Photochemical Synthesis of Benzoyl Spiro[2.2]pentane

Olaf Muehling, Pablo Wessig *

Humboldt-Universität zu Berlin, Institut für Chemie, Brook-Taylor-Str. 2, 12489 Berlin, Germany. Fax: (+49)30-2093-7450; Tel: (+49)30-2093-7455; E-mail: pablo.wessig@chemie.hu-berlin.de

1 Supplementary Information

1.1.1 Quantum chemical calculations (B3PW91/6-31G*//B3PW91/6-31G*)

The geometry optimization were performed with the *ab initio* program package GAUS-SIAN 98¹, the B3PW91 hybrid functional 2,3,4 , and the 6-31G* basis set. At the same level of theory, frequency calculations were carried out to characterize each structure as minimum (21, 22, 15, 12) or transition state (TS-21, TS-22, TS-15, TS-12) and to obtain the zero-point vibrational energies.

aturativa	$\mathbf{E} \begin{bmatrix} a & a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \end{bmatrix}$	Ε	ZPE	E + ZPE	E [ltool/moll ^[c]
structure	E [a.u.]	[kcal/mol]	[kcal/mol] ^[b]	[kcal/mol]	E _{rel} [KCal/mol]
21	- 541.8378692	- 340008.41	156.81579	- 339851.87	± 0.0
TS-21	- 541.8315906	- 340004.47	153.68497	- 339851.06	+ 3.9 (+ 0.8)
22	- 1204.7942852	- 756019.86	183.58912	- 755836.87	± 0.0
TS-22	- 1204.7920961	- 756018.49	181.14821	- 755837.94	+ 1.4 (- 1.1)
15	- 540.5962682	- 339229.29	142.91041	- 339086.65	± 0.0
TS-15	- 540.5803766	- 339219.32	139.23719	- 339080.35	+ 10.0 (+ 6.3)
12	- 1203.5534998	- 755241.26	169.80897	- 755072.05	± 0.0
TS-12	- 1203.5416236	- 755233.80	166.41963	- 755067.98	+ 7.5 (+ 4.1)

[a]: Electronic energy (B3PW91/6-31G*), 1 a.u. = 627.5095 kcal/mol. [b] Zero-point vibrational energy (B3PW91/6-31G*).
[c]: Energy relating to 21,22,15 or 12 respectively. The value in parentheses includes the zero-point vibrational energy.

structure:	12 B3PW91/6-31G*//B3PW91/6-31G*				
method:					
cartasian coordinatas.	Н	455955	3.289255	339516	
cartesian coordinates.	0	.768159	1.356362	-1.981267	
	С	-1.342396	2.802176	.062847	

¹ Gaussian 98, Revision A.9, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, V. G. Zakrzewski, J. A. Montgomery, Jr., R. E. Stratmann, J. C. Burant, S. Dapprich, J. M. Millam, A. D. Daniels, K. N. Kudin, M. C. Strain, O. Farkas, J. Tomasi, V. Barone, M. Cossi, R. Cammi, B. Mennucci, C. Pomelli, C. Adamo, S. Clifford, J. Ochterski, G. A. Petersson, P. Y. Ayala, Q. Cui, K. Morokuma, D. K. Malick, A. D. Rabuck, K. Raghavachari, J. B. Foresman, J. Cioslowski, J. V. Ortiz, A. G. Baboul, B. B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R. Gomperts, R. L. Martin, D. J. Fox, T. Keith, M. A. Al-Laham, C. Y. Peng, A. Nanayakkara, M. Challacombe, P. M. W. Gill, B. Johnson, W. Chen, M. W. Wong, J. L. Andres, C. Gonzalez, M. Head-Gordon, E. S. Replogle, and J. A. Pople, Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 1998.

² B3PW91 = BECKES 3-parameter functional (B3) with the nonlocal correlation provided by the PERDEW-WANG 91 expression (PW91).

³ A. D. Becke, J. Chem. Phys. **1993**, 98, 5648-5652.

⁴ J. P. Perdew, J. A. Chevary, S. H. Vosko, K. A. Jackson, M. R. Pederson, D. J. Singh and C. Fiolhais, *Phys. Rev.* B 1992, 46, 6671-6687.

