

Universität  
Rostock



Traditio et Innovatio

**Untersuchungen an neuartigen Derivaten des Singulett-  
Biradikals  $[P(\mu\text{-N}Ter)]_2$ .**

**Dissertation**

zur Erlangung des akademischen Grades  
*Doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)*  
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät  
der Universität Rostock

vorgelegt von Lukas Chojetzki, geboren am 21.10.1992 in Northeim  
Rostock, [Veröffentlichungsdatum]

Die vorliegende Arbeit wurde in der Zeit von Januar 2017 bis Dezember 2019 am Institut für Chemie der Universität Rostock am Lehrstuhl für Anorganische Chemie in der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Axel Schulz angefertigt.

1. Gutachter: Prof. Dr. Axel Schulz

2. Gutachter:

Datum der Verteidigung:

# Erklärung

Ich versichere hiermit an Eides statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig angefertigt und ohne fremde Hilfe verfasst habe. Dazu habe ich keine außer den von mir angegebenen Hilfsmitteln und Quellen verwendet und die den benutzten Werken inhaltlich und wörtlich entnommenen Stellen habe ich als solche kenntlich gemacht.

Rostock, *[Veröffentlichungsdatum]*

Lukas Chojetzki



# Danksagungen

Zu allererst möchte ich mich bei meinem Themenleiter Dr. Ronald Wustrack bedanken, der für Fragen immer ein offenes Ohr hatte.

Des Weiteren gilt mein Dank Prof. Dr. Axel Schulz, der mir Thema und Platz im Arbeitskreis überhaupt erst zur Verfügung gestellt hat und somit eine Promotion für mich ermöglichte.

Besonders möchte ich meinen Laborkollegen Philip, Lilli, Tobi und Basti, Alrik, Justin sowie den Bachelor und Masterstudenten während dieser Zeit aus Labor 140 für die nette Atmosphäre und die kleinen Gefälligkeiten, aber auch für den täglichen gemeinsamen Gang zur Mensa, danken.

Danken möchte ich auch allen übrigen Mitarbeitern des Arbeitskreises, die bei kleinen Problemen und Fragen immer hilfreiche Antworten parat hatten und mich so herzlich in den Arbeitskreis aufgenommen haben.

Ein besonderer Dank geht hier an Dr. Jonas Bresin für Hilfe in allen erdenklichen wissenschaftlichen Bereichen und Dr. Alexander Villinger, der mir bei der Strukturaufklärung meiner Substanzen behilflich war.

Abseits der Uni möchte ich mich natürlich auch noch bei meinen langjährigen Freunden und ganz besonders bei meiner Freundin Carina bedanken.

Zu guter Letzt gilt mein ganz besonderer Dank natürlich auch noch meinen Eltern und Großeltern.



# Zusammenfassung

In der vorliegenden Dissertation werden die Ergebnisse der Untersuchungen zur Reaktivität des bekannten Singulett-Biradikals  $[P(\mu\text{-N}^{\cdot}\text{Ter})]_2$  präsentiert und erläutert. Ein besonderes Augenmerk wurde auf die Reaktivität gegenüber Dienen und Diinen, Diazomethanen und Bromalkanen gelegt. Ebenfalls wurden erste Reaktionen mit einer Brønsted-Säure durchgeführt, welche ein schwach koordinierendes Anion besitzt. Während die Reaktionen mit Doppel-/Dreifachbindungssystemen zu [2+2]-Cycloadditionsprodukten führten, konnte durch die Verwendung von Bromalkanen eine gezielte Substitution der einzelnen Phosphoratome des Biradikals in Form eines  $[P\text{Br}(\mu\text{-N}^{\cdot}\text{Ter})_2\text{PR}]$  erzielt werden. Durch die Umsetzung mit der Brønsted-Säure ließ sich das Biradikal protonieren und somit in eine kationische Spezies überführen. Die so erhaltenen neuartigen Verbindungen wurden mit den gängigen analytischen Methoden wie NMR-, IR- und Raman-Spektroskopie, Massenspektrometrie und Einkristall-Röntgenstrukturanalyse charakterisiert und teilweise in Folgereaktionen derivatisiert.

## Summary

This thesis includes the results of the investigations on the reactivity of the known singlet biradical  $[P(\mu\text{-N}^{\cdot}\text{Ter})]_2$ . Special attention was paid to the reactivity to dienes and diynes, diazomethanes and bromoalkanes. First reactions were also performed with a Brønsted acid in the presence of a weakly coordinating anion. While the reactions with double/triple bond systems resulted in a [2+2] cycloaddition product, the use of bromoalkanes allowed a targeted substitution of the individual phosphorus atoms of the biradical yielding  $[P\text{Br}(\mu\text{-N}^{\cdot}\text{Ter})_2\text{PR}]$ . By reaction with the Brønsted acid, the biradical could be protonated and thus converted into a cationic species. The resulting novel substances were characterized by common analytical methods such as NMR, IR and Raman spectroscopy, mass spectrometry and single crystal X-ray structure analysis and in some cases derivatized in subsequent reactions.





# Inhaltsverzeichnis

1	Zielsetzung und Motivation.....	1
2	Einleitung .....	3
2.1	<i>Cyclo</i> -1,3-Diphospha-2,4-diazane.....	3
2.2	Biradikale.....	7
2.3	Reaktivität des $[P(\mu\text{-NTer})]_2$ .....	9
3	Ergebnisse und Diskussion.....	13
3.1.1	Aktivierung der Mehrfachbindungen von Dienen und Diinen.....	13
3.1.2	Quantenchemische Berechnungen.....	24
3.2	Addition von Bromalkanen an $[P(\mu\text{-NTer})]_2$ .....	37
3.3	Addition von Diazomethanen an $[P(\mu\text{-NTer})]_2$ .....	53
3.4	Umsetzung von $[P(\mu\text{-NTer})]_2$ mit Brønsted-Säuren .....	63
4	Zusammenfassung und Ausblick .....	69
5	Anhang .....	71
5.1	Arbeitstechnik .....	71
5.2	Analysenmethoden .....	73
5.3	Strukturaufklärung .....	74
5.4	Rechenmethoden.....	80
5.5	Darstellung der Verbindungen.....	81
5.5.1	$[(\text{TerNP})_2(\text{C}_6\text{H}_{10})]$ ( <b>2</b> ) .....	81
5.5.2	$[(\text{TerNP})_2(\text{C}_8\text{H}_{14})]$ ( <b>3</b> ) .....	87
5.5.3	$[(\text{TerNP})_2(\text{C}_6\text{H}_8)]$ ( <b>4</b> ).....	93
5.5.4	$[(\text{TerNP})_2(\text{C}_{16}\text{H}_{10})]$ ( <b>5</b> ).....	98
5.5.5	$[(\text{TerNP})_2(\text{C}_{16}\text{H}_{10})]$ (Insertion) ( <b>6</b> ).....	104

5.5.6	[(TerNP) <sub>2</sub> (EtBr)] ( <b>7</b> ) .....	106
5.5.7	[(TerNP) <sub>2</sub> (CH <sub>2</sub> Br <sub>2</sub> )] ( <b>8</b> ).....	110
5.5.8	[(TerNP) <sub>2</sub> (CHBr <sub>3</sub> )] ( <b>9</b> ) .....	114
5.5.9	[(TerNP) <sub>2</sub> (Et)][GaCl <sub>3</sub> Br] ( <b>10</b> ) .....	118
5.5.10	[(TerNP) <sub>2</sub> (CH <sub>2</sub> Br)][GaCl <sub>3</sub> Br] ( <b>11</b> ) .....	122
5.5.11	[(TerNP) <sub>2</sub> (CHBr <sub>2</sub> )][GaCl <sub>3</sub> Br] ( <b>12</b> ) .....	125
5.5.12	[(TerNP) <sub>2</sub> (Et)] ( <b>13</b> ) .....	127
5.5.13	[(TerNP) <sub>2</sub> (Ph <sub>2</sub> CN <sub>2</sub> )] ( <b>14</b> ).....	128
5.5.14	[(TerNP) <sub>2</sub> (TMSCHN <sub>2</sub> )] ( <b>15</b> ) .....	131
5.5.15	[(TerNP) <sub>2</sub> (Ph <sub>2</sub> CN <sub>2</sub> )H][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] ( <b>16</b> ).....	135
5.5.16	[(TerNP) <sub>2</sub> (Ph <sub>2</sub> CN)TMSN][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] ( <b>17</b> ) .....	140
5.5.17	[(TerNP) <sub>2</sub> H][B(C <sub>6</sub> F <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> ] ( <b>18</b> ) .....	141
5.5.18	[HP(μ-NTer) <sub>2</sub> PCN] ( <b>19</b> ) .....	146
5.6	Quantenchemische Details.....	149
6	Referenzen .....	253

# Abkürzungsverzeichnis

ATR	<i>attenuated total reflection</i> (Abgeschwächte Totalreflexion)	<i>et al.</i>	<i>et alii/aliae</i> (und andere)
ac	Acetylen	exp.	experimentell
ar	Arin	gef.	gefunden
ber.	Berechnet	GIAO	<i>gauge-independent</i> AO
bd	1,3-Butadien	hd	2,4-Hexadiene
bdy	1,3-Butadiin	hdy	2,4-Hexadiin
btmsa	Bis(trimethylsilyl)acetylen	HOMO	höchstes besetztes MO
bu	2-Buten	Hyp	Tris(trimethylsilyl)-silyl
but	2-Butin	<i>iPr</i>	Isopropyl
cp	<i>cyclo</i> -Pentadien	IR	Infrarot
ch3	1,3-Cyclohexadien	LB	Lewis-Base
ch4	1,4-Cyclohexadien	LS	Lewis-Säure
dac	Diphenyl-acetylen	LUMO	tiefstes unbesetztes MO
dby	1,4-Diphenyl-1,3-Butadiin	<i>m</i>	meta
dh	2,5-Dimethyl-2,4-hexadien	$\mu$ -	verbrückend (in Formeln)
dmb	2,3-Dimethyl-butadien	Mes	Mesityl (2,4,6-trimethylphenyl)
dipp	2,6- <i>iPr</i> <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	Mes*	Supermesityl (2,4,6-tri- <i>tert</i> -butylphenyl)
dsi	CH(SiMe <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	MO	Molekülorbital
dpb	Diphenyl-1,3-butadien	NBO	natürliches Bindungsorbital
DSC	<i>differential scanning calometry</i> (Dynamische Differenzkalorimetrie)	NHC	<i>N</i> -heterozyklisches Carben
DFT	Dichtefunktionaltheorie	NMR	<i>nuclear magnetic resonance</i> (Kernresonanz)
DBU	1,8-Diazabicyclo[5.4.0]undec-7-en	<i>o</i>	ortho
DMAP	4-Dimethylaminopyridin	od1	1,7-Octadien
EA	Elementaranalyse	pe	1-Pentin
et	Ethen	<i>p</i>	para
		Ref.	Referenz
		RT	Raumtemperatur

<i>t</i> Bu	<i>tert</i> -Butyl	vdW	van der Waals
Ter	Terphenyl (2,6-dimesitylphenyl)	WCA	<i>weakly coordinating anion</i>
TMS	Trimethylsilyl		(schwach koordinierendes
TGA	Thermogravimetrische Analyse		Anion)
THF	Tetrahydrofuran		

# Maßeinheiten

In dieser Arbeit werden die im Internationalen Einheitensystem (SI) gültigen Maßeinheiten verwendet. Alle davon abweichenden Einheiten und deren Umrechnung in SI-Einheiten sind im Folgenden aufgeführt:

Größe	Einheit	Bezeichnung	Umrechnung in SI-Einheiten
Frequenz	MHz	Megahertz	$1 \text{ MHz} = 1 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$
	Hz	Hertz	$1 \text{ Hz} = 1 \text{ s}^{-1}$
Länge	Å	Ångström	$1 \text{ Å} = 1 \times 10^{-10} \text{ m}$
Leistung	mW	Milliwatt	$1 \text{ mW} = 1 \times 10^{-3} \text{ kg m}^2 \text{ s}^{-1}$
Temperatur	°C	Grad Celsius	$\vartheta/^{\circ}\text{C} = T/\text{K} - 273.15$
Volumen	ml	Milliliter	$1 \text{ ml} = 1 \text{ cm}^3 = 1 \times 10^{-6} \text{ m}^3$
Wärmemenge	kJ	Kilojoule	$1 \text{ kJ} = 1 \times 10^3 \text{ m}^2 \text{ kg s}^{-2}$
Wellenzahl	$\text{cm}^{-1}$	reziproke Zentimeter	$1 \text{ cm}^{-1} = 100 \text{ m}^{-1}$
Zeit	d	Tag	$1 \text{ d} = 8.64 \times 10^4 \text{ s}$
	h	Stunde	$1 \text{ h} = 3.6 \times 10^3 \text{ s}$
	min	Minute	$1 \text{ min} = 60 \text{ s}$



# 1 Zielsetzung und Motivation

Aufbauend auf den Arbeiten von Rene Kuzora und Alexander Hinz aus unserem Arbeitskreis, die sich bereits mit dem Singulett-Biradikal  $[P(\mu\text{-N}^{\cdot}\text{Ter})]_2$  beschäftigten, soll sich diese Arbeit mit der Fortführung und Vervollständigung der Erkenntnisse zum Biradikal und dessen vielfältige Folgechemie auseinandersetzen. Dafür sollten Reaktionen mit bisher nicht getesteten Substanzklassen durchgeführt und deren neuartige Produkte charakterisiert und analysiert werden. Für die Charakterisierung sollten hier die vorhandenen experimentellen analytischen Methoden (EA, IR-, Raman-, NMR-Spektroskopie, MS und Einkristalldiffraktometrie) verwendet werden, um genauere Einblicke in die erhaltenen Verbindungen zu ermöglichen. Unterstützend zu den experimentellen Befunden sollten ebenfalls theoretische Berechnungen durchgeführt werden, welche Informationen zu energetischen Eigenschaften, Bindungssituationen und Schwingungsfrequenzen liefern.

Experimentell sollten vor allem die Reaktionen des  $[P(\mu\text{-N}^{\cdot}\text{Ter})]_2$  mit Dienen, Diinen, Diazoverbindungen und Bromalkanen untersucht werden. Nach erfolgreicher Isolierung der Reaktionsprodukte sollten diese charakterisiert und gegebenenfalls hinsichtlich weiterer Derivatisierungsmöglichkeiten untersucht werden.

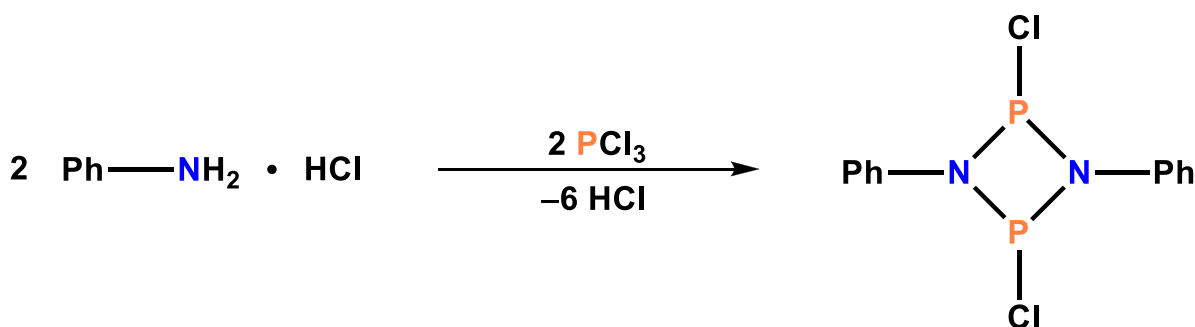




## 2 Einleitung

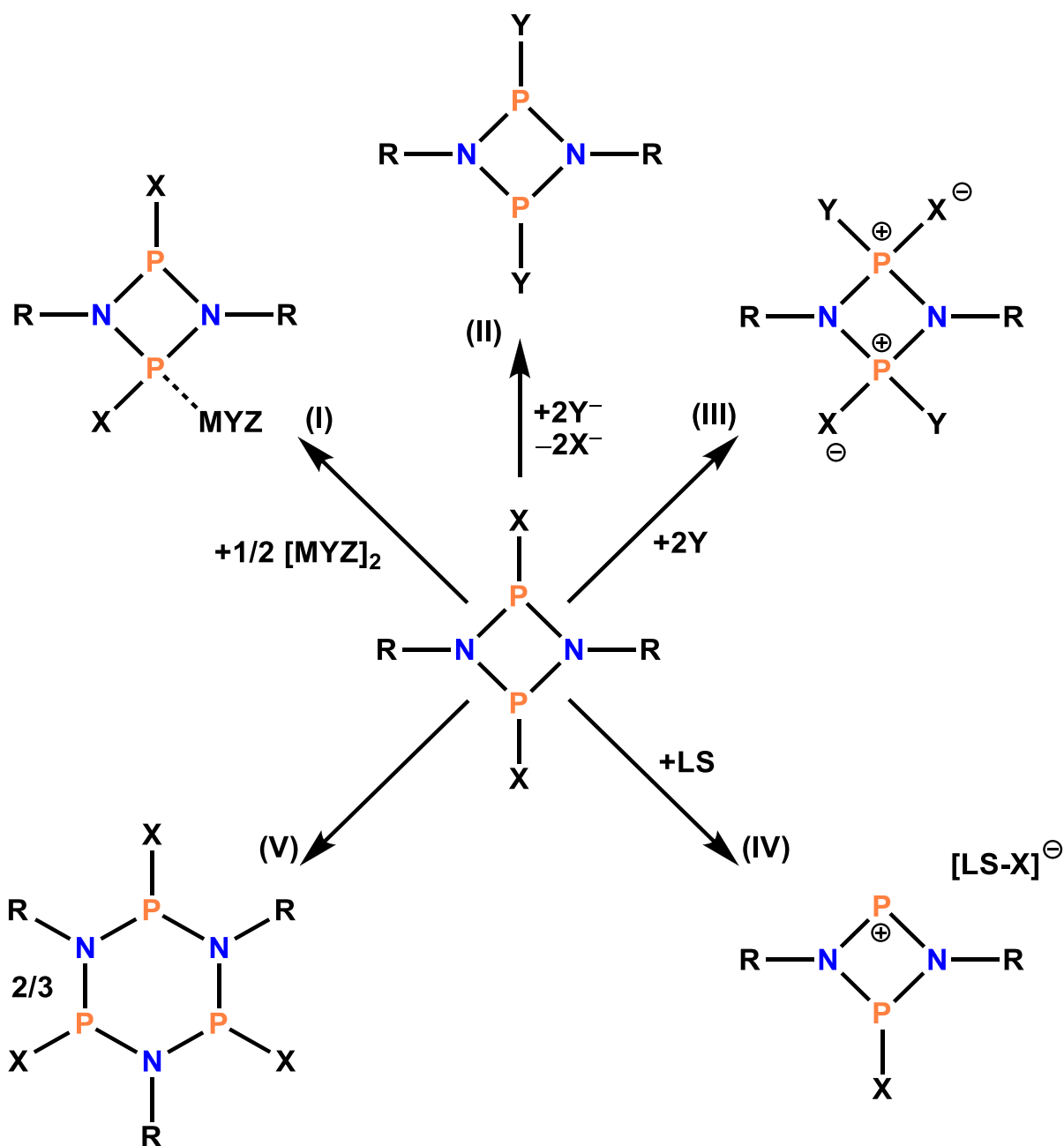
### 2.1 *Cyclo*-1,3-Diphospha-2,4-diazane

Viergliedrige Ringe, die alternierend Phosphor(III) und Stickstoff enthalten, werden *cyclo*-1,3-Diphospha-2,4-diazane genannt. Diese dienen als Ausgangsstoffe für die folgende Biradikalchemie und können kürzer auch mit der Molekülformel  $[\text{XP}(\mu\text{-NR})]_2$  dargestellt werden (X = Halogen; R = sterische, organische Gruppe). Phosphor-Stickstoff-Heterocyclen sind schon seit über 100 Jahren bekannt. Bereits 1894 gelang Michaelis und Schroeter erstmals die Synthese eines solchen *cyclo*-1,3-Diphospha-2,4-diazans (**Schema 1**).<sup>[1]</sup> Für die Synthese verwendeten sie Anilinhydrochlorid und einen Überschuss an  $\text{PCl}_3$ . Damals vermuteten sie, die monomere Spezies  $\text{C}_6\text{H}_5\text{-N=P-Cl}$  isoliert zu haben, obwohl die Molmassebestimmung auf die Bildung des Dimers hinwies. Die mögliche Existenz des Dimers, wurde nur in Form einer Randnotiz vermerkt.



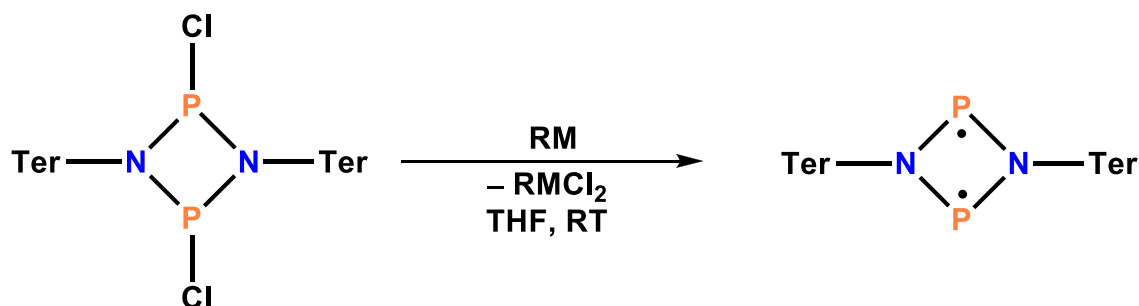
**Schema 1.** Synthese von 1,3-Dichlor-2,4-diphenyl-*cyclo*-1,3-diphospha(III)-2,4-diazan.<sup>[1]</sup>

Auf dieser Grundlage wurden in den letzten Jahrzehnten vielerlei Untersuchungen zu den Diphosphadiazanen und ihren Monomeren durchgeführt.<sup>[1-12]</sup> Dazu zählt unter anderem die Koordination von Übergangsmetallen und die nukleophile Substitution der Halogene durch Pseudohalogene, Alkyl-, Alkoxy- und Aminogruppen. Des Weiteren wurden Oxidationen mit Sauerstoff, Schwefel und Selen sowie Umsetzungen mit Lewis-Säuren wie  $\text{GaCl}_3$  und  $\text{AlCl}_3$  durchgeführt (**Schema 2**).



**Schema 2.** Chemie der *cyclo*-Diphosphadiazane (R = organischer Rest): **(I)** Koordination von Übergangsmetallen (Bsp. X = organischer Rest; M = Rh, Ir; Y = Cl; Z = COD), **(II)** Nucleophile Substitution (Bsp. X = Halogen; Y = Halogen, Pseudohalogen, Alkyl-, Alkoxy-, Aminogruppe), **(III)** Oxidation (Bsp. X = Halogen oder organischer Rest; Y =  $1/2$  O<sub>2</sub>,  $1/8$  S<sub>8</sub>,  $1/x$  Se<sub>x</sub>), **(IV)** Reaktion mit Lewis-Säuren (Bsp. X = Cl; LS = AlCl<sub>3</sub>, GaCl<sub>3</sub>), **(V)** Oligomerisation (Bsp. Ringverweiterung durch Lewis-Säuren; X = Halogen oder organischer Rest).<sup>[4,13]</sup>

Die für diese Arbeit entscheidende Entdeckung gelang Rene Kuzora im Rahmen seiner Promotion im Arbeitskreis von Axel Schulz. Ihm gelang es, durch die Wahl eines geeigneten Reduktionsmittels und einer geeigneten sterischen Gruppe, ein *cyclo*-1,3-Diphospha-2,4-diazan in ein heterocyclisches Biradikal mit Radikalzentren am Phosphor zu überführen. Reduktionen von *cyclo*-1,3-Diphospha-2,4-diazanen beschrieben vorher nur Paine *et al.* Am Beispiel von  $[\text{ClP}(\mu\text{-NtBu})_2]_2$  mit Magnesium als Reduktionsmittel erhielten sie die achtegliedrige Käfigverbindung  $\text{P}_4(\text{NtBu})_4$ .<sup>[14]</sup> So konnte Rene Kuzora durch das Einführen einer Terphenylgruppe (Ter = 2,6-Bis-(2,4,6-trimethylphenyl)phenyl) als sterisches Element eine Dimerisierung zu einer solchen Käfigverbindung verhindern und die Synthese und Isolierung eines stabilen Biradikals ausgehend vom  $[\text{ClP}(\mu\text{-NTer})_2]_2$  mit Reduktionsmitteln wie Mg,  $\text{Cp}_2\text{Ti}(\text{btmsa})$  und  $[\text{Cp}_2\text{TiCl}]_2$  erfolgreich durchführen (*Schema 3* btmsa = Bis(trimethylsilyl)acetylen).<sup>[15]</sup>



**Schema 3.** Reduktion des 1,3-Dichloro-2,4-bis[2,4-bis-(2,4,6-trimethylphenyl)phenyl]-*cyclo*-1,3-diphospha-2,4-diazans zum Biradikal. (RM =  $\text{Cp}_2\text{Ti}(\text{btmsa})$ ,  $[\text{Cp}_2\text{TiCl}]_2$ , Mg).<sup>[15]</sup>



## 2.2 Biradikale

Die Existenz von Biradikalen wird in der Literatur schon lange diskutiert. Bereits 1915 berichten Schlenk und Brauns von Biradikalen als Intermediate in Reaktionen.<sup>[16,17]</sup> Laut Definition liegen Biradikale dann vor, wenn ihre beiden Radikalzentren unabhängig voneinander agieren. Idealerweise befinden sich die beiden ungepaarten Elektronen dabei in entarteten zueinander orthogonal stehenden Molekülorbitalen. Dadurch ergibt sich in diesem Fall, aufgrund der Hund'schen Regel, ein Triplettzustand für das entsprechende Molekül.<sup>[18,19]</sup> Liegen in einem Biradikal stärkere Wechselwirkungen zwischen den Radikalzentren vor, wie es bei dem  $[P(\mu\text{-N}^{\text{Ter}})]_2$  der Fall ist, kann es dazu führen, dass der Singulettzustand energetisch niedriger als der Triplettzustand liegt. In diesem Fall spricht man von einem offenschaligen Singulettzustand. Solche Biradikale werden durch ihren geringeren Biradikalcharakter oft als Biradikaloide bezeichnet. Für die Ermittlung des Biradikalcharakters eines Moleküls gibt es verschiedene Ansätze. Zum einen können die Koeffizienten ( $c_1$  und  $c_2$ ) bestimmt werden, die angeben, wie groß die Beiträge eines geschlossenen- und eines offenschaligen Zustandes zur Gesamtwellenfunktion sind.

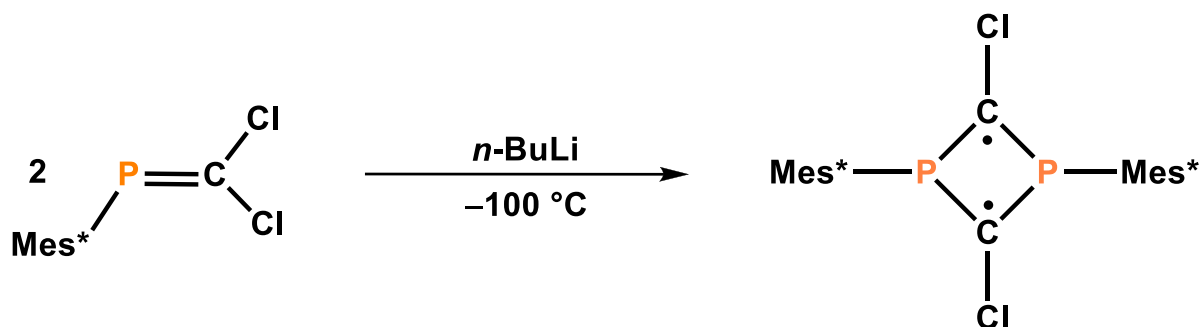
$$d = 2 \sqrt{\frac{c_1^2 c_2^2}{c_1^2 + c_2^2}} \qquad \beta = 2 \frac{c_2^2}{c_1^2 + c_2^2}$$

**Abbildung 1.** Berechnung des Biradikalcharakters nach Neese ( $d$ ) und Miliordos ( $\beta$ ).<sup>[20,21]</sup>

Die so festgelegten Skalen für den Biradikalcharakter mit Werten zwischen 0 und 1 ermöglichen eine einfache Abschätzung des Biradikalcharakters (**Abbildung 1**). Zum anderen lässt sich der Biradikalcharakter durch die Besetzungszahlen des HOMO und LUMO abschätzen. Hierbei spricht eine kleine HOMO-LUMO-Lücke meist für einen höheren Biradikalcharakter.

In den letzten 20 Jahren wurden Biradikale mit einem viergliedrigen Ring in zunehmendem Maße isoliert und charakterisiert. Niecke *et al.* gelang zum Beispiel die Synthese eines Phosphor-Kohlenstoff-Heterocyclus, dessen Radikalzentren am Kohlenstoff lokalisiert sind.<sup>[22]</sup> Hierfür gaben sie ein mit Mes\* (2,4,6-Tris(*tert*-butyl)phenyl) substituiertes Dichlorphosphaalken und *n*-BuLi als Base in einem äquimolaren Verhältnis bei  $-100\text{ }^\circ\text{C}$

zusammen in einen Kolben und tauten dieses Gemisch langsam auf Raumtemperatur auf, um das entsprechende Biradikal zu erhalten (*Schema 4*).



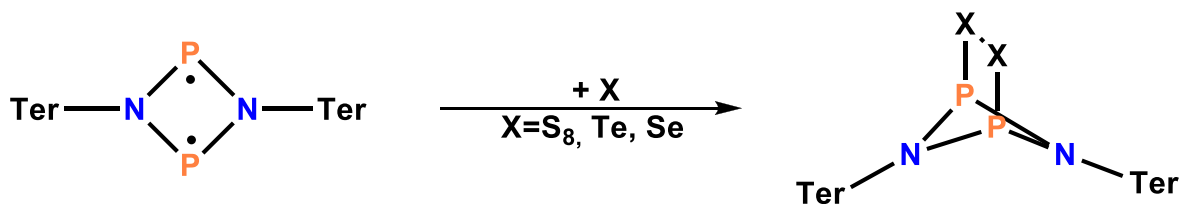
*Schema 4.* Synthese des  $\text{C}_2\text{P}_2$ -Biradikals nach Niecke *et al.*<sup>[22]</sup>

Dieses  $\text{C}_2\text{P}_2$ -Singulett-Biradikal konnte anschließend isoliert und ausführlich hinsichtlich Ringöffnungs-Reaktionen, Isomerisierung, Redoxverhalten und Aktivierung von kleinen Molekülen untersucht werden.<sup>[22]</sup> 2002 synthetisierten Bertrand *et al.* ein  $\text{P}_2\text{B}_2$ -Cyclobutandiyl und untersuchten dieses ebenfalls auf die Reaktivität gegenüber kleinen Molekülen und Wasserstoffsäuren.<sup>[23–25]</sup> Ausgehend von einem Phosphaalkin konnten Yoshifuji *et al.* ein 1,3-Diphosphacyclobutan-2,4-diyl generieren, welches erstaunlich stabil gegenüber polaren Molekülen wie Wasser und Alkoholen war.<sup>[26]</sup> Das erste Biradikal, welches schwerere Elemente der 14. Gruppe enthält, wurde von den Gruppen Power und Lappert synthetisiert. Als sterische Gruppen wurde der Dipp-Rest für das 1,3-Diaza-2,4-digermacyclobutan-2,4-diyl  $[\text{RGe}(\mu\text{-NSiMe}_3)]_2$ <sup>[27]</sup> ( $\text{R} = 2,6\text{-Dipp}_2\text{C}_6\text{H}_3$ ,  $\text{Dipp} = 2,6\text{-}i\text{Pr}_2\text{C}_6\text{H}_3$ ) verwendet, während das  $[\text{ClSn}(\mu\text{-NSiMe}_3)]_2$  durch eine Trimethylsilyl-Gruppe stabilisiert wurde.<sup>[27,28]</sup> 2009 erweiterten Schnöckel *et al.* die Reihe der Singulett-Biradikale durch die Einführung von Aluminiumatomen.<sup>[29]</sup> Zwei Jahre später publizierte die Gruppe um Sekiguchi ein siliziumzentriertes Biradikal  $[\text{Dsi}_2i\text{PrSi}(\mu\text{-NAr})]_2$  [ $\text{Dsi} = \text{CH}(\text{SiMe}_3)_2$ ].<sup>[30]</sup> Im Jahr 2017 gelang dann die Synthese eines der ersten 1,3-Diphospha-cyclobutan-1,3-diyle durch Grützmaier *et al.* und Ghadwal *et al.*<sup>[31,32]</sup> Biradikale, deren zentrale Einheit sich ausschließlich aus Elementen der 5. Hauptgruppe zusammensetzt, sind seit etwa zehn Jahren Forschungsgebiet unserer Arbeitsgruppe. So gelang Rene Kuzora 2011 erstmals die Isolierung des  $[\text{P}(\mu\text{-N}^t\text{Ter})]_2$  durch Reduktion von  $[\text{PCl}(\mu\text{-N}^t\text{Ter})]_2$  mit Mg-Spänen.<sup>[15]</sup> Fünf Jahre später konnte Anne-Kristin Rölke die Gruppe der  $\text{P}_2\text{N}_2$ -Biradikale durch die Einführung der Hypersilylgruppe als sterisches Element ( $\text{Hyp} = \text{Tris}(\text{trimethylsilyl})\text{-silyl}$ ) erweitern und das  $[\text{P}(\mu\text{-NHyp})]_2$  isolieren und charakterisieren.<sup>[33]</sup> Während das Arsen-Analogon  $[\text{As}(\mu\text{-N}^t\text{Ter})]_2$  bereits 2013 durch

Christian Godemann und René Kuzora<sup>[34]</sup> und auch die As/P-gemischte Variante  $[P(\mu\text{-N}Ter)_2As]$  2015 durch Alexander Hinz<sup>[35]</sup> synthetisiert und isoliert wurden, war es bisher nicht möglich, die schwereren Homologe zu isolieren. Anfang 2018 gelang es jedoch erstmals, die intermediäre Existenz der Biradikale der schwereren Pnictogene von Antimon und Bismut durch Isolierung des Adduktes aus der Abfangreaktion mit Tolan nachzuweisen.<sup>[36]</sup>

## 2.3 Reaktivität des $[P(\mu\text{-N}Ter)]_2$

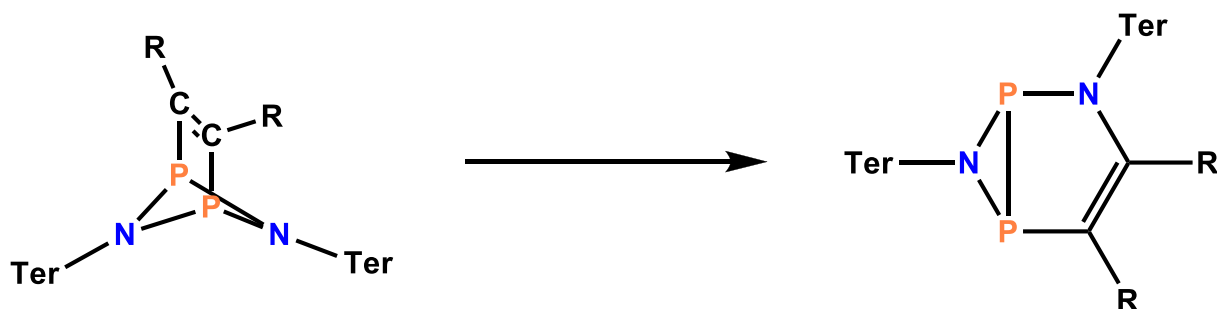
Erste Versuche zu der Reaktivität des Biradikals  $[P(\mu\text{-N}Ter)]_2$  führte bereits Rene Kuzora im Rahmen seiner Dissertation durch. Dabei beschränkte er sich hauptsächlich auf die Oxidation des Biradikals durch die Chalkogene. Für das Sauerstoffderivat verwendete er  $KMnO_4$ , für die Schwefel-, Selen- und Tellurverbindung das jeweilige Reinelement als Feststoff. Die formale Sauerstoffoxidation führte hierbei zu einem 1,3-Diphospha(V/III)-2,4-diaza-1,1-dioxid, die Oxidation mit den schwereren Chalkogenen jedoch zu einem überbrückten Bicyclus (*Schema 5*).<sup>[37]</sup>



*Schema 5.* Oxidation des Biradikals mit Chalkogenen resultieren in einer Überbrückung der Phosphoratome.<sup>[37]</sup>

Später wurden von Alexander Hinz ebenfalls im Rahmen seiner Dissertation weitere ausführliche Untersuchungen zu Reaktivität des  $[P(\mu\text{-N}Ter)]_2$  unternommen. Unter anderem wurde die Aktivierung von Doppelbindungssystemen wie Aceton, Ethylen und  $CS_2$ , aber auch Bis(trimethylsilyl)schwefeldiimid ( $Me_3Si\text{-NSN}\text{-SiMe}_3$ ) und Diphenylcarbodiimid ( $Ph\text{-NCN}\text{-Ph}$ ) näher betrachtet. Die Produkte, welche bis auf eine Ausnahme alle als [2+2]-Cycloadditionsprodukte vorlagen, konnten in guten bis sehr guten Ausbeuten (>50 %) isoliert und charakterisiert werden. Die Ausnahme bildete hier das Produkt aus der Reaktion mit dem Schwefeldiimid, welches als einziges als [3+2]-Cycloadditionsprodukt vorlag und sich durch

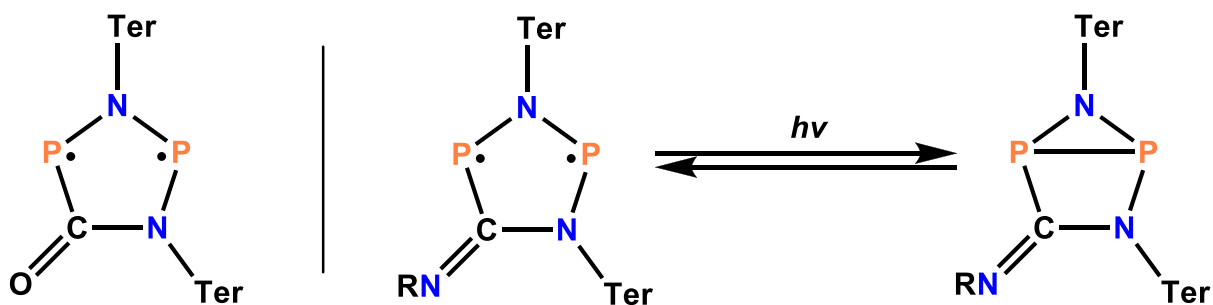
seine NSN-Brücke auszeichnet.<sup>[37]</sup> Auch die Aktivierung von Dreifachbindungen wie in Acetylen, Tolan und Acetonitril führte zu einem überbrückten Biradikal im Sinne einer [2+2]-Addition.<sup>[37]</sup> Wenig später beobachtete Alexander Hinz eine ungewöhnliche Umlagerungsreaktion bei der Umsetzung von  $[P(\mu\text{-N}Ter)_2]_2$  mit Sulfanylacetylenen ( $R-S-C\equiv C-S-R$ ) ( $R = \text{Benzyl, 2-Trimethylsilylethyl}$ ) bzw. Acetylen. Hierbei kam es zur Bildung eines dreigliedrigen PNP-Rings, auch Azadiphosphiridin genannt, welcher aus der Insertion der  $C_2$ -Einheit in eine P–N-Bindung nach der Addition der Alkine resultiert (*Schema 6*).<sup>[38]</sup>



*Schema 6.* Umlagerung des [2+2]-Cycloadditionsproduktes zum Azadiphosphiridin ( $R = \text{Benzyl, 2-Trimethylsilylethyl, H}$ ).<sup>[38]</sup>

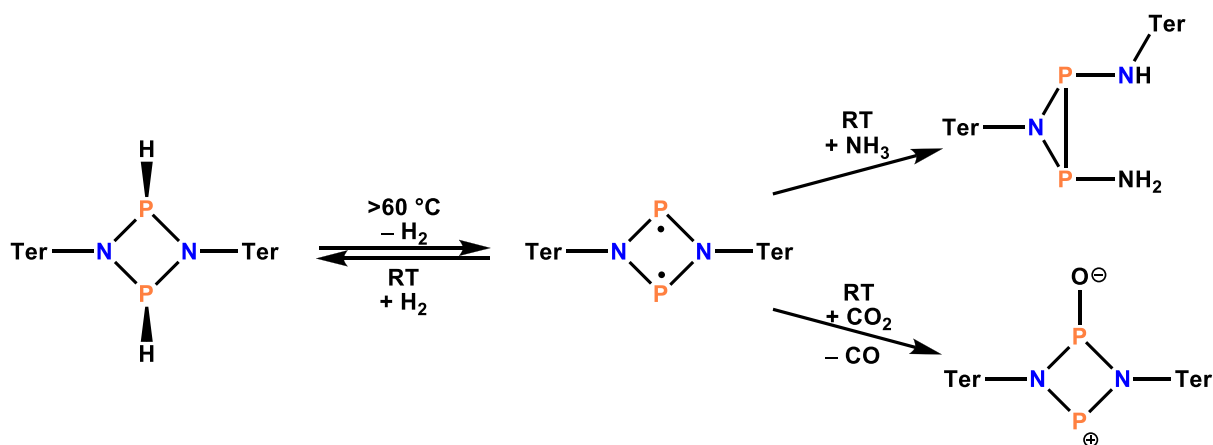
Im Jahr 2015 veröffentlichten Schulz *et al.* Ergebnisse zur gezielten Einzelelektronen-Oxidation des Biradikals zum Monoradikal-Kation. Dafür verwendeten sie verschiedene Silbersalze mit schwach koordinierenden Anionen. Während die Umsetzung mit  $Ag(CF_3CO_2)$  und  $Ag(BF_4)$  zu  $[(CF_3CO_2)P(\mu\text{-N}Ter)_2P(CF_3CO_2)]$  bzw.  $[PF(\mu\text{-N}Ter)_2]$  führte, konnte durch die Reaktion mit  $Ag[B(C_6F_5)_4]$  das gewünschte Monoradikalkation  $[P(\mu\text{-N}Ter)_2P]^+$  erhalten werden.<sup>[39]</sup> Im gleichen Jahr wurde ebenfalls über die Bildung von Heterocyclopentan-1,3-diolen berichtet, welche durch Insertion von CO und Isonitrilen in den  $P_2N_2$ -Ring des Biradikals entstehen. Durch Bestrahlung konnten diese Insertionsprodukte, welche immer noch einen biradikalen Charakter aufweisen, in sogenannte Hausan-Analoga überführt werden (*Schema 7*). Die Bindungsknüpfung, welche zwischen den Phosphoratomen zu beobachten ist, unterliegt interessanterweise einer reversiblen Gleichgewichtsreaktion zurück zur radikalischen Spezies, was sie zu einer Art molekularem Schalter macht. Vor allem die Isonitrile zeigten sich durch die große Variabilität des Restes als vielversprechende Stoffklasse, um die Eigenschaften der Schalter zu manipulieren.<sup>[40][41]</sup>





**Schema 7.** Insertionsprodukte aus der Reaktion des Biradikals mit CO (links) bzw. mit Isonitrilen (rechts), welche durch die Bestrahlung mit Licht reversibel in ein Hausanalogon überführt werden können und somit als molekularer Schalter agieren.<sup>[40,41]</sup>

2016 publizierte unsere Arbeitsgruppe Ergebnisse zum Reaktionsverhalten des  $[P(\mu\text{-N}^{\cdot}\text{Ter})]_2$  gegenüber Lewis-Basen und Säuren sowie zur Aktivierung von Wasserstoff, Kohlenstoffdioxid und Ammoniak durch das Biradikal (**Schema 8**). Während Wasserstoff schon bei Raumtemperatur leicht an die Phosphoratome des Radikals addiert, kann nach dem Entfernen der  $\text{H}_2$ -Quelle eine langsame reversible Reaktion zurück zum Biradikal beobachtet werden. Diese findet sowohl im Feststoff unter inerter Argonatmosphäre als auch in Lösung bei Temperaturen über  $60\text{ }^\circ\text{C}$  statt. Die Aktivierung von Kohlenstoffdioxid resultiert in einer zwitterionischen Spezies, die durch die Freisetzung von Kohlenstoffmonoxid nach einer [2+2]-Addition entsteht. Die Reaktion mit Ammoniak hingegen führt zu einer Öffnung des Vierrings und der Ausbildung einer P–P-Bindung und somit zu einem Azadiphosphiridin.<sup>[42]</sup>



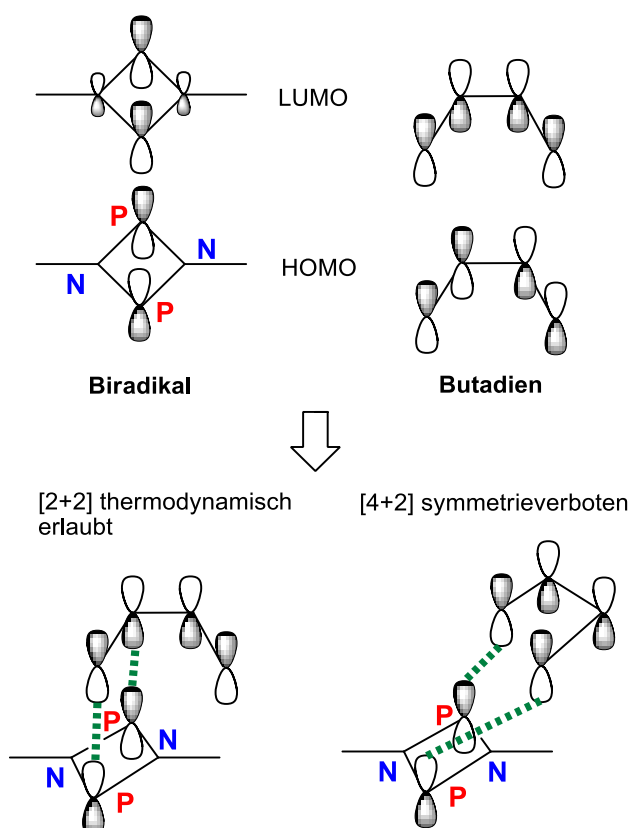
**Schema 8.** Aktivierung von kleinen Molekülen durch das  $[P(\mu\text{-N}^{\cdot}\text{Ter})]_2$ . Das Wasserstoffaddukt zeigt ein reversibles Verhalten bei erhöhten Temperaturen.<sup>[42]</sup>

Die Verwendung eines *N*-heterocyclischen Carbens (1,3,4,5-Tetramethylimidazol-2-yliden) als Lewis-Base führte zur Bildung eines Salzes  $[(\text{NHC})_2\text{P}]^+[(\text{TerN})_2\text{P}]^-$ . Durch die Umsetzung mit  $(\text{Me}_2\text{S})\text{AuCl}$  als Lewis-Säure konnte, je nach Stöchiometrie, sowohl das Monoaddukt  $(\text{ClAuP}(m\text{-NTer})_2\text{P})$  als auch das Diaddukt  $((\text{ClAu})_2\text{P}(m\text{-NTer})_2\text{P})$  beobachtet werden.<sup>[43]</sup>

# 3 Ergebnisse und Diskussion

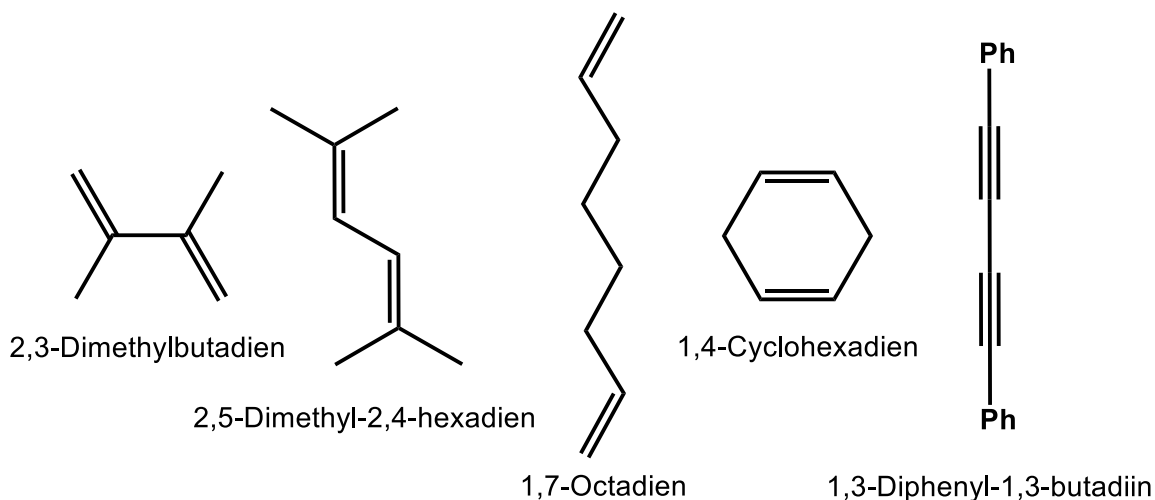
## 3.1.1 Aktivierung der Mehrfachbindungen von Dienen und Diinen

Das Reaktionsverhalten des Biradikals  $[P(\mu\text{-NTer})]_2$  gegenüber kleinen Molekülen wie Aceton, Acetonitril,  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2$  sowie Alkenen und Alkinen wurde bereits in vorhergehenden Arbeiten ausgiebig untersucht und diskutiert. Im Folgenden soll es um die Reaktionen mit Kohlenwasserstoffen gehen, die mehr als nur eine Doppel- oder Dreifachbindung aufweisen. Hierbei sollte unter anderem die Möglichkeit einer [4+2]-Cycloaddition untersucht werden, da bis zum jetzigen Zeitpunkt nur [2+2]-Cycloadditionen mit dem Biradikal beobachtet werden konnten. Eine einfache Betrachtung der Molekülorbitale zeigt allerdings, dass eine [4+2]-Cycloaddition symmetrieverboten sein sollte und nur eine [2+2]-Addition thermisch erlaubt ist (**Abbildung 2**).



**Abbildung 2.** Einfache MO-Betrachtungen für die [2+2]- bzw. [4+2]-Cycloadditionen.

Als Testsubstanzen wurden 2,3-Dimethylbutadien (konjugiertes Dien), 2,5-Dimethyl-2,4-hexadien (sterisch anspruchsvolleres konjugiertes Dien), 1,7-Octadien (langkettiges terminales Dien), 1,4-Cyclohexadien (cyclisches Dien) und 1,4-Diphenyl-1,3-butadiin (konjugiertes Diin) ausgewählt (*Abbildung 3*).

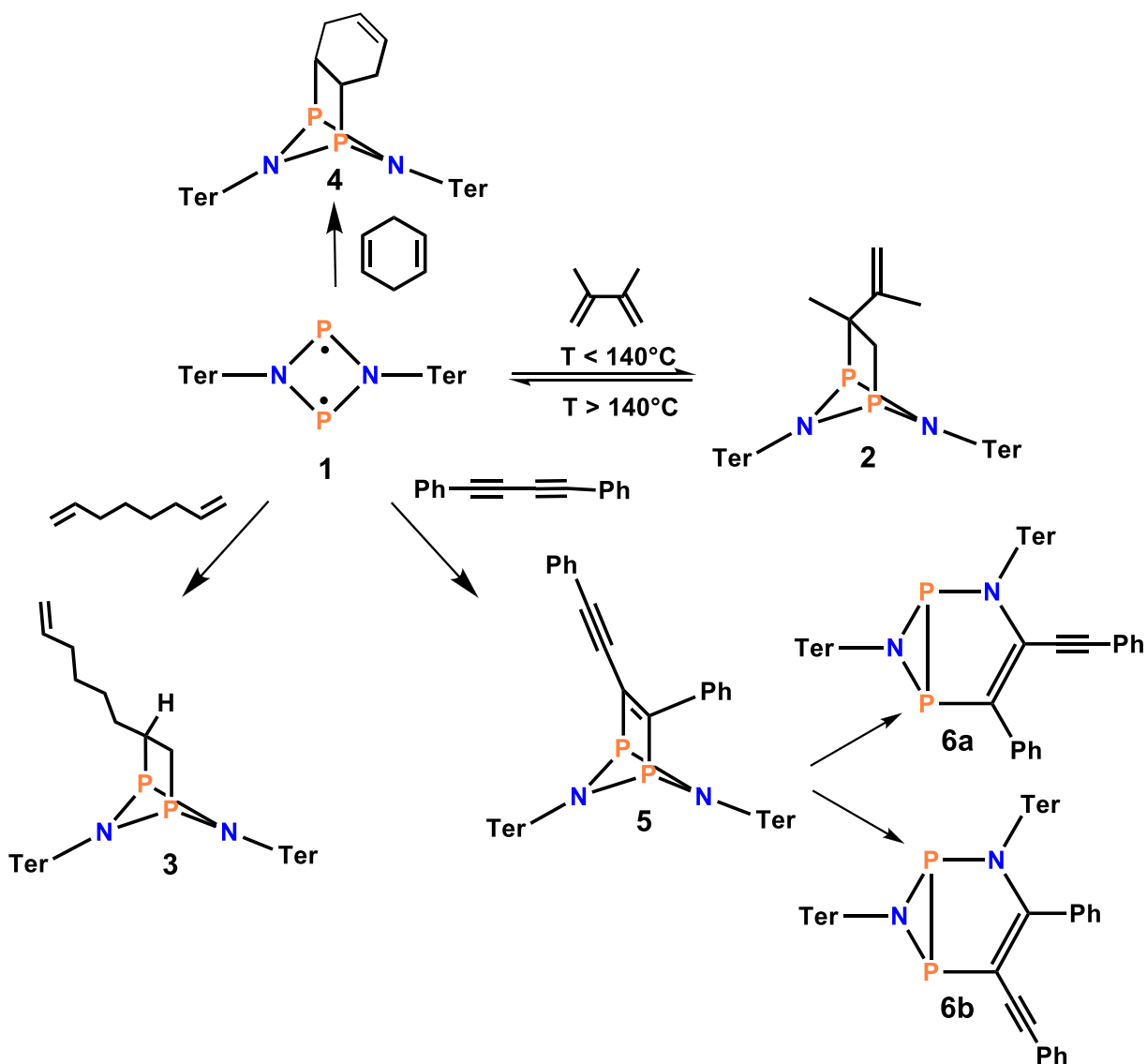


*Abbildung 3.* Experimentell verwendete Diene und Diine.

Alle Arbeiten mit dem Biradikal  $[P(\mu\text{-NTer})]_2$  wurden unter Schutzgas durchgeführt. Für die Reaktionen mit 2,3-Dimethylbutadien, 2,5-Dimethyl-2,4-hexadien und 1,7-Octadien wurde  $[P(\mu\text{-NTer})]_2$  bei Raumtemperatur in Benzol gelöst und der jeweilige Kohlenwasserstoff zugegeben. Im Falle des 1,4-Diphenyl-1,3-butadiins wurden beide Ausgangsstoffe vorgelegt und in Benzol gelöst. 1,4-Cyclohexadien diente gleichzeitig als Lösemittel und wurde vorgelegt und  $[P(\mu\text{-NTer})]_2$  darin gelöst. Bis auf die Reaktion mit 2,5-Dimethyl-2,4-hexadien waren alle Umsetzungen laut  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektroskopie nahezu quantitativ und die Additionsprodukte konnten als Feststoffe isoliert werden. Nur vom Additionsprodukt mit 1,4-Cyclohexadien konnte geeignete Kristalle für die Einkristallstrukturanalyse gewonnen werden. Für das 2,5-Dimethyl-2,4-hexadien, welches im weiteren Sinne nur eine sterisch anspruchsvollere Version des 2,3-Dimethyl-butadien ist, konnte keinerlei Reaktion beobachtet werden. Der Verlauf der Reaktionen war optisch leicht zu verfolgen, da es zu einer Entfärbung der Lösung von orange zu gelb kam. Die Reaktionen liefen, bis auf die Addition von 2,3-Dimethylbutadien, innerhalb weniger Minuten ab. Alle Reaktionen führten hierbei zu der Bildung eines fünfgliedrigen Heterocyclus in Folge einer [2+2]-Cycloaddition (*Schema 9*).

Für 2,3-Dimethylbutadien ist bereits bekannt, dass es in [4+2]-Diels-Alder-Reaktionen mit *trans*-Stilbenen, aber auch in [2+2]-Additionen mit Alkenen reagieren kann.<sup>[44-47]</sup>

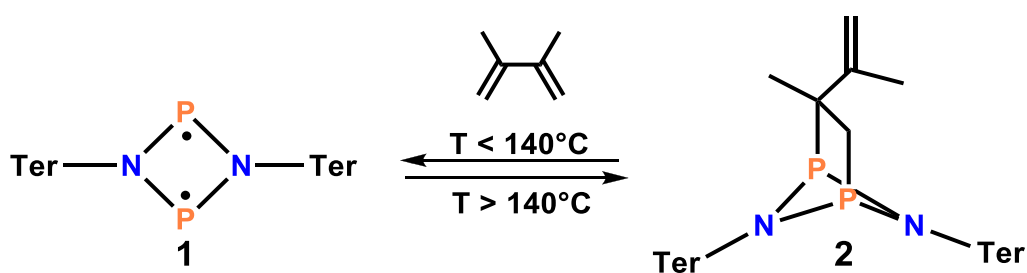
Bei einer 1:1-Umsetzung mit dem Biradikal bei Raumtemperatur dauert die Addition des 2,3-Dimethylbutadiens etwa zwei Wochen. Eine schnellere, quantitative Umsetzung konnte hingegen durch einen Überschuss an Dien erzielt werden. Der Überschuss war in der Aufarbeitung kein Problem, da nicht abreagiertes Dien unkompliziert im Vakuum entfernt werden konnte. Der Verlauf der Reaktion wurde hierbei mittels <sup>31</sup>P-NMR-Spektroskopie verfolgt.



**Schema 9.** Reaktionen des Biradikals mit Dienen und Diinen, welche jeweils zur Bildung eines [2.1.1]-Bicyclus führen. Das Produkt aus der Reaktion mit 1,4-Diphenyl-1,3-butadiin isomerisiert in einem zweiten Schritt zu einem Diphosphaaziridin.

Das  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum des isolierten Produkts **2** aus der Reaktion mit 2,3-Dimethylbutadien zeigt ausschließlich zwei Dubletts (233.6 und 230.2 ppm) mit einer Kopplungskonstanten von 7 Hz. Daher kann eine symmetrische [4+2]-Cycloaddition, welche formal für das konjugierte Dien möglich gewesen wäre, ausgeschlossen werden. Eine symmetrische Addition hätte chemisch äquivalente Phosphoratome zur Folge, welche im  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum nur ein Signal hervorrufen würden. Die Signale für das Additionsprodukt liegen im Bereich der erwarteten chemischen Verschiebung für ähnliche Additionsprodukte des Biradikals, wie z.B. mit Ethen (223 ppm).<sup>[37]</sup> Kristalle von **2** für die Einkristallstrukturanalyse konnten nicht gewonnen werden. **2** wurde mittels  $^1\text{H}$ -,  $^{13}\text{C}$ - und  $^{31}\text{P}$ -NMR-, IR- und Raman-Spektroskopie, Massenspektrometrie und Elementaranalyse charakterisiert.

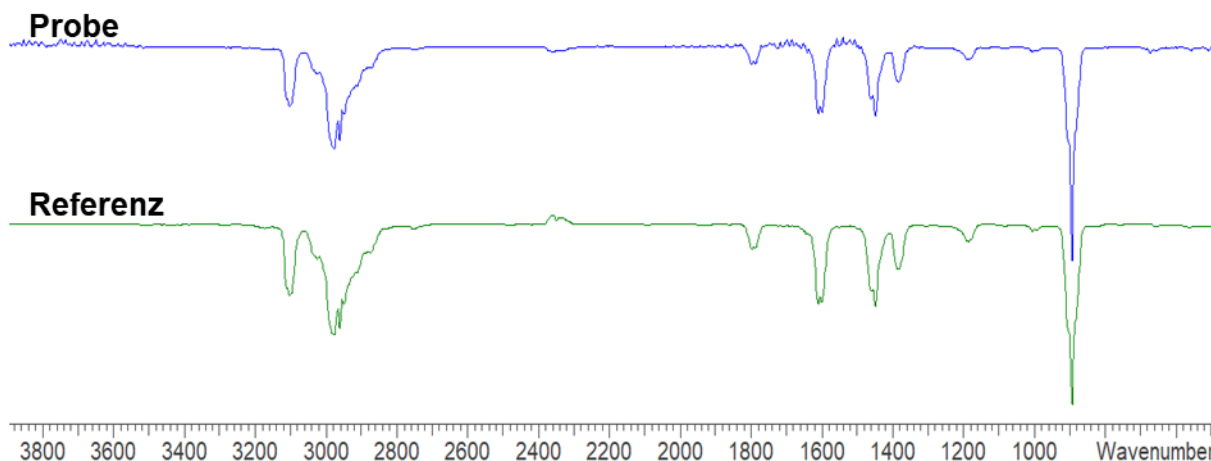
Anders als alle bisher bekannten Alken- und Alkinaddukte des Biradikals weist Verbindung **2** besondere thermische Eigenschaften auf. Durch Erhitzen des isolierten Feststoffes auf ca. 140 °C war es möglich, das addierte Alken reversibel zu entfernen und das Biradikal **1** ohne Zersetzung zurückzugewinnen (*Schema 10*).



*Schema 10.* Reaktionen des Biradikals mit 2,3-Dimethylbutadien

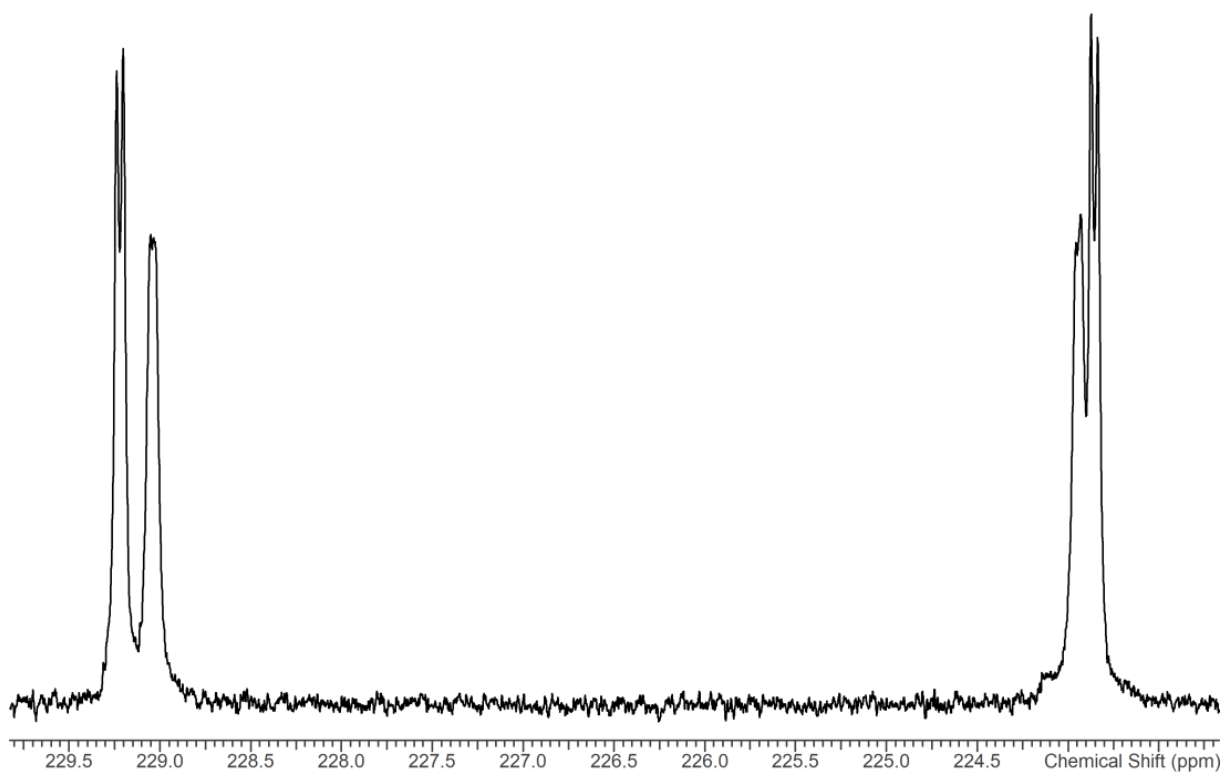
Diese Umkehrung des Gleichgewichts lässt sich auch visuell beobachten, da sich der Feststoff von der hellgelben Farbe des Adduktes zu der orangen Farbe des Biradikals verfärbt. Für die Durchführung der Reaktion wurde der Feststoff in einem Kolben unter Vakuum auf 140 °C erhitzt und anschließend erneut ein  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum in  $\text{C}_6\text{D}_6$  aufgenommen. Das Spektrum zeigte nun deutlich die charakteristische  $^{31}\text{P}$ -Resonanz des Biradikals als Singulett bei 276 ppm. Der Nachweis des entfernten 2,3-Dimethylbutadiens erfolgte mittels Gasphasen-IR-Spektroskopie verwendet. Dafür wurde **2** im statischen Vakuum für 15 min erhitzt und anschließend eine Probe aus dem Gasraum entnommen, in eine IR-Gaszelle überführt und vermessen. So konnte durch einen einfachen Vergleich mit einem Referenzspektrum gezeigt

werden, dass nur 2,3-Dimethylbutadien ohne weitere Zersetzungsprodukte in der Gasphase vorliegt (*Abbildung 4*).



*Abbildung 4.* Transmissionsspektren von reinem 2,3-Dimethylbutadien als Referenz (grün) und einer Gasphasenprobe nach Erhitzen des Adduktes 2 (blau).

Da eine zweifache Addition des Biradikals **1** an langkettige Diene mit endständigen Doppelbindungen möglich erschien, wurde die Reaktion von **1** mit dem aliphatischen 1,7-Octadien untersucht. Dazu wurde  $[\text{P}(\mu\text{-NTer})_2]$  jeweils in Benzol gelöst und 1,7-Octadien in unterschiedlichen stöchiometrischen Mengen zugegeben. Allerdings konnte in allen Fällen nur eine Mono-Addition beobachtet werden, sodass davon ausgegangen werden kann, dass eine achtgliedrige Kohlenstoffkette nicht lang genug ist, um zwei sterisch anspruchsvolle Biradikale wie das  $[\text{P}(\mu\text{-NTer})_2]$  zu addieren. Das 1,7-Octadienaddukt **3** konnte jedoch jeweils in quantitativen Mengen als farbloser Feststoff isoliert werden. Dieses Addukt zeigt allerdings deutlich schlechtere Lösungseigenschaften in Lösemitteln wie Toluol, Benzol, Dichlormethan und *n*-Hexan als die Addukte der anderen Diene. Es konnten keine geeigneten Kristalle für die Einkristallstrukturanalyse erhalten werden. In Benzol war die Löslichkeit hingegen ausreichend, um die Substanz mittels NMR-Spektroskopie zu untersuchen. Im  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum sind zwei verschiedene Spezies mit einem Integralverhältnis von ca. 55:45 zu erkennen. Es handelt sich jeweils um zwei Dubletts mit einer Kopplungskonstante von 8 Hz (Isomer **3a**:  $\delta[^{31}\text{P}] = 223.9$  und  $229.3$ , Isomer **3b**:  $\delta[^{31}\text{P}] = 224.0$  und  $229.1$  ppm) (*Abbildung 5*). Noch deutlicher sind die beiden Spezies im  $^1\text{H}$ -NMR-Spektrum zu erkennen, in welchem man zwei Signalsätze mit jeweils sechs Resonanzen für die sechs Methylgruppen der Terphenylsubstituenten erhält.



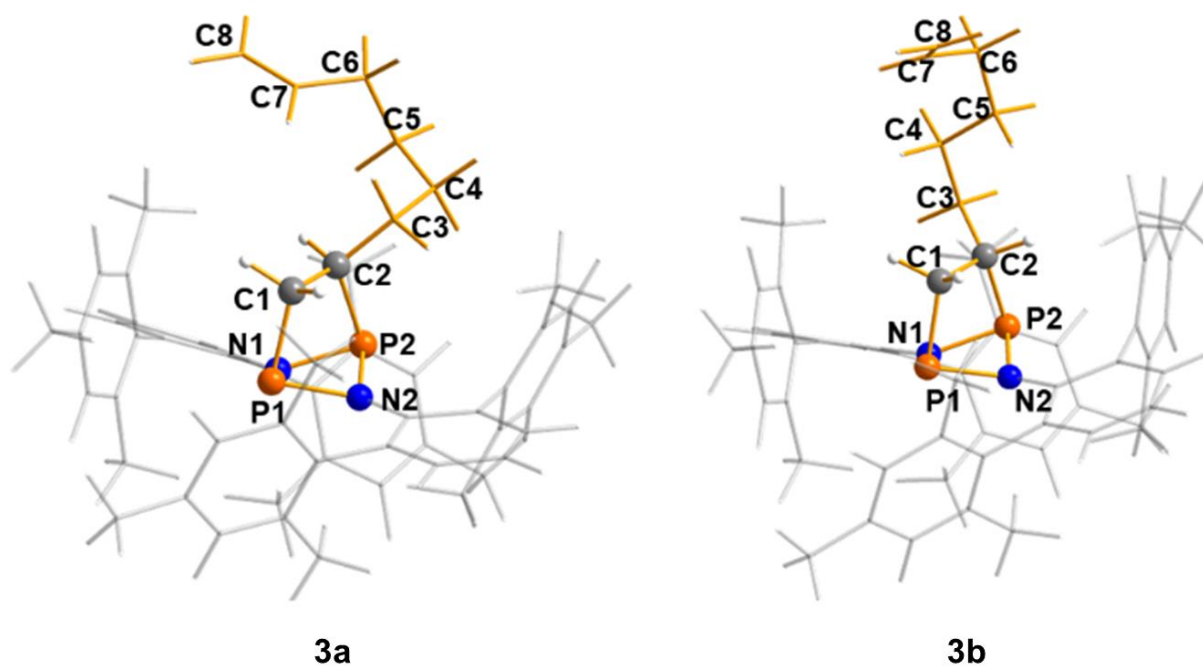
**Abbildung 5.**  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum des Isomerengemisches von **3** in  $\text{C}_6\text{D}_6$ .

Quantenchemische Berechnungen konnten zeigen, dass verschiedene Rotationsisomere vorliegen können, deren Barrieren groß genug sind, um Signale für mehrere Spezies im NMR-Spektrum beobachten zu können. Es war dabei nicht möglich, die für die Signale verantwortlichen Rotamere zu bestimmen (*Abbildung 6*).

Das Isomerengemisch von **3** wurde mittels  $^1\text{H}$ -,  $^{13}\text{C}$ - und  $^{31}\text{P}$ -NMR-, IR- und Raman-Spektroskopie, Massenspektrometrie und Elementaranalyse charakterisiert.

Der Versuch, das Addukt **3** analog zu **2** thermisch in seine Edukte zu trennen, war nicht erfolgreich. Ab einer Temperatur von ca.  $300\text{ }^\circ\text{C}$  kam es lediglich zu einer Zersetzung, die nicht identifizierbare Produkte zur Folge hatte.



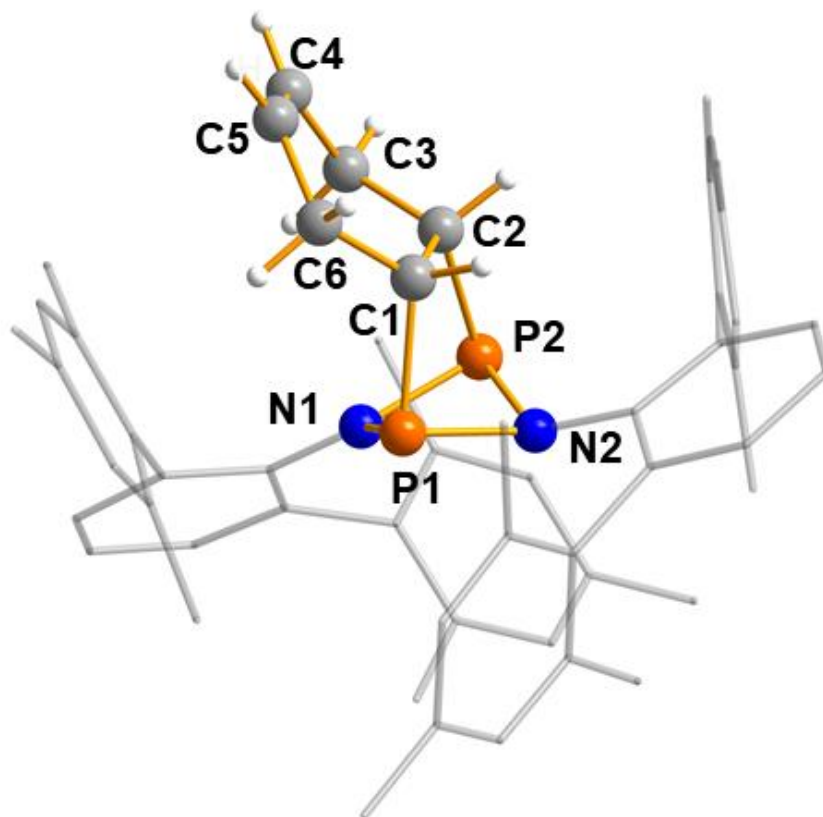


**Abbildung 6.** Quantenchemisch berechnete Minimumstrukturen für zwei mögliche Isomere von **3**. **3a** ( $\Delta_{\text{R}}G_{298}^{\ominus} = -21.51$  kcal/mol) und **3b** ( $\Delta_{\text{R}}G_{298}^{\ominus} = -27.78$  kcal/mol);  $\Delta G$  (**3a,3b** = 6.27 kcal/mol).

Das 1,4-Cyclohexadien wurde zum einen als Beispiel für ein cyclisches Dien als Reaktionspartner für das Biradikal **1** ausgewählt. Zum anderen ist 1,4-Cyclohexadien auch ein literaturbekanntes Trapping-Reagenz für Radikalreaktionen. Interessant war hier die Möglichkeit von zwei unterschiedlichen Reaktion - einer einfachen [2+2]-Cycloaddition, wie für acyclische Alkene bekannt, oder aber die Bildung von Benzol unter Abstraktion von  $\text{H}_2$  aus dem 1,4-Cyclohexadien.<sup>[48,49]</sup> Die radikalische Eliminierung des Wasserstoffs aus dem Cyclohexadien und dessen Addition an das Biradikal hätte in diesem Fall zur Bildung des bereits bekannten  $\text{H}_2$ -Addukts des Biradikals führen können.<sup>[42,50]</sup>

Bei der Zugabe des 1,4-Cyclohexadiens zum Biradikals entfärbte sich dieses schlagartig von orange zu gelb. Nach Beendigung der Reaktion wurde überschüssiges 1,4-Cyclohexadien entfernt und es wurde ein farbloser, kristalliner Feststoff als Produkt erhalten. Dieser Feststoff wurde als [2+2]-Cycloadditionsprodukt (**4**) identifiziert (Ausbeute 60 %) (**Abbildung 7**). Es gibt im  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum keine Signale für das ebenfalls erwartete und bereits bekannte  $\text{H}_2$ -Addukt des Biradikals. Eine Reduktion des Cyclohexadiens zum Benzol findet also nicht statt. Aus der [2+2]-Addition ergibt sich ein symmetrisches Produkt mit zwei chemisch

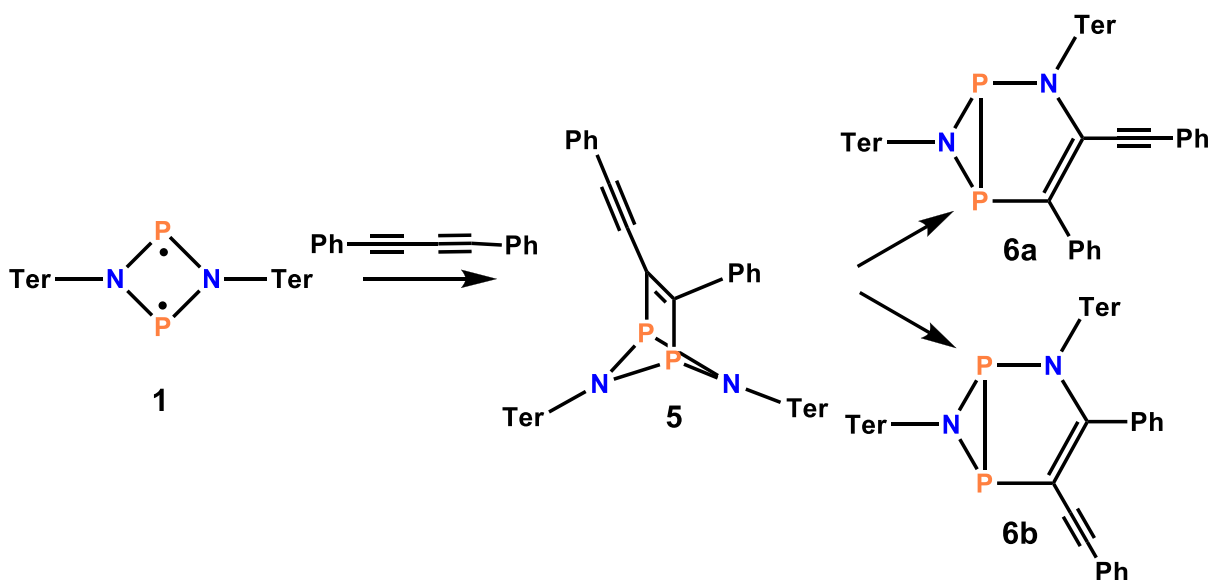
äquivalenten Phosphoratomen. Dies wird durch die  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektroskopie bestätigt, da im Spektrum nur eine Resonanz für beide Phosphoratome bei 235.1 ppm zu erkennen ist.



**Abbildung 7.** Ball-and-Stick-Darstellung der experimentellen Molekülstruktur von **4** im Kristall. Die Terphenylgruppen sind der Übersichtlichkeit halber transparent dargestellt. Ausgewählte Bindungslängen [Å]: P1–N1 1.727(3), P1–N2 1.788(3), P2–N1 1.738(3), P2–N2 1.762(3), P1⋯P2 2.528(2), P1–C1 1.890(4), C1–C2 1.530(5), C4–C5 1.330(7); Ausgewählte Winkel [°]: P1–N2–P2 90.8(1), N1–P1–N2 80.4(1), N2–P1–C1 89.0(2), N1–P1–N2–P2 27.8(1).

Kristalle, die für die Einkristallstrukturanalyse genutzt werden konnten, wurden hierbei aus 1,4-Cyclohexadien als Lösemittel erhalten. In Übereinstimmung mit der berechneten Struktur weist die Struktur im Kristall zwei stark abgewinkelte Terphenylsubstituenten auf, die eine Tasche formen, in der das addierte 1,4-Cyclohexadien Platz findet. Der viergliedrige  $\text{P}_2\text{N}_2$ -Heterocyclus wird durch die Addition stark verformt und besitzt einen Torsionswinkel von ( $\angle(\text{P1–N1–P2–N2}) = 28.3^\circ$ ). Der P1–P2 Abstand liegt mit 2.528(3) Å deutlich über der Summe der Kovalenzradien ( $\Sigma r_{\text{kov}}(\text{P–P}) = 2.22 \text{ Å}$ )<sup>[51]</sup>, aber auch deutlich unter der Summe der Van-der-Waals-Radien ( $\Sigma r_{\text{vdW}}(\text{P} \cdots \text{P}) = 3.60 \text{ Å}$ )<sup>[52]</sup>, während die vier P–N Bindungen alle im Bereich einer Einfachbindung liegen (1.727(3)–1.788(3) Å). Durch die Addition verringert

sich die Bindungsordnung der an der Reaktion beteiligten Doppelbindung. Daraus resultiert ein vergrößerter C–C-Abstand, der nach der Addition im Bereich einer typischen Einfachbindung liegt (C1–C2 1.530(5), cf.  $\Sigma r_{\text{kov}}(\text{C–C}) = 1.50 \text{ \AA}$ ). Die verbleibende Doppelbindung bleibt dahin weitestgehend unverändert (C4–C5 1.330(7), cf.  $\Sigma r_{\text{kov}}(\text{C=C}) = 1.34 \text{ \AA}$ ). Thermische Untersuchungen für **4** ergaben keine nennenswerten Ergebnisse, da es auch hier nur zu einer Zersetzung in nicht identifizierbare Produkte kommt.

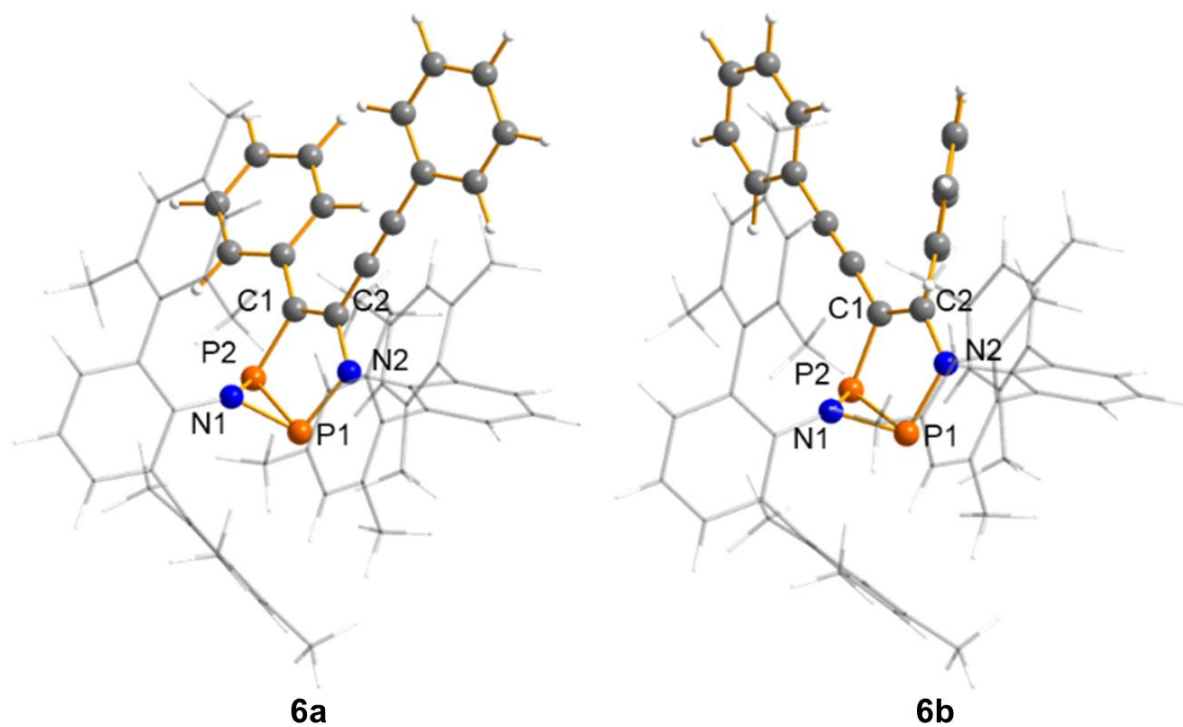


**Schema 11.** Reaktion des Biradikals mit 1,4-Diphenyl-1,3-butadiin und die anschließende Isomerisierung von **5**.

Bereits Alexander Hinz hatte eine Reihe von Alkinen mit  $[\text{P}(\mu\text{-N}^{\text{Ter}})]_2$  umgesetzt und dabei beobachtet, dass die Additionsprodukte in Abhängigkeit der Art der Substituenten an den Alkinen zu Diphosphaaziridinen isomerisieren können.<sup>[38,50]</sup> Es sollte nun untersucht werden, ob eine vergleichbare Reaktion auch bei der Umsetzung von **1** mit 1,4-Diphenyl-1,3-butadiin als Vertreter für konjugierten Diene beobachtet werden kann. Für die Reaktion wurden **1** und das Diin in äquimolarem Verhältnis als Feststoffe vorgelegt und durch Zugabe von Benzol gelöst. Wie auch bei den Dien-Reaktionen kam es zu einer Entfärbung der anfangs orangen Lösung. Das Produkt konnte als amorpher Feststoff isoliert und als Additionsprodukt **5** identifiziert werden. Analog zu den Reaktionen mit den Dienen führt also auch die Reaktion von **1** mit 1,4-Diphenyl-1,3-butadiin zu einem [2+2]-Cycloadditionsprodukt (**Schema 11**). Kristalle für die Einkristallstrukturanalyse konnten nicht gewonnen werden, aber **5** wurde mittels  $^1\text{H}$ -,  $^{13}\text{C}$ - und  $^{31}\text{P}$ -NMR-, IR- und Raman-Spektroskopie, Massenspektrometrie und

Elementaranalyse charakterisiert. Das  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum von **5** zeigt die zu erwartenden Dubletts für die einzelnen Phosphoratome bei 241.5 und 227.8 ppm mit einer Kopplungskonstante von  $^2J(^{31}\text{P}-^{31}\text{P}) = 10.13 \text{ Hz}$ . Verbleibt das Produkt in Lösung, kommt es in einem Zeitraum von etwa vier Wochen zur vollständigen Umlagerung in zwei neue Produkte (**6a**, **6b**) (*Schema 11*). Dadurch, dass nur eine der beiden Dreifachbindungen an der vorhergehenden Addition beteiligt ist, resultieren chemisch nicht äquivalente P-Atome. Da das addierte Alkin über zwei Möglichkeiten verfügt, in eine P-N-Bindung zu insertieren, entstehen zwei Isomere (**6a**, **6b**).

Im  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum lassen sich die beiden Isomere jeweils als Paar von Dubletts (**6a**: -61.8 / -84.7 ppm und **6b**: -58.6 / -90.5 ppm) mit einem Integralverhältnis von etwa 97:3 detektieren. Durch eine Simulation der NMR-Verschiebungen für die einzelnen Isomere ließen sich diese den Signalen zuordnen. Die Simulation ergab für **6a** -109.2 und -95.4 ppm und für **6b** -111.4 und -88.9 ppm. Die Signale des bekannten Acetylenaddukts liegen vergleichsweise bei -60.4 und -87.0 ppm. Energetische Berechnungen für beide Isomere ergaben leicht endergonische Werte für die Umlagerungsprozesse mit 1.21 bzw. 4.26 kcal/mol. **6a** ist folglich mit 3.04 kcal/mol bevorzugt, was sich auch mit dem Integralverhältnis von 97:3 deckt (*Abbildung 8*). Auch für **5** und dessen Umlagerungsprodukte konnten keine reversible Reaktion durch eine thermische Behandlung beobachtet werden. Es kam lediglich zu einer Zersetzung oberhalb von 205 °C.



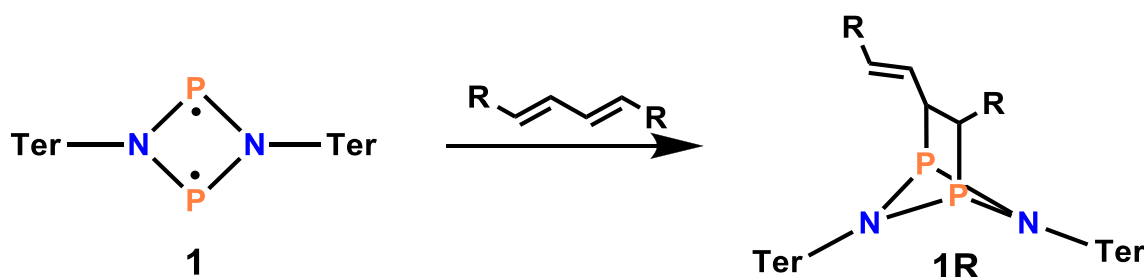
**Abbildung 8.** Quantenchemisch berechnete Minimumstrukturen für die beiden Isomere von **5**. **6a** ( $\Delta G^{\ominus}_{\text{rel}} = 0$  kcal/mol) und **6b** ( $\Delta G^{\ominus}_{\text{rel}} = 3.04$  kcal/mol).

### 3.1.2 Quantenchemische Berechnungen

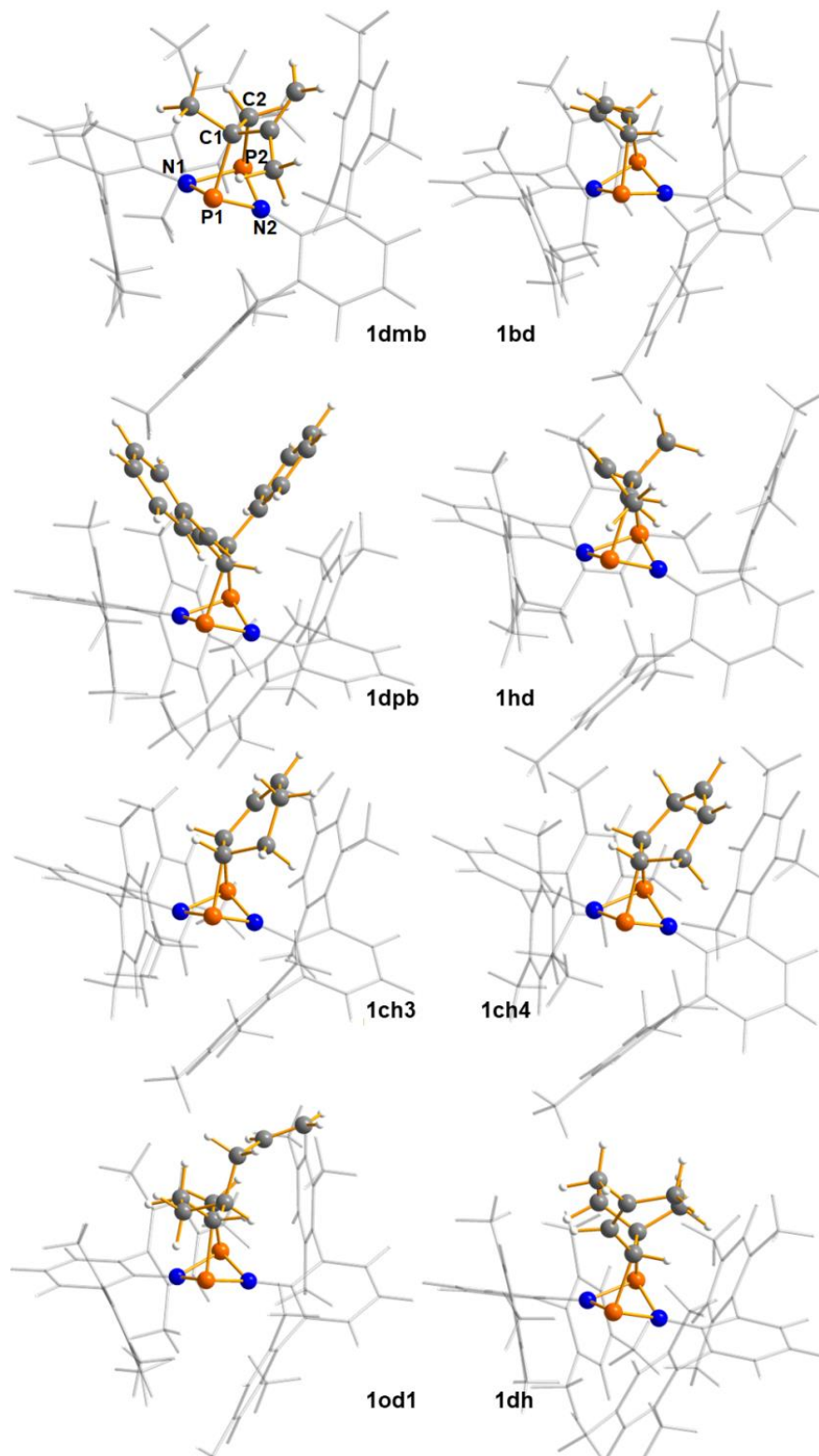
Um weitere Informationen über Struktur, Thermodynamik und Bildung der [2+2]- bzw. [4+2]-Cycloadditionsprodukte zu erhalten, wurden quantenchemische Berechnungen durchgeführt (für Details siehe Kapitel 5.6).

Hierbei wurden unter anderem auch die [4+2]-Additionsprodukte mit einbezogen, auch wenn diese bisher nicht beobachtet werden konnten. Wie zu erwarten und bereits für **4** diskutiert, weisen die berechneten [2+2]-Addukte eine nicht-planare P<sub>2</sub>N<sub>2</sub>-Einheit auf, die durch ein Kohlenstoffgerüst überbrückt wird und somit als ein [2.1.1.]-Bicyclus angesehen werden kann.

Für die überbrückenden Kohlenstoffatome ergibt sich eine Einfachbindungs­länge von 1.521 bis 1.548 Å, ( $\Sigma r_{\text{kov}}(\text{C}-\text{C}) = 1.50 \text{ Å}$ ) bei den Alkenaddukten und eine Doppelbindungs­länge von 1.334 bis 1.403 Å, ( $\Sigma r_{\text{kov}}(\text{C}=\text{C}) = 1.34 \text{ Å}$ ) für die Alkinaddukte. Aus der [4+2]-Addition ergibt sich respektive ein [4.1.1.]-Bicyclus, dessen P<sub>2</sub>N<sub>2</sub>-Einheit deutlich weniger von der Planarität abweicht. Die Diederwinkel liegen bei diesen Addukten zwischen 6 und 13°, während sie bei [2+2]-Addukten bei ca. 30° liegen (*Tabelle 1* bis *Tabelle 5*). Des Weiteren führt die Addition im IR-Spektrum zu einer starken Verschiebung der C–C-Streckschwingungsbanden zu niedrigeren Wellenzahlen ( $\Delta\tilde{\nu}_{\text{C-C}}$  zwischen 400–723 cm<sup>-1</sup>), was im Einklang mit einem vergrößertem Abstand für die überbrückenden Kohlenstoffatome steht (*Tabelle 6*). Diese Beobachtungen hängen hauptsächlich damit zusammen, dass die Bindungsordnung der involvierten Kohlenstoffatome bei der Addition um eins verringert wird.



*Schema 12.* Allgemeine Reaktion des Biradikals **1** mit Dienen.

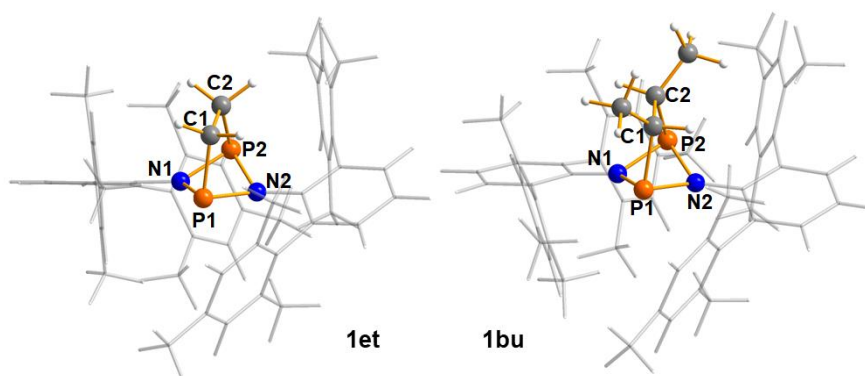


**Abbildung 9.** Berechnete Minimumstrukturen für [2+2]-Addukte **1R** (R = dmb = 2,3-Dimethyl-butadien, bd = 1,3-Butadien, dpb = Diphenyl-1,3-butadien, hd = 2,4-Hexadiene, ch3 = 1,3-Cyclohexadien, ch4 = 1,4-Cyclohexadien, od1 = 1,7-Octadien, dh = 2,5-Dimethyl-2,4-hexadien).

**Tabelle 1.** Ausgewählte berechnete Abstände (Å) und Winkel (°) für [2+2]-Dien-Addukte **1R** (siehe **Abbildung 9**) theoretisches Niveau pbe1pbe/def2svp mit einbezogener Dispersionskorrektur.

R	P1–N1	P1–N2	P1–C1	P2–C2	C1–C2	∠1	∠2	NPNP
<b>1dmb</b>	1.775	1.753	1.948	1.874	1.537	91.4	93.5	27.7
<b>1bd</b>	1.765	1.769	1.937	1.890	1.526	94.5	94.5	28.4
<b>1dpb</b>	1.760	1.788	1.933	1.933	1.521	95.9	95.2	28.3
<b>1hd</b>	1.778	1.757	1.936	1.903	1.525	95.1	96.8	28.9
<b>1ch3</b>	1.783	1.769	1.898	1.918	1.532	93.0	95.1	28.0
<b>1ch4</b>	1.787	1.760	1.902	1.899	1.537	93.1	95.9	28.0
<b>1od1</b>	1.772	1.769	1.915	1.886	1.526	94.1	94.6	28.5
<b>1dh</b>	1.759	1.801	1.912	1.921	1.548	96.2	94.4	28.2

∠1 = N1–P1–C1; ∠2 = N2–P2–C2



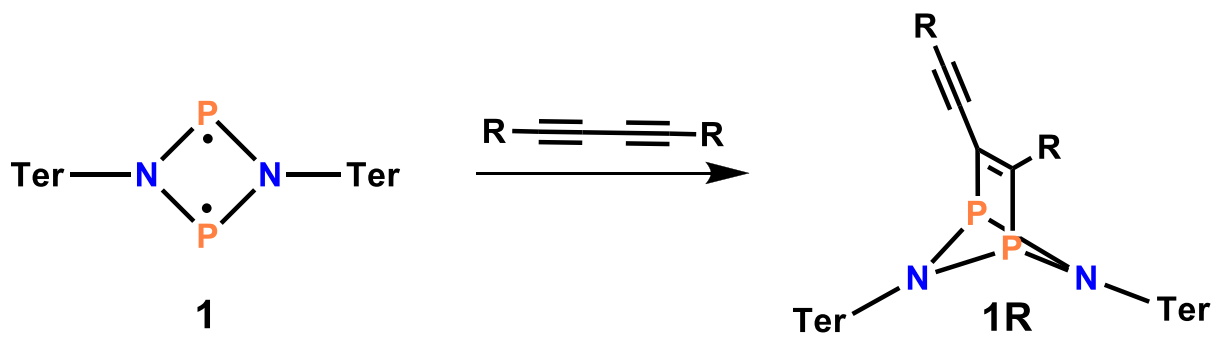
**Abbildung 10.** Berechnete Minimumstrukturen für [2+2]-Addukte **1R** (R = et = Ethen, bu = 2-Buten).

**Tabelle 2.** Ausgewählte berechnete Abstände (Å) und Winkel (°) für lineare [2+2]-Alken-Addukte **1R** (siehe **Abbildung 10**) theoretisches Niveau pbe1pbe/def2svp mit einbezogener Dispersionskorrektur.

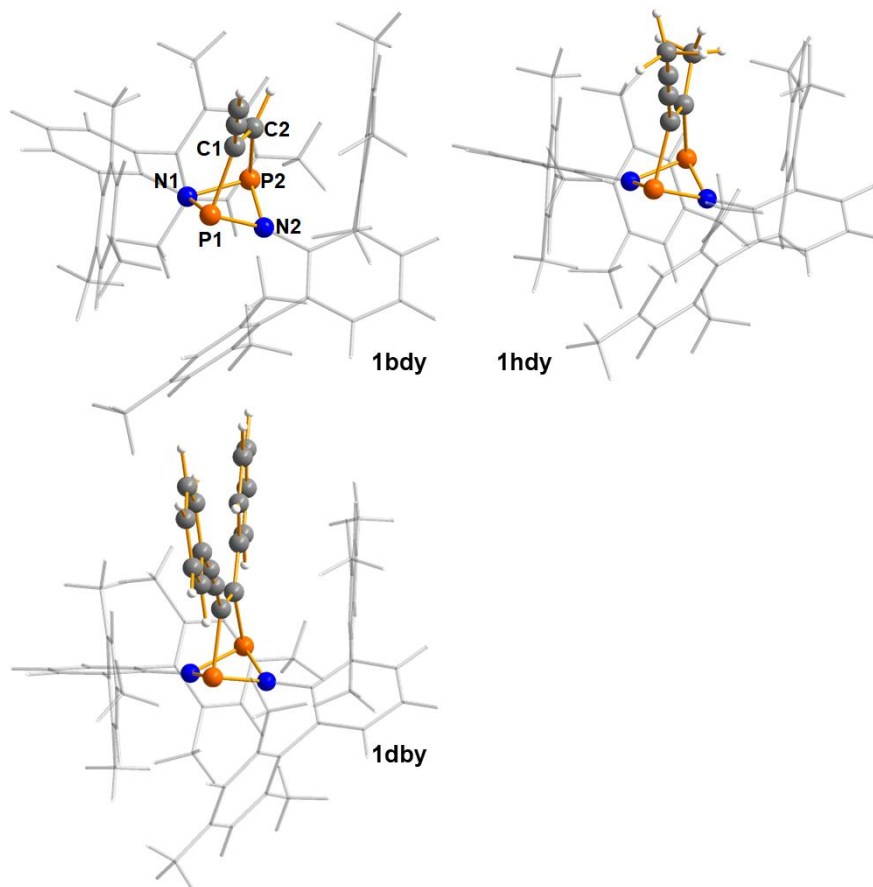
R	P1–N1	P1–N2	P1–C1	P2–C2	C1–C2	∠1	∠2	NPNP
<b>1et</b>	1.750	1.803	1.892	1.895	1.527	94.3	92.5	27.5
<b>1bu</b>	1.763	1.797	1.906	1.907	1.528	95.9	94.8	28.5

∠1 = N1–P1–C1; ∠2 = N2–P2–C2





*Schema 13.* Allgemeine Reaktion des Biradikals mit Diinen.

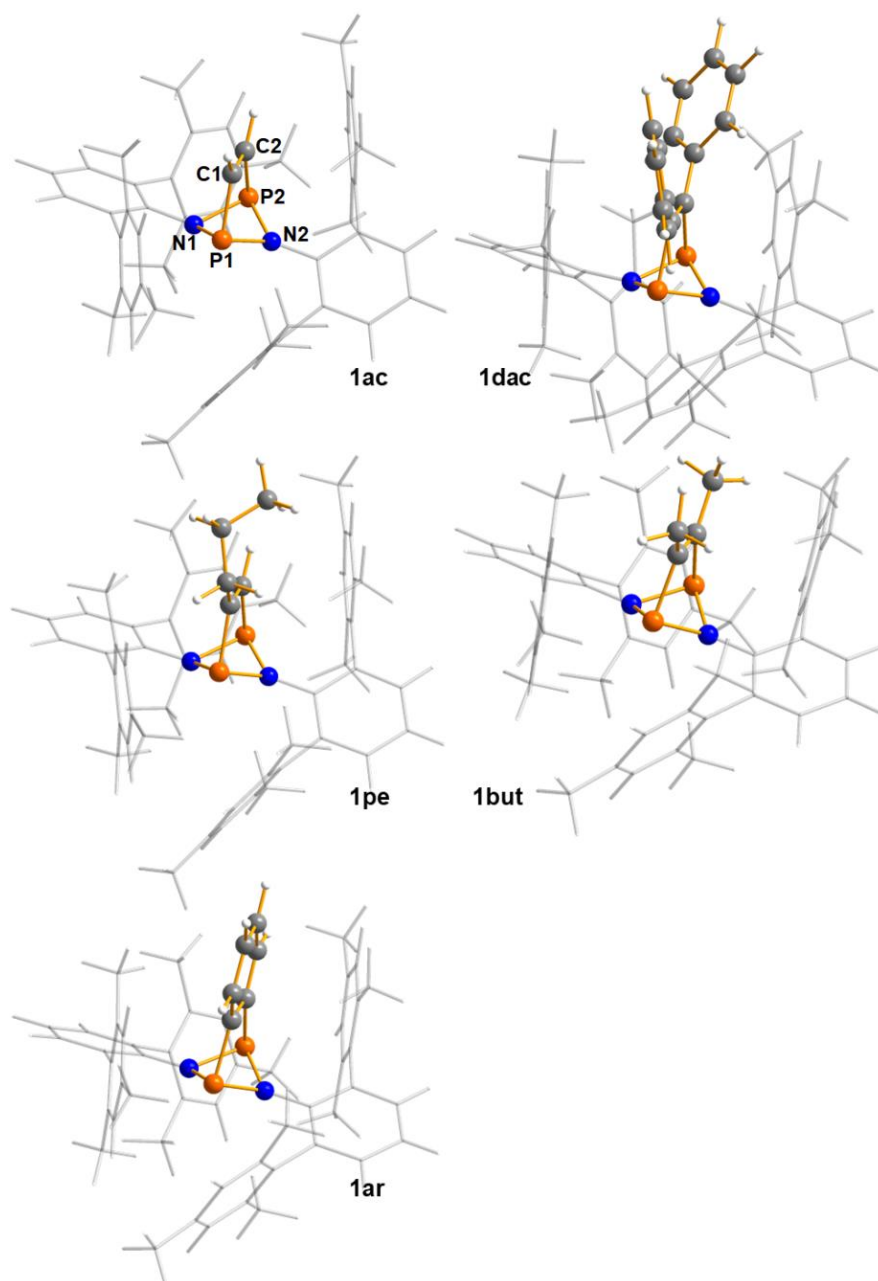


*Abbildung 11.* Berechnete Minimumstrukturen für [2+2]-Diin-Addukte **1R** (R = bdy = 1,3-Butadiin, hdy = 2,4-Hexadiin, dby = 1,4-Diphenyl-1,3-Butadiin).

**Tabelle 3.** Ausgewählte berechnete Abstände (Å) und Winkel (°) für lineare [2+2]-Diin-Addukte **1R** (siehe **Abbildung 11**) theoretisches Niveau pbe1pbe/def2svp mit einbezogener Dispersionskorrektur.

R	P1-N1	P1-N2	P1-C1	P2-C2	C1-C2	$\angle 1$	$\angle 2$	NPNP
<b>1bdy</b>	1.776	1.764	1.942	1.896	1.344	90.7	92.2	29.9
<b>1hdy</b>	1.764	1.787	1.923	1.906	1.351	92.4	92.5	30.4
<b>1dby</b>	1.763	1.774	1.927	1.914	1.360	91.9	92.8	30.0

$\angle 1 = \text{N1-P1-C1}$ ;  $\angle 2 = \text{N2-P2-C2}$

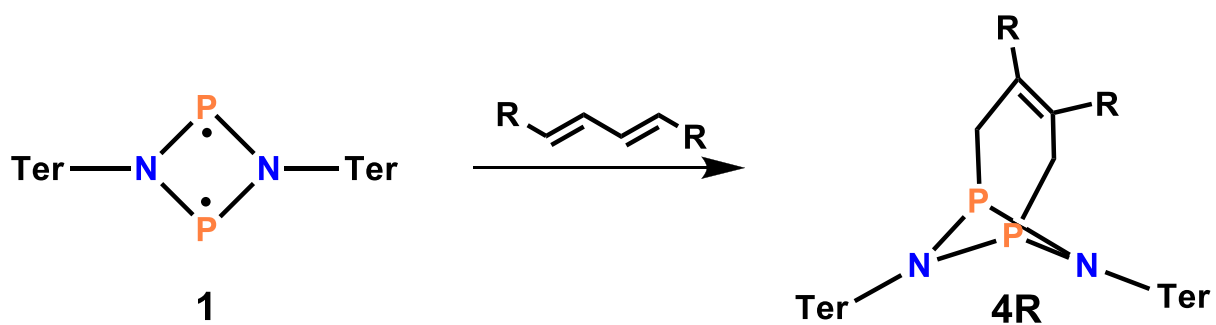


**Abbildung 12.** Berechnete Minimumstrukturen für [2+2]-Addukte **1R** (R = ac = Acetylen, dac = Diphenyl-acetylen, pe = 1-Pentin, but = 2-Butin, ar = Arin).

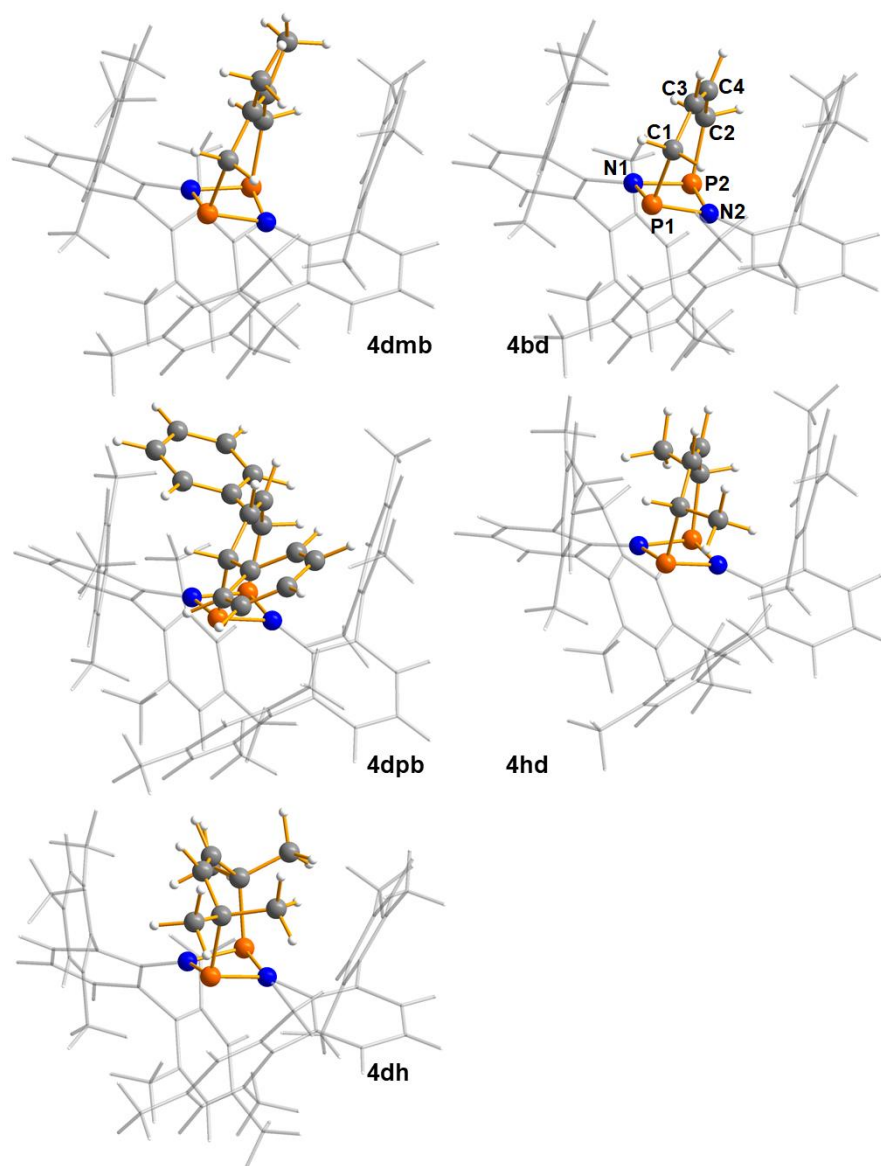
**Tabelle 4.** Ausgewählte berechnete Abstände (Å) und Winkel (°) für [2+2]-Alkin-Addukte **1R** (siehe *Abbildung 12*) theoretisches Niveau pbe1pbe/def2svp mit einbezogener Dispersionskorrektur.

R	P1–N1	P1–N2	P1–C1	P2–C2	C1–C2	$\angle 1$	$\angle 2$	NPNP
<b>1ac</b>	1.790	1.762	1.905	1.904	1.334	90.2	92.4	30.7
<b>1dac</b>	1.758	1.784	1.921	1.925	1.351	92.9	91.8	30.4
<b>1pe</b>	1.787	1.760	1.924	1.890	1.339	91.1	92.7	31.1
<b>1but</b>	1.771	1.785	1.907	1.907	1.343	92.9	92.9	31.5
<b>1ar</b>	1.772	1.787	1.883	1.883	1.403	91.8	91.8	29.3

$\angle 1 = \text{N1–P1–C1}$ ;  $\angle 2 = \text{N2–P2–C2}$



*Schema 14.* Allgemeine Reaktion des Biradikals mit Dienen zum [4+2]-Addukt.



*Abbildung 13.* Berechnete Minimumstrukturen für [4+2]-Dien-Addukte **4R** (R = dmb = 2,3-Dimethylbutadien, bd = 1,3-Butadiene, dpb = 1,4-Diphenyl-1,3-butadien, hd = 2,4-Hexadien, dh = 2,5-Dimethyl-2,4-hexadien).

**Tabelle 5.** Ausgewählte berechnete Abstände (Å) und Winkel (°) für [4+2]-Addukte **4R** (siehe *Abbildung 13*) theoretisches Niveau pbe1pbe/def2svp mit einbezogener Dispersionskorrektur.

R	P1–N1	P1–N2	P1–C1	P2–C2	C1–C2	$\angle 1$	$\angle 2$	NPNP
<b>1dmb</b>	1.741	1.783	1.841	1.847	1.352	108.2	107.5	10.7
<b>1bd</b>	1.745	1.784	1.847	1.852	1.340	107.4	107.0	7.7
<b>1dpb</b>	1.761	1.771	1.886	1.874	1.338	103.1	104.4	6.7
<b>1hd</b>	1.759	1.774	1.860	1.860	1.338	106.6	106.6	7.4
<b>1dh</b>	1.750	1.787	1.925	1.919	1.335	107.6	112.1	12.9

$\angle 1 = \text{N1–P1–C1}$ ;  $\angle 2 = \text{N2–P2–C2}$

**Tabelle 6.** Berechnete C–C-Abstände und Schwingungsbanden für die überbrückenden Kohlenstoffatome in **R** und **1R**. Theoretisches Niveau pbe1pbe/def2svp mit einbezogener Dispersionskorrektur.

