



DFT STUDY OF ELECTRONIC PROPERTIES, SPECTROSCOPIC ANALYSIS, AND THERMODYNAMIC PARAMETERS OF CLEOMIN

Dipak Thapa^{1§}, Krishna Bahadur Rai^{1,2,*§}, Tulsi Ojha¹, Madhav Prasad Ghimire^{2*}

¹Department of Physics, Patan Multiple Campus, Lalitpur, Tribhuvan University, Nepal

²Central Department of Physics, Tribhuvan University, Nepal

*Correspondence: krishna.raai@pmc.tu.edu.np; madhav.ghimire@cdp.tu.edu.np

§These authors contributed equally

(Received: February 18, 2026; Revised: March 30, 2026; Accepted: May 12, 2026)

SUPPLEMENTARY

Table S1. Second Order Perturbation Theory Analysis of Fock Matrix in NBO Basis for Cleomin molecule using B3LYP/6-311++G(d,p) level calculation. The interactions involve donor orbitals such as σ , π , lone pair (LP), core orbital (CR) and acceptor orbitals such as σ^* , π^* , and Ry* (Rydberg)

Donor (i)	Type of bond	Acceptor (j)	Type of bond	E(2)(kcal/mol)	E(j) – E(i) (a.u)	F (i, j) (a.u)
S1-C9	σ	O2	RY*	1.15	0.86	0.028
S1-C9	σ	N3	RY*	0.70	0.95	0.023
S1-C9	σ	N3	RY*	0.60	0.96	0.022
S1-C9	σ	S1-C9	σ^*	5.66	0.22	0.035
S1-C9	Π	O2	Π^*	1.29	1.31	0.037
S1-C9	Π	O2-C4	σ	2.68	0.97	0.046
S1-C9	Π	N3-C5	σ	2.38	1.08	0.045
S1-C9	Π	N3-C9	σ	0.95	1.15	0.030
O2-C4	σ	C9	RY*	2.35	1.66	0.056
O2-C4	σ	C9	RY*	0.71	2.68	0.039
O2-C4	σ	S1-C9	Π^*	4.11	1.14	0.061
O2-C4	σ	N3-C5	σ^*	0.84	1.18	0.028
O2-C4	σ	N3-C9	σ^*	0.75	1.25	0.028
O2-C4	σ	C5-H10	σ^*	0.67	1.20	0.025
O2-C4	σ	C6-12	σ^*	1.19	1.22	0.034
O2-C4	σ	C7-H16	σ^*	1.05	1.22	0.032
O2-C9	σ	C4	RY*	2.79	1.77	0.063
O2-C9	σ	C9	RY*	0.59	1.75	0.029
O2-C9	σ	N3-H17	σ^*	2.17	1.29	0.047
O2-C9	σ	C4-C6	σ^*	1.02	1.29	0.032
N3-C5	σ	C9	RY*	1.65	1.61	0.046
N3-C5	σ	C9	RY*	0.53	1.80	0.028
N3-C5	σ	S1-C9	Π^*	4.70	1.09	0.064
N3-C5	σ	O2-C4	σ^*	1.58	1.02	0.036
N3-C5	σ	O2-C9	σ^*	1.05	1.10	0.031
N3-C5	σ	N3-C9	σ^*	1.11	1.20	0.033
N3-C5	σ	C4-C6	σ^*	1.26	1.15	0.034
N3-C9	σ	C5	RY*	1.65	1.63	0.046
N3-C9	σ	S1-C9	Π^*	0.53	1.17	0.022
N3-C9	σ	C3-C5	σ^*	1.11	1.21	0.033
N3-C9	σ	N3-H17	σ^*	0.60	1.24	0.024
N3-C9	σ	C5-H10	σ^*	0.51	1.23	0.022
N3-H17	σ	C5	RY*(2)	0.84	1.41	0.031
N3-H17	σ	C9	RY*(1)	0.51	1.53	0.025

N3-H17	σ	C9	RY*(2)	0.85	1.79	0.035
N3-H17	σ	C9	RY*(3)	0.70	1.83	0.032
N3-H17	σ	O2-C9	σ^*	3.08	1.02	0.051
N3-H17	σ	N3-C9	σ^*	0.65	1.12	0.024
N3-H17	σ	C4-C5	σ^*	0.99	1.04	0.029
C4-C5	σ	C6	RY*(2)	1.07	1.34	0.034
C4-C5	σ	C7	RY*(2)	0.96	1.32	0.032
C4-C5	σ	S1-C9	Π^*	1.18	1.03	0.056
C4-C5	σ	N3-H17	σ^*	3.77	0.28	0.063
C4-C5	σ	C4-C6	σ^*	0.93	0.02	0.028
C4-C5	σ	C4-C7	σ^*	0.80	1.01	0.025
C4-C5	σ	C5-H10	σ^*	0.57	1.02	0.022
C4-C5	σ	C5-H11	σ^*	0.55	1.02	0.021
C4-C5	σ	C6-C8	σ^*	1.95	1.04	0.040
C4-C5	σ	C7-H15	σ^*	1.53	1.05	0.036
C4-C6	σ	C5	RY*(1)	0.50	1.44	0.024
C4-C6	σ	C5	RY*(2)	0.59	1.35	0.025
C4-C6	σ	C7	RY*(1)	1.02	1.31	0.033
C4-C6	σ	O2-C9	σ^*	1.59	0.96	0.035
C4-C6	σ	C4-C7	σ^*	1.08	1.00	0.029
C4-C6	σ	C7-H14	σ^*	1.50	1.03	0.035
C4-C6	σ	C8-H20	σ^*	1.1	1.04	0.031
C4-C7	σ	C5	RY*(1)	1.08	1.44	0.035
C4-C7	σ	C4-C6	σ^*	1.09	1.01	0.030
C5-H10	σ	N3	RY*(2)	0.54	1.22	0.023
C5-H10	σ	C4	RY*(3)	0.58	1.40	0.026
C5-H10	σ	N3-C9	σ^*	2.08	0.97	0.041
C5-H11	σ	N3-C9	σ^*	1.06	0.96	0.029
C5-H11	σ	C4-C7	σ^*	2.53	0.89	0.043
C6-C8	σ	C4	RY*(3)	0.64	1.48	0.028
C6-C8	σ	C4-C5	σ^*	2.84	0.97	0.047
C6-H12	σ	O2-C4	σ^*	5.07	0.75	0.056
C6-H12	σ	C8-H19	σ^*	2.74	0.92	0.045
C6-H13	σ	C4-C7	σ^*	3.95	0.86	0.052
C6-H13	σ	C8-H18	σ^*	2.99	0.90	0.470
C7-H14	σ	C4-C6	σ^*	3.47	0.88	0.050
C7-H15	σ	C4	RY*(3)	0.67	1.38	0.027
C7-H15	σ	C4-C5	σ^*	3.38	0.86	0.048
C7-H16	σ	C4	RY*(3)	0.80	1.38	0.030
C7-H16	σ	O2-C4	σ^*	4.81	0.76	0.055
C8-H18	σ	C6-H13	σ^*	2.46	0.89	0.042
C8-H19	σ	C6	RY*(1)	0.64	1.25	0.025
C8-H19	σ	C6-H12	σ^*	2.73	0.89	0.044
C8-H20	σ	C4-C6	σ^*	3.12	0.87	0.047
S1	CR(2)	C9	RY*(2)	1.70	9.91	0.116
S1	CR(2)	C9	RY*(3)	1.43	9.95	0.107
S1	CR(2)	C9	RY*(5)	0.99	10.60	0.092
S1	CR(2)	O2-C9	σ^*	1.48	9.15	0.106
S1	CR(2)	N3-C9	σ^*	2.21	9.24	0.130
O2	CR(1)	C4	RY*(1)	0.94	19.81	0.122
O2	CR(1)	C4	RY*(2)	1.31	19.97	0.145
O2	CR(1)	C9	RY*(1)	2.89	19.78	0.214
N3	CR(1)	C5	RY*(2)	1.19	14.91	0.119
N3	CR(1)	C5	RY*(3)	0.56	14.97	0.081

N3	CR(1)	C9	RY*(1)	2.74	15.03	0.182
N3	CR(1)	C9	RY*(2)	0.61	15.29	0.087
N3	CR(1)	C9	RY*(7)	0.53	15.21	0.080
N3	CR(1)	H17	RY*(2)	0.77	16.49	0.101
N3	CR(1)	S2-C9	Π^*	0.79	14.51	0.096
C4	CR (1)	C5	RY*(3)	0.63	10.91	0.074
C4	CR (1)	C6	RY*(3)	0.89	11.07	0.089
C4	CR (1)	C7	RY*(3)	0.69	10.93	0.078
C4	CR (1)	O2-C4	σ^*	1.01	10.37	0.093
C4	CR (1)	O2-C9	σ^*	0.93	10.46	0.090
C5	CR (1)	C4	RY*(1)	1.73	10.95	0.123
C5	CR (1)	N3-C9	σ^*	0.72	10.51	0.079
C6	CR (1)	C4	RY*(3)	0.89	10.90	0.088
C6	CR (1)	C8	RY*(3)	0.98	11.15	0.093
C6	CR (1)	H13	RY*(1)	0.51	10.99	0.067
C7	CR (1)	C4	RY*(3)	1.92	10.90	0.129
C7	CR (1)	H14	RY*(1)	0.55	10.84	0.069
C7	CR (1)	H15	RY*(1)	0.66	11.00	0.076
C8	CR (1)	C6	RY*(2)	0.57	10.72	0.070
C8	CR (1)	C6	RY*(4)	0.64	11.25	0.076
C8	CR (1)	H19	RY*(1)	0.71	11.04	0.079
C9	CR (1)	S1	RY*(4)	0.80	10.98	0.083
C9	CR (1)	O2-C4	σ^*	1.34	10.44	0.107
C9	CR (1)	N3-C5	σ^*	0.92	10.56	0.088
S1	LP(1)	C9	RY*(2)	2.77	1.78	0.063
S1	LP(1)	C9	RY*(3)	2.37	1.82	0.059
S1	LP(1)	C9	RY*(5)	0.56	2.47	0.033
S1	LP(1)	O2-C9	σ^*	2.72	1.01	0.048
S1	LP(1)	N3-C9	σ^*	4.89	1.11	0.067
S1	LP(2)	S1	RY*(2)	0.98	0.90	0.028
S1	LP(2)	C9	RY*(1)	2.62	1.02	0.048
S1	LP(2)	O2-C9	σ^*	17.54	0.51	0.086
S1	LP(2)	N3-C9	σ^*	11.85	0.61	0.077
O2	LP(1)	C4	RY*(1)	1.10	1.46	0.036
O2	LP(1)	C4	RY*(2)	2.60	1.62	0.058
O2	LP(1)	C9	RY*(1)	4.83	1.43	0.075
O2	LP(1)	C9	RY*(5)	0.58	2.37	0.033
O2	LP(1)	N3-C9	σ^*	4.31	1.02	0.060
O2	LP(1)	C4-C5	σ^*	2.90	0.94	0.047
O2	LP(2)	C4	RY*(4)	1.11	1.97	0.044
O2	LP(2)	C9	RY*(2)	0.81	1.43	0.032
O2	LP(2)	C9	RY*(3)	0.76	1.47	0.031
O2	LP(2)	C9	RY*(4)	2.00	1.88	0.057
O2	LP(2)	S1-C9	σ^*	43.67	0.27	0.103
O2	LP(2)	C4-C6	σ^*	2.63	0.71	0.040
O2	LP(2)	C4-C7	σ^*	5.33	0.69	0.056
O2	LP(2)	C7-H16	σ^*	0.74	0.72	0.022
N3	LP(1)	C5	RY*(1)	0.88	1.08	0.030
N3	LP(1)	C5	RY*(4)	0.92	1.81	0.039
N3	LP(1)	C9	RY*(2)	0.98	1.37	0.035
N3	LP(1)	C9	RY*(3)	1.35	1.41	0.042
N3	LP(1)	C9	RY*(4)	1.12	1.82	0.044
N3	LP(1)	H17	RY*(1)	0.89	1.87	0.039
N3	LP(1)	S1-C9	σ^*	68.90	0.22	0.113

N3	LP(1)	C5-H10	σ^*	4.40	0.65	0.051
N3	LP(1)	C5-H11	σ^*	6.89	0.65	0.064
S1-C9	σ^*	S1	RY*(1)	4.12	0.61	0.097
S1-C9	σ^*	S1	RY*(7)	0.53	0.44	0.030
S1-C9	σ^*	C9	RY*(2)	0.63	1.16	0.052
S1-C9	σ^*	C9	RY*(3)	0.67	1.20	0.055

E(2) represents the energy of the hyper-conjugative interaction.

E(j)-E(i) is the energy difference between donor(i) and acceptor(j).

F(i,j) is the Fock matrix element between i and j.