

Termičke transformacije novih aromatskih derivata stilbena i kvantno-kemijska studija mehanizma reakcije

Meixner, Jan

Undergraduate thesis / Završni rad

2024

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Zagreb, Faculty of Chemical Engineering and Technology / Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:149:903433>

Rights / Prava: [In copyright](#) / [Zaštićeno autorskim pravom](#).

Download date / Datum preuzimanja: **2025-02-23**



FKITMCMXIX

Repository / Repozitorij:

[Repository of Faculty of Chemical Engineering and Technology University of Zagreb](#)



SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET KEMIJSKOG INŽENJERSTVA I TEHNOLOGIJE
SVEUČILIŠNI PREDDIPLOMSKI STUDIJ

Jan Meixner

ZAVRŠNI RAD

Zagreb, rujan 2024.

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET KEMIJSKOG INŽENJERSTVA I TEHNOLOGIJE
POVJERENSTVO ZA ZAVRŠNE ISPITE

Kandidat Jan Meixner

Predao je izrađen završni rad dana: 17. rujna 2024.

Povjerenstvo u sastavu:

doc. dr. sc. Dragana Vuk, Sveučilište u Zagrebu Fakultet
kemijskog inženjerstva i tehnologije

prof. dr. sc. Irena Škorić, Sveučilište u Zagrebu Fakultet
kemijskog inženjerstva i tehnologije

dr. sc. Ines Despotović, viša znanstvena suradnica,
Institut Ruđer Bošković, Zagreb

prof. dr. sc. Danijela Ašperger, Sveučilište u Zagrebu
Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije (zamjena)

povoljno je ocijenilo završni rad i odobrilo obranu završnog
rada pred povjerenstvom u istom sastavu.

Završni ispit održat će se dana: 20. rujna 2024.

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET KEMIJSKOG INŽENJERSTVA I TEHNOLOGIJE
SVEUČILIŠNI PREDDIPLOMSKI STUDIJ

Jan Meixner

**TERMIČKE TRANSFORMACIJE NOVIH AROMATSKIH DERIVATA STILBENA I
KVANTNO-KEMIJSKA STUDIJA MEHANIZMA REAKCIJE**

ZAVRŠNI RAD

Mentor: doc. dr. sc. Dragana Vuk, FKIT

Komentor: dr. sc. Ines Despotović, viši znanstveni suradnik, IRB

Članovi ispitnog povjerenstva:

1. doc. dr. sc. Dragana Vuk
2. dr. sc. Ines Despotović, viši znanstveni suradnik
3. prof. dr. sc. Irena Škorić

Zagreb, rujan 2024.

SAŽETAK:

Cilj ovog rada bio je prirediti nove heterocikličke stilbenske sustave koji će se podvrgnuti termičkim ispitivanjima u kiselom mediju u pokušaju sinteze indanskih i indenskih (metilnih, piridinskih, fenilnih i tiofenskih) derivata stilbena. Upotrebom kvantno-kemijskih računalnih metoda predviđen je ishod razmatranih kemijskih reakcija.

Ključne riječi: heterociklički stilbeni sustavi, indanski i indenski derivati, kvantno-kemijske računalne metode.

ABSTRACT:

The aim of this was to prepare new heterocyclic stilbene systems that will be subjected to the thermal tests in acidic medium in an attempt to synthesize indane and indene (methyl, pyridine, phenyl and thiophene) stilbene derivatives. The outcome of the considered chemical reactions was predicted using quantum-chemical computer methods.

Key words: heterocyclic stilbene systems, indane and indene derivatives, quantum-chemical computational methods.

SADRŽAJ

1. UVOD	1
2. OPĆI DIO	2
2.1. Razvoj kvantne mehanike	2
2.2. Povijesni pregled i začetak računalne kemije	3
2.3. Metode, alati i tehnike u računalnoj kemiji	6
2.3.1. Metode računalne kemije	6
2.3.2. Uvod u geometrijsku optimizaciju	7
2.3.3. Izračuni frekvencija i slobodna energija.....	8
2.3.4. Teorija funkcionala gustoće (DFT).....	9
3. REZULTATI I RASPRAVA	12
3.1. Uvod	12
3.2. Protoniranje i zaključci o istraživanim spojevima	16
4. EKSPERIMENTALNI DIO	22
4.1. Opće napomene	22
4.2. Kartezijeve koordinate	22
5. ZAKLJUČAK	60
6. LITERATURA	61

1. UVOD

Računalna kemija je grana kemije koja se bavi primjenom računala i računalnih metoda u kemiji. Računalne metode omogućuju izračun i predviđanje gotovo svih kemijskih i fizikalnih svojstava molekula te njihove interakcije, dajući dublji uvid u prirodu kemijskog procesa te objašnjenje dobivenih eksperimentalnih podataka.^[1] Tako je, primjerice, moguće dobiti informaciju o geometriji istraživane molekule te njezinom najpovoljnijem konformeru. Uz geometriju molekule jedan od najvažnijih podataka je i energija molekule. Energija molekule pokazatelj je stabilnosti molekule, termodinamike reakcije te brzine reakcije.^[2] Raspodjela elektronske gustoće daje uvid u nukleofilna mjesta (povećana elektronska gustoća) i elektrofilna mjesta (smanjena elektronska gustoća) molekule ukazujući na optimalan položaj za „napad“ supstrata, što se u zadnje vrijeme uvelike koristi za interakcije supstrata s enzimom, gdje uvid u pristajanje određenog lijeka na aktivno mjesto enzima daje dobru osnovu za dizajn lijekova. Mogu se izračunati i neka druga fizička svojstva tvari kao što su čvrstoća i talište nekih polimera, kao što je plastika. Često se koristi i u istraživanju svojstava čvrstih tvari u mehanici materijala.^[1,3,4]

Zahvaljujući naglom razvoju informacijskih tehnologija tijekom posljednjih nekoliko desetljeća, računalna kemija postaje ravnopravan i nužan suradnik eksperimentalnim istraživanjima. Vrijeme potrebno za sintezu i ispitivanje na različitim spojevima nekoliko je puta kraće od onoga korištenjem klasičnih eksperimentalnih metoda. Također, u slučaju računskih metoda eksperimentiranja izbjegava se izloženost štetnom utjecaju kemikalija. Na kraju, po svojoj točnosti, rezultati računskih simulacija usporedivi su s onima iz najsuvremenijih eksperimenata te se danas naveliko koriste kao nadopuna, usmjeravanje te vrlo često kao potpuna zamjena eksperimentalnih istraživanja, posebice onih financijski zahtjevnih i ekološki neprimjerenih.^[5]

2. OPĆI DIO

2.1. Razvoj kvantne mehanike

Kvantna mehanika proučava gibanje elektrona i ostalih elementarnih čestica u atomima, molekulama i kristalima, te atomskim jezgrama. Kvant energije prema Maxu Plancku označava najmanju količinu energije koju neki sustav može apsorbirati ili emitirati.^[6] U skladu s postavkama kvantne mehanike, energija kao i mnoga druga svojstva stacionarnog stanja molekule mogu se izračunati rješavanjem nerelativističke, vremenski neovisne, Schrödingerove jednačbe:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (1)$$

U jednačbi (1), \hat{H} predstavlja Hamiltonov operator, E predstavlja numeričku vrijednost energije dotičnog stanja, dok Ψ predstavlja valnu funkciju koja ovisi o koordinatama svih čestica, kao i njihovom spinu. Kvadrat valne funkcije predstavlja gustoću vjerojatnosti raspodjele čestica u molekuli.^[7]

U drugoj polovici devetnaestog stoljeća napredovala je ideja o proučavanju raspodjele energije u ovisnosti o valnoj duljini koja karakterizira zračenje crnog tijela, odnosno onog koje savršeno apsorbira zračenje, najviše od strane njemačkog fizičara Otta Lummera i njemačkog matematičara Alfreda Pringsheima.^[8] Pokušaj da se teorijski objasni spektar zračenja crnog tijela uz pretpostavku da crno tijelo zrači energiju kontinuirano, doveo je znanstvenike do rezultata koji su bili u suprotnosti s eksperimentom. Max Planck je 1900. godine formulirao matematički odnos kojim je objasnio raspodjelu zračenja crnog tijela koje je u potpunosti odgovaralo eksperimentalnim rezultatima. Planck je pretpostavio da su izvori zračenja crnog tijela atomi u stanju oscilacija, te da vibracijska energija svakog oscilatora može poprimiti samo određene diskretne vrijednosti, $E = hv$, što je kvant energije. Konstanta h ($h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ Js) nazvana je Plackovovom konstantom i jedna od najvažnijih prirodnih konstanti. Prema Max Planckovoj teoriji kvanta energije, atom ne može emitirati odnosno apsorbirati bilo koju količinu energije, već samo točno određeni kvant energije ili višekratnike tog kvanta.^[5]

Osim zračenja crnog tijela, važnu ulogu u razvoju kvantne mehanike odigrao je fotoelektrični efekt. Fotoelektrični efekt je pojava izbijanja elektrona iz materijala uslijed

djelovanja elektromagnetskog zračenja. Prvi nagovještaj ovog fenomena dao je Heinrich Rudolf Hertz, a prvi ga je sustavno proučavao Phillip Lenard. Činjenice koje klasična fizika nije mogla objasniti su postojanje granične frekvencije za izbacivanje elektrona, povezanost kinetičke energije elektrona s frekvencijom svjetlosti i činjenicom da je tok elektrona proporcionalan intenzitetu svjetlosti. Njemački fizičar Albert Einstein 1905. godine dao je teorijsko objašnjenje fotoelektričnog efekta. Problem neslaganja rezultata pokusa i tadašnje teorije riješio je poopćavanjem Planckove hipoteze o emisiji i apsorpciji svjetlosti u kvantima energije. Prema Einsteinovom tumačenju svjetlost je shvaćena kao čestica, poslije nazvana foton, koja ima energiju ovisnu o frekvenciji $E = h\nu$. Kada slobodni elektron na površini metala apsorbira foton, preuzima njegovu energiju. Dio te energije troši na izlazni rad iz metala, dok mu preostali dio ostaje kao kinetička energija.

Planckovo objašnjenje zračenja crnog tijela i Einsteinovo objašnjenje fotoelektričnog učinka predstavljale su dvije glavne prekretnice za razvoj kvantne mehanike i prelazak iz vremena klasične u vrijeme moderne fizike.^[5] Danski fizičar Niels Bohr primjenio je Planckovu kvantnu teoriju na Ruthefordov model atoma (planetarni model atoma) te utvrdio da se elektroni u atomu nalaze u fiksnim orbitalama iz kojih ne emitiraju energiju, kasnije nazvanim stacionarnim stanjima. Elektron zrači i apsorbira energiju, koja je jednaka kvantu energije, samo pri prijelazu s jedne putanje na neku drugu, tj. pri prijelazu iz jednog stacionarnog u drugo stacionarno stanje energije.^[8]

2.2. Povijesni pregled i začetak računalne kemije

U prvoj polovici 20. stoljeća kvantni principi mogli su se rigorozno primijeniti samo na jednostavne atome i molekule, poput H, He, H₂ i H₂⁺. Tijekom godina koje su prethodile početku Drugog svjetskog rata razvijene su prve kvantno mehaničke metode za molekule, na temelju kojih je postignuto nekoliko uspjeha u modeliranju njihovog elektronskog sustava. Njemački fizičar i fizikalni kemičar Eric Hückel dao je model molekulskih orbitala kojim se opisuje ponašanje elektrona u organskim polimerima. Svemu je potpomoglo otkriće i razvoj prvih digitalnih računala, osobito početkom 1940.-ih godina, koja su se nakon Drugog svjetskog rata počela intenzivno koristiti za rješavanje kemijskih problema. Mjera napretka računalne organske kemije bila je dodjela Nobelove nagrade za kemiju 1966. godine Robertu Mullikenu za njegov razvoj molekularno orbitalne teorije i njene primjene u proračunu elektroničke strukture molekula. Nadalje, treba istaknuti dodjelu Nobelove nagrade za kemiju 1988. godine Walteru Kohnu i Johnu Popleu. Walter Kohn razvio je teoriju funkcionala

gustoće, dok je John Pople razvio upotrebu računalnih metoda u kvantnoj kemiji. Njihova istraživanja pružila su dodatno uvjerenje u računalnu kemiju kao zrelu i korisnu granu kemije u razvoju. Prakticiranje teorijske organske kemije započelo je s Hückelovom teorijom molekularskih orbitala, koja se bavi primjenom kvantne mehanike na konjugirane π -sustave.^[5] U okviru navedene teorije molekularske orbitale računaju se kao linearne kombinacije atomskih orbitala. S ovim početkom, organski kemičari, a posebno fizikalni organski kemičari, počeli su koristiti kvantnu mehaniku za racionalizaciju i procjenu organskih struktura, svojstava i reakcija. Jedna od najdosljednijih primjena kvantne teorije na organsku kemiju dolazi iz koncepta očuvanja orbitalne simetrije, što je još poznato kao Woodward-Hoffmannova pravila. Ta pravila proširuju Hückelovu teoriju i objašnjavaju razlike u reaktivnosti kod reaktanata, s obzirom kako neki od njih u reakcijama stvaranja ili kidanja prstenaste strukture reagiraju lako dok drugi uopće ne reagiraju. Osim toga, njihovim su pravilima objašnjene i razlike između termičkih i fotokemijskih reakcija. Temelji su tih pravila simetrijska svojstva reaktanata, koja se očitavaju u strukturi molekula i njihovih molekularskih orbitala u kojima se tijekom reakcije događaju najveće promjene.^[6] Osim Hückelove teorije, vrlo je važno spomenuti i razumijeti koncept Hartree-Fockove metode. D.R. Hartree 1928. godine donosi rad o metodi temeljenoj na iterativnom samousklađenom polju (SCF, engl., „Self-consistent field“), korištenoj za procjenu valnih funkcija i energija atoma. V. A. Fock proširuje ovu metodu uključujući efekte elektronske razmjene preko Slaterovih determinanti. Pet pretpostavi u Hartree-Fockovoj metodi su Born-Oppenheimerova aproksimacija, zanemarivanje relativističkih utjecaja, činjenica da se rješenje može dobiti iz linearnih kombinacija baznih funkcija, činjenica da se svojstvena energetska funkcija može opisati jednom Slaterovom determinantom te aproksimacija srednjeg polja pomoću koje se sve intramolekulske interakcije opisuju prosječnom interakcijom. Energije dobivene ovom metodom generalno pokazuju veće vrijednosti od stvarnih energija struktura. Glavni nedostatak Hartree-Fockove metode je taj da ne tretira pravilno korelaciju elektrona. HF metoda pretpostavlja da se elektron giba u elektrostatičkom polju predstavljenim prosječnim položajem drugih elektrona, dok se u stvarnosti elektroni međusobno izbjegavaju bolje od onoga predviđenog modelom.^[3,7]

Povijest razvoja računalne organske kemije najčešće se dijeli na tri razdoblja. Prvo razdoblje uključuje uspostavljanje računalne kemije kao legitimne znanstvene discipline, a traje od 1930.-ih do 1970.-ih godina. Drugi period traje 20-ak godina, otprilike od 1970.-ih do 1990.-ih, kada se računalna kemija promiče u vrlo koristan alat za proučavanje, razumijevanje

i predviđanje u organskoj kemiji. Zadnje, odnosno treće razdoblje, traje od 1990.-ih do danas gdje računalna organska kemija postaje pristupačna znatno većem broju ljudi. Krajem 1950.-ih Roothaan usavršava proces za rješavanje Hartree-Fockove valne funkcije za različite organske strukture, no spora i poprilično skupa računala, uz malo memorije dovode do problema realizacije proračuna. 1960.-ih, Longuet-Higgins daje snažan doprinos računalnoj kemiji proučavajući molekulu metilena.^[1,5] Prvi veliki uspjeh računalne kemije započinje 1970.-ih, kada su Bender i Schaefer primijenili metodu konfiguracijske interakcije (CI) za opis korelacije elektrona. Nakon provođenja CISD proračuna (CISD je CI metoda ograničena na jednostruku i dvostruku pobudu), Bender i Schaefer zaključuju kako je triplet metilena savijena molekula s H-C-H kutem od $135,1^\circ$, što je bilo u suprotnosti s dotadašnjim tvrdnjama da je triplet metilena linearna molekula.^[9] Naknadna eksperimentalna istaživanja potvrdila su računalne proračune. Ovime je računalna kemija ostvarila svoj prvi veliki uspjeh.^[6] 1972. godine dvije različite teorijske studije na metilenu potvrdile su kako triplet metilena leži oko 11 kcal mol^{-1} ispod singletnog stanja. Međutim, Liebergerov fotoelektronski spektroskopski eksperiment pokazao je kako je razlika između ta dva stanja mnogo veća i kako iznosi oko 20 kcal mol^{-1} . 1980.-ih, laserskom magnetskom rezonancijom u infracrvenom području pokazalo se kako ta energetska razlika zapravo iznosi 9 kcal mol^{-1} . Nakon ovog otkrića, Lieberger ponavlja svoj spektroskopski eksperiment na temelju čijih se rezultata uviđa kako se energetska razlika između singletnog i tripletnog stanja slagala s računskim proračunima. Na taj je način računalna organska kemija iskorištena za ispravljanje dviju velikih eksperimentalnih pogrešaka. Dalje, u razdoblju od 1970.-ih do 1990.-ih, dolazi do nove faze razvoja računalne kemije zahvaljujući snažnom razvoju računala, te intenzivnom razvoju računalnih programskih paketa. Zadnje razdoblje je ono od 1990.-ih pa do danas, u kojem je računalna kemija naširoko dostupna i poznata svima u zajednici organskih kemičara i njihovih skupina. Danas su u intenzivnoj primjeni Gaussian i GAMESS programski paketi. Uz naveliko korištene Gaussian i GAMESS programske pakete, pojavili su se i razni drugi softverski programi poboljšanih performansi kao što su MOLCAS, Q-CHEM i Jaguar, zajedno s programima otvorenog koda kao što su Psi4 i Orca. Odabir odgovarajuće kvantno mehaničke metode i dalje ostaje izazov. U četiri desetljeća koja su uslijedila nakon Benderovog i Schaeferovog temeljnog rada na metilenu, računalna organska kemija izrasla je u cijenjenu znanstvenu disciplinu koja se najviše koristi u potkrijepljivanju eksperimentalnih rezultata ili tumačenju određenih svojstava ili reakcija.^[4]