С	-1.661944	1.464061	562242
С	.770277	.725343	825877
0	-1.237228	-1.902198	1.427657
С	593582	.411128	271536
0	-1.012196	876208	861173
S	-1 848196	-1 900761	099255
C	-1 427781	-3 401162	- 768671
0	-1.427701	-3.401102	700071
0	-3.277718	-1.650470	031513
H	-1./59949	-3.309118	-1.8038/8
Н	348680	-3.549292	713409
Н	-1.957842	-4.215318	269404
C	2.014719	.277753	272834
H	482002	.264335	.806631
Н	-1.786706	1.559130	-1.647799
H	-2.611041	1.081880	167730
С	-2.458907	3.720616	.481770
C	-1.619144	3.038064	1.526262
С	2.067855	609739	.831331
С	3.292982	-1.004455	1.347846
С	4.492195	557145	.783752
С	4.450659	.303646	316837
С	3.238069	.718597	843190
Н	1.155098	998204	1.273060
Н	3.312758	-1.678353	2.200850
н	5,445205	876722	1.195839
н	5.375519	.659471	764333
н	3 215843	1 402984	-1 686805
н	-3 480527	3 374214	345143
11	5.100527	5.5/1211	. 545145
ч	-2 227822	1 799265	228475
H	-2.327822	4.788265	.328475
H H	-2.327822 911637	4.788265 3.635044	.328475 2.095042
H H H	-2.327822 911637 -2.077269	4.788265 3.635044 2.231420	.328475 2.095042 2.094406
н н Н ТS-12	-2.327822 911637 -2.077269	4.788265 3.635044 2.231420	.328475 2.095042 2.094406
н н TS-12	-2.327822 911637 -2.077269	4.788265 3.635044 2.231420	.328475 2.095042 2.094406
н н ТS-12 В3РW9	-2.327822 911637 -2.077269 1/6-31G*//B3PW9	4.788265 3.635044 2.231420	.328475 2.095042 2.094406
н н TS-12 ВЗРW9 0	-2.327822 911637 -2.077269 1/6-31G*//B3PW9 .582406	4.788265 3.635044 2.231420 01/6-31G* 2.242756	.328475 2.095042 2.094406 .409456
н н TS-12 ВЗРW9 о С	-2.327822 911637 -2.077269 1/6-31G*//B3PW9 .582406 -1.800697	4.788265 3.635044 2.231420 01/6-31G* 2.242756 2.222514	.328475 2.095042 2.094406 .409456 150373
н н TS-12 ВЗРW9 о с с	-2.327822 911637 -2.077269 1/6-31G*//B3PW9 .582406 -1.800697 -1.470652	4.788265 3.635044 2.231420 01/6-31G* 2.242756 2.222514 1.193275	.328475 2.095042 2.094406 .409456 150373 -1.187016
н н TS-12 ВЗРW9 о с с с	-2.327822 911637 -2.077269 1/6-31G*//B3PW9 .582406 -1.800697 -1.470652 .797747	4.788265 3.635044 2.231420 01/6-31G* 2.242756 2.222514 1.193275 1.033859	.328475 2.095042 2.094406 .409456 150373 -1.187016 128654
н н TS-12 ВЗРW9 о с с с с о	-2.327822 911637 -2.077269 1/6-31G*//B3PW9 .582406 -1.800697 -1.470652 .797747 -3.134396	4.788265 3.635044 2.231420 01/6-31G* 2.242756 2.222514 1.193275 1.033859 -1.591750	.328475 2.095042 2.094406 .409456 150373 -1.187016 128654 136511
н н TS-12 ВЗРW9 о с с с с с с	-2.327822 911637 -2.077269 1/6-31G*//B3PW9 .582406 -1.800697 -1.470652 .797747 -3.134396 365246	4.788265 3.635044 2.231420 01/6-31G* 2.242756 2.222514 1.193275 1.033859 -1.591750 .271459	.328475 2.095042 2.094406 .409456 150373 -1.187016 128654 136511 678435
н н TS-12 ВЗРW9 о с с с с о с о	-2.327822 911637 -2.077269 1/6-31G*//B3PW9 .582406 -1.800697 -1.470652 .797747 -3.134396 365246 890383	4.788265 3.635044 2.231420 01/6-31G* 2.242756 2.222514 1.193275 1.033859 -1.591750 .271459 569864	.328475 2.095042 2.094406 .409456 150373 -1.187016 128654 136511 678435 .431039
н н TS-12 B3PW9 о с с с с о с с о с с о с	-2.327822 911637 -2.077269 1/6-31G*//B3PW9 .582406 -1.800697 -1.470652 .797747 -3.134396 365246 890383 -1.716400	4.788265 3.635044 2.231420 01/6-31G* 2.242756 2.222514 1.193275 1.033859 -1.591750 .271459 569864 -1.909599	.328475 2.095042 2.094406 .409456 150373 -1.187016 128654 136511 678435 .431039 .011709
н н TS-12 ВЗРW9 о с с с с о с с о с с о с	-2.327822 911637 -2.077269 1/6-31G*//B3PW9 .582406 -1.800697 -1.470652 .797747 -3.134396 365246 890383 -1.716400 -1.470538	4.788265 3.635044 2.231420 01/6-31G* 2.242756 2.222514 1.193275 1.033859 -1.591750 .271459 569864 -1.909599 -2.807833	.328475 2.095042 2.094406 .409456 150373 -1.187016 128654 136511 678435 .431039 .011709 1.533460
н н TS-12 ВЗРW9 о с с с о с о с о с о с о с о с о с	-2.327822 911637 -2.077269 1/6-31G*//B3PW9 .582406 -1.800697 -1.470652 .797747 -3.134396 365246 890383 -1.716400 -1.470538 -1.014402	4.788265 3.635044 2.231420 91/6-31G* 2.242756 2.222514 1.193275 1.033859 -1.591750 .271459 569864 -1.909599 -2.807833 -2.577507	.328475 2.095042 2.094406 .409456 150373 -1.187016 128654 136511 678435 .431039 .011709 1.533460 -1.082500
н н TS-12 ВЗРW9 о с с с с о с с о с о с и с и с и с и с	-2.327822 911637 -2.077269 1/6-31G*//B3PW9 .582406 -1.800697 -1.470652 .797747 -3.134396 365246 890383 -1.716400 -1.470538 -1.014402 402490	4.788265 3.635044 2.231420 01/6-31G* 2.242756 2.222514 1.193275 1.033859 -1.591750 .271459 569864 -1.909599 -2.807833 -2.577507 -2.982783	.328475 2.095042 2.094406 .409456 150373 -1.187016 128654 136511 678435 .431039 .011709 1.533460 -1.082500 1.668327
н н TS-12 B3PW9 о с с с с о с с о с о с и с о с и с о с и с о с и с о с с о с и с и	-2.327822 911637 -2.077269	4.788265 3.635044 2.231420 01/6-31G* 2.242756 2.222514 1.193275 1.033859 -1.591750 .271459 569864 -1.909599 -2.807833 -2.577507 -2.982783 -2.219219	.328475 2.095042 2.094406 .409456 150373 -1.187016 128654 136511 678435 .431039 .011709 1.533460 -1.082500 1.668327 2.356429
н н TS-12 B3PW9 о с с с с о с о с о с о с о с и с о с и с о с с о с с о с с о с и с и	-2.327822 911637 -2.077269	4.788265 3.635044 2.231420 01/6-31G* 2.242756 2.222514 1.193275 1.033859 -1.591750 .271459 569864 -1.909599 -2.807833 -2.577507 -2.982783 -2.219219 -3.752733	.328475 2.095042 2.094406 .409456 150373 -1.187016 128654 136511 678435 .431039 .011709 1.533460 -1.082500 1.668327 2.356429 1.435709