R	$\tilde{\nu}_{\text{C-C,R}}$	$\tilde{\nu}_{\text{C-C,1R}}^a$	$\Delta\tilde{\nu}$	$d_{\text{C-C,R}}$	$d_{\text{C-C,1R}}$	$\Delta d_{\text{C-C}}$
Ethen	1717	1005	712	1.331	1.527	0.196
2-Buten	1774	1158	616	1.339	1.528	0.189
2,3-Dimethylbutadien	1694	1168	526	1.345	1.537	0.192
1,3-Butadien	1682	1091	591	1.340	1.526	0.186
Diphenyl-1,3-butadien	1708	1069	639	1.353	1.521	0.168
2,4-Hexadien	1730	1165	565	1.344	1.525	0.181
1,3-Cyclohexadien	1714	1133	581	1.344	1.532	0.188
1,4-Cyclohexadien	1746	1155	591	1.336	1.537	0.201
1,7-Octadien	1745	1022	723	1.334	1.526	0.192
2,5-Dimethyl-2,4-hexadien	1718	1234	484	1.352	1.548	0.196
Acetylen	2085	1600	485	1.209	1.334	0.126
Diphenylacetylen	2347	1672	675	1.219	1.351	0.133
1-Pentin	2249	1663	586	1.211	1.339	0.127
2-Butin	2395	1704	691	1.212	1.343	0.131
1,3-Butadiin	2131	1627	504	1.216	1.344	0.128
2,4-Hexadiin	2296	1671	626	1.219	1.351	0.132
Diphenyl-1,3-butadiin	2268	1639	629	1.220	1.360	0.140

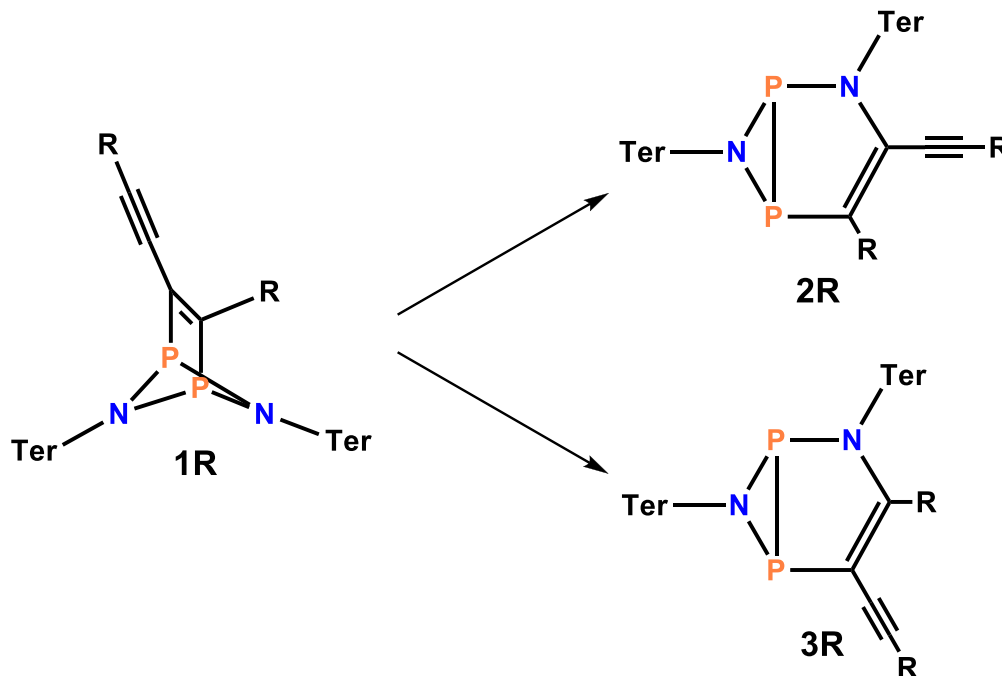
Arin	2054	1654	400	1.252	1.403	0.151
<b>[4+2]-Cycloaddition</b>						
2,3-Dimethylbutadien	1418	1760	-341	1.480	1.352	-0.128
1,3-Butadien	1450	1767	-317	1.454	1.340	-0.115
Diphenyl-1,3-butadien	1410	1776	-366	1.439	1.338	-0.101
2,4-Hexadien	1341	1778	-437	1.451	1.338	-0.113
2,5-Dimethyl-2,4-hexadien	1203	1768	-565	1.449	1.335	-0.114
<b>Nicht überbrückende Doppel-/Dreifachbindung<sup>b</sup> in R and 1R</b>						
2,3-Dimethylbutadien	1694	1733	-39			
1,3-Butadien	1682	1726	-43			
Diphenyl-1,3-butadien	1708	1735	-27			
2,4-Hexadien	1730	1749	-19			
1,3-Cyclohexadien	1714	1745	-31			
1,4-Cyclohexadien	1746	1763	-18			
1,7-Octadien	1745	1739	6			
2,5-Dimethyl-2,4-hexadien	1718	1758	-40			
1,3-Butadiin	2131	2207	-76			
2,4-Hexadiin	2296	2341	-45			
Diphenyl-1,3-butadiin	2268	2293	-25			

<sup>a</sup> diese Bande ist immer mit Käfigschwingungen gekoppelt; <sup>b</sup> zweite C-C-Schwingungsbande, die nahezu unbeeinflusst durch die Addition bleibt

**Tabelle 7.** Berechnete Gibbs-Energien  $\Delta_R G_{298}^\ominus$  (kcal mol<sup>-1</sup>) für die Bildung von [2+2]- **1R** und [4+2]-Addukten **4R**. Theoretisches Niveau pbe1pbe/def2svp mit einbezogener Dispersionskorrektur (geordnet nach  $\Delta_R G_{298}^\ominus$  der [2+2]-Produkte).

R	$\Delta_R G_{298}^\ominus(1R)$	$\Delta_R G_{298}^\ominus(4R)$
2,5-Dimethyl-2,4-hexadien*	-7.95	10.83
2,4-Hexadien	-10.94	-11.52
2,3-Dimethylbutadien*	-12.39	-23.73
Diphenyl-1,3-butadien	-12.68	-8.03
2-Buten	-14.79	
1,4-Cyclohexadien*	-17.01	
1,7-Octadien*	-21.51	
1,3-Butadien	-20.23	-25.78
1,3-Cyclohexadien	-25.00	
Ethen	-29.43	

\*Experimentell untersucht



**Schema 15.** Insertion des verbrückenden Alkins im [2+2]-Addukt in eine P-N-Bindung, was zur Bildung eines Azadiphosphiridin führt.

**Tabelle 8.** Berechnete Gibbs-Energien  $\Delta_{\text{R}}G_{298}^{\ominus}$  (kcal mol<sup>-1</sup>) für die Isomerisation von **1R** zu **2R** oder **3R**: **1R** → **2R** oder **3R** (siehe *Schema 15*). Theoretisches Niveau pbe1pbe/def2svp mit einbezogener Dispersionskorrektur (geordnet nach  $\Delta_{\text{R}}G_{298}^{\ominus}$  der [2+2]-Addukte).

<b>R</b>	$\Delta_{\text{R}}G_{298}^{\ominus}$ ( <b>1R</b> )	$\Delta_{\text{R}}G_{298}^{\ominus}$ ( <b>2R</b> )	$\Delta_{\text{R}}G_{298}^{\ominus}$ ( <b>3R</b> )
2-Butin	-31.76	-3.92 <sup>a</sup>	
2,4-Hexadiin	-32.60	-1.41	-4.25
1-Pentin	-32.74	-8.38	-5.36
Diphenylacetylen	-35.91	3.51 <sup>a</sup>	
Acetylen	-37.70	-10.26 <sup>a</sup>	
1,3-Butadiin	-38.17	-1.39	-6.54
Diphenyl-1,3-butadiin*	-40.23	1.21	4.26
Arin	-92.34	-0.20 <sup>a</sup>	

\*Experimentell untersucht <sup>a</sup>symmetrisches Alkin, daher nur ein Isomer

Die [2+2]-Produkte von Alkinen und Alkenen sind sich in den bisher beschriebenen Eigenschaften insgesamt sehr ähnlich. Unterschiede treten hier bei der Verformung der P<sub>2</sub>N<sub>2</sub>-Einheit auf. Diese ist bei den Alkinaddukten durch die resultierende Doppelbindung im Addukt etwas stärker ausgeprägt als bei den Alkenaddukten (maximale Abweichung der Diederwinkel 4°). Die berechneten Bindungslängen (siehe *Tabelle 9* bis *Tabelle 13*) sind bei allen Addukten nahezu identisch. Eine Ausnahme bilden hier natürlich die Bindungslängen der überbrückenden Kohlenstoffatome.

Für die thermodynamischen Eigenschaften der Addukte wurden die Gibbs-Energien der einzelnen Reaktionen (siehe *Schema 12* bis *Schema 15*) berechnet. In Übereinstimmung mit den Experimenten sind alle berechneten [2+2]-Addukte das Produkt einer exergonischen Reaktion (Alkene: -7.95 bis -20.07 kcal mol<sup>-1</sup>; Alkine: -31.76 bis -92.34 kcal mol<sup>-1</sup>). Die Addition von Spezies mit Doppelbindungen ist offensichtlich weniger exergonisch als die Addition von Verbindungen mit einer Dreifachbindungen (*cf.* -14.79 kcal mol<sup>-1</sup> 2-Buten, -29.23 kcal mol<sup>-1</sup> 2-Butin; *Tabelle 7*, *Tabelle 8*).

Das Gleiche gilt auch für die Addition von Ethen, dessen Addition energetisch günstiger als die Addition der konjugierten und nicht konjugierten Diene ist (*cf.* -29.43 kcal mol<sup>-1</sup> Ethen, -10.94 kcal mol<sup>-1</sup> 2,4-Hexadien; *Tabelle 7*). Thermodynamische Untersuchungen bezüglich der Reversibilität der Additionsreaktion von 2,3-Dimethylbutadien ergaben eine Gibbs-



Energie von  $-12.39 \text{ kcal mol}^{-1}$  für die Bildung von **2**. Eine Reaktion mit 2,5-Dimethyl-2,4-hexadien ( $-7.95 \text{ kcal mol}^{-1}$ ) konnte nicht beobachtet werden. Interessanterweise ist die Bildung der [4+2]-Addukte für konjugierte Alkine und Alkene in den meisten Fällen theoretisch energetisch günstiger als die [2+2]-Addition (2,3-Dimethylbutadien: [2+2]  $-12.39 \text{ kcal mol}^{-1}$ ; [4+2]  $-23.73 \text{ kcal mol}^{-1}$ ). Experimentell beobachtet wurden trotzdem nur [2+2]-Addukte, was auf das Symmetrieverbot der [4+2]- Reaktion zurückzuführen ist.

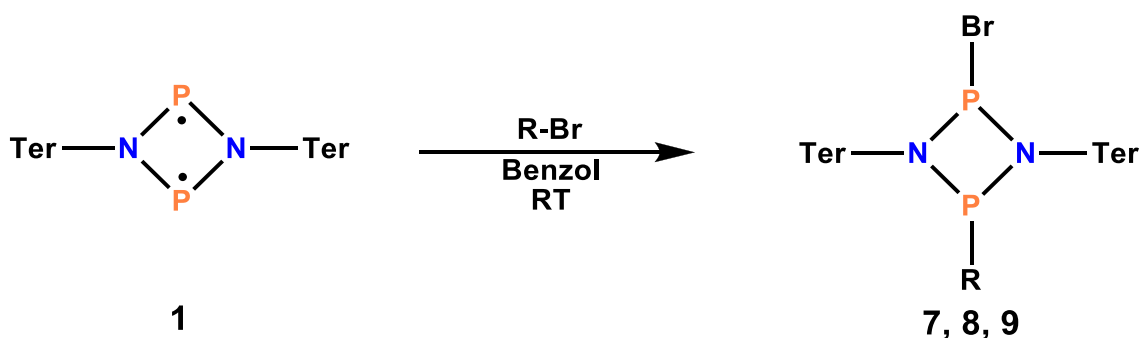
Die Gibbs-Energien für die Isomerisationsprozesse der Alkinaddukte sind alle schwach exergonisch. Eine Ausnahme bilden hier die phenylsubstituierten Alkine, bei denen die Umlagerung schwach endergonisch ist. Trotzdem konnte eine langsame Insertion für das 1,4-Diphenyl-1,3-butadiin nachgewiesen werden (*Tabelle 8*). Es gilt zu bedenken, dass alle quantenchemischen Rechnungen für isoliert Teilchen in der Gasphase durchgeführt wurden, so dass kleinere Abweichungen zu experimentellen Daten zu erwarten sind.



## 3.2 Addition von Bromalkanen an $[P(\mu\text{-NTer})]_2$

Von der Reaktion des Biradikals mit Halogenalkanen wie zum Beispiel mit Dichlormethan war bekannt, dass es nicht immer zu einer selektiven Umsetzung, sondern vielmehr zu einer Mischung aus verschiedenen substituierten Produkten kommt.<sup>[13]</sup> Beobachtet wurden bei der Umsetzung mit Dichlormethan der doppelt chlorierte Vierring  $[P\text{Cl}(\mu\text{-NTer})]_2$ , aber auch geringere Mengen des Additionsproduktes  $[P\text{Cl}(\mu\text{-NTer})\text{PCH}_2\text{Cl}]$ . Eine Umsetzung des Biradikals mit Tetrachlorkohlenstoff führte hingegen zu einer selektiven Bildung von  $[P\text{Cl}(\mu\text{-NTer})]_2$ .<sup>[33][34][13]</sup>

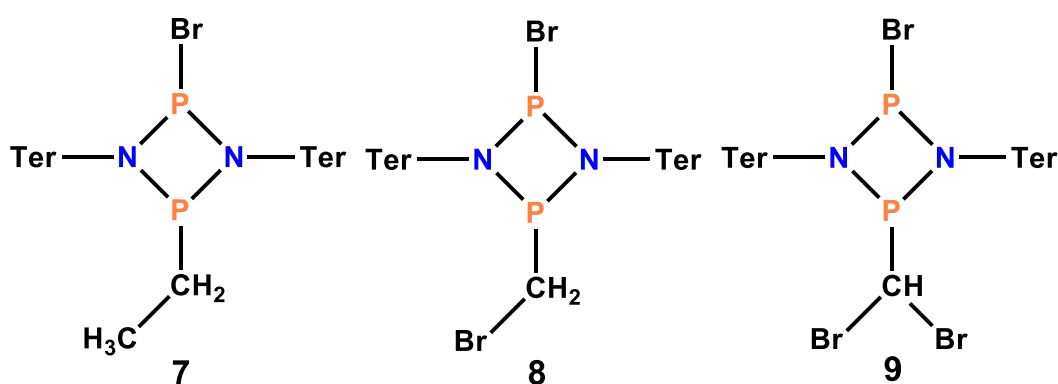
Da bei Bromalkanen eine höhere Reaktivität als bei Chloralkanen gegenüber dem Biradikal und damit eine eher selektive Reaktion zu erwarten war, sollten im Rahmen dieser Arbeit entsprechende Untersuchungen durchgeführt werden. Dazu wurde das Biradikal  $[P(\mu\text{-NTer})]_2$  mit Bromethan, Dibrommethan bzw. Tribrommethan umgesetzt. Wie erwartet führten alle diese Reaktionen bei einer einfachen Umsetzung von **1** mit den Bromoalkanen in Benzol und bei Raumtemperatur deutlich selektiver als bei den Chloralkanen zu einem  $P_2N_2$ -Cyclus, der an einem Phosphoratom durch Brom und an dem anderen Phosphoratom durch den Rest ( $R = \text{CH}_2\text{CH}_3, \text{CH}_2\text{Br}, \text{CHBr}_2$ ) des Bromalkans substituiert ist (*Schema 16*).



*Schema 16.* Reaktion des Biradikals **1** mit Bromalkanen ( $R = \text{CH}_2\text{CH}_3$  (**7**),  $\text{CH}_2\text{Br}$  (**8**),  $\text{CHBr}_2$  (**9**)).

Die Reaktionen dauerten jeweils mehrere Stunden, konnte jedoch sowohl mittels  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektroskopie als auch optisch durch Farbänderung der orangen Lösung zu gelb verfolgt werden. Ein Überschuss an Bromalkan beschleunigte die Reaktion. Durch Entfernen des Lösemittels und überschüssigen Bromalkans und einer anschließenden Extraktion mit *n*-Hexan konnte das Produkt als fast farbloser, kristalliner Feststoff in Ausbeuten um die 50 %

gewonnen werden. Kristalle, die für die Röntgenstrukturanalytik geeignet waren, konnten aus einer gesättigten *n*-Hexan Lösung gewonnen werden, die über Nacht auf  $-30\text{ }^{\circ}\text{C}$  heruntergekühlt wurde. Die Produkte (*Schema 17*) weisen eine sehr gute Löslichkeit in Benzol und Fluorbenzol auf, sind hingegen in *n*-Hexan und *n*-Pentan deutlich schlechter löslich. Die Stabilität von **9** im gelösten Zustand gegenüber Licht ist eher schlecht. Hier ließ sich nach wenigen Tagen eine Braunfärbung der Lösung und die Entstehung unbekannter Spezies im  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum beobachten. Die beiden anderen Verbindungen wiesen eine deutlich bessere Stabilität auf. Genauere Untersuchungen zu den entstehenden Nebenprodukten und photochemischen Eigenschaften der Verbindungen wurden im Rahmen dieser Arbeit nicht unternommen und sind Gegenstand weiterführender Arbeiten.

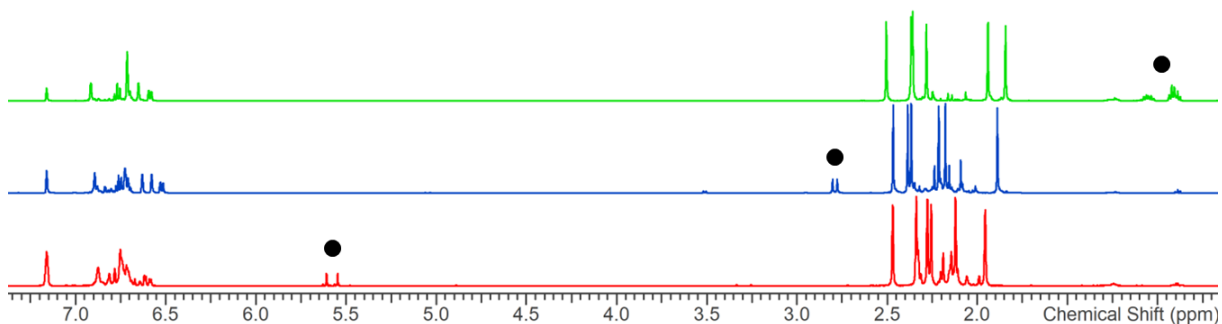


*Schema 17.* Produkte aus der Reaktion von **1** mit Bromethan (**7**), Dibrommethan (**8**) und Tribrommethan (**9**).

Die Einfachheit der genannten Reaktion ermöglicht eine große Bandbreite an denkbaren und gut designbaren Produkten, die für weitere Folgereaktionen einsetzbar sind.

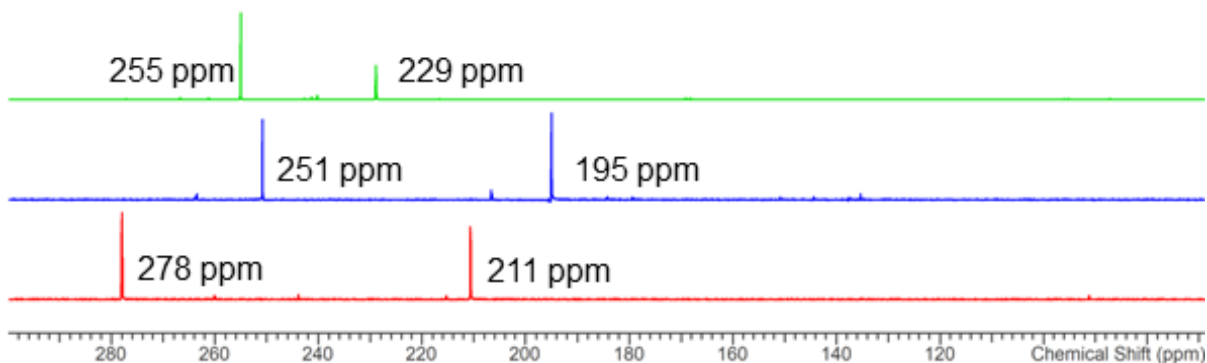
In den  $^1\text{H}$ -NMR-Spektren dieser Verbindungen ist sehr gut der Einfluss der Bromatome auf die Verschiebung der Protonen der  $\text{CH}_2$ - bzw.  $\text{CH}$ -Gruppe am Phosphor zu erkennen, was ein Indiz für die Azidität dieser Gruppe ist. Das Signal der  $\text{CH}_2$ -Gruppe erscheint bei dem Bromethanaddukt **7** als komplexeres Multipllett wegen der Kopplung zur  $\text{CH}_3$ -Gruppe und den Phosphoratomen bei 1.01–1.10 ppm. Bei dem Dibrommethanaddukt **8** tritt das Signal der  $\text{CH}_2$ -Gruppe bereits deutlich weiter tieffeldverschoben als Dublett (Kopplung zum Phosphoratom) mit einer Kopplungskonstanten von 13 Hz auf. Für **9** liegt das Signal des  $\text{CH}$ -aziden Protons sogar bei 5.58 ppm (Dublett mit einer Kopplungskonstante von 15.3 Hz). Die Signale der Methylgruppen der Terphenylsubstituenten liegen als einzelne Singulett im

erwarteten Bereich von ca. 1.5-2.5 ppm vor und werden nur geringfügig von der Substitution durch die verschiedenen Bromalkane beeinflusst (**Abbildung 14**).

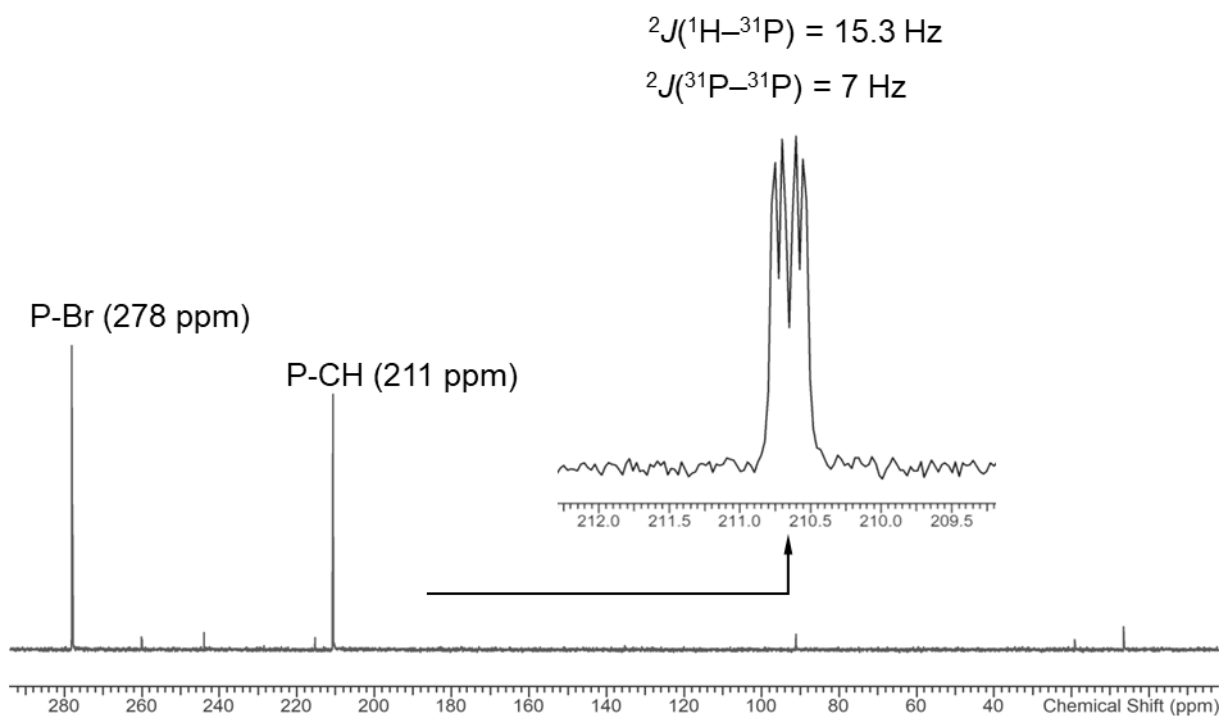


**Abbildung 14.**  $^1\text{H}$ -NMR-Spektren der Bromalkanaddukte (grün = Bromethan (**7**), blau = Dibrommethan (**8**), rot = Tribrommethan (**9**)) mit Markierung an dem Signal der CH-aziden  $\text{CH}_2/\text{CH}$ -Gruppe in Benzol- $d_6$ .

Im  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum der Bromalkanaddukte sind jeweils zwei Signale zu erkennen. Diese treten je nach Auflösung als breite Singulets (durch die geringe Kopplungskonstante von ca. 7 Hz) oder als die zu erwartenden Dubletts durch die Kopplung zum jeweils anderen Phosphoratom auf (**Abbildung 15**). Bei **9** ist im protonengekoppelten  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum auch die Kopplung zum CH-aziden Proton erkennbar, sodass hier ein doppeltes Dublett für das entsprechende Phosphoratom zu sehen ist (**Abbildung 16**). Die chemischen Verschiebungen der Phosphoratome liegen mit 229/255 ppm (**7**), 195/251 ppm (**8**) und 211/278 ppm (**9**) im erwarteten Bereich für derartige Verbindungen. Das bisher einzige literaturbekannte formale Additionsprodukt des Biradikals mit Dichlormethan (aus der Reaktion des Fünfring-Biradikals  $[\text{Ter}_2\text{N}_2\text{P}_2(\text{CN}^t\text{Bu})]$  mit  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ) liegt bei 243.5/199.9 ppm für das *cis*-Isomer und 242.2/214.8 ppm für das *trans*-Isomer.<sup>[40]</sup>



**Abbildung 15.**  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektren der Bromalkanaddukte (grün = Bromethan (**7**), blau = Dibrommethan (**8**), rot = Tribrommethan (**9**)) in Benzol- $d_6$ . Die jeweils weiter tieffeldverschobenen Signale werden vom bromsubstituierten Phosphoratom erzeugt.

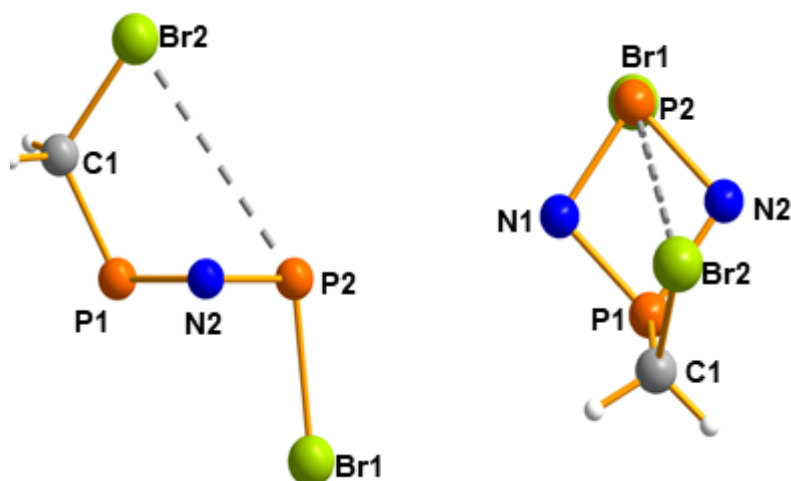


**Abbildung 16.**  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum von **9** (Aufspaltung des Signals vom PCH zum Doppeldublett) in Benzol- $d_6$ .

Des Weiteren nimmt die Differenz zwischen den chemischen Verschiebungen der beiden Phosphor-Signale durch die zunehmende Bromsubstitution zu ( $\Delta\delta(\text{P1}, \text{P2}; \text{P1} = \text{P-Br}, \text{P2} = \text{P-R}) = 26$  (**7**),  $56$  (**8**) und  $67$  ppm (**9**)). Laut NMR-Daten liegen alle drei Bromalkanaddukte als jeweils ein Isomer vor und nicht wie bei dem Dichlormethan-Addukt als Isomerengemisch.<sup>[40]</sup> Im  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum sind dennoch kleinere Signale zu erkennen, die

keiner Spezies zugeordnet werden konnten. In der Einkristall-Röntgenstrukturanalyse wurde jeweils das *trans*-Isomer gefunden. Auffällig in den Molekülstrukturen der Kristalle ist, dass das Bromatom der Alkylkette in Richtung Ring gedreht ist und somit über dem zweiten Phosphoratom liegt, was auf eine Wechselwirkung hindeutet. Im Falle von **7** ist auch die CH<sub>3</sub>-Gruppe ähnlich angeordnet und in den Ring gedreht (*Abbildung 17*). Signifikante Unterschiede der Addukte untereinander liegen hier bei dem Abstand zwischen Bromatom Br2 und Phosphoratom P2 vor (P⋯Br in **8** = 3.973(2); in **9** 3.503(3) Å; *Tabelle 9*).

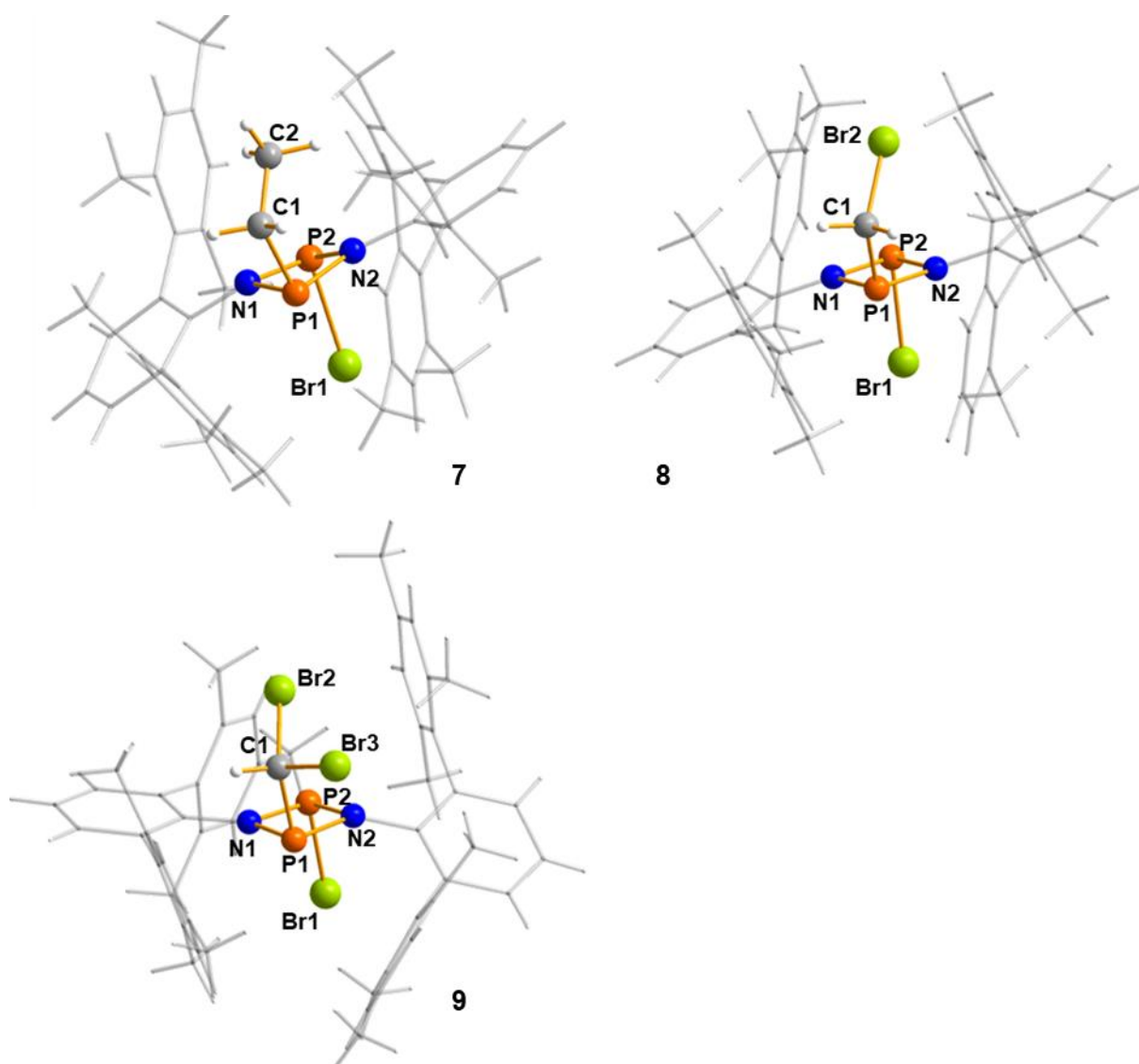
Abweichungen, die die kovalenten Bindungslängen betreffen, treten hauptsächlich bei der P–Br-Bindung auf. Diese ist bei **9** mit 2.273(3) Å um etwa 0.15 Å kürzer als die der anderen Addukte (**7** = 2.420(1) Å; **8** = 2.422(2) Å). Die auffälligsten strukturellen Unterschiede zeigen sich jedoch bei der zentralen P<sub>2</sub>N<sub>2</sub>-Einheit. Diese liegt im Falle von **8** planar, für **9** leicht gewinkelt (3.1(3)°) und für **7** stark verformt (12.2(1)°) vor (*Tabelle 9*).



*Abbildung 17.* Seitenansicht (links) und Draufsicht (rechts) der P<sub>2</sub>N<sub>2</sub>-Einheit nach der Addition von Dibrommethan (**8**). Die gestrichelte Bindung zeigt den P2–Br2-Abstand. Die Terphenylgruppen sind der Übersichtlichkeit halber weggelassen.

Für weitere Informationen bezüglich Struktur der Addukte und der theoretisch möglichen Bildung von *cis*-Isomeren wurden quantenchemische Berechnungen durchgeführt. Hierbei fiel auf, dass die theoretischen Strukturwerte für die *trans*-Addukte bis auf den Diederwinkel der P<sub>2</sub>N<sub>2</sub>-Einheit gut mit den experimentell ermittelten Werten übereinstimmen (*Tabellen 9* und *10*). Der berechnete Wert für den Diederwinkel weicht vor allem bei **8** mit 11.152° sehr stark von dem Wert aus der Einkristall-Röntgenstrukturanalyse ab (0.0(3)°). Die berechneten Diederwinkel von **7** und **9** weichen mit etwa 3° von den Werten aus der Einkristall-Röntgenstrukturanalyse ab (**7** = 12.15° (berechnet 9.50°); **9** = 3.10° (berechnet 0.16)°). Die

energetischen Betrachtungen der Addukte ergaben eine thermodynamisch günstigere Bildungsenergie für die jeweiligen *trans*-Produkte und stimmen somit sehr gut mit den experimentellen Befunden überein. Für die *trans*-Isomere ergaben sich exergone Gibbs-Werte von  $-28.07$  kcal/mol für **7** und  $-34.28$  bzw.  $-34.23$  kcal/mol für **8** bzw. **9**. Die Werte für die *cis*-Isomere liegen bei  $-25.98$ ,  $-32.03$  bzw.  $-28.96$  kcal/mol (**7**, **8**, **9**) und sind somit 2.09, 2.25 bzw. 5.27 kcal/mol (**7**, **8**, **9**) weniger exergonisch als die der *trans*-Isomere (*Tabelle 10*).



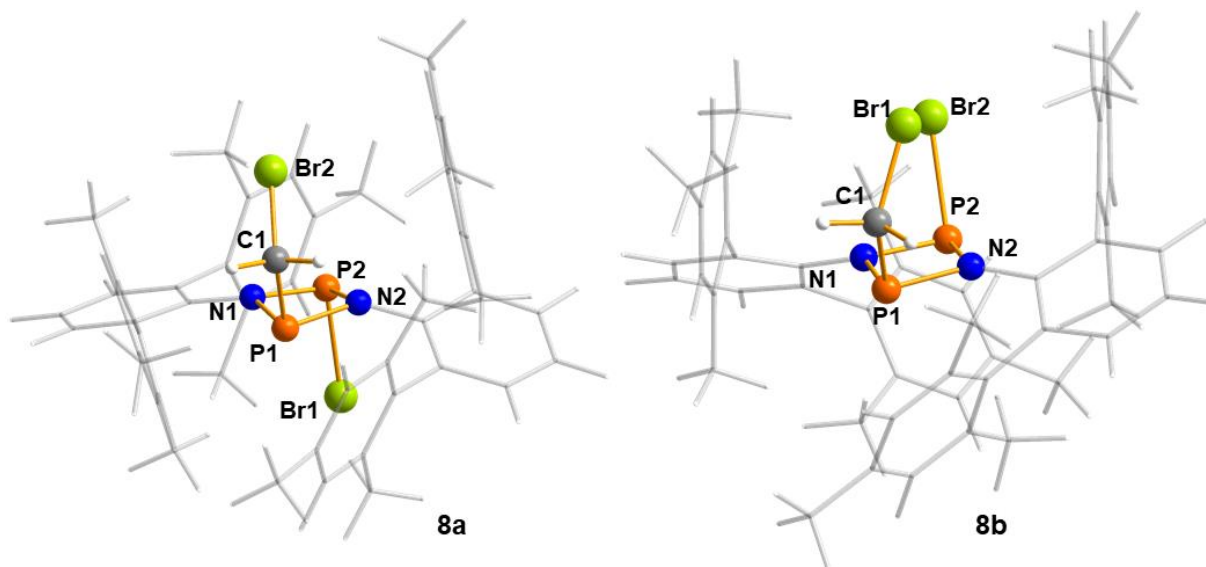
**Abbildung 18.** Ball-and-Stick-Darstellung der Molekülstrukturen des Bromethan- (**7**), Dibrommethan- (**8**) und Tribrommethanaddukts (**9**) im Kristall. Die Terphenylgruppen sind der Übersichtlichkeit halber transparent und als *Wires-and-Sticks*-Modell dargestellt.



**Tabelle 9.** Ausgewählte experimentelle Bindungslängen (Å) und Winkel (°) der Bromalkanaddukte (**Abbildung 18**).

Addukte	N1–P1	N1–P2	P1–C1	Br2–P2	P2–Br1	NPNP
<b>7</b>	1.765(3)	1.709(2)	1.844(3)	3.748(3)*	2.420(1)	12.2(1)
<b>8</b>	1.724(7)	1.722(6)	1.846(2)	3.973(2)	2.422(2)	0.0(3)
<b>9</b>	1.748(8)	1.711(7)	1.874(1)	3.503(3)	2.273(3)	3.1(3)

\*C2–P2-Abstand, da kein Brom an der Alkylkette



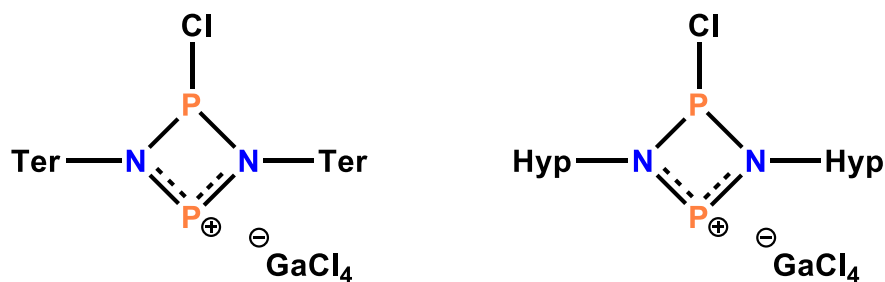
**Abbildung 19.** Ball-and-Stick-Darstellung der berechneten Molekülstrukturen des *trans*-Dibrommethanaddukts (**8a**) und *cis*-Dibrommethanaddukts (**8b**). Die Terphenylgruppen sind der Übersichtlichkeit halber transparent und als *Wires-and-Sticks*-Modell dargestellt.

**Tabelle 10.** Berechnete Bindungslängen (Å), Diederwinkel (NPNP) und Gibbs-Energien  $\Delta_R G_{298}^\ominus$  (kcal mol<sup>-1</sup>) von *trans*- (**a**) und *cis*- (**b**)Addukten.

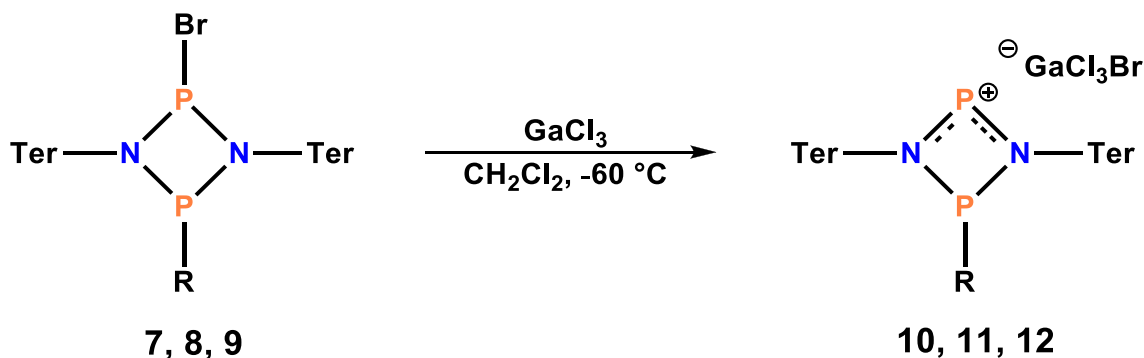
<i>trans/cis</i> -Addukte	N1–P1	N1–P2	P1–C1	Br2–P2	P2–Br1	NPNP	$\Delta_R G_{298}^\ominus$
<b>7a</b>	1.794	1.727	1.856	3.659*	2.397	9.503	–28.07
<b>8a</b>	1.776	1.737	1.853	3.889	2.391	11.152	–34.28
<b>9a</b>	1.770	1.743	1.893	3.469	2.356	0.162	–34.23
<b>7b</b>	1.768	1.736	1.843	3.788*	2.396	1.169	–25.98
<b>8b</b>	1.751	1.746	1.845	4.029	2.358	2.858	–32.03
<b>9b</b>	1.760	1.762	1.921	(4.994)	2.335	8.656	–28.96

\*C2–P2-Abstand, da kein Brom an der Alkylkette

Wie bereits am Anfang des Kapitels erwähnt, besitzen die Bromalkanaddukte gute Voraussetzungen für Folgereaktionen. Durch die vorhandenen Halogenatome ergibt sich die Möglichkeit, diese z.B. durch den Einsatz einer Lewis-Säure wie GaCl<sub>3</sub> zu eliminieren, um so Kationen zu generieren. Diese Art von Kationen sind bereits aus früheren Arbeiten von Nico Weding und Rene Kuzora bekannt, die die Precursoren der Biradikale [CIP( $\mu$ -NTer)]<sub>2</sub> bzw. [CIP( $\mu$ -NHyp)]<sub>2</sub>, mit GaCl<sub>3</sub> zu den entsprechenden Mono-Kationen umsetzten.<sup>[53,54]</sup>



**Schema 18.** Mono-Kationen aus der Umsetzung von [CIP( $\mu$ -NTer)]<sub>2</sub> bzw. [CIP( $\mu$ -NHyp)]<sub>2</sub> mit GaCl<sub>3</sub>.

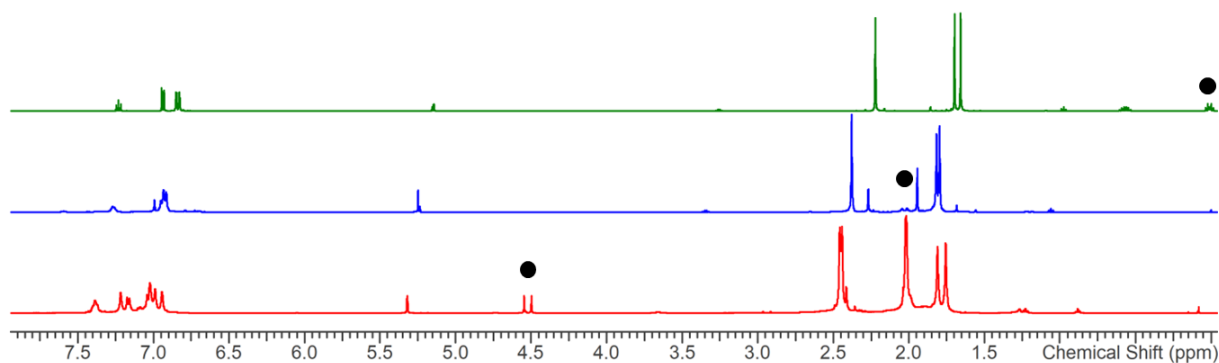


**Schema 19.** Reaktion der Bromalkanaddukte (**7**, **8**, **9**) mit GaCl<sub>3</sub> zu (**10**, **11**, **12**) (R = (**7**, **10**) CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>, (**8**, **11**) CH<sub>2</sub>Br, (**9**, **12**) CHBr<sub>2</sub>).

Für diese Reaktion wurden das jeweilige Bromalkanaddukt und ein Äquivalent GaCl<sub>3</sub> als Feststoffe zusammengegeben und bei -60 °C in CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> gelöst (**Schema 19**). Bei der Zugabe des Lösemittels färbte sich die Lösung in allen drei Fällen schlagartig tief rot. Durch das langsame Entfernen des Lösemittels *in vacuo* bis zur einsetzenden Kristallisation konnten bei -30 °C jeweils rote Kristalle gewonnen werden, die sich für die Einkristall-

Röntgenstrukturanalytik eigneten. Bei den isolierten Verbindungen handelte es sich um die in (*Schema 19*) abgebildeten Salze **10**, **11** bzw. **12**. Es wurde also in allen Fällen das Bromid abstrahiert, welches direkt an das Phosphoratom gebunden war. Die Produkte **10** und **11** ließen sich in guter Reinheit mit Ausbeuten von etwa 20 % isolieren. Bei **12** gelang es nicht, größere Mengen an reinem Produkt zu isolieren, da beim Entfernen des Lösemittels ein feiner Niederschlag anfiel, der anhand der NMR-Daten auf größere Mengen einer bisher unbekanntes Spezies hindeutete. Diese könnte das Produkt aus der Reaktion des doppeltbromierten Biradikals  $[\text{PBr}(\mu\text{-N}^{\text{Ter}})]_2$  mit  $\text{GaCl}_3$  sein, welches in geringen Mengen auch als Nebenprodukt bei der Eduktsynthese zu beobachten war. Auch durch die höhere Anzahl an Reaktionsmöglichkeiten durch die weiteren Bromatome könnte es zu Produktgemischen kommen. Versuche mit  $\text{GaBr}_3$  um einen Chlor-Bromaustausch zu verhindern wurden bisher nicht durchgeführt.

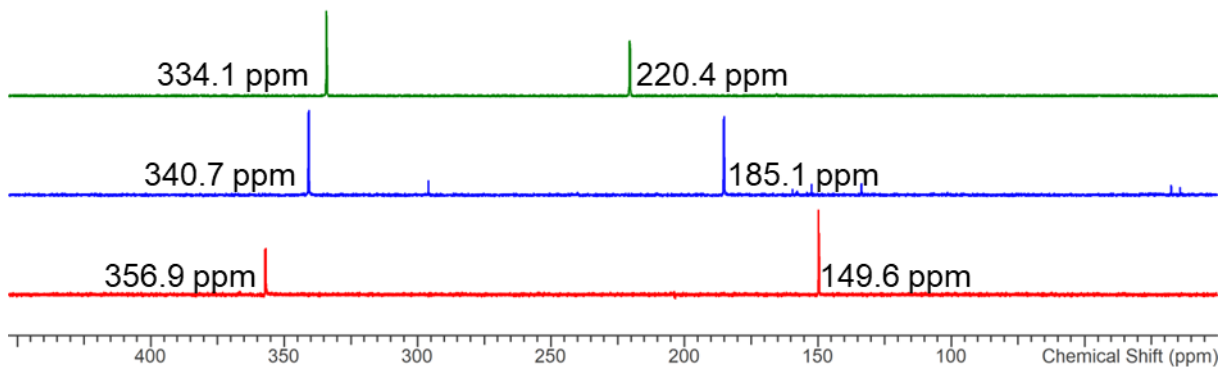
Die  $^1\text{H-NMR}$ -Spektren von **10**, **11** und **12** unterscheiden sich nur geringfügig zu ihren jeweiligen Edukten (**7**, **8** und **9**). Auffällig sind die chemischen Verschiebungen der  $\text{CH/CH}_2$ -Gruppen. Diese treten in sehr ähnlichem Maße auf, sind jedoch im Vergleich zu den Addukten (**7**, **8** und **9**) hochfeldverschoben. Das Multiplett der  $\text{CH}_2$ -Gruppe von **10** tritt bei 0.69–0.80 ppm auf (**7** = 1.01–1.10 ppm). Für **11** verschiebt sich das Signal im Vergleich zu **8** von 2.79 ppm auf 2.03 ppm und für **12** von 5.58 auf 4.52 ppm (*Abbildung 20*). Auch die Aufspaltung der Signale vergrößert sich geringfügig. Die Kopplungskonstante nimmt von 13 Hz auf 17 Hz (von **8** zu **11**) bzw. von 15.3 Hz auf 23.8 Hz (von **9** zu **12**) zu. An dieser Stelle ist zu beachten, dass **7**, **8** und **9** aufgrund eines möglichen Halogenaustauschs in deuteriertem Benzol gemessen wurden, während die Kationen aufgrund der schlechten Löslichkeit in Benzol in deuteriertem Dichlormethan gemessen werden mussten obwohl auch hier ein Halogenaustausch möglich ist. Die chemischen Verschiebungen sind daher nur bedingt vergleichbar, wobei trotzdem ein signifikanter Trend zu erkennen ist.



**Abbildung 20.**  $^1\text{H}$ -NMR-Spektren von (**10**, **11**, **12**) (grün = Bromethan (**10**), blau = Dibrommethan (**11**), rot = Tribrommethan (**12**)) mit Markierung an dem Signal der CH-aziden  $\text{CH}_2/\text{CH}$ -Gruppe in  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ .

Vor allem die  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektren unterscheiden sich deutlich gegenüber den Spektren der Addukte. Hier zeigt sich eine signifikante Tieffeldverschiebung der Signale (P–Br) durch die Abstrahlung eines Bromidions. Nach der Reaktion mit  $\text{GaCl}_3$  erscheinen diese Signale ( $\text{P}^+$ ) bei 334.1, 340.7 bzw. 356.9 ppm (**10**, **11** bzw. **12**) (Addukte **7**, **8** bzw. **9**: 225, 251 bzw. 278 ppm). Deutlich schwächer, aber trotzdem auffällig, ist die Hochfeldverschiebung des Signals vom anderen Phosphoratom. Diese fällt bei **12** ( $\text{R} = \text{CHBr}_2$ ) mit 149.6 ppm (im Edukt **9** 211 ppm) sehr viel stärker aus als bei den Verbindungen **10** ( $\text{R} = \text{CH}_2\text{CH}_3$ ) bzw. **11** ( $\text{R} = \text{CH}_2\text{Br}$ ) mit 220.4 bzw. 185.1 ppm (Edukt (**7**) 229 bzw. Edukt (**8**) 195 ppm) (**Abbildung 21**). Insgesamt liegen die Signale im erwarteten Bereich für bereits bekannte, kationische Formen des NPNP-Heterocyclus. Diese Kationen resultieren zum Beispiel aus der Umsetzung des Biradikals mit  $\text{CO}_2$ , welche unter der Abspaltung von CO zur oxidierten, zwitterionischen Form  $[\text{OP}(\mu\text{-N}^+\text{Ter})_2\text{P}]$  führte (335.0 ppm für  $\text{P}^+$ , 196.6 ppm für  $\text{P}-\text{O}$ ).<sup>[42]</sup> Auch die direkte Umsetzung des Biradikal-Precursors  $[\text{PCl}(\mu\text{-N}^+\text{Ter})_2]$  mit  $\text{GaCl}_3$  führte zum entsprechenden Kation  $[\text{ClP}(\mu\text{-N}^+\text{Ter})_2\text{P}]^+$  mit einer Verschiebung von 366 ppm für das  $\text{P}^+$  und 204 ppm für  $\text{P}-\text{Cl}$ .<sup>[53]</sup>

Die Ergebnisse der Einkristall-Röntgenstrukturanalytik ergaben auch für die kationische Spezies der Bromalkanaddukte **11** und **12** jeweils ein in den  $\text{P}_2\text{N}_2$ -Ring gedrehtes Bromatom des Bromalkylsubstituenten, wie bereits für die Addukte **8** und **9** diskutiert. Auch für **10** ist die  $\text{CH}_3$ -Gruppe des Ethylsubstituenten am Phosphor wieder ähnlich wie beim Edukt **7** gedreht.

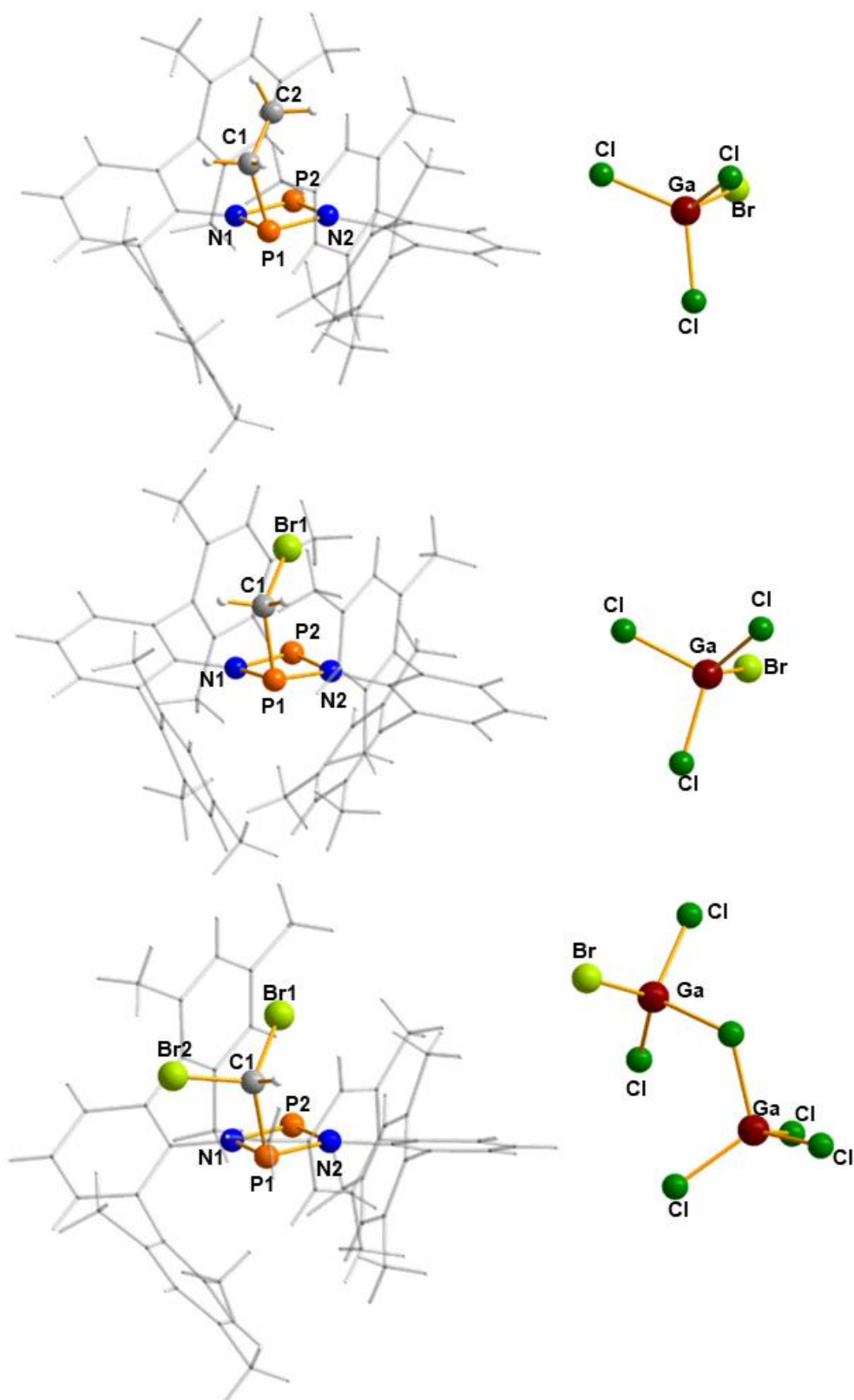


**Abbildung 21.**  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektren von (**10**, **11**, **12**) (grün = Bromethan (**10**), blau = Dibrommethan (**11**), rot = Tribrommethan (**12**)) in  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ .

Die Kationen von **10** und **11** kristallisieren jeweils mit  $[\text{GaCl}_3\text{Br}]^-$  als Anion. Die Verbindung **12** kristallisiert hingegen mit einem  $[\text{Ga}_2\text{Cl}_6\text{Br}]^-$  als Gegenion (**Abbildung 22**). Durch die Abstraktion eines Bromidions kommt es innerhalb des Vierrings zu einer geringfügigen Verkürzung der N1–P2-Bindung und einer etwa gleichgroßen Verlängerung der N1–P1-Bindung. Die Phosphor-Kohlenstoffbindung bleibt hingegen nahezu unverändert. Diese Tatsachen, aber auch die verstärkte Wechselwirkung zwischen dem Bromatom vom Bromalkyl-Substituenten und dem kationischen Phosphoratom ( $\text{P2}\cdots\text{Br1}$ ; **Abbildung 22**), tragen zu einer deutlichen Verkleinerung des Abstands zwischen diesen beiden Atomen bei. Besonders stark ausgeprägt ist dieser Effekt bei **11**, mit einem um fast 1 Å kürzeren Abstand als im Addukt **9** (Addukt: 3.973(2) Å; Kation: 3.082(1) Å, **Tabelle 11**).

Auch die Verformung des  $\text{P}_2\text{N}_2$ -Rings wird mehr oder weniger stark durch die Bromidabstraktion beeinflusst. Während **7** noch einen Diederwinkel von  $12.2(1)^\circ$  aufweist, ist die  $\text{P}_2\text{N}_2$ -Einheit in **10** annähernd planar ( $0.94(9)^\circ$ ). Bei der Reaktion von **8** zu **11** tritt der entgegengesetzte Effekt auf. Während die  $\text{P}_2\text{N}_2$ -Einheit in **8** planar ist, weist die  $\text{P}_2\text{N}_2$ -Einheit in **11** einen Diederwinkel von  $6.85(9)^\circ$  auf. Beim Übergang von **9** zu **12** verkleinert sich der sowieso schon kleine Diederwinkel nur geringfügig (**Tabellen 9** und **11**).

Ein Halogenaustausch bzw. eine Fehlbesetzung in den Molekülstrukturen der Kristalle ist nur bei den Anionen  $[\text{GaCl}_3\text{Br}]^-$  und  $[\text{Ga}_2\text{Cl}_6\text{Br}]^-$  zu beobachten. Die Kationen von **10**, **11** und **12** weisen laut Einkristall-Röntgenstrukturanalytik keine Fehlbesetzung durch Chloridionen auf.



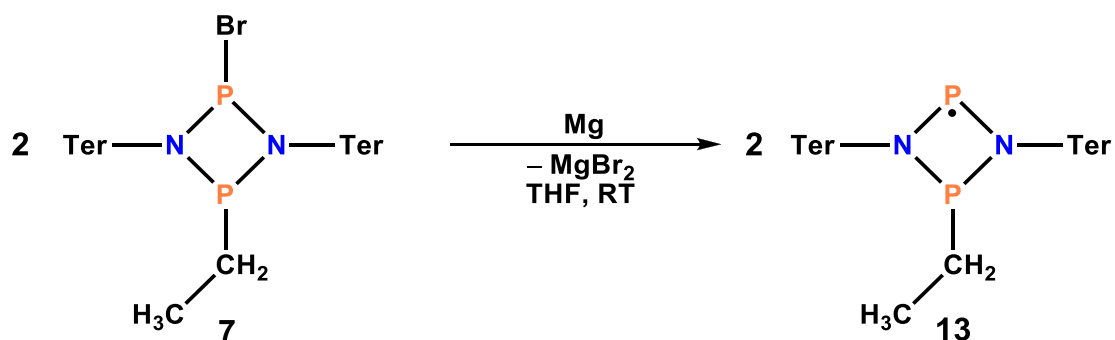
**Abbildung 22.** Ball-and-Stick-Darstellung der Molekülstrukturen (10, 11, 12) im Kristall mit  $[\text{GaCl}_3\text{Br}]^-$  bzw.  $[\text{Ga}_2\text{Cl}_6\text{Br}]^-$  als Anion. Die Terphenylgruppen sind der Übersichtlichkeit halber transparent und als *Wires-and-Sticks*-Modell dargestellt.

**Tabelle 11.** Ausgewählte experimentelle Bindungslängen (Å) und Winkel (°) der kationischen Spezies **10**, **11** und **12** im Kristall (*Abbildung 22*).

Addukte	N1–P1	N1–P2	P1–C1	Br1–P2	NPNP
<b>10</b>	1.789(2)	1.651(2)	1.848(3)	3.335(4)*	0.94(9)
<b>11</b>	1.791(2)	1.657(2)	1.864(2)	3.082(1)	6.85(9)
<b>12</b>	1.762(9)	1.640(1)	1.88(1)	3.253(4)	1.3(5)

\*C2–P2-Abstand, da kein Brom an der Alkylkette

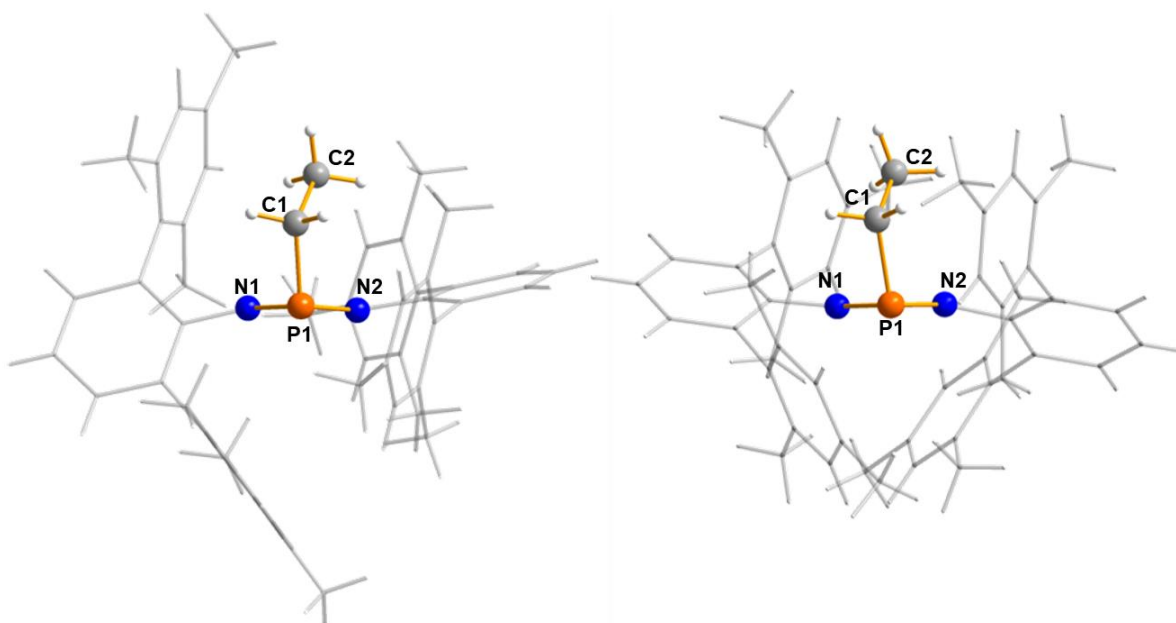
Des Weiteren stellte sich die Frage, ob sich auch die Addukte **7–9** analog zu  $[\text{PCl}(\mu\text{-N}^+\text{Ter})]_2$  reduzieren lassen würden und welche Produkte daraus resultieren. Mit Magnesium als Reduktionsmittel wurden erste Redoxreaktionen an den Bromalkan-Addukten unternommen.



**Schema 20.** Reaktion des Ethylbromid-Adduktes mit Magnesiumspänen.

Dafür wurde das jeweilige Bromalkan-Addukt in THF gelöst, mit Magnesiumspänen bei Raumtemperatur zusammengegeben und die Reaktionsmischung gerührt. Nach kurzer Zeit war bereits ein Farbwechsel von schwach gelb zu rot-braun erkennbar, welcher sich über die Zeit intensivierte.  $^{31}\text{P}$ -NMR-spektroskopische Verfolgungen der Reaktion konnten zeigen, dass das jeweilige Addukt über einen langen Zeitraum von mehr als sieben Tagen abreagiert, jedoch nicht nur zur selektiven Bildung eines Produkts führte. Isolierung von möglichen Produkten durch Entfernen des Lösemittels und der anschließenden Extraktion mit Benzol waren bisher nicht erfolgreich. Problematisch bei der einfachen Reduktion mit Magnesium ist die Vielzahl an möglichen Produkten, die aus dem Vorkommen mehrerer Bromatome als Reaktionszentren in **8** und **9** resultieren. Einzig aus der Reduktion von **7** konnten nach der

Extraktion vereinzelte tiefrote Kristalle minderer Qualität gewonnen werden, welche trotzdem ausreichend für die Strukturaufklärung waren. Die Einkristall-Röntgenstrukturanalyse deutet auf die Bildung eines Monoradikals **13** hin, welche aus der homolytischen Abspaltung des Bromatoms resultieren würde (**Schema 19**). Auch die Farbe der Kristalle spricht für eine derartige Verbindung. Kationische Monoradikale aus der Reaktion des Biradikals  $[P(\mu\text{-Nter})]_2$  mit  $\text{Ag}[\text{B}(\text{C}_6\text{F}_5)_4]$  waren ebenfalls tief orange bis rot.<sup>[39]</sup> NMR- bzw. EPR-Messungen zum Nachweis dieser Radikalbildung waren auf Grund der kleinen Menge und Unreinheit an isoliertem Produkt bisher nicht möglich. Da **7** nur ein Bromatom enthält, welches für eine Reduktion in Frage kommt, war zu erwarten, dass diese Reaktion am ehesten selektiv ablaufen wird. Interessant zu sehen sind die strukturellen Verschiedenheiten im Kristall, die sich aus der Anwesenheit des einzelnen Elektrons, welches das Radikal von der kationischen Spezies unterscheidet, ergeben (**Abbildung 23**).



**Abbildung 23.** Ball-and-Stick-Darstellung der experimentellen Molekülstrukturen von **13** (links, Monoradikal) und dem Kation von **10** (rechts) im Kristall. Die Terphenylgruppen sind der Übersichtlichkeit halber transparent und als *Wires-and-Sticks*-Modell dargestellt.



**Tabelle 12.** Ausgewählte experimentelle Bindungslängen (Å) und Winkel (°) des Monoradikals **13** und des Kations von **10** (*Abbildung 23*).

Addukte	N1-P1	N1-P2	P1-C1	C2-P2	NPNP
<b>13</b>	1.72(1)	1.700(1)	1.800(8)	3.35(1)*	4.4(6)
<b>10</b>	1.789(2)	1.651(2)	1.848(3)	3.335(4)*	0.94(9)

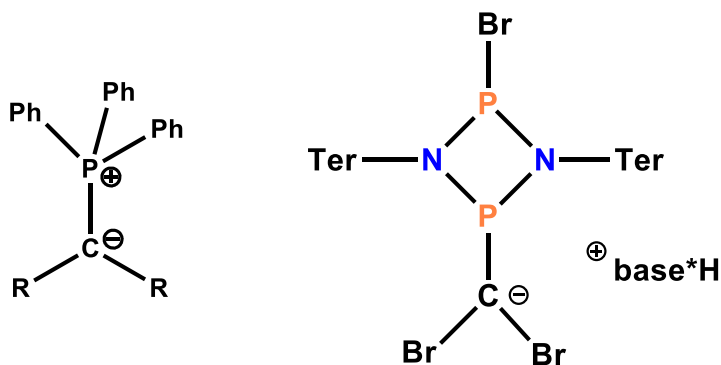
\*C2-P2-Abstand, da kein Brom an der Alkylkette

Die Co-Kristallisation weiterer Nebenprodukte mindert die Qualität der Kristalle, so dass sich keine genauen Aussagen bezüglich der Bindungslängen treffen lassen. Auffällig ist der Unterschied der P<sub>2</sub>N<sub>2</sub>-Einheit, welche in **13** mit 4.4° etwas stärker verformt ist als der fast planare Vierring von **10** (*Tabelle 12*).

Letztendlich gelang es noch nicht, ausreichende Informationen über die anderen Reduktionsprodukte zu erlangen. Die Wahl eines anderen Reduktionsmittels oder eine Anpassung der Reaktionsbedingungen wäre ein Ansatz, um diese besser zugänglich zu machen. Dem konnte aber aus Zeitgründen im Rahmen dieser Arbeit nicht mehr nachgegangen werden und wird Gegenstand weiterführender Arbeiten sein.

Abschließend zu den Bromalkanaddukten sollte noch die CH-azidität der CH<sub>2</sub>/CH-Gruppe untersucht werden, die durch die Art und Anzahl der Substituenten an der Alkylkette gesteuert werden kann. Dieses war von Interesse, da durch Deprotonierung eine negative Ladung am Kohlenstoff verbleiben würde, was durch das gebundene Phosphoratom eine Ylid ähnliche Verbindung zur Folge hätte (

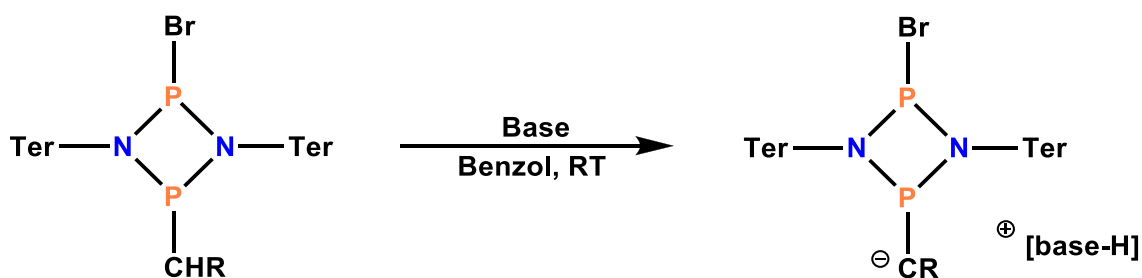
*Schema 21*). Diese könnte dann analog zur Wittig-Reaktion mit Aldehyden umgesetzt werden um neuartige Umlagerungsprodukte oder Additionsprodukte zu generieren.



**Schema 21.** Phosphorylid (links, R = Organylgruppe oder Wasserstoff) und deprotoniertes Bromoformaddukt (rechts).

Dafür wurden in den ersten Reaktionen verschiedene Basen getestet, welche den  $\alpha$ -Kohlenstoff deprotonieren sollten und somit zur Bildung eines Salzes oder eines Umlagerungsproduktes führen würden (*Schema 22*). Als Basen wurden hierfür Triethylamin, Kaliumhydrid, 1,8-Diazabicyclo[5.4.0]undec-7-en und 4-(Dimethylamino)-pyridin verwendet. Die Reaktionen wurden bei Raumtemperatur in Benzol durchgeführt, um bei der Bildung eines Salzes ein direktes Ausfällen als Kristalle oder Niederschlag zu ermöglichen. Vielversprechend waren hier die Umsetzungen mit DMAP und DBU, die in einfachen NMR-Versuchen eine quantitative Umsetzung und eine moderate Selektivität, also die Bildung weniger unterschiedlicher Produkte, andeuteten. Die Umsetzung mit  $\text{Et}_3\text{N}$  führte unter den gegebenen Bedingungen zu keinerlei Reaktion, während die heterogene Reaktion mit KH nur langsam und zu bisher nicht isolierbaren Produkten führte.

In Upscale-Versuchen mit DBU in äquimolaren Mengen fielen nach kurzer Zeit farblose Nadeln aus der Reaktionslösung aus. Diese konnten als Hydrobromid der Base identifiziert werden. NMR-spektroskopische Untersuchungen nach mehreren Tagen zeigten allerdings nur eine geringe Umsetzung des Eduktes.



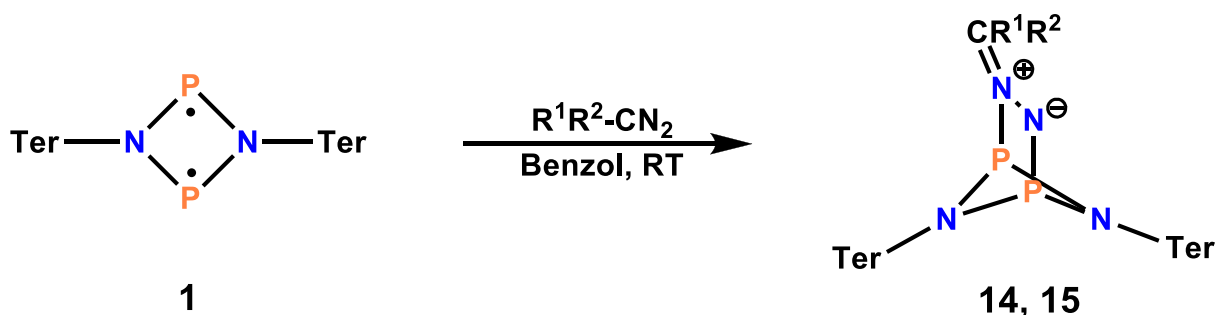
*Schema 22.* Reaktion der Bromalkanaddukte mit verschiedenen Basen ( $\text{R} = \text{HCH}_3, \text{HBr}, \text{Br}_2$ ; Basen =  $\text{Et}_3\text{N}$ , KH, DBU, DMAP).

Es wurde versucht, das aus der HBr-Eliminierung resultierende Produkt durch Abtrennen des Hydrobromids zu isolieren. Erhalten wurde stets nur das unvollständig abreagierte Edukt. Umsetzungen mit einem Überschuss an DBU führten zu einer vollständigeren Umsetzung, hatten jedoch zur Folge, dass sich die überschüssige Base nicht mehr aus dem System entfernen lässt. Bisher konnten daher auch hier keine Produkte isoliert werden.

Da direkte Isolierungen der Verbindungen bisher nicht erfolgreich waren, könnten durch *in situ*-Umsetzungen mit Aldehyden die entsprechenden Derivate erhalten werden. *Bis dato* wurden noch keine derartigen Versuche durchgeführt.

### 3.3 Addition von Diazomethanen an $[P(\mu\text{-N}Ter)]_2$

Auch wenn aliphatische Diazoverbindungen eine eher geringe Bedeutung für die kommerzielle Chemie besitzen, sind sie aufgrund ihrer besonderen elektronischen Eigenschaften und der vorgebildeten  $N_2$ -Einheit für die Synthesechemie interessant und so auch eine vielversprechende Stoffklasse für neuartige Derivate des  $[P(\mu\text{-N}Ter)]_2$ . Der einfachste Vertreter, das Diazomethan  $CH_2N_2$ , ist bis  $-145\text{ }^\circ\text{C}$  gasförmig und sowohl als Gas als auch in konzentrierter gelöster Form hochexplosiv. Durch seine starke methylierende Eigenschaft ist es zusätzlich stark krebserregend. Deshalb wurden das Diphenyl- und Trimethylsilyl-diazomethan als besser handhabbare Vertreter dieser Stoffklasse für die Umsetzung mit dem Biradikal **1** ausgewählt.<sup>[55-60]</sup> Es sollte nun das Verhalten von Diazomethanen gegenüber **1** untersucht werden. Es galt herauszufinden, auf welche Art die Diazomethane mit **1** reagieren und ob nach einer erfolgreichen Addition eine gezielte  $N_2$ -Eliminierung induziert werden kann, welche wiederum zu neuen Umlagerungsprodukten führen würde. TGA-Messungen sollten diesen spezifischen Masseverlust detektieren.

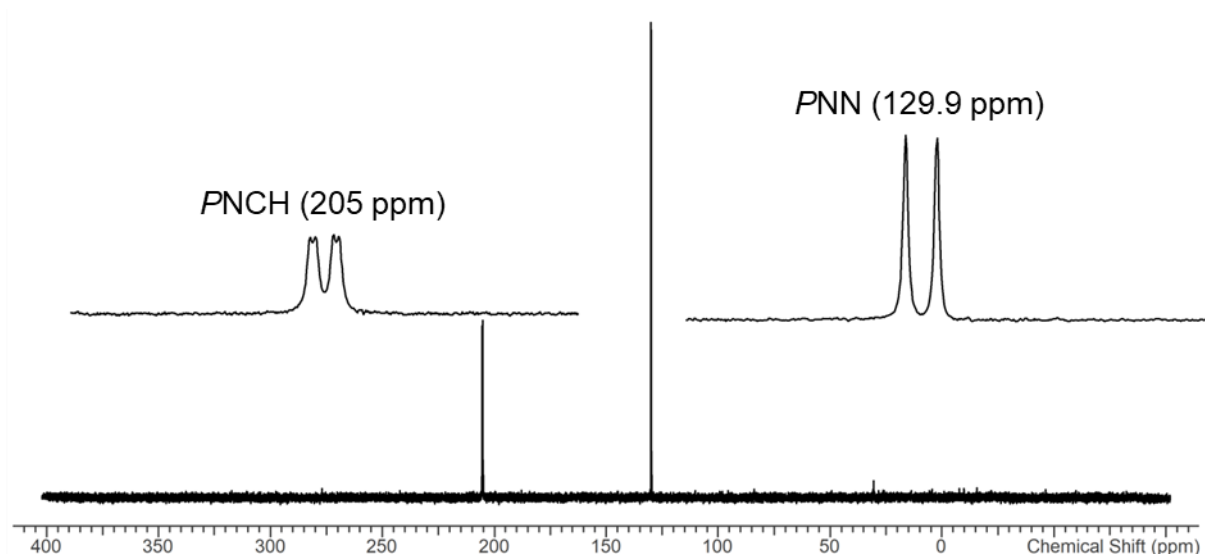


**Schema 23.** Reaktion des Biradikals mit Trimethylsilyl- und Diphenyl-diazomethan (**14**  $R^1 = R^2 = Ph$ , **15**  $R^1 = TMS$   $R^2 = H$ ).

Für die Reaktionen wurde **1** mit dem jeweiligen Diazomethan bei Raumtemperatur in Benzol zusammengegeben (**Schema 23**). Das Trimethylsilyl-diazomethan wurde als eine zweimolare Lösung in Ether verwendet, welche in dieser Form kommerziell verfügbar ist. Das Diphenyl-diazomethan wurde nach einer bekannten Literaturvorschrift synthetisiert und aufgrund seiner Instabilität direkt nach der Synthese<sup>[61]</sup> als kristalliner Feststoff eingesetzt. Nach der Zugabe der TMS-Diazomethan-Lösung zum in Benzol gelösten Biradikal bzw. des Lösemittels Benzol zu dem Feststoff-Gemisch aus Biradikal und Diphenyl-diazomethan kam es nach wenigen Sekunden zu einer Entfärbung der Reaktionslösung von orange zu gelb. Bei der

Reaktion mit dem Diphenyl-diazomethan war die Entfärbung deutlich schwächer ausgeprägt als bei der Umsetzung mit TMS-Diazomethan. Durch das Einengen der Lösung bis zur einsetzenden Kristallisation und anschließendem Lagern bei Raumtemperatur ließen sich über Nacht orange Kristalle für das Diphenyl-diazomethanaddukt **14** erhalten, welche für die Einkristall-Röntgenstrukturanalytik nutzbar waren. Die Ausbeute konnte mit einer zweiten Fraktion geringfügig erhöht werden und lag bei etwa 50%. Aus der Reaktion des Biradikals mit dem TMS-Diazomethan konnte bisher keine Kristalle für die Einkristall-Röntgenstrukturanalytik gewonnen werden. **15** wurde lediglich als gelber voluminöser Feststoff durch Entfernen des Lösemittels erhalten, was aufgrund der guten Selektivität der Reaktion für die meisten analytischen Untersuchungen und auch die Folgereaktionen ausreichend war.

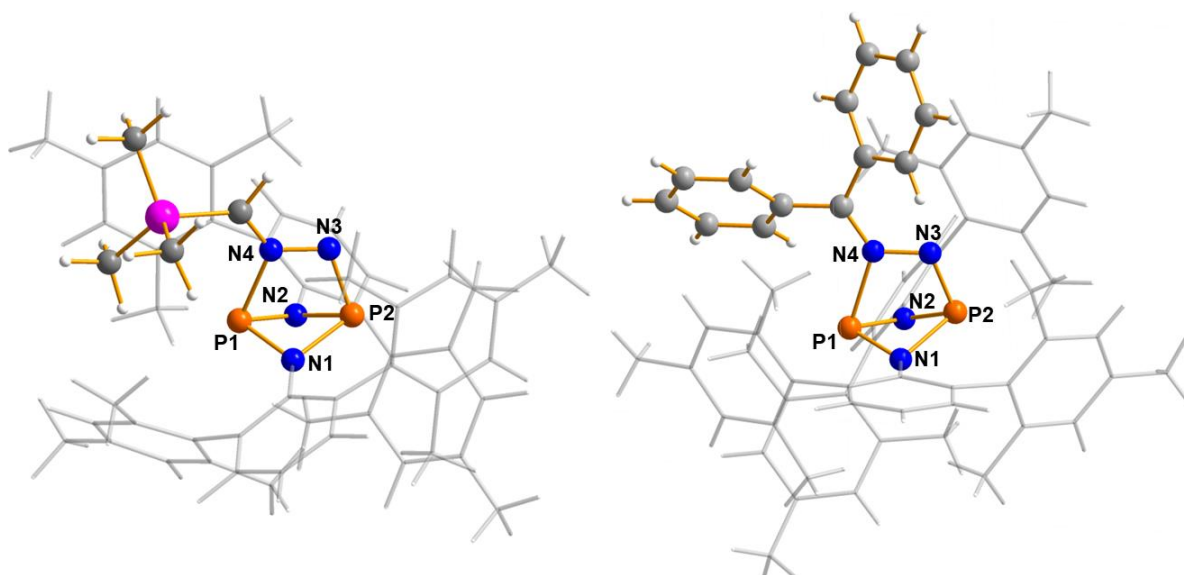
Als Produkte dieser Reaktionen wurden jeweils die über die beiden Stickstoffatome überbrückten Addukte erhalten. Durch die daraus resultierenden chemisch inäquivalenten Phosphoratome ergeben sich jeweils zwei Signale in den  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektren. Die chemischen Verschiebungen der Phosphoratome variieren je nach Substitution am Diazomethan stark. Bei **15** liegen die Signale bei 129.9 und 205.2 ppm (**Abbildung 24**). Beide Signale sind durch die Kopplung der Phosphoratome untereinander zu Dubletts mit einer Kopplungskonstante von 24 Hz aufgespalten. Bei dem Signal bei 205.2 ppm handelt es sich um das Phosphoratom, welches näher zum Substituenten des Diazomethans steht (*PNCH*). Im gekoppelten  $^{31}\text{P}$ -Spektrum ist hier die Kopplung zum nahegelegenen Proton sichtbar, welche mit einer Kopplungskonstante  $^3J(^{31}\text{P}-^1\text{H}) = 6.3 \text{ Hz}$  für eine Aufspaltung zum Doppeldublett sorgt.



**Abbildung 24.**  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum von **15** (Aufspaltung des Signals vom *PNCH* zum Doppeldublett, links) in Benzol- $d_6$ .

Im Gegensatz dazu liegen die Signale für die beiden Phosphoratome von **14** bei 224.8 (PNN) und 236.0 ppm (PNCPh). Werden die  $^{31}\text{P}$ -NMR-Signale von **14** und **15** untereinander verglichen werden zeigt sich, dass der Einfluss der Phenylgruppen offensichtlich zu einer Tieffeldverschiebung der  $^{31}\text{P}$ -NMR-Signale führt, während der Einfluss der TMS-Gruppe eine Hochfeldverschiebung der  $^{31}\text{P}$ -NMR-Signale zur Folge hat. Die quantenchemische Simulation der  $^{31}\text{P}$ -NMR-Verschiebungen für die einzelnen Verbindungen ergab für **14** 198.9 und 168.9 ppm und für **15** 197.2 und 202.6 ppm. Die simulierten Verschiebungen stimmen folglich gut mit den experimentellen Werten der Verbindungen überein und unterstützen somit die Identifikation von **14** und **15**.

Wie bereits erwähnt, ließ sich **14** sehr gut als kristalliner Feststoff isolieren und ermöglichte somit die Bestimmung der Molekülstruktur im Einkristall. Für **15** liegen nur berechnete Strukturdaten vor, welche aber im Grundgerüst in guter Näherung mit dem der realen Struktur von **14** übereinstimmen, sodass diese als sinnvoller Vergleich betrachtet werden können (*Abbildung 25*). So zeichnen sich beide Strukturen, im Vergleich zu einer einfachen P–N-Bindung, durch einen etwas verkürzte P1–N1-Abstand und einen N1–P2-Abstand mit etwa 1.7 Å bzw. 1.8 Å aus. Des Weiteren ist der Abstand P1–N4 mit ca. 2 Å deutlich größer als der Abstand P2–N3 (ca. 1.7 Å). Diese Verlängerung der Bindung resultiert aus den sterischen Gruppen, welche jeweils an N4 hängen, die durch ihren Platzbedarf zu einer Streckung der Bindung führen ( $\Sigma r_{\text{kov}}(\text{N–P}) = 1.82 \text{ Å}^{[51]}$ ,  $\Sigma r_{\text{vdW}}(\text{N}\cdots\text{P}) = 3.35 \text{ Å}^{[52]}$ ). Beide Strukturen weisen eine stark deformierte  $\text{P}_2\text{N}_2$ -Einheit mit einem Diederwinkel von 30.1° bzw. 31.1° auf, was ein Resultat der kurzen Doppelbindung zwischen den überbrückenden Stickstoffatomen ist. Die Diederwinkel liegen somit im gleichen Bereich wie die Diederwinkel der  $\text{P}_2\text{N}_2$ -Einheit der kohlenstoffüberbrückten Alkinaddukte (Diederwinkel der Alkinaddukte: 29.3°–31.5°, vgl. *Tabelle 4*).

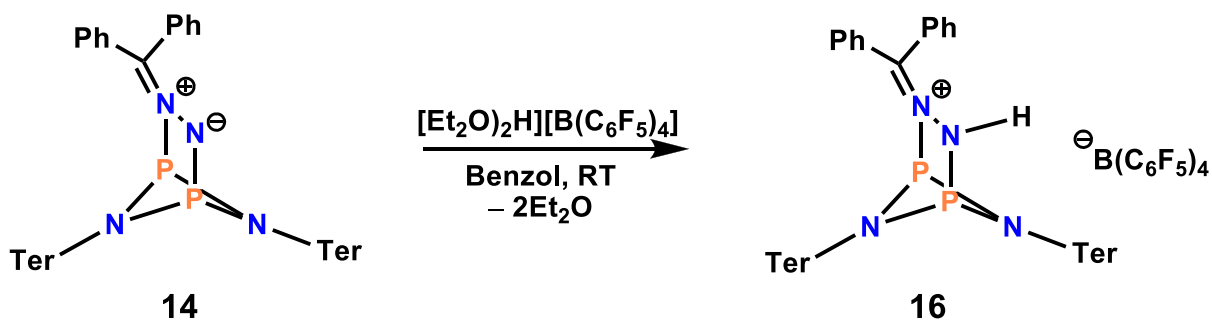


**Abbildung 25.** Ball-and-Stick-Darstellung der Molekülstrukturen von **15** (berechnet, links) und **14** (experimentell bestimmt, rechts). Die Terphenylgruppen sind der Übersichtlichkeit halber transparent und als *Wires-and-Sticks*-Modell dargestellt.

**Tabelle 13.** Ausgewählte Bindungslängen (Å) und Winkel (°) von **14** (experimentell bestimmt) und **15** (berechnet, siehe **Abbildung 25**).

Addukte	P1–N1	N1–P2	P1–N4	P2–N3	N3–N4	NPNP
<b>14</b>	1.698(1)	1.8413(8)	2.0506(8)	1.6895(9)	1.349(1)	30.09(4)
<b>15</b>	1.732	1.807	1.9931	1.7101	1.3142	31.105

Wie eingangs erwähnt, sollte untersucht werden, ob die Diazomethan-Addukte **14** und **15** unter Freisetzung von N<sub>2</sub> zu neuen Produkten umlagern. Thermische Untersuchungen der beiden Verbindungen mittels Thermogravimetrie ergaben jedoch keinerlei Anzeichen eines spezifischen Masseverlusts von molekularem Stickstoff, sondern zeigten lediglich eine kontinuierliche Zersetzung oberhalb 180 °C für **15** und oberhalb 196 °C für **14**. Beide Addukte weisen folglich eine gute thermische Stabilität auf und lassen sich auch bei Raumtemperatur im festen Zustand unter Schutzgas über langen Zeitraum lagern.



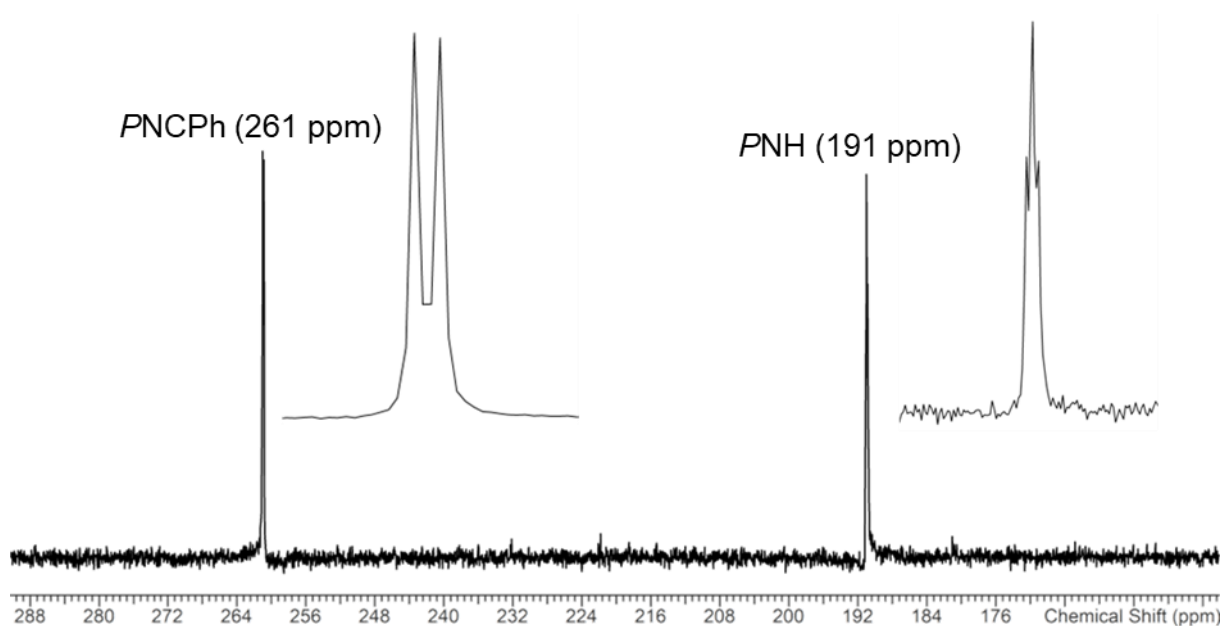
**Schema 24.** Protonierungsreaktion des Diphenyl-diazomethanadduktes mit Jutzi-Säure.

Als nächstes sollten Derivatisierungsmöglichkeiten der Diazomethan-Addukte untersucht werden. Dazu sollte zunächst eine einfache Protonierung am formal negativ geladenen Stickstoff vorgenommen werden (**Schema 24**). Zum einen war es notwendig, eine wasserfreie Säure einzusetzen, zum anderen sollte aber auch die Koordination des jeweiligen Säureanions verhindert werden. Es wurde also eine Säure benötigt, deren Säurerest-Ion ein schwachkoordinierendes Anion ist. Deshalb wurde für die Protonierung die sogenannte Jutzi-Säure  $[(\text{Et}_2\text{O})_2\text{H}][\text{B}(\text{C}_6\text{F}_5)_4]$  verwendet, bei der es sich um ein eine starke Säure in Form eines Feststoffs handelt und somit gut zu dosieren ist. In der Jutzi-Säure wird ein einzelnes Proton von zwei Diethylethermolekülen stabilisiert, welches das schwach koordinierende, inerte  $[\text{B}(\text{C}_6\text{F}_5)_4]^-$  als Gegenanion besitzt.<sup>[62]</sup> Für die Reaktion wurde das jeweilige Diazomethan-Addukt **14** bzw. **15** zusammen mit einem Äquivalent Jutzi-Säure in Benzol bei Raumtemperatur in Benzol gelöst. Es kam zu einer sofortigen Farbveränderung von gelb-orange zu tief rot. Nach wenigen Minuten Reaktionszeit im Ultraschallbad bildeten sich zwei Phasen. Eine schwach orange obere Phase, die laut  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektroskopie nur extrem wenig Produkt enthielt und einer viskosen, roten unteren Phase. Durch das Einengen der Lösung aus der Umsetzung von **14** mit der Jutzi-Säure bis zu dieser zweiten Phase konnten bei Raumtemperatur große rote Kristalle von **16** erhalten werden, welche für die Einkristall-Röntgenstrukturanalytik verwendet werden konnten. Bei **16** handelt es sich um die erwartete protonierte Form des Diazomethan-Adduktes mit  $[\text{B}(\text{C}_6\text{F}_5)_4]^-$  als Gegenion. Die protonierte Spezies des TMS-Diazomethan-Adduktes konnte bisher nicht isoliert werden.

Durch die erfolgreiche Protonierung kommt es zu einer Verschiebung der Signale im  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum. So erfährt das Signal des Phosphoratoms, welches an dem protonierten Stickstoff gebunden ist (PNH) eine Hochfeldverschiebung von 224.8 zu 191 ppm. Das Dublett von **14** (PNN) liegt durch die Kopplung zum Proton jetzt als Doppeldublett in Form eines *pseudo*-Tripletts mit Kopplungskonstanten von  $^2J(^{31}\text{P}-^{31}\text{P}) = 26 \text{ Hz}$  und  $^2J(^1\text{H}-^{31}\text{P}) = 17$

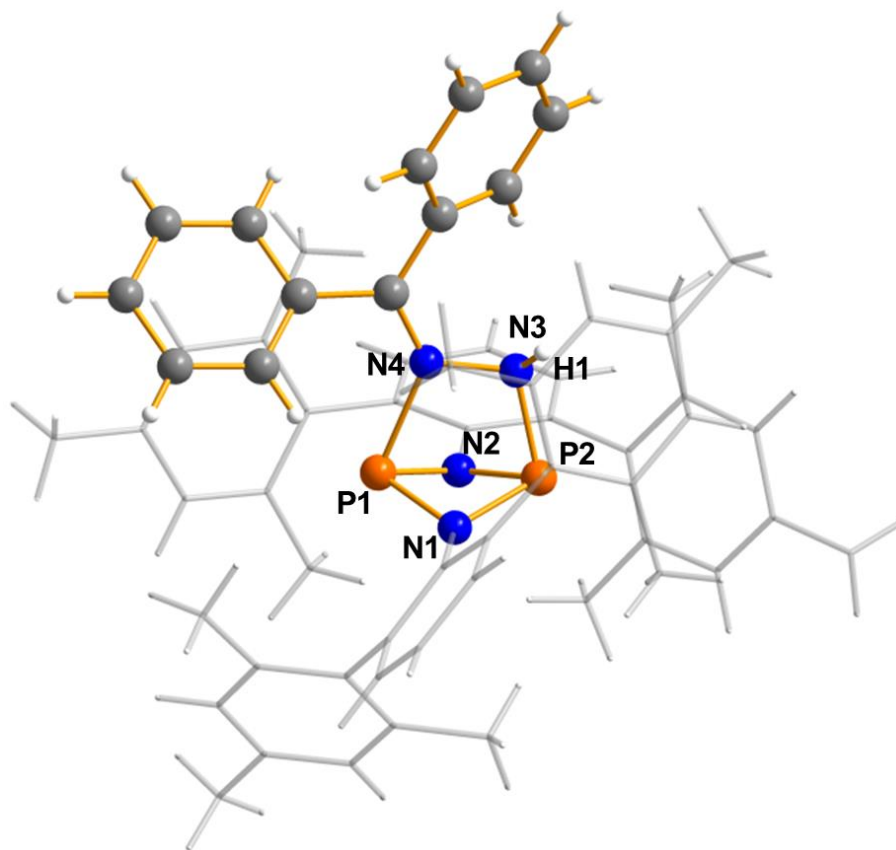
Hz vor (**Abbildung 26**). Das Signal des anderen Phosphoratoms (*PNCPH*) wird hingegen von 236 auf 261.1 ppm tieffeldverschoben. Auch die Molekülstruktur im Einkristall wird durch die Protonierung beeinflusst. Es kommt zu einer Verlängerung der P2–N3-Bindung und auch der Abstand zwischen den beiden überbrückenden Stickstoffatomen vergrößert sich von 1.349(1) auf 1.411(5) Å.

Aus dieser insgesamt Aufweitung des zentralen Käfigs resultiert gleichzeitig auch eine weniger starke Verformung der P<sub>2</sub>N<sub>2</sub>-Einheit, deren Diederwinkel in der protonierten Form nur noch bei 25.98(9)° liegt (vorher 30.09(4)°, siehe **Abbildung 27**).



**Abbildung 26.** <sup>31</sup>P-NMR-Spektrum von **16** (Aufspaltung des Signals vom *PNH* zum *pseudo*-Triplet, rechts) in THF-*d*<sub>8</sub>.

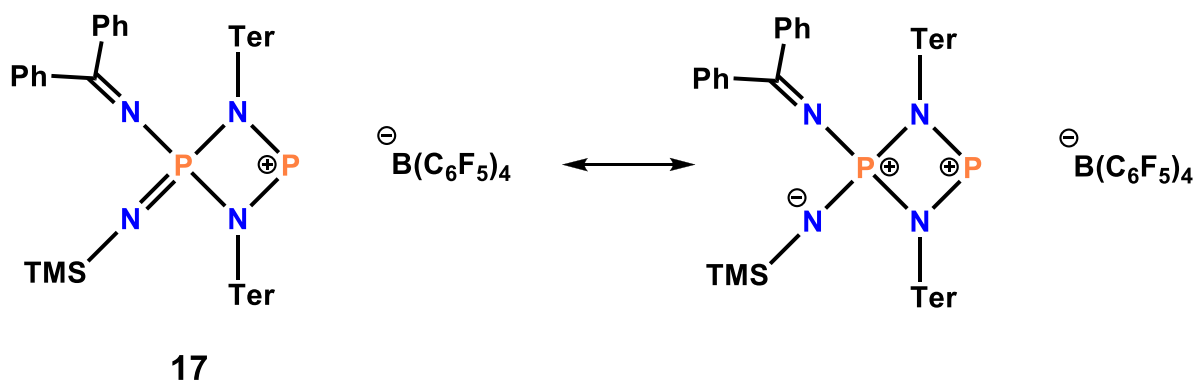




**Abbildung 27.** Ball-and-Stick-Darstellung der experimentellen Molekülstruktur von **16** im Kristall. Die Terphenylgruppen sind der Übersichtlichkeit halber transparent und als *Wires-and-Sticks*-Modell dargestellt. Ausgewählte Bindungslängen [Å]: P1–N1 1.761(2), P2–N1 1.749(2), P1–N4 1.990(3), P2–N3 1.750(2), N3–N4 1.411(5); Ausgewählte Winkel [°]: N1–P1–N2–P2 25.98(9).

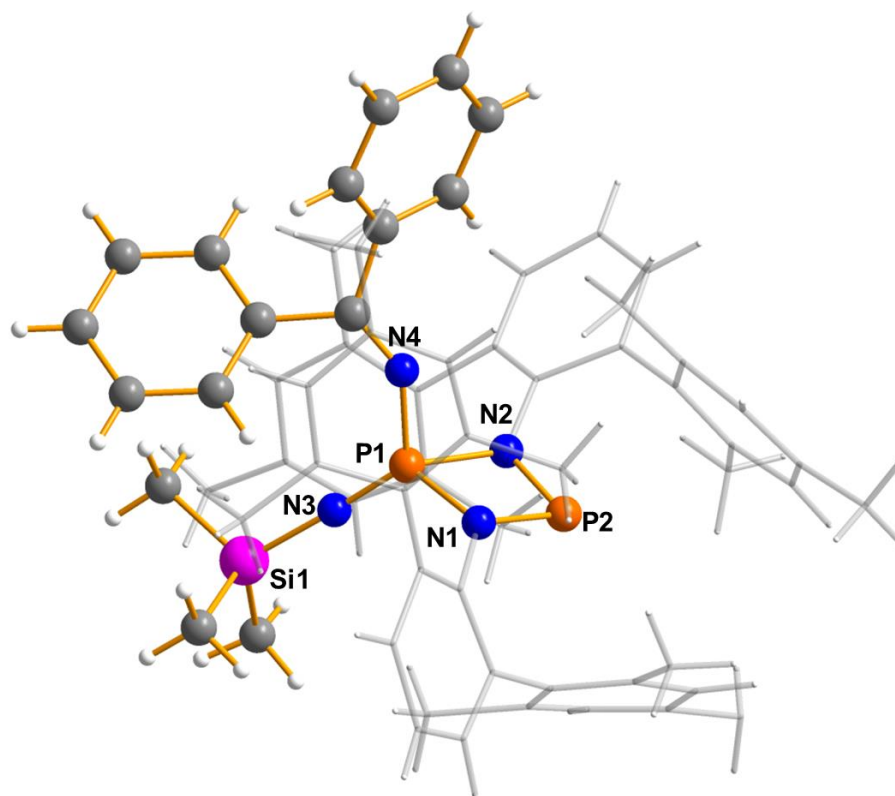
Es gibt mittlerweile zahlreiche Arbeiten, die sich mit den ähnlichen Eigenschaften von Protonen und dem Trimethylsilylium-Ion ( $\text{TMS}^+$ ) beschäftigen.<sup>[63–66]</sup> Das  $\text{TMS}^+$  kann daher formal als ein großes Proton bezeichnet werden. Es lag deshalb nahe, analog zur Protonenübertragung auf das Diazomethan-Addukt auch die Übertragung eines  $\text{TMS}^+$  zu untersuchen. Als  $\text{TMS}^+$ -Quelle wurde  $[\text{TMS-H-TMS}][\text{B}(\text{C}_6\text{F}_5)_4]$  verwendet, welches nach einer Literaturvorschrift hergestellt wurde.<sup>[66]</sup> Dabei sollte ein  $\text{TMS}^+$  auf das formal negative Stickstoffatom übertragen werden. Dazu wurde **14** zusammen mit  $[\text{TMS-H-TMS}][\text{B}(\text{C}_6\text{F}_5)_4]$  in äquimolaren Mengen vorgelegt und Benzol zugegeben. Wie bei der Protonierung mit der Jutzi-Säure entstanden wieder zwei Phasen, wobei die untere eine rote Farbe aufwies. Nach Einengen der Lösung bis auf die untere rote Phase konnten über Nacht sehr kleine Kristalle erhalten werden. Es gelang die Isolierung (mittels „*crystal picking*“) kleinster Mengen an roten Kristallen mit geringer Streukraft. Eine Aufklärung der Struktur mittels Einkristall-Röntgenstrukturanalytik war dennoch möglich und zeigte eine geöffnete N-N-Brücke des

vormaligen Käfigs (**17**) (*Schema 25*). Die sterisch anspruchsvolle Trimethylsilyl-Gruppe scheint aufgrund ihrer Größe folglich nicht analog wie das Proton an den Käfig gebunden werden zu können. Da die TMS-Gruppe dennoch an das gewünschten Stickstoffatom gebunden ist, kommt es sehr wahrscheinlich direkt nach der Bindungsbildung zu einer Migration der N-TMS-Einheit zu P1 und somit zu einer Spaltung der N-N-Bindung. Aufgrund der kleinen Menge des isolierten Materials war es nicht möglich weiteren analytischen Informationen zu dieser Verbindung zu erhalten.



*Schema 25.* Mesomere Formen des Produktes **17** aus der Umsetzung von **14** mit [TMS-H-TMS][B(C<sub>6</sub>F<sub>5</sub>)<sub>4</sub>].

Die Molekülstruktur des Kations von **17** im Einkristall ist in Abbildung 27 wiedergegeben. Auch wenn aufgrund der schlechten Kristallqualität keine genauen Aussagen zu Bindungslängen und -winkeln gemacht werden können, ist aus den Kristalldaten erkennbar, dass es sich bei der P1–N3-Bindung um die kürzeste der vier Phosphor-Stickstoff-Bindungen handelt, was zu dem erwarteten Doppelbindungscharakter passt. Die N1–P2- bzw. N2–P2-Bindungen sind im Vergleich zu den P1–N1- bzw. P1–N2-Bindungen verkürzt und deuten auf eine positive Ladung am P2 hin. Der P<sub>2</sub>N<sub>2</sub>-Ring liegt nach der Spaltung der N4–N3-Bindung mit ca. 6° nahezu planar vor.



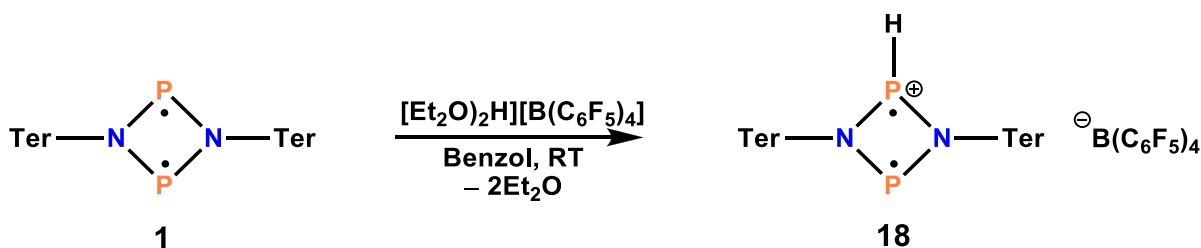
**Abbildung 28.** *Ball-and-Stick*-Darstellung der experimentellen Molekülstruktur von **17** im Kristall. Die Terphenylgruppen sind der Übersichtlichkeit halber transparent und als *Wires-and-Sticks*-Modell dargestellt. Ausgewählte Bindungslängen [Å]: P1–N1 1.7760(3), P2–N1 1.6638(3), P1–N4 1.6216(3), P1–N3 1.4541(3); Ausgewählte Winkel [°]: N1–P1–N2–P2 6.13(2).

Zuletzt sollten auch noch Oxidationsversuche der Diazomethanaddukte unter der Verwendung von  $\text{Ag}[\text{B}(\text{C}_6\text{F}_5)_4]$  durchgeführt werden. Dabei zeigte sich zwar die Bildung von elementarem Silber, welches als schwarzer Niederschlag beobachtet werden konnte, aber es war nicht möglich, aus dem im  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum erkennbaren Produktgemisch einzelne Produkte zu isolieren oder Signale (bei 82.8, 73.3, 27.2 und  $-18.9$  ppm) bestimmten Verbindungen zuzuordnen.

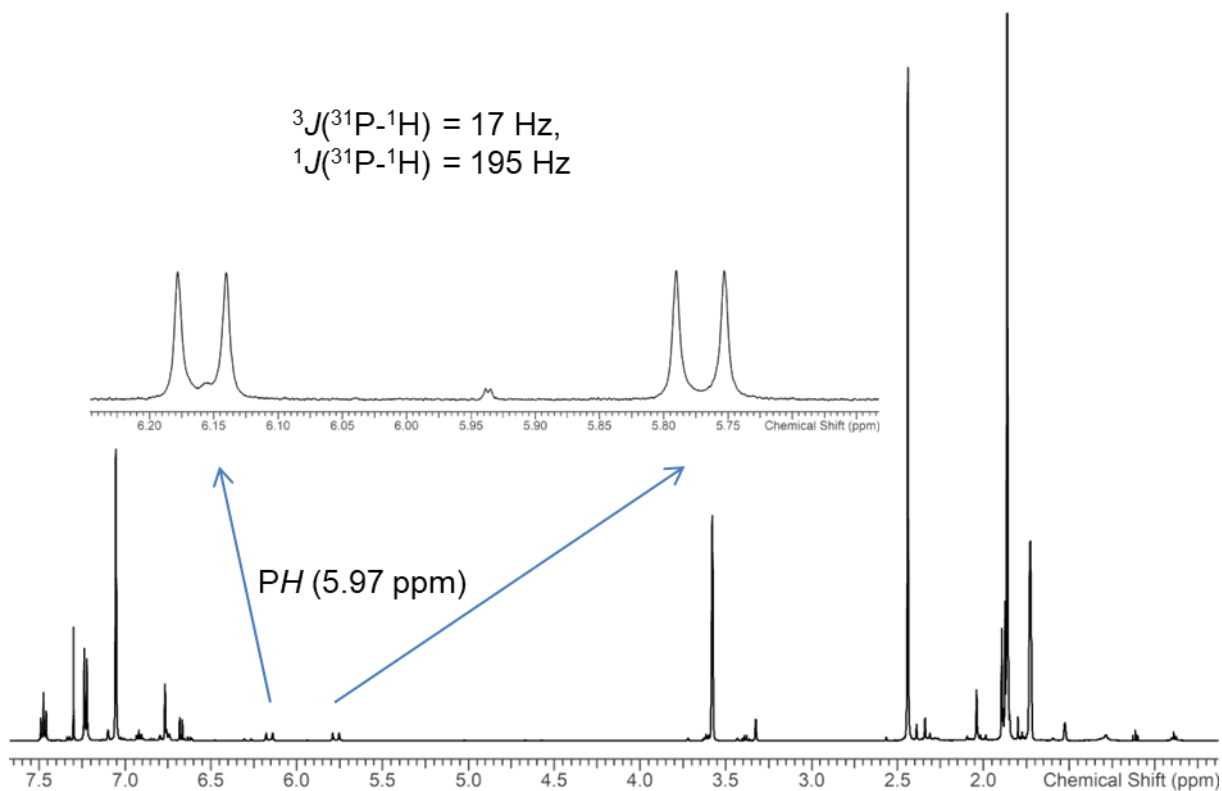


### 3.4 Umsetzung von $[P(\mu\text{-N}^{\cdot}\text{Ter})]_2$ mit Brønsted-Säuren

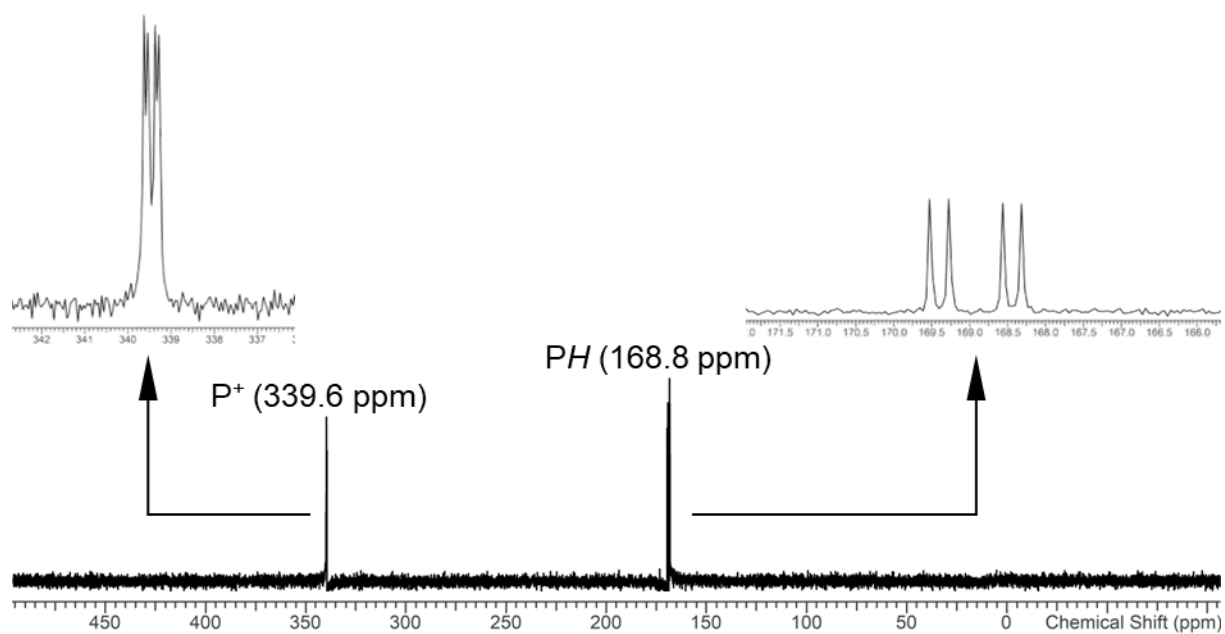
Die erste bekannte Umsetzung des Biradikals **1** mit einer Brønsted-Säure wurde bei uns im Arbeitskreis beim Lösen von **1** mit HCl verunreinigtem Lösemittel beobachtet. Zum Beispiel trat dieses teilweise bei der Reduktion vom chlorierten Vierring  $[PCl(\mu\text{-N}^{\cdot}\text{Ter})]_2$  zum Biradikal auf und resultierte vermutlich aus HCl-Spuren im Lösemittel oder in der Schlenkanlage. Da das Addukt nur in sehr kleinen Mengen auftrat und als störende Verunreinigung betrachtet wurde, lagen bisher nur wenige Informationen zu diesen Spezies vor. Zu beobachten war eine Protonierung eines Phosphoratoms und eine Addition des Chlorids an das andere Phosphoratom. Es stellte sich nun die Frage, was geschehen würde, wenn die Protonierung mit einer Säure mit einem sterisch anspruchsvollen, schwach koordinierenden Anion durchgeführt wird, um eine Addition analog zu der mit HCl zu verhindern. Verwendet wurde hierfür die bereits im vorherigen Kapitel erwähnte Jutzi-Säure  $[(\text{Et}_2\text{O})_2\text{H}][\text{B}(\text{C}_6\text{F}_5)_4]$ . Das inerte  $[\text{B}(\text{C}_6\text{F}_5)_4]^-$  hatte sich bereits bei vielen anderen Reaktionen als geeignetes schwach koordinierendes Anion erwiesen.<sup>[63–68]</sup> Für die Durchführung der Reaktion wurden **1** und die Jutzi-Säure in äquimolarem Verhältnis bei Raumtemperatur in Benzol gelöst (*Schema 26*). Es kam zu einer sofortigen Änderung der Farbe von orange zu rot. Des Weiteren bildeten sich durch die schlechte Löslichkeit des entstehenden Salzes zwei Phasen, wobei die obere Phase fast farblos und die untere Phase tief rot und viskos war. Das Einengen der Lösung im Vakuum bis zur zweiten Phase und das Lagern der Lösung über Nacht führten zu der Bildung von großen roten Kristallen, welche isoliert und für die Einkristall-Röntgenstrukturanalytik verwendet werden konnten. Bei den Kristallen handelte es sich um die gewünschte protonierte Form des Biradikals  $[(\text{TerNP})_2\text{H}]^+$  mit  $[\text{B}(\text{C}_6\text{F}_5)_4]^-$  als schwach koordinierendes Anion (**18**).



*Schema 26.* Reaktion des Biradikals **1** mit Jutzi-Säure zu **18**.



**Abbildung 29.**  ${}^1\text{H}$ -NMR-Spektrum von **18** (Aufspaltung des Signals vom *PH* zum Doppeldublett) in  $\text{THF-}d_8$ .



**Abbildung 30.**  ${}^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum von **18** (Aufspaltung beider Signale zum Doppeldublett, *PH* bei 168.8 ppm) in  $\text{THF-}d_8$ .

NMR-spektroskopische Untersuchungen der Substanz konnten in deuteriertem Tetrahydrofuran durchgeführt werden, wobei die Probe immer sofort vermessen werden musste, da das THF in Gegenwart von **18** über einen Zeitraum von etwa 12 Stunden polymerisiert. Andere deuterierte Lösemittel waren auf Grund der Löslichkeit des Produktes (z.B. unlöslich in Benzol) bzw. der Reaktivität (z.B. Reaktion mit Dichlormethan) nicht möglich. Das Signal des übertragenen Protons lässt sich im  $^1\text{H}$ -NMR-Spektrum sehr gut als Dublett von Dubletts bei 5.97 ppm erkennen. Zu sehen ist die  $^1J$ -Kopplung zum gebundenen Phosphoratom mit einer Kopplungskonstante von 195 Hz sowie die  $^3J$ -Kopplung über das Stickstoffatom zum zweiten Phosphoratom mit einer deutlich kleineren Konstante von 17 Hz (*Abbildung 29*).

Im  $^1\text{H}$ -gekoppelten  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum der Verbindung **18** sind zwei Signale zu beobachten. Das im Hochfeld auftretende Signal bei 168.8 ppm wird von dem protonierten Phosphoratom (PH bzw. P2) erzeugt und liegt als Dublett von Dubletts vor. Auch hier ist die  $^1J$ -Kopplung zum Proton mit einer Konstante von 195 Hz und die  $^2J$ -Kopplung zum anderen Phosphoratom ( $\text{P}^+$  bzw. P1) mit einer Konstante von 50.7 Hz zu sehen. Das Signal des anderen Phosphoratoms (P1; 338.6 ppm) liegt deutlich stärker tieffeldverschoben ebenfalls als Dublett von Dubletts vor. Auch hier ist die Kopplung zum Proton, in diesem Fall als  $^3J$ -Kopplung, mit einer Konstante von 17 Hz und die  $^2J$ -Kopplung zum protonierten Phosphoratom (P2) mit einer Konstante von 50.7 Hz zu sehen (*Abbildung 30*). Im Raman-Spektrum von **18** ist eine Bande bei  $2270\text{ cm}^{-1}$  zu beobachten, welche der PH-Streckschwingung zugeordnet werden kann (*Abbildung 31*).