2.3. Metode, alati i tehnike u računalnoj kemiji

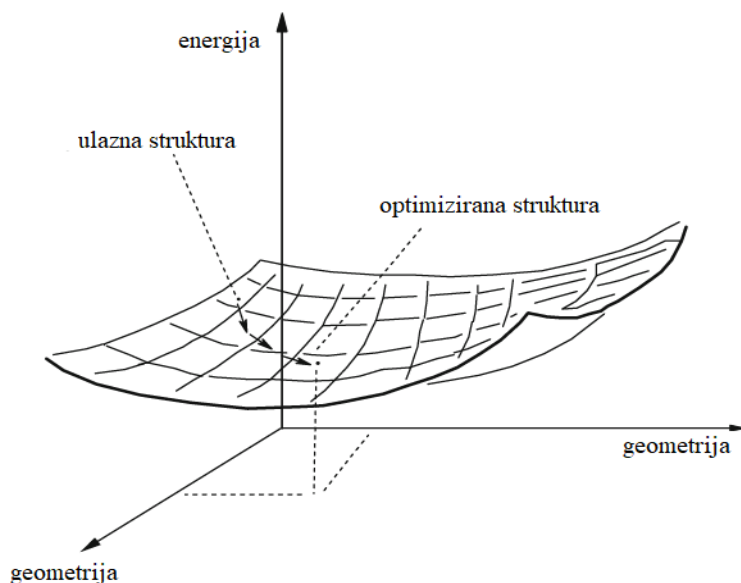
2.3.1. Metode računalne kemije

Metode računalne kemije mogu se podijeliti u pet glavnih skupina: molekularnu mehaniku, *ab initio* proračune, poluempirijske izračune, teoriju funkcionala gustoće i molekularnu dinamiku. Molekularna mehanika strukture molekula prikazuje kao loptice koje su međusobno povezane s oprugama, gdje su loptice atomi a opruge kemijske veze između tih atoma. Jednadžbe i parametri koji definiraju energiju sustava nazivaju se polje sila. Polje sila uključuje nekoliko članova od kojih se najčešće koriste oni koji opisuju energiju istezanja veza u molekuli (EI), savijanja kuteva (ES), torzije (ET), van der Waalove interakcije (EVDW) i elektrostatske interakcije (EES). *Ab-initio* proračuni temeljeni su na rješavanju Schrödingerove jednadžbe. Oslanjaju se na zakone kvantne mehanike koristeći osnovne fizikalne konstante poput Planckove konstante, brzine svjetlosti te mase i naboja elektrona i jezgri, pri tome ne koristeći eksperimentalne parametre u svojim izračunima. Rješavanjem Schrödingerove jednadžbe za molekulu dobivaju se svojstvene energije stacionarnih stanja molekule i pripadajuće valne funkcije. Valna funkcija je od važnosti zato što se pomoću nje može izračunati distribucija elektrona, koja pak daje informaciju o polarnosti molekule i nekim drugim fizičkim svojstvima. Njihov nedostatak je to što su relativno spori, pogotovo za velike molekule kao što su polimeri.^[5] Za razliku od *ab-initio* metoda, poluempirijski izračuni (npr. AM1, PM3, MINDO) koriste parametre izvedene iz eksperimentalnih podataka. Poluempirijski proračuni sporiji su od molekularne mehanike, ali ipak puno brži od *ab-initio* izračuna.^[1] Još jedna od metoda je teorija funkcionala gustoće (DFT, engl. „Density Functional Theory“). Izračuni funkcije gustoće su u usporedbi s *ab-initio* ili poluempirijskim metodama relativno novi (početak 1980-ih godina). Također, ova teorija je brža od *ab-initio* proračuna, ali ipak sporija od poluempirijskih metoda.^[5] Molekularna dinamika bavi se primjenom zakona gibanja na različite molekule. Na taj je način primjerice moguće simulirati kretanje supstrata i mijenjanje oblika aktivnog mjesta enzima prilikom vezanja na supstrat. Kvantna molekularna dinamika također omogućuje simulaciju stvarne kemijske reakcije.^[4] Uspješnost primjene navedenih metoda računalne kemije ovisi o predmetu istraživanja. Primjerice, ako se istražuju velike biološke molekule najbolje je koristiti molekularnu mehaniku zbog njene brzine, s obzirom da bi za iste biomolekule *ab-initio* metode bile preskorpore. Za istraživanje gibanja takvih molekula koristi se molekularna dinamika. Moguće je manipulirati molekulom uz pomoć miša ili „joysticka“ te pokušati naći optimalan trenutak za

umetanje molekule enzima na aktivno mjesto (doking). Spektri istraživanih tvari najčešće podliježu ab initio proračunima ili poluempirijskim metodama.^[5]

2.3.2. Uvod u geometrijsku optimizaciju

Jedna od najvažnijih aproksimacija koja se koristi kako bi se pojednostavilo rješavanje Schrödingerove jednačbe je Born-Oppenheimerova aproksimacija. Osnova Born-Oppenheimerove aproksimacije je sljedeća: budući da su jezgre mnogo teže od elektrona, njihovo je kretanje mnogo sporije, te se stoga može smatrati da se elektroni gibaju u polju fiksnih jezgara. Za svaki set fiksnih jezgara (određena molekulska struktura) može se izračunati energija sustava te na taj način kreirati ploha potencijalne energije (PES, engl., „Potential Energy Surface“) molekule. Geometrijska optimizacija je postupak pronalaženja stacionarnih točaka na plohi potencijalne energije. Promjenom strukture molekule mijenja se i njezina energija te je moguće računati gradijente energije kao prvu derivaciju zadane funkcije. Mjesto na plohi potencijalne energije gdje je gradijent jednak nuli naziva se stacionarna točka. Po svojoj prirodi, stacionarna točka može biti minimum ili maksimum. Minimum na plohi potencijalne energije predstavlja stabilnu konformaciju molekule, dok maksimum na plohi potencijalne energije predstavlja prijelazno stanje. Geometrijska optimizacija iterativan je postupak kojim se mijenjaju geometrijski parametri molekule (duljine veza, vezni i diedarski kutevi) u smjeru sniženja ukupne energije sustava, što se očituje negativnom vrijednošću gradijenta energije.^[6] Princip geometrijske optimizacije počinje od ulazne strukture, za koju se preporuča da bude što je više moguće nalik stacionarnoj točki koju se želi optimirati, nakon čega se prema korištenom algoritamu mijenja geometrija molekule i na taj način traži stacionarna točka. Razlika između minimuma i točke sedla je u zakrivljenosti na PES krivulji, odnosno razlika proizlazi iz druge derivacije energije po geometrijskim parametrima. Prikaz načina funkcioniranja geometrijske optimizacije strukture koja ovisi o dva geometrijska parametra nalazi se na slici 1.



Slika 1. Prikaz načina funkcioniranja algoritma za geometrijsku optimizaciju strukture koja ovisi o dva parametra

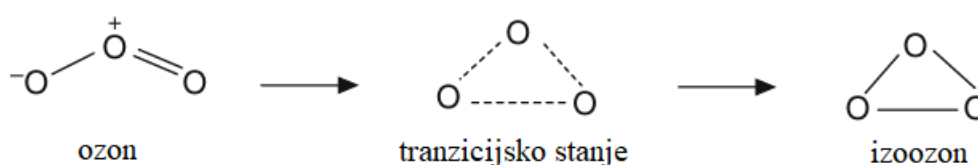
Prilikom optimizacije molekule u obzir je moguće uzeti njezinu simetriju. Upotreba simetrije molekule u kvantno-kemijskom izračunu značajno reducira računalno vrijeme. Važno je napomenuti kako vrijedi pravilo da što je simetrija molekule veća to će njeno vrijeme optimiranja biti kraće.^[5]

2.3.3. Izračuni frekvencija i slobodna energija

Ukupna elektronska energija izračunata geometrijskom optimizacijom ne odgovara u potpunosti onoj u stvarnosti. U stvarnosti, molekula nije u stanju potpunog mirovanja već posjeduje određeno vibracijsko, translacijsko i rotacijsko gibanje. Na optimiranoj strukturi molekule nužno je provesti frekvencijski račun. Pretpostavka koju kvantno-kemijski algoritmi uzimaju u obzir je aproksimacija običnog harmonijskog oscilatora. Energija nulte točke je energija koju neka molekula posjeduje na apsolutnoj nuli odnosno na temperaturi od 0 K ili -273,15 °C, a ta je energija posljedica činjenice da molekula na toj temperaturi i dalje vibrira.^[7] Energija nulte točke (energija molekule pri 0 K) računa se kao zbroj elektronske energije i tzv. „korekcije nulte točke“, energije koja odgovara najnižem vibracijskom stanju molekule pri 0 K. Entalpija i entropija molekule računaju se kao različiti doprinosi vibracijskog, translacijskog i rotacijskog gibanja molekule pribrojenih energiji nulte točke, uz korištenje aproksimacije idealnog plina za translacijsko gibanje i aproksimaciju rigidnog operatora za rotacijsko gibanje. Entalpija je termodinamička funkcija stanja ravnoteže termodinamičkog

sustava, a dobiva se kao zbroj unutarnje energije te umnoška tlaka i volumena sustava. Entropija je kao i entalpija funkcija stanja koja se često naziva mjera za „nered“ sustava, te predstavlja energiju sustava koja se više ne može upotrijebiti za rad. Gibbsova slobodna energija jednaka je razlici entalpije i entropije pomnožene s temperaturom ($G = H - TS$). U slučaju da se proučava reakcija u otopini potrebno je primijeniti niz korekcija na idealnu plinsku fazu.^[1]

Izračuni frekvencija omogućuju potpunu karakterizaciju stacionarnih točaka na PES-u. Uz prikaz svih mogućih vibracija atoma u molekuli (vrste vibracija te atomi koji sudjeluju u dotičnim vibracijama) frekvencijskim računom možemo dobiti informaciju odgovara li optimizirana struktura minimumu na PES-u (reaktanti, intermedijeri, produkti) ili prijelaznom stanju. Potpuno optimizirana struktura s nula imaginarnih frekvencija na PES-u je minimum, dok je potpuno optimizirana struktura s jednom imaginarnom frekvencijom prijelazno stanje. Globalni minimum se definira kao najmanja vrijednost funkcije na njenom području definiranosti, dok se lokalni minimum definira kao najmanja vrijednost funkcije u nekom intervalu koji ne mora, ali može biti globalni minimum. Postojanje jedne imaginarnе frekvencije karakterizira točku kao prijelazno stanje, no da bi se došlo do zaključka koje minimume ispitivano prijelazno stanje povezuje potrebno je pratiti oba reakcijska smjera duž intrinzičke reakcijske koordinate (IRC), kako je primjerice prikazano u reakciji prijelaska ozona u izomer izoozon na slici 2. Struktura s više od jedne imaginarnе frekvencije nije relevantna za reakciju.^[5,6]



Slika 2. Prikaz reakcije prelaska ozona u izomer izoozon

2.3.4. Teorija funkcionala gustoće (DFT)

Teorija funkcionala gustoće ili DFT metoda, temelji se na dva Hohenberg-Kohnova teorema, a to su teorem o egzistenciji i varijacijski teorem. Teorem o egzistenciji kaže kako su svojstva osnovnog stanja atoma ili molekule određena njihovom elektronskom gustoćom, dok varijacijski teorem kaže da određivanje energije sustava korištenjem gustoće osnovnog stanja zadovoljava varijacijski princip prema kojem je moguća energija sustava uvijek veća ili

jednaka od realne energije osnovnog stanja sustava. Cilj DFT metode je razvijanje funkcionala koji povezuju elektronsku gustoću s energijom.^[7] Kohn-Shamov pristup je pokazao da se energija sustava može raspisati u nekoliko doprinosa, $E = E^T(\rho) + E^V(\rho) + E^J(\rho) + E^{XC}(\rho)$, pri čemu je $E^T(\rho)$ kinetička energija, $E^V(\rho)$ energija privlačenja jezgara i elektrona, $E^J(\rho)$ klasično odbijanje između elektrona, dok je $E^{XC}(\rho)$ izmjenjensko-korelacijski član. Funkcional koji povezuje gustoću i energiju za E^T , E^V i E^J je poznat. Problem se reducira na pronalaženje izraza koji povecuje E^{XC} i elektronsku gustoću (ρ). Razlika u DFT metodama je u izboru funkcionala E^{XC} energije.^[10]

LDA (engl. „Local Density Approximation“) tretira elektronsku gustoću kao homogeni električni plin, tj. pretpostavlja se da je gustoća sporo mijenjajuća funkcija položaja. U slučaju da α i β gustoće nisu jednake, LDA zamjenjuje se s LSDA (engl., „Local Spin Density Approximation“), u kojem se α i β tretiraju odvojeno. Poboljšanje LSDA pristupa postiže se uvođenjem gradijenta elektronske gustoće $\nabla\rho(r)$ kao dodatne informacije s ciljem boljeg opisa nehomogenosti elektronske gustoće. Te su metode poznate kao poopćeno gradijentno približenje (GGA, engl., „Generalized Gradient Approximation“). Meta-poopćeno gradijentno približenje koristi laplasijsan elektronske gustoće te predstavlja nadogradnju GGA metode. Takva grupa funkcionala razvijena je u grupi profesora Donalda Truhlara na Sveučilištu u Minnesoti te je stoga dobila naziv Minnesota funkcionali. U ovome radu korišten je M06-2X Minnesota funkcional.^[5,11,12]

Skupina funkcionala koji koriste određeni udio Hartree-Fock izmjene zajedno s izmjenjensko-korelacijskim opisom iz teorije funkcionala gustoće zovu se hibridni funkcionali. Današnji poznati hibridni funkcional je B3LYP (Becke 3-parameter Lee-Yang-Parr) funkcional koji je zbog širine svoje primjene postao tzv. zlatni standard. Pored njega, često se koriste PBE0 i B98 hibridni funkcionali. M06-2X funkcional korišten u ovome hibridni je funkcional s 54% HF izmjene. Hibridni funkcionali se danas intenzivno upotrebljavaju jer za nešto dulje trajanje računa u odnosu na HF račun daju izrazito dobre rezultate zbog uzimanja u obzir dijela elektronske korelacije.^[1,9]

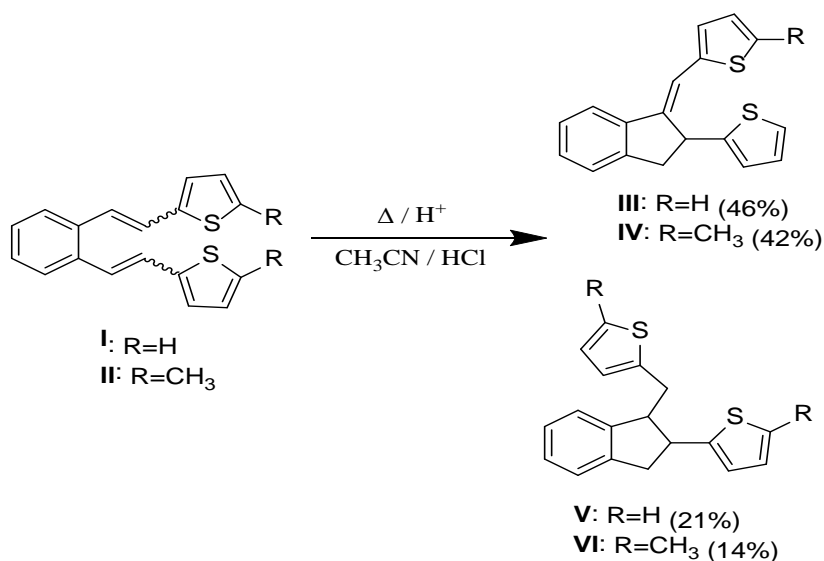
Zadnja razina, dvostruko-hibridni funkcionali, pored određenog udjela Hartree-Fock izmjene sadrže i određeni udio PT2 (engl., „Second Order Perturbation Theory“) korelacije zajedno s izmjenjensko-korelacijskim opisom iz teorije funkcionala gustoće.^[10,13] Glavna prednost DFT metoda u odnosu na metode temeljene na valnoj funkciji jest u tome što je elektronska gustoća funkcija samo triju prostornih varijabli, dok valna funkcija za N elektrona

ovisi o 4N varijabli (tri prostorne i jedna spinska varijabla). Pored navedenog elektronska gustoća je eksperimentalno mjerljiva te intuitivno lakša za razumijeti.^[5]

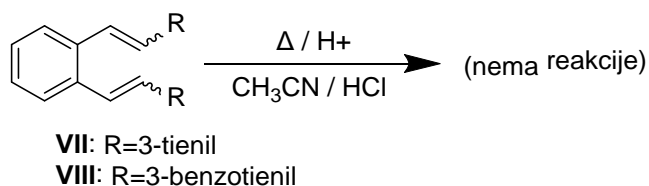
3. REZULTATI I RASPRAVA

3.1. Uvod

Ovom radu prethodilo je istraživanje termičkih transformacija furanskih i tiofenskih derivata *o*-distirilbenzena u kiselim uvjetima. Distirilbenzeni su skupina organskih spojeva sa svojstvima sličnim stilbenu. Pripremiti ih je relativno jednostavno, a zbog delokalizacije π -elektrona u pobuđenom stanju omogućeno im je induciranje novih svojstava i formiranje složenijih struktura. Termičke reakcije ovih spojeva u neutralnom mediju ne pokazuju značajnu reaktivnost, za razliku od kiselih uvjeta pri kojima može doći do protoniranja dvostruke veze i stvaranja novih intramolekulskih indanskih i indenskih produkata. Istraživanja su se provodila na različito supstituiranim tiofenskim i furanskim derivatima. Što se tiče tiofenskog derivata, formiranje željenih produkata (**II**, **III**) vidljivo je samo kod 2-supstituiranih derivata (**I**), (shema 1.), dok su se 3-supstituirani derivati (**IV**) pokazali nereaktivnima. (shema 2.)^[14]

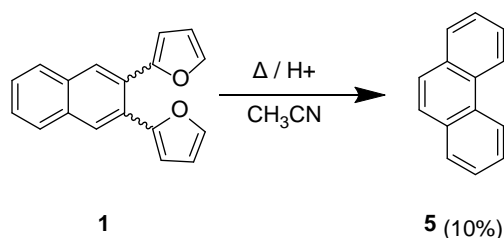


Shema 1. Prikaz reakcija 2-supstituiranih tiofenskih derivata *o*-distirilbenzena

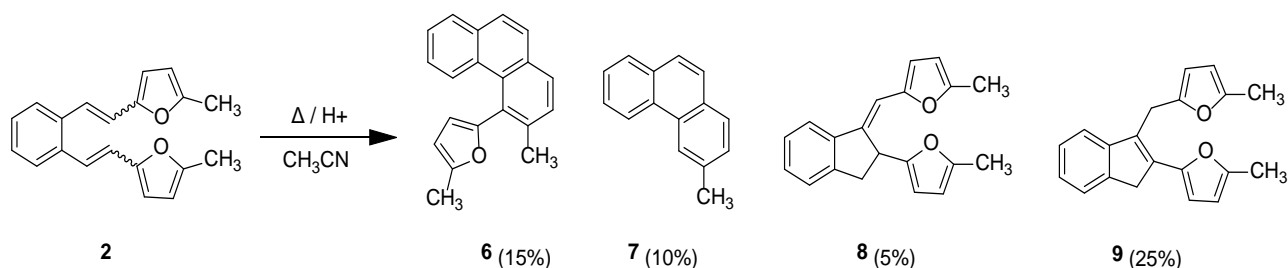


Shema 2. Prikaz reakcija 3-supstituiranih tiofenskih derivata *o*-distirilbenzena

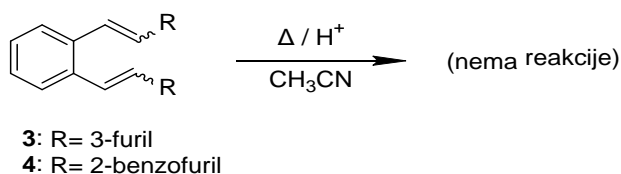
Početni prekursori furana **1-4** pripremljeni su Wittigovom reakcijom, nakon čega je nad njima provedena toplinska reakcija. Nesupstituirani derivat furana **1** formirao je fenantren **5** u malim količinama (shema 3.). U slučaju spoja **2** izolirana su četiri proizvoda (**6-9**) (shema 4.), dok su početni spojevi **3** i **4** ostali neizreagirani. (shema 5.)