н н TS-12 B3PW9 0 с с с с 0 с с 0 с с 0 с 0 с с 0 с с 0 с с 0 с с 0 с с с 0 с с с 0 с с с с с с с с с с с с и с н и с н и с н и с н и с н и с н и с н и с н и с и с	-2.327822 911637 -2.077269 1/6-31G*//B3PW9 .582406 -1.800697 -1.470652 .797747 -3.134396 365246 890383 -1.716400 -1.470538 -1.014402 402490 -1.878673 -2.009678 2.127849	4.788265 3.635044 2.231420 91/6-31G* 2.242756 2.222514 1.193275 1.033859 -1.591750 .271459 569864 -1.909599 -2.807833 -2.577507 -2.982783 -2.219219 -3.752733 .506564	.328475 2.095042 2.094406 .409456 150373 -1.187016 128654 136511 678435 .431039 .011709 1.533460 -1.082500 1.668327 2.356429 1.435709 065308
н н TS-12 B3PW9 0 С С 0 С 0 5 С 0 н н н н н	-2.327822 911637 -2.077269	4.788265 3.635044 2.231420 91/6-31G* 2.242756 2.222514 1.193275 1.033859 -1.591750 .271459 569864 -1.909599 -2.807833 -2.577507 -2.982783 -2.219219 -3.752733 .506564 413221	.328475 2.095042 2.094406 .150373 -1.187016 128654 136511 678435 .431039 .011709 1.533460 -1.082500 1.668327 2.356429 1.435709 065308 -1.464880
н н TS-12 B3PW9 о с с с о с о с о с о с о с о с о с о	-2.327822 911637 -2.077269	4.788265 3.635044 2.231420 91/6-31G* 2.242756 2.222514 1.193275 1.033859 -1.591750 .271459 569864 -1.909599 -2.807833 -2.577507 -2.982783 -2.219219 -3.752733 .506564 413221 1.677621	.328475 2.095042 2.094406 .150373 -1.187016 128654 136511 678435 .431039 .011709 1.533460 -1.082500 1.668327 2.356429 1.435709 065308 -1.464880 -2.105149
н н TS-12 B3PW9 о с с о с о с о с о к с о н н н н н н	-2.327822 911637 -2.077269	4.788265 3.635044 2.231420 91/6-31G* 2.242756 2.222514 1.193275 1.033859 -1.591750 .271459 569864 -1.909599 -2.807833 -2.577507 -2.982783 -2.577507 -2.982783 -2.219219 -3.752733 .506564 413221 1.677621 .597722	.328475 2.095042 2.094406 .150373 -1.187016 128654 136511 678435 .431039 .011709 1.533460 -1.082500 1.668327 2.356429 1.435709 065308 -1.464880 -2.105149 -1.440466
н н TS-12 B3PW9 о с с о с о с о с о к с о н н н н н н с н н н н н н с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с с о с с с о с с с о с с с о с с о с с о с с о с с с о с с с о с с с о с с с о с с с о с с о с с о с с с о с с о н н н н н н н н н н н н н	-2.327822 911637 -2.077269	4.788265 3.635044 2.231420 2.242756 2.222514 1.193275 1.033859 -1.591750 .271459 569864 -1.909599 -2.807833 -2.577507 -2.982783 -2.219219 -3.752733 .506564 413221 1.677621 .597722 3.278066	.328475 2.095042 2.094406 .409456 150373 -1.187016 128654 136511 678435 .431039 .011709 1.533460 -1.082500 1.668327 2.356429 1.435709 065308 -1.464880 -2.105149 -1.440466 - 194781
н н TS-12 B3PW9 о с с о с о с о с о к с о н н н н н н с с о с с о с с о с с о с с о с с с о с с с с о с с с с о с с с с о с с с с с с с с с с с с с	-2.327822 911637 -2.077269	4.788265 3.635044 2.231420 2.242756 2.222514 1.193275 1.033859 -1.591750 .271459 569864 -1.909599 -2.807833 -2.577507 -2.982783 -2.219219 -3.752733 .506564 413221 1.677621 .597722 3.278066 - 806103	.328475 2.095042 2.094406 .150373 -1.187016 128654 136511 678435 .431039 .011709 1.533460 -1.082500 1.668327 2.356429 1.435709 065308 -1.464880 -2.105149 -1.440466 194781
н н TS-12 B3PW9 о с с о с о с о с о к с о н н н н н н с с о с с о с с о с с о с с о с с с о с с с о с с с о с с с о с с с о с с с с о с с с с о с с с о с с с о с с с о с с с с с с с с с с с с с	-2.327822 911637 -2.077269	4.788265 3.635044 2.231420 2.242756 2.222514 1.193275 1.033859 -1.591750 .271459 569864 -1.909599 -2.807833 -2.577507 -2.982783 -2.219219 -3.752733 .506564 413221 1.677621 .597722 3.278066 806103	.328475 2.095042 2.094406 .150373 -1.187016 128654 136511 678435 .431039 .011709 1.533460 -1.082500 1.668327 2.356429 1.435709 065308 -1.464880 -2.105149 -1.440466 194781 501149
н н TS-12 B3PW9 о с с о с о с о с о к с о н н н н н н н с с о с с о с с о с с о с с о с с с о с с с о с с с о с с с о с с с о с с с о с с с о с с о с с с о с с с о с с с о с с с с о с с с с о с с с о с с с о с с о с с с о с с с с с с с с с с с с с	-2.327822 911637 -2.077269	4.788265 3.635044 2.231420 2.242756 2.222514 1.193275 1.033859 -1.591750 .271459 569864 -1.909599 -2.807833 -2.577507 -2.982783 -2.219219 -3.752733 .506564 413221 1.677621 .597722 3.278066 806103 -1.277817	.328475 2.095042 2.094406 .150373 -1.187016 128654 136511 678435 .431039 .011709 1.533460 -1.082500 1.668327 2.356429 1.435709 065308 -1.464880 -2.105149 -1.440466 194781 501149 442712
н н TS-12 B3PW9 о с с о с о с о с о к с о н н н н н н н н с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с с о с с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о с с о н н н н н н н н с с с о с с о с с с о с с с о с с о с с о с с о с с с о с с с с с с с с с с с с с	$\begin{array}{c} -2.327822\\911637\\ -2.077269 \end{array}$	4.788265 3.635044 2.231420 91/6-31G* 2.242756 2.222514 1.193275 1.033859 -1.591750 .271459 569864 -1.909599 -2.807833 -2.577507 -2.982783 -2.219219 -3.752733 .506564 413221 1.677621 .597722 3.278066 806103 -1.277817 475949	.328475 2.095042 2.094406 .150373 -1.187016 128654 136511 678435 .431039 .011709 1.533460 -1.082500 1.668327 2.356429 1.435709 065308 -1.464880 -2.105149 -1.440466 194781 501149 442712 .053224

