} t_{im}^{ae} W_{mbej} + P_-(ij) P_-(ab) \sum_Q^{N_{aux}} (t_{aj}^Q t_{ib}^Q + t_{ia}^Q b_{jb}^Q)
\end{aligned} \tag{39}$$

$$\tau_{ij}^{ab} = t_{ij}^{ab} + t_i^a t_j^b - t_i^b t_j^a \tag{40}$$

$$D_i^a = f_{ii} - f_{aa} \tag{41}$$

D_{ij}^{ab} Eşitlik (25) ile, $P_-(pq)$ operatörü ise Eşitlik (26) ile verilmiştir. Burada gösterilmeyen tüm ara terimler için EK 1'e bakınız. Böylece enerji ifadesi aşağıdaki gibi yazılabilir [47].

$$\Delta E = \sum_i^{N_{occ}} \sum_a^{N_{vir}} t_i^a f_{ia} + \frac{1}{4} \sum_{i,j}^{N_{occ}} \sum_{a,b}^{N_{vir}} \tau_{ij}^{ab} \langle ij || ab \rangle \tag{42}$$

2.4. Pertürbatif Üçlü Uyarılma Düzeltmesi

CCSD enerjisinin üzerine yapılacak pertürbatif üçlü uyarılma düzeltmesi için enerji aşağıdaki eşitlikle verilir [50, 62–64]:

$$E_{(T)} = \langle 0 | (\hat{T}_1^\dagger + \hat{T}_2^\dagger) \hat{W}_N \hat{T}_3^{[2]} | 0 \rangle \quad (43)$$

$$\hat{T}_3^{[2]} = \frac{1}{36} \sum_{a,b,c}^{N_{vir}} t(c)_{ijk}^{abc} \hat{a}^\dagger \hat{b}^\dagger \hat{c}^\dagger \hat{k} \hat{j} \hat{i} \quad (44)$$

Burada \hat{W}_N , \hat{T}_1 ve \hat{T}_2 sırasıyla Eşitlik (16) (34) ve (35) ile verilmiştir. $\hat{T}_3^{[2]}$ üçlü uyarılma operatörüdür. Daha açık ifadeleri şöyledir [50, 64]:

$$E_T^{[4]} = \langle 0 | \hat{T}_2^\dagger \hat{W}_N \hat{T}_3^{[2]} | 0 \rangle = \frac{1}{36} \sum_{i,j,k}^{N_{occ}} \sum_{a,b,c}^{N_{vir}} t(c)_{ijk}^{abc} D_{ijk}^{abc} t(c)_{ijk}^{abc} \quad (45)$$

$$E_{ST}^{[4]} = \langle 0 | \hat{T}_1^\dagger \hat{W}_N \hat{T}_3^{[2]} | 0 \rangle = \frac{1}{4} \sum_{i,j,k}^{N_{occ}} \sum_{a,b,c}^{N_{vir}} t_{ijk}^{abc} t_k^{c} \langle ab || ij \rangle \quad (46)$$

$$E_{DT}^{[4]} = \langle 0 | \hat{T}_2^\dagger \hat{f}_N \hat{T}_3^{[2]} | 0 \rangle = \frac{1}{4} \sum_{i,j,k}^{N_{occ}} \sum_{a,b,c}^{N_{vir}} t(c)_{ijk}^{abc} f_{kc} t_{ij}^{ab} \quad (47)$$

$$E_{(T)} = E_T^{[4]} + E_{ST}^{[4]} + E_{DT}^{[4]} \quad (48)$$

Burada $t(c)_{ijk}^{abc}$ ve $t(d)_{ijk}^{abc}$ sırasıyla bağlanmış ve bağlanmamış üçlü uyarılma katsayılarıdır. t_{ijk}^{abc} ve D_{ijk}^{abc} ise;

$$t_{ijk}^{abc} = t(c)_{ijk}^{abc} + t(d)_{ijk}^{abc} \quad (49)$$

$$D_{ijk}^{abc} = f_{ii} + f_{jj} + f_{kk} - f_{aa} - f_{bb} - f_{cc} \quad (50)$$

şeklindedir. Bağlanmış üçlü uyarma katsayıları aşağıdaki eşitlikle elde edilebilir.

$$\langle \Phi_{ijk}^{abc} | (\hat{f}_N^d \hat{T}_3^{[2]} + \hat{W}_N \hat{T}_2) | 0 \rangle = 0 \quad (51)$$

$$\begin{aligned} D_{ijk}^{abc} t(c)_{ijk}^{abc} &= P(ij/k) P(ab/c) \sum_e^{N_{vir}} t_{ij}^{ae} \langle bc || ek \rangle \\ &- P(ij/k) P(ab/c) \sum_m^{N_{occ}} t_{im}^{ab} \langle mc || jk \rangle \end{aligned} \quad (52)$$

Bağlanmamış üçlü uyarma katsayıları ise şu eşitlikle elde edilebilir [50, 64]:

$$\langle \Phi_{ijk}^{abc} | \hat{W}_N \hat{T}_1 | 0 \rangle = 0, \quad D_{ijk}^{abc} t(d1)_{ijk}^{abc} = P(ij/k) P(ab/c) [t_k^c \langle ab || ij \rangle] \quad (53)$$

$$\langle \Phi_{ijk}^{abc} | \hat{f}_N^o \hat{T}_2 | 0 \rangle = 0, \quad D_{ijk}^{abc} t(d2)_{ijk}^{abc} = P(ij/k) P(ab/c) [t_{ij}^{ab} f_{kc}] \quad (54)$$

$$t(d)_{ijk}^{abc} = t(d1)_{ijk}^{abc} + t(d2)_{ijk}^{abc} \quad (55)$$

$$P(pq/r) = 1 - \mathcal{P}(pr) - \mathcal{P}(qr) \quad (56)$$

Burada \hat{f}_N^o , \hat{f}_N 'in diyagonal olmayan bloğudur. Son olarak pertürbatif üçlü uyarılma düzeltmesi için enerji ifadesi şu şekilde yazılabilir:

$$W = t(c)_{ijk}^{abc}, \quad V_{ijk}^{abc} = D_{ijk}^{abc} t_{ijk}^{abc} \quad (57)$$

$$E_{(T)} = \frac{1}{36} \sum_{i,j,k}^{N_{occ}} \sum_{a,b,c}^{N_{vir}} W_{ijk}^{abc} V_{ijk}^{abc} \quad (58)$$

$$E_{CCSD(T)} = E_{CCSD} + E_{(T)} \quad (59)$$

2.5. Molekül İçi Küme (Cluster-in-Molecule) Yaklaşımı

MP2, MP2.5, MP3, CCSD ve CCSD(T) yöntemleri için korelasyon enerjileri şu şekilde yazılabilir [18, 19, 21]:

$$E_{corr} = \sum_i^{N_{occ}} \Delta E_i \quad (60)$$

Bir i moleküler orbitalinden gelen bireysel katkılar,

$$\text{MP2, MP2.5 ve MP3 için;} \quad \Delta E_i = \frac{1}{4} \sum_j^{N_{occ}} \sum_{a,b}^{N_{vir}} t_{ij}^{ab} \langle ij || ab \rangle \quad (61)$$

$$\text{CCSD için;} \quad \Delta E_i = \sum_a^{N_{vir}} t_i^a f_{ia} + \frac{1}{4} \sum_j^{N_{occ}} \sum_{a,b}^{N_{vir}} \tau_{ij}^{ab} \langle ij || ab \rangle \quad (62)$$

$$\text{(T) katkısı için;} \quad \Delta E_i = \frac{1}{36} \sum_{j,k}^{N_{occ}} \sum_{a,b,c}^{N_{vir}} W_{ijk}^{abc} V_{ijk}^{abc} \quad (63)$$

şeklindedir. Burada ve bölüm boyunca MP2 için $t_{ij}^{ab} = t_{ij}^{ab(1)}$, MP2.5 için $t_{ij}^{ab} = (t_{ij}^{ab(1)} + \frac{1}{2}t_{ij}^{ab(2)})$ ve MP3 için $t_{ij}^{ab} = (t_{ij}^{ab(1)} + t_{ij}^{ab(2)})$ olarak tanımlanmıştır.

Merkezi i orbitallerinden oluşan bir $\{P_i\}$ ($\{P\}$, orbital alt sistemleri) seçilebilir. Ardından her $\{P\}$ için, i 'inci orbitalin enerjisi aşağıdaki şekilde yazılabilir [18, 19, 21];

$$\text{MP2, MP2.5 ve MP3; } \quad \Delta E_i^{\{P_i\}} = \frac{1}{4} \sum_{j \in \{P_i\}}^{N_{occ}} \sum_{a, b \in \{P_i\}}^{N_{vir}} t_{ij}^{ab} \langle ij || ab \rangle \quad (64)$$

$$\text{CCSD için; } \quad \Delta E_i^{\{P_i\}} = \sum_{a \in \{P_i\}}^{N_{vir}} t_i^a f_{ia} + \frac{1}{4} \sum_{j \in \{P_i\}}^{N_{occ}} \sum_{a, b \in \{P_i\}}^{N_{vir}} \tau_{ij}^{ab} \langle ij || ab \rangle \quad (65)$$

$$\text{(T) katkısı için; } \quad \Delta E_i^{\{P_i\}} = \frac{1}{36} \sum_{j, k \in \{P_i\}}^{N_{occ}} \sum_{a, b, c \in \{P_i\}}^{vir} W_{ijk}^{abc} V_{ijk}^{abc} \quad (66)$$

Tüm sistemin korelasyon enerjisi ise bu orbital alt sistemlerinden gelen katkıların bir toplamıdır ve tez kapsamında incelenecek olan Tek Çevreli CIM (*Single-Environment CIM*, SECIM) [19] algoritması için;

$$\Delta E_i = \frac{1}{M_i} \sum_{\{P_i\}} \Delta E_i^{\{P_i\}} \quad (67)$$

yazılabilir. Burada M_i , i orbitalinin kaç alt kümede merkezi olarak bulunduğu sayıdır. Böylece her i merkezi orbitali için, birden fazla kümede bulunuyorsa, hepsinden gelen katkının bir ortalaması hesaba katılmış olur.

2.6. Tek Çevreli CIM (Single-Environment CIM) Algoritması

1. HF çözümünden elde edilen çekirdek ve aktif dolu orbitaller ayrı ayrı lokalize edilir. Lokalizasyon için Boys prosedürü kullanılır [9]. Oluşan çekirdek LMO'lar $\phi_{i''}$, aktif dolu LMO'lar $\phi_{i'}$ olarak adlandırılır. Genel olarak dolu LMO'lar ϕ_i olarak adlandırılacaktır.
2. AO alanı $\Omega(i)$ olarak adlandırılan, dolu ϕ_i LMO'larıyla ilişkili atomların bir listesi oluşturulur. Bunun için her ϕ_i 'ye ait yoğunluk matrisleri oluşturulup bununla atomlar üzerindeki Mulliken orbital yükleri hesaplanır. Eğer ele alınan LMO'nun, bir atom üzerindeki yükü 0,15'i geçerse o atom ele alınan LMO ile eşleştirilir.

$$D_{\mu\nu}^{(i)} = C_{\mu i} C_{\nu i} \quad (68)$$

$$q_A^{(i)} = \sum_{\mu \in A} (\mathbf{D}^{(i)} \mathbf{S})_{\mu\mu} \quad (69)$$

$$S_{\mu\nu} = \langle \chi_\mu | \chi_\nu \rangle \quad (70)$$

Burada $D_{\mu\nu}^{(i)}$, ϕ_i LMO'suna ait yoğunluk matrisi, $C_{\mu i}$ MO dönüşüm katsayıları, $q_A^{(i)}$, A atomu üzerindeki ϕ_i LMO'sunun Mulliken yükü ve $S_{\mu\nu}$ ise örtüşme matrisidir. Tipik olarak, orbitaller iyi lokalize olduğunda her bir AO alanı $\Omega(i)$ bir (ϕ_i çekirdek veya eşleşmemiş çift LMO'su ise) veya iki atom içerir. $\Omega(i)$ AO alanları, CIM hesaplamalarında kullanılacak son orbital setlerini tanımlamak için 6. adımda kullanılacaktır.

3. Aktif dolu $\phi_{i'}$ LMO'larından bir merkezi orbital grubu $[i'_1, \dots, i'_\alpha]$ belirlemek için hidrojen dışındaki her bir atomun ve o atoma komşu hidrojen atomlarının her bir aktif dolu LMO'sunun Mulliken orbital yüklerinden yararlanır. Bir hidrojen olmayan atom veya onun komşu hidrojen atomları üzerinde, Mulliken orbital yükü 0,15'ü aşan $\phi_{i'}$ orbitalleri merkezi LMO grubuna karşılık gelir. Hidrojen olmayan bir A atomu ile bir

hidrojen atomu arasındaki mesafe $r(H) + r(A) + 0,168 \text{ \AA}$ 'dan küçükse, o hidrojen atomu A atomuna bağlı olarak tanımlanır, burada $r(H)$ ve $r(A)$ H ve A 'in van der Waals yarıçaplarıdır.

Çizelge 2.1.'de açık zincirli $C_{10}H_{24}$ molekülü için seçilen merkezi orbital grupları $[i'_1, \dots, i'_\alpha]$ biçiminde görülmektedir. HF orbitalleri enerjilerine göre küçükten büyüğe numaralandırılmıştır. Bu aşamada # kolonundaki numaralar hidrojen dışındaki atomlar ile ilişkilendirilebilir. İlk 10 orbital karbon atomlarının çekirdek orbitalleridir ve merkezi orbitaller aktif dolu orbitallerden oluşturulduğu için burada görülmemektedir. Bölüm boyunca verilecek olan örnekler bu sistem üzerine verilecektir. Örnek molekülde HF orbitalleri Pople baz seti ailesinden 3-21G baz seti ile elde edilmiştir [65]. Molekül geometrisi için EK 3'e bakınız.

Çizelge 2.1. Açık zincirli $C_{10}H_{24}$ molekülü için merkezi orbital grupları.

#	Merkezi Orbital Grupları
1	[16, 29, 33, 39]
2	[20, 23, 32, 33]
3	[12, 19, 32, 34]
4	[14, 21, 25, 34]
5	[13, 14, 27, 28]
6	[13, 15, 36, 40]
7	[15, 24, 26, 41]
8	[18, 35, 38, 41]
9	[11, 22, 30, 35]
10	[17, 30, 31, 37]

- Her bir hidrojen olmayan atoma ve onun komşu hidrojen atomlarına bir grup merkezi LMO $\phi_{i'}$ atandıktan sonra, bir eşik değeri (ζ) yardımıyla her merkezi orbital grubu $[i'_1, \dots, i'_\alpha]$ 'ya çevre orbitalleri eklenir. Bu da sistemin aktif dolu LMO'larına karşılık gelen tüm j' değerleri için $\langle \phi_{i'} | \hat{f} | \phi_{j'} \rangle$ Fock matris elemanlarına göre belirlenir. $\phi_{i'}$ 'in

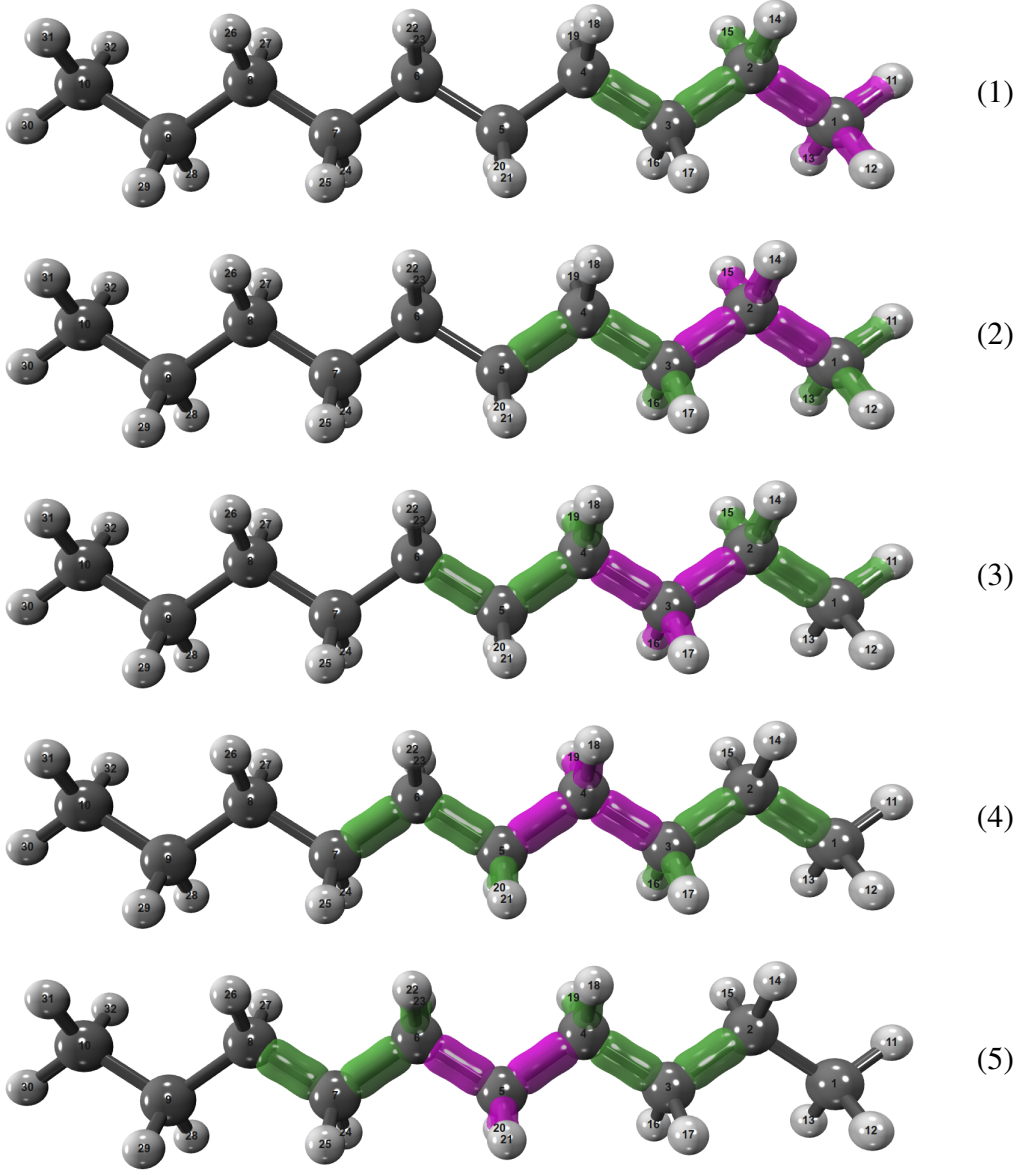
çevresi, $|\langle \phi_{i'} | \hat{f} | \phi_{j'} \rangle| > \zeta$ olan aktif $\phi_{i'}$ LMO'larından oluşur. Burada ζ uygun şekilde seçilmiş bir sayısal kriter ve \hat{f} ise Fock operatörüdür. Böylece merkezi ve çevre orbitallerden oluşan LMO alt kümeleri elde edilmiş olur. Bunlara *indirgenabilir LMO alanı* denir. Her bir indirgenebilir LMO alanı belirli bir hidrojen olmayan atoma ve onun komşu hidrojen atomlarına atanmıştır ve $[i'_1, \dots, i'_\alpha] = (i'_1, \dots, i'_\alpha | j'_1, \dots, j'_\beta)$ biçiminde gösterilebilir. Burada $\phi_{i'_1}, \dots, \phi_{i'_\alpha}$ ilgili merkezi LMO'lar ve $\phi_{j'_1}, \dots, \phi_{j'_\beta}$ ise karşılık gelen çevre orbitalleridir. Her aktif dolu LMO, en az bir indirgenebilir LMO alanında merkezi orbitaldir.

Çizelge 2.2.'de açık zincirli $C_{10}H_{24}$ molekülü için seçilen merkezi orbital gruplarına çevresel orbitallerin eklenmesiyle oluşturulan indirgenebilir LMO alanları $(i'_1, \dots, i'_\alpha | j'_1, \dots, j'_\beta)$ biçiminde görülmektedir.

Çizelge 2.2. Açık zincirli $C_{10}H_{24}$ molekülü için indirgenebilir LMO alanları.

#	İndirgenebilir LMO Alanları
r1	(16, 29, 33, 39 20, 23, 32, 34)
r2	(20, 23, 32, 33 12, 14, 16, 19, 29, 34, 39)
r3	(12, 19, 32, 34 13, 14, 16, 20, 21, 23, 25, 33)
r4	(14, 21, 25, 34 12, 13, 15, 19, 27, 28, 32, 33)
r5	(13, 14, 27, 28 15, 21, 25, 32, 34, 36, 40, 41)
r6	(13, 15, 36, 40 14, 24, 26, 27, 28, 34, 35, 41)
r7	(15, 24, 26, 41 13, 14, 18, 30, 35, 36, 38, 40)
r8	(18, 35, 38, 41 11, 13, 15, 22, 24, 26, 30, 31)
r9	(11, 22, 30, 35 15, 17, 18, 31, 37, 38, 41)
r10	(17, 30, 31, 37 11, 22, 35, 41)

Şekil 2.1.'de açık zincirli $C_{10}H_{24}$ molekülü için ilk 5 indirgenebilir LMO alanı temsili verilmiştir. İndirgenebilir LMO alanını belirlerken kullanılan ζ parametresi bu örnek için 0,02 (a.u.) olarak kullanılmıştır. Bu parametrenin daha küçük tutulması, her bir alan için yeşil renkle gösterilen çevresel LMO'ların sayısını artıracaktır.



Şekil 2.1. $C_{10}H_{24}$ molekülü için sıralı şekilde ilk 5 indirgenebilir LMO alanı temsili. Mor renkle gösterilen LMO'lar merkezi LMO'lar, yeşil renkle gösterilenler ise çevresel LMO'lardır.

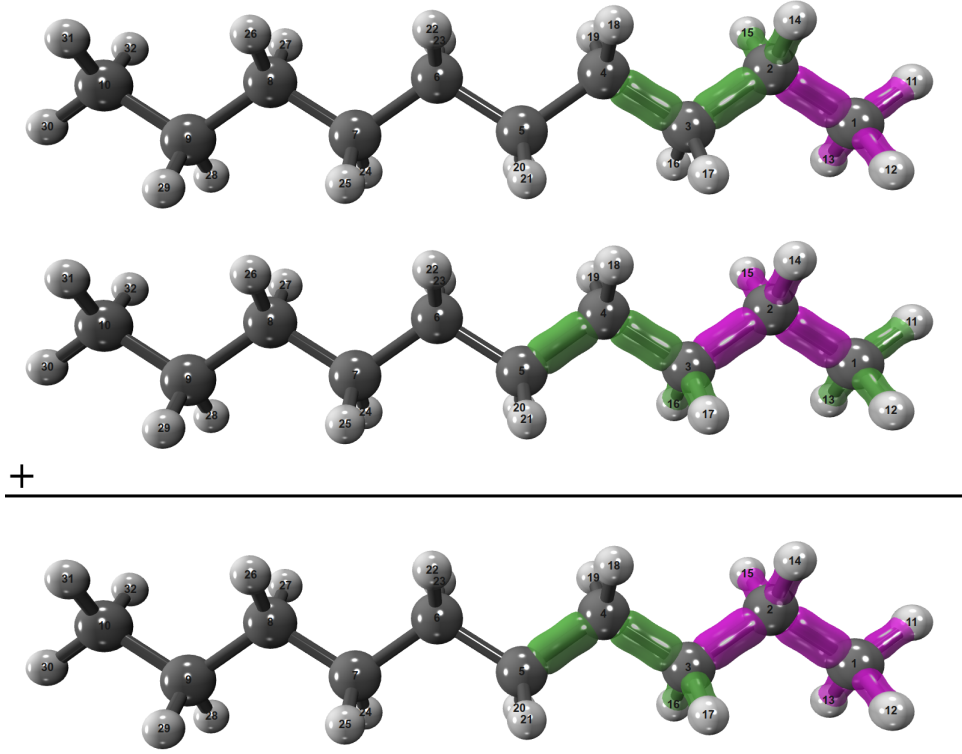
5. Bazı küçük indirgenebilir LMO alanları, daha büyük indirgenebilir alanlardan bir veya daha fazlasının içinde olabilir. Bu durumda, küçük indirgenebilir LMO alanları kaldırılır ve bu küçük indirgenebilir alanların merkezi orbitalleri, onları kapsayan büyük alanların hepsinde merkezi yapılıdır. Bu işlemi, alanları analiz edip tekrarlayarak en son, 4. adımda elde edilen indirgenebilir LMO alanlarından, merkezi ve çevre orbitallerinden oluşan, en az sayıda *indirgenemez LMO alanları* kümesi elde edilir. Her bir indirgenemez LMO alanının bileşimi, $(i'_1, \dots, i'_\delta | j'_1, \dots, j'_\epsilon)$ olarak gösterilebilir. Burada $\phi_{i'_1}, \dots, \phi_{i'_\delta}$, ilgili merkezi orbitallerdir ve $\phi_{j'_1}, \dots, \phi_{j'_\epsilon}$, çevreyi tanımlayan LMO'lardır. İndirgenemez LMO alanı için kısaltılmış gösterim (i'_1, \dots, i'_δ) 'dir. Belirli bir indirgenemez LMO alanının merkez ve çevre orbitalleri, ilgili $\{P\}$ alt sisteminin dolu LMO'larını tanımlar. 3. adımda belirtilen üzere, birleşmeden sonra da her bir aktif dolu LMO, en az bir $\{P\}$ alt sisteminde merkezi olmalıdır.

Çizelge 2.2.'de 2 no.lu alanın 1 no.lu alanı, 10 no.lu alanın ise 9 no.lu alanı kapsadığı görülmektedir. Çizelge 2.3.'de açık zincirli $C_{10}H_{24}$ molekülü için birbirini kapsayan indirgenebilir LMO alanlarının birleştirilmesiyle oluşturulan indirgenemez LMO alanları $(i'_1, \dots, i'_\delta | j'_1, \dots, j'_\epsilon)$ biçiminde görülmektedir. Bu aşamadan itibaren indirgenemez LMO alanlarının numaraları hidrojen dışındaki atomlarla tam olarak ilişkilendirilemez. Bu numaralar sonraki adımlarda genişletilmiş veya genişletilmemiş alt sistemlerin numaraları olarak ele alınabilir.

Çizelge 2.3. Açık zincirli $C_{10}H_{24}$ molekülü için indirgenemez LMO alanları ve onları oluşturulan indirgenebilir LMO alanları.

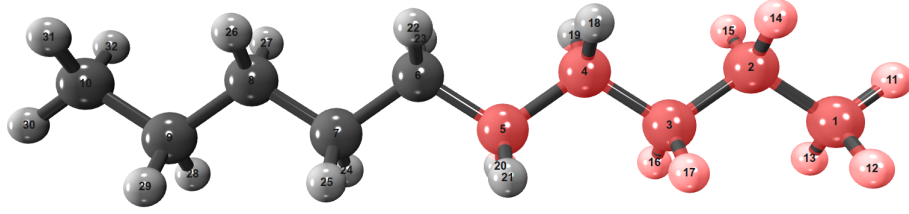
#	İndirgenemez LMO Alanları	Bileşimi
i1	(16, 20, 23, 29, 32, 33, 39 12, 14, 19, 34)	r1+r2
i2	(12, 19, 32, 34 13, 14, 16, 20, 21, 23, 25, 33)	r3
i3	(14, 21, 25, 34 12, 13, 15, 19, 27, 28, 32, 33)	r4
i4	(13, 14, 27, 28 15, 21, 25, 32, 34, 36, 40, 41)	r5
i5	(13, 15, 36, 40 14, 24, 26, 27, 28, 34, 35, 41)	r6
i6	(15, 24, 26, 41 13, 14, 18, 30, 35, 36, 38, 40)	r7
i7	(18, 35, 38, 41 11, 13, 15, 22, 24, 26, 30, 31)	r8
i8	(11, 17, 22, 30, 31, 35, 37 15, 18, 38, 41)	r9+r10

Şekil 2.2.'de açık zincirli $C_{10}H_{24}$ molekülü için Şekil 2.1.'de verilen 1 ve 2 no.lu indirgenebilir LMO alanı ve bunların birleşmesiyle oluşan indirgenemez LMO alanı temsili görülmektedir. Şekil 2.2.'de görülen 1 ve 2 no.lu indirgenebilir LMO alanında var olan merkezi orbitallerin, alanlar birleştikten sonra merkezi özelliklerini koruduklarına dikkat edilmelidir. Genel anlamda ζ parametresi küçüldükçe daha büyük alanlar oluşacağından, indirgenebilir LMO alanlarının birbirini içermeye ihtimali artmaktadır. Bu, birleşmeler sonucu oluşan indirgenemez LMO alanlarının merkezi orbital sayılarının artmasına neden olacaktır.



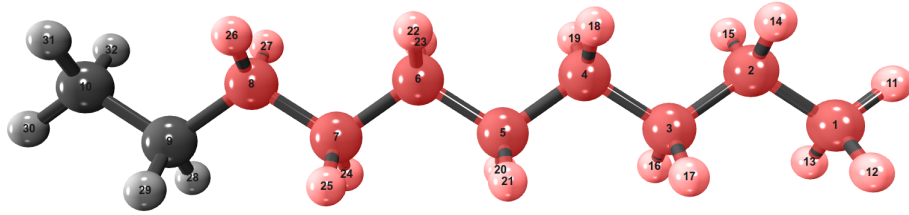
Şekil 2.2. Birbirini içeren indirgenebilir LMO alanlarından indirgenemez LMO alanı oluşturma temsili. Mor renkle gösterilen LMO'lar merkezi LMO'lar, yeşil renkle gösterilenler ise çevresel LMO'lardır.

6. Bu adımdan itibaren alt sistemler için genel dolu orbital indisleri kullanılacaktır. $\{P_i\}$ alt sistemini tanımlayan merkezi spin-orbitallerinin içinden belirli bir dolu spin-orbitalden gelen korelasyon enerji katkısını hesaplamak için, $\{P_i\}$ ile ilişkili uygun boş LMO setinin belirlenmesi gerekmektedir. Bu, önce 7-9. adımlarda izlenerek $\{\bar{P}_i\}$ ($\{\bar{P}_i\} \supseteq \{P_i\}$) genişletilmiş alt sistemine karşılık gelen yansıtılmış dolu LMO'ların ve PAO'ların belirlenmesiyle gerçekleştirilir. Ardından oluşturulan PAO'lar ortogonalize edilir, fazlalıklardan temizlenir ve 10 ve 11. adımda anlatıldığı şekilde $\{P_i\}$ 'nin AO alanına yansıtılır. $\{P\}$ 'ye karşılık gelen AO setinden oluşan $\{P\}$ alt sisteminin AO alanı, $\Omega(P)$ ile gösterilir ve $\{P\}$ alt sistemine ait olan tüm dolu LMO ϕ_i 'lerin 2. adımda belirlenen $\Omega(i)$ AO alanlarının birleştirilmesiyle elde edilir.



Şekil 2.3. İndirgenemez LMO alanındaki LMO'lar ile ilişkili atomlar (kırmızı ile işaretlenmiş).

$\{P\}$ alt sistemi ile ilişkili tampon atomlar, $\{P\}$ alt sisteminin herhangi bir atomundan 4,0 Å'luk bir mesafe içindeki hidrojen olmayan tüm atomlar ve $\{P\}$ alt sisteminin ve tamponunun hidrojen olmayan atomlarına bağlı tüm hidrojen atomları olarak tanımlanır. $\{P\}$ alt sisteminin atomlarına ve onun tampon atomlarına karşılık gelen AO'lar, $\Omega(\bar{P})$ olarak adlandırılan genişletilmiş alt sistem $\{\bar{P}\}$ 'nin AO alanını oluşturur. $\Omega(\bar{P})$ 'daki tüm AO'ların sayısı $N_{ao}^{\bar{P}}$ ile gösterilir. Tanım itibariyle, $\Omega(\bar{P}) \supseteq \Omega(P)$ 'dir.

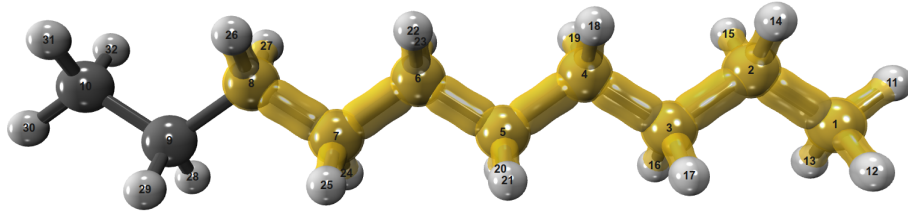


Şekil 2.4. Genişletilmiş alt sistem $\{\bar{P}\}$ ile ilişkili atomlar (kırmızı ile işaretlenmiş).

Şekil 2.3.'te açık zincirli C₁₀H₂₄ molekülü için Şekil 2.2.'de ele alınan alt sisteme ait LMO'ların 2. adımda oluşturulan listeye göre ilişkili olduğu atomlar (kırmızı ile işaretlenmiş) görülmektedir. Bu atomlar alt sistemin atomlarıdır. Daha sonrasında bu atomlar için yukarıda belirtilen kurallara göre tampon atomlar eklenerek genişletilmiş alt sistemin atomları belirlenir. Şekil 2.4.'de işaretli atomlar ele alınan genişletilmiş alt sistemin atomlarıdır. Yukarıda da belirtildiği üzere, bu adımda belirlenen atomların AO'ları sırasıyla, ilgili alt sistemin ve genişletilmiş alt sistemin AO alanları olan $\Omega(P)$ ve $\Omega(\bar{P})$ 'dir.

7. Genişletilmiş alt sistem $\{\bar{P}\}$ ile ilişkili dolu LMO'lar şunları içerir:

- (i) $\{\bar{P}\}$ atomlarıyla ilişkili tüm çekirdek LMO'lar,
- (ii) $\{P\}$ alt sisteminin tüm aktif dolu LMO'ları ve
- (iii) (i) ve (ii)'de yer alanlar dışında, 2. adımda oluşturulan AO alanları hakkındaki bilgilere dayanarak $\{\bar{P}\}$ 'ya atanabilen ek dolu LMO'lar. 2. adımda belirlenen ilgili $\Omega(i)$ AO alanı tamamen $\{\bar{P}\}$ 'nin AO alanına dahilse, ek dolu LMO ϕ_i genişletilmiş alt sistem $\{\bar{P}\}$ 'ye atanır. Örneğin, belirli bir dolu LMO ϕ_i 'nin AO alanı iki atomun AO'larını içeriyorsa ve bu iki atomdan biri $\{\bar{P}\}$ 'de, diğeri $\{\bar{P}\}$ 'nin dışında ise bu ϕ_i orbitali $\{\bar{P}\}$ 'ye atanmaz. $\{\bar{P}\}$ ile ilişkili dolu LMO'ların sayısı $N_{occ}^{\bar{P}}$ ile gösterilir.