Shema 3. Prikaz reakcije furanskog derivata 1

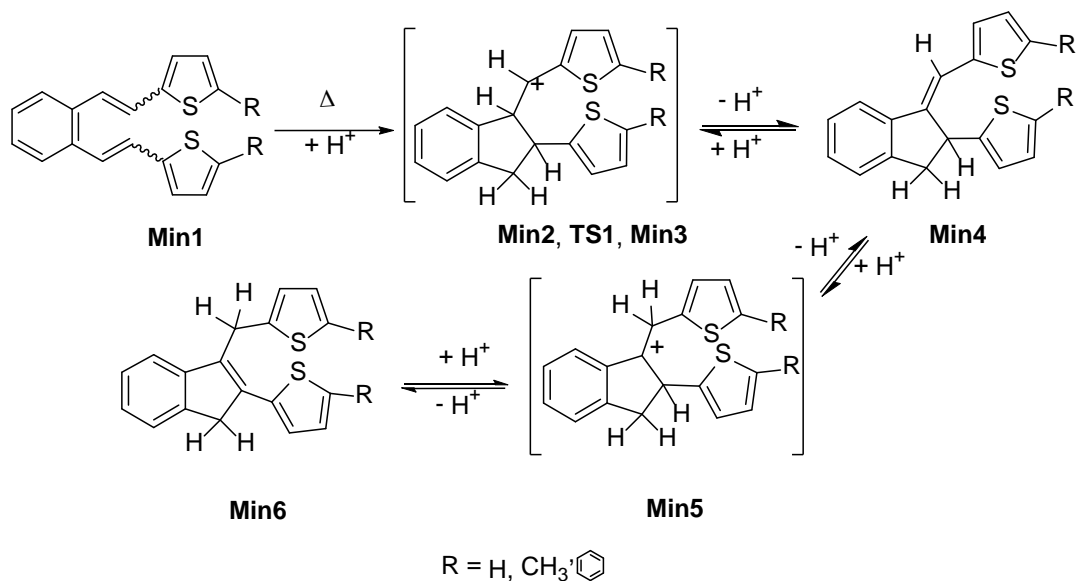


Shema 4. Prikaz reakcije furanskog derivata 2



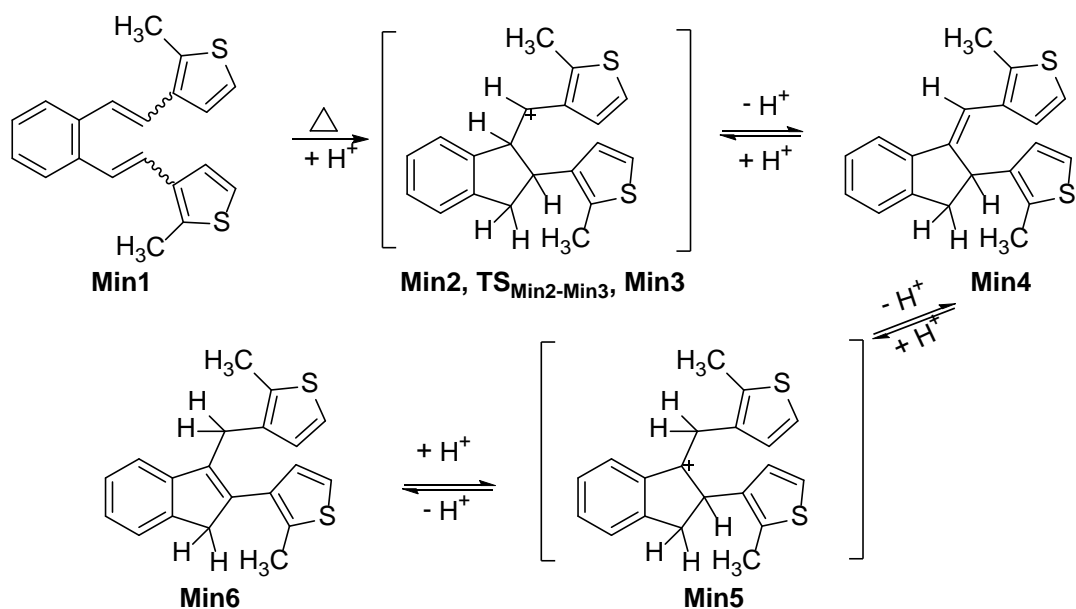
Shema 5. Prikaz reakcija furanskih derivata 3 i 4

Značajan utjecaj na reaktivnost ima početna struktura spoja i položaj supstituenta na heterocikličkoj jezgri. Kvantno - kemijski proračuni potvrdili su da položaj supstituenta može usmjeriti protoniranje na dvostruku vezu i na taj način omogućiti reaktivnost derivata koji su inače nereaktivni. Proučavanjem najpovoljnijeg mjesta protoniranja za nereaktivne 3-supstituirane derivate došlo se do zaključka da najpovoljniji položaj protoniranja ne dovodi do 1,5 zatvaranja prstena, što je razlog uočenoj nereaktivnosti. Činjenica o mogućnosti manipuliranja protoniranja „namještanjem“ supstituenta na heterocikličku jezgru potvrđena je putem metil supstituiranog 3-tiofenskog derivata koji se pokazao reaktivnijim u odnosu na nesupstituirani derivat. Mehanizam nastajanja indanskih i indenskih derivata za 2-supstituirani tiofenski derivat nalazi se na shemi 6.



Shema 6. Mehanizam nastajanja indanskih i indenskih derivata za 2-supstituirani tiofenski derivat

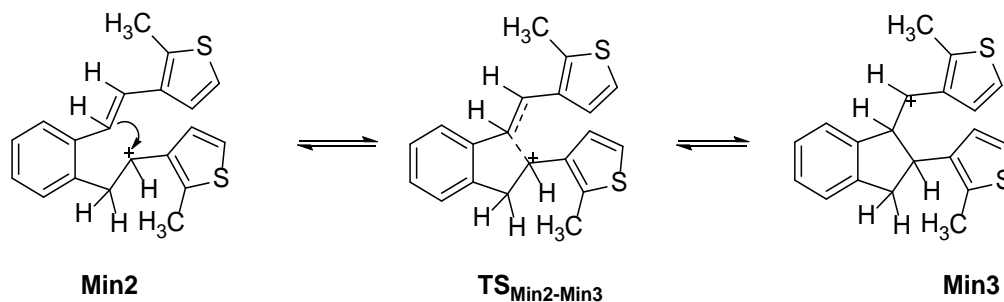
Istraživanjem mehanizma formiranja produkata u slučaju 2-supstituiranog tiofenskog derivata, zaključeno je kako je ono omogućeno putem karbokationskog intermedijera i kako supstituent na položaju 5 tiofenske jezgre ne utječe na nastanak produkata, već samo na omjer nastalih indanskih i indenskih derivata. Protoniranje etenske veze početnog reaktanta (**Min2**) dovodi do 1,5- zatvaranja prstena. Na taj način se dobiva karbokationski međuprodukt (**Min3**). Mehanizam se dalje odvija isto kao i za 3-supstituirani tiofenski derivat. (shema 7.)



Shema 7. Mehanizam nastajanja indanskih i indenskih derivata za 3-supstituirani tiofenski derivat

Što se tiče 3-supstituiranog tiofenskog derivata, ako se na položaju 2 tiofenske jezgre nalazi supstituent, mehanizam formiranja produkata tada je jednak onome kao kod 2-

supstituiranih derivata. U prvom koraku dolazi do protoniranja etenske veze početnog spoja **Min1**, što uzrokuje 1,5-zatvaranje prstena protoniranog spoja **Min2** i nastanak spomenutog karbokationskog intermedijera (**Min3**) preko prijelaznog stanja $TS_{\text{Min2-Min3}}$. Shema 8. prikazuje mehanizam nastajanja karbokationskog međuprodukta 1,5-zatvaranjem prstena 3-supstituiranog tiofenskog derivata.

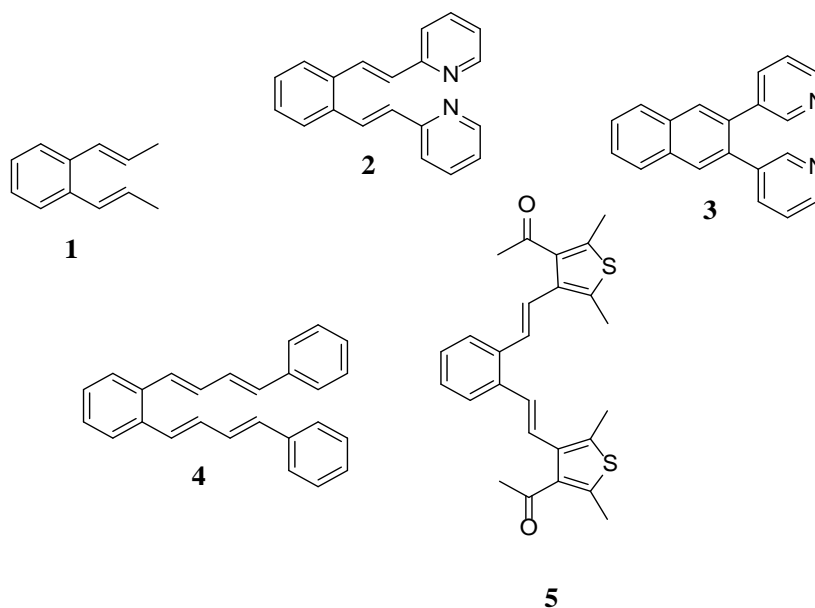


Shema 8. Mehanizam nastajanja karbokationskog međuprodukta (Min3) 1,5-zatvaranjem prstena 3-supstituiranog tiofenskog derivata

Deprotoniranje nastalog međuprodukta **Min3** vodi do nastanka indanskog derivata **Min4** koji u slučaju 2-supstituiranog derivata doprinosi stabilizaciji sustava radi smanjenja Gibbsove energije. Ponovnim protoniranjem, ovog puta indanskog derivata **Min4**, nastaje karbokationski međuprodukt **Min5**, čije deprotoniranje uzrokuje nastanak indanskog derivata **Min6**.^[15] Proučavanjem profila promjene Gibbsove energije za termičku transformaciju zaključeno je kako je u slučaju 3-supstituiranog derivata favoriziran nastanak indanskog derivata, dok je za 2-supstituirani derivat sa steričkim smetnjama zbog prisutnosti fenilnih skupina potrebno dovesti više energije sustavu za prijelaz indanskog u indenski produkt. Cilj istraživanja bio je detaljnije objasniti utjecaj inicijalnog supstrata na mehanizam nastanka produkata termičkih protoniranih reakcija, a uvid u to omogućili su kvantno kemijski izračuni korištenjem teorije funkcionala gustoće. U radu su izračunati profili slobodne energije za najpovoljnije reakcijske puteve spomenutih reakcija, na taj način pružajući objašnjenje za eksperimentalna opažanja koja se tiču termičkih reakcija *o*-divinilbenzena pod kiselim uvjetima. Vrlo intrigantna je bila nereaktivnost nekih početnih prekursora za dobivanje indanskih/indenskih i fenentrenskih produkata. Na ovo se pitanje obratila pozornost otkrivanjem preferencije sustava što se tiče položaja protoniranja. Daljnim proučavanjem energetskih zahtjeva i formiranih produkata što se tiče početnog [4+2] cikloadicijskog koraka, zaključeno je kako je on ključan u nastajanju fenantrenskih produkata. Rezultati ovog istraživanja dali su vrijedne informacije o mehanizmima i nastajanju produkata, na temelju kojih su razmotreni novi aspekti za buduća istraživanja.^[14]

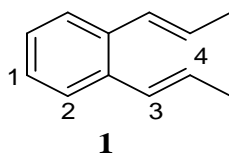
3.2. Protoniranje i zaključci o istraživanim spojevima

U ovom radu provedeni su izračuni slobodnih Gibbsovih energija za protonirane specije prikazanih spojeva. (1 - 5, slika 1.) Mjesto protoniranja za dani spoj pri čemu nastaje protonirana specija s najnižom Gibbsovom energijom termodinamički je najpovoljnije mjesto protoniranja. U spoju **1** supstituente čine metilne skupine. Spojevi **2** i **3** sadrže piridinsku heterocikličku jezgru, pri čemu su proučavani 2- i 3-supstituirani derivati. Nadalje, protoniranje se proučavalo na butadienskom derivatu **4**, dok je zadnji obrađeni spoj **5** tiofenski derivat stilbena.



Slika 1. Prikaz struktura spojeva 1-5

Razmatrani položaji protoniranja za spoj **1** prikazani su na slici 2. te su označeni brojevima od 1 do 4. U tablici 1. prikazane su odgovarajuće Gibbsove slobodne energije u atomskim jedinicama (a.u.) te relativne Gibbsove slobodne energije u kJ mol^{-1} za pojedine protonirane specije.



Slika 2. Prikaz spoja **1** s odgovarajućim položajima protoniranja

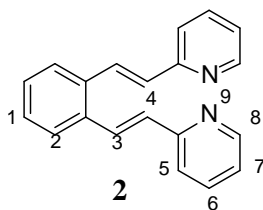
Tablica 1. Protonirane forme i Gibbsove energije za spoj 1

Položaj protoniranja	G^* , a.u.	$G^*_{\text{relat.}}$, kJ mol ⁻¹
1	-465.8226005	33.35
2	-465.8202546	39.51
3*	-	-
4	-465.8353044	0.00

*struktura nije postojana

Uvidom u dobivene rezultate može se zaključiti da se termički najpovoljnije mjesto protoniranja nalazi na položaju 4, dok protoniranje na položaj 3, koji je favoriziran za 1,5-zatvaranje prstena, daje nepostojanu strukturu. Očekivano, položaji 1 i 2 na benzenskoj jezgri pokazali su se kao najmanje povoljni.

Rezultati ispitivanja za spoj **2** (slika 3.) dani su u tablici 2.



Slika 3. Prikaz spoja 2 s odgovarajućim položajima protoniranja

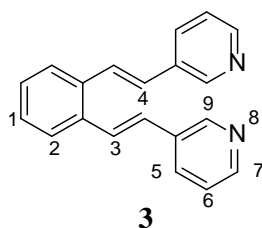
Tablica 2. Protonirane forme i Gibbsove energije za spoj 2

Položaj protoniranja	G^* , a.u.	$G^*_{\text{relat.}}$, kJ mol ⁻¹
1	-881.2923144	167.37
2	-881.2907816	171.40
3	-881.2880381	178.60
4	-881.3041059	136.41
5	-881.2915629	169.34
6	-881.2570817	259.87
7	-881.2942725	162.23
8	-881.2657024	237.24

9	-881.3560628	0.00
---	---------------------	-------------

Najpovoljniji položaj protoniranja u ovom slučaju je očekivano položaj 9, odnosno atom dušika, dok su ostali položaji pokazali znatno veću energetska barijeru.

3-Supstituirani pridinski derivat (**3**, slika 4.) daje vrlo slične rezultate.



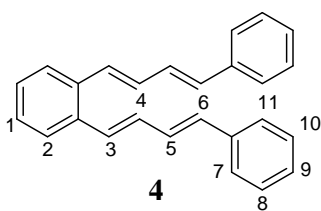
Slika 4. Prikaz spoja 3 s odgovarajućim položajima protoniranja

Tablica 3. Protonirane forme i Gibbsove energije za spoj 3

Položaj protoniranja	G^* , a.u.	$G^*_{\text{relat.}}$, kJ mol ⁻¹
1	-881.2911125	157.85
2	-881.2887580	164.03
3	-881.2919875	155.55
4	-881.2980875	139.53
5	-881.2720840	207.81
6	-881.2748223	200.62
7	-881.2808003	184.92
8	-881.3512329	0.00
9	-881.2800690	186.84

Protoniranje je usmjereno na atom dušika, a ostali položaji su se pokazali nepovoljni. Iz ovoga bi se moglo zaključiti da piridinski derivati vjerorajno neće dati ciklizacijske termičke produkte u kiselim uvjetima.

Za razliku od prethodnih rezultata kao najpovoljniji položaj protoniranja u slučaju butadienskog derivata (**4**, slika 5.) pokazao se položaj 6 dvostruke veze, a nakon njega slijedi položaj 3. Protoniranjem oba položaja mogli bi se formirati novi ciklizacijski produkti, radi čega se ovaj sustav pokazao kao interesantan za buduća eksperimentalna istraživanja.

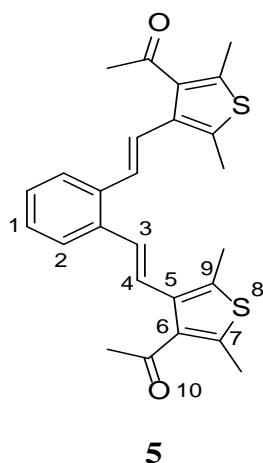


Slika 5. Prikaz spoja 4 s odgovarajućim položajima protoniranja

Tablica 4. Protonirane forme i Gibbsove energije za spoj 4

Položaj protoniranja	G^* , a.u.	$G^*_{\text{relat.}}$, kJ mol ⁻¹
1	-1003.925131	38.98
2	-1003.921799	47.73
3	-1003.938384	4.19
4	-1003.926026	36.63
5	-1003.929087	28.60
6	-1003.939979	0.00
7	-1003.923244	43.94
8	-1003.909418	80.24
9	-1003.926478	35.45
10	-1003.908840	81.76
11	-1003.923336	43.70

Acetatni derivat **5** (slika 6.) očekivano protoniranje usmjerava na atom kisika, što bi opet onemogućavalo ulazak protona na željeni položaj i formiranje ciklizacijskih produkata.