structure:

method:

cartesian coordinates:

This journal is $\ensuremath{\mathbb{C}}$ The Royal Society of Chemistry and Owner Societies 2006

	С	3.184740	1.304251	.443651
	Н	1.661012	-1.464892	871197
	Н	3.958079	-2.288042	783969
	Н	5.794389	853714	.095890
	Н	5.273319	1.450039	.888724
	Н	2.964017	2.310101	.786668
	Н	-3.544482	3.262140	-1.023534
	Н	-2.594755	4.276535	.161442
	С	-2.885829	2.172549	.856249
	Н	-2.670327	2.469965	1.879990
	Н	-3.614765	1.369869	.764318
	Н	639631	2.498917	.278791
structure:	15			
method:	B3PW	91/6-31G*//B3PW9	01/6-31G*	
cartesian coordinates:	Н	1.452292	589715	-1.171676
	0	208152	2.589051	308410
	С	2.314159	446213	522004
	С	2.389772	.916740	.124479
	С	128676	1.410186	.272875
	С	1.184094	1.253877	1.020660
	C	-1.178113	.460572	.148151
	Н	1.384576	2.190164	1.557967
	Н	2.491690	1.693539	644382
	Н	3.295215	.974088	.745983
	С	3.573095	-1.154122	940575
	С	-1.087803	848031	.696754
	С	-2.140333	-1.739446	.567676
	С	-3.310676	-1.382375	112122
	С	-3.410338	101008	666702
	С	-2.373524	.807453	545880
	Н	183866	-1.161581	1.209631
	Н	-2.046989	-2.733332	.999429
	Н	-4.128850	-2.090263	208947
	Н	-4.313716	.191333	-1.197126
	Н	-2.469071	1.802975	971299
	Н	4.523808	668536	731840
	Н	3.561510	-1.724986	-1.865131
	С	2.776427	-1.669338	.228796
	Н	2.219853	-2.594666	.106830
	H	3.194023	-1.529878	1.223979
	H	1.036235	.478672	1.781211
structure:	TS-15			
method:	B3PW	91/6-31G*//B3PW9	01/6-31G*	
cartesian coordinates.	0	.704571	-1.146299	.060348
cui testun coor unatest	С	2.914344	111149	116839
	С	2.227471	1.132090	597923
	С	.056058	.033459	.027954
	С	.886520	1.290791	.130126
	С	-1.365631	007513	.023467
	Н	.334447	2.138029	286358
	Н	2.058969	1.071158	-1.680276
	Н	2.860934	2.012176	408374
	С	4.230735	666364	505881
	С	-2.164240	1.166691	.105179

	С	-3.547907	1.090983	.082741
	С	-4.199811	143041	011529
	С	-3.431213	-1.310852	082161
	С	-2.048240	-1.254362	064809
	Н	-1.693792	2.141210	.198117
	Н	-4.129977	2.007866	.145759
	Н	-5.285024	193734	027042
	Н	-3.922980	-2.278623	153765
	Н	-1.463279	-2.166641	125769
	Н	4.875447	053541	-1.134435
	Н	4.324843	-1.735220	685302
	С	3.959718	231486	.929981
	Н	3.878535	-1.020854	1.674001
	Н	4.417833	.684351	1.301102
	Н	1.082662	1.529057	1.189464
	Н	1.917986	900324	011740
structure:	21			
method:	B3P	W91/6-31G*//B3PW	/91/6-31G*	
	ц ц	1 911522	- 065775	-1 253166
cartesian coordinates:		210921	065775	- 090571
	C	.240921	2.243080	=.090371
	C	2.542790	424292	514053
	c	2.476988	.514233	.699031
	C	020323	1.081252	.469671
	c	1.106163	.034449	1.386554
	ч	-1.247444	1 250542	.204284
	п	2 205625	1 5150042	2.210019
	п	2.003033	172077	1 457051
	С	3 932082	- 350976	_1 153061
	C	_1 615220	- 805497	937775
	C	-2 921260	-1 /19976	5/1695
	C	-2.021200	- 959634	- 380680
	C	- 3.711341	050054	300000
	C	-2 169997	.545557	- 726984
	с u	-2.100007	-1 264160	1 571012
	и п	950700	-1.204100	1 0/1695
	п u	-1 654349	-2.331099	- 604807
	и ц	-4.054349	796632	-1 724070
	и п	-4.050400	1 907164	-1.24070
	и ц	4 705156	- 699981	- 455715
	и и	4 185846	674908	-1 445637
	и 11	3 088334	- 979231	-2 050293
	C	2 195921	-1 969/92	- 159191
	с u	1 15/3921	-1.06/301	197/85
	и п	2 954020	2 250200	.197405
	п	2.004020	-2.259309	.021700
	н	806844	-2.320820	1 822632
structure	 TS-2	1	.522270	1.022032
mathadi	יחנם	$\frac{1}{3}$	01/6 210*	
methoa:	В3Р	W91/0-31U*//B3PW	91/0 - 31U*	
cartesian coordinates:	0	.670994	-1.135357	.228723
	С	2.958788	133199	027011
	С	2.221488	1.040212	661367
	С	.029835	.026630	.044149
	С	.861697	1.287251	.000743