Şekil 2.5. Genişletilmiş alt sistem $\{\bar{P}\}$ ile ilişkili dolu LMO'lar.

Şekil 2.5.'te açık zincirli $C_{10}H_{24}$ molekülü için Şekil 2.4.'de ele alınan genişletilmiş alt sistemin atomları ile etkileşen LMO'lar görülmektedir.

8. Her bir genişletilmiş alt sistem $\{\bar{P}\}$ ile ilişkili olan dolu LMO ϕ_i 'ler ve tüm χ_μ AO'ları belirlendikten sonra, Boughton ve Pulay'ın yöntemi takip edilir [66]. Şu ana kadar tüm sistemin AO'larının bir doğrusal birleşimi olarak tarif edilen, $\{\bar{P}\}$ 'ye karşılık gelen her dolu LMO ϕ_i , $\Omega(\bar{P})$ AO alanı üzerine yansıtılır. Böylece genişletilmiş alt sistem $\{\bar{P}\}$ 'ye atanan tüm dolu LMO'lar, yalnızca bu belirli $\{\bar{P}\}$ ile ilişkili $N_{ao}^{\bar{P}}$ kadar AO'nun doğrusal birleşimiyle tarif edilmiş olur. Ortaya çıkan $\bar{\phi}_i$ orbitalleri şu şekilde tanımlanır:

$$\bar{\phi}_i = \sum_{\mu \in \Omega(\bar{P})}^{N_{ao}^{\bar{P}}} \bar{C}_{\mu i} \chi_\mu \quad (71)$$

burada $\bar{C}_{\mu i}$ doğrusal açılım katsayıları, her yeni $\bar{\phi}_i \in \{\bar{P}\}$ orbitalini orijinal ϕ_i LMO'suna mümkün olduğunca benzetmek için $(\bar{\phi}_i - \phi_i)$ normunun karesi minimize edilerek belirlenir. Bu, her i için $N_{ao}^{\bar{P}}$ sayıda $\bar{C}_{\mu i}$ katsayısı, $\mu \in \Omega(\bar{P})$ için, $N_{ao}^{\bar{P}}$ sayıda doğrusal denklem sistemi demektir [23, 66, 67].

$$\sum_{\nu \in \Omega(\bar{P})}^{N_{ao}^{\bar{P}}} S_{\mu\nu} \bar{C}_{\nu i} = \sum_{\lambda} S_{\mu\lambda} C_{\lambda i}, \quad \mu \in \Omega(\bar{P}) \quad (72)$$

Eşitliği biraz daha düzenlersek;

$$\bar{C}_{\mu i} = \sum_{\nu \in \Omega(\bar{P})}^{N_{ao}^{\bar{P}}} S_{\mu\nu}^{-1} \sum_{\lambda} S_{\nu\lambda} C_{\lambda i}, \quad \mu \in \Omega(\bar{P}) \quad (73)$$

şeklinde bir açık ifadeye ulaşılır. Bugüne kadar edinilen deneyimler, genişletilmiş alt sistem $\{\bar{P}\}$ 'ye atanmış orijinal ϕ_i LMO'larının, $\Omega(\bar{P})$ AO alanına yansıtılmasıyla elde edilmiş $\bar{\phi}_i$ LMO'larının, tam anlamıyla ortogonal olmasa da, ortogonalliğe çok yakın olduğunu göstermektedir [17, 18]. Bu nedenle, pratikte CIM hesaplamalarında (yeniden normalize edildikten sonra) kesinlikle ortogonallermiş gibi güvenle kullanılabilir. CIM hesaplamalarında her bir ϕ_i , $\Omega(\bar{P})$ üzerine yansıtıldıktan sonra, simetrik ortogonalizasyon uygulanmış $\bar{\phi}_i$ orbitalleri yerine, yeniden ortogonalize edilmeden, ham $\bar{\phi}_i$ LMO'ları kullanılırsa, CIM korelasyon enerjisinde sadece milihartree ölçeğinde küçük değişimlere yol açmaktadır.

9. Saebø ve Pulay'ın yöntemi takip edilerek, yansıtılmış ortonormal veya ortogonalizasyon tercih edilmezse, yaklaşık olarak ortogonal ve normalize edilmiş dolu $\bar{\phi}_i$ LMO'ları belirlendikten sonra, $\bar{\chi}_\lambda$ PAO'ları hesaplanarak genişletilmiş alt sistem $\{\bar{P}\}$ ile ilişkili boş orbitaller oluşturulur [11, 12, 68, 69],

$$|\bar{\chi}_\lambda\rangle = \left(1 - \sum_{i=1}^{N_{occ}^{\bar{P}}} |\bar{\phi}_i\rangle \langle \bar{\phi}_i| \right) |\chi_\lambda\rangle = \sum_{\mu \in \Omega(\bar{P})}^{N_{ao}^{\bar{P}}} R_{\mu\lambda} |\chi_\lambda\rangle \quad (74)$$

burada, 7. adımda gösterildiği gibi $N_{occ}^{\bar{P}}$, ilgili çekirdek orbitaller dahil olmak üzere $\{\bar{P}\}$ 'deki dolu LMO'ların sayısıdır ve $N_{ao}^{\bar{P}}$, genişletilmiş alt sistem $\{\bar{P}\}$ 'nin $\Omega(\bar{P})$ AO alanındaki tüm AO'larının toplam sayısıdır. Genişletilmiş alt sistem $\{\bar{P}\}$ ile ilişkili boş orbital uzayını oluşturmak için $\bar{\chi}_\lambda$ PAO'ları kullanılır. Yansıtılmış $\bar{\chi}_\lambda$ atomik fonksiyonları, ilgili orijinal χ_λ AO'ları ile aynı atomik merkezlerde lokalizedir [11, 12, 68, 69]. \mathbf{R} , $N_{ao}^{\bar{P}} \times N_{ao}^{\bar{P}}$ boyutlarında $\bar{\chi}_\lambda$ PAO'larını tanımlayan $R_{\mu\lambda}$ doğrusal açılım katsayıları matrisi,

$$\mathbf{R} = \mathbf{1} - \bar{\mathbf{C}}^{(o)}(\bar{\mathbf{C}}^{(o)})^\dagger \mathbf{S} \quad (75)$$

eşitliği ile belirlenebilir. Burada $\mathbf{1}$, $N_{ao}^{\bar{P}} \times N_{ao}^{\bar{P}}$ birim matris, $\bar{\mathbf{C}}^{(o)}$, $N_{ao}^{\bar{P}} \times N_{occ}^{\bar{P}}$ boyutlarında yansıtılmış dolu $\bar{\phi}_i$ LMO'larını tanımlayan $\bar{C}_{\mu i}$ doğrusal açılım katsayıları matrisidir ve \mathbf{S} , genişletilmiş AO alanı $\Omega(\bar{P})$ 'deki χ_μ AO'larını içeren $N_{ao}^{\bar{P}} \times N_{ao}^{\bar{P}}$ boyutlarında örtüşme matrisi $S_{\mu\nu} = \langle \chi_\mu | \chi_\nu \rangle$ 'dür.

10. Eşitlik (74) ile tanımlanan $\bar{\chi}_\lambda$ PAO'ları, orijinal χ_λ AO'ları ile aynı atomik merkezlerde lokalizedir ve bu nedenle genişletilmiş alt sistem $\{\bar{P}\}$ ile ilişkili boş LMO'ları oluşturmak için bir baz oluşturabilir. Ancak bu PAO'lar, doğrusal olarak bağımlı olduklarından ve ortogonal olmadıklarından CIM hesaplamalarında kullanılabilmeleri için üzerlerinde ek işlemler yapılmalıdır. İlgili $\bar{\mathbf{S}}$ örtüşme matrisi bir köşegen matris değildir ve $N_{occ}^{\bar{P}}$ kadar özdeğeri sıfırdır. $\bar{S}_{\lambda\sigma} = \langle \bar{\chi}_\lambda | \bar{\chi}_\sigma \rangle$,

$$\bar{\mathbf{S}} = \mathbf{R}^\dagger \mathbf{S} \mathbf{R} \quad (76)$$

ifadesi kullanılarak hesaplanabilir. Burada \mathbf{S} , genişletilmiş AO alanı $\Omega(\bar{P})$ 'deki χ_μ AO'larını içeren $N_{ao}^{\bar{P}} \times N_{ao}^{\bar{P}}$ boyutlarında örtüşme matrisi $S_{\mu\nu} = \langle \chi_\mu | \chi_\nu \rangle$ 'dür. Böylece, doğrusal olarak bağımlı olan ve ortogonal olmayan $\bar{\chi}_\lambda$ PAO'lar seti, ortonormal ve fazlalıksız bir $N_{vir}^{\bar{P}} = N_{ao}^{\bar{P}} - N_{occ}^{\bar{P}}$ sayıda boş orbital setine dönüştürülür. Artık

genişletilmiş alt sistem $\{\bar{P}\}$ ile ilişkili boş $\bar{\phi}_a$ LMO'lar belirlenebilir.

$$\bar{\phi}_a = \sum_{\lambda \in \Omega(\bar{P})}^{N_{ao}^{\bar{P}}} \bar{C}_{\lambda a} \bar{\chi}_\lambda = \sum_{\mu \in \Omega(\bar{P})}^{N_{ao}^{\bar{P}}} \left(\mathbf{R}\bar{\mathbf{C}}^{(v)} \right)_{\mu a} \chi_\mu \quad (77)$$

burada bilinmeyen $\bar{C}_{\mu a}$ dönüşüm katsayıları, $N_{occ}^{\bar{P}}$ sayıda orbitali elimine edilen $\bar{\chi}_\lambda$ PAO'larının kanonik ortonormalizasyonunu gerçekleştirerek belirlenir. Bunu yapmak için, $\bar{\mathbf{S}}$ örtüşme matrisi köşegen hale getirilir.

$$\mathbf{\Lambda} = \mathbf{U}^\dagger \bar{\mathbf{S}} \mathbf{U} \quad (78)$$

\mathbf{U} dönüşüm matrisinde $\bar{\mathbf{S}}$ 'nin sıfır özdeğerlerine karşılık gelen $N_{occ}^{\bar{P}}$ sayıda sütunu ve $\mathbf{\Lambda}$ 'da sıfır olan köşegen elemanlar kaldırılır. Artık sıfır özdeğeri olmayan $N_{ao}^{\bar{P}} \times N_{vir}^{\bar{P}}$ boyutlarında dönüşüm matrisi \mathbf{U}' ve $N_{vir}^{\bar{P}} \times N_{vir}^{\bar{P}}$ boyutlarında köşegen $\mathbf{\Lambda}'$ matrisi,

$$\bar{\mathbf{C}}^{(v)} = \mathbf{U}' (\mathbf{\Lambda}')^{-1/2} \quad (79)$$

eşitliğinde kullanılarak $N_{vir}^{\bar{P}}$ sayıda ortonormal set ile $\bar{\phi}_a$ orbitallerini tanımlayan $N_{ao}^{\bar{P}} \times N_{vir}^{\bar{P}}$ boyutlarında $\bar{C}_{\mu a}$ katsayı matrisi hesaplanır. Elde edilen $\bar{\phi}_a$ orbitalleri ortonormal olduğu için aşağıdaki eşitlik sağlanmalıdır.

$$(\bar{\mathbf{C}}^{(v)})^\dagger \bar{\mathbf{S}} \bar{\mathbf{C}}^{(v)} = (\mathbf{\Lambda}')^{-1/2} (\mathbf{U}')^\dagger \bar{\mathbf{S}} \mathbf{U}' (\mathbf{\Lambda}')^{-1/2} = (\mathbf{\Lambda}')^{-1/2} \mathbf{\Lambda}' (\mathbf{\Lambda}')^{-1/2} = \mathbf{1} \quad (80)$$

$\mathbf{1}$, $N_{vir}^{\bar{P}} \times N_{vir}^{\bar{P}}$ boyutlarındaki birim matrisdir. Bu adım $\bar{\phi}_a$ orbitallerinin Boys Lokalizasyonu kullanılarak lokalize edilmesiyle sonlandırılır.

11. Bu adıma kadar, her bir genişletilmiş alt sistem $\{\bar{P}\}$ için iki orbital seti mevcuttur,

- (i) $N_{occ}^{\bar{P}}$ sayıda ortonormal veya ortagonalize edilmemişlerse [bkz. adım 8], yaklaşık olarak ortogonal ve normalize edilmiş dolu $\bar{\phi}_i$ LMO'ları ve
- (ii) $N_{vir}^{\bar{P}}$ sayıda fazlalıksız, ortonormal ve lokalize $\bar{\phi}_a$ PAO'ları.

Bu iki set de, $\Omega(P)$ AO alanı, yani $\{P\}$ alt sistemine karşılık gelen AO'ları içeren bir alt kümenin doğrusal birleşimleri olarak ifade edilmelidir. Bunun için her bir genişletilmiş alan $\{\bar{P}\}$ 'yi tanımlayan $\bar{\phi}_i$ ve $\bar{\phi}_a$ orbitalleri $\Omega(P)$ AO alanına yansıtılır. Sonuç olarak elde edilecek, belirli bir alt sistem $\{P\}$ 'yi tanımlayan dolu ve boş LMO $\tilde{\phi}_i$ ve $\tilde{\phi}_a$ 'ler, 6. adımda bahsedilen AO alanı $\Omega(P)$ vasıtasıyla bu alt sisteme atanan nispeten küçük AO setinin doğrusal birleşimleri olarak ifade edilmiş olur. $\bar{\phi}_i$ orbitallerine benzer şekilde, LMO $\tilde{\phi}_p$ 'ları yapmak için sırasıyla $(\tilde{\phi}_i - \bar{\phi}_i)$ ve $(\tilde{\phi}_a - \bar{\phi}_a)$ normlarının karelerini minimize ederek CIM korelasyon enerji hesaplamaları için son $\tilde{\phi}_i$ ve $\tilde{\phi}_a$ orbitalleri elde edilir. Burada $\tilde{\phi}_p$, $p = i$ veya a olmak üzere, karşılık gelen genişletilmiş alt sistem $\{\bar{P}\}$ 'deki LMO $\bar{\phi}_p$ 'lere mümkün olduğunca benzetilerek her bir alt sistem $\{P\}$ 'yi tanımlayan orbitallerdir.

$$\tilde{\phi}_p = \sum_{\mu \in \Omega(P)}^{N_{ao}^P} \tilde{C}_{\mu p} \chi_{\mu} \quad (81)$$

Burada, $p = i$ ve a sırasıyla dolu ve boş orbitaller, N_{ao}^P , $\{P\}$ alt sisteminin $\Omega(P)$ AO alanındaki AO sayısıdır. Doğrusal açılım katsayıları $\tilde{C}_{\mu p}$, $\mu \in \Omega(P)$ için, $\|\tilde{\phi}_p - \bar{\phi}_p\|^2$ 'nin minimize edilmesiyle belirlenir. Her p için N_{ao}^P adet $\tilde{C}_{\mu p}$ [$\mu \in \Omega(P)$] katsayısı, N_{ao}^P adet doğrusal denklem sistemi çözülerek bulunur.

$$\tilde{C}_{\mu i} = \sum_{\nu \in \Omega(P)}^{N_{ao}^P} S_{\mu\nu}^{-1} \sum_{\lambda \in \Omega(\bar{P})}^{N_{ao}^{\bar{P}}} S_{\nu\lambda} \bar{C}_{\lambda i}, \quad \mu \in \Omega(P) \quad (82)$$

$$\tilde{C}_{\mu a} = \sum_{\nu \in \Omega(P)}^{N_{ao}^P} S_{\mu\nu}^{-1} \sum_{\lambda \in \Omega(\bar{P})}^{N_{ao}^{\bar{P}}} S_{\nu\lambda} \bar{C}_{\lambda a}, \quad \mu \in \Omega(P) \quad (83)$$

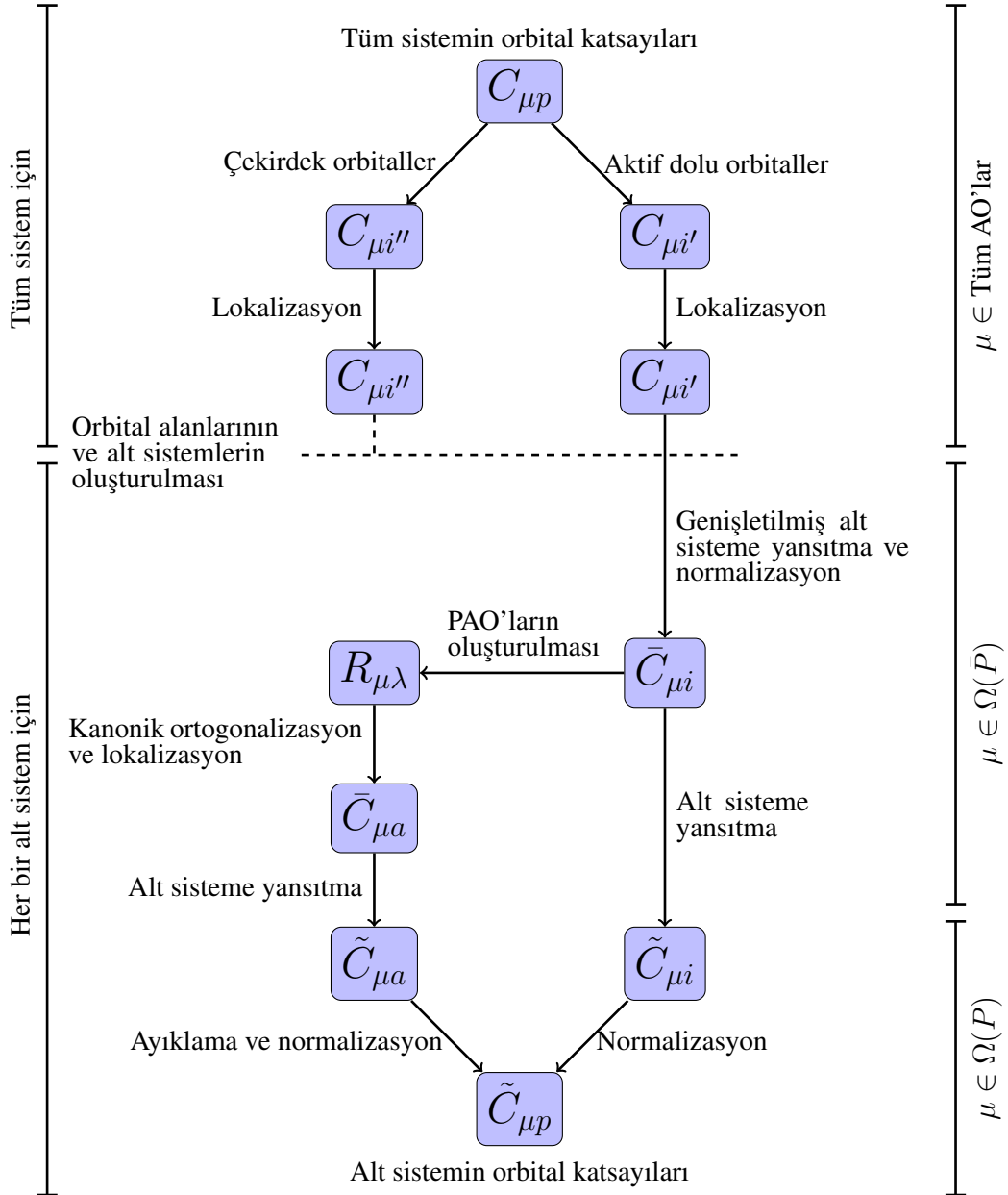
5. adımda anlatıldığı gibi CIM hesaplamaları için dolu LMO $\tilde{\phi}_i$ 'lerin son kümesi belirlenirken yalnızca belirli bir alt sistem $\{P\}$ ile ilişkili aktif dolu orbitallere odaklanılır. Yani 7. adımda genişletilmiş alt sistemleri oluşturmak için eklenen çekirdek ve ek dolu LMO'lar artık dikkate alınmamaktadır. Ancak alt sistemler için genel dolu LMO indisleri kullanılmaya devam edilecektir. N_{occ}^P , $\{P\}$ alt

sistemi ile ilişkili aktif dolu $\tilde{\phi}_i$ orbitallerinin sayısını belirtir ve $N_{occ}^P < N_{occ}^{\bar{P}} \ll N_{occ}$ olacaktır. Burada $N_{occ}^{\bar{P}}$ genişletilmiş alt sistem $\{\bar{P}\}$ 'deki dolu orbitallerin sayısıdır ve N_{occ} tüm sistemdeki dolu orbitallerin toplam sayısıdır. Ayrıca, $\bar{\phi}_i$ orbitallerine benzer şekilde Eşitlik (71), dolu LMO $\tilde{\phi}_i$ 'leri belirlemek için çok iyi bir yaklaşımdır. Yine benzer şekilde $\tilde{\phi}_i$ orbitalleri ortogonaldir ve bu nedenle yeniden normalize edildikten sonra kesinlikle ortonormalmiş gibi CIM hesaplamalarında güvenle kullanılabilir. $\bar{\phi}_i$ orbitallerinin AO alanı $\Omega(P)$ üzerine yansıtılmasıyla elde edilen $\tilde{\phi}_i$ orbitalleri simetrik ortogonalizasyon prosedürü kullanılarak yeniden ortogonalize ve normalize edilir. Ancak bugüne kadar edinilen deneyimler, dolu $\tilde{\phi}_i$ orbitallerinin ek simetrik ortogonalizasyonunun CIM korelasyon enerjilerinde mikrohartree seviyesinde değişiklikler yaptığını göstermektedir [17, 18]. Ancak durum boş $\tilde{\phi}_a$ orbitallerinde farklıdır. Genişletilmiş alt sistem $\{\bar{P}\}$ 'ye karşılık gelen boş $\bar{\phi}_a$ orbitallerinden bazıları, $\Omega(P)$ üzerine yansıtıldığında önemli ölçüde değişir. Bu nedenle, yalnızca $\|\tilde{\phi}_a - \bar{\phi}_a\| < \eta$ koşulunu sağlayan $\Omega(P)$ -yansıtılmış $\tilde{\phi}_a$ orbitalleri seçilir. Bu, her a için aşağıdaki eşitsizlik ile yapılır. Koşula uymayan a 'lar $\tilde{C}_{\mu a}$ matrisinden silinir.

$$\text{Her } a \text{ için; } \quad 1 - \sum_{\mu \in \Omega(P)}^{N_{ao}^P} \tilde{C}_{\mu}^{(a)} \sum_{\nu \in \Omega(\bar{P})}^{N_{ao}^{\bar{P}}} S_{\mu\nu} \bar{C}_{\nu}^{(a)} < \eta \quad (84)$$

Burada η uygun bir eşik değeridir. Bu eşikle seçilen orbitaller, AO alanı $\Omega(P)$ içindeki sağlıklı orbitallerdir. Genellikle η değeri 0,2 civarında kullanılır. $N_{vir}^P, \{P\}$ alt sistemi ile ilişkili ve CIM hesaplamalarında kullanılacak son boş $\tilde{\phi}_a$ orbitallerinin sayısını belirtmek üzere, $N_{vir}^P < N_{vir}^{\bar{P}} \ll N_{vir}$ olacaktır. Burada $N_{vir}^{\bar{P}}$ genişletilmiş alt sistem $\{\bar{P}\}$ 'deki boş orbitallerin sayısıdır ve N_{vir} , büyük sistemdeki tüm boş orbitallerin toplam sayısıdır. Dolu $\tilde{\phi}_i$ orbitallerine benzer şekilde, $\Omega(P)$ AO alanına ortonormal $\bar{\phi}_a$ orbitallerinin yansıtılmasıyla elde edilen boş $\tilde{\phi}_a$ orbitalleri, çok iyi bir yakınlıkta birbirine ve dolu $\tilde{\phi}_i$ orbitallerine ortogonaldir. Bu nedenle, ortonormal bazlar için geliştirilmiş CIM hesaplamalarında güvenle kullanılabilir. Bugüne kadar edinilen deneyimler, boş $\tilde{\phi}_a$ orbitallerinin birbirine ve dolu $\tilde{\phi}_i$ orbitallerine katı bir

şekilde ortogonalliğe zorlayarak boş LMO $\tilde{\phi}_a$ 'ları seçmek için daha gevşek bir η değeri kullanmanın daha iyi olduğunu göstermektedir [18]. $\|\tilde{\phi}_p - \bar{\phi}_p\|^2$ 'nin minimize edilmesi, $\|\tilde{\phi}_a - \bar{\phi}_a\| < \eta$ 'yi sağlamayan orbitallerin elimine edilmesi ve kalan $\tilde{\phi}_a$ orbitallerinin ek bir yeniden ortogonalizasyon olmaksızın normalize edilmesiyle elde edilen boş ve yaklaşık olarak ortogonal $\tilde{\phi}_a$ orbitallerinin kullanılması yeterlidir.



Şekil 2.6. Alt sistemin orbital katsayılarının elde edilmesi için şematik gösterim.

Son aşama tamamlandıktan sonra alt sistemin atomlarına ait AO'lar, alt sisteme ait dolu ve boş LMO'lar ile enerji hesabına geçilebilir. Yeni oluşan orbitaller kanonik olmayacağından MP2 ve CCSD(T) için iteratif çözüm gerekecektir. Ancak orbitallere yarı kanonik yaklaştırması uygulanarak iteratif olmayan çözümle devam edilebilir. Ayrıca yarı kanonik yaklaştırmasının CCSD iterasyonlarının yakınsamasını hızlandırdığı da bilinmektedir [18]. Yarı kanonikleştirme için orbitaller, LMO bazındaki Fock matrisinin dolu ve boş orbitallere karşılık gelen bloklarının diyagonal olduğu baza dönüştürülür. Bu bazdaki orbitallere yarı kanonik moleküler orbital (*Semi-Canonical Molecular Orbital*, SCMO) denir. SCMO dönüşüm matrisi \mathbf{K} aşağıdaki şekilde elde edilebilir.

$$\mathbf{F} = \mathbf{K}^\dagger \mathbf{L} \mathbf{K} \quad (85)$$

Burada LMO bazındaki Fock matrisi alt sistemin orbital katsayılarıyla dönüştürülerek elde edilir.

$$F_{pq} = \sum_{\mu, \nu \in \Omega(P)} \tilde{C}_{\mu p} \tilde{C}_{\nu q} F_{\mu \nu} \quad (86)$$

SCMO orbital katsayılar ise aşağıdaki eşitlikle elde edilebilir. I, J, K, L, \dots dolu SCMO'ları tarif eden, A, B, C, D, \dots boş SCMO'ları tarif eden ve P, Q, R, S, \dots ise genel SCMO'ları tarif eden indisler olarak kullanılacaktır. SCMO indisleri ile karışmaması için DF faktörlerinde yardımcı baz seti sayısı üzerinden dönen indis X ile gösterilecektir.

$$\tilde{C}_{\mu P} = \sum_p K_{Pp} \tilde{C}_{\mu p} \quad (87)$$

Korelasyon hesaplamalarında kullanılacak iki elektron integralleri de bu orbital katsayıları ile dönüştürülür.

$$b_{PQ}^X = \sum_{\mu, \nu \in \Omega(P)} \tilde{C}_{\mu P} \tilde{C}_{\nu Q} b_{\mu \nu}^X \quad (88)$$

MP ve CC uyarma katsayılar için hesaplamalar SCMO bazında sürdürülür. Ancak enerji değerleri bulunurken merkezi I SCMO'ları LMO bazına çevrilir ve enerji ifadeleri şu hali alır [18, 19, 21]:

$$\text{MP2, MP2.5 ve MP3; } \quad \Delta \tilde{E}_i^{\{P_i\}} = \frac{1}{4} \sum_{J \in \{P_i\}}^{N_{occ}} \sum_{A, B \in \{P_i\}}^{N_{vir}} t_{iJ}^{AB} \langle iJ || AB \rangle \quad (89)$$

$$\text{CCSD için; } \quad \Delta \tilde{E}_i^{\{P_i\}} = \sum_{A \in \{P_i\}}^{N_{vir}} t_i^A f_{iA} + \frac{1}{4} \sum_{J \in \{P_i\}}^{N_{occ}} \sum_{A, B \in \{P_i\}}^{N_{vir}} \tau_{iJ}^{AB} \langle iJ || AB \rangle \quad (90)$$

$$\text{(T) katkısı için; } \quad \Delta \tilde{E}_i^{\{P_i\}} = \frac{1}{36} \sum_{J, K \in \{P_i\}}^{N_{occ}} \sum_{A, B, C \in \{P_i\}}^{N_{vir}} W_{iJK}^{ABC} V_{iJK}^{ABC} \quad (91)$$

Burada merkezi I SCMO'ları LMO bazına şöyle dönüştürülür:

$$t_{iJ}^{AB} = \sum_I K_{Ii} t_{IJ}^{AB} \quad (92)$$

$$\tau_{iJ}^{AB} = \sum_I K_{Ii} \tau_{IJ}^{AB} \quad (93)$$

$$W_{iJK}^{ABC} = \sum_I K_{Ii} W_{IJK}^{ABC} \quad (94)$$

$$V_{iJK}^{ABC} = \sum_I K_{Ii} V_{IJK}^{ABC} \quad (95)$$

DF integralleri ise DF faktörleri cinsinden dönüştürülebilir.

$$b_{iA}^X = \sum_I K_{Ii} b_{IA}^X \quad (96)$$

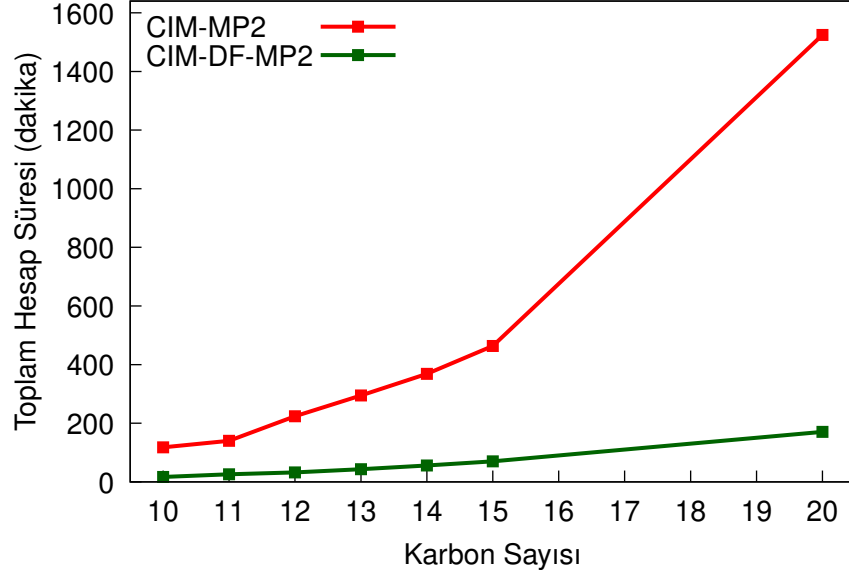
$$\langle iJ||AB \rangle = \sum_X^{N_{aux}} (b_{iA}^X b_{JB}^X - b_{iB}^X b_{JA}^X) \quad (97)$$

3. HESAPLAMALAR

Bölüm boyunca gerçekleştirilen bütün CIM dışı hesaplamalarda donmuş çekirdek (*Frozen Core*, FC) yaklaşımı kullanılmıştır. CIM hesaplamaları SECIM algoritması gereği doğal olarak FC yaklaşımına sahiptir.

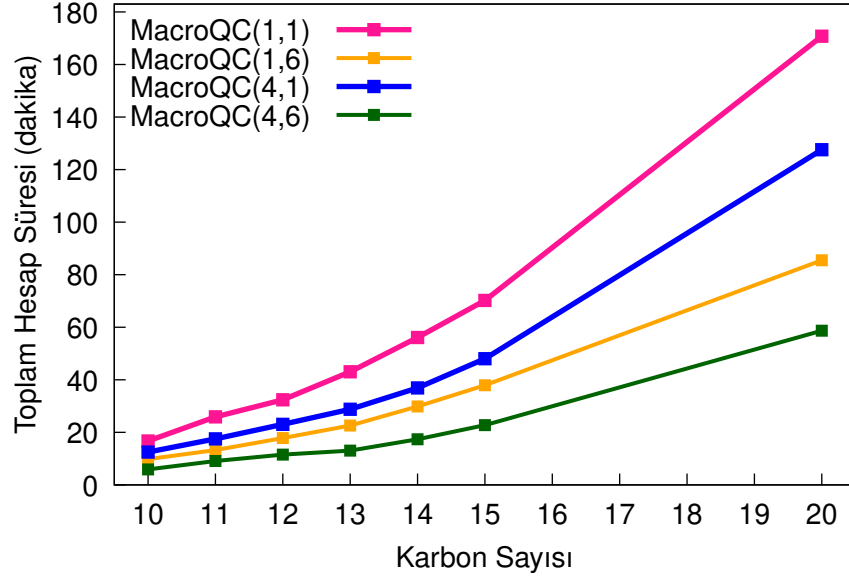
3.1. CIM-DF-MP2 Süre Karşılaştırmaları

CIM-MP2 ve CIM-DF-MP2 yöntemlerinin etkinliklerini karşılaştırmak için bir dizi açık zincirli alkan göz önünde bulundurulmuştur. Konvansiyonel CIM-MP2 hesaplamaları GAMESS (30 SEP 2021 (R2) sürümü) [52] paket programı ile gerçekleştirilmiştir. Toplam hesap süreleri CIM-MP2 ve CIM-DF-MP2 yöntemleri için Şekil 3.1. de sunulmuştur. Süre hesaplamaları, tek düğümlü (1 çekirdekli) Intel® Xeon® merkezi işlem birimi (CPU) E5-2620 v3 @ 2.40 GHz bilgisayarda (bellek ~64 GB) gerçekleştirilmiştir. Göz önüne alınan set için hesaplamalarda Dunning'in korelasyon uyumlu, polarize, değerlik kabuğu üçe yarılmış, cc-pVTZ baz seti kullanılmıştır [70]. Bütün süre hesaplamalarında SCF enerjileri için 10^{-8} toleransı kullanılmıştır. CIM için çevresel orbital toleransı 0,002 ve genişletilmiş alt sistem seçimi için 4,0 Å kullanılmıştır.



Şekil 3.1. C_nH_{2n+2} ($n=10-15,20$) alkan seti için CIM-MP2/cc-pVTZ ve CIM-DF-MP2/cc-pVTZ seviyesinde gerçekleştirilen tek nokta enerji hesabına ait toplam hesap süreleri.