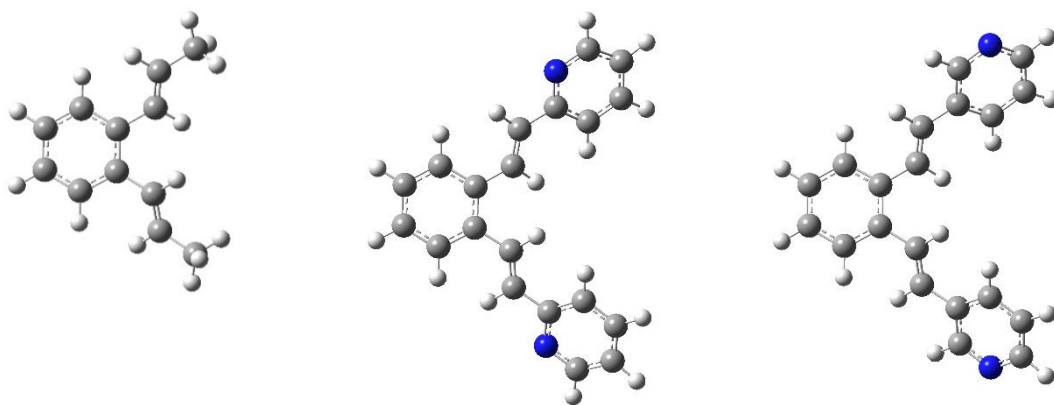


Slika 6. Prikaz spoja 5 s odgovarajućim položajima protoniranja

Tablica 5. Protonirane forme i Gibbsove energije za spoj 5

Položaj protoniranja	G^* , a.u.	$G^*_{\text{relat.}}$, kJ mol ⁻¹
1	-1953.145462	81.49
2	-1953.143856	85.70
3	-1953.157296	50.42
4	-1953.152716	62.45
5	-1953.146690	78.26
6	-1953.152367	63.36
7	-1953.157998	48.58
8	-1953.127988	127.36
9	-1953.168323	21.48
10	-1953.176505	0.00

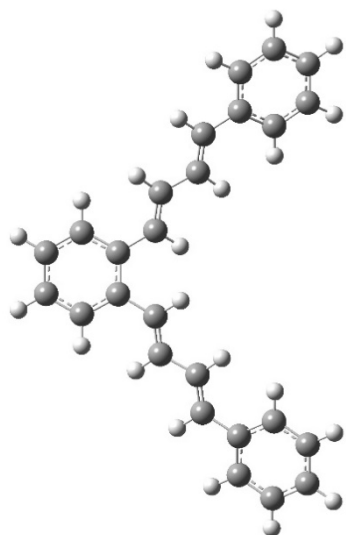
Na slici 7. prikazane su 3-D strukture ispitivanih spojeva **1** – **5** u osnovnom stanju dobivene pomoću GaussView programa.



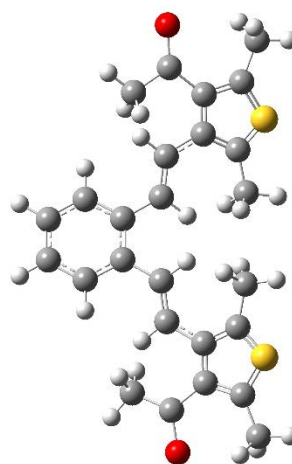
1

2

3



4



5

Slika 7. 3-D prikaz razmatranih spojeva 1 – 5 dobiven korištenjem GaussView programa

4. EKSPERIMENTALNI DIO

4.1. Opće napomene

Rezultati prikazani u ovom radu dobiveni su korištenjem Gaussian 09 programskog paketa na klasteru Supek Sveučilišnog računskog centra Sveučilišta u Zagrebu (SRCE). Optimizacije proučavanih molekula te frekvencijski račun provedeni su u okviru teorije funkcionala gustoće (DFT). Odabran je M06-2X razmjensko-korelacijski funkcional dizajniran od strane Truhlarove grupe zbog svojih prednosti pri termodinamičkom proučavanju spojeva elemenata glavne skupine periodnog sustava, te 6-31G(d,p) Popleov osnovni skup. Efekt otapala acetonitrila izračunan je korištenjem implicitnog SMD solvacijskog modela, pri čemu je otapalo aproksimirano polarizabilnim kontinuumom dielektrične konstante $\epsilon=35.69$. Izračuni frekvencija napravljeni su uz aproksimaciju harmonijskog oscilatora. Konačne energije za optimirane strukture izračunate su korištenjem istog M06-2X funkcionala te fleksibilnijeg 6-311+G(2df,2pd) osnovnog skupa. Za generiranje početnih struktura korišten je vizualizacijski program Molden 5.0., dok je za vizualizaciju optimiranih struktura korišten program GaussView.

4.2. Kartezijske koordinate

Molekula-1-protoniranje-1

scf done: -466.018251

C	1.270330	-0.168435	-0.753155
C	0.018134	-0.162395	0.010171
C	0.014772	-0.145190	1.364751
C	1.239272	-0.118466	2.104274
C	2.506420	-0.119765	1.411379
C	2.499816	-0.159727	0.046382
C	1.233684	-0.055513	3.542954
C	0.157754	-0.334077	4.314352
C	0.176543	-0.285076	5.796245
C	3.784915	-0.114549	2.156315
C	4.838810	0.620178	1.791105
C	6.160501	0.607005	2.489855
H	1.284047	-1.033464	-1.439502
H	-0.917226	-0.160839	-0.540930
H	-0.927501	-0.109019	1.896874
H	3.444120	-0.204231	-0.489190
H	-0.601463	0.402007	6.149236
H	1.145926	0.028655	6.186339
H	-0.079670	-1.270639	6.202105
H	-0.782175	-0.640360	3.859563
H	2.166211	0.201987	4.035630
H	3.857943	-0.761902	3.028399
H	4.744714	1.286237	0.932787
H	6.417119	1.608609	2.850922

H	6.157536	-0.081548	3.338283
H	6.956523	0.307392	1.799512
H	1.281967	0.681196	-1.459193

Molekula-1-protoniranje-2

scf done: -466.016349

C	1.194859	0.072120	-0.736963
C	0.008165	-0.048054	-0.092047
C	-0.049986	-0.181590	1.370369
C	1.225212	-0.149195	2.127013
C	2.440116	-0.047080	1.421454
C	2.387671	0.048241	0.027460
C	1.217038	-0.208128	3.567411
C	0.108311	-0.401187	4.313145
C	0.109471	-0.455097	5.796899
C	3.751146	-0.061906	2.103907
C	4.795944	0.674485	1.714379
C	6.139237	0.640625	2.369421
H	1.253922	0.159927	-1.815014
H	-0.933464	-0.063862	-0.631778
H	-0.743484	0.576146	1.767305
H	3.333206	0.091752	-0.507434
H	-0.563246	0.312641	6.196306
H	1.108844	-0.312674	6.211664
H	-0.290012	-1.418505	6.134096
H	-0.858448	-0.534326	3.829793
H	2.167235	-0.083358	4.077019
H	3.857083	-0.723650	2.960792
H	4.681099	1.358267	0.872543
H	6.910831	0.350815	1.647843
H	6.413025	1.633688	2.741356
H	6.159387	-0.064427	3.203944
H	-0.577297	-1.125801	1.598457

Molekula-1-protoniranje-3

scf done: -466.032460

C	1.135726	0.421982	-0.473042
C	-0.045890	0.064329	0.207671
C	0.039649	-0.356143	1.506574
C	1.306548	-0.411904	2.177734
C	2.516946	-0.068415	1.458729
C	2.382084	0.349383	0.130436
C	1.359374	-0.684563	3.535171
C	0.242612	-0.995911	4.442452
C	-0.030393	0.246121	5.323351
C	3.837230	-0.186964	2.070307
C	4.898089	0.543662	1.688482
C	6.250685	0.428727	2.302043
H	1.073129	0.742520	-1.508758
H	-1.002906	0.118800	-0.297461
H	-0.858975	-0.628923	2.047060
H	3.265404	0.581402	-0.452987
H	-0.800865	-0.006225	6.054054
H	-0.382094	1.078279	4.709793
H	0.870233	0.557364	5.857553
H	-0.665220	-1.301094	3.923971

H	0.572795	-1.812694	5.094510
H	3.964244	-0.897062	2.882498
H	4.785618	1.286262	0.899674
H	6.558045	1.390429	2.727223
H	6.277881	-0.332155	3.084809
H	6.990419	0.177485	1.533680
H	2.324432	-0.599909	4.031760

Molekula-1-protoniranje-4

scf done: -466.032460

C	1.104548	0.528692	-0.419120
C	-0.081374	0.156141	0.245933
C	-0.001402	-0.317921	1.526610
C	1.264268	-0.414541	2.195447
C	2.478852	-0.054882	1.491567
C	2.349556	0.418233	0.181396
C	1.313052	-0.742969	3.540633
C	0.192282	-1.079205	4.433983
C	-0.068244	0.128638	5.364787
C	3.797287	-0.212366	2.098329
C	4.866169	0.521905	1.747101
C	6.216952	0.367607	2.356006
H	1.046232	0.891914	-1.440902
H	-1.037333	0.241389	-0.256941
H	-0.903329	-0.602962	2.055136
H	3.235782	0.664468	-0.391702
H	-0.841968	-0.145126	6.084257
H	-0.410563	0.988869	4.785604
H	0.835192	0.408182	5.911625
H	0.513215	-1.925418	5.052254
H	2.278537	-0.688956	4.040657
H	3.916066	-0.956358	2.880886
H	4.762259	1.297259	0.989242
H	6.954621	0.140092	1.578322
H	6.534154	1.307812	2.820242
H	6.235403	-0.424859	3.107047
H	-0.718309	-1.353260	3.903098

Molekula-2-protoniranje-1

scf done: -881.562472

N	-3.565512	7.000225	3.535501
C	-3.501119	5.939823	2.711364
C	-3.182976	6.069484	1.353252
C	-2.913997	7.332973	0.845028
C	-2.973618	8.431283	1.698411
C	-3.305971	8.208136	3.031431
C	-3.792974	4.646276	3.353794
C	-3.672921	3.437134	2.791562
C	-4.039995	2.195005	3.502718
C	-3.239846	0.999555	3.376413
C	-3.632752	-0.201697	4.044073
C	-4.748232	-0.238737	4.813450
C	-5.602056	0.940827	4.982933
C	-5.172649	2.144185	4.265040
C	-2.027225	1.054169	2.602414

C	-1.369964	-0.046370	2.162232
C	-0.147317	-0.047864	1.360244
N	0.252959	-1.274502	0.970299
C	1.357668	-1.366117	0.236198
C	2.120846	-0.260415	-0.145616
C	1.709275	1.002937	0.262363
C	0.555556	1.116791	1.028346
H	-5.806981	3.023128	4.338407
H	-6.640951	0.694462	4.699819
H	-5.025275	-1.150277	5.333814
H	-1.655253	2.039354	2.342841
H	-3.312846	3.331410	1.771033
H	-1.752438	-1.044457	2.360911
H	-4.112917	4.730481	4.390989
H	3.013506	-0.397051	-0.745677
H	-3.152219	5.199951	0.705846
H	-2.665124	7.458980	-0.203867
H	-3.367199	9.041594	3.727463
H	-2.772737	9.436087	1.344228
H	1.655766	-2.366971	-0.065667
H	2.275778	1.887094	-0.010166
H	0.211991	2.088952	1.363377
H	-3.005381	-1.080910	3.969009
H	-5.712009	1.172744	6.057866

Molekula-2-protoniranje-2

scf done: -881.561193

N	6.611258	-7.027501	3.540823
C	5.928757	-5.986939	3.023843
C	4.937245	-6.146923	2.047711
C	4.641012	-7.429017	1.602215
C	5.338543	-8.504834	2.140157
C	6.313995	-8.248815	3.104997
C	6.319029	-4.685311	3.567087
C	5.733069	-3.499023	3.285402
C	6.170181	-2.246233	3.845970
C	5.454735	-1.060333	3.595143
C	5.950438	0.139266	4.122256
C	7.136326	0.253171	4.884053
C	7.837844	-0.874620	5.165952
C	7.394658	-2.187421	4.680131
C	4.197058	-1.051290	2.823971
C	3.856053	-0.054172	1.996839
C	2.608952	0.039934	1.218092
C	1.545700	-0.862082	1.355362
C	0.416224	-0.692671	0.566457
C	0.372830	0.369380	-0.332455
C	1.472647	1.220182	-0.395075
N	2.565837	1.070248	0.355060
H	5.371390	1.042520	3.947570
H	7.447518	1.225559	5.245650
H	8.739944	-0.845952	5.769009
H	8.235080	-2.670553	4.157047
H	4.891198	-3.465649	2.603065
H	3.536437	-1.902468	2.961102
H	7.152583	-4.742328	4.263680

H	4.540571	0.775946	1.829842
H	5.140023	-9.522421	1.822891
H	1.597508	-1.677168	2.068765
H	-0.420155	-1.378733	0.654701
H	1.474012	2.063695	-1.081543
H	-0.489418	0.540203	-0.967105
H	6.879697	-9.067894	3.542052
H	3.878650	-7.584023	0.845978
H	4.413748	-5.289120	1.640486
H	7.261425	-2.839294	5.563201

Molekula-2-protoniranje-3

scf done: -881.558355

N	5.895405	-7.077406	4.227802
C	5.782838	-6.120122	3.256555
C	5.851665	-6.406463	1.877626
C	6.025861	-7.728577	1.483062
C	6.130486	-8.693320	2.470735
C	6.060471	-8.317926	3.835002
C	5.594919	-4.817771	3.753231
C	5.296493	-3.605196	3.003156
C	5.940631	-2.353265	3.560003
C	5.335358	-1.089727	3.400574
C	6.005291	0.036282	3.901352
C	7.243400	-0.073223	4.523380
C	7.843187	-1.322272	4.659947
C	7.191011	-2.451574	4.175187
C	4.034763	-0.938078	2.724083
C	3.688112	0.146624	2.015735
C	2.399428	0.369917	1.338681
C	1.324000	-0.526862	1.408276
C	0.150109	-0.224048	0.732974
C	0.073220	0.962125	0.007708
C	1.188878	1.793602	-0.004229
N	2.325030	1.516463	0.638633
H	5.530762	1.009200	3.819543
H	7.735774	0.815460	4.904859
H	8.812149	-1.420184	5.138201
H	7.672226	-3.423596	4.260814
H	5.432646	-3.703930	1.923480
H	3.331183	-1.762572	2.811805
H	5.614400	-4.733027	4.840680
H	4.397133	0.961613	1.884793
H	6.272049	-9.738437	2.216590
H	1.401818	-1.443294	1.982569
H	-0.694937	-0.904091	0.774115
H	1.168051	2.729693	-0.557791
H	-0.824509	1.240088	-0.532889
H	6.147246	-9.076472	4.607611
H	6.083644	-7.991662	0.433484
H	5.779371	-5.613340	1.142076
H	4.196839	-3.564696	3.161810

Molekula-2-protoniranje-4

scf done: -881.574143

N	6.331943	-5.774022	3.977357
---	----------	-----------	----------

C	6.363179	-5.681495	2.646747
C	5.727090	-6.584833	1.798135
C	5.048886	-7.657431	2.370472
C	5.027834	-7.776747	3.755388
C	5.683943	-6.809783	4.514707
C	7.138953	-4.483073	2.083941
C	6.241178	-3.329224	2.293835
C	6.211330	-2.487015	3.393325
C	5.229458	-1.423251	3.472988
C	5.323871	-0.534908	4.546707
C	6.308621	-0.683958	5.514336
C	7.244307	-1.734866	5.469216
C	7.197399	-2.621215	4.426398
C	4.151409	-1.290508	2.497347
C	3.569247	-0.111632	2.211608
C	2.478165	0.097968	1.250204
C	1.950207	-0.924517	0.452035
C	0.912253	-0.624306	-0.420117
C	0.434225	0.681160	-0.474093
C	1.025628	1.634791	0.352323
N	2.022392	1.362932	1.193987
H	4.592579	0.257499	4.655531
H	6.342283	0.020929	6.339682
H	7.989607	-1.834383	6.249395
H	7.910995	-3.433827	4.373833
H	5.502045	-3.186300	1.509024
H	3.814769	-2.189377	1.991238
H	7.303618	-4.628898	1.015356
H	3.906818	0.802889	2.693970
H	5.777115	-6.453218	0.722762
H	4.546678	-8.386417	1.742717
H	2.346718	-1.932118	0.507105
H	0.485242	-1.398164	-1.049673
H	0.680378	2.665667	0.332928
H	-0.373470	0.961191	-1.140888
H	5.683180	-6.867407	5.600196
H	4.510959	-8.594628	4.244374
H	8.093586	-4.395725	2.601176

Molekula-2-protoniranje-5

scf done: -881.559993

N	6.424956	-7.046672	3.695742
C	5.936691	-5.927948	3.124171
C	5.062800	-5.978293	1.919961
C	4.756700	-7.329742	1.414577
C	5.264630	-8.422248	2.026951
C	6.097409	-8.214649	3.165651
C	6.323993	-4.709831	3.749735
C	5.878483	-3.487001	3.344099
C	6.266158	-2.214448	3.919005
C	5.525594	-1.039231	3.617495
C	5.969698	0.181439	4.141690
C	7.113370	0.254552	4.926486
C	7.841627	-0.900716	5.223221
C	7.416977	-2.120370	4.726864
C	4.290342	-1.087404	2.816825

C	3.891694	-0.085387	2.018529
C	2.658082	-0.056870	1.215656
C	1.642882	-1.016229	1.330823
C	0.520443	-0.907109	0.521528
C	0.434914	0.153994	-0.375619
C	1.486436	1.065292	-0.414283
N	2.572016	0.973974	0.355758
H	5.390092	1.079263	3.954099
H	7.433223	1.214442	5.319269
H	8.735361	-0.843665	5.834974
H	7.999818	-3.011337	4.934433
H	5.177960	-3.447811	2.513615
H	3.683785	-1.985508	2.895854
H	6.989748	-4.823414	4.598862
H	4.515568	0.797843	1.896597
H	4.117435	-5.448270	2.118564
H	5.066367	-9.431597	1.689442
H	1.726151	-1.826561	2.046635
H	-0.279136	-1.637573	0.593607
H	1.452774	1.910989	-1.097308
H	-0.423830	0.279646	-1.025381
H	6.515843	-9.085775	3.666724
H	4.115926	-7.407289	0.541668
H	5.517417	-5.386634	1.109285

Molekula-2-protoniranje-6

scf done: -881.525400

N	6.252325	-7.026598	3.706826
C	5.856604	-5.918046	3.051719
C	5.143998	-6.029126	1.851419
C	4.902017	-7.331555	1.296320
C	5.298869	-8.479192	2.070532
C	5.992645	-8.255124	3.246109
C	6.199957	-4.643413	3.687545
C	5.890782	-3.430466	3.202399
C	6.275755	-2.160375	3.836621
C	5.516560	-0.987398	3.611899
C	5.933793	0.211657	4.206733
C	7.078493	0.267229	4.991790
C	7.831025	-0.887679	5.205207
C	7.430247	-2.086093	4.629984
C	4.284639	-1.021606	2.802824
C	3.847146	0.010995	2.066845
C	2.613684	0.035347	1.263297
C	1.624226	-0.954307	1.347328
C	0.502314	-0.854811	0.536611
C	0.388762	0.228920	-0.330438
C	1.412898	1.171029	-0.336668
N	2.498906	1.088740	0.434595
H	5.331322	1.104429	4.070622
H	7.379219	1.207730	5.442274
H	8.730398	-0.852364	5.811343
H	8.038462	-2.974600	4.767943
H	5.324390	-3.351536	2.277662
H	3.714951	-1.947876	2.817765
H	6.733432	-4.753577	4.627804