	С	-1.393498	007118	.023549
	Η	.321885	2.064626	548414
	H	2.068633	.838560	-1.728701
	H	2.835859	1.951079	588862
	С	3.901443	873664	954067
	С	-2.183947	1.174042	031005
	С	-3.567774	1.104004	065333
	С	-4.227438	129215	037900
	С	-3.466500	-1.302454	.026986
	С	-2.083579	-1.252511	.058913
	Н	-1.707263	2.149959	033674
	Н	-4.143970	2.025799	107705
	Н	-5.312653	174962	063866
	Н	-3.964264	-2.269526	.050862
	Н	-1.504752	-2.169921	.102619
	Н	4.744628	223880	-1.233154
	Н	3.398836	-1.179340	-1.877764
	Н	4.319665	-1.766082	475974
	С	3.531645	.132981	1.352723
	Н	2.799295	.593140	2.023308
	H	4.391258	.815068	1.275528
	Н	3.885830	791088	1.822079
	Н	1.010340	1.680974	1.020737
	Н	1.995758	863313	.150912
structure:	22			
method:	B3PW	/91/6-31G*//B3PW9	91/6-31G*	
	н	1 409856	-2 790061	.377232
anterion coordinater.		1.100000	2.720001	
cartesian coordinates:	C	2.240514	-2.171725	020049
cartesian coordinates:	C C	2.240514	-2.171725	020049 -1.007202
cartesian coordinates:	C C C	2.240514 1.610713 732053	-2.171725 -1.182119 -1.118242	020049 -1.007202 .034725
cartesian coordinates:	с с с о	2.240514 1.610713 732053 2.833351	-2.171725 -1.182119 -1.118242 2.029250	020049 -1.007202 .034725 222717
cartesian coordinates:	с с с о с	2.240514 1.610713 732053 2.833351 .426493	-2.171725 -1.182119 -1.118242 2.029250 345543	020049 -1.007202 .034725 222717 537535
cartesian coordinates:	с с с о с о	2.240514 1.610713 732053 2.833351 .426493 .833892	-2.171725 -1.182119 -1.118242 2.029250 345543 .643040	020049 -1.007202 .034725 222717 537535 .487742
cartesian coordinates:	с с с о с о я	2.240514 1.610713 732053 2.833351 .426493 .833892 1.387541	-2.171725 -1.182119 -1.118242 2.029250 345543 .643040 2.084544	020049 -1.007202 .034725 222717 537535 .487742 045797
cartesian coordinates:	с с с с с с с с с с	2.240514 1.610713 732053 2.833351 .426493 .833892 1.387541 1.007141	-2.171725 -1.182119 -1.118242 2.029250 345543 .643040 2.084544 3.020886	020049 -1.007202 .034725 222717 537535 .487742 045797 1.424277
cartesian coordinates:	с с с с с с с с с с с с	2.240514 1.610713 732053 2.833351 .426493 .833892 1.387541 1.007141 .544337	-2.171725 -1.182119 -1.118242 2.029250 345543 .643040 2.084544 3.020886 2.529646	020049 -1.007202 .034725 222717 537535 .487742 045797 1.424277 -1.154289
cartesian coordinates:	с С О С О S С О Н	2.240514 1.610713 732053 2.833351 .426493 .833892 1.387541 1.007141 .544337 070953	-2.171725 -1.182119 -1.118242 2.029250 345543 .643040 2.084544 3.020886 2.529646 2.997695	020049 -1.007202 .034725 222717 537535 .487742 045797 1.424277 -1.154289 1.587599
cartesian coordinates:	с С О С О S С О Н Н	2.240514 1.610713 732053 2.833351 .426493 .833892 1.387541 1.007141 .544337 070953 1.542332	-2.171725 -1.182119 -1.118242 2.029250 345543 .643040 2.084544 3.020886 2.529646 2.997695 2.579887	020049 -1.007202 .034725 222717 537535 .487742 045797 1.424277 -1.154289 1.587599 2.266582
cartesian coordinates:	с С О С О S С О Н Н Н	2.240514 1.610713 732053 2.833351 .426493 .833892 1.387541 1.007141 .544337 070953 1.542332 1.351308	-2.171725 -1.182119 -1.118242 2.029250 345543 .643040 2.084544 3.020886 2.529646 2.997695 2.579887 4.042279	020049 -1.007202 .034725 222717 537535 .487742 045797 1.424277 -1.154289 1.587599 2.266582 1.247104
cartesian coordinates:	с С О С О С О Н Н Н С	2.240514 1.610713 732053 2.833351 .426493 .833892 1.387541 1.007141 .544337 070953 1.542332 1.351308 -2.095962	-2.171725 -1.182119 -1.118242 2.029250 345543 .643040 2.084544 3.020886 2.529646 2.997695 2.579887 4.042279 667436	020049 -1.007202 .034725 222717 537535 .487742 045797 1.424277 -1.154289 1.587599 2.266582 1.247104 013913
cartesian coordinates:	С С С С С С С С С С С И Н Н Н С Н	2.240514 1.610713 732053 2.833351 .426493 .833892 1.387541 1.007141 .544337 070953 1.542332 1.351308 -2.095962 .038583	-2.171725 -1.182119 -1.118242 2.029250 345543 .643040 2.084544 3.020886 2.529646 2.997695 2.579887 4.042279 667436 .229192	020049 -1.007202 .034725 222717 537535 .487742 045797 1.424277 -1.154289 1.587599 2.266582 1.247104 013913 -1.383973
cartesian coordinates:	С С О С О К С О Н Н Н Н Н Н Н	2.240514 1.610713 732053 2.833351 .426493 .833892 1.387541 1.007141 .544337 070953 1.542332 1.351308 -2.095962 .038583 1.255069	-2.171725 -1.182119 -1.118242 2.029250 345543 .643040 2.084544 3.020886 2.529646 2.997695 2.579887 4.042279 667436 .229192 -1.738688	020049 -1.007202 .034725 222717 537535 .487742 045797 1.424277 -1.154289 1.587599 2.266582 1.247104 013913 -1.383973 -1.885475
cartesian coordinates:	с С О С О С О Н Н Н Н Н Н Н	2.240514 1.610713 732053 2.833351 .426493 .833892 1.387541 1.007141 .544337 070953 1.542332 1.351308 -2.095962 .038583 1.255069 2.378997	-2.171725 -1.182119 -1.118242 2.029250 345543 .643040 2.084544 3.020886 2.529646 2.997695 2.579887 4.042279 667436 .229192 -1.738688 486297	020049 -1.007202 .034725 222717 537535 .487742 045797 1.424277 -1.154289 1.587599 2.266582 1.247104 013913 -1.383973 -1.885475 -1.371120
cartesian coordinates:	С С О С О С О Н Н Н Н Н Н Н Н С Н Н Н С	2.240514 1.610713 732053 2.833351 .426493 .833892 1.387541 1.007141 .544337 070953 1.542332 1.351308 -2.095962 .038583 1.255069 2.378997 3.194482	-2.171725 -1.182119 -1.118242 2.029250 345543 .643040 2.084544 3.020886 2.529646 2.997695 2.579887 4.042279 667436 .229192 -1.738688 486297 -3.111272	020049 -1.007202 .034725 222717 537535 .487742 045797 1.424277 -1.154289 1.587599 2.266582 1.247104 013913 -1.383973 -1.885475 -1.371120 763163
cartesian coordinates:	С С О С О С О И И И И И И И И И И С С С	2.240514 1.610713 732053 2.833351 .426493 .833892 1.387541 1.007141 .544337 070953 1.542332 1.351308 -2.095962 .038583 1.255069 2.378997 3.194482 -2.452198	-2.171725 -1.182119 -1.118242 2.029250 345543 .643040 2.084544 3.020886 2.529646 2.997695 2.579887 4.042279 667436 .229192 -1.738688 486297 -3.111272 .600548	020049 -1.007202 .034725 222717 537535 .487742 045797 1.424277 -1.154289 1.587599 2.266582 1.247104 013913 -1.383973 -1.885475 -1.371120 763163 538340
cartesian coordinates:	С С О С О С О Н Н Н Н С С С С	2.240514 1.610713 732053 2.833351 .426493 .833892 1.387541 1.007141 .544337 070953 1.542332 1.351308 -2.095962 .038583 1.255069 2.378997 3.194482 -2.452198 -3.783903	-2.171725 -1.182119 -1.118242 2.029250 345543 .643040 2.084544 3.020886 2.529646 2.997695 2.579887 4.042279 667436 .229192 -1.738688 486297 -3.111272 .600548 .985411	020049 -1.007202 .034725 222717 537535 .487742 045797 1.424277 -1.154289 1.587599 2.266582 1.247104 013913 -1.383973 -1.885475 -1.371120 763163 538340 589602
cartesian coordinates:	с С О С О С О Н Н Н Н С Н Н Н С С С С С С	2.240514 1.610713 732053 2.833351 .426493 .833892 1.387541 1.007141 .544337 070953 1.542332 1.351308 -2.095962 .038583 1.255069 2.378997 3.194482 -2.452198 -3.783903 -4.795723	-2.171725 -1.182119 -1.118242 2.029250 345543 .643040 2.084544 3.020886 2.529646 2.997695 2.579887 4.042279 667436 .229192 -1.738688 486297 -3.111272 .600548 .985411 .149049	020049 -1.007202 .034725 222717 537535 .487742 045797 1.424277 -1.154289 1.587599 2.266582 1.247104 013913 -1.383973 -1.385475 -1.371120 763163 538340 589602 107702
cartesian coordinates:	С С О С О С О И И И И И И И И И И И И С С С С	2.240514 1.610713 732053 2.833351 .426493 .833892 1.387541 1.007141 .544337 070953 1.542332 1.351308 -2.095962 .038583 1.255069 2.378997 3.194482 -2.452198 -3.783903 -4.795723 -4.454222	-2.171725 -1.182119 -1.118242 2.029250 345543 .643040 2.084544 3.020886 2.529646 2.997695 2.579887 4.042279 667436 .229192 -1.738688 486297 -3.111272 .600548 .985411 .149049 -1.095282	020049 -1.007202 .034725 222717 537535 .487742 045797 1.424277 -1.154289 1.587599 2.266582 1.247104 013913 -1.383973 -1.885475 -1.371120 763163 589602 107702 .429721
cartesian coordinates:	с С О С О С О С О С О С С С С С С С С С	2.240514 1.610713 732053 2.833351 .426493 .833892 1.387541 1.007141 .544337 070953 1.542332 1.351308 -2.095962 .038583 1.255069 2.378997 3.194482 -2.452198 -3.783903 -4.795723 -4.454222 -3.131206	-2.171725 -1.182119 -1.118242 2.029250 345543 .643040 2.084544 3.020886 2.529646 2.997695 2.579887 4.042279 667436 .229192 -1.738688 486297 -3.111272 .600548 .985411 .149049 -1.095282 -1.504089	020049 -1.007202 .034725 222717 537535 .487742 045797 1.424277 -1.154289 1.587599 2.266582 1.247104 013913 -1.383973 -1.885475 -1.371120 763163 538340 589602 107702 .429721 .480061
cartesian coordinates:	с С О С О С О С О С С С С С С С С С С С	2.240514 1.610713 732053 2.833351 .426493 .833892 1.387541 1.007141 .544337 070953 1.542332 1.351308 -2.095962 .038583 1.255069 2.378997 3.194482 -2.452198 -3.783903 -4.795723 -4.454222 -3.131206 -1.690160	-2.171725 -1.182119 -1.118242 2.029250 345543 .643040 2.084544 3.020886 2.529646 2.997695 2.579887 4.042279 667436 .229192 -1.738688 486297 -3.111272 .600548 .985411 .149049 -1.095282 -1.504089 1.286768	020049 -1.007202 .034725 222717 537535 .487742 045797 1.424277 -1.154289 1.587599 2.266582 1.247104 013913 -1.383973 -1.383973 -1.371120 763163 538340 589602 107702 .429721 .480061 895482
cartesian coordinates:	с С С О С О С О С О С О И И И И И И И И И	2.240514 1.610713 732053 2.833351 .426493 .833892 1.387541 1.007141 .544337 070953 1.542332 1.351308 -2.095962 .038583 1.255069 2.378997 3.194482 -2.452198 -3.783903 -4.795723 -4.454222 -3.131206 -1.690160 -4.035802	-2.171725 -1.182119 -1.118242 2.029250 345543 .643040 2.084544 3.020886 2.529646 2.997695 2.579887 4.042279 667436 .229192 -1.738688 486297 -3.111272 .600548 .985411 .149049 -1.095282 -1.504089 1.286768 1.957819	020049 -1.007202 .034725 222717 537535 .487742 045797 1.424277 -1.154289 1.587599 2.266582 1.247104 013913 -1.383973 -1.383973 -1.385475 -1.371120 763163 538340 589602 107702 .429721 .480061 895482 -1.005826
cartesian coordinates:	с С С О С О С О С О С О С С С С С С С С	2.240514 1.610713 732053 2.833351 .426493 .833892 1.387541 1.007141 .544337 070953 1.542332 1.351308 -2.095962 .038583 1.255069 2.378997 3.194482 -2.452198 -3.783903 -4.795723 -4.454222 -3.131206 -1.690160 -4.035802 -5.834716	-2.171725 -1.182119 -1.118242 2.029250 345543 .643040 2.084544 3.020886 2.529646 2.997695 2.579887 4.042279 667436 .229192 -1.738688 486297 -3.111272 .600548 .985411 .149049 -1.095282 -1.504089 1.286768 1.957819 .463642	020049 -1.007202 .034725 222717 537535 .487742 045797 1.424277 -1.154289 1.587599 2.266582 1.247104 013913 -1.383973 -1.383973 -1.383475 -1.371120 763163 538340 589602 107702 .429721 .480061 895482 -1.005826 149839
cartesian coordinates:	С С С О С О С О И И И И И И И И И И И И	2.240514 1.610713 732053 2.833351 .426493 .833892 1.387541 1.007141 .544337 070953 1.542332 1.351308 -2.095962 .038583 1.255069 2.378997 3.194482 -2.452198 -3.783903 -4.795723 -4.454222 -3.131206 -1.690160 -4.035802 -5.834716 -5.230785	-2.171725 -1.182119 -1.118242 2.029250 345543 .643040 2.084544 3.020886 2.529646 2.997695 2.579887 4.042279 667436 .229192 -1.738688 486297 -3.111272 .600548 .985411 .149049 -1.095282 -1.504089 1.286768 1.957819 .463642 -1.756459	020049 -1.007202 .034725 222717 537535 .487742 045797 1.424277 -1.154289 1.587599 2.266582 1.247104 013913 -1.383973 -1.885475 -1.371120 763163 538340 589602 107702 .429721 .480061 895482 -1.005826 149839 .806686
cartesian coordinates:	С С С С С С С С С С С С С С С С С С С	2.240514 1.610713 732053 2.833351 .426493 .833892 1.387541 1.007141 .544337 070953 1.542332 1.351308 -2.095962 .038583 1.255069 2.378997 3.194482 -2.452198 -3.783903 -4.795723 -4.454222 -3.131206 -1.690160 -4.035802 -5.834716 -5.230785 -2.877780	-2.171725 -1.182119 -1.118242 2.029250 345543 .643040 2.084544 3.020886 2.529646 2.997695 2.579887 4.042279 667436 .229192 -1.738688 486297 -3.111272 .600548 .985411 .149049 -1.095282 -1.504089 1.286768 1.957819 .463642 -1.756459 -2.481536	020049 -1.007202 .034725 222717 537535 .487742 045797 1.424277 -1.154289 1.587599 2.266582 1.247104 013913 -1.383973 -1.383973 -1.385475 -1.371120 763163 538340 589602 107702 .429721 .480061 895482 -1.005826 149839 .806686 .880254

This journal is $\ensuremath{\mathbb{C}}$ The Royal Society of Chemistry and Owner Societies 2006

	Η	2.691772	-3.637450	-1.583124
	Н	3.610575	-3.863630	084093
	С	2.938912	-1.511062	1.169249
	Н	2.236824	953132	1.793045
	Н	3.711451	810789	.828033
	Н	3.422589	-2.269761	1.795491
	0	459472	-2.185436	.756323
structure:	TS-2 2	2		
method:	B3PV	V91/6-31G*//B3PW9	1/6-31G*	
antonian accudination.	0	.494245	2.222724	.560941
cartesian coordinates:	С	-1.969044	2.256613	022431
	С	-1.594777	1.179308	-1.035865
	С	.719301	1.055299	040643
	0	-3.008416	-1.893543	141847
	С	436936	.286495	599002
	0	876600	668866	.457509
	S	-1.562699	-2.062840	041584
	С	-1.179518	-3.030978	1.407473
	0	817513	-2.572612	-1.191202
	Н	095600	-3.086789	1.515110
	Н	-1.636495	-2.555848	2.276822
	Н	-1.605675	-4.024000	1.248054
	С	2.063763	.552088	032173
	Н	102870	326656	-1.439676
	Н	-1.283905	1.657502	-1.973477
	Н	-2.463842	.547478	-1.264582
	С	-2.486393	3.537942	650036
	С	2.393431	729915	540244
	С	3.707863	-1.174397	533536
	С	4.733824	376711	019367
	С	4.421672	.885023	.495130
	С	3.114813	1.346873	.492915
	Н	1.620295	-1.385323	930318
	Н	3.934497	-2.160652	931774
	Н	5.760015	733871	017760
	Н	5.209225	1.516187	.900329
	Н	2.882511	2.330498	.889198
	Н	-3.449457	3.348474	-1.146606
	Н	-1.794941	3.929089	-1.404055
	Н	-2.652699	4.314374	.104081
	С	-2.782336	1.785212	1.169777
	Н	-2.306657	.943270	1.676781
	Н	-3.774037	1.450644	.833277
	Н	-2.929223	2.596657	1.890747
	Н	875663	2.505648	.403994