CIM-DF-MP2 yönteminin paralelizasyon verimini karşılaştırmak için aynı alkan seti kullanılmıştır. Toplam hesap süreleri CIM-DF-MP2 yönteminin farklı paralelizasyon seviyeleri için Şekil 3.2. de sunulmuştur. Süre hesaplamaları, Intel® Xeon® merkezi işlem birimi (CPU) E5-2620 v3 @ 2.40 GHz bilgisayarda (bellek ~64 GB) gerçekleştirilmiştir. Düğümlere dağıtma işlemi MPI paralelizasyonu ile, düğümlerdeki paralelizasyon ise OpenMP paralelizasyonlarıyla sağlanmıştır. Şekil 3.2.'de parantez içindeki ilk sayı düğüm sayısını, ikinci sayı ise çekirdek sayısını göstermektedir.



Şekil 3.2. C_nH_{2n+2} ($n=10-15,20$) alkan seti için CIM-DF-MP2/cc-pVTZ seviyesinde gerçekleştirilen tek nokta enerji hesabına ait toplam hesap süreleri.

3.2. CIM-DF-MP Yöntemlerinin Doğruluğu

Bu alt başlıkta göz önüne alınan setler için hesaplamalarda Dunning'in korelasyon uyumlu, polarize, değerlik kabuğu üçe yarılmış, cc-pVTZ baz seti kullanılmıştır. Aynı şekilde bu alt başlıktaki bütün karşılaştırma hesaplamalarında SCF enerjileri için 10^{-8} toleransı kullanılmıştır. Yine bu alt başlıkta gerçekleştirilen tüm CIM hesaplamalarında çevresel orbital toleransı 0,002 ve genişletilmiş alt sistem seçimi için 4,0 Å kullanılmıştır.

CIM-DF-MP2 yönteminin doğruluğunu göstermek için CIM-MP2 yöntemi ile korelasyon enerjisi karşılaştırmaları Çizelge 3.1. de verilmiştir. Konvansiyonel CIM-MP2 hesaplamaları GAMESS (30 SEP 2021 (R2) sürümü) [52] paket programı ile gerçekleştirilmiştir. Açık zincirli alkan seti için CIM-MP2 ve CIM-DF-MP2 korelasyon enerjileri arasındaki farklar ve ortalama mutlak hata (*Mean Absolute Error*, MAE) değeri kcal/mol biriminde sunulmuştur. GAMESS programı CIM yöntemi ile küresel koordinatlarda moleküler integral hesabına izin vermediği için integraller küresel baz seti kullanılarak kartezyen koordinatlarda hesaplanmıştır.

Çizelge 3.1. C_nH_{2n+2} ($n=10-15,20$) alkan seti için CIM-DF-MP2/cc-pVTZ ve CIM-MP2/cc-pVTZ seviyesinde gerçekleştirilen tek nokta enerji hesabına ait korelasyon enerjisi ve hata değerleri.

n	Korelasyon Enerjisi (Hartree)		Mutlak Hata (kcal/mol)
	CIM-DF-MP2	CIM-MP2	
10	-1.774 489	-1.774 735	0,15
11	-1.949 676	-1.949 951	0,17
12	-2.124 841	-2.125 159	0,20
13	-2.300 070	-2.300 374	0,19
14	-2.475 272	-2.475 584	0,20
15	-2.650 444	-2.650 796	0,22
20	-3.528 230	-3.528 732	0,31
MAE			0,21

CIM-DF-MP2 yönteminin doğruluğunu göstermek için DF-MP2 yöntemi ile toplam enerji karşılaştırmaları Çizelge 3.2.'de verilmiştir. Dallanmış ve açık zincirli alkan izomerleri için CIM-DF-MP2 ve DF-MP2 enerjileri arasındaki farklar ve MAE değeri kcal/mol biriminde, SECIM algoritmasının oluşturduğu küme sayılarıyla birlikte sunulmuştur.

Çizelge 3.2. İsimleri verilen alkanlar için CIM-DF-MP2/cc-pVTZ seviyesinde gerçekleştirilen tek nokta enerji hesabına ait enerji ve hata değerleri.

n*	İzomer	Toplam Enerji (Hartree)		Mutlak Hata (kcal/mol)	Küme Sayısı
		CIM-DF-MP2	DF-MP2		
10	2,2,5-Trimetilheptan	-393,408 0993	-393,409 8522	1,10	3
	2,2-Dimetiloktan	-393,408 3073	-393,408 9202	0,38	2
	n-Dekan	-393,402 3645	-393,402 7499	0,24	3
11	2,2,3,4,4-Pentametilhekzan	-432,618 7255	-432,620 4118	1,06	3
	5-Etil-3,3-dimetilheptan	-432,624 4807	-432,626 7238	1,41	5
	n-Undekan	-432,623 9689	-432,624 4878	0,33	5
12	3-Etil-2,5,6-trimetil heptan	-471,849 1687	-471,850 3585	0,75	3
	4-Etil-2,3,5-trimetilheptan	-471,841 7412	-471,845 4649	2,34	5
	2,3,4,5,6-Pentametilheptan	-471,847 1043	-471,850 2031	1,94	5
	5,5-Dietil-2-metilheptan	-471,849 1127	-471,851 5178	1,51	3
	n-Dodekan	-471,845 5719	-471,846 2229	0,41	6
13	5-Etil-3,6-dimetilnonan	-511,068 6937	-511,070 2090	0,95	4
	2,4,8-Trimetildekan	-511,067 9868	-511,072 5611	2,87	6
	3-Etil-4,7-dimetilnonan	-511,067 8039	-511,069 5513	1,10	4
	4-Metil-5-propilnonan	-511,067 2056	-511,068 4063	0,75	3
	n-Tridekan	-511,067 2108	-511,067 9605	0,47	7
14	2,3,5,8-Tetrametildekan	-550,289 9483	-550,295 3086	3,36	6
	4-Etil-4,5,6-trimetilnonan	-550,283 8717	-550,289 1410	3,31	7
	5-Metil-6-propildekan	-550,286 9168	-550,290 1414	2,02	5
	7-Etil-3,5-dimetildekan	-550,288 7493	-550,293 0171	2,68	8
	n-Tetradekan	-550,288 7948	-550,289 6978	0,57	8
15	2,2,4,5,5-Pentametildekan	-589,515 9970	-589,520 8206	3,03	8
	4,6,8-Trimetildodekan	-589,510 8676	-589,516 8808	3,77	7
	5-Etil-5-propildekan	-589,511 6992	-589,515 3460	2,29	4
	n-Pentadekan	-589,510 4156	-589,511 4358	0,64	9
MAE				1,57	

*n karbon sayısını belirtmektedir.

Benzer bir karşılaştırma açık zincirli alkan seti kullanılarak CIM-DF-MP2.5 ve CIM-DF-MP3 için gerçekleştirilmiştir. Çizelge 3.3.'de CIM-DF-MP2.5 ve DF-MP2.5 enerjileri arasındaki farklar ve ortalama mutlak hata, Çizelge 3.4.'te ise CIM-DF-MP3 ve DF-MP3 enerjileri arasındaki farklar ve ortalama mutlak hata gösterilmektedir.

Çizelge 3.3. C_nH_{2n+2} (n=10-15,20) alkan seti için CIM-DF-MP2.5/cc-pVTZ seviyesinde gerçekleştirilen tek nokta enerji hesabına ait enerji ve hata değerleri.

n	Toplam Enerji (Hartree)		Mutlak Hata (kcal/mol)
	CIM-DF-MP2.5	DF-MP2.5	
10	-393,456 9076	-393,457 2315	0,20
11	-432,683 5116	-432,683 9544	0,28
12	-471,910 1603	-471,910 6739	0,32
13	-511,136 7742	-511,137 3956	0,39
14	-550,363 3683	-550,364 1173	0,47
15	-589,590 0138	-589,590 8396	0,52
20	-785,720 0189	-785,721 4229	0,88
MAE			0,44

Çizelge 3.4. C_nH_{2n+2} (n=10-15,20) alkan seti için CIM-DF-MP3/cc-pVTZ seviyesinde gerçekleştirilen tek nokta enerji hesabına ait enerji ve hata değerleri.

n	Toplam Enerji (Hartree)		Mutlak Hata (kcal/mol)
	CIM-DF-MP3	DF-MP3	
10	-393,511 4531	-393,511 7131	0,16
11	-432,743 0689	-432,743 4210	0,22
12	-471,974 7205	-471,975 1248	0,25
13	-511,206 3405	-511,206 8308	0,31
14	-550,437 9476	-550,438 5367	0,37
15	-589,669 5958	-589,670 2433	0,41
20	-785,824 5702	-785,825 6509	0,68
MAE			0,34

3.3. CIM-DF-CC Yöntemlerinin Doğruluğu

CIM-DF-CCSD yönteminin doğruluğunu göstermek için CIM-CCSD yöntemi ile korelasyon enerjisi karşılaştırmaları Çizelge 3.5.'te verilmiştir. CCSD için pertürbatif üçlü uyarılma düzeltmeleri ise CIM-DF-(T) ve CIM-(T) şeklinde Çizelge 3.6.'da görülmektedir. Karşılaştırmada (H₂O)_n su kümeleri kullanılmıştır.

Çizelge 3.5. (H₂O)_n (n=5-25) su kümeleri için CIM-DF-CCSD/6-311G(d,p) ve CIM-CCSD/6-311G(d,p) seviyesinde gerçekleştirilen tek nokta enerji hesabına ait korelasyon enerjisi ve hata değerleri.

n	Korelasyon Enerjisi (Hartree)		Mutlak Hata (kcal/mol)
	CIM-CCSD	CIM-DF-CCSD	
5	-1,148 106	-1.148 035	0,04
6	-1,381 625	-1,381 479	0,09
7	-1,611 435	-1,611 359	0,05
8	-1,844 658	-1,844 456	0,13
9	-2,074 644	-2,074 372	0,17
10	-2,306 035	-2,305 817	0,14
11	-2,536 039	-2,535 706	0,21
12	-2,770 521	-2,770 151	0,23
13	-3,000 957	-3,000 569	0,24
14	-3,232 415	-3,231 990	0,27
15	-3,464 064	-3,463 475	0,37
16	-3,696 653	-3,696 057	0,37
17	-3,923 583	-3,924 403	0,51
18	-4,158 991	-4,158 342	0,41
19	-4,383 809	-4,382 869	0,59
20	-4,622 805	-4,622 115	0,43
21	-4,852 891	-4,852 042	0,53
22	-5,084 952	-5,084 134	0,51
23	-5,314 726	-5,313 753	0,61
24	-5,547 436	-5,546 448	0,62
25	-5,780 931	-5,779 831	0,69
MAE			0,34

Çizelge 3.6. $(\text{H}_2\text{O})_n$ ($n=5-25$) su kümeleri için CIM-DF-CCSD(T)/6-311G(d,p) ve CIM-CCSD(T)/6-311G(d,p) seviyesinde gerçekleştirilen tek nokta enerji hesabına ait pertürbatif üçlü uyarılma korelasyon enerji düzeltmeleri ve hata değerleri.

n	Korelasyon Enerjisi (Hartree)		Mutlak Hata (kcal/mol)
	CIM-(T)	CIM-DF-(T)	
5	-0,027 156	-0,027 138	0,01
6	-0,033 425	-0,033 309	0,07
7	-0,038 970	-0,038 787	0,12
8	-0,045 046	-0,044 979	0,04
9	-0,050 497	-0,050 437	0,04
10	-0,056 396	-0,056 219	0,11
11	-0,062 076	-0,061 684	0,25
12	-0,068 416	-0,068 075	0,21
13	-0,073 957	-0,073 636	0,20
14	-0,079 814	-0,079 436	0,24
15	-0,085 462	-0,085 137	0,20
16	-0,091 442	-0,091 226	0,14
17	-0,096 323	-0,096 131	0,12
18	-0,103 155	-0,102 686	0,29
19	-0,107 393	-0,107 178	0,13
20	-0,114 705	-0,114 379	0,20
21	-0,120 205	-0,119 862	0,22
22	-0,126 251	-0,125 807	0,28
23	-0,131 951	-0,131 242	0,44
24	-0,137 876	-0,137 313	0,35
25	-0,143 722	-0,143 149	0,36
MAE			0,19

Konvansiyonel CIM-CCSD ve CIM-CCSD(T) hesaplamaları GAMESS (30 SEP 2021 (R2) sürümü) [52] paket programı ile gerçekleştirilmiştir. Bu alt başlıktaki bütün karşılaştırma hesaplamalarında Pople baz seti ailesinden 6-311G(d,p) baz seti kullanılmıştır. DF hesaplamaları için yardımcı baz seti olarak Dunning baz seti ailesinden cc-pVTZ-JKFIT ve cc-pVTZ-RI baz setleri kullanılmıştır. Aynı şekilde bu alt başlıktaki bütün karşılaştırma hesaplamalarında SCF enerjileri için 10^{-8} ve CCSD enerjileri için 10^{-8} toleransı

kullanılmıştır. Yine bu alt başlıkta gerçekleştirilen tüm CIM hesaplamalarında çevresel orbital toleransı 0,002 ve genişletilmiş alt sistem seçimi için 4,0 Å kullanılmıştır. Ele alınan yapıların molekül geometrileri Kaynak [71]'de pentamer, 6A, 7A, 8D_{2d}, 9A, 10Dopp, 11A, 12D_{2d}D_{2d}, 13A, 14A, 15A, 16D_{2d}D_{2d}D_{2d}, 17cage, 18A, 19cage, 20A, 21A, 22A, 23A, 24A ve 25A isimleriyle verilmiştir.

3.4. Çevresel LMO Seçiminde Kullanılan Parametre ζ 'nin Etkisi

Bu alt başlıkta kullanılan set için okunabilirlik açısından harf kodları kullanılacaktır. Çizelge 3.7.'de IUPAC adları ve baz fonksiyon sayıları (N_{bf}) verilen alkanlardan A, B, C ve D 50 karbonlu, E, F, G ve H 60 karbonlu, K, L, M ve N ise 70 karbonludur.

Çizelge 3.7. Çevresel LMO seçiminde kullanılan parametrenin incelenmesinde kullanılan molekül seti için IUPAC adları ve baz fonksiyon sayıları

Harf Kodu	IUPAC Adı	N_{bf}
A	n-Pentakontan	1210
B	14-Bütil-13-desil-13-oktiloktakoza	1210
C	9-Ter-bütil-11-heptil-10-heksil-11-oktil-10-pentilikoza	1210
D	8,14-Dietil-9-heptil-13-heksil-10,15-dimetil-11-pentil-12-propiltriakoza	1210
E	n-Hekzakontan	1450
F	13-Metil-11,13,15,17-tetraoctilheptakoza	1450
G	12-(2-Etilheksil)-11-heptil-10-heksil-12-nonil-11-oktildokoza	1450
H	11-Desil-10-heptil-12,12-dimetil-11-nonil-10-oktiltetraakoza	1450
K	n-Heptakontan	1690
L	16-Desil-16-pentadesil-15-tridesildotriakontan	1690
M	17,17,18-Tridodesil tetratriakontan	1690
N	15-(2,4,4,6,6-Pentametilheptan-2-il)-16-tetradesil-16-tridesilhentriakontan	1690

CIM alt sistemlerinin oluşturulmasını etkileyen başat parametre olan ζ parametresinin etkisini incelemek için Çizelge 3.7.'de verilen moleküller göz önüne alınmıştır. Ele alınan set için CIM-DF-MP2 yönteminin DF-MP2 yöntemine karşı mutlak hataları Çizelge 3.8. de verilmiştir. Hesaplamalarda Dunning baz seti ailesinden cc-pVTZ baz seti kullanılmıştır. Yardımcı baz seti olarak yine Dunning baz set ailesinden cc-pVTZ-JKFIT ve cc-pVTZ-RI baz setleri kullanılmıştır. SCF enerjileri için 10^{-8} toleransı kullanılmıştır. Genişletilmiş alt sistem seçimi içinse 4,0 Å kullanılmıştır. Toplam enerji değerleri için EK 2'e bakınız.

Çizelge 3.8. Farklı ζ değerleri için CIM-DF-MP2/cc-pVTZ enerjilerine karşılık DF-MP2/cc-pVTZ enerjilerinin mutlak hataları ve ortalama mutlak hataları

Molekül	Mutlak Hata (kcal/mol)			
	0,0001	0,0005	0,001	0,002
A	0,28	3,77	3,77	3,67
B	1,13	5,68	7,57	10,82
C	2,01	8,72	14,78	23,42
D	1,83	7,85	12,18	21,66
E	0,35	4,63	4,65	4,48
F	2,13	9,24	13,30	19,54
G	3,07	12,37	18,99	29,32
H	2,03	9,88	13,85	22,88
K	0,43	5,50	5,51	5,37
L	1,59	7,85	9,77	13,59
M	1,62	7,88	9,76	13,55
N	2,09	8,69	13,40	19,96
MAE	1,55	7,67	10,63	15,69

ζ parametresinin SECIM algoritmasının oluşturduğu alt sistem sayısına ve oluşan alt sistemlerin büyüklüğüne etkisiyle ilgili bilgiler Çizelge 3.9. ve Çizelge 3.10. verilmiştir. Çizelge 3.9.'da 50 karbonlu A, B, C ve D molekülleri, Çizelge 3.10.'da 60 karbonlu E, F, G ve H moleküllerinin, Çizelge 3.11.'de ise 70 karbonlu K, L, M ve N moleküllerinin farklı ζ değerleri için, oluşan alt sistem sayısı, alt sistemlerin ortalama, maksimum ve minimum baz fonksiyon sayıları görülmektedir.

Çizelge 3.9. Farklı C₅₀H₁₀₂ izomerleri için SECIM alt sistemleri detayları.

Molekül		ζ			
		0,0001	0,0005	0,001	0,002
A	Toplam Alt Sistem	40	44	44	44
	Ortalama N_{bf}	370	275	249	223
	Maksimum N_{bf}	376	280	252	224
	Minimum N_{bf}	325	229	215	201
B	Toplam Alt Sistem	26	36	36	36
	Ortalama N_{bf}	496	336	308	273
	Maksimum N_{bf}	800	612	546	475
	Minimum N_{bf}	316	229	215	201
C	Toplam Alt Sistem	25	30	33	31
	Ortalama N_{bf}	715	452	400	342
	Maksimum N_{bf}	988	745	670	565
	Minimum N_{bf}	414	215	201	201
D	Toplam Alt Sistem	27	31	32	30
	Ortalama N_{bf}	672	443	390	341
	Maksimum N_{bf}	840	667	605	509
	Minimum N_{bf}	430	215	215	201

Çizelge 3.10. Farklı C₆₀H₁₂₂ izomerleri için SECIM alt sistemleri detayları.

Molekül		ζ			
		0,0001	0,0005	0,001	0,002
E	Toplam Alt Sistem	50	54	54	54
	Ortalama N_{bf}	371	276	249	223
	Maksimum N_{bf}	376	280	252	224
	Minimum N_{bf}	325	229	215	201
F	Toplam Alt Sistem	36	47	45	44
	Ortalama N_{bf}	549	350	315	276
	Maksimum N_{bf}	763	580	480	409
	Minimum N_{bf}	330	206	206	196
G	Toplam Alt Sistem	40	46	44	41
	Ortalama N_{bf}	647	425	366	320
	Maksimum N_{bf}	968	775	665	532
	Minimum N_{bf}	104	196	172	167
H	Toplam Alt Sistem	30	42	42	42
	Ortalama N_{bf}	665	395	349	301
	Maksimum N_{bf}	977	736	669	541
	Minimum N_{bf}	316	215	215	201

Çizelge 3.11. Farklı C₇₀H₁₄₂ izomerleri için SECIM alt sistemleri detayları.

Molekül		ζ			
		0,0001	0,0005	0,001	0,002
K	Toplam Alt Sistem	60	64	64	64
	Ortalama N_{bf}	372	276	250	223
	Maksimum N_{bf}	376	280	252	224
	Minimum N_{bf}	325	229	215	201
L	Toplam Alt Sistem	45	55	55	55
	Ortalama N_{bf}	472	319	289	256
	Maksimum N_{bf}	851	621	541	480
	Minimum N_{bf}	311	229	215	201
M	Toplam Alt Sistem	45	55	55	55
	Ortalama N_{bf}	472	319	289	256
	Maksimum N_{bf}	851	621	541	480
	Minimum N_{bf}	316	229	215	201
N	Toplam Alt Sistem	46	54	54	54
	Ortalama N_{bf}	523	354	310	272
	Maksimum N_{bf}	895	665	570	518
	Minimum N_{bf}	311	229	215	201

4. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Tez kapsamında CIM yöntemi (SECIM), DF tekniği ile MP ve CC yöntemlere uygulanarak CIM-DF-MP2, CIM-DF-MP2.5, CIM-DF-MP3, CIM-DF-CCSD ve CIM-DF-CCSD(T) yöntemleri geliştirilmiştir. Yöntemler etkin ve paralel şekilde programlanıp MacroQC paket programına entegre edilmiştir. Geliştirilen yöntemlerin doğruluğu ve etkinliği DF yöntemler için MacroQC [51] ve konvansiyonel CIM hesapları için GAMESS [52] paket programları ile karşılaştırılarak gösterilmiştir.

CIM-DF-MP2 yöntemi $C_{20}H_{44}$ molekülü için CIM-MP2 yöntemi ile karşılaştırıldığında toplam hesap zamanında ~ 9 kat azalma gözlemlenmiştir. Bu nedenle, yeni uygulamamızın geleneksel CIM-MP2 koduna kıyasla daha etkin olduğu sonucuna varılmıştır.

Tek düğüm tek çekirdek ve 4 düğüm 6 çekirdek ile yapılan CIM-DF-MP2 hesabının toplam süreleri arasında ~ 3 kat fark olduğu gözlemlenmiştir. Paralelizasyon ile gelen hızlanmanın, işlemci çekirdeği ve düğüm sayısı ile doğru orantılı olsa da, birebir katlanarak artmadığı gözlemlenmiştir. Çok düğümle gerçekleştirilen hesaplamalarda bunun bir nedeni, düğümlerin yalnızca MP2 korelasyon enerjisi kısımlarının paralel çalışmasına karşın SCF hesabının düğümler arasında bölüşülmemesidir. Bunun dışındaki sebepler;

- sabit disk ile yapılan okuma yazma işlemlerinin paralel çalışmaya izin vermemesi,
- paralelize edilemeyecek tekil işlemlerin varlığı,
- paralelizasyonun sağlanması için yapılan haberleşme işlemlerinin varlığı,

olarak sıralanabilir.

Korelasyon enerjisi hesaplarında hatanın kaynağı CIM alt sistemleri oluşturularak molekülün ve orbital uzayının parçalar halinde ele alınması yaklaşımıdır. Buna rağmen Çizelge 3.2.'de değerlendirilen moleküller için, seçilen küme sayısı ile hata arasında anlamlı bir orantı görülmemekle birlikte artış yönünde olduğu görülmektedir.

Çizelge 3.1., Çizelge 3.5. ve Çizelge 3.6. de görüldüğü gibi DF yaklaştırmasından gelen hata, pek çok çalışmayla gösterildiği üzere oldukça küçüktür [44–50]. CIM yaklaşımının yanında DF yaklaşımının hatası ihmal edilebilir.

Ç parametresinin SECIM algoritmasının oluşturduğu alt sistem sayısını dolaylı olarak etkilediği Bölüm 2.5. 5. adımda tartışılmıştır. Alt sistemlerin büyüklüğü ise çevresel LMO sayısını belirleyen Ç parametresine doğrudan bağlıdır. İndirgenebilir LMO alanlarının birbirini içirme ihtimalini değiştirdiği içinse dolaylı olarak bu parametreye bağlıdır. Alt sistemlerin büyüklüğünün ölçüsü baz fonksiyon sayısı olarak düşünülebilir ve bu da iyi bilindiği üzere hesaplardaki hatayı ve maliyeti belirleyen birincil faktördür.

Çizelge 3.8.'de görüldüğü üzere Ç parametresi hesaplamaların hatası üzerinde büyük etkiye sahiptir. Ç parametresi küçüldükçe hata önemli ölçüde azalmaktadır. $\zeta = 0,0001$ alındığında ortalama mutlak hata 1,55 kcal/mol'dür. Çizelge 3.8. ve Çizelge 3.2.'de ele alınan setler üzerinde, açık zincirli yapılarda CIM yaklaşımının daha iyi sonuçlar verdiği görülmektedir. Ayrıca bu iki set dikkatle incelendiğinde sistemin büyüklüğüyle hatanın arttığı, daha büyük sistemlerde Ç parametresini daha küçük tutmak gerektiği açıktır.

CIM yaklaşımının uygun sistemler ve parametreler ile korelasyon enerjisi hesaplarında yüksek doğruluk sağlayabildiği sonucuna varılmıştır. Ele alınan en büyük ve dallanmış yapı olan 15-(2,4,4,6,6-pentametilheptan-2-il)-16-tetradesil-16-tridesilhentriakontan molekülü (bkz. Çizelge 3.7.) için 1690 baz fonksiyon büyüklüğündeki hesabı, ortalama 523 baz fonksiyon büyüklüğünde 46 alt sisteme bölerek 2,09 kcal/mol hata ile MP2 enerjisi hesaplanmıştır. DF tekniğinin CIM yaklaşımına yüksek bir hata getirmediği ve ele alınan durumlarda hatanın 0,50 kcal/mol gibi güvenli bir seviyenin altında kaldığı görülmüştür. Dolayısıyla CIM-DF yöntemler konvansiyonel CIM yöntemlere uygun bir alternatif olarak değerlendirilebilir.

5. KAYNAKLAR

- [1] P. A. M. Dirac, R. H. Fowler, Quantum mechanics of many-electron systems, Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character 123 (1929) 714.
- [2] E. A. Hylleraas, Neue berechnung der energie des heliums im grundzustande, sowie des tiefsten terms von ortho-helium, Zeitschrift für Physik 54 (1929) 347.
- [3] D. R. Hartree, The wave mechanics of an atom with a non-coulomb central field. Part II. some results and discussion, Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society 24 (1928) 111.
- [4] V. Fock, Näherungsmethode zur lösung des quantenmechanischen mehrkörperproblems, Zeitschrift für Physik 61 (1930) 126.
- [5] E. Wigner, F. Seitz, On the constitution of metallic sodium. II, Phys. Rev. 46 (1934) 509.
- [6] P.-O. Löwdin, Quantum theory of many-particle systems. III. extension of the Hartree-Fock scheme to include degenerate systems and correlation effects, Physical Review 97 (1955) 1509.
- [7] O. Sinanoğlu, Many-electron theory of atoms. molecules and their interactions, Advance in Chemical Physics 17 (1964) 316.
- [8] C. Edmiston, K. Ruedenberg, Localized atomic and molecular orbitals, Reviews of Modern Physics 35 (1963) 457.
- [9] J. M. Foster, S. F. Boys, Canonical configurational interaction procedure, Reviews of Modern Physics 32 (1960) 300.
- [10] P. Pulay, Localizability of dynamic electron correlation, Chemical physics letters 100 (1983) 151.

- [11] S. Saebø, P. Pulay, Local configuration interaction: An efficient approach for larger molecules, *Chemical physics letters* 113 (1985) 13–18.
- [12] S. Saebø, P. Pulay, The local correlation treatment. II. implementation and tests, *The Journal of chemical physics* 88 (1988) 1884–1890.
- [13] S. Saebø, P. Pulay, Local treatment of electron correlation, *Annual Review of Physical Chemistry* 44 (1993) 213–236.
- [14] S. Saebø, P. Pulay, A low-scaling method for second order Møller–Plesset calculations, *The Journal of Chemical Physics* 115 (2001) 3975–3983.
- [15] W. Förner, J. Ladik, P. Otto, J. Cizek, Coupled-cluster studies. II. the role of localization in correlation calculations on extended systems, *Chemical Physics* 97 (1985) 251.
- [16] S. Li, J. Ma, Y. Jiang, Linear scaling local correlation approach for solving the coupled cluster equations of large systems, *Journal of Computational Chemistry* 23 (2002) 237–244.
- [17] S. Li, J. Shen, W. Li, Y. Jiang, An efficient implementation of the “cluster-in-molecule” approach for local electron correlation calculations, *The Journal of Chemical Physics* 125 (2006) 074109.
- [18] W. Li, P. Piecuch, J. R. Gour, S. Li, Local correlation calculations using standard and renormalized coupled-cluster approaches, *The Journal of Chemical Physics* 131 (2009) 114109.
- [19] W. Li, P. Piecuch, Improved design of orbital domains within the cluster-in-molecule local correlation framework: Single-environment cluster-in-molecule ansatz and its application to local coupled-cluster approach with singles and doubles, *The Journal of Physical Chemistry A* 114 (2010) 8644–8657.

- [20] W. Li, P. Piecuch, Multilevel extension of the cluster-in-molecule local correlation methodology: Merging coupled-cluster and Møller-Plesset perturbation theories, *The Journal of Physical Chemistry A* 114 (2010) 6721–6727.
- [21] W. Li, Y. Guo, S. Li, A refined cluster-in-molecule local correlation approach for predicting the relative energies of large systems, *Physical Chemistry Chemical Physics* 14 (2012) 7854–7862.
- [22] Y. Guo, W. Li, S. Li, Improved cluster-in-molecule local correlation approach for electron correlation calculation of large systems, *The Journal of Physical Chemistry A* 118 (2014) 8996–9004.
- [23] A. E. DePrince, D. A. Mazziotti, Exploiting the spatial locality of electron correlation within the parametric two-electron reduced-density-matrix method, *The Journal of Chemical Physics* 132 (2010) 034110.
- [24] Z. Rolik, M. Kállay, A general-order local coupled-cluster method based on the cluster-in-molecule approach, *The Journal of Chemical Physics* 135 (2011) 104111.
- [25] Y. Guo, U. Becker, F. Neese, Comparison and combination of “direct” and fragment based local correlation methods: Cluster in molecules and domain based local pair natural orbital perturbation and coupled cluster theories, *The Journal of Chemical Physics* 148 (2018) 124117.
- [26] Y. Wang, Z. Ni, W. Li, S. Li, Cluster-in-molecule local correlation approach for periodic systems, *Journal of Chemical Theory and Computation* 15 (2019) 2933–2943.
- [27] Z. Ni, Y. Wang, W. Li, P. Pulay, S. Li, Analytical energy gradients for the cluster-in-molecule MP2 method and its application to geometry optimizations of large systems, *Journal of Chemical Theory and Computation* 15 (2019) 3623–3634.

- [28] Z. Ni, Y. Guo, F. Neese, W. Li, S. Li, Cluster-in-molecule local correlation method with an accurate distant pair correction for large systems, *Journal of Chemical Theory and Computation* 17 (2021) 756–766.
- [29] C. C. J. Roothaan, A study of two-center integrals useful in calculations on molecular structure. i, *The Journal of Chemical Physics* 19 (1951) 1445–1458.
- [30] S. F. Boys, A. C. Egerton, Electronic wave functions - I. A general method of calculation for the stationary states of any molecular system, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* 200 (1950) 542–554.
- [31] R. McWeeny, Gaussian approximations, to wave functions, *Nature* 166 (1950) 21–22.
- [32] U. Bozkaya, Molint 1.0: A framework for the computation of molecular integrals and their derivatives for density-fitted methods, *International Journal of Quantum Chemistry* 121 (2021) e26623.
- [33] T. Helgaker, P. Jørgensen, J. Olsen, *Molecular Integral Evaluation*, John Wiley & Sons, Ltd, 2000.
- [34] M. P. Barnett, C. A. Coulson, The evaluation of integrals occurring in the theory of molecular structure. Parts I & II, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences* 243 (1951) 221–249.
- [35] S. Reine, T. Helgaker, R. Lindh, Multi-electron integrals, *WIREs Computational Molecular Science* 2 (2012) 290–303.
- [36] M. Häser, R. Ahlrichs, Improvements on the direct SCF method, *Journal of Computational Chemistry* 10 (1989) 104–111.

- [37] D. S. Lambrecht, C. Ochsenfeld, Multipole-based integral estimates for the rigorous description of distance dependence in two-electron integrals, *The Journal of Chemical Physics* 123 (2005) 184101.
- [38] F. Aquilante, T. B. Pedersen, R. Lindh, Low-cost evaluation of the exchange Fock matrix from Cholesky and density fitting representations of the electron repulsion integrals, *The Journal of Chemical Physics* 126 (2007) 194106.
- [39] J. Kussmann, C. Ochsenfeld, Hybrid CPU/GPU integral engine for strong-scaling ab initio methods, *Journal of Chemical Theory and Computation* 13 (2017) 3153–3159.
- [40] T. H. Thompson, C. Ochsenfeld, Integral partition bounds for fast and effective screening of general one-, two-, and many-electron integrals, *The Journal of Chemical Physics* 150 (2019) 044101.
- [41] E. Baerends, D. Ellis, P. Ros, Self-consistent molecular Hartree-Fock-Slater calculations I. the computational procedure, *Chemical Physics* 2 (1973) 41–51.
- [42] B. I. Dunlap, J. W. D. Connolly, J. R. Sabin, On some approximations in applications of $X\alpha$ theory, *The Journal of Chemical Physics* 71 (1979) 3396–3402.
- [43] J. L. Whitten, Coulombic potential energy integrals and approximations, *The Journal of Chemical Physics* 58 (1973) 4496–4501.
- [44] U. Bozkaya, Orbital-optimized second-order perturbation theory with density-fitting and Cholesky decomposition approximations: An efficient implementation, *Journal of Chemical Theory and Computation* 10 (2014) 2371–2378.
- [45] U. Bozkaya, Orbital-optimized linearized coupled-cluster doubles with density-fitting and Cholesky decomposition approximations: an efficient implementation, *Physical Chemistry Chemical Physics* 18 (2016) 11362–11373.

- [46] U. Bozkaya, Orbital-optimized MP3 and MP2.5 with density-fitting and Cholesky decomposition approximations, *Journal of Chemical Theory and Computation* 12 (2016) 1179–1188.
- [47] U. Bozkaya, C. D. Sherrill, Analytic energy gradients for the coupled-cluster singles and doubles method with the density-fitting approximation, *The Journal of Chemical Physics* 144 (2016) 174103.
- [48] U. Bozkaya, Analytic energy gradients for orbital-optimized MP3 and MP2.5 with the density-fitting approximation: An efficient implementation, *Journal of Computational Chemistry* 39 (2018) 351–360.
- [49] U. Bozkaya, A. Ünal, Y. Alagöz, Energy and analytic gradients for the orbital-optimized coupled-cluster doubles method with the density-fitting approximation: An efficient implementation, *The Journal of Chemical Physics* 153 (2020) 244115.
- [50] Y. Alagöz, A. Ünal, U. Bozkaya, Efficient implementations of the symmetric and asymmetric triple excitation corrections for the orbital-optimized coupled-cluster doubles method with the density-fitting approximation, *The Journal of Chemical Physics* 155 (2021) 114104.
- [51] U. Bozkaya, B. Ermiş, Y. Alagöz, A. Ünal, A. K. Uyar, MacroQC 1.0: An electronic structure theory software for large-scale applications, *The Journal of Chemical Physics* 156 (2022) 044801.
- [52] G. M. J. Barca, C. Bertoni, L. Carrington, D. Datta, N. De Silva, J. E. Deustua, D. G. Fedorov, J. R. Gour, A. O. Gunina, E. Guidez, T. Harville, S. Irle, J. Ivanic, K. Kowalski, S. S. Leang, H. Li, W. Li, J. J. Lutz, I. Magoulas, J. Mato, V. Mironov, H. Nakata, B. Q. Pham, P. Piecuch, D. Poole, S. R. Pruitt, A. P. Rendell, L. B. Roskop, K. Ruedenberg, T. Sattasathuchana, M. W. Schmidt, J. Shen, L. Slipchenko, M. Sosonkina, V. Sundriyal, A. Tiwari, J. L. Galvez Vallejo, B. Westheimer, M. Włoch, P. Xu, F. Zahariev, M. S. Gordon,

- Recent developments in the general atomic and molecular electronic structure system, *The Journal of Chemical Physics* 152 (2020) 154102.
- [53] R. Polly, H.-J. Werner, F. R. Manby, P. J. Knowles, Fast Hartree–Fock theory using local density fitting approximations, *Molecular Physics* 102 (2004) 2311–2321.
- [54] I. Shavitt, R. J. Bartlett, *Many-Body Methods in Chemistry and Physics: MBPT and Coupled-Cluster Theory*, Cambridge University Press, 2009.
- [55] U. Bozkaya, J. M. Turney, Y. Yamaguchi, H. F. Schaefer, C. D. Sherrill, Quadratically convergent algorithm for orbital optimization in the orbital-optimized coupled-cluster doubles method and in orbital-optimized second-order Møller–Plesset perturbation theory, *The Journal of Chemical Physics* 135 (2011) 104103.
- [56] U. Bozkaya, C. D. Sherrill, Analytic energy gradients for the orbital-optimized second-order Møller–Plesset perturbation theory, *The Journal of Chemical Physics* 138 (2013) 184103.
- [57] E. Soydaş, U. Bozkaya, Assessment of orbital-optimized third-order Møller–Plesset perturbation theory and its spin-component and spin-opposite scaled variants for thermochemistry and kinetics, *Journal of Chemical Theory and Computation* 9 (2013) 1452–1460.
- [58] U. Bozkaya, Orbital-optimized third-order Møller–Plesset perturbation theory and its spin-component and spin-opposite scaled variants: Application to symmetry breaking problems, *The Journal of Chemical Physics* 135 (2011) 224103.
- [59] U. Bozkaya, Derivation of general analytic gradient expressions for density-fitted post-Hartree-Fock methods: An efficient implementation for the density-fitted second-order Møller–Plesset perturbation theory, *The Journal of Chemical Physics* 141 (2014) 124108.

- [60] U. Bozkaya, C. D. Sherrill, Orbital-optimized MP2.5 and its analytic gradients: Approaching CCSD(T) quality for noncovalent interactions, *The Journal of Chemical Physics* 141 (2014) 204105.
- [61] T. D. Crawford, H. F. Schaefer III, *An Introduction to Coupled Cluster Theory for Computational Chemists*, John Wiley & Sons, Ltd, 2000, pp. 33–136.
- [62] U. Bozkaya, H. F. Schaefer, Symmetric and asymmetric triple excitation corrections for the orbital-optimized coupled-cluster doubles method: Improving upon CCSD(T) and CCSD(T)_Λ: Preliminary application, *The Journal of Chemical Physics* 136 (2012) 204114.
- [63] U. Bozkaya, A noniterative asymmetric triple excitation correction for the density-fitted coupled-cluster singles and doubles method: Preliminary applications, *The Journal of Chemical Physics* 144 (2016) 144108.
- [64] U. Bozkaya, C. D. Sherrill, Analytic energy gradients for the coupled-cluster singles and doubles with perturbative triples method with the density-fitting approximation, *The Journal of Chemical Physics* 147 (2017) 044104.
- [65] J. S. Binkley, J. A. Pople, W. J. Hehre, Self-consistent molecular orbital methods. 21. Small split-valence basis sets for first-row elements, *Journal of the American Chemical Society* 102 (1980) 939–947.
- [66] J. W. Boughton, P. Pulay, Comparison of the Boys and Pipek–Mezey localizations in the local correlation approach and automatic virtual basis selection, *Journal of Computational Chemistry* 14 (1993) 736–740.
- [67] C. Hampel, H. Werner, Local treatment of electron correlation in coupled cluster theory, *The Journal of Chemical Physics* 104 (1996) 6286–6297.
- [68] P. Pulay, S. Saebø, Orbital-invariant formulation and second-order gradient evaluation in Møller-Plesset perturbation theory, *Theoretica chimica acta* 69 (1986) 357–368.

- [69] S. Saebø, P. Pulay, Fourth-order Møller–Plessett perturbation theory in the local correlation treatment. I. method, *The Journal of Chemical Physics* 86 (1987) 914–922.
- [70] T. H. Dunning, Gaussian basis sets for use in correlated molecular calculations. i. the atoms boron through neon and hydrogen, *The Journal of Chemical Physics* 90 (1989) 1007–1023.
- [71] P. Qian, W. Song, L. Lu, Z. Yang, Ab initio investigation of water clusters (H₂O)_n (n = 2–34), *International Journal of Quantum Chemistry* 110 (2010) 1923–1937.

EKLER

EK 1 – CCSD Ara Terimler

Bu başlıkta yer alan ifadeler için kaynak: U. Bozkaya, C. D. Sherrill, Analytic energy gradients for the coupled-cluster singles and doubles method with the density-fitting approximation, The Journal of Chemical Physics 144 (2016) 174103.

1-indisli ve 2-indisli Ara Tensörler

$$T_{ia}^Q = \sum_j^{N_{occ}} \sum_b^{N_{vir}} t_{ij}^{ab} b_{jb}^Q \quad (98)$$

$$t_Q = \sum_m^{N_{occ}} \sum_f^{N_{vir}} t_m^f b_{mf}^Q \quad (99)$$

$$t_{ia}^Q = \sum_f^{N_{vir}} t_i^f b_{af}^Q \quad (100)$$

$$t_{ij}^Q = \sum_e^{N_{vir}} t_i^e b_{je}^Q \quad (101)$$

$$t_{ai}^Q = \sum_m^{N_{occ}} t_m^a b_{mi}^Q \quad (102)$$

$$t_{ab}^Q = \sum_m^{N_{occ}} t_m^a b_{mb}^Q \quad (103)$$

$$\tilde{\tau}_{ia}^Q = \sum_m^{N_{occ}} \sum_f^{N_{vir}} \tilde{\tau}_{im}^{af} b_{mf}^Q \quad (104)$$

$$\tilde{t}_{ia}^Q = \sum_m^{N_{occ}} t_{im}^Q t_m^a \quad (105)$$

$$t_{ia}^{Q'} = t_{ia}^Q - t_{ai}^Q - \tilde{t}_{ia}^Q \quad (106)$$

$$\tau_{ia}^{Q'} = \tilde{\tau}_{ia}^Q + t_{ia}^Q \quad (107)$$

$$\tau_{ia}^{Q''} = \tilde{\tau}_{ia}^Q - t_{ia}^Q \quad (108)$$

$$\tilde{\tau}_{ij}^{ab} = t_{ij}^{ab} + \frac{1}{2}(t_i^a t_j^b - t_i^b t_j^a) \quad (109)$$

F ve \mathcal{F} Matrisleri

$$F_{mi} = (1 - \delta_{mi})f_{mi} + \frac{1}{2} \sum_e^{N_{vir}} f_{me} t_i^e + \sum_Q^{N_{aux}} t_Q b_{mi}^Q + \sum_Q^{N_{aux}} \sum_e^{N_{vir}} \tau_{ie}^{Q''} b_{me}^Q \quad (110)$$

$$F_{ae} = (1 - \delta_{ae})f_{ae} - \frac{1}{2} \sum_e^{N_{occ}} f_{me} t_m^a + \sum_Q^{N_{aux}} t_Q b_{ae}^Q - \sum_Q^{N_{aux}} \sum_m^{N_{occ}} \tau_{ma}^{Q'} b_{me}^Q \quad (111)$$

$$F_{me} = f_{me} + \sum_Q^{N_{aux}} t_Q b_{me}^Q - \sum_Q^{N_{aux}} \sum_n^{N_{occ}} t_{nm}^Q b_{ne}^Q \quad (112)$$

$$\mathcal{F}_{mi} = F_{mi} + \frac{1}{2} \sum_e^{N_{vir}} t_i^e F_{me} \quad (113)$$

$$\mathcal{F}_{ae} = F_{ae} - \frac{1}{2} \sum_m^{N_{occ}} t_m^a F_{me} \quad (114)$$

W Tensörleri

$$W_{mnij} = \langle mn||ij \rangle + P_-(mn)P_-(ij) \sum_Q^{N_{aux}} t_{im}^Q b_{jn}^Q + \sum_{e,f}^{N_{vir}} \tau_{ij}^{ef} \langle mn|ef \rangle \quad (115)$$

$$W_{abef} = \langle ab||ef \rangle - P_-(ab) \sum_m^{N_{occ}} t_m^b \langle am||ef \rangle \quad (116)$$

$$\begin{aligned} W_{mbej} &= \langle mb||ej \rangle + \sum_Q^{N_{aux}} (t_{jb}^{Q'} + \frac{1}{2} T_{jb}^Q) b_{me}^Q + \sum_Q^{N_{aux}} t_{be}^Q (t_{jm}^Q b_{jm}^Q) \\ &+ \sum_Q^{N_{aux}} t_{jm}^Q b_{be}^Q - \frac{1}{2} \sum_n^{N_{occ}} \sum_f^{N_{vir}} t_{jn}^{bf} \langle em|nf \rangle \end{aligned} \quad (117)$$

EK 2 – Çevresel LMO Seçiminde kullanılan Parametrenin İncelenmesinde Kullanılan Set için Toplam Enerjiler

Çizelge 5.1. Farklı ζ değerleri için CIM-DF-MP2/cc-pVTZ enerjilerine karşılık DF-MP2/cc-pVTZ enerjileri.

Molekül	CIM-DF-MP2				DF-MP2
	0,0001	0,0005	0,001	0,002	
A	-1960,1898884	-1960,1843308	-1960,1843243	-1960,1844812	-1960,190335
B	-1960,1857689	-1960,1785047	-1960,1754972	-1960,1703198	-1960,187563
C	-1960,1182692	-1960,1075687	-1960,0979057	-1960,0841402	-1960,121466
D	-1960,1434082	-1960,1338265	-1960,1269280	-1960,1118079	-1960,146331
E	-2351,9926137	-2351,9858028	-2351,9857621	-2351,9860386	-2351,993178
F	-2351,9988495	-2351,9875079	-2351,9810450	-2351,9711012	-2352,002237
G	-2351,9414376	-2351,9266070	-2351,9160657	-2351,8996009	-2351,946323
H	-2351,9359487	-2351,9234441	-2351,9171053	-2351,9027273	-2351,939182

EK 3 – Hesaplamalarda ve Örneklerde Ele Alınan Yapıların Molekül Geometrileri

n-Dekan ($C_{10}H_{22}$)

C	5.767998034560	-0.292223071368	-0.000000934117
C	4.472599985739	0.542179474234	-0.000000234497
C	3.212932639294	-0.344666091054	-0.000000849817
C	1.910224926783	0.477479852987	0.000000109928
C	0.651523451973	-0.411017128989	-0.000000655493
C	-0.651523262139	0.411021786924	0.000000524429
C	-1.910224502171	-0.477475652806	-0.000000448385
C	-3.212933676926	0.344667879718	0.000000983787
C	-4.472597991977	-0.542181554881	-0.000000136940
C	-5.767999419511	0.292215405325	0.000001589769
H	6.644319277378	0.346653090023	-0.000001027049

H	5.812261314524	-0.927344949402	0.878520227219
H	5.812260729665	-0.927344307206	-0.878522591682
H	4.456124636983	1.186054593589	0.874146780038
H	4.456124481003	1.186055952183	-0.874146249280
H	3.230289289553	-0.989059378561	-0.874794161442
H	3.230289560472	-0.989060980886	0.874791280477
H	1.893520588917	1.121696485797	0.874908980190
H	1.893520381488	1.121698285030	-0.874907435929
H	0.668270365491	-1.055212299456	-0.874895387469
H	0.668270668387	-1.055214268947	0.874892618521
H	-0.668270352721	1.055216816462	0.874895422497
H	-0.668270570096	1.055219011068	-0.874892750678
H	-1.893519236106	-1.121692310096	-0.874909497679
H	-1.893518878558	-1.121694748584	0.874906799020
H	-3.230291911097	0.989060483021	0.874794523385
H	-3.230292226098	0.989063135863	-0.874790595329
H	-4.456120754713	-1.186056174377	-0.874147492578
H	-4.456120356622	-1.186058993110	0.874145132928
H	-6.644318553796	-0.346664413921	0.000000510242
H	-5.812265226368	0.927335517576	0.878524423279
H	-5.812265437879	0.927338736724	-0.878518897430

2,2,5-Trimetilheptan (C₁₀H₂₂)

C	2.0576210000	-0.0485210000	0.0048460000
C	0.6120400000	-0.1335020000	-0.5568820000
C	-0.4812280000	0.6219680000	0.2101430000
C	-1.8620560000	0.6303980000	-0.4799770000
C	-2.4572340000	-0.7762530000	-0.7236820000
C	2.9662680000	-0.9020500000	-0.9009110000
C	2.5731890000	1.4033750000	-0.0072530000
C	2.1228230000	-0.6049050000	1.4398920000
C	-2.8364320000	1.5370660000	0.2871470000
C	-2.6846170000	-1.6360380000	0.5251340000
H	0.3418460000	-1.2027560000	-0.6201220000
H	0.6297800000	0.2338940000	-1.6004450000
H	-0.1737050000	1.6730130000	0.3484510000
H	-0.5871170000	0.2064960000	1.2278930000
H	-1.7191390000	1.0803000000	-1.4816880000
H	-3.4189820000	-0.6501730000	-1.2531860000
H	-1.8062320000	-1.3277170000	-1.4238820000

H	4.0125890000	-0.8758980000	-0.5534840000
H	2.9487350000	-0.5364030000	-1.9413720000
H	2.6421700000	-1.9563010000	-0.9114200000
H	1.9954560000	2.0536530000	0.6686350000
H	2.5200840000	1.8373600000	-1.0201940000
H	3.6259970000	1.4454760000	0.3185510000
H	1.7449220000	-1.6405460000	1.4839070000
H	3.1622240000	-0.6135350000	1.8087520000
H	1.5291000000	0.0006920000	2.1428580000
H	-3.8204960000	1.5807820000	-0.2085860000
H	-2.4492480000	2.5671580000	0.3537950000
H	-2.9982960000	1.1829320000	1.3191970000
H	-3.1353690000	-2.6042320000	0.2526130000
H	-3.3643380000	-1.1506460000	1.2444290000
H	-1.7422260000	-1.8527840000	1.0545570000

2,2-Dimetiloktan (C₁₀H₂₂)

C	-2.6098300000	-0.0237760000	0.0000010000
C	-1.2237340000	0.6740090000	-0.0000070000
C	0.0207080000	-0.2227870000	-0.0000060000
C	1.3288570000	0.5777800000	-0.0000070000
C	-2.7890430000	-0.8941430000	-1.2584770000
C	-2.7890380000	-0.8941070000	1.2585020000
C	-3.6916850000	1.0735520000	-0.0000140000
C	2.5865770000	-0.2970020000	0.0000040000
C	3.8944250000	0.5017940000	0.0000030000
C	5.1444720000	-0.3811590000	-0.0000010000
H	-1.1764230000	1.3408230000	-0.8815310000
H	-1.1764200000	1.3408320000	0.8815090000
H	0.0097090000	-0.8870530000	0.8825140000
H	0.0097070000	-0.8870520000	-0.8825270000
H	1.3486280000	1.2453360000	-0.8822840000
H	1.3486210000	1.2453480000	0.8822630000
H	-3.8036490000	-1.3251830000	-1.2932410000
H	-2.0753010000	-1.7328280000	-1.2867540000
H	-2.6476050000	-0.2998790000	-2.1772680000
H	-3.8036390000	-1.3251620000	1.2932750000
H	-2.6476150000	-0.2998150000	2.1772770000
H	-2.0752860000	-1.7327830000	1.2868080000
H	-3.6059640000	1.7188340000	0.8903970000

H	-3.6059720000	1.7188030000	-0.8904470000
H	-4.7033010000	0.6343860000	-0.0000010000
H	2.5679390000	-0.9646340000	0.8825170000
H	2.5679440000	-0.9646500000	-0.8824960000
H	3.9128950000	1.1684410000	0.8821190000
H	3.9128920000	1.1684410000	-0.8821140000
H	5.1727570000	-1.0344500000	0.8889260000
H	5.1727980000	-1.0343870000	-0.8889720000
H	6.0670260000	0.2216620000	0.0000420000

n-Undekan (C₁₁H₂₄)

C	0.0000140000	0.4683870000	0.0001020000
C	-1.2831520000	-0.3691720000	-0.0001500000
C	1.2831000000	-0.3692510000	-0.0000540000
C	-2.5667260000	0.4677700000	0.0001180000
C	2.5666820000	0.4676910000	-0.0001450000
C	-3.8495180000	-0.3699260000	-0.0001570000
C	3.8495560000	-0.3699370000	0.0000060000
C	-5.1337320000	0.4662580000	-0.0000240000
C	5.1337420000	0.4662770000	-0.0000650000
C	-6.4087480000	-0.3803330000	0.0001610000
C	6.4087770000	-0.3802940000	0.0001780000
H	0.0000150000	1.1363070000	-0.8820830000
H	0.0000060000	1.1358900000	0.8825980000
H	-1.2828910000	-1.0366170000	-0.8826970000
H	-1.2829490000	-1.0371890000	0.8819640000
H	1.2829350000	-1.0370180000	0.8822420000
H	1.2827930000	-1.0369490000	-0.8824010000
H	-2.5668520000	1.1351940000	0.8827190000
H	-2.5668840000	1.1358000000	-0.8820260000
H	2.5668410000	1.1355510000	0.8821300000
H	2.5668330000	1.1352910000	-0.8826130000
H	-3.8499480000	-1.0376230000	-0.8828070000
H	-3.8500800000	-1.0380660000	0.8821590000
H	3.8500150000	-1.0377510000	0.8825720000
H	3.8500750000	-1.0379570000	-0.8824020000
H	-5.1329060000	1.1331760000	0.8820710000
H	-5.1331440000	1.1331040000	-0.8821720000
H	5.1329730000	1.1333480000	0.8819120000
H	5.1330770000	1.1329760000	-0.8823230000

H	-7.3135340000	0.2488310000	-0.0002230000
H	-6.4557120000	-1.0328600000	-0.8885380000
H	-6.4559620000	-1.0321540000	0.8893610000
H	6.4557400000	-1.0324080000	0.8891780000
H	6.4560040000	-1.0325370000	-0.8887080000
H	7.3135860000	0.2488470000	0.0002640000

2,2,3,4,4-Pentametilheksan (C₁₁H₂₄)

C	0.4408130000	0.7224920000	0.2936100000
C	-1.0637700000	0.2110780000	0.3906500000
C	1.6329010000	-0.2814620000	-0.0267840000
C	-1.5053960000	-0.5544790000	-0.8868210000
C	0.5437090000	1.9653920000	-0.6210260000
C	-1.9791160000	1.4459870000	0.5945040000
C	-1.2791930000	-0.6704360000	1.6452360000
C	2.9379010000	0.3646250000	0.5034690000
C	1.8206090000	-0.5508300000	-1.5373100000
C	1.5292530000	-1.6460350000	0.6854060000
C	-2.9861630000	-0.9482640000	-0.9769860000
H	0.6563850000	1.0759570000	1.3192720000
H	-1.2572040000	0.0561410000	-1.7720730000
H	-0.9030480000	-1.4726660000	-0.9729930000
H	0.1093640000	1.7858670000	-1.6174730000
H	1.5869850000	2.2725820000	-0.7754270000
H	0.0254240000	2.8314980000	-0.1885180000
H	-1.6075870000	2.0809400000	1.4163490000
H	-2.9976140000	1.1310740000	0.8670800000
H	-2.0599910000	2.0720690000	-0.3062750000
H	-2.3544240000	-0.7973360000	1.8469060000
H	-0.8398870000	-0.1943180000	2.5376710000
H	-0.8478950000	-1.6741680000	1.5540350000
H	2.6919230000	-1.2095120000	-1.6906220000
H	0.9507890000	-1.0514230000	-1.9858460000
H	2.0091390000	0.3713550000	-2.1070650000
H	3.7997160000	-0.2894940000	0.2921040000
H	2.8911160000	0.5116720000	1.5954000000
H	3.1507300000	1.3407850000	0.0428540000
H	2.4611120000	-2.2126440000	0.5208270000
H	1.4019660000	-1.5343160000	1.7728770000
H	0.7063830000	-2.2660910000	0.3028420000

H	-3.3019960000	-1.5790110000	-0.1303810000
H	-3.1685170000	-1.5256630000	-1.8980390000
H	-3.6521500000	-0.0717010000	-1.0071930000

5-Etil-3,3-dimetilheptan (C₁₁H₂₄)

C	-1.4825260000	0.0367140000	0.4279860000
C	-0.0372640000	-0.4841530000	0.6858390000
C	1.0982820000	0.0202440000	-0.2473380000
C	-1.9757570000	-0.5054920000	-0.9415050000
C	1.9311660000	1.1308140000	0.4295860000
C	1.9651160000	-1.1480830000	-0.7763010000
C	-1.5355500000	1.5762150000	0.4664110000
C	-2.3734340000	-0.5138130000	1.5598870000
C	-3.3810200000	-0.0896980000	-1.3912980000
C	2.9712090000	1.8019240000	-0.4725010000
C	2.7821620000	-1.9021880000	0.2793910000
H	0.2258090000	-0.2504000000	1.7331250000
H	-0.0857840000	-1.5863710000	0.6364640000
H	0.6355950000	0.4753280000	-1.1423330000
H	-1.9254930000	-1.6092470000	-0.9042800000
H	-1.2590560000	-0.1990360000	-1.7230300000
H	1.2401910000	1.9025390000	0.8075240000
H	2.4294020000	0.7193820000	1.3261860000
H	2.6496090000	-0.7698800000	-1.5554510000
H	1.2962200000	-1.8608090000	-1.2911660000
H	-2.3707870000	-1.6168960000	1.5696930000
H	-3.4184020000	-0.1805310000	1.4590050000
H	-2.0129890000	-0.1707110000	2.5439250000
H	-0.9606360000	2.0325120000	-0.3556060000
H	-2.5713170000	1.9423630000	0.3875200000
H	-1.1273370000	1.9587850000	1.4163970000
H	-4.1596210000	-0.4057330000	-0.6785450000
H	-3.6229060000	-0.5517720000	-2.3622550000
H	-3.4696530000	1.0010020000	-1.5202310000
H	2.5043070000	2.2149730000	-1.3836070000
H	3.5357840000	-1.2554580000	0.7578400000
H	2.1437330000	-2.3126970000	1.0795310000
H	3.3210720000	-2.7486940000	-0.1766180000
H	3.7586720000	1.1017610000	-0.7953200000
H	3.4692850000	2.6346930000	0.0502920000

n-Dodekan (C₁₂H₂₆)

C	0.6344400000	0.4295360000	0.0001310000
C	-0.6344390000	-0.4295240000	0.0000980000
C	1.9317360000	-0.3860020000	0.0000570000
C	-1.9317330000	0.3860150000	0.0001790000
C	3.2006390000	0.4730120000	0.0000160000
C	-3.2006370000	-0.4730010000	0.0000570000
C	4.4979600000	-0.3420520000	-0.0000350000
C	-4.4979570000	0.3420580000	0.0000520000
C	5.7671960000	0.5166870000	-0.0001880000
C	-5.7671920000	-0.5166930000	-0.0001230000
C	7.0570380000	-0.3070950000	-0.0000360000
C	-7.0570500000	0.3070660000	-0.0001730000
H	0.6231720000	1.0971310000	0.8824840000
H	0.6231240000	1.0972310000	-0.8821490000
H	-0.6231310000	-1.0972320000	0.8823630000
H	-0.6231630000	-1.0971080000	-0.8822660000
H	1.9428930000	-1.0536150000	-0.8822880000
H	1.9429760000	-1.0536540000	0.8823710000
H	-1.9429310000	1.0537500000	-0.8820750000
H	-1.9429400000	1.0535420000	0.8825880000
H	3.1892470000	1.1406620000	0.8823760000
H	3.1891770000	1.1406700000	-0.8823390000
H	-3.1892530000	-1.1407180000	0.8823670000
H	-3.1891550000	-1.1405890000	-0.8823530000
H	4.5100910000	-1.0099070000	-0.8824880000
H	4.5102220000	-1.0098080000	0.8824920000
H	-4.5102260000	1.0097740000	0.8826060000
H	-4.5100970000	1.0099510000	-0.8823740000
H	5.7547300000	1.1833110000	-0.8824150000
H	5.7547240000	1.1836160000	0.8818100000
H	-5.7547960000	-1.1835450000	0.8819320000
H	-5.7546310000	-1.1833870000	-0.8822970000
H	7.1159760000	-0.9579030000	0.8892090000
H	7.1156200000	-0.9587550000	-0.8886850000
H	7.9505080000	0.3380580000	-0.0005270000
H	-7.1158800000	0.9581560000	-0.8892180000
H	-7.9504980000	-0.3381150000	-0.0000150000
H	-7.1157650000	0.9584390000	0.8886760000

3-Etil-2,5,6-trimetilheptan (C₁₂H₂₆)

C	1.2252110000	0.2842800000	0.1810000000
C	-0.1125690000	-0.3332350000	-0.2912530000
C	-1.3780700000	0.2952570000	0.3375480000
C	2.4276790000	-0.6965700000	0.0511490000
C	-2.6228090000	0.1294790000	-0.5805400000
C	1.4814220000	1.6294600000	-0.5348700000
C	-1.5987080000	-0.2225390000	1.7679790000
C	2.3883720000	-1.7967960000	1.1226170000
C	2.5775630000	-1.3117040000	-1.3494030000
C	-3.8201730000	0.9603070000	-0.0966230000
C	-3.0390120000	-1.3311930000	-0.8122440000
C	2.5414590000	2.5231510000	0.1168150000
H	1.1328170000	0.5094860000	1.2606050000
H	-0.1189010000	-1.4160700000	-0.0820140000
H	-0.1694940000	-0.2393660000	-1.3907330000
H	-1.2087950000	1.3864480000	0.4073920000
H	3.3394190000	-0.1037280000	0.2450060000
H	-2.3226890000	0.5414960000	-1.5630340000
H	0.5330860000	2.1927440000	-0.5774300000
H	1.7554420000	1.4366740000	-1.5881510000
H	-1.8047790000	-1.3059000000	1.7789240000
H	-2.4391140000	0.2847110000	2.2669890000
H	-0.7054620000	-0.0555640000	2.3906890000
H	2.6174550000	-0.5450040000	-2.1396710000
H	3.5077850000	-1.8996540000	-1.4154480000
H	1.7432480000	-1.9926300000	-1.5865400000
H	3.2812890000	-2.4406670000	1.0600130000
H	2.3559090000	-1.3675920000	2.1377980000
H	1.5071350000	-2.4508600000	1.0095730000
H	-4.2335270000	0.5740540000	0.8501920000
H	-4.6355390000	0.9412360000	-0.8385260000
H	-3.5408920000	2.0148590000	0.0658910000
H	-3.3929740000	-1.8075060000	0.1174310000
H	-3.8658510000	-1.3858000000	-1.5395500000
H	-2.2116630000	-1.9409170000	-1.2083490000
H	2.2733870000	2.7638800000	1.1600290000
H	2.6437350000	3.4761100000	-0.4274750000
H	3.5367870000	2.0501790000	0.1333400000

4-Etil-2,3,5-trimetilheptan (C₁₂H₂₆)

C	0.1827770000	0.5502030000	-0.2819870000
C	-1.2612900000	0.3052460000	0.2635630000
C	1.2886900000	-0.3604560000	0.3480720000
C	-1.8286840000	-1.1095180000	-0.0660720000
C	0.5791640000	2.0453340000	-0.2857620000
C	2.3504730000	-0.7274700000	-0.7142820000
C	-1.4169700000	0.6342400000	1.7592250000
C	1.9505820000	0.2112650000	1.6156020000
C	-1.7338970000	-1.4656860000	-1.5587260000
C	-3.2912320000	-1.2564050000	0.3895060000
C	-0.2532670000	2.9304410000	-1.2202800000
C	3.4099400000	-1.7371570000	-0.2614890000
H	0.1409320000	0.2675460000	-1.3469750000
H	-1.9093980000	1.0120930000	-0.2881480000
H	0.8030110000	-1.3098310000	0.6382820000
H	-1.2369860000	-1.8569550000	0.4963870000
H	0.5442540000	2.4623760000	0.7351830000
H	1.6356930000	2.1198380000	-0.5962220000
H	1.8296990000	-1.1385820000	-1.5972770000
H	2.8525070000	0.1943460000	-1.0637920000
H	-0.9630140000	-0.1419610000	2.3978960000
H	-2.4760770000	0.7133580000	2.0448670000
H	-0.9465320000	1.5953400000	2.0154270000
H	2.5901410000	1.0795090000	1.3849540000
H	2.5906220000	-0.5444240000	2.0969090000
H	1.2125890000	0.5322750000	2.3634150000
H	-3.6873280000	-2.2455030000	0.1072700000
H	-3.4076060000	-1.1567970000	1.4782910000
H	-3.9325390000	-0.4945280000	-0.0888010000
H	-2.2250510000	-2.4326280000	-1.7552970000
H	-0.6966380000	-1.5514930000	-1.9144270000
H	-2.2396340000	-0.7062560000	-2.1813410000
H	-0.2375810000	2.5464440000	-2.2550140000
H	-1.3081740000	2.9972780000	-0.9092890000
H	0.1435260000	3.9585020000	-1.2424370000
H	2.9436760000	-2.6592190000	0.1274830000
H	4.0612780000	-2.0255710000	-1.1025860000
H	4.0609130000	-1.3353890000	0.5310250000

2,3,4,5,6-Pentametilheptan (C₁₂H₂₆)

C	0.0307800000	0.8267340000	-0.1391040000
C	-1.4538990000	0.5502930000	0.2657590000
C	1.0588120000	-0.1981650000	0.4361690000
C	-1.9127320000	-0.9241340000	0.0576590000
C	2.4905840000	-0.0582510000	-0.1651780000
C	0.4287020000	2.2777820000	0.1941570000
C	-2.4013520000	1.5465900000	-0.4311520000
C	1.0962910000	-0.1770340000	1.9755780000
C	-3.2689790000	-1.2090510000	0.7240480000
C	-1.9359040000	-1.3686350000	-1.4132140000
C	2.4990310000	-0.0035510000	-1.7014960000
C	3.4112280000	-1.2011800000	0.2973690000
H	0.0671540000	0.7262470000	-1.2369550000
H	-1.5395130000	0.7398540000	1.3523040000
H	0.7163740000	-1.2017070000	0.1269800000
H	-1.1829290000	-1.5640180000	0.5811590000
H	2.9310820000	0.8854530000	0.2077060000
H	0.2640540000	2.5092480000	1.2601360000
H	-0.1503010000	3.0051090000	-0.3926280000
H	1.4906470000	2.4669290000	-0.0237740000
H	-3.4568730000	1.3043600000	-0.2365970000
H	-2.2563310000	1.5502000000	-1.5248890000
H	-2.2430160000	2.5749420000	-0.0761210000
H	0.0869620000	-0.2371440000	2.4105800000
H	1.5644040000	0.7466540000	2.3556360000
H	1.6675280000	-1.0245590000	2.3815680000
H	-3.4902610000	-2.2889350000	0.7038450000
H	-3.2760530000	-0.8870510000	1.7788060000
H	-4.1022500000	-0.6996610000	0.2128260000
H	-0.9574000000	-1.2448240000	-1.9042940000
H	-2.2094200000	-2.4339990000	-1.4911940000
H	-2.6769380000	-0.7990050000	-1.9987210000
H	3.5341140000	0.0017560000	-2.0802820000
H	1.9956470000	-0.8870560000	-2.1331670000
H	2.0022370000	0.8931910000	-2.1005040000
H	3.5554870000	-1.2156460000	1.3875190000
H	3.0019150000	-2.1829460000	-0.0009050000
H	4.4082970000	-1.1057840000	-0.1626080000

5,5-Dietil-2-metilheptan (C₁₂H₂₆)

C	-1.1244160000	0.0225160000	-0.0950020000
C	0.2892820000	0.0062200000	0.5549930000
C	-2.1412200000	-0.1869200000	1.0635390000
C	-1.2611310000	-1.0982500000	-1.1642220000
C	-1.3931610000	1.3666760000	-0.8289030000
C	1.4980440000	0.1751030000	-0.3756050000
C	2.8557070000	0.2727580000	0.3506810000
C	-1.3103000000	2.6509340000	0.0031920000
C	-1.0498970000	-2.5432560000	-0.6995080000
C	-3.6295460000	-0.2095410000	0.6979740000
C	3.9671390000	0.6527920000	-0.6371530000
C	3.2228030000	-1.0158850000	1.0999790000
H	0.3919270000	-0.9371900000	1.1166280000
H	0.3254550000	0.8008070000	1.3216280000
H	-0.6902050000	1.4473860000	-1.6759700000
H	-2.3922170000	1.3099620000	-1.2944970000
H	-0.5535300000	-0.8823790000	-1.9833640000
H	-2.2616120000	-1.0166870000	-1.6233240000
H	-1.8893180000	-1.1299030000	1.5787950000
H	-1.9733130000	0.6015750000	1.8176400000
H	1.3725470000	1.0889210000	-0.9818410000
H	1.5478500000	-0.6620130000	-1.0963480000
H	2.7759090000	1.0874120000	1.0971100000
H	-3.8743350000	-1.0203580000	-0.0070870000
H	-4.2419630000	-0.3683960000	1.6005720000
H	-3.9631700000	0.7366470000	0.2420630000
H	-1.7713180000	-2.8424660000	0.0779200000
H	-1.1774710000	-3.2387450000	-1.5451000000
H	-0.0388110000	-2.7085800000	-0.2938870000
H	-1.5261700000	3.5291260000	-0.6270240000
H	-2.0364130000	2.6598980000	0.8321670000
H	-0.3096000000	2.8026030000	0.4392110000
H	4.9376420000	0.7665550000	-0.1265580000
H	3.7438110000	1.6022360000	-1.1513430000
H	4.0892230000	-0.1243010000	-1.4124950000
H	4.2002070000	-0.9168040000	1.6005150000
H	2.4823770000	-1.2747280000	1.8727680000
H	3.2926710000	-1.8694470000	0.4020300000

n-Tridekan (C₁₃H₂₈)

C	0.0000020000	-0.3753760000	0.0003000000
C	1.2834260000	0.4618300000	0.0001920000
C	-1.2834140000	0.4618500000	0.0002280000
C	2.5663450000	-0.3761300000	0.0002250000
C	-2.5663490000	-0.3760950000	0.0001960000
C	3.8502040000	0.4603820000	0.0000630000
C	-3.8502090000	0.4604050000	0.0000410000
C	5.1327860000	-0.3776810000	-0.0000290000
C	-5.1327750000	-0.3776730000	-0.0000280000
C	6.4172890000	0.4580710000	-0.0001670000
C	-6.4172960000	0.4580540000	-0.0003120000
C	7.6919890000	-0.3889450000	-0.0003660000
C	-7.6919990000	-0.3889610000	-0.0002480000
H	0.0000070000	-1.0430580000	0.8826560000
H	-0.0000200000	-1.0432180000	-0.8819370000
H	1.2836300000	1.1296470000	0.8824480000
H	1.2835800000	1.1294670000	-0.8822020000
H	-1.2836230000	1.1296100000	0.8825280000
H	-1.2835460000	1.1295390000	-0.8821260000
H	2.5658480000	-1.0439750000	-0.8820140000
H	2.5659410000	-1.0437800000	0.8826110000
H	-2.5658230000	-1.0438990000	-0.8820750000
H	-2.5659570000	-1.0437880000	0.8825520000
H	3.8504960000	1.1280810000	-0.8823320000
H	3.8506600000	1.1281630000	0.8823980000
H	-3.8506630000	1.1282040000	0.8823600000
H	-3.8505130000	1.1281010000	-0.8823570000
H	5.1331350000	-1.0455820000	0.8824690000
H	5.1329730000	-1.0456270000	-0.8824980000
H	-5.1329170000	-1.0457150000	-0.8824210000
H	-5.1331570000	-1.0454970000	0.8825320000
H	6.4166950000	1.1249830000	-0.8822700000
H	6.4169280000	1.1249460000	0.8819600000
H	-6.4168980000	1.1251300000	0.8816670000
H	-6.4167510000	1.1247760000	-0.8825580000
H	7.7388080000	-1.0414550000	0.8883560000
H	8.5970290000	0.2398670000	-0.0000740000
H	7.7389530000	-1.0408360000	-0.8895300000
H	-7.7386650000	-1.0415580000	-0.8889140000
H	-7.7391180000	-1.0407660000	0.8889710000

H -8.5970390000 0.2398510000 -0.0007620000

5-Etil-3,6-dimetilnonan (C₁₃H₂₈)

C 0.0626530000 0.9106180000 0.0770680000
C -1.0871840000 0.1107480000 0.7617210000
C 0.8763660000 0.0287190000 -0.8979500000
C 1.8816030000 -0.9500080000 -0.2515000000
C -0.4265970000 2.2056530000 -0.6098210000
C -2.2955450000 -0.1452610000 -0.1646220000
C -1.5139810000 0.7718590000 2.0821270000
C 3.1343100000 -0.2127340000 0.2645900000
C -3.2277450000 -1.2725550000 0.2988240000
C 2.2498310000 -2.0622860000 -1.2442380000
C 0.6728860000 3.2512280000 -0.8240250000
C 4.0419580000 -1.0435040000 1.1770910000
C -4.3979470000 -1.5127270000 -0.6586640000
H 0.7417350000 1.2237910000 0.8921260000
H -0.6674160000 -0.8791660000 1.0217850000
H 1.4351670000 0.6703260000 -1.6025970000
H 0.1709750000 -0.5441910000 -1.5256070000
H 1.3916490000 -1.4269930000 0.6195160000
H -1.2266760000 2.6651450000 -0.0048920000
H -0.8892200000 1.9551740000 -1.5815250000
H -1.9372940000 -0.3956300000 -1.1791650000
H -2.8819260000 0.7856770000 -0.2744910000
H -1.9296960000 1.7802990000 1.9156630000
H -2.2844940000 0.1834600000 2.6042380000
H -0.6577630000 0.8748820000 2.7689270000
H 3.7139930000 0.1485950000 -0.6063060000
H 2.8215910000 0.6924170000 0.8133540000
H -2.6419880000 -2.2045560000 0.4048450000
H -3.6239780000 -1.0482540000 1.3047110000
H 2.9639580000 -2.7832960000 -0.8167140000
H 1.3570370000 -2.6281740000 -1.5570000000
H 2.7091680000 -1.6379240000 -2.1547430000
H 1.1027120000 3.5779690000 0.1383010000
H 1.5015870000 2.8635700000 -1.4390180000
H 0.2780830000 4.1456950000 -1.3326840000
H 3.4945620000 -1.3976070000 2.0676760000
H 4.8997650000 -0.4486210000 1.5306720000

H	4.4484820000	-1.9305150000	0.6650120000
H	-5.0260590000	-0.6107920000	-0.7575860000
H	-5.0459980000	-2.3326990000	-0.3089220000
H	-4.0415960000	-1.7770730000	-1.6691920000

2,4,8-Trimetildekan (C₁₃H₂₈)

C	1.3423310000	-1.2626570000	0.2549930000
C	0.1446260000	-1.9204020000	-0.4662130000
C	-1.0974560000	-1.0430670000	-0.7047840000
C	2.0027460000	-0.1845950000	-0.6285860000
C	-1.8270850000	-0.6351720000	0.5841710000
C	-3.1650030000	0.1207640000	0.4056990000
C	3.1233110000	0.6647750000	0.0056080000
C	2.3464810000	-2.3434900000	0.6824890000
C	-3.0363430000	1.4589260000	-0.3499890000
C	-4.2471540000	-0.7578150000	-0.2399630000
C	2.6294400000	1.4928810000	1.2000950000
C	3.7570580000	1.5762120000	-1.0547240000
C	-2.0915920000	2.4792640000	0.2913450000
H	0.9619620000	-0.7798440000	1.1728280000
H	-0.1677350000	-2.8062590000	0.1169990000
H	0.4991460000	-2.3109960000	-1.4383570000
H	-1.7880420000	-1.6102140000	-1.3522990000
H	-0.8204690000	-0.1443530000	-1.2827400000
H	1.2254490000	0.5095430000	-0.9972520000
H	2.4090960000	-0.6847940000	-1.5287130000
H	-1.1556130000	-0.0209120000	1.2078670000
H	-2.0286220000	-1.5465310000	1.1778400000
H	-3.5136900000	0.3644720000	1.4282000000
H	3.9147660000	-0.0164610000	0.3690520000
H	2.7617730000	-2.8658340000	-0.1977630000
H	3.1922340000	-1.9265050000	1.2511680000
H	1.8635220000	-3.1020260000	1.3201210000
H	-2.7220950000	1.2663380000	-1.3921340000
H	-4.0446790000	1.9046630000	-0.4243820000
H	-4.3667110000	-1.7117210000	0.3001640000
H	-5.2238390000	-0.2462830000	-0.2359250000
H	-4.0098620000	-0.9963270000	-1.2903940000
H	1.8202610000	2.1803900000	0.8942890000
H	2.2403240000	0.8615900000	2.0146090000

H	3.4438960000	2.1064570000	1.6194690000
H	3.0147570000	2.2856230000	-1.4617960000
H	4.1569590000	0.9928500000	-1.9005460000
H	4.5856690000	2.1681850000	-0.6323900000
H	-2.3760570000	2.6858510000	1.3376680000
H	-2.1151620000	3.4371370000	-0.2532850000
H	-1.0454000000	2.1322270000	0.2968650000

3-Etil-4,7-dimetilnonan (C₁₃H₂₈)

C	-0.9925530000	-0.6481460000	0.3741040000
C	-2.1987030000	0.1534710000	-0.2016890000
C	0.3543880000	-0.0423580000	-0.0759540000
C	1.5881240000	-0.8883160000	0.2701500000
C	2.9123220000	-0.4219080000	-0.3705290000
C	-3.4979050000	-0.6821120000	-0.2367540000
C	-2.4273860000	1.5026700000	0.5170890000
C	-1.0631760000	-0.8269120000	1.8999760000
C	3.3540990000	0.9586740000	0.1550590000
C	3.9970620000	-1.4886520000	-0.1604560000
C	-3.2124610000	2.5278700000	-0.3084720000
C	-3.5168130000	-1.8063060000	-1.2774490000
C	4.5789180000	1.5571370000	-0.5443570000
H	-1.0424370000	-1.6572510000	-0.0751170000
H	-1.9402150000	0.3879880000	-1.2531740000
H	0.4612110000	0.9692360000	0.3533890000
H	0.3218350000	0.0945380000	-1.1729010000
H	1.3982050000	-1.9294280000	-0.0510140000
H	1.7268620000	-0.9314860000	1.3659490000
H	2.7396130000	-0.3244760000	-1.4613180000
H	-3.6903380000	-1.1029110000	0.7669380000
H	-4.3478780000	-0.0092590000	-0.4411080000
H	-1.4549380000	1.9491630000	0.7850610000
H	-2.9506700000	1.3243860000	1.4739820000
H	-0.8824970000	0.1235050000	2.4294270000
H	-0.3105460000	-1.5483190000	2.2531240000
H	-2.0467050000	-1.2046560000	2.2216060000
H	2.5152410000	1.6673350000	0.0517020000
H	3.5506100000	0.8773780000	1.2415620000
H	4.9399760000	-1.2300670000	-0.6662030000
H	3.6714210000	-2.4665410000	-0.5514240000

H	4.2182930000	-1.6180880000	0.9140130000
H	-2.7273330000	-2.5551540000	-1.1017130000
H	-3.3724780000	-1.4080050000	-2.2965140000
H	-4.4804210000	-2.3412800000	-1.2641750000
H	-2.6810560000	2.7753720000	-1.2434150000
H	-4.2140420000	2.1611140000	-0.5868490000
H	-3.3530600000	3.4662360000	0.2523270000
H	5.4868630000	0.9532860000	-0.3873900000
H	4.7916630000	2.5707710000	-0.1676090000
H	4.4173330000	1.6359410000	-1.6334550000

4-Metil-5-propilnonan (C₁₃H₂₈)

C	0.0407450000	0.4735660000	0.3428790000
C	1.5142100000	0.1250310000	0.7147380000
C	-0.9826820000	-0.0997160000	1.3513560000
C	-0.1670680000	1.9927400000	0.1500370000
C	1.8901020000	-1.3397260000	0.4019260000
C	-2.4120340000	-0.2787130000	0.8103930000
C	1.8652600000	0.4596350000	2.1743150000
C	0.4224780000	2.5739860000	-1.1415400000
C	1.9746560000	-1.6978470000	-1.0869480000
C	-2.5833570000	-1.4403310000	-0.1771990000
C	0.1869660000	4.0801470000	-1.2814000000
C	2.4112300000	-3.1455230000	-1.3272400000
C	-4.0245110000	-1.6007760000	-0.6676670000
H	-0.1565170000	0.0032910000	-0.6365700000
H	2.1599500000	0.7544080000	0.0752980000
H	-0.6353350000	-1.0800070000	1.7221800000
H	-1.0165890000	0.5596060000	2.2363830000
H	0.2475580000	2.5360990000	1.0196130000
H	-1.2495770000	2.2118090000	0.1574060000
H	2.8735090000	-1.5488050000	0.8621680000
H	1.1803920000	-2.0244500000	0.9033200000
H	-2.7588610000	0.6570210000	0.3340450000
H	-3.0932520000	-0.4452660000	1.6646370000
H	1.5911530000	1.4918440000	2.4446470000
H	1.3567430000	-0.2157250000	2.8819790000
H	2.9491020000	0.3530270000	2.3435980000
H	1.5070540000	2.3719440000	-1.1909700000
H	-0.0218820000	2.0498930000	-2.0080910000

H	0.9993000000	-1.5300720000	-1.5764990000
H	2.6850830000	-1.0116070000	-1.5843310000
H	-1.9176410000	-1.2987550000	-1.0473040000
H	-2.2528190000	-2.3777510000	0.3078370000
H	0.6537840000	4.6370130000	-0.4508890000
H	-0.8901700000	4.3203590000	-1.2729060000
H	0.6078680000	4.4706160000	-2.2221510000
H	1.7020670000	-3.8580680000	-0.8720450000
H	3.4035410000	-3.3433640000	-0.8867700000
H	2.4716060000	-3.3773400000	-2.4029450000
H	-4.1240260000	-2.4479070000	-1.3655320000
H	-4.7157900000	-1.7785240000	0.1740200000
H	-4.3722300000	-0.6941230000	-1.1920330000

n-Tetradekan (C₁₄H₃₀)

C	-0.6468660000	-0.4106050000	0.0003630000
C	0.6468640000	0.4106060000	0.0002710000
C	-1.9195350000	0.4428320000	0.0003690000
C	1.9195480000	-0.4428360000	0.0002060000
C	-3.2131980000	-0.3784510000	0.0003010000
C	3.2132050000	0.3784460000	0.0000960000
C	-4.4859420000	0.4748730000	0.0002130000
C	4.4859370000	-0.4748760000	0.0000250000
C	-5.7795760000	-0.3460210000	-0.0000760000
C	5.7795640000	0.3460310000	-0.0001670000
C	-7.0527080000	0.5069330000	-0.0002360000
C	7.0527070000	-0.5069240000	-0.0001210000
C	-8.3387810000	-0.3227280000	-0.0006170000
C	8.3387810000	0.3227240000	-0.0004640000
H	-0.6551670000	-1.0782720000	0.8826920000
H	-0.6552560000	-1.0783380000	-0.8819170000
H	0.6551490000	1.0782820000	-0.8820520000
H	0.6552850000	1.0783230000	0.8825610000
H	-1.9111910000	1.1105090000	0.8826940000
H	-1.9111800000	1.1105470000	-0.8819290000
H	1.9111280000	-1.1105480000	-0.8820910000
H	1.9112550000	-1.1105070000	0.8825380000
H	-3.2214800000	-1.0461530000	0.8826100000
H	-3.2213790000	-1.0461160000	-0.8820390000
H	3.2213730000	1.0461120000	-0.8822430000

H	3.2214940000	1.0461490000	0.8824080000
H	-4.4776320000	1.1424990000	0.8826250000
H	-4.4773720000	1.1426480000	-0.8820880000
H	4.4774160000	-1.1426360000	-0.8822840000
H	4.4775860000	-1.1425190000	0.8824270000
H	-5.7889280000	-1.0139740000	0.8823360000
H	-5.7885930000	-1.0137920000	-0.8826330000
H	5.7888000000	1.0140080000	0.8822280000
H	5.7887020000	1.0137700000	-0.8827450000
H	-7.0430530000	1.1738660000	-0.8822680000
H	-7.0434500000	1.1736690000	0.8819480000
H	7.0433490000	-1.1735610000	0.8821350000
H	7.0431440000	-1.1739460000	-0.8820880000
H	-8.3947460000	-0.9743560000	0.8882230000
H	-8.3943620000	-0.9741060000	-0.8896610000
H	-9.2351990000	0.3183200000	-0.0007270000
H	8.3947690000	0.9735690000	-0.8898690000
H	8.3943630000	0.9748770000	0.8880160000
H	9.2351760000	-0.3183550000	0.0002150000

2,3,5,8-Tetrametildekan (C₁₄H₃₀)

C	0.6583960000	1.8791720000	-0.0122700000
C	1.6454830000	0.7800450000	-0.4665680000
C	2.0975320000	-0.2332810000	0.6055520000
C	-0.6526110000	1.3381420000	0.6074080000
C	2.9054090000	-1.4289550000	0.0182690000
C	-1.4957920000	0.4220470000	-0.2917320000
C	-2.8731840000	0.0316790000	0.2837960000
C	0.3906190000	2.8530100000	-1.1707730000
C	2.8636820000	0.4491830000	1.7497150000
C	-3.7060390000	-0.6965720000	-0.7906080000
C	4.1853960000	-1.0202670000	-0.7277560000
C	2.0414700000	-2.3466380000	-0.8594460000
C	-2.7470120000	-0.7995860000	1.5690180000
C	-5.1664510000	-0.9661710000	-0.4162690000
H	1.1518370000	2.4655640000	0.7839310000
H	1.1942680000	0.2379090000	-1.3152860000
H	2.5389200000	1.2832460000	-0.8782520000
H	1.1903320000	-0.6848320000	1.0479820000
H	-0.4099300000	0.8119930000	1.5457290000

H	-1.2695360000	2.2059580000	0.9070640000
H	3.2186050000	-2.0298870000	0.8933420000
H	-0.9356910000	-0.5041460000	-0.5182440000
H	-1.6619770000	0.9194010000	-1.2631510000
H	-3.4069020000	0.9702320000	0.5360100000
H	-0.0564950000	2.3445720000	-2.0415410000
H	-0.2959400000	3.6602520000	-0.8660280000
H	1.3271160000	3.3222850000	-1.5146040000
H	3.7413320000	1.0056150000	1.3792490000
H	3.2231620000	-0.2918280000	2.4828690000
H	2.2300790000	1.1664600000	2.2942930000
H	-3.2067200000	-1.6515090000	-1.0432140000
H	-3.6834910000	-0.0919940000	-1.7151710000
H	4.7688670000	-1.9127860000	-1.0081050000
H	4.8391410000	-0.3805370000	-0.1139780000
H	3.9597140000	-0.4744730000	-1.6592410000
H	1.1318220000	-2.6734970000	-0.3285760000
H	1.7252630000	-1.8494200000	-1.7916200000
H	2.6017550000	-3.2509510000	-1.1491620000
H	-2.2186380000	-1.7493500000	1.3699980000
H	-3.7319120000	-1.0492590000	1.9930660000
H	-2.1869310000	-0.2638150000	2.3508030000
H	-5.2584710000	-1.6549400000	0.4387480000
H	-5.7121900000	-1.4193970000	-1.2597050000
H	-5.6887760000	-0.0317180000	-0.1472380000

4-Etil-4,5,6-trimetilnonan (C₁₄H₃₀)

C	-1.3471320000	-0.3883590000	0.1519160000
C	-0.0700990000	-1.1541730000	0.6783900000
C	1.2365630000	-0.9555190000	-0.1650590000
C	-1.1097480000	1.1485840000	0.1330910000
C	-1.7067760000	-0.8467470000	-1.2941040000
C	-2.5399830000	-0.7176610000	1.0797870000
C	0.1926740000	-0.9667490000	2.1850830000
C	2.1593370000	0.1897010000	0.3146870000
C	-2.3112270000	2.0542360000	-0.1818770000
C	2.0180010000	-2.2804100000	-0.2322820000
C	-1.9763310000	-2.3396240000	-1.5189030000
C	3.1510040000	0.6852820000	-0.7472260000
C	-1.9271200000	3.5372180000	-0.1884920000

C	4.0610630000	1.8053180000	-0.2368000000
H	-0.3300880000	-2.2200800000	0.5618280000
H	0.9353010000	-0.7110170000	-1.1978820000
H	-0.7129400000	1.4573460000	1.1160600000
H	-0.3148960000	1.3737660000	-0.5995580000
H	-2.6076060000	-0.2909040000	-1.6034240000
H	-0.9135040000	-0.5209990000	-1.9885410000
H	-2.4638570000	-0.1965800000	2.0466570000
H	-2.6031810000	-1.7970060000	1.2919650000
H	-3.4954540000	-0.4182180000	0.6211740000
H	0.3447100000	0.0864530000	2.4676590000
H	-0.6352530000	-1.3567540000	2.7942260000
H	1.0973010000	-1.5167760000	2.4894570000
H	1.5595520000	1.0521630000	0.6447410000
H	2.7234800000	-0.1406510000	1.2061750000
H	-2.7452120000	1.7932310000	-1.1623410000
H	-3.1115660000	1.8942090000	0.5604880000
H	1.4212360000	-3.0752850000	-0.7084880000
H	2.9505080000	-2.1793690000	-0.8094970000
H	2.2928900000	-2.6316810000	0.7775250000
H	-1.0853300000	-2.9629180000	-1.3440280000
H	-2.7803340000	-2.7193260000	-0.8680230000
H	-2.2923280000	-2.5141160000	-2.5604160000
H	3.7739080000	-0.1518180000	-1.1084740000
H	2.5863510000	1.0436750000	-1.6281510000
H	-1.1572420000	3.7494080000	-0.9501400000
H	-1.5179240000	3.8500460000	0.7875780000
H	-2.7964330000	4.1786910000	-0.4061220000
H	3.4734020000	2.6753490000	0.1030810000
H	4.7518080000	2.1553280000	-1.0210110000
H	4.6713420000	1.4672520000	0.6182160000

5-Metil-6-propildekan (C₁₄H₃₀)

C	0.9221080000	-0.3705690000	0.1403650000
C	-0.4565890000	0.0374470000	0.7404180000
C	2.1082250000	0.3856220000	0.7833390000
C	1.1731910000	-1.8960480000	0.1786110000
C	-1.6266940000	-0.4108180000	-0.1617420000
C	-0.6439030000	-0.4264650000	2.1940920000
C	2.1180180000	1.9184980000	0.6597830000

C	-2.9760720000	0.2497480000	0.1479910000
C	2.1884780000	-2.4067880000	-0.8530940000
C	2.1997600000	2.4566480000	-0.7744230000
C	-4.0897500000	-0.1627740000	-0.8214490000
C	2.4098420000	-3.9194930000	-0.7734170000
C	2.3248320000	3.9811900000	-0.8329860000
C	-5.4350740000	0.5004770000	-0.5175150000
H	0.8842260000	-0.0819470000	-0.9267690000
H	-0.4802820000	1.1426460000	0.7428720000
H	2.1639630000	0.1185770000	1.8537480000
H	3.0440900000	0.0041820000	0.3384520000
H	0.2239190000	-2.4331070000	0.0102520000
H	1.5092140000	-2.1901600000	1.1904500000
H	-1.3645150000	-0.1878050000	-1.2126970000
H	-1.7470970000	-1.5085240000	-0.1072840000
H	1.2328270000	2.3522490000	1.1597450000
H	2.9881010000	2.2987370000	1.2261310000
H	-1.5697830000	-0.0190790000	2.6287300000
H	0.1854080000	-0.0975220000	2.8399640000
H	-0.7040110000	-1.5256580000	2.2630570000
H	-3.2931470000	0.0058100000	1.1778740000
H	-2.8592930000	1.3501260000	0.1190160000
H	3.1567330000	-1.8924490000	-0.7229200000
H	1.8370810000	-2.1392540000	-1.8668140000
H	1.3083700000	2.1442000000	-1.3469840000
H	3.0653890000	1.9953560000	-1.2859740000
H	-3.7823000000	0.0826410000	-1.8549720000
H	-4.2060520000	-1.2621700000	-0.7947520000
H	1.4676070000	-4.4714360000	-0.9331640000
H	2.8000080000	-4.2154510000	0.2155100000
H	3.1307320000	-4.2641490000	-1.5324700000
H	3.2298520000	4.3288650000	-0.3058630000
H	2.3836710000	4.3440590000	-1.8719340000
H	1.4587300000	4.4724610000	-0.3571390000
H	-5.7878080000	0.2444410000	0.4962930000
H	-5.3604360000	1.6001840000	-0.5715060000
H	-6.2134200000	0.1841300000	-1.2306840000

7-Etil-3,5-dimetildekan (C₁₄H₃₀)

C	-0.4473520000	-0.9506270000	1.0263870000
C	1.8840070000	-0.2823220000	0.0292470000
C	1.0237890000	-1.3379510000	0.7591690000
C	-1.2909380000	-1.0433610000	-0.2633150000
C	-2.6695110000	-0.3479870000	-0.2434700000
C	2.3083730000	0.8386240000	1.0048440000
C	3.1170480000	-0.9304610000	-0.6364910000
C	-1.0311040000	-1.8338630000	2.1395390000
C	-2.5301510000	1.1872420000	-0.2952290000
C	2.7966860000	2.1488490000	0.3641200000
C	-3.5401710000	-0.8758130000	-1.3933850000
C	2.8122050000	-1.7483870000	-1.8950400000
C	-3.8188330000	1.9630680000	-0.0043650000
C	1.6945680000	2.9674860000	-0.3165450000
H	-0.4652560000	0.0945620000	1.3849660000
H	1.2729550000	0.1676750000	-0.7751140000
H	1.0268010000	-2.2846220000	0.1899660000
H	1.5173500000	-1.5695270000	1.7212980000
H	-0.7169650000	-0.6308370000	-1.1129770000
H	-1.4337660000	-2.1157300000	-0.4938950000
H	-3.1774040000	-0.6060950000	0.7054230000
H	3.1038810000	0.4366470000	1.6599240000
H	1.4644750000	1.0809890000	1.6756810000
H	3.6268340000	-1.5683950000	0.1102970000
H	3.8429850000	-0.1430810000	-0.9021790000
H	-0.9755970000	-2.9013070000	1.8612830000
H	-2.0874800000	-1.5997000000	2.3458220000
H	-0.4739340000	-1.7071750000	3.0822380000
H	-2.1413520000	1.4728460000	-1.2913910000
H	-1.7610630000	1.5055280000	0.4293790000
H	3.6015530000	1.9391420000	-0.3628710000
H	3.2630570000	2.7675080000	1.1511790000
H	-3.6803590000	-1.9665180000	-1.3174310000
H	-4.5400570000	-0.4148250000	-1.4032680000
H	-3.0672670000	-0.6690460000	-2.3700060000
H	2.3554450000	-1.1180860000	-2.6773480000
H	3.7317560000	-2.1856600000	-2.3169750000
H	2.1167390000	-2.5801980000	-1.6955700000
H	-4.2224340000	1.7052810000	0.9900100000
H	-4.6077100000	1.7553730000	-0.7451540000

H	-3.6378120000	3.0501680000	-0.0164920000
H	0.8929490000	3.2255820000	0.3971040000
H	1.2270740000	2.4215180000	-1.1525470000
H	2.0929040000	3.9110010000	-0.7241520000

n-Pentadekan (C₁₅H₃₂)

C	0.0000030000	0.4577640000	0.0000950000
C	1.2831850000	-0.3798470000	0.0001160000
C	-1.2831800000	-0.3798460000	0.0001040000
C	2.5668810000	0.4569660000	0.0001050000
C	-2.5668890000	0.4569550000	0.0000620000
C	3.8495350000	-0.3814250000	0.0001100000
C	-3.8495430000	-0.3814360000	0.0000430000
C	5.1336920000	0.4546490000	0.0000670000
C	-5.1336850000	0.4546540000	-0.0000190000
C	6.4159760000	-0.3838770000	-0.0000320000
C	-6.4159720000	-0.3838690000	-0.0000380000
C	7.7007610000	0.4514470000	-0.0001740000
C	-7.7007650000	0.4514490000	-0.0001220000
C	8.9751750000	-0.3959970000	-0.0001650000
C	-8.9751730000	-0.3960010000	-0.0001190000
H	-0.0000020000	1.1254950000	0.8824090000
H	0.0000050000	1.1254570000	-0.8822470000
H	1.2829760000	-1.0476180000	-0.8821700000
H	1.2829670000	-1.0475820000	0.8824280000
H	-1.2829810000	-1.0475720000	0.8824260000
H	-1.2829520000	-1.0476230000	-0.8821790000
H	2.5672710000	1.1246820000	0.8824360000
H	2.5672790000	1.1246740000	-0.8822310000
H	-2.5672620000	1.1246540000	-0.8822820000
H	-2.5673000000	1.1246820000	0.8823850000
H	3.8488660000	-1.0491330000	0.8824520000
H	3.8488490000	-1.0491830000	-0.8821960000
H	-3.8488940000	-1.0491470000	0.8823820000
H	-3.8488370000	-1.0491880000	-0.8822640000
H	5.1343420000	1.1223500000	0.8824590000
H	5.1342410000	1.1224050000	-0.8822870000
H	-5.1342600000	1.1223570000	-0.8824100000
H	-5.1343090000	1.1224100000	0.8823320000
H	6.4159280000	-1.0518100000	-0.8825070000

H	6.4160990000	-1.0517740000	0.8824710000
H	-6.4159750000	-1.0518210000	-0.8824980000
H	-6.4160480000	-1.0517480000	0.8824790000
H	7.7005670000	1.1183970000	0.8819000000
H	7.7004680000	1.1182630000	-0.8823450000
H	-7.7005490000	1.1183720000	0.8819710000
H	-7.7004950000	1.1182880000	-0.8822780000
H	9.0216360000	-1.0485150000	-0.8888990000
H	9.8804290000	0.2325150000	-0.0005910000
H	9.0220460000	-1.0479010000	0.8889960000
H	-9.0217910000	-1.0482900000	-0.8890120000
H	-9.0218900000	-1.0481310000	0.8888850000
H	-9.8804240000	0.2325170000	-0.0002240000

2,2,4,5,5-Pentametildekan (C₁₅H₃₂)

C	0.0023240000	1.4258860000	-0.1497620000
C	0.8434390000	0.2626400000	0.4990690000
C	2.3754170000	0.3999150000	0.2661810000
C	3.1703970000	-0.8753960000	-0.1421570000
C	-1.5136780000	1.2789990000	0.1708650000
C	0.4455990000	2.8053350000	0.3814190000
C	0.1837640000	1.4180770000	-1.6832300000
C	0.5533740000	0.0824250000	2.0011710000
C	-2.2139320000	-0.0174430000	-0.2568880000
C	4.6625670000	-0.4924840000	-0.2030250000
C	2.7343370000	-1.3656120000	-1.5365150000
C	3.0022550000	-2.0227310000	0.8716550000
C	-3.7070040000	-0.0255710000	0.0936050000
C	-4.4332430000	-1.3070760000	-0.3284140000
C	-5.9208680000	-1.3081670000	0.0314700000
H	0.5092830000	-0.6592390000	-0.0079760000
H	2.5759640000	1.1486710000	-0.5159450000
H	2.8364800000	0.8087700000	1.1832650000
H	-2.0330250000	2.1279210000	-0.3110300000
H	-1.6682260000	1.4233530000	1.2541620000
H	-0.1393630000	3.6063730000	-0.1003740000
H	1.5082030000	3.0058560000	0.1739560000
H	0.2906190000	2.8985610000	1.4679850000
H	-0.0514150000	0.4357660000	-2.1220350000
H	1.2125840000	1.6720110000	-1.9804100000

H	-0.4807530000	2.1627850000	-2.1525530000
H	1.1790940000	-0.7155870000	2.4259380000
H	-0.4944250000	-0.1873820000	2.2009250000
H	0.7762430000	1.0017350000	2.5677520000
H	-1.7325820000	-0.8892540000	0.2212790000
H	-2.1025170000	-0.1686390000	-1.3451410000
H	5.2802750000	-1.3500790000	-0.5178820000
H	5.0290910000	-0.1582860000	0.7820530000
H	4.8362870000	0.3270240000	-0.9204460000
H	1.6726300000	-1.6588810000	-1.5577230000
H	3.3243170000	-2.2459260000	-1.8419490000
H	2.8810050000	-0.5829620000	-2.2992060000
H	3.6212240000	-2.8875440000	0.5788480000
H	1.9596570000	-2.3729530000	0.9319680000
H	3.3177550000	-1.7167230000	1.8830720000
H	-3.8272930000	0.1191510000	1.1842670000
H	-4.1993900000	0.8447040000	-0.3806610000
H	-4.3173500000	-1.4482980000	-1.4190630000
H	-3.9390280000	-2.1770960000	0.1424580000
H	-6.4505960000	-0.4700020000	-0.4530190000
H	-6.4140530000	-2.2413770000	-0.2852950000
H	-6.0691790000	-1.2052300000	1.1201230000

4,6,8-Trimetildodekan (C₁₅H₃₂)

C	1.1168940000	-1.3944560000	-0.7082960000
C	-0.0845260000	-2.3020370000	-0.3618960000
C	1.8214340000	-0.8751370000	0.5617550000
C	-1.2720100000	-1.6834560000	0.4067500000
C	3.0205620000	0.0785450000	0.3686770000
C	-1.9844420000	-0.5872410000	-0.4110020000
C	2.6903910000	1.3559750000	-0.4364390000
C	2.0808520000	-2.1610170000	-1.6274930000
C	-2.2398400000	-2.7993000000	0.8313370000
C	-3.0658870000	0.1959590000	0.3432450000
C	3.6533200000	0.4055930000	1.7308650000
C	1.6202620000	2.2841480000	0.1548360000
C	-3.6745740000	1.3378390000	-0.4793550000
C	1.3963890000	3.5378300000	-0.6954540000
C	-4.7528230000	2.1198360000	0.2740680000
H	0.7374430000	-0.5281110000	-1.2786360000

H	0.2961650000	-3.1611830000	0.2218500000
H	-0.4763520000	-2.7323850000	-1.3028900000
H	1.0804910000	-0.3746500000	1.2089240000
H	2.1727430000	-1.7510570000	1.1404800000
H	-0.8845330000	-1.2141860000	1.3303570000
H	3.7892450000	-0.4601070000	-0.2145200000
H	-2.4275750000	-1.0481780000	-1.3154850000
H	-1.2357300000	0.1357420000	-0.7798110000
H	3.6262740000	1.9327340000	-0.5592390000
H	2.3843090000	1.0728140000	-1.4598390000
H	2.5188430000	-3.0293320000	-1.1038110000
H	1.5557530000	-2.5427210000	-2.5184290000
H	2.9124100000	-1.5319260000	-1.9809850000
H	-1.7192920000	-3.5701740000	1.4229090000
H	-3.0706550000	-2.4187880000	1.4448950000
H	-2.6769120000	-3.2984340000	-0.0518260000
H	-2.6325790000	0.6106230000	1.2737420000
H	-3.8768130000	-0.4823360000	0.6630760000
H	4.0045870000	-0.5109580000	2.2328360000
H	4.5191110000	1.0794870000	1.6196980000
H	2.9349210000	0.8937980000	2.4108030000
H	0.6643520000	1.7402160000	0.2558800000
H	1.9070570000	2.5867040000	1.1772910000
H	-4.1016780000	0.9257150000	-1.4124810000
H	-2.8708240000	2.0286050000	-0.7952220000
H	1.0749350000	3.2763190000	-1.7183110000
H	2.3223480000	4.1316360000	-0.7845580000
H	0.6228740000	4.1906910000	-0.2595200000
H	-5.5896700000	1.4645090000	0.5707430000
H	-5.1690200000	2.9328700000	-0.3425680000
H	-4.3482290000	2.5735880000	1.1950640000

5-Etil-5-propildekan (C₁₅H₃₂)

C	-0.8439130000	-0.6485140000	0.2190370000
C	0.5264700000	-0.2231570000	0.8187480000
C	-1.4520880000	0.4887520000	-0.6510260000
C	-0.6901720000	-1.8807080000	-0.7176240000
C	-1.7668290000	-0.9817880000	1.4263770000
C	1.6469200000	0.1572830000	-0.1575420000
C	-1.7272710000	1.8387380000	0.0234070000

C	-0.0852740000	-3.1605140000	-0.1257140000
C	-3.2004310000	-1.4253150000	1.1159050000
C	2.9398000000	0.5701500000	0.5567010000
C	-2.3194680000	2.8723280000	-0.9432990000
C	-0.0184940000	-4.2979560000	-1.1496820000
C	4.0758190000	0.9540340000	-0.3972640000
C	-2.5996620000	4.2260050000	-0.2866770000
C	5.3620530000	1.3648750000	0.3232260000
H	0.8897720000	-1.0396210000	1.4680080000
H	0.3554490000	0.6270640000	1.5026790000
H	-2.3952840000	0.1206630000	-1.0927750000
H	-0.7836480000	0.6589560000	-1.5134740000
H	-1.6845890000	-2.1250190000	-1.1322170000
H	-0.0855500000	-1.5811850000	-1.5924300000
H	-1.2763820000	-1.7656710000	2.0288830000
H	-1.8048870000	-0.0981600000	2.0867470000
H	1.3205930000	0.9876620000	-0.8091320000
H	1.8693140000	-0.6879930000	-0.8330780000
H	-2.4219230000	1.7083530000	0.8725510000
H	-0.7960610000	2.2492100000	0.4534910000
H	-0.6764680000	-3.4939360000	0.7447930000
H	0.9310740000	-2.9600700000	0.2556520000
H	-3.2329060000	-2.3474690000	0.5133900000
H	-3.7679370000	-0.6540280000	0.5707770000
H	-3.7471740000	-1.6298000000	2.0509470000
H	3.2773390000	-0.2566440000	1.2104840000
H	2.7289680000	1.4204990000	1.2329910000
H	-3.2545810000	2.4716940000	-1.3767650000
H	-1.6282740000	3.0112730000	-1.7951960000
H	0.5944360000	-4.0158720000	-2.0229900000
H	-1.0228250000	-4.5592010000	-1.5249230000
H	0.4218470000	-5.2094360000	-0.7139790000
H	3.7388990000	1.7805790000	-1.0501740000
H	4.2867880000	0.1038560000	-1.0723170000
H	-3.3162770000	4.1262530000	0.5465400000
H	-3.0234380000	4.9455210000	-1.0058920000
H	-1.6770700000	4.6701460000	0.1249320000
H	5.7450080000	0.5466940000	0.9570640000
H	6.1578350000	1.6336170000	-0.3902440000
H	5.1931910000	2.2367750000	0.9782070000

n-İkozan (C₂₀H₄₂)

C	12.048005000	0.351271000	-0.000017000
H	12.101492000	0.998192000	0.882945000
H	12.101488000	0.998168000	-0.882997000
H	12.944502000	-0.278614000	-0.000011000
C	10.777984000	-0.496240000	-0.000003000
H	10.774717000	-1.164107000	-0.883587000
H	10.774721000	-1.164085000	0.883599000
C	9.513710000	0.374605000	-0.000011000
H	9.519306000	1.043016000	-0.882288000
H	9.519310000	1.043037000	0.882249000
C	8.240647000	-0.482083000	0.000002000
H	8.236553000	-1.149977000	0.882874000
H	8.236549000	-1.149996000	-0.882857000
C	6.977591000	0.389745000	-0.000005000
H	6.981767000	1.057737000	-0.882822000
H	6.981770000	1.057753000	0.882801000
C	5.704173000	-0.466861000	0.000005000
H	5.700159000	-1.134817000	0.882844000
H	5.700154000	-1.134831000	-0.882823000
C	4.441242000	0.405140000	0.000002000
H	4.445339000	1.073109000	-0.882836000
H	4.445341000	1.073118000	0.882833000
C	3.167807000	-0.451447000	0.000008000
H	3.163763000	-1.119412000	0.882850000
H	3.163759000	-1.119419000	-0.882828000
C	1.904891000	0.420576000	0.000008000
H	1.908968000	1.088546000	-0.882832000
H	1.908969000	1.088549000	0.882845000
C	0.631456000	-0.436012000	0.000009000
H	0.627394000	-1.103981000	0.882849000
H	0.627392000	-1.103982000	-0.882830000
C	-0.631456000	0.436015000	0.000011000
H	-0.627393000	1.103987000	-0.882828000
H	-0.627394000	1.103983000	0.882852000
C	-1.904891000	-0.420573000	0.000008000
H	-1.908968000	-1.088547000	0.882845000
H	-1.908968000	-1.088541000	-0.882833000
C	-3.167807000	0.451450000	0.000011000
H	-3.163760000	1.119423000	-0.882825000
H	-3.163763000	1.119414000	0.882853000

C	-4.441242000	-0.405137000	0.000004000
H	-4.445340000	-1.073117000	0.882835000
H	-4.445338000	-1.073106000	-0.882835000
C	-5.704173000	0.466863000	0.000008000
H	-5.700156000	1.134832000	-0.882821000
H	-5.700160000	1.134819000	0.882847000
C	-6.977591000	-0.389745000	-0.000002000
H	-6.981770000	-1.057752000	0.882804000
H	-6.981766000	-1.057737000	-0.882819000
C	-8.240647000	0.482082000	0.000002000
H	-8.236549000	1.149994000	-0.882857000
H	-8.236555000	1.149977000	0.882874000
C	-9.513709000	-0.374607000	-0.000010000
H	-9.519309000	-1.043037000	0.882252000
H	-9.519304000	-1.043020000	-0.882285000
C	-10.777984000	0.496236000	-0.000006000
H	-10.774717000	1.164101000	-0.883592000
H	-10.774723000	1.164083000	0.883594000
C	-12.048004000	-0.351276000	-0.000019000
H	-12.101492000	-0.998194000	0.882945000
H	-12.944502000	0.278607000	-0.000016000
H	-12.101485000	-0.998176000	-0.882997000

n-Pentakontan (C₅₀H₁₀₂)

C	-0.632437	-0.433307	0.000000
C	-1.895566	0.435842	0.000000
C	-3.160407	-0.430821	0.000000
C	-4.423502	0.438353	0.000000
C	-5.688422	-0.428184	0.000000
C	-6.951399	0.441181	0.000000
C	-8.216457	-0.425167	0.000000
C	-9.479342	0.444354	0.000000
C	-10.744554	-0.421779	0.000000
C	-12.007304	0.447973	0.000000
C	-13.272596	-0.418013	0.000000
C	-14.535358	0.451716	0.000000
C	-15.800487	-0.414508	0.000000
C	-17.063485	0.454842	0.000000
C	-18.328337	-0.411794	0.000000
C	-19.591600	0.457176	0.000000

C	-20.856161	-0.409874	0.000000
C	-22.119780	0.458565	0.000000
C	-23.383912	-0.409140	0.000000
C	-24.647980	0.458614	0.000000
C	-25.911728	-0.409683	0.000000
C	-27.176103	0.457670	0.000000
C	-28.439712	-0.410725	0.000000
C	-29.703358	0.457076	0.000000
C	-30.963341	-0.403628	0.000000
C	0.632437	0.433307	0.000000
C	1.895566	-0.435842	0.000000
C	3.160407	0.430821	0.000000
C	4.423502	-0.438353	0.000000
C	5.688422	0.428184	0.000000
C	6.951399	-0.441181	0.000000
C	8.216457	0.425167	0.000000
C	9.479342	-0.444354	0.000000
C	10.744554	0.421779	0.000000
C	12.007304	-0.447973	0.000000
C	13.272596	0.418013	0.000000
C	14.535358	-0.451716	0.000000
C	15.800487	0.414508	-0.000000
C	17.063485	-0.454842	-0.000000
C	18.328337	0.411794	-0.000000
C	19.591600	-0.457176	-0.000000
C	20.856161	0.409874	0.000000
C	22.119780	-0.458565	0.000000
C	23.383912	0.409140	0.000000
C	24.647980	-0.458614	0.000000
C	25.911728	0.409683	0.000000
C	27.176103	-0.457670	0.000000
C	28.439712	0.410725	0.000000
C	29.703358	-0.457076	0.000000
C	30.963341	0.403628	0.000000
H	-0.633102	-1.083022	0.903030
H	-0.633102	-1.083022	-0.903030
H	-1.894937	1.085572	0.903024
H	-1.894937	1.085572	-0.903024
H	-3.161059	-1.080538	-0.903030
H	-3.161059	-1.080538	0.903030
H	-4.422821	1.088072	0.903028
H	-4.422821	1.088072	-0.903028

H	-5.689148	-1.077900	-0.903032
H	-5.689148	-1.077900	0.903032
H	-6.950604	1.090912	0.903022
H	-6.950604	1.090912	-0.903022
H	-8.217254	-1.074879	-0.903031
H	-8.217254	-1.074879	0.903031
H	-9.478470	1.094080	0.903020
H	-9.478470	1.094080	-0.903020
H	-10.745478	-1.071503	-0.903029
H	-10.745478	-1.071503	0.903029
H	-12.006355	1.097692	0.903026
H	-12.006355	1.097692	-0.903026
H	-13.273554	-1.067738	-0.903024
H	-13.273554	-1.067738	0.903024
H	-14.534474	1.101435	0.903028
H	-14.534474	1.101435	-0.903028
H	-15.801278	-1.064237	-0.903020
H	-15.801278	-1.064237	0.903020
H	-17.062800	1.104549	0.903035
H	-17.062800	1.104549	-0.903035
H	-18.328931	-1.061533	-0.903024
H	-18.328931	-1.061533	0.903024
H	-19.591113	1.106882	0.903032
H	-19.591113	1.106882	-0.903032
H	-20.856530	-1.059608	-0.903021
H	-20.856530	-1.059608	0.903021
H	-22.119580	1.108276	0.903033
H	-22.119580	1.108276	-0.903033
H	-23.383945	-1.058875	-0.903019
H	-23.383945	-1.058875	0.903019
H	-24.648100	1.108320	0.903036
H	-24.648100	1.108320	-0.903036
H	-25.911478	-1.059421	-0.903020
H	-25.911478	-1.059421	0.903020
H	-27.176412	1.107394	0.903031
H	-27.176412	1.107394	-0.903031
H	-28.439782	-1.060411	-0.903093
H	-28.439782	-1.060411	0.903093
H	-29.712068	1.106910	0.902216
H	-29.712068	1.106910	-0.902216
H	-30.992111	-1.045717	0.906079
H	-31.860432	0.250740	0.000000

H	-30.992111	-1.045717	-0.906079
H	0.633102	1.083022	-0.903030
H	0.633102	1.083022	0.903030
H	1.894937	-1.085572	0.903024
H	1.894937	-1.085572	-0.903024
H	3.161059	1.080538	-0.903030
H	3.161059	1.080538	0.903030
H	4.422821	-1.088072	0.903028
H	4.422821	-1.088072	-0.903028
H	5.689148	1.077900	-0.903032
H	5.689148	1.077900	0.903032
H	6.950604	-1.090912	0.903022
H	6.950604	-1.090912	-0.903022
H	8.217254	1.074879	-0.903031
H	8.217254	1.074879	0.903031
H	9.478470	-1.094080	0.903020
H	9.478470	-1.094080	-0.903020
H	10.745478	1.071503	-0.903029
H	10.745478	1.071503	0.903029
H	12.006355	-1.097692	0.903026
H	12.006355	-1.097692	-0.903026
H	13.273554	1.067738	-0.903024
H	13.273554	1.067738	0.903024
H	14.534474	-1.101435	0.903028
H	14.534474	-1.101435	-0.903028
H	15.801278	1.064237	-0.903020
H	15.801278	1.064237	0.903020
H	17.062800	-1.104549	0.903035
H	17.062800	-1.104549	-0.903035
H	18.328931	1.061533	-0.903024
H	18.328931	1.061533	0.903024
H	19.591113	-1.106882	0.903032
H	19.591113	-1.106882	-0.903032
H	20.856530	1.059608	-0.903021
H	20.856530	1.059608	0.903021
H	22.119580	-1.108276	0.903033
H	22.119580	-1.108276	-0.903033
H	23.383945	1.058875	-0.903019
H	23.383945	1.058875	0.903019
H	24.648100	-1.108320	0.903036
H	24.648100	-1.108320	-0.903036
H	25.911478	1.059421	-0.903020

H	25.911478	1.059421	0.903020
H	27.176412	-1.107394	0.903031
H	27.176412	-1.107394	-0.903031
H	28.439782	1.060411	-0.903093
H	28.439782	1.060411	0.903093
H	29.712068	-1.106910	0.902216
H	29.712068	-1.106910	-0.902216
H	30.992111	1.045717	0.906079
H	31.860432	-0.250740	0.000000
H	30.992111	1.045717	-0.906079

14-Bütil-13-desil-13-oktiloktakozaan (C₅₀H₁₀₂)

C	-1.543991	0.040754	-2.239472
C	-2.483168	-0.819989	-3.170951
C	-2.502600	-2.345805	-2.921219
C	-3.654549	-3.009020	-3.687085
C	-3.658340	-4.527487	-3.473276
C	-4.813278	-5.187804	-4.235292
C	-4.817224	-6.706001	-4.021538
C	-5.972365	-7.365597	-4.783398
C	-5.979532	-8.876949	-4.573333
C	-1.819662	1.542778	-2.639981
C	-0.871700	2.612534	-2.072426
C	-1.447064	4.021226	-2.270218
C	-0.477202	5.089864	-1.751707
C	-1.052910	6.497347	-1.946656
C	-0.082609	7.565474	-1.428537
C	-0.657766	8.973285	-1.623813
C	0.312615	10.041389	-1.105865
C	-0.262927	11.448615	-1.301703
C	0.700067	12.514654	-0.787340
C	-1.943073	-0.182629	-0.729745
C	-3.447308	-0.106927	-0.380301
C	-3.667500	-0.321641	1.123071
C	-5.158380	-0.260312	1.476977
C	-5.377457	-0.475650	2.979024
C	-6.868336	-0.415144	3.331780
C	-7.088326	-0.630479	4.833788
C	-8.579371	-0.569795	5.185987
C	-8.799866	-0.784787	6.688017

C	-10.290879	-0.723484	7.040017
C	-10.510797	-0.938421	8.541787
C	-11.993750	-0.877393	8.896070
C	-0.024849	-0.412119	-2.476730
C	0.515055	-0.071380	-3.906713
C	1.034225	-1.312875	-4.651862
C	1.645858	-0.930935	-6.004605
C	2.146309	-2.164224	-6.750688
C	1.001543	0.018373	-1.374722
C	2.352138	-0.712350	-1.491606
C	3.274124	-0.363920	-0.315894
C	4.626157	-1.075123	-0.447038
C	5.548346	-0.725505	0.726810
C	6.901274	-1.434594	0.594226
C	7.824196	-1.083526	1.767160
C	9.177364	-1.792180	1.634472
C	10.100355	-1.440586	2.807218
C	11.453511	-2.149335	2.674840
C	12.376243	-1.797946	3.847892
C	13.729314	-2.506818	3.715884
C	14.651025	-2.155357	4.889264
C	15.998881	-2.859164	4.761605
H	-3.522939	-0.433468	-3.094043
H	-2.209313	-0.666225	-4.235616
H	-1.553398	-2.799670	-3.272305
H	-2.620810	-2.574010	-1.843355
H	-4.621636	-2.587583	-3.333801
H	-3.548467	-2.790295	-4.772729
H	-2.693229	-4.951549	-3.828695
H	-3.761925	-4.745638	-2.387314
H	-5.778434	-4.763878	-3.879783
H	-4.709774	-4.969499	-5.321219
H	-3.852282	-7.130231	-4.377311
H	-4.920662	-6.924496	-2.935615
H	-6.940919	-6.949072	-4.430160
H	-5.873691	-7.154340	-5.870593
H	-5.031018	-9.322342	-4.942165
H	-6.102779	-9.116195	-3.495528
H	-6.824979	-9.326377	-5.135661
H	-1.820704	1.659399	-3.743942
H	-2.856404	1.809173	-2.353037
H	-0.698292	2.454426	-0.989274

H	0.093040	2.561512	-2.618573
H	-1.639096	4.192409	-3.352633
H	-2.411413	4.105444	-1.721932
H	-0.284720	4.917756	-0.669604
H	0.487570	5.008123	-2.299559
H	-1.245602	6.669204	-3.028747
H	-2.017370	6.579448	-1.398322
H	0.109846	7.393614	-0.346394
H	0.881964	7.482995	-1.976626
H	-0.850287	9.145081	-2.705956
H	-1.622286	9.055844	-1.075639
H	0.504987	9.870075	-0.023592
H	1.277254	9.959061	-1.653916
H	-0.454433	11.628512	-2.382130
H	-1.225962	11.539616	-0.753395
H	0.888793	12.372784	0.298176
H	1.663726	12.462006	-1.337501
H	0.257459	13.521188	-0.942129
H	-1.565983	-1.173914	-0.396792
H	-1.434088	0.569019	-0.094496
H	-3.861180	0.884342	-0.653280
H	-4.014413	-0.889857	-0.923756
H	-3.261555	-1.315072	1.416274
H	-3.122876	0.464394	1.691517
H	-5.565251	0.732952	1.184656
H	-5.703784	-1.046617	0.909615
H	-4.970272	-1.468760	3.271466
H	-4.832841	0.310966	3.546656
H	-7.275458	0.577937	3.039120
H	-7.412805	-1.201705	2.763902
H	-6.681368	-1.623614	5.126467
H	-6.543906	0.156070	5.401714
H	-8.986307	0.423260	4.892987
H	-9.123700	-1.356437	4.618090
H	-8.393354	-1.778024	6.980985
H	-8.255301	0.001643	7.255983
H	-10.697555	0.269784	6.747282
H	-10.835692	-1.509975	6.472319
H	-10.110336	-1.931585	8.841141
H	-9.971564	-0.153615	9.115953
H	-12.122015	-1.036189	9.987536
H	-12.413504	0.116138	8.629999

H	-12.553005	-1.669398	8.353802
H	-0.032713	-1.515523	-2.372756
H	-0.259333	0.384965	-4.548475
H	1.323644	0.689037	-3.845064
H	1.800538	-1.833877	-4.040357
H	0.188421	-2.014442	-4.819763
H	0.883310	-0.417390	-6.629979
H	2.499054	-0.235654	-5.846798
H	2.929450	-2.682665	-6.157365
H	1.306741	-2.865837	-6.943025
H	2.583185	-1.857761	-7.724411
H	1.202712	1.103612	-1.407065
H	0.609920	-0.220860	-0.367510
H	2.180662	-1.811138	-1.504896
H	2.859654	-0.418181	-2.434528
H	3.438052	0.736137	-0.290908
H	2.789200	-0.670847	0.637057
H	4.462181	-2.175168	-0.471366
H	5.111988	-0.769028	-1.399879
H	5.710723	0.374777	0.751803
H	5.063574	-1.033103	1.679681
H	6.739031	-2.534913	0.570310
H	7.385443	-1.127794	-0.359224
H	7.986134	0.016843	1.791102
H	7.340176	-1.390487	2.720623
H	9.015505	-2.892561	1.610867
H	9.661251	-1.485449	0.680865
H	10.262300	-0.340213	2.830684
H	9.616366	-1.747126	3.760835
H	11.291560	-3.249702	2.651114
H	11.937648	-1.842582	1.721366
H	12.538336	-0.697589	3.871531
H	11.891979	-2.104533	4.801364
H	13.567502	-3.607233	3.692181
H	14.214083	-2.200010	2.762717
H	14.820445	-1.056775	4.917146
H	14.174369	-2.462587	5.845700
H	16.643729	-2.586373	5.623420
H	15.859824	-3.961310	4.756950
H	16.508737	-2.549465	3.824470

9-Ter-bütil-11-heptil-10-heksil-11-oktil-10-pentilikozan (C₅₀H₁₀₂)

C	-1.166446	-0.446781	-2.622454
C	-2.310099	-0.882665	-3.600801
C	0.098722	-1.050445	-3.282596
C	-1.043295	1.093387	-2.818287
C	-1.470946	-0.800308	-1.024858
C	-3.005859	-1.175505	-0.827918
C	-3.932264	0.058000	-0.718411
C	-5.405469	-0.357610	-0.618165
C	-6.315441	0.868672	-0.482099
C	-7.787180	0.452729	-0.375866
C	-8.697185	1.678962	-0.238888
C	-10.168619	1.262628	-0.132490
C	-11.077639	2.480595	0.003794
C	-0.418747	-1.600322	-0.006486
C	0.771372	-0.607754	0.651513
C	1.857349	-0.163735	-0.403183
C	3.137708	0.519587	0.145911
C	3.844960	1.332295	-0.946507
C	5.133907	1.968779	-0.413834
C	5.835744	2.785318	-1.505115
C	7.123864	3.423720	-0.972320
C	7.825724	4.240618	-2.063522
C	9.113268	4.879022	-1.530117
C	9.814972	5.692780	-2.613521
C	0.140601	0.721527	1.310781
C	0.207943	2.086015	0.576994
C	-0.509948	3.181354	1.379954
C	-0.466839	4.524866	0.641501
C	-1.191857	5.614980	1.439065
C	-1.148649	6.957845	0.700604
C	-1.874974	8.047294	1.497668
C	-1.833287	9.385823	0.766277
C	1.562592	-1.300749	1.859682
C	2.446618	-2.541008	1.583634
C	3.644732	-2.611650	2.543546
C	4.483251	-3.870127	2.288739
C	5.681311	-3.936020	3.242958
C	6.519187	-5.193903	2.987198
C	7.713028	-5.263152	3.934950
C	-1.172977	-2.329062	1.217776

C	-1.933340	-1.519370	2.301716
C	-2.829796	-2.434793	3.148333
C	-3.564485	-1.638167	4.233116
C	-4.462115	-2.544801	5.069812
C	0.211893	-2.848210	-0.769964
C	-0.767861	-3.834159	-1.457844
C	-0.014063	-4.861999	-2.317253
C	-0.990494	-5.793821	-3.044990
C	-0.238163	-6.822049	-3.897138
C	-1.207066	-7.750485	-4.623374
H	-2.455308	-1.981271	-3.609778
H	-3.274775	-0.385569	-3.390081
H	-2.072882	-0.607341	-4.652645
H	0.229008	-0.646105	-4.311319
H	1.034125	-0.789636	-2.784923
H	0.012828	-2.140573	-3.428029
H	-1.840203	1.646239	-2.281669
H	-0.057356	1.469118	-2.491446
H	-1.118084	1.379353	-3.890616
H	-1.458482	0.187227	-0.562866
H	-3.370989	-1.870486	-1.603628
H	-3.242702	-1.758603	0.060121
H	-3.658550	0.637623	0.190338
H	-3.809122	0.732269	-1.586224
H	-5.688260	-0.927129	-1.530854
H	-5.543548	-1.016216	0.267865
H	-6.028304	1.440327	0.428100
H	-6.181821	1.526156	-1.369490
H	-8.074417	-0.118829	-1.286043
H	-7.920352	-0.204985	0.511458
H	-8.409988	2.250523	0.671340
H	-8.564311	2.336789	-1.126172
H	-10.464027	0.693543	-1.040915
H	-10.309877	0.607641	0.754869
H	-12.134702	2.148968	0.078650
H	-10.819643	3.054148	0.919522
H	-10.974440	3.140422	-0.883937
H	1.385187	0.518610	-1.124544
H	2.244263	-1.019618	-0.973923
H	2.920561	1.181027	1.007937
H	3.841185	-0.260718	0.505921
H	4.088644	0.663390	-1.801365

H	3.163891	2.133915	-1.308356
H	4.888061	2.634616	0.442836
H	5.818490	1.168674	-0.054995
H	6.081978	2.119393	-2.361563
H	5.150449	3.584686	-1.864329
H	6.877363	4.089454	-0.115775
H	7.809203	2.624415	-0.613094
H	8.072737	3.574972	-2.920004
H	7.140485	5.039939	-2.422974
H	8.873611	5.549168	-0.675818
H	9.804943	4.085486	-1.172000
H	10.088752	5.040226	-3.469851
H	9.153358	6.510162	-2.971629
H	10.741936	6.142184	-2.199104
H	-0.922603	0.585177	1.511935
H	0.574151	0.911031	2.316949
H	1.248847	2.417886	0.416652
H	-0.284129	2.022361	-0.400923
H	-1.571208	2.887479	1.539486
H	-0.020444	3.291680	2.372688
H	0.592928	4.825444	0.486112
H	-0.952180	4.413382	-0.353438
H	-2.251718	5.314151	1.593502
H	-0.707212	5.726484	2.434187
H	-0.088853	7.259289	0.546874
H	-1.632562	6.846154	-0.294907
H	-2.936620	7.754676	1.651451
H	-1.394766	8.166728	2.493408
H	-2.330140	9.300337	-0.223629
H	-2.366095	10.153718	1.365790
H	-0.781883	9.714279	0.622212
H	2.221708	-0.539543	2.327331
H	0.893099	-1.545112	2.703343
H	1.847740	-3.458135	1.760244
H	2.829241	-2.548002	0.544437
H	4.286544	-1.714226	2.406054
H	3.273474	-2.621519	3.592290
H	3.847845	-4.771713	2.433411
H	4.849908	-3.860838	1.238435
H	6.317311	-3.034818	3.097924
H	5.314989	-3.945190	4.293367
H	5.890780	-6.099408	3.133938

H	6.891766	-5.189758	1.939563
H	8.300017	-6.182436	3.726797
H	8.372099	-4.380623	3.790528
H	7.366823	-5.294118	4.990066
H	-1.877515	-3.086443	0.836975
H	-0.465354	-2.982294	1.765498
H	-1.219713	-1.029952	2.993155
H	-2.577229	-0.738432	1.855731
H	-3.579242	-2.928546	2.490802
H	-2.205317	-3.221373	3.626807
H	-2.825782	-1.146200	4.902846
H	-4.190816	-0.850309	3.760183
H	-5.228076	-3.028814	4.427039
H	-3.856894	-3.328446	5.573464
H	-4.979359	-1.942037	5.845744
H	0.984281	-2.569876	-1.488430
H	0.764214	-3.487038	-0.070011
H	-1.339422	-4.413084	-0.705811
H	-1.493178	-3.295269	-2.086661
H	0.619481	-4.342962	-3.067835
H	0.652062	-5.465526	-1.661785
H	-1.619551	-6.325333	-2.297100
H	-1.655382	-5.188982	-3.700718
H	0.389676	-6.297636	-4.650255
H	0.426678	-7.432668	-3.247943
H	-0.635078	-8.482584	-5.231500
H	-1.830352	-8.306884	-3.891242
H	-1.867735	-7.166576	-5.299149

8,14-Dietil-9-heptil-13-heksil-10,15-dimetil-11-pentil-12-propiltrikozaan (C₅₀H₁₀₂)

C	4.922036	-2.134565	-1.191328
C	5.889881	-3.253632	-0.783170
C	4.657592	-1.072994	-0.065477
C	5.578055	0.164561	-0.330417
C	7.081217	-0.147809	-0.226664
C	7.920321	1.134033	-0.314512
C	9.418874	0.817890	-0.240630
C	10.256673	2.099091	-0.325663
C	11.754731	1.782382	-0.252720
C	12.592059	3.055218	-0.337118

C	3.097410	-0.742559	0.041674
C	2.271013	-1.789893	0.930369
C	0.666871	-1.821426	0.774868
C	-0.147583	-1.153730	1.982255
C	-1.742264	-1.336505	2.012154
C	-2.671639	-0.281457	1.249482
C	-4.175939	-0.171781	1.770383
C	-5.104520	0.282489	0.605611
C	-6.348576	1.049529	1.085386
C	-7.172748	1.557035	-0.104465
C	-8.418027	2.315296	0.370241
C	-9.240805	2.822257	-0.820101
C	-10.486886	3.579271	-0.345891
C	-11.309238	4.085150	-1.536569
C	-12.550925	4.838596	-1.068717
C	-4.792920	-1.391246	2.477391
C	-2.103708	1.187340	1.285540
C	-1.283548	1.597908	0.061906
C	-2.128909	-2.855178	1.860276
C	-2.603569	-3.317157	0.468874
C	-3.049968	-4.783788	0.497735
C	-3.469153	-5.256624	-0.899659
C	-3.910695	-6.723969	-0.874835
C	-4.325267	-7.197693	-2.264797
C	0.411074	-1.646620	3.372766
C	1.044290	-0.505321	4.186941
C	1.644273	-1.019407	5.492215
C	0.190120	-1.381146	-0.637012
C	0.521183	-2.409608	-1.737805
C	-0.132405	-2.018236	-3.068167
C	0.196037	-3.038759	-4.163475
C	-0.457767	-2.654970	-5.487470
C	2.792829	-3.244707	0.889271
C	2.802581	0.691865	0.595329
C	2.707242	1.786932	-0.485303
C	2.381617	3.147988	0.143312
C	2.190754	4.221668	-0.933920
C	1.854467	5.578316	-0.304373
C	1.659961	6.651111	-1.381765
C	1.323853	8.002991	-0.759104
H	5.325371	-1.641583	-2.102836
H	3.987869	-2.610129	-1.544582

H	5.368525	-4.035863	-0.198293
H	6.297285	-3.738921	-1.695141
H	6.738243	-2.873827	-0.181377
H	4.976524	-1.469375	0.921885
H	5.380369	0.566881	-1.346541
H	5.385776	0.965224	0.406706
H	7.289572	-0.652321	0.742243
H	7.382795	-0.817844	-1.059343
H	7.700130	1.652272	-1.274001
H	7.647639	1.812290	0.524044
H	9.638067	0.297811	0.718049
H	9.694284	0.142183	-1.080376
H	10.037023	2.619440	-1.284126
H	9.982278	2.774713	0.514520
H	11.982546	1.265137	0.704837
H	12.037257	1.110061	-1.092077
H	13.670169	2.795240	-0.281862
H	12.401893	3.579248	-1.298010
H	12.346969	3.735048	0.506589
H	2.728667	-0.766231	-0.998768
H	2.526275	-1.478562	1.958501
H	0.363726	-2.884260	0.833282
H	0.050229	-0.079523	1.930634
H	-2.013888	-1.085526	3.060575
H	-2.735386	-0.592953	0.191802
H	-4.200234	0.613730	2.560650
H	-4.546923	0.951301	-0.085951
H	-5.415862	-0.602793	0.007925
H	-6.989614	0.389159	1.705289
H	-6.030111	1.917209	1.704004
H	-6.545603	2.234408	-0.725325
H	-7.484996	0.691971	-0.730394
H	-9.046788	1.638609	0.990188
H	-8.105542	3.180014	0.996497
H	-8.612488	3.499745	-1.439655
H	-9.552254	1.957468	-1.446813
H	-11.115302	2.901971	0.273802
H	-10.175724	4.444523	0.280349
H	-10.688568	4.766423	-2.158661
H	-11.626627	3.225015	-2.165697
H	-13.125392	5.192245	-1.950697
H	-13.202371	4.171554	-0.464757

H	-12.260338	5.719598	-0.457593
H	-4.238709	-1.627577	3.407300
H	-5.822216	-1.162043	2.817879
H	-4.868952	-2.267181	1.806010
H	-2.930348	1.931001	1.317241
H	-1.541125	1.381261	2.222793
H	-1.273466	2.705593	-0.025412
H	-0.235712	1.288834	0.175444
H	-1.712329	1.184529	-0.874863
H	-1.275400	-3.496475	2.163011
H	-2.888960	-3.138177	2.610364
H	-3.450171	-2.701327	0.107413
H	-1.780988	-3.231009	-0.255843
H	-2.211476	-5.417248	0.862987
H	-3.908213	-4.893746	1.196882
H	-4.309386	-4.625497	-1.264898
H	-2.611583	-5.142658	-1.599617
H	-3.074571	-7.361133	-0.512544
H	-4.771769	-6.844805	-0.181815
H	-4.639274	-8.261656	-2.216606
H	-5.177669	-6.592392	-2.640451
H	-3.473184	-7.110452	-2.972269
H	-0.379814	-2.102060	4.007305
H	1.129469	-2.483147	3.260408
H	1.843998	-0.006474	3.599980
H	0.265616	0.252761	4.421732
H	0.859298	-1.496283	6.116971
H	2.446463	-1.758557	5.281898
H	2.082827	-0.171300	6.059016
H	-0.896346	-1.244676	-0.638040
H	0.600094	-0.399834	-0.920415
H	1.615481	-2.479085	-1.886129
H	0.162897	-3.418425	-1.441561
H	-1.235873	-1.966619	-2.935022
H	0.234941	-1.014261	-3.376062
H	1.297241	-3.092523	-4.308033
H	-0.169418	-4.044372	-3.860521
H	-0.202533	-3.409946	-6.260633
H	-1.562552	-2.619970	-5.376251
H	-0.091055	-1.662291	-5.825388
H	2.688337	-3.690702	-0.118083
H	3.832216	-3.316040	1.255059

H	2.213818	-3.882955	1.590112
H	1.830259	0.702970	1.103644
H	3.510851	0.965749	1.403396
H	3.650075	1.880565	-1.051769
H	1.908117	1.520732	-1.209437
H	1.450661	3.067957	0.746445
H	3.213147	3.445702	0.819565
H	3.124470	4.313333	-1.531671
H	1.363581	3.917508	-1.612988
H	0.921134	5.484877	0.293973
H	2.681045	5.883969	0.374581
H	2.590483	6.753053	-1.981840
H	0.832669	6.353353	-2.062442
H	1.188856	8.758537	-1.561529
H	0.382310	7.934727	-0.173496
H	2.147562	8.336272	-0.092388

n-Hekzakontan (C₆₀H₁₂₂)

C	-0.433783	0.632114	-0.000000
C	0.434408	1.895928	0.000000
C	-0.433234	3.160104	0.000000
C	0.434842	4.423987	0.000000
C	-0.432936	5.688073	0.000000
C	0.435004	6.952046	0.000000
C	-0.432899	8.216051	0.000000
C	0.434941	9.480096	0.000000
C	-0.433028	10.744048	0.000000
C	0.434735	12.008145	0.000000
C	-0.433367	13.272003	0.000000
C	0.434237	14.536195	0.000000
C	-0.434013	15.799957	0.000000
C	0.433501	17.064204	0.000000
C	-0.434736	18.327980	0.000000
C	0.432899	19.592149	0.000000
C	-0.435147	20.856048	0.000000
C	0.432722	22.120057	0.000000
C	-0.435048	23.384143	0.000000
C	0.433140	24.647930	0.000000
C	-0.434273	25.912263	0.000000
C	0.434291	27.175787	0.000000

C	-0.432720	28.440398	0.000000
C	0.436313	29.703605	0.000000
C	-0.430178	30.968565	0.000000
C	0.439384	32.231433	0.000000
C	-0.426621	33.496745	0.000000
C	0.443239	34.759350	0.000000
C	-0.422977	36.024089	0.000000
C	0.439385	37.282956	0.000000
C	0.433783	-0.632114	-0.000000
C	-0.434408	-1.895928	0.000000
C	0.433234	-3.160104	0.000000
C	-0.434842	-4.423987	0.000000
C	0.432936	-5.688073	0.000000
C	-0.435004	-6.952046	0.000000
C	0.432899	-8.216051	0.000000
C	-0.434941	-9.480096	0.000000
C	0.433028	-10.744048	0.000000
C	-0.434735	-12.008145	0.000000
C	0.433367	-13.272003	0.000000
C	-0.434237	-14.536195	0.000000
C	0.434013	-15.799957	0.000000
C	-0.433501	-17.064204	0.000000
C	0.434736	-18.327980	0.000000
C	-0.432899	-19.592149	0.000000
C	0.435147	-20.856048	0.000000
C	-0.432722	-22.120057	0.000000
C	0.435048	-23.384143	0.000000
C	-0.433140	-24.647930	0.000000
C	0.434273	-25.912263	0.000000
C	-0.434291	-27.175787	0.000000
C	0.432720	-28.440398	0.000000
C	-0.436313	-29.703605	0.000000
C	0.430178	-30.968565	0.000000
C	-0.439384	-32.231433	0.000000
C	0.426621	-33.496745	0.000000
C	-0.443239	-34.759350	0.000000
C	0.422977	-36.024089	0.000000
C	-0.439385	-37.282956	0.000000
H	-1.083506	0.632273	0.903025
H	-1.083506	0.632273	-0.903025
H	1.084133	1.895796	0.903025
H	1.084133	1.895796	-0.903025

H	-1.082962	3.160214	-0.903023
H	-1.082962	3.160214	0.903023
H	1.084562	4.423911	0.903028
H	1.084562	4.423911	-0.903028
H	-1.082663	5.688114	-0.903023
H	-1.082663	5.688114	0.903023
H	1.084725	6.952034	0.903027
H	1.084725	6.952034	-0.903027
H	-1.082629	8.216031	-0.903023
H	-1.082629	8.216031	0.903023
H	1.084657	9.480132	0.903028
H	1.084657	9.480132	-0.903028
H	-1.082759	10.744001	-0.903020
H	-1.082759	10.744001	0.903020
H	1.084457	12.008233	0.903027
H	1.084457	12.008233	-0.903027
H	-1.083089	13.271882	-0.903028
H	-1.083089	13.271882	0.903028
H	1.083962	14.536360	0.903024
H	1.083962	14.536360	-0.903024
H	-1.083737	15.799772	-0.903022
H	-1.083737	15.799772	0.903022
H	1.083223	17.064382	0.903028
H	1.083223	17.064382	-0.903028
H	-1.084456	18.327833	-0.903028
H	-1.084456	18.327833	0.903028
H	1.082630	19.592248	0.903020
H	1.082630	19.592248	-0.903020
H	-1.084859	20.856008	-0.903032
H	-1.084859	20.856008	0.903032
H	1.082459	22.120031	0.903018
H	1.082459	22.120031	-0.903018
H	-1.084755	23.384258	-0.903034
H	-1.084755	23.384258	0.903034
H	1.082882	24.647720	0.903013
H	1.082882	24.647720	-0.903013
H	-1.083976	25.912575	-0.903035
H	-1.083976	25.912575	0.903035
H	1.084033	27.175375	0.903015
H	1.084033	27.175375	-0.903015
H	-1.082428	28.440924	-0.903035
H	-1.082428	28.440924	0.903035

H	1.086050	29.702947	0.903020
H	1.086050	29.702947	-0.903020
H	-1.079887	30.969346	-0.903036
H	-1.079887	30.969346	0.903036
H	1.089121	32.230510	0.903018
H	1.089121	32.230510	-0.903018
H	-1.076339	33.497781	-0.903037
H	-1.076339	33.497781	0.903037
H	1.092940	34.758627	0.903080
H	1.092940	34.758627	-0.903080
H	-1.072801	36.033635	-0.902217
H	-1.072801	36.033635	0.902217
H	1.081529	37.310858	0.906068
H	1.081529	37.310858	-0.906068
H	-0.213746	38.180953	0.000000
H	1.083506	-0.632273	-0.903025
H	1.083506	-0.632273	0.903025
H	-1.084133	-1.895796	0.903025
H	-1.084133	-1.895796	-0.903025
H	1.082962	-3.160214	-0.903023
H	1.082962	-3.160214	0.903023
H	-1.084562	-4.423911	0.903028
H	-1.084562	-4.423911	-0.903028
H	1.082663	-5.688114	-0.903023
H	1.082663	-5.688114	0.903023
H	-1.084725	-6.952034	0.903027
H	-1.084725	-6.952034	-0.903027
H	1.082629	-8.216031	-0.903023
H	1.082629	-8.216031	0.903023
H	-1.084657	-9.480132	0.903028
H	-1.084657	-9.480132	-0.903028
H	1.082759	-10.744001	-0.903020
H	1.082759	-10.744001	0.903020
H	-1.084457	-12.008233	0.903027
H	-1.084457	-12.008233	-0.903027
H	1.083089	-13.271882	-0.903028
H	1.083089	-13.271882	0.903028
H	-1.083962	-14.536360	0.903024
H	-1.083962	-14.536360	-0.903024
H	1.083737	-15.799772	-0.903022
H	1.083737	-15.799772	0.903022
H	-1.083223	-17.064382	0.903028

H	-1.083223	-17.064382	-0.903028
H	1.084456	-18.327833	-0.903028
H	1.084456	-18.327833	0.903028
H	-1.082630	-19.592248	0.903020
H	-1.082630	-19.592248	-0.903020
H	1.084859	-20.856008	-0.903032
H	1.084859	-20.856008	0.903032
H	-1.082459	-22.120031	0.903018
H	-1.082459	-22.120031	-0.903018
H	1.084755	-23.384258	-0.903034
H	1.084755	-23.384258	0.903034
H	-1.082882	-24.647720	0.903013
H	-1.082882	-24.647720	-0.903013
H	1.083976	-25.912575	-0.903035
H	1.083976	-25.912575	0.903035
H	-1.084033	-27.175375	0.903015
H	-1.084033	-27.175375	-0.903015
H	1.082428	-28.440924	-0.903035
H	1.082428	-28.440924	0.903035
H	-1.086050	-29.702947	0.903020
H	-1.086050	-29.702947	-0.903020
H	1.079887	-30.969346	-0.903036
H	1.079887	-30.969346	0.903036
H	-1.089121	-32.230510	0.903018
H	-1.089121	-32.230510	-0.903018
H	1.076339	-33.497781	-0.903037
H	1.076339	-33.497781	0.903037
H	-1.092940	-34.758627	0.903080
H	-1.092940	-34.758627	-0.903080
H	1.072801	-36.033635	-0.902217
H	1.072801	-36.033635	0.902217
H	-1.081529	-37.310858	0.906068
H	-1.081529	-37.310858	-0.906068
H	0.213746	-38.180953	0.000000

13-Metil-11,13,15,17-tetraoctilheptakozan (C₆₀H₁₂₂)

C	0.853046	0.003166	-0.080193
C	0.023507	-0.621725	1.068717
C	1.616665	1.247820	0.488568
C	2.613691	1.928198	-0.475592

C	2.779665	3.417948	-0.129957
C	3.483204	4.194251	-1.247911
C	3.578332	5.683827	-0.888981
C	4.073093	6.516265	-2.076047
C	4.187989	7.996667	-1.692764
C	4.571027	8.851400	-2.896690
C	1.846650	-1.073590	-0.648143
C	2.848209	-1.722654	0.365744
C	2.377968	-3.134585	0.822489
C	2.566894	-4.250307	-0.224206
C	1.892456	-5.549420	0.233017
C	2.101972	-6.670326	-0.792031
C	1.423909	-7.967446	-0.335510
C	1.632984	-9.088360	-1.360424
C	0.954449	-10.384771	-0.903534
C	1.160255	-11.503009	-1.921141
C	4.292336	-1.718245	-0.201471
C	5.343884	-2.170687	0.825057
C	6.761232	-2.029609	0.257299
C	7.810998	-2.490311	1.275388
C	9.228013	-2.348546	0.707369
C	10.277971	-2.809239	1.725287
C	11.695036	-2.667642	1.157122
C	12.745142	-3.127336	2.175300
C	14.161575	-2.985811	1.606450
C	15.209738	-3.442253	2.617086
C	-0.133830	0.385018	-1.248859
C	-1.132616	1.570522	-0.995794
C	-0.690010	2.835800	-1.782243
C	-1.088479	4.146754	-1.087439
C	-0.540827	5.351857	-1.866592
C	-0.654892	6.648436	-1.058969
C	-0.085942	7.831650	-1.852610
C	-0.059974	9.107852	-1.004930
C	0.493297	10.289463	-1.810147
C	0.555481	11.554782	-0.960104
C	-2.582541	1.193129	-1.412840
C	-3.316042	0.241030	-0.426565
C	-3.714449	0.933613	0.910883
C	-4.797286	2.021385	0.787150
C	-5.123581	2.622968	2.159632
C	-6.195883	3.712812	2.043211

C	-6.519819	4.315202	3.415364
C	-7.591724	5.405206	3.299001
C	-7.915157	6.007104	4.671210
C	-8.982147	7.092205	4.559644
C	-4.511936	-0.433709	-1.146647
C	-5.237042	-1.476055	-0.279661
C	-6.267955	-2.256906	-1.103675
C	-7.006546	-3.280881	-0.233649
C	-8.035953	-4.063226	-1.057606
C	-8.774354	-5.087060	-0.187312
C	-9.803738	-5.869735	-1.011143
C	-10.542259	-6.893422	-0.140851
C	-11.570962	-7.675766	-0.965229
C	-12.308637	-8.695388	-0.102340
H	-0.725911	0.092365	1.462686
H	-0.513364	-1.529507	0.719688
H	0.665939	-0.904202	1.927705
H	0.876543	1.987925	0.850739
H	2.176853	0.973512	1.406459
H	3.603142	1.433500	-0.391677
H	2.293101	1.815856	-1.528427
H	1.781693	3.879427	0.030008
H	3.357923	3.511348	0.815467
H	4.503807	3.782060	-1.405932
H	2.903712	4.078205	-2.190388
H	2.575691	6.058823	-0.585271
H	4.273325	5.807970	-0.029432
H	5.067521	6.141575	-2.404521
H	3.356167	6.408191	-2.920034
H	3.217684	8.360323	-1.290750
H	4.960362	8.118158	-0.902354
H	5.548080	8.521165	-3.309313
H	3.793109	8.775013	-3.686158
H	4.656188	9.913943	-2.585652
H	1.247268	-1.873282	-1.132492
H	2.409277	-0.616327	-1.490552
H	2.884023	-1.101239	1.281510
H	2.923650	-3.418249	1.748348
H	1.306195	-3.086457	1.104931
H	2.136496	-3.944292	-1.200399
H	3.650274	-4.447814	-0.368119
H	2.320095	-5.860762	1.211714

H	0.802132	-5.371414	0.363834
H	1.676251	-6.357586	-1.771093
H	3.191945	-6.851103	-0.921932
H	1.849684	-8.280151	0.643545
H	0.333935	-7.786643	-0.205520
H	1.207302	-8.775804	-2.339591
H	2.722902	-9.269696	-1.490273
H	1.377675	-10.705486	0.073392
H	-0.136436	-10.212033	-0.775092
H	0.658840	-12.427229	-1.564259
H	0.723024	-11.217746	-2.901723
H	2.243453	-11.713508	-2.049422
H	4.352594	-2.349054	-1.114100
H	4.548269	-0.683152	-0.511376
H	5.253545	-1.549859	1.743428
H	5.174113	-3.233230	1.098808
H	6.849492	-2.643916	-0.665998
H	6.948304	-0.965243	-0.006748
H	7.721658	-1.876580	2.198934
H	7.625386	-3.555042	1.539048
H	9.317058	-2.962236	-0.216244
H	9.413726	-1.283839	0.443716
H	10.188933	-2.195434	2.648818
H	10.092187	-3.873898	1.989088
H	11.784224	-3.282007	0.233964
H	11.880601	-1.603109	0.892640
H	12.656456	-2.512755	3.098388
H	12.559815	-4.191878	2.440003
H	14.258936	-3.600719	0.685162
H	14.355434	-1.923154	1.342734
H	15.150950	-2.825578	3.539225
H	15.053690	-4.510448	2.879187
H	16.223396	-3.328834	2.178219
H	0.445845	0.581193	-2.176896
H	-0.707769	-0.531445	-1.509342
H	-1.143537	1.826849	0.075714
H	0.407149	2.851674	-1.896107
H	-1.105832	2.815449	-2.814312
H	-2.194754	4.222847	-1.016640
H	-0.671142	4.151762	-0.056801
H	0.531490	5.183294	-2.109720
H	-1.101712	5.454076	-2.821588

H	-1.722367	6.843097	-0.814982
H	-0.087623	6.535868	-0.108510
H	0.949759	7.594173	-2.181315
H	-0.711068	7.998913	-2.757354
H	-1.091623	9.345134	-0.663125
H	0.580499	8.940372	-0.110731
H	1.516449	10.052067	-2.174559
H	-0.157602	10.479182	-2.691358
H	0.954924	12.392607	-1.569563
H	-0.459400	11.828707	-0.600904
H	1.224973	11.400212	-0.087164
H	-3.193741	2.106419	-1.556506
H	-2.530746	0.721534	-2.419634
H	-2.614051	-0.577171	-0.163479
H	-4.062327	0.157801	1.625695
H	-2.820106	1.379537	1.388279
H	-4.445556	2.836301	0.121731
H	-5.726267	1.587386	0.362087
H	-5.488498	1.819009	2.836483
H	-4.200154	3.062281	2.597867
H	-5.831474	4.516470	1.365705
H	-7.120217	3.274178	1.606409
H	-6.884313	3.511721	4.092985
H	-5.595336	4.753704	3.852036
H	-7.227304	6.208903	2.621543
H	-8.516379	4.966901	2.862466
H	-8.283389	5.209790	5.353166
H	-6.995953	6.450928	5.112174
H	-8.628577	7.914976	3.902284
H	-9.921493	6.668556	4.144625
H	-9.195188	7.508937	5.566579
H	-5.235032	0.332836	-1.498945
H	-4.123761	-0.952454	-2.051410
H	-4.493959	-2.185676	0.146205
H	-5.764561	-0.966758	0.554786
H	-7.003621	-1.545769	-1.540426
H	-5.751368	-2.786334	-1.934544
H	-6.270076	-3.990299	0.204467
H	-7.525275	-2.752323	0.596516
H	-8.772303	-3.353658	-1.495673
H	-7.517429	-4.592010	-1.887734
H	-8.037906	-5.796438	0.250901

H	-9.292927	-4.558234	0.642768
H	-10.540130	-5.160359	-1.449472
H	-9.285121	-6.398698	-1.841110
H	-9.806092	-7.602947	0.297668
H	-11.061357	-6.364625	0.688951
H	-12.312455	-6.973075	-1.404289
H	-11.058543	-8.210535	-1.794574
H	-11.591944	-9.426360	0.329072
H	-12.851321	-8.183640	0.720882
H	-13.045262	-9.245580	-0.724949

12-(2-Etilheksil)-11-heptil-10-heksil-12-nonil-11-oktildokozan (C₆₀H₁₂₂)

C	-2.930599	2.383416	3.922842
C	-3.279775	3.664213	3.154392
C	-2.821245	1.131783	2.998585
C	-1.427330	1.174857	2.249763
C	-0.934761	0.307307	0.980371
C	-1.628006	0.820959	-0.468660
C	-1.033292	2.254906	-1.013343
C	0.429539	2.313125	-1.598684
C	1.141213	3.632295	-1.238940
C	2.562124	3.672915	-1.815001
C	3.266738	4.984433	-1.449679
C	4.689159	5.022507	-2.020378
C	5.394302	6.333650	-1.653716
C	6.816704	6.372463	-2.224583
C	7.520938	7.683582	-1.857282
C	8.937027	7.726387	-2.424019
C	-1.927883	3.032146	-2.063077
C	-2.786079	4.156516	-1.446773
C	-3.645208	4.844288	-2.515021
C	-4.494741	5.963805	-1.901821
C	-5.353785	6.650022	-2.969778
C	-6.202514	7.763257	-2.362617
C	-1.618335	-0.268596	-1.627235
C	-0.372115	-0.528074	-2.502271
C	-0.490002	-1.886474	-3.220295
C	0.849704	-2.341827	-3.809136
C	0.713375	-3.729027	-4.450956
C	2.075266	-4.276075	-4.890998

C	1.928546	-5.669495	-5.513454
C	3.285329	-6.242307	-5.911199
C	-3.185334	1.082952	-0.240334
C	-4.143811	-0.086193	0.111469
C	-5.599175	0.401685	0.193296
C	-6.526495	-0.713331	0.694334
C	-7.967580	-0.211589	0.835065
C	-8.884395	-1.319974	1.364729
C	-10.319649	-0.824051	1.513096
C	0.632720	0.550415	0.974675
C	1.460467	0.177950	2.238921
C	2.926527	-0.105131	1.880000
C	3.756648	-0.406824	3.133079
C	5.217414	-0.694984	2.767712
C	6.048906	-0.997546	4.019732
C	7.509802	-1.285386	3.653940
C	8.341623	-1.588155	4.905759
C	9.802031	-1.875840	4.539259
C	10.633360	-2.177438	5.782753
C	-1.141659	-1.243121	1.279979
C	-0.163301	-2.262873	0.635195
C	-0.786298	-3.654309	0.461496
C	0.221975	-4.615350	-0.187081
C	-0.448167	-5.916768	-0.638475
C	0.570977	-6.849658	-1.305044
C	-0.106389	-8.112812	-1.847334
C	0.916810	-9.042270	-2.510262
C	0.244992	-10.293652	-3.067456
C	-3.035160	-0.171708	3.819460
C	-4.428996	-0.271258	4.476678
C	-4.791072	-1.724551	4.811225
C	-6.171323	-1.814343	5.455809
H	-1.983792	2.535118	4.485774
H	-3.731157	2.259237	4.676655
H	-4.216821	3.524970	2.574170
H	-3.437982	4.493580	3.875706
H	-2.467639	3.968244	2.464732
H	-3.679602	1.205923	2.331401
H	-1.219923	2.226338	1.985023
H	-0.737223	0.982328	3.090188
H	-1.015193	2.894729	-0.108334
H	1.085603	1.494659	-1.309327

H	0.417072	2.235923	-2.706157
H	0.560218	4.491708	-1.638080
H	1.196915	3.738553	-0.133939
H	3.147197	2.817350	-1.410509
H	2.513294	3.576743	-2.922122
H	2.683936	5.840517	-1.855928
H	3.312301	5.081271	-0.342337
H	5.271359	4.165818	-1.614442
H	4.643818	4.926218	-3.127745
H	4.811825	7.190362	-2.059160
H	5.439772	6.429544	-0.546300
H	7.399470	5.515880	-1.819226
H	6.771498	6.277004	-3.332060
H	6.945612	8.544600	-2.262272
H	7.573336	7.784074	-0.751153
H	8.911559	7.653310	-3.532216
H	9.421193	8.685201	-2.142532
H	9.541993	6.889416	-2.014660
H	-1.304453	3.554616	-2.821661
H	-2.525641	2.342477	-2.691056
H	-3.455142	3.773781	-0.656090
H	-2.111169	4.908659	-0.981795
H	-2.985079	5.272747	-3.301222
H	-4.314791	4.091281	-2.986470
H	-5.156941	5.535677	-1.116943
H	-3.825699	6.715995	-1.428295
H	-4.698424	7.085372	-3.755473
H	-6.026873	5.904013	-3.446008
H	-6.812396	8.241458	-3.157804
H	-6.886303	7.349901	-1.590811
H	-5.551968	8.536253	-1.900709
H	-1.950253	-1.231531	-1.202716
H	-2.413664	-0.023355	-2.365716
H	-0.300109	0.250406	-3.287616
H	0.557669	-0.516863	-1.916087
H	-0.833475	-2.666173	-2.506818
H	-1.248783	-1.808522	-4.029861
H	1.191632	-1.608174	-4.571637
H	1.607136	-2.388427	-2.995456
H	0.262806	-4.434092	-3.717691
H	0.037278	-3.660078	-5.331498
H	2.528942	-3.583905	-5.634214

H	2.747940	-4.338809	-4.006985
H	1.449086	-6.358522	-4.784568
H	1.283171	-5.609748	-6.416831
H	3.778658	-5.583494	-6.657248
H	3.938954	-6.340676	-5.018320
H	3.146421	-7.247866	-6.361246
H	-3.310678	1.926946	0.453237
H	-3.646420	1.457520	-1.168163
H	-4.092857	-0.884677	-0.656945
H	-3.912600	-0.527667	1.086756
H	-5.661793	1.266516	0.890139
H	-5.935121	0.737596	-0.812432
H	-6.498180	-1.564181	-0.021560
H	-6.169505	-1.073840	1.684561
H	-7.990096	0.649785	1.538881
H	-8.336384	0.131351	-0.156828
H	-8.872439	-2.183240	0.664062
H	-8.519822	-1.666252	2.356691
H	-10.362792	0.023375	2.230115
H	-10.717409	-0.493776	0.529851
H	-10.959270	-1.646592	1.896832
H	1.081713	0.002195	0.134783
H	0.828492	1.629921	0.846500
H	1.449845	1.032456	2.951302
H	1.047449	-0.699549	2.771142
H	2.974934	-0.978120	1.192167
H	3.353137	0.780098	1.357989
H	3.714867	0.465973	3.821502
H	3.326632	-1.290241	3.654872
H	5.258960	-1.567665	2.078970
H	5.646897	0.188390	2.245370
H	6.007232	-0.125036	4.708629
H	5.619433	-1.881103	4.541734
H	7.551403	-2.157804	2.964894
H	7.939193	-0.401783	3.131926
H	8.300383	-0.715759	5.594877
H	7.912552	-2.471884	5.427852
H	9.851473	-2.749550	3.853291
H	10.238886	-0.995094	4.019830
H	10.621627	-1.308573	6.474865
H	10.232333	-3.070512	6.307810
H	11.683995	-2.381511	5.486970

H	-1.030691	-1.418591	2.367396
H	-2.154566	-1.565429	1.024752
H	0.164268	-1.932474	-0.353235
H	0.748617	-2.365860	1.259337
H	-1.098682	-4.053230	1.451255
H	-1.686563	-3.569554	-0.186250
H	0.684620	-4.129419	-1.074354
H	1.029543	-4.843808	0.542831
H	-0.899532	-6.426313	0.241081
H	-1.256261	-5.677826	-1.364941
H	1.068886	-6.315452	-2.144208
H	1.346948	-7.135628	-0.561092
H	-0.606394	-8.650537	-1.011670
H	-0.877909	-7.823434	-2.594849
H	1.426785	-8.508678	-3.341709
H	1.683957	-9.347003	-1.765365
H	1.009184	-10.947389	-3.538189
H	-0.253342	-10.859806	-2.251868
H	-0.507988	-10.017386	-3.836095
H	-2.967120	-1.032940	3.139096
H	-2.245314	-0.276168	4.594941
H	-4.441426	0.314056	5.420501
H	-5.201547	0.140401	3.790268
H	-4.794925	-2.335800	3.882159
H	-4.035411	-2.146702	5.509003
H	-6.405250	-2.874863	5.686959
H	-6.195145	-1.230960	6.400807
H	-6.946416	-1.422989	4.762410

11-Desil-10-heptil-12,12-dimetil-11-nonil-10-oktiltetrakozan (C₆₀H₁₂₂)

C	0.639406	-0.670046	1.067887
C	1.381263	0.582727	1.623047
C	0.572974	1.303546	2.716431
C	1.311599	2.549220	3.220419
C	0.500803	3.268730	4.304414
C	1.236980	4.517044	4.804685
C	0.424918	5.238540	5.886720
C	1.161009	6.486980	6.386987
C	0.348374	7.208179	7.468359
C	1.078186	8.451013	7.969468

C	0.575702	-0.977315	-0.504734
C	2.084670	-1.444010	-1.114564
C	3.258197	-0.549031	-0.542824
C	4.672789	-0.767839	-1.144639
C	5.732486	-0.003654	-0.339726
C	7.127436	-0.184709	-0.950057
C	8.184449	0.577345	-0.142413
C	9.579036	0.398281	-0.753795
C	10.636333	1.160082	0.053926
C	12.030144	0.981963	-0.558780
C	13.085483	1.738327	0.242794
C	2.483176	-2.960491	-0.772793
C	3.108252	-3.314903	0.605005
C	3.271603	-4.834643	0.757962
C	3.912751	-5.190287	2.105087
C	4.072456	-6.707634	2.255358
C	4.713149	-7.062972	3.602140
C	4.872121	-8.580203	3.752225
C	5.509734	-8.937865	5.091582
C	2.185357	-1.341183	-2.722366
C	2.323836	0.033840	-3.442919
C	3.043829	-0.106744	-4.794440
C	3.121069	1.239918	-5.524721
C	3.845756	1.096998	-6.868085
C	3.922825	2.443276	-7.597005
C	4.643496	2.305336	-8.934874
C	-0.658905	-2.091060	-0.711297
C	-2.101791	-1.443932	-0.549600
C	-3.334080	-2.372437	-0.702463
C	-4.620406	-1.642353	-0.287761
C	-5.853028	-2.531892	-0.489283
C	-7.133837	-1.798011	-0.074903
C	-8.367860	-2.684163	-0.281033
C	-9.648460	-1.948995	0.131832
C	-10.883142	-2.833767	-0.076868
C	-12.163767	-2.098153	0.335251
C	-13.398684	-2.982198	0.125034
C	-14.678604	-2.245970	0.536944
C	-15.910180	-3.122422	0.328565
C	-0.681430	-2.750026	-2.123788
C	-0.607155	-3.235090	0.359609
C	0.161976	0.373417	-1.243613

C	-0.775851	1.420370	-0.568287
C	-1.595785	2.198062	-1.609654
C	-2.507388	3.230644	-0.935359
C	-3.329245	4.001706	-1.974528
C	-4.244465	5.029754	-1.299156
C	-5.068558	5.799659	-2.337732
C	-5.983682	6.826974	-1.661697
C	-6.805893	7.595330	-2.692205
H	1.030179	-1.531257	1.618244
H	-0.389804	-0.616196	1.457391
H	2.328994	0.265678	2.106177
H	1.641434	1.306863	0.833194
H	-0.418333	1.607696	2.318243
H	0.405871	0.604281	3.565418
H	2.298788	2.249259	3.636249
H	1.482667	3.244049	2.368554
H	-0.486820	3.566721	3.887829
H	0.330268	2.575183	5.157322
H	2.223982	4.219130	5.222616
H	1.408881	5.209422	3.951049
H	-0.562026	5.536394	5.468560
H	0.252832	4.546244	6.740370
H	2.147789	6.189304	6.805693
H	1.333324	7.179386	5.533437
H	-0.638167	7.512672	7.055578
H	0.174728	6.522902	8.326614
H	1.242272	9.165157	7.134509
H	0.467075	8.951574	8.749820
H	2.058310	8.171166	8.411204
H	3.034905	0.525291	-0.653008
H	3.356964	-0.735575	0.536655
H	4.946767	-1.840714	-1.155876
H	4.713731	-0.406243	-2.190284
H	5.474299	1.078373	-0.326542
H	5.739828	-0.378194	0.707782
H	7.384927	-1.266880	-0.964367
H	7.122695	0.191651	-1.996952
H	7.925855	1.659239	-0.126747
H	8.190265	0.199972	0.904089
H	9.837508	-0.683644	-0.769772
H	9.573076	0.775871	-1.800230
H	10.377615	2.241954	0.070842

H	10.643339	0.781705	1.100084
H	12.297161	-0.097280	-0.576103
H	12.031832	1.362015	-1.603732
H	12.855495	2.825091	0.254769
H	13.122411	1.359332	1.286391
H	14.082396	1.591560	-0.223680
H	1.670289	-3.660422	-0.976312
H	3.248372	-3.317854	-1.492282
H	4.115013	-2.860397	0.702953
H	2.503756	-2.956933	1.447933
H	2.274032	-5.321873	0.688420
H	3.911128	-5.221533	-0.065953
H	4.911954	-4.706450	2.176229
H	3.273564	-4.804555	2.929864
H	3.073184	-7.191411	2.184384
H	4.711623	-7.093641	1.430702
H	5.712660	-6.579639	3.673089
H	4.074198	-6.676789	4.426925
H	3.876098	-9.070033	3.686137
H	5.512890	-8.973080	2.932822
H	6.518989	-8.480816	5.172820
H	4.875214	-8.578007	5.929421
H	5.611906	-10.040620	5.171921
H	3.074301	-1.920381	-3.048139
H	1.372974	-1.860395	-3.235632
H	1.321268	0.447001	-3.667785
H	2.876396	0.777856	-2.839690
H	4.075371	-0.487781	-4.627574
H	2.495283	-0.838747	-5.427671
H	2.091697	1.622955	-5.701337
H	3.666500	1.971982	-4.888930
H	4.875589	0.714785	-6.691891
H	3.300678	0.364889	-7.504115
H	2.896525	2.830125	-7.779824
H	4.469883	3.179375	-6.968308
H	5.682051	1.943443	-8.778259
H	4.101888	1.593157	-9.593326
H	4.684248	3.293976	-9.438760
H	-2.203491	-0.997659	0.455289
H	-2.247616	-0.653538	-1.307848
H	-3.452406	-2.678108	-1.763027
H	-3.229671	-3.280278	-0.073880

H	-4.550845	-1.352202	0.783951
H	-4.731212	-0.717574	-0.896582
H	-5.926261	-2.822267	-1.560651
H	-5.743875	-3.455583	0.120951
H	-7.062394	-1.510358	0.997361
H	-7.240275	-0.872383	-0.682818
H	-8.438642	-2.972360	-1.353197
H	-8.262201	-3.609351	0.327611
H	-9.578372	-1.662280	1.204439
H	-9.752901	-1.022831	-0.475565
H	-10.952824	-3.120737	-1.149434
H	-10.779048	-3.759741	0.530854
H	-12.094543	-1.812076	1.408092
H	-12.267245	-1.171605	-0.271731
H	-13.468115	-3.268321	-0.947802
H	-13.295727	-3.908691	0.732211
H	-14.618178	-1.960254	1.609826
H	-14.789981	-1.319949	-0.068399
H	-16.008411	-3.401736	-0.742146
H	-15.835979	-4.044746	0.943292
H	-16.819842	-2.564033	0.634645
H	0.193978	-3.365248	-2.362448
H	-1.496681	-3.492873	-2.216873
H	-0.846754	-1.994986	-2.919438
H	-1.131653	-2.938042	1.293372
H	-1.091630	-4.166780	-0.002598
H	0.397725	-3.514729	0.689658
H	1.061781	0.968300	-1.456630
H	-0.271008	0.099620	-2.224463
H	-1.458604	0.985966	0.176526
H	-0.168648	2.173042	-0.025763
H	-0.900911	2.716853	-2.306608
H	-2.221042	1.495004	-2.200879
H	-3.197258	2.709268	-0.235290
H	-1.886105	3.945974	-0.352341
H	-2.640145	4.525065	-2.673656
H	-3.948820	3.285504	-2.558361
H	-4.932273	4.505928	-0.599013
H	-3.625033	5.746649	-0.716072
H	-4.381066	6.323930	-3.037837
H	-5.688071	5.082790	-2.920815
H	-6.676462	6.309522	-0.962645

H	-5.370870	7.549555	-1.079712
H	-7.457727	8.330245	-2.174533
H	-6.136501	8.143335	-3.389124
H	-7.447562	6.897843	-3.271742

n-Heptakontan (C₇₀H₁₄₂)

C	-0.632323	-0.433492	0.000000
C	-1.895772	0.435262	0.000000
C	-3.160349	-0.431824	-0.000000
C	-4.423894	0.436769	-0.000000
C	-5.688357	-0.430490	-0.000000
C	-6.952004	0.437949	-0.000000
C	-8.216388	-0.429437	-0.000000
C	-9.480095	0.438913	0.000000
C	-10.744453	-0.428515	0.000000
C	-12.008145	0.439857	0.000000
C	-13.272567	-0.427473	0.000000
C	-14.536146	0.441061	-0.000000
C	-15.800694	-0.426069	-0.000000
C	-17.064115	0.442695	-0.000000
C	-18.328819	-0.424194	-0.000000
C	-19.592078	0.444812	-0.000001
C	-20.856909	-0.421872	-0.000001
C	-22.120079	0.447262	-0.000000
C	-23.384924	-0.419395	0.000000
C	-24.648129	0.449684	0.000001
C	-25.912880	-0.417107	0.000001
C	-27.176222	0.451760	0.000001
C	-28.440769	-0.415320	0.000001
C	-29.704336	0.453201	0.000001
C	-30.968607	-0.414281	0.000000
C	-32.232467	0.453805	-0.000000
C	-33.496420	-0.414138	-0.000000
C	-34.760597	0.453476	-0.000000
C	-36.024211	-0.414961	-0.000000
C	-37.288723	0.452158	-0.000000
C	-38.552044	-0.416735	0.000000
C	-39.816841	0.450001	0.000000
C	-41.079967	-0.419085	0.000000
C	-42.344149	0.447935	0.000000

C	-43.603556	-0.413624	-0.000000
C	0.632323	0.433492	0.000001
C	1.895772	-0.435262	0.000001
C	3.160349	0.431824	0.000001
C	4.423894	-0.436769	0.000001
C	5.688357	0.430490	0.000000
C	6.952004	-0.437949	-0.000000
C	8.216388	0.429437	-0.000000
C	9.480095	-0.438913	-0.000000
C	10.744453	0.428515	-0.000000
C	12.008145	-0.439857	0.000000
C	13.272567	0.427473	0.000000
C	14.536146	-0.441061	-0.000000
C	15.800694	0.426069	-0.000000
C	17.064115	-0.442695	-0.000000
C	18.328819	0.424194	0.000000
C	19.592078	-0.444812	0.000000
C	20.856909	0.421872	0.000000
C	22.120079	-0.447262	-0.000000
C	23.384924	0.419395	-0.000000
C	24.648129	-0.449684	-0.000001
C	25.912880	0.417107	-0.000001
C	27.176222	-0.451760	-0.000000
C	28.440769	0.415320	-0.000000
C	29.704336	-0.453201	0.000000
C	30.968607	0.414281	0.000000
C	32.232467	-0.453805	0.000000
C	33.496420	0.414138	0.000000
C	34.760597	-0.453476	-0.000000
C	36.024211	0.414961	-0.000000
C	37.288723	-0.452158	-0.000000
C	38.552044	0.416735	-0.000000
C	39.816841	-0.450001	-0.000000
C	41.079967	0.419085	-0.000000
C	42.344149	-0.447935	-0.000000
C	43.603556	0.413624	-0.000000
H	-0.632772	-1.083220	0.903019
H	-0.632772	-1.083220	-0.903019
H	-1.895350	1.084989	0.903019
H	-1.895350	1.084989	-0.903019
H	-3.160737	-1.081555	-0.903017
H	-3.160737	-1.081555	0.903018

H	-4.423556	1.086494	0.903023
H	-4.423556	1.086494	-0.903023
H	-5.688667	-1.080222	-0.903017
H	-5.688667	-1.080223	0.903017
H	-6.951732	1.087675	0.903022
H	-6.951732	1.087675	-0.903022
H	-8.216641	-1.079167	-0.903020
H	-8.216641	-1.079167	0.903020
H	-9.479856	1.088640	0.903020
H	-9.479856	1.088640	-0.903020
H	-10.744709	-1.078241	-0.903022
H	-10.744709	-1.078241	0.903022
H	-12.007877	1.089593	0.903020
H	-12.007877	1.089593	-0.903020
H	-13.272881	-1.077197	-0.903025
H	-13.272881	-1.077197	0.903025
H	-14.535784	1.090795	0.903018
H	-14.535784	1.090795	-0.903018
H	-15.801118	-1.075790	-0.903026
H	-15.801118	-1.075790	0.903026
H	-17.063637	1.092431	0.903019
H	-17.063637	1.092431	-0.903019
H	-18.329362	-1.073916	-0.903028
H	-18.329362	-1.073916	0.903028
H	-19.591494	1.094542	0.903021
H	-19.591494	1.094542	-0.903020
H	-20.857536	-1.071598	-0.903022
H	-20.857536	-1.071599	0.903022
H	-22.119452	1.096990	0.903025
H	-22.119452	1.096990	-0.903025
H	-23.385540	-1.069124	-0.903025
H	-23.385540	-1.069124	0.903025
H	-24.647552	1.099405	0.903027
H	-24.647552	1.099406	-0.903027
H	-25.913405	-1.066844	-0.903020
H	-25.913405	-1.066843	0.903019
H	-27.175772	1.101471	0.903030
H	-27.175772	1.101472	-0.903031
H	-28.441138	-1.065061	-0.903013
H	-28.441138	-1.065060	0.903012
H	-29.704076	1.102909	0.903034
H	-29.704076	1.102910	-0.903035

H	-30.968765	-1.064026	-0.903017
H	-30.968764	-1.064025	0.903016
H	-32.232431	1.103511	0.903038
H	-32.232431	1.103511	-0.903038
H	-33.496339	-1.063880	-0.903014
H	-33.496339	-1.063880	0.903015
H	-34.760807	1.103183	0.903036
H	-34.760807	1.103183	-0.903036
H	-36.023876	-1.064699	-0.903015
H	-36.023876	-1.064699	0.903015
H	-37.289169	1.101870	0.903033
H	-37.289169	1.101870	-0.903033
H	-38.551483	-1.066474	-0.903016
H	-38.551483	-1.066474	0.903016
H	-39.817486	1.099721	0.903037
H	-39.817486	1.099721	-0.903037
H	-41.079651	-1.068786	-0.903078
H	-41.079651	-1.068786	0.903078
H	-42.353281	1.097768	0.902213
H	-42.353281	1.097768	-0.902214
H	-43.631875	-1.055744	0.906074
H	-44.501123	0.240099	-0.000000
H	-43.631875	-1.055744	-0.906074
H	0.632772	1.083220	-0.903019
H	0.632772	1.083220	0.903018
H	1.895350	-1.084989	0.903019
H	1.895350	-1.084990	-0.903020
H	3.160737	1.081555	-0.903018
H	3.160737	1.081554	0.903017
H	4.423556	-1.086494	0.903022
H	4.423556	-1.086494	-0.903023
H	5.688667	1.080223	-0.903017
H	5.688667	1.080223	0.903017
H	6.951732	-1.087675	0.903022
H	6.951732	-1.087675	-0.903022
H	8.216641	1.079167	-0.903020
H	8.216641	1.079167	0.903020
H	9.479856	-1.088640	0.903020
H	9.479856	-1.088640	-0.903020
H	10.744709	1.078241	-0.903022
H	10.744709	1.078241	0.903022
H	12.007877	-1.089593	0.903020

H	12.007877	-1.089593	-0.903020
H	13.272881	1.077197	-0.903025
H	13.272881	1.077197	0.903025
H	14.535784	-1.090795	0.903018
H	14.535784	-1.090795	-0.903018
H	15.801118	1.075790	-0.903026
H	15.801118	1.075790	0.903026
H	17.063637	-1.092431	0.903019
H	17.063637	-1.092431	-0.903019
H	18.329362	1.073916	-0.903028
H	18.329362	1.073916	0.903028
H	19.591494	-1.094542	0.903020
H	19.591494	-1.094542	-0.903021
H	20.857536	1.071599	-0.903022
H	20.857536	1.071599	0.903022
H	22.119452	-1.096990	0.903025
H	22.119452	-1.096990	-0.903025
H	23.385540	1.069123	-0.903025
H	23.385540	1.069124	0.903025
H	24.647552	-1.099406	0.903027
H	24.647552	-1.099405	-0.903027
H	25.913405	1.066844	-0.903019
H	25.913405	1.066844	0.903019
H	27.175772	-1.101471	0.903031
H	27.175772	-1.101471	-0.903031
H	28.441138	1.065060	-0.903013
H	28.441138	1.065061	0.903013
H	29.704076	-1.102909	0.903034
H	29.704076	-1.102909	-0.903034
H	30.968765	1.064026	-0.903017
H	30.968765	1.064025	0.903016
H	32.232431	-1.103511	0.903037
H	32.232431	-1.103511	-0.903038
H	33.496339	1.063880	-0.903015
H	33.496339	1.063880	0.903014
H	34.760806	-1.103183	0.903036
H	34.760807	-1.103183	-0.903036
H	36.023876	1.064699	-0.903015
H	36.023876	1.064699	0.903015
H	37.289169	-1.101870	0.903033
H	37.289169	-1.101870	-0.903033
H	38.551483	1.066474	-0.903016

H	38.551483	1.066474	0.903016
H	39.817486	-1.099721	0.903037
H	39.817486	-1.099721	-0.903037
H	41.079651	1.068786	-0.903078
H	41.079651	1.068786	0.903078
H	42.353281	-1.097768	0.902213
H	42.353281	-1.097768	-0.902214
H	43.631875	1.055744	-0.906074
H	43.631875	1.055744	0.906074
H	44.501123	-0.240099	-0.000000

16-Desil-16-pentadesil-15-tridesildotriakontan (C₇₀H₁₄₂)

C	-0.584260	-2.758141	-1.743725
C	-1.092930	-3.858109	-0.783316
C	-1.368458	-5.161315	-1.544186
C	-1.883552	-6.253806	-0.599436
C	-2.164630	-7.553731	-1.361995
C	-2.683837	-8.644320	-0.417642
C	-2.966960	-9.944088	-1.180057
C	-3.487760	-11.034040	-0.235851
C	-3.770843	-12.333230	-0.998630
C	-4.289985	-13.420403	-0.062185
C	-0.276742	-1.347791	-1.096747
C	-1.622874	-0.738494	-0.476431
C	-1.444758	0.620795	0.267272
C	-2.634460	0.956071	1.185818
C	-2.381423	2.251877	1.966564
C	-3.571680	2.589844	2.872095
C	-3.318838	3.883892	3.654454
C	-4.508089	4.219242	4.562214
C	-4.255784	5.512873	5.345587
C	-5.444151	5.845953	6.255384
C	-5.192355	7.139311	7.039390
C	-6.380160	7.470808	7.950541
C	-6.128712	8.764046	8.734927
C	-7.316182	9.094864	9.646674
C	-7.064219	10.387873	10.430599
C	-8.243990	10.720409	11.339419
C	-2.806987	-0.610753	-1.504374
C	-4.059190	-1.392488	-1.072880

C	-5.246225	-1.093171	-1.996337
C	-6.481935	-1.901061	-1.582899
C	-7.668160	-1.604632	-2.507783
C	-8.902557	-2.416037	-2.097165
C	-10.088112	-2.121746	-3.023797
C	-11.321787	-2.935248	-2.615006
C	-12.506917	-2.641904	-3.542536
C	-13.740173	-3.456703	-3.134948
C	-14.925144	-3.163640	-4.062697
C	-16.157518	-3.979127	-3.655112
C	-17.339158	-3.690201	-4.576318
C	0.802480	-1.547863	0.037072
C	2.064870	-2.339792	-0.377570
C	3.175169	-2.202237	0.672049
C	4.411425	-3.018804	0.277200
C	5.523141	-2.876014	1.323216
C	6.758353	-3.693929	0.928207
C	7.870693	-3.552083	1.973833
C	9.104874	-4.371696	1.578985
C	10.217250	-4.231200	2.624783
C	11.450579	-5.052254	2.230236
C	12.562800	-4.913013	3.276390
C	13.795540	-5.735116	2.882145
C	14.907687	-5.596706	3.928536
C	16.139995	-6.419470	3.534497
C	17.251566	-6.280808	4.580952
C	18.479646	-7.098902	4.192443
C	0.283100	-0.421042	-2.249912
C	1.225539	0.735759	-1.843206
C	1.488331	1.673990	-3.028282
C	2.455277	2.798522	-2.638403
C	2.714796	3.736649	-3.822882
C	3.682272	4.860515	-3.433430
C	3.942129	5.798431	-4.618174
C	4.909981	6.922152	-4.229108
C	5.169951	7.859795	-5.414077
C	6.138038	8.983418	-5.025264
C	6.397995	9.920992	-6.210308
C	7.366398	11.044445	-5.821672
C	7.626124	11.982193	-7.006563
C	8.594706	13.104834	-6.617410
C	8.855574	14.040556	-7.794167

H	0.331999	-3.146412	-2.238035
H	-1.305784	-2.664001	-2.577312
H	-0.342141	-4.065607	0.005269
H	-2.028392	-3.546160	-0.284427
H	-2.128874	-4.972117	-2.333947
H	-0.430638	-5.508523	-2.031481
H	-1.123047	-6.446778	0.189208
H	-2.819926	-5.905215	-0.110129
H	-2.923355	-7.359833	-2.152163
H	-1.228005	-7.904134	-1.849359
H	-1.924822	-8.838910	0.372063
H	-3.619777	-8.293023	0.070453
H	-3.725264	-9.749190	-1.970381
H	-2.030837	-10.296039	-1.667307
H	-2.729569	-11.229355	0.554501
H	-4.423979	-10.682259	0.251401
H	-4.530735	-12.146430	-1.788588
H	-2.838145	-12.693304	-1.485225
H	-3.537389	-13.644640	0.723564
H	-5.237212	-13.095494	0.418733
H	-4.485643	-14.347441	-0.641223
H	-1.929655	-1.446372	0.321531
H	-0.547661	0.607395	0.911371
H	-1.331931	1.442937	-0.470917
H	-3.557520	1.082257	0.581570
H	-2.793247	0.122739	1.905096
H	-1.467765	2.134464	2.590220
H	-2.215414	3.086268	1.249755
H	-4.485661	2.709453	2.249221
H	-3.738265	1.754145	3.587265
H	-2.403816	3.765185	4.275929
H	-3.154549	4.719972	2.939220
H	-5.423122	4.338147	3.940776
H	-4.672409	3.382685	5.276911
H	-3.339733	5.394686	5.965652
H	-4.093517	6.349898	4.630991
H	-6.360233	5.964168	5.635372
H	-5.606346	5.008646	6.969676
H	-4.275582	7.021596	7.658476
H	-5.031557	7.976939	6.325172
H	-7.296943	7.588516	7.331466
H	-6.540912	6.632997	8.664571

H	-5.211631	8.646569	9.353612
H	-5.968602	9.602019	8.020945
H	-8.233424	9.212569	9.028228
H	-7.476334	8.257093	10.360925
H	-6.150433	10.276380	11.054241
H	-6.906935	11.230950	9.722898
H	-8.033487	11.659600	11.893116
H	-9.166852	10.862230	10.737505
H	-8.407029	9.903667	12.074566
H	-3.087444	0.455892	-1.646383
H	-2.535123	-0.943645	-2.521704
H	-3.843276	-2.479777	-1.112055
H	-4.332686	-1.125641	-0.029491
H	-5.484413	-0.007565	-1.949218
H	-4.971824	-1.350620	-3.043262
H	-6.243307	-2.986776	-1.627578
H	-6.757313	-1.642331	-0.536556
H	-7.908807	-0.519510	-2.461056
H	-7.391317	-1.860705	-3.554395
H	-8.661085	-3.501059	-2.142304
H	-9.180504	-2.158887	-1.051122
H	-10.330766	-1.037054	-2.977413
H	-9.809376	-2.377254	-4.070042
H	-11.078731	-4.019885	-2.660707
H	-11.601131	-2.679282	-1.569043
H	-12.750683	-1.557465	-3.496025
H	-12.227081	-2.896816	-4.588630
H	-13.496281	-4.541131	-3.181342
H	-14.020227	-3.201731	-2.088922
H	-15.169723	-2.079360	-4.015979
H	-14.645243	-3.418309	-5.108867
H	-15.921572	-5.064670	-3.702984
H	-16.445632	-3.727039	-2.611177
H	-17.085927	-3.957880	-5.624320
H	-18.215156	-4.293537	-4.257595
H	-17.612244	-2.614485	-4.527888
H	1.146057	-0.570354	0.422967
H	0.340393	-2.057898	0.909463
H	1.820175	-3.416908	-0.483278
H	2.446731	-1.979619	-1.355188
H	3.460200	-1.131188	0.768178
H	2.796451	-2.557964	1.655695

H	4.129815	-4.090996	0.183989
H	4.786304	-2.664691	-0.708557
H	5.805872	-1.804037	1.415574
H	5.147956	-3.229063	2.309206
H	6.475314	-4.765802	0.835519
H	7.133357	-3.340798	-0.057835
H	8.154720	-2.480412	2.065698
H	7.495433	-3.904261	2.960109
H	8.820448	-5.443210	1.486400
H	9.480453	-4.019167	0.592949
H	10.502533	-3.159867	2.716700
H	9.841389	-4.582903	3.611003
H	11.164950	-6.123437	2.137545
H	11.826824	-4.700124	1.244311
H	12.849028	-3.841954	3.368584
H	12.186305	-5.264535	4.262431
H	13.509066	-6.806069	2.789455
H	14.172271	-5.383341	1.896281
H	15.194589	-4.525835	4.020906
H	14.530836	-5.948088	4.914503
H	15.853310	-7.490438	3.442267
H	16.517192	-6.068150	2.548618
H	17.546393	-5.212888	4.675699
H	16.882756	-6.633343	5.568907
H	19.266263	-6.979216	4.966961
H	18.217588	-8.175727	4.115847
H	18.883986	-6.749290	3.218602
H	0.853138	-1.036845	-2.980022
H	-0.557547	0.007819	-2.830718
H	0.804664	1.328893	-1.012095
H	2.199660	0.324757	-1.505161
H	1.922466	1.090760	-3.870276
H	0.526009	2.119096	-3.364989
H	2.021223	3.381181	-1.795932
H	3.418745	2.355340	-2.302361
H	3.148164	3.153772	-4.665523
H	1.751450	4.180432	-4.158464
H	3.248763	5.443509	-2.590938
H	4.645485	4.416663	-3.097539
H	4.375314	5.215290	-5.460729
H	2.978923	6.242435	-4.953877
H	4.476759	7.505437	-3.386678

H	5.873130	6.478137	-3.893265
H	5.602975	7.276413	-6.256548
H	4.206819	8.303920	-5.749823
H	5.705026	9.566833	-4.182814
H	7.101162	8.539274	-4.689522
H	6.830751	9.337515	-7.052849
H	5.434888	10.365299	-6.545883
H	6.933784	11.627825	-4.978983
H	8.329589	10.600115	-5.486336
H	8.058687	11.399059	-7.849477
H	6.663114	12.427083	-7.341747
H	8.167253	13.694553	-5.777244
H	9.561431	12.667607	-6.284790
H	9.307278	13.479989	-8.640227
H	7.907251	14.511439	-8.130377
H	9.558931	14.841561	-7.483277

17,17,18-Tridodesiltetatriakontan (C₇₀H₁₄₂)

C	0.966696	0.452873	2.875962
C	1.375700	-1.038609	2.867114
C	1.399696	-1.611364	4.290142
C	1.845079	-3.078726	4.286830
C	1.866579	-3.650990	5.708931
C	2.313189	-5.117704	5.705086
C	2.335758	-5.690314	7.127180
C	2.783168	-7.156834	7.123121
C	2.806610	-7.729489	8.545244
C	3.254104	-9.195940	8.541090
C	3.277999	-9.767696	9.963201
C	3.722388	-11.227453	9.963110
C	0.668570	1.137260	1.481362
C	1.622860	0.568596	0.360680
C	3.123289	0.904757	0.530122
C	3.991455	0.046938	-0.399248
C	5.475424	0.404456	-0.254438
C	6.342269	-0.461909	-1.175529
C	7.826723	-0.107644	-1.028619
C	8.693457	-0.977295	-1.946913
C	10.178285	-0.624722	-1.799312
C	11.044709	-1.496786	-2.715646

C	12.529777	-1.145210	-2.568015
C	13.395835	-2.018929	-3.483139
C	14.881060	-1.667860	-3.335797
C	15.746953	-2.542911	-4.249856
C	17.232183	-2.191822	-4.103052
C	18.097173	-3.067743	-5.016541
C	19.576290	-2.721150	-4.873551
C	-0.863457	0.929873	1.059367
C	-1.272385	-0.549953	0.784921
C	-2.590527	-0.666492	-0.002795
C	-2.911999	-2.130872	-0.326859
C	-4.230977	-2.246907	-1.099973
C	-4.551929	-3.710471	-1.424912
C	-5.869801	-3.825960	-2.199943
C	-6.190891	-5.289415	-2.525523
C	-7.507296	-5.404431	-3.303167
C	-7.828117	-6.867805	-3.629461
C	-9.143118	-6.982587	-4.409505
C	-9.463904	-8.445964	-4.735885
C	-10.778200	-8.560574	-5.517157
C	-11.099166	-10.023942	-5.843491
C	-12.412832	-10.138386	-6.625758
C	-12.733380	-11.601648	-6.951344
C	-14.039996	-11.719598	-7.730591
C	-1.899346	1.573271	2.053431
C	-2.814266	2.606944	1.375434
C	-3.928121	3.068928	2.322666
C	-4.816819	4.123662	1.653055
C	-5.930129	4.586973	2.599769
C	-6.816782	5.644077	1.931095
C	-7.929924	6.108030	2.877915
C	-8.815726	7.166209	2.209709
C	-9.928692	7.630492	3.156654
C	-10.813856	8.689437	2.488918
C	-11.926357	9.153047	3.436179
C	-12.809122	10.207798	2.775428
C	0.966575	2.681571	1.649578
C	0.798943	3.555254	0.384833
C	1.090438	5.028442	0.697791
C	0.915946	5.903069	-0.549576
C	1.200367	7.375969	-0.233341
C	1.021210	8.250933	-1.479550

C	1.303583	9.724351	-1.163198
C	1.122751	10.599489	-2.409122
C	1.404648	12.073054	-2.092744
C	1.223071	12.948342	-3.338397
C	1.504706	14.421440	-3.021270
C	1.324832	15.295930	-4.258721
H	0.091405	0.565803	3.546149
H	1.793248	0.993167	3.387921
H	0.684307	-1.645322	2.255908
H	2.392032	-1.146419	2.434131
H	2.100907	-1.015291	4.915102
H	0.381676	-1.538756	4.732754
H	1.144043	-3.674408	3.661232
H	2.863422	-3.153108	3.845170
H	2.566983	-3.054802	6.334693
H	0.848069	-3.577694	6.150352
H	1.612503	-5.713872	5.079599
H	3.331422	-5.190891	5.262979
H	3.036112	-5.093851	7.752747
H	1.317434	-5.617629	7.569138
H	2.082528	-7.753335	6.497911
H	3.801256	-7.229505	6.680602
H	3.507251	-7.132959	9.170439
H	1.788533	-7.656920	8.987809
H	2.553199	-9.792796	7.916467
H	4.272096	-9.268822	8.098316
H	3.980043	-9.178352	10.592619
H	2.262562	-9.701185	10.411340
H	3.730450	-11.613605	11.004160
H	3.021544	-11.844162	9.360970
H	4.746441	-11.319100	9.542396
H	1.542086	-0.532632	0.304413
H	1.292676	0.934855	-0.635101
H	3.303747	1.971951	0.285554
H	3.444015	0.736954	1.579035
H	3.848659	-1.027396	-0.148102
H	3.673422	0.209962	-1.452716
H	5.622702	1.476656	-0.511831
H	5.789934	0.247639	0.801091
H	6.193156	-1.534149	-0.919218
H	6.028950	-0.303846	-2.231195
H	7.976582	0.963868	-1.287443

H	8.139205	-0.263361	0.027657
H	8.542542	-2.048770	-1.688480
H	8.381584	-0.821127	-3.003295
H	10.329692	0.446201	-2.059662
H	10.489727	-0.779168	-0.742547
H	10.892731	-2.567672	-2.455406
H	10.733483	-1.342188	-3.772450
H	12.682081	-0.074697	-2.829537
H	12.840788	-1.298683	-1.510982
H	13.243274	-3.089393	-3.221538
H	13.084799	-1.865532	-4.540174
H	15.033809	-0.597697	-3.598496
H	15.191892	-1.820263	-2.278561
H	15.594325	-3.613035	-3.986875
H	15.435905	-2.390846	-5.307089
H	17.385219	-1.121934	-4.366825
H	17.543459	-2.343471	-3.045806
H	17.952265	-4.138948	-4.755989
H	17.793942	-2.918829	-6.075898
H	19.752926	-1.660616	-5.153099
H	19.911902	-2.885895	-3.827459
H	20.176732	-3.370084	-5.545356
H	-0.970935	1.428520	0.073593
H	-0.504378	-1.070528	0.185785
H	-1.391757	-1.092794	1.746540
H	-3.427775	-0.244237	0.591993
H	-2.506414	-0.093292	-0.952206
H	-2.089131	-2.562633	-0.938397
H	-2.988720	-2.708504	0.620798
H	-5.054949	-1.816834	-0.488635
H	-4.154156	-1.668052	-2.046870
H	-3.727451	-4.141092	-2.035159
H	-4.630130	-4.288872	-0.477846
H	-6.694377	-3.395498	-1.589715
H	-5.791398	-3.247216	-3.146786
H	-5.365425	-5.720441	-3.134146
H	-6.271235	-5.867787	-1.578621
H	-8.332932	-4.973781	-2.694507
H	-7.426915	-4.825648	-4.249822
H	-7.001634	-7.298978	-4.236594
H	-7.910302	-7.446192	-2.682729
H	-9.969703	-6.551406	-3.802516

H	-9.060780	-6.404175	-5.356217
H	-8.636908	-8.877391	-5.342144
H	-9.547132	-9.024212	-3.789154
H	-11.605212	-8.129013	-4.911021
H	-10.694816	-7.982389	-6.463912
H	-10.271824	-10.455784	-6.448995
H	-11.183355	-10.601962	-4.896696
H	-13.240392	-9.706519	-6.020535
H	-12.328639	-9.560835	-7.572865
H	-11.911658	-12.039351	-7.559249
H	-12.823178	-12.184621	-6.008772
H	-14.245840	-12.788138	-7.951543
H	-14.883434	-11.311449	-7.133839
H	-13.967929	-11.165850	-8.690935
H	-2.535746	0.787861	2.516754
H	-1.421346	2.062201	2.920707
H	-2.211746	3.489356	1.077675
H	-3.270990	2.168425	0.462285
H	-4.551051	2.193993	2.612400
H	-3.473869	3.500495	3.241915
H	-4.193947	4.998360	1.362092
H	-5.271216	3.691838	0.733993
H	-6.554300	3.712755	2.889152
H	-5.475445	5.016846	3.519593
H	-6.192302	6.518026	1.641506
H	-7.271616	5.214254	1.011328
H	-8.554952	5.234257	3.166805
H	-7.475044	6.537015	3.798057
H	-8.190571	8.039838	1.920640
H	-9.270783	6.737207	1.289667
H	-10.554292	6.756992	3.445162
H	-9.473642	8.058851	4.077013
H	-10.188480	9.563196	2.200624
H	-11.269196	8.261353	1.568553
H	-12.558510	8.285243	3.725420
H	-11.478535	9.585212	4.357620
H	-13.604056	10.523723	3.483413
H	-12.205264	11.098337	2.499045
H	-13.289767	9.792821	1.863915
H	0.351232	3.118959	2.458493
H	2.007360	2.820365	2.013115
H	1.492691	3.223195	-0.413369

H	-0.229972	3.484397	-0.012052
H	0.394598	5.380177	1.491428
H	2.133303	5.125905	1.072555
H	1.613732	5.555508	-1.343204
H	-0.126141	5.802838	-0.926062
H	0.504136	7.722342	0.562221
H	2.243181	7.477140	0.140658
H	1.718050	7.905314	-2.274882
H	-0.021361	8.148524	-1.853958
H	0.607347	10.069566	-0.367149
H	2.346451	9.827007	-0.789730
H	1.819094	10.254459	-3.205150
H	0.079921	10.496516	-2.782641
H	0.708617	12.417917	-1.296363
H	2.447635	12.176128	-1.719695
H	1.919327	12.603985	-4.134831
H	0.180113	12.845439	-3.711643
H	0.809737	14.773871	-2.228061
H	2.547244	14.532727	-2.651007
H	1.534889	16.354939	-3.999215
H	2.027117	14.980502	-5.059586
H	0.282143	15.222549	-4.634892

15-(2,4,4,6,6-Pentametilheptan-2-il)-16-tetradecil-16-tridesilhentriakontan (C₇₀H₁₄₂)

C	-2.538142	-1.969358	-3.922999
C	-2.984545	-2.209968	-2.469157
C	-4.434819	-1.672916	-2.306377
C	-3.082582	-3.777456	-2.121467
C	-3.619122	-4.951814	-3.057480
C	-3.810597	-6.199820	-2.091946
C	-3.898389	-7.701953	-2.566528
C	-2.522046	-8.257537	-3.009323
C	-4.343233	-8.534774	-1.337232
C	-4.939809	-7.940755	-3.676754
C	-4.975566	-4.616937	-3.717036
C	-2.580587	-5.266702	-4.157351
C	-1.968698	-1.453159	-1.428696
C	-0.644023	-2.288946	-1.205908
C	-0.631848	-3.056650	0.131428
C	0.529838	-4.054981	0.185273

C	0.544195	-4.810970	1.518624
C	1.700379	-5.816381	1.568641
C	1.713016	-6.574177	2.901357
C	2.869493	-7.579475	2.952421
C	2.882088	-8.336583	4.285623
C	4.039738	-9.340519	4.338066
C	4.052567	-10.096779	5.671782
C	5.210804	-11.100053	5.725000
C	5.224152	-11.855454	7.059148
C	6.382753	-12.857808	7.112044
C	6.399846	-13.611204	8.438874
C	-1.557370	0.124442	-1.562552
C	-0.943903	0.569748	-0.160653
C	-0.665132	2.083131	0.068481
C	0.630528	2.311467	0.861345
C	0.887792	3.806082	1.086476
C	2.190370	4.027856	1.863946
C	2.452867	5.522095	2.084807
C	3.758262	5.742693	2.858170
C	4.022838	7.236819	3.077979
C	5.329336	7.456662	3.849770
C	5.594839	8.950707	4.069267
C	6.901868	9.170197	4.840278
C	7.167455	10.664204	5.060204
C	8.474682	10.883590	5.830800
C	8.739364	12.377393	6.050782
C	10.039715	12.599850	6.817588
C	-0.518553	0.305401	-2.764539
C	0.904825	0.836036	-2.471217
C	1.814916	0.684173	-3.698858
C	3.212417	1.252421	-3.421875
C	4.121945	1.100617	-4.646540
C	5.517525	1.671755	-4.369173
C	6.427164	1.522890	-5.594368
C	7.821942	2.096252	-5.317344
C	8.731452	1.948891	-6.542888
C	10.125735	2.523708	-6.266193
C	11.035068	2.377413	-7.491952
C	12.428652	2.952702	-7.214654
C	13.336668	2.809386	-8.432579
C	-2.771640	1.078461	-1.861590
C	-3.859745	1.177865	-0.765739

C	-5.098449	1.926183	-1.277081
C	-6.184218	1.996969	-0.196784
C	-7.420877	2.745842	-0.706915
C	-8.506979	2.814650	0.373056
C	-9.744717	3.561705	-0.137544
C	-10.830828	3.630557	0.942505
C	-12.068897	4.377044	0.431770
C	-13.155090	4.445690	1.511787
C	-14.393376	5.191792	1.000924
C	-15.479625	5.260310	2.080803
C	-16.717364	6.006134	1.569284
C	-17.800912	6.076398	2.641366
H	-2.494813	-0.889215	-4.153805
H	-1.541540	-2.417025	-4.111644
H	-3.260885	-2.374402	-4.651705
H	-5.167957	-2.235313	-2.894525
H	-4.771966	-1.744467	-1.252076
H	-4.582836	-0.660211	-2.687044
H	-2.097281	-4.161748	-1.839444
H	-3.649298	-3.831496	-1.163939
H	-2.986402	-6.184957	-1.342881
H	-4.721018	-5.987050	-1.486536
H	-1.725628	-7.963308	-2.292641
H	-2.543999	-9.368101	-3.055274
H	-2.231402	-7.924683	-4.021770
H	-5.345415	-8.211591	-0.980398
H	-4.407325	-9.617257	-1.583561
H	-3.621548	-8.417398	-0.499512
H	-4.610326	-7.526834	-4.648624
H	-5.090595	-9.030072	-3.839965
H	-5.920703	-7.502748	-3.393294
H	-4.897397	-3.771257	-4.422075
H	-5.350826	-5.446596	-4.337147
H	-5.747548	-4.403168	-2.947767
H	-1.619917	-5.600454	-3.710708
H	-2.957230	-6.036252	-4.854577
H	-2.370854	-4.402538	-4.804559
H	-2.525197	-1.508305	-0.468044
H	-0.431817	-2.953012	-2.068106
H	0.267892	-1.669625	-1.210236
H	-0.529602	-2.326190	0.963520
H	-1.587157	-3.600890	0.284608

H	0.424332	-4.784313	-0.648273
H	1.490723	-3.508768	0.059386
H	0.652449	-4.083042	2.352866
H	-0.419355	-5.352770	1.644414
H	1.592138	-6.543209	0.733361
H	2.664176	-5.274994	1.443819
H	1.820407	-5.847292	3.736650
H	0.749212	-7.115729	3.025626
H	2.761932	-8.306678	2.117432
H	3.833254	-7.037968	2.827803
H	2.988106	-7.609165	5.120627
H	1.918813	-8.879119	4.409559
H	3.933526	-10.068359	3.503466
H	5.002935	-8.797955	4.213644
H	4.158047	-9.368749	6.506319
H	3.089601	-10.639811	5.795935
H	5.105016	-11.828559	4.890913
H	6.173735	-10.557092	5.600206
H	5.329683	-11.127087	7.893418
H	4.261570	-12.399079	7.183917
H	6.281644	-13.592004	6.283135
H	7.348969	-12.320990	6.991163
H	6.525559	-12.901392	9.284128
H	5.453911	-14.178031	8.573033
H	7.247712	-14.328144	8.448314
H	-1.634111	0.252437	0.650957
H	-0.022697	0.004284	0.065864
H	-0.612453	2.650667	-0.877373
H	-1.496569	2.529631	0.651805
H	0.552269	1.797296	1.844721
H	1.488157	1.876142	0.303836
H	0.956136	4.319440	0.101850
H	0.038878	4.244368	1.656264
H	2.121996	3.516472	2.849532
H	3.037981	3.586212	1.294504
H	2.518520	6.033618	1.099085
H	1.606994	5.963598	2.656774
H	3.692359	5.231867	3.844226
H	4.603645	5.299866	2.286448
H	4.087731	7.747808	2.091941
H	3.178172	7.679555	3.650782
H	5.264319	6.945914	4.835931

H	6.173807	7.013378	3.277074
H	5.659348	9.461572	3.083141
H	4.750723	9.393903	4.642528
H	6.837511	8.659059	5.826281
H	7.745946	8.727138	4.266837
H	7.231586	11.175443	4.074228
H	6.323548	11.107207	5.633955
H	8.410902	10.372332	6.816808
H	9.318847	10.441150	5.256953
H	8.808129	12.894713	5.068940
H	7.901000	12.825939	6.627247
H	10.898689	12.182708	6.249921
H	10.204602	13.688418	6.961853
H	9.987699	12.113293	7.814908
H	-0.367564	-0.663032	-3.272539
H	-0.943311	0.961000	-3.556694
H	0.867292	1.913378	-2.226735
H	1.373985	0.283825	-1.633766
H	1.904530	-0.393208	-3.961477
H	1.363316	1.222137	-4.561593
H	3.126262	2.330105	-3.159484
H	3.663957	0.714208	-2.559265
H	4.210570	0.022875	-4.907667
H	3.669495	1.637601	-5.509392
H	5.428371	2.749021	-4.106133
H	5.970457	1.133736	-3.507199
H	6.517662	0.445560	-5.856580
H	5.973479	2.059779	-6.456642
H	7.731145	3.173347	-5.054220
H	8.276008	1.558875	-4.455573
H	8.823110	0.871745	-6.805477
H	8.276872	2.485515	-7.404859
H	10.033940	3.600693	-6.002933
H	10.580615	1.986689	-5.404618
H	11.127479	1.300464	-7.755199
H	10.580370	2.914388	-8.353681
H	12.344504	4.030361	-6.954000
H	12.891262	2.417882	-6.356563
H	14.336709	3.233647	-8.202600
H	13.458262	1.737883	-8.699364
H	12.909202	3.357320	-9.299255
H	-2.398224	2.110603	-2.022505

H	-3.202839	0.850623	-2.850446
H	-4.148599	0.181872	-0.391001
H	-3.472397	1.734169	0.107764
H	-4.804465	2.957533	-1.572633
H	-5.509277	1.412142	-2.172098
H	-6.475656	0.964718	0.098636
H	-5.780043	2.520249	0.697855
H	-7.129822	3.778081	-1.002433
H	-7.824652	2.222357	-1.601653
H	-8.796832	1.782293	0.669437
H	-8.103619	3.339147	1.267371
H	-9.454927	4.594016	-0.434097
H	-10.148041	3.037020	-1.031769
H	-11.120291	2.598227	1.239327
H	-10.427629	4.155566	1.836589
H	-11.779506	5.409426	0.135062
H	-12.472007	3.852078	-0.462388
H	-13.444259	3.413297	1.808692
H	-12.752074	4.970896	2.405845
H	-14.104281	6.224233	0.704102
H	-14.796355	4.666622	0.106821
H	-15.768991	4.227960	2.377758
H	-15.077044	5.785789	2.974925
H	-16.436466	7.040634	1.273885
H	-17.127708	5.484299	0.677281
H	-18.682950	6.620904	2.243251
H	-18.118487	5.053649	2.936695
H	-17.424191	6.616547	3.536023