H	4.436807	0.923131	1.998921
H	4.828540	-5.157712	1.286839
H	5.109708	-9.480250	1.699905
H	1.727978	-1.779443	2.043216
H	-0.276567	-1.609335	0.584984
H	1.356566	2.035974	-0.993758
H	-0.471014	0.348689	-0.979938
H	6.345748	-9.083398	3.851569
H	4.081637	-7.438649	0.583663
H	5.808597	-7.296368	0.591771

Molekula-2-protoniranje-7

scf done: -881.563864

N	6.437649	-7.061835	3.637232
C	5.867076	-5.933485	3.068936
C	4.945337	-6.014107	1.971862
C	4.580281	-7.226881	1.501980
C	5.126257	-8.460075	2.092288
C	6.091413	-8.220622	3.180665
C	6.287399	-4.721527	3.672610
C	5.799630	-3.489585	3.328247
C	6.212646	-2.229761	3.900708
C	5.481724	-1.042971	3.609783
C	5.946634	0.170254	4.132783
C	7.099139	0.226474	4.905443
C	7.818628	-0.938070	5.191202
C	7.375136	-2.150183	4.696989
C	4.242042	-1.068851	2.816035
C	3.860333	-0.057524	2.020939
C	2.628791	-0.004716	1.216352
C	1.603415	-0.954959	1.314285
C	0.485024	-0.822142	0.502807
C	0.414048	0.252525	-0.379225
C	1.475460	1.152939	-0.401651
N	2.557176	1.038908	0.370595
H	5.376904	1.076038	3.954396
H	7.433764	1.181222	5.298513
H	8.718697	-0.892311	5.794340
H	7.949470	-3.047099	4.900710
H	5.036123	-3.434778	2.558574
H	3.620487	-1.956430	2.893473
H	7.016569	-4.838542	4.466892
H	4.499488	0.814988	1.901405
H	4.549619	-5.110985	1.525700
H	3.877939	-7.314155	0.678856
H	4.315752	-9.105865	2.471221
H	1.675939	-1.777221	2.017525
H	-0.322223	-1.545340	0.561086
H	1.453456	2.008304	-1.072987
H	-0.440818	0.396362	-1.030339
H	6.554411	-9.090605	3.644987
H	5.602351	-9.090493	1.323386

Molekula-2-protoniranje-8

scf done: -881.534998

N	6.009416	-6.999000	3.832363
---	----------	-----------	----------

C	5.770635	-5.933225	3.126249
C	5.171052	-6.021803	1.805122
C	4.807972	-7.227984	1.243770
C	5.047813	-8.368216	1.995122
C	5.663309	-8.260926	3.298833
C	6.139233	-4.640793	3.717322
C	5.875404	-3.436913	3.187355
C	6.287114	-2.161545	3.797181
C	5.539688	-0.982219	3.569543
C	5.982757	0.218476	4.141814
C	7.141619	0.268139	4.906531
C	7.881892	-0.893896	5.122843
C	7.454970	-2.094352	4.570111
C	4.292069	-1.014693	2.785236
C	3.839533	0.015727	2.055308
C	2.586893	0.036816	1.281888
C	1.596196	-0.947859	1.402254
C	0.454395	-0.853100	0.619310
C	0.322600	0.221608	-0.256362
C	1.349513	1.159777	-0.298896
N	2.454673	1.081772	0.445187
H	5.389902	1.117635	4.005368
H	7.462518	1.210107	5.339733
H	8.791462	-0.863107	5.713820
H	8.050963	-2.991032	4.709577
H	5.328796	-3.362553	2.250821
H	3.721425	-1.940099	2.815013
H	6.642841	-4.730766	4.676304
H	4.428110	0.927042	1.969773
H	5.007570	-5.110132	1.238922
H	4.360025	-7.275912	0.259023
H	4.792761	-9.358089	1.626936
H	1.714339	-1.764977	2.105238
H	-0.325769	-1.603949	0.696043
H	1.279232	2.017969	-0.963446
H	-0.553088	0.337722	-0.884924
H	5.044163	-8.814669	4.034436
H	6.560896	-8.916550	3.305567

Molekula-2-protoniranje-9

scf done: -881.630691

N	5.932497	-7.036713	3.940858
C	5.787239	-5.993041	3.104657
C	5.337513	-6.154531	1.786740
C	5.015007	-7.427176	1.337036
C	5.154853	-8.506617	2.205505
C	5.620397	-8.254236	3.492437
C	6.141631	-4.685278	3.680570
C	5.909815	-3.489490	3.118659
C	6.313960	-2.208305	3.725302
C	5.575295	-1.023779	3.492516
C	6.007686	0.179966	4.068979
C	7.151882	0.229209	4.853483
C	7.886525	-0.935469	5.076122
C	7.471121	-2.135765	4.513330
C	4.338213	-1.060183	2.701487

C	3.852374	-0.015589	2.009530
C	2.600397	-0.059247	1.266494
C	1.630218	-1.062001	1.339881
C	0.486997	-0.974218	0.562054
C	0.287367	0.116249	-0.290741
C	1.252394	1.096318	-0.333848
N	2.352552	0.976513	0.431611
H	5.416644	1.079586	3.927862
H	7.465779	1.169202	5.295299
H	8.786802	-0.906799	5.681592
H	8.065982	-3.031825	4.660101
H	5.397378	-3.437386	2.160912
H	3.796237	-2.002866	2.688032
H	6.605167	-4.747381	4.663152
H	4.404835	0.919424	1.951885
H	5.252834	-5.300094	1.124536
H	4.665039	-7.576021	0.320357
H	5.750460	-9.072210	4.197457
H	4.917387	-9.518303	1.896470
H	1.774363	-1.894575	2.016524
H	3.051606	1.717406	0.372516
H	-0.262170	-1.756289	0.623542
H	1.196188	1.982827	-0.952140
H	-0.600180	0.206602	-0.903295

Molekula-3-protoniranje-1

scf done: -881.561551

C	5.705456	-7.063668	3.968836
C	5.705177	-5.948469	3.120966
C	5.383185	-6.170034	1.775823
C	5.075780	-7.456674	1.359154
C	5.102618	-8.490325	2.294238
N	5.413405	-8.305697	3.580624
C	6.038828	-4.635806	3.687264
C	5.969935	-3.461005	3.047041
C	6.378894	-2.189580	3.678541
C	5.619022	-0.976403	3.471308
C	6.054166	0.249918	4.067943
C	7.166391	0.295434	4.839625
C	7.980365	-0.899847	5.087077
C	7.509759	-2.129828	4.441065
C	4.413167	-1.039491	2.696345
C	3.774090	0.053752	2.201988
C	2.560483	0.029923	1.406251
C	1.830194	-1.132275	1.108741
C	0.685957	-1.019344	0.338511
C	0.302711	0.245036	-0.112568
N	0.979121	1.366128	0.160466
C	2.077380	1.248914	0.902724
H	5.459703	1.145470	3.938193
H	7.472018	1.227485	5.304805
H	8.077579	-1.068125	6.174618
H	5.622740	-3.410927	2.017674
H	4.021157	-2.026846	2.477984
H	6.350704	-4.647638	4.731441

H	4.188585	1.046375	2.364783
H	5.377444	-5.351173	1.062563
H	4.822500	-7.664040	0.325440
H	2.149302	-2.102457	1.475985
H	0.091654	-1.889657	0.085310
H	-0.591144	0.358141	-0.720955
H	5.957210	-6.930947	5.020068
H	2.621357	2.166747	1.120794
H	4.866840	-9.508282	1.993519
H	8.113515	-3.023776	4.570317
H	9.026955	-0.706905	4.792427

Molekula-3-protoniranje-2

scf done: -881.559901

C	6.602782	-7.115168	3.476426
C	5.939783	-5.966327	3.016218
C	4.946693	-6.138510	2.038830
C	4.670533	-7.418155	1.588174
C	5.390228	-8.488264	2.122060
N	6.342847	-8.349199	3.050195
C	6.325675	-4.682082	3.577040
C	5.737477	-3.491401	3.301950
C	6.163690	-2.245510	3.874928
C	5.444851	-1.057808	3.623553
C	5.928763	0.137791	4.163832
C	7.108459	0.252084	4.939183
C	7.811165	-0.872700	5.222978
C	7.378595	-2.186509	4.725608
C	4.196367	-1.050543	2.838276
C	3.859724	-0.052535	2.008945
C	2.620463	0.034577	1.227396
C	1.554187	-0.868338	1.331187
C	0.436189	-0.686413	0.531136
C	0.408027	0.394313	-0.349079
N	1.408756	1.272572	-0.461710
C	2.478668	1.085906	0.312185
H	5.347060	1.039744	3.991359
H	7.411039	1.224053	5.309328
H	8.706232	-0.843629	5.836351
H	7.235412	-2.842054	5.603932
H	4.900863	-3.456746	2.613241
H	3.535085	-1.903013	2.966116
H	7.155402	-4.723981	4.280940
H	4.554930	0.773973	1.862014
H	4.406117	-5.288095	1.635176
H	3.912826	-7.595960	0.833762
H	1.592589	-1.698871	2.029609
H	-0.406793	-1.366196	0.585900
H	-0.456895	0.559909	-0.986836
H	7.380353	-7.012694	4.231741
H	3.284328	1.811311	0.208023
H	5.190240	-9.502151	1.784414
H	8.226691	-2.662540	4.209118

Molekula-3-protoniranje-3

scf done: -881.565174

C	5.120987	-6.287437	3.802320
C	5.509046	-5.237899	2.920314
C	4.815034	-5.105362	1.685321
C	3.804596	-5.997843	1.412714
C	3.510924	-6.986336	2.363488
N	4.148980	-7.139839	3.536792
C	6.560756	-4.417875	3.325420
C	7.123314	-3.250734	2.630645
C	7.024630	-2.068943	3.598455
C	5.884447	-1.240280	3.626903
C	5.872130	-0.162509	4.527466
C	6.945649	0.085629	5.372180
C	8.063032	-0.748590	5.344604
C	8.093754	-1.821818	4.462271
C	4.732120	-1.487644	2.744699
C	3.906197	-0.535340	2.286517
C	2.736106	-0.776298	1.434118
C	2.219123	-2.047343	1.149144
C	1.114141	-2.156853	0.318205
C	0.545766	-0.994382	-0.200792
N	1.012553	0.229139	0.064910
C	2.077580	0.320415	0.862559
H	4.990812	0.469103	4.580365
H	6.905557	0.922106	6.062491
H	8.904074	-0.564478	6.004852
H	8.962783	-2.473168	4.426258
H	8.188245	-3.468818	2.468341
H	4.549281	-2.516942	2.448920
H	7.015244	-4.652963	4.288943
H	4.102040	0.509080	2.525173
H	2.667216	-2.939589	1.578488
H	0.688773	-3.125068	0.077928
H	-0.323052	-1.051388	-0.851933
H	5.645287	-6.401781	4.749516
H	2.444394	1.324902	1.069126
H	2.712224	-7.696621	2.165151
H	3.237844	-5.951375	0.490808
H	5.075800	-4.322543	0.979710
H	6.656443	-3.047283	1.667478

Molekula-3-protoniranje-4

scf done: -881.570619

C	6.088537	-5.977196	4.060076
C	6.322137	-5.668642	2.717996
C	5.694548	-6.443721	1.744927
C	4.891785	-7.502765	2.152473
C	4.738061	-7.735518	3.516722
N	5.321664	-6.991069	4.462684
C	7.216733	-4.486012	2.362537
C	6.341495	-3.304400	2.526990
C	6.350460	-2.370603	3.550244
C	5.375422	-1.296403	3.558644
C	5.520806	-0.298460	4.528420
C	6.544807	-0.351144	5.461763
C	7.474420	-1.410395	5.488780
C	7.376692	-2.403752	4.553158

C	4.256857	-1.260155	2.625572
C	3.661847	-0.112415	2.243569
C	2.530702	-0.005083	1.324767
C	1.851167	-1.100650	0.773204
C	0.789335	-0.867457	-0.086009
C	0.433642	0.450726	-0.371889
N	1.064448	1.510976	0.142486
C	2.083520	1.275280	0.967976
H	4.795425	0.504738	4.584713
H	6.616107	0.435841	6.206440
H	8.252606	-1.432462	6.242372
H	8.090712	-3.218567	4.559304
H	5.585317	-3.211753	1.750330
H	3.898917	-2.203545	2.226371
H	8.107433	-4.471763	2.988419
H	4.046260	0.838516	2.608306
H	5.843879	-6.226366	0.691038
H	4.393253	-8.139140	1.430046
H	2.144975	-2.118062	1.012657
H	0.238783	-1.688354	-0.531390
H	-0.395465	0.660215	-1.043330
H	4.115399	-8.555861	3.864961
H	6.553540	-5.373809	4.839453
H	2.587657	2.148036	1.380398
H	7.510141	-4.563170	1.311687

Molekula-3-protoniranje-5

scf done: -881.541976

C	6.542158	-7.143867	3.528492
C	5.946403	-5.899377	3.100547
C	4.940774	-5.974477	2.010496
C	4.658872	-7.341420	1.514844
C	5.296493	-8.411205	2.027003
N	6.243230	-8.305660	3.036522
C	6.365266	-4.729139	3.736504
C	5.838595	-3.487902	3.425156
C	6.233614	-2.232083	3.980571
C	5.506629	-1.046092	3.648656
C	5.971339	0.175856	4.151073
C	7.110160	0.241490	4.941789
C	7.822458	-0.919246	5.272690
C	7.384900	-2.138208	4.801555
C	4.282853	-1.088520	2.838857
C	3.902828	-0.084333	2.030411
C	2.688372	-0.057436	1.211058
C	1.678132	-1.027597	1.259964
C	0.577527	-0.896778	0.426884
C	0.510572	0.200349	-0.430954
N	1.456711	1.142254	-0.491163
C	2.510137	1.005168	0.314296
H	5.411062	1.081876	3.947615
H	7.441581	1.203694	5.319286
H	8.709502	-0.858766	5.893081
H	7.948424	-3.032764	5.040818
H	5.052675	-3.461712	2.674872
H	3.669549	-1.982029	2.907696

H	7.122824	-4.838252	4.506343
H	4.543938	0.790259	1.929474
H	3.997698	-5.502627	2.330727
H	1.746346	-1.869111	1.942700
H	-0.222978	-1.628010	0.438694
H	-0.341666	0.326389	-1.094290
H	7.289115	-7.106388	4.319931
H	3.271361	1.781707	0.254250
H	5.104204	-9.418702	1.676391
H	3.925396	-7.454384	0.723864
H	5.264758	-5.346272	1.164821

Molekula-3-protoniranje-6

scf done: -881.542459

C	5.880756	-7.099090	3.873083
C	5.883510	-5.914574	3.097593
C	5.644035	-6.082402	1.751306
C	5.270849	-7.389409	1.229748
C	5.229535	-8.478542	2.198778
N	5.539552	-8.339368	3.462154
C	6.226044	-4.639934	3.739096
C	5.929724	-3.439295	3.220037
C	6.317372	-2.155193	3.827150
C	5.546181	-0.990304	3.604166
C	5.968658	0.218312	4.176133
C	7.129277	0.290477	4.936416
C	7.893151	-0.857041	5.148124
C	7.487657	-2.064445	4.594360
C	4.299875	-1.045104	2.818964
C	3.838189	-0.025618	2.078299
C	2.591936	-0.022232	1.303482
C	1.628499	-1.038444	1.350944
C	0.491538	-0.930398	0.563918
C	0.339965	0.192815	-0.247610
N	1.239553	1.179355	-0.305261
C	2.328906	1.062053	0.455134
H	5.357911	1.106025	4.043315
H	7.433257	1.238258	5.369206
H	8.804705	-0.809197	5.734991
H	8.102596	-2.949210	4.728484
H	5.365125	-3.388914	2.290762
H	3.739455	-1.976659	2.857931
H	6.721046	-4.719426	4.704547
H	4.427601	0.887610	2.005036
H	5.743930	-5.258741	1.049512
H	4.260712	-7.325024	0.769482
H	1.761784	-1.898792	1.999677
H	-0.273605	-1.698752	0.578180
H	-0.542452	0.303532	-0.873198
H	6.189700	-7.029504	4.915294
H	3.050698	1.875671	0.396658
H	4.911903	-9.462935	1.862023
H	5.870650	-7.667657	0.344806

Molekula-3-protoniranje-7

scf done: -881.552412

C	6.443162	-7.159444	3.574703
C	5.876473	-5.903395	3.058979
C	4.955029	-5.996339	1.976451
C	4.640381	-7.227542	1.504226
C	5.222349	-8.456739	2.067534
N	6.162479	-8.329081	3.144012
C	6.302112	-4.717812	3.683600
C	5.804457	-3.474873	3.357049
C	6.212039	-2.223216	3.929322
C	5.485598	-1.032410	3.625654
C	5.953185	0.180111	4.148635
C	7.098952	0.232370	4.930472
C	7.813029	-0.934197	5.230081
C	7.369385	-2.144925	4.739298
C	4.254126	-1.058160	2.824168
C	3.868828	-0.040347	2.036330
C	2.645009	0.003911	1.230949
C	1.633071	-0.964629	1.274008
C	0.523002	-0.816517	0.456361
C	0.448222	0.296191	-0.380412
N	1.395874	1.236895	-0.434609
C	2.458513	1.082768	0.355675
H	5.389892	1.088968	3.966690
H	7.433671	1.187192	5.323410
H	8.707000	-0.887416	5.841836
H	7.937454	-3.042925	4.954242
H	5.031397	-3.424511	2.596190
H	3.638388	-1.950801	2.884912
H	7.037975	-4.824612	4.474602
H	4.510943	0.834471	1.943702
H	4.519893	-5.109514	1.532061
H	3.940688	-7.340583	0.680866
H	1.707299	-1.818387	1.940723
H	-0.278992	-1.546201	0.464494
H	-0.411606	0.436281	-1.031022
H	4.411704	-9.125423	2.401377
H	7.157423	-7.073917	4.393981
H	3.220789	1.858686	0.300744
H	5.701639	-9.037599	1.262703

Molekula-3-protoniranje-8

scf done: -881.626253

C	5.788925	-7.102979	3.858244
C	5.700417	-5.942618	3.095356
C	5.256467	-6.081813	1.769670
C	4.900329	-7.325285	1.263635
C	5.000415	-8.441648	2.073920
N	5.441901	-8.285581	3.331211
C	6.080667	-4.668833	3.713450
C	5.835318	-3.460597	3.183990
C	6.259303	-2.190744	3.796789
C	5.523371	-1.002544	3.576501
C	5.977357	0.190219	4.157659
C	7.135837	0.225007	4.923756
C	7.865520	-0.945143	5.132197
C	7.428009	-2.137481	4.570153