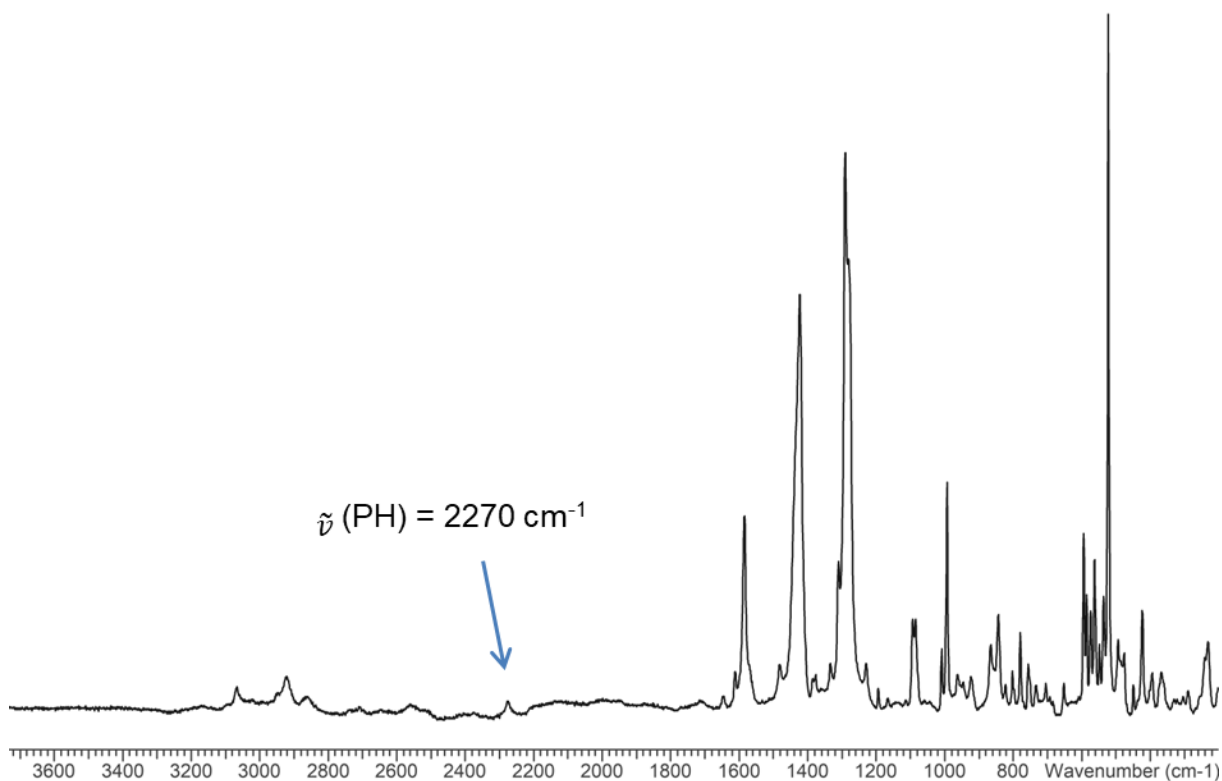


Abbildung 31. Raman-Spektrum von **18** (Markierung an der Bande der PH-Schwingung).

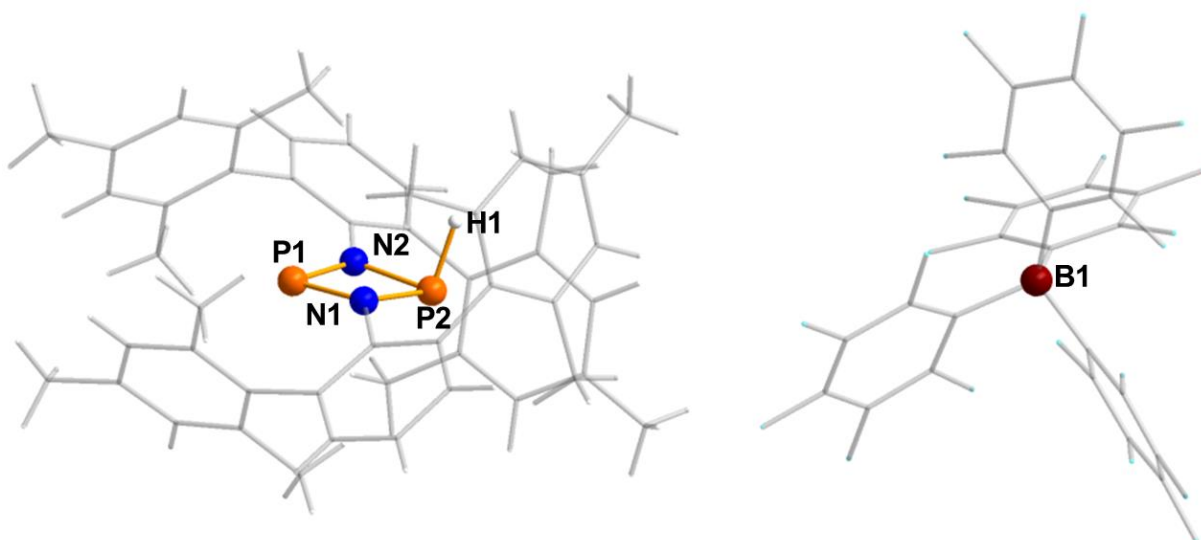


Abbildung 32. Ball-and-Stick-Darstellung der experimentellen Molekülstruktur von **18** im Kristall (lithiumfreie Struktur). Die Terphenylgruppen sind der Übersichtlichkeit halber transparent und als Wires-and-Sticks-Modell dargestellt. Ausgewählte Bindungslängen [Å]: P1–N1 1.667(1), P2–N1 1.773(3), P2–H1 1.38(3); Ausgewählte Winkel [°]: N1–P1–N2–P2 5.80(1).

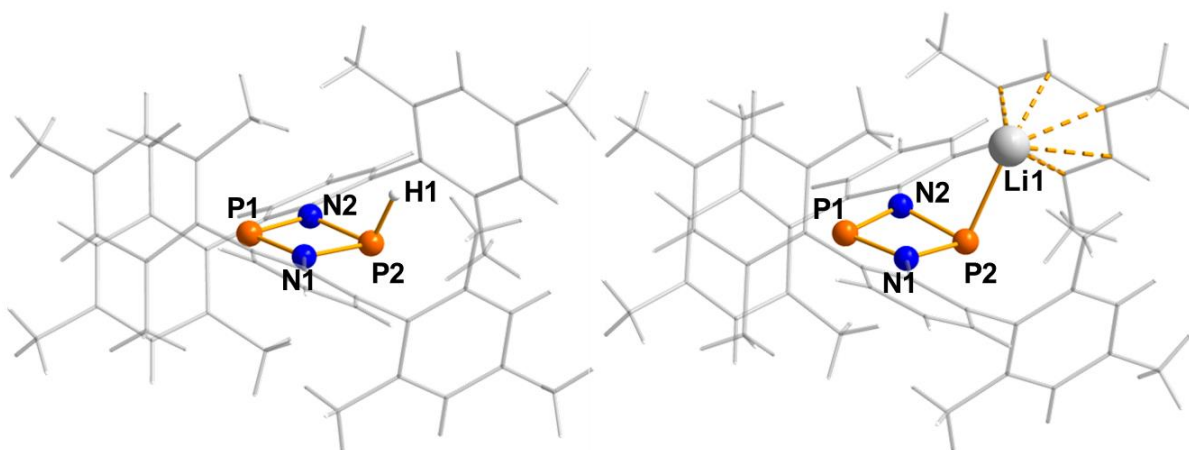
Die Struktur von **18** im Kristall weist eine Deformation des vorher noch planaren P<sub>2</sub>N<sub>2</sub>-Ringsystems des Biradikals mit einem Diederwinkel von 5.8° auf. Auch eine Änderung der



Bindungslängen ist durch die Protonierung erkennbar. Es kommt zu einer Verlängerung der P2–N1-Bindung des protonierten Phosphoratoms auf 1.773(3) Å und zu einer Verkürzung der P1–N1-Bindung auf 1.667(1) Å (beide vorher 1.72 Å)<sup>[15]</sup> (**Abbildung 32**).

Bei der Einkristall-Röntgenstrukturanalyse von **18** fiel außerdem auf, dass etwa 23 % des Protons mit Li<sup>+</sup>-Ionen fehlbesetzt ist. In dieser lithiierten Form ist die Verformung der P<sub>2</sub>N<sub>2</sub>-Einheit noch ausgeprägter als in **18**. Der Diederwinkel beträgt hier 8.6 Å. Die Abstände zwischen Phosphor- und Stickstoffatomen sind unter Berücksichtigung der Messungengenauigkeit jedoch gleich. Wie in (**Abbildung 33**) zu sehen, deutet die Struktur im Kristall auf eine Wechselwirkung des Lithiumatoms mit dem π-System des Mesitylens hin.

Die partielle Besetzung ist auf die Synthese der Jutzi-Säure zurückzuführen, welche in den ersten Versuchen ausgehend vom Li[B(C<sub>6</sub>F<sub>5</sub>)<sub>4</sub>] hergestellt wurde.<sup>[66]</sup> In späteren Versuchen wurde die Jutzi-Säure aus dem Silbersalz Ag[B(C<sub>6</sub>F<sub>5</sub>)<sub>4</sub>] generiert. Da sich bei dieser Syntheseroute das anfallende AgCl besser abtrennen lässt als das LiCl bei der vorherigen Synthese, konnte eine Fehlbesetzung des Protons verhindert werden. Versuche zur Darstellung der reinen lithiierten Spezies ausgehend vom Li[B(C<sub>6</sub>F<sub>5</sub>)<sub>4</sub>] waren bisher nicht erfolgreich. Es konnte lediglich immer nur das reine Biradikal auskristallisiert und isoliert werden.

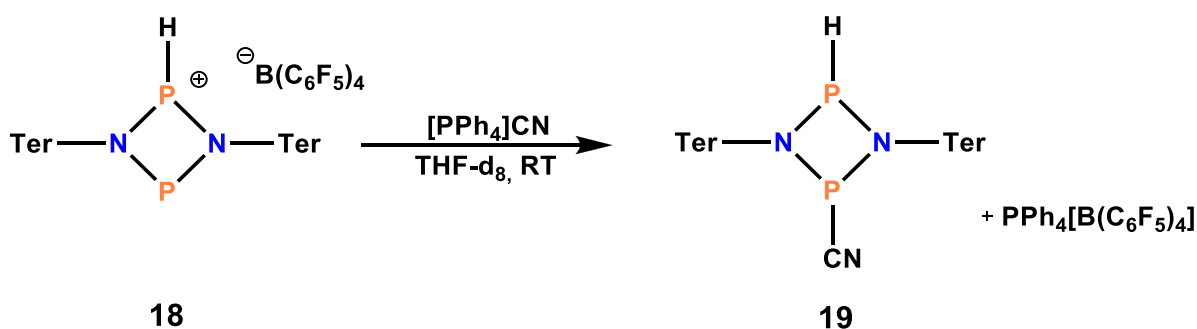


**Abbildung 33.** Ball-and-Stick-Darstellung der experimentellen Molekülstruktur von **18** und der lithiierten Form im Kristall (ausgehend von der lithiumhaltigen Jutzi-Säure). Die Terphenylgruppen sind der Übersichtlichkeit halber transparent und als Wires-and-Sticks-Modell dargestellt. Ausgewählte Bindungslängen (lithiiert, rechts) [Å]: P1–N1 1.676(3), P2–N1 1.77(2), P2–H1 2.33(4); Ausgewählte Winkel [°]: N1–P1–N2–P2 8.6(6).

Um die Reaktivität von **18** zu untersuchen, wurden erste Folgereaktionen mit CS<sub>2</sub> und PPh<sub>4</sub>CN durchgeführt. Während die Umsetzung mit CS<sub>2</sub> laut <sup>31</sup>P-NMR-Spektrum zu keinerlei

Reaktion führte, wurde für die Reaktion mit dem Cyanid eine nahezu quantitative Umsetzung beobachtet. In einer einfachen Reaktion des protonierten Biradikals mit  $\text{PPh}_4\text{CN}$  in einem NMR-Rohr in deuteriertem Tetrahydrofuran kam es zu einer Addition des Cyanid-Ions an das nicht substituierte Phosphoratom (*Schema 27*).

Da **19** im Arbeitskreis bereits auf dem direkten Weg aus der Umsetzung des Biradikals **1** mit reiner HCN isoliert und analysiert werden konnte, war eine einfache Identifikation des Produktes durch einen Vergleich der  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektren möglich. **19** erzeugt, wie zu erwarten, jeweils ein Dublett für jedes Phosphoratom im NMR-Spektrum. Das Signal bei 163.9 ppm kann dem cyanidsubstituierten Phosphoratom *PCN* zugeordnet werden, das Signal bei 185.0 ppm dem *PH*. Beide Signale besitzen eine Kopplungskonstante von  $^2J(^{31}\text{P}-^{31}\text{P}) = 33$  Hz. Es konnte somit gezeigt werden, dass diese formale Addition von HCN in zwei Schritten ebenfalls zur Bildung dieser neuartigen Form von Additionsprodukten führt. **19** wurde im Rahmen dieser Arbeit nicht nochmals isoliert und charakterisiert, sondern lediglich mittels  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektroskopie nachgewiesen.



*Schema 27.* Reaktion von **18** mit  $[\text{PPh}_4]\text{CN}$  unter der Bildung von **19**.

Die dargestellte Reaktion bietet folglich einen alternativen Weg zur Synthese der entsprechenden Pseudohalogen-Säure Addukte, welche auch über den direkten Weg hergestellt werden können. Diese Route könnte nützlich sein, wenn sich die Darstellung mit den reinen Pseudohalogen-Säuren, aufgrund von Zersetzung oder Polymerisation, als problematisch erweist.

## 4 Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Dissertation wurden die Ergebnisse der Untersuchungen zur Reaktivität des bekannten Singulett-Biradikals  $[P(\mu\text{-N}^{\cdot}\text{Ter})_2]$  präsentiert und erläutert. Es gelang, die Doppel- und Dreifachbindungen in verschiedenen Dienen und Diinen zu aktivieren, was in allen beobachteten Fällen zu Bildung eines Bicyclus führte, welcher aus der Überbrückung des Biradikals resultiert.

Nach der Addition des Diphenylbisactylens kam es, wie bereits für Mono-Alkine bekannt, zur Insertion der Kohlenstoffbrücke in den  $P_2N_2$ -Ring und zur Bildung eines Azadiphosphiridins. Eine [4+2]-Cycloaddition für konjugierte Diene konnte nicht beobachtet werden, da sie zudem symmetrie-verboden ist.

Die Umsetzung mit Bromethan, Dibrommethan und Bromoform führte zur Bildung von Additionsprodukten des Typs  $[PBr(\mu\text{-N}^{\cdot}\text{Ter})_2PR]$  ( $R = CH_2CH_3, CH_2Br, CHBr_2$ ), bei dem ein Phosphoratom durch Brom und das andere Phosphoratom durch den Rest des Bromalkans substituiert ist. Die Produkte dieser Reaktion lassen sich folglich gut durch die Wahl des Bromalkans und dessen Restes R designen. Die Umsetzung dieser Addukte mit  $GaCl_3$  führte zur Bildung der kationischen Spezies, bei der das phosphorgebundene Bromatom eliminiert wurde und somit Salze in der Form von  $[P(\mu\text{-N}^{\cdot}\text{Ter})_2PR][GaCl_3Br]$  bzw.  $[P(\mu\text{-N}^{\cdot}\text{Ter})_2PR][Ga_2Cl_6Br]$  ( $R = CH_2CH_3, CH_2Br, CHBr_2$ ) ergab. Durch eine Reduktion mit Mg-Spänen konnte im Falle des Bromethanaddukts ein Monoradikal des Typs  $[P(\mu\text{-N}^{\cdot}\text{Ter})_2PEt]$  erhalten werden. Die Addukte, welche mehrere Bromatome enthalten, konnten hingegen nicht selektiv reduziert werden. Erste Reaktionen der Bromalkanaddukte mit Basen wie DBU und DMAP deuteten auf die Möglichkeit hin, den *alpha*-Kohlenstoff der eingeführten Gruppe deprotonieren zu können. Eine Isolierung dieser formal anionischen Form war bisher nicht erfolgreich. *In situ*-Umsetzungen mit Aldehyden könnte sich jedoch als sinnvolle Herangehensweise erweisen, um eine zur Wittig-Reaktion analoge Umsetzung beobachten zu können.

Analog zu Alkenen und Alkinen führte auch die Reaktion des Biradikals  $[P(\mu\text{-N}^{\cdot}\text{Ter})_2]$  mit Diazomethanen zu einem Bicyclus, welcher sich aus der Aktivierung der N=N-Bindung ergibt. Durch thermische Behandlung der Reaktionsprodukte konnte kein spezifischer

Masseverlust von N<sub>2</sub> beobachtet werden. Es trat lediglich eine Zersetzung bei 160–180 °C ein.

Durch die Verwendung von Jutzi-Säure, einer Brønsted-Säure mit dem schwach koordinierenden Anion [B(C<sub>6</sub>F<sub>5</sub>)<sub>4</sub>]<sup>−</sup>, konnte das Biradikal am Phosphor protoniert und somit in ein Kation [(TerNP)<sub>2</sub>H]<sup>+</sup> überführt werden. Erste Reaktionen mit Salzen wie [PPh<sub>4</sub>]CN führten zu einer alternativen Darstellungsmethode der formalen Pseudohalogenwasserstoffsäure-Addukte (z.B. [HP(μ-NTer)<sub>2</sub>PCN]).

# 5 Anhang

## 5.1 Arbeitstechnik

Sofern nicht anders angegeben, wurden alle Experimente, bei denen absolute Lösemittel verwendet wurden, unter Argon-Atmosphäre mit Hilfe der Schlenk-Technik durchgeführt. Alle Glasgeräte wurden dafür dreimal mit einem Heißluftgebläse im Hochvakuum ausgeheizt und unter Argon-Atmosphäre abgekühlt. Das Ab- und Umfüllen hydrolyseempfindlicher Substanzen wurde in einer Drybox unter Inertgasatmosphäre durchgeführt. Lösemittel wurden unter Argon-Atmosphäre destilliert und für die Versuche mit Einwegspritzen umgefüllt. Die Einwegspritzen wurden zuvor dreimal mit Argon gespült.

Die verwendeten Lösemittel wurden über den Chemikalienhandel erhalten und, wenn nötig, nach literaturbekannten Methoden gereinigt und getrocknet. Ausgangsverbindungen wurden entweder über den Chemikalienhandel erhalten oder nach bekannten Vorschriften aus der Literatur hergestellt (*Tabelle 14*).

**Tabelle 14.** Eingesetzte Lösemittel und Chemikalien, deren Herkunft und Aufreinigung.

Substanz	Herkunft	Reinigung
CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	lokaler Handel	aufgereinigt gemäß Literaturvorschrift <sup>[69]</sup> getrocknet über P <sub>4</sub> O <sub>10</sub> , gelagert über CaH <sub>2</sub> frisch destilliert und entgast ( <i>freeze-pump-thaw</i> )
Et <sub>2</sub> O, THF	lokaler Handel	getrocknet über Na/Benzophenon frisch destilliert vor Verwendung
<i>n</i> -Pentan, <i>n</i> -Hexan	lokaler Handel	getrocknet über Na/Benzophenon/Tetraglyme frisch destilliert vor Verwendung
PhF	lokaler Handel	getrocknet über CaH <sub>2</sub> frisch destilliert vor Verwendung
CD <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	euriso-top	getrocknet über P <sub>4</sub> O <sub>10</sub> und CaH <sub>2</sub> frisch destilliert vor Verwendung
C <sub>6</sub> D <sub>6</sub>	euriso-top	getrocknet über Na frisch destilliert vor Verwendung

Substanz	Herkunft	Reinigung
THF- <i>d</i> <sub>8</sub>	euriso-top	getrocknet über Na destilliert und über Molsiebe (4 Å) gelagert
PCl <sub>3</sub>	Merck, zur Synthese	getrocknet über P <sub>4</sub> O <sub>10</sub> frisch destilliert und entgast ( <i>freeze-pump-thaw</i> )
NEt <sub>3</sub>	Sigma Aldrich, 99 %	getrocknet über Na frisch destilliert vor Verwendung
DBU	Merck, zur Synthese	destilliert
GaCl <sub>3</sub>	ABCR (99 %)	sublimiert
<i>n</i> -Butyllithium (2.5 M in <i>n</i> -Hexan)	Acros	keine
[PPh <sub>4</sub> ]CN	synthetisiert <sup>[70]</sup>	keine
DMSO	Fluka	gemäß Literaturvorschrift <sup>[71]</sup>
Oxalylchlorid	ABCR	destilliert
Benzophenonhydrazon	J&K	keine
Mg-Späne	Aldrich	keine
2,3-Dimethylbutadien	Aldrich	getrocknet über NaBH <sub>4</sub> frisch destilliert vor Verwendung
1,7-Octadien	Altbestand	frisch destilliert vor Verwendung
1,4-Cyclohexadien	Aldrich	getrocknet über MgSO <sub>4</sub> frisch destilliert vor Verwendung
Diphenylacetylen	chemPUR	keine
EtBr	Alfa Aesar	gemäß Literaturvorschrift <sup>[71]</sup>
CH <sub>2</sub> Br <sub>2</sub>	Altbestand	gemäß Literaturvorschrift <sup>[71]</sup>
TMS-Diazomethan (2 M in Et <sub>2</sub> O)	Aldrich	keine
CHBr <sub>3</sub>	Merck	gemäß Literaturvorschrift <sup>[71]</sup>
DMAP	Altbestand	gemäß Literaturvorschrift <sup>[71]</sup>
CS <sub>2</sub>	ABCR	destilliert
Diphenyl-diazomethan	synthetisiert <sup>[61]</sup>	Umkristallisiert gemäß Literaturvorschrift
Jutzi-Säure	synthetisiert <sup>[67]</sup>	Umkristallisiert gemäß Literaturvorschrift
Ter-I	synthetisiert <sup>[72]</sup>	Umkristallisiert gemäß Literaturvorschrift
Ter-N <sub>3</sub>	synthetisiert <sup>[72]</sup>	Umkristallisiert gemäß Literaturvorschrift
Ter-NH <sub>2</sub>	synthetisiert <sup>[72]</sup>	Umkristallisiert gemäß Literaturvorschrift
Ter-NHPCl <sub>2</sub>	synthetisiert <sup>[72]</sup>	Umkristallisiert gemäß Literaturvorschrift
[PCl(μ-NTer)] <sub>2</sub>	synthetisiert <sup>[72]</sup>	Umkristallisiert gemäß Literaturvorschrift
[P(μ-NTer)] <sub>2</sub>	synthetisiert <sup>[15]</sup>	Umkristallisiert gemäß Literaturvorschrift

## 5.2 Analysenmethoden

**NMR-Spektren** wurden auf Bruker-Spektrometern des Typs AVANCE 250, AVANCE 300 und AVANCE 500 aufgenommen. Die Spektren wurden intern auf die verwendeten deuterierten Lösemittel ( $^{13}\text{C}$ :  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$   $\delta_{\text{Ref}} = 54.0$  ppm,  $\text{C}_6\text{D}_6$   $\delta_{\text{Ref}} = 128.4$  ppm, THF- $d_8$   $\delta_{\text{Ref},1} = 25.4$  ppm,  $\delta_{\text{Ref},2} = 67.6$  ppm) bzw. die protischen Verunreinigungen in den deuterierten Lösemitteln ( $^1\text{H}$ :  $\text{CHDCl}_2$   $\delta_{\text{Ref}} = 5.32$  ppm,  $\text{C}_6\text{HD}_5$   $\delta_{\text{Ref}} = 7.16$  ppm, THF- $d_7$   $\delta_{\text{Ref},1} = 1.73$  ppm,  $\delta_{\text{Ref},2} = 3.58$  ppm) oder extern kalibriert ( $^{31}\text{P}$ : 85 %  $\text{H}_3\text{PO}_4$   $\delta_{\text{Ref}} = 0$  ppm;  $^{19}\text{F}$ :  $\text{CFCl}_3$   $\delta_{\text{Ref}} = 0$  ppm,  $^{29}\text{Si}$ :  $\text{SiMe}_4$   $\delta_{\text{Ref}} = 0$  ppm). Alle Messungen wurden bei Raumtemperatur durchgeführt, soweit nicht anders vermerkt. NMR-Signale wurden anhand experimenteller Daten (chemische Verschiebungen, Kopplungskonstanten, Integrale) sowie berechneter Daten (GIAO-Methode, vgl. Rechenmethoden S. 80) zugeordnet.

**IR-Spektren** wurden von kristallinen Proben gemessen. Dazu wurde ein Bruker Alpha-II-Spektrometer mit ATR-Einheit verwendet. Die Intensitäten der Banden wurden anhand folgender relativer Intensitätsintervalle angegeben: *very weak* (vw, 0–10 %), *weak* (w, 10–30 %), *medium* (m, 30–60 %), *strong* (s, 60–90 %), *very strong* (vs, 90–100 %).

**Raman-Spektren** wurden von festen Proben aufgenommen. Dazu wurde ein LabRAM HR 800 Horiba Jobin YVON Raman-Spektrometer verwendet, welches mit einem Olympus BX41-Mikroskop mit variablen Linsen ausgestattet ist. Zur Anregung der Proben wurde ein Infrarotlaser (758 nm, 100 mW, luftgekühlter Diodenlaser) oder ein roter Laser (633 nm, 17 mW, HeNe-Laser) verwendet.

**Elementaranalysen** wurden mithilfe eines Elementar vario Micro cube CHNS-Analysators erhalten.

**Schmelzpunkte** (unkorrigiert) wurden mithilfe eines EZ-Melt von Stanford Research Systems bei einer Heizrate von 10 °C/min ermittelt.

**TGA-Messungen** wurden an einer Setaram LapSys 1600 TGA-DSC unter Argon mit einer Heizrate von 5 °C/min durchgeführt. Massenverluste wurden über die Ableitung der TG-Kurve ausgewertet ( $d\text{TG}$ -Kurve). Die Temperaturen der Massenverluste wurden über die Integration der  $d\text{TG}$ -Kurve bestimmt. Die angegebenen Temperaturen entsprechen dem interpolierten Schnittpunkt der Tangente am Wendepunkt der  $d\text{TG}$ -Kurve mit der interpolierten Basislinie der  $d\text{TG}$ -Kurve. Alle Daten wurden unter Verwendung der Setsoft 2000 Software erhalten.

**Massenspektren** wurden mit einem Thermo Electron MAT 95-XP Sektorfeld-Massenspektrometer unter Verwendung kristalliner Proben aufgenommen.

## 5.3 Strukturaufklärung

Kristalle zur Einkristall-Röntgenstrukturanalyse wurden in Fomblin YR-1800 Perfluorether (Alfa Aesar) bei Raumtemperatur selektiert. Alle Proben wurden während der Messung auf 123(2) K gekühlt. Die Daten wurden auf einem Bruker Kappa Apex-II Diffraktometer oder einem Bruker D8 Quest Diffraktometer mit monochromatischer Mo-K $\alpha$ -Strahlung ( $\lambda = 0.71073$  Å) aufgenommen. Die Strukturen wurden durch iterative Methoden (SHELXT)<sup>[73]</sup> gelöst und durch *full-matrix-least-squares*-Prozeduren (SHELXL)<sup>[74]</sup> verfeinert. Semiempirische Absorptionskorrekturen wurden angewendet (SADABS).<sup>[75]</sup> Alle Nicht-Wasserstoff-Atome wurden anisotrop verfeinert, Wasserstoff-Atome wurden rechnerisch mit einem *riding model* eingefügt.



**Tabelle 15.** Kristallographische Daten zu Verbindungen **1**, **4**, **7**.

Verbindung	<b>1</b>	<b>4</b>	<b>7</b>
Chem. Formel	C <sub>48</sub> H <sub>50</sub> N <sub>2</sub> P <sub>2</sub>	C <sub>54</sub> H <sub>58</sub> N <sub>2</sub> P <sub>2</sub> ·(C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> )	C <sub>50</sub> H <sub>55</sub> BrN <sub>2</sub> P <sub>2</sub>
Molmasse [g/mol]	716.84	917.15	825.81
Farbe	orange	farblos	farblos
Kristallsystem	monoklin	triklin	monoklin
Raumgruppe	C2/c	P $\bar{1}$	P2 <sub>1</sub> /c
a [Å]	18.6590 (15)	12.0166(10)	20.485(4)
b [Å]	15.3382 (14)	12.0610(7)	10.6869(19)
c [Å]	16.6570 (15)	18.8757(12)	19.906(3)
$\alpha$ [°]	90	91.975(3)	90
$\beta$ [°]	122.061 (2)	97.797(3)	91.298(7)
$\gamma$ [°]	90	107.840(4)	90
V [Å <sup>3</sup> ]	4040.1 (6)	2571.7(3)	4356.7(13)
Z	4	2	4
$\rho_{\text{ber.}}$ [g/cm <sup>3</sup> ]	1.179	1.184	1.259
$\mu$ [mm <sup>-1</sup> ]	0.14	0.13	1.05
T [K]	123	123	123
Gemessene Reflexe	73276	7674	69172
Unabhängige Reflexe	7310	7674	9516
Reflexe mit $I > 2\sigma(I)$	5350	5309	6416
$R_{\text{int}}$	0.052	0.088	0.114
F(000)	1528	984	1736
$R_1(R[F^2 > 2\sigma(F^2)])$	0.046	0.070	0.054
wR <sub>2</sub> (F <sup>2</sup> )	0.129	0.161	0.149
GooF	1.031	1.035	1.01
Anzahl Parameter	242	636	509
Labcode	av_lc143	av_lc32b	is_lc91

**Tabelle 16.** Kristallographische Daten zu Verbindungen **8**, **9**, **10**.

Verbindung	<b>8</b>	<b>9</b>	<b>10</b>
Chem. Formel	C <sub>49</sub> H <sub>52</sub> Br <sub>2</sub> N <sub>2</sub> P <sub>2</sub>	C <sub>49</sub> H <sub>51</sub> Br <sub>3</sub> N <sub>2</sub> P <sub>2</sub>	C <sub>50</sub> H <sub>55</sub> N <sub>2</sub> P <sub>2</sub> <sup>+</sup> BrCl <sub>3</sub> Ga (CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> ) <sup>-</sup>
Molmasse [g/mol]	890.68	1053.67	1094.03
Farbe	farblos	farblos	rot
Kristallsystem	triklin	triklin	monoklin
Raumgruppe	<i>P</i> $\bar{1}$	<i>P</i> $\bar{1}$	<i>P</i> 2 <sub>1</sub> / <i>c</i>
<i>a</i> [Å]	11.1965(6)	11.9025(5)	15.8364(13)
<i>b</i> [Å]	21.3386 (9)	15.7374(7)	16.4514(13)
<i>c</i> [Å]	21.3787(9)	25.4743(10)	19.5981(17)
$\alpha$ [°]	117.502(2)	88.947(3)	90
$\beta$ [°]	100.306(2)	87.558(2)	96.158(2)
$\gamma$ [°]	98.619(2)	88.960(2)	90
<i>V</i> [Å <sup>3</sup> ]	4296.4(4)	4765.8(3)	5076.4(7)
<i>Z</i>	4	4	4
$\rho_{\text{ber.}}$ [g/cm <sup>3</sup> ]	1.117	1.468	1.431
$\mu$ [mm <sup>-1</sup> ]	2.00	2.628	1.811
<i>T</i> [K]	123	123	123
Gemessene Reflexe	181593	206019	93906
Unabhängige Reflexe	20736	23008	16141
Reflexe mit $I > 2\sigma(I)$	17603	18479	11176
<i>R</i> <sub>int</sub>	0.064	0.0704	0.0577
<i>F</i> (000)	1840	2172	2244
<i>R</i> <sub>1</sub> ( $R[F^2 > 2\sigma(F^2)]$ )	0.098	0.0592	0.0514
<i>wR</i> <sub>2</sub> ( <i>F</i> <sup>2</sup> )	0.229	0.1558	0.1357
GooF	1.29	1.080	1.014
Anzahl Parameter	1088	1123	618
Labcode	is_lc105	is_lc149	is_lc166

**Tabelle 17.** Kristallographische Daten zu Verbindungen **11**, **12**, **13**.

Verbindung	<b>11</b>	<b>12</b>	<b>13</b>
Chem. Formel	$C_{49}H_{52}BrN_2P_2^+$ $^-BrCl_3Ga(CH_2Cl_2)$	$C_{49}H_{51}Br_2N_2P_2^+$ $^-Ga_2BrCl_7$ 0.737( $C_6H_6$ ), 0.263( $CH_2Cl_2$ )	$C_{50}H_{55}N_2P_2$
Molmasse [g/mol]	1161.35	1377.36	738.24
Farbe	rot	rot	rot
Kristallsystem	monoklin	triklin	monoklin
Raumgruppe	$P2_1/c$	$P\bar{1}$	$P 2_1/n$
$a$ [Å]	15.8857 (6)	11.0899(12)	12.5832(7)
$b$ [Å]	16.4328(6)	15.4262(17)	21.0941(9)
$c$ [Å]	19.4890(7)	17.1034(19)	16.0779(8)
$\alpha$ [°]	90	88.804(6)	90
$\beta$ [°]	96.2830(10)	88.053(6)	106.101(2)
$\gamma$ [°]	90	83.396(6)	90
$V$ [Å <sup>3</sup> ]	5057.0(3)	2904.4(6)	4100.2(4)
Z	4	2	4
$\rho_{ber.}$ [g/cm <sup>3</sup> ]	1.525	1.575	1.196
$\mu$ [mm <sup>-1</sup> ]	2.649	3.034	0.220
$T$ [K]	123	123	123
Gemessene Reflexe	101453	10776	57412
Unabhängige Reflexe	16091	10776	9397
Reflexe mit $I > 2\sigma(I)$	11454	4572	6443
$R_{int}$	0.049	0.0706	0.0683
$F(000)$	2352	1380	1578
$R_1(R[F^2 > 2\sigma(F^2)])$	0.0389	0.1136	0.0527
$wR_2(F^2)$	0.0886	0.2802	0.1343
GooF	1.016	0.991	1.009
Anzahl Parameter	633	400	597
Labcode	is_lc161	is_lc154ga	is_lc167

**Tabelle 18.** Kristallographische Daten zu Verbindungen **14**, **16**, **17**.

Verbindung	<b>14</b>	<b>16</b>	<b>17</b>
Chem. Formel	$C_{61}H_{60}N_4P_2 \cdot 0.5(C_6H_6)$	$C_{61}H_{61}N_4P_2^+$ $^-C_{24}BF_{20}, 3(C_6H_6)$	$C_{64}H_{69}N_4P_2Si^+$ $^-C_{24}BF_{20}$
Molmasse [g/mol]	950.12	1094.03	3326.7
Farbe	orange	rot	rot
Kristallsystem	triklin	triklin	monoklin
Raumgruppe	$P\bar{1}$	$P\bar{1}$	
$a$ [Å]	12.0292(8)	14.1452(10)	11.9378
$b$ [Å]	12.0757(8)	16.5489(11)	16.9332
$c$ [Å]	19.3278(12)	20.6137(15)	19.5805
$\alpha$ [°]	89.254(2)	89.348(3)	90
$\beta$ [°]	87.813(2)	72.117(3)	106.140
$\gamma$ [°]	69.591(2)	73.676(2)	90
$V$ [Å <sup>3</sup> ]	2629.4(3)	4392.3(5)	3802.10(183)
Z	2	2	
$\rho_{\text{ber.}}$ [g/cm <sup>3</sup> ]	1.200	1.380	1.45283
$\mu$ [mm <sup>-1</sup> ]	0.127	0.144	
$T$ [K]	123	123	123
Gemessene Reflexe	86242	228584	9723
Unabhängige Reflexe	18948	23330	
Reflexe mit $I > 2\sigma(I)$	16212	14018	3383
$R_{\text{int}}$	0.0490	0.1060	0.2559
$F(000)$	1010	1880	
$R_1(R[F^2 > 2\sigma(F^2)])$	0.0421	0.0538	0.1321
$wR_2(F^2)$	0.1184	0.1312	
GooF	1.038	1.005	
Anzahl Parameter	671	1395	513
Labcode	Ah308A	av_lc125	Av_lc128

**Tabelle 19.** Kristallographische Daten zu Verbindungen **18**.

Verbindung	<b>18</b>
Chem. Formel	$C_{48}H_{50}N_2P_2O_{0.23}(Li^+), 0.77(H^+)$ $4.5(C_6H_6) + ^-C_{24}BF_{20}$
Molmasse [g/mol]	1749.74
Farbe	rot
Kristallsystem	triklin
Raumgruppe	$P\bar{1}$
$a$ [Å]	12.5190(16)
$b$ [Å]	15.2123(18)
$c$ [Å]	21.689(3)
$\alpha$ [°]	92.824(3)
$\beta$ [°]	91.593(4)
$\gamma$ [°]	94.632(3)
$V$ [Å <sup>3</sup> ]	4109.9(9)
Z	2
$\rho_{ber.}$ [g/cm <sup>3</sup> ]	1.414
$\mu$ [mm <sup>-1</sup> ]	0.150
$T$ [K]	123
Gemessene Reflexe	176850
Unabhängige Reflexe	19764
Reflexe mit $I > 2\sigma(I)$	13073
$R_{int}$	0.0795
$F(000)$	1803
$R_1(R[F^2 > 2\sigma(F^2)])$	0.0921
$wR_2(F^2)$	0.2544
GooF	1.040
Anzahl Parameter	904
Labcode	av_lc124

## 5.4 Rechenmethoden

Elektronische Strukturberechnungen wurden mit der Software Gaussian09<sup>[76]</sup> oder ORCA 4.1<sup>[77]</sup> sowie dem Programm NBO 6.0 durchgeführt.<sup>[78–81]</sup>

Strukturoptimierungen wurden mit dem Hybrid-Dichtefunktional PBE1PBE<sup>[82–84]</sup> und dem Basissatz def2-SVP<sup>[85]</sup> durchgeführt (Notation: PBE1PBE/def2-SVP). Alle Strukturen wurden vollständig optimiert und durch Frequenzanalysen als lokale Minima auf der Potentialhyperfläche charakterisiert. Berechnete harmonische Frequenzen wurden für den Vergleich mit experimentellen Daten mit dem Skalierungsfaktor 0.950 skaliert, welcher mithilfe des reduzierten Skalierungsfaktor-Optimierungsmodells von Truhlar *et al.* abgeleitet wurde.<sup>[86]</sup> Partialladungen wurden durch natürliche Populationsanalyse mithilfe des NBO-Programms bestimmt. NMR-Daten wurden mittels GIAO-Methode berechnet.<sup>[87–91]</sup> Die berechneten absoluten Verschiebungen ( $\sigma_{\text{ber},X}$ ) wurden auf die berechneten absoluten Verschiebungen des jeweiligen NMR-Standards ( $\sigma_{\text{ber,Ref}}$ ) referenziert.

$$\delta_{\text{ber}} = \sigma_{\text{ber,Ref}} - \sigma_{\text{ber},X}$$

Im Falle von  $^{31}\text{P}$  wurden die berechneten Verschiebungen auf die absolute Verschiebung von 85 % iger  $\text{H}_3\text{PO}_4$  in der Gasphase (exp.  $\sigma_{\text{Ref},1} = 328.35 \text{ ppm}$ )<sup>[92]</sup> referenziert, indem  $\text{PH}_3$  (exp.  $\sigma_{\text{Ref},2} = 594.45 \text{ ppm}$ ) als sekundärer Standard verwendet wurde.<sup>[93]</sup>

$$\sigma_{\text{ber,Ref}} = \sigma_{\text{ber,PH}_3} - (\sigma_{\text{Ref},2} - \sigma_{\text{Ref},1}) = \sigma_{\text{ber,PH}_3} - 266.1$$

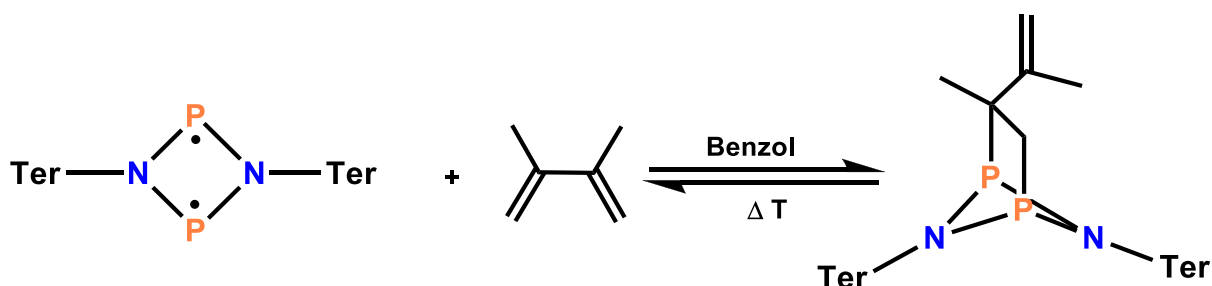
$$\Rightarrow \delta_{\text{ber},X} = (\sigma_{\text{ber,PH}_3} - 266.1) - \sigma_{\text{ber},X}$$

Auf PBE1PBE/def2-SVP-Niveau beträgt  $\sigma_{\text{ber,PH}_3} = 629.17 \text{ ppm}$

Es sei darauf hingewiesen, dass alle Berechnungen für isolierte Moleküle in der Gasphase durchgeführt wurden (ideales Gas). Es können signifikante Unterschiede zwischen Gasphase und kondensierter Phase auftreten.

## 5.5 Darstellung der Verbindungen

### 5.5.1 $[(\text{TerNP})_2(\text{C}_6\text{H}_{10})]$ (2)

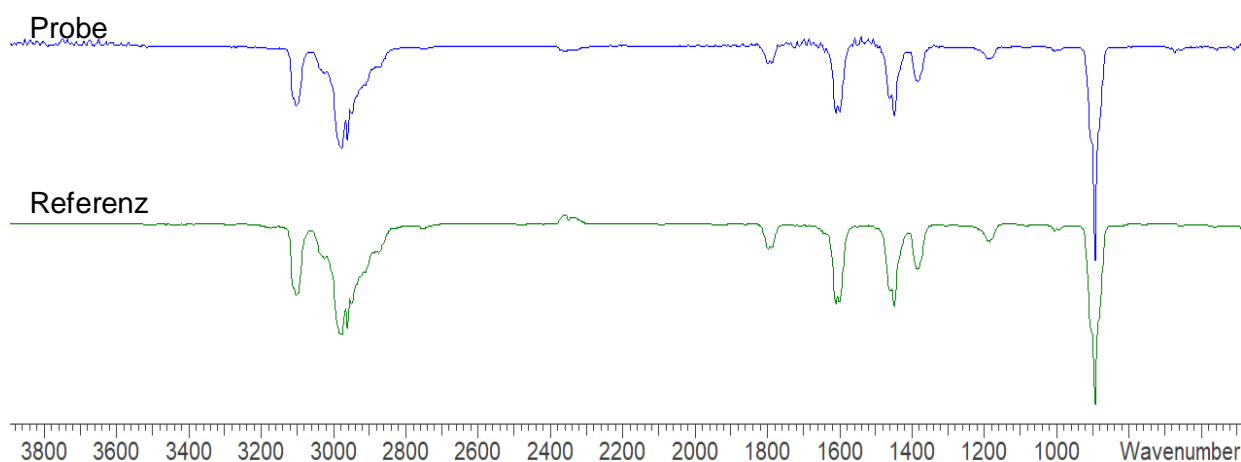


95 mg  $[\text{P}(\mu\text{-N}^{\text{Ter}})]_2$  (0,13 mmol) werden in 4 ml Benzol gelöst. Bei Raumtemperatur werden 10,42 mg 2,3-Dimethylbutadien (0,13 mmol) mittels einer  $\mu\text{l}$ -Spritze zugegeben. Die Farbe der Lösung verfärbt sich nach einigen Tagen von orange nach gelb. Wird die Reaktion mit einem Überschuss von 2,3-Dimethylbutadien ohne Benzol als Lösemittel durchgeführt, ist die Reaktion nach wenigen Minuten abgeschlossen. Lösemittel und restliches 2,3-Dimethylbutadien werden im Vakuum entfernt, was zu einem gelblichen Feststoff führt. Kristallisationsversuche mit verschiedenen Lösemitteln und Verfahren waren bisher nicht erfolgreich.

Ausbeute: 104 mg (0,13 mmol, >99 %)  $\text{M}(\text{C}_{54}\text{H}_{60}\text{P}_2\text{N}_2) = 799 \text{ g/mol}$

**$^1\text{H-NMR}$**  (25 °C,  $\text{C}_6\text{D}_6$ , 500.13 MHz):  $\delta = 0.96$  (t, 1 H,  $\text{P-CH}_2$ ,  $^2J(^1\text{H-}^{31}\text{P}) = 13.09 \text{ Hz}$ ), 1.1 (d, 3 H,  $\text{P-C-CH}_3$ ,  $^3J(^1\text{H-}^{31}\text{P}) = 11.05 \text{ Hz}$ ), 1.5 (dd, 1 H,  $\text{P-CH}_2$ ,  $^2J(^1\text{H-}^{31}\text{P}) = 13.3 \text{ Hz}$ ,  $^3J(^1\text{H-}^{31}\text{P}) = 8.4 \text{ Hz}$ ), 1.64 (s, 3 H,  $\text{P-C-C-CH}_3$ ), 2.0-2.24 (m, 24 H,  $o\text{-CH}_3$ ), 2.3-2.4 (m, 12 H,  $p\text{-CH}_3$ ), 4.61 (s, 1 H,  $\text{P-C-C-CH}_2$ ), 4.70 (s, 1 H,  $\text{P-C-C-CH}_2$ ), 6.58-6.81 (m, 14 H,  $\text{ArH}$ ).  **$^{13}\text{C-NMR}$**  (25 °C,  $\text{C}_6\text{D}_6$ , 125.77 MHz)  $\delta = 21.4$  (s,  $o\text{-CH}_3$ ), 21.5 (s,  $p\text{-CH}_3$ ), 23.6 (d,  $\text{P-C-C-CH}_3$ ,  $J = 8.03 \text{ Hz}$ ), 26.6 (d,  $\text{P-C-CH}_3$ ,  $J = 17.12 \text{ Hz}$ ), 37.6 (d,  $\text{P-CH}_2$ ,  $J = 32.9 \text{ Hz}$ ), 55.3 (d,  $\text{P-C}$ ,  $J = 30.9 \text{ Hz}$ ), 111.4 (d,  $\text{P-C-C-CH}_2$ ,  $J = 11.1 \text{ Hz}$ ), 148.9 (d,  $\text{P-C-C}$ ,  $J = 10.0 \text{ Hz}$ ).  **$^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}\text{-NMR}$**  (25 °C,  $\text{C}_6\text{D}_6$ , 202.48 MHz)  $\delta = 233.6$  (d, 1 P,  $^2J(^{31}\text{P-}^{31}\text{P}) = 7 \text{ Hz}$ ), 230.2 (d, 1 P,  $^2J(^{31}\text{P-}^{31}\text{P}) = 7 \text{ Hz}$ ). **Raman (638nm)** 230 (2), 261 (1), 333 (1), 376 (1), 421 (1), 467 (1), 484 (1), 510 (1), 522 (1), 547 (1), 578 (5), 590 (3), 701 (1), 739 (1), 843 (1), 895 (1), 942 (1), 990 (1), 1003 (1), 1067 (1), 1098 (1), 1163 (1), 1187 (1), 1231 (1), 1282 (2), 1301 (4), 1380 (2), 1409 (2), 1417 (2), 1433 (2), 1483 (1), 1579 (3), 1611 (3), 1626 (1), 2727 (3), 2799 (3), 2815 (3), 2820 (3), 2823 (3), 2829 (3), 2857 (3), 2863 (3), 2876 (3), 2882 (3), 2917 (5), 2938 (3), 2943 (3), 2961 (3), 2964 (3), 2969 (3), 2982 (3), 2985 (3), 2989 (3), 2998 (3), 3005 (3), 3010 (3),

3014 (3), 3023 (3), 3028 (3), 3034 (3), 3041 (3), 3046 (3), 3056 (3), 3061 (3). **IR (ATR  $\text{cm}^{-1}$ )** 435 (w), 456 (m), 472 (w), 488 (w), 503 (m), 550 (m), 575 (w), 594 (w), 622 (w), 645 (w), 670 (w), 690 (m), 705 (w), 746 (s), 791 (s), 806 (m), 816 (m), 843 (vs), 892 (s), 950 (w), 1014 (m), 1031 (m), 1088 (m), 1121 (w), 1171 (w), 1189 (w), 1231 (s), 1268 (w), 1288 (w), 1373 (m), 1402 (s), 1437 (m), 1482 (w), 1579 (w), 1597 (w), 1612 (w), 1626 (vw), 2727 (vw), 2855 (w), 2914 (w), 2945 (w), 2968 (w), 3090 (vw). **MS** (CI, pos., Isobutan)  $m/z$  (%): 83 (100)  $[\text{dmbH}]^+$ , 330 (100)  $[\text{TerNH}_3]^+$ , 386 (22)  $[\text{TerNH}_2+\text{C}_4\text{H}_9]^+$ , 687 (49)  $[(\text{TerNH})_2\text{P}]^+$ , 716 (65)  $[(\text{TerNP})_2]^+$ . **EA** found (calc.): C 82.00 (81.17), H 8.44 (7.57), N 3.21 (3.51). **Mp**: 140 °C (dec.)



**Abbildung 34** Gasphasen-IR-Spektrum von 2,3-Dimethyl-butadien (grün) und Probe aus dem Gasraum nach dem Erhitzen von **2** (blau).



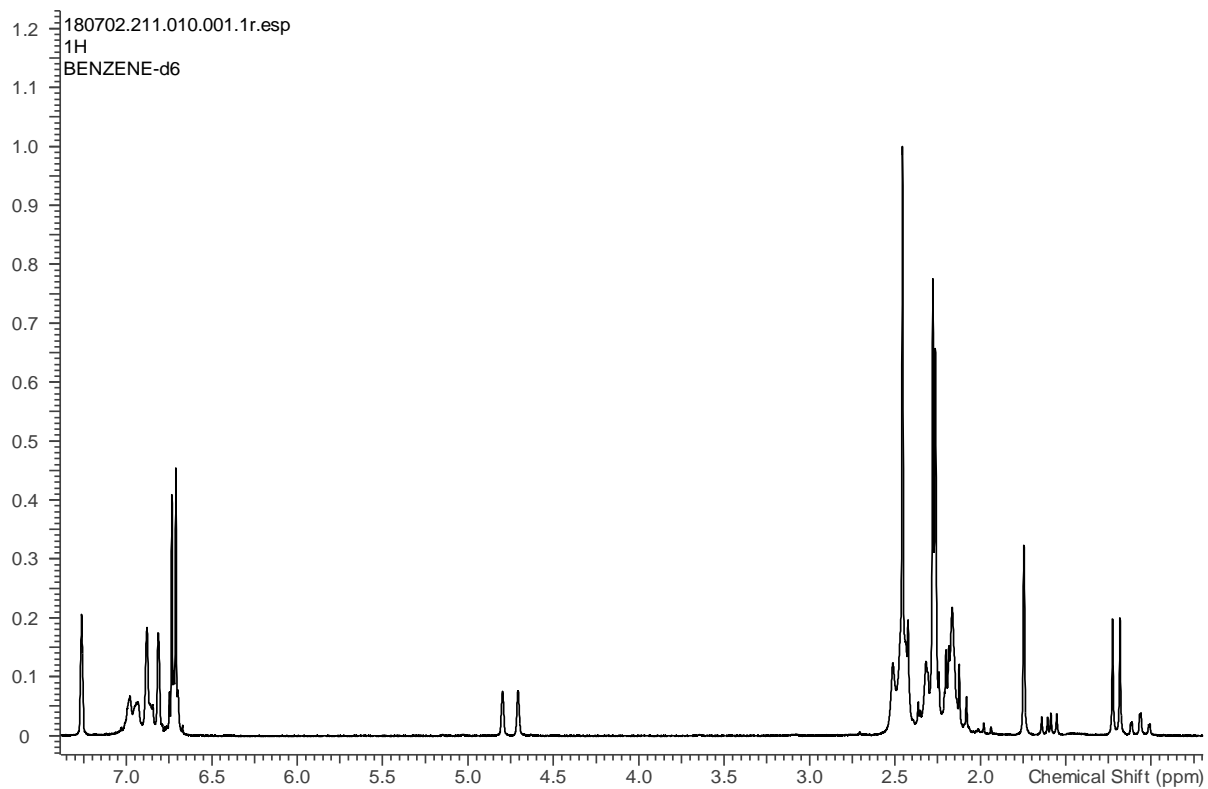


Abbildung 35 <sup>1</sup>H-NMR-Spektrum von **2** in Benzol-d<sub>6</sub>.

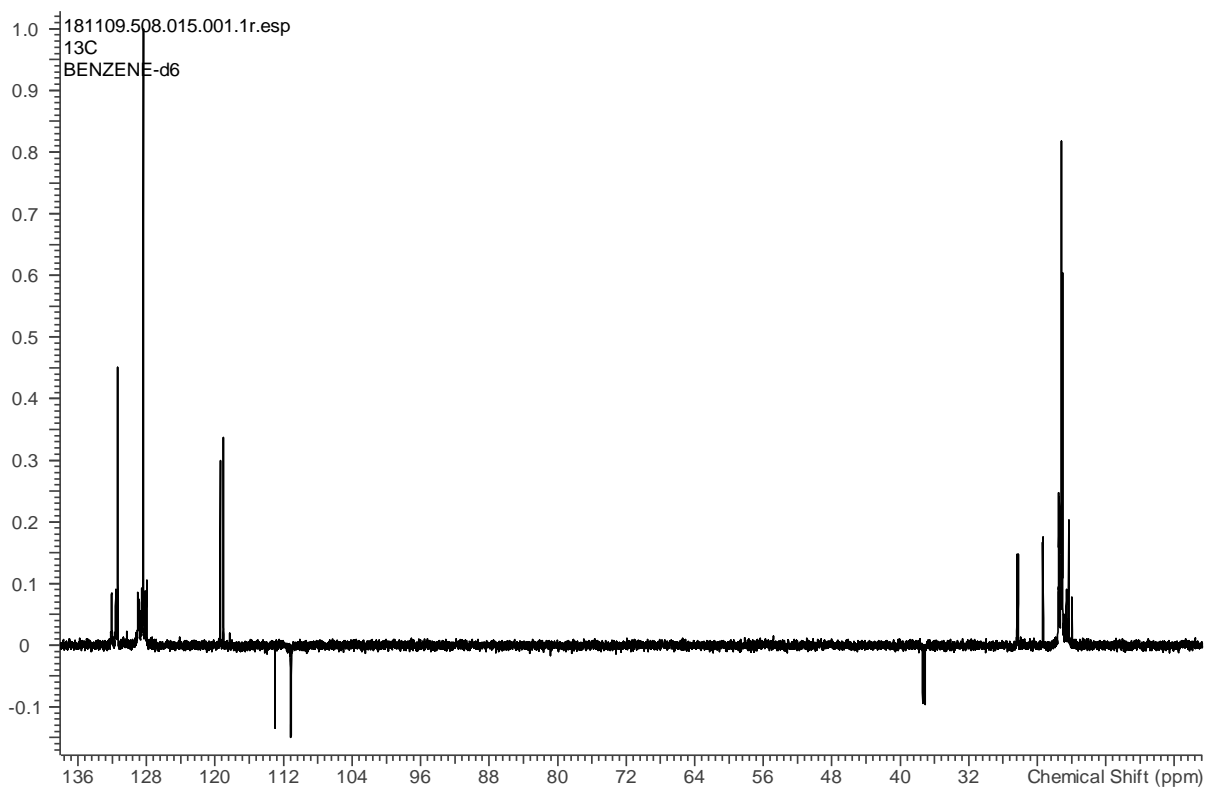


Abbildung 36 <sup>13</sup>C-NMR-Spektrum von **2** in Benzol-d<sub>6</sub>.

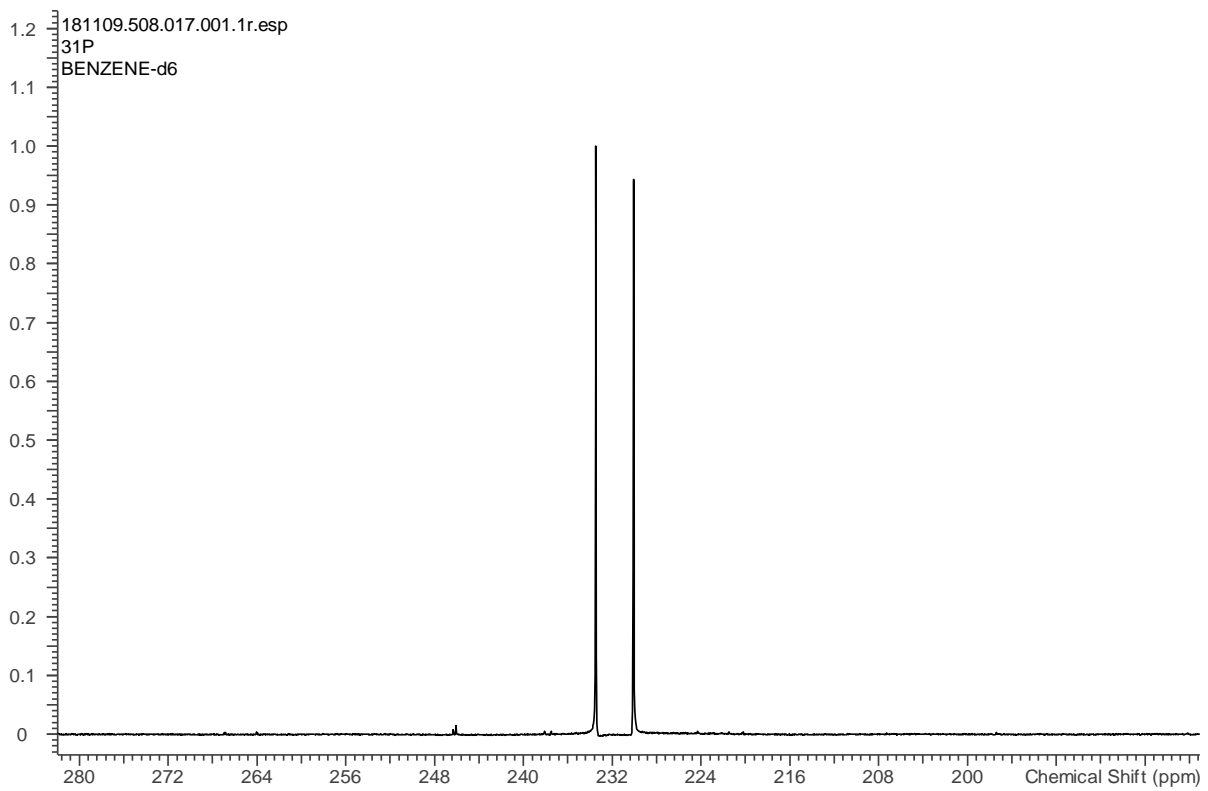


Abbildung 37  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum von **2** in Benzol- $\text{d}_6$ .

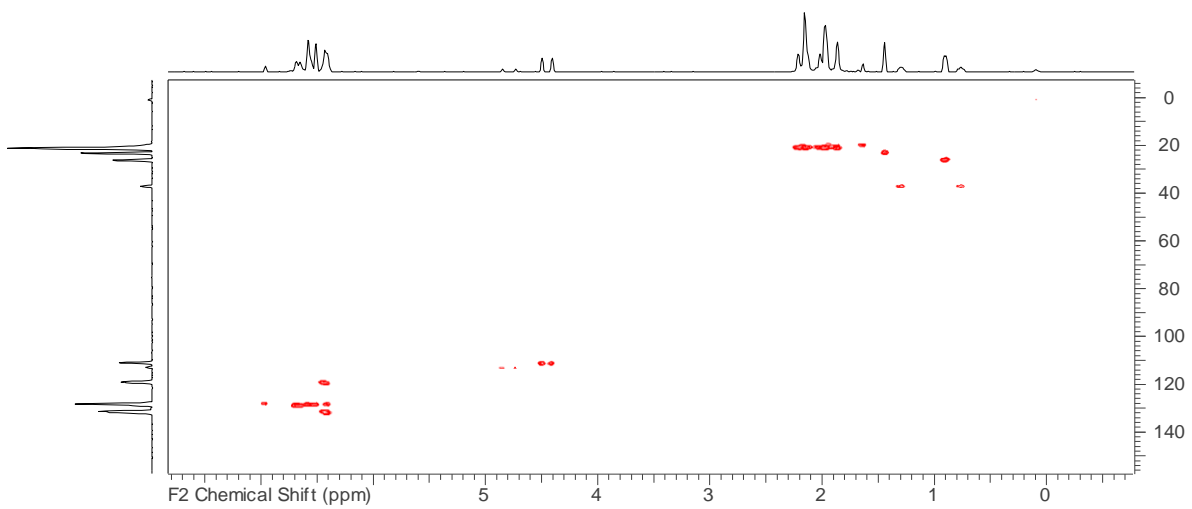


Abbildung 38 HSQC-NMR-Spektrum von **2** in Benzol- $\text{d}_6$ .

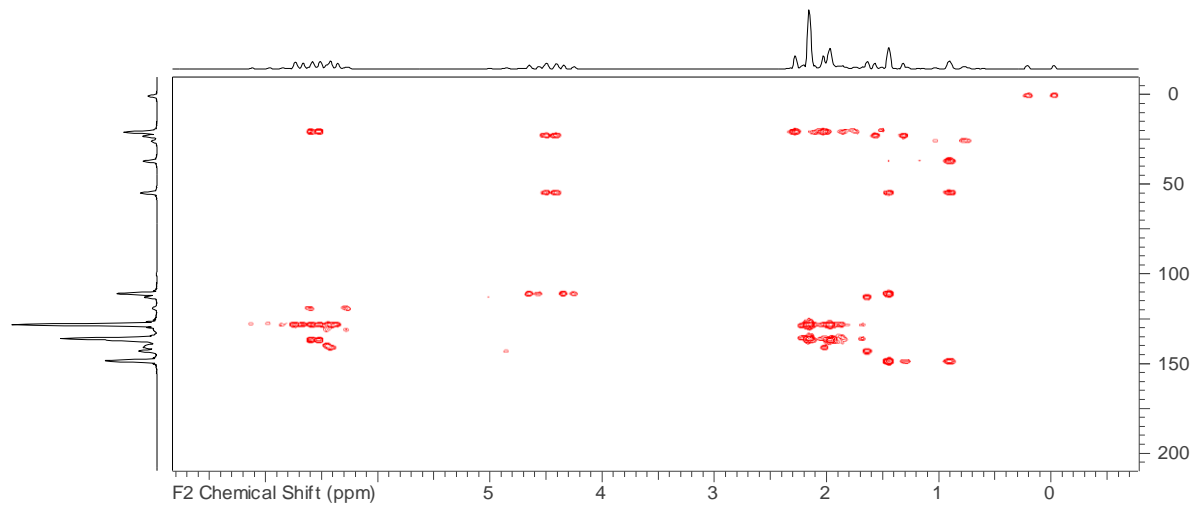


Abbildung 39 HMBC-NMR-Spektrum von **2** in Benzol-d<sub>6</sub>.

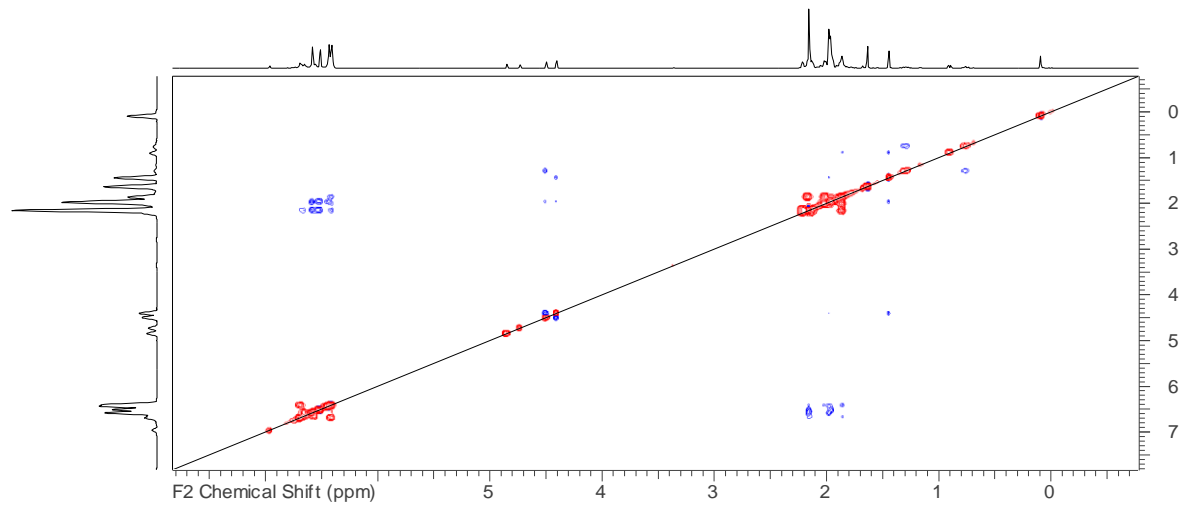
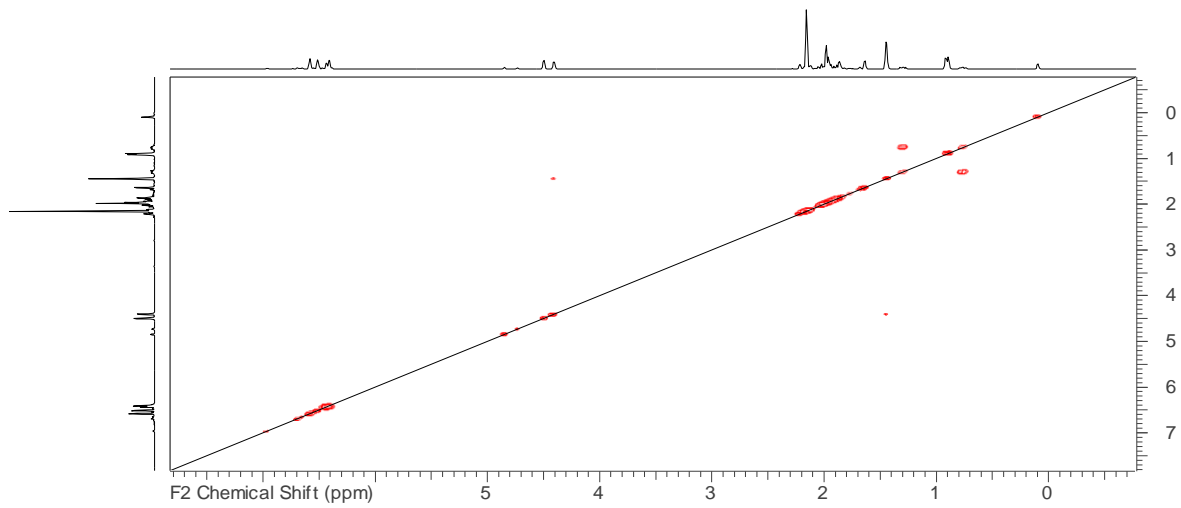
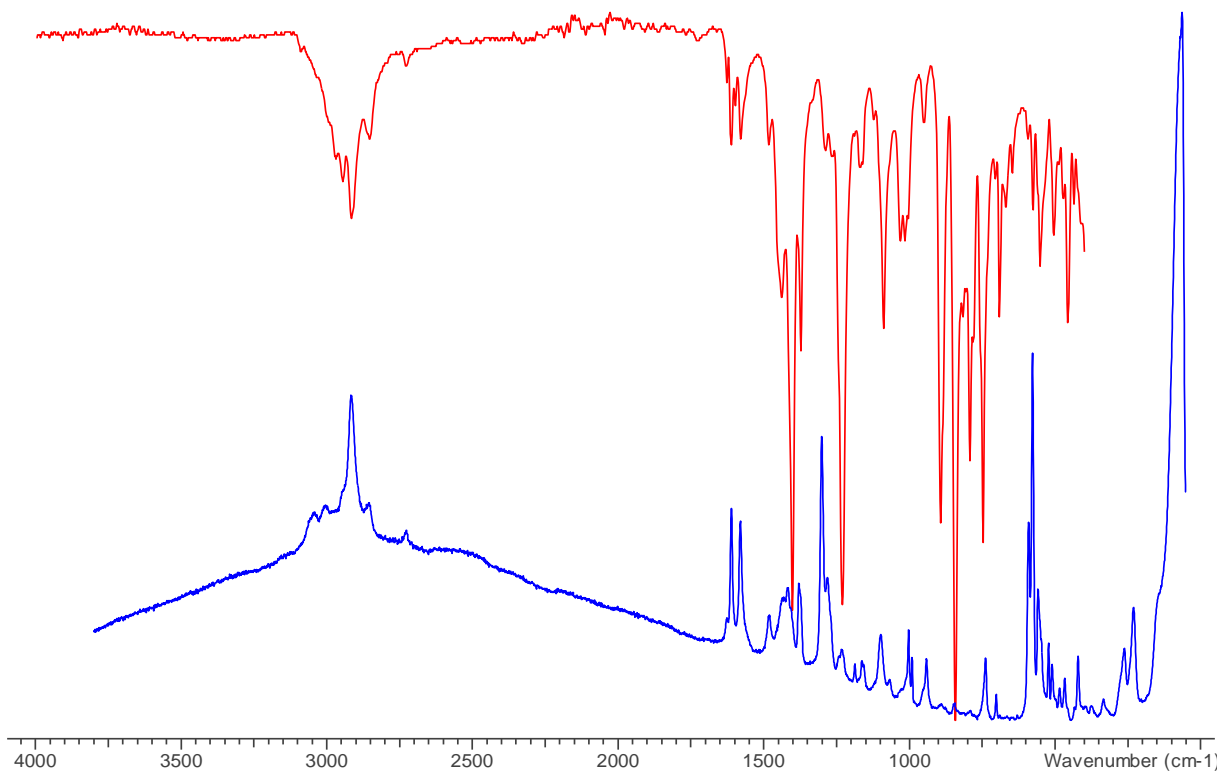


Abbildung 40 NOESY-NMR-Spektrum von **2** in Benzol-d<sub>6</sub>.

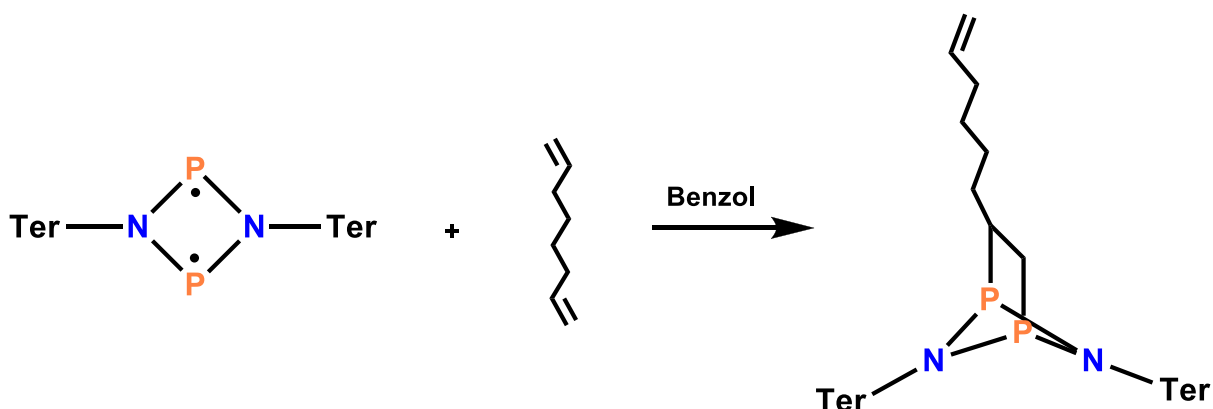


**Abbildung 41** COSY-NMR-Spektrum von **2** in Benzol-d<sub>6</sub>.



**Abbildung 42** Raman-Spektrum (blau) und IR-Spektrum (rot) von **2**.

### 5.5.2 [(TerNP)<sub>2</sub>(C<sub>8</sub>H<sub>14</sub>)] (3)

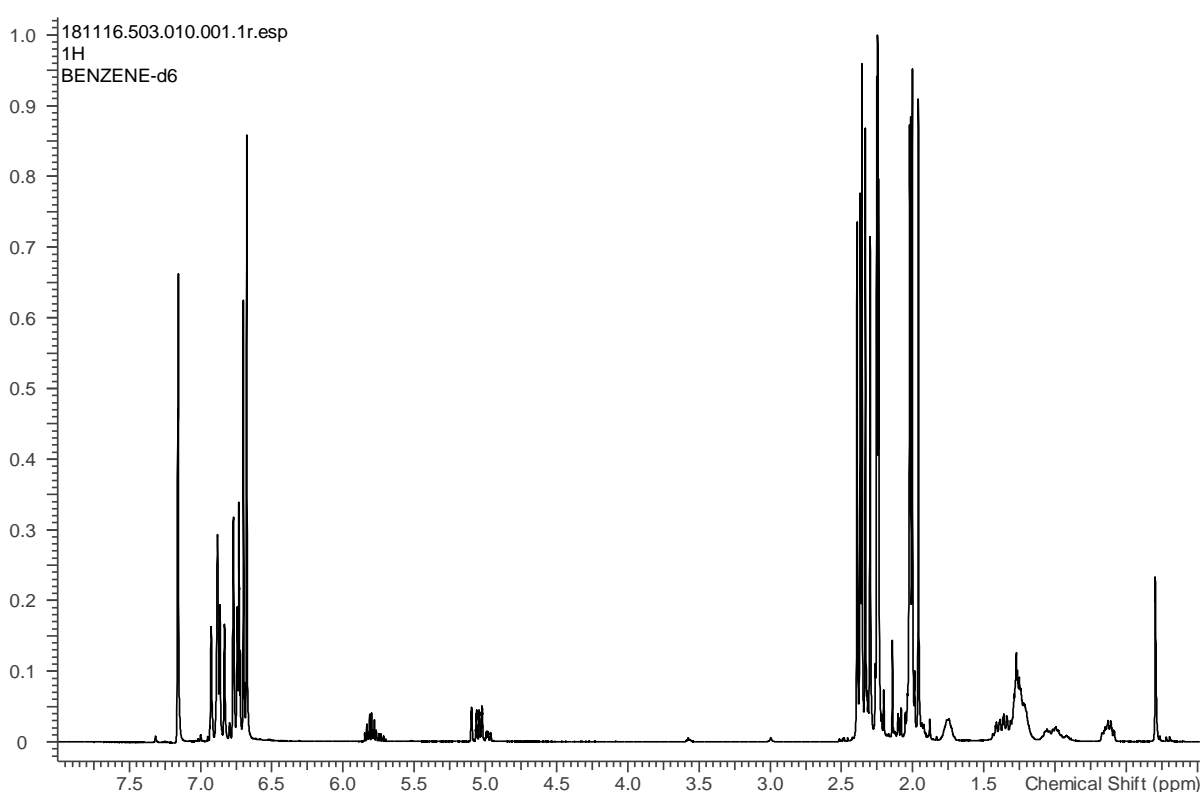


Bei Raumtemperatur werden 112,7 mg [P( $\mu$ -NTer)]<sub>2</sub> (0,16 mmol) in Benzol gelöst. 1,7-Octadien wird im fünffachen Überschuss zugesetzt. Die Lösung färbt sich innerhalb weniger Minuten von tieforange zu hellgelb. Nach einer Stunde wird das überschüssige 1,7-Octadien und Lösemittel im Vakuum entfernt. Kristallisationsversuche mit Benzol, Toluol, CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> waren nicht erfolgreich. Das gebildete Produkt ist in Benzol, Toluol, Hexan und CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> nahezu unlöslich. Die NMR-Spektroskopie konnte in C<sub>6</sub>D<sub>6</sub> durchgeführt werden und zeigt zwei Verbindungen, die als Rotamere identifiziert werden konnten.

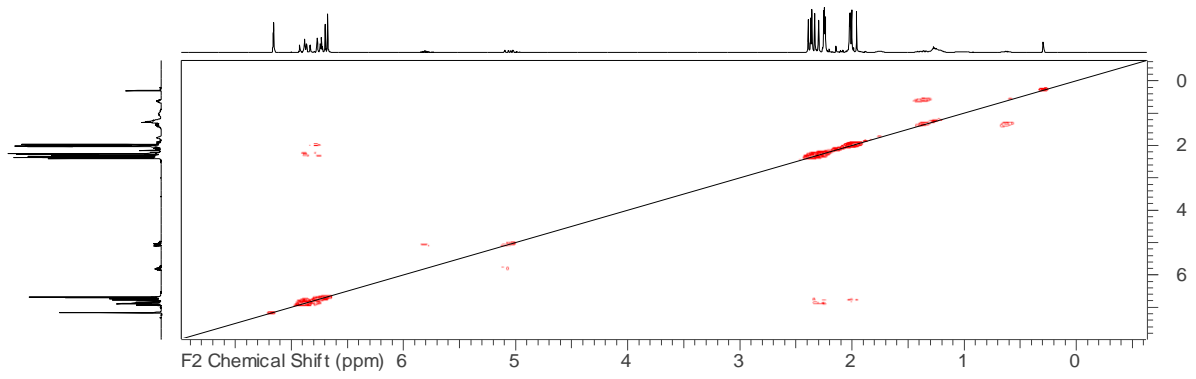
Ausbeute: 128 mg (0.16 mmol, >99 %) M(C<sub>56</sub>H<sub>64</sub>P<sub>2</sub>N<sub>2</sub>) = 827 g/mol

**<sup>1</sup>H-NMR** (25 °C, C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>, 500.13 MHz):  $\delta$  = 0.57-0.69 (m, 1 H, P-CH<sub>2</sub>), 0.81-1.12 (m), 1.13-1.31 (m), 1.31-1.45 (m, 1 H, P-CH<sub>2</sub>), 1.7-1.81 (m, 1 H, P-CH), 1.94-2.03 (m, 12 H, *p*-CH<sub>3</sub>), 2.02 (s, 2 H, P-CH-(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>-CH<sub>2</sub>), 2.22-2.41 (m, 24 H, *o*-CH<sub>3</sub>), 4.93-5.12 (m, 2 H, P-CH-(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-CH-CH<sub>2</sub>), 5.69-5.86 (m, 1H, P-CH-(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-CH), 6.66-6.94 (m, 14 H, ArH). **<sup>13</sup>C-NMR** (25 °C, C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>, 125.77 MHz)  $\delta$  = 29.2 (s, CH<sub>2</sub>), 33.2 (d, P-CH<sub>2</sub>, <sup>1</sup>J(<sup>13</sup>C-<sup>31</sup>P) = 32 Hz), 34.3 (s, P-CH-(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>-CH<sub>2</sub>), 39.3 (dd, P-CH, <sup>1</sup>J(<sup>13</sup>C-<sup>31</sup>P) = 40 Hz, <sup>2</sup>J(<sup>13</sup>C-<sup>31</sup>P) = 30 Hz), 114.6 (s, P-CH-(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-CH-CH<sub>2</sub>), 139 (s, P-CH-(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-CH). **<sup>31</sup>P{<sup>1</sup>H}-NMR** (25 °C C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>, 202.48 MHz)  $\delta$  = 223.9 (d, 1 P, <sup>2</sup>J(<sup>31</sup>P-<sup>31</sup>P) = 8 Hz), 224 (d, 1 P, <sup>2</sup>J(<sup>31</sup>P-<sup>31</sup>P) = 8 Hz), 229.1 (d, 1 P, <sup>2</sup>J(<sup>31</sup>P-<sup>31</sup>P) = 8 Hz), 229.3 (d, 1 P, <sup>2</sup>J(<sup>31</sup>P-<sup>31</sup>P) = 8 Hz). **Raman (632 nm)** 142 (2), 234 (2), 271 (1), 322 (1), 335 (1), 421 (1), 464 (1), 473 (1), 486 (1), 509 (1), 522 (2), 550 (1), 561 (2), 577 (4), 598 (2), 620 (1), 704 (1), 737 (1), 794 (1), 847 (1), 943 (1), 991 (2), 1003 (2), 1032 (1), 1098 (2), 1107 (1), 1155 (1), 1163 (1), 1187 (1), 1225 (1), 1231 (1), 1237 (1), 1245 (1), 1269 (1), 1284 (2), 1303 (4), 1328 (1), 1376 (2), 1380 (2), 1404 (1), 1422 (2), 1426 (2), 1429 (2), 1432 (2), 1439 (2), 1465 (1), 1481 (1), 1581 (2), 1612 (3), 1642 (1), 2732 (1), 2851

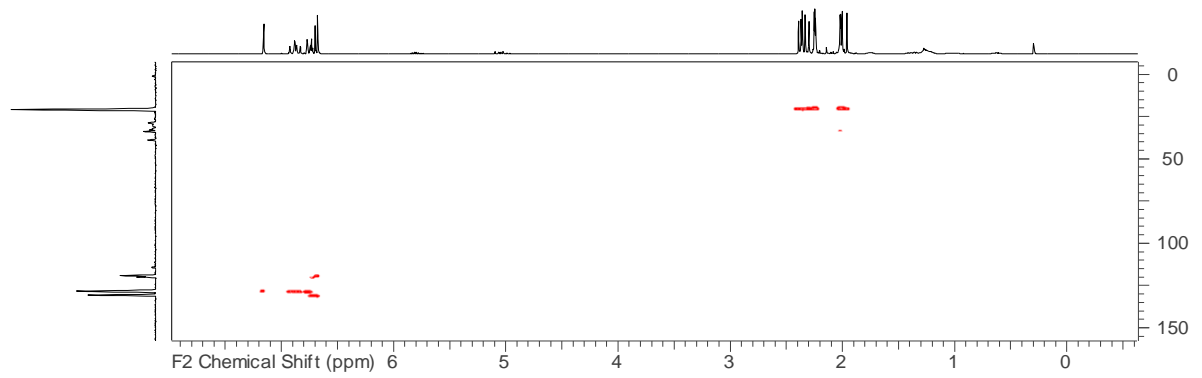
(1), 2856 (1), 2917 (2), 2940 (1), 2946 (1), 3010 (1), 3051 (1). **IR** (ATR  $\text{cm}^{-1}$ ) 416 (w), 427 (w), 435 (w), 453 (w), 462 (w), 474 (w), 486 (w), 511 (w), 534 (w), 550 (m), 561 (w), 575 (w), 585 (w), 598 (w), 618 (w), 647 (w), 676 (m), 688 (m), 705 (w), 736 (m), 756 (m), 791 (m), 816 (m), 843 (vs), 895 (m), 946 (w), 956 (w), 1006 (w), 1014 (w), 1031 (m), 1084 (m), 1158 (w), 1187 (w), 1231 (s), 1292 (w), 1375 (m), 1404 (s), 1482 (w), 1579 (w), 1610 (w), 1641 (vw), 1721 (vw), 2729 (vw), 2797 (vw), 2851 (w), 2914 (m), 2945 (w), 2972 (w), 2995 (w), 3034 (w). **MS** (CI, pos., Isobutan)  $m/z$  (%): 111 (69)  $[\text{C}_8\text{H}_{15}]^+$ , 330 (100)  $[\text{TerNH}_3]^+$ , 386 (23)  $[\text{TerNH}_2+\text{C}_4\text{H}_9]^+$ , 716 (63)  $[(\text{TerNP})_2]^+$ , 827 (31)  $[\text{M}+\text{H}]^+$ , 883 (15)  $[\text{M}+\text{C}_4\text{H}_9]^+$ . **EA** found (calc.): C 81.33 (81.32), H 7.98 (7.80), N 3.32 (3.39). **Mp**: 305 °C (dec.)



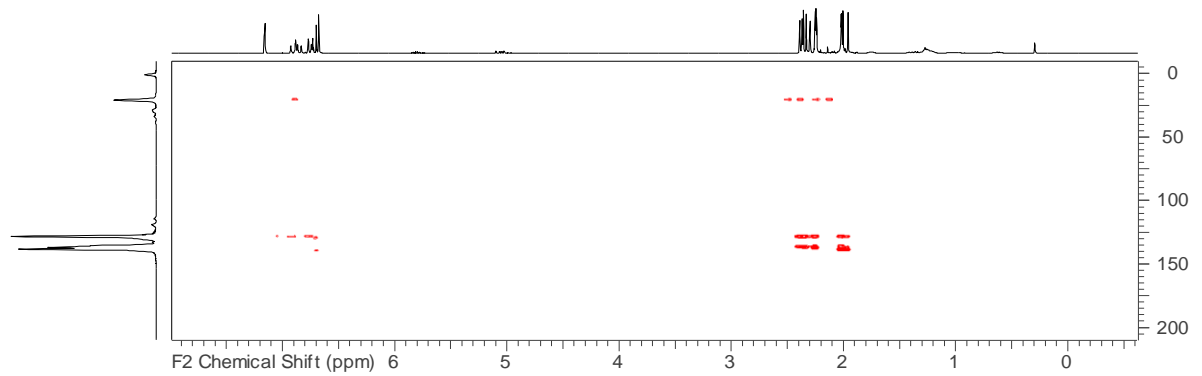
**Abbildung 43**  $^1\text{H}$ -NMR-Spektrum von **3** in Benzol- $d_6$ .



**Abbildung 44** COESY-NMR-Spektrum von **3** in Benzol-d<sub>6</sub>.



**Abbildung 45** HSQC-NMR-Spektrum von **3** in Benzol-d<sub>6</sub>.



**Abbildung 46** HMBC-NMR-Spektrum von **3** in Benzol-d<sub>6</sub>.

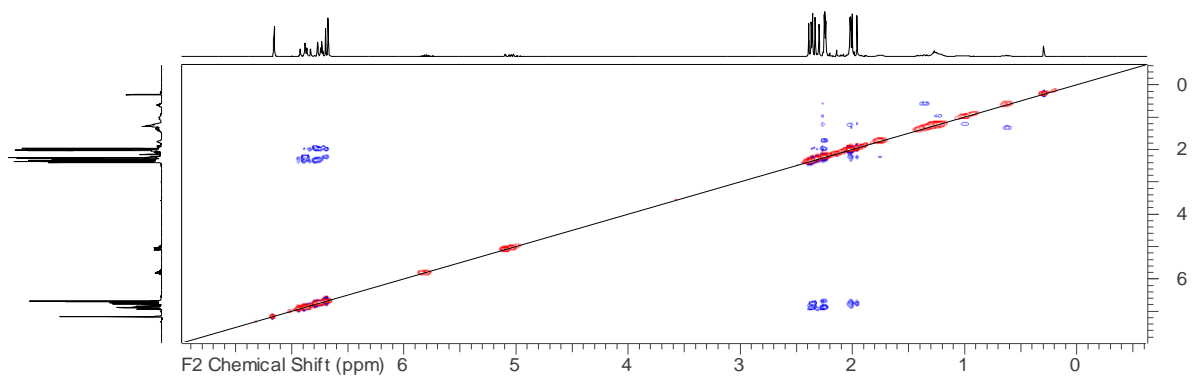


Abbildung 47 NOESY-NMR-Spektrum von **3** in Benzol-d<sub>6</sub>.

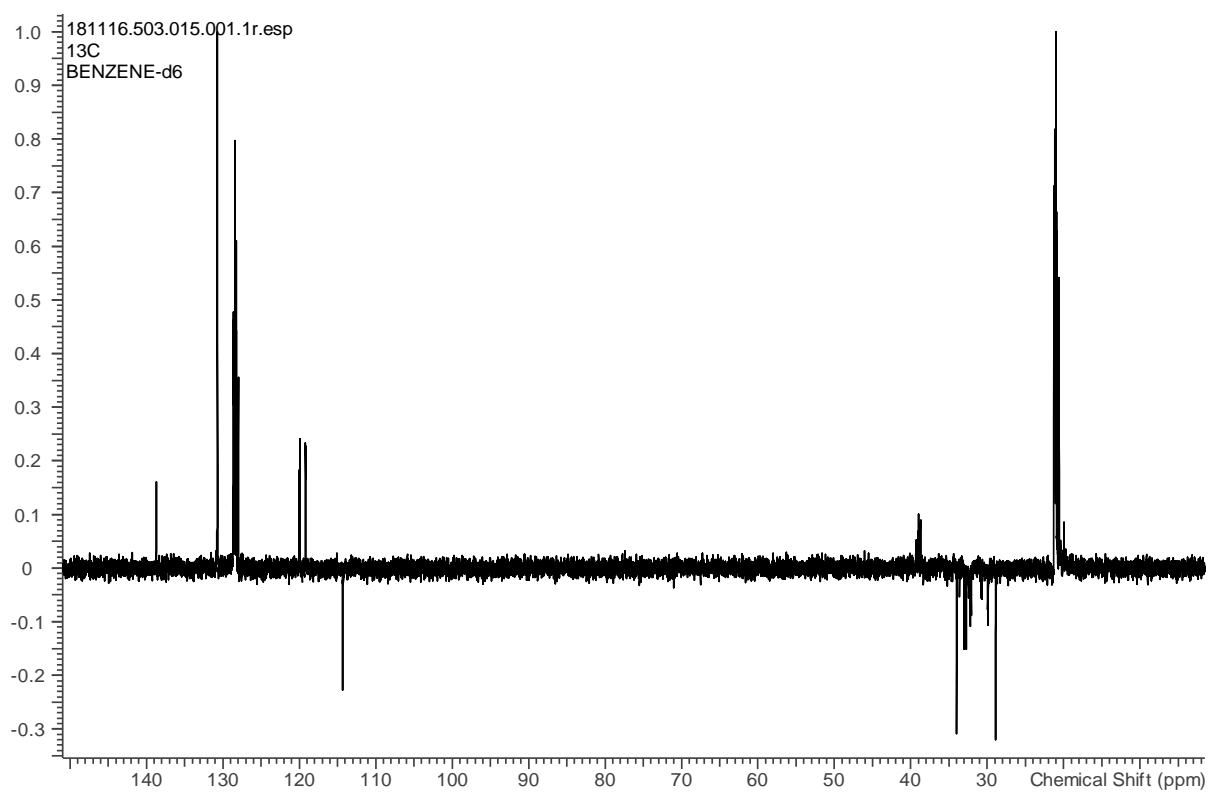


Abbildung 48 <sup>13</sup>C-DEPT-NMR-Spektrum von **3** in Benzol-d<sub>6</sub>.



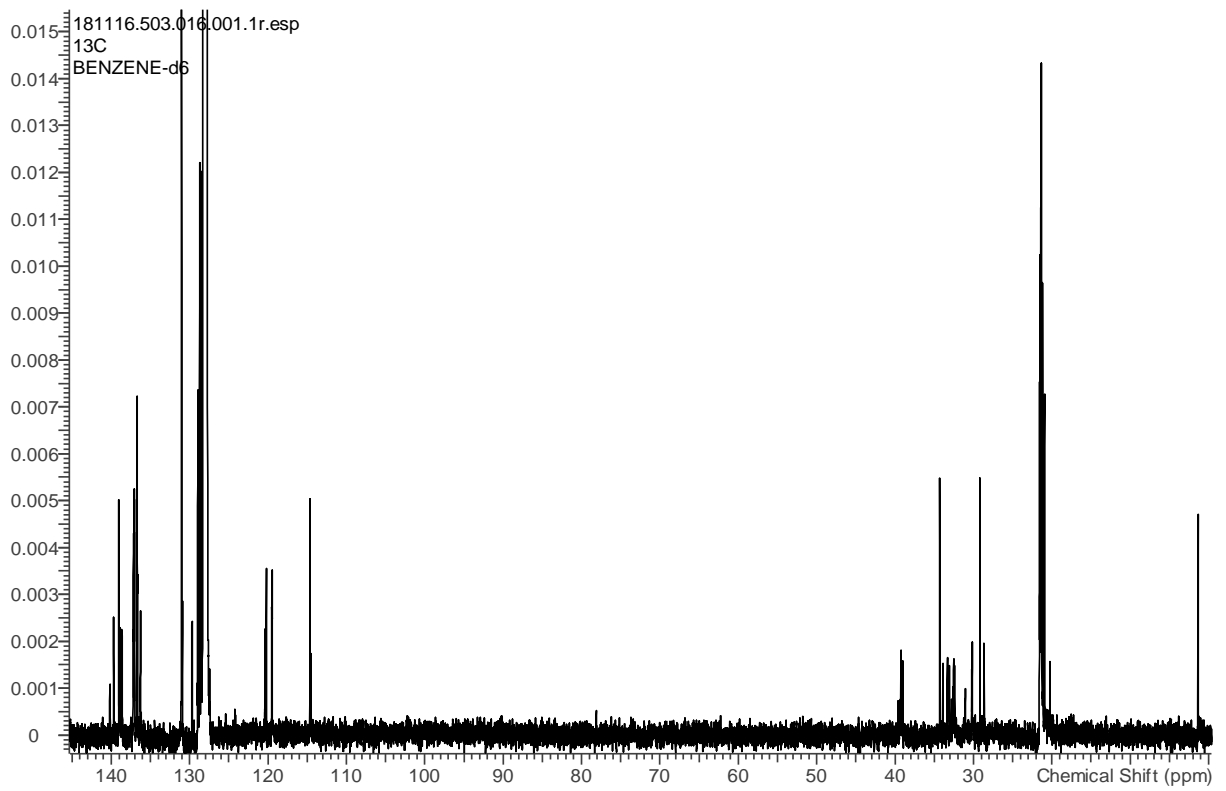


Abbildung 49 <sup>13</sup>C-NMR-Spektrum von **3** in Benzol-d<sub>6</sub>.

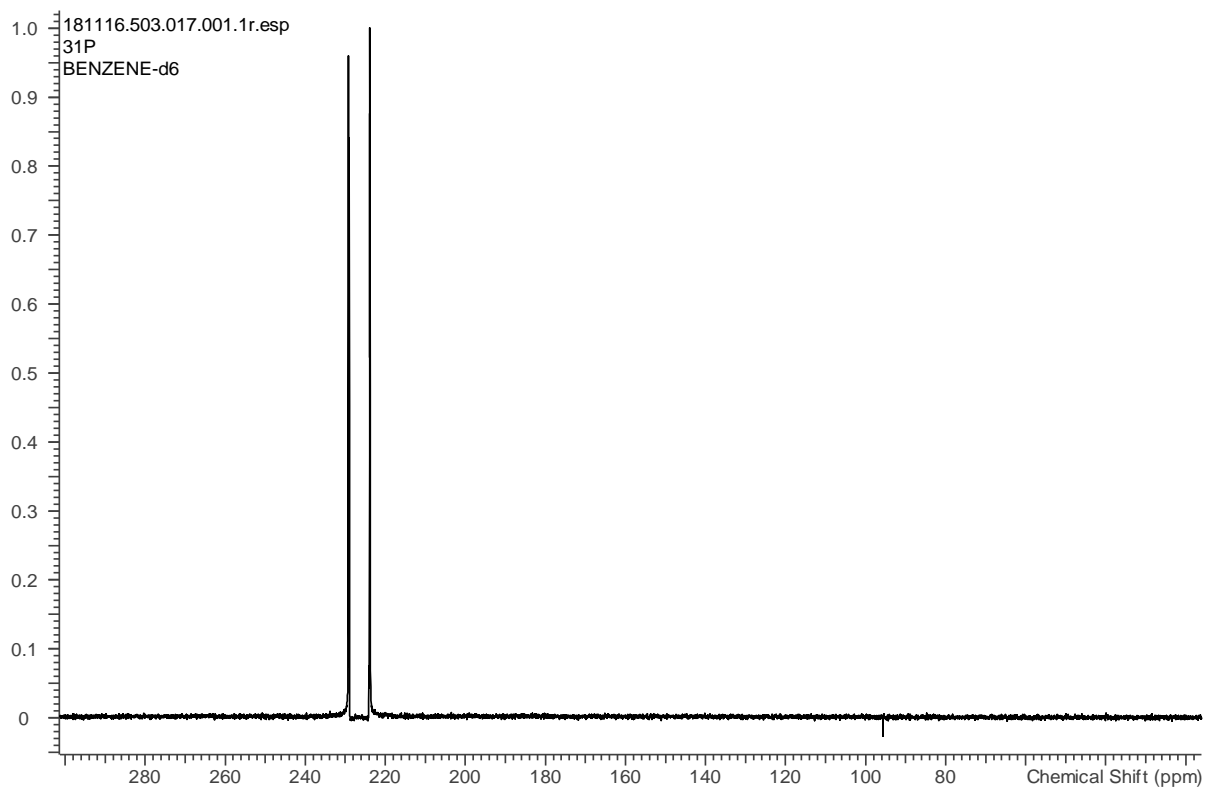


Abbildung 50 <sup>31</sup>P-NMR-Spektrum von **3** in Benzol-d<sub>6</sub>.

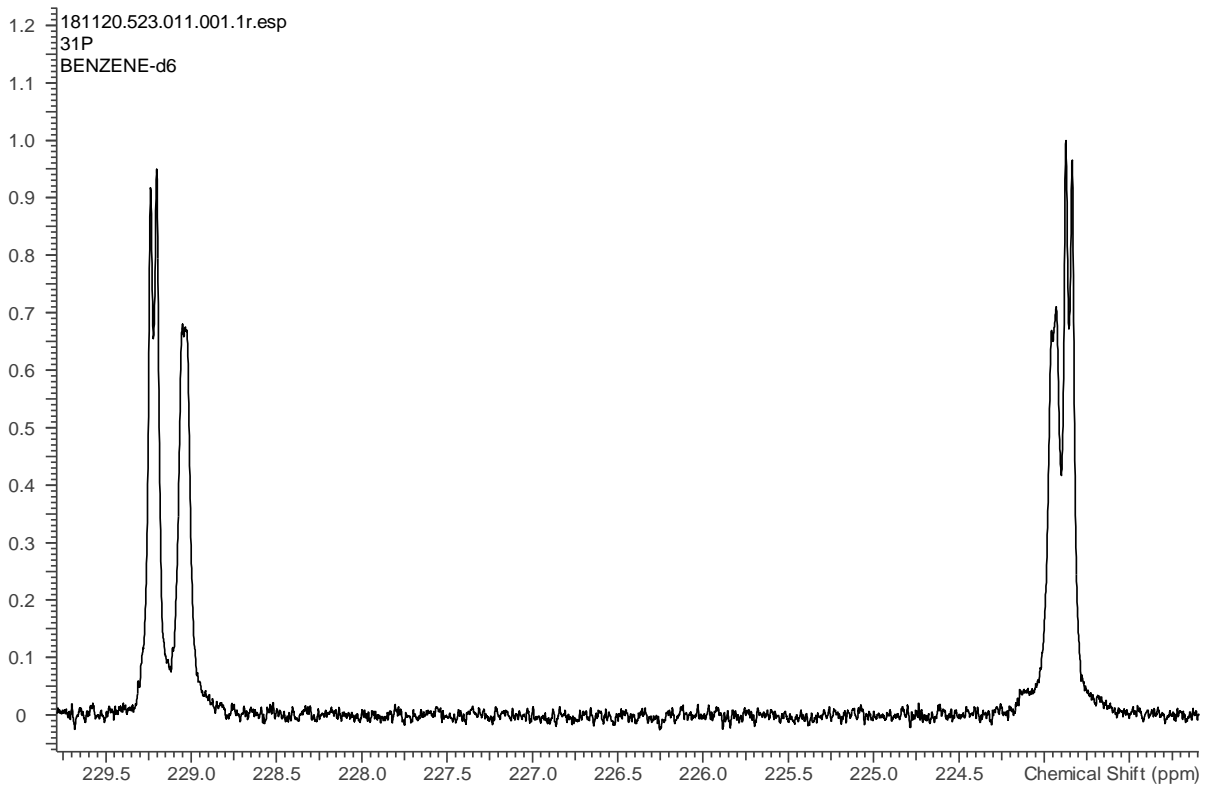


Abbildung 51  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum von **3** in Benzol- $\text{d}_6$  (vergrößert).

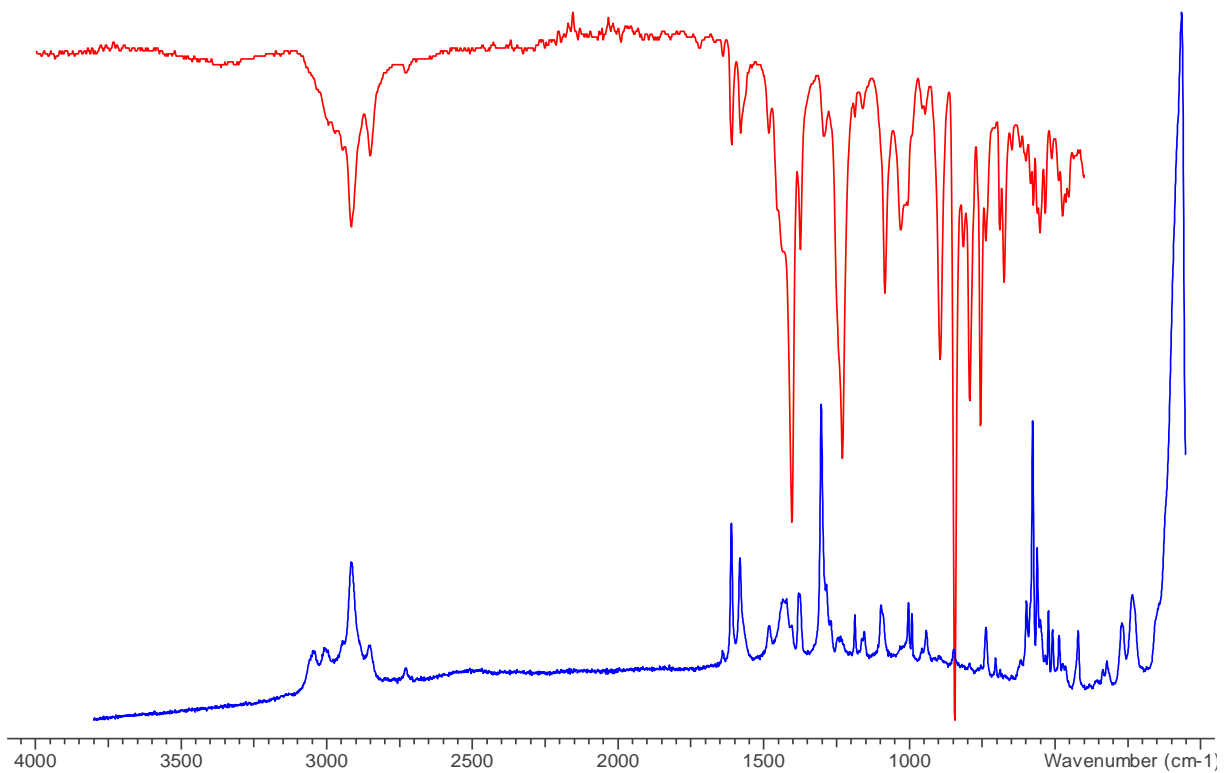
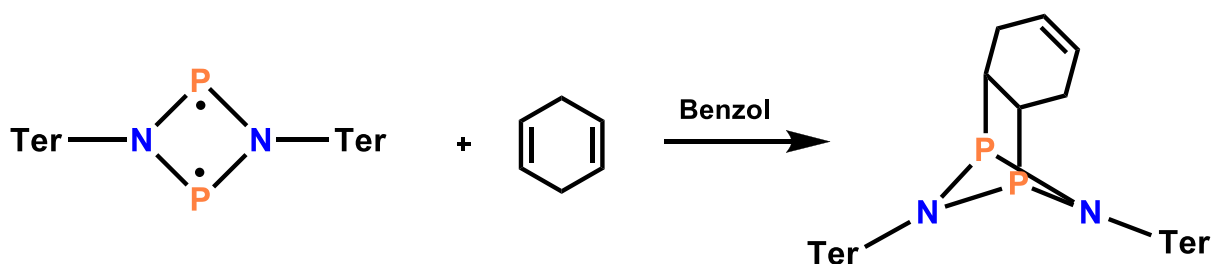


Abbildung 52 Raman-Spektrum (blau) und IR-Spektrum (rot) von **3**.

### 5.5.3 [(TerNP)<sub>2</sub>(C<sub>6</sub>H<sub>8</sub>)] (4)



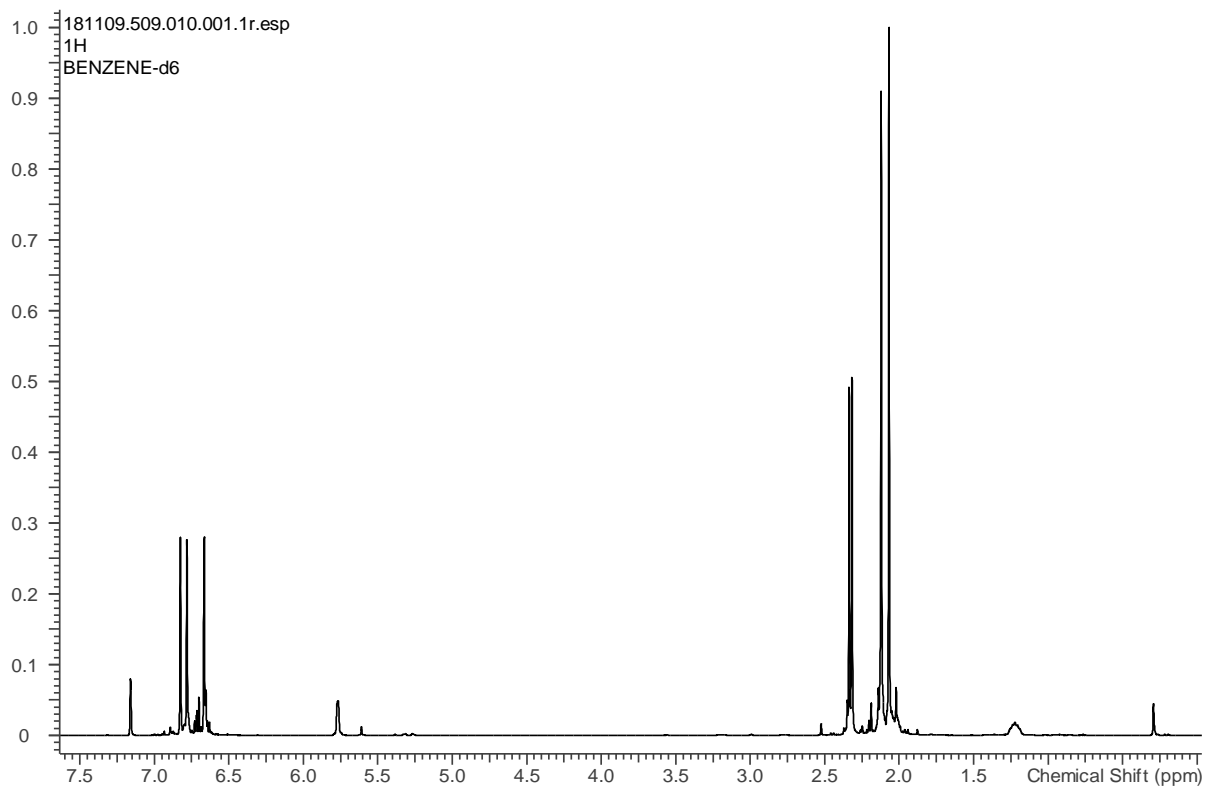
Bei Raumtemperatur werden 160 mg  $[P(\mu\text{-NTer})]_2$  (0,22 mmol) in 1 ml 1,4-Cyclohexadien gelöst. Die Suspension wird filtriert, um ungelösten Feststoff zu entfernen. Die erhaltene klare Lösung verfärbt sich innerhalb weniger Minuten von orange zu hellgelb. Das Produkt kann kristallin erhalten werden, indem die Lösung bei 5 °C gelagert wird.

Ausbeute: 108 mg (0.14 mmol, 61 %)  $M(\text{C}_{54}\text{H}_{58}\text{P}_2\text{N}_2) = 797 \text{ g/mol}$

**<sup>1</sup>H-NMR** (25 °C, C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>, 500.13 MHz):  $\delta = 1.22$  (m, 2 H, P-CH-CH<sub>2</sub>), 2.02 (m, 2 H, P-CH-CH<sub>2</sub>), 2.07 (s, 12 H, *p*-CH<sub>3</sub>), 2.12 (s, 12 H, *o*-CH<sub>3</sub>), 2.13 (m, 2 H, P-CH), 2.33 (d, 12 H, *o*-CH<sub>3</sub>, <sup>7</sup>*J* = 9.5 Hz), 5.77 (m, 2 H, P-CH-CH<sub>2</sub>-CH), 6.6-6.74 (m, 6 H, Ter-*H*), 6.78 (s, 4 H, Mes-*H*), 6.83 (s, 4 H, Mes-*H*). **<sup>13</sup>C-NMR** (25 °C, C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>, 125.77 MHz)  $\delta = 21.1$  (s, *o*-CH<sub>3</sub>), 21.3 (s, *o*-CH<sub>3</sub>), 21.5 (s, *p*-CH<sub>3</sub>), 22.9 (t, P-CH-CH<sub>2</sub>), 38.9 (d, P-CH, <sup>1</sup>*J*(<sup>13</sup>C-<sup>31</sup>P) = 29.5 Hz), 128.7 (s, P-CH-CH<sub>2</sub>-CH), 128.8 (s), 131.3 (s), 131.7 (s). **<sup>31</sup>P{<sup>1</sup>H}-NMR** (25 °C, C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>, 202.48 MHz)  $\delta = 235.2$  (s). **Raman (632 nm)** 143 (3), 181 (1), 204 (1), 220 (1), 241 (3), 278 (2), 324 (1), 337 (1), 353 (1), 375 (1), 415 (1), 425 (1), 470 (1), 477 (1), 489 (1), 511 (1), 527 (2), 537 (1), 548 (2), 553 (2), 563 (3), 581 (6), 599 (2), 604 (1), 651 (1), 689 (1), 705 (1), 738 (2), 744 (1), 761 (1), 798 (1), 842 (1), 850 (1), 879 (1), 887 (1), 943 (1), 956 (1), 1005 (1), 1072 (1), 1100 (2), 1157 (1), 1164 (1), 1189 (1), 1208 (1), 1234 (1), 1272 (1), 1284 (3), 1304 (5), 1379 (2), 1385 (2), 1402 (1), 1421 (2), 1436 (2), 1483 (1), 1582 (3), 1613 (3), 1659 (1), 2722 (1), 2731 (1), 2856 (1), 2918 (3), 2946 (1), 2966 (1), 2972 (1), 2976 (1), 2984 (1), 2990 (1), 2994 (1), 3007 (1), 3040 (2). **IR (ATR cm<sup>-1</sup>)** 404 (m), 451 (w), 482 (w), 534 (w), 548 (w), 559 (w), 575 (w), 585 (w), 602 (w), 647 (w), 670 (w), 686 (w), 705 (vw), 732 (w), 742 (w), 759 (m), 791 (m), 810 (w), 841 (vs), 886 (s), 1006 (w), 1016 (w), 1029 (w), 1086 (m), 1099 (w), 1187 (w), 1222 (m), 1261 (w), 1284 (w), 1375 (m), 1400 (s), 1416 (m), 1435 (w), 1482 (w), 1566 (w), 1577 (w), 1610 (w), 1721 (vw), 1874 (vw), 2731 (vw), 2846 (w), 2912 (w), 2941 (w), 2993 (w). **MS** (CI, pos., Isobutan) *m/z* (%): 79 (6) [C<sub>6</sub>H<sub>7</sub>]<sup>+</sup>, 716 (100) [(TerNP)<sub>2</sub>]<sup>+</sup>, 797 (12)

$[M+H]^+$ , 853 (8)  $[M+C_4H_9]^+$ . EA found (calc.): C 81.21 (81.38), H 7.36 (7.34), N 3.23 (3.51).

**Mp:** 215 °C (dec.)



**Abbildung 53**  $^1\text{H}$ -NMR-Spektrum von **4** in Benzol- $d_6$ .

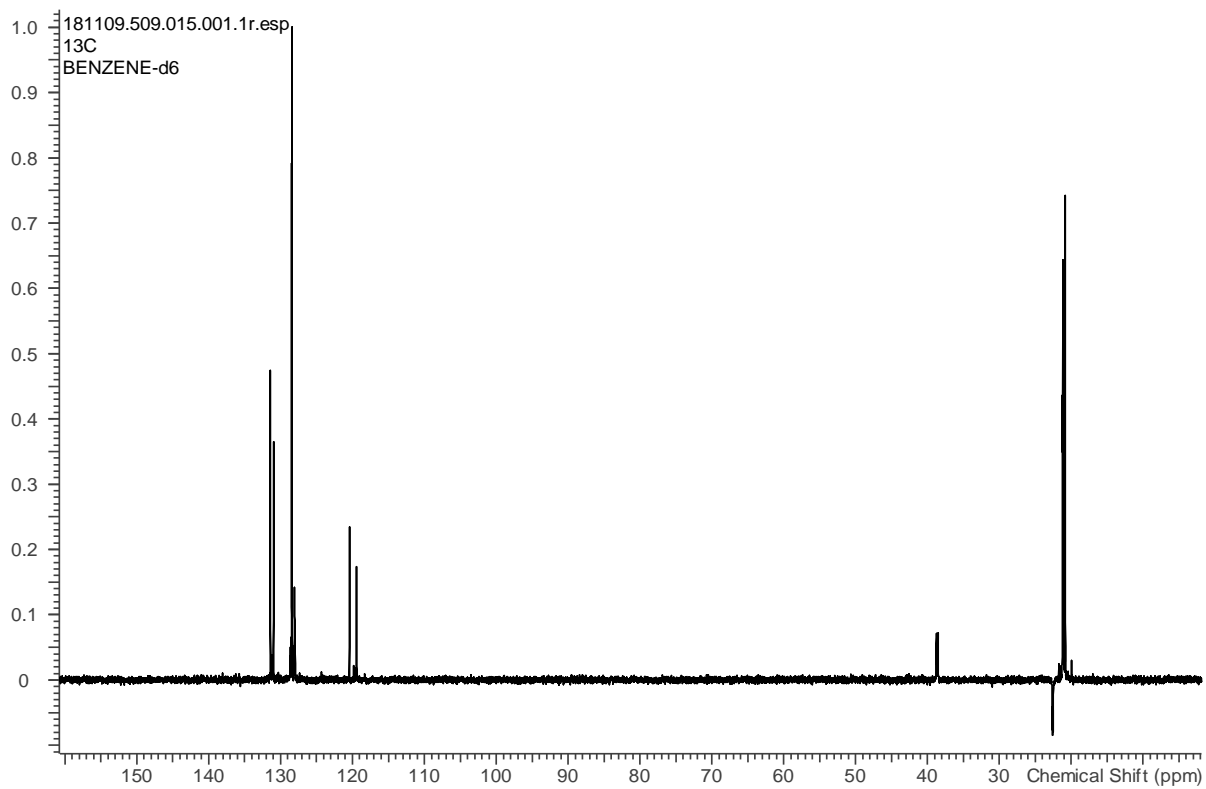


Abbildung 54 <sup>13</sup>C-DEPT-NMR-Spektrum von **4** in Benzol-d<sub>6</sub>.

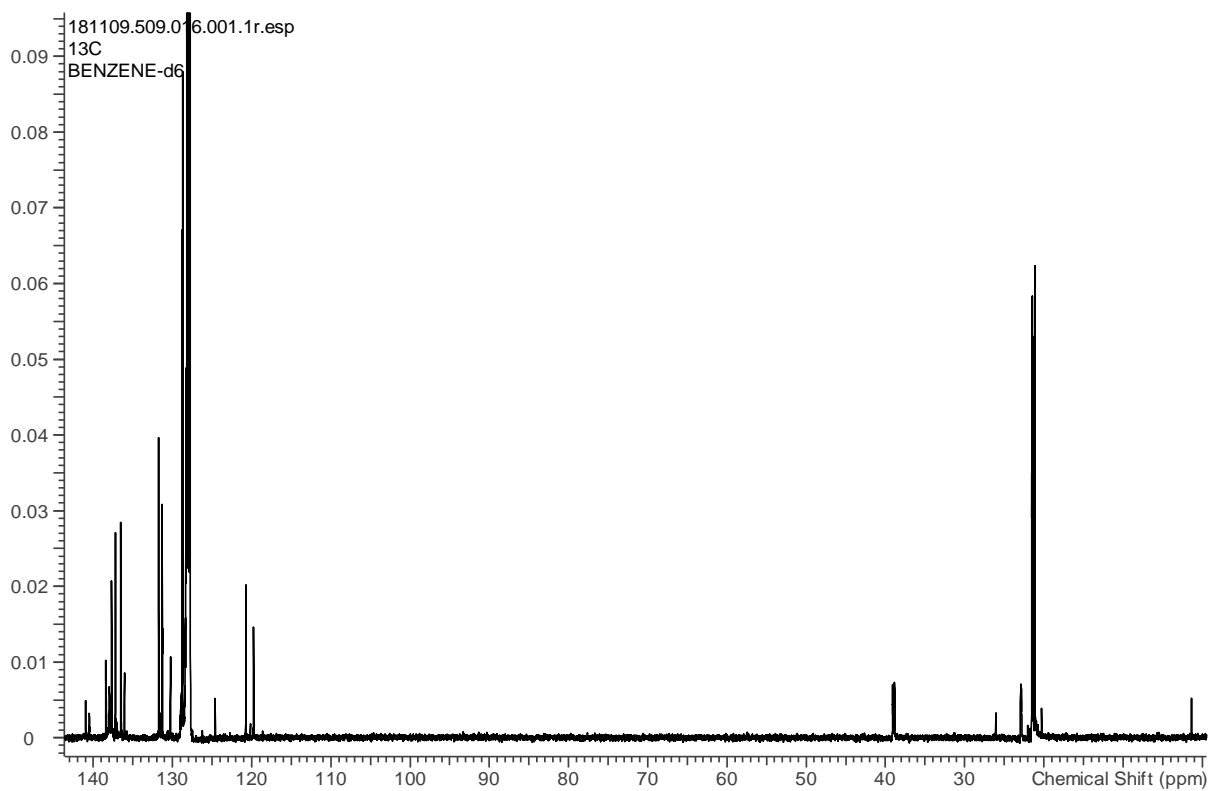


Abbildung 55 <sup>13</sup>C-NMR-Spektrum von **4** in Benzol-d<sub>6</sub>.

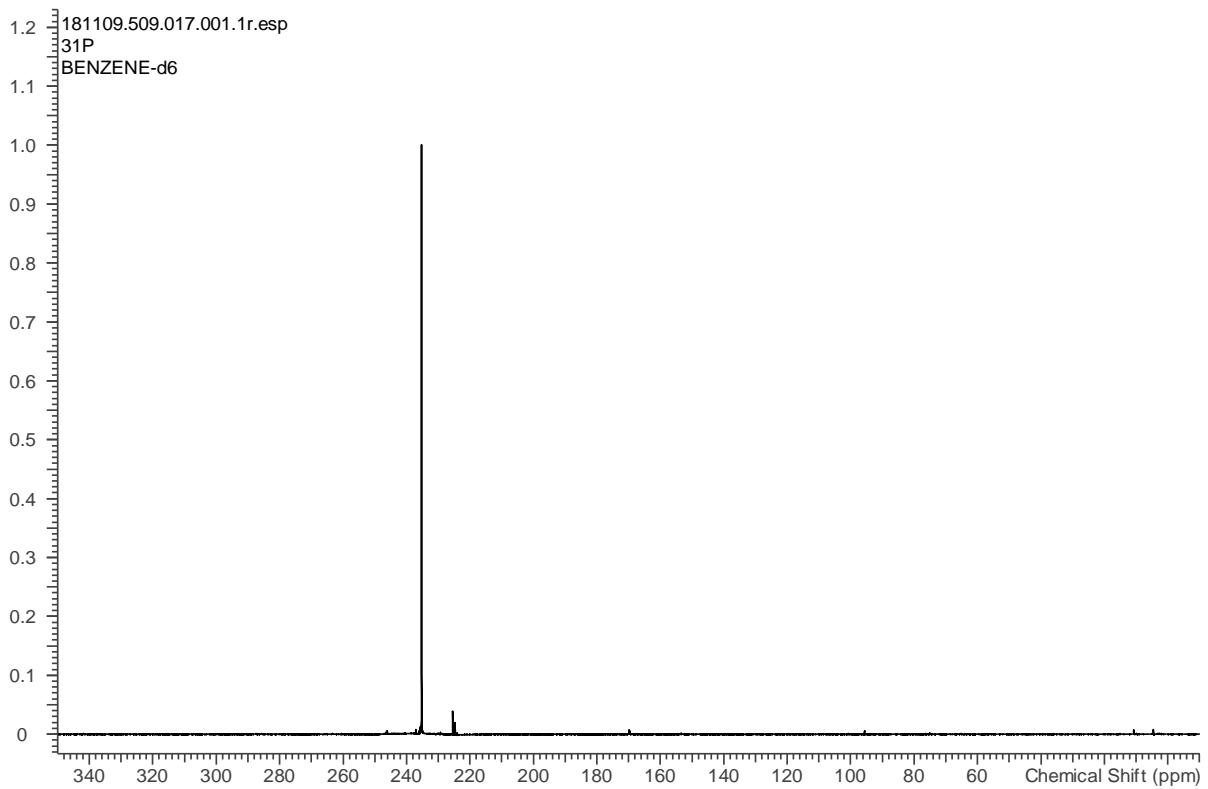


Abbildung 56  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum von **4** in Benzol- $\text{d}_6$ .

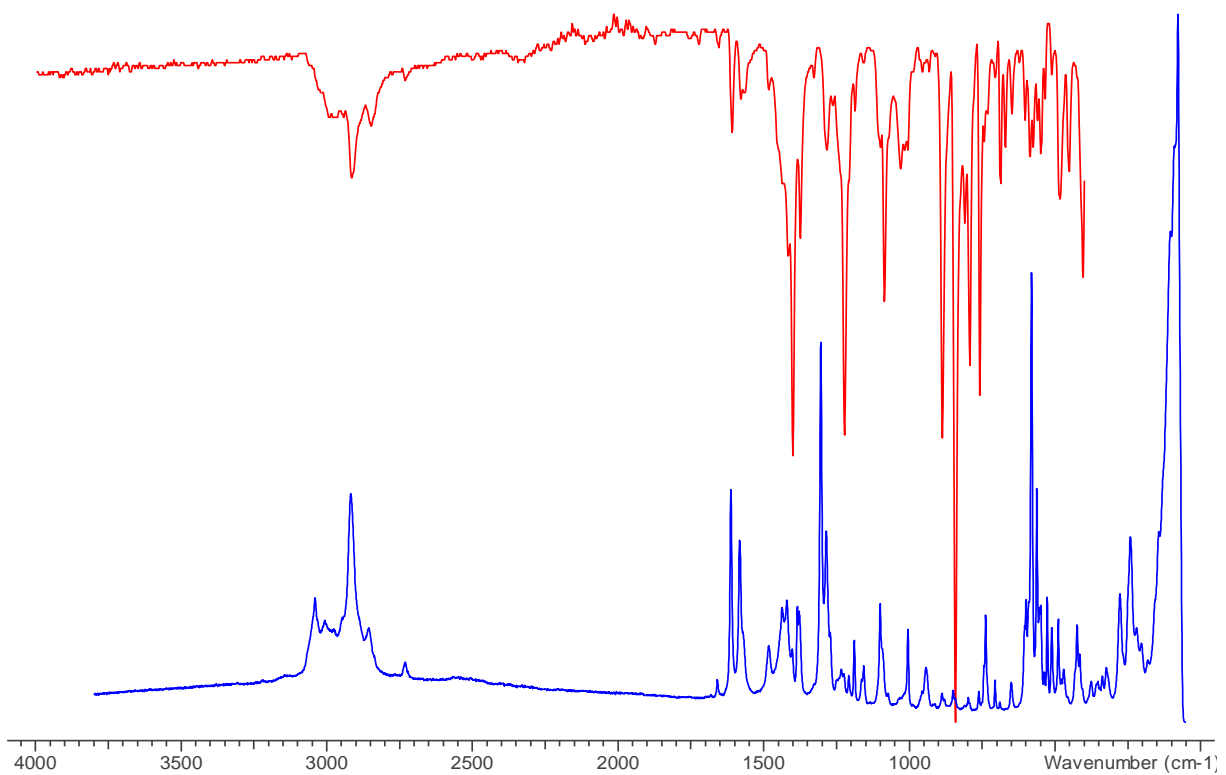
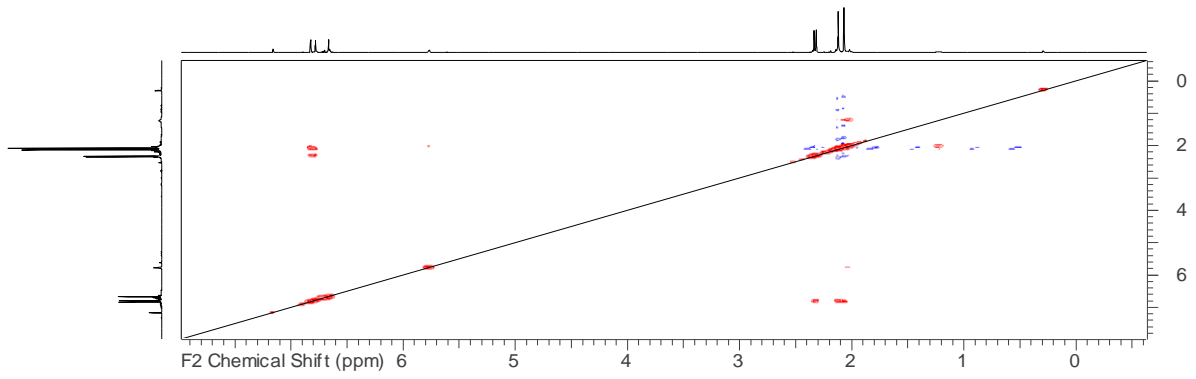
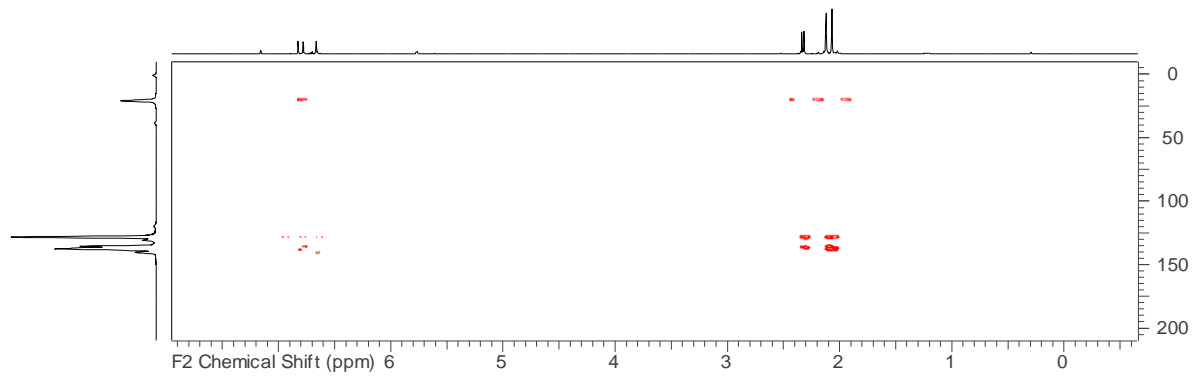


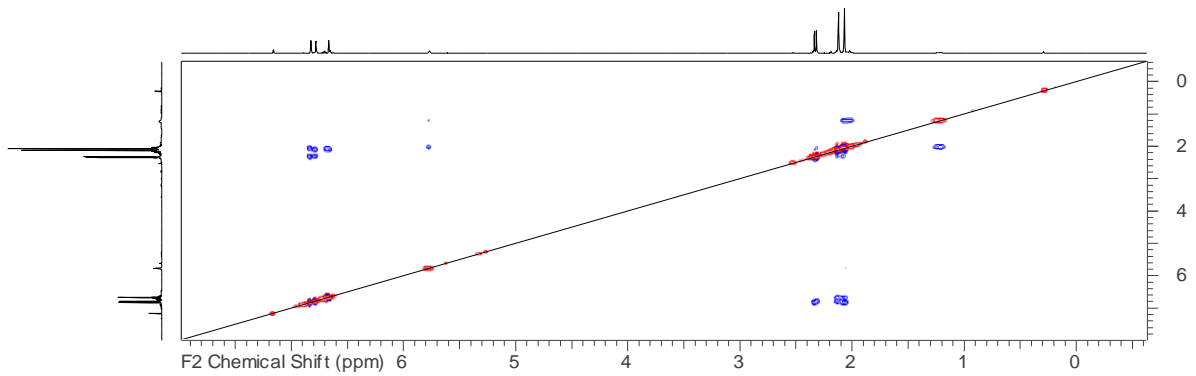
Abbildung 57 Raman-Spektrum (blau) und IR-Spektrum (rot) von **4**.



**Abbildung 58** COESY-NMR-Spektrum von **4** in Benzol-d<sub>6</sub>.

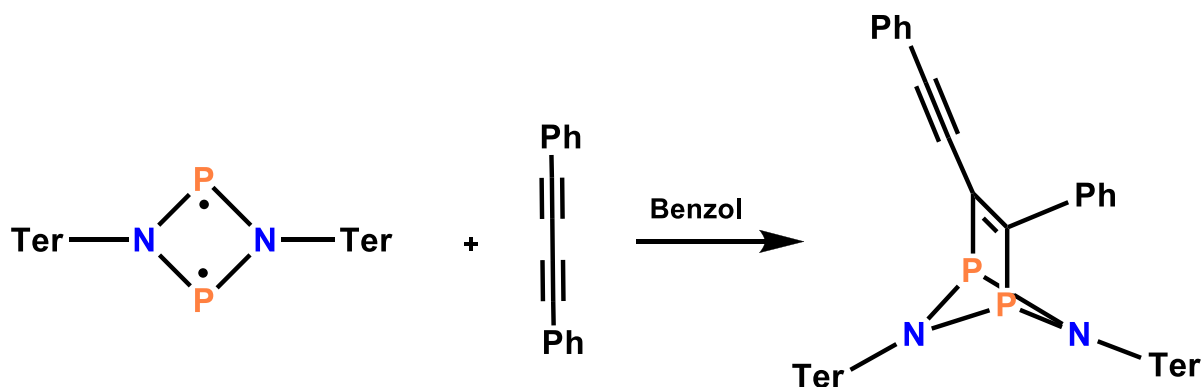


**Abbildung 59** HMBC-NMR-Spektrum von **4** in Benzol-d<sub>6</sub>.



**Abbildung 60** NOESY-NMR-Spektrum von **4** in Benzol-d<sub>6</sub>.

### 5.5.4 [(TerNP)<sub>2</sub>(C<sub>16</sub>H<sub>10</sub>)] (5)



Bei Raumtemperatur werden 88,7 mg [P( $\mu$ -NTer)]<sub>2</sub> (0,12 mmol) und 24,7 mg Diphenyldiacetylen (0,12 mmol) in einem Schlenkcolben als Feststoffe kombiniert und in 3 ml Benzol gelöst. Die Lösung verfärbt sich innerhalb weniger Stunden von orange zu dunkelgelb. Das Entfernen des Lösemittels im Vakuum führt zu einem orange-gelben Schaum. Kristallisationsversuche mit verschiedenen Lösemitteln und Verfahren waren nicht erfolgreich.

Ausbeute: 112 mg (0,12 mmol, >99 %) M(C<sub>64</sub>H<sub>60</sub>P<sub>2</sub>N<sub>2</sub>) = 919 g/mol

**<sup>1</sup>H-NMR** (25 °C, C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>, 500.13 MHz):  $\delta$  = 1.97 (s, 12 H, *o*-CH<sub>3</sub>), 2.15 (s, 12 H, *o*-CH<sub>3</sub>), 2.33 (s, 12 H, *p*-CH<sub>3</sub>), 6.67 (m), 6.87 (m), 7.15 (m), 7.54 (m), 7.88 (m). **<sup>13</sup>C-NMR** (25 °C, C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>, 125.77 MHz)  $\delta$  = 21.2 (s, *o*-CH<sub>3</sub>), 21.3 (s, *o*-CH<sub>3</sub>), 21.6 (s, *p*-CH<sub>3</sub>), 120.1 (s), 129.1 (m), 130.8 (s), 131.6 (s) 136.9 (s). **<sup>31</sup>P{<sup>1</sup>H}-NMR** (25 °C, C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>, 202.48 MHz)  $\delta$  = 241.5 (d, 1 P, <sup>2</sup>J(<sup>31</sup>P–<sup>31</sup>P) = 10.13 Hz), 227.8 (d, 1 P, <sup>2</sup>J(<sup>31</sup>P–<sup>31</sup>P) = 10.13 Hz). **Raman (784 nm)** 147 (3), 236 (2), 269 (2), 333 (2), 425 (2), 523 (2), 554 (2), 564 (3), 577 (3), 612 (2), 742 (2), 943 (1), 965 (2), 998 (4), 1021 (2), 1043 (2), 1091 (2), 1176 (3), 1205 (3), 1305 (5), 1382 (7), 1438 (6), 1482 (6), 1534 (5), 1596 (5), 1613 (4), 2165 (1), 2195 (1). **IR (ATR cm<sup>-1</sup>)** 404 (m), 423 (w), 439 (m), 460 (m), 478 (m), 488 (m), 501 (m), 511 (m), 526 (m), 548 (m), 563 (m), 596 (w), 608 (w), 629 (w), 678 (s), 688 (s), 738 (m), 754 (vs), 791 (m), 806 (m), 845 (s), 890 (m), 911 (w), 936 (w), 1029 (m), 1057 (w), 1084 (m), 1158 (w), 1226 (s), 1270 (m), 1299 (w), 1315 (w), 1375 (m), 1406 (s), 1439 (m), 1453 (m), 1480 (w), 1490 (m), 1534 (w), 1575 (w), 1595 (w), 1612 (w), 1719 (vw), 1876 (vw), 2201 (vw), 2315 (vw), 2729 (w), 2789 (w), 2822 (w), 2853 (w), 2871 (w), 2914 (m), 2945 (w), 2962 (w), 2989 (w), 2997 (w). **MS** (CI, pos., Isobutan) *m/z* (%): 330 (21) [TerNH<sub>3</sub>]<sup>+</sup>, 386 (5) [TerNH<sub>2</sub>+C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>]<sup>+</sup>, 592 (7), 716 (100) [(TerNP)<sub>2</sub>]<sup>+</sup>, 919



(43)  $[M+H]^+$ , 975 (14)  $[M+C_4H_9]^+$ . EA found (calc.): C 83.13 (83.63), H 6.73 (6.58), N 2.85 (3.05). Mp: 205 °C (dec.)

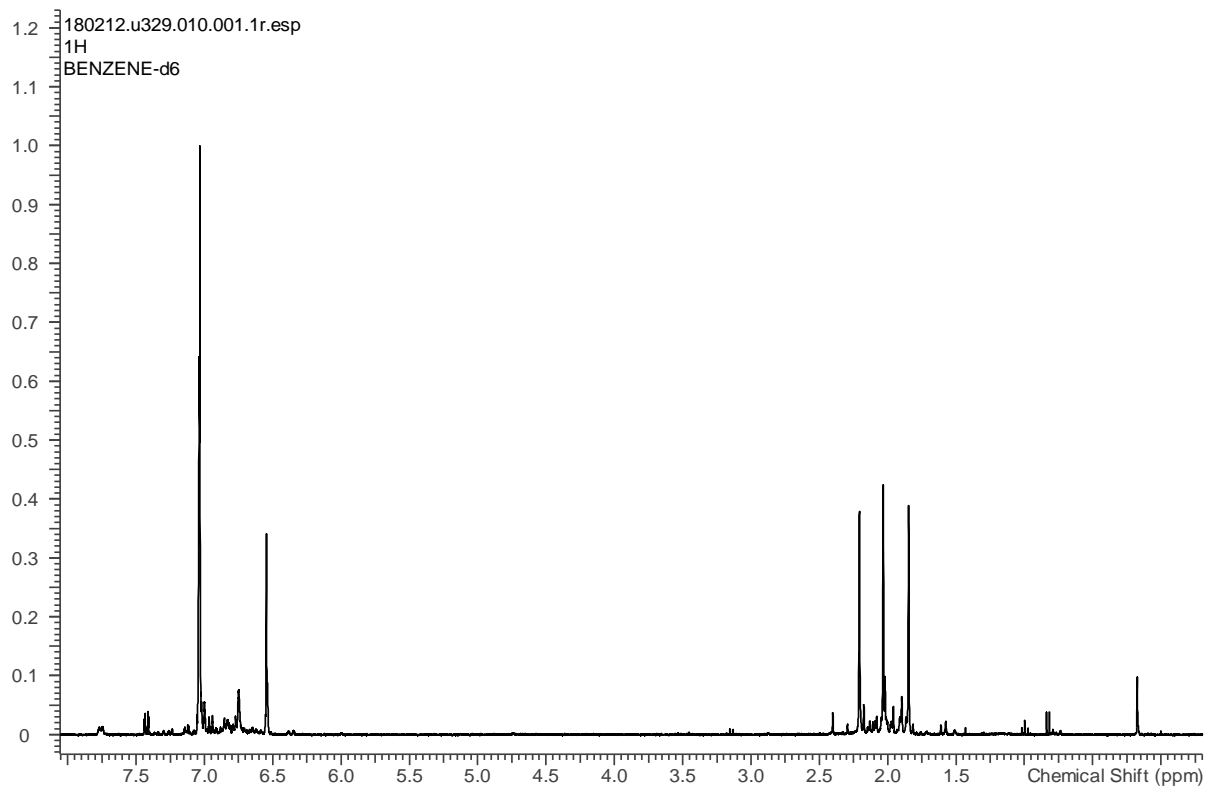


Abbildung 61  $^1\text{H-NMR}$ -Spektrum von **5** in Benzol- $d_6$ .

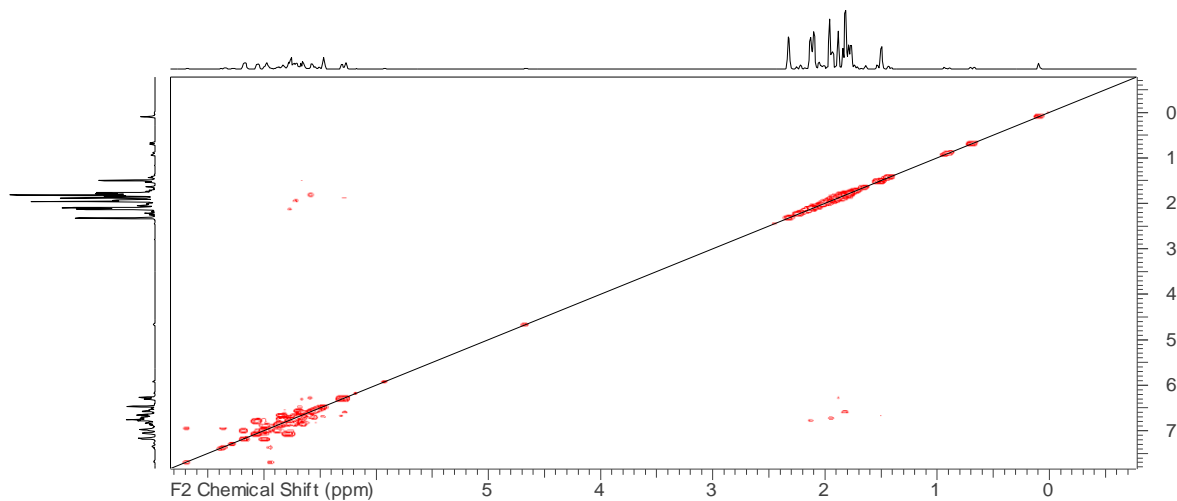
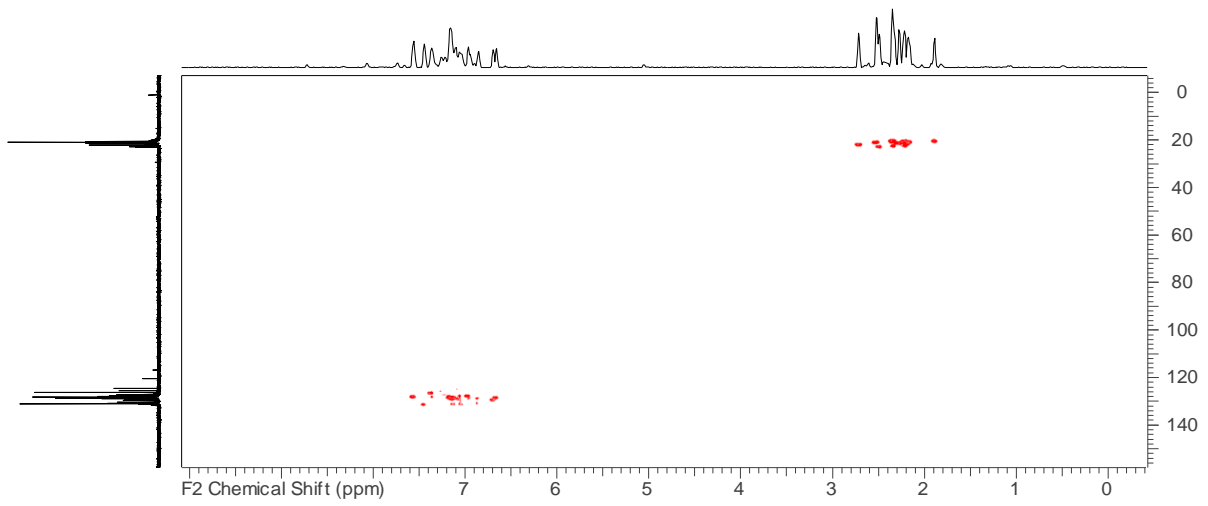
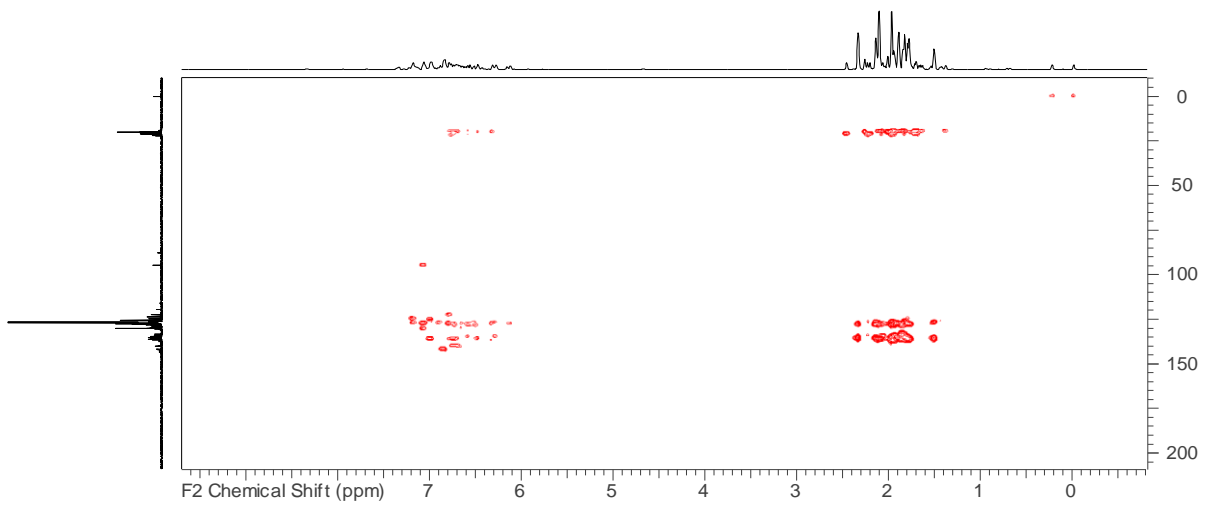


Abbildung 62 COESY-NMR-Spektrum von **5** in Benzol- $d_6$ .



**Abbildung 63** HSQC-NMR-Spektrum von **5** in Benzol-d<sub>6</sub>.



**Abbildung 64** HMBC-NMR-Spektrum von **5** in Benzol-d<sub>6</sub>.

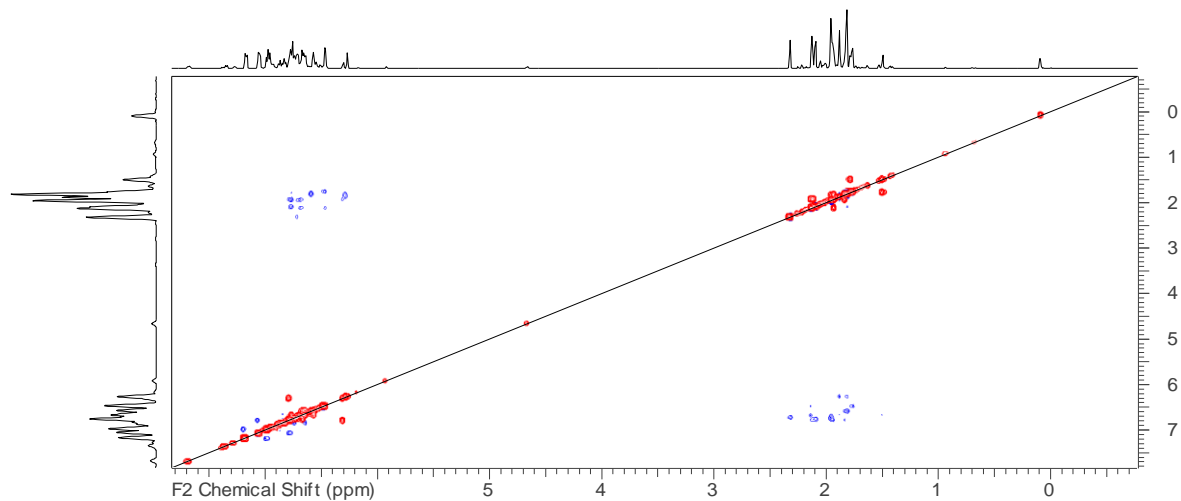


Abbildung 65 NOESY-NMR-Spektrum von **5** in Benzol-d<sub>6</sub>.

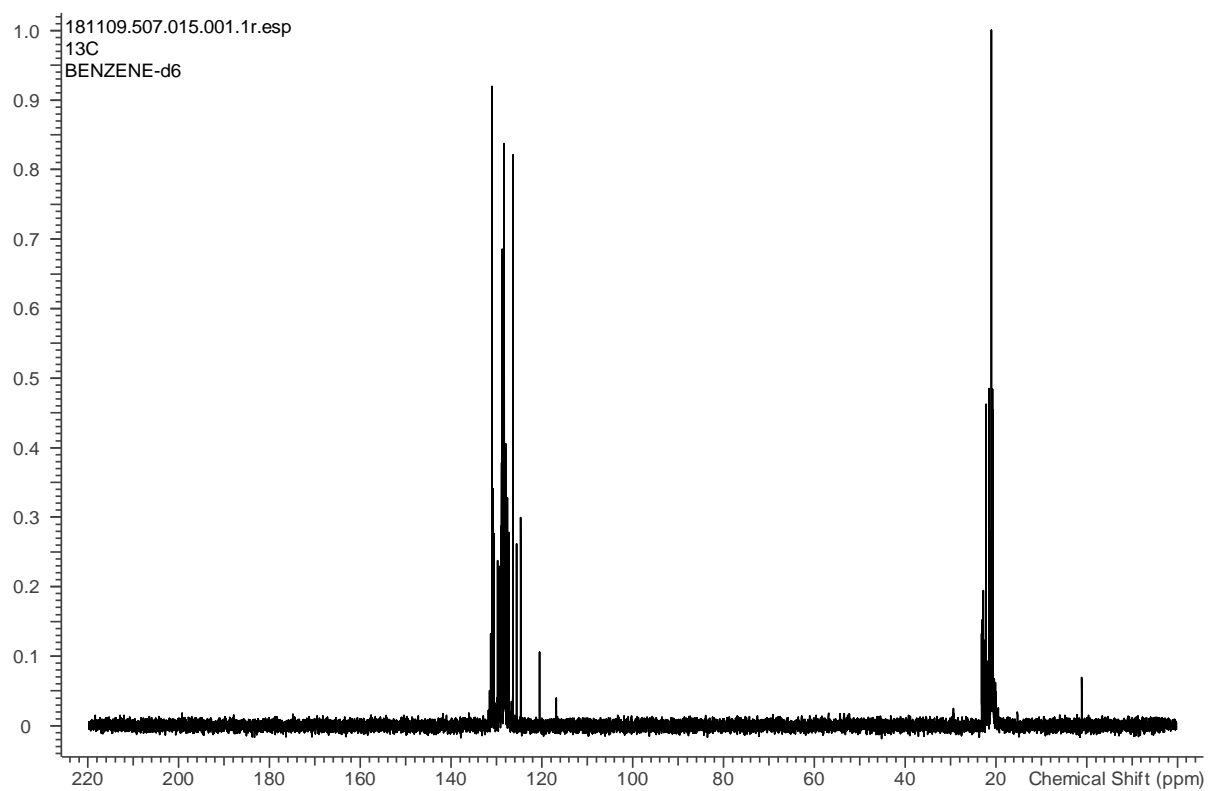


Abbildung 66 <sup>13</sup>C-DEPT-NMR-Spektrum von **5** in Benzol-d<sub>6</sub>.

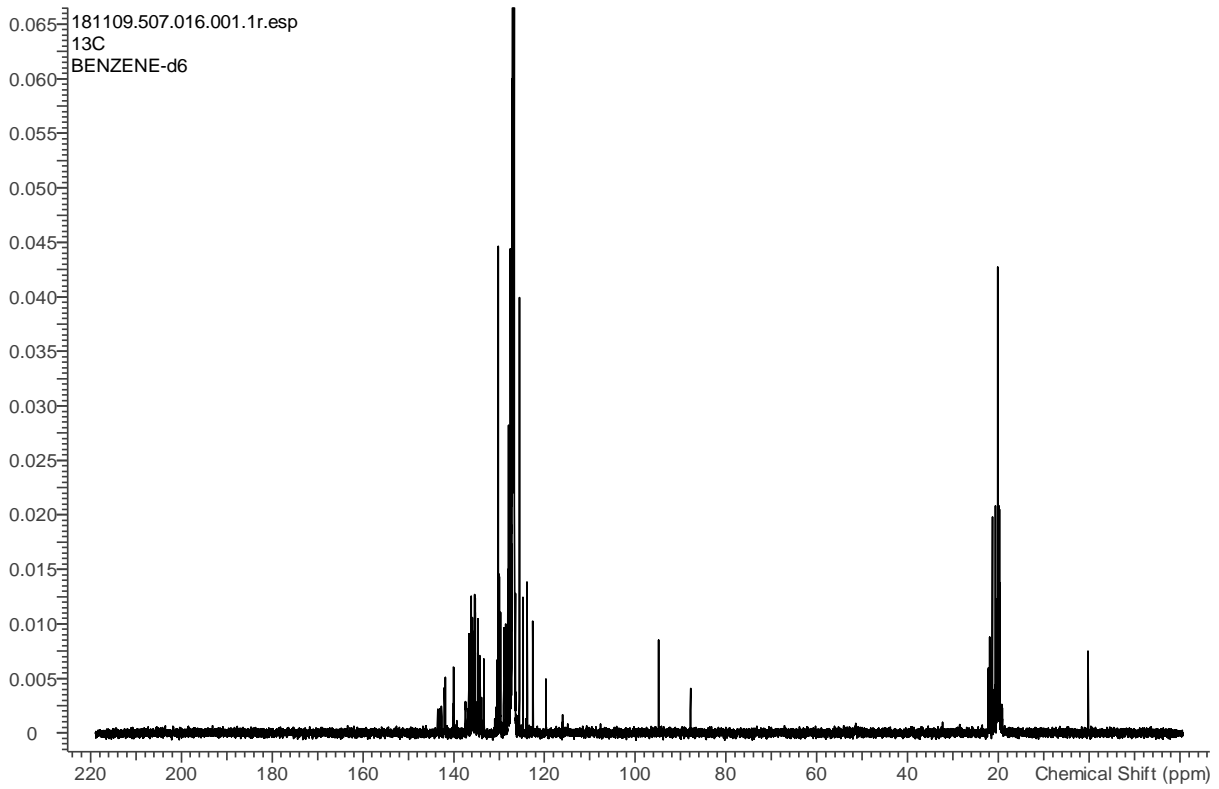


Abbildung 67 <sup>13</sup>C-NMR-Spektrum von **5** in Benzol-d<sub>6</sub>.

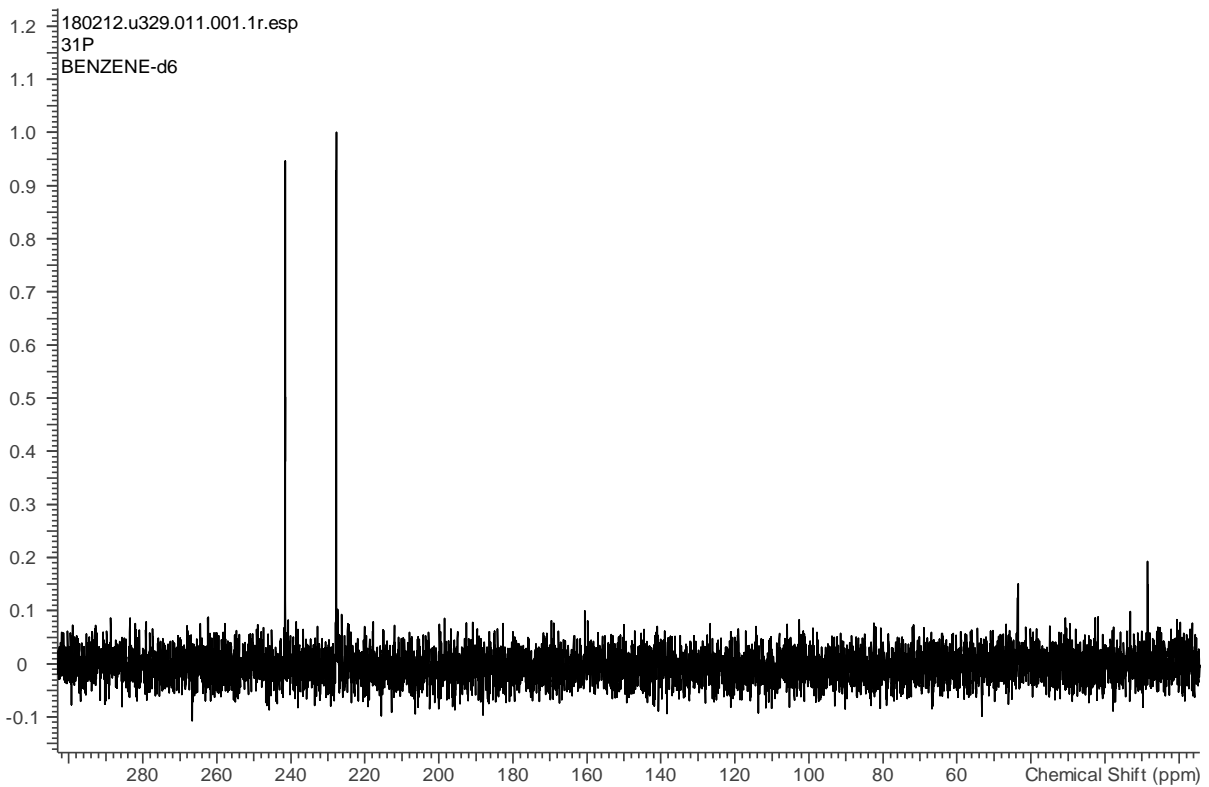
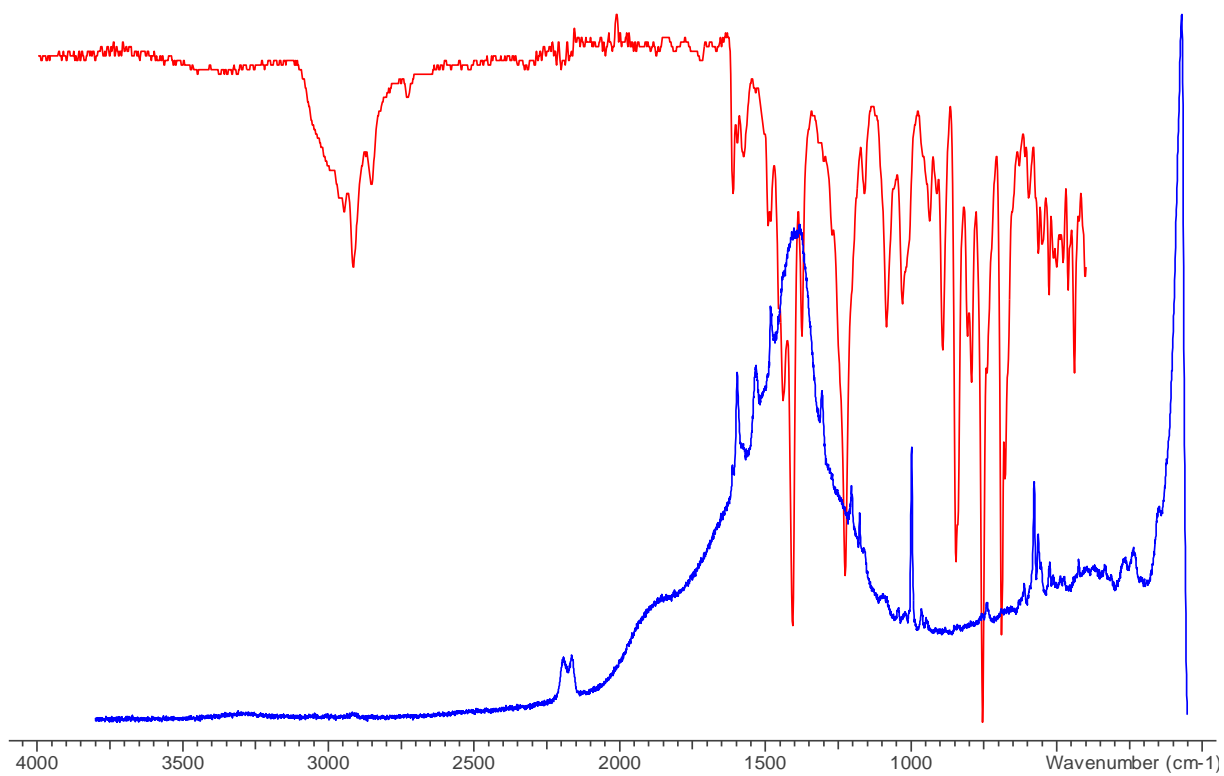
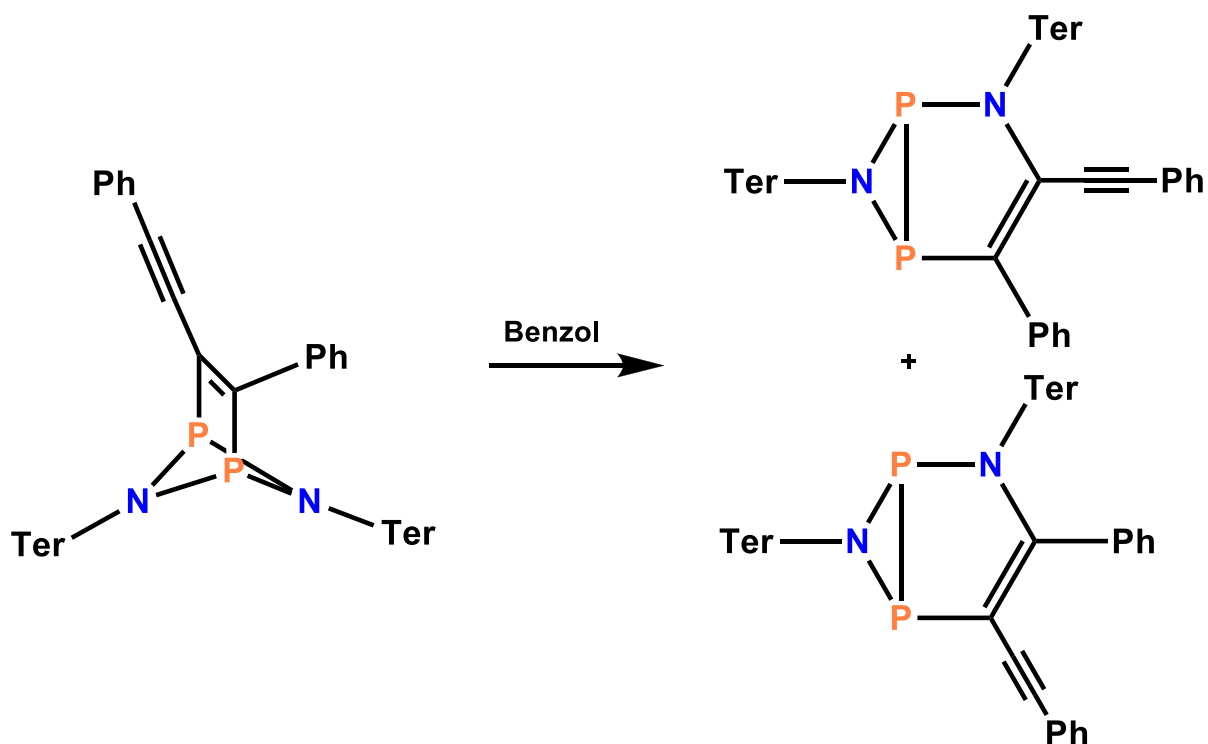


Abbildung 68 <sup>31</sup>P-NMR-Spektrum von **5** in Benzol-d<sub>6</sub>.



**Abbildung 69** Raman-Spektrum (blau) und IR-Spektrum (rot) von **5**.

### 5.5.5 [(TerNP)<sub>2</sub>(C<sub>16</sub>H<sub>10</sub>)](Insertion) (6)



Wenn **5** in benzolischer Lösung gelagert wird, findet eine Umlagerung statt. Über einen Zeitraum von drei Wochen bei Raumtemperatur wird die Bildung der beiden Isomere **6** beobachtet. Versuche die Isomere zu kristallisieren, waren trotz verschiedener Methoden und Lösemittel bisher nicht erfolgreich. Es konnte daher kein sauberes Produkt isoliert werden und nur <sup>31</sup>P-NMR-Daten liegen für das Insertionsprodukt vor.

<sup>31</sup>P{<sup>1</sup>H}-NMR (25 °C, C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>, 202.48 MHz)  $\delta = -58.6$  (d, 1 P,  $^2J(^{31}\text{P}-^{31}\text{P}) = 118.21$  Hz),  $-61.8$  (d, 1 P,  $^2J(^{31}\text{P}-^{31}\text{P}) = 109.27$  Hz),  $-84.7$  (d, 1 P,  $^2J(^{31}\text{P}-^{31}\text{P}) = 109.27$  Hz),  $-90.5$  (d, 1 P,  $^2J(^{31}\text{P}-^{31}\text{P}) = 118.21$  Hz).

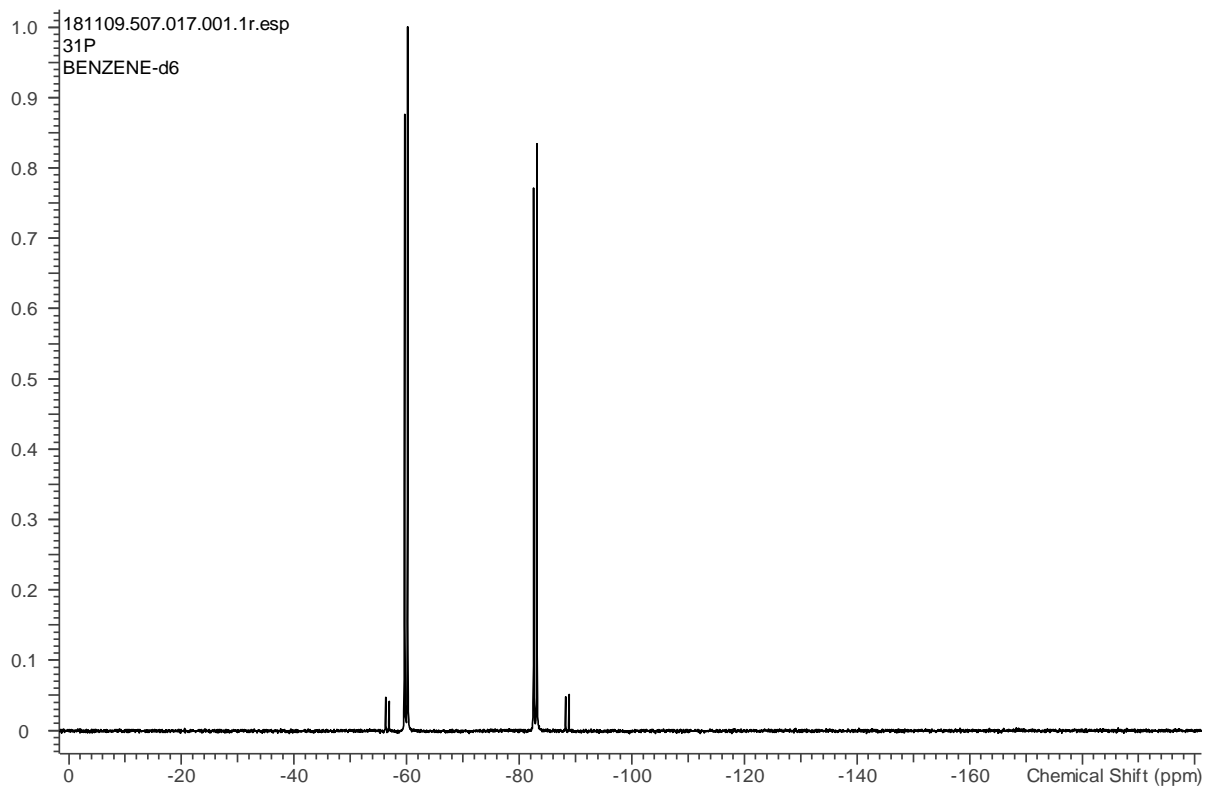
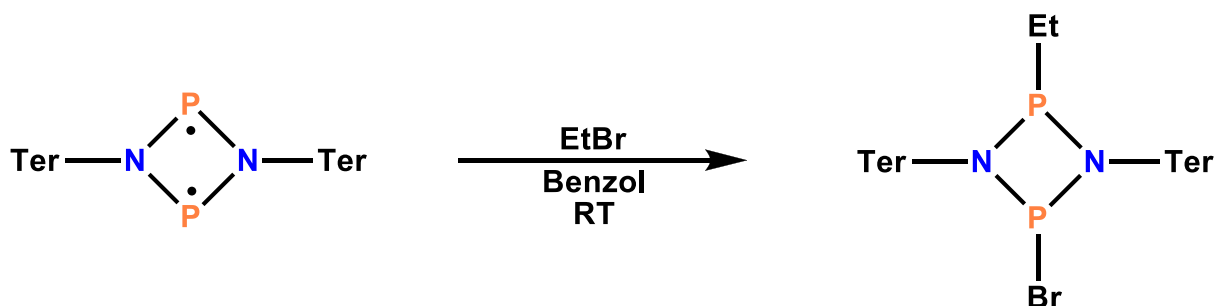


Abbildung 70  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum von **6** in Benzol- $\text{d}_6$ .

### 5.5.6 [(TerNP)<sub>2</sub>(EtBr)] (7)



488 mg [P( $\mu$ -N<sub>2</sub>Ter)]<sub>2</sub> (0,68 mmol) werden in 5 ml Benzol gelöst. Bei Raumtemperatur wird ein Überschuss an Bromethan zugegeben. Die Lösung färbt sich über mehrere Stunden von orange zu hellgelb. Das Lösemittel und überschüssiges Bromethan werden im Vakuum entfernt. Dabei bleibt **7** als gelber Feststoff bzw. als Schaum zurück. Durch mehrfache Extraktion mit 10 ml Hexan und Lagern der klaren Lösung bei 5 °C können von **7** farblose Kristalle erhalten werden.

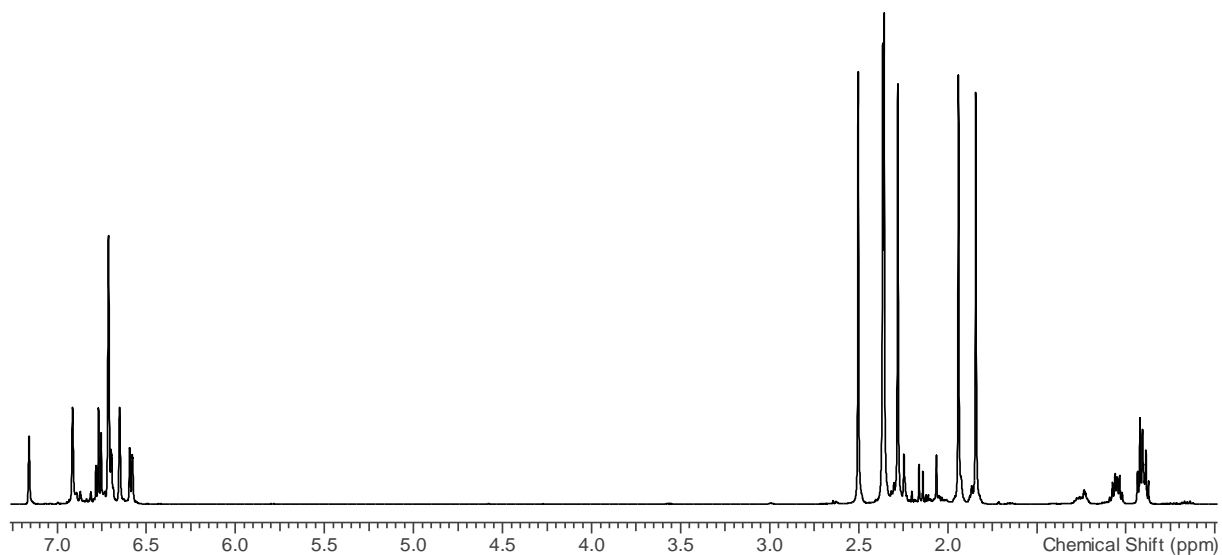
Ausbeute: 286 mg (0.35 mmol, 51 %) M(C<sub>50</sub>H<sub>55</sub>BrP<sub>2</sub>N<sub>2</sub>) = 826 g/mol

<sup>1</sup>H-NMR (25 °C, C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>, 500.13 MHz):  $\delta$  = 0.88-0.95 (m, 3 H, P-CH<sub>2</sub>-CH<sub>3</sub>), 1.01-1.10 (m, 2 H, P-CH<sub>2</sub>), 1.84 (s, 6 H, *o/p*-CH<sub>3</sub>), 1.94 (s, 6 H, *o/p*-CH<sub>3</sub>), 2.28 (s, 6 H, *o/p*-CH<sub>3</sub>), 2.36 (s, 6 H, *o/p*-CH<sub>3</sub>), 2.37 (s, 6 H, *o/p*-CH<sub>3</sub>), 2.50 (s, 6 H, *o/p*-CH<sub>3</sub>), 6.57-6.60 (m, 2 H, *m*-ArH), 6.65 (s(br), 2 H, *m*-MesH), 6.69-6.72 (m, 2 H, *m*-ArH), 6.71 (s(br), 4 H, *m*-MesH), 6.75-6.79 (m, 2 H, *p*-ArH), 6.91 (s(br), 2 H, *m*-MesH). <sup>13</sup>C-NMR (25 °C, C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>, 125.77 MHz)  $\delta$  = 6.6 (s(br), P-CH<sub>2</sub>-CH<sub>3</sub>), 20.8 (s(br), *o/p*-CH<sub>3</sub>), 21.5 (s, *o/p*-CH<sub>3</sub>), 21.6 (s, *o/p*-CH<sub>3</sub>), 21.7 (s, *o/p*-CH<sub>3</sub>), 22.7-23.0 (m, *o/p*-CH<sub>3</sub>), 28.7-29.3 (m, P-CH<sub>2</sub>), 122.9 (s, *p*-ArC), 127.9 (s, *m*-MesC), 128.4 (s, *m*-MesC), 128.6 (s, *m*-MesC), 129.8 (s, *m*-MesC), 131.7 (s, *m*-ArC), 131.8 (s, *m*-ArC). <sup>31</sup>P{<sup>1</sup>H}-NMR (25 °C, C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>, 202.48 MHz)  $\delta$  = 229.0 (s(br), 1 P, P-CH<sub>2</sub>), 255.1 (s(br), 1 P, P-Br). **Raman (632 nm)** 81 (6), 102 (10), 123 (6), 142 (6), 161 (3), 235 (4), 252 (4), 263 (2), 277 (2), 323 (2), 331 (2), 338 (2), 365 (0), 381 (1), 408 (1), 425 (1), 441 (1), 454 (4), 474 (1), 492 (1), 533 (3), 545 (3), 560 (3), 580 (7), 631 (2), 649 (1), 705 (1), 710 (0), 739 (3), 757 (1), 763 (0), 801 (0), 834 (0), 844 (0), 851 (0), 884 (2), 947 (1), 964 (1), 971 (1), 1007 (2), 1031 (1), 1097 (1), 1105 (1), 1162 (1), 1191 (1), 1236 (1), 1244 (1), 1270 (3), 1277 (3), 1285 (3), 1306 (6), 1386 (2), 1419 (3), 1483 (2), 1582 (4), 1614 (4), 2733 (2), 2741 (2), 2798 (2), 2815 (2), 2818 (2), 2823 (2), 2834 (2), 2841 (3), 2860 (3), 2874 (3), 2920 (5), 2945 (3), 2954 (3), 2962 (3), 2978 (3), 2985 (3), 2988 (3), 2992 (3), 3004 (3), 3020 (3), 3039 (3), 3051 (3), 3073



(3), 3080 (3). **IR** (ATR  $\text{cm}^{-1}$ ) 420 (w), 427 (w), 451 (m), 472 (w), 490 (w), 503 (w), 530 (m), 546 (m), 558 (w), 575 (w), 591 (w), 628 (w), 647 (w), 690 (w), 713 (m), 738 (w), 754 (s), 797 (s), 847 (s), 880 (vs), 900 (s), 946 (w), 964 (w), 983 (w), 1006 (w), 1028 (w), 1082 (m), 1162 (w), 1216 (s), 1245 (w), 1265 (w), 1374 (w), 1403 (s), 1438 (w), 1455 (w), 1482 (w), 1506 (vw), 1541 (vw), 1558 (vw), 1576 (w), 1609 (w), 2728 (vw), 2852 (w), 2870 (w), 2914 (w), 2959 (w). **MS** (CI, pos., Isobutan)  $m/z$  (%): 358 (13) [TerNP]<sup>+</sup>, 388 (31) [TerNH<sub>2</sub> + C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>]<sup>+</sup>, 716 (5) [(TerNP)<sub>2</sub>]<sup>+</sup>, 745 (100), 826 (3) [M]<sup>+</sup>. **EA** found (calc.): C 71.83 (72.72), H 6.61 (6.71), N 3.21 (3.39).

190226.511.020.001.1r.esp  
1H  
BENZENE-d6



**Abbildung 71** <sup>1</sup>H-NMR-Spektrum von **7** in Benzol-d<sub>6</sub>.

190226.511.013.001.1r.esp  
13C  
BENZENE-d6

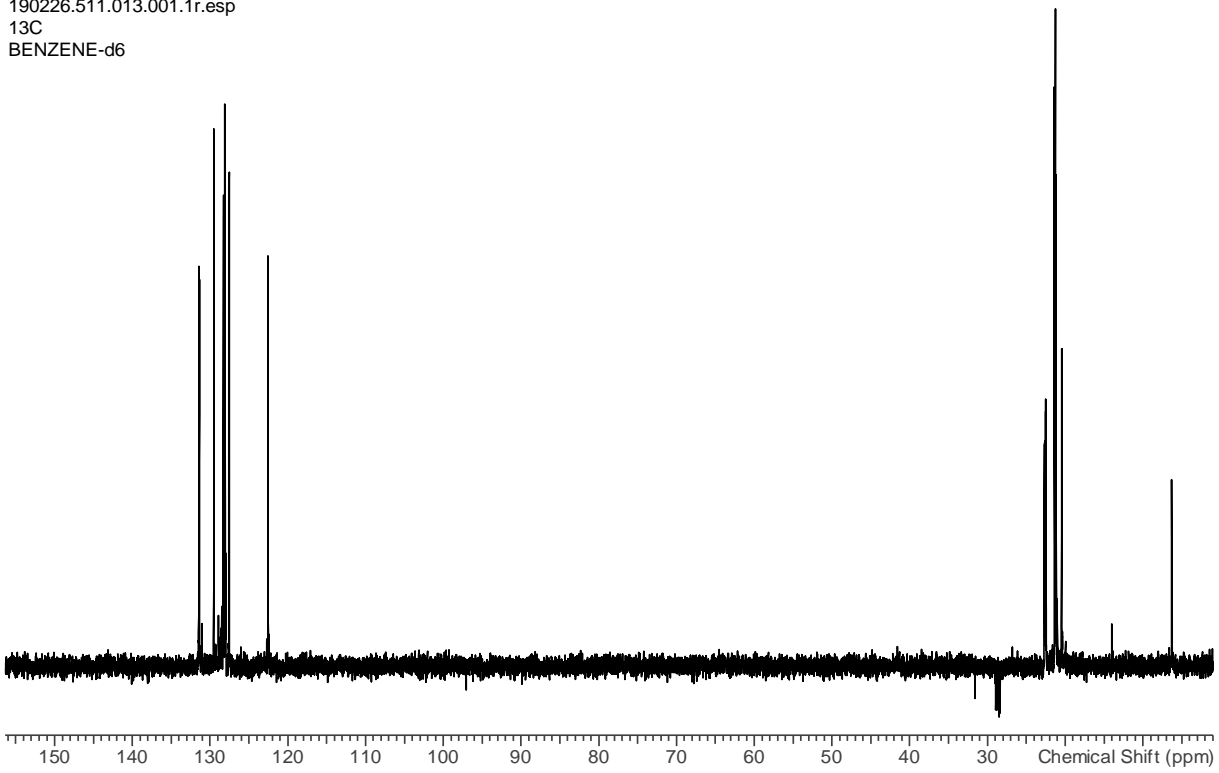


Abbildung 72 <sup>13</sup>C-NMR-Spektrum von **7** in Benzol-d<sub>6</sub>.

180604.512.010.001.1r.esp  
31P  
None

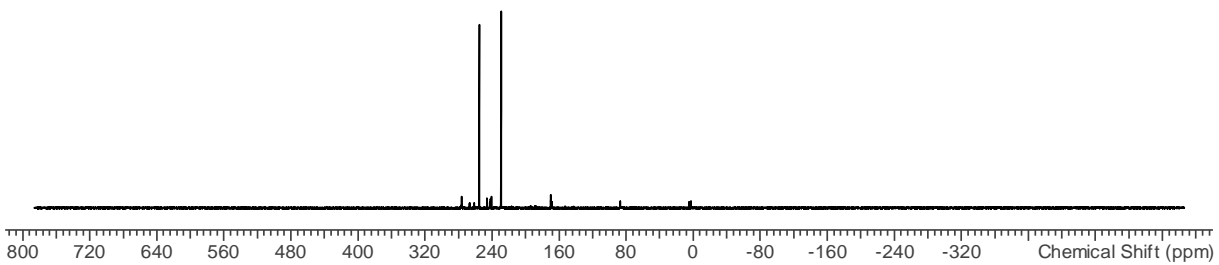
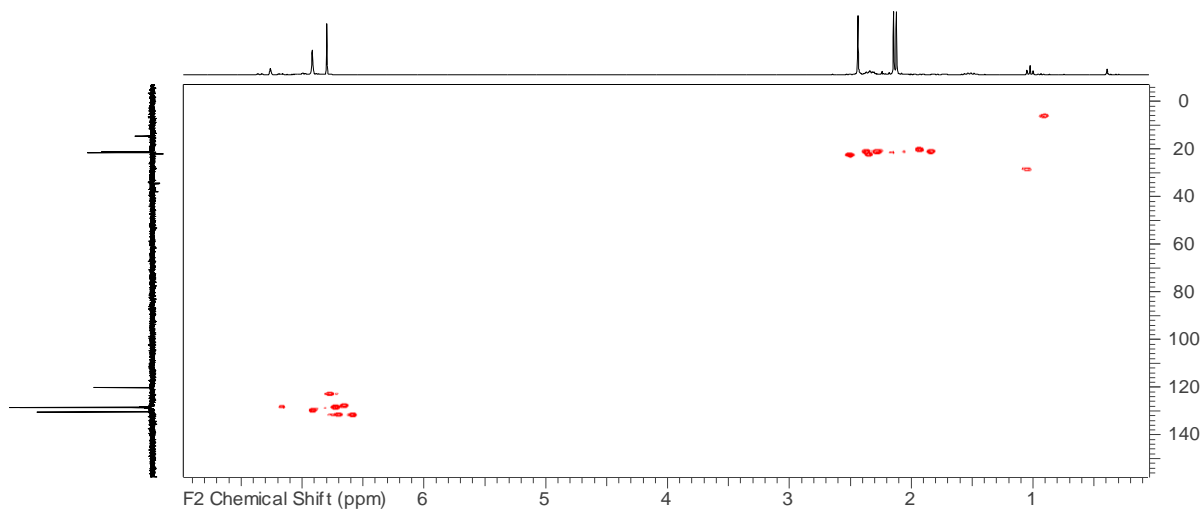
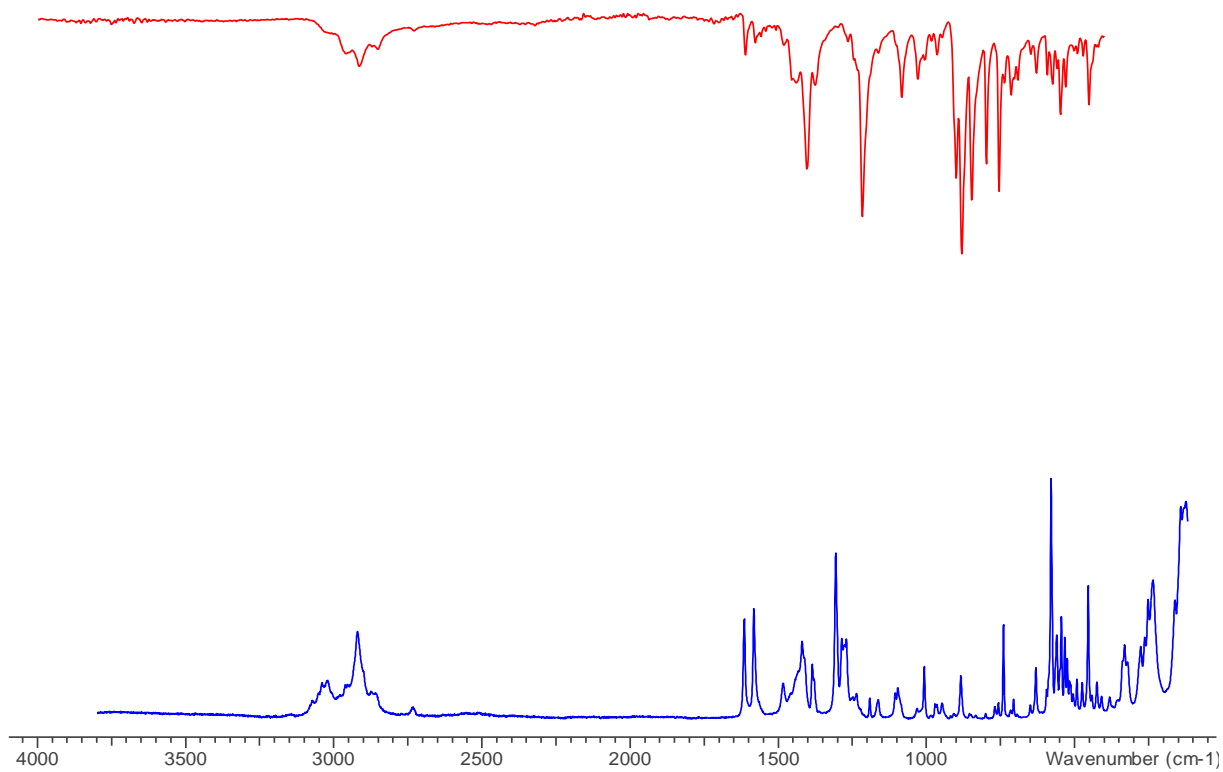


Abbildung 73 <sup>31</sup>P-NMR-Spektrum von **7** in Benzol-d<sub>6</sub>.

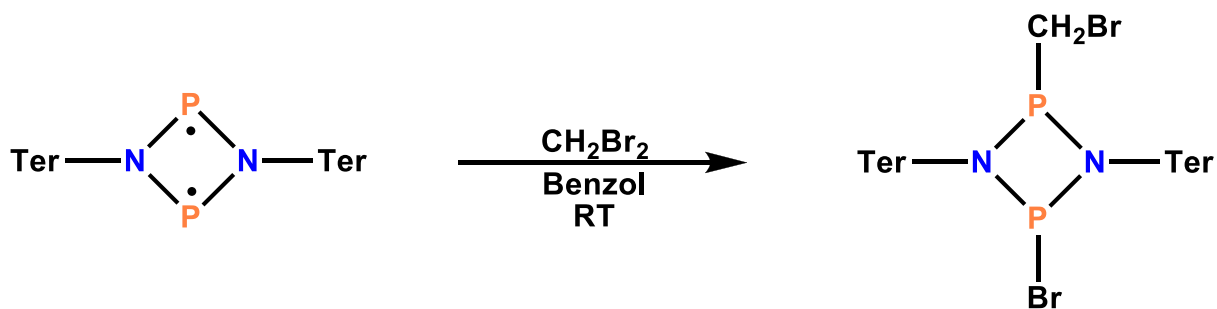


**Abbildung 74** HSQC-NMR-Spektrum von **7** in Benzol-d<sub>6</sub>.



**Abbildung 75** Raman-Spektrum (blau) und IR-Spektrum (rot) von **7**.

### 5.5.7 [(TerNP)<sub>2</sub>(CH<sub>2</sub>Br<sub>2</sub>)] (**8**)



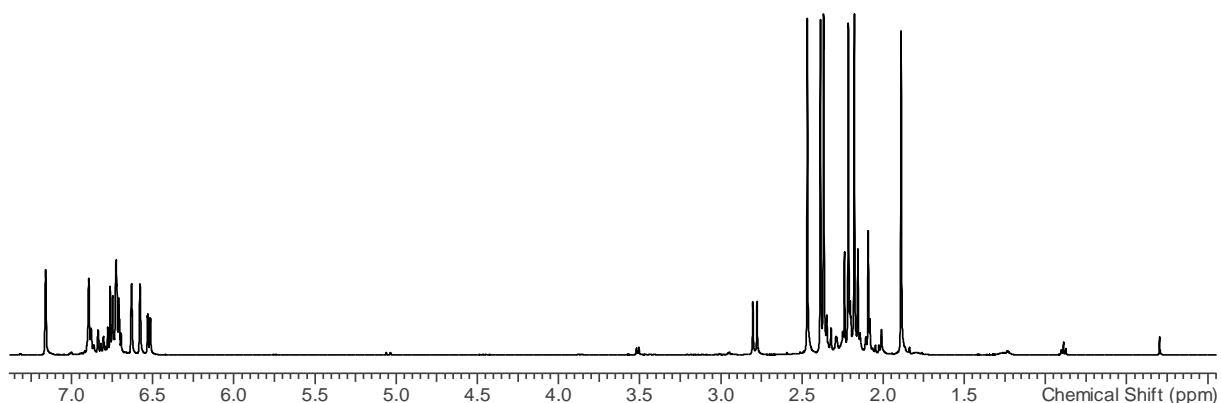
294 mg [P( $\mu$ -NTer)]<sub>2</sub> (0,41 mmol) werden in 3 ml Benzol gelöst. Bei Raumtemperatur wird ein Überschuss an Dibrommethan zugegeben. Die Lösung färbt sich über Nacht (12h) von orange zu hellgelb. Das Lösemittel und überschüssiges Dibrommethan werden im Vakuum entfernt. Dabei bleibt **8** als gelber Feststoff bzw. als Schaum zurück. Durch mehrfache Extraktion mit 10 ml Hexan und Lagern der klaren Lösung bei 5 °C können farblose Kristalle von **8** erhalten werden.

Ausbeute: 179 mg (0.2 mmol, 49 %) M(C<sub>49</sub>H<sub>52</sub>Br<sub>2</sub>P<sub>2</sub>N<sub>2</sub>) = 890 g/mol

**<sup>1</sup>H-NMR** (25 °C, C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>, 500.13 MHz):  $\delta$  = 1.89 (s, 6 H, *o*-CH<sub>3</sub>), 2.18 (s, 6 H, *o*-CH<sub>3</sub>), 2.21 (s, 6 H, *o*-CH<sub>3</sub>), 2.37 (s, 6 H, *o*-CH<sub>3</sub>), 2.39 (s, 6 H, *p*-CH<sub>3</sub>), 2.47 (s, 6 H, *p*-CH<sub>3</sub>), 2.79 (d, 2 H, CH<sub>2</sub>, <sup>2</sup>J(<sup>1</sup>H-<sup>31</sup>P) = 13 Hz), 6.50-6.54 (m, 2 H, *m*-ArH), 6.59 (s(br), 2 H, *m*-MesH), 6.63 (s(br), 2 H, *m*-MesH), 6.70-6.74 (m, 2 H, *m*-ArH), 6.73 (s(br), 2 H, *m*-MesH), 6.74-6.78 (m, 2 H, *p*-ArH), 6.89 (s(br), 2 H, *m*-MesH). **<sup>13</sup>C-NMR** (25 °C, C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>, 125.77 MHz)  $\delta$  = 21.6-21.8 (s, *p/o*-CH<sub>3</sub>), 22.6-22.9 (s, *p/o*-CH<sub>3</sub>), 34.1-34.9 (m, CH<sub>2</sub>), 123.0 (s, *p*-ArC), 128.2 (s, *m*-MesC), 128.6 (s, *m*-MesC), 128.7 (s, *m*-MesC), 129.6 (s, *m*-MesC), 131.4 (s, *m*-ArC), 132.1 (s, *m*-ArC). **<sup>31</sup>P{<sup>1</sup>H}-NMR** (25 °C, C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>, 202.48 MHz)  $\delta$  = 195 (s(br), 1 P, *P*-CH<sub>2</sub>), 250.9 (s(br), 1 P, *P*-Br). **Raman (632 nm)** 216 (6), 233 (5), 246 (3), 260 (6), 272 (3), 291 (9), 318 (2), 355 (0), 368 (1), 376 (1), 401 (1), 429 (1), 442 (2), 470 (2), 488 (2), 499 (1), 514 (9), 542 (2), 557 (4), 572 (5), 580 (3), 601 (5), 645 (1), 685 (2), 706 (1), 721 (1), 736 (3), 753 (1), 765 (1), 798 (0), 831 (0), 853 (0), 882 (1), 900 (0), 907 (0), 944 (1), 962 (0), 969 (1), 1004 (1), 1063 (0), 1090 (3), 1101 (2), 1159 (1), 1188 (1), 1217 (0), 1233 (1), 1251 (2), 1265 (9), 1281 (7), 1302 (7), 1336 (1), 1361 (1), 1383 (2), 1417 (7), 1480 (2), 1507 (0), 1515 (0), 1561 (1), 1580 (10), 1612 (2), 2509 (0), 2543 (0), 2729 (0), 2856 (1), 2918 (4), 2945 (2), 3019 (1), 3040 (2), 3052 (1), 3071 (2), 3081 (1), 3149 (0), 3220 (0). **IR (ATR cm<sup>-1</sup>)** 416 (w), 429 (m), 443 (m), 457 (w), 472 (w), 490 (w), 515 (m), 548 (m), 558 (w), 573 (m), 591 (w), 612 (w), 647 (w), 674 (w),

694 (w), 721 (m), 738 (m), 754 (s), 797 (s), 845 (s), 882 (vs), 900 (s), 946 (vw), 962 (w), 1006 (w), 1016 (w), 1030 (w), 1082 (m), 1100 (w), 1162 (w), 1216 (s), 1245 (w), 1267 (w), 1294 (vw), 1339 (w), 1374 (m), 1403 (s), 1438 (m), 1455 (m), 1482 (w), 1506 (vw), 1521 (vw), 1541 (vw), 1558 (w), 1576 (w), 1609 (w), 2728 (vw), 2852 (w), 2914 (w), 2945 (w), 2971 (w), 3000 (w), 3029 (vw). **MS** (CI, pos., Isobutan) *m/z* (%): 330 (46) [TerNH<sub>3</sub>]<sup>+</sup>, 358 (26) [TerNP]<sup>+</sup>, 438 (97), 440 (100), 451 (55), 452 (93), 453 (80), 454 (93), 729 (94), 811 (18), 891 (49) [M]<sup>+</sup>. **EA** found (calc.): C 66.66 (66.07), H 5.99 (5.88), N 3.16 (3.15).

190226.510.020.001.1r.esp  
1H  
BENZENE-d6



**Abbildung 76** <sup>1</sup>H-NMR-Spektrum von **8** in Benzol-d<sub>6</sub>.

190226.510.013.001.1r.esp  
13C  
BENZENE-d6

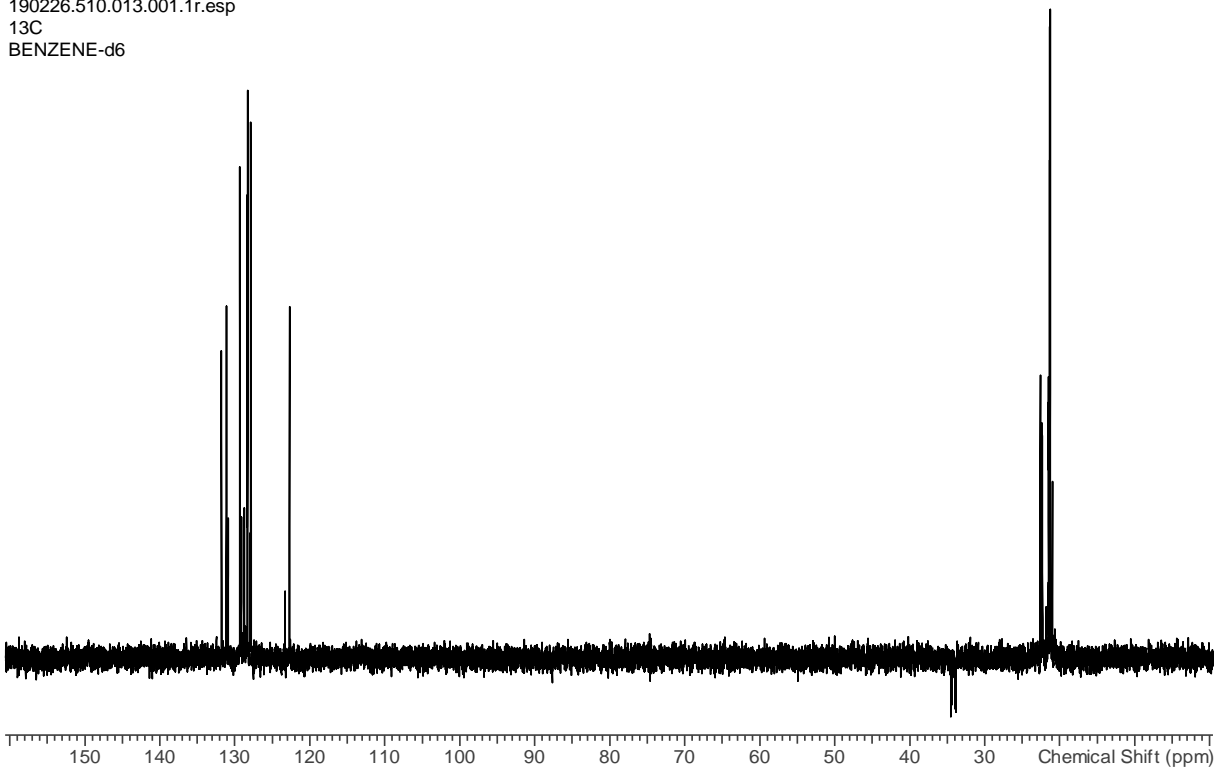


Abbildung 77  $^{13}\text{C}$ -NMR-Spektrum von **8** in Benzol- $\text{d}_6$ .

190226.510.014.001.1r.esp  
31P  
BENZENE-d6

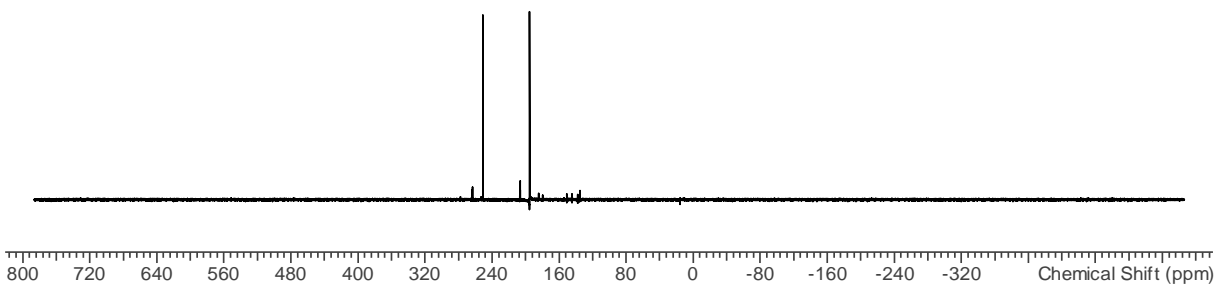
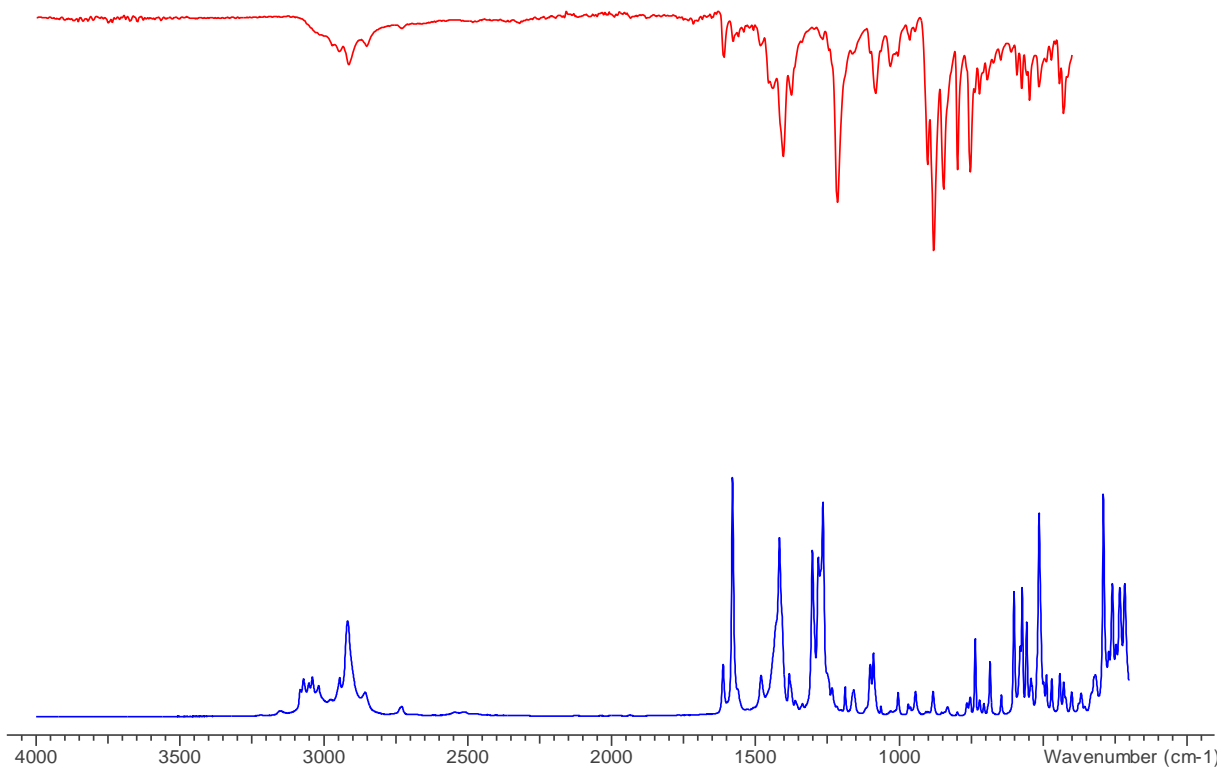
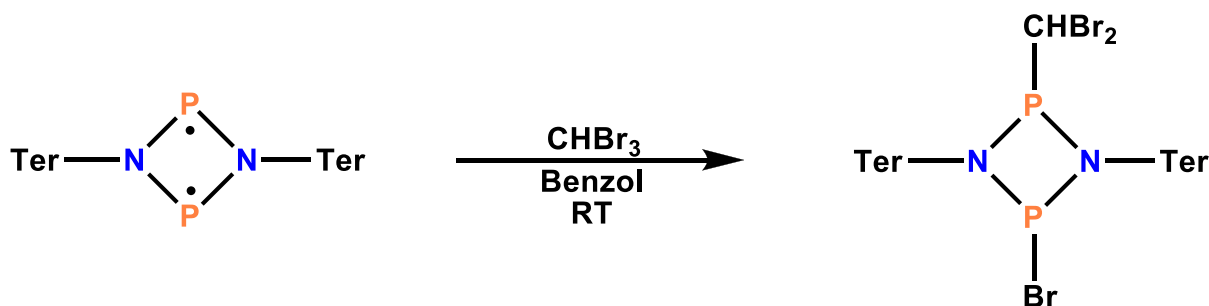


Abbildung 78  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum von **8** in Benzol- $\text{d}_6$ .



**Abbildung 79** Raman-Spektrum (blau) und IR-Spektrum (rot) von **8**.

### 5.5.8 [(TerNP)<sub>2</sub>(CHBr<sub>3</sub>)] (9)



421 mg [P( $\mu$ -NTer)]<sub>2</sub> (0.59 mmol) werden in 5 ml Benzol gelöst. Bei Raumtemperatur werden 0.1 ml, 0.29 g Tribrommethan (1.14 mmol) zugegeben. Die Lösung färbt sich leicht braun-orange. Das Lösemittel und überschüssiges Bromoform werden im Vakuum entfernt. Dabei bildet sich ein braun-oranger Feststoff. Durch Extraktion mit 20 ml Hexan und Lagern der klaren Lösung bei Raumtemperatur können farblose Kristalle von **9** erhalten werden (200 mg). In einer 2. Fraktion können aus der Mutterlauge weitere 104 mg (nicht ganz farblos) gewonnen werden.

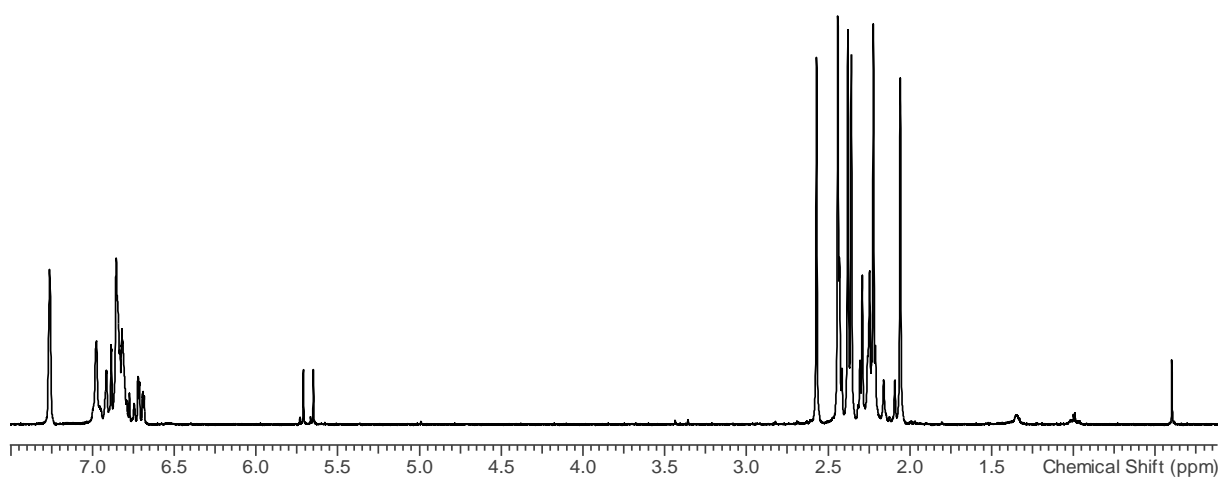
Ausbeute: 304 mg (0.314 mmol, 53 %) M(C<sub>72</sub>H<sub>51</sub>BF<sub>20</sub>P<sub>2</sub>N<sub>2</sub>) = 969.6 g/mol

**<sup>1</sup>H-NMR** (298 K, C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>, 250.13 MHz): 1.96 (s, 6 H, *o*-CH<sub>3</sub>), 2.12 (s, 6 H, *o*-CH<sub>3</sub>), 2.26 (s, 6 H, *o*-CH<sub>3</sub>), 2.28 (s, 6 H, *o*-CH<sub>3</sub>), 2.34 (s, 6 H, *p*-CH<sub>3</sub>), 2.47 (s, 6 H, *p*-CH<sub>3</sub>), 5.58 (d, 1H, CH-Br<sub>2</sub>, <sup>2</sup>J(<sup>1</sup>H-<sup>31</sup>P) = 15.3 Hz), 6.57-6.63 (m, 2 H, *m*-ArH), 6.71-6.74 (m, 4 H, *m*-MesH/*m*-ArH), 6.75 (s(br), 2 H, *m*-MesH), 6.77-6.80 (m, 2 H, *p*-ArH), 6.80-6.83 (m, 2 H, *m*-MesH), 6.87-6.88 (m, 2 H, *m*-MesH). **<sup>13</sup>C-NMR** (298 K, C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>, 62.9 MHz): 21.5 (s, *p*-CH<sub>3</sub>), 21.6 (s, *o*-CH<sub>3</sub>), 22.4 (s, *o*-CH<sub>3</sub>), 22.6 (s, *o*-CH<sub>3</sub>), 22.8 (s, *o*-CH<sub>3</sub>), 22.9 (s, *p*-CH<sub>3</sub>), 49.5-51.5 (m, CHBr<sub>2</sub>), 123.5 (s, *p*-ArC), 128.7 (s, *m*-MesC), 129.0 (s, *m*-MesC), 129.2 (s, *m*-MesC), 129.4 (s, *m*-MesC), 132.0 (s, *m*-ArC), 132.2 (s, *m*-ArC). **<sup>31</sup>P-NMR** (298 K, C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>, 101.27 MHz): 210.7 (dd, 1P, *P*-CHBr<sub>2</sub>, <sup>2</sup>J(<sup>31</sup>P-<sup>31</sup>P) = 7.26 Hz, <sup>2</sup>J(<sup>1</sup>H-<sup>31</sup>P) = 15.3 Hz), 278.0 (d, 1P, *P*-Br, <sup>2</sup>J(<sup>31</sup>P-<sup>31</sup>P) = 7.26 Hz). **Raman (632 nm)**: 158 (3), 175 (2), 178 (2), 204 (1), 232 (5), 268 (2), 306 (1), 319 (2), 337 (2), 359 (1), 376 (1), 399 (1), 423 (3), 436 (1), 478 (1), 488 (2), 511 (3), 526 (1), 541 (1), 552 (1), 566 (2), 582 (8), 593 (2), 652 (0), 660 (0), 698 (0), 710 (1), 741 (2), 800 (0), 852 (0), 882 (0), 889 (0), 947 (1), 1007 (1), 1102 (1), 1159 (1), 1189 (1), 1193 (1), 1234 (1), 1272 (1), 1284 (2), 1306 (6), 1376 (2), 1412 (1), 1483 (1), 1582 (2), 1614 (4), 2731 (0), 2859 (1), 2872 (1), 2917 (2), 2972 (1), 2985 (1), 3006 (1), 3014 (1), 3018 (1), 3046 (1), 3072 (0), 3075 (0). **IR (ATR cm<sup>-1</sup>)** 427 (s), 441 (m), 447 (m), 482 (w), 495 (m), 509 (w), 540



(w), 550 (m), 558 (m), 575 (m), 596 (m), 645 (m), 694 (m), 740 (m), 750 (s), 767 (m), 795 (s), 845 (vs), 878 (vs), 900 (s), 946 (w), 1006 (w), 1030 (m), 1086 (m), 1125 (w), 1160 (w), 1205 (s), 1374 (m), 1401 (s), 1438 (m), 1453 (m), 1480 (w), 1591 (vw), 1609 (w), 1626 (vw), 1717 (vw), 1725 (vw), 2324 (vw), 2726 (w), 2852 (w), 2912 (w), 2947 (w), 2992 (w). **EA** found (calc.): C 61.38 (60.70), H 5.48 (5.30), N 2.94 (2.89).

190701.203.010.001.1r.esp  
1H  
BENZENE-d6



**Abbildung 80**  $^1\text{H}$ -NMR-Spektrum von **9** in Benzol- $\text{d}_6$ .

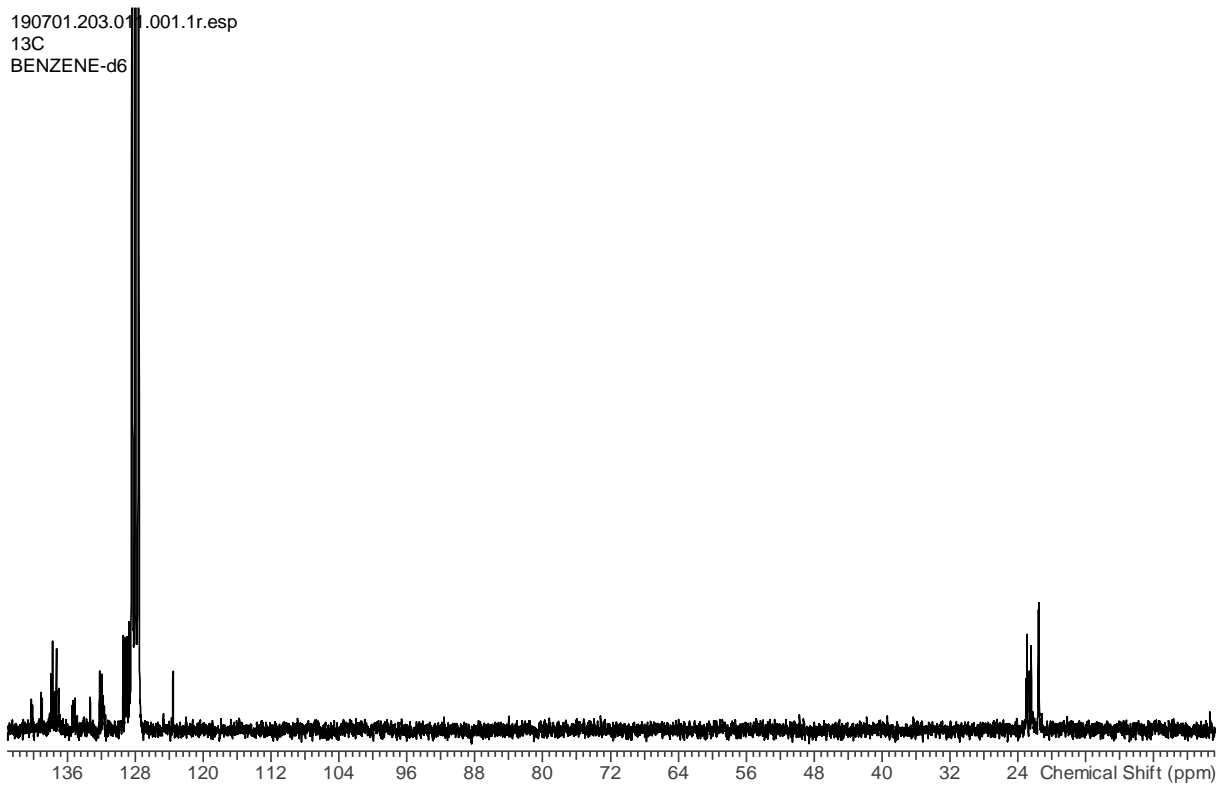


Abbildung 81  $^{13}\text{C}$ -NMR-Spektrum von **9** in Benzol- $\text{d}_6$ .

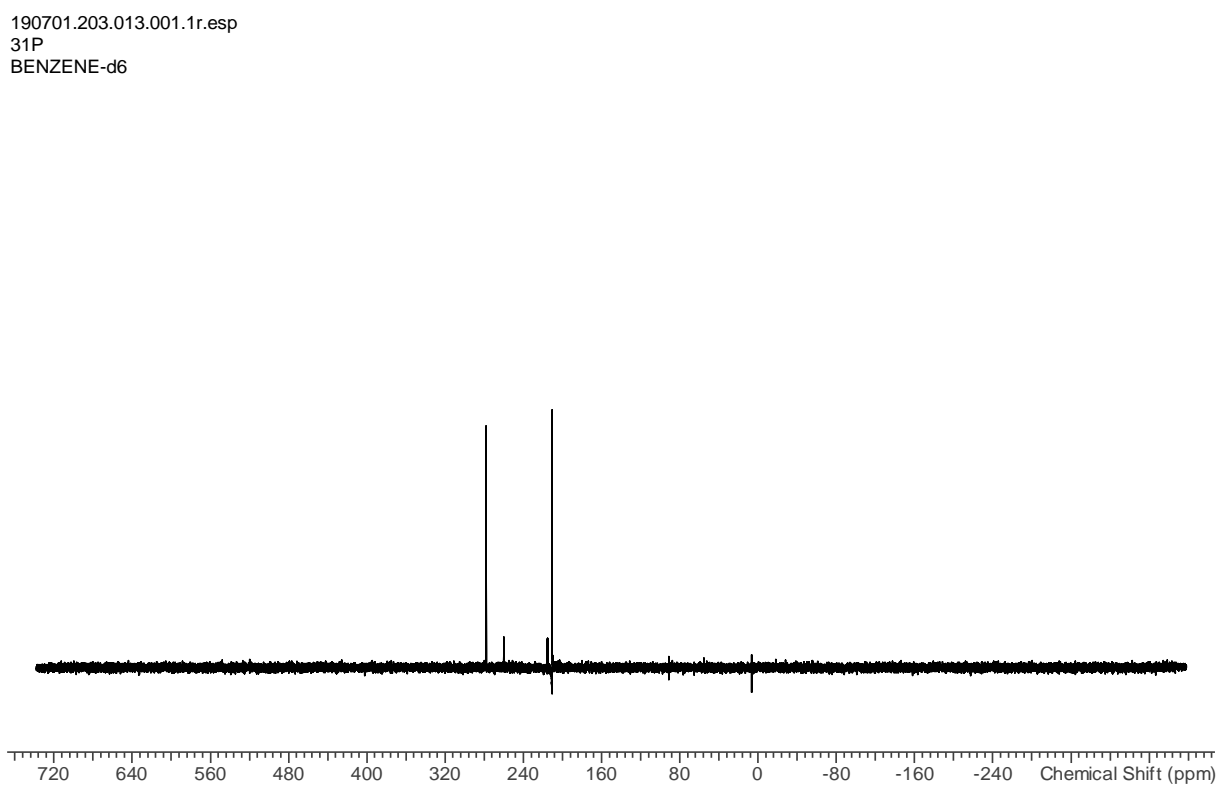
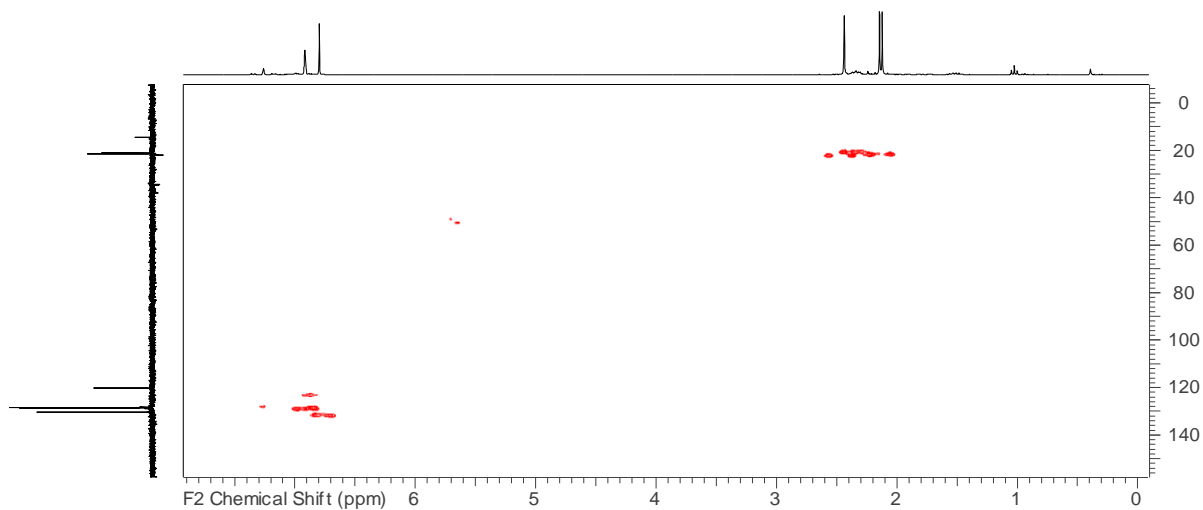
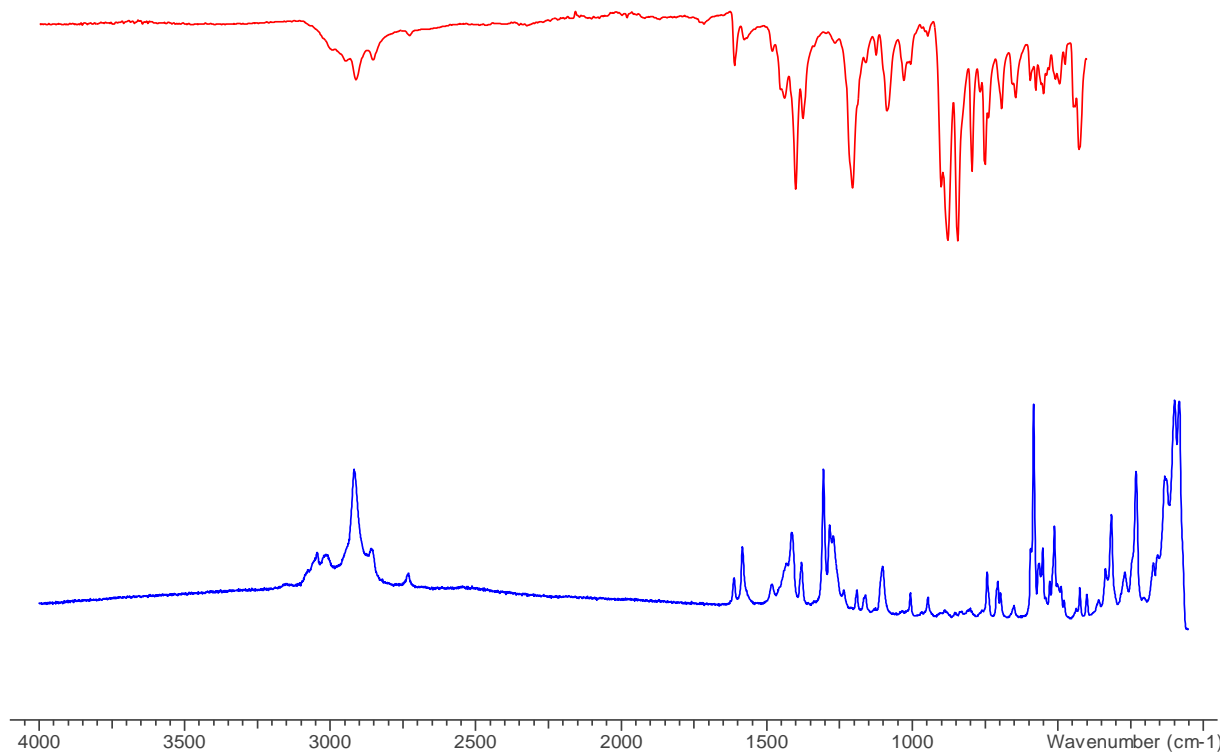


Abbildung 82  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum von **9** in Benzol- $\text{d}_6$ .

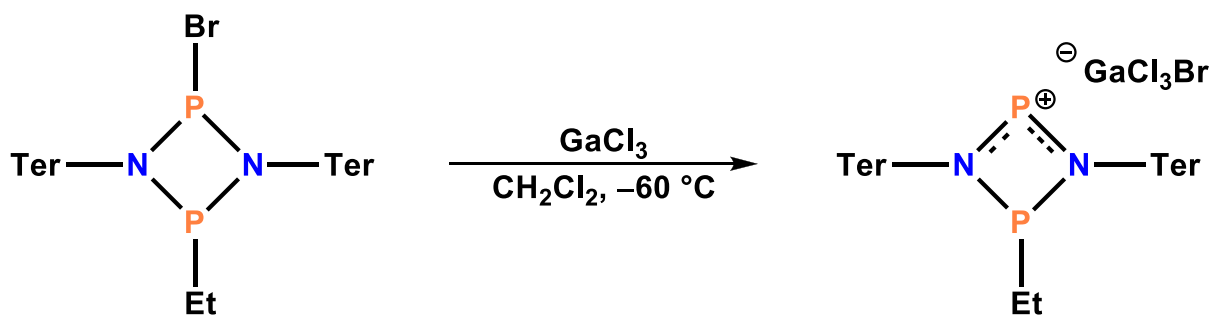


**Abbildung 83** HSQC-NMR-Spektrum von **9** in Benzol-d<sub>6</sub>.



**Abbildung 84** Raman-Spektrum (blau) und IR-Spektrum (rot) von **9**.

### 5.5.9 [(TerNP)<sub>2</sub>(Et)][GaCl<sub>3</sub>Br] (**10**)



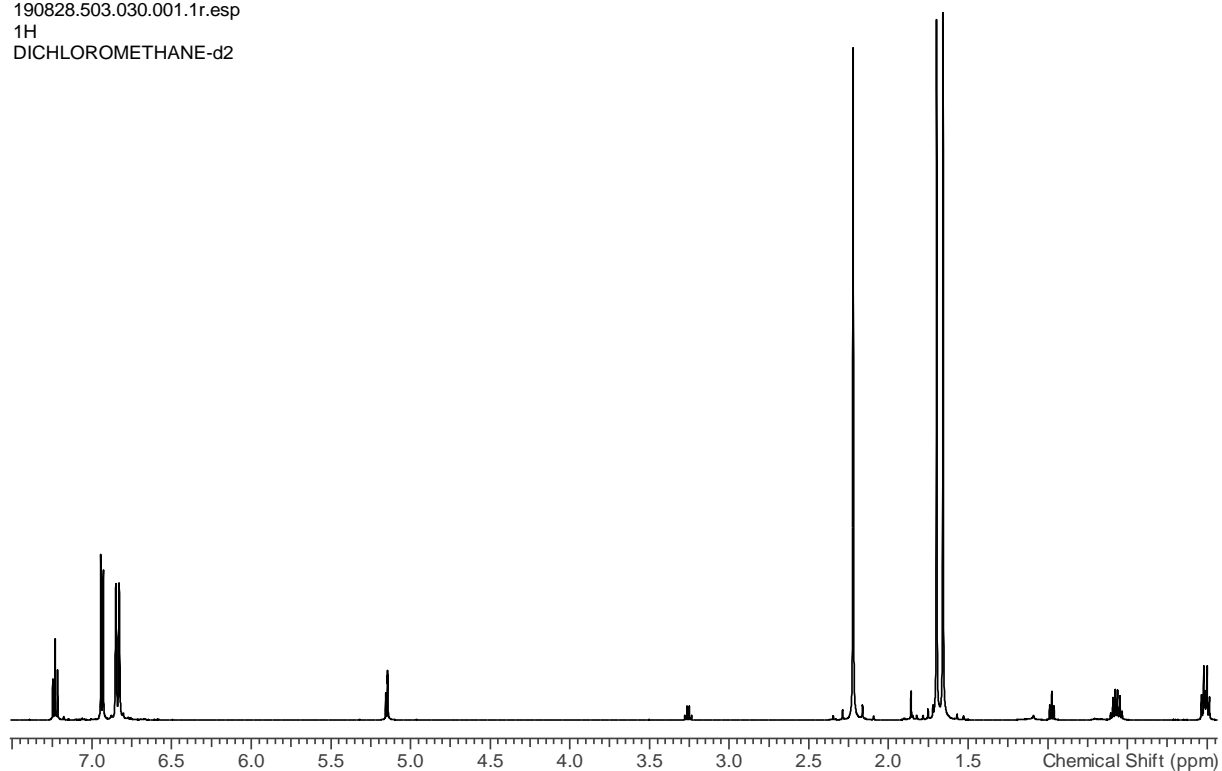
198 mg Bromethanaddukt (0.24 mmol) **7** und 42.2 mg GaCl<sub>3</sub> (0.24 mmol) werden in einem Schlenkkolben vermischt. 1.5 ml CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> werden bei –60 °C zugegeben. Es ist eine Rotfärbung der Lösung zu beobachten. Einengen der Lösung bis zur einsetzenden Kristallisation und Lagern der Lösung bei –30 °C führt zur Bildung von großen roten Kristallen, welche für die Einkristall-Röntgenstrukturanalytik genutzt werden können.

Ausbeute: 44 mg (0.044 mmol, 18.3 %) M(C<sub>72</sub>H<sub>51</sub>BF<sub>20</sub>P<sub>2</sub>N<sub>2</sub>) = 1001.9 g/mol

<sup>1</sup>H-NMR (25 °C, CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 500.13 MHz): δ = 0.15-0.23 (m, 3 H, P-CH<sub>2</sub>-CH<sub>3</sub>), 0.69-0.80 (m, 2 H, P-CH<sub>2</sub>), 1.83 (s, 6 H, *o*-CH<sub>3</sub>), 1.87 (s, 6 H, *o*-CH<sub>3</sub>), 2.40 (s, 6 H, *p*-CH<sub>3</sub>), 6.98-7.04 (m, 8 H, *m*-MesH), 7.09-7.13 (m, 4 H, *m*-ArH), 7.38-7.43 (m, 2 H, *p*-ArH). <sup>13</sup>C-NMR (25 °C, CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 125.77 MHz) δ = 4.3 (s(br), P-CH<sub>2</sub>-CH<sub>3</sub>), 21.0 (s, *o*-CH<sub>3</sub>), 21.05 (s, *o*-CH<sub>3</sub>), 21.5 (s, *p*-CH<sub>3</sub>), 26.3-26.9 (m, P-CH<sub>2</sub>), 128.9 (s, *p*-ArC), 130.7 (m, *m*-MesC), 131.5 (s, *m*-ArC). <sup>31</sup>P{<sup>1</sup>H}-NMR (25 °C, CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 202.48 MHz) δ = 220.4 (d, 1 P, P-CH<sub>2</sub>, <sup>2</sup>J(<sup>31</sup>P-<sup>31</sup>P) = 59.4 Hz, <sup>2</sup>J(<sup>1</sup>H-<sup>31</sup>P) = 16.9 Hz), 334.1 (d, 1 P, P-Br, <sup>2</sup>J(<sup>31</sup>P-<sup>31</sup>P) = 59.4 Hz). **Raman (632 nm):** 78 (2), 104 (2), 147 (1), 225 (1), 241 (1), 287 (1), 313 (0), 334 (1), 342 (1), 352 (1), 375 (1), 404 (1), 424 (1), 436 (1), 454 (3), 473 (1), 491 (1), 499 (1), 513 (1), 525 (3), 537 (1), 545 (1), 555 (1), 562 (3), 577 (2), 587 (1), 595 (1), 623 (1), 652 (1), 699 (1), 706 (0), 732 (1), 758 (1), 775 (1), 779 (1), 805 (1), 826 (0), 863 (4), 951 (1), 994 (1), 1007 (2), 1089 (2), 1106 (1), 1161 (1), 1187 (1), 1268 (7), 1275 (10), 1304 (3), 1329 (1), 1342 (1), 1363 (1), 1382 (1), 1412 (7), 1478 (1), 1566 (1), 1578 (3), 1607 (1), 1688 (0), 1930 (0), 2277 (0), 2362 (0), 2429 (1), 2539 (1), 2622 (1), 2685 (1), 2737 (1), 2859 (1), 2921 (1), 2976 (1), 3046 (1), 3157 (0). **IR (ATR cm<sup>-1</sup>)** 447 (m), 476 (w), 497 (m), 505 (w), 532 (w), 548 (m), 575 (m), 591 (m), 600 (m), 645 (m), 686 (w), 701 (m), 738 (m), 748 (s), 781 (m), 797 (s), 859 (vs), 886 (w), 900 (w), 911 (w), 938 (s), 950 (m), 989 (m), 1010 (w), 1030 (m), 1041 (m), 1080 (m), 1107 (w), 1162 (w), 1201 (s), 1241 (w), 1249 (w), 1269 (w), 1379 (m), 1407 (m), 1436 (m), 1455 (m), 1484 (w), 1506 (w),

1558 (w), 1566 (w), 1607 (m), 1714 (vw), 1721 (vw), 1743 (vw), 1877 (vw), 2324 (vw), 2353 (vw), 2737 (w), 2850 (w), 2908 (w), 2936 (w), 2965 (w), 2982 (w). EA found (calc.): C 59.29 (59.94), H 5.39 (5.53), N 2.64 (2.80).

190828.503.030.001.1r.esp  
1H  
DICHLOROMETHANE-d2



**Abbildung 85**  $^1\text{H}$ -NMR-Spektrum von **10** in  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ .

190828.503.017.001.1r.esp  
13C  
DICHLOROMETHANE-d2

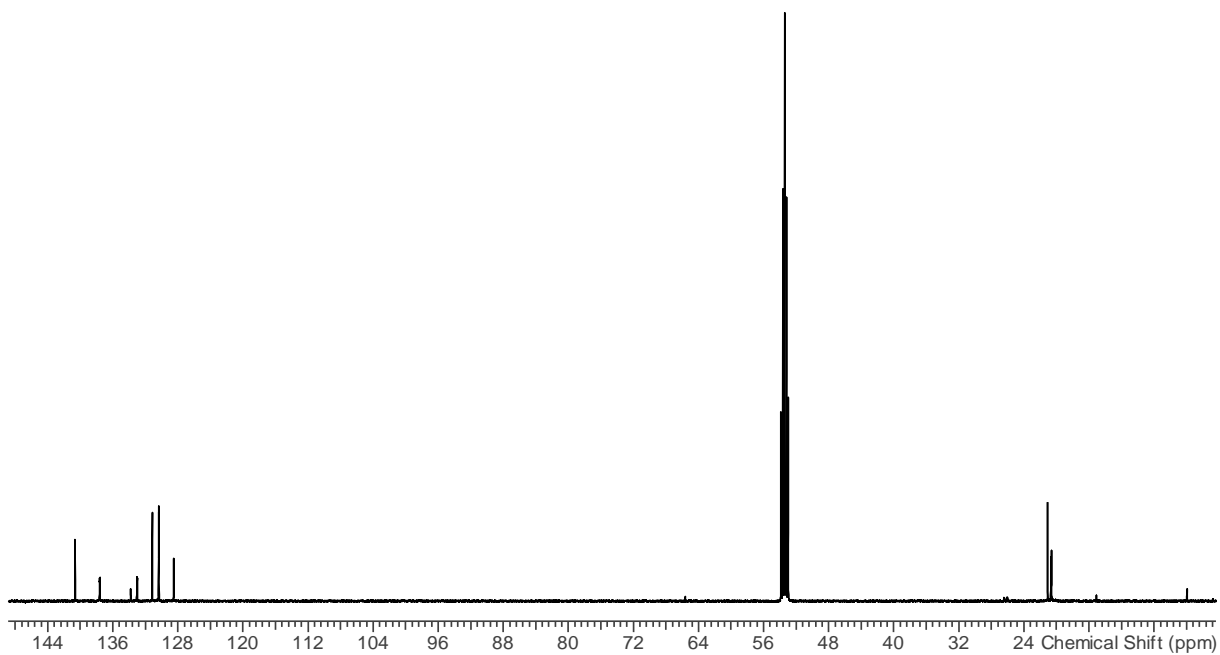


Abbildung 86  $^{13}\text{C}$ -NMR-Spektrum von **10** in  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ .

190828.503.016.001.1r.esp  
31P  
DICHLOROMETHANE-d2

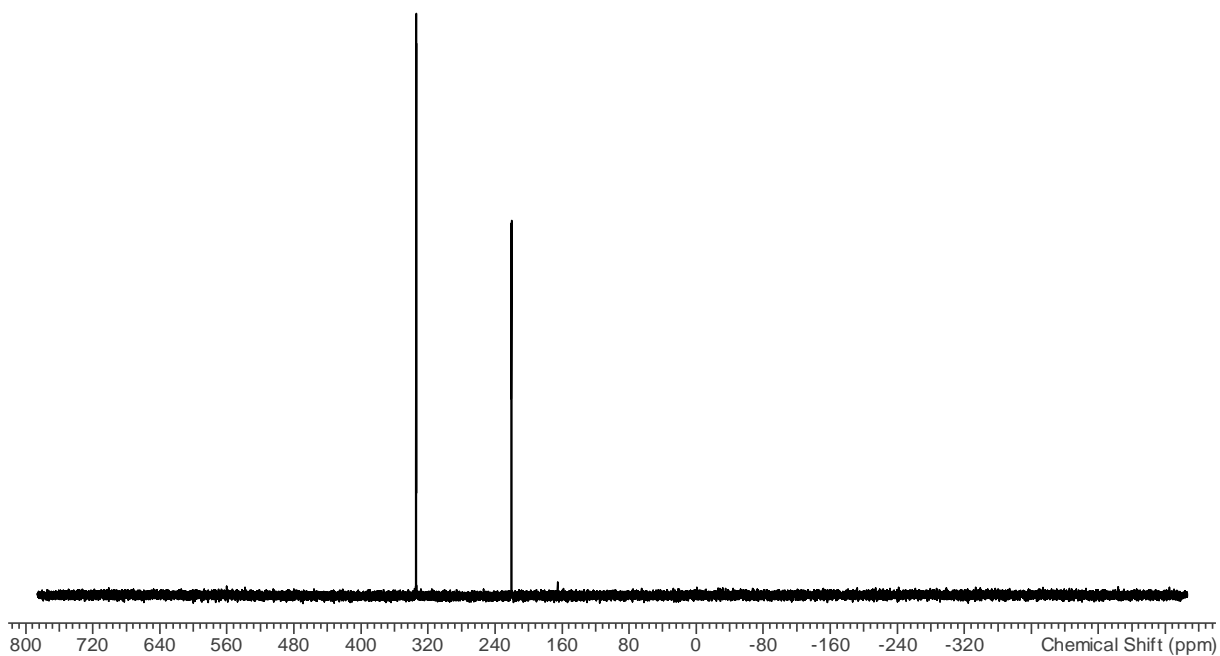
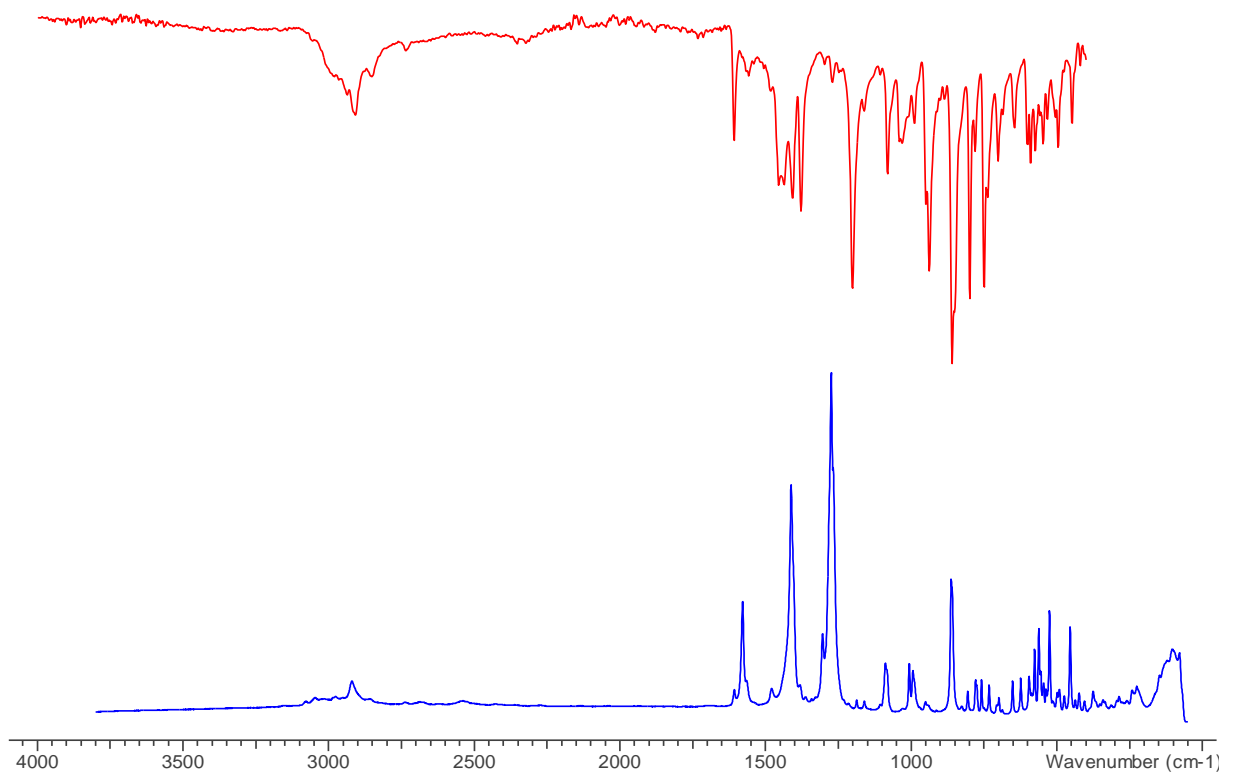
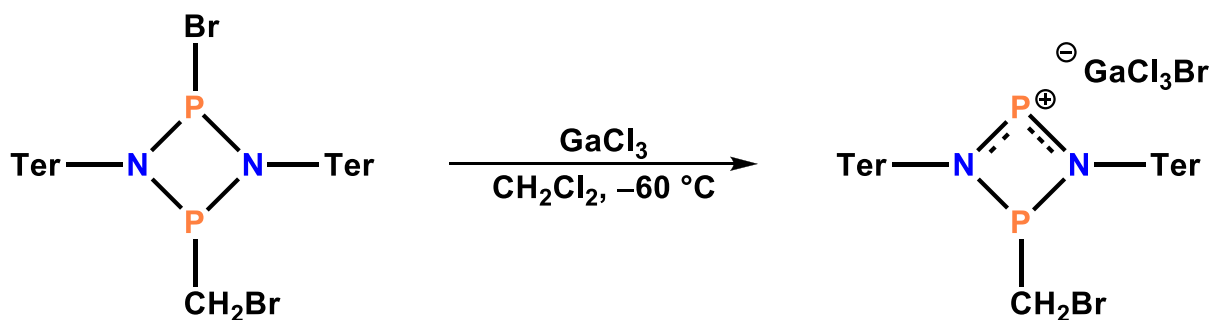


Abbildung 87  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum von **10** in  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ .



**Abbildung 88** Raman-Spektrum (blau) und IR-Spektrum (rot) von **10**.

### 5.5.10 [(TerNP)<sub>2</sub>(CH<sub>2</sub>Br)][GaCl<sub>3</sub>Br] (**11**)



140 mg Dibrommethanaddukt (0.157 mmol) **8** und 27.5 mg GaCl<sub>3</sub> (0.157 mmol) werden in einem Schlenkkolben vermengt. 1.5 ml CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> werden bei –60 °C zugegeben. Es ist eine Rotfärbung der Lösung zu beobachten. Einengen der Lösung bis zur einsetzenden Kristallisation und Lagern der Lösung bei –30 °C führt zur Bildung von roten Kristallen, welche für die Einkristall-Röntgenstrukturanalytik genutzt werden können.

Ausbeute: 44 mg (0.041 mmol, 26 %) M(C<sub>72</sub>H<sub>51</sub>BF<sub>20</sub>P<sub>2</sub>N<sub>2</sub>) = 1066.8 g/mol

<sup>1</sup>H-NMR (298 K, CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 500.13 MHz): 1.80 (s, 12 H, *o*-CH<sub>3</sub>), 1.82 (s, 12 H, *o*-CH<sub>3</sub>), 2.03 (d, 2 H, PCH<sub>2</sub>, <sup>2</sup>J(<sup>1</sup>H-<sup>31</sup>P) = 17 Hz), 2.38 (s, 12 H, *p*-CH<sub>3</sub>), 6.90-6.94 (m, 8 H, *m*-MesH), 6.95-6.99 (m, 4 H, *m*- ArH), 7.24-7.29 (m, 2 H, *p*-ArH). <sup>13</sup>C-NMR (298 K, CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 125.77 MHz): 21.3 (s, *o*-CH<sub>3</sub>), 21.6 (m, *o*-CH<sub>3</sub>), 21.8 (s, *p*-CH<sub>3</sub>), 31.1 (m, PCH<sub>2</sub>), 128.7 (s, *p*- ArH), 130.1 (s, *m*- ArH), 130.8 (s, *m*- MesH), 131.9 (s, *m*- MesH). <sup>31</sup>P-NMR (298 K, CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 202.47 MHz): 185.1 (dd, PCH<sub>2</sub>, <sup>2</sup>J(<sup>1</sup>H-<sup>31</sup>P) = 17 Hz, <sup>2</sup>J(<sup>31</sup>P-<sup>31</sup>P) = 33.9 Hz), 340.7 (d, P, <sup>2</sup>J(<sup>31</sup>P-<sup>31</sup>P) = 33.9 Hz). **Raman (632 nm):** 99 (6), 129 (6), 216 (3), 243 (2), 287 (2), 293 (2), 337 (1), 370 (3), 405 (1), 433 (3), 473 (1), 525 (5), 538 (5), 560 (4), 576 (5), 608 (2), 652 (2), 702 (2), 733 (4), 778 (3), 805 (2), 829 (1), 874 (8), 940 (1), 947 (1), 992 (3), 1007 (2), 1086 (3), 1161 (2), 1186 (1), 1219 (1), 1278 (10), 1304 (5), 1381 (2), 1404 (5), 1415 (6), 1478 (2), 1579 (4), 1608 (3), 2551 (2), 2626 (2), 2735 (2), 2836 (2), 2858 (2), 2920 (3), 2983 (2), 3046 (2). **IR (ATR cm<sup>-1</sup>)** 433 (m), 457 (m), 474 (m), 490 (m), 511 (m), 538 (s), 550 (m), 556 (m), 575 (m), 589 (m), 618 (m), 635 (m), 649 (m), 703 (m), 738 (s), 756 (s), 777 (m), 804 (s), 851 (vs), 870 (s), 940 (s), 952 (s), 989 (m), 1010 (m), 1030 (m), 1078 (m), 1164 (m), 1212 (s), 1265 (w), 1377 (m), 1409 (s), 1436 (m), 1484 (w), 1568 (w), 1609 (m), 2450 (w), 2734 (w), 2852 (w), 2916 (m), 2947 (w), 2976 (w), 3373 (w). **EA** found (calc.): C 52.68 (55.17) große Abweichung nicht erklärbar, H 4.86 (4.91), N 2.40 (2.63).



190820.510.010.001.1r.esp  
1H  
DICHLOROMETHANE-d2

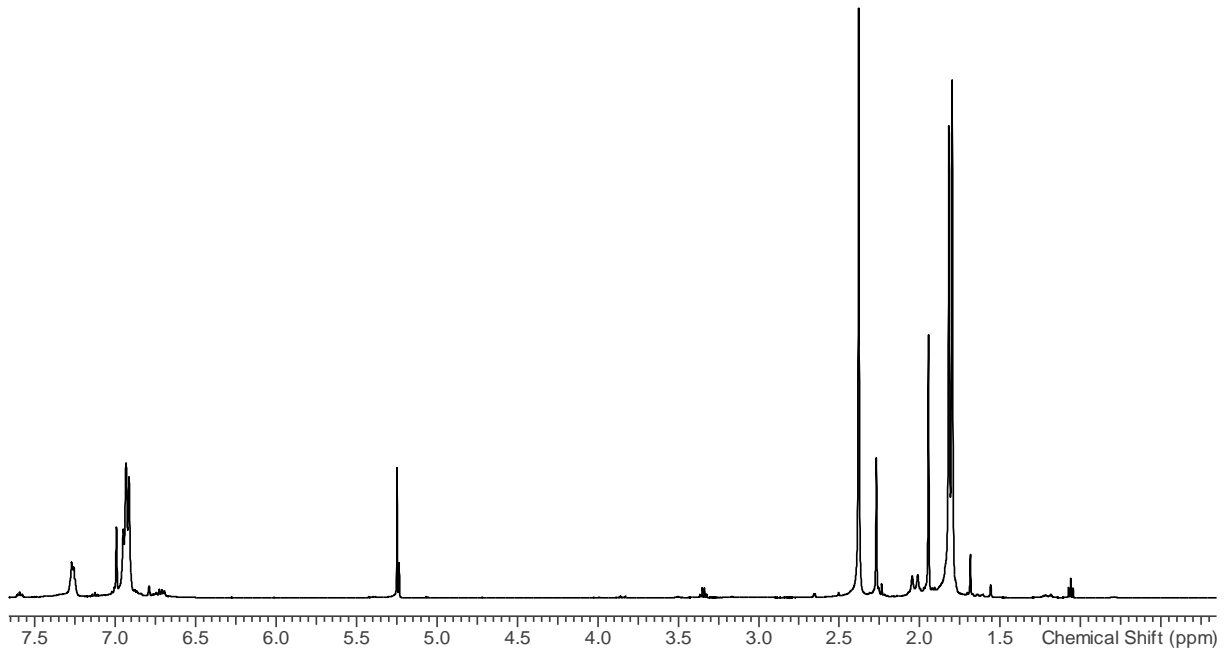


Abbildung 89  $^1\text{H}$ -NMR-Spektrum von **11** in  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ .

190820.510.017.001.1r.esp  
13C  
DICHLOROMETHANE-d2

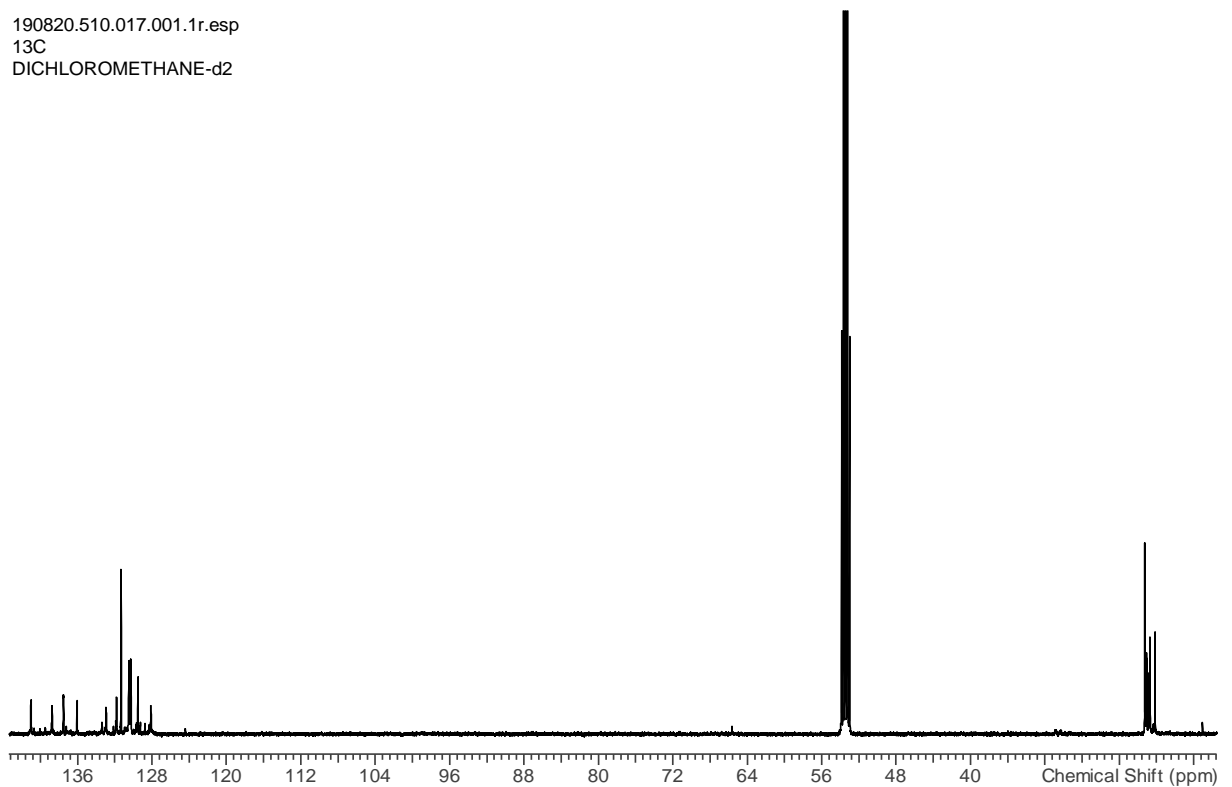
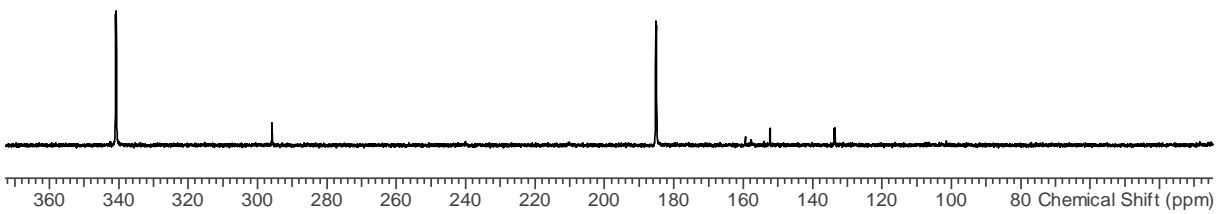
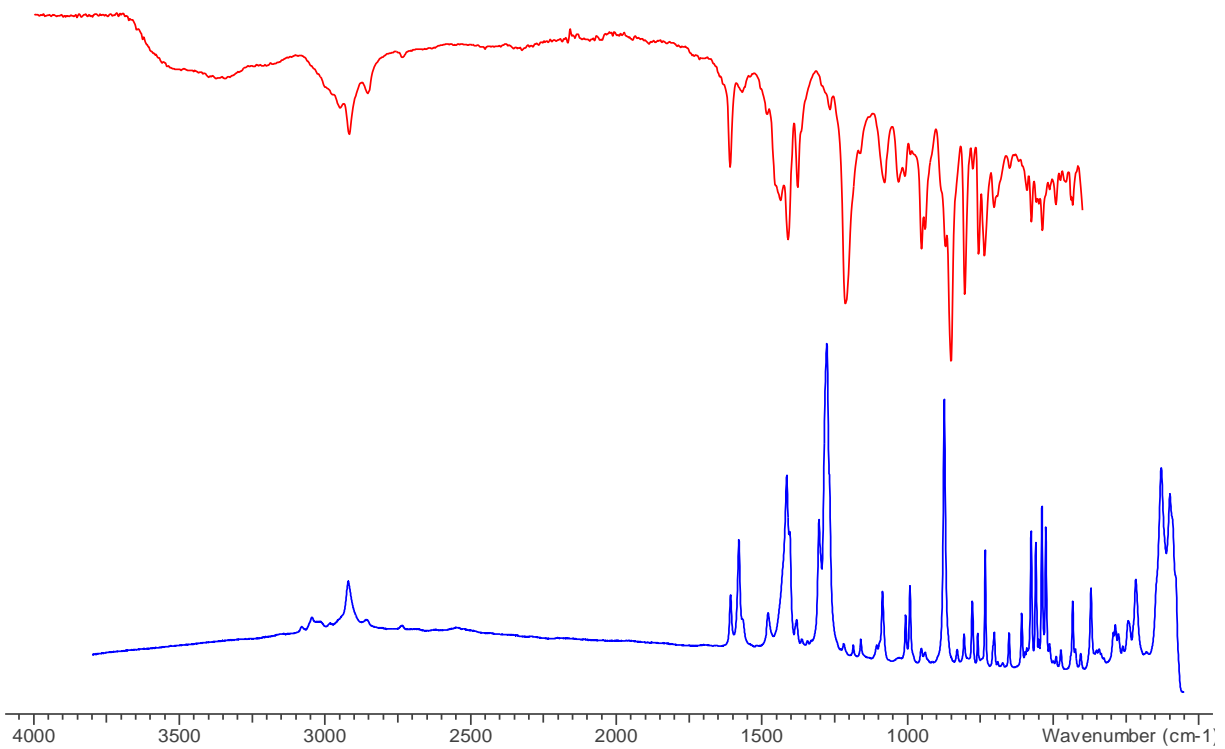


Abbildung 90  $^{13}\text{C}$ -NMR-Spektrum von **11** in  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ .

190820.510.016.001.1r.esp  
31P  
DICHLOROMETHANE-d2

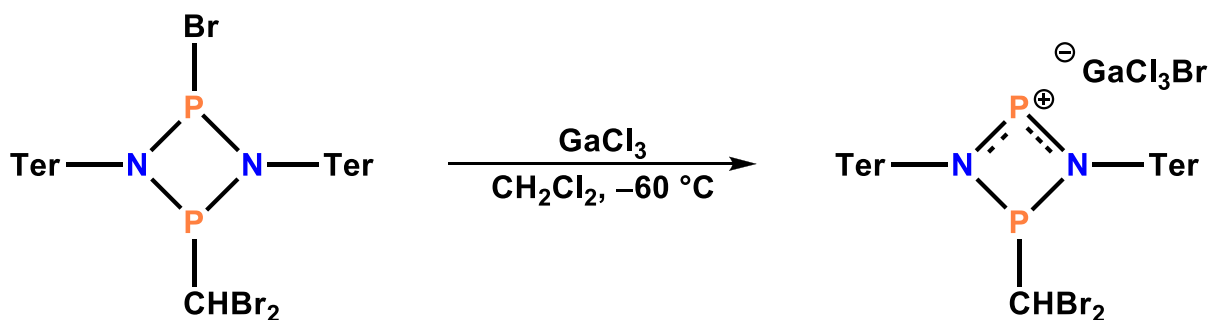


**Abbildung 91**  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum von **11** in  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ .



**Abbildung 92** Raman-Spektrum (blau) und IR-Spektrum (rot) von **11**.

### 5.5.11 [(TerNP)<sub>2</sub>(CHBr<sub>2</sub>)] [GaCl<sub>3</sub>Br] (**12**)

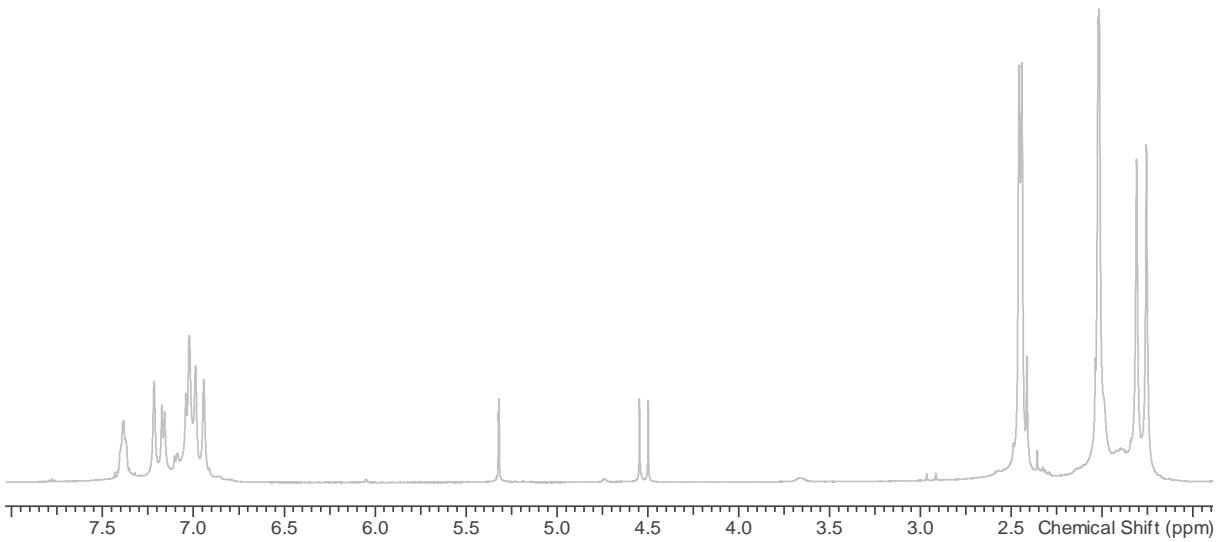


153 mg Tribromethanaddukt (0.158 mmol) **9** und 27.5 mg GaCl<sub>3</sub> (0.156 mmol) werden in einem Schlenkkolben vermengt. 2 ml CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> werden bei –60 °C zugegeben. Es ist eine Rotfärbung der Lösung zu beobachten. Einengen der Lösung bis zur einsetzenden Kristallisation führt zur Bildung von einem feinen roten Niederschlag. Kristalle minderer Qualität konnten für die Einkristall-Röntgenstrukturanalytik genutzt werden. Laut NMR-Daten enthält der Feststoff nicht nur reines Produkt **12**, sondern auch Nebenprodukte, die bisher nicht identifiziert werden konnten. Aufgrund der hohen Empfindlichkeit von **12** waren Aufreinigungsversuche bisher nicht erfolgreich. Daher liegt noch keine weitere Analytik außer der Molekülstruktur im Einkristall und den NMR-Verschiebungen vor.

Ausbeute: konnte nicht bestimmt werden, da Produktgemisch M(C<sub>72</sub>H<sub>51</sub>BF<sub>20</sub>P<sub>2</sub>N<sub>2</sub>) = 1145.7 g/mol

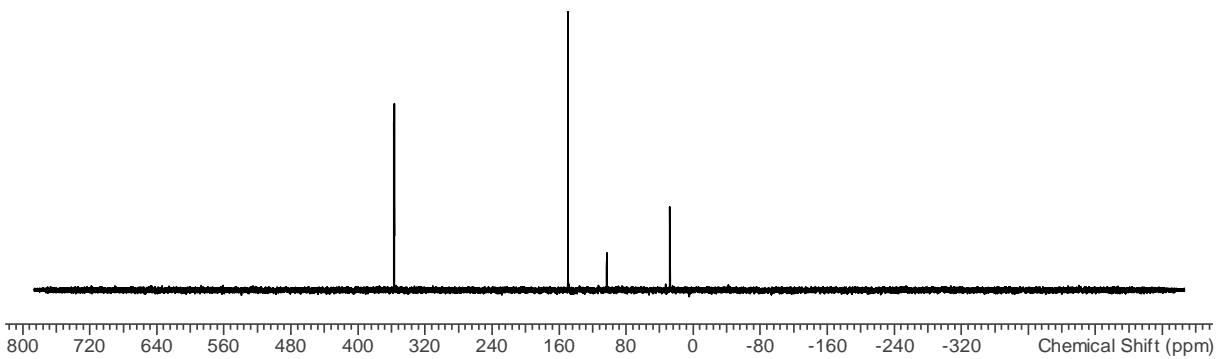
<sup>1</sup>H-NMR (298 K, CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 500.13 MHz): δ ppm 1.78 (d, 12 H, *m/p*-CH<sub>3</sub> (*J* = 27.01 Hz)), 2.02 (br d, 12 H, *m/p*-CH<sub>3</sub>, (*J* = 2.59 Hz)), 2.45 (br d, 12 H, *m/p*-CH<sub>3</sub>, (*J* = 7.78 Hz)), 4.52 (d, 1 H, PCH, (<sup>2</sup>*J*(<sup>1</sup>H-<sup>31</sup>P) = 23.80 Hz)), 6.89–7.46 (m, AromatenH) <sup>31</sup>P-NMR (298 K, CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 202.47 MHz): 149.6 (dd, PCH, <sup>2</sup>*J*(<sup>1</sup>H-<sup>31</sup>P) = 23.8 Hz, <sup>2</sup>*J*(<sup>31</sup>P-<sup>31</sup>P) = 42.4 Hz), 356.9 (d, P, <sup>2</sup>*J*(<sup>31</sup>P-<sup>31</sup>P) = 42.4 Hz).

190725.u325.010.001.1r.esp  
1H  
DICHLOROMETHANE-d2  
0 H's



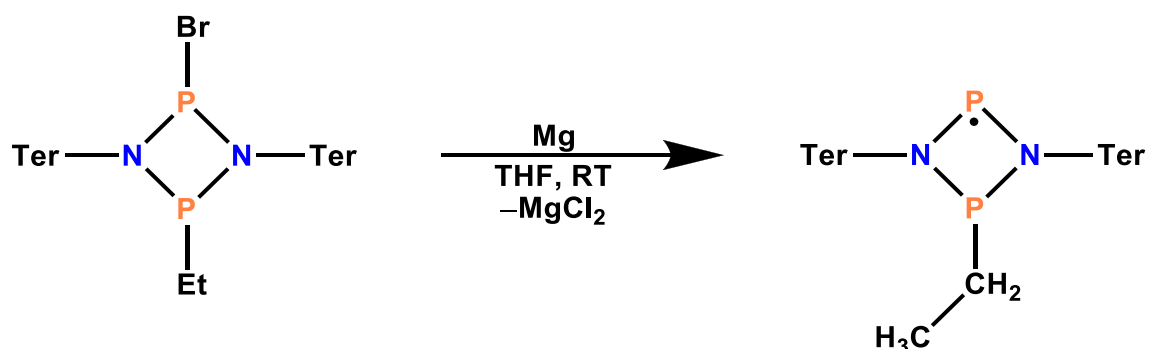
**Abbildung 93**  $^1\text{H}$ -NMR-Spektrum von **12** in  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ .

191022.513.011.001.1r.esp  
31P  
DICHLOROMETHANE-d2  
0 P's



**Abbildung 94**  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum von **12** in  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ .

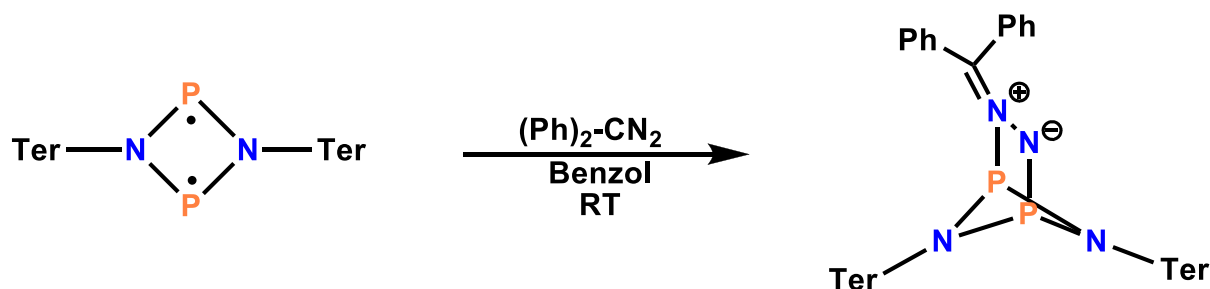
### 5.5.12 [(TerNP)<sub>2</sub>(Et)] (13)



140 mg Bromethanaddukt (0.17 mmol) **7** werden mit Mg-Spänen in THF bei Raumtemperatur suspendiert. Die Reaktionsmischung färbt sich nach kurzer Zeit rötlich. Das Lösemittel wird nach drei Tagen entfernt und der verbliebene Feststoff mit Benzol extrahiert. Sehr kleine tiefrote Kristalle können bei 5 °C gewonnen werden. Bisher konnte nicht genügend Produkt in reiner Form gewonnen werden, um eine vollständige Charakterisierung durchzuführen. Die Einkristall-Röntgenstrukturanalytik war dennoch möglich und deutet auf ein Monoradikal hin.

EA found (calc.): C 77.62 (80.51), H 7.15 (7.43), N 3.58 (3.76).

### 5.5.13 [(TerNP)<sub>2</sub>(Ph<sub>2</sub>CN<sub>2</sub>)] (14)



Ph<sub>2</sub>CN<sub>2</sub> wurde wie in 5.1.1 beschrieben synthetisiert

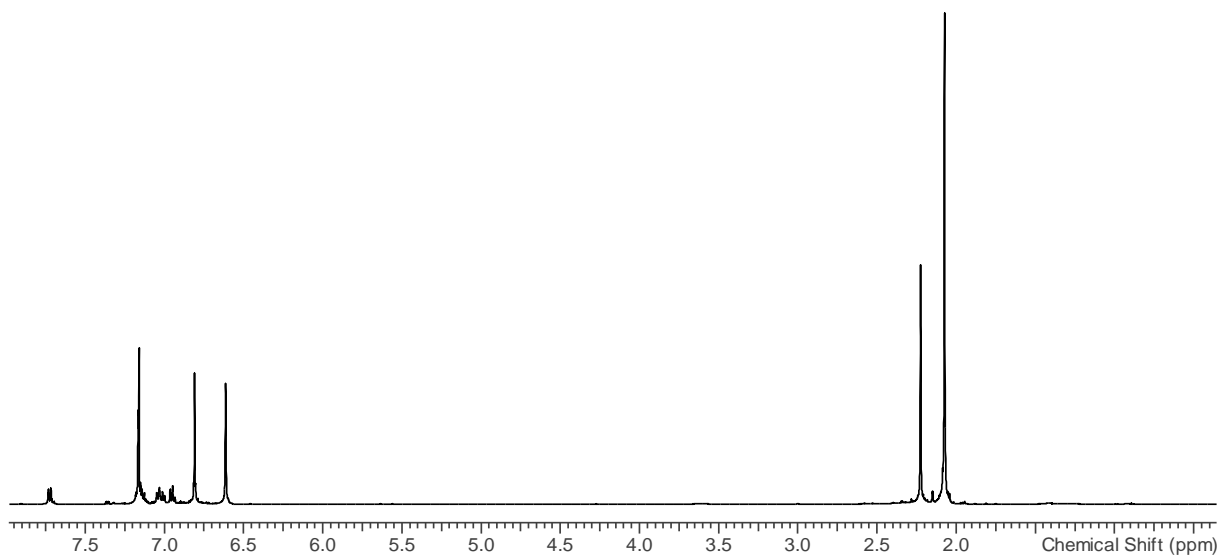
37 mg Diphenyl-diazomethan (0.19 mmol) und 135 mg [P(μ-NTer)]<sub>2</sub> (0.19 mmol) werden als Feststoffe zusammengegeben. Das Gemisch wird in 5 ml Benzol gelöst und für 15 Minuten gerührt. Anschließend wird die Suspension filtriert und das Filtrat bis zur einsetzenden Kristallisation im Vakuum eingengt. Das Lagern der Lösung bei Raumtemperatur über Nacht führt zur Bildung von orangen Kristallen. Die Mutterlauge wird mit einer Spritze entfernt und die Kristalle im Vakuum getrocknet.

Ausbeute: 82 mg (0.09 mmol, 48 %) M(C<sub>61</sub>H<sub>60</sub>P<sub>2</sub>N<sub>4</sub>) = 911 g/mol

**<sup>1</sup>H-NMR** (298 K, C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>, 250.1 MHz): 2.06 (s, 24 H, *o*-CH<sub>3</sub>), 2.21 (s, 12 H, *p*-CH<sub>3</sub>), 6.60 (s, 8 H, *m*-MesH), 6.80 (s, 6 H, *m/p*-ArH), 6.94-7.13 (m, 10 H, CPh<sub>2</sub>). **<sup>13</sup>C-NMR** (298 K, C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>, 250.1 MHz): 21.45 (s, CH<sub>3</sub>), 21.47 (s, CH<sub>3</sub>), 21.81 (s, CH<sub>3</sub>), 122.62 (s, CH), 127.38 (s, CH), 128.24 (s, CH), 128.37 (s, CH), 128.45 (s, CH), 128.69 (s, CH), 128.85 (s, CH), 128.92 (s, CH), 129.36 (s, CH), 130.74 (s, CH), 131.7 (s, CH), 131.89 (s, CH), 132.38 (s, CH), 133.23 (d, *J*(<sup>13</sup>C-<sup>31</sup>P) = 3.3 Hz), 137.10 (t, *J*(<sup>13</sup>C-<sup>31</sup>P) = 2.7 Hz), 137.49 (s), 137.52 (s), 137.55 (s), 138.55 (s), 138.94 (s), 138.99 (s), 139.03 (s). **<sup>31</sup>P-NMR** (298 K, CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 250.1 MHz): 224.8 (s, PNN), 236.0 (s, PNC). **Raman (632 nm)**: 203 (19), 229 (21), 240 (13), 275 (49), 308 (7), 323 (3), 338 (8), 374 (2), 401 (4), 418 (21), 438 (13), 460 (14), 469 (13), 481 (15), 502 (12), 512 (15), 522 (5), 531 (6), 546 (22), 562 (100), 578 (78), 587 (20), 596 (51), 616 (20), 624 (33), 646 (21), 722 (9), 734 (24), 757 (3), 767 (6), 773 (2), 791 (2), 797 (4), 803 (3), 817 (8), 843 (12), 908 (2), 918 (1), 945 (11), 962 (11), 982 (5), 989 (32), 1000 (62), 1029 (7), 1043 (3), 1089 (36), 1158 (15), 1182 (33), 1186 (27), 1225 (13), 1237 (4), 1246 (5), 1268 (22), 1289 (78), 1305 (66), 1326 (16), 1380 (8), 1405 (26), 1423 (38), 1432 (41), 1476 (40), 1490 (19), 1498 (18), 1582 (61), 1595 (39), 1612 (18), 2726 (2), 2854 (6), 2857 (6), 2916 (20), 2947 (6), 3012 (4), 3015 (4), 3049 (14), 3059 (12), 3070 (12). **IR (ATR, cm<sup>-1</sup>)**: 530 (m), 551

(s), 563 (m), 574 (m), 595 (m), 611 (s), 624 (s), 636 (s), 646 (m), 676 (vs), 690 (vs), 719 (s), 750 (s), 756 (s), 765 (vs), 792 (s), 815 (s), 842 (vs), 894 (s), 962 (m), 983 (m), 1006 (m), 1027 (s), 1041 (m), 1081 (s), 1112 (m), 1157 (m), 1182 (s), 1224 (vs), 1311 (m), 1373 (m), 1403 (s), 1430 (m), 1442 (m), 1479 (w), 1488 (w), 1579 (w), 1610 (w), 2726 (w), 2852 (w), 2914 (m), 2944 (w), 2964 (w), 2996 (w), 3029 (w), 3050 (w). **MS** (CI, pos., *Isobutan*) *m/z* (%): 182 (35) [Ph<sub>2</sub>CNH<sub>2</sub>]<sup>+</sup>, 330 (47) [TerNH<sub>3</sub>]<sup>+</sup>, 358 (54) [TerNP]<sup>+</sup>, 526 (82), 554 (77), 582 (14), 687 (56) [(TerNH)<sub>2</sub>P]<sup>+</sup>, 716 (100) [(TerNP)<sub>2</sub>]<sup>+</sup>, 866 (10), 895 (11), 911 (42) [M+H]<sup>+</sup>. **EA** found (calc.): C 80.05 (80.41), H 6.74 (6.64), N 5.99 (6.15). **Mp**: 196 °C (dec.).

190205.521best.010.001.1r.esp  
1H  
BENZENE-d6  
0 H's



**Abbildung 95** <sup>1</sup>H-NMR-Spektrum von **14** in Benzol-d<sub>6</sub>.

190205.521best.011.001.1r.esp  
31P  
BENZENE-d6

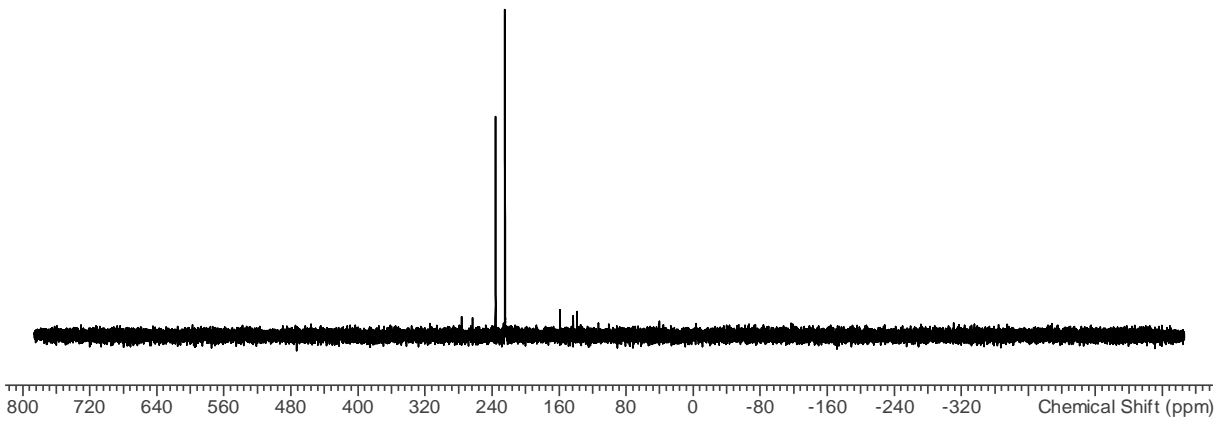
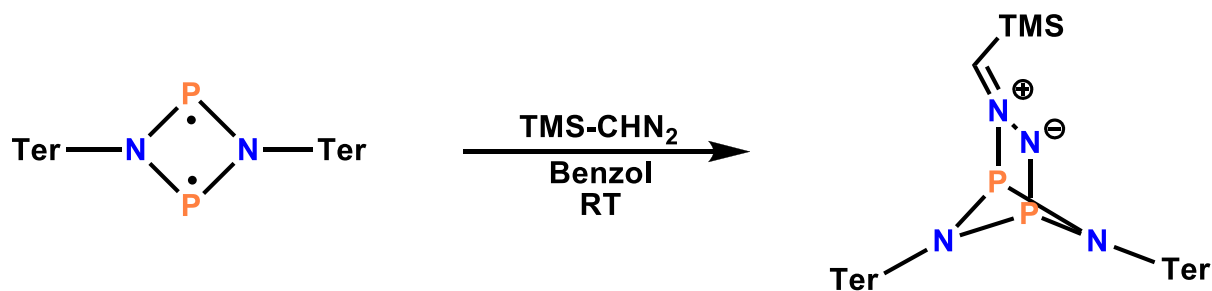


Abbildung 96  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum von **14** in Benzol- $\text{d}_6$ .



### 5.5.14 [(TerNP)<sub>2</sub>(TMSCHN<sub>2</sub>)] (15)



387 mg [P( $\mu$ -NTer)]<sub>2</sub> (0.53 mmol) werden in 5 ml Benzol gelöst. 270  $\mu$ l Trimethylsilyldiazomethan (2 M in Diethylether, 0.53 mmol) werden bei Raumtemperatur zugegeben. Die Lösung färbt sich von orange zu hellgelb. Das Lösemittel wird anschließend im Vakuum entfernt. Dabei bildet sich ein gelber voluminöser Feststoff als Schaum. Die Gewinnung von Kristallen für die Einkristall-Röntgenstrukturanalytik war nicht erfolgreich.

Ausbeute: 440 mg (0.53 mmol, >99 %) M(C<sub>52</sub>H<sub>60</sub>P<sub>2</sub>N<sub>4</sub>Si) = 831 g/mol

**<sup>1</sup>H-NMR** (25 °C, C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>, 500.13 MHz):  $\delta$  = -0.1 (s, 9 H, Si-CH<sub>3</sub>), 2.07 (s, 12 H, *p/o*-CH<sub>3</sub>), 2.24 (s, 12 H, *p/o*-CH<sub>3</sub>), 2.31 (s, 12 H, *p/o*-CH<sub>3</sub>), 4.83 (d, 1 H, N-N-CH, <sup>3</sup>J(<sup>1</sup>H-<sup>31</sup>P) = 6.3 Hz), 6.6 (m, 4 H, *m*-ArH), 6.69 (s, 4 H, *m*-MesH), 6.74 (dd, 2 H, *p*-ArH, <sup>3</sup>J(<sup>1</sup>H-<sup>1</sup>H) = 6.9 Hz, <sup>3</sup>J(<sup>1</sup>H-<sup>1</sup>H) = 8.1 Hz), 6.84 (s, 4 H, *m*-MesH). **<sup>13</sup>C-NMR** (25 °C, C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>, 125.77 MHz)  $\delta$  = 1.98 (d, Si-CH<sub>3</sub>, <sup>4</sup>J(<sup>13</sup>C-<sup>31</sup>P) = 5 Hz), 21.5 (s, *p/o*-CH<sub>3</sub>), 21.8 (d, *p/o*-CH<sub>3</sub>, J = 2 Hz), 22.1 (d, *p/o*-CH<sub>3</sub>, J = 7 Hz), 121.6 (s, *p*-ArC), 128.6 (s, *m*-MesC), 129.5 (s, *m*-MesC), 131.1 (d, N-N-CH, <sup>2</sup>J(<sup>13</sup>C-<sup>31</sup>P) = 4.5 Hz), 132 (s, *m*-ArC). **<sup>29</sup>Si inept NMR** (25 °C, C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>, 99.36 MHz)  $\delta$  = 4.7-5.4 (m, Si). **<sup>31</sup>P{<sup>1</sup>H}-NMR** (25 °C, C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>, 202.48 MHz)  $\delta$  = 129.9 (d, PNN, <sup>2</sup>J(<sup>31</sup>P-<sup>31</sup>P) = 24.4 Hz), 205.2 (dd, PNCH, <sup>2</sup>J(<sup>31</sup>P-<sup>31</sup>P) = 24.4 Hz, <sup>3</sup>J(<sup>31</sup>P-<sup>1</sup>H) = 6.3 Hz). **Raman** (Probe nicht kristallin genug). **IR (ATR CM-1)** 423 (w), 431 (w), 445 (w), 458 (w), 468 (w), 474 (w), 486 (w), 509 (w), 538 (w), 550 (m), 561 (m), 569 (m), 596 (w), 618 (w), 631 (w), 649 (w), 690 (m), 717 (w), 750 (m), 796 (m), 843 (vs), 897 (m), 958 (w), 985 (w), 1006 (w), 1014 (w), 1031 (w), 1062 (w), 1086 (w), 1220 (m), 1249 (w), 1375 (w), 1406 (m), 1484 (w), 1544 (vw), 1579 (vw), 1612 (vw), 2729 (vw), 2799 (vw), 2811 (vw), 2855 (vw), 2875 (vw), 2914 (w), 2952 (w), 3030 (vw), 3040 (vw), 3302 (vw). **MS** (CI, pos., Isobutan) *m/z* (%): 100 (100) [TMSN]<sup>+</sup>, 172 (7) [TMSN<sub>2</sub>+C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>]<sup>+</sup>, 330 (59) [TerNH<sub>3</sub>]<sup>+</sup>, 386 (13) [TerNH<sub>2</sub>+C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>]<sup>+</sup>, 447 (76) [TerN<sub>2</sub>P<sub>2</sub>+C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>]<sup>+</sup>, 687 (27), 716 (3) [(TerNP)<sub>2</sub>]<sup>+</sup>, 804 (6). **EA** found (calc.): C 73.59 (75.15), H 7.47 (7.28), N 6.07 (6.74). **Mp**: 160 °C (dec.).

181116.502.010.001.1r.esp  
1H  
BENZENE-d6

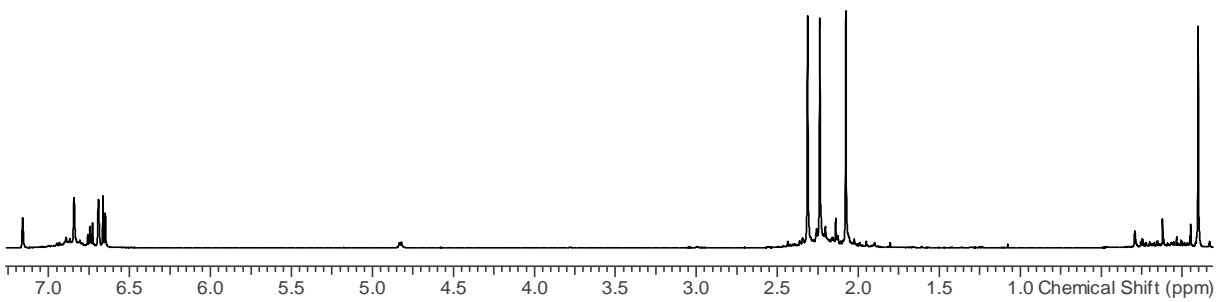


Abbildung 97  $^1\text{H}$ -NMR-Spektrum von **15** in Benzol- $\text{d}_6$ .

181120.203.011.001.1r.esp  
31P  
BENZENE-d6

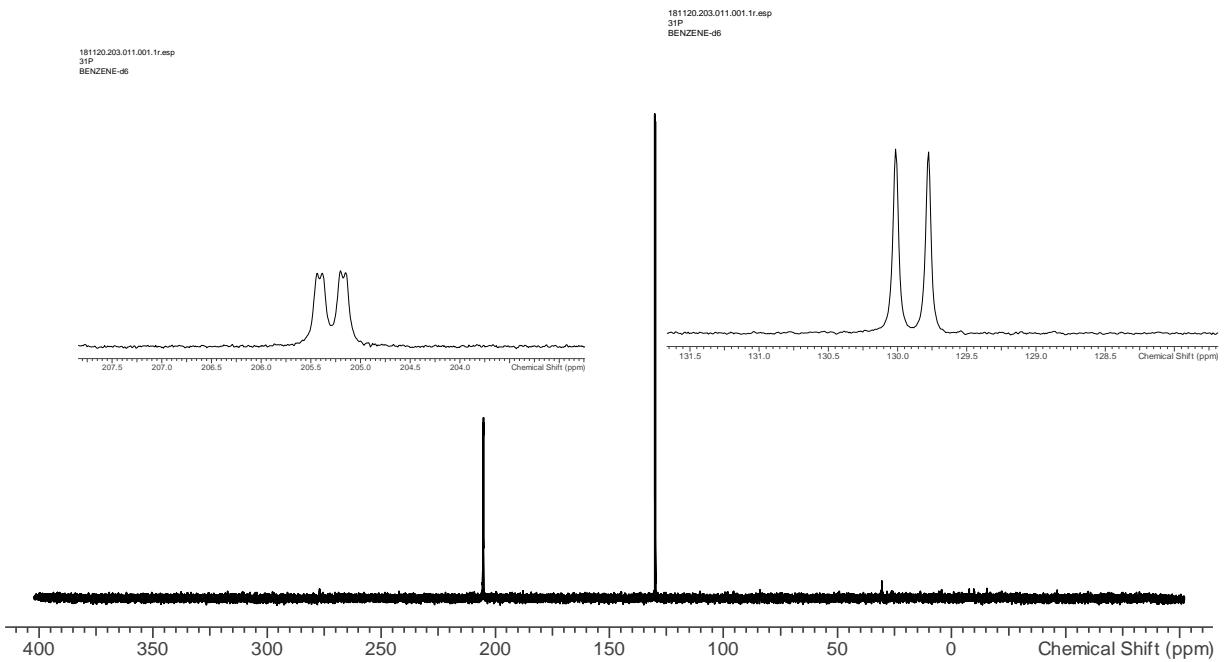


Abbildung 98  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum von **15** in Benzol- $\text{d}_6$ .

181116.502016.001.1r.esp  
13C  
BENZENE-d6

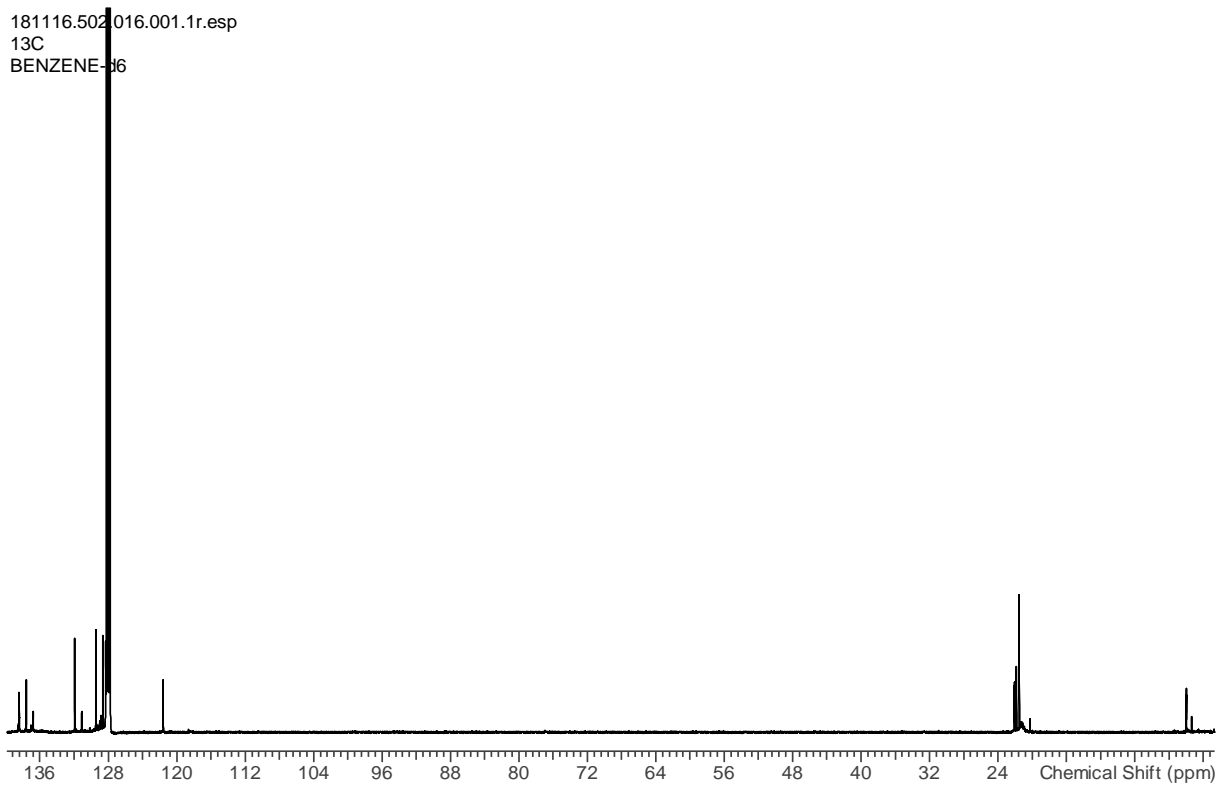


Abbildung 99  $^{13}\text{C}$ -NMR-Spektrum von **15** in Benzol- $\text{d}_6$ .

181116.502.015.001.1r.esp  
13C  
BENZENE-d6

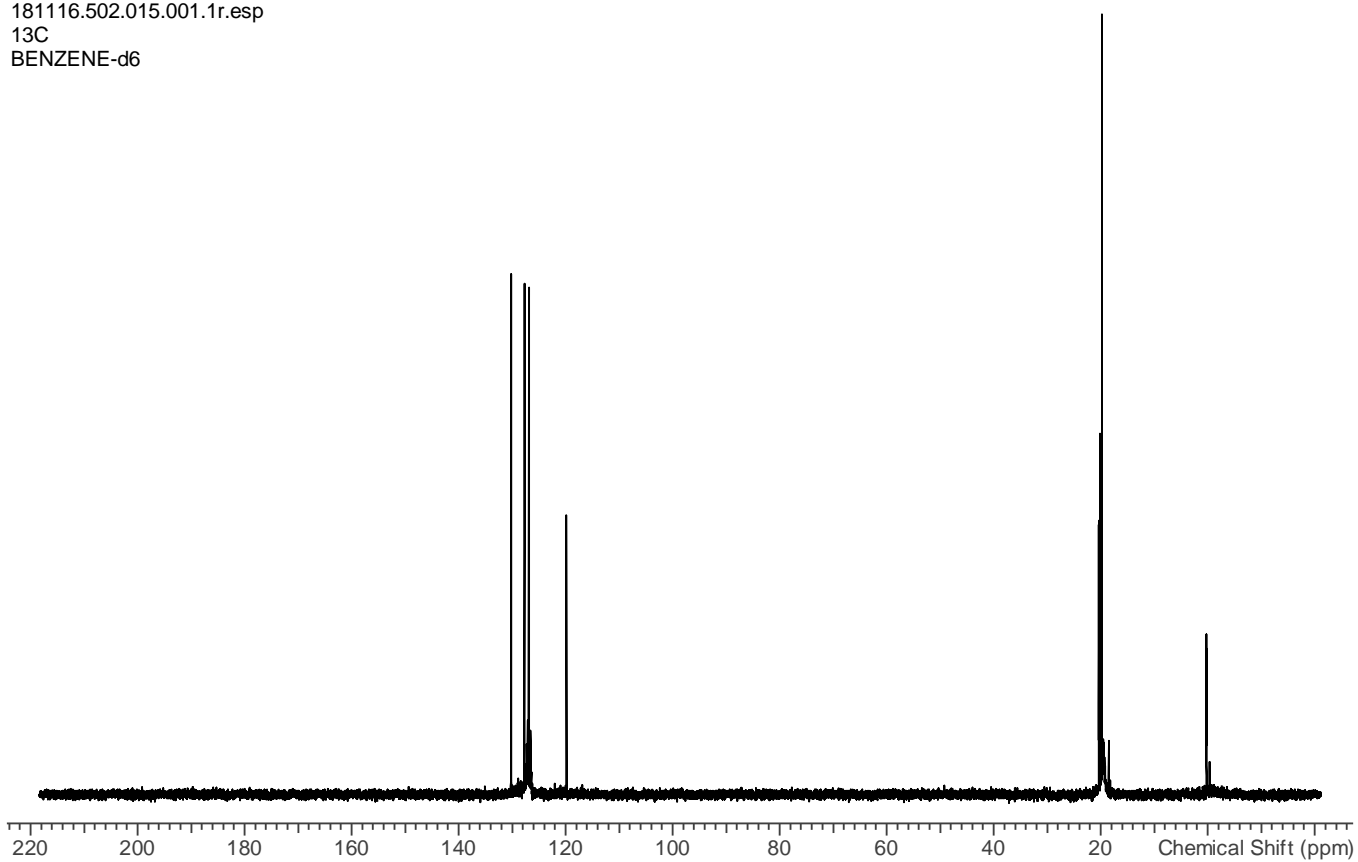


Abbildung 100  $^{13}\text{C}$  DEPT-NMR-Spektrum von **15** in Benzol- $\text{d}_6$ .

181116.502.018.001.1r.esp  
29Si  
BENZENE-d6

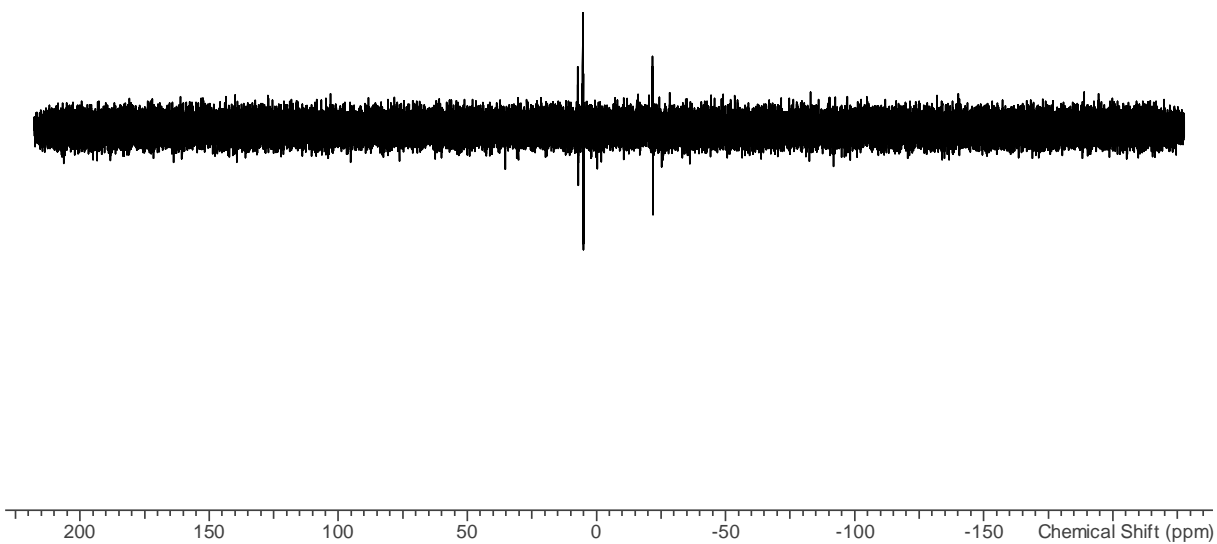


Abbildung 101  $^{29}\text{Si}$ -NMR-Spektrum von **15** in Benzol- $\text{d}_6$ .

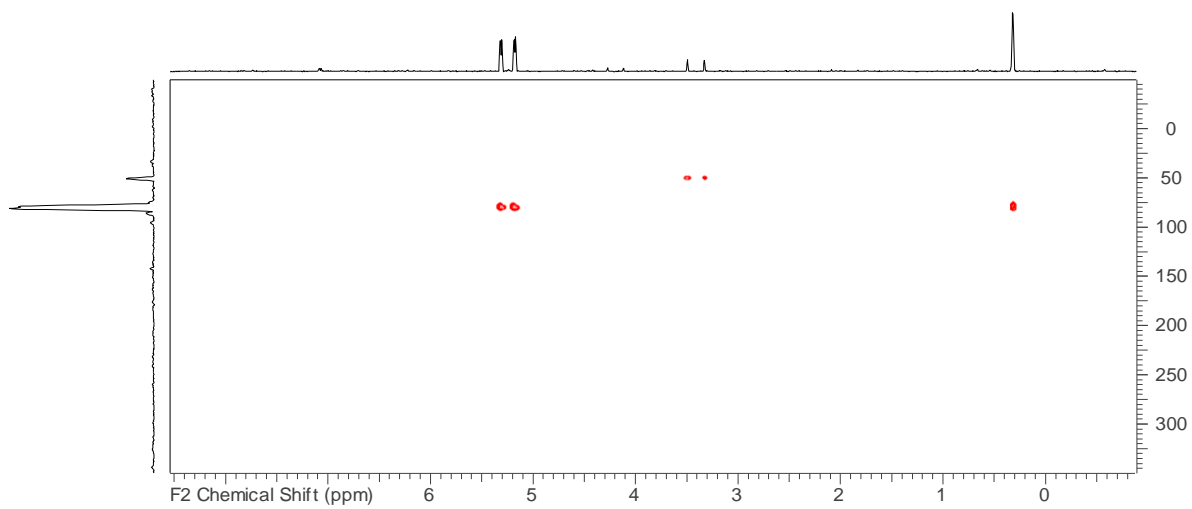
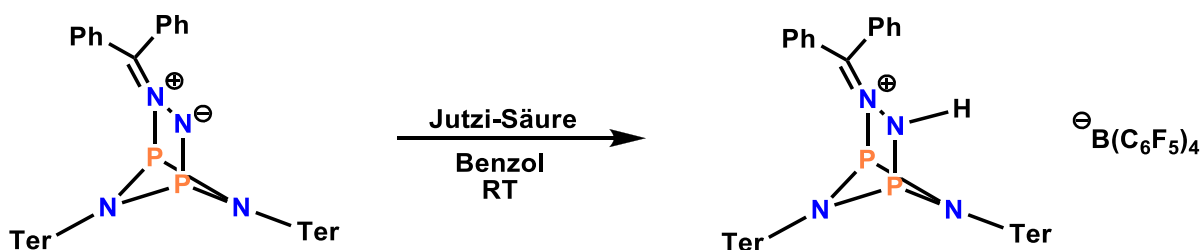


Abbildung 102  $^1\text{H}$ - $^{15}\text{N}$ -HMBC-NMR-Spektrum von **15** in Benzol- $\text{d}_6$ .

### 5.5.15 [(TerNP)<sub>2</sub>(Ph<sub>2</sub>CN<sub>2</sub>)H][B(C<sub>6</sub>F<sub>5</sub>)<sub>4</sub>] (16)



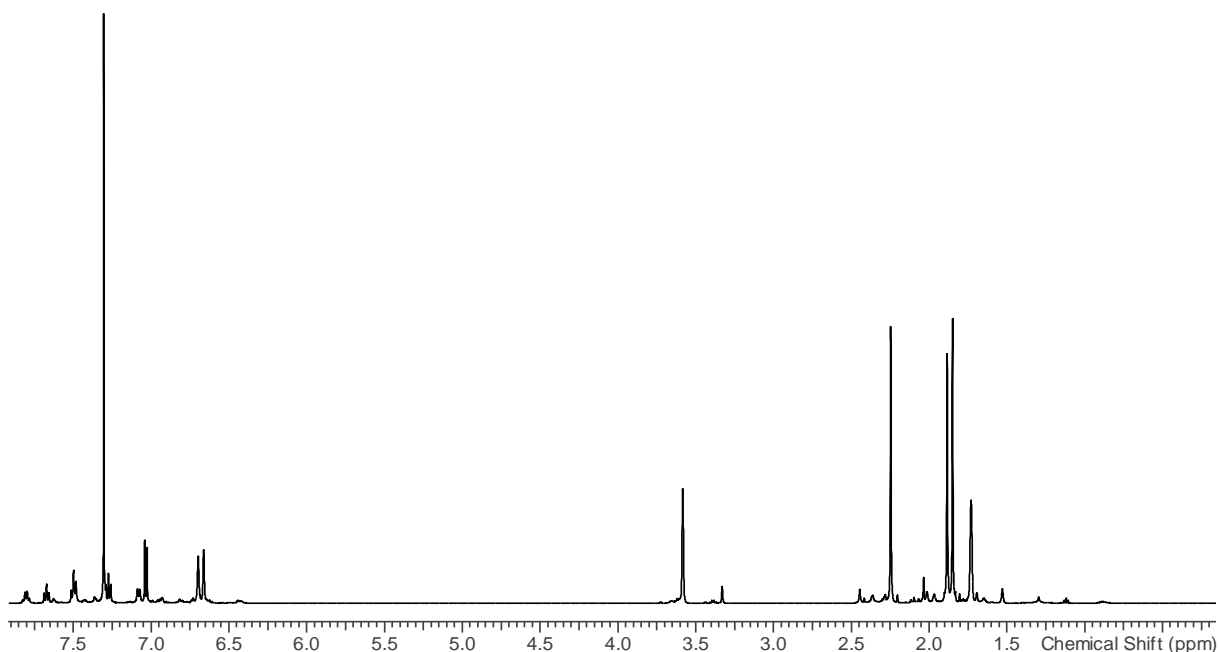
85 mg Diphenyl-diazomethanaddukt (0.0933 mmol) und 80 mg Jutzi-Säure (0.0985 mmol) werden in einem Schlenkkolben vermengt. 4 ml Benzol werden bei Raumtemperatur zugegeben. Die klare Lösung teilt sich in zwei Phasen auf. Die obere Phase ist gelb und die untere tiefrot und viskos. Einengen der Lösung, bis fast nur noch die untere Phase vorliegt führt zu Bildung von gelblichen Kristallen in der unteren Phase über Nacht. Das Produkt bildet zwei Phasen mit Toluol und Benzol. Es ist unlöslich in Hexan und Pentan aber löslich in Fluorbenzol und Ether. NMR-Spektroskopie in deuteriertem THF ist möglich, führt jedoch bei längeren Messzeiten zur Polymerisation des THFs.

Ausbeute: 51 mg (0.03 mmol, 34 %)  $M(C_{72}H_{51}BF_{20}P_2N_2) = 1591.1$  g/mol

**<sup>1</sup>H-NMR** (298 K, C<sub>4</sub>D<sub>8</sub>O, 500.13 MHz): 1.70 (s, 12 H, *p*-CH<sub>3</sub>), 1.74 (s, 12 H, *o*-CH<sub>3</sub>), 2.10 (s, 12 H, *o*-CH<sub>3</sub>), 6.50-6.57 (m, 8 H, *m*-MesH), 6.78-6.81 (m, 4 H, *m*- ArH), 9.92-6.96 (m, 2 H, PhH) 7.11-7.15 (m, 2 H, *p*-ArH), 7.33-7.38 (m, 4 H, PhH), 7.50-7.56 (m, 2 H, PhH), 7.62-7.70 (m, 2 H, PhH). **<sup>11</sup>B-NMR** (298K, C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>F, 160.46 MHz): -16.6 (s). **<sup>13</sup>C-NMR** (298 K, C<sub>4</sub>D<sub>8</sub>O, 125.77 MHz): 20.8 (s, *p*-CH<sub>3</sub>), 21.2-21.4 (m, *o*-CH<sub>3</sub>), 126.6 (s, *p*- ArH), 130.1-130.3 (m, PhH) 130.4-130.6 (m, *m*- MesH), 131.6 (s, *m*- ArH), 132.0 (s, PhH), 133.3 (s, PhH), 135.5 (s), 134.8 (s), 137.7 (s), 138.5 (s), 140.2 (s). **<sup>19</sup>F-NMR** (298K, C<sub>4</sub>D<sub>8</sub>O, 470.55 MHz): -132.7 (s(br)), -165.0 (t, *J* = 20.3 Hz), -168.5 (t, *J* = 18.3 Hz). **<sup>31</sup>P-NMR** (298 K, C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>F, 202.47 MHz): 191 (dd, 1 P, PNH, <sup>2</sup>*J*(<sup>31</sup>P-<sup>31</sup>P) = 26 Hz, <sup>2</sup>*J*(<sup>1</sup>H-<sup>31</sup>P) = 17 Hz), 261.1 (d, 1 P, PNPNH, <sup>2</sup>*J*(<sup>31</sup>P-<sup>31</sup>P) = 26 Hz). **Raman (632 nm)**: 130 (6), 146 (4), 158 (3), 186 (0), 210 (1), 230 (2), 241 (2), 244 (2), 270 (2), 309 (1), 330 (1), 345 (0), 358 (1), 376 (1), 394 (1), 403 (1), 423 (2), 436 (1), 448 (2), 460 (1), 473 (1), 490 (2), 512 (1), 523 (1), 530 (1), 548 (1), 554 (1), 568 (3), 578 (8), 584 (5), 591 (3), 607 (1), 616 (2), 623 (1), 655 (0), 696 (0), 704 (0), 713 (0), 732 (2), 738 (1), 777 (1), 798 (0), 812 (0), 821 (1), 849 (1), 857 (1), 861 (1), 913 (0), 925 (0), 932 (0), 946 (1), 958 (0), 963 (0), 966 (0), 984 (1), 992 (10), 1001 (6), 1020 (0), 1028 (1), 1093 (2), 1107 (0), 1110 (0), 1115 (0), 1118 (0), 1123 (0), 1134 (0), 1139 (0), 1163 (1), 1171 (3), 1187

(1), 1190 (1), 1216 (2), 1247 (1), 1281 (3), 1309 (3), 1327 (1), 1340 (1), 1350 (0), 1360 (1), 1385 (2), 1424 (2), 1430 (2), 1436 (2), 1465 (1), 1485 (1), 1496 (1), 1524 (1), 1545 (10), 1582 (4), 1589 (3), 1598 (4), 1613 (2), 1628 (1), 1645 (1), 1649 (1), 2736 (0), 2861 (1), 2870 (1), 2923 (2), 2950 (1), 2973 (1), 2978 (1), 2981 (1), 2985 (1), 2992 (1), 2995 (1), 3006 (1), 3026 (1), 3032 (1), 3066 (4), 3163 (0), 3188 (0), 3222 (0). **IR (ATR,  $\text{cm}^{-1}$ )** 406 (m), 418 (m), 437 (m), 445 (m), 460 (m), 474 (m), 488 (m), 497 (m), 511 (m), 530 (m), 550 (m), 560 (m), 573 (m), 604 (m), 628 (m), 659 (s), 678 (s), 696 (m), 732 (m), 754 (s), 773 (m), 797 (m), 853 (m), 894 (m), 905 (m), 977 (vs), 1034 (m), 1082 (s), 1177 (w), 1218 (m), 1273 (m), 1327 (w), 1377 (m), 1409 (m), 1459 (vs), 1510 (s), 1541 (w), 1558 (w), 1568 (w), 1597 (w), 1609 (w), 1642 (w), 2737 (vw), 2856 (vw), 2918 (w), 3035 (vw), 3091 (vw), 3219 (vw), 3254 (vw), 3410 (w). **MS** (CI, pos., *Isobutan*)  $m/z$  (%): 182 (73), 330 (100) [TerNP]<sup>+</sup>, 361 (23), 386 (15), 526 (17), 687 (6), 745 (4). **EA** found (calc.): C 64.66 (64.12), H 4.26 (3.93), N 2.91 (3.52). **Mp**: 180 °C (dec.).

190219.511.010.001.1r.esp  
1H  
THF



**Abbildung 103** <sup>1</sup>H-NMR-Spektrum von **16** in THF-d<sub>8</sub>.

190219.511.012.001.1r.esp  
19F  
THF

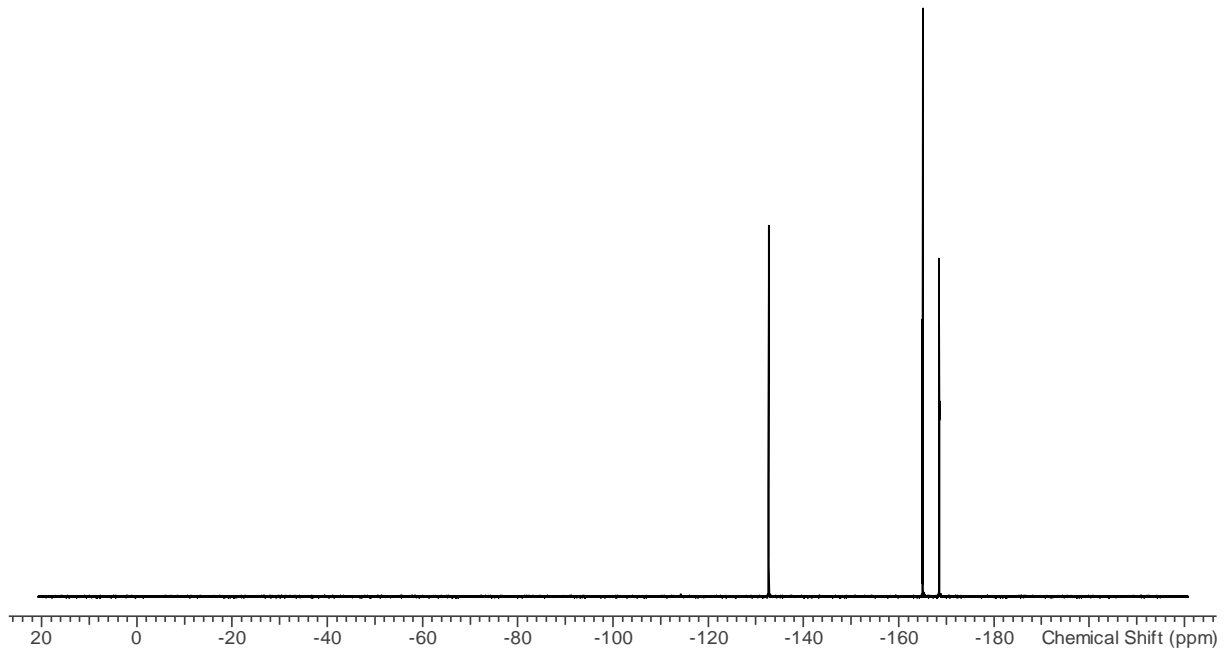


Abbildung 104  $^{19}\text{F}$ -NMR-Spektrum von **16** in THF- $d_8$ .

190219.511.013.001.1r.esp  
31P  
THF

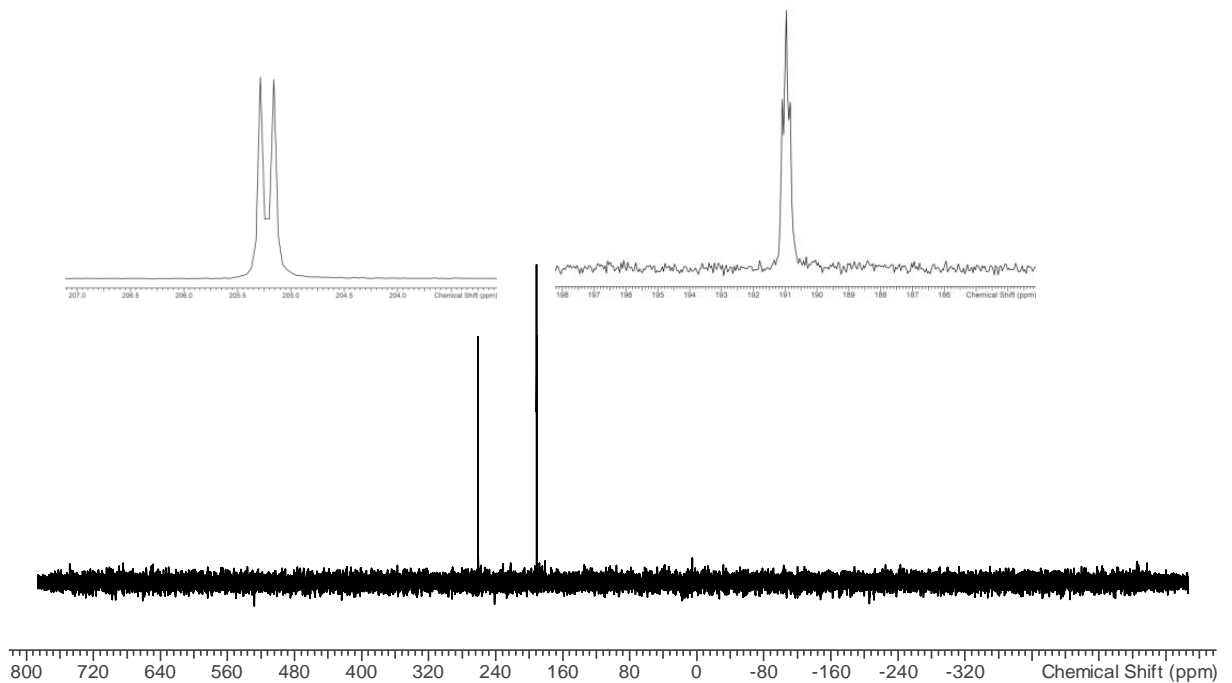


Abbildung 105  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum von **16** in THF- $d_8$ .

190219.511.016.001.1r.esp  
13C  
THF

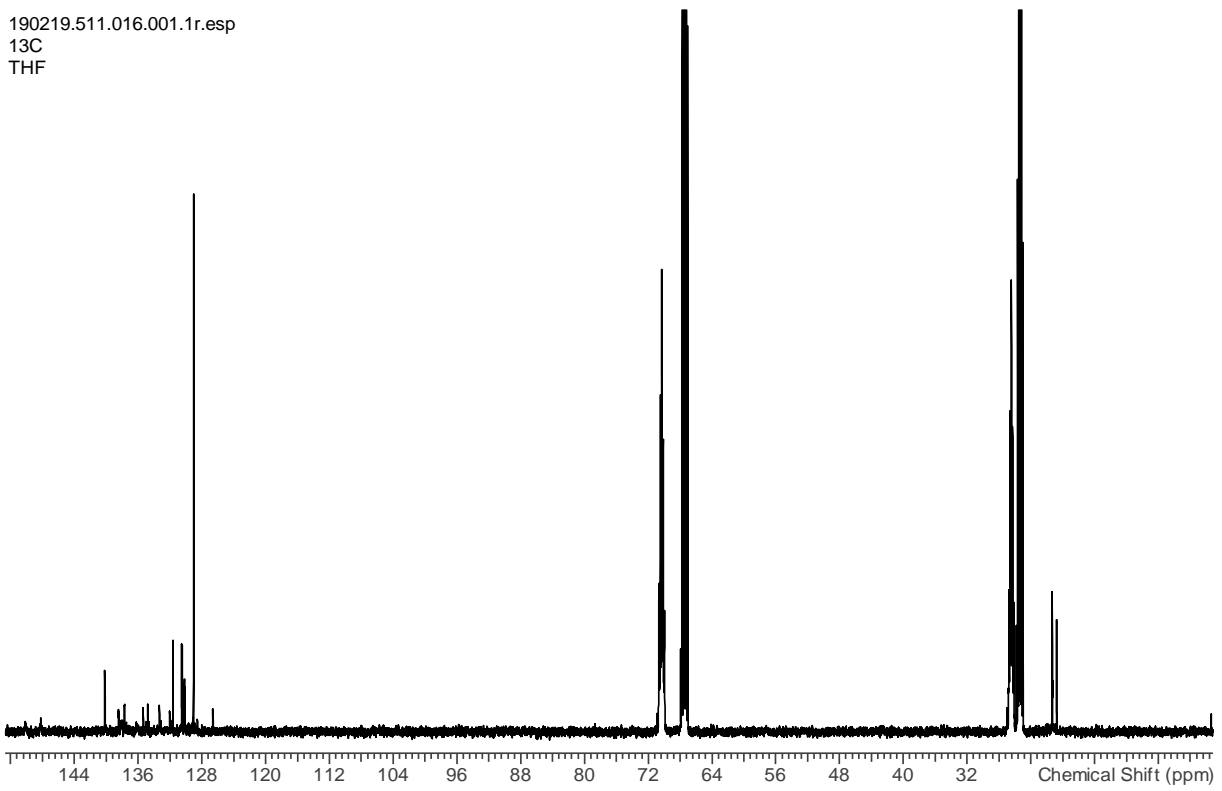


Abbildung 106  $^{13}\text{C}$ -NMR-Spektrum von **16** in THF- $\text{d}_8$ .

190219.511.015.001.1r.esp  
11B  
THF

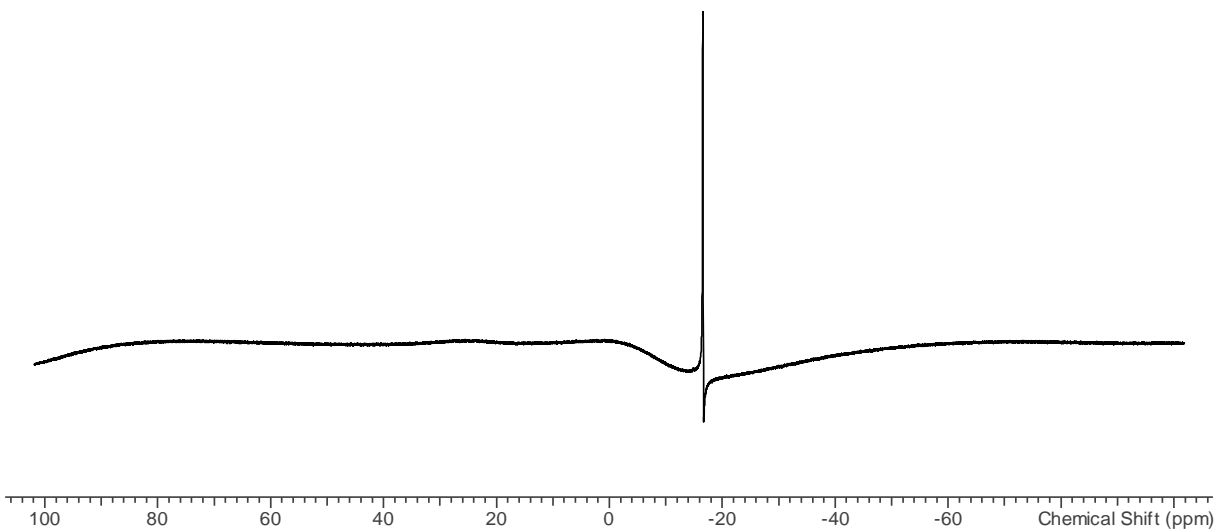
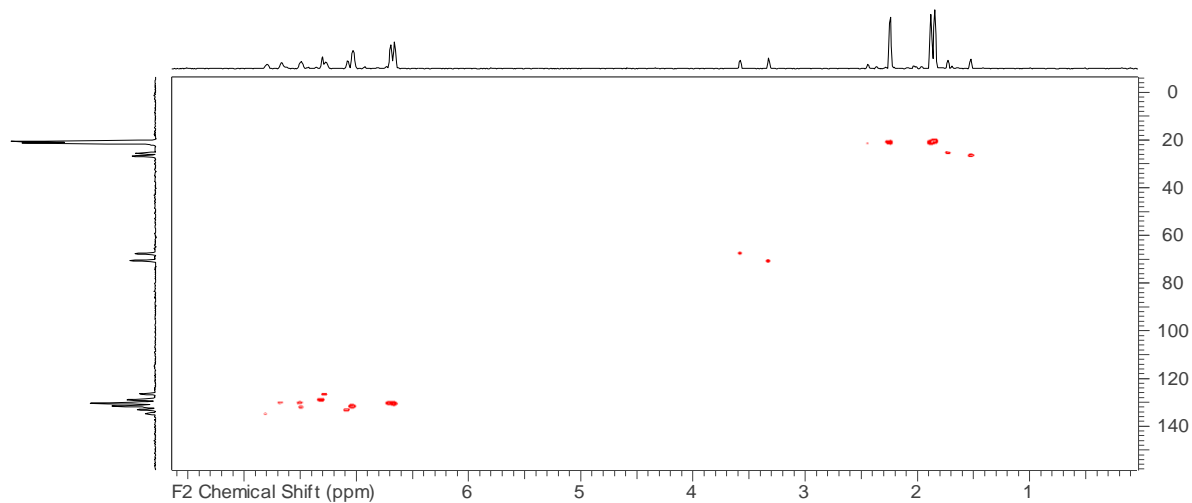
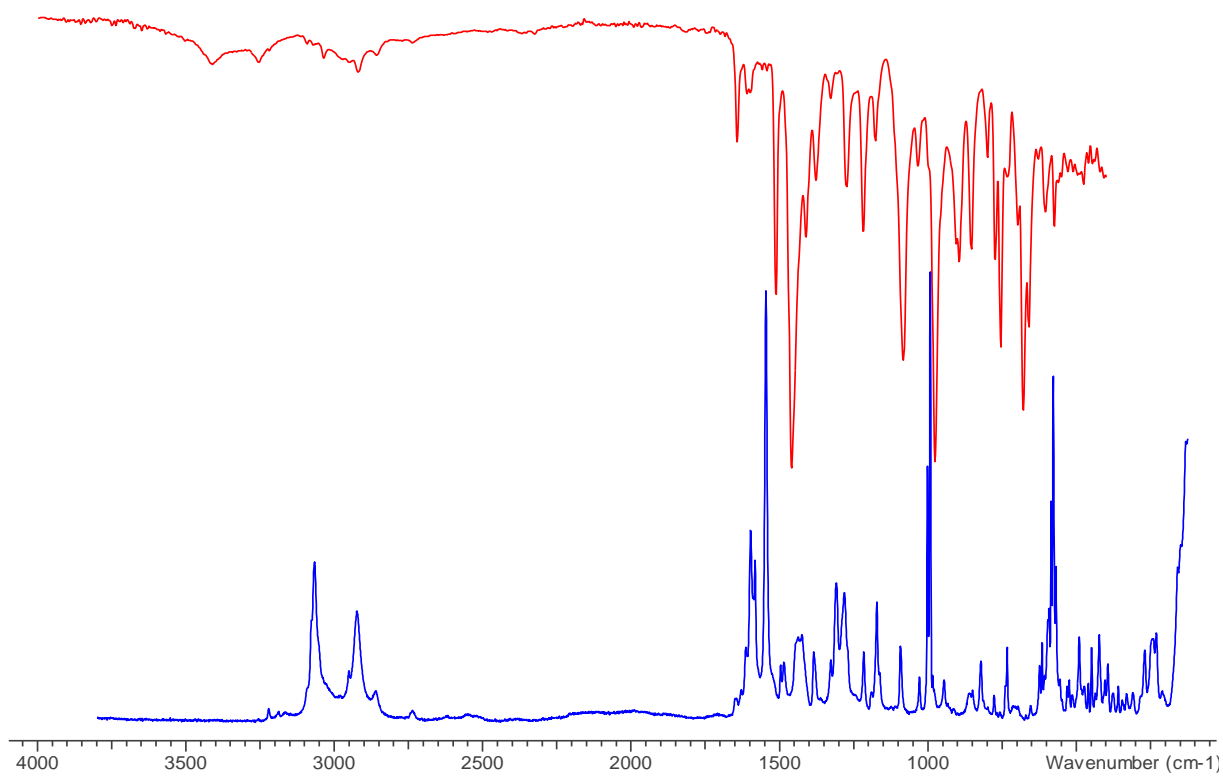


Abbildung 107  $^{11}\text{B}$ -NMR-Spektrum von **16** in THF- $\text{d}_8$ .



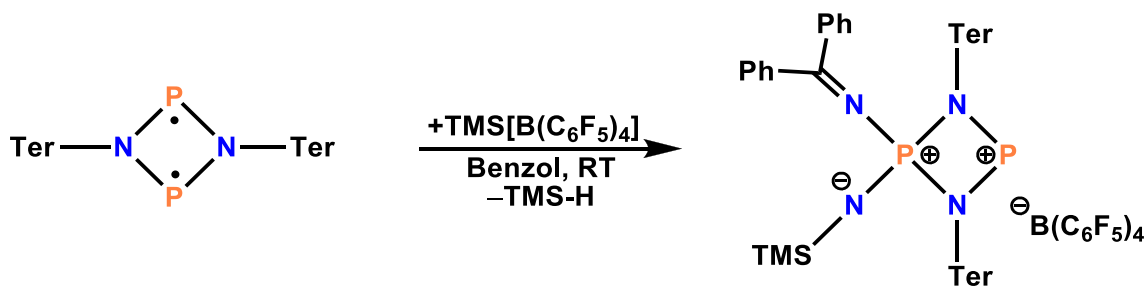


**Abbildung 108** HSQC-NMR-Spektrum von **16** in THF-d<sub>8</sub>.



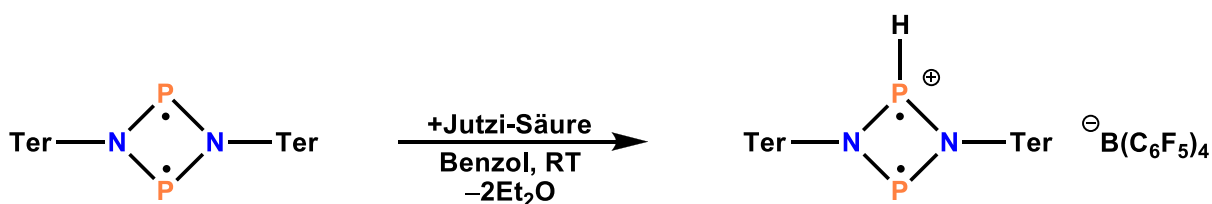
**Abbildung 109** Raman-Spektrum (blau) und IR-Spektrum (rot) von **16**.

### 5.5.16 [(TerNP)<sub>2</sub>(Ph<sub>2</sub>CN)TMSN][B(C<sub>6</sub>F<sub>5</sub>)<sub>4</sub>] (**17**)



47.4 mg Diphenyl-diazomethanaddukt (0.0933 mmol) und 43 mg TMS-H-TMS[B(C<sub>6</sub>F<sub>5</sub>)<sub>4</sub>] (0.0985 mmol) werden in einem Schlenkkolben vermengt. 2 ml Benzol werden bei Raumtemperatur zugegeben. Die klare Lösung teilte sich in zwei Phasen auf. Die obere Phase ist gelb und die untere tief rot und viskos. Einengen der Lösung bis fast nur noch die untere Phase vorliegt führt zu Bildung einer Kristallplatte in der unteren Phase über Nacht. Durch „*crystal-picking*“ können Kristalle für die Röntgenstrukturanalytik gewonnen werden. Die Qualität der Kristalle eignete sich nur für die Aufklärung der Atomverknüpfungen jedoch nicht für eine genauere Strukturaufklärung. Lösungsversuche in CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> führten zur schlagartigen Entfärbung und Zersetzung der Kristalle. Weitere Analytik ist daher bisher nicht möglich gewesen.

### 5.5.17 [(TerNP)<sub>2</sub>H][B(C<sub>6</sub>F<sub>5</sub>)<sub>4</sub>] (18)



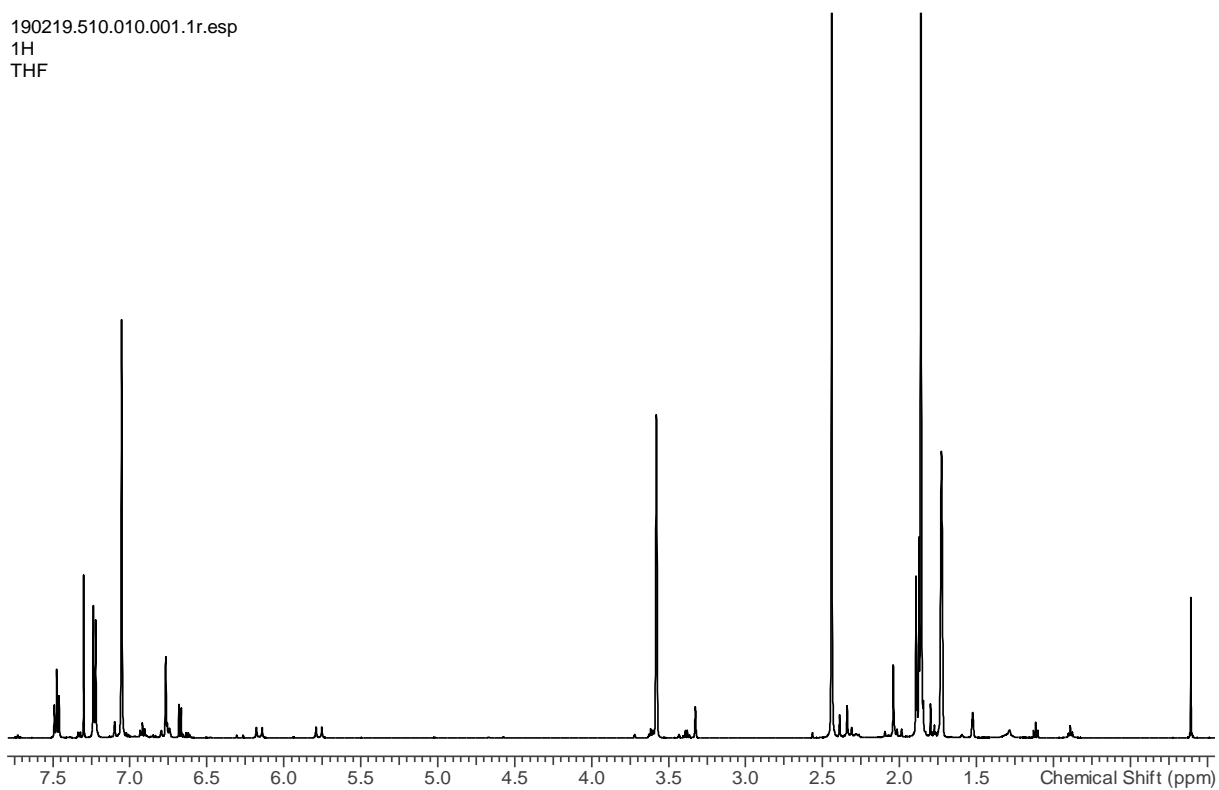
82 mg [P( $\mu$ -N<sub>2</sub>Ter)]<sub>2</sub> (0.11 mmol) und 115.5 mg Jutzi-Säure (0.14 mmol) werden in einem Schlenkkolben vermengt. 4 ml Benzol werden bei Raumtemperatur zugegeben. Die klare Lösung teilt sich in zwei Phasen auf. Die obere Phase ist gelb und die untere tief rot und viskos. Einengen der Lösung bis fast nur noch die untere Phase vorliegt führt zu Bildung von roten Kristallen in der unteren Phase über Nacht. Das Produkt bildet zwei Phasen mit Toluol und Benzol. Es ist unlöslich in Hexan und Pentan aber löslich in Fluorbenzol und Ether. NMR-Spektroskopie in deuteriertem THF ist möglich, führt jedoch bei längeren Messzeiten zur Polymerisation des THFs.

Ausbeute: 71 mg (0.05 mmol, 44 %) M(C<sub>72</sub>H<sub>51</sub>BF<sub>20</sub>P<sub>2</sub>N<sub>2</sub>) = 1397 g/mol

**<sup>1</sup>H-NMR** (298 K, C<sub>4</sub>D<sub>8</sub>O, 500.13 MHz): 1.86 (s, 24 H, *o*-CH<sub>3</sub>), 2.44 (s, 12 H, *p*-CH<sub>3</sub>), 5.97 (dd, 1 H, PH, <sup>3</sup>J(<sup>31</sup>P-<sup>1</sup>H) = 17 Hz, <sup>1</sup>J(<sup>31</sup>P-<sup>1</sup>H) = 195 Hz), 7.05 (s, 8 H, *m*-MesH), 7.23 (d, 4 H, *m*-ArH, <sup>3</sup>J(<sup>1</sup>H-<sup>1</sup>H) = 7.72 Hz), 7.48 (t, 2 H, *p*-ArH, <sup>3</sup>J(<sup>1</sup>H-<sup>1</sup>H) = 7.72 Hz). **<sup>11</sup>B-NMR** (298K, C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>F, 160.46 MHz): -16.1 (s). **<sup>13</sup>C-NMR** (298 K, C<sub>4</sub>D<sub>8</sub>O, 125.77 MHz): 20.07 (s, *o*-CH<sub>3</sub>), 21.6 (s, *p*-CH<sub>3</sub>), 130.9 (s), 131.4, 131.5 (s), 131.8 (s), 142.2 (s). **<sup>19</sup>F-NMR** (298K, C<sub>4</sub>D<sub>8</sub>O, 470.55 MHz): -132.7 (s(br)), -165.0 (t, *J* = 20.3 Hz), -168.5 (t, *J* = 18.3 Hz). **<sup>31</sup>P-NMR** (298 K, C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>F, 202.47 MHz): 168.9 (dd, 1 P, PH, <sup>1</sup>J(<sup>1</sup>H-<sup>31</sup>P) = 195 Hz, <sup>2</sup>J(<sup>31</sup>P-<sup>31</sup>P) = 50.7 Hz), 339.6 (dd, 1 P, PNP, <sup>2</sup>J(<sup>31</sup>P-<sup>31</sup>P) = 50.7 Hz, <sup>3</sup>J(<sup>1</sup>H-<sup>31</sup>P) = 17 Hz). **Raman (632 nm)**: 88 (5), 117 (4), 149 (3), 163 (3), 231 (3), 241 (3), 289 (3), 367 (3), 394 (3), 423 (4), 449 (3), 475 (3), 493 (4), 522 (10), 536 (4), 562 (4), 574 (4), 585 (4), 594 (5), 652 (3), 704 (3), 734 (3), 756 (3), 779 (4), 803 (3), 822 (3), 843 (4), 866 (4), 924 (3), 955 (3), 962 (3), 993 (5), 1009 (4), 1085 (4), 1094 (4), 1194 (3), 1230 (4), 1281 (8), 1290 (9), 1311 (5), 1334 (4), 1377 (4), 1424 (8), 1465 (4), 1482 (4), 1584 (5), 1612 (4), 1646 (4), 2277 (4), 2860 (3), 2925 (3), 2951 (3), 3069 (3). **IR (ATR cm<sup>-1</sup>)** 406 (w), 416 (w), 427 (w), 437 (w), 447 (w), 478 (w), 497 (w), 511 (w), 534 (w), 548 (w), 560 (m), 573 (m), 593 (w), 602 (m), 610 (m), 659 (m), 682 (m), 703 (w), 727 (w), 754 (m), 773 (m), 797 (m), 839 (m), 851 (m), 859 (m), 888 (w), 915 (m), 975 (vs), 1032 (w), 1084 (s), 1164 (vw), 1226 (m), 1276 (m), 1298 (w), 1339 (w), 1381 (m), 1418 (m), 1459 (vs), 1513 (m), 1541 (vw), 1558 (vw), 1568 (vw), 1611 (w), 1642 (w), 2739 (vw),

2854 (vw), 2918 (vw), 2924 (vw), 2980 (vw). **MS** (CI, pos., *Isobutan*) m/z (%): 330 (100)  
[TerNP]<sup>+</sup>, 386 (15). **EA** found (calc.): C 62.15 (61.91), H 3.95 (3.68), N 1.71 (2.01).

190219.510.010.001.1r.esp  
1H  
THF



**Abbildung 110** <sup>1</sup>H-NMR-Spektrum von **18** in THF-d<sub>8</sub>.

190219.510.014.001.1r.esp  
13C  
THF

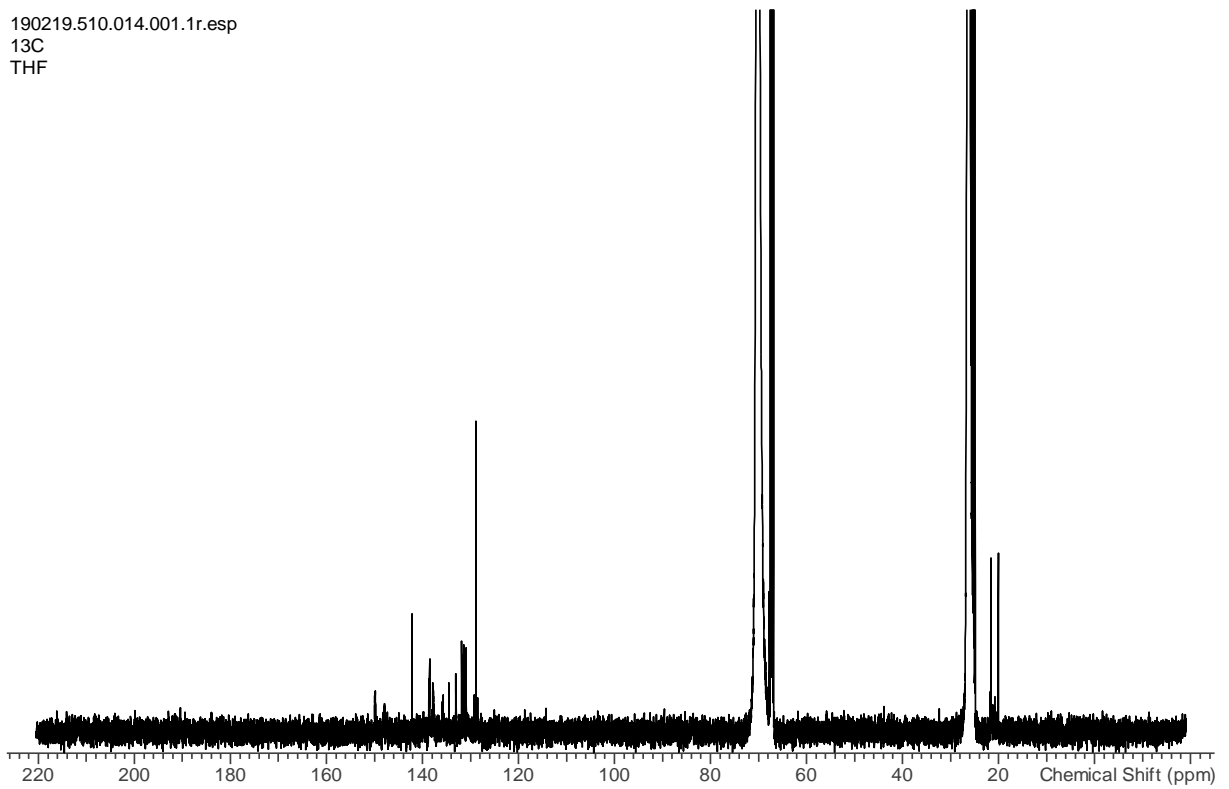


Abbildung 111  $^{13}\text{C}$ -NMR-Spektrum von **18** in THF- $d_8$ .

190211.521.010.001.1r.esp  
31P  
None

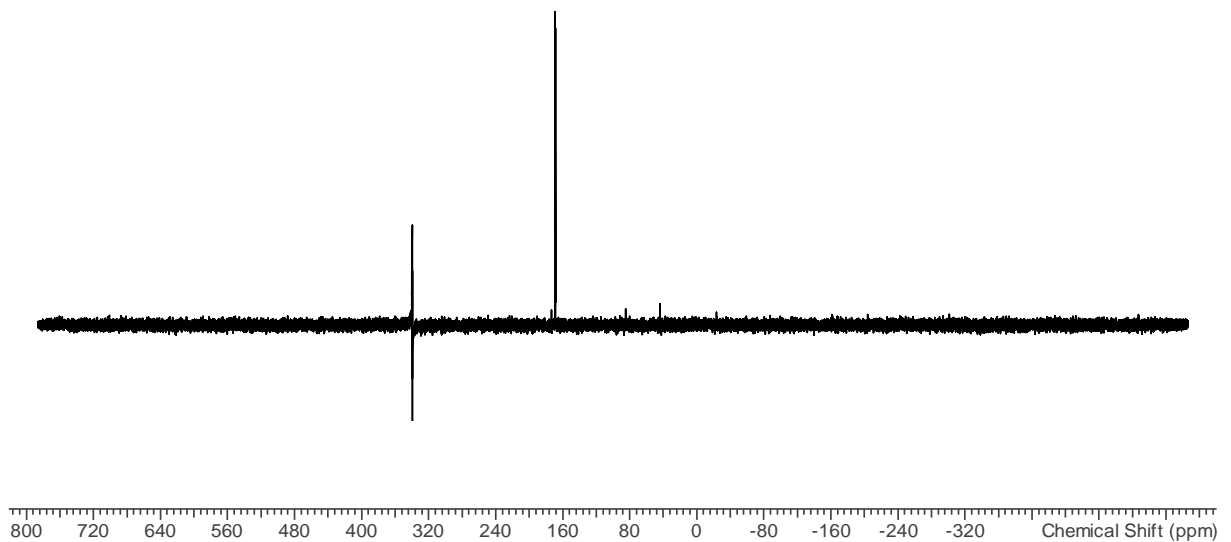


Abbildung 112  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum von **18** in THF- $d_8$ .

190219.510.013.001.1r.esp  
19F  
THF

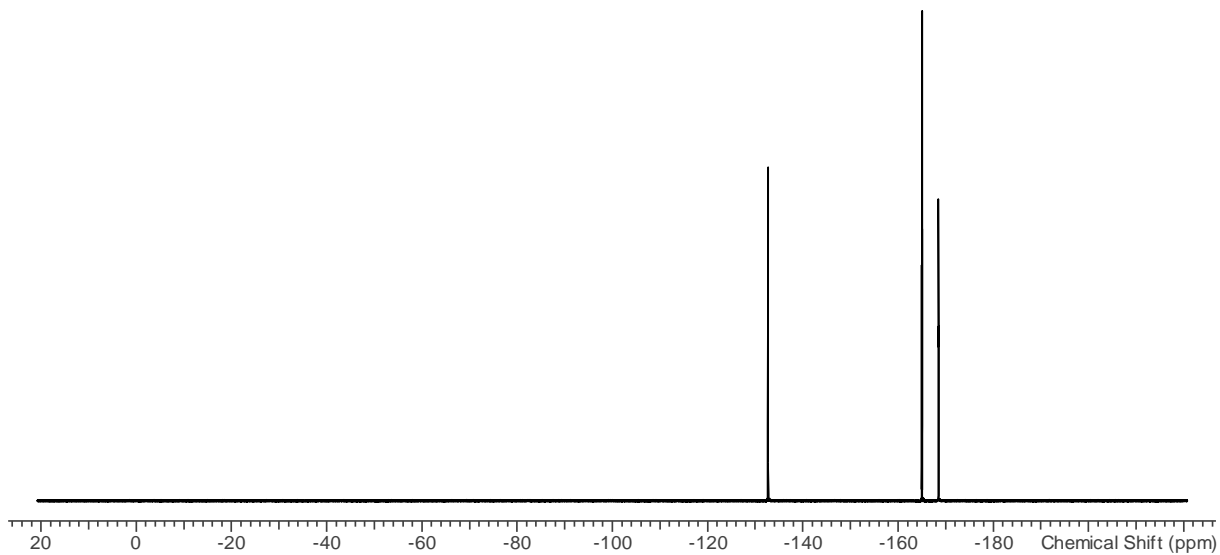


Abbildung 113  $^{19}\text{F}$ -NMR-Spektrum von **18** in THF- $d_8$ .

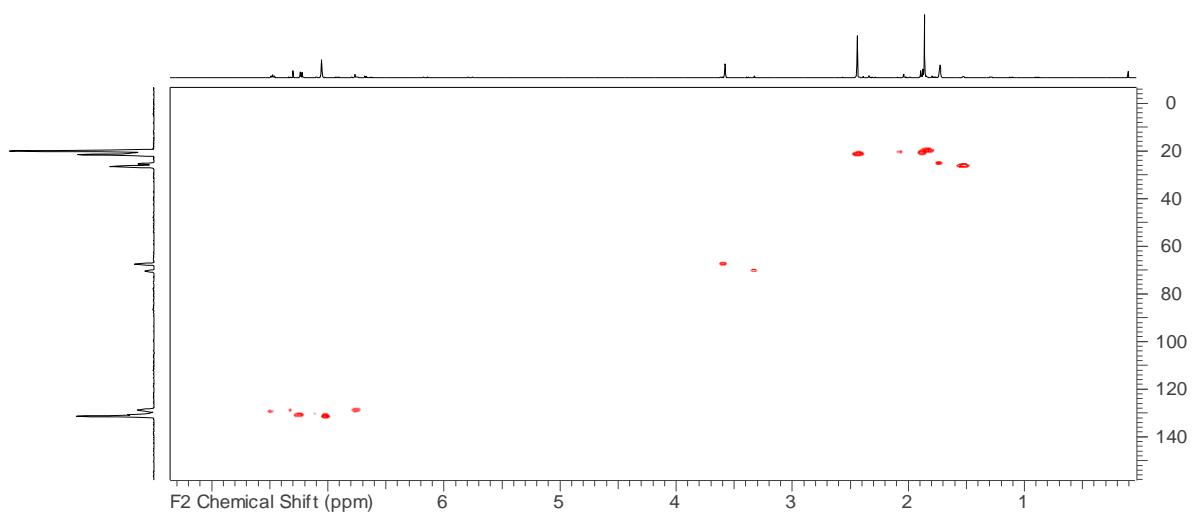
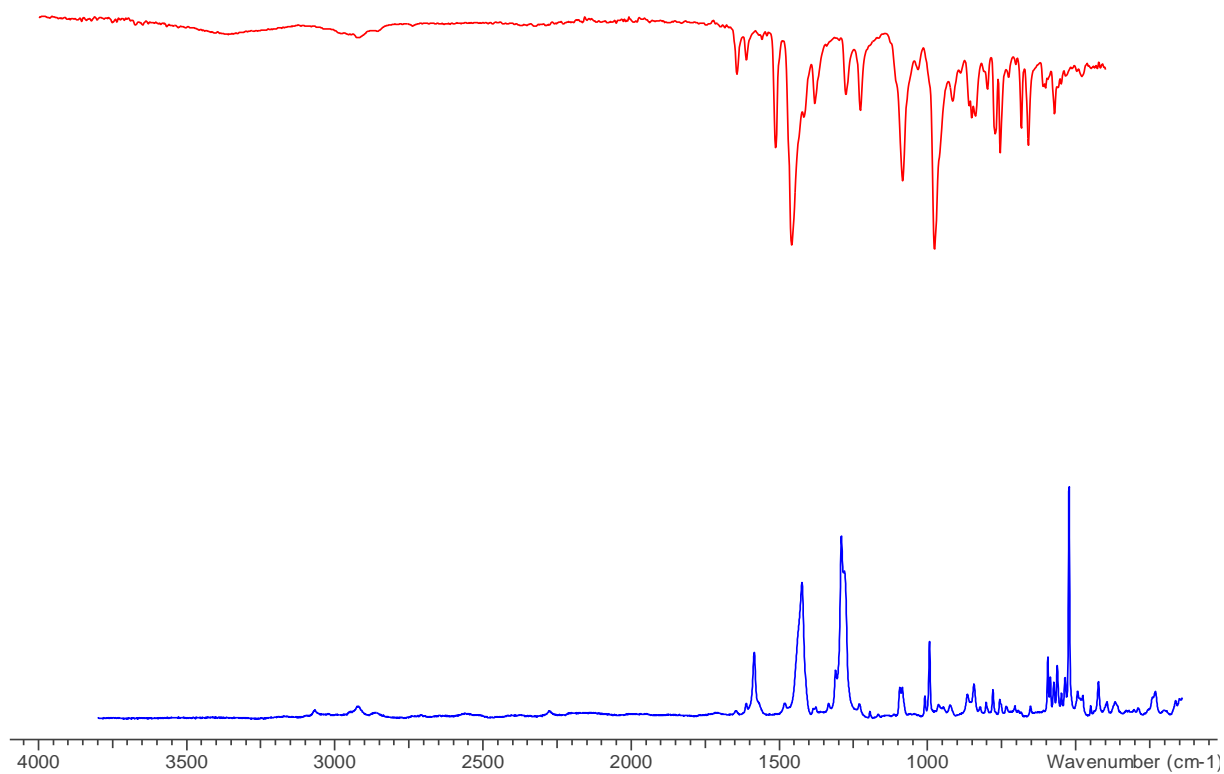
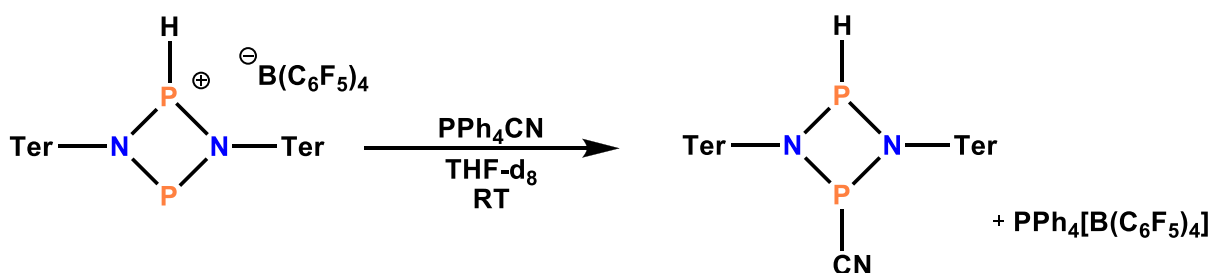


Abbildung 114 HSQC-NMR-Spektrum von **18** in THF- $d_8$ .



**Abbildung 115** Raman-Spektrum (blau) und IR-Spektrum (rot) von **18**.

### 5.5.18 [HP( $\mu$ -NTer)<sub>2</sub>PCN] (19)



**NMR-Versuch:** 16 mg [HP( $\mu$ -NTer)<sub>2</sub>P][B(C<sub>6</sub>F<sub>5</sub>)<sub>4</sub>] (0.011 mmol) werde mit 4 mg PPh<sub>4</sub>CN (0.011 mmol) in ein NMR-Rohr gegeben. Anschließend wird das Gemenge mit 0.5 ml deuteriertem THF suspendiert. Es kommt zu einer Entfärbung der Suspension und im <sup>31</sup>P-NMR-Spektrum können die charakteristischen Signale des HCN-Adduktes beobachtet werden. (siehe unten)

**Synthese mit HCN:** 154 mg [P( $\mu$ -NTer)]<sub>2</sub> (0.21 mmol) wird auf -10 °C abgekühlt und 0.5 ml, 0.725 mg pures HCN (27 mmol) wird per Spritze hinzugegeben. Nach der Zugabe der HCN entfärbt sich die Reaktionsmischung und resultiert in einer farblosen Suspension. Alle flüchtigen Bestandteile werden im Vakuum für 1 h bei 25 °C entfernt. Kristalle für die Röntgenstrukturanalytik können aus einer gesättigten Lösung in Benzol durch Abkühlen von 40 °C auf Raumtemperatur über Nacht erhalten werden. Die Strukturaufklärung zeigt die Bildung von [HP( $\mu$ -NTer)<sub>2</sub>PCN]. Die Kristalle werden für 2h bei 40 °C im Vakuum getrocknet.

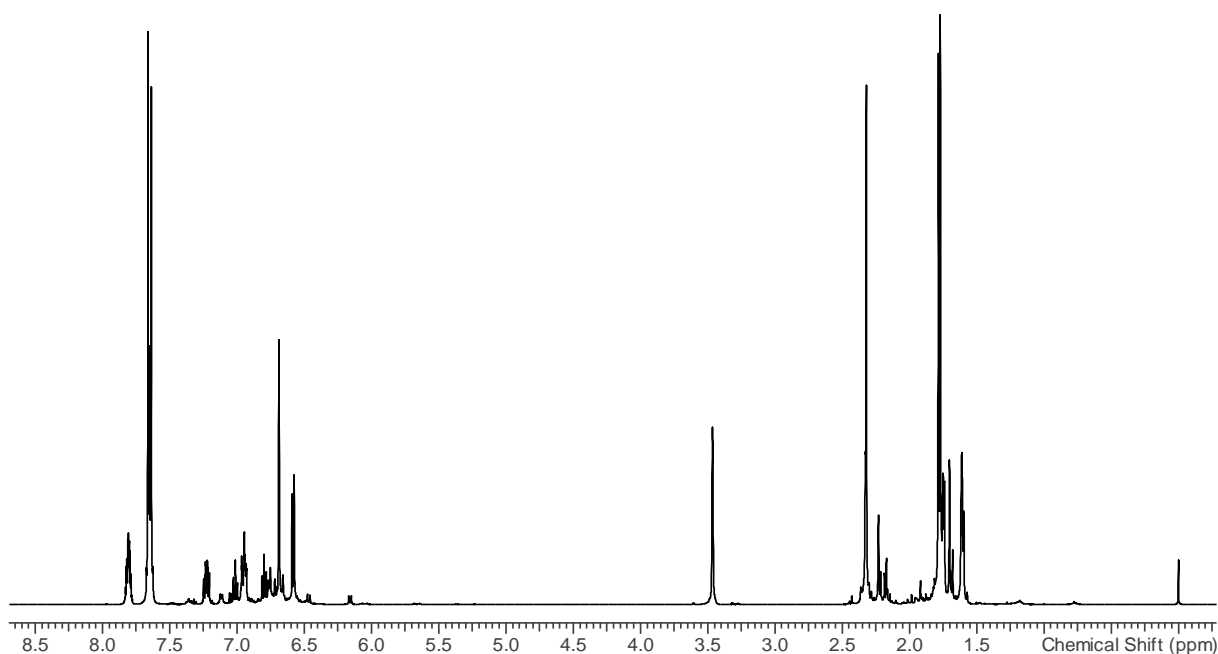
Ausbeute: 112 mg (0.15 mmol, 70 %) M(C<sub>49</sub>H<sub>51</sub>P<sub>2</sub>N<sub>3</sub>) = 743.91 g/mol

<sup>1</sup>H-NMR (298 K, C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>, 500.13 MHz):  $\delta$  = 2.07 (s, 6H, *o*-CH<sub>3</sub>), 2.10 (s, 6H, *o*-CH<sub>3</sub>), 2.29 (s, 6H, *p*-CH<sub>3</sub>), 6.67 (d, 2H, *m*-CH, <sup>3</sup>J(<sup>1</sup>H,<sup>1</sup>H) = 7.5 Hz), 6.75 (s, 2H, *m*-MesH), 6.76 (t, 1H, *p*-ArH, <sup>3</sup>J(<sup>1</sup>H,<sup>1</sup>H) = 7.5 Hz), 6.77 (s, 2H, *m*-MesH), 6.77 (dd, 1H, HP( $\mu$ -NTer)<sub>2</sub>PCl, <sup>1</sup>J(<sup>1</sup>H,<sup>31</sup>P) = 154 Hz, <sup>3</sup>J(<sup>1</sup>H,<sup>31</sup>P) = 9.5 Hz). <sup>13</sup>C-NMR (298 K, C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>, 62.9 MHz):  $\delta$  = 21.3 (d, *o*-CH<sub>3</sub>, J(<sup>13</sup>C,<sup>31</sup>P) = 1.4 Hz), 21.6 (d, *o*-CH<sub>3</sub>, J(<sup>13</sup>C,<sup>31</sup>P) = 4.6 Hz), 21.9 (s, *p*-CH<sub>3</sub>), 122.7 (s, CH), 129.3 (s, CH), 129.4 (s, CH), 130.8 (s, CH), 132.1 (s), 135.1 (s), 137.8 (s), 138.4 (s), 139.2 (d, J(<sup>13</sup>C,<sup>31</sup>P) = 1.3 Hz), 139.3 (dd, CN, <sup>1</sup>J(<sup>13</sup>C,<sup>31</sup>P) = 3.7 Hz, <sup>3</sup>J(<sup>13</sup>C,<sup>31</sup>P) = 1.8 Hz), 139.4 (d, J(<sup>13</sup>C,<sup>31</sup>P) = 2.3 Hz). <sup>14</sup>N{<sup>1</sup>H} NMR (298 K, C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>, 36.1 MHz):  $\delta$  = not observed. <sup>31</sup>P{<sup>1</sup>H}-NMR (298 K, C<sub>7</sub>D<sub>8</sub>, 101.3 MHz):  $\delta$  = 163.9 (d, HP( $\mu$ -NTer)<sub>2</sub>PCN, <sup>2</sup>J(<sup>31</sup>P,<sup>31</sup>P) = 33 Hz), 185.0 (d, HP( $\mu$ -NTer)<sub>2</sub>PCN, <sup>2</sup>J(<sup>31</sup>P,<sup>31</sup>P) = 33 Hz). <sup>31</sup>P-NMR (298 K, C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>, 202.5 MHz):  $\delta$  = 163.9 (d, HP( $\mu$ -NTer)<sub>2</sub>PCN, <sup>2</sup>J(<sup>31</sup>P,<sup>31</sup>P) = 33 Hz), 185.0 (dd, HP( $\mu$ -NTer)<sub>2</sub>PCN, <sup>1</sup>J(<sup>31</sup>P,<sup>1</sup>H) = 152



Hz,  $^2J(^{31}\text{P}, ^{31}\text{P}) = 33$  Hz). **Raman (633 nm):** 2950 (3), 2893 (8), 2783 (1), 1443 (1), 1405 (1), 1265 (1), 1244 (1), 1052 (1), 869 (1), 837 (1), 746 (1), 690 (2), 628 (10), 601 (2), 497 (1), 464 (1), 424 (2), 401 (1). **IR (ATR  $\text{cm}^{-1}$ )** 2943 (w), 2912 (w), 2853 (w), 1610 (w), 1581 (w), 1484 (w), 1453 (w), 1412 (s), 1375 (m), 1292 (w), 1235 (s), 1165 (w), 1078 (m), 1031 (w), 1006 (w), 969 (w), 946 (w), 903 (m), 876 (vs), 845 (s), 818 (m), 796 (m), 765 (w), 752 (m), 738 (m), 705 (w), 693 (m), 649 (w), 589 (w), 573 (w), 557 (m), 548 (m), 493 (s), 435 (m), 404 (m). **MS** ( $\text{Cl}^+$ ,  $m/z$  (%)): 716 (100)  $[\text{P}(\mu\text{-NTer})_2]^+$ , 687 (77)  $(\mu\text{-NTer})_2\text{PH}^+$ , 743 (18)  $\text{HP}(\mu\text{-NTer})_2\text{PCN}^+$ , 330 (23)  $[\text{TerNH}_3]^+$ . **EA** calc. (found),: C, 79.11 (79.72); H, 6.91 (6.78); N, 5.65 (5.48). **MP.**  $>45$  °C (dec.).

191008.503.010.001.1r.esp  
 $^1\text{H}$   
 THF



**Abbildung 116**  $^1\text{H}$ -NMR-Spektrum von **19** in  $\text{THF-d}_8$ .

191008.503.011.001.1r.esp  
31P  
THF

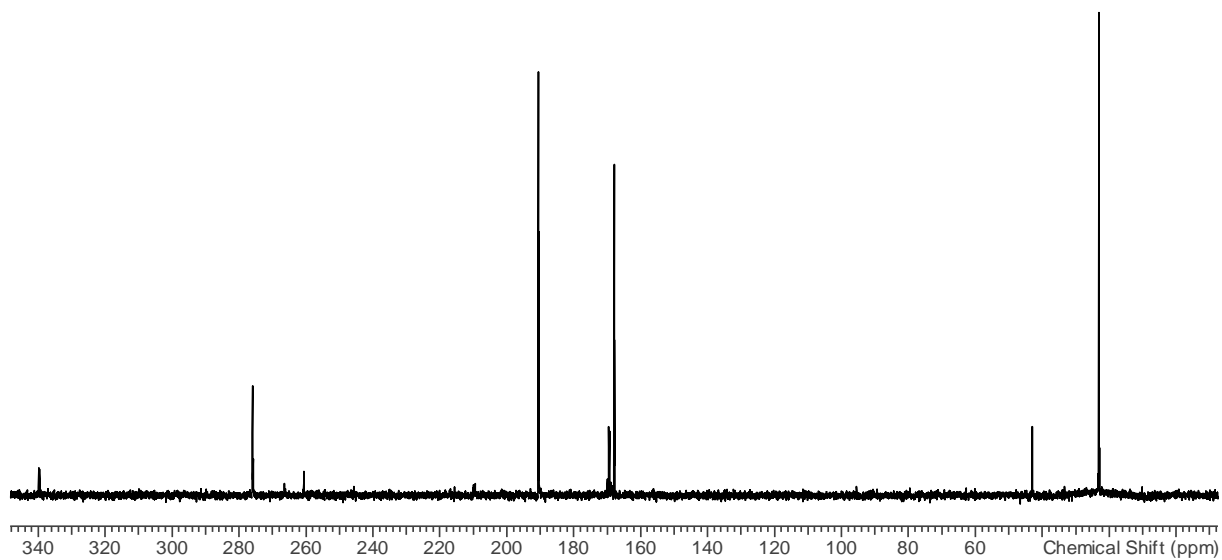
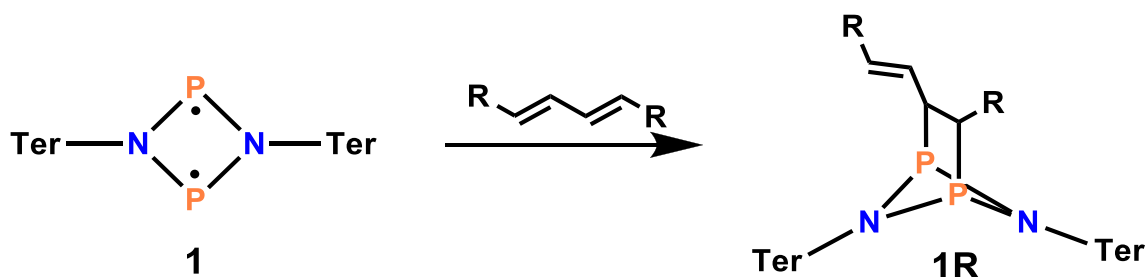


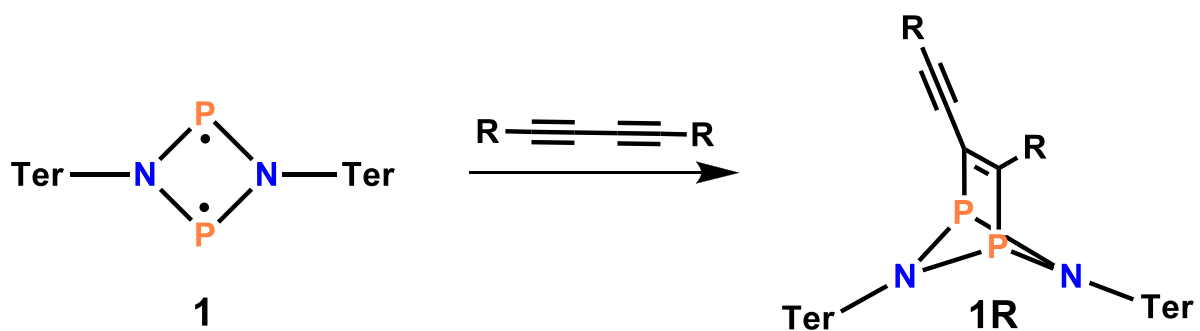
Abbildung 117  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektrum von **19** in THF- $\text{d}_8$ .

## 5.6 Quantenchemische Details



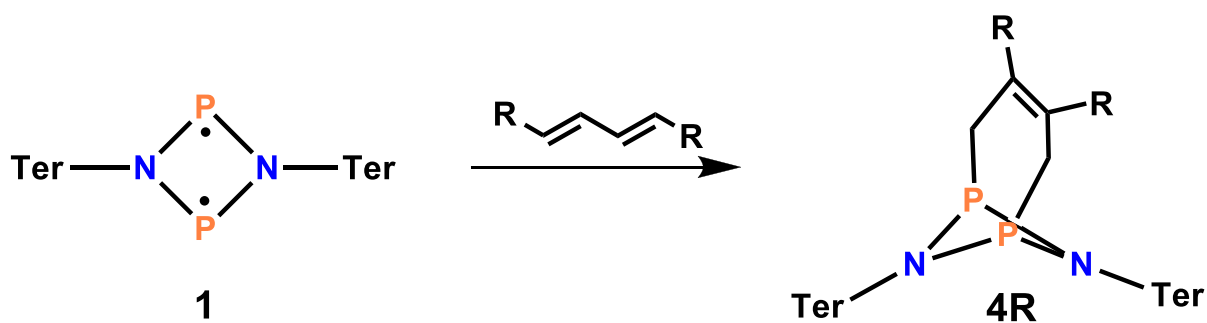
**Tabelle 20:** Reaktions-Energien der [2+2]-Alkenaddukte (pbe1pbe/def2svp) empiricaldispersion=gd3bj, in kcal·mol<sup>-1</sup>.

[2+2]-Addukt	$\Delta E^{\text{tot}}$	$\Delta H_{298}^{\ominus}$	$\Delta G_{298}^{\ominus}$
Ethen	-45.62	-43.51	-29.43
2-Buten	-33.90	-31.85	-14.79
2,3-Dimethylbutadien	-32.80	-30.94	-12.39
1,3-Butadien	-37.72	-35.90	-20.23
Diphenyl-1,3-butadien	-35.54	-33.78	-12.68
2,4-Hexadien	-30.44	-28.24	-10.94
1,3-Cyclohexadien	-44.00	-41.56	-25.00
1,4-Cyclohexadien	-36.45	-34.19	-17.01
1,7-Octadien	-41.99	-40.43	-20.07
2,5-Dimethyl-2,4-hexadien	-29.81	-27.69	-7.95



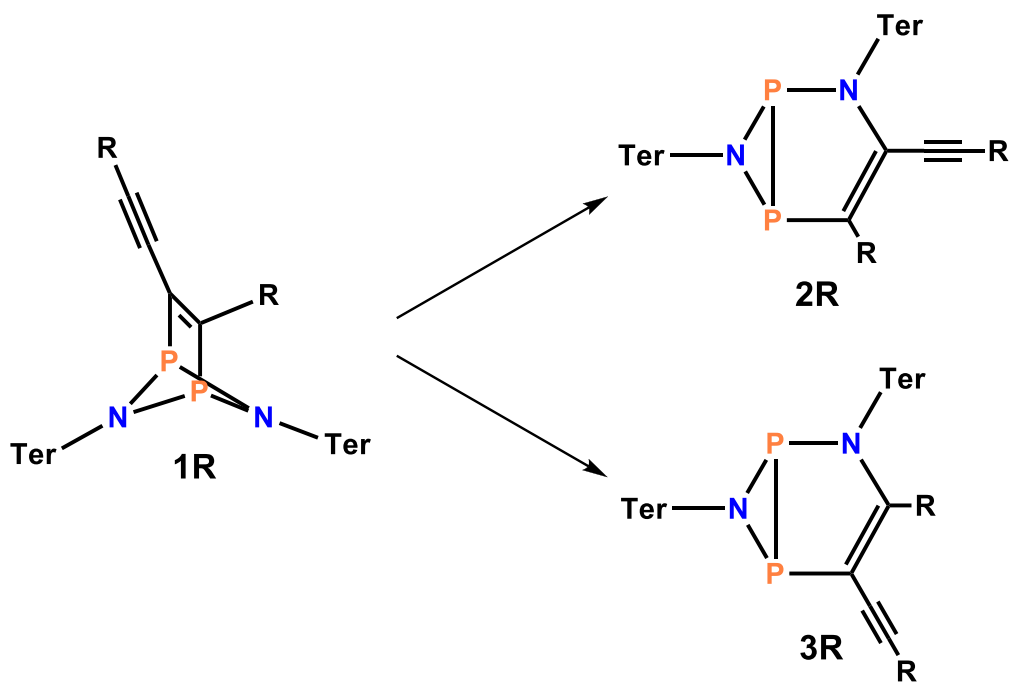
**Tabelle 21:** Reaktions-Energien der [2+2]-Alkinaddukte (pbe1pbe/def2svp) empiricaldispersion=gd3bj, in  $\text{kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$ .

[2+2]-Addukt	$\Delta E^{\text{tot}}$	$\Delta H_{298}^{\ominus}$	$\Delta G_{298}^{\ominus}$
Acetylen	-52.74	-50.72	-37.70
Diphenylacetylen	-56.98	-54.48	-35.91
1-Pentin	-51.22	-49.17	-32.74
2-Butin	-47.77	-45.48	-31.76
1,3-Butadiin	-52.94	-51.26	-38.17
2,4-Hexadiin	-49.93	-48.23	-32.60
Diphenyl-1,3-butadiin	-59.43	-57.02	-40.23
Arin	-110.49	-107.89	-92.34



**Tabelle 22:** Reaktions-Energien der [4+2]-Alkenaddukte (pbe1pbe/def2svp) empiricdispersion=gd3bj, in kcal·mol<sup>-1</sup>.

[4+2]-Addukt	$\Delta E^{\text{rot}}$	$\Delta H_{298}^{\ominus}$	$\Delta G_{298}^{\ominus}$
2,3-Dimethylbutadien	-41.35	-39.49	-23.73
1,3-Butadien	-43.56	-41.56	-25.78
Diphenyl-1,3-butadien	-33.23	-30.81	-8.03
2,4-Hexadien	-32.22	-29.50	-11.52



**Tabelle 23:** Reaktions-Energien der Insertions-Produkte (pbe1pbe/def2svp) empiricaldispersion=gd3bj, in kcal·mol<sup>-1</sup>.

Insertion	$\Delta E^{\text{tot}}$	$\Delta H_{298}^{\ominus}$	$\Delta G_{298}^{\ominus}$
Acetylen	-62.49	-59.53	-47.96
Diphenylacetylen	-52.15	-49.54	-32.41
1-Pentin1	-60.92	-58.16	-41.12
1-Pentin2	-56.33	-53.44	-38.10
2-Butin	-53.06	-50.09	-35.68
1,3-Butadiin1	-53.91	-51.62	-39.56
1,3-Butadiin2	-59.89	-57.40	-44.71
2,4-Hexadiin1	-50.88	-48.66	-34.02
2,4-Hexadiin2	-54.25	-51.88	-36.85
Diphenyl-1,3-butadiin1	-58.54	-55.64	-39.02
Diphenyl-1,3-butadiin2	-55.90	-53.07	-35.98
Arin	-113.08	-109.91	-92.54

## Optimierte Strukturen der berechneten Produkte (pbe1pbe/def2svp)

### [2+2]-Addukte (Alkene)

Ethen

P,0,-1.2887708333,0.3248891718,-0.1983169019  
P,0,1.1443932929,-0.32238802,-0.7729771974  
N,0,-0.2803373458,-1.1014475559,-0.091336835  
C,0,-1.1389081612,0.4653872017,-2.079287349  
N,0,0.3382655955,1.0834962773,-0.0316891916  
C,0,-0.5464308867,-2.4458050786,0.1360550599  
C,0,0.6281215871,2.4379396617,-0.1849060652  
C,0,-1.8160253638,-3.0134272918,-0.1297705926  
C,0,0.4678804983,-3.2703298856,0.682084733  
C,0,1.8757017513,2.8872400411,-0.6887721713  
C,0,-0.3231053609,3.4181836717,0.2072018409  
C,0,-2.023141553,-4.3790241813,0.083043773  
C,0,-2.9609618914,-2.1917638442,-0.6116547532  
C,0,0.224270087,-4.6348908718,0.8622065131  
C,0,1.7591558766,-2.7255201591,1.1864339975  
C,0,2.1221471989,4.2556183018,-0.8286818906  
C,0,2.9628867093,1.9350524431,-1.0373543351  
C,0,-0.0379971191,4.7754388337,0.0446099055  
C,0,-1.6194071168,3.0331476627,0.825413665  
H,0,-3.01361582,-4.7895693701,-0.1304715577  
C,0,-1.0083072305,-5.2022939698,0.5576242708  
C,0,-3.7812753107,-1.5109415044,0.3090354006  
C,0,-3.263319512,-2.1522412993,-1.9880478887  
H,0,1.0221116154,-5.2478454354,1.2899758377  
C,0,2.9712719954,-3.0179042801,0.5360073368  
C,0,1.7648389773,-1.9920296771,2.3913978409  
H,0,3.0966653034,4.5630074572,-1.2169320337  
C,0,1.1748673416,5.209801192,-0.4778001018  
C,0,3.7134979091,1.3371766127,-0.0021995601  
C,0,3.2849774528,1.6712443658,-2.3835541439  
H,0,-0.7954675907,5.4990225082,0.3568700589  
C,0,-2.8251899237,3.1660785471,0.1128464348  
C,0,-1.6316486042,2.5324846476,2.1473705068  
H,0,-1.1842882201,-6.2682722963,0.7159276731  
C,0,-4.8563272243,-0.7573101959,-0.1716280652  
C,0,-3.4994184372,-1.5479251175,1.7816517894  
C,0,-4.3435915848,-1.3852024993,-2.4256076125  
C,0,-2.4255406123,-2.9182727064,-2.9703712202  
C,0,4.1716746529,-2.6096041948,1.1219405357  
C,0,2.9850011263,-3.6951435033,-0.8033187575  
C,0,2.9863713037,-1.5936705677,2.9352618395  
C,0,0.4803933836,-1.6416950101,3.0840163896  
H,0,1.3848972935,6.2749659478,-0.5927171008  
C,0,4.7336884648,0.4481508655,-0.332772498  
C,0,3.3918889884,1.6210358727,1.4336860208  
C,0,4.2846599989,0.73724982,-2.6682712318

C,0,2.5992840231,2.3938658594,-3.5086548178  
C,0,-4.0185117657,2.7535077703,0.7168497323  
C,0,-2.8687731173,3.7297641143,-1.2794527867  
C,0,-2.8437698254,2.1483722855,2.7136444873  
C,0,-0.3547533807,2.3842617913,2.9198129925  
H,0,-5.4818315939,-0.2188020535,0.5449005695  
C,0,-5.1425587124,-0.6641940465,-1.5324083715  
H,0,-4.4277541759,-1.4481956932,2.3620232971  
H,0,-2.8434133453,-0.7040229233,2.0573563058  
H,0,-2.9947317208,-2.4761021948,2.0813005068  
H,0,-4.5649947959,-1.3444141643,-3.4965263527  
H,0,-1.3540159919,-2.7132108611,-2.8279089765  
H,0,-2.6955582169,-2.668513605,-4.0059150883  
H,0,-2.5481239869,-4.0045839971,-2.8364662137  
H,0,5.1121888792,-2.8423657644,0.6135392491  
C,0,4.2038403591,-1.9062143398,2.3255139411  
H,0,4.0098478795,-3.9471410845,-1.1103125875  
H,0,2.561075967,-3.022590596,-1.5689286674  
H,0,2.3822089418,-4.6138553657,-0.8183635774  
H,0,2.9858496597,-1.0311269449,3.8740672825  
H,0,-0.1499155498,-2.5309427591,3.237364658  
H,0,-0.1060795114,-0.9383423158,2.4722894226  
H,0,0.6698072356,-1.1745268521,4.0602976585  
H,0,5.3118491451,-0.0111624222,0.4713264008  
C,0,5.0118333557,0.1062830404,-1.6575549274  
H,0,4.204806447,1.2910283757,2.0936499409  
H,0,2.4819183115,1.0761937334,1.7335766162  
H,0,3.2031197172,2.6907436038,1.6046316113  
H,0,4.5097997771,0.5060875936,-3.7139939236  
H,0,1.5563204945,2.6426897651,-3.2685501111  
H,0,2.6211499985,1.8009886207,-4.4345528675  
H,0,3.1049586806,3.3507906678,-3.7205451679  
H,0,-4.9515816451,2.8332207809,0.1507542658  
C,0,-4.0509939897,2.2423748862,2.0112893353  
H,0,-3.6594720216,3.2472964885,-1.8729016739  
H,0,-1.9120363766,3.6101432172,-1.8045710747  
H,0,-3.085998926,4.8107565427,-1.2604229172  
H,0,-2.8486676242,1.7587053189,3.7363690226  
H,0,0.2403604499,3.3094033991,2.8943656519  
H,0,0.27113582,1.5924777318,2.4780520691  
H,0,-0.5533011619,2.1220445905,3.9681363435  
C,0,-6.2564155959,0.2123093102,-2.0260506794  
C,0,5.5043974697,-1.4986346765,2.9550867995  
C,0,6.0449944872,-0.933010611,-1.9790999028  
C,0,-5.3398558047,1.8193709078,2.6529796587  
H,0,-7.0628885739,0.2977619148,-1.2832630209  
H,0,-6.6894785325,-0.1674197768,-2.962886145  
H,0,-5.8876864413,1.2329227124,-2.2263874352  
H,0,5.6965183828,-2.0700239188,3.878012023  
H,0,5.5020019667,-0.4331067024,3.2343394229  
H,0,6.353148383,-1.6703196042,2.2774260369



H,0,6.8605944706,-0.9329571806,-1.2411460612  
H,0,6.4815977018,-0.7805161019,-2.9767409015  
H,0,5.5945617308,-1.9399391758,-1.9670624248  
H,0,-5.2767711658,0.7880402188,3.03350545  
H,0,-6.1801844221,1.8717102486,1.9462722371  
H,0,-5.5852866132,2.4638588077,3.5125743154  
C,0,0.247302183,-0.0731976051,-2.4237792148  
H,0,0.8305154577,0.5960567195,-3.0683794835  
H,0,-1.2441043385,1.5331267386,-2.3252089866  
H,0,-1.9664278203,-0.0725953466,-2.558724733  
H,0,0.2144936665,-1.05821866,-2.9154155808

## 2-Buten

P,0,-1.3013789142,0.1589839837,-0.303445165  
P,0,1.2422852671,-0.1347621842,-0.6186882746  
N,0,-0.1222747258,-1.1328762952,-0.0810657828  
C,0,-0.9494443019,0.4323548453,-2.1564500628  
N,0,0.1762543973,1.1177930774,0.0526785724  
C,0,-0.2173846302,-2.5121191569,0.057602336  
C,0,0.298842521,2.5026643952,0.117206801  
C,0,-1.4462903077,-3.2085142582,-0.0905041846  
C,0,0.9347619278,-3.2698310378,0.3982680835  
C,0,1.5383884699,3.1684240399,-0.0891887002  
C,0,-0.8300155618,3.3025343188,0.4487025035  
C,0,-1.4823697276,-4.6006606393,0.0362093831  
C,0,-2.7498575482,-2.5381525271,-0.3449903157  
C,0,0.8524599128,-4.6625533254,0.4921896381  
C,0,2.2494382872,-2.6890983572,0.7942749705  
C,0,1.6067776127,4.5624563443,-0.0017156861  
C,0,2.8136806569,2.4536241879,-0.3595343501  
C,0,-0.7132762015,4.6937519491,0.5098399629  
C,0,-2.1600007797,2.7447118294,0.8200556573  
H,0,-2.4499532453,-5.096770721,-0.0753692653  
C,0,-0.3423865282,-5.3448255941,0.3052658631  
C,0,-3.4342466798,-1.9029068723,0.7134113379  
C,0,-3.3707935412,-2.6705852161,-1.6021181439  
H,0,1.7611688764,-5.2077823249,0.7608788577  
C,0,3.3807730442,-2.8642884685,-0.024925746  
C,0,2.3905959573,-2.1277265613,2.0778259871  
H,0,2.5811506273,5.0332727357,-0.1533667404  
C,0,0.493723987,5.3411120573,0.2824132917  
C,0,3.4409238608,1.729406178,0.6792013688  
C,0,3.4672985742,2.6029934595,-1.5995505903  
H,0,-1.605140979,5.2677950172,0.7742869558  
C,0,-3.2683153215,2.9168888698,-0.0319928321  
C,0,-2.3321244897,2.1473355444,2.086419914  
H,0,-0.3890826364,-6.4315325702,0.3985000899  
C,0,-4.6937751956,-1.3572227409,0.4733152289  
C,0,-2.8207336945,-1.812659477,2.0780753727  
C,0,-4.6240049008,-2.0873372602,-1.8059126746

C,0,-2.7269871609,-3.4618530869,-2.7061492233  
C,0,4.6394702185,-2.5279104756,0.474314241  
C,0,3.2375048606,-3.3836781925,-1.4265449337  
C,0,3.6683878124,-1.8034800625,2.538167336  
C,0,1.1882702312,-1.8931669411,2.9438690123  
H,0,0.5700218937,6.4280727615,0.3484859062  
C,0,4.6678945601,1.1186383925,0.4357206935  
C,0,2.8040173259,1.6238606005,2.0323121449  
C,0,4.6761827394,1.9331572412,-1.8137596268  
C,0,2.9488421658,3.5188513315,-2.6733486678  
C,0,-4.528236003,2.4929464971,0.3986018422  
C,0,-3.1231800784,3.5572823586,-1.3836452366  
C,0,-3.6095192352,1.7520177734,2.4811669644  
C,0,-1.1584468091,1.9279491676,2.9932339685  
H,0,-5.2175307627,-0.8671211156,1.2958658999  
C,0,-5.2965984346,-1.4152984427,-0.785057841  
H,0,-2.3718253278,-2.7690249753,2.3840762749  
H,0,-3.5655936394,-1.5112564419,2.8267799534  
H,0,-2.0169608637,-1.056989153,2.0930333232  
H,0,-5.0909965005,-2.168954994,-2.7922108301  
H,0,-1.6371690054,-3.3197017853,-2.7342499902  
H,0,-3.147381858,-3.191582104,-3.6852929365  
H,0,-2.8922234227,-4.5422199255,-2.5629362996  
H,0,5.5167648178,-2.6777694859,-0.1623451565  
C,0,4.8092856412,-2.0200126885,1.7637694926  
H,0,4.1974330674,-3.3514460719,-1.9604578381  
H,0,2.5108744524,-2.7813629029,-1.9957162143  
H,0,2.8661107318,-4.4193755699,-1.4487985652  
H,0,3.7746194966,-1.3843204705,3.5434408895  
H,0,0.621042844,-2.8237264607,3.101818096  
H,0,0.4964047837,-1.1837180315,2.4624593181  
H,0,1.4748754183,-1.4879328184,3.9239595967  
H,0,5.1488094648,0.5698068084,1.2463713855  
C,0,5.2893415758,1.1803547087,-0.8138356512  
H,0,3.5183203673,1.2445669415,2.7746060129  
H,0,1.9487105426,0.9291577901,2.0096022388  
H,0,2.4166955755,2.5961519678,2.3713793468  
H,0,5.1652305747,2.0274210092,-2.7883615825  
H,0,1.8606632788,3.6541842218,-2.6236355001  
H,0,3.2175894851,3.1491640154,-3.6733281587  
H,0,3.394495565,4.5222283285,-2.5680472421  
H,0,-5.3857615217,2.6255557923,-0.2684719484  
C,0,-4.7250769393,1.9288224234,1.6591256321  
H,0,-3.9656691643,3.2901589684,-2.0373469798  
H,0,-2.1881779533,3.2608606389,-1.8796651438  
H,0,-3.0959939897,4.6563166943,-1.3068527099  
H,0,-3.7390675728,1.3001097901,3.4692448853  
H,0,-0.5827919436,2.8551757046,3.1361097796  
H,0,-0.4618908466,1.1941019712,2.5557217586  
H,0,-1.4780690334,1.5571528111,3.9766643758  
C,0,-6.6217481689,-0.755884656,-1.0317589969

C,0,6.1794708738,-1.7343328515,2.3071930975  
C,0,6.5764242733,0.4523276046,-1.0661835257  
C,0,-6.1011642222,1.5678184509,2.1379013695  
H,0,-7.3107649764,-0.9055750215,-0.1869690713  
H,0,-7.1049022351,-1.1410680807,-1.9409529581  
H,0,-6.4949041562,0.3324520677,-1.1589781676  
H,0,6.1574568738,-0.939730806,3.0678473743  
H,0,6.8750952779,-1.4291507476,1.511727178  
H,0,6.6074482839,-2.6306299918,2.7869121212  
H,0,7.2756501317,0.5682358784,-0.224140557  
H,0,7.0750418991,0.8110735535,-1.9777831172  
H,0,6.3926484181,-0.6278359712,-1.1882376452  
H,0,-6.0730164133,0.7655340033,2.8900444408  
H,0,-6.7472984346,1.2420406256,1.3101363547  
H,0,-6.5900079017,2.4365612405,2.610038259  
C,0,0.4757283853,-0.0793542635,-2.3638058377  
C,0,-1.9792207688,-0.0601930475,-3.1524531603  
H,0,-1.7654713169,0.3382383167,-4.1576800704  
H,0,-1.9794346369,-1.1536996346,-3.2239875354  
H,0,-2.9959722913,0.2552543363,-2.873336451  
C,0,1.2733203957,0.654155849,-3.4232615485  
H,0,2.3249136531,0.328417906,-3.4426936997  
H,0,0.8473866795,0.4807907745,-4.4248810846  
H,0,1.2628807581,1.7362243874,-3.244370706  
H,0,-0.9256871305,1.5366920084,-2.2016212513  
H,0,0.4344432555,-1.1545736891,-2.6228375652

### 2,3-Dimethylbutadien

P,0,-1.3543244279,0.1760758092,0.2085494653  
P,0,0.9862260651,-0.0210999346,-0.8289249205  
N,0,-0.1222151948,-1.0688975867,0.0355740987  
C,0,-1.6252242707,0.3282723773,-1.6393004416  
N,0,0.1200305675,1.203666637,0.1203636659  
C,0,-0.25307278,0.1849997521,-2.3171044501  
C,0,-0.1012234318,-2.4447483719,0.2663992457  
H,0,-2.0880372323,1.3039543651,-1.8392694632  
C,0,0.2249411857,2.5934756154,0.1424467389  
C,0,-0.1570570095,-0.9814495556,-3.2900311185  
C,0,-1.2512203464,-3.2589860417,0.0812736834  
C,0,1.087486054,-3.0593266787,0.7332476821  
C,0,1.4273780217,3.2631145494,-0.2264128584  
C,0,-0.8638557567,3.3953992651,0.5800743793  
C,0,-1.173846378,-4.636842895,0.2980689606  
C,0,-2.5586524125,-2.694699192,-0.3476782818  
C,0,1.1295830257,-4.4498852162,0.8949708173  
C,0,2.2827031002,-2.3292388504,1.2494291176  
C,0,1.4861224934,4.658775327,-0.2007539999  
C,0,2.6618502164,2.522127037,-0.5924177517  
C,0,-0.7580418912,4.788825114,0.5861469546  
C,0,-2.1333273007,2.8123493343,1.0940735765

H,0,-2.0797071649,-5.2320857546,0.158778446  
C,0,0.0148599278,-5.2481844986,0.6748200857  
C,0,-3.3658532132,-1.9848876731,0.5618653923  
C,0,-3.0166327652,-2.9226211295,-1.6641367056  
H,0,2.0607610189,-4.8942243944,1.2558399448  
C,0,3.5401251411,-2.4505150905,0.6280790939  
C,0,2.1885010963,-1.7249376776,2.5213979231  
H,0,2.4294101511,5.1330501204,-0.4822501212  
C,0,0.4038148194,5.4373205311,0.1894941337  
C,0,3.3406858591,1.7998593288,0.4140677246  
C,0,3.2094026741,2.5918399393,-1.8899098205  
H,0,-1.6217413042,5.3640238374,0.9299737044  
C,0,-3.3056641762,2.8409878895,0.3170311276  
C,0,-2.169335104,2.2883742604,2.4063968271  
H,0,0.0636795023,-6.3280083555,0.8296592033  
C,0,-4.5521446505,-1.400401286,0.1014547797  
C,0,-3.03612186,-1.9167752809,2.0262296939  
C,0,-4.2065411021,-2.3244116139,-2.0792621282  
C,0,-2.2633970074,-3.8226675365,-2.5998492538  
C,0,4.6818629997,-2.0285137606,1.3141721377  
C,0,3.6782040332,-2.9732653593,-0.7716747908  
C,0,3.3529802823,-1.3009901093,3.1623342649  
C,0,0.860740207,-1.5699279997,3.2025952743  
H,0,0.4725256692,6.5266562389,0.2048621841  
C,0,4.4873616254,1.0852099795,0.0814306475  
C,0,2.843033696,1.8062168778,1.8282435776  
C,0,4.3332984701,1.8139363847,-2.1906264243  
C,0,2.6874349432,3.5298308826,-2.9428902995  
C,0,-4.47957611,2.2864080943,0.8404889842  
C,0,-3.3334558166,3.4740372791,-1.045249937  
C,0,-3.3665260453,1.7786885552,2.9001754027  
C,0,-0.9230771448,2.2438234171,3.2378862432  
H,0,-5.156732215,-0.8211673748,0.8027661038  
C,0,-4.9724777981,-1.5285794972,-1.2196793609  
H,0,-3.5626707099,-2.7239498328,2.5636149523  
H,0,-3.3483406004,-0.9543965805,2.453584329  
H,0,-1.9642444054,-2.0452699551,2.2208149114  
H,0,-4.5414785863,-2.4765661246,-3.1097663323  
H,0,-1.1820626586,-3.639061224,-2.5619498579  
H,0,-2.6034285454,-3.6875030991,-3.6349743461  
H,0,-2.4186683109,-4.8800200601,-2.3298063689  
H,0,5.6574775177,-2.145060135,0.8320831415  
C,0,4.6145280522,-1.4607549929,2.5861768226  
H,0,3.5007596905,-2.1513128935,-1.4856687546  
H,0,2.9523052621,-3.7648357129,-1.0006150671  
H,0,4.6894926752,-3.3630306978,-0.9559085596  
H,0,3.2709801904,-0.8499780282,4.1560029808  
H,0,0.346380846,-2.5384966625,3.3038519654  
H,0,0.1970175133,-0.9174099479,2.6142612574  
H,0,0.9762277586,-1.1316365474,4.2033319864  
H,0,5.005655669,0.5326631697,0.8655753275

C,0,4.9753416269,1.0387138651,-1.2265359295  
H,0,3.6205189196,1.4582879873,2.519872717  
H,0,1.9790772531,1.1323163366,1.9362591765  
H,0,2.5128524479,2.8099169595,2.1333759832  
H,0,4.7334415473,1.8403199966,-3.209127074  
H,0,1.6390621178,3.8079955521,-2.7862947288  
H,0,2.7908363372,3.0973264295,-3.9488341062  
H,0,3.2720536043,4.4652484985,-2.9343911171  
H,0,-5.3825763483,2.2812211034,0.2223260043  
C,0,-4.5329391616,1.755137798,2.1272002195  
H,0,-3.6233719797,4.5357656832,-0.9742005034  
H,0,-4.0669061163,2.9777544746,-1.6975659616  
H,0,-2.3502070958,3.4511278028,-1.533655398  
H,0,-3.388733328,1.374073667,3.9167603196  
H,0,-0.4283173396,3.2257926993,3.276407341  
H,0,-0.1930959095,1.5422787917,2.8022381589  
H,0,-1.139769274,1.9158891811,4.2637205763  
C,0,-6.1982810094,-0.8158911637,-1.711105777  
C,0,5.8509135049,-0.9823483548,3.28965989  
C,0,6.1563221368,0.179675828,-1.5716704461  
C,0,-5.8050347696,1.1857321152,2.6848324574  
H,0,-6.9178673527,-0.6424599387,-0.897726736  
H,0,-6.7065373231,-1.3799583676,-2.5068701668  
H,0,-5.9326977483,0.1704658352,-2.1283754865  
H,0,5.7650331768,-1.0942375696,4.3804806227  
H,0,6.0319088266,0.08848621,3.0885611239  
H,0,6.7440182261,-1.5309176007,2.9569763287  
H,0,6.9187607979,0.2066415451,-0.7787007576  
H,0,6.6278984723,0.4938897772,-2.5138260631  
H,0,5.8500901252,-0.8733866428,-1.688668037  
H,0,-5.6476667287,0.1752316376,3.0941683371  
H,0,-6.5908707897,1.1240683588,1.9186449019  
H,0,-6.1900870043,1.8079679245,3.50901155  
C,0,0.130182766,1.4550918778,-3.0767413828  
H,0,0.1164507343,2.3354623667,-2.4187672798  
H,0,1.1331996947,1.3696761114,-3.5188111567  
H,0,-0.5831534562,1.629089578,-3.897597693  
C,0,1.0977960588,-1.8008964885,-3.2816891852  
H,0,1.1974775142,-2.3591369112,-2.3345351792  
H,0,1.1087588293,-2.530329364,-4.1038576793  
H,0,1.9955285794,-1.1656499099,-3.3653589824  
C,0,-1.1277762775,-1.2113003391,-4.1814935439  
H,0,-2.0493864145,-0.6232164994,-4.1967160724  
H,0,-1.033683891,-2.0061414002,-4.926235949  
H,0,-2.3375852737,-0.4522322013,-1.9349718621

### 1,3-Butadien

P,0,-1.3882692778,0.1143611967,-0.1258162969  
P,0,1.1326177598,-0.0636927195,-0.6529354062  
N,0,-0.1292966967,-1.112604298,0.0076484711

C,0,-1.234606411,0.2829708435,-2.0018023788  
N,0,0.0680528418,1.1438782247,0.0712958944  
C,0,-0.1640187904,-2.5035899021,-0.0310676224  
C,0,0.1591879044,2.5297070023,0.1618960264  
C,0,-1.3320809246,-3.2303820269,-0.3699416195  
C,0,1.006559112,-3.2255585702,0.3149211733  
C,0,1.369864541,3.2225955773,-0.1062119234  
C,0,-0.9628478009,3.2947775557,0.5794019653  
C,0,-1.2902550421,-4.6273870142,-0.4197001291  
C,0,-2.6411482888,-2.575518051,-0.6418589967  
C,0,1.0080261927,-4.6208727789,0.2313192932  
C,0,2.2268324641,-2.5885306351,0.8873859748  
C,0,1.415709869,4.6153671731,0.0005119494  
C,0,2.6263999349,2.5164708318,-0.4689296445  
C,0,-0.8724743695,4.6862700962,0.6627653407  
C,0,-2.2500485517,2.6719384104,0.9898882293  
H,0,-2.2097001089,-5.159599899,-0.6773522565  
C,0,-0.1257118353,-5.3324479704,-0.1441250073  
C,0,-3.4478567124,-2.1463781017,0.4322788583  
C,0,-3.1219848055,-2.481093184,-1.9636359331  
H,0,1.9241342888,-5.1493877124,0.5076574939  
C,0,3.4400212331,-2.5737008716,0.1744972576  
C,0,2.190681338,-2.1325168685,2.2226406995  
H,0,2.3674837767,5.1105421918,-0.2076723063  
C,0,0.3052809791,5.3627032262,0.3710457863  
C,0,3.3399831596,1.8129750383,0.5261433678  
C,0,3.1557115781,2.6187206623,-1.7712955954  
H,0,-1.7588728677,5.2364105102,0.9892565549  
C,0,-3.3838808537,2.7679000861,0.1614936043  
C,0,-2.3434349399,2.0302914539,2.2434792132  
H,0,-0.1092109754,-6.4232006534,-0.1907665011  
C,0,-4.6976076954,-1.5883164354,0.1592516475  
C,0,-2.9731112207,-2.2685250456,1.8494565156  
C,0,-4.3699946896,-1.8985040003,-2.1924457809  
C,0,-2.3104483816,-2.9975071679,-3.1173057391  
C,0,4.6044765349,-2.1592155365,0.8262297732  
C,0,3.4916074285,-2.9150661307,-1.2863327609  
C,0,3.3740236732,-1.7092064224,2.8272159705  
C,0,0.9019130262,-2.1040172914,2.9899251382  
H,0,0.3621130339,6.4500017129,0.4504636537  
C,0,4.5288746126,1.1744424217,0.1824886256  
C,0,2.8226429509,1.7346522764,1.931474509  
C,0,4.3223756663,1.9159964884,-2.0840591059  
C,0,2.5405459931,3.5132956565,-2.8096238532  
C,0,-4.5894126327,2.208355871,0.5953059222  
C,0,-3.323273602,3.4632006938,-1.1690456699  
C,0,-3.5675723548,1.4966924918,2.6410121573  
C,0,-1.1339055632,1.8860318458,3.117864837  
H,0,-5.3167776141,-1.2561340593,0.9948261756  
C,0,-5.169357798,-1.4356856028,-1.1443226544  
H,0,-3.7988083183,-2.1111634081,2.5568236376

H,0,-2.20540907,-1.5065622688,2.0659548586  
H,0,-2.5192675066,-3.2512974002,2.0434802946  
H,0,-4.729765324,-1.8066387828,-3.2217565496  
H,0,-1.2585058155,-2.6843894263,-3.0477506237  
H,0,-2.7163652832,-2.6469175852,-4.0764873613  
H,0,-2.3013131659,-4.0988843514,-3.1366242938  
H,0,5.5467224165,-2.1584580642,0.2705944343  
C,0,4.5976601059,-1.7343660436,2.1537505013  
H,0,4.5218176984,-3.1156709533,-1.6129662966  
H,0,3.1181897574,-2.0598408214,-1.8781141831  
H,0,2.868299705,-3.7824401892,-1.5419458607  
H,0,3.3400188025,-1.3648774223,3.8655346403  
H,0,0.3931931939,-3.0797395513,2.9602940447  
H,0,0.2082982127,-1.3731451565,2.5446243455  
H,0,1.0701095278,-1.8292075316,4.0402593296  
H,0,5.0788426153,0.6384130071,0.9568891852  
C,0,5.0173969006,1.1789863249,-1.1255702496  
H,0,3.6002306493,1.3745151289,2.6179132407  
H,0,1.9780967685,1.028898746,1.995739147  
H,0,2.455868102,2.7101299935,2.2833928931  
H,0,4.7067338927,1.9627592139,-3.1074506727  
H,0,1.4602906622,3.6436596102,-2.6644018299  
H,0,2.7226995404,3.1271946851,-3.8222985908  
H,0,2.9867391325,4.5207380504,-2.7579816935  
H,0,-5.4671356315,2.2764104458,-0.0546229895  
C,0,-4.7062091322,1.5798749195,1.8343172855  
H,0,-3.4597624671,4.5513272006,-1.0563297036  
H,0,-4.1128292411,3.09761912,-1.8410518401  
H,0,-2.3500977836,3.3246318079,-1.660339436  
H,0,-3.6357478785,0.9995822102,3.6134807084  
H,0,-0.6102325429,2.8454015436,3.2440709781  
H,0,-0.4091396674,1.1912771736,2.6616856808  
H,0,-1.4028625268,1.4975503979,4.1096769823  
C,0,-6.4860388632,-0.7675490949,-1.4110689944  
C,0,5.8602536095,-1.3036230233,2.8425800567  
C,0,6.2439917885,0.3962196134,-1.4914749349  
C,0,-6.0262557936,1.0489020032,2.312155044  
H,0,-7.2201704357,-0.9930767029,-0.6234988743  
H,0,-6.911491357,-1.0761308508,-2.3767351039  
H,0,-6.3645025919,0.328485341,-1.4394180248  
H,0,6.1294407699,-1.9981945441,3.6549380676  
H,0,5.7496419283,-0.3065959858,3.2986782094  
H,0,6.7081882428,-1.2638563074,2.1438936318  
H,0,6.918850299,0.2778858237,-0.6311914907  
H,0,6.8049044739,0.8747133846,-2.3076315545  
H,0,5.9684333264,-0.6159023164,-1.8330700833  
H,0,-5.9017530739,0.1433843898,2.9247932199  
H,0,-6.6949413461,0.8095587253,1.4728321062  
H,0,-6.5430426003,1.793832462,2.9402789344  
C,0,0.2029588713,-0.0893394402,-2.3522181577  
C,0,0.8309126401,0.71680837,-3.4257433886

H,0,0.6166848997,1.7904740044,-3.4016664452  
C,0,1.6318328998,0.239691384,-4.3831215477  
H,0,2.080837108,0.8974720129,-5.1316087763  
H,0,-1.4467651341,1.3381749728,-2.2376740236  
H,0,1.8694889313,-0.8271610759,-4.4497466362  
H,0,0.2785157262,-1.1603340581,-2.6101872236  
H,0,-1.9899848567,-0.32919302,-2.5100349213

#### Diphenyl-1,3-butadien

P,0,-1.5831811155,0.1153346589,-0.1938868284  
P,0,0.8274894291,0.1469091896,0.7247711743  
N,0,-0.7052369698,-0.6867780394,1.1134504669  
C,0,-0.4331913384,-0.5367634981,-1.6044573416  
N,0,-0.3393201045,1.3370096025,0.1596340613  
C,0,-0.9049872368,-1.8987116617,1.7705824443  
C,0,-0.218313472,2.6362773068,-0.3260070483  
C,0,-2.1146020848,-2.6261406488,1.6343845378  
C,0,0.0856850218,-2.4205218039,2.6451015955  
C,0,1.0396499638,3.2668179462,-0.508801635  
C,0,-1.387529218,3.3891846197,-0.6137083145  
C,0,-2.2921782479,-3.8289883592,2.3225410256  
C,0,-3.2562888493,-2.1614209488,0.8040619541  
C,0,-0.1359911792,-3.6299228704,3.3109324785  
C,0,1.3647002585,-1.7265950429,2.9572460659  
C,0,1.098211563,4.5773541265,-0.9950667188  
C,0,2.3479724424,2.6349193846,-0.1863277505  
C,0,-1.276105803,4.6872184684,-1.1205729419  
C,0,-2.7773376915,2.9386971668,-0.322551366  
H,0,-3.2423301006,-4.3531238925,2.1920774191  
C,0,-1.3133353931,-4.3490459343,3.1586596883  
C,0,-4.1251760865,-1.1675964246,1.303117402  
C,0,-3.5490439906,-2.8155385806,-0.4061677737  
H,0,0.6460872932,-3.9902868973,3.9842612496  
C,0,2.5860177822,-2.2576809982,2.4968393224  
C,0,1.3615375471,-0.6049711639,3.8113538121  
H,0,2.0850574968,5.0331815026,-1.1082948008  
C,0,-0.0438062674,5.2945608237,-1.3209843284  
C,0,2.7847113736,2.557616279,1.1536959164  
C,0,3.2269195305,2.2878188228,-1.2321366392  
H,0,-2.1998844843,5.2355296324,-1.3226943373  
C,0,-3.6709295297,2.6803572109,-1.3792526938  
C,0,-3.2412965751,2.9443023353,1.0073662403  
H,0,-1.4717326178,-5.2870136332,3.6942380072  
C,0,-5.2540278944,-0.8272464822,0.5639439932  
C,0,-3.8320190318,-0.4878646812,2.606962451  
C,0,-4.6789693183,-2.4219986542,-1.1295192112  
C,0,-2.7029793426,-3.9511545782,-0.9011568202  
C,0,3.7810447957,-1.64897685,2.8873825339  
C,0,2.6218487821,-3.4816219671,1.6253685497  
C,0,2.578949658,-0.0424191465,4.194235852



C,0,0.0689776998,-0.0199195159,4.2968984887  
H,0,0.0234783189,6.3160921403,-1.7002013275  
C,0,4.0641673205,2.0727633337,1.4195789418  
C,0,1.8978488412,3.0083629877,2.2757974528  
C,0,4.4979139892,1.8006136931,-0.9207189783  
C,0,2.8416552342,2.4846122192,-2.671346714  
C,0,-5.0217810986,2.4782478153,-1.0925160707  
C,0,-3.1867745991,2.6238048842,-2.8006607037  
C,0,-4.6010684222,2.7417692149,1.2489492985  
C,0,-2.2941990797,3.1816284395,2.1462334742  
H,0,-5.9309483653,-0.0680301349,0.9586597207  
C,0,-5.5402048568,-1.4301147654,-0.6651716328  
H,0,-3.610157152,-1.2173962827,3.4004610976  
H,0,-4.6752530316,0.1388061215,2.9258420832  
H,0,-2.9471891203,0.1637763016,2.5170513326  
H,0,-4.8916644368,-2.9171056352,-2.0811670754  
H,0,-1.6409125442,-3.8031373864,-0.6666371278  
H,0,-2.8037464174,-4.0741135275,-1.9875293265  
H,0,-3.0043514566,-4.8983463127,-0.4233683499  
H,0,4.7276560095,-2.0600359321,2.5225174609  
C,0,3.8010672624,-0.5541498403,3.7530196856  
H,0,3.602716874,-3.5946996919,1.1420419391  
H,0,1.8455752688,-3.4581778071,0.8467563278  
H,0,2.4360060856,-4.3955137679,2.211745328  
H,0,2.5722798526,0.8192906791,4.8682992486  
H,0,-0.5719058668,-0.7890866056,4.7543119241  
H,0,-0.5072492581,0.4054518961,3.4586187894  
H,0,0.2431793388,0.7767060037,5.0328636078  
H,0,4.3970098692,2.0160590216,2.4578963705  
C,0,4.9297303085,1.6717000751,0.3990218763  
H,0,2.4589960801,3.081061078,3.2170848955  
H,0,1.0725568657,2.2948323209,2.4394460115  
H,0,1.4392708587,3.984754218,2.0591378659  
H,0,5.1699423362,1.5131662657,-1.7336446262  
H,0,1.7827633472,2.2507365128,-2.8531608624  
H,0,3.4663123914,1.8664002894,-3.330769496  
H,0,2.9799708409,3.5343868553,-2.9773942028  
H,0,-5.7140492749,2.2879228154,-1.9184867004  
C,0,-5.5132712527,2.5328964568,0.2129370184  
H,0,-2.9868558642,3.6286105487,-3.2055396282  
H,0,-3.9298780836,2.141782886,-3.4516222778  
H,0,-2.2410246818,2.0670296073,-2.8837851175  
H,0,-4.9611853266,2.7680975711,2.2818854322  
H,0,-1.7427963885,4.1260156282,2.0173758976  
H,0,-1.5370586044,2.3827130812,2.1944817682  
H,0,-2.8257630932,3.2152828709,3.1069989624  
C,0,-6.7336489059,-1.0040408617,-1.4686010507  
C,0,5.1003749239,0.0186583069,4.238884113  
C,0,6.2820512631,1.1044019154,0.7144085172  
C,0,-6.9826861485,2.402873718,0.4912208101  
H,0,-7.6160706905,-0.8479850391,-0.8297515731

H,0,-6.9929541262,-1.7481165342,-2.2351485391  
H,0,-6.5337429935,-0.0500716178,-1.9845102179  
H,0,5.5092663147,-0.5887233242,5.0636017823  
H,0,4.9759321452,1.0425428526,4.6202461484  
H,0,5.8586281376,0.0380521605,3.4432021908  
H,0,6.7641596861,1.6435056058,1.5438618849  
H,0,6.947649894,1.1373255624,-0.1592284472  
H,0,6.1955829902,0.046908674,1.0154226957  
H,0,-7.1724726052,2.0273662219,1.5076706365  
H,0,-7.4728406224,1.725228649,-0.222729773  
H,0,-7.4848695191,3.3813638306,0.4080614434  
C,0,0.8784424125,-0.8776759125,-0.9139801046  
C,0,2.1083372236,-0.7318992799,-1.7278215946  
H,0,2.0742840937,-0.0018590403,-2.5410642891  
C,0,3.2439000302,-1.4103170215,-1.4932585465  
H,0,3.2708656443,-2.094500053,-0.639131173  
C,0,-0.9980967057,-1.5330979062,-2.5754706571  
C,0,-0.2769297372,-2.6582371687,-2.9939030111  
C,0,-2.2497925183,-1.2933376862,-3.1613443897  
C,0,-0.7855072524,-3.5106895729,-3.9734375948  
H,0,0.7078262827,-2.8600141946,-2.5683496059  
C,0,-2.7583518281,-2.142413801,-4.1390318007  
H,0,-2.8371570582,-0.4308555519,-2.8357484154  
C,0,-2.0266135863,-3.2564218165,-4.5526674432  
H,0,-0.20107907,-4.3787082671,-4.288218996  
H,0,-3.7367279361,-1.9341999821,-4.5794401486  
H,0,-2.4229039741,-3.921721608,-5.3234050022  
C,0,4.4995738149,-1.2645599993,-2.2264083633  
C,0,5.7046537795,-1.622935844,-1.6020663377  
C,0,4.5617159987,-0.7491871278,-3.5323964235  
C,0,6.9293393399,-1.4290405082,-2.2347488659  
H,0,5.6724085364,-2.0389168179,-0.5913330271  
C,0,5.7843461753,-0.5550668705,-4.1659640485  
H,0,3.6351003436,-0.5133262619,-4.0606023429  
C,0,6.9762865441,-0.8846815306,-3.5174787224  
H,0,7.8546338156,-1.7034353403,-1.7220296447  
H,0,5.8091535514,-0.1517191792,-5.1813886549  
H,0,7.9355614008,-0.732060382,-4.0173294755  
H,0,-0.2850521805,0.4036519536,-2.1697073144  
H,0,0.8310934032,-1.9008932956,-0.5023164017

#### 2,4-Hexadien

P,0,1.180524193,0.7649419374,-0.1177912227  
P,0,-0.8356747087,-0.5442517067,0.7799040649  
N,0,0.5823542621,-0.8731519756,-0.203071492  
C,0,1.2865294531,0.8706078862,1.7791450396  
N,0,-0.5998113248,1.0615282902,0.0548271527  
C,0,1.0044494171,-2.0881929266,-0.7373955922  
C,0,-1.21666177,2.2794974031,0.3326944894  
C,0,2.3353179687,-2.5570992665,-0.626838259

C,0,0.0581508615,-2.8930035824,-1.4203046017  
C,0,-2.4491266757,2.3718005421,1.0326174346  
C,0,-0.6294581972,3.4867828067,-0.1391942166  
C,0,2.6631588415,-3.8280611732,-1.1139331381  
C,0,3.4526874785,-1.7665509722,-0.0420816356  
C,0,0.4196486892,-4.1701687907,-1.8594990678  
C,0,-1.2733611551,-2.3993188356,-1.8755356869  
C,0,-3.0236437406,3.6251920282,1.2655910593  
C,0,-3.1888083649,1.1658989344,1.4876479518  
C,0,-1.2344936389,4.7160012312,0.1244816534  
C,0,0.6175025376,3.4573346665,-0.9462819482  
H,0,3.6999011219,-4.1617690714,-1.0200981973  
C,0,1.7130461728,-4.6534621477,-1.7002908283  
C,0,4.1083757113,-0.7883695237,-0.814969549  
C,0,3.9623366978,-2.1231130601,1.2241950788  
H,0,-0.3315742017,-4.7670791114,-2.3832764628  
C,0,-2.4713571963,-2.9343618622,-1.3684566019  
C,0,-1.304369245,-1.540980026,-2.9971250457  
H,0,-3.9788028379,3.6574094941,1.7954104217  
C,0,-2.4290776148,4.8024641325,0.8302080018  
C,0,-3.8149671248,0.3392082414,0.5287107368  
C,0,-3.3431004454,0.8863572732,2.8603121127  
H,0,-0.7527712707,5.6189400222,-0.259566322  
C,0,1.8447516176,3.8692915637,-0.3880973573  
C,0,0.5667666639,2.9881598266,-2.2762163032  
H,0,1.9855482894,-5.6465807067,-2.0636514956  
C,0,5.2235564718,-0.1375462064,-0.2744931472  
C,0,3.6699006472,-0.4735936288,-2.2164798498  
C,0,5.1005117681,-1.4759391911,1.7062948803  
C,0,3.2924347836,-3.183629774,2.0503295125  
C,0,-3.6722892117,-2.6484300158,-2.0270159382  
C,0,-2.4813593601,-3.7714857428,-0.1234222242  
C,0,-2.5269570041,-1.2709964749,-3.6120112459  
C,0,-0.0373386627,-0.960305172,-3.5532959524  
H,0,-2.8985269605,5.769546576,1.0204144712  
C,0,-4.4938963032,-0.8012713554,0.9539959701  
C,0,-3.7491871585,0.6767416213,-0.9282960361  
C,0,-4.0039793744,-0.2853079714,3.2399815872  
C,0,-2.8738549298,1.8438349299,3.9173917755  
C,0,3.0110967757,3.7275623589,-1.1444350674  
C,0,1.9213238418,4.4436193217,0.9979008061  
C,0,1.7539062536,2.8801623136,-3.0001519686  
C,0,-0.7383963935,2.5744293406,-2.8880404051  
H,0,5.723999107,0.6296121779,-0.873203508  
C,0,5.7355025013,-0.4636322616,0.9805896924  
H,0,3.2920179633,-1.3693980449,-2.7290115143  
H,0,4.5041128592,-0.060511048,-2.8004512715  
H,0,2.8621093467,0.2765592425,-2.2188189073  
H,0,5.4901189112,-1.7546822665,2.6900666219  
H,0,2.2068082759,-3.014535648,2.1157644719  
H,0,3.7008879556,-3.207552771,3.0701025022

H,0,3.4196176676,-4.1837948044,1.60770958  
H,0,-4.5983114967,-3.0897228632,-1.6457355351  
C,0,-3.7226030534,-1.8333356049,-3.1564813347  
H,0,-3.4535478958,-4.2643730042,0.0178513555  
H,0,-2.2969356045,-3.1262096577,0.7533749893  
H,0,-1.6965515709,-4.5407943569,-0.1298485851  
H,0,-2.5417188162,-0.6177467516,-4.4898576458  
H,0,0.6920990533,-1.7493818904,-3.7929389455  
H,0,0.4454368014,-0.2936611688,-2.8224824473  
H,0,-0.2349641169,-0.3800575747,-4.4648736459  
H,0,-4.9675405356,-1.439508859,0.2038424915  
C,0,-4.5664192342,-1.1531693166,2.3035095395  
H,0,-4.5909222104,0.2285561228,-1.4702253346  
H,0,-2.8250298491,0.2825363261,-1.3808357024  
H,0,-3.7570215238,1.7634334859,-1.0916567715  
H,0,-4.0886413857,-0.5194100544,4.3054472664  
H,0,-1.9702068656,2.387885109,3.6139716471  
H,0,-2.6750658035,1.3220024687,4.8631758167  
H,0,-3.6481588005,2.6037813172,4.1160562953  
H,0,3.9681640765,4.0121420165,-0.6967491552  
C,0,2.9896691782,3.2252596887,-2.4461072876  
H,0,2.9494879401,4.4069334723,1.384263008  
H,0,1.2624262477,3.9152131292,1.7010423616  
H,0,1.5996331297,5.4976615999,1.0067503587  
H,0,1.7145292936,2.499686377,-4.0253391689  
H,0,-1.503447035,3.3548711235,-2.7603487843  
H,0,-1.1266965751,1.666733074,-2.3995689935  
H,0,-0.6249579142,2.3653914097,-3.9605390902  
C,0,6.9144796759,0.267458431,1.5528140017  
C,0,-5.0214743912,-1.5323235325,-3.8450936465  
C,0,-5.2226701308,-2.4351792892,2.7256873048  
C,0,4.2573561178,3.0925476025,-3.2383854096  
H,0,7.5277593132,0.7268646846,0.764358175  
H,0,7.5577676185,-0.4017584276,2.1431111216  
H,0,6.5829466303,1.0762938713,2.2256987627  
H,0,-4.9322978043,-1.6398673159,-4.9369509143  
H,0,-5.3426063037,-0.4950185234,-3.6503952657  
H,0,-5.825412703,-2.1984364424,-3.501098832  
H,0,-5.4759755718,-2.4299796576,3.7954747042  
H,0,-4.5522391474,-3.292987925,2.5469071681  
H,0,-6.1444199236,-2.6238251452,2.1548397527  
H,0,4.146577958,2.3690712784,-4.0584814872  
H,0,5.0938539327,2.7652352781,-2.60296311  
H,0,4.5469784763,4.0579899271,-3.6859224889  
C,0,0.362790283,-0.238914432,2.2696900696  
C,0,2.673482091,0.9100580877,2.3831962208  
H,0,3.2303340462,-0.0116039584,2.1820674904  
H,0,3.2593827946,1.7478360793,1.9742938489  
H,0,2.6165467115,1.0384182196,3.4764397492  
C,0,-0.2315482156,-0.0433080273,3.6184720194  
H,0,-0.2020668603,0.9738747919,4.0216448899

C,0,-0.791430293,-1.0015324486,4.370254522  
H,0,-1.1851057057,-0.7129746575,5.3519813996  
C,0,-0.9753080275,-2.4318514129,3.9857962363  
H,0,-0.4297509414,-2.6986404532,3.0690870125  
H,0,-0.6487800212,-3.1118905999,4.7893841297  
H,0,-2.042180816,-2.6457148395,3.7994448221  
H,0,0.7890949083,1.8364086671,1.9806441902  
H,0,0.9173036301,-1.193613495,2.2536348524

### 1,3-Cyclohexadien

P,0,1.2249101271,0.2801214972,0.1785828198  
P,0,-1.3028045884,-0.1861058722,0.4181161937  
N,0,0.141597477,-1.0642174258,-0.104438184  
C,0,0.8116431765,0.4464224811,2.0437338812  
N,0,-0.3032908989,1.1725493483,-0.1601861725  
C,0,-0.6245172462,-0.0666655363,2.1871625231  
C,0,0.33161601,-2.394140798,-0.4649965102  
H,0,0.8153779372,1.5480246817,2.1461861824  
C,0,1.7826100048,-0.0909851704,3.0333431063  
C,0,-0.4930911403,2.5415804634,0.026251329  
C,0,-0.716522024,-1.4184855702,2.8838196763  
H,0,-1.2426225165,0.6619854865,2.7270996834  
C,0,1.5825918436,-3.0439260699,-0.303621161  
C,0,-0.7382563132,-3.1316582915,-1.0348842727  
H,0,2.819579574,0.2475688033,2.9445009436  
C,0,1.4312040843,-0.8956992854,4.0433776956  
C,0,-1.7282044284,3.0817382545,0.4698880375  
C,0,0.5632187146,3.4468176856,-0.2660494368  
C,0,0.0399255644,-1.4285546939,4.2077016544  
H,0,-1.7740801142,-1.6871049582,3.0376909711  
H,0,-0.281642144,-2.1932358348,2.2294355644  
C,0,1.7100157358,-4.3972820005,-0.6293851202  
C,0,2.8098769791,-2.3385920373,0.1575054253  
C,0,-0.5688524971,-4.4883388332,-1.3263350275  
C,0,-2.0287892425,-2.5206378946,-1.4592126  
H,0,2.1872051041,-1.1955394023,4.7763126834  
C,0,-1.8650964318,4.4613679495,0.6470966712  
C,0,-2.9189985903,2.2274211151,0.7223924963  
C,0,0.3844004107,4.8174876017,-0.0641226456  
C,0,1.8611988205,2.9988097177,-0.8398930286  
H,0,-0.5052278154,-0.8308189613,4.9630518013  
H,0,2.6895618777,-4.8642669718,-0.4972232725  
C,0,0.6412708914,-5.1379660447,-1.1176206653  
C,0,3.5574956737,-1.5696980527,-0.7597966623  
C,0,3.2944079624,-2.5401892355,1.4640561953  
H,0,-1.4127230788,-5.0251059382,-1.7677436857  
C,0,-3.2262631343,-2.8468066936,-0.7973076542  
C,0,-2.0588836798,-1.7077146153,-2.6101082744  
H,0,-2.8334420911,4.8400613836,0.9842656783  
C,0,-0.8181624582,5.3394075018,0.397132673

C,0,-3.6557062751,1.7256592244,-0.3714340292  
C,0,-3.3584148978,1.9797586104,2.0389930245  
H,0,1.2178599236,5.4828111077,-0.3037123787  
C,0,3.042440279,3.0597927246,-0.0764942487  
C,0,1.9114922847,2.5664556407,-2.1829351546  
H,0,0.7583068983,-6.195382995,-1.3629451879  
C,0,4.7309097463,-0.9530294734,-0.3274059125  
C,0,3.1006282775,-1.4112993462,-2.1788970768  
C,0,4.4668308871,-1.8910861472,1.8598602658  
C,0,2.5962183138,-3.4747228697,2.407230028  
C,0,-4.437242143,-2.3842059966,-1.315693146  
C,0,-3.2075544282,-3.6566856944,0.4670569876  
C,0,-3.2909512065,-1.2665672382,-3.0945986441  
C,0,-0.7884871605,-1.3124565546,-3.3032543732  
H,0,-0.9431683896,6.4145071012,0.5400358716  
C,0,-4.7797636763,0.939044393,-0.1273765943  
C,0,-3.2198235762,2.0100371769,-1.7769979235  
C,0,-4.4625273264,1.1473593751,2.2376199819  
C,0,-2.684996252,2.6153872546,3.2231857352  
C,0,4.2500207427,2.6687458034,-0.6625497646  
C,0,3.0355034675,3.5302988805,1.350632377  
C,0,3.1384440387,2.1943802089,-2.7285501039  
C,0,0.6642377248,2.4996159265,-3.0129772198  
H,0,5.3009619657,-0.3517053206,-1.0381669386  
C,0,5.1886505754,-1.0772994888,0.9855257417  
H,0,2.770618064,-2.3689094787,-2.6072589398  
H,0,3.9006532573,-0.9965757579,-2.8067619519  
H,0,2.2482946861,-0.7140484147,-2.2380779221  
H,0,4.8258729474,-2.0300951974,2.8841810354  
H,0,1.5090098704,-3.3200985939,2.4016512573  
H,0,2.9613301764,-3.345928074,3.434599433  
H,0,2.7655293101,-4.523852513,2.1149947955  
H,0,-5.3661694685,-2.6380746456,-0.7962032533  
C,0,-4.4941895257,-1.6077529904,-2.4734722835  
H,0,-4.1910726115,-3.6442149276,0.9578463389  
H,0,-2.4626284751,-3.2644895859,1.1764732072  
H,0,-2.9352216608,-4.7071791246,0.2809117785  
H,0,-3.3097538488,-0.6444195586,-3.9946763369  
H,0,-0.1595824684,-2.188392959,-3.5233488908  
H,0,-0.190692437,-0.6492505399,-2.6580711974  
H,0,-0.994828453,-0.7824975914,-4.2433068149  
H,0,-5.3459353287,0.5536347475,-0.9764999767  
C,0,-5.1790732734,0.6071692798,1.167806785  
H,0,-3.9959234265,1.7208041944,-2.4976790849  
H,0,-2.310963684,1.4363304422,-2.0207077483  
H,0,-2.9776484803,3.0737671867,-1.9181634112  
H,0,-4.7801068849,0.9261784017,3.2613486861  
H,0,-1.6067928549,2.7562819956,3.0646018175  
H,0,-2.8355312161,2.017979155,4.1340708203  
H,0,-3.1033059442,3.6174215741,3.4158223559  
H,0,5.1634984703,2.7008428753,-0.0609334939

C,0,4.3225846709,2.2413380146,-1.9868734733  
H,0,3.9062361587,3.1393365646,1.8963464481  
H,0,2.1242843901,3.2229473871,1.8821601644  
H,0,3.0727364155,4.6302487257,1.411283153  
H,0,3.1723355477,1.8621527204,-3.7707087995  
H,0,0.1087723505,3.4490947919,-2.9781897254  
H,0,-0.0145968192,1.722840494,-2.6275822676  
H,0,0.8966050858,2.2673620141,-4.0613749412  
C,0,6.4104808471,-0.3346580339,1.4418023711  
C,0,-5.8082900048,-1.1642478706,-3.0485702953  
C,0,-6.3286618565,-0.327974135,1.4009054979  
C,0,5.6343067272,1.8717025526,-2.6160851782  
H,0,7.1726687895,-0.28598675,0.6497369819  
H,0,6.8644321173,-0.8009421257,2.3280463127  
H,0,6.1559449969,0.7050618372,1.710089921  
H,0,-6.098638635,-1.7956828822,-3.9048328579  
H,0,-5.7614411271,-0.1277219721,-3.4168121772  
H,0,-6.6175400527,-1.2279736348,-2.3065123219  
H,0,-7.0549123544,-0.2880982435,0.576052682  
H,0,-6.8569995232,-0.1009484804,2.3384075347  
H,0,-5.9693724857,-1.3687323092,1.4693955798  
H,0,5.5547461948,0.9438305527,-3.2033910205  
H,0,6.4212968649,1.7330556451,-1.8609471671  
H,0,5.9754667365,2.6596880079,-3.3077548315  
H,0,0.0761708957,-2.4534698568,4.6135455757

#### 1,4-Cyclohexadien

P,0,-1.1279616805,0.5358004464,-0.0210038056  
P,0,1.1748339411,-0.4550669364,-0.5950314803  
N,0,-0.3228602794,-1.003905082,0.1492569842  
C,0,-0.97318287,0.6310241976,-1.9115299551  
N,0,0.5928164006,1.0977292635,0.0700590603  
C,0,0.2696163222,-0.2072086836,-2.2492552118  
C,0,-0.6675339406,-2.2441422047,0.6816372345  
H,0,-0.6930583486,1.687304649,-2.0443037327  
C,0,-2.2463930273,0.3875771493,-2.7276245151  
C,0,1.025763203,2.3835274649,-0.2594839014  
C,0,0.0016130878,-1.5696139689,-2.8836898589  
H,0,0.9290419149,0.3600008905,-2.9167414297  
C,0,-1.9802527776,-2.7736395275,0.5853501523  
C,0,0.3174467498,-3.0073830269,1.3576715199  
H,0,-3.0880627447,0.1287561321,-2.0626361927  
H,0,-2.5555494664,1.3309300968,-3.2092064737  
C,0,-2.1393802512,-0.6718383026,-3.7749359583  
C,0,2.2780141959,2.6251743649,-0.8825791568  
C,0,0.2126848548,3.5076711312,0.0519973139  
C,0,-1.1344237366,-1.5471340707,-3.8578543332  
H,0,0.9213220801,-1.9307806624,-3.371965522  
H,0,-0.2287173082,-2.3178514783,-2.1001890636  
C,0,-2.249473311,-4.0516940116,1.0856067132

C,0,-3.1273309784,-2.0237206191,0.0027991321  
C,0,0.0098439514,-4.2921851576,1.8155574692  
C,0,1.6518912126,-2.4721512591,1.7499452163  
H,0,-2.9646327298,-0.733718625,-4.492588657  
C,0,2.6657123227,3.9312658557,-1.1939821631  
C,0,3.2289825861,1.5219691958,-1.1808677039  
C,0,0.6371167007,4.7955876151,-0.2821017651  
C,0,-1.0898039461,3.3555042486,0.7530203717  
H,0,-1.1512106045,-2.3153567082,-4.6378254148  
H,0,-3.2724887232,-4.4279695522,1.0054630408  
C,0,-1.2633171184,-4.8307478313,1.675911374  
C,0,-3.7691414383,-1.0179557773,0.7516342453  
C,0,-3.6637732855,-2.4229699065,-1.2421554261  
H,0,0.7924479716,-4.85300433,2.3333629471  
C,0,2.8351257543,-2.9698144585,1.1699897021  
C,0,1.7218926423,-1.5751511478,2.8332732578  
H,0,3.6401277441,4.0760380235,-1.6676643225  
C,0,1.8565465648,5.0239050734,-0.9084074537  
C,0,3.9729378292,0.9562959726,-0.1226882809  
C,0,3.4445170862,1.0875025456,-2.5038054673  
H,0,-0.0155257842,5.633327918,-0.0233337374  
C,0,-2.3019545773,3.5742538302,0.0720502554  
C,0,-1.1021509281,3.00986489,2.1235359525  
H,0,-1.4919051355,-5.8293024565,2.0539591397  
C,0,-4.8703701712,-0.3549694551,0.1949614214  
C,0,-3.3518354317,-0.6808070168,2.1542215732  
C,0,-4.7780202909,-1.7534267195,-1.7459389394  
C,0,-3.0858892549,-3.583392494,-1.9992569312  
C,0,4.0643253636,-2.5974843736,1.7135308489  
C,0,2.7851235901,-3.834554674,-0.0545798963  
C,0,2.9749573356,-1.2204363118,3.3392895038  
C,0,0.4724161226,-1.019994453,3.4517702098  
H,0,2.1767903863,6.0375323104,-1.157129613  
C,0,4.8615400326,-0.0796981138,-0.3988160363  
C,0,3.7916036843,1.4534336622,1.2792053622  
C,0,4.3100428944,0.0128798697,-2.7281086744  
C,0,2.7991587006,1.7744531794,-3.6746614077  
C,0,-3.5076641259,3.3841736053,0.757044173  
C,0,-2.3407751596,4.0076635605,-1.3661732794  
C,0,-2.3250113763,2.854887857,2.7709419358  
C,0,0.183468855,2.7990786174,2.8660563237  
H,0,-5.3481745324,0.442951175,0.7710092652  
C,0,-5.3811042749,-0.6962023423,-1.0551452872  
H,0,-4.2135667637,-0.7650202251,2.8351806897  
H,0,-2.9730164723,0.3505961168,2.2100669255  
H,0,-2.5651014425,-1.3515258716,2.5216641943  
H,0,-5.180473468,-2.0571639911,-2.7170506855  
H,0,-1.9886929943,-3.5869413726,-1.9653693823  
H,0,-3.4017085929,-3.5637551524,-3.0505115461  
H,0,-3.4158724662,-4.5401266798,-1.5623784622  
H,0,4.979789632,-2.994249356,1.2635787072



C,0,4.1578168884,-1.7333852017,2.8071591997  
H,0,3.7723190212,-4.2603244256,-0.2831007803  
H,0,2.469087558,-3.2288014569,-0.9221058822  
H,0,2.0636331983,-4.6579544037,0.0403023321  
H,0,3.0247534754,-0.5302197611,4.1868490339  
H,0,-0.2062163682,-1.824803912,3.774531037  
H,0,-0.0820717772,-0.4067789701,2.7249665374  
H,0,0.7053449874,-0.3908705308,4.3217915785  
H,0,5.4334964459,-0.5143654714,0.4231052953  
C,0,5.0160415673,-0.5935884667,-1.6881767841  
H,0,4.5849193407,1.0788722227,1.9383817722  
H,0,2.8301555134,1.1040543157,1.6876201577  
H,0,3.7824988903,2.5525947263,1.3177063868  
H,0,4.4478827931,-0.3497260935,-3.7514147257  
H,0,1.832567651,2.2262678468,-3.4137410273  
H,0,2.6520944318,1.0792275676,-4.513968867  
H,0,3.4392130293,2.5953931425,-4.039412291  
H,0,-4.4487928019,3.524900676,0.2170494298  
C,0,-3.5432259528,3.0236842726,2.1014667816  
H,0,-3.2614441244,3.658715087,-1.8557524191  
H,0,-1.477262974,3.6390345697,-1.9356352767  
H,0,-2.3216310766,5.1071382009,-1.4468509858  
H,0,-2.3298884225,2.5864365879,3.8319021884  
H,0,0.8580961991,3.6606481362,2.7483354009  
H,0,0.7172920341,1.9211549858,2.470047572  
H,0,0.0014160392,2.6392008325,3.9376688389  
C,0,-6.5300124768,0.0580585027,-1.6581417726  
C,0,5.4944741351,-1.3727533359,3.3876993719  
C,0,5.903079737,-1.7778047728,-1.9368194009  
C,0,-4.8435933527,2.8145481932,2.8203877782  
H,0,-7.1082734583,0.5943501459,-0.8921563458  
H,0,-7.2144141415,-0.6116990211,-2.1999572311  
H,0,-6.1686047707,0.8072001689,-2.3828821083  
H,0,5.4069078481,-0.572744545,4.1364228342  
H,0,6.1964781373,-1.0316676484,2.60961197  
H,0,5.9626684907,-2.2409204555,3.8796895169  
H,0,6.8000580344,-1.7504086134,-1.3004001919  
H,0,6.2263483647,-1.8328477473,-2.9861932276  
H,0,5.369111307,-2.7148229668,-1.7055361974  
H,0,-4.9327645518,1.7774878681,3.1817820163  
H,0,-5.7037026112,3.019612826,2.1675965114  
H,0,-4.9232811618,3.4698374035,3.702101882

#### 1,7-Octadien

P,0,-1.4821583737,-0.2548279711,-0.1465300253  
P,0,1.0494194592,0.0434222465,0.263951495  
N,0,-0.2139019596,0.8549555121,-0.6717017482  
C,0,-1.2890700473,0.149456148,1.6850168291  
N,0,-0.0409313026,-1.3191853015,-0.0429245474  
C,0,-0.2555236242,2.1781045505,-1.0991873898

C,0,0.0283312743,-2.6675792869,0.2906026894  
C,0,-1.4338499385,2.9619465045,-1.0213999417  
C,0,0.9051675346,2.7619448498,-1.6687402816  
C,0,1.2506852304,-3.2941772449,0.6573279222  
C,0,-1.1339564025,-3.4843512878,0.2228645299  
C,0,-1.4120656821,4.2957352061,-1.4404115723  
C,0,-2.7382100994,2.4276916627,-0.5403091328  
C,0,0.8862770392,4.1057653778,-2.0536875049  
C,0,2.1448672144,2.0016599624,-1.9931970804  
C,0,1.2672429947,-4.6526718643,0.9889331001  
C,0,2.5604852477,-2.5911268731,0.6611506745  
C,0,-1.0688023434,-4.8348847133,0.574308526  
C,0,-2.4480150784,-2.9939638932,-0.2755663861  
H,0,-2.3397845529,4.8698430575,-1.3705284671  
C,0,-0.2574269795,4.8862602079,-1.937332911  
C,0,-3.5655554924,1.695489701,-1.4169442227  
C,0,-3.2001234137,2.7595894268,0.7486180688  
H,0,1.7952584143,4.5250806895,-2.4927472107  
C,0,3.3497186522,2.2925527779,-1.3265420347  
C,0,2.1424567769,1.1051240896,-3.0805570358  
H,0,2.2291804432,-5.0979867953,1.2544335044  
C,0,0.1202216518,-5.433987435,0.9685242551  
C,0,3.1603800104,-2.2298813504,-0.5664606028  
C,0,3.2688318851,-2.4070865949,1.8652301964  
H,0,-1.9878276782,-5.4229432081,0.5071779498  
C,0,-3.5266108015,-2.8123142783,0.6101242962  
C,0,-2.6341846018,-2.8008425461,-1.6619823763  
H,0,-0.2560201343,5.930350723,-2.2566152421  
C,0,-4.8212755909,1.2791824982,-0.9736103383  
C,0,-3.1014384442,1.3514792608,-2.8003362734  
C,0,-4.454335386,2.3039896375,1.1595173804  
C,0,-2.3664962301,3.5990149434,1.6721860032  
C,0,4.5378361344,1.7226864644,-1.7868533634  
C,0,3.366849501,3.1981525502,-0.1288469512  
C,0,3.3533968598,0.5574225229,-3.5081302765  
C,0,0.8645175964,0.7501771773,-3.7810738716  
H,0,0.1569995119,-6.4932704535,1.2296525004  
C,0,4.4214976981,-1.6415922741,-0.5575126625  
C,0,2.4578211826,-2.4746256131,-1.8679106682  
C,0,4.5205431994,-1.7829266328,1.8281999201  
C,0,2.7502101982,-2.9102176784,3.1835568913  
C,0,-4.7699146107,-2.4314543128,0.0958278704  
C,0,-3.3754409046,-3.0374516302,2.0881140152  
C,0,-3.8926184238,-2.4329525727,-2.1321020889  
C,0,-1.4861064838,-2.9544955593,-2.6135774801  
H,0,-5.4577662822,0.7138379332,-1.6574790393  
C,0,-5.2787871251,1.5576177579,0.3150216184  
H,0,-3.9238891535,0.9438709551,-3.4037946016  
H,0,-2.3088025286,0.5853729011,-2.7605264215  
H,0,-2.6791993943,2.2262470261,-3.3165886319  
H,0,-4.8012235449,2.5485108995,2.1681726294

H,0,-1.3177266963,3.270666694,1.697426585  
H,0,-2.764283278,3.5708234909,2.6964175097  
H,0,-2.3463672588,4.6515809237,1.3474566049  
H,0,5.4718077157,1.9568573313,-1.267089301  
C,0,4.5661097063,0.8702293393,-2.8910661216  
H,0,4.2890687657,3.0634939245,0.4539876778  
H,0,2.5103386669,2.9990105235,0.531861614  
H,0,3.2994970697,4.2602815433,-0.4132386917  
H,0,3.3479164838,-0.1258721937,-4.3629328457  
H,0,0.318944375,1.651287346,-4.1011886648  
H,0,0.1932829315,0.2029664441,-3.1000167037  
H,0,1.0539038918,0.1237337262,-4.6634733808  
H,0,4.8793209848,-1.3718028739,-1.5099551342  
C,0,5.1094005179,-1.3824861667,0.6307777966  
H,0,3.1523271826,-2.3826860179,-2.7130619619  
H,0,1.6520761802,-1.7382464247,-2.0197069513  
H,0,1.9911355485,-3.4704304571,-1.8932005204  
H,0,5.0550697992,-1.6184652735,2.7690339182  
H,0,1.6556121604,-2.987997048,3.2020664844  
H,0,3.0754575028,-2.2608646938,4.0089209043  
H,0,3.1405434519,-3.9200132974,3.3934996767  
H,0,-5.6050153268,-2.2874399645,0.7883550584  
C,0,-4.9786564347,-2.2518970195,-1.2707891603  
H,0,-3.5924850586,-4.085458067,2.3535551005  
H,0,-4.0712423758,-2.402837009,2.6559155495  
H,0,-2.3520195197,-2.8361137843,2.4326718186  
H,0,-4.0320862592,-2.2862380739,-3.2074506519  
H,0,-0.9560719031,-3.9057709284,-2.4558831203  
H,0,-0.7439293284,-2.153869641,-2.4573790607  
H,0,-1.8246118832,-2.907581371,-3.6576293238  
C,0,-6.6085194129,1.0487743119,0.7882987623  
C,0,5.8620726376,0.3176369323,-3.4104556056  
C,0,6.4357229918,-0.6817020215,0.6109552041  
C,0,-6.3405808131,-1.9251090536,-1.8101323922  
H,0,-7.3483735623,1.0336271314,-0.0254594816  
H,0,-7.0104960259,1.6628533704,1.6068954284  
H,0,-6.5160016836,0.0165186537,1.1656753255  
H,0,6.2713411542,0.9573607353,-4.2103761762  
H,0,5.7329857622,-0.6885949023,-3.8369219557  
H,0,6.623350952,0.2598476299,-2.6187001611  
H,0,7.0599788693,-1.0246770268,-0.2279163142  
H,0,6.9951883749,-0.8418683899,1.5436821469  
H,0,6.2977295187,0.4054984665,0.4881176554  
H,0,-6.2795257625,-1.3346044162,-2.736333434  
H,0,-6.9425165963,-1.3639723455,-1.081410897  
H,0,-6.8956798905,-2.8471979018,-2.0514693992  
C,0,0.165996641,0.5671022424,1.8797602862  
C,0,0.8057397945,0.0645337157,3.1643716303  
H,0,0.8334151926,-1.0365181642,3.1374626064  
C,0,2.2135548876,0.5896531803,3.4292275414  
H,0,2.6014542257,0.0942697981,4.3367514487

H,0,-1.5186914676,-0.7797504788,2.2306100612  
H,0,2.8728161237,0.2649530091,2.6073292304  
H,0,0.2384169953,1.6687824699,1.8407681227  
H,0,-2.0194446896,0.9081490086,1.9945473442  
H,0,0.1452412057,0.3124476005,4.0146833075  
C,0,2.3740153883,2.0970738013,3.6074339627  
H,0,3.4499947122,2.2943803384,3.7431336099  
H,0,2.0988983826,2.631507924,2.6828441079  
C,0,1.6190043418,2.7225553514,4.791130353  
H,0,1.6066252523,1.9979744634,5.6268761881  
H,0,2.1773982466,3.5997167783,5.1557438067  
C,0,0.2189065341,3.1593499608,4.4867981297  
H,0,-0.4932434074,2.3810994324,4.186539293  
C,0,-0.2066382346,4.4227927156,4.5412642992  
H,0,0.4650333619,5.2376178463,4.8322562377  
H,0,-1.2376897141,4.6928730012,4.2998445392

#### Dimethyl-2,4-hexadien

P,0,1.3655011587,0.5948591862,0.4686304488  
P,0,-1.0123146428,-0.3793927049,0.2957231191  
N,0,0.6135493003,-0.7817503517,-0.3652093926  
C,0,0.9310234279,-0.041635479,2.2280444661  
N,0,-0.2755893253,1.2177063418,0.2651862838  
C,0,1.1022097103,-2.0454536203,-0.6879822102  
C,0,-0.7594782583,2.5187722726,0.3531277264  
C,0,2.4945717466,-2.3387539539,-0.7445672255  
C,0,0.1928871061,-3.0843095913,-1.0317202417  
C,0,-2.076141033,2.8168621225,0.7981353309  
C,0,0.0768982689,3.6027988727,-0.0245552474  
C,0,2.9186443681,-3.6325919895,-1.0658587153  
C,0,3.5503657054,-1.312275743,-0.5372506983  
C,0,0.6679033987,-4.3638943181,-1.3312604415  
C,0,-1.2733808369,-2.8691226366,-1.1956785585  
C,0,-2.4762311699,4.1496726438,0.942935082  
C,0,-3.1167380404,1.7872498204,1.0689335712  
C,0,-0.3617276199,4.9175478944,0.1631098039  
C,0,1.3692623659,3.4734949115,-0.7611391597  
H,0,3.9943991727,-3.8169760553,-1.1144638937  
C,0,2.0250429825,-4.6585679319,-1.3403937127  
C,0,3.7052605145,-0.2780075053,-1.488245352  
C,0,4.4748699054,-1.4209175541,0.5244123434  
H,0,-0.0665084463,-5.1317768428,-1.5876455098  
C,0,-2.203573868,-3.4162768113,-0.2927266105  
C,0,-1.7324076706,-2.1936815148,-2.3507029717  
H,0,-3.4989878018,4.3407365351,1.2774136356  
C,0,-1.6249518544,5.2084655209,0.6616160912  
C,0,-3.7475812935,1.1326137303,-0.0116569869  
C,0,-3.5902281881,1.579979956,2.3810428782  
H,0,0.3117448237,5.7250160311,-0.135429606  
C,0,2.5857932759,3.8748988806,-0.1794366407

C,0,1.3243070667,3.1559026372,-2.1363227646  
H,0,2.3803098559,-5.6607771814,-1.5875124026  
C,0,4.7114609084,0.6682170936,-1.3090091893  
C,0,2.8155964848,-0.1940821037,-2.69193613  
C,0,5.4376218511,-0.4206920054,0.690113075  
C,0,4.5203418521,-2.6061634829,1.4494653522  
C,0,-3.5707330633,-3.2812157919,-0.5592761104  
C,0,-1.788371586,-4.0950395268,0.9807986917  
C,0,-3.1017104737,-2.0878998609,-2.5781345474  
C,0,-0.7605132554,-1.583483034,-3.3154225082  
H,0,-1.9530195562,6.2419410003,0.7887368264  
C,0,-4.7730798492,0.2247996272,0.2498231684  
C,0,-3.3451752573,1.4133618278,-1.4282526134  
C,0,-4.6144929284,0.6541590343,2.5967275619  
C,0,-3.0350554345,2.3493049326,3.5474282357  
C,0,3.7146598011,4.0183172608,-0.9913300452  
C,0,2.7191378073,4.0871197646,1.3001800926  
C,0,2.4767405682,3.3032261365,-2.9070846308  
C,0,0.0497056634,2.6837715636,-2.770407976  
H,0,4.8231853546,1.4584469209,-2.0518011912  
C,0,5.563698999,0.6412889607,-0.2044810881  
H,0,2.6287441476,-1.1873325996,-3.1254524854  
H,0,3.2571238906,0.4548515238,-3.4593376627  
H,0,1.8351092963,0.23123397,-2.425456298  
H,0,6.1290164915,-0.4926069217,1.5357517476  
H,0,3.5746021574,-3.1603249728,1.4818927178  
H,0,4.7847149138,-2.3002702338,2.4721997291  
H,0,5.2944782892,-3.316951841,1.114745102  
H,0,-4.2881184475,-3.7053857785,0.1503356116  
C,0,-4.0415820532,-2.6366853105,-1.6995438242  
H,0,-2.2929982806,-5.0666273367,1.0955992614  
H,0,-2.0750399665,-3.473645483,1.8445703061  
H,0,-0.7057971456,-4.2652868588,1.0291340985  
H,0,-3.4479770854,-1.5704970146,-3.4780381871  
H,0,-0.0024265021,-2.3130593161,-3.6384029801  
H,0,-0.212614437,-0.7534963303,-2.8415496463  
H,0,-1.2745539001,-1.1938225585,-4.2046964477  
H,0,-5.2493978272,-0.2819009329,-0.5911706031  
C,0,-5.204358162,-0.0509968955,1.5477295708  
H,0,-4.1009883568,1.0391428698,-2.1318505506  
H,0,-2.3963648414,0.9080933296,-1.674118594  
H,0,-3.1972024664,2.4893332592,-1.6006204458  
H,0,-4.9616830176,0.4794902673,3.6196233607  
H,0,-1.9486985933,2.4900816376,3.4707988866  
H,0,-3.2550718462,1.8404038724,4.4968261082  
H,0,-3.476521315,3.3573051686,3.6042855938  
H,0,4.6534417973,4.3459290904,-0.5345833988  
C,0,3.6783324946,3.7607466962,-2.3601351716  
H,0,3.0593078556,3.1491451376,1.7732927824  
H,0,1.7680758726,4.3650736554,1.7725896803  
H,0,3.4662548324,4.8599723785,1.5320857343

H,0,2.4270685436,3.0727206234,-3.97576324  
H,0,-0.7670386106,3.4058807638,-2.6163438242  
H,0,-0.2805950853,1.7363624566,-2.3165410361  
H,0,0.1768448537,2.5247801775,-3.8499756301  
C,0,6.5774530218,1.7252856805,0.0139667738  
C,0,-5.5096830049,-2.5720477918,-2.0054262597  
C,0,-6.2548398652,-1.0914133253,1.8018463406  
C,0,4.8866522517,3.9711263402,-3.2262066482  
H,0,6.9254645559,2.1491732328,-0.9394154498  
H,0,7.4530807535,1.3589397972,0.5694905053  
H,0,6.1400015396,2.5530558225,0.59719273  
H,0,-5.8115569664,-3.4126102231,-2.6526737747  
H,0,-5.7736338018,-1.6461128903,-2.5382243498  
H,0,-6.1175129701,-2.6294664112,-1.0909265899  
H,0,-6.726063834,-0.9632390969,2.7867908334  
H,0,-5.810646596,-2.1008895428,1.7761850978  
H,0,-7.0444623129,-1.0643909422,1.0359824719  
H,0,5.0043767753,3.1603400666,-3.9618570522  
H,0,5.8078203018,4.0262499379,-2.6282479963  
H,0,4.8068204081,4.9119602098,-3.7959456438  
C,0,-0.352925299,-0.881104899,2.0185027553  
C,0,2.0528057952,-0.8921392003,2.7997557502  
H,0,2.2020729056,-1.8020828182,2.2057785266  
H,0,3.0063401989,-0.3416985642,2.8266476301  
H,0,1.8072996412,-1.1988605888,3.8303324829  
C,0,-1.3380873212,-0.8704738358,3.1336566986  
H,0,-2.0112698779,-0.0129245962,3.174782367  
C,0,-1.4833343913,-1.8018481119,4.0944413889  
C,0,-0.6379389907,-3.0336568515,4.2271819805  
H,0,0.0974551844,-3.1443462887,3.4205021134  
H,0,-0.0861044668,-3.0172326543,5.182821886  
H,0,-1.2644901527,-3.9416404131,4.2475289822  
H,0,-0.0424027546,-1.9202661068,1.8246075903  
C,0,0.7204989257,1.1851464803,3.1099015765  
H,0,0.4675554275,0.8756353987,4.136600666  
H,0,1.6398362061,1.7898029955,3.1596198601  
H,0,-0.0874513987,1.8325890214,2.744424223  
C,0,-2.5413971551,-1.6489106842,5.147510646  
H,0,-3.2439725424,-2.5001742874,5.1275653278  
H,0,-2.099121588,-1.6344864948,6.1586491495  
H,0,-3.1214413598,-0.725928507,5.0104863329

## [2+2]-Addukte (Alkine)

Acetylen

P,0,-1.1461062244,0.1854778902,-0.7510522538  
P,0,1.3054532435,-0.2321231251,-0.0808316945  
N,0,-0.2670294134,-1.0933942583,0.1415377317  
C,0,-0.1253471609,-0.1935939005,-2.3143541971  
N,0,0.1812701205,1.1109288851,-0.0536000788

C,0,-0.4564297996,-2.4712114777,0.0517676443  
C,0,0.3631011092,2.4847992743,0.026657592  
C,0,-1.655312664,-3.0296167279,-0.4571222353  
C,0,0.5479119527,-3.3593560121,0.5163302777  
C,0,1.5813972967,3.1018901106,-0.3399219194  
C,0,-0.6915638331,3.2834365389,0.5299743519  
C,0,-1.8207163624,-4.4163124624,-0.4962274532  
C,0,-2.7632265566,-2.1646773066,-0.9395720758  
C,0,0.345783829,-4.7393102217,0.4563980266  
C,0,1.8237350994,-2.8433125603,1.0770184043  
C,0,1.7085421568,4.4900872666,-0.2389015783  
C,0,2.7410743141,2.3030686994,-0.8250505496  
C,0,-0.5314318875,4.6698751384,0.5950536794  
C,0,-1.9342980743,2.6800996795,1.0866825709  
H,0,-2.7618212111,-4.8098035742,-0.8893853337  
C,0,-0.8316390488,-5.2824774138,-0.0456392679  
C,0,-3.6365986459,-1.5689339214,-0.0051166112  
C,0,-2.9618607594,-1.9683452105,-2.3212783042  
H,0,1.1401555311,-5.3914238064,0.8289929012  
C,0,3.0035658339,-2.8998128388,0.3114146354  
C,0,1.8415085535,-2.2743542143,2.3678404349  
H,0,2.6603314644,4.9451120234,-0.5255430377  
C,0,0.6572836275,5.2824372447,0.2101087644  
C,0,3.6838280088,1.7923035331,0.0890570954  
C,0,2.9187721999,2.1039312087,-2.2101430638  
H,0,-1.3553763836,5.2676848688,0.9937366328  
C,0,-3.1669721757,2.8209744879,0.4212610643  
C,0,-1.8774420752,2.0203538789,2.3310681265  
H,0,-0.9785674604,-6.3638133773,-0.0785680868  
C,0,-4.6618060648,-0.7475952218,-0.4683248999  
C,0,-3.4285072858,-1.7750536869,1.4645608877  
C,0,-3.976967476,-1.1029885833,-2.7384296527  
C,0,-2.113785341,-2.6849191886,-3.3325209388  
C,0,4.1800613181,-2.3615507756,0.8414822103  
C,0,3.0040330959,-3.4922607409,-1.0692617492  
C,0,3.0372744002,-1.7538390412,2.8584359039  
C,0,0.5821305712,-2.1902478181,3.1780812218  
H,0,0.7703312674,6.3663207593,0.2801377384  
C,0,4.762094193,1.0480740748,-0.3975612262  
C,0,3.5180348749,1.9882270051,1.5668113692  
C,0,4.0074679831,1.3499804936,-2.6515418382  
C,0,1.9474458631,2.6927642883,-3.1889780514  
C,0,-4.3260724638,2.3353050395,1.0288439893  
C,0,-3.237842717,3.4132139512,-0.9562428472  
C,0,-3.0602151303,1.5391256836,2.8965139096  
C,0,-0.570790672,1.8243046262,3.0421809351  
H,0,-5.333026107,-0.2843109665,0.2578044799  
C,0,-4.8289448519,-0.4745907728,-1.8278010779  
H,0,-3.2509437765,-2.8335810533,1.7043657526  
H,0,-4.291102953,-1.4164548031,2.0412085137  
H,0,-2.5440236753,-1.2115302219,1.8048512413

H,0,-4.1125850311,-0.9243161669,-3.809492469  
H,0,-1.0547609801,-2.7001256675,-3.0388357794  
H,0,-2.200166053,-2.2189378994,-4.3245924796  
H,0,-2.4277658522,-3.7370681103,-3.4298966871  
H,0,5.0921276203,-2.3872546246,0.237884989  
C,0,4.2186053271,-1.7838582631,2.1093583909  
H,0,3.9290281827,-3.2373681209,-1.60576904  
H,0,2.1467180968,-3.137336507,-1.6609459424  
H,0,2.9235595159,-4.5904271446,-1.0377604406  
H,0,3.0482187034,-1.3066739166,3.8573361195  
H,0,0.0848796166,-3.1692667712,3.2498090095  
H,0,-0.1352740255,-1.5041854146,2.6991095676  
H,0,0.785541913,-1.8238165078,4.1937425187  
H,0,5.4840503974,0.6414734008,0.3155044329  
C,0,4.9316868105,0.798605275,-1.7590148515  
H,0,4.4889063452,1.9501508545,2.0806368535  
H,0,2.8900374361,1.1807396431,1.9826582155  
H,0,3.030278725,2.9432636994,1.8040029395  
H,0,4.1361833984,1.187156154,-3.7260623807  
H,0,0.9241974991,2.3420020975,-2.9842368711  
H,0,2.2065098966,2.4189263935,-4.2212207743  
H,0,1.9240592337,3.7908879451,-3.115587674  
H,0,-5.2811807343,2.4500366883,0.5070844959  
C,0,-4.2975076912,1.698665013,2.2705442007  
H,0,-4.2796616959,3.5879435587,-1.259822915  
H,0,-2.7866989304,2.7189048646,-1.6862657406  
H,0,-2.6889042846,4.3613736702,-1.0377280602  
H,0,-3.011972652,1.0314264566,3.8647214638  
H,0,0.0025867376,2.7617796334,3.1001843978  
H,0,0.0543185156,1.101129303,2.4947973118  
H,0,-0.7259925462,1.4443974862,4.0614426651  
C,0,-5.8806990459,0.4910063289,-2.2888840799  
C,0,5.4908588495,-1.2193353849,2.6705189226  
C,0,6.0566872384,-0.0662713995,-2.2480460302  
C,0,-5.5622634999,1.2214752414,2.9235628583  
H,0,-6.7842803255,0.4317665443,-1.6643084107  
H,0,-6.1710944917,0.3101872013,-3.3337660199  
H,0,-5.5075441363,1.5268709104,-2.2241207921  
H,0,5.8222128202,-1.7887650032,3.5538799801  
H,0,5.3560353637,-0.1754185319,2.9935564988  
H,0,6.3050541102,-1.2455231125,1.9324815486  
H,0,6.3793789099,0.2185143309,-3.2600574874  
H,0,5.7440367628,-1.1238029329,-2.2902319735  
H,0,6.9286408741,-0.0114257582,-1.5801826933  
H,0,-5.370589046,0.3913310231,3.6191365515  
H,0,-6.3010011415,0.8828058595,2.1812287513  
H,0,-6.0374167734,2.0302967091,3.5037522627  
C,0,1.1395824026,-0.4371951166,-1.9662740025  
H,0,1.9766585559,-0.6762376882,-2.6264862612  
H,0,-0.5399355788,-0.19650261,-3.3261721536



## Diphenylacetylen

P,0,-0.0762899266,4.1931184044,4.4974524271  
P,0,1.41069553,6.2479566978,4.3067764973  
N,0,-0.2915994382,5.8636224501,3.99223594  
C,0,0.4993895836,4.6755792326,6.2610630953  
N,0,1.536262082,4.5574658029,3.8267501912  
C,0,-1.3600398651,6.7669415323,4.0190354723  
C,0,2.6230586166,3.7506866778,3.4913654543  
C,0,-2.5616226947,6.5380232122,4.728050208  
C,0,-1.2385157097,7.9566046808,3.2507213556  
C,0,3.9559527058,4.2280324669,3.5558906224  
C,0,2.4104618202,2.4324139155,3.0077497529  
C,0,-3.5559031265,7.5233283047,4.7273853236  
C,0,-2.8954032149,5.2763553597,5.452364771  
C,0,-2.2456346775,8.9210715623,3.3091850684  
C,0,-0.1527550495,8.1900850757,2.2485685722  
C,0,5.0107216042,3.4026234651,3.1587095655  
C,0,4.324046322,5.591879953,4.0356324868  
C,0,3.4989048246,1.6413039032,2.6383094799  
C,0,1.0540540728,1.8443795063,2.826701737  
H,0,-4.4726650314,7.3174750085,5.2738049702  
C,0,-3.4006533083,8.724742328,4.0547525107  
C,0,-3.3646443668,4.1563637613,4.7402180801  
C,0,-2.9275047507,5.2715438098,6.8634464087  
H,0,-2.1230687548,9.8229536825,2.7152413079  
C,0,0.8267185451,9.1792759919,2.4267319966  
C,0,-0.2309344612,7.5046974611,1.0144250698  
H,0,6.017867443,3.8079466015,3.2171317055  
C,0,4.8032225599,2.1088952508,2.7048912286  
C,0,4.3844193646,6.6724711424,3.1364002782  
C,0,4.7513355423,5.7613364365,5.3684617316  
H,0,3.2941265409,0.6412611668,2.2647130799  
C,0,0.604660249,0.8228748664,3.6817070796  
C,0,0.254093699,2.2553080123,1.7419279288  
H,0,-4.1815004627,9.4786225272,4.0776106853  
C,0,-3.8115133937,3.0391960691,5.450618882  
C,0,-3.4217735729,4.1449111267,3.2384541709  
C,0,-3.3908061491,4.1411949715,7.529337407  
C,0,-2.4914714774,6.4779856537,7.6480263755  
C,0,1.7086723183,9.4661170625,1.3791661156  
C,0,0.9902676412,9.9296593961,3.7199236299  
C,0,0.6731900021,7.8137988141,0.0031498456  
C,0,-1.3093067952,6.4887420872,0.7644963189  
H,0,5.636657906,1.4837369065,2.4005690851  
C,0,4.8053359111,7.9182377439,3.6033598932  
C,0,3.9853105489,6.5010166697,1.6998047076  
C,0,5.1524563991,7.0241367258,5.7970175483  
C,0,4.816924085,4.5860316806,6.3034837742  
C,0,-0.6641107252,0.27535821,3.4768028172  
C,0,1.4679963749,0.2963870286,4.7978959204

C,0,-0.999315532,1.6741634838,1.5670706709  
C,0,0.7463277109,3.2966308109,0.776451631  
H,0,-4.1668167104,2.1743228549,4.8937847567  
C,0,-3.8331479959,3.0101546564,6.8409725871  
H,0,-3.6893291907,5.1257669509,2.8366326066  
H,0,-4.1569143552,3.4151917845,2.8871945314  
H,0,-2.4526636893,3.8616898394,2.809816049  
H,0,-3.3984994173,4.1388586149,8.6170753196  
H,0,-1.5011947198,6.8233804903,7.3332706722  
H,0,-2.4549587058,6.2524269033,8.716449408  
H,0,-3.1762867571,7.3203989693,7.503000357  
H,0,2.458790077,10.2414222704,1.5266390496  
C,0,1.6512322619,8.7991932549,0.161870678  
H,0,1.0973448301,11.0046646886,3.5413078894  
H,0,1.898814094,9.5922045595,4.2336429487  
H,0,0.1427873617,9.7810745701,4.392235764  
H,0,0.5959732244,7.2886113948,-0.9471709152  
H,0,-2.3037944382,6.9291310828,0.8954440905  
H,0,-1.2347476685,5.6518323414,1.4653646487  
H,0,-1.242014614,6.0918123017,-0.2518768699  
H,0,4.8389437258,8.754289771,2.9076537108  
C,0,5.1757762623,8.1187374433,4.9314076511  
H,0,4.3253929276,7.3477763371,1.0986811368  
H,0,2.8943091556,6.4482964687,1.5969609983  
H,0,4.398299277,5.5810575113,1.2762810394  
H,0,5.4499813236,7.1575611115,6.8348765296  
H,0,3.8612593773,4.0539524659,6.352488965  
H,0,5.0882532308,4.9050657402,7.3121359459  
H,0,5.5606740237,3.8573597864,5.9625542794  
H,0,-1.0171804396,-0.5014435193,4.1525711732  
C,0,-1.4842479642,0.690819574,2.4317966313  
H,0,0.871306203,-0.2703975902,5.518316879  
H,0,1.9871304557,1.0971493129,5.332019904  
H,0,2.2450138551,-0.3754293507,4.4155583902  
H,0,-1.6147247934,1.9957427085,0.7285929316  
H,0,1.7212501847,3.0196697974,0.362033167  
H,0,0.8735257589,4.2666506691,1.2693942128  
H,0,0.0439538995,3.4241336759,-0.0513749917  
C,0,-4.3198081624,1.8020825856,7.5900118893  
C,0,2.6083797728,9.1159867428,-0.9526179582  
C,0,5.6076922302,9.4705150884,5.4266380875  
C,0,-2.8395451063,0.0782456736,2.2148965055  
H,0,-4.6767502777,1.0255421138,6.9082124474  
H,0,-5.1408948185,2.0577491451,8.2686849501  
H,0,-3.5167948727,1.3748790581,8.2006550966  
H,0,2.0804617028,9.2740147837,-1.898910006  
H,0,3.3157018017,8.2938673388,-1.1137668787  
H,0,3.1896729247,10.0165476925,-0.7367865799  
H,0,6.6505665712,9.4569641871,5.7630301214  
H,0,4.9979850563,9.7852647221,6.2804082359  
H,0,5.5183945103,10.23081136,4.6460982304

H,0,-3.5951926647,0.8439488987,2.0115599472  
H,0,-3.163721998,-0.4938593457,3.0885152811  
H,0,-2.8342570191,-0.6040194373,1.3565776326  
C,0,1.2443247676,5.797347103,6.1638981136  
C,0,0.0977763595,3.8615380117,7.4152046046  
C,0,-0.1754122005,2.4975454746,7.2293845955  
C,0,-0.0385568578,4.3855420943,8.7120634181  
C,0,-0.5254018531,1.680234483,8.2986817515  
H,0,-0.120551471,2.0724512396,6.2317006318  
C,0,-0.4036230908,3.5723668398,9.7762708823  
H,0,0.1350484614,5.4417649615,8.8816269436  
C,0,-0.6395568981,2.2122676777,9.5790368316  
H,0,-0.714714028,0.6241730582,8.12677827  
H,0,-0.5038383276,4.0034003646,10.7687063993  
H,0,-0.9138156809,1.5765222177,10.4160779067  
C,0,1.8946124612,6.6299491931,7.1858515802  
C,0,1.8475041063,8.0270583358,7.0695940811  
C,0,2.5895632469,6.0835698249,8.2764760699  
C,0,2.4551498474,8.8482696891,8.0138141273  
H,0,1.3176380639,8.4740007628,6.2337050436  
C,0,3.2075083713,6.9035773119,9.2121413537  
H,0,2.645140103,5.0055648079,8.3837302683  
C,0,3.1422363939,8.290664301,9.0880207012  
H,0,2.3898668372,9.9276042549,7.9076480121  
H,0,3.742712553,6.4565730927,10.0454997884  
H,0,3.621159075,8.9296098413,9.8242900832

#### 1-Pentin

P,0,1.3036398995,0.1569884122,-0.1828525081  
P,0,-1.1560916541,-0.1443238087,0.4935505363  
N,0,0.113211283,-1.1374148383,-0.2146547057  
C,0,1.1625466693,0.3648606277,1.6902267922  
N,0,-0.2263637571,1.0902672889,-0.4032319596  
C,0,0.2402673463,-2.515757174,-0.3170686784  
C,0,-0.3538958844,2.477063873,-0.3774644647  
C,0,1.4543550425,-3.1788607465,-0.0176713214  
C,0,-0.8607462533,-3.2795384231,-0.7742803806  
C,0,-1.5516983183,3.113304949,0.0351079126  
C,0,0.712532312,3.3025781396,-0.8220779966  
C,0,1.5403305505,-4.5663293394,-0.1645739336  
C,0,2.6495980921,-2.4440347371,0.4817265631  
C,0,-0.7409238875,-4.6676042315,-0.8804075507  
C,0,-2.131332278,-2.6566166332,-1.2382904432  
C,0,-1.6578703448,4.50608294,-0.0038157042  
C,0,-2.7240930791,2.3358365279,0.509872127  
C,0,0.5686569671,4.6912292157,-0.8378457915  
C,0,1.9977132453,2.7299965798,-1.3017827678  
H,0,2.4915293955,-5.0517104752,0.0698921629  
C,0,0.450054307,-5.3212533076,-0.5818105856  
C,0,3.6127754432,-1.9433955502,-0.4152874711

C,0,2.843273375,-2.3158577303,1.8724172493  
H,0,-1.6038398466,-5.2327669581,-1.2427195863  
C,0,-3.3093962118,-2.7911982589,-0.4821810276  
C,0,-2.1675521499,-2.0161236609,-2.4934322073  
H,0,-2.60296871,4.95583449,0.3119187114  
C,0,-0.6095951749,5.3088263324,-0.4351770077  
C,0,-3.5662122051,1.6977068629,-0.4226795977  
C,0,-3.022210216,2.2859948611,1.8858023231  
H,0,1.4122529036,5.2887622834,-1.1935339385  
C,0,3.138257027,2.7681565406,-0.4779693048  
C,0,2.0699541846,2.1587294911,-2.5892791534  
H,0,0.530933685,-6.4051372383,-0.6866880828  
C,0,4.7239067163,-1.2678992239,0.0959317647  
C,0,3.4313289729,-2.0872780289,-1.8965959316  
C,0,3.9655772367,-1.630333538,2.3405585059  
C,0,1.8515345438,-2.9100417779,2.8270580943  
C,0,-4.5146848007,-2.328333672,-1.0146912979  
C,0,-3.2718063061,-3.3793135052,0.8987645611  
C,0,-3.39236556,-1.5637342911,-2.9856740665  
C,0,-0.9104218503,-1.8183112573,-3.2881295945  
H,0,-0.71109808,6.3954198274,-0.4644413614  
C,0,-4.6601385049,0.9712228409,0.0433013993  
C,0,-3.2633997496,1.7760637485,-1.8883148528  
C,0,-4.1093426114,1.5179383991,2.3119547717  
C,0,-2.1952346745,3.0551601585,2.8762840011  
C,0,4.33129387,2.2131108319,-0.9503455736  
C,0,3.0787134091,3.3677931525,0.8981782669  
C,0,3.2812914566,1.6244733666,-3.0230621976  
C,0,0.8479152458,2.0886799082,-3.4558617101  
H,0,5.4623385724,-0.8672392129,-0.6026872735  
C,0,4.9078882654,-1.0808879567,1.4659249241  
H,0,3.0198520988,-3.0701486663,-2.1651770187  
H,0,4.3824670249,-1.9441076388,-2.4276838043  
H,0,2.7264226333,-1.3219762683,-2.2650869618  
H,0,4.1098648832,-1.5259367129,3.4204153598  
H,0,0.8636479234,-2.4397593439,2.7033447517  
H,0,2.1691231642,-2.7757761984,3.869458354  
H,0,1.7121063826,-3.9849308044,2.6385333373  
H,0,-5.4293620044,-2.436854721,-0.4240451604  
C,0,-4.5816659809,-1.7261565919,-2.2710431491  
H,0,-4.2734180129,-3.3919259943,1.3510950468  
H,0,-2.6124420499,-2.7842491236,1.5526201149  
H,0,-2.8769071962,-4.4057903559,0.9055860918  
H,0,-3.4177397425,-1.0766702987,-3.9654094011  
H,0,-0.3594567614,-2.7630088913,-3.4128290487  
H,0,-0.2356661058,-1.1239922683,-2.7623918684  
H,0,-1.1278590698,-1.4054876586,-4.2829049303  
H,0,-5.3088348938,0.4743652312,-0.6801760546  
C,0,-4.9296516708,0.8402640238,1.4070891003  
H,0,-4.0926828194,1.3788172267,-2.4874832486  
H,0,-2.3658205047,1.1819257979,-2.1257236071

H,0,-3.0576792907,2.8104612175,-2.2012706858  
H,0,-4.3270795555,1.4564741244,3.3828855551  
H,0,-1.1185680795,2.9139226788,2.6994194191  
H,0,-2.4265535909,2.7567749311,3.9084392189  
H,0,-2.3828726976,4.1370880634,2.7903690462  
H,0,5.2133228151,2.2259585468,-0.3031550344  
C,0,4.4254697646,1.641657272,-2.2185616467  
H,0,3.9765774611,3.1111391244,1.4782116049  
H,0,2.1932927363,3.0196819914,1.4512262699  
H,0,3.0051128008,4.4660860965,0.8560550502  
H,0,3.3348780828,1.1774097013,-4.0205647475  
H,0,0.3774146507,3.0772310282,-3.5672664721  
H,0,0.0915319667,1.4290269043,-2.9999387518  
H,0,1.088586577,1.6990912282,-4.4545875272  
C,0,6.0704275239,-0.2853499695,1.9837475768  
C,0,-5.8900388281,-1.2637891417,-2.8444156789  
C,0,-6.0551078714,-0.0302124379,1.8833221596  
C,0,5.7217503894,1.0801113442,-2.7252979647  
H,0,6.9337374949,-0.3418366062,1.3048505231  
H,0,6.3903312042,-0.6306166014,2.9777212672  
H,0,5.7998180144,0.7802494921,2.0796344237  
H,0,-6.1960711012,-1.8933061516,-3.6960135058  
H,0,-5.8252428103,-0.2299776453,-3.2194191862  
H,0,-6.6957819921,-1.3040105489,-2.09728657  
H,0,-6.8945858604,-0.0293235166,1.172601771  
H,0,-6.4331323214,0.2904059874,2.864886157  
H,0,-5.71642359,-1.0752076167,1.9854512077  
H,0,5.5886032472,0.0662886121,-3.1332567184  
H,0,6.4806638862,1.0330808449,-1.9314047415  
H,0,6.1303370768,1.7017796613,-3.5386856292  
C,0,-0.1025360216,0.1566552016,2.0748066051  
C,0,-0.720861836,0.0766667596,3.4325838139  
H,0,-0.9045075739,-0.9930818281,3.6570210834  
H,0,-1.7310236409,0.5108945682,3.3716267673  
C,0,0.0558342964,0.7143450437,4.5826122013  
H,0,0.3990308576,1.7138952945,4.2656878017  
H,0,-0.6453301315,0.8886526308,5.4161806458  
C,0,1.2338018467,-0.0983232579,5.0991672936  
H,0,1.9919792335,-0.2708011618,4.3223390716  
H,0,1.7284315352,0.4120855513,5.9396436598  
H,0,0.9045152032,-1.0863690888,5.4583920032  
H,0,2.0292789219,0.5541438558,2.3265791208

## 2-Butin

P,0,-1.2680935126,0.1971749205,-0.3866087034  
P,0,1.2681001139,-0.1971552244,-0.3868758835  
N,0,-0.1825422307,-1.1115218265,0.1097883997  
C,0,-0.6542993383,0.1523249765,-2.1919117967  
N,0,0.182644352,1.1115212121,0.1098488443  
C,0,-0.3381082022,-2.4910101712,0.1148738448

C,0,0.3382376937,2.4910031422,0.1149828794  
C,0,-1.5497643004,-3.1198401389,-0.2598902555  
C,0,0.7361316979,-3.3074924535,0.5593466746  
C,0,1.5499054773,3.1198233691,-0.2597720337  
C,0,-0.7359735414,3.3075036455,0.5594864403  
C,0,-1.6453038965,-4.5148102007,-0.237464997  
C,0,-2.7663734808,-2.3509859734,-0.6363454625  
C,0,0.6014427676,-4.6969977782,0.5523131766  
C,0,1.9971641202,-2.7306220804,1.1005117984  
C,0,1.6455046298,4.5147855774,-0.2372393504  
C,0,2.7664443605,2.3509487765,-0.6364118476  
C,0,-0.601225061,4.6970034163,0.5525692863  
C,0,-1.9970710508,2.7306257653,1.1004874405  
H,0,-2.5973910864,-4.9676270653,-0.5270202791  
C,0,-0.5777653755,-5.3149264915,0.1498908596  
C,0,-3.590634358,-1.813335686,0.3742793063  
C,0,-3.1466755885,-2.2452083457,-1.9882269872  
H,0,1.445155422,-5.2962612653,0.9046095843  
C,0,3.1967241861,-2.8368926639,0.3731839136  
C,0,1.99278093,-2.1104773637,2.366926075  
H,0,2.5975995849,4.9675831492,-0.526799856  
C,0,0.5780095347,5.3149183344,0.1502056025  
C,0,3.5908170526,1.813215211,0.3740779142  
C,0,3.1465499678,2.2452118493,-1.9883511857  
H,0,-1.4449271704,5.2962707647,0.9048852363  
C,0,-3.1965551814,2.8369672309,0.3730477966  
C,0,-1.9928167648,2.1103685246,2.3668470648  
H,0,-0.6706321393,-6.4026963028,0.1621832398  
C,0,-4.7612246918,-1.1491825568,0.0111417734  
C,0,-3.1931766128,-1.9178528649,1.8153439456  
C,0,-4.3246132913,-1.5640301927,-2.3079853736  
C,0,-2.2948518916,-2.8447894111,-3.069376412  
C,0,4.3752732588,-2.3323800876,0.9272779364  
C,0,3.2142933357,-3.4435510532,-1.0008855672  
C,0,3.1920184424,-1.6176491473,2.8817440271  
C,0,0.7187543955,-1.9631374024,3.1449114432  
H,0,0.6709202931,6.4026832111,0.1625792172  
C,0,4.7613265505,1.1490258931,0.0107510291  
C,0,3.1935329633,1.9176555989,1.8151957644  
C,0,4.3244012068,1.563974543,-2.3083022321  
C,0,2.2946260781,2.8449285058,-3.0693463063  
C,0,-4.375161082,2.3323926322,0.9269700063  
C,0,-3.213989472,3.4438262141,-1.0009343122  
C,0,-3.1921058097,1.6174961184,2.8814989906  
C,0,-0.7188675349,1.9629830536,3.1449509162  
H,0,-5.3919854185,-0.7274436659,0.7964566564  
C,0,-5.1377383629,-0.9970437053,-1.3241914038  
H,0,-2.854835338,-2.9324249318,2.0715125035  
H,0,-4.024106244,-1.64025415,2.4775636241  
H,0,-2.356707453,-1.2323156236,2.0319667826  
H,0,-4.6155461616,-1.4759586177,-3.3595441321

H,0,-1.253084661,-2.4976133953,-2.9875112547  
H,0,-2.6741497004,-2.5811813066,-4.0664450308  
H,0,-2.2638171337,-3.9425699428,-2.9933972154  
H,0,5.3040173804,-2.4073229975,0.3536010145  
C,0,4.3975217245,-1.7270986884,2.1833527821  
H,0,4.1565454239,-3.2162997465,-1.519295437  
H,0,2.3815523763,-3.0657692627,-1.6136498153  
H,0,3.1009111955,-4.5386021319,-0.9690913706  
H,0,3.1850370695,-1.1392773616,3.8661029073  
H,0,0.1803203039,-2.9200474038,3.2192640182  
H,0,0.0420018317,-1.2575388714,2.6372182467  
H,0,0.9126934623,-1.5894522652,4.1597828016  
H,0,5.3921781495,0.72722568,0.7959607655  
C,0,5.1376388072,0.9969151962,-1.324643618  
H,0,4.0245186072,1.6399528971,2.4773013253  
H,0,2.3570441627,1.2321557297,2.0318587919  
H,0,2.8552838026,2.932229858,2.0714755864  
H,0,4.6151867451,1.4759344867,-3.3599045926  
H,0,1.2528561273,2.4977763352,-2.9874092797  
H,0,2.6738093217,2.5814180191,-4.0664841007  
H,0,2.263633494,3.9427014745,-2.9932397501  
H,0,-5.3038508559,2.4074045695,0.3532134461  
C,0,-4.3975376648,1.7270029354,2.1829893502  
H,0,-4.1562193959,3.2167165032,-1.5194454071  
H,0,-2.3812238253,3.0660928567,-1.6136942594  
H,0,-3.1005344749,4.5388645358,-0.9689596436  
H,0,-3.1852311456,1.1390534665,3.8658241669  
H,0,-0.1804735944,2.9199030875,3.2194683261  
H,0,-0.0420348557,1.2574626669,2.6372553664  
H,0,-0.9129031415,1.5891776969,4.1597595698  
C,0,-6.3636750069,-0.2127799579,-1.6897518654  
C,0,5.6789919036,-1.2271062259,2.784494077  
C,0,6.3634913956,0.2126188492,-1.6904158837  
C,0,-5.6790729861,1.2269967667,2.7839802829  
H,0,-7.1474094294,-0.3080496334,-0.9238974317  
H,0,-6.7825072829,-0.5353409801,-2.6539566838  
H,0,-6.1238957953,0.8606930353,-1.7779765243  
H,0,6.0213468871,-1.8917436372,3.5948841285  
H,0,5.5566051436,-0.2249094126,3.2238264099  
H,0,6.4844596946,-1.1776500237,2.0376285861  
H,0,7.1472822343,0.3076995122,-0.9245964087  
H,0,6.7822847323,0.5353118544,-2.6545938567  
H,0,6.1236273979,-0.8608207338,-1.7788103914  
H,0,-5.556757483,0.2247541491,3.2232273337  
H,0,-6.484485053,1.1776451458,2.0370487008  
H,0,-6.021460999,1.8915683532,3.5944100632  
C,0,0.6539632357,-0.1520930339,-2.1920454935  
C,0,1.5420571385,-0.4689960906,-3.345123633  
H,0,1.6882054882,-1.5611138826,-3.4181111072  
H,0,2.5418712419,-0.0299430885,-3.2189710614  
H,0,1.122781738,-0.1254885719,-4.3024705294

C,0,-1.5425905056,0.4693322202,-3.3448060182  
H,0,-1.1234171686,0.1260180399,-4.3022666386  
H,0,-2.5423414918,0.0301586042,-3.21857759  
H,0,-1.6888633381,1.5614449271,-3.4175977713

### 1,3-Butadiin

P,0,1.1595623239,-0.0823597256,-0.5118048132  
P,0,-1.358160125,0.1435563691,-0.0126621759  
N,0,0.1117303773,1.1494252314,0.2214888098  
C,0,0.1815919217,0.0463608028,-2.1846844905  
N,0,-0.120514797,-1.0924103053,0.1618681944  
C,0,0.1963200992,2.5396936414,0.1535826707  
C,0,-0.1946533092,-2.4803437616,0.2135021492  
C,0,1.3786336254,3.1935697872,-0.2692443785  
C,0,-0.900722726,3.3398947234,0.5620806484  
C,0,-1.3546999022,-3.1905569581,-0.1739815782  
C,0,0.9198854813,-3.2005138339,0.7069109305  
C,0,1.4394021373,4.588914745,-0.2845236159  
C,0,2.5721329388,2.4200382651,-0.6961697019  
C,0,-0.8032755586,4.7322275344,0.5242957667  
C,0,-2.1605345941,2.7270154295,1.05762599  
C,0,-1.3709036605,-4.5857134834,-0.0850019983  
C,0,-2.5740915691,-2.4993819494,-0.6774677646  
C,0,0.8684183826,-4.5953560665,0.7625547925  
C,0,2.1289228659,-2.5160266186,1.2431548  
H,0,2.3712788299,5.0577047981,-0.6113565582  
C,0,0.3584451352,5.3706722544,0.1052856347  
C,0,3.4526534446,1.8998647726,0.2740853914  
C,0,2.8356122232,2.2390747057,-2.0690445315  
H,0,-1.6677658436,5.3159628632,0.8514328079  
C,0,-3.2962833568,2.6780623634,0.2281999609  
C,0,-2.2057407438,2.1832164216,2.3579886858  
H,0,-2.2808797658,-5.111236142,-0.3862782648  
C,0,-0.266468472,-5.2972253606,0.3692735685  
C,0,-3.5579093948,-2.0449426073,0.2229273159  
C,0,-2.7732897386,-2.369271255,-2.06903262  
H,0,1.738576529,-5.1283333113,1.154742717  
C,0,3.3487222446,-2.5666852863,0.5436138756  
C,0,2.0605675542,-1.8757375439,2.4980797739  
H,0,0.4227113099,6.4604358513,0.0904677339  
C,0,4.5599298883,1.1659772283,-0.1468621127  
C,0,3.1691127453,2.0902197275,1.7338544958  
C,0,3.9313652709,1.4581175764,-2.4435190113  
C,0,1.9694147303,2.8907035669,-3.1074359276  
C,0,-4.459683748,2.0713265081,0.7106334634  
C,0,-3.2565079654,3.2302910923,-1.1684149553  
C,0,-3.3871035251,1.5905858464,2.7995859666  
C,0,-0.9866192083,2.2017039032,3.2318187417  
H,0,-0.29490148,-6.3870254219,0.4315551343  
C,0,-4.7010953889,-1.4210244884,-0.2840128313



C,0,-3.3727561558,-2.175571808,1.7053722622  
C,0,-3.9254872071,-1.7304216993,-2.5300013275  
C,0,-1.7643334915,-2.9142869455,-3.035888469  
C,0,4.4897956075,-2.0153421972,1.1311717738  
C,0,3.4232110032,-3.1338030454,-0.8446073482  
C,0,3.2223182334,-1.3249567106,3.040239276  
C,0,0.7603747164,-1.7786354978,3.2408433188  
H,0,5.2410949226,0.7623889703,0.6048849194  
C,0,4.7976637314,0.9047739677,-1.4980216562  
H,0,2.914043254,3.1347490064,1.9654367166  
H,0,4.0280339766,1.7881414144,2.347319156  
H,0,2.3092818232,1.4714857382,2.0404873926  
H,0,4.1137380203,1.2831362625,-3.5076287206  
H,0,0.9008928476,2.7180854396,-2.9127366475  
H,0,2.2015759517,2.5120147824,-4.1109474588  
H,0,2.1153765833,3.9828473191,-3.105736121  
H,0,-5.3376193552,2.018483337,0.0601003942  
C,0,-4.5268306971,1.5242714296,1.9912379753  
H,0,-4.1533881304,2.9385771421,-1.7328508954  
H,0,-2.3695684775,2.8758173865,-1.7162324673  
H,0,-3.1976822586,4.3299803404,-1.1679220232  
H,0,-3.4204463585,1.1653842058,3.8075265598  
H,0,-0.5619578576,3.2139344485,3.3082388139  
H,0,-0.1987585362,1.5597581982,2.804782388  
H,0,-1.2156478397,1.8391421066,4.2433728612  
H,0,-5.4575358614,-1.0603531034,0.4170838135  
C,0,-4.8941656734,-1.2342028177,-1.6520984454  
H,0,-4.3417431559,-2.1951260062,2.2237758822  
H,0,-2.8097630872,-1.3073611815,2.0909155608  
H,0,-2.8106248798,-3.0808593485,1.9720753801  
H,0,-4.0701551474,-1.6172769621,-3.6088571656  
H,0,-0.7525222963,-2.5473998704,-2.8099166582  
H,0,-2.0082952577,-2.630101817,-4.0687959901  
H,0,-1.7185157641,-4.0133137886,-2.9811692497  
H,0,5.436948009,-2.0602463737,0.5854565152  
C,0,4.452045064,-1.3985627779,2.3811670213  
H,0,4.4660943767,-3.2241251245,-1.179471837  
H,0,2.9006259245,-2.4696948295,-1.5551968576  
H,0,2.9465754225,-4.1205088691,-0.9241050629  
H,0,3.1659396241,-0.8338077278,4.0166490414  
H,0,0.2698761327,-2.7603645051,3.3245632675  
H,0,0.0623247625,-1.1192854671,2.7007602538  
H,0,0.9086314739,-1.3742473354,4.2516686944  
C,0,5.9379278506,0.025753822,-1.9203480235  
C,0,-5.7887782139,0.8957609368,2.5058417548  
C,0,-6.0935512334,-0.4931983055,-2.1665949098  
C,0,5.69463026,-0.8377088201,3.0098467101  
H,0,6.7564516922,0.0446922888,-1.1862037861  
H,0,6.3435002157,0.3254550948,-2.8977454515  
H,0,5.6027506081,-1.0210767072,-2.0119899003  
H,0,-6.2132093403,1.4828458909,3.3363657034

H,0,-5.6023905754,-0.1181390574,2.892748892  
H,0,-6.555886633,0.8269863982,1.7215751888  
H,0,-6.9349789543,-0.5463975538,-1.4607522816  
H,0,-6.4312367301,-0.8877640556,-3.1361516876  
H,0,-5.8567333732,0.5744067771,-2.3143669105  
H,0,5.5249281546,0.1747176718,3.4084662885  
H,0,6.5244360004,-0.7859374774,2.290183866  
H,0,6.0289652346,-1.462143853,3.8547073273  
C,0,-1.1182777756,0.2244900056,-1.8920032557  
H,0,-1.9365174801,0.3068019772,-2.6102562627  
C,0,0.7882852228,-0.1576929657,-3.4386383276  
C,0,1.3560534769,-0.386064581,-4.4906839939  
H,0,1.8433644352,-0.5817110618,-5.4272844665

## 2,4-Hexadiin

P,0,1.1939658764,-0.1460100451,-0.0610141363  
P,0,-1.3365582176,0.1877587055,-0.3831988205  
N,0,0.0472587144,1.1805738902,0.1263812651  
C,0,0.7632231709,-0.362391159,-1.9225035449  
N,0,-0.2961933733,-1.0309831278,0.3757433092  
C,0,0.1896666447,2.5592558475,0.0272804194  
C,0,-0.4324474729,-2.4112608669,0.4832168911  
C,0,1.4176299679,3.1657937777,-0.327355243  
C,0,-0.9162885317,3.3915686959,0.337401128  
C,0,-1.6097391886,-3.0873032336,0.0836418548  
C,0,0.6181054518,-3.1704379993,1.0623832209  
C,0,1.5031153407,4.5580127132,-0.4149327219  
C,0,2.6463994703,2.3662281088,-0.5808482217  
C,0,-0.7907467037,4.7779278284,0.2232740149  
C,0,-2.1987521929,2.8421622221,0.8571916485  
C,0,-1.6984960489,-4.4752388652,0.2266218163  
C,0,-2.7957331986,-2.367254178,-0.4509124663  
C,0,0.4907559599,-4.5560214007,1.1781198242  
C,0,1.8412438887,-2.5302000072,1.6189895338  
H,0,2.4661748925,4.996777771,-0.6890531124  
C,0,0.4069997635,5.3732517889,-0.1579844854  
C,0,3.4536488453,1.9630571996,0.5031307086  
C,0,3.0382257988,2.0765508354,-1.9023343021  
H,0,-1.657520669,5.3949541585,0.4746459683  
C,0,-3.3572683932,2.8572685998,0.0589439195  
C,0,-2.2568371076,2.3444954611,2.1750386021  
H,0,-2.6250175802,-4.9645763166,-0.0853198011  
C,0,-0.6557654638,-5.2224487235,0.7595999666  
C,0,-3.6874871544,-1.7351544125,0.4408148002  
C,0,-3.0751792049,-2.3935763755,-1.8313924417  
H,0,1.3143548883,-5.109802016,1.6365400773  
C,0,3.0798415754,-2.6646067864,0.9634655298  
C,0,1.7560812526,-1.8116820287,2.829549508  
H,0,0.4906425268,6.4594228894,-0.2313838701  
C,0,4.6190119688,1.2420658861,0.2456431028

C,0,3.0358151124,2.2534638116,1.9131494788  
C,0,4.2057210808,1.3410267673,-2.1126365933  
C,0,2.2136898583,2.5481933411,-3.0637448209  
C,0,-4.5604006247,2.3967594267,0.5977752777  
C,0,-3.2986545051,3.3049954215,-1.3734495501  
C,0,-3.478531931,1.8885569001,2.671842718  
C,0,-1.0244793237,2.2860313434,3.0286986866  
H,0,-0.7428980132,-6.3053979736,0.8675279974  
C,0,-4.821421204,-1.1053187149,-0.069635774  
C,0,-3.3973169727,-1.7046145274,1.9106957495  
C,0,-4.2166225327,-1.7375611226,-2.3009882468  
C,0,-2.1617733931,-3.1120111669,-2.7822255975  
C,0,4.2141192911,-2.0829135119,1.5347364335  
C,0,3.1832447528,-3.3602517986,-0.3637234688  
C,0,2.9129140294,-1.2403209097,3.3595549571  
C,0,0.4397775,-1.641944943,3.5291248987  
H,0,5.2355499447,0.9192649283,1.0873887829  
C,0,5.0002457265,0.9008362239,-1.0530633296  
H,0,2.6938361995,3.2916168728,2.0333662648  
H,0,3.8576132501,2.06547811,2.6172138352  
H,0,2.1967908222,1.5992235941,2.2056504026  
H,0,4.4954286968,1.0984743442,-3.1388702577  
H,0,1.1575884475,2.2662997842,-2.9392884281  
H,0,2.5756387043,2.1166943481,-4.0064588985  
H,0,2.2378746416,3.6461331366,-3.1491649841  
H,0,-5.4573479721,2.4041147456,-0.028781526  
C,0,-4.6458766838,1.9172389502,1.9047805045  
H,0,-4.2664792659,3.1570624287,-1.8727454414  
H,0,-2.5372309353,2.7362219587,-1.9315540674  
H,0,-3.0221891812,4.3657636754,-1.4675135003  
H,0,-3.5203075248,1.5068676693,3.6967236569  
H,0,-0.4947251012,3.2505563411,3.0377396572  
H,0,-0.3190151952,1.5406986092,2.6278658933  
H,0,-1.2694649294,2.0100217244,4.0635849814  
H,0,-5.5049776548,-0.6096910672,0.6228470182  
C,0,-5.0932635736,-1.0753337865,-1.4383917218  
H,0,-4.2688512783,-1.355461597,2.4801306983  
H,0,-2.5658481085,-1.0118123764,2.122950532  
H,0,-3.0970264637,-2.6938292181,2.2859686949  
H,0,-4.428483811,-1.7487523301,-3.3748516995  
H,0,-1.1148726228,-2.8014023096,-2.6432200946  
H,0,-2.4471133181,-2.923310867,-3.826360242  
H,0,-2.1872875516,-4.1997339181,-2.6131599357  
H,0,5.1738579526,-2.1814492888,1.018908602  
C,0,4.154948662,-1.371385778,2.7326305537  
H,0,4.2236981841,-3.3744763396,-0.7177670529  
H,0,2.577876477,-2.8461523458,-1.128310609  
H,0,2.8194354748,-4.396958793,-0.319382422  
H,0,2.8429895125,-0.6833341753,4.2990888998  
H,0,-0.07552462,-2.6060886255,3.6553743871  
H,0,-0.2300461923,-1.0005184972,2.9343190386

H,0,0.5712545589,-1.1820878936,4.518319169  
C,0,6.2037853349,0.0399708214,-1.3015071479  
C,0,-5.9545427187,1.4629405979,2.4832715643  
C,0,-6.2767715096,-0.320162727,-1.9679699567  
C,0,5.3898519078,-0.7827235801,3.350433805  
H,0,6.9435350279,0.1318870914,-0.4929828972  
H,0,6.6980387942,0.293811907,-2.2511030478  
H,0,5.9100118204,-1.0223233975,-1.3579573709  
H,0,-6.3407354825,2.194920005,3.2117371185  
H,0,-5.8511035939,0.5054277696,3.0170835789  
H,0,-6.7205284169,1.3392159092,1.7041422968  
H,0,-7.1093907569,-0.3184343369,-1.2493501199  
H,0,-6.6399167206,-0.7423114889,-2.9162133031  
H,0,-6.0087178726,0.7331260262,-2.1585095753  
H,0,5.2255079302,0.2584017575,3.6688640186  
H,0,6.2383439343,-0.796911955,2.6513607972  
H,0,5.6915427724,-1.3479836274,4.2476437618  
C,0,-0.546718023,-0.0839241111,-2.0965924582  
C,0,1.6999302222,-0.7726343864,-2.8891936565  
C,0,2.5340220636,-1.1781714342,-3.6794238505  
C,0,-1.2787332299,0.0717350506,-3.3800323268  
H,0,-1.3258739144,1.1424794614,-3.6491953544  
H,0,-0.7676409767,-0.4521435243,-4.201532315  
H,0,-2.3169188552,-0.2803442814,-3.3043452865  
C,0,3.5520255149,-1.6445541294,-4.6015793682  
H,0,3.5337699848,-2.7426192799,-4.6935774047  
H,0,3.4081732508,-1.2242757055,-5.6096841298  
H,0,4.5581786201,-1.3571228503,-4.255203822

#### Diphenyl-1,3-butadiin

P,0,1.5818589175,-0.2639135653,0.0009553563  
P,0,-0.9451432587,-0.6749323963,0.1802309157  
N,0,0.4211733118,-0.5202297616,1.300797919  
C,0,0.6883925687,1.3123567691,-0.6163709083  
N,0,0.3727890265,-1.2890083611,-0.8170909009  
C,0,-0.6449900137,1.1319406496,-0.4190474042  
C,0,0.3356154779,-0.0420267865,2.6067906252  
C,0,0.3791633124,-1.8420224609,-2.0934372922  
C,0,1.2378529191,0.9039056242,3.1416572885  
C,0,-0.6886589947,-0.5581103341,3.4422490287  
C,0,-0.8199446405,-2.0445058631,-2.8176604732  
C,0,1.5989248487,-2.2684589596,-2.679042151  
C,0,1.0824680045,1.3330746223,4.4651139776  
C,0,2.3919603741,1.4610476362,2.3852506936  
C,0,-0.8165822374,-0.0894831811,4.7510379713  
C,0,-1.5996754485,-1.6525651729,3.0039698518  
C,0,-0.7803010557,-2.6420246208,-4.0797688767  
C,0,-2.1478652032,-1.6665070095,-2.2647464583  
C,0,1.5939249542,-2.859982977,-3.9439784984  
C,0,2.8968722821,-2.1005656801,-1.9755625865

H,0,1.8004301401,2.059161967,4.8552834842  
C,0,0.0577558156,0.8582204991,5.2726387198  
C,0,3.581438032,0.7104875583,2.2687136944  
C,0,2.3446627445,2.7905873737,1.920577732  
H,0,-1.6108659017,-0.5105160065,5.373017679  
C,0,-2.962263883,-1.4000463946,2.7500195061  
C,0,-1.0975692983,-2.9663537652,2.9156555317  
H,0,-1.7267564596,-2.7850225618,-4.6078877985  
C,0,0.4158912262,-3.0532024873,-4.6557678564  
C,0,-2.8570647898,-2.5935731361,-1.4706426497  
C,0,-2.7236934104,-0.4258054258,-2.5958476284  
H,0,2.5499121139,-3.1864635972,-4.3614656675  
C,0,3.8106723127,-1.1271306666,-2.4239299295  
C,0,3.2112854329,-2.9113544575,-0.8658719929  
H,0,-0.0468325182,1.206004361,6.3023714378  
C,0,4.6931764648,1.2976953672,1.6640637327  
C,0,3.6519209585,-0.6945767464,2.7884273974  
C,0,3.4851505341,3.3414673394,1.3334485644  
C,0,1.0897069366,3.6041186871,2.0464153751  
C,0,-3.8016790265,-2.4706283099,2.4375070307  
C,0,-3.5015809991,0.0008263192,2.7249911597  
C,0,-1.9702489447,-4.0045071773,2.5839918929  
C,0,0.3528704659,-3.2505747993,3.1738426981  
H,0,0.4291869766,-3.5238055446,-5.6407912034  
C,0,-4.1191847677,-2.2466199067,-0.9974619386  
C,0,-2.2362640164,-3.9082686115,-1.1054979134  
C,0,-3.9845463711,-0.1096940834,-2.0790082645  
C,0,-2.0062241235,0.5333279603,-3.5004362177  
C,0,5.00716142,-0.9504622696,-1.7228980439  
C,0,3.5108322749,-0.2789956307,-3.6278942162  
C,0,4.422781798,-2.7098767921,-0.2050777257  
C,0,2.2431254725,-3.94984197,-0.3811091584  
H,0,5.6100075599,0.7108075028,1.5657942424  
C,0,4.6660144353,2.611959933,1.1921521475  
H,0,3.2236049433,-0.7726510767,3.7985490079  
H,0,4.6892965583,-1.0546929421,2.815292057  
H,0,3.0829158989,-1.3813849686,2.1395312659  
H,0,3.4379694605,4.3638951704,0.9482290362  
H,0,0.2206851393,3.059231406,1.6473254909  
H,0,1.1815988606,4.5537024205,1.5023350846  
H,0,0.8591233352,3.8294632005,3.0993709965  
H,0,-4.8593987096,-2.2695070648,2.2422978271  
C,0,-3.3291765939,-3.7812115135,2.354219379  
H,0,-4.6006576965,0.0005995518,2.6993279577  
H,0,-3.1477200459,0.5282644429,1.8210223057  
H,0,-3.1732284392,0.5965027158,3.5873623855  
H,0,-1.5761478133,-5.0231653513,2.5168564344  
H,0,0.670005388,-2.8562344392,4.1514795085  
H,0,0.9820163264,-2.7605270281,2.4147349527  
H,0,0.5570350182,-4.329928469,3.1498182958  
H,0,-4.665276321,-2.9638697289,-0.3800012014

C,0,-4.6933889766,-1.0022263713,-1.2751014137  
H,0,-2.9640876672,-4.5684265956,-0.6160394122  
H,0,-1.4020988454,-3.7570701087,-0.3999036455  
H,0,-1.8241391357,-4.422003332,-1.9863463002  
H,0,-4.4239533238,0.8627279887,-2.3174059912  
H,0,-0.9773417165,0.7191558692,-3.1576721045  
H,0,-2.5300577305,1.4971418505,-3.5493643487  
H,0,-1.9275871821,0.1259373106,-4.5210439475  
H,0,5.7082898176,-0.1802436938,-2.0593672481  
C,0,5.3318698433,-1.7289897908,-0.6114839924  
H,0,4.2139258574,0.561556969,-3.7050260963  
H,0,2.4897923837,0.1288834989,-3.5961887278  
H,0,3.5839709951,-0.8648747787,-4.5575717199  
H,0,4.6627138261,-3.3364780172,0.6593230937  
H,0,1.9071996294,-4.5987449233,-1.2039126215  
H,0,1.340590086,-3.4714943361,0.0327600255  
H,0,2.6906692828,-4.5774893942,0.4017871684  
C,0,5.8780698011,3.2125708221,0.542293224  
C,0,-4.2604574023,-4.920001864,2.0555602473  
C,0,-6.0350776704,-0.6429149869,-0.7058648743  
C,0,6.6422661932,-1.5549627955,0.0992590981  
H,0,6.6921279273,3.3571971088,1.2713114568  
H,0,5.6509485386,4.1888709088,0.0921307144  
H,0,6.2695549658,2.5552457672,-0.25050612  
H,0,-4.7500263962,-5.2815109893,2.975450172  
H,0,-3.7269915651,-5.7737293518,1.6128805827  
H,0,-5.061141709,-4.6195810196,1.3628028469  
H,0,-6.7711763463,-1.4435605494,-0.8770254017  
H,0,-6.4272339323,0.2847538628,-1.1454707018  
H,0,-5.9698657869,-0.4955968282,0.3854424187  
H,0,6.5342762486,-1.6901049643,1.1857744111  
H,0,7.0721359428,-0.5594137982,-0.0828473897  
H,0,7.3792198618,-2.2991256449,-0.2463465068  
C,0,1.4130626118,2.4294244346,-1.2032547197  
C,0,0.7979549399,3.6667568383,-1.4775282273  
C,0,2.7712556923,2.2766379352,-1.5380963747  
C,0,1.5158707437,4.7009704782,-2.0655778814  
H,0,-0.2509047495,3.8111056016,-1.2164440755  
C,0,3.4797401698,3.3054321868,-2.1476932818  
H,0,3.2775860916,1.3383279431,-1.3016588565  
C,0,2.8577604879,4.5245402556,-2.4109499851  
H,0,1.0224469065,5.6557210214,-2.2636002599  
H,0,4.5311465421,3.1578698988,-2.4054687628  
H,0,3.4151855603,5.3372357889,-2.882946178  
C,0,-1.7296699163,2.0005878264,-0.5494305718  
C,0,-2.7438127369,2.6839448738,-0.5966422162  
C,0,-3.9492932279,3.4301299112,-0.6658784132  
C,0,-5.1130758032,2.9425583408,-0.0393148529  
C,0,-4.0141343294,4.6492650067,-1.3667486757  
C,0,-6.3036638955,3.6551187288,-0.1168658465  
H,0,-5.0616443267,1.9984974847,0.5055907983

C,0,-5.2102195522,5.3540399009,-1.4398905507  
H,0,-3.1148887848,5.0294605267,-1.8555500865  
C,0,-6.3576946533,4.8611422294,-0.8173101066  
H,0,-7.1992487126,3.2663368261,0.3736670407  
H,0,-5.2490418456,6.2977421992,-1.9890118398  
H,0,-7.2955200855,5.4181339145,-0.8776996553

#### Arin

P,0,1.2899837576,0.1437159353,0.2029849366  
P,0,-1.2900957161,-0.1438244126,0.2008096718  
N,0,0.1352571797,-1.1187065977,-0.2588321409  
C,0,0.6889747987,0.124243705,1.9873025066  
N,0,-0.1345831183,1.1187747152,-0.2580809468  
C,0,-0.6919145091,-0.1261396206,1.9861254013  
C,0,0.2463050798,-2.5051072486,-0.2846719374  
C,0,1.3761882692,0.2961754549,3.1787189614  
C,0,-0.245464555,2.50516231,-0.2841822134  
C,0,-1.3809642467,-0.2989915966,3.1763482193  
C,0,1.4379777647,-3.1734907505,0.0843169491  
C,0,-0.8500827633,-3.2822548694,-0.739083704  
H,0,2.4490946834,0.5050347764,3.1807583795  
C,0,0.6746576763,0.1570980201,4.3858163487  
C,0,-1.4370238376,3.1737818322,0.0846807892  
C,0,0.8510989793,3.2819618325,-0.7387239625  
C,0,-0.6812935592,-0.1608483505,4.384636385  
H,0,-2.4538677889,-0.5078476265,3.1766019602  
C,0,1.5006364122,-4.5685188493,0.0253480951  
C,0,2.6555522509,-2.4372876993,0.5180013386  
C,0,-0.7498503204,-4.6747424069,-0.7687817632  
C,0,-2.1033008344,-2.6596934843,-1.2447700778  
C,0,-1.4993535116,4.5688270439,0.0256376197  
C,0,-2.654846877,2.4379171478,0.5182907682  
C,0,0.7512013847,4.6744769908,-0.7684602451  
C,0,2.1039871585,2.6590980384,-1.2449084918  
H,0,-1.2084028415,-0.2876161969,5.3336937723  
H,0,2.4380193868,-5.0519290719,0.3131997485  
C,0,0.4150131992,-5.3313190764,-0.3874407449  
C,0,3.5472808989,-1.9282874955,-0.4484460065  
C,0,2.9529309949,-2.319460437,1.8899206633  
H,0,-1.6111206579,-5.2434102916,-1.1293682388  
C,0,-3.2832868842,-2.7194644319,-0.4808591469  
C,0,-2.109561699,-2.0365388532,-2.5089522976  
H,0,-2.4366319698,5.0524828114,0.3134173506  
C,0,-0.413509259,5.3313355668,-0.3871156657  
C,0,-3.5468199075,1.9294187453,-0.4481990107  
C,0,-2.9522712719,2.3200704389,1.8901936825  
H,0,1.6125628812,5.2429343033,-1.1291623932  
C,0,3.2843919559,2.7187848584,-0.4816416662  
C,0,2.1095749369,2.0360646704,-2.5091506613  
H,0,0.4806419128,-6.4204062673,-0.427476937

C,0,4.7015636389,-1.2715999841,-0.0237257926  
C,0,3.2326694663,-2.0488597678,-1.9090080328  
C,0,4.110767214,-1.6369693107,2.2711453067  
C,0,2.0436037427,-2.9209175607,2.9209607146  
C,0,-4.4574360904,-2.1723449888,-1.0030475446  
C,0,-3.2768588741,-3.3110693401,0.8999089841  
C,0,-3.3030503018,-1.4976511641,-2.9899145733  
C,0,-0.8495192739,-1.9347027735,-3.3171269797  
H,0,-0.478871522,6.4204384069,-0.4271841649  
C,0,-4.701421019,1.2732493666,-0.0235253485  
C,0,-3.2322208166,2.0499484141,-1.9087692783  
C,0,-4.1105240596,1.6382652627,2.2713663829  
C,0,-2.042452698,2.9206702627,2.9212900997  
C,0,4.458316892,2.1719682096,-1.0046303659  
C,0,3.2786096446,3.3098577289,0.8993505847  
C,0,3.3028637532,1.4974244043,-2.9909132689  
C,0,0.849089425,1.9342021092,-3.3166344572  
H,0,5.3858747751,-0.8703495913,-0.7741631859  
C,0,4.9896806292,-1.0941902272,1.3304968784  
H,0,2.9087353157,-3.0660161945,-2.173094678  
H,0,4.1003738549,-1.7794168639,-2.5258235136  
H,0,2.4103596204,-1.3658414868,-2.181414558  
H,0,4.3339350675,-1.5313914194,3.3373551464  
H,0,1.0011361162,-2.6018168768,2.772088669  
H,0,2.3481127326,-2.6323214882,3.9359991395  
H,0,2.0485290243,-4.0205647149,2.8578112215  
H,0,-5.3722439604,-2.2139682533,-0.4043034913  
C,0,-4.4921348202,-1.5660871606,-2.2586513281  
H,0,-4.2457203778,-3.1610630494,1.3968223319  
H,0,-2.494923639,-2.8508636937,1.5255274343  
H,0,-3.0631469213,-4.3906095138,0.8861727705  
H,0,-3.3057812758,-1.0168055622,-3.9730758634  
H,0,-0.3658370726,-2.9166120642,-3.4319573386  
H,0,-0.1220752592,-1.2804458783,-2.8104101137  
H,0,-1.0489034281,-1.5230521431,-4.3161447211  
H,0,-5.3859082102,0.8723625027,-0.7739999505  
C,0,-4.9897136545,1.0960065954,1.3306814615  
H,0,-4.1001888674,1.781267748,-2.5255555201  
H,0,-2.4104793355,1.3663016625,-2.1813334047  
H,0,-2.9075160362,3.0668810553,-2.1727626554  
H,0,-4.3337393862,1.5327356632,3.3375694005  
H,0,-1.0003573235,2.6002179164,2.7726747572  
H,0,-2.3475071758,2.6326423136,3.9363247184  
H,0,-2.0459637743,4.0203043508,2.8578985984  
H,0,5.3734618147,2.2136055748,-0.4064038085  
C,0,4.4923813732,1.5659687984,-2.2603813609  
H,0,4.2482071884,3.161049918,1.3951847013  
H,0,2.4980472102,2.8481443937,1.525602415  
H,0,3.0632306363,4.3890637251,0.8863522711  
H,0,3.3050667897,1.016730873,-3.9741503998  
H,0,0.3652277773,2.9160708618,-3.4310660196



H,0,0.1220188604,1.2797956377,-2.8095800787  
H,0,1.0479558156,1.5227045501,-4.3158183561  
C,0,6.1944849948,-0.3098598582,1.7609973388  
C,0,-5.771407298,-1.0216703375,-2.8247291923  
C,0,-6.1949962503,0.3123676623,1.7611097991  
C,0,5.7714023967,1.0218094321,-2.8272813343  
H,0,7.0137031102,-0.3950814213,1.0321358388  
H,0,6.5685530454,-0.6410193257,2.7406910986  
H,0,5.9474879947,0.7620279776,1.8491476931  
H,0,-6.1555223341,-1.6710005203,-3.6287377453  
H,0,-5.6276440051,-0.0218918257,-3.2629386638  
H,0,-6.5557127248,-0.9498007417,-2.0574813426  
H,0,-7.0142712371,0.3983960021,1.0324042754  
H,0,-6.5686841156,0.6434701627,2.7409669059  
H,0,-5.9487460862,-0.7597261063,1.8488705129  
H,0,5.6276012751,0.0219247447,-3.2652438953  
H,0,6.5562581871,0.9502390717,-2.060566584  
H,0,6.1548031465,1.6711113333,-3.6316521501  
H,0,1.2002862618,0.2831419531,5.3357903141

#### [4+2]-Addukte

##### 2,3-Dimethylbutadien

P,0,-1.1908415109,-0.4192437462,-0.2718877905  
P,0,1.1874370356,0.4854340335,0.4597549502  
N,0,-0.4606176201,1.0663410387,0.2663757092  
N,0,0.521648356,-0.9016442336,-0.3870586795  
C,0,-0.9549046734,2.3666736573,0.30892959  
C,0,1.0727166123,-2.0870956375,-0.8556670879  
C,0,-2.2535179448,2.6299521302,0.8041000787  
C,0,-0.1712033451,3.454863292,-0.1513481045  
C,0,2.3295024334,-2.5708185669,-0.4100374564  
C,0,0.3740334566,-2.8617274244,-1.8249843132  
C,0,-2.7094344067,3.948232623,0.8944647547  
C,0,-3.1668642118,1.5424983356,1.2529938508  
C,0,-0.6518182043,4.7600406206,-0.0170676459  
C,0,1.0905456383,3.2465178529,-0.9128134114  
C,0,2.8255812244,-3.7837410084,-0.8989241537  
C,0,3.1806968043,-1.8415379104,0.5684079991  
C,0,0.8945014863,-4.0791656758,-2.2653735169  
C,0,-0.8817422866,-2.362573864,-2.4437076747  
H,0,-3.7151041451,4.1202866036,1.2874385576  
C,0,-1.9115210804,5.0206649884,0.5116772353  
C,0,-4.0992291985,0.9822564112,0.3587526472  
C,0,-3.1588725411,1.1510129999,2.6068826733  
H,0,-0.0270939969,5.5793204589,-0.3830861874  
C,0,2.347396567,3.5306180375,-0.3525618592  
C,0,0.9936257558,2.8049217261,-2.2478397543  
H,0,3.8019189026,-4.1169169223,-0.5364537022  
C,0,2.1185981897,-4.5563220287,-1.8111532427

C,0,3.9980244084,-0.7783263693,0.1373770793  
C,0,3.2538722282,-2.2953340401,1.9024066831  
H,0,0.3232075985,-4.6412225624,-3.0088237425  
C,0,-2.1305059108,-2.9251814802,-2.124805408  
C,0,-0.8001931867,-1.3002296906,-3.371006378  
H,0,-2.276810331,6.045896839,0.6004304195  
C,0,-4.9818596391,0.003552654,0.8304404839  
C,0,-4.1527609535,1.4151119719,-1.077569149  
C,0,-4.0717664899,0.189633411,3.0401217683  
C,0,-2.1933248094,1.7774126503,3.5680360438  
C,0,3.4928396739,3.357224547,-1.1333166802  
C,0,2.4689634172,3.9505004214,1.082714905  
C,0,2.1631293592,2.6385230511,-2.9909368931  
C,0,-0.3460764498,2.5245650619,-2.8648289517  
H,0,2.521878243,-5.5033864446,-2.1747829723  
C,0,4.8125353677,-0.1293806595,1.0722066668  
C,0,4.0195955176,-0.3622539973,-1.3030933811  
C,0,4.1036076514,-1.6391149454,2.793660827  
C,0,2.4197378001,-3.4559329223,2.3620341429  
C,0,-3.2868061696,-2.3589202271,-2.6730497761  
C,0,-2.254968111,-4.1117641366,-1.2110347615  
C,0,-1.9751418199,-0.7779311235,-3.9048305404  
C,0,0.5323336962,-0.7260112544,-3.7511771255  
H,0,-5.6958833045,-0.441633373,0.1313209679  
C,0,-4.9831685318,-0.408990424,2.1635271018  
H,0,-4.10916766,2.5096555003,-1.171436201  
H,0,-5.0707254303,1.0552476232,-1.5621697998  
H,0,-3.2958474996,1.0022410625,-1.6347250876  
H,0,-4.0691377479,-0.1036579714,4.0943140501  
H,0,-1.1653107106,1.7100872753,3.1859380187  
H,0,-2.2302133318,1.2838580474,4.5488234619  
H,0,-2.4092135159,2.8485787283,3.7067608616  
H,0,4.4709191962,3.5676629287,-0.6900515649  
C,0,3.4240543035,2.9113088936,-2.4532146759  
H,0,2.1187919787,3.1459854944,1.7512088998  
H,0,1.8565064932,4.8350979874,1.3099728415  
H,0,3.5125418725,4.1725870646,1.3453127787  
H,0,2.085852654,2.2949967197,-4.0270953552  
H,0,-1.0436771151,3.3589726788,-2.6982214901  
H,0,-0.813524788,1.6300458935,-2.4226446692  
H,0,-0.2555302151,2.3559611531,-3.9463976119  
H,0,5.427458976,0.7114561182,0.7384360168  
C,0,4.873366906,-0.5367010336,2.4044777006  
H,0,4.8870143945,0.2775153528,-1.5130642806  
H,0,3.1192657383,0.218275455,-1.5609961717  
H,0,4.0518163637,-1.2371447136,-1.9686443957  
H,0,4.1598342176,-1.991656884,3.8282750092  
H,0,1.3532041034,-3.2705309834,2.1644228843  
H,0,2.5466402656,-3.6323783277,3.4391937071  
H,0,2.686002039,-4.3810900788,1.8290370446  
H,0,-4.2606927053,-2.7743215181,-2.3961110878

C,0,-3.2331036406,-1.2809345056,-3.5537110101  
H,0,-2.297886077,-5.0487066544,-1.7913553886  
H,0,-3.1768550095,-4.0559465049,-0.6135429267  
H,0,-1.3964791968,-4.2035316627,-0.5317695436  
H,0,-1.9105895917,0.053663507,-4.6131933129  
H,0,1.2484107754,-1.5195040082,-4.0115658565  
H,0,0.9740101601,-0.1636874182,-2.9131316419  
H,0,0.4396688693,-0.0424045532,-4.6058496925  
C,0,-5.9136475388,-1.4838275359,2.6453652345  
C,0,4.6618171436,2.7349129143,-3.2838159476  
C,0,5.7258206576,0.1927674548,3.4014967429  
C,0,-4.4819555508,-0.6941610986,-4.1442338593  
H,0,-6.7390656531,-1.6512175373,1.9391120143  
H,0,-6.3460572812,-1.2330237125,3.6257193398  
H,0,-5.3796415292,-2.4419634098,2.7634714119  
H,0,4.7171949731,3.4931944257,-4.0821036806  
H,0,4.6768656816,1.7490734612,-3.7740599319  
H,0,5.5728423979,2.8258215866,-2.6753495812  
H,0,6.5200346181,0.7707314557,2.9079327089  
H,0,6.1967594222,-0.5005130681,4.11425828  
H,0,5.1202696866,0.9019296603,3.9905901472  
H,0,-4.4344972748,0.4047665839,-4.1717829536  
H,0,-5.3739592317,-0.9833370607,-3.5703894784  
H,0,-4.628610402,-1.0388532959,-5.1814518185  
C,0,-1.5883608542,-1.4360068084,1.2105204017  
H,0,-2.6671110937,-1.2806074362,1.3848781141  
C,0,1.0780905271,0.1376045016,2.2698646476  
C,0,0.178894971,-0.8254818896,3.0034969854  
C,0,-0.9071771179,-1.4940296031,2.5546706805  
H,0,2.1158855871,-0.0643042399,2.5829153876  
H,0,0.8870866501,1.1645073063,2.6491748313  
H,0,-1.5471224031,-2.4491608354,0.7644787975  
C,0,0.6704957761,-0.9421380382,4.4259606281  
H,0,1.6733804714,-1.3998667896,4.4526496879  
H,0,0.7823177828,0.0658067666,4.860131222  
H,0,0.0158971175,-1.5128377319,5.0929578576  
C,0,-1.6536975356,-2.4867327374,3.4136045949  
H,0,-1.1999649283,-2.6816550383,4.3909224085  
H,0,-2.690235581,-2.1481503931,3.5773516698  
H,0,-1.7240641117,-3.4530102709,2.8860301507

### 1,3-Butadien

P,0,-1.2099868447,0.5098773365,-0.0230150953  
P,0,1.1816802474,-0.5635170463,-0.5063576474  
N,0,-0.4896928096,-1.062670507,-0.2563569007  
N,0,0.5075901995,0.9933247604,-0.0391529103  
C,0,-1.0061089322,-2.3271778413,0.0234166119  
C,0,1.0627062071,2.2527662115,0.150847479  
C,0,-2.3126871496,-2.6749339474,-0.3940130183  
C,0,-0.2469051813,-3.2872832929,0.7384352506

C,0,2.3377151221,2.6080813501,-0.3606770013  
C,0,0.3489607287,3.2421078242,0.8860987293  
C,0,-2.7970185005,-3.9656807853,-0.1641764501  
C,0,-3.2062555397,-1.7091583966,-1.0923652922  
C,0,-0.7554638455,-4.5763111637,0.9214108439  
C,0,1.0151060682,-2.9319372589,1.44324089  
C,0,2.8249418595,3.9068978581,-0.1834645098  
C,0,3.2254537745,1.6494594254,-1.0725540608  
C,0,0.8641712756,4.5323515089,1.0187140912  
C,0,-0.9121780494,2.9087656207,1.5991978412  
H,0,-3.8075300711,-4.2054632017,-0.5058825478  
C,0,-2.0207350389,-4.9311809446,0.4669633005  
C,0,-4.144776462,-0.9525924029,-0.3636384571  
C,0,-3.1740541537,-1.6348450369,-2.4989210946  
H,0,-0.1478227994,-5.2949994821,1.4779426497  
C,0,2.268257491,-3.3674559021,0.9802478042  
C,0,0.9197889125,-2.1901451594,2.6376730133  
H,0,3.8139288828,4.1381771452,-0.5882777752  
C,0,2.0976426282,4.8842326138,0.4835558624  
C,0,3.9987982643,0.7295462925,-0.3368468081  
C,0,3.378566875,1.7425740171,-2.4717083358  
H,0,0.2809118834,5.2602401729,1.5887645796  
C,0,-2.1585869692,3.3839142721,1.153304711  
C,0,-0.8366386318,2.1021317129,2.7573683711  
H,0,-2.4072890269,-5.9398908567,0.6265896729  
C,0,-5.0075834707,-0.0987720626,-1.0596943799  
C,0,-4.2239951163,-1.0470049814,1.1324694571  
C,0,-4.0598589256,-0.778909568,-3.1542790185  
C,0,-2.2109834061,-2.4827412047,-3.2743293009  
C,0,3.4121872581,-3.0435663018,1.7132807598  
C,0,2.3873413621,-4.1146786763,-0.3153694832  
C,0,2.0880461317,-1.88365298,3.3373306716  
C,0,-0.4164624054,-1.7419532311,3.1551918629  
H,0,2.4951044651,5.8936993589,0.6050015651  
C,0,4.8528812717,-0.1391455466,-1.0250113373  
C,0,3.9301687557,0.6901414801,1.160357746  
C,0,4.2608515488,0.8737895397,-3.1151153304  
C,0,2.5908286241,2.7466338542,-3.2621967959  
C,0,-3.3179601181,2.9671486644,1.817423372  
C,0,-2.2793927004,4.3245058813,-0.0123616894  
C,0,-2.0139499758,1.7283394759,3.3988113709  
C,0,0.4921485799,1.6312653786,3.2694573782  
H,0,-5.728888912,0.4965798221,-0.4920453929  
C,0,-4.9779520506,0.0081124748,-2.4514690804  
H,0,-4.2098816932,-2.0922104563,1.4732262672  
H,0,-5.1372765233,-0.5656767283,1.5083151649  
H,0,-3.3619760954,-0.5387167734,1.5949298037  
H,0,-4.0292936849,-0.7218507016,-4.2465133701  
H,0,-1.1838116469,-2.3330864369,-2.9137642253  
H,0,-2.2388526702,-2.2408008332,-4.3454192913  
H,0,-2.4384812041,-3.5532734752,-3.1504457339

H,0,4.3877291934,-3.3729049847,1.3427551449  
C,0,3.3451117408,-2.3036896263,2.8942367511  
H,0,2.0415263146,-3.4904637755,-1.1562620725  
H,0,1.7689853674,-5.0241226016,-0.3273568136  
H,0,3.429309516,-4.3997040123,-0.5162365352  
H,0,2.0123211865,-1.306345554,4.2639228258  
H,0,-1.1319452136,-2.5773697351,3.1856910097  
H,0,-0.8625642668,-0.9696969397,2.5078425961  
H,0,-0.3276744485,-1.3213239891,4.1659557278  
H,0,5.4348756458,-0.8663314491,-0.451336267  
C,0,4.9915866828,-0.0906854772,-2.4117504119  
H,0,4.8033084214,0.1717918508,1.5785522006  
H,0,3.0363063668,0.1412518636,1.498089505  
H,0,3.8791664322,1.7029871123,1.5849603463  
H,0,4.3713278717,0.9418891745,-4.2017197068  
H,0,1.5192738013,2.6809514942,-3.0235617821  
H,0,2.7155967585,2.5846065431,-4.3419819377  
H,0,2.9055231318,3.7764806941,-3.0323660023  
H,0,-4.2898229565,3.3071547471,1.4465318788  
C,0,-3.2698281947,2.1330425594,2.9318542796  
H,0,-2.3345021945,5.3696970314,0.3354725446  
H,0,-3.1947445785,4.1249750711,-0.5888630936  
H,0,-1.4142573932,4.2642982191,-0.6865546766  
H,0,-1.9533294775,1.0932290705,4.2878717352  
H,0,1.2130101266,2.46012107,3.3292405743  
H,0,0.931535746,0.8786099277,2.5957174808  
H,0,0.3944507355,1.1777219555,4.2650436721  
C,0,-5.885564993,0.9601780566,-3.1751326573  
C,0,4.5811099041,-1.9792985542,3.6816909261  
C,0,5.8839611209,-1.0566252743,-3.1354771997  
C,0,-4.5214997742,1.7065143871,3.6416197646  
H,0,-6.7699727162,1.2123021166,-2.5727422344  
H,0,-6.2296843276,0.5409134922,-4.1322201361  
H,0,-5.3633589515,1.9045143849,-3.4041072132  
H,0,4.6633749786,-2.6222298466,4.5738522815  
H,0,4.5698066097,-0.9368564791,4.0346405662  
H,0,5.4916393559,-2.1274602076,3.0835272924  
H,0,6.6731680359,-1.4479499788,-2.4776449358  
H,0,6.3634248716,-0.5883751907,-4.0077742981  
H,0,5.3075389678,-1.9209972246,-3.5061423527  
H,0,-4.4880046008,0.6389250513,3.9061615904  
H,0,-5.4141324938,1.8771726761,3.0231488821  
H,0,-4.6548961667,2.2692832536,4.5804762215  
C,0,-1.6287526348,1.1803013462,-1.6923642653  
H,0,-2.7095526853,1.0177419351,-1.8366797407  
C,0,1.1500632174,-0.6367136553,-2.3565280257  
C,0,0.204646347,0.1353596955,-3.2173861356  
C,0,-0.9036939632,0.8400212741,-2.9522036869  
H,0,2.1832143736,-0.4743070269,-2.701882653  
H,0,0.9782015582,-1.7228575685,-2.5119671234  
H,0,-1.5414969744,2.2703352867,-1.5211175022

H,0,0.4752742116,0.0943355996,-4.280955226  
H,0,-1.3883333986,1.2752053419,-3.8366588991

### Diphenyl-1,3-butadien

P,0,-1.4237066754,-0.0495225271,0.0846026966  
P,0,1.2319046139,-0.1428910097,0.0615331234  
N,0,-0.142117396,-1.2593994776,0.0283370669  
N,0,-0.0479299266,1.0387610698,0.3228511444  
C,0,-0.270952413,-2.5976115255,0.4432496886  
C,0,-0.0765519359,2.3809361384,0.7184670825  
C,0,-1.4229140769,-3.3394144293,0.0753918814  
C,0,0.7054455202,-3.2581185912,1.2331356909  
C,0,0.9121941246,3.3201984718,0.321196422  
C,0,-1.1515150364,2.8542276864,1.5303692945  
C,0,-1.5811513329,-4.6610720859,0.5049262035  
C,0,-2.4767713779,-2.8372899709,-0.8494697628  
C,0,0.5206895477,-4.5893889793,1.6170185914  
C,0,1.9173857016,-2.5762969893,1.754596655  
C,0,0.7151036768,4.6825368103,0.5843724512  
C,0,2.2325265633,2.9813950013,-0.2895816785  
C,0,-1.3152562718,4.2236297099,1.7423015643  
C,0,-2.0352679056,1.9353411286,2.3030792328  
H,0,-2.4834798748,-5.193569772,0.1925839115  
C,0,-0.6184973651,-5.3028967373,1.2710738181  
C,0,-3.7307438134,-2.4165427842,-0.3678371337  
C,0,-2.2484114838,-2.941793369,-2.2373865825  
H,0,1.2978394516,-5.0530052485,2.2306639533  
C,0,3.1626595008,-2.7459972841,1.1251999718  
C,0,1.8130783747,-1.8334651656,2.9421419675  
H,0,1.4918154298,5.3789159939,0.2572508297  
C,0,-0.4094028897,5.1537287411,1.2465730168  
C,0,3.2788941842,2.541986882,0.5486145674  
C,0,2.504466732,3.262471629,-1.6477217524  
H,0,-2.1576378594,4.5503648331,2.3564841814  
C,0,-3.4252268763,1.8641115437,2.0943996351  
C,0,-1.4539908551,1.207342241,3.3641917462  
H,0,-0.7516173942,-6.3389815456,1.5885508104  
C,0,-4.7209229866,-2.0625734473,-1.2920147587  
C,0,-4.0085876798,-2.3423491891,1.1044207984  
C,0,-3.2645465293,-2.584989485,-3.1236913298  
C,0,-0.926088604,-3.4335566018,-2.7410950441  
C,0,4.2624085329,-2.0446614156,1.6211036322  
C,0,3.2997674055,-3.6838476365,-0.0357766347  
C,0,2.9371371796,-1.1498628754,3.4097273716  
C,0,0.5172803573,-1.8202076276,3.6951814976  
H,0,-0.547758393,6.2220095778,1.424361078  
C,0,4.5531841214,2.3434974854,0.0051669793  
C,0,3.0657252774,2.3066312597,2.0137882837  
C,0,3.7900163476,3.0436649149,-2.1471753922  
C,0,1.4351801726,3.7438361859,-2.5849349504

C,0,-4.1804487572,0.9666645461,2.8552043104  
C,0,-4.126950926,2.7471862434,1.1083380763  
C,0,-2.2468223215,0.3331161009,4.1071785497  
C,0,-0.0114857612,1.4061439602,3.7233511988  
H,0,-5.6920240555,-1.7256490418,-0.9172296142  
C,0,-4.50935426,-2.1349454855,-2.6703695283  
H,0,-3.8456737886,-3.3143784039,1.593507318  
H,0,-5.0426685688,-2.0240009997,1.2957226563  
H,0,-3.3375034743,-1.6160314308,1.589398202  
H,0,-3.0796684565,-2.6601025824,-4.1994125573  
H,0,-0.1080885837,-2.8298819311,-2.3242298382  
H,0,-0.8725250164,-3.3848126784,-3.8375304137  
H,0,-0.7442887271,-4.4732609637,-2.4264791709  
H,0,5.2264403569,-2.1506445899,1.1145668492  
C,0,4.1633405947,-1.217618035,2.7431586121  
H,0,2.6395860144,-3.4000592513,-0.8685043386  
H,0,3.0167984881,-4.7076138538,0.253333102  
H,0,4.3287012037,-3.7027802306,-0.4143339894  
H,0,2.8552063113,-0.5533437349,4.3234325283  
H,0,0.1908559851,-2.846820108,3.9214162824  
H,0,-0.293918372,-1.3622830976,3.1094747405  
H,0,0.6105882087,-1.2719379586,4.6408953658  
H,0,5.3576775692,2.0080812003,0.6667185961  
C,0,4.8301454285,2.5753615069,-1.3408872435  
H,0,4.0159809549,2.3719545112,2.5614364565  
H,0,2.6579708291,1.2978686438,2.1863339189  
H,0,2.3597342843,3.0304472893,2.4425217543  
H,0,3.985030158,3.2497541513,-3.2037144063  
H,0,0.7999673497,2.9049826255,-2.9129728467  
H,0,1.8763146629,4.1931374317,-3.4851966755  
H,0,0.7750318163,4.4842004587,-2.1136332424  
H,0,-5.2552072966,0.8926261105,2.66260869  
C,0,-3.6103237937,0.1705770385,3.8464326905  
H,0,-4.4875082151,3.6657560223,1.601867002  
H,0,-5.0033070198,2.2433746423,0.6791840991  
H,0,-3.4712760598,3.0589919266,0.2885529641  
H,0,-1.7904361877,-0.2265154945,4.928736687  
H,0,0.2476488046,2.4747376881,3.7284260732  
H,0,0.65967447,0.9202300338,3.0001282945  
H,0,0.2076713962,0.9917150262,4.7159559435  
C,0,-5.5730058502,-1.7196640895,-3.6448190451  
C,0,5.3600974408,-0.456335106,3.2354789465  
C,0,6.1865249486,2.2997810302,-1.9176144666  
C,0,-4.4261213046,-0.8327495937,4.6070715846  
H,0,-6.5526736057,-1.6217494651,-3.1560258742  
H,0,-5.6708632671,-2.4457296554,-4.4660029986  
H,0,-5.3296572931,-0.7459079633,-4.1019259874  
H,0,5.1070479335,0.1865658629,4.090205853  
H,0,5.7754571952,0.1847241841,2.4416727713  
H,0,6.1661182812,-1.1374830393,3.5527451024  
H,0,6.9615523749,2.2787808103,-1.1381375899

H,0,6.4693995822,3.0550676685,-2.6656464082  
H,0,6.1953683665,1.3198581936,-2.4244342043  
H,0,-4.3254531962,-1.8364588519,4.1601450323  
H,0,-5.4952364304,-0.5759338779,4.5987187043  
H,0,-4.0985960964,-0.91059959,5.6544721181  
C,0,-1.8315584786,0.2856389573,-1.7137430563  
C,0,1.6079085126,0.032159894,-1.7781995278  
C,0,0.5371547278,0.1288172874,-2.8169896418  
C,0,-0.7962262205,0.2312331548,-2.7929119891  
H,0,2.0950976447,1.022916956,-1.7471896125  
H,0,0.9666944833,0.1520387702,-3.827384143  
H,0,-1.2607603282,0.3310463717,-3.7832081185  
H,0,-2.5382391459,-0.5320729428,-1.9189359279  
C,0,2.7142993515,-0.9188641312,-2.1861944503  
C,0,2.5166001856,-1.9269814302,-3.1375100394  
C,0,3.9995484349,-0.76494239,-1.64666969  
C,0,3.5735589966,-2.7334769013,-3.5610754407  
H,0,1.5244823888,-2.0741788346,-3.5672110624  
C,0,5.0556938495,-1.5645135762,-2.0715842481  
H,0,4.1675821784,0.0059415304,-0.8927947405  
C,0,4.8507703181,-2.5494875924,-3.0386856673  
H,0,3.3933304313,-3.50802095,-4.3105848344  
H,0,6.0502336303,-1.4162647524,-1.642294307  
H,0,5.6813357751,-3.1733707041,-3.3772358058  
C,0,-2.6407307827,1.5595198874,-1.861774793  
C,0,-4.0243337209,1.5059456694,-2.0657466248  
C,0,-2.0149973179,2.8114712462,-1.8735265537  
C,0,-4.7596469412,2.6688293765,-2.2891810572  
H,0,-4.5224502841,0.5343407255,-2.0501826203  
C,0,-2.7472345214,3.9765190996,-2.0866179294  
H,0,-0.9400547023,2.8705727116,-1.7157815021  
C,0,-4.1238318811,3.9092482506,-2.3020717614  
H,0,-5.8383152287,2.6042617892,-2.4529388666  
H,0,-2.2360031421,4.9422107635,-2.0816049793  
H,0,-4.6995533998,4.8214124261,-2.4759484639

## 2,4-Hexadien

P,0,-1.212791761,0.5517066299,-0.2498035185  
P,0,1.1977392623,-0.5681695693,-0.2010073536  
N,0,-0.5041350202,-1.0466005777,-0.057485503  
N,0,0.4898275583,1.0415931199,-0.1660181995  
C,0,-1.0719849015,-2.2716634446,0.3046925325  
C,0,1.0596357892,2.2966851616,0.0673928484  
C,0,-2.3725408343,-2.6364194609,-0.1286879767  
C,0,-0.3689128779,-3.2040646223,1.1222034938  
C,0,2.3573024819,2.6154598821,-0.4088155478  
C,0,0.3616009721,3.3068955061,0.7914132017  
C,0,-2.8983022548,-3.8923380237,0.1925799434  
C,0,-3.2489456307,-1.7480562852,-0.9404680694  
C,0,-0.9208790075,-4.4587385438,1.3918513346



C,0,0.8910286313,-2.8504295129,1.8277517169  
C,0,2.8848433937,3.8970877171,-0.2188653225  
C,0,3.2286171346,1.6495846175,-1.1328051469  
C,0,0.9150342846,4.5820809163,0.9300061774  
C,0,-0.8938840324,3.0266179215,1.5367256836  
H,0,-3.9036252159,-4.1297163781,-0.1657803273  
C,0,-2.1789656251,-4.8231594235,0.9292037527  
C,0,-4.1047336523,-0.8246940259,-0.3088570196  
C,0,-3.3072329821,-1.9273991759,-2.3382784718  
H,0,-0.3483716215,-5.1428061736,2.0233430007  
C,0,2.1180668665,-3.4704981221,1.536677683  
C,0,0.807055615,-1.9233392155,2.8898365424  
H,0,3.8877844911,4.0968007912,-0.6057346576  
C,0,2.1700600373,4.8975721665,0.4250420439  
C,0,4.0888568133,0.7941112496,-0.4171217007  
C,0,3.2776732057,1.6873869984,-2.5418652141  
H,0,0.3464222596,5.3264429954,1.4931221222  
C,0,-2.1228014908,3.6147800394,1.192191143  
C,0,-0.8032874018,2.2109384296,2.686058285  
H,0,-2.6000280614,-5.8036414157,1.1600122939  
C,0,-4.9468385439,-0.0354107193,-1.1013980547  
C,0,-4.1371557481,-0.6896077417,1.1858439226  
C,0,-4.1815852112,-1.1388731438,-3.0870259045  
C,0,-2.4261643685,-2.936740893,-3.0126500263  
C,0,3.2673351153,-3.0434297679,2.2126322535  
C,0,2.2270561077,-4.6153484408,0.5694789129  
C,0,1.9711329123,-1.5446609985,3.5535347747  
C,0,-0.527568471,-1.3888463394,3.3187435313  
H,0,2.5923955668,5.8961066357,0.5533891042  
C,0,4.9259777766,-0.0711340878,-1.1317272116  
C,0,4.1310681443,0.8099448056,1.0833493781  
C,0,4.147356367,0.8271906504,-3.2132435502  
C,0,2.3920390985,2.6242184082,-3.3085668563  
C,0,-3.2678773751,3.2581779274,1.9144838094  
C,0,-2.2377983706,4.6567033036,0.1155301694  
C,0,-1.963283399,1.9012586285,3.3914094506  
C,0,0.5340256108,1.7217158725,3.1584227785  
H,0,-5.5956889625,0.6960473439,-0.6107918185  
C,0,-4.9946279062,-0.1691708685,-2.4893053695  
H,0,-4.1010585732,-1.672481333,1.6773015624  
H,0,-5.0460207184,-0.1642415268,1.5102147852  
H,0,-3.2733391111,-0.1065077498,1.5441231097  
H,0,-4.2185919624,-1.274791073,-4.1720646962  
H,0,-1.3667705683,-2.7111390203,-2.8225109634  
H,0,-2.5844101811,-2.9375144655,-4.0998881196  
H,0,-2.6115380134,-3.9524367661,-2.6316033718  
H,0,4.2288291119,-3.4996300892,1.9569773116  
C,0,3.2211859273,-2.0702212577,3.2075219708  
H,0,1.4113297173,-4.6260098144,-0.1629008927  
H,0,2.1843036707,-5.5748859489,1.1121620739  
H,0,3.1866853325,-4.5951423504,0.0319423391

H,0,1.9036034451,-0.824030811,4.3738628774  
H,0,-1.2625814596,-2.2019119475,3.4134024011  
H,0,-0.9392316632,-0.6763086026,2.5878084075  
H,0,-0.4527645669,-0.8743266183,4.2853841791  
H,0,5.5783286514,-0.7496878696,-0.5742788192  
C,0,4.9645678065,-0.0777282004,-2.526389891  
H,0,5.0429043431,0.3207891216,1.4528825168  
H,0,3.2705269168,0.2648696176,1.5039853344  
H,0,4.0964257216,1.8371671959,1.4738303993  
H,0,4.1772317088,0.853280794,-4.3066626235  
H,0,1.333977035,2.4200376613,-3.0891009986  
H,0,2.5425273179,2.5149377086,-4.3914055936  
H,0,2.5803986576,3.6730565668,-3.0334814934  
H,0,-4.2310175603,3.6866498329,1.6199928001  
C,0,-3.2155064787,2.389811144,3.0018223018  
H,0,-2.1911213917,5.6658918767,0.5587075099  
H,0,-3.2009562605,4.5835120071,-0.4109706662  
H,0,-1.4269097542,4.5929014293,-0.6195167172  
H,0,-1.8906746199,1.2665894552,4.2795117292  
H,0,1.2693991338,2.5399109975,3.1664924687  
H,0,0.9414478051,0.9392050858,2.5002956657  
H,0,0.4651903903,1.3069372887,4.1722964269  
C,0,-5.8756504469,0.7138049341,-3.3242785455  
C,0,4.4607336834,-1.6243751906,3.926843257  
C,0,5.8400205098,-1.041105511,-3.2737248862  
C,0,-4.4506136137,2.0193041608,3.7698951801  
H,0,-6.6968229151,1.141867274,-2.7318827066  
H,0,-6.3122638177,0.1635817108,-4.1709762025  
H,0,-5.3004163699,1.5552095001,-3.7457203264  
H,0,4.4586944581,-1.9685103301,4.9741490759  
H,0,4.5357962924,-0.5261827761,3.9488571216  
H,0,5.36882716,-2.0173485775,3.4481028572  
H,0,6.6733064063,-1.3967881916,-2.6510792372  
H,0,6.2594978792,-0.5841331514,-4.1822290817  
H,0,5.2652321593,-1.9272508027,-3.5913497672  
H,0,-4.5220784251,0.9294760418,3.9086581641  
H,0,-5.3619402508,2.3568665122,3.256276408  
H,0,-4.4453663824,2.4727299488,4.774740278  
C,0,-1.4788713841,0.8000526403,-2.0736455256  
C,0,1.4522022985,-0.9989241065,-1.9922639073  
C,0,0.5572579538,-0.4958752545,-3.0786045906  
C,0,-0.5904463889,0.1903741779,-3.1095618288  
H,0,2.4574413517,-0.6018386202,-2.2022317893  
H,0,0.9394826108,-0.781417916,-4.0698480446  
H,0,-0.9788431721,0.3751923263,-4.1220751719  
C,0,1.5877959047,-2.5223506108,-2.0686721236  
H,0,1.8400966438,-2.8316308381,-3.0955957489  
H,0,2.3908137416,-2.8755466021,-1.4077370026  
H,0,0.6544136411,-3.0331824627,-1.7859878147  
C,0,-1.616014434,2.3080631306,-2.3019874785  
H,0,-2.4150603026,2.7258804344,-1.6747904355

H,0,-0.6811989939,2.8447716054,-2.0780885623  
H,0,-1.875051333,2.5125026144,-3.3531706039  
H,0,-2.4851460428,0.383800845,-2.2361953483

## Insertions-Produkte

### Acetylen

C,0,0.8332918512,2.2761034041,0.6043849  
C,0,2.1590824259,2.7234774365,0.4052856559  
C,0,0.0519485096,2.8525790501,1.6323748065  
C,0,2.697832107,3.6801936393,1.2679787828  
C,0,2.9885483108,2.2089005591,-0.7200143547  
C,0,0.6351581575,3.7954601423,2.484782429  
C,0,-1.3969328386,2.5462967372,1.7788653205  
H,0,3.7282342964,4.0058010084,1.1020196099  
C,0,1.9529618683,4.2072505511,2.3191230393  
C,0,3.6767851885,0.9911434945,-0.5877143301  
C,0,3.0909974941,2.9532514327,-1.9109015973  
H,0,0.0175417204,4.2336204836,3.2729197421  
C,0,-2.3086982004,3.008730407,0.8051132156  
C,0,-1.8722104829,1.8536469744,2.9085493136  
H,0,2.3895487456,4.9497457394,2.990448363  
C,0,4.4759139604,0.5443927888,-1.642041982  
C,0,3.5121996242,0.1618278959,0.6462387963  
C,0,3.8857161043,2.4616724744,-2.9500524175  
C,0,2.3381228632,4.2421076923,-2.0747660196  
C,0,-3.6689565997,2.7425258068,0.9692604188  
C,0,-1.8498960081,3.7840144243,-0.3965421412  
C,0,-3.2427414127,1.6077327262,3.0306606972  
C,0,-0.9418404206,1.4058157487,3.9999084059  
H,0,5.0070623277,-0.4061940919,-1.5323205393  
C,0,4.5951300597,1.2639006214,-2.8327149304  
H,0,3.7561109184,0.7286505208,1.5578234443  
H,0,4.1387887118,-0.7385027343,0.6118971813  
H,0,2.4666157366,-0.1679686951,0.747926635  
H,0,3.9529839738,3.0358340985,-3.8791716111  
H,0,1.2552894242,4.0844310722,-1.9460328809  
H,0,2.503490253,4.6741091427,-3.0714234564  
H,0,2.6390092737,4.9851050318,-1.3205967424  
H,0,-4.3699184052,3.1048424796,0.2110007768  
C,0,-4.1596641749,2.0466683624,2.0756171124  
H,0,-0.9985138808,4.4367726803,-0.1567944908  
H,0,-2.6651504463,4.4037820058,-0.7957019589  
H,0,-1.5219985445,3.1170481729,-1.211977785  
H,0,-3.6041691905,1.0597945687,3.9064800387  
H,0,-0.8001510303,2.2028680099,4.7486754844  
H,0,0.0542769452,1.1562477034,3.6124300773  
H,0,-1.3459225037,0.5299345966,4.52747387  
C,0,5.4779424814,0.7779703876,-3.9460824967  
C,0,-5.6335169686,1.8253684267,2.2552601974

H,0,6.4928444792,1.2012432389,-3.8586805417  
H,0,5.0867178943,1.0740201075,-4.9306103144  
H,0,5.579973831,-0.317053745,-3.9323491382  
H,0,-6.1104592885,2.708432225,2.7126323968  
H,0,-5.8378258973,0.9672842341,2.9118064788  
H,0,-6.1382493878,1.6502678026,1.2933386255  
C,0,1.2145309786,-0.3283416755,-2.1921087341  
C,0,0.9247918834,-1.3698277419,-1.3755654761  
N,0,0.3063657843,1.3118072451,-0.2480516784  
N,0,-0.1683301535,-1.3277037463,-0.532400003  
P,0,0.2292233358,1.1629939138,-2.0018715296  
P,0,-1.015872217,0.2354208798,-0.3732200794  
C,0,-0.7807757532,-2.5514530142,-0.1375730938  
C,0,-0.0516538262,-3.5039018882,0.6041792612  
C,0,-2.1071677431,-2.8324306503,-0.533006382  
C,0,-0.6468518218,-4.7356997492,0.899537377  
C,0,1.3070145134,-3.2371192479,1.1527329671  
C,0,-2.6687287781,-4.0702767995,-0.2059354982  
C,0,-2.9230531449,-1.8351799895,-1.2802819999  
H,0,-0.0732167352,-5.4629407716,1.4794489668  
C,0,-1.9444598656,-5.0270828843,0.4960569886  
C,0,1.4346097194,-2.407536248,2.284075762  
C,0,2.4366348848,-3.8868327231,0.6242994679  
H,0,-3.6915361633,-4.2775788412,-0.5301861128  
C,0,-3.9177008737,-1.1059256511,-0.5951096115  
C,0,-2.6992995316,-1.6130293627,-2.6517218183  
H,0,-2.3933692413,-5.9933552558,0.7364619938  
C,0,2.6924634634,-2.2403523829,2.8631608754  
C,0,0.2354851399,-1.7264398758,2.8715180276  
C,0,3.6824061143,-3.6764256394,1.2244725295  
C,0,2.3224480802,-4.8200609102,-0.5489460426  
C,0,-4.6299740075,-0.1265292009,-1.285262925  
C,0,-4.1497921688,-1.3109128334,0.8717492325  
C,0,-3.4325332629,-0.6159773939,-3.3007617151  
C,0,-1.6805427375,-2.4095584947,-3.412773817  
H,0,2.7847865065,-1.6001925942,3.7457131763  
C,0,3.832512818,-2.8605822686,2.3460052218  
H,0,-0.1317653493,-0.926234738,2.2085075888  
H,0,0.4754649034,-1.2735940268,3.8420933873  
H,0,-0.6008801804,-2.4279840279,3.0101906641  
H,0,4.5612753309,-4.1748500733,0.8041647021  
H,0,1.6063947371,-4.4576564592,-1.301771164  
H,0,1.9592725002,-5.8124895534,-0.2356999043  
H,0,3.2974098437,-4.9637741243,-1.0357278843  
H,0,-5.3850276157,0.4522862994,-0.7461571388  
C,0,-4.3863805517,0.1516885902,-2.6326419643  
H,0,-5.0386276246,-0.7630217054,1.2090115211  
H,0,-3.2884794864,-0.931921194,1.4477172979  
H,0,-4.2726665971,-2.3712996052,1.1321270988  
H,0,-3.2478829216,-0.4345328691,-4.363745522  
H,0,-1.6327584273,-3.4498969278,-3.0599115037

H,0,-0.6749815758,-1.9759299356,-3.2911705057  
H,0,-1.9104598949,-2.4153847945,-4.4876434403  
C,0,5.1809394937,-2.6178207665,2.9581668217  
C,0,-5.1133043401,1.2655419499,-3.3275654297  
H,0,5.5861636087,-1.6434696913,2.6362846421  
H,0,5.9053691155,-3.3906572249,2.66438428  
H,0,5.1268642645,-2.597171731,4.0568440544  
H,0,-5.1060208362,1.1367983597,-4.4193072796  
H,0,-4.6359662532,2.2354132128,-3.1073333805  
H,0,-6.1599099905,1.335256016,-2.9955604478  
H,0,2.0282836392,-0.3917258767,-2.9165065224  
H,0,1.5058231551,-2.2959141479,-1.3699813882

### Diphenylacetylen

C,0,-1.1568164336,-2.7333668569,0.7349779695  
C,0,-0.1558550182,-3.458644011,1.4104488375  
C,0,-2.3760661138,-3.3662142252,0.4034619879  
C,0,-0.3796189035,-4.803545166,1.7255487458  
C,0,1.1361987121,-2.8346744233,1.8034117394  
C,0,-2.5627879092,-4.7127617234,0.7257050428  
C,0,-3.4752362922,-2.6128443729,-0.2615835583  
H,0,0.4050614714,-5.3531045054,2.2519684892  
C,0,-1.5709822261,-5.4343120455,1.3834140746  
C,0,2.2695472024,-3.0234551125,0.9962332223  
C,0,1.237956395,-2.1313659235,3.0166755014  
H,0,-3.5096332762,-5.1895125207,0.4589840289  
C,0,-4.4636507593,-1.985712631,0.5228630817  
C,0,-3.5549102493,-2.5694855738,-1.6658844822  
H,0,-1.7300232778,-6.4853650826,1.6352441359  
C,0,3.4960744098,-2.4978201743,1.4130908706  
C,0,2.1606746955,-3.7782636793,-0.2953821273  
C,0,2.4855400919,-1.6420379372,3.4076867278  
C,0,0.0288295855,-1.9149288979,3.8777112856  
C,0,-5.4885990987,-1.2847194334,-0.1170076156  
C,0,-4.4440781021,-2.1051287183,2.0190324691  
C,0,-4.598376109,-1.8594132797,-2.2652217032  
C,0,-2.5615030985,-3.3138198995,-2.509292787  
H,0,4.3750312419,-2.6381246635,0.7762397145  
C,0,3.6269268229,-1.808120319,2.6191892086  
H,0,1.7819773266,-4.7993896409,-0.1360914249  
H,0,3.1331457257,-3.8417462728,-0.8000487511  
H,0,1.4565755072,-3.2819594835,-0.9807532179  
H,0,2.5644122601,-1.1110219935,4.3607649886  
H,0,-0.722126073,-1.3047623789,3.3497150909  
H,0,0.2873027971,-1.3870320759,4.805374282  
H,0,-0.4598389976,-2.8674107825,4.1349939809  
H,0,-6.2512766785,-0.7932401704,0.4944814578  
C,0,-5.5712346918,-1.2031736039,-1.5093681843  
H,0,-4.6063814203,-3.1487695166,2.3318715288  
H,0,-5.2254756325,-1.4825905996,2.4761735667

H,0,-3.4743989056,-1.7966766569,2.4371638389  
H,0,-4.6509961308,-1.8199530413,-3.3572952691  
H,0,-2.7761940916,-4.3951234426,-2.5011462579  
H,0,-1.5368059905,-3.1978226763,-2.1298289388  
H,0,-2.5851865421,-2.9696501698,-3.5525694862  
C,0,4.9443238382,-1.2395548531,3.0596509372  
C,0,-6.6575797892,-0.4067618475,-2.1713478199  
H,0,5.7651133326,-1.5697177987,2.4068706305  
H,0,5.1872663268,-1.5411111023,4.0904739897  
H,0,4.923453304,-0.1375632608,3.0368635039  
H,0,-6.8845673557,-0.7900049535,-3.1766103353  
H,0,-6.3555610504,0.64818145,-2.2835806791  
H,0,-7.585098137,-0.4191969733,-1.580537647  
N,0,-0.9170949908,-1.3757263615,0.4442956141  
N,0,0.2199760532,0.6359545709,-0.9430994677  
P,0,-1.7891850166,0.0579063877,1.0859229473  
P,0,-1.1842180648,-0.4358304452,-0.9626911655  
C,0,0.3173739597,1.3953285324,-2.1673381358  
C,0,1.1839250697,0.9942453753,-3.2064512248  
C,0,-0.5671077287,2.4823694168,-2.3863152334  
C,0,1.0828514607,1.6153215063,-4.4584812965  
C,0,2.2920596444,0.0120630875,-3.040551289  
C,0,-0.6337709357,3.0772870575,-3.6490357948  
C,0,-1.3555442433,3.0866663808,-1.2738377985  
H,0,1.7557188878,1.2843469115,-5.2535366926  
C,0,0.1669176709,2.6319954591,-4.6937393251  
C,0,2.100155101,-1.3624320991,-3.2577171013  
C,0,3.5850745879,0.5157018154,-2.7976581159  
H,0,-1.3311186898,3.9054610228,-3.7974276121  
C,0,-2.6545309858,2.6719856913,-0.9496177017  
C,0,-0.7559986619,4.1523184069,-0.5640170462  
H,0,0.0945192042,3.0923705779,-5.6818302575  
C,0,3.1939467063,-2.2239401344,-3.1494701195  
C,0,0.7573071466,-1.8936660785,-3.6581574806  
C,0,4.6487640668,-0.3827502102,-2.6841985897  
C,0,3.8342799792,1.9930408432,-2.6923627619  
C,0,-3.2717432838,3.2198290392,0.1847875732  
C,0,-3.4416494706,1.7288117184,-1.8129527043  
C,0,-1.4087360477,4.6767607352,0.5481155293  
C,0,0.5218893162,4.7725970312,-1.0551324255  
H,0,3.0392050664,-3.2931728196,-3.319939904  
C,0,4.4726617883,-1.7589168963,-2.8374048821  
H,0,-0.0288102411,-1.5872560205,-2.951838866  
H,0,0.7590870731,-2.9910415265,-3.7151158175  
H,0,0.4531241058,-1.4996531977,-4.6413543704  
H,0,5.6483256321,0.0102596868,-2.4751756621  
H,0,3.693081939,2.4872875876,-3.666893948  
H,0,4.857684107,2.1960061766,-2.3503154528  
H,0,3.1405747716,2.4732784847,-1.9872567679  
H,0,-4.2720278246,2.8683663837,0.4561134818  
C,0,-2.659962799,4.2019462843,0.9589815389

H,0,-3.8954531549,0.9207082245,-1.2217474175  
H,0,-2.8313539385,1.2666375371,-2.5989434201  
H,0,-4.258444603,2.2806876059,-2.3083606486  
H,0,-0.9324880872,5.4865274316,1.1093237946  
H,0,0.3369604993,5.33510373,-1.9849652552  
H,0,1.291592934,4.0251949325,-1.2899645369  
H,0,0.9349265008,5.4736576429,-0.3170229001  
C,0,5.6171385681,-2.7129183255,-2.6557009537  
C,0,-3.3309808083,4.7788702771,2.1713038662  
H,0,5.6670309828,-3.0724765542,-1.6133354512  
H,0,6.5822237425,-2.2368573024,-2.8819976281  
H,0,5.5115218163,-3.5992795997,-3.2982931314  
H,0,-3.641913032,5.8215074728,1.9943525582  
H,0,-2.6480528657,4.7866827833,3.0349580827  
H,0,-4.2273643189,4.2058566989,2.4482171507  
C,0,-0.2891841942,1.0522586118,1.3610194456  
C,0,0.5780435782,1.1638193661,0.3055692432  
C,0,-0.0713710097,1.5539202157,2.7333761288  
C,0,-1.1442908394,2.1491530186,3.4185490513  
C,0,1.1459137189,1.4123344128,3.4180623525  
C,0,-1.0020211536,2.6067819053,4.7252218698  
H,0,-2.104040487,2.255728577,2.9075131792  
C,0,1.2879454806,1.8719485803,4.7242927396  
H,0,1.9831324487,0.9205888391,2.9246624235  
C,0,0.2190835466,2.4754510615,5.3859215652  
H,0,-1.8539518152,3.0686785414,5.2309810656  
H,0,2.2476688799,1.7484016286,5.2331432457  
H,0,0.3341357507,2.833500227,6.4117290475  
C,0,1.9585481965,1.6773589921,0.4663275061  
C,0,2.2268527755,2.9523663319,0.9775227064  
C,0,3.018350579,0.7924921395,0.2372264419  
C,0,3.5374018497,3.3465387433,1.2275766466  
H,0,1.3941366446,3.6176158614,1.2070774068  
C,0,4.3271159528,1.1835658231,0.5058579207  
H,0,2.8047508348,-0.213472635,-0.1253657385  
C,0,4.5918828466,2.4623559941,0.9935030289  
H,0,3.7367823417,4.3458308684,1.6217301181  
H,0,5.143281556,0.4795313852,0.3285739045  
H,0,5.6202492367,2.7698575953,1.1990332733

#### 1-Pentin1

C,0,0.4290872128,-2.6535004018,0.3556038362  
C,0,1.730236297,-3.048652033,0.7338391076  
C,0,-0.4241385979,-3.5750073302,-0.2915134894  
C,0,2.151905138,-4.3549642992,0.4756604368  
C,0,2.6627488394,-2.0782269738,1.3700365458  
C,0,0.0365284025,-4.8712222325,-0.5389868973  
C,0,-1.7928544322,-3.1717407671,-0.7121903463  
H,0,3.1649142669,-4.6441459199,0.7678701134  
C,0,1.3135730846,-5.2696207691,-0.156068658

C,0,3.2985122665,-1.1066160867,0.576743228  
C,0,2.9216410765,-2.141574033,2.7523176188  
H,0,-0.6379345891,-5.5803646493,-1.0259725907  
C,0,-2.8148154902,-2.9814372513,0.2344759942  
C,0,-2.0532409139,-2.9577355635,-2.0828304942  
H,0,1.654823718,-6.2887258657,-0.3506735652  
C,0,4.2145536287,-0.2380210509,1.1753351914  
C,0,2.9778238117,-0.9726898192,-0.8803660906  
C,0,3.8253914159,-1.2374457773,3.3154362148  
C,0,2.2148390761,-3.1448765057,3.6185668455  
C,0,-4.0701169211,-2.542531114,-0.2025537006  
C,0,-2.5925903413,-3.212957235,1.7016590581  
C,0,-3.3162144036,-2.5161516669,-2.4733770105  
C,0,-0.9824232113,-3.1945405927,-3.1098209168  
H,0,4.7196562052,0.5054186907,0.5505648798  
C,0,4.4939272437,-0.28503457,2.5417455055  
H,0,2.9838472702,-1.945857965,-1.3937654009  
H,0,3.6851041288,-0.3029506627,-1.3875011905  
H,0,1.969216116,-0.5494091546,-1.0140444342  
H,0,4.0169329565,-1.2845241063,4.3920352393  
H,0,1.1216208258,-3.0367684037,3.5317268195  
H,0,2.4883672908,-3.0180891277,4.6753437241  
H,0,2.4524964227,-4.178236805,3.3238375059  
H,0,-4.8604812398,-2.3899404012,0.5389739464  
C,0,-4.3400382977,-2.2940380395,-1.5460440789  
H,0,-1.6767328,-3.7871746412,1.8939120136  
H,0,-3.4417689831,-3.7568373852,2.1423332939  
H,0,-2.5058260896,-2.2567873193,2.2452996523  
H,0,-3.5082398438,-2.3368103018,-3.5358930059  
H,0,-0.7260605865,-4.2623503805,-3.1848518438  
H,0,-0.0503962268,-2.6705413552,-2.8482267318  
H,0,-1.3075105135,-2.8579309073,-4.1038411625  
C,0,5.4898331566,0.650485135,3.1657889625  
C,0,-5.6887534417,-1.8165141092,-2.0002003389  
H,0,5.7714299308,1.4591325833,2.4759693213  
H,0,6.4133775841,0.1184758053,3.4479377723  
H,0,5.0906429179,1.1101158168,4.0834118675  
H,0,-6.1665963823,-2.548882202,-2.6706480703  
H,0,-5.608938074,-0.8711117376,-2.5598235698  
H,0,-6.3650999177,-1.6495411322,-1.1500004248  
C,0,0.8802695677,0.7760116287,2.0591134105  
C,0,0.8608377983,1.4944127245,0.9051009677  
N,0,0.005877779,-1.3690783988,0.6831448983  
N,0,-0.1366493609,1.221955352,-0.0410598882  
P,0,-0.2635415823,-0.5856917327,2.2500317548  
P,0,-1.1565654787,-0.2056942676,0.2441592735  
C,0,-0.7186314358,2.299747762,-0.7887314409  
C,0,-0.1876953629,2.704154715,-2.0319026148  
C,0,-1.8483300372,2.9638472728,-0.2557942557  
C,0,-0.7416322366,3.8187724475,-2.6733799667  
C,0,0.8766767095,1.9301886599,-2.7295068996



C,0,-2.3771132271,4.0679523298,-0.9300312293  
C,0,-2.5141611727,2.4397898507,0.9721113061  
H,0,-0.3223574941,4.12761644,-3.6339622473  
C,0,-1.8156365573,4.5097933028,-2.1232241593  
C,0,0.5156940178,0.7021370812,-3.326107702  
C,0,2.1787244301,2.4329544237,-2.9007437594  
H,0,-3.2423402529,4.5793469163,-0.5011004304  
C,0,-3.6379695407,1.5970359228,0.8227658117  
C,0,-2.0154154864,2.7261893854,2.2546736787  
H,0,-2.2303027629,5.3796958908,-2.6378528283  
C,0,1.4911692876,-0.0472820102,-3.9824295912  
C,0,-0.9071947668,0.2284305018,-3.3111314284  
C,0,3.1287395992,1.6413778513,-3.5574573584  
C,0,2.5805003076,3.8139920926,-2.460673136  
C,0,-4.1760554251,0.9837448289,1.9547238136  
C,0,-4.2256201877,1.3149524794,-0.5294080802  
C,0,-2.5782284904,2.0795798675,3.3584329589  
C,0,-0.9347966768,3.744507058,2.4709780042  
H,0,1.2051283463,-0.9987019622,-4.4408066765  
C,0,2.8147398367,0.3900670317,-4.08379288  
H,0,-1.1756779209,-0.2565982462,-2.3578160716  
H,0,-1.082106236,-0.5051830402,-4.1081435263  
H,0,-1.6108587771,1.0622026794,-3.4467498386  
H,0,4.1472072802,2.0270465424,-3.6679740854  
H,0,2.7091696557,4.4685542056,-3.3383793346  
H,0,3.5423569377,3.8004536364,-1.9267192291  
H,0,1.8343475677,4.2845712648,-1.8100301516  
H,0,-5.0276800042,0.3084270112,1.8308857547  
C,0,-3.639051723,1.1834938127,3.2283332012  
H,0,-3.5230340422,0.7345234902,-1.1500202631  
H,0,-4.4550022003,2.2395866372,-1.078593539  
H,0,-5.1479829394,0.7265058907,-0.4370643734  
H,0,-2.1661778922,2.2809066347,4.3520040549  
H,0,-0.3650251951,3.9464797926,1.5558549925  
H,0,-0.2329799961,3.4181581872,3.2507486652  
H,0,-1.3768010786,4.7015239514,2.7960845271  
C,0,3.8620653561,-0.47090704,-4.7258669727  
C,0,-4.1629385271,0.429292721,4.4146035199  
H,0,4.2549934582,-1.2059296118,-4.002947387  
H,0,4.713454688,0.1243740779,-5.0858453226  
H,0,3.4542617669,-1.0386083774,-5.5752640718  
H,0,-4.0790237619,1.0171723874,5.3402941701  
H,0,-3.5848454151,-0.4986110301,4.5631452393  
H,0,-5.2162572022,0.1431249852,4.2812529787  
H,0,1.6237112953,0.9811829178,2.8300754087  
C,0,1.8771576593,2.5418307062,0.5671882669  
H,0,2.5049284874,2.1244655255,-0.2398933292  
H,0,1.3658913035,3.4076926216,0.1161271573  
C,0,2.7577485127,3.0135303152,1.7119274632  
H,0,2.1268009723,3.4584387237,2.4991660984  
H,0,3.2549377025,2.1453269815,2.1694818096

C,0,3.8085127724,4.0143026478,1.2606772231  
H,0,3.3519225193,4.9039480731,0.797664539  
H,0,4.4253769931,4.3577950665,2.1047193899  
H,0,4.4868978517,3.568819027,0.5146400485

#### 1-Pentin2

C,0,2.0255897632,-1.0079212843,1.3232027303  
C,0,3.3283856479,-0.4769592515,1.2087845358  
C,0,1.8497680874,-2.2597297293,1.9611373163  
C,0,4.4189122499,-1.2255569857,1.6650082396  
C,0,3.624052316,0.8595549651,0.6230226054  
C,0,2.9647837559,-2.9786846923,2.4010111549  
C,0,0.4925800896,-2.8088711244,2.2242203442  
H,0,5.4200729351,-0.8032183944,1.5452585778  
C,0,4.2517161402,-2.4765297814,2.2472322013  
C,0,3.5980495582,1.0492096786,-0.7689601913  
C,0,4.0729665775,1.8945729582,1.4684886579  
H,0,2.801160749,-3.9429062654,2.8896766446  
C,0,-0.2457134093,-2.3418688849,3.3296222435  
C,0,-0.0420070603,-3.8040104052,1.3857660429  
H,0,5.1162906913,-3.04869764,2.5907155843  
C,0,4.0744668853,2.2531414154,-1.2971898806  
C,0,3.0798714918,-0.024690462,-1.674882413  
C,0,4.540525722,3.0802633322,0.8996277485  
C,0,4.0386319777,1.7381904604,2.9629210211  
C,0,-1.5524852166,-2.8037971884,3.5089983944  
C,0,0.3649250246,-1.3884302974,4.3151614451  
C,0,-1.3448329305,-4.2504389688,1.6105587372  
C,0,0.7680710787,-4.3389625551,0.2437325603  
H,0,4.066754017,2.3906777414,-2.3826489624  
C,0,4.5653105322,3.2745131966,-0.484263477  
H,0,3.5776077873,-0.9891953162,-1.4890437442  
H,0,3.2244314049,0.240585785,-2.7305427277  
H,0,2.0048297549,-0.1882773243,-1.5016502865  
H,0,4.8900514943,3.8804511901,1.5595148999  
H,0,3.0499207013,1.3878423479,3.2988268473  
H,0,4.2544833445,2.6930690084,3.4624415802  
H,0,4.7702634801,0.9962230055,3.3180160733  
H,0,-2.1317590231,-2.4290427858,4.3584208531  
C,0,-2.1298914143,-3.7378732099,2.6464444515  
H,0,1.3226669914,-1.7762693558,4.6945050708  
H,0,-0.306990857,-1.2198470877,5.1680758309  
H,0,0.5810668498,-0.4076881098,3.8629552071  
H,0,-1.7651394262,-5.0125829172,0.9478148696  
H,0,1.7401560998,-4.7253321449,0.5832573356  
H,0,0.9859853391,-3.5466670269,-0.4900323127  
H,0,0.237809303,-5.1479862819,-0.2757713837  
C,0,5.0705398722,4.5633740723,-1.0644678195  
C,0,-3.5580595711,-4.1657822425,2.8178506318  
H,0,5.0823081319,4.5341800604,-2.163161523

H,0,6.0928101801,4.7857145583,-0.7199845435  
H,0,4.436425617,5.4114977176,-0.757743463  
H,0,-3.7251179193,-5.1835599262,2.4365299478  
H,0,-4.2337517149,-3.4928367396,2.2629256128  
H,0,-3.865842513,-4.1381560407,3.8733505412  
C,0,-0.1803949117,2.2327413575,0.4043124367  
C,0,-0.7219381991,1.7063382212,-0.7238302734  
N,0,0.9508356333,-0.2437119886,0.8319415859  
N,0,-1.0727430899,0.3745178088,-0.8183500208  
P,0,0.1298117873,1.0624777572,1.7334863657  
P,0,-0.7014714463,-0.669786193,0.5556808942  
C,0,-2.2136285562,0.0564767146,-1.618053497  
C,0,-2.0991503821,-0.839785644,-2.6938946474  
C,0,-3.4604089689,0.6548048163,-1.315436916  
C,0,-3.2326195061,-1.1030086606,-3.4749808033  
C,0,-0.8221468764,-1.5152853101,-3.0524471909  
C,0,-4.5666389671,0.3659750992,-2.1160948255  
C,0,-3.5895948685,1.5775372717,-0.1531211676  
H,0,-3.1326045444,-1.7845857251,-4.3232396371  
C,0,-4.4555334749,-0.5053007361,-3.1962623634  
C,0,-0.6825344167,-2.8917809096,-2.7878606251  
C,0,0.1919320956,-0.8216980094,-3.7371417769  
H,0,-5.5263363942,0.8283987044,-1.8731862759  
C,0,-3.6849379534,1.0675745588,1.152284281  
C,0,-3.5790449505,2.9719856651,-0.3691986474  
H,0,-5.3260560769,-0.7208631313,-3.8201926037  
C,0,0.4785078559,-3.5470135976,-3.2033394319  
C,0,-1.7509450975,-3.6430732043,-2.0464255643  
C,0,1.3298769092,-1.5210583405,-4.1465480768  
C,0,0.0883359875,0.6481567956,-4.0209364869  
C,0,-3.6590140529,1.9632487593,2.2276566694  
C,0,-3.8771643859,-0.396760799,1.4332368496  
C,0,-3.5841807842,3.8275567046,0.7305289638  
C,0,-3.5686737534,3.5409953815,-1.7598639654  
H,0,0.5860657955,-4.614841964,-2.9917379636  
C,0,1.5008317666,-2.8795121093,-3.8806657725  
H,0,-1.9027352023,-3.216965075,-1.0412470676  
H,0,-1.4805945354,-4.7012574738,-1.9314538102  
H,0,-2.721903288,-3.5945548358,-2.5606028585  
H,0,2.1103700117,-0.9820065159,-4.6918123912  
H,0,-0.9540528424,0.9721927795,-4.1495957364  
H,0,0.6500819096,0.9170480446,-4.9267449976  
H,0,0.5148205155,1.2298060756,-3.186860355  
H,0,-3.6992967146,1.5620930932,3.2448633448  
C,0,-3.5881814312,3.3418657883,2.0418705853  
H,0,-3.2333113697,-0.7362235213,2.2572682355  
H,0,-3.6641925167,-1.0279232679,0.5609481913  
H,0,-4.9239499272,-0.5854636532,1.7266613258  
H,0,-3.562270186,4.9082770081,0.5599527501  
H,0,-4.5519561829,3.428147117,-2.2446641295  
H,0,-2.8470330316,3.0278535068,-2.4129581305

H,0,-3.3233327552,4.6122066597,-1.7472117809  
C,0,2.7608345969,-3.5905992246,-4.2795133555  
C,0,-3.4950116041,4.2825907738,3.2072647968  
H,0,3.5458414127,-3.4483368109,-3.5176196335  
H,0,3.1584575106,-3.206350447,-5.2304261475  
H,0,2.5994134879,-4.6729223688,-4.3861125522  
H,0,-4.0979528636,5.1886880021,3.0454558862  
H,0,-2.4526081233,4.6094757527,3.3602609476  
H,0,-3.8311750488,3.8076540379,4.1398288601  
H,0,-0.9732446431,2.3234734905,-1.5918620536  
C,0,-0.0094612846,3.7118273887,0.6153778016  
H,0,-0.0102554357,3.9062828135,1.7019155076  
H,0,-0.8950738918,4.2372451574,0.2167413816  
C,0,1.255442251,4.3194984042,0.0081402208  
H,0,1.3362988529,5.3648862465,0.3540007948  
H,0,2.1364463878,3.7905842955,0.4016569461  
C,0,1.2814757553,4.2858707025,-1.5101700947  
H,0,2.1831282785,4.7766634633,-1.9056634978  
H,0,1.2882131489,3.2509476782,-1.8839736251  
H,0,0.404237999,4.7985815481,-1.9403326824

## 2-Butin

C,0,1.4167598863,-2.1706458338,-0.2092759126  
C,0,2.776099938,-2.1720151097,0.1709123207  
C,0,0.9443636052,-3.1485909125,-1.1136141526  
C,0,3.629645991,-3.1511549362,-0.3462104586  
C,0,3.3409471427,-1.1334545734,1.0757448481  
C,0,1.8294662133,-4.1079113391,-1.612314689  
C,0,-0.4787495379,-3.1549693322,-1.5443031615  
H,0,4.6826469451,-3.1306380398,-0.0531614998  
C,0,3.1676406328,-4.1198061898,-1.2316185092  
C,0,3.5338896854,0.1789887822,0.6030432169  
C,0,3.7621437058,-1.484168511,2.3727741585  
H,0,1.4449538548,-4.8634763755,-2.3025884576  
C,0,-1.4837816246,-3.6472476108,-0.6925591718  
C,0,-0.813039573,-2.6486251619,-2.8160109627  
H,0,3.8482993934,-4.8769417427,-1.627025319  
C,0,4.1733077874,1.107246397,1.4285703748  
C,0,3.0650820964,0.5874390484,-0.7600620377  
C,0,4.4077280255,-0.5273110822,3.1610150289  
C,0,3.506271152,-2.8602675722,2.919741721  
C,0,-2.8168437101,-3.5748841854,-1.1100585199  
C,0,-1.1448670213,-4.2353296693,0.6460454001  
C,0,-2.1548016277,-2.5953409588,-3.1928738017  
C,0,0.2629672079,-2.166993148,-3.7466113399  
H,0,4.3315363954,2.1226459938,1.051886145  
C,0,4.6283796681,0.774375325,2.7060640183  
H,0,3.3441625676,-0.152830464,-1.5249425318  
H,0,3.4776797942,1.5626678691,-1.050531147  
H,0,1.9669709286,0.6698748618,-0.7851006234

H,0,4.7377047102,-0.8072851505,4.1662329228  
H,0,2.4470306274,-3.1379101815,2.8014573071  
H,0,3.7592608279,-2.9121368755,3.9879849386  
H,0,4.0921464877,-3.6299872856,2.3944655717  
H,0,-3.5982337647,-3.9520778381,-0.4433564367  
C,0,-3.175145562,-3.0453644253,-2.3493018899  
H,0,-0.2466249417,-4.8673368065,0.5910678476  
H,0,-1.9775844747,-4.8395772888,1.0326780604  
H,0,-0.9346711029,-3.4519553275,1.3938513827  
H,0,-2.4126105973,-2.1884126907,-4.175644759  
H,0,0.9383855864,-2.986289663,-4.0358477244  
H,0,0.8938010261,-1.4010706487,-3.2691179977  
H,0,-0.1670034784,-1.7435590373,-4.6643865933  
C,0,5.2821708292,1.7996498083,3.5864175458  
C,0,-4.6093646928,-2.9840367138,-2.7885023225  
H,0,5.7852489257,2.5785150908,2.9951256206  
H,0,6.0254672654,1.3434747809,4.2566312401  
H,0,4.5356888338,2.3042331884,4.2239008093  
H,0,-4.7967320405,-3.669795366,-3.6308221237  
H,0,-4.8804609639,-1.972676165,-3.1292378286  
H,0,-5.293265545,-3.2623457242,-1.9742224404  
C,0,0.4719736971,0.6367959392,2.3319020083  
C,0,0.22953357,1.5622572014,1.3596409582  
N,0,0.5680181412,-1.2184073222,0.3524269941  
N,0,-0.5498960916,1.2058844626,0.2436067693  
P,0,-0.0552403757,-1.0545350163,2.0034583834  
P,0,-0.9516374589,-0.502741925,0.0437452214  
C,0,-1.4996955971,2.1655625645,-0.2471225026  
C,0,-1.1686937124,3.0528569765,-1.29252011  
C,0,-2.781505625,2.223630546,0.3479373231  
C,0,-2.0966375848,4.031543188,-1.6687390372  
C,0,0.0948854385,2.9191325492,-2.0696463192  
C,0,-3.6831330309,3.2109271338,-0.0596289892  
C,0,-3.1907075192,1.190484921,1.3436815622  
H,0,-1.8319018258,4.7164371483,-2.4779599913  
C,0,-3.3381804808,4.1254766199,-1.0490797371  
C,0,0.1815288811,1.8637082484,-3.0040834655  
C,0,1.1391070578,3.8552485135,-1.9755412874  
H,0,-4.6668806672,3.2511384216,0.414494354  
C,0,-3.914307443,0.0654197602,0.8892017635  
C,0,-2.8320886358,1.2946019698,2.6984690955  
H,0,-4.0465056655,4.8993144056,-1.3541164502  
C,0,1.3558740004,1.6995888192,-3.7368870841  
C,0,-0.9925415324,0.9640945652,-3.2542777291  
C,0,2.3034287986,3.647255735,-2.72542256  
C,0,1.0376976718,5.106113468,-1.1459910144  
C,0,-4.1690425646,-0.9776766964,1.7795461978  
C,0,-4.3724860028,-0.0404809904,-0.5363799574  
C,0,-3.0975777805,0.2196666522,3.5521712875  
C,0,-2.2265350528,2.5473976154,3.2605238696  
H,0,1.4178718499,0.8784320946,-4.4572122975

C,0,2.4446074994,2.5642579393,-3.5901035683  
H,0,-1.0978374248,0.1903023464,-2.4756802867  
H,0,-0.8895797994,0.4471930475,-4.2167203208  
H,0,-1.9356337724,1.5294608347,-3.2633582074  
H,0,3.123087219,4.3668771016,-2.6326104094  
H,0,0.9852519822,5.9908348252,-1.8013381749  
H,0,1.9227512346,5.2355970663,-0.5044579565  
H,0,0.1464351184,5.1180865987,-0.5079996672  
H,0,-4.7016455869,-1.8607620844,1.4148131585  
C,0,-3.735224615,-0.9376949781,3.1065276908  
H,0,-5.0228260356,-0.9146878113,-0.6710171105  
H,0,-3.514884598,-0.1580712302,-1.2190967155  
H,0,-4.9214671755,0.8563718939,-0.8579488476  
H,0,-2.7877471379,0.2911747263,4.5993912398  
H,0,-1.8046875864,3.1913202222,2.479710915  
H,0,-1.4348400005,2.3180957023,3.987241871  
H,0,-2.9978362512,3.1357086547,3.7858301405  
C,0,3.7257262922,2.3202231586,-4.3313729365  
C,0,-3.9174504984,-2.1191818071,4.0124932809  
H,0,4.3528224005,1.5918944897,-3.789556408  
H,0,4.313774224,3.2426042511,-4.4420619405  
H,0,3.541149088,1.9062465492,-5.3336733882  
H,0,-3.9967919735,-1.8162443666,5.0666363094  
H,0,-3.0519807987,-2.7984949377,3.9300488494  
H,0,-4.8152530011,-2.6977594588,3.7503782471  
C,0,0.7827921905,2.947506153,1.3934255525  
H,0,1.2496192841,3.1644397023,2.3601477424  
H,0,1.5533627279,3.0448065193,0.6135537802  
H,0,0.0152059198,3.7080530535,1.1927989064  
C,0,1.1401832745,0.9171280364,3.6440880248  
H,0,0.7452286516,0.2379170229,4.41776844  
H,0,2.2256836537,0.7409546066,3.5967411493  
H,0,0.9740235569,1.946587394,3.9961633174

### 1,3-Butadiin1

C,0,2.3705247119,0.8896413526,1.0767873708  
C,0,2.722116991,2.2324930643,0.8400187293  
C,0,3.3462259527,-0.0404904164,1.4941846174  
C,0,4.0541325073,2.624065032,0.9921045871  
C,0,1.6616319809,3.192756644,0.4342391908  
C,0,4.6714272423,0.3824315542,1.6261197025  
C,0,2.9290839773,-1.4300078375,1.8218069289  
H,0,4.3219647742,3.6658193719,0.7977324205  
C,0,5.0288305024,1.7048679786,1.373983259  
C,0,1.2164848747,3.2081708198,-0.9000919565  
C,0,1.0743115421,4.0404935853,1.3876991693  
H,0,5.4244856529,-0.3398757402,1.9519430782  
C,0,2.3117560041,-1.6949613745,3.0603306976  
C,0,3.104534171,-2.4627226755,0.8850352958  
H,0,6.0682736109,2.021933727,1.4851264824

C,0,0.1868367217,4.0773872045,-1.2586979335  
C,0,1.8094740065,2.273395818,-1.9104358738  
C,0,0.0382491662,4.8911098071,0.9886738821  
C,0,1.519141772,4.0071557552,2.8221959107  
C,0,1.7988337311,-2.9720981833,3.2982509612  
C,0,2.239935891,-0.6357636497,4.1214992642  
C,0,2.5975778357,-3.7323398691,1.1722946796  
C,0,3.799771508,-2.1922640802,-0.4152905831  
H,0,-0.1604218611,4.0837321978,-2.2960112027  
C,0,-0.4250177039,4.9198920776,-0.3271782473  
H,0,2.9079616737,2.2538269915,-1.856951139  
H,0,1.5146030929,2.5498839868,-2.931536477  
H,0,1.4632703336,1.2421275493,-1.7344725104  
H,0,-0.4243317727,5.5456784146,1.7338881691  
H,0,1.3703828341,3.0051628976,3.25798368  
H,0,0.9545732961,4.7282999153,3.4295471573  
H,0,2.5908571035,4.2349826287,2.924653761  
H,0,1.3053896902,-3.1719590655,4.2542869801  
C,0,1.9122651413,-3.9999749166,2.3583757915  
H,0,3.248466892,-0.2858510106,4.3918440481  
H,0,1.7489535377,-1.0156362952,5.0279678975  
H,0,1.6811279724,0.2502820893,3.7843263199  
H,0,2.7264655808,-4.5313367699,0.4364347881  
H,0,4.8071540891,-1.7793687583,-0.2574524897  
H,0,3.2467819096,-1.4534376783,-1.0161323932  
H,0,3.893477236,-3.1094149997,-1.0116561553  
C,0,-1.5745311825,5.7961524568,-0.7309312536  
C,0,1.2947925922,-5.3448242872,2.6094646243  
H,0,-1.3749863874,6.3112043615,-1.6830719627  
H,0,-1.7921866925,6.55830472,0.0308825602  
H,0,-2.486723209,5.1924147639,-0.8731478848  
H,0,1.8081722782,-6.1378638219,2.0468561657  
H,0,0.2371326507,-5.3517799968,2.2952838514  
H,0,1.3186064437,-5.6093626293,3.6768704488  
N,0,1.0237586334,0.5289302395,0.9512164652  
N,0,-1.0734673432,-0.1429159739,-0.6072978404  
P,0,-0.3279031168,0.7168250247,2.088297348  
P,0,0.1085800611,-0.8307154172,0.5231932747  
C,0,-1.8543355084,-1.0640887999,-1.3758269987  
C,0,-1.3401138286,-1.6219151733,-2.5613011977  
C,0,-3.1365973453,-1.4532655558,-0.9076816284  
C,0,-2.1480096433,-2.4982714282,-3.2996578276  
C,0,0.0348740723,-1.3685333487,-3.0815210117  
C,0,-3.9092131742,-2.3246496519,-1.6764348519  
C,0,-3.6353063467,-0.9756475467,0.4131849599  
H,0,-1.7458942868,-2.9127958424,-4.227396994  
C,0,-3.4267939844,-2.8370415045,-2.876797512  
C,0,1.0285849726,-2.3474672809,-2.8786236657  
C,0,0.3038458223,-0.2529110897,-3.8950513639  
H,0,-4.8959166689,-2.6139648504,-1.3072824032  
C,0,-3.0902880947,-1.5116336149,1.597533314

C,0,-4.6305898781,0.0191345528,0.4883863283  
H,0,-4.04088451,-3.5163249038,-3.4725894411  
C,0,2.2797732744,-2.174591135,-3.4748488978  
C,0,0.7619264069,-3.5621777183,-2.0366649486  
C,0,1.5741177585,-0.1149471891,-4.4600485396  
C,0,-0.7457025183,0.781806397,-4.1618649625  
C,0,-3.4286893914,-0.9279935206,2.8206583357  
C,0,-2.2404227459,-2.7531909739,1.6000640752  
C,0,-4.9479088484,0.5644246624,1.7343998498  
C,0,-5.3970247994,0.4664969809,-0.7239838156  
H,0,3.0440568105,-2.9420980607,-3.3251979806  
C,0,2.5808045363,-1.0586022448,-4.2568973073  
H,0,0.5878005982,-3.2808783006,-0.9850825405  
H,0,1.6156415026,-4.2531643528,-2.0624372282  
H,0,-0.1322252462,-4.1070607799,-2.3735706071  
H,0,1.7767534913,0.7561984702,-5.0903355733  
H,0,-1.7262317885,0.3260263226,-4.3636618139  
H,0,-0.4696888081,1.413243051,-5.0181217567  
H,0,-0.8824583833,1.4367115258,-3.2887957412  
H,0,-2.9777714012,-1.3260696684,3.734788774  
C,0,-4.3281527854,0.1359674105,2.9086970919  
H,0,-1.423044783,-2.6838574493,2.3320457047  
H,0,-1.8017458331,-2.9750960648,0.6188925557  
H,0,-2.8641139364,-3.620902002,1.8758547713  
H,0,-5.6986132197,1.3589558016,1.7848843661  
H,0,-6.3132840597,-0.1382126075,-0.8361361374  
H,0,-4.8168300542,0.3584441402,-1.6477778492  
H,0,-5.7055804662,1.5172323225,-0.6305809682  
C,0,3.9512669037,-0.8702885134,-4.8387935362  
C,0,-4.613792997,0.7956233588,4.2260384817  
H,0,4.6096181263,-0.3467296969,-4.1250237708  
H,0,3.9216753647,-0.2674822123,-5.7580176556  
H,0,4.427097872,-1.833693406,-5.0737701201  
H,0,-5.5786637011,1.3225646837,4.2150427724  
H,0,-3.834551472,1.5383917878,4.466403549  
H,0,-4.6291763112,0.0660324855,5.0493250433  
C,0,-1.4291194311,1.6049942832,0.9905510888  
C,0,-1.6324526578,1.0914078774,-0.2562641611  
C,0,-2.4028178168,1.8057590357,-1.2233780147  
C,0,-3.051453115,2.4531287122,-2.0185960965  
H,0,-3.6275904066,3.0118470473,-2.7320338204  
H,0,-1.9156431678,2.5373689953,1.2796700221

### 1,3-Butadiin2

C,0,2.2268740289,0.928948983,1.1629710426  
C,0,2.7331516517,2.1757367172,0.7461866521  
C,0,3.0422889157,0.0435393974,1.8998192177  
C,0,4.0551195627,2.5099641169,1.0491329381  
C,0,1.858401863,3.1059408297,-0.0149603222  
C,0,4.3637420087,0.405614684,2.174789572



C,0,2.4707764906,-1.2342351043,2.4009955235  
H,0,4.4409740592,3.4757070636,0.7126471915  
C,0,4.8740442853,1.6301411892,1.7525162379  
C,0,1.6230920131,2.8704303052,-1.3795906203  
C,0,1.2555129687,4.2004109838,0.6309275878  
H,0,4.9878371062,-0.2845884954,2.7485397837  
C,0,1.6467968585,-1.2244316227,3.5441865178  
C,0,2.713510939,-2.4364901435,1.7141022076  
H,0,5.9076282218,1.9018692702,1.9783711414  
C,0,0.7822156408,3.7373212309,-2.0804695501  
C,0,2.2387828725,1.689410176,-2.0657871515  
C,0,0.4237808692,5.0439230065,-0.107185224  
C,0,1.4736697094,4.4430861492,2.097378679  
C,0,1.0086374134,-2.4071780475,3.9247599768  
C,0,1.4764786283,0.0276558375,4.354244442  
C,0,2.0739142859,-3.6020037119,2.1426949293  
C,0,3.612020682,-2.4520397863,0.5134266056  
H,0,0.6019995098,3.5526137718,-3.1443777989  
C,0,0.1671920508,4.8268136694,-1.4619037365  
H,0,3.3085695081,1.5889160514,-1.8290812375  
H,0,2.1306036209,1.7623350341,-3.1559509951  
H,0,1.7524400557,0.7543650457,-1.7446367206  
H,0,-0.0570847833,5.8854124203,0.3998661485  
H,0,1.1744538074,3.5648145858,2.6920753754  
H,0,0.8871377561,5.3041713687,2.4462869299  
H,0,2.5332076562,4.6312897509,2.3291388626  
H,0,0.3563564768,-2.3950260837,4.8033188111  
C,0,1.1919324093,-3.6025220761,3.2248572586  
H,0,2.4524783414,0.4217240923,4.6767057448  
H,0,0.8628869513,-0.1584496933,5.246374804  
H,0,0.9918364014,0.8312789667,3.7780003374  
H,0,2.2563217551,-4.5348113631,1.6012406332  
H,0,4.6024146519,-2.0321392961,0.7420029962  
H,0,3.1933157937,-1.8406692696,-0.3019033982  
H,0,3.7500858476,-3.4733401819,0.1341530157  
C,0,-0.7877841017,5.7067260037,-2.2124029809  
C,0,0.4431099619,-4.8437683067,3.613725307  
H,0,-0.5967758775,5.6847100993,-3.2951905071  
H,0,-0.7289075649,6.7518508292,-1.8738333576  
H,0,-1.8243705659,5.366049553,-2.0488555909  
H,0,0.9647843564,-5.7528151055,3.2816142204  
H,0,-0.5592326909,-4.852666179,3.1526816232  
H,0,0.3003049314,-4.9070221869,4.7025750035  
N,0,0.8875071588,0.6324671713,0.8738743437  
N,0,-0.9974399808,-0.3903359488,-0.7365057765  
P,0,-0.5844541848,1.1945941683,1.6773565307  
P,0,-0.0636030799,-0.7754376616,0.7297565256  
C,0,-1.6887621789,-1.4650858044,-1.3821853957  
C,0,-1.0497035764,-2.2464777641,-2.3580664185  
C,0,-3.0244235711,-1.7424949095,-1.0020418093  
C,0,-1.7693280397,-3.2871838004,-2.9616425113

C,0,0.351387247,-2.0148380771,-2.8044720566  
C,0,-3.7071792997,-2.786443879,-1.6269786166  
C,0,-3.680414588,-0.9189196832,0.0510676759  
H,0,-1.2736482641,-3.8813927478,-3.7331752361  
C,0,-3.0852978358,-3.556329751,-2.6063600673  
C,0,1.360640227,-2.9020643751,-2.3823600092  
C,0,0.6454454227,-0.999475712,-3.7320578771  
H,0,-4.7369914645,-2.994527971,-1.3273928587  
C,0,-3.4237294984,-1.1665596815,1.409604248  
C,0,-4.5046905426,0.1612789198,-0.3303465685  
H,0,-3.6285429068,-4.369761773,-3.0929787494  
C,0,2.6520599799,-2.7479478136,-2.8906341599  
C,0,1.0619948872,-3.9879933931,-1.3891426968  
C,0,1.9475791916,-0.8936392467,-4.2270233005  
C,0,-0.3989175647,-0.0190992118,-4.179578117  
C,0,-3.9054517125,-0.2578654117,2.3595726807  
C,0,-2.6954699066,-2.3958388094,1.8795203522  
C,0,-4.9832978585,1.0248435162,0.6510607384  
C,0,-4.8656645519,0.3932307702,-1.7703925822  
H,0,3.4347622044,-3.4364779657,-2.5594006364  
C,0,2.968908441,-1.7483838379,-3.8128046826  
H,0,0.7249767166,-3.5621602178,-0.4299763942  
H,0,1.9529527564,-4.600017473,-1.194488526  
H,0,0.2599786321,-4.6546919532,-1.7387155551  
H,0,2.1701240675,-0.1121645749,-4.9598269645  
H,0,-1.4004210861,-0.4706463915,-4.2205033959  
H,0,-0.160693983,0.3883739988,-5.1722717154  
H,0,-0.4482713012,0.8327252689,-3.4804408775  
H,0,-3.6707835789,-0.4276157091,3.4147273269  
C,0,-4.662169,0.8555399547,2.0008626719  
H,0,-1.9892954638,-2.1601444303,2.6891033302  
H,0,-2.1338554366,-2.8893184217,1.0755260579  
H,0,-3.4178731216,-3.132193064,2.2712014281  
H,0,-5.590622288,1.8825685633,0.3495734411  
H,0,-5.6541529591,-0.3037879346,-2.0992001424  
H,0,-4.0128433166,0.2296976513,-2.4456406281  
H,0,-5.2369036679,1.4160858653,-1.9226813113  
C,0,4.3721030582,-1.5757777503,-4.3162946669  
C,0,-5.0862024402,1.874377947,3.0157704953  
H,0,4.9221570269,-0.8490800878,-3.6948340021  
H,0,4.3875680424,-1.1976664353,-5.3489707881  
H,0,4.932367754,-2.5214592923,-4.2873562165  
H,0,-6.1345441818,2.1774136865,2.8728107993  
H,0,-4.4675349809,2.7822737568,2.9168421893  
H,0,-4.9722882527,1.4994449573,4.0426767016  
C,0,-1.4990593608,1.7473181794,0.2118795206  
C,0,-1.5441258365,0.8642316931,-0.8321588348  
C,0,-2.2438834816,2.9481511317,0.2314726727  
C,0,-2.9113190583,3.9630300611,0.3097469172  
H,0,-3.4816216223,4.870330251,0.3669384392  
H,0,-2.0684261238,1.1020699243,-1.761955068

## 2,4-Hexadiin1

C,0,-2.4725361073,-0.8643826229,1.0323860908  
C,0,-2.7201199105,-2.2468168258,0.9204544419  
C,0,-3.5361587669,0.0268974097,1.2941481098  
C,0,-4.0318068192,-2.7151632678,1.0370693096  
C,0,-1.5929767378,-3.1861417859,0.677151041  
C,0,-4.8360233225,-0.4746430703,1.3975481827  
C,0,-3.245958925,1.4728740007,1.4902028982  
H,0,-4.2170555328,-3.7875751486,0.9347405814  
C,0,-5.0885055529,-1.8377629995,1.2654432189  
C,0,-1.0180736331,-3.2686868862,-0.6032665126  
C,0,-1.1011211689,-3.9827222985,1.7264348696  
H,0,-5.6539211585,0.2217034318,1.6005135449  
C,0,-2.7756749123,1.9255999835,2.7383917112  
C,0,-3.4031437424,2.3763210705,0.4244086578  
H,0,-6.109445418,-2.217426714,1.3484913459  
C,0,0.0505364598,-4.1422818456,-0.8098674908  
C,0,-1.5145996837,-2.4094233174,-1.724864913  
C,0,-0.0407074385,-4.8574446476,1.4727695401  
C,0,-1.6710027151,-3.8663352161,3.1118433627  
C,0,-2.3853029594,3.260872515,2.8673704237  
C,0,-2.7339863235,1.0019314187,3.9210046755  
C,0,-3.0230034783,3.7083059592,0.6021761333  
C,0,-3.9321689211,1.8998837568,-0.8944854268  
H,0,0.504185557,-4.1919740117,-1.8041225129  
C,0,0.5599482534,-4.940653987,0.2149218955  
H,0,-2.612978193,-2.3584968051,-1.7494976362  
H,0,-1.1610064491,-2.7799974762,-2.6958013966  
H,0,-1.1473868265,-1.376994427,-1.6130349879  
H,0,0.3411238825,-5.4754455777,2.2916083271  
H,0,-1.6071732491,-2.827630518,3.4753468174  
H,0,-1.1282729348,-4.5098277282,3.8183288916  
H,0,-2.7357390358,-4.142566357,3.1459959254  
H,0,-2.0036468371,3.6070388565,3.8326817665  
C,0,-2.481504794,4.1639463498,1.805678479  
H,0,-3.7451718066,0.6419502331,4.1684077388  
H,0,-2.3197083341,1.5070344239,4.8043646022  
H,0,-2.1214960407,0.1092601107,3.7256889781  
H,0,-3.1347876119,4.4056257459,-0.233263478  
H,0,-4.8987230727,1.3869434552,-0.7828428732  
H,0,-3.2440934088,1.1747930053,-1.357924824  
H,0,-4.062511423,2.7354772526,-1.5949590815  
C,0,1.7617282109,-5.8099796476,-0.013237355  
C,0,-1.993425185,5.5762099854,1.9481895704  
H,0,1.810026224,-6.1704327749,-1.0514785946  
H,0,1.767861235,-6.6837518726,0.6546827097  
H,0,2.6878474071,-5.2410872551,0.1804650593  
H,0,-2.5294977681,6.2601308614,1.2743719399  
H,0,-0.9209124197,5.643841692,1.6979282061

H,0,-2.1114033835,5.9444333127,2.977840394  
N,0,-1.1481139009,-0.4180740238,0.9282313894  
N,0,0.9755815017,0.2919828361,-0.5378254526  
P,0,0.0924941047,-0.2229837218,2.1903551017  
P,0,-0.367552135,0.9857968915,0.3672558731  
C,0,1.7326019378,1.1768491859,-1.3705234408  
C,0,1.2911097047,1.4958423033,-2.6687462174  
C,0,2.918126514,1.7708587606,-0.8644975685  
C,0,2.0802692948,2.3388877376,-3.4640165612  
C,0,0.0079020914,1.0186849988,-3.2609064657  
C,0,3.6783072707,2.5983909671,-1.6919609856  
C,0,3.3264746101,1.5612817639,0.5534541073  
H,0,1.7336197738,2.56738764,-4.4749656962  
C,0,3.272419731,2.8741766096,-2.9939182457  
C,0,-1.1073848167,1.8793869918,-3.256951689  
C,0,-0.0498894236,-0.2035797088,-3.9554618656  
H,0,4.5901589129,3.045841654,-1.2893526333  
C,0,2.6264216661,2.2179841577,1.5835186846  
C,0,4.3982358063,0.7016475894,0.8711859202  
H,0,3.8747528025,3.522979358,-3.6340498502  
C,0,-2.2734465259,1.4783942513,-3.9147133921  
C,0,-1.0569528873,3.2115091516,-2.5653918042  
C,0,-1.2359408497,-0.5635959109,-4.5984092009  
C,0,1.1382789624,-1.1147980673,-4.0096830899  
C,0,2.9100157918,1.8843732235,2.9115418516  
C,0,1.6501100617,3.3303650603,1.3135778704  
C,0,4.6583515954,0.4119364877,2.2112131688  
C,0,5.2965421371,0.1335261857,-0.191067078  
H,0,-3.1360004682,2.150701353,-3.9134759949  
C,0,-2.3654111416,0.2553868034,-4.5799176095  
H,0,-0.9758562365,3.0867115182,-1.4728962559  
H,0,-1.9638775422,3.7963792934,-2.7711478198  
H,0,-0.1858256605,3.8030571024,-2.8833893337  
H,0,-1.2743430357,-1.5157040882,-5.1363312955  
H,0,2.0551562302,-0.5688369301,-4.2794474423  
H,0,0.9840149707,-1.9217609516,-4.7398260559  
H,0,1.3262821746,-1.5702614613,-3.0255998282  
H,0,2.3396904869,2.3719493409,3.7079752192  
C,0,3.8997070688,0.9608204701,3.2470987208  
H,0,0.7677017445,3.2607950329,1.9659572136  
H,0,1.3027660063,3.3512237179,0.2728059605  
H,0,2.1370778948,4.3009690428,1.5103925125  
H,0,5.4739539048,-0.2767519782,2.4523014956  
H,0,6.1571267876,0.803133372,-0.3602252863  
H,0,4.7791257412,0.013383221,-1.1502068963  
H,0,5.6957265455,-0.8450608486,0.1120563325  
C,0,-3.6451332057,-0.1757059021,-5.2347739172  
C,0,4.1352555034,0.5602435321,4.6739265848  
H,0,-4.2628327055,-0.763385436,-4.5347536414  
H,0,-3.4567058179,-0.8098591248,-6.1134403629  
H,0,-4.2466593318,0.6872266493,-5.5555132883

H,0,5.1923720457,0.3185956445,4.8580674651  
H,0,3.5468457728,-0.3375787847,4.9295468751  
H,0,3.8361728715,1.3545866695,5.3729311927  
C,0,1.4161922675,-1.1228425661,1.3624600007  
C,0,1.6401302435,-0.7988123354,0.05104738  
C,0,2.5309990218,-1.5624133568,-0.756070704  
C,0,3.2679076803,-2.2646154834,-1.4198249205  
C,0,4.141484813,-3.0774567343,-2.2430465335  
H,0,4.1068395844,-4.1357728208,-1.9400358179  
H,0,3.8427406316,-3.0189344197,-3.3019464251  
H,0,5.1875631052,-2.7376436542,-2.1711232959  
C,0,2.2004601323,-2.1553994163,2.1042433988  
H,0,2.3108402204,-1.8606465366,3.1602616934  
H,0,1.6899515662,-3.1312346331,2.0891616762  
H,0,3.2045701699,-2.28243642,1.6749929165

#### 2,4-Hexadiin2

C,0,1.7033611978,-1.8470661125,-1.0721581997  
C,0,1.5820985839,-3.1514822757,-0.5564255704  
C,0,2.8167078679,-1.4979842425,-1.86701866  
C,0,2.5912389657,-4.0828927676,-0.8147945744  
C,0,0.3875436283,-3.5104039001,0.2536552849  
C,0,3.811899116,-2.4505321258,-2.0991693232  
C,0,2.8812340304,-0.1388516039,-2.4687596934  
H,0,2.4933638333,-5.091106051,-0.4040536312  
C,0,3.7059579627,-3.7364029488,-1.5745277797  
C,0,0.3523762625,-3.1784198442,1.618002485  
C,0,-0.7072359408,-4.1541667384,-0.3482910646  
H,0,4.6709707099,-2.1748879928,-2.7164375592  
C,0,2.1635402709,0.1344778363,-3.6495463856  
C,0,3.6163934442,0.8796555646,-1.8368709268  
H,0,4.4896478812,-4.472883639,-1.7664695804  
C,0,-0.7841686391,-3.5007900774,2.3637788079  
C,0,1.500603006,-2.4530311944,2.2512903749  
C,0,-1.8242666012,-4.4567723283,0.4314625118  
C,0,-0.7052358981,-4.458785463,-1.8181952949  
C,0,2.1251396542,1.4474504274,-4.1260134409  
C,0,1.492814854,-0.9712273665,-4.4121407821  
C,0,3.5702234597,2.1739995314,-2.359058778  
C,0,4.4035495165,0.5809089932,-0.5968282677  
H,0,-0.8053768691,-3.2489637819,3.4292201822  
C,0,-1.8892270321,-4.1293136119,1.7860553517  
H,0,2.4664630706,-2.9181202914,2.0037763274  
H,0,1.399999163,-2.4218255626,3.3444097837  
H,0,1.5477205926,-1.4121682195,1.892533822  
H,0,-2.681169423,-4.9430157539,-0.043552839  
H,0,-0.6936089477,-3.5257706974,-2.4070093112  
H,0,-1.6017708548,-5.0243343347,-2.1072578533  
H,0,0.183377356,-5.0325721162,-2.120385245  
H,0,1.5514132948,1.66198018,-5.0327045375

C,0,2.8052035973,2.4857364198,-3.484742714  
H,0,2.2446753118,-1.6478040386,-4.8498660854  
H,0,0.8718899596,-0.5732852117,-5.2264081354  
H,0,0.8515374592,-1.5896480239,-3.7681800599  
H,0,4.1332193935,2.9665902938,-1.8574333656  
H,0,5.1049227431,-0.2519650134,-0.7526253093  
H,0,3.7402382063,0.2815018793,0.2303098034  
H,0,4.975852437,1.4588677245,-0.2687801479  
C,0,-3.1390914058,-4.3871793124,2.5754600126  
C,0,2.6939734431,3.8995739742,-3.9764502904  
H,0,-2.942202576,-4.4087840203,3.6571790887  
H,0,-3.6085817205,-5.3416161185,2.2934362346  
H,0,-3.8808163795,-3.5913451924,2.388406513  
H,0,3.5855540137,4.4894543873,-3.7189848361  
H,0,1.8249679184,4.4029049654,-3.5193000833  
H,0,2.5572587239,3.940305891,-5.0669915688  
N,0,0.6628880523,-0.9412367789,-0.8233118554  
N,0,-0.6255967337,0.8062703604,0.7684646915  
P,0,-0.7961904851,-0.5905042317,-1.7788645199  
P,0,0.5238268443,0.7372900814,-0.5826533388  
C,0,-0.764140451,2.0786763157,1.4101992755  
C,0,0.1665877787,2.5089217166,2.374267583  
C,0,-1.8257379281,2.9387308791,1.0205925012  
C,0,-0.0270432204,3.7538483369,2.990904744  
C,0,1.3832302091,1.7421157753,2.7713473723  
C,0,-1.9851231224,4.1663193108,1.6638339862  
C,0,-2.7293446295,2.5439081019,-0.0964794116  
H,0,0.6922583881,4.0702610521,3.750335984  
C,0,-1.0992397741,4.5712401852,2.6581229633  
C,0,2.6308654304,2.1293108044,2.2387897975  
C,0,1.324938063,0.7596112626,3.7756434962  
H,0,-2.8086264963,4.8154011744,1.3569466373  
C,0,-2.2575740673,2.6008396233,-1.4222632153  
C,0,-4.0306524867,2.0669523297,0.1642521494  
H,0,-1.2335381421,5.5329711131,3.1585678764  
C,0,3.7885558698,1.4996765156,2.7009838913  
C,0,2.7301134564,3.2002079706,1.1905395409  
C,0,2.5098834413,0.1610450499,4.2115219417  
C,0,0.0202590976,0.3335201622,4.3782102536  
C,0,-3.0249232903,2.0184014239,-2.4352806783  
C,0,-0.9970510424,3.3320479831,-1.7959909148  
C,0,-4.7662064235,1.5066417025,-0.8797493018  
C,0,-4.6627530008,2.1860464836,1.5229842355  
H,0,4.753882811,1.8050257416,2.2875098281  
C,0,3.751817393,0.5048549284,3.6796322713  
H,0,2.2487191687,2.8783161385,0.252428608  
H,0,3.7797447845,3.435755323,0.9679755589  
H,0,2.228638332,4.1276287123,1.5037151426  
H,0,2.4570379159,-0.597948244,4.9979155881  
H,0,-0.6896415499,1.1692397837,4.4557308391  
H,0,0.1677265956,-0.0929721601,5.3804177024

H,0,-0.4548279535,-0.4401388816,3.7556976957  
H,0,-2.6356777833,2.0237353649,-3.4578552205  
C,0,-4.2610796176,1.4255644239,-2.1782811816  
H,0,-0.4379636329,2.7992018389,-2.5784695911  
H,0,-0.3237121205,3.4874458834,-0.9431800301  
H,0,-1.2544266218,4.3310732518,-2.1882978797  
H,0,-5.7564697457,1.0942513531,-0.6650074021  
H,0,-5.2399550648,3.1237493118,1.5914858457  
H,0,-3.9244938643,2.20968695,2.3337319397  
H,0,-5.363502036,1.3600237335,1.7111484041  
C,0,5.0058142093,-0.1890574926,4.1244266319  
C,0,-5.0092827272,0.6897675987,-3.248294321  
H,0,5.2123338698,-1.0658988869,3.4877138905  
H,0,4.9233100452,-0.5500114018,5.159885726  
H,0,5.8807293992,0.474154704,4.0592997922  
H,0,-6.0974058059,0.8145799389,-3.1443055236  
H,0,-4.7927543719,-0.3897526501,-3.1750331895  
H,0,-4.7164698709,1.0219629176,-4.2546031061  
C,0,-1.9881180946,-0.743477271,-0.4258092729  
C,0,-1.7169137875,-0.0569960808,0.7343678804  
C,0,-3.1447495747,-1.5365772453,-0.6070998465  
C,0,-4.1354576338,-2.2139321446,-0.8162582845  
C,0,-5.2987655876,-3.053824672,-1.0392711893  
H,0,-5.3872985513,-3.8266308952,-0.2574671464  
H,0,-6.234764873,-2.4712277648,-1.0373838108  
H,0,-5.2337068921,-3.5730953211,-2.0089169205  
C,0,-2.5207078479,-0.2619651272,1.9736947205  
H,0,-3.5682006633,-0.4606405132,1.7164536678  
H,0,-2.1350212025,-1.1532475595,2.4942736205  
H,0,-2.4611640283,0.5922496145,2.6575221882

#### Diphenyl-1,3-butadiin1

C,0,-2.4179289086,-2.0628305387,-0.3349066856  
C,0,-1.8405404601,-3.1735728903,-0.9803812859  
C,0,-3.8213632159,-1.9638709463,-0.205621184  
C,0,-2.6795032184,-4.1393102255,-1.5445734468  
C,0,-0.361496551,-3.3279469695,-1.0206773494  
C,0,-4.62859801,-2.9452766013,-0.7849031149  
C,0,-4.3954711521,-0.8426749981,0.5865348142  
H,0,-2.2264372151,-4.9915099693,-2.0575473644  
C,0,-4.0644848928,-4.0235166602,-1.4624094423  
C,0,0.4109851876,-2.5512486263,-1.9003082298  
C,0,0.2610304759,-4.252414967,-0.1607633345  
H,0,-5.7136805668,-2.8658651229,-0.6797294269  
C,0,-4.3420891002,-0.8828800273,1.9938715963  
C,0,-4.9375946858,0.2800598478,-0.0656514534  
H,0,-4.7062257012,-4.7844884982,-1.9124413711  
C,0,1.799407447,-2.7061124976,-1.8990560827  
C,0,-0.2355449002,-1.5486113281,-2.8057062693  
C,0,1.649874437,-4.3814507914,-0.1964720578

C,0,-0.5464022092,-5.0702252307,0.8080265456  
C,0,-4.7404662744,0.2453721361,2.7167043045  
C,0,-3.9340327073,-2.131363087,2.7226197853  
C,0,-5.3493295121,1.3753123816,0.6955836641  
C,0,-5.0382629625,0.3077119621,-1.5608876414  
H,0,2.3982940697,-2.0918577696,-2.5778340162  
C,0,2.4392222915,-3.610133327,-1.0507674193  
H,0,-1.1435849317,-1.9478174214,-3.2811868437  
H,0,0.455098522,-1.2220318708,-3.5943381044  
H,0,-0.5398202245,-0.6538442019,-2.2405991198  
H,0,2.1330843695,-5.0854482194,0.4871076234  
H,0,-1.2323765026,-4.4363898917,1.3929911123  
H,0,0.1080325595,-5.6084646658,1.5080251921  
H,0,-1.177412853,-5.8128979549,0.2951649983  
H,0,-4.6749662525,0.2207805853,3.8087362872  
C,0,-5.2267350489,1.3925764611,2.0867298091  
H,0,-4.7955762735,-2.8150905921,2.8083138452  
H,0,-3.5788046999,-1.9044779648,3.7371238004  
H,0,-3.1432315034,-2.684029273,2.1988173989  
H,0,-5.7558169253,2.251919253,0.1826868442  
H,0,-5.6491798904,-0.5247082561,-1.9409380992  
H,0,-4.0462779054,0.2083952193,-2.0280257599  
H,0,-5.4857532506,1.2479951678,-1.9093952557  
C,0,3.9349886079,-3.7237089237,-1.0157710367  
C,0,-5.5809816819,2.6173292939,2.8786732436  
H,0,4.3946194372,-3.2792858464,-1.9102093632  
H,0,4.260451214,-4.7727674325,-0.9472763165  
H,0,4.3351611084,-3.2021312009,-0.1299993947  
H,0,-6.3611409216,3.2106328458,2.3800986433  
H,0,-4.6997565629,3.2703514104,2.9989056496  
H,0,-5.9357957722,2.359872268,3.887294894  
C,0,0.8856857118,-0.7764026753,1.3048984926  
C,0,1.0742673663,0.201249781,0.3453776653  
N,0,-1.5670203432,-1.1009652842,0.2277432544  
N,0,0.0114265971,1.0416827744,-0.0266296333  
P,0,-0.8371931319,-0.9998034377,1.8438216863  
P,0,-1.6099433718,0.5777765011,0.4869366152  
C,0,0.2672193031,2.4349324772,-0.2340027775  
C,0,-0.1434724352,3.082000354,-1.4158482707  
C,0,0.897785103,3.181730026,0.7961263515  
C,0,0.1568321999,4.4422454279,-1.5786686952  
C,0,-0.9140546824,2.4299986269,-2.51478115  
C,0,1.1828002924,4.5316134879,0.5894534718  
C,0,1.2183005704,2.5354681571,2.0986984454  
H,0,-0.1540329974,4.9301715551,-2.5059035305  
C,0,0.8282518592,5.1622805772,-0.5991610799  
C,0,-2.3099380638,2.6122728406,-2.5746120713  
C,0,-0.2440062516,1.7887018512,-3.5733626686  
H,0,1.671756509,5.0917295347,1.3898508622  
C,0,0.1799636575,2.2069928112,2.9904337948  
C,0,2.5523930372,2.2126092346,2.4253142494



H,0,1.0557235453,6.2197952822,-0.752155169  
C,0,-3.0113801247,2.1001084346,-3.6696273275  
C,0,-3.0457571656,3.3550508278,-1.4964418408  
C,0,-0.9872392189,1.2789050558,-4.6395226548  
C,0,1.2494423456,1.6752820613,-3.5776085421  
C,0,0.4722252095,1.4049173474,4.0988549702  
C,0,-1.2125069988,2.7559040295,2.8398434913  
C,0,2.8002385077,1.442085824,3.5611818107  
C,0,3.7094065352,2.7015773995,1.6006229603  
H,0,-4.0928936199,2.2526003874,-3.7190581927  
C,0,-2.3748292638,1.4110883091,-4.7023217212  
H,0,-3.037954654,2.7898587611,-0.5501256262  
H,0,-4.0943062584,3.5209288622,-1.7793298266  
H,0,-2.5860322065,4.3324151493,-1.2882428921  
H,0,-0.4596248091,0.7724258407,-5.4531860536  
H,0,1.7207486363,2.6642580982,-3.4664707693  
H,0,1.6130343979,1.2250570935,-4.5114709359  
H,0,1.6058363035,1.0614650328,-2.7388094682  
H,0,-0.3454000902,1.1073433422,4.7623878887  
C,0,1.76927679,0.9759515059,4.3790630856  
H,0,-1.9746788949,2.0056568233,3.0949565997  
H,0,-1.4202877603,3.1232507225,1.8264739561  
H,0,-1.343959881,3.6120360174,3.5238164306  
H,0,3.8313703144,1.1606439763,3.7927829041  
H,0,4.0601271638,3.6792803367,1.972464717  
H,0,3.443751931,2.8310705821,0.5445718115  
H,0,4.5609652991,2.0081035742,1.6574116795  
C,0,-3.1600052946,0.8163899344,-5.8344956712  
C,0,2.0544210908,0.012210841,5.491138522  
H,0,-3.4555978633,-0.2205269863,-5.6012124944  
H,0,-2.5720167847,0.7861254943,-6.7633890387  
H,0,-4.0826260705,1.3826043646,-6.0286748075  
H,0,2.9814412827,0.2697647419,6.0248711651  
H,0,2.1857947587,-1.0037945623,5.0807703097  
H,0,1.2326414205,-0.0244028787,6.2204235089  
C,0,1.9219063715,-1.6008464169,1.9385421332  
C,0,1.5478397447,-2.7587215097,2.6492339241  
C,0,3.2914229941,-1.2687838808,1.9415036527  
C,0,2.4802198573,-3.543077551,3.3197368271  
H,0,0.4984654737,-3.0598458161,2.6606755836  
C,0,4.226692563,-2.0602948393,2.599167382  
H,0,3.6258439348,-0.3670990808,1.4353888663  
C,0,3.831720564,-3.2045627429,3.2929765674  
H,0,2.1460473629,-4.4346972839,3.8560202161  
H,0,5.2802319021,-1.7691658345,2.5790279277  
H,0,4.5695472667,-3.8223102836,3.8102494598  
C,0,2.2928231979,0.4014495291,-0.3488280536  
C,0,3.3303779269,0.5742118713,-0.9636653866  
C,0,4.5598491695,0.7838335453,-1.6419357875  
C,0,5.5713565656,-0.1938445445,-1.5969313103  
C,0,4.7891473376,1.9759197454,-2.3540955777

C,0,6.7788590373,0.019614551,-2.2519407183  
H,0,5.3901593826,-1.1183118196,-1.0462991172  
C,0,5.9997614837,2.1778627312,-3.0067020979  
H,0,4.0064868265,2.7363184269,-2.3827582578  
C,0,6.9968874987,1.2027396661,-2.958938678  
H,0,7.5575552173,-0.7456812906,-2.212428464  
H,0,6.1686031782,3.1061931935,-3.5573661556  
H,0,7.9464843578,1.3655473432,-3.4739183081

#### Diphenyl-1,3-butadiin2

C,0,-1.252716776,1.0084013862,2.538573099  
C,0,-0.4318476939,0.4546233736,3.5376997454  
C,0,-2.4032883697,1.7470852389,2.8924354542  
C,0,-0.7859261548,0.626631345,4.8796203383  
C,0,0.7975828598,-0.3023569293,3.1807358447  
C,0,-2.7297120329,1.8964262854,4.2420960446  
C,0,-3.2339734377,2.3552178708,1.8193005187  
H,0,-0.145695581,0.1879182809,5.6491404041  
C,0,-1.9284641013,1.3382104126,5.234732153  
C,0,0.7042096521,-1.6651523331,2.8431212179  
C,0,2.0472943322,0.337097617,3.2098645377  
H,0,-3.6189780485,2.4734069745,4.5087360344  
C,0,-2.8337044131,3.557068334,1.2050784989  
C,0,-4.3990157325,1.6939698609,1.386746936  
H,0,-2.1913618319,1.4649097368,6.287495777  
C,0,1.8758210952,-2.3746916429,2.5809896884  
C,0,-0.6347274076,-2.3337061088,2.7302268854  
C,0,3.1951173612,-0.407526178,2.9251129204  
C,0,2.1534595568,1.8074022076,3.4958006458  
C,0,-3.5550838663,4.0214176839,0.1010463406  
C,0,-1.70096345,4.3749119774,1.7569275825  
C,0,-5.1041542785,2.2048954267,0.2958578456  
C,0,-4.8525411091,0.4417222153,2.0777735804  
H,0,1.8048918974,-3.4366007968,2.3305419408  
C,0,3.1324531754,-1.7639103376,2.612283923  
H,0,-1.2614045811,-2.1528005746,3.6170543363  
H,0,-0.5299559709,-3.4187636297,2.5925238494  
H,0,-1.1943863597,-1.9443770663,1.8632962787  
H,0,4.1660533369,0.0958203508,2.933625107  
H,0,1.5973617916,2.3925576742,2.7439044828  
H,0,3.2004685616,2.1395899852,3.4683377523  
H,0,1.7282915992,2.070000304,4.4766315768  
H,0,-3.2296964359,4.9435812417,-0.390316518  
C,0,-4.6787611351,3.3494048757,-0.3833615085  
H,0,-2.0783508881,5.0613697314,2.5339322744  
H,0,-1.2251206591,4.981640213,0.9741602627  
H,0,-0.9271245296,3.7557133412,2.2289211274  
H,0,-6.0009295499,1.6806150085,-0.0473894175  
H,0,-5.012915207,0.6112137193,3.1527471884  
H,0,-4.0921714668,-0.3516048733,1.9995175275

H,0,-5.7896193528,0.0661008181,1.6459336622  
C,0,4.3700673246,-2.5398588941,2.2682866656  
C,0,-5.3916587017,3.8278610444,-1.6143664313  
H,0,4.3983289064,-3.5095514805,2.7890681077  
H,0,5.2803788207,-1.9819035849,2.5302487783  
H,0,4.4010360224,-2.7517808772,1.1871873992  
H,0,-6.4480276745,3.5227479359,-1.6156542656  
H,0,-4.9265456312,3.4044627075,-2.5209024091  
H,0,-5.3492393146,4.9228775571,-1.7080385889  
C,0,1.2776498605,0.7106168946,-0.3870425288  
C,0,0.7745185379,-0.4769617459,-0.883148233  
N,0,-0.856737183,0.8627914416,1.1992459533  
N,0,-0.6071307052,-0.5932750566,-1.0672699987  
P,0,0.0883609254,1.9655834045,0.1696104637  
P,0,-1.6209704945,0.6559206065,-0.3043816354  
C,0,1.634982067,-1.6617907735,-1.0623192212  
C,0,1.2023306401,-2.8993219095,-0.5731048297  
C,0,2.9308526436,-1.562567461,-1.5926615281  
C,0,2.0397036877,-4.0110343671,-0.6195510746  
H,0,0.2127615814,-2.968083867,-0.1195714782  
C,0,3.75813425,-2.6780547404,-1.6534401803  
H,0,3.2777051976,-0.6037013341,-1.9742945521  
C,0,3.3167674498,-3.9089722496,-1.1658765644  
H,0,1.6930311666,-4.9649673036,-0.2154475839  
H,0,4.7574779847,-2.5850410175,-2.0858828872  
H,0,3.9700844622,-4.7838690181,-1.2056838311  
C,0,2.6314261052,0.9997021305,-0.1553920598  
C,0,3.7829417521,1.3266769523,0.089599674  
C,0,5.1379705034,1.5984895429,0.4086070133  
C,0,5.5639705262,2.8956529255,0.7527915017  
C,0,6.0836184595,0.5533266054,0.4046235826  
C,0,6.8944966109,3.1361564403,1.0776404309  
H,0,4.8340839039,3.7077917213,0.763332088  
C,0,7.4105164205,0.8044620081,0.7338657989  
H,0,5.7526783629,-0.4551736535,0.1481600746  
C,0,7.8231102521,2.0947198754,1.0703719848  
H,0,7.2107039134,4.1480083518,1.3426903937  
H,0,8.1319984858,-0.0163434404,0.7299732755  
H,0,8.8667299766,2.2878183971,1.3289798312  
C,0,-1.1552462729,-1.0978557738,-2.3021382497  
C,0,-2.1254955624,-2.1265721879,-2.3127803105  
C,0,-0.7996535675,-0.4725409312,-3.5259526806  
C,0,-2.6877124798,-2.5227821872,-3.5331131351  
C,0,-2.582456444,-2.839610079,-1.0865875221  
C,0,-1.3783568173,-0.9052032292,-4.7207152859  
C,0,0.1806033735,0.6476493368,-3.5512584418  
H,0,-3.4310693597,-3.3238156313,-3.5219160316  
C,0,-2.3200010602,-1.9274197415,-4.7322477157  
C,0,-3.6856908637,-2.3617329113,-0.3527818769  
C,0,-2.0027619515,-4.0776528399,-0.7472875562  
H,0,-1.0904271045,-0.4064649727,-5.6491875293

C,0,-0.2093150536,1.9534404471,-3.2099779612  
C,0,1.5187399415,0.3799781064,-3.9091780239  
H,0,-2.7727731422,-2.2524069094,-5.6717509001  
C,0,-4.0492910099,-3.0251190606,0.8229513989  
C,0,-4.5249909925,-1.2280010002,-0.8690448996  
C,0,-2.3896948771,-4.7030934051,0.4406451348  
C,0,-1.0865014457,-4.7891268192,-1.7020199139  
C,0,0.7839667774,2.9264742595,-3.0433899822  
C,0,-1.6541324293,2.3543851381,-3.0948504531  
C,0,2.4721418615,1.3831641299,-3.7462495094  
C,0,1.9030422943,-0.9486446177,-4.4957766551  
H,0,-4.898068964,-2.6470519207,1.3999684228  
C,0,-3.3812958445,-4.1686446891,1.2652461858  
H,0,-4.0446816126,-0.2482145395,-0.7287148543  
H,0,-5.4964077876,-1.20325338,-0.358184317  
H,0,-4.7073971539,-1.3368960906,-1.9482370314  
H,0,-1.9147850743,-5.6494274127,0.7174293597  
H,0,-1.6859700175,-5.3121715563,-2.4663175246  
H,0,-0.480036452,-5.5471618429,-1.1880071749  
H,0,-0.4127485275,-4.1081500303,-2.2361917151  
H,0,0.4874236642,3.9326285847,-2.7319073398  
C,0,2.1335130233,2.6495102343,-3.2586581384  
H,0,-1.8227587006,3.0331135431,-2.2465273158  
H,0,-2.3247718987,1.4933214655,-2.9770567607  
H,0,-1.9623159254,2.8825145828,-4.0135129994  
H,0,3.5169077344,1.1659363826,-3.9887688832  
H,0,1.5226133363,-1.0382507725,-5.5266894479  
H,0,1.4848683908,-1.7909304606,-3.9276502937  
H,0,2.9941357926,-1.068067479,-4.5309384233  
C,0,-3.7270896284,-4.8085241058,2.5770229105  
C,0,3.1973643049,3.6622525749,-2.960487182  
H,0,-3.1038603591,-4.3909699306,3.385918016  
H,0,-3.5531115295,-5.8943010805,2.5580974182  
H,0,-4.777462436,-4.6315378091,2.8503434185  
H,0,3.9863584322,3.6617829292,-3.7273406994  
H,0,3.6795220701,3.4245609328,-1.9969296897  
H,0,2.7842934538,4.6783729612,-2.8882479147

## Arin

C,0,-1.1673254343,2.3404192693,0.4205083793  
C,0,-2.5463645308,2.3588038264,0.7161702563  
C,0,-0.5361708624,3.5057124969,-0.0667719402  
C,0,-3.2713774789,3.5368976279,0.5207667635  
C,0,-3.2375551423,1.1379954479,1.2112374113  
C,0,-1.2969436208,4.6634801919,-0.254308036  
C,0,0.9174669747,3.5117461558,-0.3833259675  
H,0,-4.3415348478,3.5334202241,0.7436038011  
C,0,-2.6568859929,4.6885633693,0.0375255655  
C,0,-3.5130931462,0.0804826041,0.322374309  
C,0,-3.644164175,1.0561149226,2.5553611459

H,0,-0.7953316985,5.5633641125,-0.6196145556  
C,0,1.8819034584,3.5168554721,0.6392772235  
C,0,1.3233588579,3.497174838,-1.7351170483  
H,0,-3.2357411424,5.6029122339,-0.1102836416  
C,0,-4.2219135193,-1.0260404093,0.7908363272  
C,0,-3.0440836167,0.1227507666,-1.100047916  
C,0,-4.3489135567,-0.0729111593,2.9827564182  
C,0,-3.3042978485,2.1473654166,3.5314198552  
C,0,3.237408281,3.4673726213,0.292682056  
C,0,1.5021803692,3.5533362105,2.0921248277  
C,0,2.6832173886,3.4454177497,-2.0351385406  
C,0,0.3029018676,3.5266425265,-2.8369030517  
H,0,-4.4306840299,-1.8466126368,0.0981815219  
C,0,-4.657616026,-1.1197663792,2.1136873902  
H,0,-3.2330956726,1.1025185206,-1.5637280992  
H,0,-3.5333952352,-0.6522143053,-1.7041633394  
H,0,-1.9582723884,-0.0541411762,-1.1579133157  
H,0,-4.6599312795,-0.1360866591,4.0302466766  
H,0,-2.2224663461,2.3565067079,3.5290273883  
H,0,-3.5967349241,1.8670988709,4.5531576968  
H,0,-3.8063443256,3.0947671803,3.2823558946  
H,0,3.9844052645,3.4641621315,1.0925514833  
C,0,3.6599977232,3.4221439902,-1.0333852844  
H,0,0.440173045,3.7918146155,2.2354388382  
H,0,2.0997905974,4.3042416297,2.6311431609  
H,0,1.6959973603,2.5811660519,2.5759496662  
H,0,2.9923529599,3.4191822015,-3.0847227292  
H,0,-0.2455066549,4.4807535344,-2.8519971829  
H,0,-0.4532053497,2.7375388021,-2.7049684469  
H,0,0.7778065053,3.3969271496,-3.8189652634  
C,0,-5.4404534602,-2.3123164245,2.5791297511  
C,0,5.1167057894,3.3692458332,-1.3914635846  
H,0,-6.5078522863,-2.2126499833,2.3194542627  
H,0,-5.3786793568,-2.436118008,3.6702391303  
H,0,-5.0750115546,-3.2367025412,2.1074755597  
H,0,5.4279920756,4.2798831635,-1.9284116419  
H,0,5.3342688213,2.5151859608,-2.0518687913  
H,0,5.749215123,3.2756948511,-0.4974216162  
N,0,-0.4568450104,1.1653849123,0.6718432203  
N,0,0.478649758,-1.1790876272,-0.2278349807  
P,0,-0.0352243579,0.3918827983,2.2042901173  
P,0,1.0291498892,0.4286564243,0.2561978527  
C,0,1.3713310154,-1.9910475355,-1.002056695  
C,0,1.034438657,-2.3953376297,-2.309647357  
C,0,2.5907518215,-2.4069671743,-0.420277147  
C,0,1.8904738998,-3.2753349856,-2.9836394424  
C,0,-0.1429176787,-1.8304815749,-3.0269613737  
C,0,3.422336229,-3.2787758614,-1.1279608793  
C,0,3.0085854987,-1.8496750415,0.8990480395  
H,0,1.6258924322,-3.5861557674,-3.9972829807  
C,0,3.0660547778,-3.7295354906,-2.3952247303

C,0,-0.0380661789,-0.5062244223,-3.5082436558  
C,0,-1.2891721204,-2.589377595,-3.3197847763  
H,0,4.3591492383,-3.6017140305,-0.6674738362  
C,0,3.8516597404,-0.7152586265,0.913100064  
C,0,2.538358753,-2.3919570102,2.1077036611  
H,0,3.7185382009,-4.4188332269,-2.9362777023  
C,0,-1.1194839353,0.0614723354,-4.1795347966  
C,0,1.2368450262,0.2699163763,-3.3531753034  
C,0,-2.3529395409,-1.9763711822,-3.9930253862  
C,0,-1.4174451628,-4.0493726193,-2.9790508034  
C,0,4.1193027971,-0.0882558954,2.130076912  
C,0,4.4272111268,-0.1578028789,-0.3564521119  
C,0,2.8219068532,-1.7211113478,3.302152851  
C,0,1.7757221484,-3.683597761,2.1611676907  
H,0,-1.0310171176,1.0867649683,-4.5506667224  
C,0,-2.301683077,-0.6485277968,-4.4087450402  
H,0,1.3374362059,0.7092243599,-2.3467308457  
H,0,1.2791508804,1.0975090903,-4.0726217899  
H,0,2.1189707308,-0.3681025611,-3.5066882194  
H,0,-3.2503130648,-2.567087489,-4.2028493115  
H,0,-0.5114153086,-4.4561421904,-2.5120221591  
H,0,-1.6104942423,-4.636959135,-3.8903547769  
H,0,-2.2648088025,-4.2256011511,-2.2980313585  
H,0,4.7517432024,0.8043238319,2.1329529036  
C,0,3.5831699254,-0.5536058044,3.3334785399  
H,0,5.1607987529,0.6291504282,-0.1371565915  
H,0,3.6398470644,0.2906567287,-0.9844985975  
H,0,4.9181383818,-0.9351944779,-0.9594822203  
H,0,2.4296565317,-2.1306287368,4.2382320897  
H,0,2.3338710864,-4.4240131706,2.7567731387  
H,0,1.6096507239,-4.1079285845,1.1637900987  
H,0,0.7936427409,-3.5504371137,2.6387082624  
C,0,-3.4793794155,0.0086466666,-5.0653419205  
C,0,3.7970674425,0.1973335712,4.6145978401  
H,0,-4.0843032289,0.5503846285,-4.3184639512  
H,0,-4.1375459031,-0.7266817971,-5.5501243717  
H,0,-3.1645313049,0.7422174842,-5.8220923308  
H,0,3.7956633646,-0.474545429,5.4851594057  
H,0,2.9886404389,0.932471177,4.7675875085  
H,0,4.7471407027,0.75113371,4.6070667585  
C,0,-0.7355276463,-1.2430262585,1.8602478131  
C,0,-1.4971888379,-1.9456074739,2.7966755911  
C,0,-2.0060504615,-3.2063086493,2.4976450361  
H,0,-2.6069008722,-3.7465996123,3.2318188731  
C,0,-1.7607940049,-3.7567892934,1.238841804  
C,0,-0.433409254,-1.8339612752,0.6103259399  
C,0,-0.9841739347,-3.0832436784,0.3022492433  
H,0,-1.7052086018,-1.4859160311,3.7660399682  
H,0,-2.1634076717,-4.7408550554,0.9850007346  
H,0,-0.7622622624,-3.5436060388,-0.6562605606

**Bromalkan-Addukte**

Bromethan

P,0,-1.3616562364,0.0957278207,-0.2350027876  
P,0,1.1857041351,0.0107879646,0.5283544188  
N,0,0.0145624647,1.184940528,0.0544319326  
N,0,-0.0318346394,-1.0878297569,-0.0123829206  
C,0,0.0602013189,2.5547261177,0.3552748229  
C,0,-0.0420258554,-2.4881644495,0.0383802375  
C,0,-1.0842787153,3.2912960138,0.7378855472  
C,0,1.3023128387,3.229638947,0.2424194546  
C,0,1.1415988947,-3.2190410104,0.3249630785  
C,0,-1.2288720106,-3.2201350084,-0.2161437506  
C,0,-0.9383879102,4.6344437529,1.1053209875  
C,0,-2.4782860711,2.7565144653,0.7099081294  
C,0,1.4053018758,4.5641904215,0.6380942634  
C,0,2.4713079042,2.5998904238,-0.4360751314  
C,0,1.1107629123,-4.6160276855,0.3393871462  
C,0,2.4573006766,-2.5955189087,0.6480887533  
C,0,-1.2119114995,-4.6181298832,-0.1791747191  
C,0,-2.5378597991,-2.5963844635,-0.5554814977  
H,0,-1.8359283203,5.1808250067,1.4066917479  
C,0,0.296763565,5.2692188764,1.0939793523  
C,0,-3.2631316718,2.9535766363,-0.4412486385  
C,0,-3.0568346706,2.1946834575,1.8684023534  
H,0,2.3775612134,5.0552696167,0.5492313953  
C,0,3.609708718,2.1655528478,0.261207223  
C,0,2.4369263896,2.5235977997,-1.8488350787  
H,0,2.0446522328,-5.1408700963,0.5552813192  
C,0,-0.0533659135,-5.3308035608,0.0925767125  
C,0,3.313203419,-2.1286003189,-0.368952631  
C,0,2.8991999877,-2.606674527,1.9911913962  
H,0,-2.150686067,-5.1429878876,-0.3736985194  
C,0,-3.3736251758,-2.0831556199,0.4596408865  
C,0,-3.0008508921,-2.6622388376,-1.8857871774  
H,0,0.3882121308,6.3129470528,1.4015402084  
C,0,-4.6028706267,2.545712977,-0.4316419146  
C,0,-2.719222898,3.6698061406,-1.6456040876  
C,0,-4.3969541734,1.8176922175,1.8392201437  
C,0,-2.2490978865,2.0296540824,3.116071578  
C,0,4.6860331391,1.6393844267,-0.4649222455  
C,0,3.6983236434,2.1969553372,1.7590967862  
C,0,3.5151829268,1.9610317495,-2.5261288222  
C,0,1.2756695843,3.0849826659,-2.61696432  
H,0,-0.0569025997,-6.4222896631,0.1132893406  
C,0,4.577951585,-1.6487609147,-0.0229072618  
C,0,2.8832967656,-2.081034886,-1.8040534345  
C,0,4.1548511572,-2.0817612964,2.2931042346  
C,0,2.0588796616,-3.2031823413,3.0823034197  
C,0,-4.6341120404,-1.5938406905,0.1115403981  
C,0,-2.9205618856,-2.0739032589,1.8884581609  
C,0,-4.2667509121,-2.1586572786,-2.1883597307  
C,0,-2.1702833538,-3.2823644821,-2.9733370467

H,0,-5.2091845594,2.7039649443,-1.3289259359  
C,0,-5.1928792792,1.9922292479,0.7025996504  
H,0,-2.8301939465,4.7606896169,-1.5267355585  
H,0,-3.2583375703,3.3805377421,-2.5591763195  
H,0,-1.6463777767,3.4890270644,-1.7942771184  
H,0,-4.841685436,1.3922277857,2.7441220559  
H,0,-1.3847199535,1.3702651705,2.9472474625  
H,0,-2.8528257185,1.6032080479,3.9289050594  
H,0,-1.838472737,2.9934102547,3.4550584266  
H,0,5.5718927781,1.306970943,0.0824190979  
C,0,4.6546636682,1.5090706439,-1.8490386967  
H,0,3.7152769936,1.1688600396,2.1572362112  
H,0,2.8439741441,2.7088046808,2.2191201027  
H,0,4.6233380802,2.6959878236,2.0877247286  
H,0,3.4796114915,1.8988265703,-3.618202647  
H,0,1.1475964124,4.1584998118,-2.407093519  
H,0,0.3318083849,2.5974012765,-2.3360368465  
H,0,1.4174169476,2.9566443982,-3.698828008  
H,0,5.2406997686,-1.2968510704,-0.8168843031  
C,0,5.0103269336,-1.5954504061,1.3011991019  
H,0,2.5335728638,-1.0661286836,-2.0597829159  
H,0,2.0653169805,-2.7829801101,-2.0157934754  
H,0,3.7239844985,-2.3095064438,-2.4754861925  
H,0,4.4797969244,-2.0649329117,3.3375764094  
H,0,0.9984760562,-2.9417503852,2.9690650976  
H,0,2.3941269663,-2.8527687971,4.0679139512  
H,0,2.1263315432,-4.3035980263,3.0704846439  
H,0,-5.2716650596,-1.1850463553,0.8991852476  
C,0,-5.0954026748,-1.6116762426,-1.2062913848  
H,0,-3.7140152644,-1.7046778393,2.5521209816  
H,0,-2.0410009406,-1.4233825795,2.0266973489  
H,0,-2.6247977815,-3.0821651884,2.2168195605  
H,0,-4.6187136368,-2.1987695838,-3.2237781501  
H,0,-2.3064583162,-4.3760433671,-2.9967702553  
H,0,-1.0968015652,-3.1080826935,-2.8222375512  
H,0,-2.4565926802,-2.8920054339,-3.9604290611  
C,0,-6.654432113,1.6543190926,0.7432842281  
C,0,5.7987356161,0.8993149144,-2.6049652935  
C,0,6.3500793238,-1.0228657073,1.6607108223  
C,0,-6.4345094972,-1.045017401,-1.5738687258  
H,0,-7.119489763,1.7291945363,-0.2490006771  
H,0,-7.1918776208,2.3420373653,1.416361307  
H,0,-6.8265765353,0.6362551487,1.1246782985  
H,0,6.1277831932,1.548214393,-3.431525747  
H,0,5.5067305155,-0.0655757371,-3.0520471409  
H,0,6.6637360999,0.7176528767,-1.9515008218  
H,0,6.8821374939,-1.6618271655,2.3817964659  
H,0,6.2388388238,-0.0315319332,2.1312635282  
H,0,6.9894312731,-0.9016621031,0.7746634047  
H,0,-6.342377054,0.0207894414,-1.8403604168  
H,0,-7.1476296055,-1.1125429401,-0.7405444283



H,0,-6.8665013791,-1.5645908441,-2.4414469112  
Br,0,0.8399317556,0.0177950095,2.9000967231  
C,0,-1.438304321,0.2674238213,-2.0809136575  
H,0,-2.3312900567,-0.2844446145,-2.4087842867  
H,0,-1.6761468105,1.3348629126,-2.2203955892  
C,0,-0.1978932608,-0.1299041737,-2.8556911309  
H,0,0.7014873989,0.3625039616,-2.4572823329  
H,0,-0.0262133496,-1.2131580398,-2.8056572756  
H,0,-0.2894180622,0.1505414008,-3.916638314

Bromethan(*cis*)

P,0,1.2627171041,-0.0095092606,0.2237308957  
P,0,-1.3806433872,0.071833462,-0.2221685976  
N,0,-0.1495858495,-1.1044289368,0.0859564075  
N,0,-0.0241690791,1.1506452178,-0.1272907643  
C,0,-0.199316136,-2.4885721318,0.3091431292  
C,0,-0.0385587791,2.5417823988,0.0467433187  
C,0,0.7900774924,-3.110610491,1.1189218327  
C,0,-1.2186255795,-3.3017432051,-0.2448315221  
C,0,-1.1565398864,3.1877865065,0.6318445595  
C,0,1.0707824597,3.3296353469,-0.3310979909  
C,0,0.8094044818,-4.5010707821,1.2527156631  
C,0,1.7617636298,-2.3120424453,1.9133490719  
C,0,-1.1637179899,-4.6888179306,-0.075893511  
C,0,-2.4117061083,-2.7518685483,-0.943326512  
C,0,-1.1799281175,4.5801830257,0.7375693842  
C,0,-2.2667272911,2.4227598616,1.2593707955  
C,0,1.0181216402,4.7198833047,-0.1870688862  
C,0,2.3246275795,2.7559916953,-0.8905397534  
H,0,1.5858358095,-4.9457039215,1.8801222466  
C,0,-0.1475775947,-5.3034472807,0.644590285  
C,0,3.1343371835,-2.3014523059,1.6035601217  
C,0,1.2823507602,-1.567900259,3.0164653402  
H,0,-1.9644806105,-5.2864237798,-0.5188179378  
C,0,-3.4762472085,-2.2337339633,-0.177484219  
C,0,-2.535929201,-2.8627069733,-2.3420895486  
H,0,-2.0561043832,5.0472981418,1.1942824308  
C,0,-0.1053187846,5.3578705653,0.3229698158  
C,0,-3.543382312,2.3677450437,0.6689587632  
C,0,-2.0245315032,1.7903654759,2.4975589595  
H,0,1.8909126909,5.3005374792,-0.4970563167  
C,0,3.4166137583,2.4826069127,-0.0431388832  
C,0,2.4529697917,2.6206464925,-2.2870562501  
H,0,-0.1226517336,-6.3888268783,0.7603772601  
C,0,3.9816846718,-1.4508549914,2.3224928243  
C,0,3.7160842488,-3.1772387671,0.5298384285  
C,0,2.1668081212,-0.7575227797,3.7217949331  
C,0,-0.164573794,-1.6243638067,3.4074633634  
C,0,-4.606546027,-1.7439487926,-0.8381345002  
C,0,-3.4249748578,-2.223855185,1.322378879

C,0,-3.692029564,-2.3860080969,-2.9558815556  
C,0,-1.4420979875,-3.4750034834,-3.1668329322  
H,0,-0.1342830703,6.4452843677,0.417655536  
C,0,-4.5457361667,1.6326315689,1.3069254288  
C,0,-3.8265063064,3.0656801577,-0.6289403182  
C,0,-3.0583267518,1.074313134,3.1015982075  
C,0,-0.6766900219,1.8788220327,3.1533514854  
C,0,4.612344879,2.0325353682,-0.6125654576  
C,0,3.3113054863,2.6710345826,1.4430949935  
C,0,3.6669817198,2.1763373805,-2.8126599316  
C,0,1.3054345574,2.9719875145,-3.1871856142  
H,0,5.0406162706,-1.4085520811,2.0499355861  
C,0,3.5180010253,-0.6601776429,3.3716633438  
H,0,4.0896531449,-4.1209838496,0.9614917834  
H,0,4.5677187664,-2.6864642401,0.0365205246  
H,0,2.9756852435,-3.4535108086,-0.2331174078  
H,0,1.7887572833,-0.170895554,4.5645908274  
H,0,-0.7963493026,-1.084824067,2.6845785674  
H,0,-0.3238967525,-1.1684488168,4.3940380019  
H,0,-0.532833686,-2.6604471906,3.4348026386  
H,0,-5.4182433807,-1.3151474339,-0.2431676746  
C,0,-4.7258312511,-1.7940638286,-2.2256123911  
H,0,-2.8944942834,-1.3325284873,1.6950642761  
H,0,-2.9082248526,-3.1099394611,1.716976655  
H,0,-4.4385558631,-2.191169041,1.7440992002  
H,0,-3.7733623788,-2.4444740781,-4.0451196635  
H,0,-1.4305302235,-4.5727085548,-3.06785758  
H,0,-0.4511017356,-3.1231023838,-2.8478771918  
H,0,-1.5685909144,-3.2329109665,-4.2309742185  
H,0,-5.5310012895,1.5689860478,0.8356072501  
C,0,-4.3258343254,0.9785000073,2.5195944691  
H,0,-3.0684973328,2.8208552082,-1.3874296485  
H,0,-3.8204542046,4.1601286928,-0.5051791686  
H,0,-4.8090593465,2.7736658319,-1.0243395417  
H,0,-2.8698990995,0.579543696,4.0593197822  
H,0,0.085749025,1.3074045894,2.5985430743  
H,0,-0.7102941143,1.4825540307,4.1773099358  
H,0,-0.3202417528,2.9191136421,3.1915678611  
H,0,5.4578323269,1.8100175671,0.0450441409  
C,0,4.7564129881,1.8668556287,-1.9916806957  
H,0,4.2920106011,2.5518910632,1.9236439886  
H,0,2.6292335821,1.9252557776,1.8825813511  
H,0,2.9144808431,3.665227385,1.6958849882  
H,0,3.7643532721,2.0659270889,-3.8967781252  
H,0,1.0682314578,4.0455799586,-3.1197665337  
H,0,0.38806378,2.4326248199,-2.9032981154  
H,0,1.5352531812,2.7354491447,-4.2352542901  
C,0,4.4423208273,0.2407053523,4.1369971751  
C,0,-5.9041628199,-1.1844814423,-2.9237364313  
C,0,-5.4301426286,0.2249806313,3.2015183122  
C,0,6.0341719734,1.3423111812,-2.5790888224

H,0,5.3880131282,0.3989206646,3.5995349622  
H,0,4.6872439515,-0.1890846444,5.1224344784  
H,0,3.9830482996,1.2241446381,4.3178422746  
H,0,-6.1851142218,-1.7534944118,-3.8222414343  
H,0,-5.658367085,-0.1592014993,-3.248713126  
H,0,-6.7817913859,-1.1221602726,-2.2642082862  
H,0,-5.0395418905,-0.612164389,3.7981495562  
H,0,-6.1520916122,-0.1772947161,2.475825037  
H,0,-5.9895743091,0.8827223467,3.8878379016  
H,0,5.9605067517,0.2589785922,-2.7731441362  
H,0,6.8851190986,1.4977444666,-1.9006266019  
H,0,6.265873356,1.8274254081,-3.5387967338  
C,0,2.1510717812,-0.5327420422,-1.3034096149  
H,0,3.0344385997,0.1175629742,-1.3778737172  
H,0,2.5437260552,-1.5064466378,-0.9619621557  
C,0,1.4431484486,-0.6881383772,-2.6300655287  
H,0,0.5753339561,-1.3558577728,-2.5498775959  
H,0,1.0713329105,0.271036049,-3.0080018217  
H,0,2.1307998938,-1.1072644864,-3.3819362491  
Br,0,-1.8467276535,0.4732960128,-2.5373382993

#### Dibrommethan

P,0,1.3779987792,0.027765214,-0.1664765343  
P,0,-1.2409774871,-0.0480879562,0.1524952528  
N,0,0.0608404824,-1.1495374088,-0.1678307662  
N,0,-0.0111017868,1.1339966402,-0.1754484743  
C,0,0.0663653254,-2.508668336,0.1913285715  
C,0,-0.0752384195,2.5253331427,0.0146750883  
C,0,1.2259295599,-3.1677612134,0.6581804563  
C,0,-1.135560002,-3.2501390861,0.0622757734  
C,0,-1.309790334,3.1740831089,0.2805982544  
C,0,1.0901939696,3.3267482409,-0.0651510684  
C,0,1.1314051277,-4.4983168815,1.0841378015  
C,0,2.5952485797,-2.5722986188,0.6566863044  
C,0,-1.1874271643,-4.5695771067,0.5142262323  
C,0,-2.3146132322,-2.7047666805,-0.6670005665  
C,0,-1.3358547742,4.5570282969,0.4873537804  
C,0,-2.6324819174,2.4895087149,0.3456339058  
C,0,1.0167619978,4.7028854507,0.1674109299  
C,0,2.4269665914,2.8056567514,-0.4598140381  
H,0,2.0410479325,-4.9821284217,1.4494980254  
C,0,-0.0678375371,-5.1969413732,1.0486521826  
C,0,3.4206243573,-2.7817460518,-0.464737854  
C,0,3.1155933235,-1.940996594,1.8063988978  
H,0,-2.13034239,-5.1118601958,0.4099637399  
C,0,-3.5217198392,-2.3929215501,-0.0190421257  
C,0,-2.2175649264,-2.589918708,-2.0748267152  
H,0,-2.3059952004,5.0207127838,0.6812492741  
C,0,-0.1863345206,5.3329008672,0.4501900449  
C,0,-3.2912512689,2.1042784488,-0.8414264614

C,0,-3.2926908893,2.372572057,1.5884460959  
H,0,1.943384256,5.2795133377,0.1062144265  
C,0,3.30118683,2.2494380857,0.4949058227  
C,0,2.8584129732,3.0066255553,-1.7885157779  
H,0,-0.1213413573,-6.2291923797,1.4004368182  
C,0,4.7396441247,-2.3152686154,-0.4376633044  
C,0,2.9239352529,-3.5493808629,-1.6578581151  
C,0,4.4419469018,-1.5125677525,1.7990275399  
C,0,2.2533378733,-1.7312001471,3.0103842061  
C,0,-4.5995753532,-1.9334033532,-0.7864455719  
C,0,-3.6987661331,-2.5213623593,1.4665688333  
C,0,-3.3068713433,-2.1063992293,-2.7921736752  
C,0,-0.9761050248,-3.0247489167,-2.7948593013  
H,0,-0.2299169843,6.4096226571,0.6249015091  
C,0,-4.5767850078,1.5690343512,-0.7593447459  
C,0,-2.6215473947,2.2519442562,-2.1737486746  
C,0,-4.5670760954,1.8056568258,1.6236599938  
C,0,-2.6787356986,2.8855954913,2.8586215839  
C,0,4.5696740783,1.8307349973,0.0827320136  
C,0,2.9003092948,2.1518502769,1.9373239374  
C,0,4.1380750113,2.584797848,-2.1529899699  
C,0,1.9626289054,3.6653164175,-2.7969950143  
H,0,5.3752214061,-2.4759164871,-1.3138917923  
C,0,5.2740751104,-1.6929083292,0.6900243088  
H,0,2.9083683881,-4.6303730814,-1.4424833698  
H,0,3.5713938,-3.3913444106,-2.5320228245  
H,0,1.8918177857,-3.2855097726,-1.9293570292  
H,0,4.8427162016,-1.031045045,2.6963327996  
H,0,1.3967766442,-1.0798992211,2.7739720933  
H,0,2.818845217,-1.2717404737,3.8326074935  
H,0,1.8242489276,-2.6801220475,3.3664971279  
H,0,-5.5355329623,-1.6885960955,-0.278033433  
C,0,-4.512260324,-1.7702131322,-2.1647115109  
H,0,-4.1036062257,-1.5868340503,1.8848108551  
H,0,-2.7545471776,-2.7315267342,1.9829230113  
H,0,-4.4096980494,-3.3291990714,1.7059456777  
H,0,-3.2235247597,-2.0147983146,-3.8794178527  
H,0,-0.6978601038,-4.0533421262,-2.5179007656  
H,0,-0.1273053752,-2.3740891083,-2.5422785687  
H,0,-1.1143082511,-2.9784065137,-3.8834356147  
H,0,-5.0830059638,1.2733413875,-1.6812702754  
C,0,-5.2288365405,1.4014183201,0.4630190843  
H,0,-1.7891307617,1.537019144,-2.2810633727  
H,0,-2.1920231727,3.2573964223,-2.3003195599  
H,0,-3.3279697424,2.0645970291,-2.994011392  
H,0,-5.0649737781,1.6937277107,2.5916062361  
H,0,-1.5886851978,2.7607023496,2.8682654222  
H,0,-3.0923175615,2.3598053868,3.7301541306  
H,0,-2.8878364501,3.9612559424,2.9839410524  
H,0,5.2360725978,1.3772439186,0.8198226538  
C,0,5.0023382296,1.9768196905,-1.2359662821

H,0,3.5826497104,1.4935586767,2.491826527  
H,0,1.8791397958,1.7616883096,2.0580345837  
H,0,2.918303956,3.1481689838,2.4084714523  
H,0,4.467348019,2.7273624452,-3.1865171425  
H,0,1.8587383515,4.7421255656,-2.5888329069  
H,0,0.9501029013,3.2385816321,-2.7727946199  
H,0,2.3619120537,3.5497215153,-3.8138544074  
C,0,6.7173310454,-1.285091103,0.7433091691  
C,0,-5.673562325,-1.2703795935,-2.9732762341  
C,0,-6.6151693081,0.8314880938,0.5395888412  
C,0,6.3467409075,1.4735346018,-1.6715562392  
H,0,7.1643069309,-1.2350143208,-0.259030629  
H,0,7.3033479999,-2.010552687,1.3314891509  
H,0,6.8472859489,-0.3046619676,1.2260160827  
H,0,-5.9899497436,-2.0165382718,-3.7196737806  
H,0,-5.4088255074,-0.3561933412,-3.5288563303  
H,0,-6.5410873125,-1.0425418365,-2.3383903371  
H,0,-7.3239915312,1.5674693018,0.9518537747  
H,0,-6.6489248289,-0.0494120034,1.2003548301  
H,0,-6.9841757066,0.5293108144,-0.4502016932  
H,0,6.2781288204,0.4220988219,-1.9974509428  
H,0,7.0794231817,1.513321019,-0.8532560601  
H,0,6.7404442661,2.0545665107,-2.5178855331  
Br,0,-1.146740476,-0.1472057474,2.5390899168  
C,0,1.8864695208,-0.0986758061,-1.9433832659  
H,0,2.7311471779,0.5755625195,-2.1264585076  
H,0,2.2230563331,-1.1318936762,-2.0915348275  
Br,0,0.5452379225,0.2640556179,-3.2881354753

Dibrommethan(*cis*)

P,0,1.2681879442,-0.0352300563,0.2862505119  
P,0,-1.3489999364,0.0372065486,-0.2506431437  
N,0,-0.109235953,-1.1366215224,0.0849046127  
N,0,0.0188998728,1.1166136424,-0.1362721686  
C,0,-0.1773152539,-2.5167761415,0.3345306275  
C,0,0.0020005235,2.5124737315,0.0172313596  
C,0,0.7945664243,-3.1396945528,1.162816635  
C,0,-1.2089876523,-3.3199458206,-0.2077706773  
C,0,-1.1260915108,3.1642064453,0.5743266591  
C,0,1.11507986,3.2940065067,-0.3587956772  
C,0,0.7884135245,-4.5272711259,1.3249754559  
C,0,1.774652458,-2.3426157957,1.9477040273  
C,0,-1.1807386831,-4.7040553772,-0.0101591322  
C,0,-2.3926601971,-2.7656427007,-0.9198981888  
C,0,-1.1554196125,4.558511926,0.6510672111  
C,0,-2.2422543236,2.4077185109,1.2014338908  
C,0,1.0565716919,4.6867256115,-0.2429377113  
C,0,2.3802286437,2.7117244981,-0.8819937817  
H,0,1.5527357862,-4.9731827445,1.9661794982  
C,0,-0.179945373,-5.323504049,0.7274880627

C,0,3.1469431034,-2.3522400568,1.634994154  
C,0,1.3055078201,-1.5777808944,3.040638049  
H,0,-1.9904472232,-5.2947989106,-0.4460307584  
C,0,-3.4685938902,-2.2555734109,-0.1651495096  
C,0,-2.4982820969,-2.8749295477,-2.3207555753  
H,0,-2.0396076687,5.0322053995,1.0847879549  
C,0,-0.0769536348,5.3306240988,0.2362547975  
C,0,-3.5135706247,2.3455915612,0.6003575263  
C,0,-2.0124967498,1.7936281328,2.451395872  
H,0,1.9320874196,5.2638176774,-0.5515428936  
C,0,3.4618464585,2.4812068708,-0.0094877833  
C,0,2.5243347828,2.5135951968,-2.2702482387  
H,0,-0.175795431,-6.4066841654,0.8642408496  
C,0,4.0047112524,-1.4989123725,2.3372469833  
C,0,3.7102129069,-3.2540594448,0.5724333121  
C,0,2.2007779876,-0.7661733855,3.732138455  
C,0,-0.1422574305,-1.6103858777,3.4312135319  
C,0,-4.5963925077,-1.7754497644,-0.8376448035  
C,0,-3.4280823788,-2.2385569868,1.3347102765  
C,0,-3.6540089806,-2.4126277684,-2.9456375325  
C,0,-1.371177802,-3.4451340306,-3.127492996  
H,0,-0.1110412895,6.4196976199,0.3073517605  
C,0,-4.5217691059,1.6185363933,1.2386319342  
C,0,-3.7899851394,3.0339008587,-0.7041917307  
C,0,-3.0522252599,1.0869981531,3.0558082722  
C,0,-0.672870281,1.8951737321,3.1223085954  
C,0,4.6694241916,2.0185176333,-0.5440612646  
C,0,3.3303418764,2.7144670396,1.4684201915  
C,0,3.7496722307,2.0610815615,-2.7607439797  
C,0,1.3745937318,2.7802082938,-3.1932562575  
H,0,5.0632685971,-1.4712748588,2.0614678186  
C,0,3.5512261214,-0.687181918,3.3760328942  
H,0,4.0086707616,-4.2230509311,1.0061996548  
H,0,4.6077649887,-2.8151787219,0.11285167  
H,0,2.9800576794,-3.4823240918,-0.2170431647  
H,0,1.8308095785,-0.1618809771,4.5659282627  
H,0,-0.767260522,-1.0737339546,2.6999210603  
H,0,-0.2968256288,-1.1379661939,4.4107169909  
H,0,-0.5234298969,-2.6412613411,3.47237973  
H,0,-5.4180106973,-1.3532124246,-0.2516562264  
C,0,-4.7017598407,-1.8311674229,-2.2259831748  
H,0,-2.886193965,-1.3528984988,1.7048167542  
H,0,-2.926255703,-3.1294688088,1.737838731  
H,0,-4.4435351318,-2.1892042404,1.749947272  
H,0,-3.7240127822,-2.474653028,-4.0354447813  
H,0,-1.1802179705,-4.4991079271,-2.8723271884  
H,0,-0.437970571,-2.8958550123,-2.9312944361  
H,0,-1.5859343796,-3.3853818401,-4.2032651555  
H,0,-5.5023155144,1.5479851767,0.758636265  
C,0,-4.3141919336,0.9827658465,2.4629198246  
H,0,-2.9946360263,2.8398378034,-1.4378056653

H,0,-3.8531112679,4.1260765885,-0.5728379748  
H,0,-4.7403602309,2.6893736748,-1.1344409713  
H,0,-2.8737824036,0.6074164814,4.0231341678  
H,0,0.0983765573,1.3165998505,2.5873946489  
H,0,-0.7186120953,1.5153990159,4.152051961  
H,0,-0.3187103463,2.9366232692,3.1483716537  
H,0,5.5069761659,1.825866947,0.1327256777  
C,0,4.8323598724,1.7986905383,-1.9137626508  
H,0,4.3017289541,2.6077038943,1.9703272764  
H,0,2.6378025787,1.9849006509,1.9190128972  
H,0,2.9316357833,3.7162805944,1.6854440126  
H,0,3.8572029625,1.8944268378,-3.8361823386  
H,0,1.0389806381,3.8260659712,-3.1160330738  
H,0,0.5103006379,2.1468785785,-2.938203995  
H,0,1.6484405025,2.5751447276,-4.2368376139  
C,0,4.4885678625,0.2146190706,4.1241939196  
C,0,-5.8818031533,-1.2399559998,-2.9371631916  
C,0,-5.4259440293,0.2418947111,3.1463999009  
C,0,6.1237073417,1.2745359881,-2.4708542248  
H,0,5.4107286106,0.3990325713,3.5550001295  
H,0,4.7784655555,-0.231277798,5.0901783033  
H,0,4.0207124568,1.1860251358,4.3426263431  
H,0,-6.1559006391,-1.8250156745,-3.827499083  
H,0,-5.6425284737,-0.2183365311,-3.278153644  
H,0,-6.7620436607,-1.1734556141,-2.2815524548  
H,0,-5.0426010274,-0.5867015054,3.7593914508  
H,0,-6.1424043285,-0.1698226449,2.420639331  
H,0,-5.9897194964,0.9115654208,3.8174375093  
H,0,5.9967395883,0.2512045778,-2.860246457  
H,0,6.9133419732,1.2481038979,-1.7069341232  
H,0,6.4787039674,1.8946296508,-3.3083459479  
C,0,2.2937711689,-0.5512596908,-1.1586574001  
H,0,3.1164900301,0.1615177244,-1.2856820804  
H,0,2.7278232572,-1.5004794346,-0.8199353858  
Br,0,-1.7987967193,0.4328175087,-2.5309546261  
Br,0,1.5420043123,-0.8941570204,-2.8983376049

#### Tribrommethan

P,0,-1.2672323377,0.0080570318,-0.4142902149  
P,0,1.308315006,0.0811239736,0.2446942496  
N,0,0.0190867808,1.1772497855,-0.2063285817  
N,0,0.0400878698,-1.0971080956,0.0372181733  
C,0,0.0005094739,2.5548776712,0.1065165309  
C,0,0.1169202824,-2.4996919806,0.0807619918  
C,0,-1.1560027031,3.245908068,0.5384669525  
C,0,1.2233903026,3.2702976103,0.0005055509  
C,0,1.340178753,-3.1569352997,0.3800423501  
C,0,-1.0268553902,-3.3035958143,-0.1627064686  
C,0,-1.034750303,4.5855069811,0.9340786762  
C,0,-2.5511896075,2.7088529156,0.556945888

C,0,1.2925982384,4.6024504183,0.4091546844  
C,0,2.4296130009,2.6534565565,-0.618338274  
C,0,1.3950615097,-4.5538888992,0.377258122  
C,0,2.6050274051,-2.4768030482,0.7932357071  
C,0,-0.9229091792,-4.6981705647,-0.1348108162  
C,0,-2.3767509705,-2.753012107,-0.4585903114  
H,0,-1.9387345847,5.0932779099,1.2798212772  
C,0,0.1739548328,5.2649225929,0.8985115218  
C,0,-3.4385891248,3.11849603,-0.4571008267  
C,0,-3.0375189981,1.9669862492,1.6531254843  
H,0,2.2499882137,5.1208815396,0.3179044367  
C,0,3.5913559441,2.3725742495,0.1249446  
C,0,2.4111389848,2.4169512697,-2.0141008976  
H,0,2.357025424,-5.0202512984,0.6042211347  
C,0,0.2798131533,-5.3388644187,0.1191877407  
C,0,3.5838054775,-2.0928297484,-0.1431137699  
C,0,2.8830627786,-2.3879733801,2.1767575546  
H,0,-1.8304900188,-5.2793638088,-0.3153344997  
C,0,-3.1564453514,-2.1752202813,0.5646896581  
C,0,-2.9160869128,-2.9045621815,-1.7553936627  
H,0,0.2376918646,6.3051570453,1.2241681758  
C,0,-4.7792940969,2.7238758989,-0.3904109943  
C,0,-2.9962438155,4.0408365298,-1.5579657762  
C,0,-4.3849411167,1.6128338145,1.6901799415  
C,0,-2.1323452572,1.5957396775,2.7831554411  
C,0,4.6729730848,1.7610517154,-0.5218637676  
C,0,3.7340853821,2.7243546222,1.5778353448  
C,0,3.5075693488,1.802644182,-2.6115106632  
C,0,1.2551472984,2.8809835525,-2.8481260194  
H,0,0.3449569607,-6.4284975042,0.1317464081  
C,0,4.7943307894,-1.5695255945,0.3182190897  
C,0,3.3515034934,-2.183549728,-1.6199427351  
C,0,4.0989860369,-1.848791142,2.5910723141  
C,0,1.892845303,-2.8819697544,3.1899630866  
C,0,-4.4297412372,-1.6918371514,0.254525614  
C,0,-2.6297256553,-2.0858114089,1.9659725132  
C,0,-4.1853132737,-2.3910729319,-2.0235616705  
C,0,-2.1396213563,-3.5803676094,-2.8531589478  
H,0,-5.4604295915,3.0385762877,-1.1870827149  
C,0,-5.2765149167,1.9814725416,0.6794076262  
H,0,-3.0302332895,5.0893431267,-1.2178039608  
H,0,-3.6577168478,3.9573289804,-2.4324086939  
H,0,-1.9643262034,3.8454980499,-1.8771640067  
H,0,-4.7548219035,1.0500293635,2.5528544607  
H,0,-1.3207195908,0.9306745645,2.4547081111  
H,0,-2.6819839275,1.0888651866,3.5880498382  
H,0,-1.6326377878,2.4822351091,3.2030636741  
H,0,5.5655469413,1.5240669664,0.0640645104  
C,0,4.6457854662,1.4466666004,-1.8766935074  
H,0,4.1687292558,1.8841399582,2.1389791541  
H,0,2.7753838856,2.9757506763,2.0450547705



H,0,4.4091757834,3.5888268601,1.6938465478  
H,0,3.4842351513,1.6163052029,-3.6896170902  
H,0,1.1079598901,3.9669410881,-2.7350528008  
H,0,0.3139963626,2.4008177922,-2.5486103817  
H,0,1.4180546292,2.6589623842,-3.9111697758  
H,0,5.547137746,-1.2662526776,-0.4140251894  
C,0,5.065006886,-1.4201557988,1.6767627313  
H,0,4.2310816606,-2.6031740034,-2.1312369031  
H,0,3.1816547144,-1.1727040608,-2.0281652676  
H,0,2.4766368892,-2.7981929652,-1.8679771804  
H,0,4.296015063,-1.7576272483,3.6630933955  
H,0,0.8877084914,-2.479290331,2.998700636  
H,0,2.1902566611,-2.5871850615,4.2054219246  
H,0,1.8089272761,-3.9801499755,3.1584031678  
H,0,-5.0205884137,-1.2251896943,1.0461035355  
C,0,-4.9516096647,-1.7649401808,-1.037039655  
H,0,-3.3895455563,-1.6832823079,2.6489574778  
H,0,-1.7461684681,-1.430208341,2.0266522298  
H,0,-2.3126511963,-3.0741357829,2.3326449034  
H,0,-4.5865187649,-2.4759087499,-3.0377637706  
H,0,-2.1675898149,-4.6762532917,-2.7461095713  
H,0,-1.0759274137,-3.2982051274,-2.8432972041  
H,0,-2.5590007693,-3.3330864762,-3.8387247632  
C,0,-6.7370557138,1.6538301641,0.791522752  
C,0,5.8013197829,0.760965649,-2.544802053  
C,0,6.3458505451,-0.7961867377,2.147482876  
C,0,-6.2787755738,-1.156783165,-1.3759874787  
H,0,-7.2435970143,1.7046451551,-0.1825196303  
H,0,-7.2437016936,2.3662331434,1.4638578929  
H,0,-6.898037093,0.6490232576,1.209712473  
H,0,6.1006871363,1.2838477687,-3.4662831141  
H,0,5.5363165655,-0.2698362193,-2.8324352155  
H,0,6.6776227965,0.708780464,-1.8833328329  
H,0,6.7460366102,-1.3106297586,3.033904863  
H,0,6.1849704596,0.2575149581,2.4318483494  
H,0,7.1160191261,-0.8122197746,1.3630320129  
H,0,-6.149548153,-0.0922647559,-1.6323348497  
H,0,-6.9780970774,-1.207038015,-0.5296907509  
H,0,-6.742798646,-1.6532339008,-2.2401724416  
C,0,-1.2186906087,-0.2520787216,-2.2885672849  
H,0,-1.7996022283,-1.15446637,-2.4926713213  
Br,0,-2.2109109413,1.1652770365,-3.1406248668  
Br,0,0.5158923652,-0.5335882122,-3.0758691802  
Br,0,1.2785701397,0.4801567703,2.5664457366

Tribrommethan(*cis*)

P,0,1.1498805801,-0.0405785832,-0.6470908254  
P,0,-1.3987310373,0.0854713392,0.0979829042  
N,0,-0.1575326365,-1.0926715494,-0.111259236  
N,0,-0.0388775309,1.170284019,-0.1815228074

C,0,-0.0724774318,-2.4561159081,0.2277550608  
C,0,0.0273722902,2.5668289404,-0.049835679  
C,0,1.0100393359,-2.8992630981,1.0232799903  
C,0,-1.0457383993,-3.3851600063,-0.1992833311  
C,0,-1.0530510621,3.2616099786,0.5567041465  
C,0,1.1641715181,3.3193982579,-0.4482016399  
C,0,1.1811163736,-4.2713932257,1.2354958629  
C,0,1.8827014113,-1.9821271537,1.8147290918  
C,0,-0.8475652057,-4.7461006014,0.0546187991  
C,0,-2.3193658592,-2.9741326169,-0.8518780763  
C,0,-1.037803596,4.6549305918,0.635346396  
C,0,-2.1779930235,2.5375865072,1.2085249309  
C,0,1.1358557113,4.714175171,-0.3398647874  
C,0,2.4454920935,2.6986450079,-0.8826722272  
H,0,2.0257894112,-4.5980001519,1.847222661  
C,0,0.2762246208,-5.2000740648,0.7344338292  
C,0,3.2603918334,-1.8513097629,1.5596701933  
C,0,1.3260280898,-1.394833016,2.9751476936  
H,0,-1.6079560773,-5.4505449124,-0.2913850744  
C,0,-3.4135443145,-2.5850609065,-0.0528141541  
C,0,-2.4640267082,-3.0752751707,-2.2483441316  
H,0,-1.8912611524,5.1514673662,1.1036001529  
C,0,0.0405176324,5.3966639373,0.1704756955  
C,0,-3.45421692,2.4850851679,0.6123945295  
C,0,-1.9567455644,1.9283622207,2.4657995192  
H,0,2.0276499586,5.264860894,-0.6473285165  
C,0,3.2337312403,2.0191716927,0.0715655038  
C,0,2.9476858848,2.8871631499,-2.1893576353  
H,0,0.4232147359,-6.2675593427,0.9123187218  
C,0,4.057434873,-1.1569979936,2.4773494909  
C,0,3.8922283559,-2.3944773891,0.3134270275  
C,0,2.1574969475,-0.6993861531,3.8529382311  
C,0,-0.1297572666,-1.5564013495,3.3038727147  
C,0,-4.6153785919,-2.2426023084,-0.6789197763  
C,0,-3.3295759576,-2.5488627253,1.448454029  
C,0,-3.6841618951,-2.7311411464,-2.8284985524  
C,0,-1.3327824392,-3.5631606114,-3.105351543  
H,0,0.0442261519,6.4859980933,0.2419707074  
C,0,-4.4455033541,1.7100576901,1.2205670451  
C,0,-3.7623917016,3.2539423581,-0.6378132271  
C,0,-2.9863199707,1.1944043953,3.0518083472  
C,0,-0.6185109381,2.0216753174,3.1355670919  
C,0,4.4238973753,1.4104666653,-0.3324476694  
C,0,2.8159210957,1.9428544694,1.5068738964  
C,0,4.1291293848,2.2413548226,-2.5560410858  
C,0,2.2799870114,3.8097125611,-3.168057688  
H,0,5.1309800619,-1.0749152676,2.2809325985  
C,0,3.5320127977,-0.5787610989,3.6303413657  
H,0,4.9391620048,-2.6805270978,0.489946902  
H,0,3.8829003661,-1.6196042121,-0.4718259636  
H,0,3.35167979,-3.2607213632,-0.0889865518

H,0,1.7201109523,-0.2601427202,4.7546284703  
H,0,-0.7742713961,-1.0312269274,2.5816851469  
H,0,-0.3542431133,-1.153343992,4.3007625974  
H,0,-0.4300822809,-2.6148047163,3.2804595097  
H,0,-5.4603860909,-1.9283984701,-0.0586214177  
C,0,-4.7671570724,-2.2922224983,-2.0634114385  
H,0,-3.0052875205,-1.5574892901,1.8052616862  
H,0,-2.6175712637,-3.2899030929,1.8367223266  
H,0,-4.3147128549,-2.7464528422,1.8946152865  
H,0,-3.7866512704,-2.790664742,-3.9161590975  
H,0,-1.2540783347,-4.6625298201,-3.0685082664  
H,0,-0.3597082982,-3.1785157879,-2.7696771653  
H,0,-1.47636151,-3.2742689048,-4.1559126939  
H,0,-5.4188227742,1.6235380772,0.7289734746  
C,0,-4.2287091202,1.0444041375,2.4275852645  
H,0,-4.6248654969,2.8219242242,-1.1630425309  
H,0,-2.9096442072,3.2693020519,-1.3288412843  
H,0,-4.0053119917,4.3014151677,-0.3917235567  
H,0,-2.8072184388,0.7060801118,4.0143153387  
H,0,0.1393641074,1.4293074693,2.5987334545  
H,0,-0.6655846728,1.6449593447,4.1663294557  
H,0,-0.249725054,3.0578631979,3.1547097278  
H,0,5.0125222112,0.8661539464,0.411244437  
C,0,4.8646487603,1.4685695722,-1.6536972892  
H,0,3.6935627317,1.8495022132,2.1586945131  
H,0,2.1920109033,1.0527036821,1.695105331  
H,0,2.2385694671,2.826115986,1.8111038939  
H,0,4.4877010814,2.347773901,-3.5840663477  
H,0,2.6460786006,4.841072733,-3.029343224  
H,0,1.1900759261,3.8339543326,-3.0406352268  
H,0,2.5109935592,3.5191620149,-4.202614202  
C,0,4.4001361761,0.1784532207,4.5914913477  
C,0,-6.0392625146,-1.8418864246,-2.7175489078  
C,0,-5.3170353109,0.2265123057,3.0588581177  
C,0,6.0814129427,0.7130679436,-2.0983834709  
H,0,5.4672178857,-0.0116993053,4.4090429754  
H,0,4.1772601223,-0.0924524091,5.6346728902  
H,0,4.2355107433,1.2654007208,4.499887046  
H,0,-6.233199046,-2.3892865737,-3.6515135807  
H,0,-5.9766665225,-0.7701729045,-2.9720730737  
H,0,-6.9064713757,-1.972075826,-2.0539134737  
H,0,-6.003230328,0.8645980247,3.6404161179  
H,0,-4.9083427753,-0.5290636961,3.7447829466  
H,0,-5.9196279331,-0.2910512554,2.2979584075  
H,0,5.7904007876,-0.2671556521,-2.5127939183  
H,0,6.7705886189,0.5256886635,-1.2623192696  
H,0,6.6295640964,1.2498497332,-2.8864923592  
C,0,0.7885648416,-0.4109255038,-2.4966277496  
H,0,-0.189505808,-0.8979079364,-2.579015129  
Br,0,-2.4423176977,0.3980048107,-1.9670457888  
Br,0,0.7656185386,1.0046835302,-3.7776900768

Br,0,2.1094816369,-1.7739642119,-2.9301099253

## Diazomethan-Addukte

### TMS-Diazomethan

P,0,-2.4885108018,0.0318838091,-1.7342971647  
P,0,-0.2850110213,-0.5960915813,-0.6187323808  
N,0,-1.8460829172,-1.3358605014,-0.7435780259  
N,0,-1.2359015091,0.8207906952,-0.6607209721  
C,0,-2.2681162663,-2.6488221723,-0.5589852353  
C,0,-0.9945539774,2.1977271126,-0.7036239976  
C,0,0.6579372754,-1.13987403,-3.3635661614  
C,0,-3.3135402189,-3.1936952682,-1.3403263423  
C,0,-1.7063242422,-3.43499343,0.4807733775  
C,0,0.2567243305,2.7757214784,-0.9844328851  
C,0,-2.1049425267,3.0440998868,-0.4482754385  
C,0,-3.711611769,-4.5163172843,-1.1346738513  
C,0,-4.050679233,-2.3507271317,-2.3205836076  
C,0,-2.1323130441,-4.7548921116,0.6491784085  
C,0,-0.7268506397,-2.8402182861,1.4269172879  
C,0,0.369235035,4.1718842808,-1.0416808735  
C,0,1.5177330746,2.0144394972,-1.2028490722  
C,0,-1.9549044796,4.4282677815,-0.534486235  
C,0,-3.4147672794,2.499318183,0.0048071701  
H,0,-4.5185842751,-4.9130056843,-1.7562547713  
C,0,-3.1179048544,-5.3107439445,-0.1592214147  
C,0,-5.191925107,-1.6429120255,-1.8914365119  
C,0,-3.617794223,-2.2584030254,-3.6571570516  
H,0,-1.6953129211,-5.3411221809,1.460929452  
C,0,0.601433298,-3.3101011011,1.4912351866  
C,0,-1.14288452,-1.7920522575,2.2771209313  
H,0,1.3523594079,4.598079772,-1.2576620701  
C,0,-0.7237610673,5.0021997313,-0.835925112  
C,0,2.3184626274,1.6608133389,-0.0979838847  
C,0,2.0082730156,1.8612039758,-2.514376707  
H,0,-2.8237549913,5.0583148856,-0.3276947048  
C,0,-4.5342023236,2.4883090243,-0.8463816519  
C,0,-3.5324911054,2.0534422835,1.3368820628  
H,0,-3.4409601484,-6.3430075986,-0.0102362436  
C,0,-5.8607945055,-0.8262011452,-2.8040304185  
C,0,-5.6403349506,-1.7055062649,-0.4621310687  
C,0,-4.3070079816,-1.4180921299,-4.532116283  
C,0,-2.4227954709,-3.0361659865,-4.118605388  
C,0,1.5129966459,-2.6526224348,2.3203309701  
C,0,1.0497502319,-4.5036033882,0.6958199635  
C,0,-0.1960349614,-1.165316929,3.0913409362  
C,0,-2.5749065807,-1.3489655048,2.3167993753  
H,0,-0.6141856265,6.0873834401,-0.8904042658  
C,0,3.6176664722,1.2008638228,-0.3254376425  
C,0,1.7941291231,1.7923900109,1.3017924371

C,0,3.311549138,1.393008836,-2.6947572516  
C,0,1.1582238427,2.2282535196,-3.695213488  
C,0,-5.7518141312,2.0102676761,-0.3528836155  
C,0,-4.4302336856,2.9532067785,-2.2696092529  
C,0,-4.7653424704,1.5799912796,1.7861472164  
C,0,-2.351400131,2.1062005535,2.261034881  
H,0,-6.7381319412,-0.2673097627,-2.4666615492  
C,0,-5.421709082,-0.6831987162,-4.1215831946  
H,0,-6.6412122889,-1.2697633624,-0.3436894032  
H,0,-4.9545802056,-1.129713809,0.1821073996  
H,0,-5.6542828596,-2.7360964695,-0.0797936837  
H,0,-3.9506260321,-1.3238118325,-5.561673479  
H,0,-1.5486737783,-2.8271054231,-3.4868038466  
H,0,-2.1599400849,-2.7823862287,-5.1543693691  
H,0,-2.6064466841,-4.120776443,-4.0590799674  
H,0,2.5509761454,-2.9985105947,2.3397517313  
C,0,1.1426047276,-1.5625366504,3.1099791899  
H,0,2.1448905836,-4.5375430209,0.6165832446  
H,0,0.6251524576,-4.5073284388,-0.3172070305  
H,0,0.7250359812,-5.4414542056,1.1742936487  
H,0,-0.519132394,-0.3432158115,3.7371061394  
H,0,-3.2593755057,-2.2069005456,2.2518925425  
H,0,-2.8077312392,-0.6877569237,1.4678110352  
H,0,-2.7890474157,-0.7975697386,3.2420398306  
H,0,4.2444464945,0.9438043483,0.5338206027  
C,0,4.1389537233,1.0741070521,-1.6159003857  
H,0,2.6006782823,1.6845495066,2.0397064401  
H,0,1.0470264852,1.0085309501,1.5147289171  
H,0,1.2985150481,2.7614453812,1.4601828881  
H,0,3.6985493139,1.299466331,-3.713657332  
H,0,0.1686112871,1.7461755255,-3.6440663673  
H,0,1.6431783351,1.9323267674,-4.6357356482  
H,0,0.9760821219,3.314031795,-3.7310001526  
H,0,-6.6185412316,1.9935537902,-1.0199445687  
C,0,-5.8899940245,1.5501323598,0.9562081253  
H,0,-5.3772513266,2.7956633087,-2.8040930116  
H,0,-3.6427933203,2.4023213381,-2.8094834378  
H,0,-4.1711315421,4.0209463605,-2.3342492281  
H,0,-4.8527491076,1.2329830868,2.820383763  
H,0,-1.9217400501,3.1190938439,2.2974908899  
H,0,-1.5508371217,1.4338420577,1.9157169133  
H,0,-2.6321321355,1.811904616,3.2816447368  
C,0,-6.1053178879,0.2635296703,-5.0643494658  
C,0,2.1490916737,-0.869636648,3.981536483  
C,0,5.5278231034,0.5516175586,-1.8374262484  
C,0,-7.2074348209,1.0504158835,1.4737490127  
H,0,-7.1346058213,0.4806830401,-4.7444028777  
H,0,-6.1400366032,-0.1376086394,-6.0881146955  
H,0,-5.5631845656,1.2230200771,-5.1096054594  
H,0,1.7708416652,0.0962551411,4.3448858164  
H,0,3.0878567932,-0.6859364147,3.4369853988

H,0,2.4003379934,-1.482181686,4.8631814854  
H,0,6.2080485224,0.853774109,-1.0278090867  
H,0,5.9462015907,0.9063128606,-2.7903010195  
H,0,5.5287125179,-0.551620122,-1.869968359  
H,0,-7.1009989099,0.0651637554,1.9538062049  
H,0,-7.9485972447,0.9568135013,0.667341644  
H,0,-7.6230490807,1.7352871006,2.230918039  
N,0,-1.4137247397,-0.1452827872,-3.0525221081  
N,0,-0.280843904,-0.644521887,-2.6113109702  
Si,0,2.0853087361,-2.2834740037,-2.9322063231  
C,0,2.7816038884,-2.121536974,-1.2060638588  
H,0,3.1603050657,-1.1073359226,-1.0278458376  
H,0,2.0376085121,-2.3297749336,-0.427817737  
H,0,3.6126853316,-2.8367357328,-1.0898442797  
C,0,3.4283498041,-1.9987815486,-4.2174467444  
H,0,3.8981681475,-1.0124435207,-4.0945658467  
H,0,4.2137492389,-2.7658497466,-4.1243131185  
H,0,3.0209918731,-2.0596318703,-5.2389547593  
C,0,1.3782630708,-4.0163074932,-3.1858225328  
H,0,0.5135371722,-4.1917654078,-2.5268182073  
H,0,1.0368122711,-4.1557311785,-4.2235611813  
H,0,2.1356725228,-4.7874662822,-2.9700555028  
H,0,0.4155336614,-1.0707781062,-4.4365850923

#### Diphenyl-diazomethan

P,0,1.1700936699,-1.1161239089,0.080647479  
P,0,-1.0333544254,0.1746537036,-0.0186332548  
N,0,-0.1006412217,-0.5593170013,1.2122767781  
N,0,-0.3550317092,-1.0841092507,-0.9627852192  
C,0,-0.16955133,-0.3366561918,2.591715439  
C,0,-0.3948323002,-1.302146685,-2.3435417774  
C,0,0.7955078784,2.575896872,-0.5390162098  
C,0,0.9323786934,0.0829988557,3.3762048343  
C,0,-1.4144002426,-0.5898152077,3.2097516554  
C,0,-1.3494728256,-0.6483743021,-3.150787796  
C,0,0.4766681205,-2.2427691147,-2.9504776969  
C,0,0.7398845681,0.3132766669,4.7418889165  
C,0,2.2831875986,0.2455374624,2.775521092  
C,0,-1.5684864504,-0.3286271021,4.5739769299  
C,0,-2.5246384721,-1.2455337747,2.4613053761  
C,0,-1.3990517467,-0.9016997314,-4.5228977575  
C,0,-2.336137011,0.2808918824,-2.5451963945  
C,0,0.4005591729,-2.4643228326,-4.328310702  
C,0,1.4426080884,-3.0460351897,-2.1554946813  
H,0,1.5977466469,0.6319498642,5.3392075423  
C,0,-0.5034158762,0.1338082869,5.3403408844  
C,0,3.0708996755,-0.8903771833,2.5102383701  
C,0,2.7697950036,1.5318314348,2.4647080923  
H,0,-2.5369051851,-0.531381054,5.0383462247  
C,0,-3.7138039806,-0.5612423582,2.1541291066

C,0,-2.4014445396,-2.6173036451,2.1397205659  
H,0,-2.156574372,-0.3829268486,-5.1161102937  
C,0,-0.5247531936,-1.7987451414,-5.12505036  
C,0,-3.4702597565,-0.2412204244,-1.8883477165  
C,0,-2.1575238758,1.6725521459,-2.6623575529  
H,0,1.0810032691,-3.198224841,-4.7679049657  
C,0,2.8185049678,-2.7477735477,-2.1901122244  
C,0,0.963305602,-4.1025739251,-1.351677952  
H,0,-0.6337055289,0.3216928359,6.4083593589  
C,0,4.2835883225,-0.7248970092,1.8297907313  
C,0,2.653600471,-2.2676908283,2.9458630219  
C,0,3.9812877635,1.6495454131,1.7881025054  
C,0,2.0042822303,2.7606020333,2.8600894566  
C,0,-4.7739703294,-1.265386318,1.5711990839  
C,0,-3.8485307045,0.9193033023,2.360426232  
C,0,-3.4765820887,-3.2733621653,1.5422064049  
C,0,-1.1395061239,-3.3718750114,2.4365351238  
H,0,-0.5758837035,-1.9912932966,-6.1985973665  
C,0,-4.3822567239,0.6449573841,-1.3161732445  
C,0,-3.6778829311,-1.7226392495,-1.7861967794  
C,0,-3.0937355784,2.5226966521,-2.0682421217  
C,0,-0.9970814959,2.2305639634,-3.4347096777  
C,0,3.6914878891,-3.5029513304,-1.4012289033  
C,0,3.3374248294,-1.5751995154,-2.97013803  
C,0,1.8694314293,-4.8222413046,-0.5750477411  
C,0,-0.5029501021,-4.4155742137,-1.2932509276  
H,0,4.8799863951,-1.6124856364,1.5986871544  
C,0,4.7359174337,0.5286821186,1.4280123873  
H,0,3.5023118086,-2.7964743535,3.4054401751  
H,0,2.3208934801,-2.8667623249,2.0822693606  
H,0,1.8326009233,-2.2384025714,3.6741435945  
H,0,4.3357149943,2.6456156054,1.5081298812  
H,0,0.9725039615,2.7424766718,2.482988681  
H,0,2.492227603,3.6649230506,2.4745535153  
H,0,1.9322091454,2.8528308281,3.9551607363  
H,0,-5.7015667201,-0.7288853251,1.3497323508  
C,0,-4.6813960696,-2.6202750445,1.2637675502  
H,0,-4.8962351463,1.2056895787,2.5319417951  
H,0,-3.5051029623,1.4446832308,1.4528356161  
H,0,-3.2435608839,1.2845013794,3.200791744  
H,0,-3.3755262746,-4.3360925161,1.3014799907  
H,0,-0.7984867295,-3.1997457113,3.4683704299  
H,0,-0.3241211342,-3.0432580214,1.773002768  
H,0,-1.2807204423,-4.4515106214,2.2900467786  
H,0,-5.260080931,0.2395349446,-0.8055972944  
C,0,-4.2029728837,2.029912964,-1.3799712386  
H,0,-4.7117892978,-1.9573029984,-1.5018714109  
H,0,-3.0192032465,-2.1572154476,-1.0161136918  
H,0,-3.4461219038,-2.2284831859,-2.7344847688  
H,0,-2.95025492,3.6028240373,-2.1443006585  
H,0,-0.0382003026,1.8288194136,-3.0743154038

H,0,-0.9642526166,3.324955856,-3.3605120571  
H,0,-1.0651462584,1.9623579797,-4.5002457817  
H,0,4.7580101395,-3.2604785197,-1.4170374947  
C,0,3.2393906014,-4.5365626179,-0.5825113442  
H,0,4.4358995546,-1.5496382123,-2.9586270859  
H,0,2.9678612207,-0.6412048173,-2.5138560984  
H,0,2.9968136587,-1.5835518448,-4.0148361132  
H,0,1.4952985805,-5.6341325104,0.0564299156  
H,0,-0.9341911522,-4.5162770037,-2.3005255624  
H,0,-1.0528694272,-3.6025559138,-0.791811381  
H,0,-0.6877543945,-5.345428486,-0.7376957749  
C,0,5.9759604774,0.6732507143,0.5977051912  
C,0,-5.8372771406,-3.3671646054,0.6650896808  
C,0,-5.1809151509,2.9582450911,-0.721114777  
C,0,4.1876838645,-5.3281521179,0.2699486729  
H,0,6.7023528047,-0.1263950432,0.8049470416  
H,0,6.4661605188,1.6433492748,0.7636901037  
H,0,5.7181015572,0.620253005,-0.4734220164  
H,0,-5.5064355051,-4.0381823888,-0.1422170879  
H,0,-6.5918671756,-2.682082706,0.2526529093  
H,0,-6.338066823,-3.9939990292,1.4215700721  
H,0,-6.2200639878,2.6529054959,-0.917175578  
H,0,-5.0518664813,3.9925858602,-1.0685817013  
H,0,-5.0419747699,2.9597243395,0.3725462208  
H,0,3.916813422,-5.2577132654,1.3351989444  
H,0,5.2216472776,-4.9718888745,0.1609104942  
H,0,4.168074251,-6.396588805,0.0020603464  
N,0,1.6800126184,0.4178664544,-0.4836277466  
N,0,0.6946592892,1.2700944753,-0.4121584189  
C,0,-0.3667504356,3.4247154467,-0.218706044  
C,0,-0.6309940195,4.5778264706,-0.9775432113  
C,0,-1.1884178421,3.1657058726,0.8908761472  
C,0,-1.6889940582,5.4216138271,-0.657363935  
H,0,0.0099528949,4.8099770785,-1.8304191149  
C,0,-2.2527488066,4.005757216,1.2065136723  
H,0,-0.9700153972,2.3173455734,1.5437567737  
C,0,-2.510868193,5.1357697785,0.4332742889  
H,0,-1.8756551622,6.3091492844,-1.2669157994  
H,0,-2.8697344347,3.7857468277,2.0804739023  
H,0,-3.3399875283,5.7997460371,0.6884034797  
C,0,2.0775061295,3.2174643493,-0.8899195643  
C,0,2.3973186536,4.4810894754,-0.3611128682  
C,0,3.0159148877,2.5959524752,-1.7312930027  
C,0,3.6141425837,5.0916714273,-0.6471005323  
H,0,1.6865987611,4.9819290177,0.298655668  
C,0,4.2226460355,3.2189004229,-2.0322036581  
H,0,2.7952904058,1.6098024225,-2.1343180284  
C,0,4.5348660988,4.4628722352,-1.4849253286  
H,0,3.8451455538,6.0659712554,-0.2096439399  
H,0,4.9332145653,2.7196452264,-2.6955135768  
H,0,5.4905251496,4.9416592231,-1.711562617







## 6 Referenzen

- [1] A. Michaelis, G. Schoeter, *Ber. Dtsch. Chem. Ges.* **1894**, 27, 490–497.
- [2] E. Niecke, R. Rüger, W. W. Schoeller, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1981**, 20, 1034–1036.
- [3] N. Burford, D. J. Leblanc, *Inorg. Chem.* **1999**, 38, 2248–2249.
- [4] M. S. Balakrishna, D. J. Eisler, T. Chivers, *Chem. Soc. Rev.* **2007**, 36, 650–664.
- [5] E. Niecke, R. Rüger, B. Krebs, M. Dartmann, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1983**, 22, 552–553.
- [6] U. Warringa, H. Voelker, H. W. Roesky, Y. Shermolovich, L. Markovski, I. Usón, M. Noltemeyer, H.-G. Schmidt, *J. Chem. Soc., Dalt. Trans.* **1995**, 7, 1951–1956.
- [7] N. Burford, J. C. Landry, M. J. Ferguson, R. McDonald, *Inorg. Chem.* **2005**, 44, 5897–5902.
- [8] N. Burford, K. D. Conroy, J. C. Landry, P. J. Ragogna, M. J. Ferguson, R. McDonald, *Inorg. Chem.* **2004**, 43, 8245–8251.
- [9] N. Burford, S. T. Cameron, K. D. Conroy, B. Ellis, M. Lumsden, C. L. B. Macdonald, R. McDonald, A. D. Phillips, P. J. Ragogna, R. W. Schurko, et al., *J. Am. Chem. Soc.* **2002**, 124, 14012–14013.
- [10] N. Burford, J. A. C. Clyburne, M. S. W. Chan, *Inorg. Chem.* **1997**, 36, 3204–3206.
- [11] N. Burford, J. A. C. Clyburne, D. Silvert, S. Warner, W. A. Whitla, K. V. Darvesh, *Inorg. Chem.* **1997**, 36, 482–484.
- [12] E. Niecke, M. Nieger, F. Reichert, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1988**, 27, 1715–1716.
- [13] R. Kuzora, *Synthese, Charakterisierung Und Reaktivität von Gruppe-15-Biradikaloiden Und Cyclo-Diphosphazenen*, Universität Rostock, **2013**.
- [14] D. Dubois, E. N. Duesler, R. T. Paine, *J. Chem. Soc.* **1984**, 4, 488–489.
- [15] T. Beweries, R. Kuzora, U. Rosenthal, A. Schulz, A. Villinger, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2011**, 50, 8974–8978.

- [16] W. Schlenk, M. Brauns, *Ber. Dtsch. Chem. Ges.* **1915**, *48*, 716–728.
- [17] W. Schlenk, M. Brauns, *Ber. Dtsch. Chem. Ges.* **1915**, *48*, 661–669.
- [18] M. Abe, *Chem. Rev.* **2013**, *113*, 7011–7088.
- [19] G. He, O. Shynkaruk, M. W. Lui, E. Rivard, *Chem. Rev.* **2014**, *114*, 7815–7880.
- [20] D. Herebian, K. E. Wieghardt, F. Neese, *J. Am. Chem. Soc.* **2003**, *125*, 10997–11005.
- [21] E. Miliordos, K. Ruedenberg, S. S. Xantheas, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, *52*, 5736–5739.
- [22] E. Niecke, A. Fuchs, F. Baumeister, M. Nieger, W. W. Schoeller, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1995**, *34*, 555–557.
- [23] D. Scheschkewitz, H. Amii, H. Gornitzka, W. W. Schoeller, D. Bourissou, G. Bertrand, *Science* **2002**, *295*, 1880–1881.
- [24] H. Amii, L. Vranicar, H. Gornitzka, D. Bourissou, G. Bertrand, *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, *126*, 1344–1345.
- [25] G. Fuks, N. Saffon, L. Maron, G. Bertrand, D. Bourissou, *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, *131*, 13681–13689.
- [26] H. Sugiyama, S. Ito, M. Yoshifuji, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2003**, *42*, 3802–3804.
- [27] C. Cui, M. Brynda, M. M. Olmstead, P. P. Power, *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, *126*, 6510–6511.
- [28] H. Cox, P. B. Hitchcock, M. F. Lappert, L. J.-M. Pierssens, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2004**, *43*, 4500–4504.
- [29] P. Henke, T. Pankewitz, W. Klopfer, F. Breher, H. Schnöckel, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2009**, *48*, 8141–8145.
- [30] K. Takeuchi, M. Ichinohe, A. Sekiguchi, *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 12478–12481.
- [31] Z. Li, X. Chen, D. M. Andrada, G. Frenking, Z. Benkö, Y. Li, J. R. Harmer, C. Su, H. Grützmacher, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*, 5744–5749.
- [32] D. Rottschäfer, B. Neumann, H. G. Stammler, R. S. Ghadwal, *Chem. Eur. J.* **2017**, *23*, 9044–9047.
- [33] A. Hinz, R. Kuzora, A. K. Rölke, A. Schulz, A. Villinger, R. Wustrack, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2016**, *2016*, 3611–3619.

- [34] S. Demeshko, C. Godemann, R. Kuzora, A. Schulz, A. Villinger, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, *52*, 2105–2108.
- [35] A. Hinz, A. Schulz, A. Villinger, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*, 668–672.
- [36] J. Bresien, A. Hinz, A. Schulz, A. Villinger, *Dalton Trans.* **2018**, *47*, 4433–4436.
- [37] A. Hinz, R. Kuzora, U. Rosenthal, A. Schulz, A. Villinger, *Chem. Eur. J.* **2014**, *20*, 14659–14673.
- [38] A. Hinz, A. Schulz, W. W. Seidel, A. Villinger, *Inorg. Chem.* **2014**, *53*, 11682–11690.
- [39] A. Brückner, A. Hinz, J. B. Priebe, A. Schulz, A. Villinger, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*, 7426–7430.
- [40] A. Hinz, A. Schulz, A. Villinger, *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 9953–9962.
- [41] A. Hinz, A. Schulz, A. Villinger, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*, 2776–2779.
- [42] A. Hinz, A. Schulz, A. Villinger, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 12214–12218.
- [43] A. Hinz, A. Schulz, A. Villinger, *Chem. Commun.* **2016**, *52*, 6328–6331.
- [44] Y. Horino, M. Kimura, S. Tanaka, T. Okajima, Y. Tamaru, *Chem. Eur. J.* **2003**, *9*, 2419–2438.
- [45] R. Huisgen, P. Otto, *Chem. Ber.* **1969**, *102*, 3475–3485.
- [46] H. Cong, D. Ledbetter, G. T. Rowe, J. P. Caradonna, J. A. Porco, *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *130*, 9214–9215.
- [47] W. Yueh, N. L. Bauld, *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2* **1996**, *8*, 1761–1766.
- [48] T. P. Lockhart, C. B. Mallon, R. G. Bergman, *J. Am. Chem. Soc.* **1980**, *102*, 5976–5978.
- [49] J. A. Hawari, P. S. Engel, D. Griller, *Int. J. Chem. Kinet.* **1985**, *17*, 1215–1219.
- [50] A. Schulz, *Dalton Trans.* **2018**, *47*, 12827–12837.
- [51] P. Pyykkö, M. Atsumi, *Chem. Eur. J.* **2009**, *15*, 12770–12779.
- [52] M. Mantina, A. C. Chamberlin, R. Valero, C. J. Cramer, D. G. Truhlar, *J. Phys. Chem. A* **2009**, *113*, 5806–5812.
- [53] D. Michalik, A. Schulz, A. Villinger, N. Weding, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2008**, *47*, 6465–6468.

- [54] R. Kuzora, A. Schulz, A. Villinger, R. Wustrack, *J. Chem. Soc. Dalton Trans.* **2009**, 9304–9311.
- [55] G. Maas, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2009**, *48*, 8186–8195.
- [56] H. Meier, K. -P Zeller, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1975**, *14*, 32–43.
- [57] G. M. M. Regitz, *Diazo Compounds*, Academic Press, New York, **1986**.
- [58] T. Y. M.P. Doyle, M.A. McKervey, *Modern Catalytic Methods for Organic Synthesis with Diazo Compounds*, Wiley, New York, **1998**.
- [59] H. Zollinger, *Diazo Chemistry I and II*, VCH, Weinheim, **1994**.
- [60] K. Forstinger, H. J. Metz, P. Koch, *Diazo Compounds and Diazo Reactions*, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, Germany, **2015**.
- [61] M. I. Javed, M. Brewer, *Org. Synth.* **2008**, *85*, 189.
- [62] P. Jutzi, C. Müller, A. Stammer, H.-G. Stammer, *Organometallics* **2000**, *19*, 1442–1444.
- [63] P. Felgenhauer, R. Labbow, A. Schulz, A. Villinger, *Inorg. Chem.* **2018**, *57*, 9348–9353.
- [64] A. Schulz, A. Villinger, *Chem. Eur. J.* **2010**, *16*, 7276–7281.
- [65] M. F. Ibad, P. Langer, F. Reiß, A. Schulz, A. Villinger, *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 17757–17768.
- [66] M. Lehmann, A. Schulz, A. Villinger, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2009**, *48*, 7444–7447.
- [67] F. Reiß, A. Schulz, A. Villinger, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2012**, 261–271.
- [68] M. F. Ibad, A. Schulz, A. Villinger, *Organometallics* **2019**, *38*, 1445–1458.
- [69] C. B. Fischer, S. Xu, H. Zipse, *Chem. Eur. J.* **2006**, *12*, 5779–5784.
- [70] S. Arlt, J. Harloff, A. Schulz, A. Stoffers, A. Villinger, *Inorg. Chem.* **2016**, *55*, 12321–12328.
- [71] W. L. F. Armarego, C. L. L. Chai, *Purification of Organic Chemicals*, Elsevier, **2009**.
- [72] F. Reiß, A. Schulz, A. Villinger, N. Weding, *Dalton Trans.* **2010**, 1–40.
- [73] G. M. Sheldrick, *Acta Crystallogr. Sect. A Found. Adv.* **2015**, *71*, 3–8.
- [74] G. M. Sheldrick, *Acta Crystallogr. Sect. C Struct. Chem.* **2015**, *71*, 3–8.

- [75] G. M. Sheldrick, *SADABS Version 2*, University of Göttingen, Germany, **2004**.
- [76] *Gaussian 09, Revision E.01*, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H. P. Hratchian, A. F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J. A. Montgomery Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, T. Keith, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J. M. Millam, M. Klene, J. E. Knox, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, V. G. Zakrzewski, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, S. Dapprich, A. D. Daniels, O. Farkas, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, J. Cioslowski, D. J. Fox, Gaussian, Inc., Wallingford CT, **2013**.
- [77] F. Neese, *Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Mol. Sci.* **2018**, 8, e1327.
- [78] E. D. Glendening, J. K. Badenhoop, A. E. Reed, J. E. Carpenter, J. A. Bohmann, C. M. Morales, C. R. Landis, F. Weinhold, *NBO 6.0*, Theoretical Chemistry Institute, University of Wisconsin, Madison, **2013**.
- [79] J. E. Carpenter, F. Weinhold, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **1988**, 169, 41–62.
- [80] F. Weinhold, J. E. Carpenter, *The Natural Bond Orbital Lewis Structure Concept for Molecules, Radicals, and Radical Ions*, Springer US, Boston, MA, **1988**.
- [81] F. Weinhold, C. R. Landis, *Valency and Bonding. A Natural Bond Orbital Donor-Acceptor Perspective*, Cambridge University Press, **2005**.
- [82] J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **1996**, 77, 3865–3868.
- [83] J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **1997**, 78, 1396–1396.
- [84] C. Adamo, V. Barone, *J. Chem. Phys.* **1999**, 110, 6158–6170.
- [85] F. Weigend, R. Ahlrichs, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2005**, 7, 3297.
- [86] I. M. Alecu, J. Zheng, Y. Zhao, D. G. Truhlar, *J. Chem. Theory Comput.* **2010**, 6, 2872–2887.
- [87] F. London, *J. Phys. le Radium* **1937**, 8, 397–409.

- [88] R. McWeeny, *Phys. Rev.* **1962**, *126*, 1028–1034.
- [89] R. Ditchfield, *Mol. Phys.* **1974**, *27*, 789–807.
- [90] K. Wolinski, J. F. Hinton, P. Pulay, *J. Am. Chem. Soc.* **1990**, *112*, 8251–8260.
- [91] J. R. Cheeseman, G. W. Trucks, T. A. Keith, M. J. Frisch, *J. Chem. Phys.* **1996**, *104*, 5497–5509.
- [92] C. J. Jameson, A. De Dios, A. Keith Jameson, *Chem. Phys. Lett.* **1990**, *167*, 575–582.
- [93] C. van Wüllen, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2000**, *2*, 2137–2144.