C	4.278381	-1.018727	2.787739
C	3.839709	0.019951	2.059824
C	2.593998	0.061272	1.285305
C	1.615908	-0.941917	1.304839
C	0.479988	-0.794852	0.522667
C	0.344253	0.352892	-0.256772
N	1.258511	1.327014	-0.288204
C	2.346626	1.172224	0.467236
H	5.392617	1.095769	4.028141
H	7.464434	1.161120	5.363901
H	8.775288	-0.926773	5.723523
H	8.016559	-3.040258	4.702526
H	5.289816	-3.389101	2.245513
H	3.697419	-1.938000	2.814137
H	6.568886	-4.750506	4.682045
H	4.447975	0.921654	1.999548
H	5.198737	-5.211946	1.123808
H	4.555476	-7.437493	0.243570
H	1.737514	-1.823211	1.927296
H	-0.296153	-1.552203	0.515988
H	-0.536996	0.494145	-0.877842
H	4.752204	-9.448653	1.765306
H	6.131656	-7.113262	4.885897
H	3.080520	1.976240	0.430488
H	5.522970	-9.114146	3.920605

Molekula-3-protoniranje-9

scf done: -881.550626

C	6.332398	-7.174538	3.651359
C	5.789976	-5.898084	3.112625
C	4.880635	-5.974054	2.017598
C	4.544656	-7.200720	1.541244
C	5.097253	-8.419542	2.118843
N	5.927953	-8.432163	3.092345
C	6.222201	-4.705163	3.726689
C	5.755925	-3.463541	3.370291
C	6.175572	-2.207799	3.937213
C	5.463796	-1.013414	3.623169
C	5.939817	0.198188	4.140733
C	7.082813	0.245557	4.927409
C	7.782971	-0.925739	5.236110
C	7.328866	-2.136103	4.749979
C	4.234735	-1.031932	2.815513
C	3.869403	-0.020942	2.010291
C	2.648611	0.031738	1.200046
C	1.617900	-0.915884	1.258377
C	0.513081	-0.762266	0.434532
C	0.461952	0.335316	-0.423623
N	1.427777	1.256323	-0.492690
C	2.485117	1.096913	0.303770
H	5.385244	1.110526	3.948942
H	7.425374	1.199626	5.315330
H	8.675358	-0.885139	5.850772
H	7.888352	-3.038130	4.971236
H	5.003804	-3.406578	2.589474
H	3.603855	-1.913181	2.889283

H	6.938664	-4.813206	4.535915
H	4.526873	0.841250	1.906589
H	4.467046	-5.081801	1.563615
H	3.854712	-7.296654	0.708923
H	1.673542	-1.757750	1.941829
H	-0.302852	-1.476122	0.454374
H	-0.393278	0.479488	-1.079390
H	4.788677	-9.372673	1.694201
H	6.131434	-7.207290	4.734850
H	3.262270	1.856942	0.236302
H	7.433379	-7.126440	3.609943

Molekula-4-protoniranje-1

scf done: -1004.279564

C	6.377790	0.687212	-6.222033
C	6.530706	0.556988	-4.831036
C	7.828376	0.468805	-4.293513
C	8.934052	0.510341	-5.130108
C	8.767525	0.639859	-6.511580
C	7.487806	0.728281	-7.056807
C	5.330145	0.521335	-4.013811
C	5.255367	0.396754	-2.660980
C	3.985728	0.384857	-2.021580
C	3.837864	0.279379	-0.658067
C	2.592819	0.260258	0.016182
C	2.571885	0.220645	1.470291
C	1.371213	0.138508	2.107403
C	0.078844	0.067899	1.406125
C	0.163290	0.153036	-0.061602
C	1.346541	0.252655	-0.703912
C	3.823359	0.301928	2.246945
C	4.042022	-0.391800	3.376868
C	5.245310	-0.253862	4.177263
C	5.441568	-0.955870	5.307766
C	6.608470	-0.886283	6.195786
C	7.695355	-0.025645	5.967966
C	8.773514	-0.000714	6.843999
C	8.792475	-0.831358	7.965997
C	7.720984	-1.688637	8.204919
C	6.640836	-1.714413	7.327533
H	1.359681	0.300245	-1.785438
H	-0.763317	0.126144	-0.626882
H	-0.447193	-0.858648	1.695136
H	1.346867	0.142141	3.193697
H	4.742863	0.200135	-0.064676
H	3.118079	0.475507	-2.671239
H	4.590597	0.987141	1.892148
H	3.295284	-1.104711	3.727591
H	7.699038	0.631377	5.103584
H	9.604632	0.671093	6.652700
H	9.636474	-0.807558	8.648084
H	7.725060	-2.338283	9.074646
H	5.805184	-2.383487	7.515448
H	5.989756	0.455773	3.820062
H	4.663957	-1.654127	5.617977

H	7.972668	0.368721	-3.222764
H	9.931664	0.442069	-4.708739
H	9.637283	0.672168	-7.160245
H	7.356622	0.829061	-8.129108
H	5.376422	0.755507	-6.638070
H	6.143153	0.307237	-2.040222
H	4.391692	0.606400	-4.561616
H	-0.591996	0.854369	1.789394

Molekula-4-protoniranje-2

scf done: -1004.276948

C	6.535013	1.626255	-6.045218
C	6.553582	0.850372	-4.876705
C	7.681563	0.051757	-4.623968
C	8.750361	0.036538	-5.511584
C	8.718567	0.815076	-6.670108
C	7.605866	1.610275	-6.934044
C	5.394683	0.907828	-3.978124
C	5.245643	0.256475	-2.810177
C	4.047058	0.380389	-2.002266
C	3.879238	-0.259324	-0.831023
C	2.650561	-0.187438	-0.023708
C	2.684699	-0.235416	1.397967
C	1.398016	-0.232156	2.149807
C	0.148408	-0.109383	1.375621
C	0.164166	-0.034629	0.025833
C	1.413803	-0.099197	-0.652929
C	3.923084	-0.274442	2.091081
C	4.035917	-0.387817	3.451734
C	5.290164	-0.424236	4.129966
C	5.333929	-0.549474	5.481115
C	6.521046	-0.606770	6.321672
C	7.828501	-0.544212	5.806372
C	8.920417	-0.605102	6.660414
C	8.730663	-0.729000	8.039113
C	7.440584	-0.792334	8.562579
C	6.344691	-0.731792	7.709680
H	1.398472	-0.100819	-1.739808
H	-0.748836	0.044404	-0.552190
H	1.413230	0.559359	2.914038
H	4.686831	-0.884112	-0.456799
H	3.265915	1.039244	-2.382495
H	4.837640	-0.204509	1.511374
H	3.144815	-0.463949	4.073526
H	7.991626	-0.448900	4.737785
H	9.925455	-0.556396	6.253970
H	9.589089	-0.776545	8.701776
H	7.289498	-0.888916	9.632768
H	5.335970	-0.780755	8.110558
H	6.194274	-0.350448	3.530601
H	4.384111	-0.616742	6.011728
H	7.724759	-0.564397	-3.731074
H	9.613914	-0.586789	-5.300811
H	9.555599	0.799114	-7.360963
H	7.570519	2.218757	-7.832356
H	5.667066	2.246731	-6.252519

H	6.028074	-0.395883	-2.426023
H	4.580159	1.550742	-4.312349
H	-0.781870	-0.095239	1.934733
H	1.331505	-1.155143	2.751242

Molekula-4-protoniranje-3

scf done: -1004.293821

C	6.170555	1.439775	-6.555810
C	6.343137	0.783381	-5.327980
C	7.529522	0.059626	-5.120986
C	8.501748	-0.004462	-6.111620
C	8.314947	0.651767	-7.329739
C	7.144741	1.375253	-7.547781
C	5.279730	0.884626	-4.321638
C	5.249671	0.287069	-3.116029
C	4.144890	0.451676	-2.190500
C	4.109071	-0.134098	-0.978686
C	3.005992	-0.011543	-0.014031
C	3.227304	-0.185761	1.370293
C	2.166974	-0.012637	2.262128
C	0.887244	0.299475	1.810801
C	0.656824	0.444740	0.445547
C	1.706681	0.289296	-0.451328
C	4.620411	-0.500403	1.885130
C	4.664286	-1.007874	3.273301
C	5.540489	-0.567491	4.224729
C	5.515535	-1.178966	5.485995
C	6.332787	-0.869008	6.601349
C	7.320223	0.147278	6.567449
C	8.082176	0.397299	7.691548
C	7.875742	-0.353179	8.856665
C	6.907252	-1.358713	8.907642
C	6.138209	-1.617386	7.787272
H	1.516116	0.381756	-1.516128
H	-0.338479	0.673568	0.078081
H	0.078115	0.424934	2.523007
H	2.340206	-0.110348	3.330746
H	4.969370	-0.732794	-0.685521
H	3.329099	1.096844	-2.515432
H	5.293720	0.354459	1.763339
H	3.975840	-1.813637	3.531273
H	7.478885	0.728119	5.665243
H	8.839421	1.173026	7.675096
H	8.479893	-0.148433	9.735176
H	6.760855	-1.929850	9.817322
H	5.379239	-2.394101	7.801196
H	6.231039	0.238150	3.996977
H	4.788428	-1.978310	5.628340
H	7.695972	-0.454808	-4.179495
H	9.412296	-0.568417	-5.933499
H	9.077566	0.599165	-8.100365
H	6.989468	1.890477	-8.490697
H	5.258047	2.004728	-6.727961
H	6.067402	-0.354135	-2.789418
H	4.432853	1.510446	-4.603635
H	5.045941	-1.323743	1.287404

Molekula-4-protoniranje-4

scf done: -1004.281456

C	7.071317	2.079630	-5.155663
C	6.787445	0.980369	-4.330879
C	7.455279	-0.232298	-4.572286
C	8.372518	-0.336150	-5.609719
C	8.642876	0.764759	-6.425437
C	7.989881	1.973729	-6.195033
C	5.808939	1.150174	-3.256686
C	5.363896	0.200974	-2.406176
C	4.389359	0.506233	-1.389173
C	3.932998	-0.411985	-0.503482
C	2.948114	-0.124686	0.522190
C	2.804768	-0.944127	1.708690
C	1.768418	-0.646568	2.652761
C	0.934163	0.422265	2.470111
C	1.094906	1.227926	1.323395
C	2.064964	0.958388	0.375417
C	3.706158	-1.973950	1.961969
C	3.790033	-2.835740	3.154454
C	5.029543	-2.250490	3.822374
C	4.949796	-1.168743	4.608974
C	6.057283	-0.512378	5.316811
C	7.384311	-0.966412	5.248309
C	8.391998	-0.300365	5.934179
C	8.096940	0.828640	6.701150
C	6.784235	1.287480	6.778348
C	5.773490	0.620288	6.092306
H	2.113540	1.574647	-0.514737
H	0.426969	2.069659	1.167620
H	4.339801	-1.416269	-0.568974
H	4.045256	1.538143	-1.342946
H	4.511995	-2.135778	1.250496
H	3.983740	-3.868035	2.853519
H	7.632187	-1.842965	4.657686
H	9.413531	-0.662319	5.872190
H	8.888172	1.345528	7.234998
H	6.546024	2.163852	7.372773
H	4.748611	0.977063	6.151589
H	5.976678	-2.724501	3.582569
H	3.967909	-0.718292	4.764794
H	7.260511	-1.095844	-3.944041
H	8.881764	-1.278685	-5.784538
H	9.360854	0.678065	-7.234896
H	8.195953	2.833976	-6.824016
H	6.560965	3.021789	-4.973753
H	5.722578	-0.824900	-2.461870
H	5.403821	2.156589	-3.151955
H	0.154998	0.646961	3.188965
H	1.652931	-1.272856	3.529165
H	2.919919	-2.794857	3.806534

Molekula-4-protoniranje-5

scf done: -1004.287821

C	7.470567	2.398777	-3.707134
---	----------	----------	-----------

C	7.237485	1.367884	-2.784652
C	8.274354	0.454852	-2.525258
C	9.498782	0.575274	-3.170675
C	9.716003	1.605733	-4.087516
C	8.696997	2.517489	-4.353821
C	5.927739	1.295378	-2.129677
C	5.528861	0.365405	-1.241032
C	4.222721	0.392562	-0.618607
C	3.864867	-0.491903	0.335394
C	2.580455	-0.480518	1.032215
C	2.432053	-1.002092	2.359849
C	1.193009	-0.884079	3.039453
C	0.108340	-0.301140	2.424772
C	0.248309	0.197586	1.119619
C	1.454235	0.112976	0.441577
C	3.547585	-1.592867	3.003699
C	3.770655	-1.746693	4.371993
C	5.286943	-1.217507	4.716812
C	6.150829	-0.664220	3.632920
C	7.082301	-1.458541	2.960983
C	7.834493	-0.922586	1.914797
C	7.656108	0.404295	1.532169
C	6.731730	1.204373	2.207511
C	5.989202	0.675016	3.256164
C	4.940228	-2.621976	4.852938
H	1.522520	0.496382	-0.570509
H	-0.605162	0.652689	0.626617
H	4.613882	-1.223410	0.630154
H	3.545963	1.190208	-0.921307
H	4.376389	-1.896285	2.371245
H	7.223655	-2.494885	3.252357
H	8.557621	-1.546288	1.398585
H	8.232053	0.816667	0.708757
H	6.587771	2.238402	1.910332
H	5.259234	1.289984	3.776192
H	5.319460	-3.325843	4.119633
H	5.181320	-0.590102	5.597941
H	8.125585	-0.353982	-1.815693
H	10.289660	-0.137510	-2.958670
H	10.674252	1.695336	-4.589347
H	8.856768	3.322148	-5.064700
H	6.675762	3.110578	-3.914052
H	6.193360	-0.442381	-0.939067
H	5.226442	2.085616	-2.397651
H	-0.845032	-0.234390	2.936302
H	1.096445	-1.293703	4.039424
H	3.032277	-1.438762	5.100505
H	4.777282	-3.016750	5.849264

Molekula-4-protoniranje-6

scf done: -1004.295900

C	6.598704	1.363925	-5.954606
C	6.716932	0.997417	-4.605324
C	8.003382	0.889616	-4.049890
C	9.128723	1.141386	-4.823886
C	8.996248	1.504978	-6.165660

C	7.726927	1.615571	-6.728981
C	5.494147	0.746425	-3.839539
C	5.413358	0.371246	-2.546493
C	4.142725	0.152892	-1.897574
C	4.036560	-0.203991	-0.597013
C	2.773264	-0.437071	0.087058
C	2.654512	-0.375780	1.521058
C	1.401221	-0.662180	2.138117
C	0.297568	-0.973714	1.385610
C	0.415630	-1.021168	-0.016150
C	1.620765	-0.765973	-0.646077
C	3.752691	0.023737	2.308088
C	3.809149	0.118595	3.713009
C	4.964339	0.562434	4.285877
C	5.181803	0.686414	5.750143
C	6.292813	-0.270265	6.156163
C	6.017461	-1.635139	6.278410
C	7.026441	-2.527325	6.631455
C	8.322293	-2.063094	6.854328
C	8.604036	-0.704599	6.722966
C	7.593377	0.188423	6.371911
H	1.681051	-0.858529	-1.724141
H	-0.450727	-1.279723	-0.617248
H	4.957654	-0.315943	-0.033141
H	3.252888	0.313591	-2.504484
H	4.666596	0.311711	1.795122
H	5.006237	-1.994092	6.102483
H	6.801580	-3.584575	6.732294
H	9.109181	-2.757885	7.130549
H	9.610849	-0.337838	6.897022
H	7.810757	1.248602	6.273184
H	4.259068	0.468518	6.293618
H	8.126613	0.609472	-3.008451
H	10.115785	1.054710	-4.380528
H	9.879168	1.700894	-6.765923
H	7.614780	1.897856	-7.771081
H	5.607936	1.449766	-6.392821
H	6.307526	0.220262	-1.944764
H	4.563432	0.881446	-4.390808
H	-0.653096	-1.185037	1.861253
H	1.316010	-0.617799	3.217451
H	2.966205	-0.146546	4.343189
H	5.807072	0.818953	3.642961
H	5.491197	1.714658	5.971243

Molekula-4-protoniranje-7

scf done: -1004.277262

C	6.636181	1.394487	-5.981234
C	6.623169	0.754529	-4.732841
C	7.784602	0.082257	-4.316231
C	8.915009	0.056365	-5.123499
C	8.913710	0.698642	-6.363260
C	7.768845	1.367897	-6.789512
C	5.400857	0.818372	-3.923581
C	5.210291	0.274614	-2.707077
C	3.957530	0.394839	-1.987294

C	3.759709	-0.135594	-0.765112
C	2.495732	-0.061516	-0.018405
C	2.470424	-0.097920	1.400237
C	1.232208	-0.063188	2.067123
C	0.039966	0.008406	1.365193
C	0.063551	0.042125	-0.031197
C	1.274769	0.001428	-0.707736
C	3.713772	-0.112907	2.163392
C	3.844824	-0.479416	3.463318
C	5.114430	-0.411543	4.114548
C	5.298395	-0.772951	5.420326
C	6.541253	-0.715533	6.109806
C	7.741167	-0.243163	5.546148
C	8.898148	-0.226179	6.293991
C	8.965280	-0.668540	7.652149
C	7.841398	-1.128457	8.246329
C	6.558059	-1.185374	7.519940
H	1.280094	-0.013236	-1.792995
H	-0.864768	0.089178	-0.591646
H	4.588176	-0.665102	-0.299761
H	3.163171	0.957966	-2.476622
H	4.615259	0.211532	1.647645
H	7.769572	0.115725	4.524402
H	9.807240	0.144479	5.828467
H	9.910608	-0.625175	8.179792
H	7.846609	-1.471887	9.276135
H	6.170159	-2.218046	7.551669
H	7.806213	-0.424360	-3.356125
H	9.803589	-0.467816	-4.785289
H	9.799384	0.675695	-6.990303
H	7.756668	1.870133	-7.751877
H	5.743508	1.917199	-6.314846
H	6.004497	-0.283460	-2.213529
H	4.574265	1.368270	-4.373864
H	-0.903807	0.042660	1.899216
H	1.212069	-0.057472	3.152127
H	2.997494	-0.841476	4.040605
H	5.950942	-0.055812	3.515473
H	4.441320	-1.135358	5.984171
H	5.791988	-0.630504	8.087999

Molekula-4-protoniranje-8

scf done: -1004.263592

C	6.642257	1.355022	-5.989937
C	6.612469	0.726415	-4.736083
C	7.772047	0.066940	-4.294478
C	8.916795	0.043884	-5.081521
C	8.932392	0.676000	-6.326349
C	7.789307	1.331551	-6.777999
C	5.376697	0.789218	-3.946588
C	5.178591	0.272023	-2.720012
C	3.918357	0.389887	-2.011348
C	3.724712	-0.108243	-0.775521
C	2.460565	-0.037187	-0.026582
C	2.452158	-0.030709	1.390083
C	1.220884	0.009758	2.062680

C	0.018865	0.034708	1.368409
C	0.026400	0.024561	-0.027030
C	1.234842	-0.014785	-0.709950
C	3.711972	-0.013577	2.147567
C	3.871642	-0.462456	3.406716
C	5.141667	-0.373338	4.101533
C	5.316555	-0.809944	5.360872
C	6.564072	-0.751362	6.130460
C	7.764839	-0.190632	5.622818
C	8.968367	-0.128799	6.342121
C	9.014404	-0.628130	7.616313
C	7.824843	-1.216286	8.218616
C	6.609744	-1.251069	7.413927
H	1.235750	-0.059160	-1.794864
H	-0.907330	0.038705	-0.580264
H	4.561964	-0.606207	-0.290147
H	3.116248	0.924516	-2.519923
H	4.581878	0.407538	1.646825
H	7.764143	0.220627	4.616760
H	9.841620	0.314788	5.879383
H	9.927393	-0.595976	8.202435
H	8.058636	-2.236319	8.583124
H	7.780535	-0.432820	-3.330607
H	9.803314	-0.470581	-4.723394
H	9.829197	0.655566	-6.937477
H	7.789643	1.825683	-7.744662
H	5.751377	1.867417	-6.343848
H	5.976866	-0.260330	-2.204553
H	4.549111	1.317014	-4.420819
H	-0.920005	0.070419	1.911715
H	1.212354	0.054949	3.147493
H	3.043649	-0.920723	3.945809
H	5.963085	0.073565	3.543365
H	4.473980	-1.253454	5.888411
H	5.720557	-1.689644	7.859587
H	7.614857	-0.716811	9.185337

Molekula-4-protoniranje-9

scf done: -1004.281645

C	6.634486	1.393928	-5.977160
C	6.624263	0.754894	-4.728272
C	7.786287	0.082379	-4.313688
C	8.914723	0.055261	-5.123607
C	8.910679	0.696539	-6.363899
C	7.765200	1.366071	-6.788082
C	5.403906	0.819683	-3.916419
C	5.215371	0.275273	-2.699755
C	3.963692	0.395891	-1.978847
C	3.766894	-0.136455	-0.757032
C	2.504114	-0.062625	-0.009748
C	2.477026	-0.111219	1.409682
C	1.237796	-0.080747	2.077559
C	0.047109	0.001728	1.376217
C	0.072597	0.048808	-0.020406
C	1.283071	0.010379	-0.697942
C	3.716635	-0.132167	2.171278

C	3.845112	-0.477408	3.480948
C	5.115021	-0.414273	4.119402
C	5.301595	-0.759231	5.435555
C	6.540231	-0.707897	6.120227
C	7.760017	-0.241386	5.516248
C	8.911165	-0.221848	6.224396
C	8.987579	-0.667413	7.629392
C	7.710903	-1.128971	8.207316
C	6.564654	-1.142933	7.490997
H	1.287081	0.004800	-1.783160
H	-0.855408	0.103721	-0.580674
H	4.595452	-0.667797	-0.294409
H	3.169629	0.960510	-2.466792
H	4.623568	0.168658	1.651026
H	7.755387	0.101770	4.488950
H	9.826742	0.132403	5.759856
H	9.407195	0.140054	8.252634
H	7.809871	-0.423377	-3.353185
H	9.803879	-0.469038	-4.787134
H	9.794841	0.672589	-6.993036
H	7.751063	1.867477	-7.750839
H	5.741238	1.916762	-6.309014
H	6.009810	-0.283854	-2.207884
H	4.576781	1.370410	-4.364682
H	-0.897164	0.033329	1.909284
H	1.216806	-0.087055	3.162428
H	2.995237	-0.816417	4.067669
H	5.951327	-0.079396	3.508681
H	4.440634	-1.103421	6.003645
H	5.635523	-1.486911	7.933893
H	7.714999	-1.464477	9.240169
H	9.745808	-1.463066	7.723983

Molekula-4-protoniranje-10

scf done: -1004.262924

C	6.628079	1.347397	-6.007599
C	6.602425	0.724080	-4.751018
C	7.764789	0.070035	-4.308662
C	8.908215	0.047092	-5.097626
C	8.919687	0.673921	-6.345167
C	7.773814	1.324061	-6.797579
C	5.367787	0.786248	-3.959700
C	5.173669	0.274061	-2.730384
C	3.914079	0.389965	-2.020281
C	3.724456	-0.103860	-0.782093
C	2.461253	-0.035918	-0.031375
C	2.455326	-0.027160	1.385271
C	1.225243	0.008990	2.060241
C	0.021831	0.027919	1.368177
C	0.026886	0.015775	-0.027258
C	1.234175	-0.019677	-0.712457
C	3.716236	-0.003070	2.140632
C	3.880614	-0.453410	3.398760
C	5.150529	-0.356318	4.091724
C	5.334154	-0.795625	5.348833
C	6.591247	-0.720039	6.104023

C	7.759418	-0.164876	5.625355
C	8.975466	-0.119690	6.428151
C	8.926744	-0.683180	7.771730
C	7.766899	-1.231371	8.247115
C	6.631027	-1.242659	7.421531
H	1.233105	-0.065876	-1.797290
H	-0.907926	0.025251	-0.578764
H	4.564648	-0.596140	-0.295990
H	3.108959	0.918933	-2.530007
H	4.582582	0.424783	1.639394
H	7.811699	0.262315	4.628059
H	9.341358	0.925255	6.477744
H	9.828224	-0.653576	8.375430
H	7.776441	-0.425680	-3.342740
H	9.796906	-0.463206	-4.738916
H	9.815454	0.653549	-6.957818
H	7.770936	1.814031	-7.766351
H	5.734999	1.855511	-6.362136
H	5.974839	-0.252850	-2.213816
H	4.537470	1.308736	-4.435028
H	-0.916183	0.060515	1.913146
H	1.218799	0.055718	3.145012
H	3.056572	-0.918771	3.937826
H	5.969071	0.100193	3.536291
H	4.498760	-1.248973	5.879176
H	5.716635	-1.681780	7.815394
H	7.707786	-1.654426	9.242612
H	9.808101	-0.580536	5.860631

Molekula-4-protoniranje-11

scf done: -1004.278090

C	6.671636	1.385598	-5.936970
C	6.642149	0.748797	-4.687267
C	7.798358	0.078451	-4.253304
C	8.939748	0.051628	-5.044903
C	8.954895	0.691022	-6.286069
C	7.815331	1.358113	-6.729584
C	5.409194	0.814032	-3.894337
C	5.204826	0.275297	-2.677832
C	3.944153	0.395764	-1.972075
C	3.736873	-0.129774	-0.749278
C	2.467346	-0.057268	-0.012289
C	2.433113	-0.094293	1.406259
C	1.190804	-0.064872	2.065683
C	0.002871	0.003399	1.356080
C	0.035251	0.038794	-0.040150
C	1.250764	0.002540	-0.709349
C	3.671782	-0.103375	2.176394
C	3.801408	-0.482837	3.473118
C	5.068808	-0.409622	4.127046
C	5.265873	-0.788493	5.425895
C	6.516021	-0.718596	6.097554
C	7.749751	-0.212632	5.436111
C	8.983908	-0.183017	6.250306
C	9.001900	-0.600797	7.536380
C	7.790938	-1.081681	8.122921

C	6.596346	-1.139268	7.436596
H	1.262974	-0.011187	-1.794585
H	-0.889712	0.083567	-0.606307
H	4.563066	-0.654893	-0.274989
H	3.153045	0.954307	-2.471800
H	4.572328	0.236011	1.668572
H	7.948612	-0.803821	4.527310
H	9.882304	0.188523	5.766979
H	9.909532	-0.578747	8.127595
H	7.807178	-0.426082	-3.291919
H	9.824029	-0.471022	-4.693305
H	9.849129	0.667428	-6.900825
H	7.815900	1.858011	-7.693240
H	5.783162	1.906677	-6.284074
H	5.994468	-0.278865	-2.172620
H	4.587600	1.360725	-4.357449
H	-0.944452	0.034092	1.883993
H	1.164273	-0.059690	3.150588
H	2.956664	-0.862630	4.042850
H	5.902061	-0.030312	3.536422
H	4.423370	-1.168515	5.999019
H	5.703787	-1.510730	7.929091
H	7.813894	-1.416408	9.156278
H	7.568391	0.797891	5.036150

Molekula-5-protoniranje-1

scf done: -1953.545769

C	3.116687	-1.697031	0.550949
C	3.553157	-0.432494	0.183655
C	4.969616	-0.412271	-0.150424
C	5.566452	-1.639199	-0.035044
S	4.412390	-2.824534	0.485301
C	2.760731	0.767357	0.258000
C	1.397227	0.870871	0.229271
C	0.708995	2.120617	0.318151
C	-0.739825	2.120437	0.365675
C	-1.397518	3.314721	0.385338
C	-0.717560	4.615490	0.336536
C	0.750059	4.551540	0.322446
C	1.412601	3.372662	0.324633
C	-1.509004	0.858744	0.438156
C	-2.657805	0.684710	-0.230111
C	-3.514068	-0.507556	-0.165648
C	-4.963423	-0.466434	-0.246978
C	-5.538158	-1.716343	-0.253681
S	-4.324096	-2.939792	-0.157685
C	-3.027748	-1.790052	-0.122016
C	-5.825028	0.748152	-0.231968
O	-6.965170	0.697772	-0.665191
C	-6.981831	-2.110846	-0.304238
C	-1.610195	-2.268953	-0.092919
C	5.744824	0.743608	-0.693665
O	6.948952	0.802135	-0.516049
C	6.978666	-2.055571	-0.302437
C	1.772194	-2.156650	1.011476

C	-5.307103	2.036078	0.369549
C	5.045578	1.799174	-1.521228
H	1.301616	5.486289	0.300203
H	-1.061235	5.244907	1.174755
H	-2.482374	3.321834	0.455525
H	2.494665	3.380974	0.298612
H	-2.997194	1.481629	-0.889873
H	-1.141058	0.087899	1.111880
H	0.791617	-0.015853	0.087148
H	3.341933	1.677440	0.360137
H	-6.161273	2.596324	0.753671
H	-4.578328	1.865429	1.164423
H	-4.832249	2.639156	-0.412117
H	-7.109402	-3.160694	-0.031076
H	-7.571290	-1.492138	0.375979
H	-7.386278	-1.960507	-1.308590
H	-1.511289	-3.248847	-0.566871
H	-0.968026	-1.560507	-0.625641
H	-1.238687	-2.354165	0.934107
H	5.739181	2.131838	-2.295840
H	4.121563	1.439488	-1.977742
H	4.814332	2.665405	-0.891332
H	7.048049	-3.136168	-0.444107
H	7.360283	-1.553939	-1.193891
H	7.624065	-1.772892	0.533599
H	1.835968	-3.124807	1.511959
H	1.334430	-1.434369	1.707883
H	1.095583	-2.260269	0.157444
H	-1.072674	5.182018	-0.542972

Molekula-5-protoniranje-2

scf done: -1953.543833

C	3.059802	-1.768848	0.112992
C	3.545907	-0.485283	0.155046
C	4.994602	-0.443241	0.245892
C	5.569917	-1.692650	0.260990
S	4.356919	-2.916832	0.161539
C	2.688994	0.705775	0.210768
C	1.529079	0.858806	-0.444153
C	0.725360	2.095285	-0.367169
C	-0.687818	2.068444	-0.337707
C	-1.431803	3.355910	-0.353412
C	-0.650284	4.603779	-0.328620
C	0.703793	4.585595	-0.314334
C	1.368968	3.332016	-0.356889
C	-1.384672	0.820002	-0.259219
C	-2.744821	0.739819	-0.284840
C	-3.560775	-0.448795	-0.199940
C	-4.970424	-0.405029	0.156375
C	-5.588043	-1.624453	0.059276
S	-4.460579	-2.830796	-0.466103
C	-3.148834	-1.719860	-0.562797
C	-5.719518	0.766346	0.700858
O	-6.925555	0.843299	0.542095
C	-7.002930	-2.015438	0.351134
C	-1.815485	-2.201111	-1.035988

C	5.855675	0.771904	0.233310
O	6.992057	0.723546	0.676386
C	7.013343	-2.086395	0.322754
C	1.643686	-2.253926	0.078936
C	-4.992518	1.818841	1.509386
C	5.342623	2.057255	-0.377738
H	1.287657	5.497985	-0.302454
H	-1.205855	5.536205	-0.333268
H	-2.150055	3.382734	0.482013
H	2.455756	3.334273	-0.403903
H	-3.303213	1.666197	-0.386995
H	-0.783340	-0.070369	-0.119509
H	1.162996	0.074129	-1.101689
H	3.032346	1.511752	0.857286
H	-5.666492	2.161554	2.296906
H	-4.062818	1.451832	1.948411
H	-4.766969	2.679901	0.870298
H	-7.087693	-3.093598	0.502940
H	-7.363243	-1.500636	1.243987
H	-7.656813	-1.729471	-0.477179
H	-1.899785	-3.167559	-1.536962
H	-1.373917	-1.485491	-1.736878
H	-1.129678	-2.316905	-0.190384
H	6.199421	2.613103	-0.762438
H	4.616202	1.884078	-1.174172
H	4.867412	2.666586	0.398868
H	7.143437	-3.136598	0.052154
H	7.607455	-1.468374	-0.354002
H	7.410187	-1.934375	1.329890
H	1.552280	-3.241985	0.537009
H	0.996804	-1.559485	0.624429
H	1.269643	-2.325333	-0.948244
H	-2.088149	3.388667	-1.240387

Molekula-5-protoniranje-3

scf done: -1953.559681

C	1.664918	-1.509221	0.687591
C	2.456185	-0.454761	0.300357
C	3.804100	-0.872990	-0.041700
C	4.001411	-2.227408	0.090758
S	2.550600	-2.998398	0.620371
C	2.025421	0.949543	0.334622
C	0.789708	1.387078	0.051870
C	0.384970	2.806169	0.113449
C	-0.883995	3.173987	0.604480
C	-1.242630	4.520221	0.654115
C	-0.362646	5.510493	0.223952
C	0.893807	5.153369	-0.259240
C	1.259947	3.812383	-0.315960
C	-1.824583	2.119108	1.142032
C	-2.323379	1.181907	0.105992
C	-2.871241	-0.069706	0.269366
C	-3.199239	-0.966433	-0.845443
C	-3.539798	-2.215235	-0.439443
S	-3.534592	-2.311094	1.317925
C	-3.043398	-0.717674	1.535505

C	-3.221274	-0.619614	-2.308440
O	-2.899653	-1.464925	-3.119662
C	-3.910076	-3.434825	-1.217747
C	-2.853509	-0.184077	2.906728
C	4.890482	-0.013995	-0.589887
O	6.057785	-0.353166	-0.478730
C	5.222642	-3.051872	-0.176200
C	0.241521	-1.525783	1.154743
C	-3.710966	0.738306	-2.744932
C	4.543265	1.252647	-1.341036
H	1.585369	5.916538	-0.601820
H	-0.658097	6.553816	0.266723
H	-2.219738	4.792882	1.043594
H	2.230219	3.530685	-0.715979
H	-2.215196	1.533670	-0.919008
H	-1.345363	1.567100	1.957747
H	0.039833	0.661575	-0.260650
H	2.776811	1.676173	0.639137
H	-4.299648	0.606236	-3.654850
H	-4.309161	1.238900	-1.982158
H	-2.851777	1.368937	-2.998547
H	-4.579428	-4.079195	-0.643825
H	-4.396887	-3.151816	-2.151656
H	-3.011105	-4.006315	-1.466714
H	-3.272940	-0.862161	3.651181
H	-1.780866	-0.074672	3.112327
H	-3.321843	0.798375	3.006035
H	5.320123	1.424867	-2.088144
H	3.563328	1.203068	-1.819436
H	4.547571	2.101828	-0.649285
H	4.972288	-4.113555	-0.233875
H	5.692948	-2.745989	-1.113398
H	5.962036	-2.911268	0.616611
H	0.063233	-2.348528	1.852573
H	-0.003242	-0.584464	1.658244
H	-0.446825	-1.646782	0.308822
H	-2.712685	2.596986	1.587600

Molekula-5-protoniranje-4

scf done: -1953.553321

C	-2.546206	-1.780920	0.067674
C	-3.231582	-0.588177	0.026040
C	-4.671810	-0.769220	0.062903
C	-5.043906	-2.089670	0.145319
S	-3.649869	-3.109846	0.170954
C	-2.577543	0.706021	-0.158818
C	-1.400752	1.051299	0.400580
C	-0.751319	2.332031	0.147273
C	0.685274	2.492389	0.247881
C	1.271708	3.785010	0.039486
C	0.490740	4.864232	-0.271302
C	-0.905263	4.693141	-0.376761
C	-1.510765	3.463307	-0.170118
C	1.485843	1.379221	0.445278
C	2.949438	1.317713	0.631768
C	3.555217	0.173700	-0.156658

C	4.443440	-0.837944	0.372542
C	4.754520	-1.810383	-0.550675
S	3.993226	-1.475013	-2.063375
C	3.227000	-0.040030	-1.467685
C	5.090459	-0.858404	1.714861
O	5.430788	-1.916598	2.217023
C	5.633580	-3.015141	-0.414620
C	2.344613	0.776026	-2.366115
C	-5.702665	0.304471	0.126033
O	-6.856384	0.065659	-0.191310
C	-6.407908	-2.700051	0.236424
C	-1.075775	-2.053734	-0.028111
C	5.391744	0.444685	2.421485
C	-5.328101	1.679118	0.633274
H	-1.527243	5.551534	-0.612114
H	0.932533	5.839649	-0.436964
H	2.347128	3.899528	0.106949
H	-2.591699	3.390273	-0.215106
H	3.461014	2.266038	0.458212
H	1.004669	0.403558	0.492593
H	-0.918459	0.357452	1.080831
H	-3.076670	1.405373	-0.826339
H	6.336976	0.326207	2.954876
H	5.455209	1.293619	1.738796
H	4.616527	0.646802	3.168534
H	5.919381	-3.403292	-1.394886
H	6.537388	-2.767416	0.146106
H	5.118280	-3.807647	0.134667
H	2.636024	0.655653	-3.412376
H	1.292201	0.483655	-2.280547
H	2.427553	1.838897	-2.121274
H	-6.216609	2.129000	1.079421
H	-4.514185	1.652288	1.360730
H	-5.019992	2.307590	-0.209404
H	-6.347826	-3.749117	0.534075
H	-7.019807	-2.159053	0.961714
H	-6.919883	-2.638983	-0.727252
H	-0.888035	-3.038620	-0.462327
H	-0.590882	-1.303126	-0.659107
H	-0.598955	-2.026680	0.957047
H	3.036526	1.099921	1.708454

Molekula-5-protoniranje-5

scf done: -1953.545454

C	2.382885	-1.529822	0.202344
C	2.995245	-0.301822	0.265415
C	4.443370	-0.405480	0.262782
C	4.892763	-1.703784	0.190185
S	3.561257	-2.799391	0.118781
C	2.256669	0.960613	0.416673
C	1.102660	1.235382	-0.208428
C	0.338030	2.486663	-0.051576
C	-1.070445	2.470247	-0.154575
C	-1.784177	3.670061	-0.055799
C	-1.123054	4.877195	0.142461
C	0.267360	4.895531	0.250116

C	0.988185	3.710577	0.148791
C	-1.772951	1.184771	-0.316409
C	-2.901898	1.007844	-1.007332
C	-3.563123	-0.364298	-1.086069
C	-4.219592	-0.872684	0.167983
C	-3.851254	-2.115373	0.535081
S	-2.650742	-2.769615	-0.612736
C	-2.617861	-1.409914	-1.558759
C	-5.250825	-0.093116	0.926791
O	-5.663268	-0.515337	1.989925
C	-4.274581	-2.975851	1.679372
C	-1.724586	-1.255716	-2.721270
C	5.416120	0.721464	0.235337
O	6.569667	0.547244	0.595280
C	6.291516	-2.236224	0.140265
C	0.926159	-1.881840	0.237685
C	-5.735137	1.202519	0.336823
C	4.988528	2.073130	-0.291400
H	0.790481	5.834202	0.402918
H	-1.690281	5.799010	0.220995
H	-2.869240	3.647051	-0.107884
H	2.073598	3.731096	0.195899
H	-3.386641	1.819202	-1.540784
H	-1.315869	0.322051	0.171955
H	0.691865	0.500873	-0.898844
H	2.677898	1.693441	1.102968
H	-6.646956	1.506704	0.850834
H	-4.968440	1.971137	0.485526
H	-5.916474	1.113342	-0.737863
H	-3.881401	-3.989651	1.586297
H	-3.917385	-2.542615	2.617013
H	-5.364527	-3.014941	1.727693
H	-1.367390	-2.212352	-3.102674
H	-2.233104	-0.684861	-3.502749
H	-0.859781	-0.660012	-2.394223
H	5.870102	2.571565	-0.698112
H	4.209828	1.999170	-1.052899
H	4.605431	2.683299	0.533436
H	6.300491	-3.280129	-0.181219
H	6.900606	-1.646376	-0.548294
H	6.763320	-2.170618	1.124174
H	0.770701	-2.874322	0.669006
H	0.375820	-1.152503	0.840179
H	0.492957	-1.882825	-0.769975
H	-4.325102	-0.332552	-1.890558

Molekula-5-protoniranje-6

scf done: -1953.552839

C	-2.971738	-1.745388	-0.299173
C	-3.508738	-0.486999	-0.184301
C	-4.960265	-0.511121	-0.121263
C	-5.484267	-1.781037	-0.184367
S	-4.219687	-2.949242	-0.310367
C	-2.720575	0.751679	-0.237152
C	-1.500714	0.936841	0.292478
C	-0.776223	2.221157	0.212670

C	0.635463	2.266894	0.145256
C	1.275798	3.513850	0.079571
C	0.551318	4.697932	0.101812
C	-0.840039	4.654276	0.188212
C	-1.489962	3.427940	0.244847
C	1.422453	1.023188	0.096274
C	2.692254	0.924299	0.529772
C	3.527730	-0.271075	0.463402
C	5.015366	-0.118972	0.406272
C	5.646764	-1.451147	0.484608
S	4.510384	-2.658467	0.482479
C	3.118876	-1.562494	0.483112
C	5.580961	0.574059	-0.922307
O	6.714538	0.965146	-0.905880
C	7.099448	-1.701469	0.559426
C	1.750917	-2.152140	0.556787
C	-5.863318	0.654110	0.090394
O	-7.033921	0.594922	-0.251209
C	-6.909773	-2.236960	-0.133884
C	-1.542530	-2.165908	-0.440078
C	4.650520	0.663637	-2.089987
C	-5.345699	1.894912	0.784095
H	-1.416622	5.573368	0.216573
H	1.068589	5.650211	0.045702
H	2.355896	3.552636	-0.023751
H	-2.571171	3.397047	0.344187
H	3.185933	1.796465	0.955918
H	0.936679	0.156667	-0.347269
H	-1.017799	0.126337	0.834837
H	-3.181012	1.578600	-0.774776
H	5.207922	1.005415	-2.961634
H	4.194127	-0.313687	-2.277256
H	3.843374	1.367414	-1.863303
H	7.337412	-2.764606	0.575132
H	7.596748	-1.216996	-0.288161
H	7.484279	-1.221609	1.466669
H	1.763249	-3.141728	1.019431
H	1.108158	-1.497564	1.153488
H	1.314914	-2.246759	-0.443043
H	-6.178718	2.354111	1.319415
H	-4.525063	1.682251	1.471847
H	-4.991650	2.611261	0.034921
H	-6.969853	-3.309007	0.066707
H	-7.456351	-1.698235	0.643273
H	-7.412759	-2.032010	-1.082607
H	-1.455128	-3.090737	-1.016274
H	-0.969097	-1.385114	-0.949183
H	-1.082646	-2.336614	0.539127
H	5.410335	0.525266	1.204185

Molekula-5-protoniranje-7

scf done: -1953.558940

C	3.046251	-1.741566	0.327117
C	3.524528	-0.459299	0.221310
C	4.973373	-0.418260	0.118522
C	5.554023	-1.664494	0.144683

S	4.345381	-2.889259	0.283354
C	2.690550	0.746399	0.314417
C	1.453529	0.900281	-0.184612
C	0.698901	2.165644	-0.079914
C	-0.712235	2.179197	-0.005413
C	-1.382974	3.408089	0.080392
C	-0.687546	4.610039	0.071149
C	0.703534	4.599709	-0.023157
C	1.382546	3.390132	-0.100580
C	-1.479486	0.920885	0.031500
C	-2.730024	0.811984	-0.441957
C	-3.573551	-0.389140	-0.351290
C	-4.919544	-0.394282	-0.101409
C	-5.591770	-1.719849	-0.135773
S	-4.279799	-2.903985	-0.534504
C	-3.092007	-1.730044	-0.612028
C	-5.809146	0.792831	0.177032
O	-6.982908	0.685619	-0.117636
C	-6.319331	-2.112149	1.159862
C	-1.693868	-2.097686	-0.922596
C	5.818025	0.788974	-0.099884
O	6.998161	0.778231	0.212307
C	6.996363	-2.055360	0.047340
C	1.641108	-2.228058	0.494631
C	-5.249099	2.026073	0.826090
C	5.228964	2.012746	-0.766681
H	1.258394	5.532302	-0.042672
H	-1.226919	5.548893	0.142644
H	-2.463697	3.416220	0.188697
H	2.463311	3.388566	-0.208729
H	-3.198868	1.666694	-0.921469
H	-0.996459	0.065884	0.500539
H	0.980788	0.082065	-0.724512
H	3.136698	1.581610	0.851208
H	-6.048423	2.501091	1.396806
H	-4.396613	1.802559	1.470391
H	-4.923652	2.724021	0.046781
H	-6.745817	-3.111500	1.061754
H	-5.633893	-2.089035	2.009327
H	-7.130915	-1.402551	1.326266
H	-1.621877	-3.079533	-1.391175
H	-1.236288	-1.333057	-1.556090
H	-1.140978	-2.125088	0.025390
H	6.026464	2.511124	-1.320766
H	4.398684	1.771570	-1.433085
H	4.866735	2.707466	-0.001183
H	7.098638	-3.120625	-0.171301
H	7.495795	-1.481896	-0.736681
H	7.516730	-1.840936	0.984480
H	1.608825	-3.165230	1.055967
H	1.045859	-1.482569	1.031141
H	1.167550	-2.403895	-0.477392
H	-6.298106	-1.739768	-0.977820

Molekula-5-protoniranje-8

scf done: -1953.525901

C	2.694425	-1.688400	0.379446
C	3.342768	-0.500788	0.146125
C	4.715554	-0.692419	-0.287176
C	5.067473	-2.019788	-0.386465
S	3.738920	-3.032087	0.046425
C	2.710245	0.802625	0.404268
C	1.451566	1.094706	0.046772
C	0.777762	2.372457	0.344471
C	-0.615919	2.416313	0.580737
C	-1.224696	3.650171	0.852802
C	-0.484454	4.824650	0.879296
C	0.889073	4.782876	0.637210
C	1.508332	3.567917	0.371230
C	-1.402084	1.172702	0.580112
C	-2.722099	1.094646	0.346577
C	-3.468359	-0.165951	0.382843
C	-4.574257	-0.445768	-0.560804
C	-5.213690	-1.615676	-0.381108
S	-4.357294	-2.508149	0.924118
C	-3.271322	-1.137240	1.303877
C	-4.956898	0.452225	-1.715230
O	-6.129372	0.636228	-1.963701
C	-6.340645	-2.291654	-1.078228
C	-2.358780	-1.262567	2.474954
C	5.681925	0.367936	-0.684614
O	6.876841	0.121898	-0.740053
C	6.358538	-2.644340	-0.817160
C	1.311877	-1.937440	0.905018
C	-3.850901	1.038180	-2.552514
C	5.181494	1.744746	-1.057603
H	1.474674	5.696618	0.650005
H	-0.974500	5.768508	1.095142
H	-2.287218	3.683181	1.074267
H	2.572611	3.539931	0.154944
H	-3.297716	1.981579	0.090300
H	-0.855848	0.248525	0.758608
H	0.882968	0.350432	-0.506361
H	3.298912	1.540500	0.946604
H	-4.190637	1.070484	-3.589390
H	-3.656736	2.065522	-2.227099
H	-2.924075	0.467607	-2.471835
H	-6.068545	-3.309869	-1.367222
H	-7.215480	-2.340941	-0.422169
H	-6.609226	-1.721375	-1.967131
H	-2.860193	-1.746880	3.317255
H	-1.468353	-1.848303	2.224008
H	-2.042222	-0.263795	2.783992
H	5.930982	2.216898	-1.694636
H	4.216035	1.713497	-1.566651
H	5.070340	2.352035	-0.152869
H	6.233667	-3.715080	-0.993828
H	6.725096	-2.172922	-1.731758
H	7.127396	-2.503237	-0.053254
H	1.275322	-2.858005	1.493613
H	1.002358	-1.105600	1.544188
H	0.579848	-2.029462	0.095183

H -5.266806 -2.381836 1.928524

Molekula-5-protoniranje-9

scf done: -1953.570491

C -3.608501 -0.543111 1.791562
C -3.591506 -0.012003 0.524914
C -4.580654 -0.622056 -0.346255
C -5.315058 -1.604045 0.276665
S -4.804993 -1.791571 1.915442
C -2.737932 1.119417 0.140861
C -1.455021 1.267285 0.510573
C -0.649635 2.453327 0.169973
C 0.744352 2.365043 -0.088621
C 1.466343 3.537098 -0.386740
C 0.839648 4.770084 -0.436749
C -0.531579 4.856525 -0.182879
C -1.259706 3.713988 0.121941
C 1.399057 1.068535 -0.111091
C 2.745594 0.859120 -0.112255
C 3.323026 -0.443881 -0.171648
C 4.661985 -0.744755 0.087239
C 4.956728 -2.117309 -0.048093
S 3.620360 -3.070699 -0.464478
C 2.518809 -1.631208 -0.622509
C 5.747206 0.212900 0.503785
O 6.879108 0.017442 0.108403
C 6.278085 -2.766419 0.151800
C 2.045414 -1.511305 -2.081637
C -4.781641 -0.349615 -1.796503
O -5.840392 -0.633591 -2.334016
C -6.402870 -2.480260 -0.263149
C -2.812205 -0.163159 3.002065
C 5.429169 1.348349 1.441965
C -3.652550 0.230369 -2.617743
H -1.030547 5.819973 -0.211392
H 1.410806 5.660876 -0.674970
H 2.525906 3.473228 -0.610678
H -2.316151 3.796565 0.356235
H 3.424288 1.699688 -0.038597
H 0.742867 0.201653 -0.111417
H -0.976024 0.475405 1.080341
H -3.196412 1.880700 -0.487711
H 6.287659 1.485228 2.102219
H 5.303057 2.271644 0.866219
H 4.526465 1.170164 2.028008
H 6.186638 -3.851187 0.212891
H 6.924534 -2.503380 -0.691348
H 6.753715 -2.377102 1.055110
H 1.511476 -2.415709 -2.377979
H 1.368919 -0.658871 -2.172525
H 2.898987 -1.359745 -2.746511
H -3.787399 -0.090501 -3.652029
H -3.703025 1.324016 -2.593549
H -2.669893 -0.073358 -2.251976
H -6.598037 -3.319334 0.408452
H -7.327909 -1.911363 -0.387527

H	-6.129131	-2.867864	-1.246952
H	-3.383278	-0.335263	3.917894
H	-1.886298	-0.743128	3.072469
H	-2.541217	0.894856	2.957159
H	1.665041	-1.799158	0.042830

Molekula-5-protoniranje-10

scf done: -1953.579376

C	-3.390170	-1.097255	1.315483
C	-3.527105	-0.156279	0.323700
C	-4.603298	-0.478181	-0.597919
C	-5.247633	-1.653125	-0.288412
S	-4.546156	-2.374328	1.114144
C	-2.736708	1.080547	0.265761
C	-1.431721	1.164472	0.572201
C	-0.650482	2.414426	0.573604
C	0.747566	2.383939	0.362491
C	1.472692	3.582439	0.388838
C	0.842253	4.797631	0.626516
C	-0.535454	4.829630	0.842674
C	-1.267740	3.648958	0.821670
C	1.430647	1.107281	0.086801
C	2.689626	0.823953	0.449723
C	3.309997	-0.486166	0.198157
C	4.669303	-0.706513	-0.288678
C	5.016268	-2.066531	-0.355174
S	3.706983	-3.024352	0.145745
C	2.674443	-1.661519	0.483148
C	5.546472	0.305281	-0.748942
O	6.759607	-0.060139	-1.032417
C	6.274113	-2.727829	-0.810267
C	1.312209	-1.901987	1.057112
C	-4.976596	0.268683	-1.831144
O	-6.093761	0.147933	-2.308752
C	-6.380453	-2.341713	-0.984925
C	-2.464412	-1.126711	2.492704
C	5.188352	1.732102	-0.929039
C	-3.950809	1.134674	-2.526942
H	-1.036744	5.772340	1.037924
H	1.420955	5.715649	0.638585
H	2.541443	3.557594	0.194102
H	-2.333291	3.676681	1.028929
H	3.279690	1.559635	0.992833
H	0.866572	0.352912	-0.457954
H	-0.895061	0.251443	0.820777
H	-3.266558	1.976634	-0.051398
H	5.880182	2.215129	-1.622879
H	4.164574	1.836674	-1.288585
H	5.265987	2.233491	0.043845
H	6.168977	-3.813417	-0.787189
H	6.520428	-2.416990	-1.829610
H	7.108945	-2.437403	-0.166798
H	1.304200	-2.790735	1.693243
H	1.010557	-1.039931	1.657878
H	0.566732	-2.044545	0.267971
H	-4.194675	1.158500	-3.590476

H	-4.013330	2.158499	-2.143475
H	-2.930319	0.776963	-2.379456
H	-6.476719	-3.375308	-0.645040
H	-7.322943	-1.822721	-0.791629
H	-6.225718	-2.335851	-2.066124
H	-2.922224	-1.645141	3.339090
H	-1.526581	-1.640763	2.254990
H	-2.217226	-0.108016	2.803150
H	7.293939	0.683950	-1.376458

5. ZAKLJUČAK

U okviru završnog rada provedeni su kvantno-kemijski proračuni u cilju istraživanja ishoda termičke transformacije novih derivata stilbena u kiselom mediju u pokušaju sinteze indanskih i indenskih produkata. Reaktivnost derivata stilbena istražena je ispitivanjem najpovoljnijeg mjesta protoniranja u strukturi. Rezultati su pokazali da prisutnost elektronegativnog atoma (spojevi **2**, **3** i **5**) može imati utjecaj na ishod reakcije protonirajući se, čime je onemogućen ulazak protona na dvostruku vezu. Spojevi **1** i **4** pokazali su mogućnost protoniranja dvostruke veze, a i time i mogućnost formiranja novih struktura, radi čega su se pokazali interesantni za buduća eksperimentalna istraživanja.

6. LITERATURA

[1] Tantillo, D. J., Applied theoretical organic chemistry, World Scientific Publishing Europe Ltd., 2018, 1-14; 31-78

DOI: <https://doi.org/10.1142/q0119>

[2] Kirste, B., Applications of Density Functional Theory to Theoretical Organic Chemistry, Chemical Science Journal, 7:2 127 (2016) 1-5

DOI:10.4172/2150-3494.1000127

[3] Hui-Wen, S., Fundamentals of Computational Chemistry: A guide for organic chemists, MacMillan Group Meeting, (2009) 1-7; 15-24

https://macmillan.princeton.edu/wp-content/uploads/HWS_computational.pdf (pristup 29. lipnja 2024.)

[4] C. Young, D., Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems, A John Wiley & Sons, Inc., Publication, 1998, 1-39; 61-79; 147-162; 173-177; 296

DOI:10.1002/0471220655

[5] G. Lewars, E., Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics, Springer, 2, 2011, 1-40; 85-103; 152-181; 291-296; 391-396; 437-457; 477; 509-512

DOI 10.1007/978-90-481-3862-3

[6] Cramer, C. J., Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, A John Wiley & Sons, Inc., Publication, 2002, 6-10; 17-19; 105-136; 165-170; 334-338

<http://lqtc.fcien.edu.uy/cursos/Fq2/2009/libros/Essentials%20of%20Computational%20Chemistry%20Theories%20and%20Models%20d%20Ed%20-%20Christopher%20J.%20Cramer.pdf> (pristup 1. srpnja 2024.)

[7] S. Sholl, D., A. Steckel, J., Density Functional Theory: A Practical Introduction, A John Wiley & Sons, Inc., Publication, 2009, 22-42; 228-232

DOI:10.1002/9780470447710

[8] Zettili, N., Quantum mechanics: Concepts and Applications, A John Wiley & Sons, Inc., Publication, 2, 2009, 1-34

DOI: <https://doi.org/10.1119/1.1522702>

[9] Bachrach M., S., Computational Organic Chemistry, Wiley, 2007, 21-23; 207-213

DOI:10.1002/9780470148136

[10] Finocchi, F., Density Functional Theory for Beginners: Basic Principles and Practical Approaches, CNRS and University Pierre et Marie Curie (2011) 14-20
https://www.attacalite.com/wp-content/uploads/2017/04/pdf_DFT4beginners.pdf (pristup 2. srpnja 2024.)

[11] Zhao, Y. & Truhlar, D., Density Functionals with Broad Applicability in Chemistry, Accounts of Chemical Research, (2008)

DOI: 10.1021/ar700111a

[12] Zhao, Y. & Truhlar, D., Applications and validations of the Minnesota density functionals. Elsevier B. V., Chemical Physics Letters – Chemical Physics Letters 502 (2011) 1-13

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2010.11.060>

[13] Zhao, Y., Lynch, B. J., Truhlar, D. G., Development and Assessment of a New Hybrid Density Functional Model for Thermochemical Kinetics, J. Phys. Chem. A, 108 (2004) 4786-4791

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp049908s>

[14] Lovrinčević, V., Vuk, D., Škorić, I., Despotović, I., Mechanistic insights into the thermal transformations of heterocyclic o-distyrylbenzenes: an experimental and computational study, New Journal of Chemistry, 38 (2023)

DOI: 10.1039/d3nj02245e

[15] Znika, M. (2023) Sinteza, karakterizacija i termička transformacija novih stiril-heterocikla te kvantno kemijska studija mehanizma reakcije. Diplomski rad. Zagreb: Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije.