

وزارت علوم تحقیقات و فناوری
دانشگاه صنعتی شاهرود

حوزه معاونت پژوهشی و فناوری

گزارش پایانی
طرح پژوهشی

بررسی تأثیر گروه‌های الکترون دهنده و الکترون کشنده روی
واکنش پذیری یورازول‌ها با استفاده از محاسبات کامپیوتری

با کد ۲۲۰۹

اردیبهشت ۱۳۸۳

مجری: حسین نصر اصفهانی
عضو هیئت علمی دانشکده شیمی

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

این گزارش نتیجه طرح پژوهشی با عنوان: "بررسی تأثیر گروه‌های الکترون دهنده و الکترون کشنده روی واکنش پذیری یورازول‌ها با استفاده از محاسبات کامپیوتری" است که در تاریخ ۱۳۸۲/۸/۱۸ به تصویب شورای پژوهشی دانشگاه رسیده است.

چکیده

ساختار ترکیبات ۴،۲،۱-تری آزولیدین-۵،۳-دی اون (یورازول)، ۴-فنیل-۴،۲،۱-تری آزولیدین-۵،۳-دی اون (۴-آمینوفنیل یورازول)، ۴-آمینو-۴-فنیل-۴،۲،۱-تری آزولیدین-۵،۳-دی اون (۴-آمینوفنیل یورازول)، ۴-هیدروکسی-۴-فنیل-۴،۲،۱-تری آزولیدین-۵،۳-دی اون (۴-هیدروکسی فنیل یورازول)، ۴-نیترو-۴-فنیل-۴،۲،۱-تری آزولیدین-۵،۳-دی اون (۴-نیتروفنیل یورازول) و ۴-سیانو-۴-فنیل-۴،۲،۱-تری آزولیدین-۵،۳-دی اون (۴-سیانوفنیل یورازول) بدون هیچ محدودیت تقارنی توسط روش کوانتوم مکانیکی *ab initio* RHF و با مجموعه پایه‌های 6-31G** و 6-31G**++ به کمک نرم افزار Gaussian 98 بهینه شدند. یک مطالعه مقایسه‌ای روی اثر مجموعه پایه بر ساختارهای محاسبه شده انجام گرفت. این مطالعه نشان داد که حلقه یورازولی در هیچ کدام این مولکول‌ها مسطح نیست؛ بلکه نزدیک به مسطح بوده و در اصل دارای تقارن C_2 میباشد. ثانیاً مشخص شد که در تمام این مولکول‌ها حلقه یورازولی نسبت به حلقه فنیل واپیچیدگی دارد. این نتایج با مشاهدات تجربی در دسترس، توافق کامل دارد. همچنین مقادیر بارهای اتمی در ساختارهای بهینه شده این ترکیبات، محاسبه شد و مشخص گردید که بارهای الکتریکی روی نیتروژن‌های ۱ و ۲ در اثر تعویض گروه‌های استخلافی روی موقعیت پارای ۴-فنیل یورازول، تغییر چندانی نمی‌کند. این به معنای یکسان بودن خاصیت واکنش پذیری این ترکیبات در مقابل الکتروفیل‌ها می‌باشد. این نتیجه نیز با مشاهدات تجربی همخوانی کامل دارد.

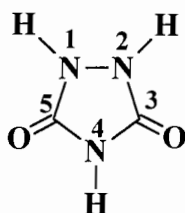
فهرست مطالب

عنوان.....	صفحه.....
بخش اول : مقدمه	
یورازول.....	۱
بخش دوم: بهینه سازی ساختارها	
۱-۲ فنیل یورازول.....	۹
۲-۲ آمینوفنیل یورازول.....	۲۱
۳-۲ هیدروکسی فنیل یورازول.....	۳۶
۴-۲ سیانوفنیل یورازول.....	۵۰
۵-۲ نیتروفنیل یورازول.....	۶۴
بخش سوم: بحث و نتیجه گیری	
مقایسه داده‌ها و نتیجه گیری.....	۷۹
مراجع.....	۸۵

مقدمه

یورازول

یورازول ترکیب حلقوی پنج عضوی است که سه عضو آن نیتروژن و دو عضو غیر مجاور آن گروه کربونیل می باشد. نام آیوپاک این ترکیب، ۱،۲،۴-تری آزولیدین-۳،۵-دی اون است.

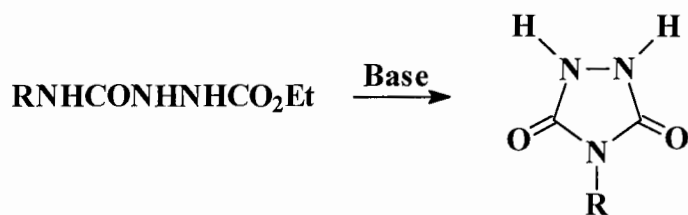
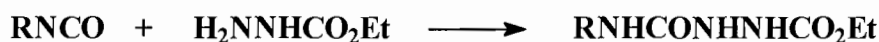


مشتقات یورازول، ترکیباتی هستند که در آن ها یک، دو یا هر سه هیدروژن با گروه یا گروه های استخلافی جایگزین شده باشد.

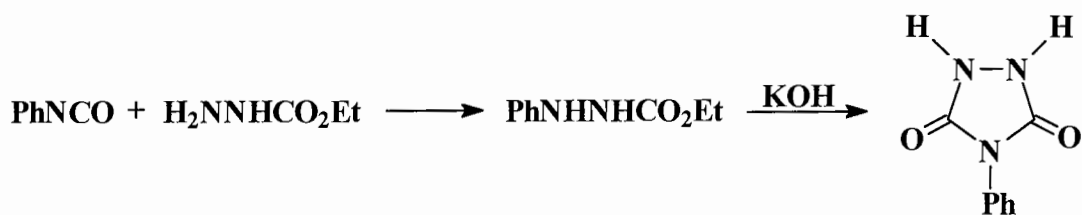
روش های عمده تهیه این ترکیبات به صورت زیر می باشد:

برای یورازول های استخلاف شده در موقعیت ۴:

الف) واکنش اتیل کربازات با ایزوسیانات ها و سپس واکنش بسته شدن حلقه روی سمی کاربازاید حاصله:

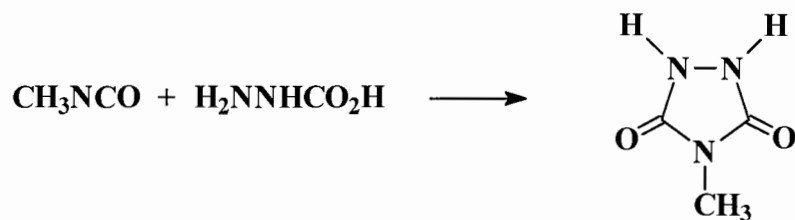


Cookson و همکارانش با استفاده از این روش، ۴-فنیل یورازول را در سال ۱۹۷۲ تهیه کردند^۱:

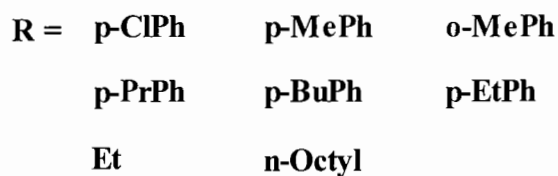
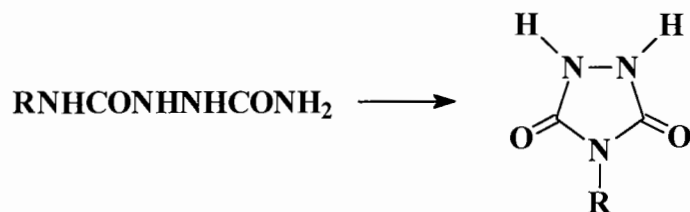


همچنین Giesecke و همکارانش در سال ۱۹۸۲ با استفاده از همین روش موفق به تهیه ۴-متیل

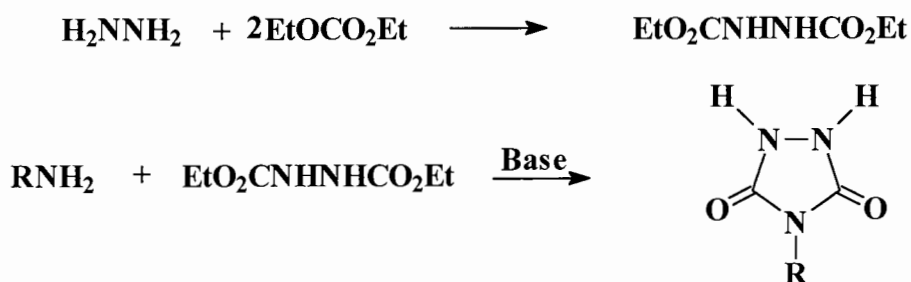
یورازول شدند^۲:



این نوع واکنش، با استفاده از هیدرازین کرآامید به جای اتیل کرآازات نیز می‌تواند صورت گیرد^۳:

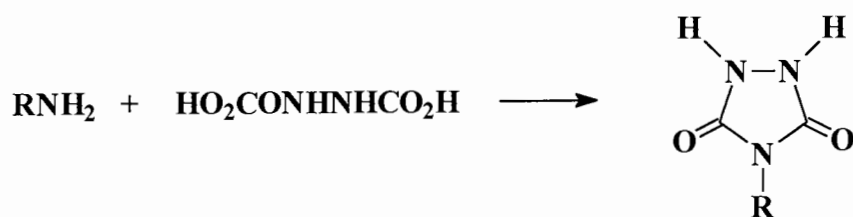


ب) واکنش آمین‌های نوع اول با دی‌اتیل هیدرازین دی‌کرآوکسیلات

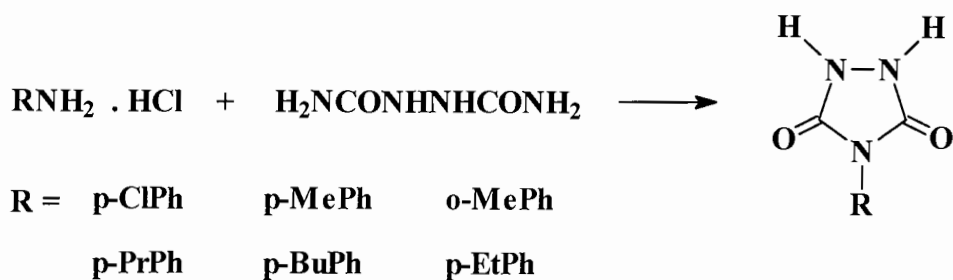


تهیه یورازول‌ها استخلاف شده در موقعیت ۴، با استفاده از مشتق هیدرازین دی‌کرآوکسیلیک‌اسید

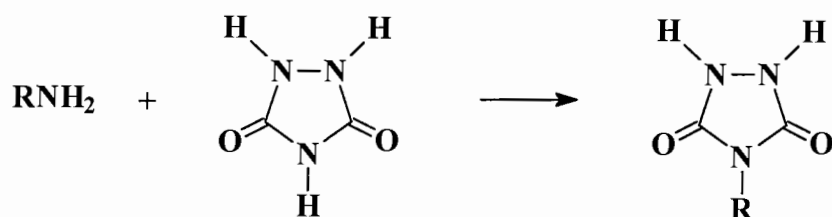
نیز گزارش شده است^۲:



واکنش هیدرازین دی‌کرآامید با آمین‌های نوع اول نیز منجر به تهیه این مشتقات می‌شود^۴:



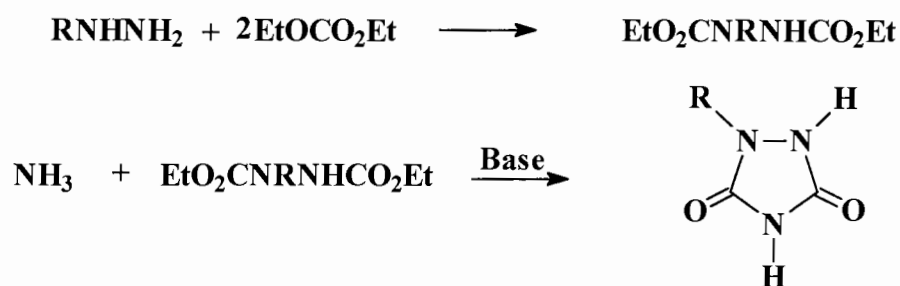
ج) واکنش آمین‌های نوع اول با یورازول:



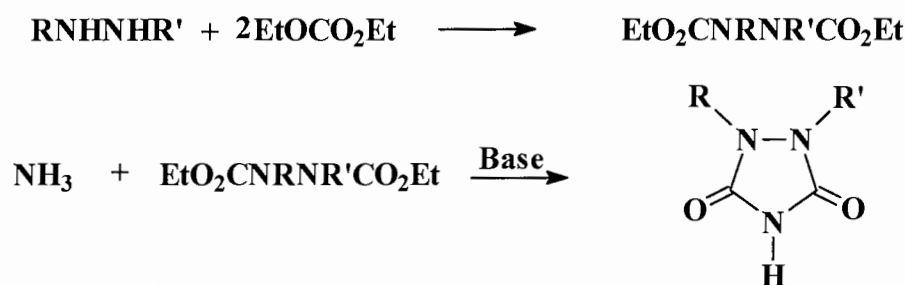
برای یورازول‌های استخلاف شده در موقعیت ۱:

برای یورازول‌های استخلاف شده در موقعیت ۱ استخلاف را روی هیدرازین قرار داده و مانند

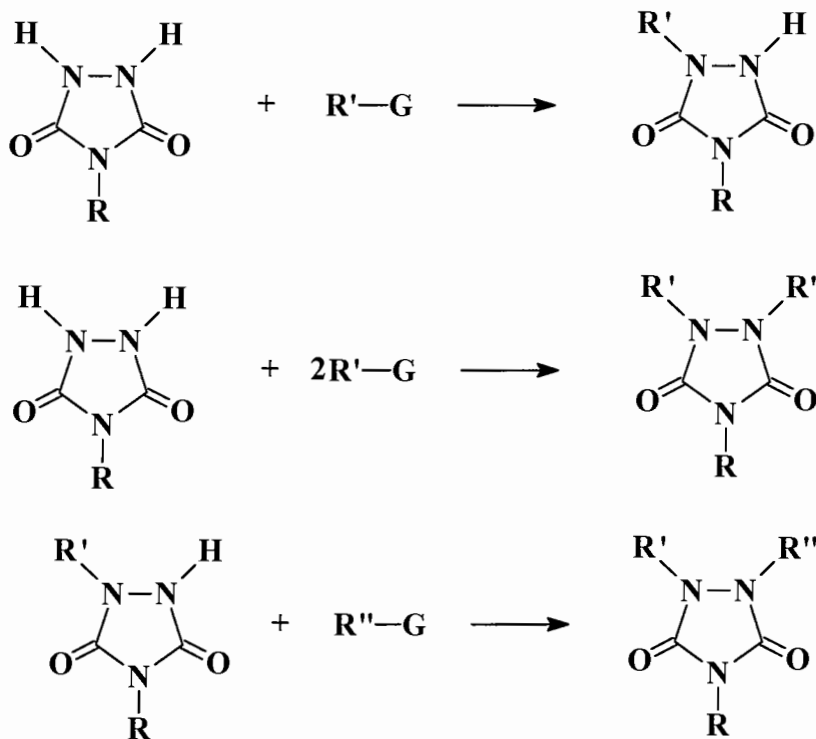
روش (ب) عمل می‌کنند:



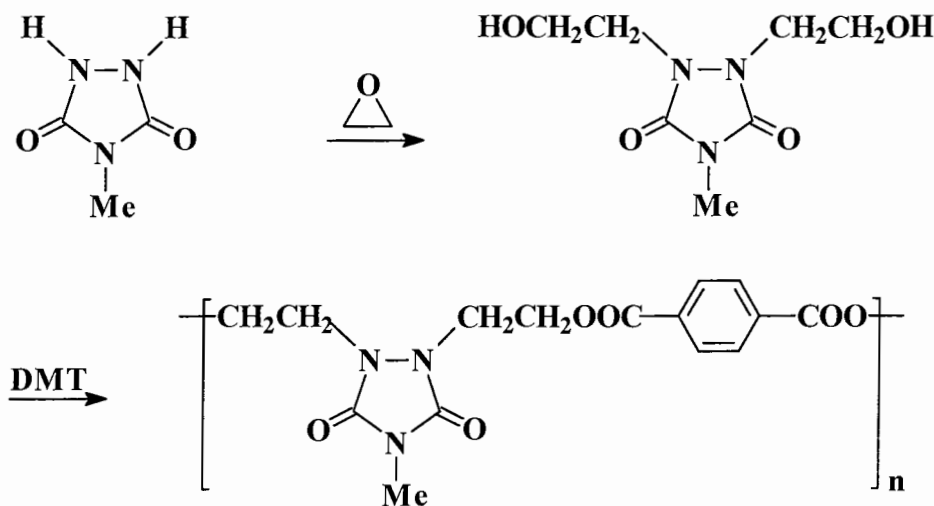
برای یورازول‌های استخلاف شده در موقعیت‌های ۱ و ۲ نیز مانند همین روش عمل می‌کنند:



اما موقعی که استخلاف‌ها روی موقعیت‌های ۱ و ۴ یا ۱، ۲ و ۴ باشد، ابتدا یورازول استخلاف شده در موقعیت ۴ را به روش‌های ۱ یا ۲ تهیه کرده، سپس آن را در یک واکنش شیمیایی وارد می‌کنند تا به عنوان نوکلئوفیل، از موقعیت ۱ و ۲ با یک الکتروفیل تشکیل پیوند دهد:

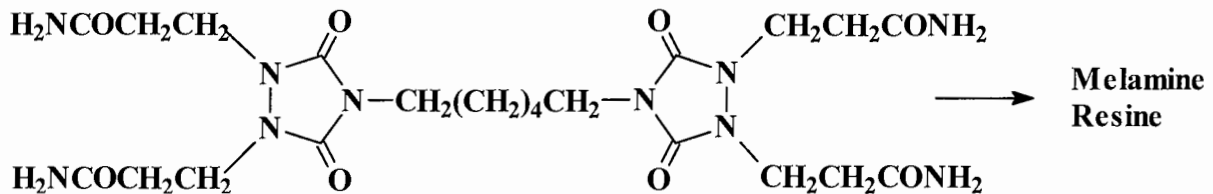
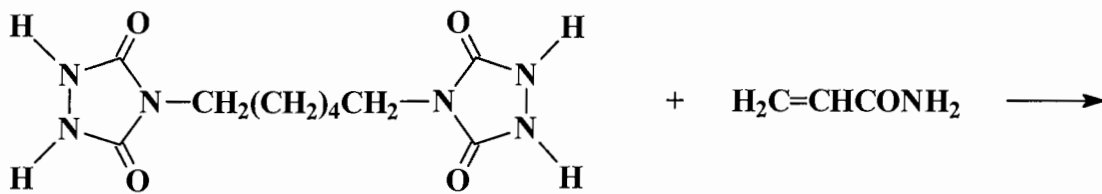
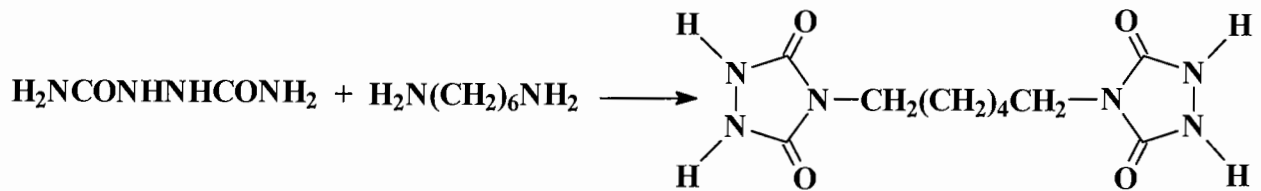


علت این واکنش یورازول‌های استخلاف شده در موقعیت ۴، خاصیت نوکلئوفیلی خوب نیتروژن‌های ۱ و ۲ به دلیل اثر آلفا می‌باشد که مشتقات بسیار مفیدی از یورازول‌ها را ایجاد می‌کند. همچنین به دلیل دو عاملی بودن یورازول‌های استخلاف شده در موقعیت ۴، از این ترکیبات جهت تهیه پلی‌مرهای تراکمی استفاده می‌شود.^۲



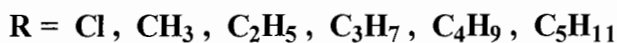
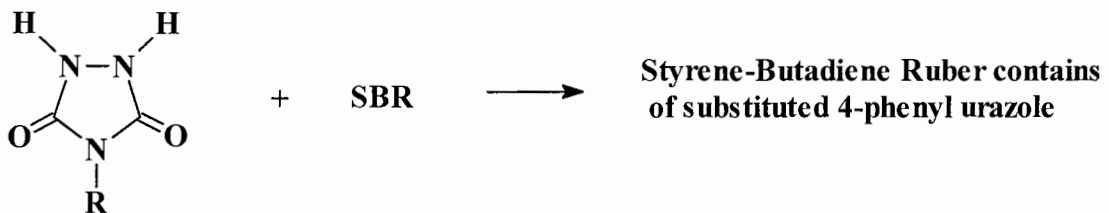
از این نوع واکنش، علاوه بر تهیه پلیمرهای خطی در تهیه رزین‌های ملامین نیز استفاده شده

است:



افزایش استحکام لاستیک استایرن- بوتادی‌ان، در اثر واکنش با مشتقات یورازول مثالی دیگر از

واکنش‌های یورازول می‌باشد^۱:

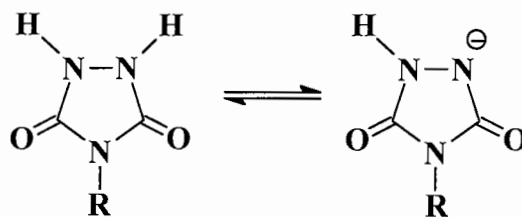


میزان واکنش پذیری یورازول‌های استخلاف شده در موقعیت ۴، در اتم‌های نیتروژن ۱ و ۲ به

میزان تمرکز بار منفی روی این دو اتم بستگی دارد. از آن جا که جفت الکترون موجود روی این دو

اتم می‌توانند در رزونانس با گروه کربونیل مجاور خود در آیند، هیدروژن موجود روی آن‌ها می‌تواند

خاصیت اسیدی در حد اسید های کربوکسیلیک از خود نشان دهند. در واقع، در محلول واکنش، یک تعادل اسید-باز را به صورت زیر خواهیم داشت^۷:



که در این صورت، خاصیت هسته دوستی اتم نیتروژن زیادتر خواهد شد. از طرف دیگر، جفت الکترون موجود روی نیتروژن شماره ۴ نیز می تواند در رزونانس با هر یک از گروه های کربونیل در آید؛ که این موضوع باعث کاهش سهم رزونانس جفت الکترون های موجود روی نیتروژن های ۱ و ۲ خواهد شد.

شیمی محاسباتی می تواند ساختارهای شیمیایی و واکنش های آنها را بر مبنای همه یا بخشی از قوانین فیزیکی شبیه سازی کند. این روش به شیمیست ها این امکان را می دهد که پدیده های شیمیایی را به جای آن که در آزمایشگاه به طور تجربی آزمایش کنند، به وسیله انجام محاسبات توسط رایانه مطالعه نمایند. حتی برخی از این روش های محاسباتی نه تنها برای مولکول های پایدار، بلکه برای حد واسطه های ناپایدار و حالت های گذار نیز کاربرد دارد. پس این روش ها می توانند اطلاعاتی را راجع به مولکول ها و واکنش هایی که مشاهده آنها غیر ممکن است فراهم کنند و به این ترتیب باید گفت شیمی محاسباتی می تواند هم یک زمینه پژوهشی مستقل و هم یک ضمیمه اساسی برای مطالعات تجربی باشد.

دو زمینه گسترده شیمی محاسباتی که به ساختار مولکول های واکنش پذیر آنها اختصاص دارد

عبارتند از:

۱- Molecular Mechanics

۲- Electronic structure theory

هر دو این ها محاسبات اساسی مشابهی را از قبیل بهینه کردن هندسه مولکول، محاسبه انرژی به

ازای ساختار مولکولی مشخص؛ محاسبه فرکانس های ارتعاشی مولکول ها و ... انجام می دهند.

روش‌های مکانیک مولکولی در برنامه‌های رایانه‌ای مختلف مثل Sybyl، Hyperchem و Quantum در دسترس است.

روش‌های ساختار الکترونی از طریق برنامه‌های 98 Gaussian، Hyperchem، MOPAC و AMPAC در دسترس است.

تمام روش‌های ساختار الکترونی، قوانین مکانیک کوانتوم را به عنوان مبنای محاسبات به کار می‌گیرند. حالت‌های مکانیک کوانتومی و انرژی وابسته به آن‌ها می‌تواند از طریق حل معادله شرودینگر به دست آید. اما برای کوچک‌ترین و متقارن‌ترین مولکول‌ها، حل دقیق معادله شرودینگر امکان‌پذیر نیست. روش‌های ساختار الکترونی با به کارگیری تقریب‌های ریاضی مختلف به حل معادله شرودینگر می‌پردازند.

سه دسته اصلی روش‌های ساختار الکترونی به شرح زیر می‌باشد:

۱- روش‌های نیمه تجربی مثل AM1، MNDO، PM3، MINDO و ... که در نرم افزارهای گفته شده در بالا وجود دارند می‌توانند با به کارگیری پارامترهایی که از داده‌های تجربی استخراج می‌شود محاسبات را ساده کنند. در حقیقت این روش‌ها یک فرم تقریبی از معادله شرودینگر را حل می‌کنند که به حضور پارامترهای مناسب موجود برای سیستم شیمیایی مورد مطالعه وابسته است.

۲- روش‌های *ab initio* این روش‌ها بر خلاف روش‌های قبلی، هیچ پارامتر تجربی را در محاسبات به کار نمی‌برند و به جای آن، محاسبات آن‌ها منحصراً بر مبنای قوانین مکانیک کوانتوم است. در این روش‌ها معادله شرودینگر را با به کارگیری یک سری از تقریب‌های سخت ریاضی حل می‌کنند. برخی از این روش‌ها عبارتند از RHF، UHF، MP2، MP3، MP4 و ... که در نرم افزار Gaussian وجود دارند.

دو روش فوق از نظر قیمت و صحت نتایج تفاوت زیادی دارند. محاسبات نیمه تجربی تقریباً ارزان هستند و توصیف کیفی قابل قبول از سیستم مولکولی به دست می‌دهند؛ و برای بعضی از سیستم‌ها با انتخاب پارامترهای مناسب می‌توان انرژی و ساختار مولکولی را با صحت نسبتاً خوبی پیش‌بینی کرد.

بهینه سازی ساختارها

بر عکس، محاسبات *ab initio* گران هستند و توصیف کمی بسیار عالی برای دامنه وسیعی از سیستم‌های مولکولی (حتی مولکول‌های بسیار بزرگ و یا مولکول‌های دارای تعداد زیادی اتم سنگین) به دست می‌دهند.

۳- روش‌های تابعی چگالی (Density Functional Methods) از قبیل B3PW91, B3LYP و ... به جای محاسبه تابع موج، دانسیته احتمال الکترونی مولکول را محاسبه می‌کند و سپس از روی آن، انرژی‌های الکترونی و سایر محاسبات وابسته به آن را انجام می‌دهد. این روش‌ها نیز در نرم افزار Gaussian وجود دارند.

دو روش اخیر از نظر صحت محاسبات، هم ارز هستند اما زمان لازم برای محاسبات مختلف در روش تابع چگالی نسبت به *ab initio* کمتر است.^۹

ساختار شیمیایی یورازول‌های استخلاف شده، از طریق تجربی با استفاده از کریستالوگرافی پرتو X انجام شده و نتایج آن گزارش شده است^۹. همچنین ساختار شیمیایی و فرکانس‌های ارتعاشی یورازول مادر از طریق محاسبه انجام گرفته است^{۱۱}؛ اما تا کنون راجع به مطالعه ساختار و تمرکز بار یورازول‌های استخلاف شده در موقعیت ۴ گزارشی منتشر نشده است. هدف از این طرح تحقیقاتی، بهینه کردن ساختار شیمیایی ۴-فنیل یورازول‌های استخلاف شده در موقعیت پارای حلقة فنیل، و مشاهده تمرکز بار روی نیتروژن‌های ۱ و ۲ برای مقایسه تاثیر گروه‌های الکترون دهنده و الکترون کشنده بر واکنش پذیری این ترکیبات با استفاده از روش *ab initio* می‌باشد.

Phenyl urazol

```

*****
Gaussian 98: x86-win32-G98RevA.6 19-Oct-1998
              17-Aug-2003
*****
%CHK=phenyl urazol P1P1 StSt
Default route: MaxDisk=2000MB
-----
# RHF/6-31++G** opt
-----
1/18=20,38=1/1,3;
2/9=110,17=6,18=5/2;
3/5=1,6=6,7=1111,11=1,25=1,30=1/1,2,3;
4/7=1/1;
5/5=2,38=4/2;
6/7=2,8=2,9=2,10=2,28=1/1;
7//1,2,3,16;
1/18=20/3(1);
99//99;
2/9=110/2;
3/5=1,6=6,7=1111,11=1,25=1,30=1/1,2,3;
4/5=5,7=1,16=2/1;
5/5=2,38=4/2;
7//1,2,3,16;
1/18=20/3(-5);
2/9=110/2;
6/7=2,8=2,9=2,10=2,19=2,28=1/1;
99/9=1/99;
-----
opt of phenyl urazol 6-31++G**
-----
Symbolic Z-matrix:
Charge = 0 Multiplicity = 1
N
N          1      R2
C          1      R3          2      A3
H          1      R4          2      A4          3      D4          0
C          2      R5          1      A5          3      D5          0
H          2      R6          1      A6          5      D6          0
N          3      R7          1      A7          2      D7          0
O          3      R8          1      A8          7      D8          0
O          5      R9          2      A9          1      D9          0
C          7      R10         3      A10         1      D10         0
C          10     R11         7      A11         3      D11         0
C          10     R12         7      A12         11     D12         0
C          11     R13         10     A13         7      D13         0
H          11     R14         10     A14         13     D14         0
C          12     R15         10     A15         7      D15         0
H          12     R16         10     A16         15     D16         0
C          13     R17         11     A17         10     D17         0
H          13     R18         11     A18         17     D18         0
H          15     R19         12     A19         10     D19         0
H          17     R20         13     A20         11     D20         0
-----
Variables:
R2          1.40665
R3          1.38539
R4          0.99881
R5          1.38542
R6          0.99882
R7          1.38213
R8          1.187
R9          1.187
R10         1.42874
R11         1.38462

```



```

R12          1.38462
R13          1.38578
R14          1.07389
R15          1.38579
R16          1.07389
R17          1.38675
R18          1.075
R19          1.075
R20          1.07526
A3           107.6317
A4           113.25548
A5           107.62844
A6           113.25271
A7           106.06821
A8           125.97986
A9           125.97708
A10          124.72322
A11          119.5755
A12          119.57512
A13          119.41135
A14          120.0766
A15          119.41145
A16          120.0766
A17          120.21611
A18          119.56657
A19          119.5664
A20          120.05526
D4           -125.74202
D5           -14.94318
D6           -125.73181
D7            11.84608
D8           -179.67609
D9           -167.83114
D10          175.42278
D11          125.30467
D12          -179.99964
D13          179.62546
D14          -179.117
D15          179.62515
D16          -179.11739
D17            0.75177
D18          179.736
D19          -179.51227
D20          179.62088

```

Grad
 Berny optimization.
 Initialization pass.

```

-----
!   Initial Parameters   !
! (Angstroms and Degrees) !

```

```

-----
! Name  Definition          Value          Derivative Info.
!
-----
! R1    R(1,2)              1.4067        estimate D2E/DX2
!
! R2    R(1,3)              1.3854        estimate D2E/DX2
!
! R3    R(1,4)              0.9988        estimate D2E/DX2
!
! R4    R(2,5)              1.3854        estimate D2E/DX2
!

```

R5	R(2,6)	0.9988	estimate D2E/DX2
R6	R(3,7)	1.3821	estimate D2E/DX2
R7	R(3,8)	1.187	estimate D2E/DX2
R8	R(5,7)	1.3821	estimate D2E/DX2
R9	R(5,9)	1.187	estimate D2E/DX2
R10	R(7,10)	1.4287	estimate D2E/DX2
R11	R(10,11)	1.3846	estimate D2E/DX2
R12	R(10,12)	1.3846	estimate D2E/DX2
R13	R(11,13)	1.3858	estimate D2E/DX2
R14	R(11,14)	1.0739	estimate D2E/DX2
R15	R(12,15)	1.3858	estimate D2E/DX2
R16	R(12,16)	1.0739	estimate D2E/DX2
R17	R(13,17)	1.3868	estimate D2E/DX2
R18	R(13,18)	1.075	estimate D2E/DX2
R19	R(15,17)	1.3867	estimate D2E/DX2
R20	R(15,19)	1.075	estimate D2E/DX2
R21	R(17,20)	1.0753	estimate D2E/DX2
A1	A(2,1,3)	107.6317	estimate D2E/DX2
A2	A(2,1,4)	113.2555	estimate D2E/DX2
A3	A(3,1,4)	113.0711	estimate D2E/DX2
A4	A(1,2,5)	107.6284	estimate D2E/DX2
A5	A(1,2,6)	113.2527	estimate D2E/DX2
A6	A(5,2,6)	113.0666	estimate D2E/DX2
A7	A(1,3,7)	106.0682	estimate D2E/DX2
A8	A(1,3,8)	125.9799	estimate D2E/DX2
A9	A(7,3,8)	127.951	estimate D2E/DX2
A10	A(2,5,7)	106.0694	estimate D2E/DX2
A11	A(2,5,9)	125.9771	estimate D2E/DX2
A12	A(7,5,9)	127.9526	estimate D2E/DX2
A13	A(3,7,5)	110.5524	estimate D2E/DX2
A14	A(3,7,10)	124.7232	estimate D2E/DX2
A15	A(5,7,10)	124.7244	estimate D2E/DX2
A16	A(7,10,11)	119.5755	estimate D2E/DX2

A17	A(7,10,12)	119.5751	estimate D2E/DX2
A18	A(11,10,12)	120.8494	estimate D2E/DX2
A19	A(10,11,13)	119.4114	estimate D2E/DX2
A20	A(10,11,14)	120.0766	estimate D2E/DX2
A21	A(13,11,14)	120.5061	estimate D2E/DX2
A22	A(10,12,15)	119.4114	estimate D2E/DX2
A23	A(10,12,16)	120.0766	estimate D2E/DX2
A24	A(15,12,16)	120.506	estimate D2E/DX2
A25	A(11,13,17)	120.2161	estimate D2E/DX2
A26	A(11,13,18)	119.5666	estimate D2E/DX2
A27	A(17,13,18)	120.2168	estimate D2E/DX2
A28	A(12,15,17)	120.216	estimate D2E/DX2
A29	A(12,15,19)	119.5664	estimate D2E/DX2
A30	A(17,15,19)	120.217	estimate D2E/DX2
A31	A(13,17,15)	119.8892	estimate D2E/DX2
A32	A(13,17,20)	120.0553	estimate D2E/DX2
A33	A(15,17,20)	120.0555	estimate D2E/DX2
D1	D(3,1,2,5)	-14.9432	estimate D2E/DX2
D2	D(3,1,2,6)	-140.675	estimate D2E/DX2
D3	D(4,1,2,5)	-140.6852	estimate D2E/DX2
D4	D(4,1,2,6)	93.583	estimate D2E/DX2
D5	D(2,1,3,7)	11.8461	estimate D2E/DX2
D6	D(2,1,3,8)	-167.83	estimate D2E/DX2
D7	D(4,1,3,7)	137.6975	estimate D2E/DX2
D8	D(4,1,3,8)	-41.9786	estimate D2E/DX2
D9	D(1,2,5,7)	11.843	estimate D2E/DX2
D10	D(1,2,5,9)	-167.8311	estimate D2E/DX2
D11	D(6,2,5,7)	137.6852	estimate D2E/DX2
D12	D(6,2,5,9)	-41.9889	estimate D2E/DX2
D13	D(1,3,7,5)	-4.5821	estimate D2E/DX2
D14	D(1,3,7,10)	175.4228	estimate D2E/DX2
D15	D(8,3,7,5)	175.0855	estimate D2E/DX2
D16	D(8,3,7,10)	-4.9096	estimate D2E/DX2

D17	D(2,5,7,3)	-4.5775	estimate D2E/DX2
D18	D(2,5,7,10)	175.4176	estimate D2E/DX2
D19	D(9,5,7,3)	175.088	estimate D2E/DX2
D20	D(9,5,7,10)	-4.9169	estimate D2E/DX2
D21	D(3,7,10,11)	125.3047	estimate D2E/DX2
D22	D(3,7,10,12)	-54.695	estimate D2E/DX2
D23	D(5,7,10,11)	-54.6898	estimate D2E/DX2
D24	D(5,7,10,12)	125.3106	estimate D2E/DX2
D25	D(7,10,11,13)	179.6255	estimate D2E/DX2
D26	D(7,10,11,14)	0.5085	estimate D2E/DX2
D27	D(12,10,11,13)	-0.3749	estimate D2E/DX2
D28	D(12,10,11,14)	-179.4919	estimate D2E/DX2
D29	D(7,10,12,15)	179.6251	estimate D2E/DX2
D30	D(7,10,12,16)	0.5078	estimate D2E/DX2
D31	D(11,10,12,15)	-0.3745	estimate D2E/DX2
D32	D(11,10,12,16)	-179.4919	estimate D2E/DX2
D33	D(10,11,13,17)	0.7518	estimate D2E/DX2
D34	D(10,11,13,18)	-179.5122	estimate D2E/DX2
D35	D(14,11,13,17)	179.8649	estimate D2E/DX2
D36	D(14,11,13,18)	-0.3991	estimate D2E/DX2
D37	D(10,12,15,17)	0.7514	estimate D2E/DX2
D38	D(10,12,15,19)	-179.5123	estimate D2E/DX2
D39	D(16,12,15,17)	179.8649	estimate D2E/DX2
D40	D(16,12,15,19)	-0.3987	estimate D2E/DX2
D41	D(11,13,17,15)	-0.3791	estimate D2E/DX2
D42	D(11,13,17,20)	179.6209	estimate D2E/DX2
D43	D(18,13,17,15)	179.8866	estimate D2E/DX2
D44	D(18,13,17,20)	-0.1134	estimate D2E/DX2
D45	D(12,15,17,13)	-0.3788	estimate D2E/DX2
D46	D(12,15,17,20)	179.6212	estimate D2E/DX2
D47	D(19,15,17,13)	179.8866	estimate D2E/DX2
D48	D(19,15,17,20)	-0.1134	estimate D2E/DX2

--

Condensed to atoms (all electrons):

	1	2	3	4	5	6
1 N	7.511673	-0.458034	0.192593	0.354503	0.227724	-0.009118
2 N	-0.458034	7.511767	0.227687	-0.009089	0.192536	0.354538
3 C	0.192593	0.227687	4.978463	-0.059920	-0.328386	-0.013092
4 H	0.354503	-0.009089	-0.059920	0.365082	-0.013097	-0.003186
5 C	0.227724	0.192536	-0.328386	-0.013097	4.978611	-0.059938
6 H	-0.009118	0.354538	-0.013092	-0.003186	-0.059938	0.365091
7 N	-0.298355	-0.298466	0.170872	-0.001523	0.170815	-0.001516
8 O	-0.087020	0.008168	0.557797	-0.000949	0.028829	0.001002
9 O	0.008174	-0.087025	0.028828	0.001001	0.557819	-0.000951
10 C	-0.180866	-0.180877	-0.522287	-0.006990	-0.522367	-0.006997
11 C	-0.322836	0.377784	1.286852	0.006431	-0.864778	0.002672
12 C	0.377758	-0.322864	-0.864511	0.002660	1.287279	0.006420
13 C	-0.050732	0.073696	0.033192	0.000209	-0.528251	0.000621
14 H	-0.003182	0.000127	0.006180	0.000114	0.004699	-0.000486
15 C	0.073683	-0.050729	-0.528161	0.000620	0.033152	0.000208
16 H	0.000126	-0.003181	0.004701	-0.000486	0.006188	0.000114
17 C	0.004422	0.004420	0.078029	0.000787	0.078052	0.000787
18 H	0.000089	0.000055	-0.001044	-0.000021	-0.001192	-0.000002
19 H	0.000055	0.000090	-0.001192	-0.000002	-0.001045	-0.000021
20 H	0.000022	0.000022	-0.000015	0.000001	-0.000015	0.000001
	7	8	9	10	11	12
1 N	-0.298355	-0.087020	0.008174	-0.180866	-0.322836	0.377758
2 N	-0.298466	0.008168	-0.087025	-0.180877	0.377784	-0.322864
3 C	0.170872	0.557797	0.028828	-0.522287	1.286852	-0.864511
4 H	-0.001523	-0.000949	0.001001	-0.006990	0.006431	0.002660
5 C	0.170815	0.028829	0.557819	-0.522367	-0.864778	1.287279
6 H	-0.001516	0.001002	-0.000951	-0.006997	0.002672	0.006420
7 N	8.153748	-0.109644	-0.109647	-0.444312	0.085667	0.085739
8 O	-0.109644	8.191513	-0.000825	0.082587	0.038899	-0.058106
9 O	-0.109647	-0.000825	8.191501	0.082570	-0.058197	0.038989
10 C	-0.444312	0.082587	0.082570	26.485717	-9.326175	-9.328583
11 C	0.085667	0.038899	-0.058197	-9.326175	25.115974	-5.803628
12 C	0.085739	-0.058106	0.038989	-9.328583	-5.803628	25.118921
13 C	-0.043280	-0.014141	-0.059038	3.544832	-4.047300	-5.973199
14 H	-0.013795	-0.001302	-0.001448	-0.000025	0.348291	-0.081020
15 C	-0.043309	-0.059036	-0.014138	3.545065	-5.972328	-4.048166
16 H	-0.013789	-0.001447	-0.001302	-0.000068	-0.081017	0.348323
17 C	0.112908	0.009227	0.009226	-5.622712	4.498123	4.498689
18 H	-0.003171	0.000022	-0.000776	0.050306	0.024973	0.026470
19 H	-0.003172	-0.000777	0.000022	0.050328	0.026484	0.024946
20 H	0.000889	0.000076	0.000076	0.005803	-0.003583	-0.003579
	13	14	15	16	17	18
1 N	-0.050732	-0.003182	0.073683	0.000126	0.004422	0.000089
2 N	0.073696	0.000127	-0.050729	-0.003181	0.004420	0.000055
3 C	0.033192	0.006180	-0.528161	0.004701	0.078029	-0.001044
4 H	0.000209	0.000114	0.000620	-0.000486	0.000787	-0.000021
5 C	-0.528251	0.004699	0.033152	0.006188	0.078052	-0.001192
6 H	0.000621	-0.000486	0.000208	0.000114	0.000787	-0.000002
7 N	-0.043280	-0.013795	-0.043309	-0.013789	0.112908	-0.003171
8 O	-0.014141	-0.001302	-0.059036	-0.001447	0.009227	0.000022
9 O	-0.059038	-0.001448	-0.014138	-0.001302	0.009226	-0.000776
10 C	3.544832	-0.000025	3.545065	-0.000068	-5.622712	0.050306
11 C	-4.047300	0.348291	-5.972328	-0.081017	4.498123	0.024973
12 C	-5.973199	-0.081020	-4.048166	0.348323	4.498689	0.026470
13 C	12.554668	0.036549	4.431012	-0.013703	-3.972021	0.194689
14 H	0.036549	0.513507	-0.013693	-0.004075	0.020210	0.002086
15 C	4.431012	-0.013693	12.554467	0.036538	-3.972065	-0.006973
16 H	-0.013703	-0.004075	0.036538	0.513508	0.020219	0.000647
17 C	-3.972021	0.020210	-3.972065	0.020219	9.890428	0.058411
18 H	0.194689	0.002086	-0.006973	0.000647	0.058411	0.504985
19 H	-0.006974	0.000647	0.194688	0.002085	0.058405	-0.002872
20 H	0.062995	-0.002493	0.062996	-0.002493	0.212115	0.006084

13

		19	20
1	N	0.000055	0.000022
2	N	0.000090	0.000022
3	C	-0.001192	-0.000015
4	H	-0.000002	0.000001
5	C	-0.001045	-0.000015
6	H	-0.000021	0.000001
7	N	-0.003172	0.000889
8	O	-0.000777	0.000076
9	O	0.000022	0.000076
10	C	0.050328	0.005803
11	C	0.026484	-0.003583
12	C	0.024946	-0.003579
13	C	-0.006974	0.062995
14	H	0.000647	-0.002493
15	C	0.194688	0.062996
16	H	0.002085	-0.002493
17	C	0.058405	0.212115
18	H	-0.002872	0.006084
19	H	0.504985	0.006085
20	H	0.006085	0.509383

Item	Value	Threshold	Converged?
Maximum Force	0.000046	0.000450	YES
RMS Force	0.000010	0.000300	YES
Maximum Displacement	0.001266	0.001800	YES
RMS Displacement	0.000355	0.001200	YES

Predicted change in Energy=-3.739066D-08

Optimization completed.

-- Stationary point found.

 ! Optimized Parameters !
 ! (Angstroms and Degrees) !

Name	Definition	value	Derivative Info.
R1	R(1,2)	1.4067	-DE/DX = 0.
R2	R(1,3)	1.3854	-DE/DX = 0.
R3	R(1,4)	0.9988	-DE/DX = 0.
R4	R(2,5)	1.3854	-DE/DX = 0.
R5	R(2,6)	0.9988	-DE/DX = 0.
R6	R(3,7)	1.3821	-DE/DX = 0.
R7	R(3,8)	1.187	-DE/DX = 0.
R8	R(5,7)	1.3821	-DE/DX = 0.
R9	R(5,9)	1.187	-DE/DX = 0.
R10	R(7,10)	1.4287	-DE/DX = 0.
R11	R(10,11)	1.3846	-DE/DX = 0.
R12	R(10,12)	1.3846	-DE/DX = 0.
R13	R(11,13)	1.3858	-DE/DX = 0.

! R14	R(11,14)	1.0739	-DE/DX =	0.
! R15	R(12,15)	1.3858	-DE/DX =	0.
! R16	R(12,16)	1.0739	-DE/DX =	0.
! R17	R(13,17)	1.3868	-DE/DX =	0.
! R18	R(13,18)	1.075	-DE/DX =	0.
! R19	R(15,17)	1.3867	-DE/DX =	0.
! R20	R(15,19)	1.075	-DE/DX =	0.
! R21	R(17,20)	1.0753	-DE/DX =	0.
! A1	A(2,1,3)	107.6317	-DE/DX =	0.
! A2	A(2,1,4)	113.2555	-DE/DX =	0.
! A3	A(3,1,4)	113.0711	-DE/DX =	0.
! A4	A(1,2,5)	107.6284	-DE/DX =	0.
! A5	A(1,2,6)	113.2527	-DE/DX =	0.
! A6	A(5,2,6)	113.0666	-DE/DX =	0.
! A7	A(1,3,7)	106.0682	-DE/DX =	0.
! A8	A(1,3,8)	125.9799	-DE/DX =	0.
! A9	A(7,3,8)	127.951	-DE/DX =	0.
! A10	A(2,5,7)	106.0694	-DE/DX =	0.
! A11	A(2,5,9)	125.9771	-DE/DX =	0.
! A12	A(7,5,9)	127.9526	-DE/DX =	0.
! A13	A(3,7,5)	110.5524	-DE/DX =	0.
! A14	A(3,7,10)	124.7232	-DE/DX =	0.
! A15	A(5,7,10)	124.7244	-DE/DX =	0.
! A16	A(7,10,11)	119.5755	-DE/DX =	0.
! A17	A(7,10,12)	119.5751	-DE/DX =	0.
! A18	A(11,10,12)	120.8494	-DE/DX =	0.
! A19	A(10,11,13)	119.4114	-DE/DX =	0.
! A20	A(10,11,14)	120.0766	-DE/DX =	0.
! A21	A(13,11,14)	120.5061	-DE/DX =	0.
! A22	A(10,12,15)	119.4114	-DE/DX =	0.
! A23	A(10,12,16)	120.0766	-DE/DX =	0.
! A24	A(15,12,16)	120.506	-DE/DX =	0.
! A25	A(11,13,17)	120.2161	-DE/DX =	0.

! A26	A(11,13,18)	119.5666	-DE/DX =	0.
! A27	A(17,13,18)	120.2168	-DE/DX =	0.
! A28	A(12,15,17)	120.216	-DE/DX =	0.
! A29	A(12,15,19)	119.5664	-DE/DX =	0.
! A30	A(17,15,19)	120.217	-DE/DX =	0.
! A31	A(13,17,15)	119.8892	-DE/DX =	0.
! A32	A(13,17,20)	120.0553	-DE/DX =	0.
! A33	A(15,17,20)	120.0555	-DE/DX =	0.
! D1	D(3,1,2,5)	-14.9432	-DE/DX =	0.
! D2	D(3,1,2,6)	-140.675	-DE/DX =	0.
! D3	D(4,1,2,5)	-140.6852	-DE/DX =	0.
! D4	D(4,1,2,6)	93.583	-DE/DX =	0.
! D5	D(2,1,3,7)	11.8461	-DE/DX =	0.
! D6	D(2,1,3,8)	-167.83	-DE/DX =	0.
! D7	D(4,1,3,7)	137.6975	-DE/DX =	0.
! D8	D(4,1,3,8)	-41.9786	-DE/DX =	0.
! D9	D(1,2,5,7)	11.843	-DE/DX =	0.
! D10	D(1,2,5,9)	-167.8311	-DE/DX =	0.
! D11	D(6,2,5,7)	137.6852	-DE/DX =	0.
! D12	D(6,2,5,9)	-41.9889	-DE/DX =	0.
! D13	D(1,3,7,5)	-4.5821	-DE/DX =	0.
! D14	D(1,3,7,10)	175.4228	-DE/DX =	0.
! D15	D(8,3,7,5)	175.0855	-DE/DX =	0.
! D16	D(8,3,7,10)	-4.9096	-DE/DX =	0.
! D17	D(2,5,7,3)	-4.5776	-DE/DX =	0.
! D18	D(2,5,7,10)	175.4176	-DE/DX =	0.
! D19	D(9,5,7,3)	175.088	-DE/DX =	0.
! D20	D(9,5,7,10)	-4.9169	-DE/DX =	0.
! D21	D(3,7,10,11)	125.3047	-DE/DX =	0.
! D22	D(3,7,10,12)	-54.695	-DE/DX =	0.
! D23	D(5,7,10,11)	-54.6898	-DE/DX =	0.
! D24	D(5,7,10,12)	125.3106	-DE/DX =	0.
! D25	D(7,10,11,13)	179.6255	-DE/DX =	0.

! D26	D(7,10,11,14)	0.5085	-DE/DX =	0.
! D27	D(12,10,11,13)	-0.3749	-DE/DX =	0.
! D28	D(12,10,11,14)	-179.4919	-DE/DX =	0.
! D29	D(7,10,12,15)	179.6252	-DE/DX =	0.
! D30	D(7,10,12,16)	0.5078	-DE/DX =	0.
! D31	D(11,10,12,15)	-0.3745	-DE/DX =	0.
! D32	D(11,10,12,16)	-179.4919	-DE/DX =	0.
! D33	D(10,11,13,17)	0.7518	-DE/DX =	0.
! D34	D(10,11,13,18)	-179.5122	-DE/DX =	0.
! D35	D(14,11,13,17)	179.8649	-DE/DX =	0.
! D36	D(14,11,13,18)	-0.3991	-DE/DX =	0.
! D37	D(10,12,15,17)	0.7514	-DE/DX =	0.
! D38	D(10,12,15,19)	-179.5123	-DE/DX =	0.
! D39	D(16,12,15,17)	179.8649	-DE/DX =	0.
! D40	D(16,12,15,19)	-0.3987	-DE/DX =	0.
! D41	D(11,13,17,15)	-0.3791	-DE/DX =	0.
! D42	D(11,13,17,20)	179.6209	-DE/DX =	0.
! D43	D(18,13,17,15)	179.8866	-DE/DX =	0.
! D44	D(18,13,17,20)	-0.1134	-DE/DX =	0.
! D45	D(12,15,17,13)	-0.3788	-DE/DX =	0.
! D46	D(12,15,17,20)	179.6212	-DE/DX =	0.
! D47	D(19,15,17,13)	179.8866	-DE/DX =	0.
! D48	D(19,15,17,20)	-0.1134	-DE/DX =	0.

 Grad

Final structure in terms of initial Z-matrix:

N
 N,1,R2
 C,1,R3,2,A3
 H,1,R4,2,A4,3,D4,0
 C,2,R5,1,A5,3,D5,0
 H,2,R6,1,A6,5,D6,0
 N,3,R7,1,A7,2,D7,0
 O,3,R8,1,A8,7,D8,0
 O,5,R9,2,A9,1,D9,0
 C,7,R10,3,A10,1,D10,0
 C,10,R11,7,A11,3,D11,0
 C,10,R12,7,A12,11,D12,0
 C,11,R13,10,A13,7,D13,0
 H,11,R14,10,A14,13,D14,0

C,12,R15,10,A15,7,D15,0
H,12,R16,10,A16,15,D16,0
C,13,R17,11,A17,10,D17,0
H,13,R18,11,A18,17,D18,0
H,15,R19,12,A19,10,D19,0
H,17,R20,13,A20,11,D20,0

Variables:

R2=1.40665404
R3=1.38538588
R4=0.99881334
R5=1.38542069
R6=0.99881829
R7=1.38213034
R8=1.18700255
R9=1.18700237
R10=1.42874293
R11=1.38462226
R12=1.38461659
R13=1.3857817
R14=1.07388529
R15=1.38578665
R16=1.07388553
R17=1.38675082
R18=1.07500165
R19=1.07500166
R20=1.07525891
A3=107.63170311
A4=113.25547516
A5=107.6284446
A6=113.25270727
A7=106.06820546
A8=125.97986035
A9=125.97708041
A10=124.72320961
A11=119.57549699
A12=119.57512717
A13=119.41135002
A14=120.07659694
A15=119.41144859
A16=120.07660129
A17=120.21611358
A18=119.56657244
A19=119.56639737
A20=120.05526233
D4=-125.74202092
D5=-14.94318082
D6=-125.73180698
D7=11.84607876
D8=-179.67608681
D9=-167.8311396
D10=175.42278002
D11=125.30468186
D12=-179.99964989
D13=179.62545367
D14=-179.1169975
D15=179.62515285
D16=-179.11739278
D17=0.75176939
D18=179.73599829
D19=-179.51226812
D20=179.62087544
1|1|UNPC-UNK|FOpt|RHF|6-31++G(d,p)|C8H7N3O2|PCUSER|17-Aug-2003|0||# RH
F/6-31++G** OPT||opt of phenyl urazol 6-31++G**||0,1|N,-2.6744340427,1
.0861769667,0.3114765048|N,-2.8567894275,-0.3044476134,0.4191119043|C,
-1.310937116,1.3293570425,0.2793265724|H,-3.1473672453,1.6022492226,1.
023959277|C,-1.6496977964,-0.9109307185,0.1117057795|H,-3.6175748466,-

0.6460940604,-0.1305436494|N,-0.7073690321,0.0999609297,0.0933829066|O
,-0.7885580007,2.3887655574,0.3965814752|O,-1.4835615568,-2.067663441,
-0.0964835211|C,0.6953741329,-0.0982846207,-0.0918646973|C,1.378153220
1,-0.9695875804,0.7398940859|C,1.354529176,0.5833721435,-1.1008353541|
C,2.7371539263,-1.165247952,0.5522107897|H,0.8530009187,-1.4980508406,
1.5133094071|C,2.7166066581,0.3944827607,-1.2725047263|H,0.8143245948,
1.2623926734,-1.7335598295|C,3.4087766573,-0.4817472998,-0.4502001052|
H,3.2681670794,-1.8471234143,1.1915068344|H,3.2323308147,0.9284337526,
-2.0500351126|H,4.4644693336,-0.6309403677,-0.5896136095||Version=x86-
win32-G98RevA.6|HF=-620.1477477|RMSD=6.499e-009|RMSF=1.914e-005|Dipole
=-0.3905574,0.0511684,-0.0000727|PG=C01 [X(C8H7N3O2)]||@

Job cpu time: 0 days 1 hours 59 minutes 23.0 seconds.
File lengths (MBytes): RWF= 45 Int= 0 D2E= 0 Chk= 10 Scr= 1
Normal termination of Gaussian 98.

Gaussian 98: x86-win32-G98RevA.6 19-Oct-1998
22-Aug-2003

%CHK=phenyl urazol P1P1 StSt
Default route: MaxDisk=2000MB

RHF/6-31++G** Geom=checkpoint guess=read POP=NBO

Interatomic angles:

N2-N1-C3=107.6317	N2-N1-H4=113.2555	C3-N1-H4=113.0711
N1-N2-C5=107.6284	N1-N2-H6=113.2527	C5-N2-H6=113.0666
N1-C3-N7=106.0682	N1-C3-O8=125.9799	N7-C3-O8=127.951
N2-C5-O9=125.9771	C3-N7-C10=124.7232	N7-C10-C11=119.5755
N7-C10-C12=119.5751	C11-C10-C12=120.8494	C10-C11-C13=119.4114
C10-C11-H14=120.0766	C13-C11-H14=120.5061	C10-C12-C15=119.4114
C10-C12-H16=120.0766	C15-C12-H16=120.506	C11-C13-C17=120.2161
C11-C13-H18=119.5666	C17-C13-H18=120.2168	C12-C15-H19=119.5664
C13-C17-H20=120.0553		

Stoichiometry C8H7N3O2

Total atomic charges:

1	N	-0.340679
2	N	-0.340624
3	C	0.753415
4	H	0.363854
5	C	0.753365
6	H	0.363852
7	N	-0.396660
8	O	-0.584872
9	O	-0.584860
10	C	-1.704949
11	C	0.667692
12	C	0.667460
13	C	-0.223825
14	H	0.189111
15	C	-0.223832
16	H	0.189113
17	C	0.012338
18	H	0.147235
19	H	0.147235
20	H	0.145630

Sum of Mulliken charges= 0.00000

Aminophenylurazol

```
*****
Gaussian 98: x86-Win32-G98RevA.6 19-Oct-1998
              31-Aug-2003
*****
```

```
%CHK=aminophenylurazol
Default route: MaxDisk=2000MB
```

```
-----
# RHF/6-31++G** opt
-----
```

```
1/18=20,38=1/1,3;
2/9=110,17=6,18=5/2;
3/5=1,6=6,7=1111,11=1,25=1,30=1/1,2,3;
4/7=1/1;
5/5=2,38=4/2;
6/7=2,8=2,9=2,10=2,28=1/1;
7//1,2,3,16;
1/18=20/3(1);
99//99;
2/9=110/2;
3/5=1,6=6,7=1111,11=1,25=1,30=1/1,2,3;
4/5=5,7=1,16=2/1;
5/5=2,38=4/2;
7//1,2,3,16;
1/18=20/3(-5);
2/9=110/2;
6/7=2,8=2,9=2,10=2,19=2,28=1/1;
99/9=1/99;
-----
```

```
opt of Aminophenylurazol
-----
```

```
Symbolic Z-matrix:
```

```
Charge = 0 Multiplicity = 1
```

N							
N	1	R2					
C	1	R3	2	A3			
H	1	R4	2	A4	3	D4	0
C	2	R5	1	A5	3	D5	0
H	2	R6	1	A6	5	D6	0
N	3	R7	1	A7	2	D7	0
O	3	R8	1	A8	7	D8	0
O	5	R9	2	A9	1	D9	0
C	7	R10	3	A10	1	D10	0
C	10	R11	7	A11	3	D11	0
C	10	R12	7	A12	11	D12	0
C	11	R13	10	A13	7	D13	0
H	11	R14	10	A14	13	D14	0
C	12	R15	10	A15	7	D15	0
H	12	R16	10	A16	15	D16	0
C	13	R17	11	A17	10	D17	0
H	13	R18	11	A18	17	D18	0
H	15	R19	12	A19	10	D19	0
N	17	R20	13	A20	11	D20	0
H	20	R21	17	A21	13	D21	0
H	20	R22	17	A22	21	D22	0

```
variables:
```

R2	1.40758
R3	1.38687
R4	0.99844
R5	1.38687
R6	0.99844
R7	1.38024
R8	1.18609
R9	1.18609

R10	1.42776
R11	1.38347
R12	1.38347
R13	1.37915
R14	1.07472
R15	1.37915
R16	1.07472
R17	1.39645
R18	1.07583
R19	1.07583
R20	1.36908
R21	0.98961
R22	0.98961
A3	107.52736
A4	113.17479
A5	107.52738
A6	113.17474
A7	106.0219
A8	125.91921
A9	125.91921
A10	124.64808
A11	120.2648
A12	120.26483
A13	120.47394
A14	119.83084
A15	120.47394
A16	119.83084
A17	120.54738
A18	119.68719
A19	119.6872
A20	120.76021
A21	120.97858
A22	120.97858
D4	-125.47808
D5	-15.45302
D6	-125.47809
D7	12.25941
D8	179.96822
D9	-167.77157
D10	175.2573
D11	119.97472
D12	180.
D13	179.59363
D14	-179.29801
D15	179.59386
D16	-179.29816
D17	0.81426
D18	179.72324
D19	-179.46223
D20	179.59413
D21	-179.83945
D22	-179.97534

Grad
 Berny optimization.
 Initialization pass.

 ! Initial Parameters !
 ! (Angstroms and Degrees) !

! Name	Definition	Value	Derivative Info.
--------	------------	-------	------------------

!

 --

R1	R(1,2)	1.4076	estimate D2E/DX2
R2	R(1,3)	1.3869	estimate D2E/DX2
R3	R(1,4)	0.9984	estimate D2E/DX2
R4	R(2,5)	1.3869	estimate D2E/DX2
R5	R(2,6)	0.9984	estimate D2E/DX2
R6	R(3,7)	1.3802	estimate D2E/DX2
R7	R(3,8)	1.1861	estimate D2E/DX2
R8	R(5,7)	1.3802	estimate D2E/DX2
R9	R(5,9)	1.1861	estimate D2E/DX2
R10	R(7,10)	1.4278	estimate D2E/DX2
R11	R(10,11)	1.3835	estimate D2E/DX2
R12	R(10,12)	1.3835	estimate D2E/DX2
R13	R(11,13)	1.3791	estimate D2E/DX2
R14	R(11,14)	1.0747	estimate D2E/DX2
R15	R(12,15)	1.3791	estimate D2E/DX2
R16	R(12,16)	1.0747	estimate D2E/DX2
R17	R(13,17)	1.3964	estimate D2E/DX2
R18	R(13,18)	1.0758	estimate D2E/DX2
R19	R(15,17)	1.3964	estimate D2E/DX2
R20	R(15,19)	1.0758	estimate D2E/DX2
R21	R(17,20)	1.3691	estimate D2E/DX2
R22	R(20,21)	0.9896	estimate D2E/DX2
R23	R(20,22)	0.9896	estimate D2E/DX2
A1	A(2,1,3)	107.5274	estimate D2E/DX2
A2	A(2,1,4)	113.1748	estimate D2E/DX2
A3	A(3,1,4)	112.9713	estimate D2E/DX2
A4	A(1,2,5)	107.5274	estimate D2E/DX2
A5	A(1,2,6)	113.1747	estimate D2E/DX2
A6	A(5,2,6)	112.9713	estimate D2E/DX2
A7	A(1,3,7)	106.0219	estimate D2E/DX2
A8	A(1,3,8)	125.9192	estimate D2E/DX2
A9	A(7,3,8)	128.0589	estimate D2E/DX2
A10	A(2,5,7)	106.0219	estimate D2E/DX2

A11	A(2, 5, 9)	125.9192	estimate D2E/DX2
A12	A(7, 5, 9)	128.0589	estimate D2E/DX2
A13	A(3, 7, 5)	110.7039	estimate D2E/DX2
A14	A(3, 7, 10)	124.6481	estimate D2E/DX2
A15	A(5, 7, 10)	124.6481	estimate D2E/DX2
A16	A(7, 10, 11)	120.2648	estimate D2E/DX2
A17	A(7, 10, 12)	120.2648	estimate D2E/DX2
A18	A(11, 10, 12)	119.4704	estimate D2E/DX2
A19	A(10, 11, 13)	120.4739	estimate D2E/DX2
A20	A(10, 11, 14)	119.8308	estimate D2E/DX2
A21	A(13, 11, 14)	119.6915	estimate D2E/DX2
A22	A(10, 12, 15)	120.4739	estimate D2E/DX2
A23	A(10, 12, 16)	119.8308	estimate D2E/DX2
A24	A(15, 12, 16)	119.6915	estimate D2E/DX2
A25	A(11, 13, 17)	120.5474	estimate D2E/DX2
A26	A(11, 13, 18)	119.6872	estimate D2E/DX2
A27	A(17, 13, 18)	119.7649	estimate D2E/DX2
A28	A(12, 15, 17)	120.5474	estimate D2E/DX2
A29	A(12, 15, 19)	119.6872	estimate D2E/DX2
A30	A(17, 15, 19)	119.7649	estimate D2E/DX2
A31	A(13, 17, 15)	118.4796	estimate D2E/DX2
A32	A(13, 17, 20)	120.7602	estimate D2E/DX2
A33	A(15, 17, 20)	120.7602	estimate D2E/DX2
A34	A(17, 20, 21)	120.9786	estimate D2E/DX2
A35	A(17, 20, 22)	120.9786	estimate D2E/DX2
A36	A(21, 20, 22)	118.0428	estimate D2E/DX2
D1	D(3, 1, 2, 5)	-15.453	estimate D2E/DX2
D2	D(3, 1, 2, 6)	-140.9311	estimate D2E/DX2
D3	D(4, 1, 2, 5)	-140.9311	estimate D2E/DX2
D4	D(4, 1, 2, 6)	93.5908	estimate D2E/DX2
D5	D(2, 1, 3, 7)	12.2594	estimate D2E/DX2
D6	D(2, 1, 3, 8)	-167.7724	estimate D2E/DX2
D7	D(4, 1, 3, 7)	137.8589	estimate D2E/DX2

D8	D(4,1,3,8)	-42.1729	estimate D2E/DX2
D9	D(1,2,5,7)	12.2589	estimate D2E/DX2
D10	D(1,2,5,9)	-167.7716	estimate D2E/DX2
D11	D(6,2,5,7)	137.8583	estimate D2E/DX2
D12	D(6,2,5,9)	-42.1721	estimate D2E/DX2
D13	D(1,3,7,5)	-4.7428	estimate D2E/DX2
D14	D(1,3,7,10)	175.2573	estimate D2E/DX2
D15	D(8,3,7,5)	175.2899	estimate D2E/DX2
D16	D(8,3,7,10)	-4.71	estimate D2E/DX2
D17	D(2,5,7,3)	-4.7418	estimate D2E/DX2
D18	D(2,5,7,10)	175.2581	estimate D2E/DX2
D19	D(9,5,7,3)	175.2895	estimate D2E/DX2
D20	D(9,5,7,10)	-4.7106	estimate D2E/DX2
D21	D(3,7,10,11)	119.9747	estimate D2E/DX2
D22	D(3,7,10,12)	-60.0253	estimate D2E/DX2
D23	D(5,7,10,11)	-60.0252	estimate D2E/DX2
D24	D(5,7,10,12)	119.9748	estimate D2E/DX2
D25	D(7,10,11,13)	179.5936	estimate D2E/DX2
D26	D(7,10,11,14)	0.2956	estimate D2E/DX2
D27	D(12,10,11,13)	-0.4064	estimate D2E/DX2
D28	D(12,10,11,14)	-179.7044	estimate D2E/DX2
D29	D(7,10,12,15)	179.5939	estimate D2E/DX2
D30	D(7,10,12,16)	0.2957	estimate D2E/DX2
D31	D(11,10,12,15)	-0.4061	estimate D2E/DX2
D32	D(11,10,12,16)	-179.7043	estimate D2E/DX2
D33	D(10,11,13,17)	0.8143	estimate D2E/DX2
D34	D(10,11,13,18)	-179.4625	estimate D2E/DX2
D35	D(14,11,13,17)	-179.8868	estimate D2E/DX2
D36	D(14,11,13,18)	-0.1635	estimate D2E/DX2
D37	D(10,12,15,17)	0.8142	estimate D2E/DX2
D38	D(10,12,15,19)	-179.4622	estimate D2E/DX2
D39	D(16,12,15,17)	-179.8867	estimate D2E/DX2
D40	D(16,12,15,19)	-0.1631	estimate D2E/DX2

D41	D(11,13,17,15)	-0.4048	estimate D2E/DX2
D42	D(11,13,17,20)	179.5941	estimate D2E/DX2
D43	D(18,13,17,15)	179.8721	estimate D2E/DX2
D44	D(18,13,17,20)	-0.1289	estimate D2E/DX2
D45	D(12,15,17,13)	-0.4049	estimate D2E/DX2
D46	D(12,15,17,20)	179.5962	estimate D2E/DX2
D47	D(19,15,17,13)	179.8717	estimate D2E/DX2
D48	D(19,15,17,20)	-0.1272	estimate D2E/DX2
D49	D(13,17,20,21)	-179.8395	estimate D2E/DX2
D50	D(13,17,20,22)	0.1852	estimate D2E/DX2
D51	D(15,17,20,21)	0.1595	estimate D2E/DX2
D52	D(15,17,20,22)	-179.8159	estimate D2E/DX2

 Item value Threshold Converged?
 Maximum Force 0.000032 0.000450 YES
 RMS Force 0.000006 0.000300 YES
 Maximum Displacement 0.001750 0.001800 YES
 RMS Displacement 0.000377 0.001200 YES
 Predicted change in Energy=-2.605204D-08
 Optimization completed.
 -- Stationary point found.

 ! Optimized Parameters !
 ! (Angstroms and Degrees) !

Name	Definition	value	Derivative Info.
R1	R(1,2)	1.4078	-DE/DX = 0.
R2	R(1,3)	1.3872	-DE/DX = 0.
R3	R(1,4)	0.9988	-DE/DX = 0.
R4	R(2,5)	1.387	-DE/DX = 0.
R5	R(2,6)	0.9988	-DE/DX = 0.
R6	R(3,7)	1.3808	-DE/DX = 0.
R7	R(3,8)	1.187	-DE/DX = 0.
R8	R(5,7)	1.3805	-DE/DX = 0.
R9	R(5,9)	1.1873	-DE/DX = 0.
R10	R(7,10)	1.4287	-DE/DX = 0.

R11	R(10, 11)	1.3834	-DE/DX = 0.
R12	R(10, 12)	1.3835	-DE/DX = 0.
R13	R(11, 13)	1.3819	-DE/DX = 0.
R14	R(11, 14)	1.0751	-DE/DX = 0.
R15	R(12, 15)	1.3819	-DE/DX = 0.
R16	R(12, 16)	1.0751	-DE/DX = 0.
R17	R(13, 17)	1.3948	-DE/DX = 0.
R18	R(13, 18)	1.0758	-DE/DX = 0.
R19	R(15, 17)	1.3948	-DE/DX = 0.
R20	R(15, 19)	1.0758	-DE/DX = 0.
R21	R(17, 20)	1.3888	-DE/DX = 0.
R22	R(20, 21)	0.9954	-DE/DX = 0.
R23	R(20, 22)	0.9954	-DE/DX = 0.
A1	A(2, 1, 3)	107.5565	-DE/DX = 0.
A2	A(2, 1, 4)	113.1183	-DE/DX = 0.
A3	A(3, 1, 4)	112.9765	-DE/DX = 0.
A4	A(1, 2, 5)	107.555	-DE/DX = 0.
A5	A(1, 2, 6)	113.1234	-DE/DX = 0.
A6	A(5, 2, 6)	112.9927	-DE/DX = 0.
A7	A(1, 3, 7)	106.0587	-DE/DX = 0.
A8	A(1, 3, 8)	125.9487	-DE/DX = 0.
A9	A(7, 3, 8)	127.9915	-DE/DX = 0.
A10	A(2, 5, 7)	106.0774	-DE/DX = 0.
A11	A(2, 5, 9)	125.943	-DE/DX = 0.
A12	A(7, 5, 9)	127.9784	-DE/DX = 0.
A13	A(3, 7, 5)	110.6703	-DE/DX = 0.
A14	A(3, 7, 10)	124.7061	-DE/DX = 0.
A15	A(5, 7, 10)	124.6236	-DE/DX = 0.
A16	A(7, 10, 11)	120.1555	-DE/DX = 0.
A17	A(7, 10, 12)	120.1767	-DE/DX = 0.
A18	A(11, 10, 12)	119.6678	-DE/DX = 0.
A19	A(10, 11, 13)	120.3405	-DE/DX = 0.
A20	A(10, 11, 14)	119.8321	-DE/DX = 0.

A21	A(13, 11, 14)	119.8264	-DE/DX =	0.
A22	A(10, 12, 15)	120.3374	-DE/DX =	0.
A23	A(10, 12, 16)	119.8344	-DE/DX =	0.
A24	A(15, 12, 16)	119.8275	-DE/DX =	0.
A25	A(11, 13, 17)	120.4469	-DE/DX =	0.
A26	A(11, 13, 18)	119.7064	-DE/DX =	0.
A27	A(17, 13, 18)	119.8448	-DE/DX =	0.
A28	A(12, 15, 17)	120.4473	-DE/DX =	0.
A29	A(12, 15, 19)	119.7078	-DE/DX =	0.
A30	A(17, 15, 19)	119.8447	-DE/DX =	0.
A31	A(13, 17, 15)	118.7569	-DE/DX =	0.
A32	A(13, 17, 20)	120.5951	-DE/DX =	0.
A33	A(15, 17, 20)	120.6018	-DE/DX =	0.
A34	A(17, 20, 21)	115.6361	-DE/DX =	0.
A35	A(17, 20, 22)	115.6263	-DE/DX =	0.
A36	A(21, 20, 22)	112.1936	-DE/DX =	0.
D1	D(3, 1, 2, 5)	-15.0425	-DE/DX =	0.
D2	D(3, 1, 2, 6)	-140.5334	-DE/DX =	0.
D3	D(4, 1, 2, 5)	-140.51	-DE/DX =	0.
D4	D(4, 1, 2, 6)	93.9991	-DE/DX =	0.
D5	D(2, 1, 3, 7)	11.9228	-DE/DX =	0.
D6	D(2, 1, 3, 8)	-167.7079	-DE/DX =	0.
D7	D(4, 1, 3, 7)	137.4749	-DE/DX =	0.
D8	D(4, 1, 3, 8)	-42.1558	-DE/DX =	0.
D9	D(1, 2, 5, 7)	11.9508	-DE/DX =	0.
D10	D(1, 2, 5, 9)	-167.6802	-DE/DX =	0.
D11	D(6, 2, 5, 7)	137.5196	-DE/DX =	0.
D12	D(6, 2, 5, 9)	-42.1114	-DE/DX =	0.
D13	D(1, 3, 7, 5)	-4.5951	-DE/DX =	0.
D14	D(1, 3, 7, 10)	175.3965	-DE/DX =	0.
D15	D(8, 3, 7, 5)	175.0255	-DE/DX =	0.
D16	D(8, 3, 7, 10)	-4.9828	-DE/DX =	0.
D17	D(2, 5, 7, 3)	-4.6398	-DE/DX =	0.

D18	D(2, 5, 7, 10)	175.3685	-DE/DX =	0.
D19	D(9, 5, 7, 3)	174.9812	-DE/DX =	0.
D20	D(9, 5, 7, 10)	-5.0105	-DE/DX =	0.
D21	D(3, 7, 10, 11)	103.0036	-DE/DX =	0.
D22	D(3, 7, 10, 12)	-77.0885	-DE/DX =	0.
D23	D(5, 7, 10, 11)	-77.0059	-DE/DX =	0.
D24	D(5, 7, 10, 12)	102.9021	-DE/DX =	0.
D25	D(7, 10, 11, 13)	179.5592	-DE/DX =	0.
D26	D(7, 10, 11, 14)	-0.0805	-DE/DX =	0.
D27	D(12, 10, 11, 13)	-0.3493	-DE/DX =	0.
D28	D(12, 10, 11, 14)	-179.989	-DE/DX =	0.
D29	D(7, 10, 12, 15)	179.9786	-DE/DX =	0.
D30	D(7, 10, 12, 16)	0.2899	-DE/DX =	0.
D31	D(11, 10, 12, 15)	-0.113	-DE/DX =	0.
D32	D(11, 10, 12, 16)	-179.8017	-DE/DX =	0.
D33	D(10, 11, 13, 17)	0.3709	-DE/DX =	0.
D34	D(10, 11, 13, 18)	179.8781	-DE/DX =	0.
D35	D(14, 11, 13, 17)	-179.9894	-DE/DX =	0.
D36	D(14, 11, 13, 18)	-0.4822	-DE/DX =	0.
D37	D(10, 12, 15, 17)	0.5557	-DE/DX =	0.
D38	D(10, 12, 15, 19)	-179.2975	-DE/DX =	0.
D39	D(16, 12, 15, 17)	-179.7556	-DE/DX =	0.
D40	D(16, 12, 15, 19)	0.3912	-DE/DX =	0.
D41	D(11, 13, 17, 15)	0.0674	-DE/DX =	0.
D42	D(11, 13, 17, 20)	177.6108	-DE/DX =	0.
D43	D(18, 13, 17, 15)	-179.4392	-DE/DX =	0.
D44	D(18, 13, 17, 20)	-1.8958	-DE/DX =	0.
D45	D(12, 15, 17, 13)	-0.5285	-DE/DX =	0.
D46	D(12, 15, 17, 20)	-178.0718	-DE/DX =	0.
D47	D(19, 15, 17, 13)	179.3244	-DE/DX =	0.
D48	D(19, 15, 17, 20)	1.7811	-DE/DX =	0.
D49	D(13, 17, 20, 21)	158.3039	-DE/DX =	0.
D50	D(13, 17, 20, 22)	24.2854	-DE/DX =	0.

4.

!	D51	D(15,17,20,21)	-24.1982	-DE/DX =	0.
!	D52	D(15,17,20,22)	-158.2166	-DE/DX =	0.
!					

--

Final structure in terms of initial Z-matrix:

N
N,1,R2
C,1,R3,2,A3
H,1,R4,2,A4,3,D4,0
C,2,R5,1,A5,3,D5,0
H,2,R6,1,A6,5,D6,0
N,3,R7,1,A7,2,D7,0
O,3,R8,1,A8,7,D8,0
O,5,R9,2,A9,1,D9,0
C,7,R10,3,A10,1,D10,0
C,10,R11,7,A11,3,D11,0
C,10,R12,7,A12,11,D12,0
C,11,R13,10,A13,7,D13,0
H,11,R14,10,A14,13,D14,0
C,12,R15,10,A15,7,D15,0
H,12,R16,10,A16,15,D16,0
C,13,R17,11,A17,10,D17,0
H,13,R18,11,A18,17,D18,0
H,15,R19,12,A19,10,D19,0
N,17,R20,13,A20,11,D20,0
H,20,R21,17,A21,13,D21,0
H,20,R22,17,A22,21,D22,0

Variables:

R2=1.4078
R3=1.3872
R4=0.9988
R5=1.378
R6=0.9988
R7=1.3808
R8=1.187
R9=1.1873
R10=1.4287
R11=1.3834
R12=1.3835
R13=1.3819
R14=1.0751
R15=1.3819
R16=1.0751
R17=1.3948
R18=1.0758
R19=1.0758
R20=1.3888
R21=0.9954
R22=0.9954
A3=107.5565
A4=113.1183
A5=107.555
A6=113.1234
A7=106.0587
A8=125.9487
A9=125.943
A10=124.7061
A11=120.1555
A12=120.1767
A13=120.3405
A14=119.8321
A15=120.3374

vj

A16=119.8344
A17=120.4469
A18=119.7064
A19=119.7078
A20=120.5951
A21=115.6361
A22=115.6263
D4=-125.4781#
D5=-15.0425
D6=-125.4781#
D7=11.9228
D8=179.9682#
D9=-167.6802
D10=175.3965
D11=103.0036
D12=180.#
D13=179.5592
D14=-179.2980#
D15=179.9786
D16=-179.2982#
D17=0.3709
D18=179.7232#
D19=-179.2975
D20=177.6108
D21=158.3039
D22=-179.9753#

From 6-31G** opt

N-N= 8.677830300333D+02 E-N=-3.316521057167D+03 KE= 6.740371340990D+02
1|1|UNPC-UNK|FOpt|RHF|6-31++G(d,p)|C8H8N4O2|PCUSER|14-Sep-2003|0||# RH
F/6-31++G** GEOM=CHECKPOINT GUESS=READ OPT||opt of Aminophenylurazol||
0,1|N,3.234189374,-0.6409211297,-0.1805584592|N,3.2145937736,0.7220266
721,0.1714288559|C,1.9297903829,-1.1086210716,-0.1157965113|H,3.869262
5146,-1.1793266597,0.3711359302|C,1.8970332524,1.1510122699,0.11019300
49|H,3.8322971618,1.278880987,-0.381650277|N,1.1282185161,0.0098611528
, -0.0014169791|O,1.5953640523,-2.2471063973,-0.1470103197|O,1.52933840
87,2.2794916372,0.1418991702|C,-0.3003116822,-0.0099463768,0.001012439
9|C,-0.9952979732,0.1321841733,1.1887376434|C,-0.9956003366,-0.1694172
437,-1.1843475266|C,-2.3771666419,0.1226944953,1.1943662576|H,-0.45763
8418,0.2564537007,2.1114331406|C,-2.37739059,-0.1895052499,-1.18578921
99|H,-0.4581665894,-0.2833058831,-2.1085180612|C,-3.0877124744,-0.0378
504581,0.0049512565|H,-2.9072813888,0.2320534054,2.124112466|H,-2.9076
604711,-0.3254644164,-2.1119292324|N,-4.4752042288,-0.0973286839,0.012
9713039|H,-4.9207155083,0.1233385991,-0.8493822817|H,-4.9203626554,0.3
395190368,0.7887503948|Version=x86-win32-G98RevA.6|HF=-675.1849417|RM
SD=7.828e-009|RMSF=1.533e-005|Dipole=-0.1946746,0.4079756,-0.0534335|P
G=C01 [X(C8H8N4O2)]|@

WHEN IT COMES TO CASH FLOW, IT SEEMS LIKE THE TIDE IS ALWAYS GOING OUT.
Job cpu time: 1 days 21 hours 57 minutes 2.0 seconds.
File lengths (Mbytes): RWF= 58 Int= 0 D2E= 0 Chk= 11 scr= 1
Normal termination of Gaussian 98.

Gaussian 98: x86-win32-G98RevA.6 19-Oct-1998
14-Sep-2003

%chk=aminophenylurazol POP
Default route: MaxDisk=2000MB

RHF/6-31++G** POP=NBO

Interatomic angles:

N2-N1-C3=107.5565
 N2-H4-C3= 68.2032
 C3-N2-C5= 72.7953
 H4-C3-C5= 91.4281
 C3-N2-H6=137.265
 C3-H4-H6= 83.1674
 C3-C5-H6= 91.4424
 N1-C3-N7=106.0587
 H4-N2-N7= 90.594
 N2-C5-N7=106.0774
 H6-N1-N7= 90.5929
 H6-H4-N7= 64.7285
 N1-C3-O8=125.9487
 N2-H4-O8= 94.8484
 C5-C3-O8=162.3304
 N7-N1-O8= 61.6238
 H4-O8-N7= 76.0988
 N1-N2-O9=131.6087
 N1-C5-O9=160.4762
 N1-H6-O9= 94.8504
 H6-C5-O9=104.2031
 C3-N7-O9=134.4617
 H6-O9-N7= 76.1061
 N2-C3-C10= 98.4062
 N2-C5-C10=134.1627
 N1-N7-C10=161.4863
 H4-N7-C10=154.7641
 N1-O8-C10= 85.9009
 C5-C10-O8= 77.731
 C3-C10-O9= 77.7572
 O9-N7-C10=100.7897
 N2-N7-C11=140.1452
 C5-N7-C11=113.8434
 O9-N7-C11= 94.1119
 N7-C10-C11=120.1555
 N1-N7-C12=140.2404
 H4-N7-C12=145.501
 O8-N7-C12= 94.2305
 C5-C10-C12=122.367
 O9-C10-C12=116.3901
 C3-C10-C13=145.4368
 O8-C10-C13=128.7683
 C10-C11-C13=120.3405
 C12-C11-C13= 90.1747
 C3-N7-H14=119.2235
 H6-N7-H14=126.7362
 C3-C10-H14= 99.6521
 O8-C10-H14=101.1087
 C10-C11-H14=119.8321
 C12-C11-H14=149.9984
 C13-C11-H14=119.8264
 C5-C10-C15=145.2303
 O9-C10-C15=128.4674
 N7-C12-C15=150.7791
 C13-C10-C15= 60.0437
 H14-C10-C15=115.7833
 N1-N7-H16=118.1925
 H4-N7-H16=126.7839
 O8-N7-H16= 87.8738
 C5-C10-H16= 99.7058
 O9-C10-H16=101.165
 N7-C12-H16= 89.393
 C13-C10-H16=115.7844
 H14-C10-H16=171.5239
 C11-C15-H16= 85.8051
 N2-N1-H4=113.1183
 N1-N2-C5=107.555
 H4-N1-C5=137.2475
 N1-N2-H6=113.1234
 H4-N1-H6=112.2645
 N1-H6-C5= 68.1958
 H4-H6-C5= 83.1562
 N2-N7-C3= 73.7181
 H4-C3-N7=124.8307
 C3-N7-C5=110.6703
 H6-N2-N7=136.037
 H6-C5-N7=124.8622
 N2-C3-O8=160.4863
 H4-C3-O8=104.2171
 H6-N1-O8=151.3659
 N2-N7-O8= 97.4013
 C5-N7-O8=134.4513
 C3-N2-O9= 97.5226
 N2-C5-O9=125.943
 H6-N2-O9= 93.937
 N1-N7-O9= 97.4024
 H4-N7-O9=102.8478
 O8-N7-O9=158.3265
 H4-C3-C10=150.7764
 C3-C5-C10= 62.8731
 N2-N7-C10=161.3931
 C5-N7-C10=124.6236
 O8-C3-C10= 99.9149
 O8-N7-C10=100.8838
 O9-C5-C10= 99.8574
 O8-C10-O9=101.2068
 C3-N7-C11=125.9348
 H6-N7-C11=145.3758
 C3-C10-C11=122.3977
 O8-C10-C11=116.4821
 N2-N7-C12=152.085
 C5-N7-C12=125.8204
 O9-N7-C12=104.6989
 N7-C10-C12=120.1767
 N7-C11-C12= 60.6189
 C5-C10-C13=135.8143
 O9-C10-C13=118.2177
 N7-C12-C13= 90.5776
 N1-N7-H14=131.3786
 H4-N7-H14=118.8346
 O8-N7-H14=105.1848
 C5-C10-H14= 87.9047
 O9-C10-H14= 84.3202
 C12-N7-H14= 82.676
 N7-H14-C13=100.9417
 C12-C13-H14= 85.8039
 N7-C10-C15=149.99
 N7-C11-C15= 90.5906
 C10-C12-C15=120.3374
 C11-C13-C15= 89.8251
 H14-C11-C15=179.9507
 N2-N7-H16=131.4256
 C5-N7-H16=119.2374
 O9-N7-H16=105.1704
 N7-C10-H16= 94.2491
 C11-N7-H16= 82.6714
 C10-C12-H16=119.8344
 C13-C12-H16=179.9636
 N7-H16-C15=100.9329
 C15-C12-H16=119.8275
 C3-N1-H4=112.9765
 C3-N1-C5= 72.7994
 H4-N2-C5=127.0939
 C3-N1-H6=127.1019
 H4-N2-H6=112.2687
 C5-N2-H6=112.9927
 N1-N2-N7= 71.4458
 H4-N1-N7=136.0044
 N1-N7-C5= 73.7078
 H4-N7-C5= 79.0175
 C3-N7-H6= 79.0241
 N2-N1-O8=131.6049
 H4-N1-O8= 93.9397
 C5-N1-O8= 97.5187
 H6-H4-O8=109.033
 N7-C3-O8=127.9915
 H6-N7-O8=102.8418
 H4-N2-O9=151.3683
 C3-C5-O9=162.3204
 H4-H6-O9=109.0334
 N7-N2-O9= 61.622
 N7-C5-O9=127.9784
 N1-C3-C10=134.1002
 N1-C5-C10= 98.4698
 H6-C5-C10=150.8557
 C3-N7-C10=124.7061
 H6-N7-C10=154.6878
 H4-O8-C10=104.1818
 N2-O9-C10= 85.9281
 H6-O9-C10=104.2225
 N1-N7-C11=152.1267
 H4-N7-C11=138.8091
 O8-N7-C11=104.8367
 C5-C10-C11=110.9848
 O9-C10-C11=101.0622
 C3-N7-C12=113.9542
 H6-N7-C12=138.7751
 C3-C10-C12=111.0534
 O8-C10-C12=101.1549
 C11-C10-C12=119.6678
 N7-C10-C13=149.9657
 N7-C11-C13=150.7916
 C12-C10-C13= 89.8566
 N2-N7-H14=118.1478
 C5-N7-H14=101.0496
 O9-N7-H14= 87.8828
 N7-C10-H14= 94.2267
 N7-C11-H14= 89.3795
 C12-C10-H14=145.5966
 C10-H14-C13= 68.4631
 C3-C10-C15=136.0189
 O8-C10-C15=118.493
 C11-C10-C15= 89.8545
 C11-C12-C15= 90.1715
 C12-C15-C13= 89.8271
 H14-C13-C15=115.7743
 C3-N7-H16=101.0559
 H6-N7-H16=118.8894
 C3-C10-H16= 87.898
 O8-C10-H16= 84.2764
 C11-C10-H16=145.5954
 C11-C12-H16=150.
 H14-N7-H16=106.5739
 C10-H16-C15= 68.4616
 C13-C15-H16=115.7755

C3-C10-C17=153.0825	C5-C10-C17=152.6093	N7-C10-C17=179.7786
O8-C10-C17=129.6478	O9-C10-C17=129.1454	N7-C11-C17=120.8651
C10-C11-C17= 90.4128	N7-C12-C17=120.8519	C10-C12-C17= 90.4106
C12-C11-C17= 60.2466	C10-C13-C17= 90.5996	C11-C13-C17=120.4469
C12-C17-C13= 89.1333	H14-C10-C17= 85.7618	H14-C11-C17=149.7546
H14-C13-C17=146.3961	C10-C15-C17= 90.5992	C11-C17-C15= 89.1321
C12-C15-C17=120.4473	C13-C17-C15=118.7569	H16-C10-C17= 85.7627
H16-C12-C17=149.755	H16-C15-C17=146.3954	N7-C11-H18=176.7977
C10-C11-H18=146.3503	C12-C11-H18=116.1842	C10-C13-H18=149.5542
C11-C13-H18=119.7064	C12-C13-H18=179.4912	N7-H14-H18=126.9312
C10-H14-H18= 94.4524	H14-C11-H18= 93.8173	H14-C13-H18= 93.7581
C15-C11-H18= 86.2128	C15-C13-H18=150.4642	C10-C17-H18= 85.1803
C11-H18-C17= 68.6363	C12-C17-H18=114.9348	C17-C13-H18=119.8448
H14-H18-C17= 94.6054	C15-C17-H18=144.557	N7-C12-H19=176.7707
C10-C12-H19=146.3435	C11-C12-H19=116.1788	C13-C12-H19= 86.2103
C10-C15-H19=149.5534	C11-C15-H19=179.291	C12-C15-H19=119.7078
C13-C15-H19=150.4624	N7-H16-H19=126.9204	C10-H16-H19= 94.4493
H16-C12-H19= 93.819	H16-C15-H19= 93.7599	C10-C17-H19= 85.1797
C11-C17-H19=114.932	C12-H19-C17= 68.6367	C13-C17-H19=144.5559
C17-C15-H19=119.8447	H16-H19-C17= 94.6051	H18-C17-H19=170.3428
C10-C13-N20=120.2076	C11-C13-N20=150.0367	C12-C13-N20= 90.2065
H14-C13-N20=175.8349	C10-C15-N20=120.2037	C11-C15-N20= 90.199
C12-C15-N20=150.0483	C15-C13-N20= 60.2389	H16-C15-N20=175.9218
C10-C17-N20=178.1024	C11-C17-N20=150.1773	C12-C17-N20=150.1987
C13-C17-N20=120.5951	C15-C17-N20=120.6018	C11-H18-N20=100.0989
H18-C13-N20= 90.226	H14-H18-N20=126.0643	C15-N20-H18= 83.4759
H18-C17-N20= 94.805	C12-H19-N20=100.1021	C13-N20-H19= 83.4748
H19-C15-N20= 90.2279	H16-H19-N20=126.069	H19-C17-N20= 94.8106
H18-N20-H19=107.4241	C10-C15-H21=141.1311	C11-C15-H21=111.4608
C12-C15-H21=169.1355	C13-C15-H21= 81.6795	H16-C15-H21=161.3894
C10-C17-H21=154.4333	C11-C17-H21=170.2889	C12-C17-H21=125.5094
C13-C17-H21=144.1213	C15-C17-H21= 96.2729	H18-C17-H21=118.8356
C12-H19-H21=120.4043	C15-H19-H21= 86.4111	H16-H19-H21=145.9352
H19-C17-H21= 70.7756	C13-N20-H21=142.3266	C15-N20-H21= 88.1234
C17-N20-H21=115.6361	H18-N20-H21=158.0247	H19-H21-N20= 92.2115
C10-C13-H22=141.1215	C11-C13-H22=169.3551	C12-C13-H22=111.4298
H14-C13-H22=161.5168	C15-C13-H22= 81.6747	C10-C17-H22=154.4261
C11-C17-H22=125.5504	C12-C17-H22=170.065	C13-C17-H22= 96.2765
C15-C17-H22=144.1099	C11-H18-H22=120.4416	C13-H18-H22= 86.4158
H14-H18-H22=146.0115	H18-C17-H22= 70.7736	H19-C17-H22=118.8372
C13-N20-H22= 88.1271	C15-N20-H22=142.2911	C17-N20-H22=115.6263
H18-H22-N20= 92.211	H19-N20-H22=157.9901	C13-H22-H21= 98.3274
C15-H21-H22= 98.3183	C17-H22-H21= 65.9715	H18-H22-H21=122.8097
H19-H21-H22=122.8002	H21-N20-H22=112.1936	

Stoichiometry C8H8N4O2

Condensed to atoms (all electrons):

	1	2	3	4	5	6
1 N	7.448106	-0.395730	0.274423	0.352221	0.134329	-0.006166
2 N	-0.395730	7.450110	0.126899	-0.005967	0.274895	0.352146
3 C	0.274423	0.126899	4.895486	-0.060079	-0.195142	-0.012811
4 H	0.352221	-0.005967	-0.060079	0.368638	-0.012442	-0.003766
5 C	0.134329	0.274895	-0.195142	-0.012442	4.891192	-0.060058
6 H	-0.006166	0.352146	-0.012811	-0.003766	-0.060058	0.368862
7 N	-0.281525	-0.292719	0.164736	-0.001286	0.139714	-0.000882
8 O	-0.103385	0.017983	0.558005	-0.000008	0.013618	0.001086
9 O	0.019359	-0.103060	0.012553	0.001100	0.553064	0.000184
10 C	-0.193396	-0.163788	-0.158721	-0.014035	-0.057706	-0.015203
11 C	-0.215541	0.271170	0.421880	0.016614	-0.667374	-0.001942
12 C	0.259689	-0.210438	-0.618526	-0.002861	0.438629	0.015110
13 C	-0.008872	0.039222	0.082216	0.000068	-0.289596	0.000372
14 H	-0.009382	0.000008	0.009766	-0.000060	-0.019819	-0.000438
15 C	0.058324	-0.028514	-0.245832	-0.000631	0.083560	0.001126
16 H	-0.001577	-0.007954	-0.018233	-0.000418	0.006630	-0.000088
17 C	0.003718	0.011808	-0.031383	0.001358	-0.030752	0.001001
18 H	0.000338	-0.000230	-0.000047	-0.000030	0.004047	-0.000010

19	H	0.000203	-0.000087	0.003327	-0.000028	0.000883	-0.000011
20	N	0.000038	-0.000069	0.000424	-0.000010	0.001337	0.000006
21	H	0.000026	-0.000002	-0.000351	0.000002	0.000097	0.000000
22	H	-0.000014	0.000038	0.000291	0.000000	-0.000490	0.000002
		7	8	9	10	11	12
1	N	-0.281525	-0.103385	0.019359	-0.193396	-0.215541	0.259689
2	N	-0.292719	0.017983	-0.103060	-0.163788	0.271170	-0.210438
3	C	0.164736	0.558005	0.012553	-0.158721	0.421880	-0.618526
4	H	-0.001286	-0.000008	0.001100	-0.014035	0.016614	-0.002861
5	C	0.139714	0.013618	0.553064	-0.057706	-0.667374	0.438629
6	H	-0.000882	0.001086	0.000184	-0.015203	-0.001942	0.015110
7	N	8.374315	-0.120532	-0.128385	-1.272166	0.062205	0.060589
8	O	-0.120532	8.161552	-0.001309	0.274340	-0.126103	-0.107040
9	O	-0.128385	-0.001309	8.161580	0.314016	-0.112428	-0.113389
10	C	-1.272166	0.274340	0.314016	28.034951	-9.705913	-9.251725
11	C	0.062205	-0.126103	-0.112428	-9.705913	30.088464	-5.616241
12	C	0.060589	-0.107040	-0.113389	-9.251725	-5.616241	28.590774
13	C	0.313018	-0.005582	-0.015950	2.465766	-6.842936	-6.983844
14	H	-0.011805	-0.003820	-0.003702	0.073691	0.331240	-0.105919
15	C	0.333712	0.009052	-0.019883	2.168341	-7.922687	-6.315942
16	H	-0.013785	-0.003863	-0.003712	0.102646	-0.088262	0.312800
17	C	-0.065310	-0.003323	0.003713	-4.422737	5.874658	5.383341
18	H	0.002749	0.000126	-0.000279	0.041619	0.040361	0.001553
19	H	0.002406	0.000074	-0.000035	0.020003	-0.015783	0.056724
20	N	0.002354	0.000155	-0.000129	0.039125	-0.134489	-0.096119
21	H	0.000040	0.000015	-0.000009	0.000140	-0.022109	0.043783
22	H	-0.000063	0.000009	0.000012	-0.000455	0.041093	-0.020716
		13	14	15	16	17	18
1	N	-0.008872	-0.009382	0.058324	-0.001577	0.003718	0.000338
2	N	0.039222	0.000008	-0.028514	-0.007954	0.011808	-0.000230
3	C	0.082216	0.009766	-0.245832	-0.018233	-0.031383	-0.000047
4	H	0.000068	-0.000060	-0.000631	-0.000418	-0.001358	-0.000030
5	C	-0.289596	-0.019819	0.083560	0.006630	-0.030752	0.004047
6	H	0.000372	-0.000438	0.001126	-0.000088	0.001001	-0.000010
7	N	0.313018	-0.011805	0.333712	-0.013785	-0.065310	0.002749
8	O	-0.005582	-0.003820	0.009052	-0.003863	-0.003323	0.000126
9	O	-0.015950	-0.003702	-0.019883	-0.003712	0.003713	-0.000279
10	C	2.465766	0.073691	2.168341	0.102646	-4.422737	0.041619
11	C	-6.842936	0.331240	-7.922687	-0.088262	5.874658	0.040361
12	C	-6.983844	-0.105919	-6.315942	0.312800	5.383341	0.001553
13	C	16.636906	0.086414	5.087020	-0.024640	-5.304330	0.166482
14	H	0.086414	0.516213	-0.029114	-0.004669	-0.007021	-0.000838
15	C	5.087020	-0.029114	17.484622	0.055101	-5.518955	0.028133
16	H	-0.024640	-0.004669	0.055101	0.517229	-0.004514	0.000839
17	C	-5.304330	-0.007021	-5.518955	-0.004514	10.408182	0.039562
18	H	0.166482	-0.000838	0.028133	0.000839	0.039562	0.531854
19	H	0.022014	0.000976	0.193902	-0.001231	0.038149	-0.004062
20	N	0.053612	-0.001680	0.071122	-0.002621	0.084429	-0.013411
21	H	0.011442	-0.000565	-0.046487	0.001991	-0.022531	0.006527
22	H	-0.041299	0.002034	0.005420	-0.000594	-0.020624	-0.014673
		19	20	21	22		
1	N	0.000203	0.000038	0.000026	-0.000014		
2	N	-0.000087	-0.000069	-0.000002	0.000038		
3	C	0.003327	0.000424	-0.000351	0.000291		
4	H	-0.000028	-0.000010	0.000002	0.000000		
5	C	0.000883	0.001337	0.000097	-0.000490		
6	H	-0.000011	0.000006	0.000000	0.000002		
7	N	0.002406	0.002354	0.000040	-0.000063		
8	O	0.000074	0.000155	0.000015	0.000009		
9	O	-0.000035	-0.000129	-0.000009	0.000012		
10	C	0.020003	0.039125	0.000140	-0.000455		
11	C	-0.015783	-0.134489	-0.022109	0.041093		
12	C	0.056724	-0.096119	0.043783	-0.020716		
13	C	0.022014	0.053612	0.011442	-0.041299		
14	H	0.000976	-0.001680	-0.000565	0.002034		
15	C	0.193902	0.071122	-0.046487	0.005420		

16	H	-0.001231	-0.002621	0.001991	-0.000594
17	C	0.038149	0.084429	-0.022531	-0.020624
18	H	-0.004062	-0.013411	0.006527	-0.014673
19	H	0.532981	-0.011583	-0.014425	0.006681
20	N	-0.011583	6.828720	0.363412	0.363550
21	H	-0.014425	0.363412	0.424945	-0.046683
22	H	0.006681	0.363550	-0.046683	0.425484

Total atomic charges:

		1	
1	N	-0.335187	
2	N	-0.335722	
3	C	0.791117	
4	H	0.361619	
5	C	0.791384	
6	H	0.361481	
7	N	-0.267381	
8	O	-0.561050	
9	O	-0.563312	
10	C	-2.278796	
11	C	0.324124	
12	C	0.279767	
13	C	0.552495	
14	H	0.178489	
15	C	0.548608	
16	H	0.178924	
17	C	-0.418438	
18	H	0.169387	
19	H	0.168923	
20	N	-0.548174	
21	H	0.300744	
22	H	0.300998	

Sum of Mulliken charges= 0.00000

Hydroxyphenylurazol

 Gaussian 98: x86-win32-G98RevA.6 19-Oct-1998
 06-Sep-2003

%CHK=Hydroxyphenylurazol
 Default route: MaxDisk=2000MB

 # RHF/6-31++G** opt

1/18=20,38=1/1,3;
 2/9=110,17=6,18=5/2;
 3/5=1,6=6,7=1111,11=1,25=1,30=1/1,2,3;
 4/7=1/1;
 5/5=2,38=4/2;
 6/7=2,8=2,9=2,10=2,28=1/1;
 7//1,2,3,16;
 1/18=20/3(1);
 99//99;
 2/9=110/2;
 3/5=1,6=6,7=1111,11=1,25=1,30=1/1,2,3;
 4/5=5,7=1,16=2/1;
 5/5=2,38=4/2;
 7//1,2,3,16;
 1/18=20/3(-5);
 2/9=110/2;
 6/7=2,8=2,9=2,10=2,19=2,28=1/1;
 99/9=1/99;

opt

Symbolic Z-matrix:
 Charge = 0 Multiplicity = 1

N							
N	1	R2					
C	1	R3	2	A3			
H	1	R4	2	A4	3	D4	0
C	2	R5	1	A5	3	D5	0
H	2	R6	1	A6	5	D6	0
N	3	R7	1	A7	2	D7	0
O	3	R8	1	A8	7	D8	0
O	5	R9	2	A9	1	D9	0
C	7	R10	3	A10	1	D10	0
C	10	R11	7	A11	3	D11	0
C	10	R12	7	A12	11	D12	0
C	11	R13	10	A13	7	D13	0
H	11	R14	10	A14	13	D14	0
C	12	R15	10	A15	7	D15	0
H	12	R16	10	A16	15	D16	0
C	13	R17	11	A17	10	D17	0
H	13	R18	11	A18	17	D18	0
H	15	R19	12	A19	10	D19	0
O	17	R20	13	A20	11	D20	0
H	20	R21	17	A21	13	D21	0

Variables:

R2	1.40639
R3	1.38514
R4	0.99846
R5	1.38488
R6	0.99843
R7	1.38153
R8	1.18609
R9	1.18631
R10	1.42829

```

R11          1.38084
R12          1.3871
R13          1.38427
R14          1.07341
R15          1.37856
R16          1.07347
R17          1.38554
R18          1.07659
R19          1.07372
R20          1.34751
R21          0.94283
A3           107.62279
A4           113.30999
A5           107.63555
A6           113.31878
A7           106.03734
A8           126.00259
A9           125.9909
A10          124.69256
A11          120.02709
A12          119.98596
A13          120.05007
A14          120.03676
A15          120.19642
A16          119.85899
A17          119.92699
A18          119.76595
A19          121.08367
A20          122.56761
A21          111.19551
D4           -125.87241
D5           -14.99862
D6           -125.91813
D7            11.84461
D8           -178.85502
D9           -166.86043
D10          175.5866
D11          -125.64943
D12          -179.8349
D13          -179.40042
D14          178.9544
D15          -179.78441
D16          179.03345
D17          -0.80449
D18          -179.78598
D19          179.50399
D20          -179.65968
D21          -0.1579

```

GradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGrad
 Berny optimization.
 Initialization pass.

```

-----
!      Initial Parameters      !
! (Angstroms and Degrees)    !
-----

```

! Name	Definition	Value	Derivative Info.
! R1	R(1,2)	1.4064	estimate D2E/DX2
! R2	R(1,3)	1.3851	estimate D2E/DX2

R3	R(1,4)	0.9985	estimate D2E/DX2
R4	R(2,5)	1.3849	estimate D2E/DX2
R5	R(2,6)	0.9984	estimate D2E/DX2
R6	R(3,7)	1.3815	estimate D2E/DX2
R7	R(3,8)	1.1861	estimate D2E/DX2
R8	R(5,7)	1.3814	estimate D2E/DX2
R9	R(5,9)	1.1863	estimate D2E/DX2
R10	R(7,10)	1.4283	estimate D2E/DX2
R11	R(10,11)	1.3808	estimate D2E/DX2
R12	R(10,12)	1.3871	estimate D2E/DX2
R13	R(11,13)	1.3843	estimate D2E/DX2
R14	R(11,14)	1.0734	estimate D2E/DX2
R15	R(12,15)	1.3786	estimate D2E/DX2
R16	R(12,16)	1.0735	estimate D2E/DX2
R17	R(13,17)	1.3855	estimate D2E/DX2
R18	R(13,18)	1.0766	estimate D2E/DX2
R19	R(15,17)	1.3887	estimate D2E/DX2
R20	R(15,19)	1.0737	estimate D2E/DX2
R21	R(17,20)	1.3475	estimate D2E/DX2
R22	R(20,21)	0.9428	estimate D2E/DX2
A1	A(2,1,3)	107.6228	estimate D2E/DX2
A2	A(2,1,4)	113.31	estimate D2E/DX2
A3	A(3,1,4)	113.1474	estimate D2E/DX2
A4	A(1,2,5)	107.6356	estimate D2E/DX2
A5	A(1,2,6)	113.3188	estimate D2E/DX2
A6	A(5,2,6)	113.1704	estimate D2E/DX2
A7	A(1,3,7)	106.0373	estimate D2E/DX2
A8	A(1,3,8)	126.0026	estimate D2E/DX2
A9	A(7,3,8)	127.9488	estimate D2E/DX2
A10	A(2,5,7)	106.038	estimate D2E/DX2
A11	A(2,5,9)	125.9909	estimate D2E/DX2
A12	A(7,5,9)	127.9584	estimate D2E/DX2
A13	A(3,7,5)	110.6016	estimate D2E/DX2

A14	A(3,7,10)	124.6926	estimate D2E/DX2
A15	A(5,7,10)	124.7058	estimate D2E/DX2
A16	A(7,10,11)	120.0271	estimate D2E/DX2
A17	A(7,10,12)	119.986	estimate D2E/DX2
A18	A(11,10,12)	119.9867	estimate D2E/DX2
A19	A(10,11,13)	120.0501	estimate D2E/DX2
A20	A(10,11,14)	120.0368	estimate D2E/DX2
A21	A(13,11,14)	119.9049	estimate D2E/DX2
A22	A(10,12,15)	120.1964	estimate D2E/DX2
A23	A(10,12,16)	119.859	estimate D2E/DX2
A24	A(15,12,16)	119.9375	estimate D2E/DX2
A25	A(11,13,17)	119.927	estimate D2E/DX2
A26	A(11,13,18)	119.7659	estimate D2E/DX2
A27	A(17,13,18)	120.3067	estimate D2E/DX2
A28	A(12,15,17)	119.8277	estimate D2E/DX2
A29	A(12,15,19)	121.0837	estimate D2E/DX2
A30	A(17,15,19)	119.0879	estimate D2E/DX2
A31	A(13,17,15)	120.0046	estimate D2E/DX2
A32	A(13,17,20)	122.5676	estimate D2E/DX2
A33	A(15,17,20)	117.4278	estimate D2E/DX2
A34	A(17,20,21)	111.1955	estimate D2E/DX2
D1	D(3,1,2,5)	-14.9986	estimate D2E/DX2
D2	D(3,1,2,6)	-140.9167	estimate D2E/DX2
D3	D(4,1,2,5)	-140.871	estimate D2E/DX2
D4	D(4,1,2,6)	93.2108	estimate D2E/DX2
D5	D(2,1,3,7)	11.8446	estimate D2E/DX2
D6	D(2,1,3,8)	-167.0104	estimate D2E/DX2
D7	D(4,1,3,7)	137.8133	estimate D2E/DX2
D8	D(4,1,3,8)	-41.0417	estimate D2E/DX2
D9	D(1,2,5,7)	11.9254	estimate D2E/DX2
D10	D(1,2,5,9)	-166.8604	estimate D2E/DX2
D11	D(6,2,5,7)	137.9314	estimate D2E/DX2
D12	D(6,2,5,9)	-40.8545	estimate D2E/DX2

ε.

D13	D(1, 3, 7, 5)	-4.5303	estimate D2E/DX2
D14	D(1, 3, 7, 10)	175.5866	estimate D2E/DX2
D15	D(8, 3, 7, 5)	174.295	estimate D2E/DX2
D16	D(8, 3, 7, 10)	-5.5881	estimate D2E/DX2
D17	D(2, 5, 7, 3)	-4.6615	estimate D2E/DX2
D18	D(2, 5, 7, 10)	175.2215	estimate D2E/DX2
D19	D(9, 5, 7, 3)	174.0926	estimate D2E/DX2
D20	D(9, 5, 7, 10)	-6.0244	estimate D2E/DX2
D21	D(3, 7, 10, 11)	-125.6494	estimate D2E/DX2
D22	D(3, 7, 10, 12)	54.5157	estimate D2E/DX2
D23	D(5, 7, 10, 11)	54.4837	estimate D2E/DX2
D24	D(5, 7, 10, 12)	-125.3512	estimate D2E/DX2
D25	D(7, 10, 11, 13)	-179.4004	estimate D2E/DX2
D26	D(7, 10, 11, 14)	-0.446	estimate D2E/DX2
D27	D(12, 10, 11, 13)	0.4345	estimate D2E/DX2
D28	D(12, 10, 11, 14)	179.3889	estimate D2E/DX2
D29	D(7, 10, 12, 15)	-179.7844	estimate D2E/DX2
D30	D(7, 10, 12, 16)	-0.751	estimate D2E/DX2
D31	D(11, 10, 12, 15)	0.3806	estimate D2E/DX2
D32	D(11, 10, 12, 16)	179.4141	estimate D2E/DX2
D33	D(10, 11, 13, 17)	-0.8045	estimate D2E/DX2
D34	D(10, 11, 13, 18)	179.4095	estimate D2E/DX2
D35	D(14, 11, 13, 17)	-179.7603	estimate D2E/DX2
D36	D(14, 11, 13, 18)	0.4537	estimate D2E/DX2
D37	D(10, 12, 15, 17)	-0.8194	estimate D2E/DX2
D38	D(10, 12, 15, 19)	179.504	estimate D2E/DX2
D39	D(16, 12, 15, 17)	-179.8521	estimate D2E/DX2
D40	D(16, 12, 15, 19)	0.4713	estimate D2E/DX2
D41	D(11, 13, 17, 15)	0.364	estimate D2E/DX2
D42	D(11, 13, 17, 20)	-179.6597	estimate D2E/DX2
D43	D(18, 13, 17, 15)	-179.8512	estimate D2E/DX2
D44	D(18, 13, 17, 20)	0.1251	estimate D2E/DX2
D45	D(12, 15, 17, 13)	0.4472	estimate D2E/DX2

D46	D(12,15,17,20)	-179.5304	estimate D2E/DX2
D47	D(19,15,17,13)	-179.8698	estimate D2E/DX2
D48	D(19,15,17,20)	0.1527	estimate D2E/DX2
D49	D(13,17,20,21)	-0.1579	estimate D2E/DX2
D50	D(15,17,20,21)	179.819	estimate D2E/DX2

--

Item	Value	Threshold	Converged?
Maximum Force	0.000069	0.000450	YES
RMS Force	0.000010	0.000300	YES
Maximum Displacement	0.001055	0.001800	YES
RMS Displacement	0.000307	0.001200	YES

Predicted change in Energy=-7.289761D-08
 Optimization completed.
 -- Stationary point found.

! Optimized Parameters !
 ! (Angstroms and Degrees) !

Name	Definition	Value	Derivative Info.
R1	R(1,2)	1.4071	-DE/DX = 0.
R2	R(1,3)	1.386	-DE/DX = 0.
R3	R(1,4)	0.9988	-DE/DX = 0.
R4	R(2,5)	1.3857	-DE/DX = 0.
R5	R(2,6)	0.9988	-DE/DX = 0.
R6	R(3,7)	1.3812	-DE/DX = 0.
R7	R(3,8)	1.1872	-DE/DX = 0.
R8	R(5,7)	1.3812	-DE/DX = 0.
R9	R(5,9)	1.1874	-DE/DX = 0.
R10	R(7,10)	1.4287	-DE/DX = 0.
R11	R(10,11)	1.3809	-DE/DX = 0.
R12	R(10,12)	1.3868	-DE/DX = 0.
R13	R(11,13)	1.3859	-DE/DX = 0.
R14	R(11,14)	1.0742	-DE/DX = 0.
R15	R(12,15)	1.3805	-DE/DX = 0.
R16	R(12,16)	1.0743	-DE/DX = 0.
R17	R(13,17)	1.3868	-DE/DX = 0.

R18	R(13,18)	1.0765	-DE/DX =	0.
R19	R(15,17)	1.3894	-DE/DX =	0.
R20	R(15,19)	1.0738	-DE/DX =	0.
R21	R(17,20)	1.3483	-DE/DX =	0.
R22	R(20,21)	0.9432	-DE/DX =	0.
A1	A(2,1,3)	107.6136	-DE/DX =	0.
A2	A(2,1,4)	113.2039	-DE/DX =	0.
A3	A(3,1,4)	113.1159	-DE/DX =	0.
A4	A(1,2,5)	107.6296	-DE/DX =	0.
A5	A(1,2,6)	113.2178	-DE/DX =	0.
A6	A(5,2,6)	113.1459	-DE/DX =	0.
A7	A(1,3,7)	106.0844	-DE/DX =	0.
A8	A(1,3,8)	126.0319	-DE/DX =	0.
A9	A(7,3,8)	127.8754	-DE/DX =	0.
A10	A(2,5,7)	106.0843	-DE/DX =	0.
A11	A(2,5,9)	126.0238	-DE/DX =	0.
A12	A(7,5,9)	127.8821	-DE/DX =	0.
A13	A(3,7,5)	110.6139	-DE/DX =	0.
A14	A(3,7,10)	124.694	-DE/DX =	0.
A15	A(5,7,10)	124.6919	-DE/DX =	0.
A16	A(7,10,11)	120.0032	-DE/DX =	0.
A17	A(7,10,12)	119.9689	-DE/DX =	0.
A18	A(11,10,12)	120.0277	-DE/DX =	0.
A19	A(10,11,13)	120.0916	-DE/DX =	0.
A20	A(10,11,14)	120.0291	-DE/DX =	0.
A21	A(13,11,14)	119.8749	-DE/DX =	0.
A22	A(10,12,15)	120.2437	-DE/DX =	0.
A23	A(10,12,16)	119.8493	-DE/DX =	0.
A24	A(15,12,16)	119.9037	-DE/DX =	0.
A25	A(11,13,17)	119.7884	-DE/DX =	0.
A26	A(11,13,18)	119.8302	-DE/DX =	0.
A27	A(17,13,18)	120.3813	-DE/DX =	0.
A28	A(12,15,17)	119.6917	-DE/DX =	0.

A29	A(12, 15, 19)	121.0923	-DE/DX =	0.
A30	A(17, 15, 19)	119.2157	-DE/DX =	0.
A31	A(13, 17, 15)	120.1524	-DE/DX =	0.
A32	A(13, 17, 20)	122.4899	-DE/DX =	0.
A33	A(15, 17, 20)	117.3577	-DE/DX =	0.
A34	A(17, 20, 21)	111.6934	-DE/DX =	0.0001
D1	D(3, 1, 2, 5)	-14.6594	-DE/DX =	0.
D2	D(3, 1, 2, 6)	-140.4703	-DE/DX =	0.
D3	D(4, 1, 2, 5)	-140.4095	-DE/DX =	0.
D4	D(4, 1, 2, 6)	93.7796	-DE/DX =	0.
D5	D(2, 1, 3, 7)	11.602	-DE/DX =	0.
D6	D(2, 1, 3, 8)	-167.4131	-DE/DX =	0.
D7	D(4, 1, 3, 7)	137.4044	-DE/DX =	0.
D8	D(4, 1, 3, 8)	-41.6107	-DE/DX =	0.
D9	D(1, 2, 5, 7)	11.6484	-DE/DX =	0.
D10	D(1, 2, 5, 9)	-167.2863	-DE/DX =	0.
D11	D(6, 2, 5, 7)	137.5019	-DE/DX =	0.
D12	D(6, 2, 5, 9)	-41.4328	-DE/DX =	0.
D13	D(1, 3, 7, 5)	-4.4596	-DE/DX =	0.
D14	D(1, 3, 7, 10)	175.7423	-DE/DX =	0.
D15	D(8, 3, 7, 5)	174.5314	-DE/DX =	0.
D16	D(8, 3, 7, 10)	-5.2667	-DE/DX =	0.
D17	D(2, 5, 7, 3)	-4.533	-DE/DX =	0.
D18	D(2, 5, 7, 10)	175.265	-DE/DX =	0.
D19	D(9, 5, 7, 3)	174.3753	-DE/DX =	0.
D20	D(9, 5, 7, 10)	-5.8266	-DE/DX =	0.
D21	D(3, 7, 10, 11)	-114.3646	-DE/DX =	0.
D22	D(3, 7, 10, 12)	65.8017	-DE/DX =	0.
D23	D(5, 7, 10, 11)	65.8653	-DE/DX =	0.
D24	D(5, 7, 10, 12)	-113.9684	-DE/DX =	0.
D25	D(7, 10, 11, 13)	-179.4913	-DE/DX =	0.
D26	D(7, 10, 11, 14)	-0.2514	-DE/DX =	0.
D27	D(12, 10, 11, 13)	0.3422	-DE/DX =	0.

D28	D(12,10,11,14)	179.5822	-DE/DX =	0.
D29	D(7,10,12,15)	-179.8784	-DE/DX =	0.
D30	D(7,10,12,16)	-0.5453	-DE/DX =	0.
D31	D(11,10,12,15)	0.2879	-DE/DX =	0.
D32	D(11,10,12,16)	179.6211	-DE/DX =	0.
D33	D(10,11,13,17)	-0.6389	-DE/DX =	0.
D34	D(10,11,13,18)	179.4914	-DE/DX =	0.
D35	D(14,11,13,17)	-179.88	-DE/DX =	0.
D36	D(14,11,13,18)	0.2503	-DE/DX =	0.
D37	D(10,12,15,17)	-0.6144	-DE/DX =	0.
D38	D(10,12,15,19)	179.5781	-DE/DX =	0.
D39	D(16,12,15,17)	-179.9472	-DE/DX =	0.
D40	D(16,12,15,19)	0.2453	-DE/DX =	0.
D41	D(11,13,17,15)	0.3102	-DE/DX =	0.
D42	D(11,13,17,20)	-179.7289	-DE/DX =	0.
D43	D(18,13,17,15)	-179.8208	-DE/DX =	0.
D44	D(18,13,17,20)	0.14	-DE/DX =	0.
D45	D(12,15,17,13)	0.315	-DE/DX =	0.
D46	D(12,15,17,20)	-179.6479	-DE/DX =	0.
D47	D(19,15,17,13)	-179.8739	-DE/DX =	0.
D48	D(19,15,17,20)	0.1632	-DE/DX =	0.
D49	D(13,17,20,21)	-0.1168	-DE/DX =	0.
D50	D(15,17,20,21)	179.8451	-DE/DX =	0.

Final structure in terms of initial Z-matrix:

N
 N,1,R2
 C,1,R3,2,A3
 H,1,R4,2,A4,3,D4,0
 C,2,R5,1,A5,3,D5,0
 H,2,R6,1,A6,5,D6,0
 N,3,R7,1,A7,2,D7,0
 O,3,R8,1,A8,7,D8,0
 O,5,R9,2,A9,1,D9,0
 C,7,R10,3,A10,1,D10,0
 C,10,R11,7,A11,3,D11,0
 C,10,R12,7,A12,11,D12,0
 C,11,R13,10,A13,7,D13,0
 H,11,R14,10,A14,13,D14,0
 C,12,R15,10,A15,7,D15,0

H, 12, R16, 10, A16, 15, D16, 0
 C, 13, R17, 11, A17, 10, D17, 0
 H, 13, R18, 11, A18, 17, D18, 0
 H, 15, R19, 12, A19, 10, D19, 0
 O, 17, R20, 13, A20, 11, D20, 0
 H, 20, R21, 17, A21, 13, D21, 0

Variables:

R2=1.4071
 R3=1.386
 R4=0.9988
 R5=1.3857
 R6=0.9988
 R7=1.3812
 R8=1.1872
 R9=1.1874
 R10=1.4287
 R11=1.3809
 R12=1.3868
 R13=1.3859
 R14=1.0742
 R15=1.3805
 R16=1.0743
 R17=1.3868
 R18=1.0765
 R19=1.0738
 R20=1.3483
 R21=0.9432
 A3=107.6136
 A4=113.2039
 A5=107.6296
 A6=113.2178
 A7=106.0844
 A8=126.0319
 A9=126.0238
 A10=124.694
 A11=120.0032
 A12=119.9689
 A13=120.0916
 A14=120.0291
 A15=120.2437
 A16=119.8493
 A17=119.7884
 A18=119.8302
 A19=121.0923
 A20=122.4899
 A21=111.6934
 D4=-125.4781#
 D5=-14.6594
 D6=-125.4781#
 D7=11.602
 D8=179.9682#
 D9=-167.4131
 D10=175.7423
 D11=-114.3646
 D12=180.#
 D13=-179.4913
 D14=-179.2980#
 D15=-179.8784
 D16=-179.2982#
 D17=-0.6389
 D18=179.7232#
 D19=179.5781
 D20=-179.7289
 D21=-0.1168

From 6-31G** opt

```

1|1|UNPC-UNK|FOPT|RHF|6-31++G(d,p)|C8H7N3O3|PCUSER|08-Sep-2003|0||# RH
F/6-31++G** GEOM=CHECKPOINT GUESS=READ OPT||opt||0,1|N,3.2143294851,-0
.6300237906,-0.2999066088|N,3.209862405,0.6424433881,0.3006036381|C,1.
9052971769,-1.0844960319,-0.3293126733|H,3.842012719,-1.2705388185,0.1
398866206|C,1.8988244275,1.0906315376,0.3245215982|H,3.8368566345,1.28
59463565,-0.1357043144|N,1.1159121306,0.0010972914,-0.0035408703|O,1.5
563159433,-2.1934820088,-0.5696632042|O,1.5438265664,2.1986394657,0.56
14248083|C,-0.3128098869,-0.0036785611,-0.0016581818|C,-1.0071439839,0
.7782576601,-0.9035582051|C,-1.0017551925,-0.7912395961,0.9085350342|C
,-2.3930074694,0.7830795111,-0.8963827308|H,-0.4735295248,1.3934254696
,-1.6041495995|C,-2.3822107172,-0.8020978915,0.9137126035|H,-0.4587216
061,-1.4031063513,1.6048619768|C,-3.0800587623,-0.0098958606,0.0105037
866|H,-2.9299548016,1.4004572895,-1.5958766041|H,-2.9293634599,-1.4118
127381,1.6079203725|O,-4.4267846395,-0.051248403,0.0616203557|H,-4.817
7046203,0.5163735333,-0.5822546314||Version=x86-win32-G98RevA.6|HF=-69
5.0102409|RMSD=5.581e-009|RMSF=1.857e-005|Dipole=0.3854491,0.3734618,-
0.4191298|PG=C01 [X(C8H7N3O3)]|@

```

A.J.MERER AND R.S.MULLIKEN, CHEM.REV. 69, 645 (1969)
Job cpu time: 0 days 1 hours 35 minutes 27.0 seconds.
File lengths (MBytes): RWF= 47 Int= 0 D2E= 0 Chk= 11 Scr= 1
Normal termination of Gaussian 98.

```

*****
Gaussian 98: x86-win32-G98RevA.6 19-Oct-1998
              12-Sep-2003
*****
%CHK=Hydroxyphenylurazo1
Default route: MaxDisk=2000MB
-----
# RHF/6-31++G** geom=checkpoint guess=read POP=NBO
-----

```

Interatomic angles:

N2-N1-C3=107.6136	N2-N1-H4=113.2039	C3-N1-H4=113.1159
N2-H4-C3= 68.1608	N1-N2-C5=107.6296	C3-N1-C5= 72.8416
C3-N2-C5= 72.8461	H4-N1-C5=137.2455	H4-N2-C5=127.1144
H4-C3-C5= 91.3919	N1-N2-H6=113.2178	C3-N1-H6=127.1165
C3-N2-H6=137.2938	H4-N1-H6=112.2437	H4-N2-H6=112.255
C3-H4-H6= 83.1375	N1-H6-C5= 68.1579	C5-N2-H6=113.1459
C3-C5-H6= 91.4039	H4-H6-C5= 83.1237	N1-N2-N7= 71.4563
N1-C3-N7=106.0844	N2-N7-C3= 73.6903	H4-N1-N7=136.0853
H4-N2-N7= 90.6145	H4-C3-N7=124.8065	N1-N7-C5= 73.6836
N2-C5-N7=106.0843	C3-N7-C5=110.6139	H4-N7-C5= 78.9692
H6-N1-N7= 90.6211	H6-N2-N7=136.1637	C3-N7-H6= 78.9676
H6-H4-N7= 64.7389	H6-C5-N7=124.8364	N2-N1-O8=131.6062
N1-C3-O8=126.0319	N2-C3-O8=160.4534	H4-N1-O8= 93.9508
N2-H4-O8= 94.8099	H4-C3-O8=104.1868	C5-N1-O8= 97.5257
C5-C3-O8=162.181	H6-N1-O8=151.3887	H6-H4-O8=109.0444
N7-N1-O8= 61.6123	N2-N7-O8= 97.4002	N7-C3-O8=127.8754
H4-O8-N7= 76.1217	C5-N7-O8=134.4212	H6-N7-O8=102.85
N1-N2-O9=131.6155	C3-N2-O9= 97.5354	H4-N2-O9=151.4047
N1-C5-O9=160.4025	N2-C5-O9=126.0238	C3-C5-O9=162.1665
N1-H6-O9= 94.8215	H6-N2-O9= 93.9274	H4-H6-O9=109.0561
H6-C5-O9=104.1415	N1-N7-O9= 97.3866	N7-N2-O9= 61.6237
C3-N7-O9=134.4127	H4-N7-O9=102.8536	N7-C5-O9=127.8821
H6-O9-N7= 76.142	O8-N7-O9=158.3234	N1-C3-C10=134.145
N2-C3-C10= 98.4118	H4-C3-C10=150.6725	N1-C5-C10= 98.433
N2-C5-C10=134.1228	C3-C5-C10= 62.8556	H6-C5-C10=150.8277
N1-N7-C10=161.478	N2-N7-C10=161.4144	C3-N7-C10=124.694
H4-N7-C10=154.6546	C5-N7-C10=124.6919	H6-N7-C10=154.8046
N1-O8-C10= 85.9309	O8-C3-C10= 99.8062	H4-O8-C10=104.2129
C5-C10-O8= 77.7303	O8-N7-C10=100.8299	N2-O9-C10= 85.9055

C3-C10-O9= 77.7231	09-C5-C10= 99.8319	H6-O9-C10=104.2652
09-N7-C10=100.8467	08-C10-O9=101.195	N1-N7-C11=150.4056
N2-N7-C11=141.6766	C3-N7-C11=131.4839	H4-N7-C11=160.4335
C5-N7-C11=109.2972	H6-N7-C11=129.4723	08-N7-C11=112.2906
09-N7-C11= 87.0325	C3-C10-C11=127.4427	C5-C10-C11=106.4637
N7-C10-C11=120.0032	08-C10-C11=128.0523	09-C10-C11= 91.0589
N1-N7-C12=141.4124	N2-N7-C12=149.93	C3-N7-C12=109.221
H4-N7-C12=129.14	C5-N7-C12=131.2888	H6-N7-C12=160.0032
08-N7-C12= 87.0482	09-N7-C12=112.2552	C3-C10-C12=106.4093
C5-C10-C12=127.234	N7-C10-C12=119.9689	08-C10-C12= 91.128
09-C10-C12=127.9118	N7-C11-C12= 60.6181	C11-C10-C12=120.0277
C3-C10-C13=150.0727	C5-C10-C13=132.5055	N7-C10-C13=150.0147
08-C10-C13=136.4993	09-C10-C13=111.9787	N7-C11-C13=150.6508
C10-C11-C13=120.0916	N7-C12-C13= 90.4463	C12-C10-C13= 90.0146
C12-C11-C13= 90.0351	N1-N7-H14=129.6429	N2-N7-H14=119.9052
C3-N7-H14=127.8133	H4-N7-H14=142.497	C5-N7-H14= 93.9546
H6-N7-H14=106.9248	08-N7-H14=117.7474	09-N7-H14= 76.0528
C3-C10-H14=104.6417	C5-C10-H14= 82.9567	N7-C10-H14= 94.1404
08-C10-H14=113.0488	09-C10-H14= 72.5536	N7-C11-H14= 89.4681
C10-C11-H14=120.0291	C12-N7-H14= 82.8641	C12-C10-H14=145.8897
C12-C11-H14=150.0848	N7-H14-C13=100.8804	C10-H14-C13= 68.3622
C13-C11-H14=119.8749	C12-C13-H14= 85.8091	C3-C10-C15=132.3969
C5-C10-C15=149.61	N7-C10-C15=149.7715	08-C10-C15=112.0151
09-C10-C15=136.2226	N7-C11-C15= 90.4719	C11-C10-C15= 90.2253
N7-C12-C15=150.7515	C10-C12-C15=120.2437	C11-C12-C15= 90.3287
C13-C10-C15= 60.213	C11-C13-C15= 89.8347	C12-C15-C13= 89.7985
H14-C10-C15=116.088	H14-C11-C15=179.7547	H14-C13-C15=115.7034
N1-N7-H16=119.5673	N2-N7-H16=129.2167	C3-N7-H16= 93.7956
H4-N7-H16=106.5535	C5-N7-H16=127.5874	H6-N7-H16=142.0533
08-N7-H16= 76.0406	09-N7-H16=117.7362	C3-C10-H16= 82.8404
C5-C10-H16=104.4913	N7-C10-H16= 94.1005	08-C10-H16= 72.5503
09-C10-H16=112.9923	C11-N7-H16= 82.8444	C11-C10-H16=145.8963
N7-C12-H16= 89.3425	C10-C12-H16=119.8493	C11-C12-H16=149.7635
C13-C10-H16=115.8839	C13-C12-H16=179.7219	H14-N7-H16=106.75
H14-C10-H16=171.759	N7-H16-C15=100.9459	C10-H16-C15= 68.4553
C11-C15-H16= 85.7377	C15-C12-H16=119.9037	C13-C15-H16=115.7195
C3-C10-C17=152.9648	C5-C10-C17=152.7424	N7-C10-C17=179.8128
08-C10-C17=129.5022	09-C10-C17=129.3025	N7-C11-C17=120.5371
C10-C11-C17= 89.9761	N7-C12-C17=120.4922	C10-C12-C17= 89.9845
C11-C12-C17= 60.0691	C10-C13-C17= 89.895	C11-C13-C17=119.7884
C12-C17-C13= 90.1052	H14-C10-C17= 85.9512	H14-C11-C17=149.9919
H14-C13-C17=145.6573	C10-C15-C17= 89.7396	C11-C17-C15= 90.0582
C12-C15-C17=119.6917	C13-C17-C15=120.1524	H16-C10-C17= 85.8078
H16-C12-C17=150.1643	H16-C15-C17=145.6128	N7-C11-H18=176.5384
C10-C11-H18=146.011	C12-C11-H18=115.9556	C10-C13-H18=149.7232
C11-C13-H18=119.8302	C12-C13-H18=179.6291	N7-H14-H18=126.8032
C10-H14-H18= 94.2855	H14-C11-H18= 93.9541	H14-C13-H18= 93.9614
C15-C11-H18= 86.1037	C15-C13-H18=150.3351	C10-C17-H18= 85.7092
C11-H18-C17= 68.187	C12-C17-H18=115.7852	C17-C13-H18=120.3813
H14-H18-C17= 94.0534	C15-C17-H18=145.8327	N7-C12-H19=176.1605
C10-C12-H19=145.6599	C11-C12-H19=115.7456	C13-C12-H19= 85.7237
C10-C15-H19=151.0445	C11-C15-H19=179.0593	C12-C15-H19=121.0923
C13-C15-H19=149.1092	N7-H16-H19=126.5946	C10-H16-H19= 94.1039
H16-C12-H19= 94.4866	H16-C15-H19= 95.1714	C10-C17-H19= 86.2185
C11-C17-H19=116.1528	C12-H19-C17= 68.1797	C13-C17-H19=146.2472
C17-C15-H19=119.2157	H16-H19-C17= 93.8692	H18-C17-H19=171.9276
C10-C13-O20=118.2076	C11-C13-O20=148.1005	C12-C13-O20= 88.1612
H14-C13-O20=173.9692	C10-C15-O20=120.538	C11-C15-O20= 90.6743
C12-C15-O20=150.4892	C13-O20-C15= 61.0414	H16-C15-O20=176.4073
C10-C17-O20=177.481	C11-C17-O20=152.5838	C12-C17-O20=147.4044
C13-C17-O20=122.4899	C15-C17-O20=117.3577	C11-H18-O20= 98.3602
H18-C13-O20= 92.0688	H14-H18-O20=124.2267	C15-O20-H18= 84.861
H18-C17-O20= 96.8094	C12-H19-O20=100.1419	C13-O20-H19= 85.9722
H19-C15-O20= 88.4174	H16-H19-O20=125.8314	H19-C17-O20= 91.2629
H18-O20-H19=109.7918	C10-C13-H21=140.5539	C11-C13-H21=170.4457
C12-C13-H21=110.5074	H14-C13-H21=163.6835	C15-C13-H21= 80.613

E_A

C10-C17-H21=155.2049 C11-C17-H21=125.2706 C12-C17-H21=174.7126
C13-C17-H21= 95.1763 C15-C17-H21=144.6712 C11-H18-H21=118.7009
C13-H18-H21= 84.4523 H14-H18-H21=144.5673 H18-C17-H21= 69.4958
H19-C17-H21=118.5765 C13-O20-H21= 82.4958 C15-O20-H21=143.537
C17-O20-H21=111.6934 H18-H21-O20=100.9831 H19-O20-H21=168.4678
Stoichiometry C8H7N3O3

Condensed to atoms (all electrons):

	1	2	3	4	5	6
1 N	7.442457	-0.395194	0.269642	0.325172	0.122921	0.015821
2 N	-0.395194	7.443561	0.117570	0.015190	0.255237	0.323979
3 C	0.269642	0.117570	4.810714	-0.046815	-0.190034	-0.024220
4 H	0.325172	0.015190	-0.046815	0.374880	-0.026098	-0.006456
5 C	0.122921	0.255237	-0.190034	-0.026098	4.829314	-0.044422
6 H	0.015821	0.323979	-0.024220	-0.006456	-0.044422	0.375400
7 N	-0.319982	-0.331841	0.190387	-0.008357	0.219501	-0.006918
8 O	-0.100390	0.010534	0.565781	-0.002135	0.020865	0.000920
9 O	0.010956	-0.099947	0.018476	0.000880	0.562438	-0.002328
10 C	-0.003652	-0.001542	-0.658917	0.035675	-0.523467	0.035744
11 C	-0.304694	0.283215	0.815413	0.013632	-0.520553	-0.042911
12 C	0.246018	-0.293117	-0.253709	-0.037518	0.753973	0.010654
13 C	-0.016929	0.043038	-0.106541	0.003945	-0.352218	0.000029
14 H	0.003233	-0.011735	-0.008198	-0.000637	0.013121	-0.000661
15 C	0.050488	-0.039419	-0.420309	-0.003166	0.086217	0.006354
16 H	-0.014355	0.004469	0.020073	-0.000143	-0.011866	-0.000954
17 C	-0.007634	0.000351	0.096787	-0.000253	-0.004155	-0.002219
18 H	-0.000467	0.000791	0.001643	0.000019	-0.000401	0.000054
19 H	0.001353	-0.000524	-0.004256	-0.000042	0.004049	0.000089
20 O	-0.000003	-0.000009	0.000024	-0.000001	0.000284	0.000001
21 H	0.000038	0.000069	-0.000026	0.000007	-0.000425	-0.000003
	7	8	9	10	11	12
1 N	-0.319982	-0.100390	0.010956	-0.003652	-0.304694	0.246018
2 N	-0.331841	0.010534	-0.099947	-0.001542	0.283215	-0.293117
3 C	0.190387	0.565781	0.018476	-0.658917	0.815413	-0.253709
4 H	-0.008357	-0.002135	0.000880	0.035675	0.013632	-0.037518
5 C	0.219501	0.020865	0.562438	-0.523467	-0.520553	0.753973
6 H	-0.006918	0.000920	-0.002328	0.035744	-0.042911	0.010654
7 N	8.191134	-0.085252	-0.089091	-0.597666	0.057711	0.206158
8 O	-0.085252	8.196496	-0.000556	0.065473	-0.062673	-0.023654
9 O	-0.089091	-0.000556	8.199666	0.059680	-0.004297	-0.050254
10 C	-0.597666	0.065473	0.059680	26.703369	-12.327299	-8.993183
11 C	0.057711	-0.062673	-0.004297	-12.327299	30.772811	-5.249812
12 C	0.206158	-0.023654	-0.050254	-8.993183	-5.249812	25.291775
13 C	-0.084496	0.002544	-0.003839	3.701139	-4.182481	-5.505394
14 H	-0.006546	-0.003015	-0.002912	0.031290	0.317145	-0.043244
15 C	0.037577	0.010115	-0.011474	4.731627	-10.019060	-5.242051
16 H	-0.008890	-0.001441	-0.001786	0.115780	0.016571	0.156864
17 C	0.045701	-0.002497	0.007718	-4.915372	6.193833	4.623322
18 H	-0.002574	0.000165	-0.000265	0.093012	-0.039405	-0.015176
19 H	-0.000629	-0.000485	-0.000274	0.015926	-0.067758	0.016035
20 O	0.000646	0.000020	0.000001	-0.049347	0.132633	0.245982
21 H	0.000030	-0.000048	-0.000030	0.027919	-0.012656	-0.040074
	13	14	15	16	17	18
1 N	-0.016929	0.003233	0.050488	-0.014355	-0.007634	-0.000467
2 N	0.043038	-0.011735	-0.039419	0.004469	0.000351	0.000791
3 C	-0.106541	-0.008198	-0.420309	0.020073	0.096787	0.001643
4 H	0.003945	-0.000637	-0.003166	-0.000143	-0.000253	0.000019
5 C	-0.352218	0.013121	0.086217	-0.011866	-0.004155	-0.000401
6 H	0.000029	-0.000661	0.006354	-0.000954	-0.002219	0.000054
7 N	-0.084496	-0.006546	0.037577	-0.008890	0.045701	-0.002574
8 O	0.002544	-0.003015	0.010115	-0.001441	-0.002497	0.000165
9 O	-0.003839	-0.002912	-0.011474	-0.001786	0.007718	-0.000265
10 C	3.701139	0.031290	4.731627	0.115780	-4.915372	0.093012
11 C	-4.182481	0.317145	-10.019060	0.016571	6.193833	-0.039405
12 C	-5.505394	-0.043244	-5.242051	0.156864	4.623322	-0.015176
13 C	11.805025	0.032534	4.070772	0.041836	-3.816992	0.294737

14	H	0.032534	0.508513	-0.017087	-0.005051	0.007839	0.000283
15	C	4.070772	-0.017087	19.071199	0.003120	-6.808548	0.051394
16	H	0.041836	-0.005051	0.003120	0.511766	-0.008369	0.001145
17	C	-3.816992	0.007839	-6.808548	-0.008369	10.543561	-0.052437
18	H	0.294737	0.000283	0.051394	0.001145	-0.052437	0.548929
19	H	-0.019411	0.000533	0.399081	-0.002476	-0.008860	-0.001952
20	O	-0.358456	0.000599	-0.451264	0.000647	0.539586	-0.019545
21	H	0.059004	0.000157	0.074363	-0.000687	-0.122767	-0.002650
		19	20	21			
1	N	0.001353	-0.000003	0.000038			
2	N	-0.000524	-0.000009	0.000069			
3	C	-0.004256	0.000024	-0.000026			
4	H	-0.000042	-0.000001	0.000007			
5	C	0.004049	0.000284	-0.000425			
6	H	0.000089	0.000001	-0.000003			
7	N	-0.000629	0.000646	0.000030			
8	O	-0.000485	0.000020	-0.000048			
9	O	-0.000274	0.000001	-0.000030			
10	C	0.015926	-0.049347	0.027919			
11	C	-0.067758	0.132633	-0.012656			
12	C	0.016035	0.245982	-0.040074			
13	C	-0.019411	-0.358456	0.059004			
14	H	0.000533	0.000599	0.000157			
15	C	0.399081	-0.451264	0.074363			
16	H	-0.002476	0.000647	-0.000687			
17	C	-0.008860	0.539586	-0.122767			
18	H	-0.001952	-0.019545	-0.002650			
19	H	0.498706	-0.033147	0.005419			
20	O	-0.033147	8.297209	0.262863			
21	H	0.005419	0.262863	0.371073			

Total atomic charges:

		1					
1	N	-0.324798					
2	N	-0.324676					
3	C	0.806516					
4	H	0.362222					
5	C	0.805720					
6	H	0.362049					
7	N	-0.406603					
8	O	-0.590766					
9	O	-0.592763					
10	C	-1.546188					
11	C	0.230634					
12	C	0.196405					
13	C	0.392154					
14	H	0.183839					
15	C	0.420073					
16	H	0.183750					
17	C	-0.308594					
18	H	0.142701					
19	H	0.198624					
20	O	-0.568722					
21	H	0.378423					
Sum of Mulliken charges=		0.00000					

Cyanophenylurazol

 Gaussian 98: x86-Win32-G98RevA.6 19-Oct-1998
 03-Sep-2003

%CHK=Cyanophenylurazol
 Default route: MaxDisk=2000MB

 # RHF/6-31++G** opt

1/18=20,38=1/1,3;
 2/9=110,17=6,18=5/2;
 3/5=1,6=6,7=1111,11=1,25=1,30=1/1,2,3;
 4/7=1/1;
 5/5=2,38=4/2;
 6/7=2,8=2,9=2,10=2,28=1/1;
 7//1,2,3,16;
 1/18=20/3(1);
 99//99;
 2/9=110/2;
 3/5=1,6=6,7=1111,11=1,25=1,30=1/1,2,3;
 4/5=5,7=1,16=2/1;
 5/5=2,38=4/2;
 7//1,2,3,16;
 1/18=20/3(-5);
 2/9=110/2;
 6/7=2,8=2,9=2,10=2,19=2,28=1/1;
 99/9=1/99;

 opt

Symbolic z-matrix:
 Charge = 0 Multiplicity = 1

N							
N	1	R2					
C	1	R3	2	A3			
H	1	R4	2	A4	3	D4	0
C	2	R5	1	A5	3	D5	0
H	2	R6	1	A6	5	D6	0
N	3	R7	1	A7	2	D7	0
O	3	R8	1	A8	7	D8	0
O	5	R9	2	A9	1	D9	0
C	7	R10	3	A10	1	D10	0
C	10	R11	7	A11	3	D11	0
C	10	R12	7	A12	11	D12	0
C	11	R13	10	A13	7	D13	0
H	11	R14	10	A14	13	D14	0
C	12	R15	10	A15	7	D15	0
H	12	R16	10	A16	15	D16	0
C	13	R17	11	A17	10	D17	0
H	13	R18	11	A18	17	D18	0
H	15	R19	12	A19	10	D19	0
C	17	R20	13	A20	11	D20	0
N	20	R21	17	A21	13	D21	0

Variables:

R2	1.40496
R3	1.3815
R4	0.99853
R5	1.38149
R6	0.99852
R7	1.38633
R8	1.18548
R9	1.18548

```

R10          1.42487
R11          1.38648
R12          1.38648
R13          1.38102
R14          1.07143
R15          1.38102
R16          1.07143
R17          1.38887
R18          1.07391
R19          1.07391
R20          1.44471
R21          1.13619
A3           107.8001
A4           113.59801
A5           107.79961
A6           113.59909
A7           105.94939
A8           126.15882
A9           126.15907
A10          124.80927
A11          119.60026
A12          119.60041
A13          119.526
A14          120.25652
A15          119.52605
A16          120.25651
A17          119.99023
A18          120.0124
A19          120.01244
A20          119.91882
A21          179.99957
D4           -126.6251
D5           -15.25104
D6           -126.62512
D7            12.03296
D8           -179.18663
D9           -167.16908
D10          175.35676
D11          -136.0656
D12          179.99954
D13          -179.64208
D14          178.89002
D15          -179.64123
D16          178.88984
D17          -0.71453
D18          -179.64517
D19          179.64028
D20          -179.63944
D21          89.89303

```

GradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGradGrad
 Beryn optimization.
 Initialization pass.

```

-----
!   Initial Parameters   !
! (Angstroms and Degrees) !

```

```

-----
! Name  Definition          Value      Derivative Info.
!
```

```

--
! R1    R(1,2)              1.405      estimate D2E/DX2
!
```

```

! R2    R(1,3)              1.3815     estimate D2E/DX2

```

R3	R(1,4)	0.9985	estimate D2E/DX2
R4	R(2,5)	1.3815	estimate D2E/DX2
R5	R(2,6)	0.9985	estimate D2E/DX2
R6	R(3,7)	1.3863	estimate D2E/DX2
R7	R(3,8)	1.1855	estimate D2E/DX2
R8	R(5,7)	1.3863	estimate D2E/DX2
R9	R(5,9)	1.1855	estimate D2E/DX2
R10	R(7,10)	1.4249	estimate D2E/DX2
R11	R(10,11)	1.3865	estimate D2E/DX2
R12	R(10,12)	1.3865	estimate D2E/DX2
R13	R(11,13)	1.381	estimate D2E/DX2
R14	R(11,14)	1.0714	estimate D2E/DX2
R15	R(12,15)	1.381	estimate D2E/DX2
R16	R(12,16)	1.0714	estimate D2E/DX2
R17	R(13,17)	1.3889	estimate D2E/DX2
R18	R(13,18)	1.0739	estimate D2E/DX2
R19	R(15,17)	1.3889	estimate D2E/DX2
R20	R(15,19)	1.0739	estimate D2E/DX2
R21	R(17,20)	1.4447	estimate D2E/DX2
R22	R(20,21)	1.1362	estimate D2E/DX2
A1	A(2,1,3)	107.8001	estimate D2E/DX2
A2	A(2,1,4)	113.598	estimate D2E/DX2
A3	A(3,1,4)	113.4621	estimate D2E/DX2
A4	A(1,2,5)	107.7996	estimate D2E/DX2
A5	A(1,2,6)	113.5991	estimate D2E/DX2
A6	A(5,2,6)	113.4618	estimate D2E/DX2
A7	A(1,3,7)	105.9494	estimate D2E/DX2
A8	A(1,3,8)	126.1588	estimate D2E/DX2
A9	A(7,3,8)	127.8861	estimate D2E/DX2
A10	A(2,5,7)	105.949	estimate D2E/DX2
A11	A(2,5,9)	126.1591	estimate D2E/DX2
A12	A(7,5,9)	127.8866	estimate D2E/DX2
A13	A(3,7,5)	110.3813	estimate D2E/DX2

A14	A(3,7,10)	124.8093	estimate D2E/DX2
A15	A(5,7,10)	124.8095	estimate D2E/DX2
A16	A(7,10,11)	119.6003	estimate D2E/DX2
A17	A(7,10,12)	119.6004	estimate D2E/DX2
A18	A(11,10,12)	120.7993	estimate D2E/DX2
A19	A(10,11,13)	119.526	estimate D2E/DX2
A20	A(10,11,14)	120.2565	estimate D2E/DX2
A21	A(13,11,14)	120.2081	estimate D2E/DX2
A22	A(10,12,15)	119.5261	estimate D2E/DX2
A23	A(10,12,16)	120.2565	estimate D2E/DX2
A24	A(15,12,16)	120.2081	estimate D2E/DX2
A25	A(11,13,17)	119.9902	estimate D2E/DX2
A26	A(11,13,18)	120.0124	estimate D2E/DX2
A27	A(17,13,18)	119.9964	estimate D2E/DX2
A28	A(12,15,17)	119.9902	estimate D2E/DX2
A29	A(12,15,19)	120.0124	estimate D2E/DX2
A30	A(17,15,19)	119.9964	estimate D2E/DX2
A31	A(13,17,15)	120.1624	estimate D2E/DX2
A32	A(13,17,20)	119.9188	estimate D2E/DX2
A33	A(15,17,20)	119.9188	estimate D2E/DX2
A34	L(17,20,21,15,-1)	180.	estimate D2E/DX2
A35	L(17,20,21,15,-2)	180.0009	estimate D2E/DX2
D1	D(3,1,2,5)	-15.251	estimate D2E/DX2
D2	D(3,1,2,6)	-141.8762	estimate D2E/DX2
D3	D(4,1,2,5)	-141.8761	estimate D2E/DX2
D4	D(4,1,2,6)	91.4987	estimate D2E/DX2
D5	D(2,1,3,7)	12.033	estimate D2E/DX2
D6	D(2,1,3,8)	-167.1537	estimate D2E/DX2
D7	D(4,1,3,7)	138.7376	estimate D2E/DX2
D8	D(4,1,3,8)	-40.4491	estimate D2E/DX2
D9	D(1,2,5,7)	12.0442	estimate D2E/DX2
D10	D(1,2,5,9)	-167.1691	estimate D2E/DX2
D11	D(6,2,5,7)	138.7496	estimate D2E/DX2

D12	D(6,2,5,9)	-40.4637	estimate D2E/DX2
D13	D(1,3,7,5)	-4.6422	estimate D2E/DX2
D14	D(1,3,7,10)	175.3568	estimate D2E/DX2
D15	D(8,3,7,5)	174.5257	estimate D2E/DX2
D16	D(8,3,7,10)	-5.4753	estimate D2E/DX2
D17	D(2,5,7,3)	-4.661	estimate D2E/DX2
D18	D(2,5,7,10)	175.34	estimate D2E/DX2
D19	D(9,5,7,3)	174.5342	estimate D2E/DX2
D20	D(9,5,7,10)	-5.4648	estimate D2E/DX2
D21	D(3,7,10,11)	-136.0656	estimate D2E/DX2
D22	D(3,7,10,12)	43.9339	estimate D2E/DX2
D23	D(5,7,10,11)	43.9332	estimate D2E/DX2
D24	D(5,7,10,12)	-136.0672	estimate D2E/DX2
D25	D(7,10,11,13)	-179.6421	estimate D2E/DX2
D26	D(7,10,11,14)	-0.7521	estimate D2E/DX2
D27	D(12,10,11,13)	0.3584	estimate D2E/DX2
D28	D(12,10,11,14)	179.2484	estimate D2E/DX2
D29	D(7,10,12,15)	-179.6412	estimate D2E/DX2
D30	D(7,10,12,16)	-0.7514	estimate D2E/DX2
D31	D(11,10,12,15)	0.3583	estimate D2E/DX2
D32	D(11,10,12,16)	179.2481	estimate D2E/DX2
D33	D(10,11,13,17)	-0.7145	estimate D2E/DX2
D34	D(10,11,13,18)	179.6403	estimate D2E/DX2
D35	D(14,11,13,17)	-179.6051	estimate D2E/DX2
D36	D(14,11,13,18)	0.7497	estimate D2E/DX2
D37	D(10,12,15,17)	-0.7146	estimate D2E/DX2
D38	D(10,12,15,19)	179.6403	estimate D2E/DX2
D39	D(16,12,15,17)	-179.6049	estimate D2E/DX2
D40	D(16,12,15,19)	0.7499	estimate D2E/DX2
D41	D(11,13,17,15)	0.3605	estimate D2E/DX2
D42	D(11,13,17,20)	-179.6394	estimate D2E/DX2
D43	D(18,13,17,15)	-179.9943	estimate D2E/DX2
D44	D(18,13,17,20)	0.0058	estimate D2E/DX2

D45	D(12,15,17,13)	0.3606	estimate D2E/DX2
D46	D(12,15,17,20)	-179.6395	estimate D2E/DX2
D47	D(19,15,17,13)	-179.9942	estimate D2E/DX2
D48	D(19,15,17,20)	0.0057	estimate D2E/DX2

```

--
Item          Value      Threshold  Converged?
Maximum Force 0.000032  0.000450  YES
RMS Force     0.000006  0.000300  YES
Maximum Displ 0.000750  0.001800  YES
RMS Displ     0.000154  0.001200  YES
Predicted change in Energy=-6.457680D-09
Optimization completed.
  -- Stationary point found.
  
```

```

-----
!   Optimized Parameters   !
! (Angstroms and Degrees) !
  
```

Name	Definition	Value	Derivative Info.
R1	R(1,2)	1.4054	-DE/DX = 0.
R2	R(1,3)	1.3823	-DE/DX = 0.
R3	R(1,4)	0.9989	-DE/DX = 0.
R4	R(2,5)	1.3823	-DE/DX = 0.
R5	R(2,6)	0.9989	-DE/DX = 0.
R6	R(3,7)	1.3857	-DE/DX = 0.
R7	R(3,8)	1.1866	-DE/DX = 0.
R8	R(5,7)	1.3857	-DE/DX = 0.
R9	R(5,9)	1.1866	-DE/DX = 0.
R10	R(7,10)	1.4256	-DE/DX = 0.
R11	R(10,11)	1.3867	-DE/DX = 0.
R12	R(10,12)	1.3867	-DE/DX = 0.
R13	R(11,13)	1.3828	-DE/DX = 0.
R14	R(11,14)	1.072	-DE/DX = 0.
R15	R(12,15)	1.3828	-DE/DX = 0.
R16	R(12,16)	1.072	-DE/DX = 0.
R17	R(13,17)	1.3898	-DE/DX = 0.
R18	R(13,18)	1.074	-DE/DX = 0.

R19	R(15,17)	1.3898	-DE/DX =	0.
R20	R(15,19)	1.074	-DE/DX =	0.
R21	R(17,20)	1.4457	-DE/DX =	0.
R22	R(20,21)	1.1367	-DE/DX =	0.
A1	A(2,1,3)	107.7733	-DE/DX =	0.
A2	A(2,1,4)	113.462	-DE/DX =	0.
A3	A(3,1,4)	113.3777	-DE/DX =	0.
A4	A(1,2,5)	107.7733	-DE/DX =	0.
A5	A(1,2,6)	113.4621	-DE/DX =	0.
A6	A(5,2,6)	113.3777	-DE/DX =	0.
A7	A(1,3,7)	106.03	-DE/DX =	0.
A8	A(1,3,8)	126.1848	-DE/DX =	0.
A9	A(7,3,8)	127.7797	-DE/DX =	0.
A10	A(2,5,7)	106.0299	-DE/DX =	0.
A11	A(2,5,9)	126.1848	-DE/DX =	0.
A12	A(7,5,9)	127.7798	-DE/DX =	0.
A13	A(3,7,5)	110.3597	-DE/DX =	0.
A14	A(3,7,10)	124.8201	-DE/DX =	0.
A15	A(5,7,10)	124.8202	-DE/DX =	0.
A16	A(7,10,11)	119.575	-DE/DX =	0.
A17	A(7,10,12)	119.5749	-DE/DX =	0.
A18	A(11,10,12)	120.8501	-DE/DX =	0.
A19	A(10,11,13)	119.5335	-DE/DX =	0.
A20	A(10,11,14)	120.3114	-DE/DX =	0.
A21	A(13,11,14)	120.1467	-DE/DX =	0.
A22	A(10,12,15)	119.5335	-DE/DX =	0.
A23	A(10,12,16)	120.3114	-DE/DX =	0.
A24	A(15,12,16)	120.1467	-DE/DX =	0.
A25	A(11,13,17)	119.9206	-DE/DX =	0.
A26	A(11,13,18)	120.0312	-DE/DX =	0.
A27	A(17,13,18)	120.0477	-DE/DX =	0.
A28	A(12,15,17)	119.9206	-DE/DX =	0.
A29	A(12,15,19)	120.0312	-DE/DX =	0.

A30	A(17,15,19)	120.0477	-DE/DX =	0.
A31	A(13,17,15)	120.2373	-DE/DX =	0.
A32	A(13,17,20)	119.8814	-DE/DX =	0.
A33	A(15,17,20)	119.8814	-DE/DX =	0.
A34	L(17,20,21,15,-1)	180.	-DE/DX =	0.
A35	L(17,20,21,15,-2)	180.0004	-DE/DX =	0.
D1	D(3,1,2,5)	-14.9225	-DE/DX =	0.
D2	D(3,1,2,6)	-141.3182	-DE/DX =	0.
D3	D(4,1,2,5)	-141.3182	-DE/DX =	0.
D4	D(4,1,2,6)	92.2861	-DE/DX =	0.
D5	D(2,1,3,7)	11.7942	-DE/DX =	0.
D6	D(2,1,3,8)	-167.4066	-DE/DX =	0.
D7	D(4,1,3,7)	138.2393	-DE/DX =	0.
D8	D(4,1,3,8)	-40.9614	-DE/DX =	0.
D9	D(1,2,5,7)	11.7955	-DE/DX =	0.
D10	D(1,2,5,9)	-167.4085	-DE/DX =	0.
D11	D(6,2,5,7)	138.2408	-DE/DX =	0.
D12	D(6,2,5,9)	-40.9631	-DE/DX =	0.
D13	D(1,3,7,5)	-4.5574	-DE/DX =	0.
D14	D(1,3,7,10)	175.4425	-DE/DX =	0.
D15	D(8,3,7,5)	174.6264	-DE/DX =	0.
D16	D(8,3,7,10)	-5.3737	-DE/DX =	0.
D17	D(2,5,7,3)	-4.5596	-DE/DX =	0.
D18	D(2,5,7,10)	175.4405	-DE/DX =	0.
D19	D(9,5,7,3)	174.6275	-DE/DX =	0.
D20	D(9,5,7,10)	-5.3724	-DE/DX =	0.
D21	D(3,7,10,11)	-133.0751	-DE/DX =	0.
D22	D(3,7,10,12)	46.9248	-DE/DX =	0.
D23	D(5,7,10,11)	46.9248	-DE/DX =	0.
D24	D(5,7,10,12)	-133.0753	-DE/DX =	0.
D25	D(7,10,11,13)	-179.6855	-DE/DX =	0.
D26	D(7,10,11,14)	-0.7398	-DE/DX =	0.
D27	D(12,10,11,13)	0.3146	-DE/DX =	0.

D28	D(12, 10, 11, 14)	179.2603	-DE/DX = 0.
D29	D(7, 10, 12, 15)	-179.6854	-DE/DX = 0.
D30	D(7, 10, 12, 16)	-0.7397	-DE/DX = 0.
D31	D(11, 10, 12, 15)	0.3146	-DE/DX = 0.
D32	D(11, 10, 12, 16)	179.2603	-DE/DX = 0.
D33	D(10, 11, 13, 17)	-0.6268	-DE/DX = 0.
D34	D(10, 11, 13, 18)	179.6416	-DE/DX = 0.
D35	D(14, 11, 13, 17)	-179.5743	-DE/DX = 0.
D36	D(14, 11, 13, 18)	0.6941	-DE/DX = 0.
D37	D(10, 12, 15, 17)	-0.6268	-DE/DX = 0.
D38	D(10, 12, 15, 19)	179.6416	-DE/DX = 0.
D39	D(16, 12, 15, 17)	-179.5743	-DE/DX = 0.
D40	D(16, 12, 15, 19)	0.6942	-DE/DX = 0.
D41	D(11, 13, 17, 15)	0.316	-DE/DX = 0.
D42	D(11, 13, 17, 20)	-179.6839	-DE/DX = 0.
D43	D(18, 13, 17, 15)	-179.9524	-DE/DX = 0.
D44	D(18, 13, 17, 20)	0.0476	-DE/DX = 0.
D45	D(12, 15, 17, 13)	0.316	-DE/DX = 0.
D46	D(12, 15, 17, 20)	-179.684	-DE/DX = 0.
D47	D(19, 15, 17, 13)	-179.9524	-DE/DX = 0.
D48	D(19, 15, 17, 20)	0.0476	-DE/DX = 0.

Condensed to atoms (all electrons):

	1	2	3	4	5	6
1 N	7.524173	-0.459445	0.229322	0.317946	0.116827	0.024998
2 N	-0.459445	7.524186	0.116837	0.024998	0.229332	0.317944
3 C	0.229322	0.116837	4.771697	-0.047369	-0.104860	-0.021636
4 H	0.317946	0.024998	-0.047369	0.368209	-0.021635	-0.006913
5 C	0.116827	0.229332	-0.104860	-0.021635	4.771684	-0.047369
6 H	0.024998	0.317944	-0.021636	-0.006913	-0.047369	0.368211
7 N	-0.387123	-0.387134	0.303615	-0.006761	0.303606	-0.006760
8 O	-0.088105	0.008970	0.550491	-0.002518	0.020679	0.001004
9 O	0.008969	-0.088099	0.020681	0.001004	0.550494	-0.002518
10 C	0.044497	0.044477	-0.937646	0.023715	-0.937628	0.023715
11 C	-0.142009	0.154268	0.293906	0.007764	0.524894	-0.023162
12 C	0.154274	-0.142001	0.524836	-0.023162	0.293854	0.007765
13 C	-0.053194	-0.006126	-0.184737	0.002717	-0.341821	-0.004318
14 H	0.007929	-0.014374	-0.014191	-0.000686	0.037549	-0.000387
15 C	-0.006123	-0.053191	-0.341805	-0.004318	-0.184734	0.002717
16 H	-0.014375	0.007930	0.037550	-0.000387	-0.014191	-0.000686
17 C	0.031331	0.031330	0.056272	0.000700	0.056275	0.000700

18	H	-0.000779	0.000756	0.001086	0.000010	-0.002376	0.000024
19	H	0.000756	-0.000779	-0.002376	0.000024	0.001086	0.000010
20	C	0.006845	0.006845	-0.038478	0.000395	-0.038476	0.000395
21	N	-0.000006	-0.000006	0.000079	-0.000001	0.000079	-0.000001
		7	8	9	10	11	12
1	N	-0.387123	-0.088105	0.008969	0.044497	-0.142009	0.154274
2	N	-0.387134	0.008970	-0.088099	0.044477	0.154268	-0.142001
3	C	0.303615	0.550491	0.020681	-0.937646	0.293906	0.524836
4	H	-0.006761	-0.002518	0.001004	0.023715	0.007764	-0.023162
5	C	0.303606	0.020679	0.550494	-0.937628	0.524894	0.293854
6	H	-0.006760	0.001004	-0.002518	0.023715	-0.023162	0.007765
7	N	8.258580	-0.073926	-0.073931	-0.063439	-0.054971	-0.055057
8	O	-0.073926	8.230622	-0.000879	-0.216045	-0.076767	0.227423
9	O	-0.073931	-0.000879	8.230616	-0.216024	0.227382	-0.076740
10	C	-0.063439	-0.216045	-0.216024	24.198607	-9.497218	-9.497096
11	C	-0.054971	-0.076767	0.227382	-9.497218	27.373848	-6.071675
12	C	-0.055057	0.227423	-0.076740	-9.497096	-6.071675	27.373575
13	C	-0.154867	0.004210	0.015037	5.601688	-8.820427	-3.799678
14	H	-0.015114	-0.000864	-0.006058	0.150425	0.154895	0.007092
15	C	-0.154875	0.015043	0.004208	5.601634	-3.799691	-8.820166
16	H	-0.015114	-0.006057	-0.000864	0.150421	0.007089	0.154893
17	C	0.042931	0.000627	0.000627	-5.244475	4.319612	4.319634
18	H	-0.003682	0.000095	-0.000037	-0.001828	0.069291	-0.015812
19	H	-0.003682	-0.000037	0.000095	-0.001825	-0.015811	0.069292
20	C	0.010009	-0.001741	-0.001741	-1.283512	0.267108	0.267092
21	N	-0.000293	-0.000002	-0.000002	0.021259	0.004139	0.004140
		13	14	15	16	17	18
1	N	-0.053194	0.007929	-0.006123	-0.014375	0.031331	-0.000779
2	N	-0.006126	-0.014374	-0.053191	0.007930	0.031330	0.000756
3	C	-0.184737	-0.014191	-0.341805	0.037550	0.056272	0.001086
4	H	0.002717	-0.000686	-0.004318	-0.000387	0.000700	0.000010
5	C	-0.341821	0.037549	-0.184734	-0.014191	0.056275	-0.002376
6	H	-0.004318	-0.000387	0.002717	-0.000686	0.000700	0.000024
7	N	-0.154867	-0.015114	-0.154875	-0.015114	0.042931	-0.003682
8	O	0.004210	-0.000864	0.015043	-0.006057	0.000627	0.000095
9	O	0.015037	-0.006058	0.004208	-0.000864	0.000627	-0.000037
10	C	5.601688	0.150425	5.601634	0.150421	-5.244475	-0.001828
11	C	-8.820427	0.154895	-3.799691	0.007089	4.319612	0.069291
12	C	-3.799678	0.007092	-8.820166	0.154893	4.319634	-0.015812
13	C	16.092880	0.015828	2.578701	-0.004597	-4.120179	0.154952
14	H	0.015828	0.490608	-0.004598	-0.007090	-0.011050	-0.005575
15	C	2.578701	-0.004598	16.092638	0.015835	-4.120114	0.035991
16	H	-0.004597	-0.007090	0.015835	0.490607	-0.011050	0.002299
17	C	-4.120179	-0.011050	-4.120114	-0.011050	14.379610	0.080591
18	H	0.154952	-0.005575	0.035991	0.002299	0.080591	0.501062
19	H	0.035990	0.002299	0.154951	-0.005574	0.080589	-0.005816
20	C	-0.382669	-0.002800	-0.382710	-0.002801	-5.353794	0.021272
21	N	-0.064152	0.000507	-0.064149	0.000507	0.626355	-0.009709
		19	20	21			
1	N	0.000756	0.006845	-0.000006			
2	N	-0.000779	0.006845	-0.000006			
3	C	-0.002376	-0.038478	0.000079			
4	H	0.000024	0.000395	-0.000001			
5	C	0.001086	-0.038476	0.000079			
6	H	0.000010	0.000395	-0.000001			
7	N	-0.003682	0.010009	-0.000293			
8	O	-0.000037	-0.001741	-0.000002			
9	O	0.000095	-0.001741	-0.000002			
10	C	-0.001825	-1.283512	0.021259			
11	C	-0.015811	0.267108	0.004139			
12	C	0.069292	0.267092	0.004140			
13	C	0.035990	-0.382669	-0.064152			
14	H	0.002299	-0.002800	0.000507			
15	C	0.154951	-0.382710	-0.064149			
16	H	-0.005574	-0.002801	0.000507			
17	C	0.080589	-5.353794	0.626355			

7.

18	H	-0.005816	0.021272	-0.009709
19	H	0.501062	0.021271	-0.009709
20	C	0.021271	13.297409	-0.029143
21	N	-0.009709	-0.029143	6.887468

Final structure in terms of initial Z-matrix:

N
N,1,R2
C,1,R3,2,A3
H,1,R4,2,A4,3,D4,0
C,2,R5,1,A5,3,D5,0
H,2,R6,1,A6,5,D6,0
N,3,R7,1,A7,2,D7,0
O,3,R8,1,A8,7,D8,0
O,5,R9,2,A9,1,D9,0
C,7,R10,3,A10,1,D10,0
C,10,R11,7,A11,3,D11,0
C,10,R12,7,A12,11,D12,0
C,11,R13,10,A13,7,D13,0
H,11,R14,10,A14,13,D14,0
C,12,R15,10,A15,7,D15,0
H,12,R16,10,A16,15,D16,0
C,13,R17,11,A17,10,D17,0
H,13,R18,11,A18,17,D18,0
H,15,R19,12,A19,10,D19,0
C,17,R20,13,A20,11,D20,0
N,20,R21,17,A21,13,D21,0

Variables:

R2=1.40542078
R3=1.38231241
R4=0.99894147
R5=1.38231196
R6=0.99894134
R7=1.38568884
R8=1.18662433
R9=1.18662443
R10=1.42558672
R11=1.38665208
R12=1.38665206
R13=1.38281511
R14=1.0719766
R15=1.3828151
R16=1.07197665
R17=1.38977025
R18=1.0739506
R19=1.0739506
R20=1.44568977
R21=1.13674277
A3=107.77334092
A4=113.46197518
A5=107.77329519
A6=113.46212957
A7=106.02999822
A8=126.18478677
A9=126.18481941
A10=124.82010535
A11=119.57496592
A12=119.57494516
A13=119.53349393
A14=120.31135912
A15=119.53350203
A16=120.31135257
A17=119.92056523
A18=120.0311853
A19=120.0311895
A20=119.88135316

A21=179.99981306
 D4=-126.39569287
 D5=-14.92247742
 D6=-126.39576624
 D7=11.79415863
 D8=-179.20071014
 D9=-167.40845676
 D10=175.44251741
 D11=-133.07510658
 D12=179.99993345
 D13=-179.68549326
 D14=178.94573075
 D15=-179.68537142
 D16=178.94570417
 D17=-0.62678887
 D18=-179.73156956
 D19=179.64163887
 D20=-179.68393974
 D21=90.02073267
 1|1|UNPC-UNK|FOpt|RHF|6-31++G(d,p)|C9H6N4O2|PCUSER|04-Sep-2003|0|# RH
 F/6-31++G** OPT||opt||0,1|N,-3.4330766429,0.4393429066,-0.7024840124|N
 ,-3.4278755576,0.4783649769,0.702385305|C,-2.1183152695,0.4239298696,-
 1.129043|H,-3.9762720459,1.1671481273,-1.1185637806|C,-2.1553016385,0.
 1476677264,1.1289779747|H,-4.1432781507,-0.0810746601,1.1184504828|N,-
 1.3525611037,0.1809045886,-0.0000200442|O,-1.7400241086,0.600943368,-2
 .2397361689|O,-1.8368590407,-0.1225171002,2.2396858621|C,0.0604424673,
 -0.0080885546,0.0000015939|C,0.6095064541,-1.0654015665,0.7095239236|C
 ,0.8680933753,0.8677594375,-0.7095012285|C,1.9807213326,-1.2440760483,
 0.7143016566|H,-0.0219882225,-1.7303241759,1.2647051883|C,2.2380653649
 ,0.6797916296,-0.714239461|H,0.4335568008,1.6752667752,-1.264698317|C,
 2.795673099,-0.373934291,0.0000410045|H,2.4149160923,-2.0568841921,1.2
 658338101|H,2.8706232258,1.3499181666,-1.26575634|C,4.2286021642,-0.56
 55933582,0.0000613106|N,5.3553109326,-0.7162966508,0.0000742893|Versi
 on=x86-win32-G98RevA.6|HF=-711.8804623|RMSD=9.486e-009|RMSF=1.155e-005
 |Dipole=-2.495579,0.3337896,-0.0000363|PG=C01 [X(C9H6N4O2)]|@

File lengths (MBytes): RWF= 63 Int= 0 D2E= 0 Chk= 11 Scr= 1
 Normal termination of Gaussian 98.

 Gaussian 98: x86-win32-G98RevA.6 19-Oct-1998
 06-Sep-2003

 %CHK=Cyanophenylurazol
 Default route: MaxDisk=2000MB

 # RHF/6-31++G** geom=checkpoint guess=read pop=nbo

Interatomic angles:

N2-N1-C3=107.7733	N2-N1-H4=113.462	C3-N1-H4=113.3777
N2-H4-C3= 68.0686	N1-N2-C5=107.7733	C3-N1-C5= 73.1338
C3-N2-C5= 73.1337	H4-N1-C5=137.8677	H4-N2-C5=127.5109
H4-C3-C5= 91.4215	N1-N2-H6=113.4621	C3-N1-H6=127.5109
C3-N2-H6=137.8679	H4-N1-H6=111.809	H4-N2-H6=111.8091
C3-H4-H6= 83.3605	N1-H6-C5= 68.0686	C5-N2-H6=113.3777
C3-C5-H6= 91.4216	H4-H6-C5= 83.3604	N1-N2-N7= 71.4691
N1-C3-N7=106.03	N2-N7-C3= 73.5339	H4-N1-N7=136.8156
H4-N2-N7= 90.8192	H4-C3-N7=125.0262	N1-N7-C5= 73.5338
N2-C5-N7=106.0299	C3-N7-C5=110.3597	H6-N1-N7= 90.8193
H6-N2-N7=136.8164	H6-C5-N7=125.0267	N2-N1-O8=131.728
N1-C3-O8=126.1848	N2-C3-O8=160.5502	H4-N1-O8= 94.0671
N2-H4-O8= 94.702	H4-C3-O8=104.2106	C5-N1-O8= 97.7833
C5-C3-O8=162.2238	H6-N1-O8=151.7791	H6-H4-O8=109.287

page12

N7-N1-08= 61.7298	N2-N7-08= 97.2405	N7-C3-08=127.7797
H4-08-N7= 76.2731	C5-N7-08=134.1641	N1-N2-09=131.7282
C3-N2-09= 97.7833	H4-N2-09=151.7789	N1-C5-09=160.5509
N2-C5-09=126.1848	C3-C5-09=162.224	N1-H6-09= 94.7018
H6-N2-09= 94.0676	H4-H6-09=109.2866	H6-C5-09=104.2111
N1-N7-09= 97.2405	N7-N2-09= 61.7298	C3-N7-09=134.1641
N7-C5-09=127.7798	H6-09-N7= 76.2731	O8-N7-09=158.0649
N1-C3-C10=133.9312	N2-C3-C10= 98.2888	H4-C3-C10=150.9133
N1-C5-C10= 98.2888	N2-C5-C10=133.931	C5-C3-C10= 62.835
H6-C5-C10=150.9143	N1-N7-C10=161.4692	N2-N7-C10=161.469
C3-N7-C10=124.8201	C5-N7-C10=124.8202	N1-08-C10= 85.8003
O8-C3-C10= 99.8598	H4-08-C10=104.2924	C5-C10-08= 77.7289
O8-N7-C10=100.9675	N2-09-C10= 85.8002	C3-C10-09= 77.7289
O9-C5-C10= 99.8598	H6-09-C10=104.2926	O9-N7-C10=100.9675
O8-C10-09=101.1588	N1-N7-C11=155.8334	N2-N7-C11=137.2234
C3-N7-C11=140.7108	C5-N7-C11=102.5634	O8-N7-C11=120.7578
O9-N7-C11= 79.5687	C3-C10-C11=135.2595	C5-C10-C11= 99.6679
N7-C10-C11=119.575	O8-C10-C11=142.2712	O9-C10-C11= 80.5562
N1-N7-C12=137.2229	N2-N7-C12=155.8323	C3-N7-C12=102.5634
C5-N7-C12=140.711	O8-N7-C12= 79.5685	O9-N7-C12=120.7577
C3-C10-C12= 99.6679	C5-C10-C12=135.2595	N7-C10-C12=119.5749
O8-C10-C12= 80.5559	O9-C10-C12=142.2709	N7-C12-C11= 60.2494
C11-C10-C12=120.8501	C3-C10-C13=157.9084	C5-C10-C13=127.6396
N7-C10-C13=149.7612	O8-C10-C13=145.7507	O9-C10-C13=105.7009
N7-C11-C13=150.2071	C10-C11-C13=119.5335	N7-C12-C13= 90.0855
C12-C10-C13= 90.6635	C12-C11-C13= 89.9589	N1-C5-H14=123.3428
N2-C5-H14=149.6369	C3-C5-H14= 96.6206	H6-C5-H14=132.038
N1-N7-H14=135.1025	N2-N7-H14=114.6254	C3-N7-H14=142.4479
C5-N7-H14= 83.3808	O8-N7-H14=132.6605	N2-09-H14=113.144
C5-09-H14= 88.6958	H6-09-H14=118.1216	N7-09-H14= 64.7706
C3-C10-H14=111.959	C5-C10-H14= 75.4088	N7-C10-H14= 93.9322
O8-C10-H14=126.4638	O9-H14-C10= 75.6353	C5-H14-C11= 90.434
N7-C11-H14= 89.639	O9-H14-C11=102.7509	C10-C11-H14=120.3114
C12-N7-H14= 83.3601	C12-C10-H14=146.4914	C12-C11-H14=149.8823
C5-H14-C13=122.7616	N7-H14-C13=100.5944	O9-H14-C13=127.4475
C10-H14-C13= 68.1364	C13-C11-H14=120.1467	C12-C13-H14= 85.9597
C3-C10-C15=127.6395	C5-C10-C15=157.9085	N7-C10-C15=149.7612
O8-C10-C15=105.7007	O9-C10-C15=145.7506	N7-C11-C15= 90.0855
C11-C10-C15= 90.6635	N7-C12-C15=150.2072	C10-C12-C15=119.5335
C11-C12-C15= 89.9589	C13-C10-C15= 60.4776	C11-C13-C15= 90.0396
C12-C15-C13= 90.0396	H14-C10-C15=116.3066	H14-C11-C15=179.427
H14-C13-C15=115.7958	N1-C3-H16=149.635	N2-C3-H16=123.3419
H4-C3-H16=132.0359	C5-C3-H16= 96.6207	N1-N7-H16=114.6247
N2-N7-H16=135.1015	C3-N7-H16= 83.3807	C5-N7-H16=142.4481
N1-08-H16=113.1437	C3-08-H16= 88.6963	H4-08-H16=118.1208
N7-08-H16= 64.7708	O9-N7-H16=132.6602	C3-C10-H16= 75.4088
C5-C10-H16=111.959	N7-C10-H16= 93.9322	O8-H16-C10= 75.6355
O9-C10-H16=126.4635	C11-N7-H16= 83.3601	C11-C10-H16=146.4914
C3-H16-C12= 90.434	N7-C12-H16= 89.639	O8-H16-C12=102.7511
C10-C12-H16=120.3114	C11-C12-H16=149.8823	C13-C10-H16=116.3066
C13-C12-H16=179.427	H14-N7-H16=107.2196	H14-C10-H16=172.1356
C3-H16-C15=122.7616	N7-H16-C15=100.5944	O8-H16-C15=127.4477
C10-H16-C15= 68.1364	C11-C15-H16= 85.9597	C15-C12-H16=120.1467
C13-C15-H16=115.7958	C3-C10-C17=152.8349	C5-C10-C17=152.835
N7-C10-C17=179.9999	O8-C10-C17=129.4205	O9-C10-C17=129.4207
N7-C11-C17=120.0866	C10-C11-C17= 89.4122	N7-C12-C17=120.0866
C10-C12-C17= 89.4122	C11-C17-C12= 60.3256	C10-C13-C17= 89.6425
C11-C13-C17=119.9206	C12-C17-C13= 90.2811	H14-C10-C17= 86.0678
H14-C11-C17=150.2682	H14-C13-C17=145.6772	C10-C15-C17= 89.6425
C11-C17-C15= 90.2811	C12-C15-C17=119.9206	C13-C17-C15=120.2373
H16-C10-C17= 86.0678	H16-C12-C17=150.2682	H16-C15-C17=145.6772
N7-C11-H18=176.03	C10-C11-H18=145.3683	C12-C11-H18=115.7942
C10-C13-H18=150.3097	C11-C13-H18=120.0312	C12-C13-H18=179.7056
C5-H14-H18=146.1792	N7-H14-H18=126.4168	O9-H14-H18=140.3416
C10-H14-H18= 93.9588	H14-C11-H18= 94.3128	H14-C13-H18= 94.2751
C15-C11-H18= 85.9595	C15-C13-H18=149.929	C10-C17-H18= 85.8661

C11-H18-C17=	68.3379	C12-C17-H18=	116.0284	C17-C13-H18=	120.0477
H14-H18-C17=	94.1073	C15-C17-H18=	145.9848	N7-C12-H19=	176.03
C10-C12-H19=	145.3683	C11-C12-H19=	115.7942	C13-C12-H19=	85.9595
C10-C15-H19=	150.3097	C11-C15-H19=	179.7056	C12-C15-H19=	120.0312
C13-C15-H19=	149.929	C3-H16-H19=	146.1791	N7-H16-H19=	126.4168
O8-H16-H19=	140.3418	C10-H16-H19=	93.9588	H16-C12-H19=	94.3128
H16-C15-H19=	94.2751	C10-C17-H19=	85.8661	C11-C17-H19=	116.0284
C12-H19-C17=	68.3379	C13-C17-H19=	145.9848	C17-C15-H19=	120.0477
H16-H19-C17=	94.1073	H18-C17-H19=	171.7323	C10-C13-C20=	120.3558
C11-C13-C20=	150.633	C12-C13-C20=	90.4307	H14-C13-C20=	176.3904
C10-C15-C20=	120.3558	C11-C15-C20=	90.4307	C12-C15-C20=	150.633
C13-C15-C20=	60.5946	H16-C15-C20=	176.3904	C10-C17-C20=	180.
C11-C17-C20=	149.8372	C12-C17-C20=	149.8372	C13-C17-C20=	119.8814
C15-C17-C20=	119.8814	C11-H18-C20=	101.059	H18-C13-C20=	89.3345
H14-H18-C20=	126.8286	C15-C20-H18=	82.5502	H18-C17-C20=	94.1339
C12-H19-C20=	101.059	C13-C20-H19=	82.5502	H19-C15-C20=	89.3345
H16-H19-C20=	126.8286	H19-C17-C20=	94.1339	H18-C20-H19=	106.2897
C10-C17-N21=	179.9999	C11-C17-N21=	149.8372	C12-C17-N21=	149.8372
C13-C17-N21=	119.8814	C15-C17-N21=	119.8814	H18-C17-N21=	94.1339
H19-C17-N21=	94.1339	C13-C20-N21=	150.5946	C15-C20-N21=	150.5946
C17-C20-N21=	179.9998	H18-C20-N21=	126.8552	H19-C20-N21=	126.8552

Stoichiometry C9H6N4O2

Total atomic charges:

	1		
1	N	-0.316709	
2	N	-0.316717	
3	C	0.786726	
4	H	0.366265	
5	C	0.786730	
6	H	0.366265	
7	N	-0.462013	
8	O	-0.592223	
9	O	-0.592222	
10	C	-1.963699	
11	C	1.097536	
12	C	1.097517	
13	C	-0.565239	
14	H	0.215656	
15	C	-0.565243	
16	H	0.215657	
17	C	0.833478	
18	H	0.178187	
19	H	0.178187	
20	C	-0.380778	
21	N	-0.367360	
Sum of Mulliken charges=			0.00000

NITROPHENYLURAZOLE

 Gaussian 98: x86-win32-G98RevA.6 19-Oct-1998
 24-Aug-2003

%CHK= NITROPHENYLURAZOLE-3
 Default route: MaxDisk=2000MB

 # RHF / 6-31++G** opt

1/18=20,38=1/1,3;
 2/9=110,17=6,18=5/2;
 3/5=1,6=6,7=1111,11=1,25=1,30=1/1,2,3;
 4/7=1/1;
 5/5=2,38=4/2;
 6/7=2,8=2,9=2,10=2,28=1/1;
 7//1,2,3,16;
 1/18=20/3(1);
 99//99;
 2/9=110/2;
 3/5=1,6=6,7=1111,11=1,25=1,30=1/1,2,3;
 4/5=5,7=1,16=2/1;
 5/5=2,38=4/2;
 7//1,2,3,16;
 1/18=20/3(-5);
 2/9=110/2;
 6/7=2,8=2,9=2,10=2,19=2,28=1/1;
 99/9=1/99;

opt & freq of NITROPHENYLURAZOLE

Symbolic Z-matrix:

Charge = 0 Multiplicity = 1

N							
N	1	R2					
C	1	R3	2	A3			
H	1	R4	2	A4	3	D4	0
C	2	R5	1	A5	3	D5	0
H	2	R6	1	A6	5	D6	0
N	3	R7	1	A7	2	D7	0
O	3	R8	1	A8	7	D8	0
O	5	R9	2	A9	1	D9	0
C	7	R10	3	A10	1	D10	0
C	10	R11	7	A11	3	D11	0
C	10	R12	7	A12	11	D12	0
C	11	R13	10	A13	7	D13	0
H	11	R14	10	A14	13	D14	0
C	12	R15	10	A15	7	D15	0
H	12	R16	10	A16	15	D16	0
C	13	R17	11	A17	10	D17	0
H	13	R18	11	A18	17	D18	0
H	15	R19	12	A19	10	D19	0
N	17	R20	13	A20	11	D20	0
O	20	R21	17	A21	13	D21	0
O	20	R22	17	A22	21	D22	0

variables:

R2	1.40751
R3	1.37185
R4	0.99351
R5	1.37185
R6	0.99351
R7	1.3933
R8	1.21371
R9	1.21371

R10	1.42286
R11	1.39033
R12	1.39033
R13	1.38378
R14	1.06874
R15	1.38378
R16	1.06874
R17	1.38387
R18	1.06953
R19	1.06953
R20	1.44963
R21	1.22797
R22	1.22797
A3	108.59425
A4	117.79927
A5	108.59486
A6	117.79803
A7	105.6986
A8	126.6144
A9	126.61405
A10	124.66885
A11	119.61591
A12	119.61574
A13	119.66941
A14	120.43376
A15	119.66934
A16	120.4338
A17	118.97531
A18	120.80271
A19	120.80265
A20	119.03046
A21	118.29196
A22	118.2919
D4	-140.92118
D5	-9.17457
D6	-140.92026
D7	7.16242
D8	-178.77257
D9	-171.59012
D10	177.21653
D11	-137.86273
D12	-179.99923
D13	-179.73633
D14	178.73226
D15	-179.73777
D16	178.73244
D17	-0.51782
D18	-179.74909
D19	179.73295
D20	-179.73902
D21	0.48563
D22	179.98418

Grad
 Berny optimization.
 Initialization pass.

```

-----
!   Initial Parameters   !
! (Angstroms and Degrees) !

```

```

-----
! Name  Definition          Value      Derivative Info.
!
```

--

! R1	R(1,2)	1.4075	estimate D2E/DX2
! R2	R(1,3)	1.3718	estimate D2E/DX2
! R3	R(1,4)	0.9935	estimate D2E/DX2
! R4	R(2,5)	1.3718	estimate D2E/DX2
! R5	R(2,6)	0.9935	estimate D2E/DX2
! R6	R(3,7)	1.3933	estimate D2E/DX2
! R7	R(3,8)	1.2137	estimate D2E/DX2
! R8	R(5,7)	1.3933	estimate D2E/DX2
! R9	R(5,9)	1.2137	estimate D2E/DX2
! R10	R(7,10)	1.4229	estimate D2E/DX2
! R11	R(10,11)	1.3903	estimate D2E/DX2
! R12	R(10,12)	1.3903	estimate D2E/DX2
! R13	R(11,13)	1.3838	estimate D2E/DX2
! R14	R(11,14)	1.0687	estimate D2E/DX2
! R15	R(12,15)	1.3838	estimate D2E/DX2
! R16	R(12,16)	1.0687	estimate D2E/DX2
! R17	R(13,17)	1.3839	estimate D2E/DX2
! R18	R(13,18)	1.0695	estimate D2E/DX2
! R19	R(15,17)	1.3839	estimate D2E/DX2
! R20	R(15,19)	1.0695	estimate D2E/DX2
! R21	R(17,20)	1.4496	estimate D2E/DX2
! R22	R(20,21)	1.228	estimate D2E/DX2
! R23	R(20,22)	1.228	estimate D2E/DX2
! A1	A(2,1,3)	108.5943	estimate D2E/DX2
! A2	A(2,1,4)	117.7993	estimate D2E/DX2
! A3	A(3,1,4)	120.1411	estimate D2E/DX2
! A4	A(1,2,5)	108.5949	estimate D2E/DX2
! A5	A(1,2,6)	117.798	estimate D2E/DX2
! A6	A(5,2,6)	120.141	estimate D2E/DX2
! A7	A(1,3,7)	105.6986	estimate D2E/DX2
! A8	A(1,3,8)	126.6144	estimate D2E/DX2
! A9	A(7,3,8)	127.6742	estimate D2E/DX2
! A10	A(2,5,7)	105.6989	estimate D2E/DX2

A11	A(2, 5, 9)	126.614	estimate D2E/DX2
A12	A(7, 5, 9)	127.6735	estimate D2E/DX2
A13	A(3, 7, 5)	110.6625	estimate D2E/DX2
A14	A(3, 7, 10)	124.6689	estimate D2E/DX2
A15	A(5, 7, 10)	124.6686	estimate D2E/DX2
A16	A(7, 10, 11)	119.6159	estimate D2E/DX2
A17	A(7, 10, 12)	119.6157	estimate D2E/DX2
A18	A(11, 10, 12)	120.7683	estimate D2E/DX2
A19	A(10, 11, 13)	119.6694	estimate D2E/DX2
A20	A(10, 11, 14)	120.4338	estimate D2E/DX2
A21	A(13, 11, 14)	119.8847	estimate D2E/DX2
A22	A(10, 12, 15)	119.6693	estimate D2E/DX2
A23	A(10, 12, 16)	120.4338	estimate D2E/DX2
A24	A(15, 12, 16)	119.8847	estimate D2E/DX2
A25	A(11, 13, 17)	118.9753	estimate D2E/DX2
A26	A(11, 13, 18)	120.8027	estimate D2E/DX2
A27	A(17, 13, 18)	120.2215	estimate D2E/DX2
A28	A(12, 15, 17)	118.9754	estimate D2E/DX2
A29	A(12, 15, 19)	120.8027	estimate D2E/DX2
A30	A(17, 15, 19)	120.2215	estimate D2E/DX2
A31	A(13, 17, 15)	121.9391	estimate D2E/DX2
A32	A(13, 17, 20)	119.0305	estimate D2E/DX2
A33	A(15, 17, 20)	119.0304	estimate D2E/DX2
A34	A(17, 20, 21)	118.292	estimate D2E/DX2
A35	A(17, 20, 22)	118.2919	estimate D2E/DX2
A36	A(21, 20, 22)	123.4161	estimate D2E/DX2
D1	D(3, 1, 2, 5)	-9.1746	estimate D2E/DX2
D2	D(3, 1, 2, 6)	-150.0948	estimate D2E/DX2
D3	D(4, 1, 2, 5)	-150.0957	estimate D2E/DX2
D4	D(4, 1, 2, 6)	68.984	estimate D2E/DX2
D5	D(2, 1, 3, 7)	7.1624	estimate D2E/DX2
D6	D(2, 1, 3, 8)	-171.6102	estimate D2E/DX2
D7	D(4, 1, 3, 7)	147.0103	estimate D2E/DX2

D8	D(4,1,3,8)	-31.7623	estimate D2E/DX2
D9	D(1,2,5,7)	7.1455	estimate D2E/DX2
D10	D(1,2,5,9)	-171.5901	estimate D2E/DX2
D11	D(6,2,5,7)	146.9919	estimate D2E/DX2
D12	D(6,2,5,9)	-31.7437	estimate D2E/DX2
D13	D(1,3,7,5)	-2.7859	estimate D2E/DX2
D14	D(1,3,7,10)	177.2165	estimate D2E/DX2
D15	D(8,3,7,5)	175.9694	estimate D2E/DX2
D16	D(8,3,7,10)	-4.0282	estimate D2E/DX2
D17	D(2,5,7,3)	-2.7576	estimate D2E/DX2
D18	D(2,5,7,10)	177.24	estimate D2E/DX2
D19	D(9,5,7,3)	175.9601	estimate D2E/DX2
D20	D(9,5,7,10)	-4.0423	estimate D2E/DX2
D21	D(3,7,10,11)	-137.8627	estimate D2E/DX2
D22	D(3,7,10,12)	42.138	estimate D2E/DX2
D23	D(5,7,10,11)	42.14	estimate D2E/DX2
D24	D(5,7,10,12)	-137.8592	estimate D2E/DX2
D25	D(7,10,11,13)	-179.7363	estimate D2E/DX2
D26	D(7,10,11,14)	-1.0041	estimate D2E/DX2
D27	D(12,10,11,13)	0.2629	estimate D2E/DX2
D28	D(12,10,11,14)	178.9951	estimate D2E/DX2
D29	D(7,10,12,15)	-179.7378	estimate D2E/DX2
D30	D(7,10,12,16)	-1.0053	estimate D2E/DX2
D31	D(11,10,12,15)	0.263	estimate D2E/DX2
D32	D(11,10,12,16)	178.9954	estimate D2E/DX2
D33	D(10,11,13,17)	-0.5178	estimate D2E/DX2
D34	D(10,11,13,18)	179.7331	estimate D2E/DX2
D35	D(14,11,13,17)	-179.2571	estimate D2E/DX2
D36	D(14,11,13,18)	0.9938	estimate D2E/DX2
D37	D(10,12,15,17)	-0.5178	estimate D2E/DX2
D38	D(10,12,15,19)	179.7329	estimate D2E/DX2
D39	D(16,12,15,17)	-179.2573	estimate D2E/DX2
D40	D(16,12,15,19)	0.9935	estimate D2E/DX2

D41	D(11,13,17,15)	0.2609	estimate	D2E/DX2
D42	D(11,13,17,20)	-179.739	estimate	D2E/DX2
D43	D(18,13,17,15)	-179.9885	estimate	D2E/DX2
D44	D(18,13,17,20)	0.0116	estimate	D2E/DX2
D45	D(12,15,17,13)	0.2608	estimate	D2E/DX2
D46	D(12,15,17,20)	-179.7392	estimate	D2E/DX2
D47	D(19,15,17,13)	-179.9884	estimate	D2E/DX2
D48	D(19,15,17,20)	0.0115	estimate	D2E/DX2
D49	D(13,17,20,21)	0.4856	estimate	D2E/DX2
D50	D(13,17,20,22)	-179.5302	estimate	D2E/DX2
D51	D(15,17,20,21)	-179.5143	estimate	D2E/DX2
D52	D(15,17,20,22)	0.4699	estimate	D2E/DX2

```

-----
Item                Value      Threshold  Converged?
Maximum Force      0.000032   0.000450   YES
RMS Force          0.000009   0.000300   YES
Maximum Displacement 0.000542   0.001800   YES
RMS Displacement   0.000136   0.001200   YES
Predicted change in Energy=-4.003196D-08
Optimization completed.
-- Stationary point found.

```

```

-----
!   Optimized Parameters   !
! (Angstroms and Degrees) !

```

```

-----
! Name  Definition                Value      Derivative Info.

```

R1	R(1,2)	1.4052	-DE/DX = 0.
R2	R(1,3)	1.3817	-DE/DX = 0.
R3	R(1,4)	0.999	-DE/DX = 0.
R4	R(2,5)	1.3817	-DE/DX = 0.
R5	R(2,6)	0.999	-DE/DX = 0.
R6	R(3,7)	1.3867	-DE/DX = 0.
R7	R(3,8)	1.1864	-DE/DX = 0.
R8	R(5,7)	1.3867	-DE/DX = 0.
R9	R(5,9)	1.1864	-DE/DX = 0.
R10	R(7,10)	1.4243	-DE/DX = 0.

V₁

! R11	R(10,11)	1.3874	-DE/DX =	0.
! R12	R(10,12)	1.3874	-DE/DX =	0.
! R13	R(11,13)	1.3829	-DE/DX =	0.
! R14	R(11,14)	1.0715	-DE/DX =	0.
! R15	R(12,15)	1.3829	-DE/DX =	0.
! R16	R(12,16)	1.0715	-DE/DX =	0.
! R17	R(13,17)	1.3822	-DE/DX =	0.
! R18	R(13,18)	1.0713	-DE/DX =	0.
! R19	R(15,17)	1.3822	-DE/DX =	0.
! R20	R(15,19)	1.0713	-DE/DX =	0.
! R21	R(17,20)	1.4613	-DE/DX =	0.
! R22	R(20,21)	1.194	-DE/DX =	0.
! R23	R(20,22)	1.194	-DE/DX =	0.
! A1	A(2,1,3)	107.8049	-DE/DX =	0.
! A2	A(2,1,4)	113.5104	-DE/DX =	0.
! A3	A(3,1,4)	113.4308	-DE/DX =	0.
! A4	A(1,2,5)	107.8058	-DE/DX =	0.
! A5	A(1,2,6)	113.5084	-DE/DX =	0.
! A6	A(5,2,6)	113.4313	-DE/DX =	0.
! A7	A(1,3,7)	106.01	-DE/DX =	0.
! A8	A(1,3,8)	126.2222	-DE/DX =	0.
! A9	A(7,3,8)	127.7638	-DE/DX =	0.
! A10	A(2,5,7)	106.0107	-DE/DX =	0.
! A11	A(2,5,9)	126.2217	-DE/DX =	0.
! A12	A(7,5,9)	127.7629	-DE/DX =	0.
! A13	A(3,7,5)	110.3147	-DE/DX =	0.
! A14	A(3,7,10)	124.8428	-DE/DX =	0.
! A15	A(5,7,10)	124.8425	-DE/DX =	0.
! A16	A(7,10,11)	119.5265	-DE/DX =	0.
! A17	A(7,10,12)	119.5263	-DE/DX =	0.
! A18	A(11,10,12)	120.9472	-DE/DX =	0.
! A19	A(10,11,13)	119.6158	-DE/DX =	0.
! A20	A(10,11,14)	120.3782	-DE/DX =	0.

A21	A(13, 11, 14)	119.9977	-DE/DX =	0.
A22	A(10, 12, 15)	119.6157	-DE/DX =	0.
A23	A(10, 12, 16)	120.3782	-DE/DX =	0.
A24	A(15, 12, 16)	119.9977	-DE/DX =	0.
A25	A(11, 13, 17)	118.8633	-DE/DX =	0.
A26	A(11, 13, 18)	120.879	-DE/DX =	0.
A27	A(17, 13, 18)	120.257	-DE/DX =	0.
A28	A(12, 15, 17)	118.8634	-DE/DX =	0.
A29	A(12, 15, 19)	120.879	-DE/DX =	0.
A30	A(17, 15, 19)	120.2569	-DE/DX =	0.
A31	A(13, 17, 15)	122.091	-DE/DX =	0.
A32	A(13, 17, 20)	118.9545	-DE/DX =	0.
A33	A(15, 17, 20)	118.9545	-DE/DX =	0.
A34	A(17, 20, 21)	117.5837	-DE/DX =	0.
A35	A(17, 20, 22)	117.5837	-DE/DX =	0.
A36	A(21, 20, 22)	124.8327	-DE/DX =	0.
D1	D(3, 1, 2, 5)	-15.0065	-DE/DX =	0.
D2	D(3, 1, 2, 6)	-141.5309	-DE/DX =	0.
D3	D(4, 1, 2, 5)	-141.5309	-DE/DX =	0.
D4	D(4, 1, 2, 6)	91.9447	-DE/DX =	0.
D5	D(2, 1, 3, 7)	11.8627	-DE/DX =	0.
D6	D(2, 1, 3, 8)	-167.4499	-DE/DX =	0.
D7	D(4, 1, 3, 7)	138.4338	-DE/DX =	0.
D8	D(4, 1, 3, 8)	-40.8787	-DE/DX =	0.
D9	D(1, 2, 5, 7)	11.8416	-DE/DX =	0.
D10	D(1, 2, 5, 9)	-167.4199	-DE/DX =	0.
D11	D(6, 2, 5, 7)	138.4111	-DE/DX =	0.
D12	D(6, 2, 5, 9)	-40.8504	-DE/DX =	0.
D13	D(1, 3, 7, 5)	-4.5973	-DE/DX =	0.
D14	D(1, 3, 7, 10)	175.4044	-DE/DX =	0.
D15	D(8, 3, 7, 5)	174.7012	-DE/DX =	0.
D16	D(8, 3, 7, 10)	-5.2971	-DE/DX =	0.
D17	D(2, 5, 7, 3)	-4.5622	-DE/DX =	0.

D18	D(2, 5, 7, 10)	175.4361	-DE/DX =	0.
D19	D(9, 5, 7, 3)	174.6843	-DE/DX =	0.
D20	D(9, 5, 7, 10)	-5.3175	-DE/DX =	0.
D21	D(3, 7, 10, 11)	-134.7178	-DE/DX =	0.
D22	D(3, 7, 10, 12)	45.2831	-DE/DX =	0.
D23	D(5, 7, 10, 11)	45.2842	-DE/DX =	0.
D24	D(5, 7, 10, 12)	-134.7149	-DE/DX =	0.
D25	D(7, 10, 11, 13)	-179.7204	-DE/DX =	0.
D26	D(7, 10, 11, 14)	-0.7695	-DE/DX =	0.
D27	D(12, 10, 11, 13)	0.2787	-DE/DX =	0.
D28	D(12, 10, 11, 14)	179.2296	-DE/DX =	0.
D29	D(7, 10, 12, 15)	-179.7221	-DE/DX =	0.
D30	D(7, 10, 12, 16)	-0.7708	-DE/DX =	0.
D31	D(11, 10, 12, 15)	0.2788	-DE/DX =	0.
D32	D(11, 10, 12, 16)	179.2301	-DE/DX =	0.
D33	D(10, 11, 13, 17)	-0.5483	-DE/DX =	0.
D34	D(10, 11, 13, 18)	179.7517	-DE/DX =	0.
D35	D(14, 11, 13, 17)	-179.5032	-DE/DX =	0.
D36	D(14, 11, 13, 18)	0.7968	-DE/DX =	0.
D37	D(10, 12, 15, 17)	-0.548	-DE/DX =	0.
D38	D(10, 12, 15, 19)	179.7517	-DE/DX =	0.
D39	D(16, 12, 15, 17)	-179.5034	-DE/DX =	0.
D40	D(16, 12, 15, 19)	0.7963	-DE/DX =	0.
D41	D(11, 13, 17, 15)	0.2766	-DE/DX =	0.
D42	D(11, 13, 17, 20)	-179.7238	-DE/DX =	0.
D43	D(18, 13, 17, 15)	179.9785	-DE/DX =	0.
D44	D(18, 13, 17, 20)	-0.0219	-DE/DX =	0.
D45	D(12, 15, 17, 13)	0.2758	-DE/DX =	0.
D46	D(12, 15, 17, 20)	-179.7238	-DE/DX =	0.
D47	D(19, 15, 17, 13)	179.9781	-DE/DX =	0.
D48	D(19, 15, 17, 20)	-0.0216	-DE/DX =	0.
D49	D(13, 17, 20, 21)	0.36	-DE/DX =	0.
D50	D(13, 17, 20, 22)	-179.628	-DE/DX =	0.

v²

```
! D51  D(15,17,20,21)  -179.6404  -DE/DX =  0.
!
! D52  D(15,17,20,22)   0.3716   -DE/DX =  0.
!
```

--

Condensed to atoms (all electrons):

		1	2	3	4	5	6
1	N	7.516053	-0.452432	0.229048	0.319566	0.143832	0.022412
2	N	-0.452432	7.515878	0.143674	0.022410	0.228931	0.319597
3	C	0.229048	0.143674	4.798778	-0.045413	-0.146544	-0.020515
4	H	0.319566	0.022410	-0.045413	0.366168	-0.020528	-0.006660
5	C	0.143832	0.228931	-0.146544	-0.020528	4.798873	-0.045414
6	H	0.022412	0.319597	-0.020515	-0.006660	-0.045414	0.366143
7	N	-0.372819	-0.372649	0.271747	-0.005511	0.271844	-0.005536
8	O	-0.087640	0.007839	0.538329	-0.002414	0.019194	0.000933
9	O	0.007859	-0.087734	0.019162	0.000930	0.538275	-0.002410
10	C	0.064192	0.064558	-0.955249	0.023155	-0.955592	0.023152
11	C	-0.196162	0.133205	0.555152	0.007644	0.653211	-0.025417
12	C	0.133115	-0.196353	0.654009	-0.025425	0.555831	0.007623
13	C	-0.052735	0.048739	-0.308352	0.004357	-0.676936	-0.004394
14	H	0.007057	-0.019817	-0.012726	-0.000922	0.046035	-0.000263
15	C	0.048669	-0.052784	-0.677123	-0.004409	-0.308280	0.004363
16	H	-0.019794	0.007049	0.046041	-0.000262	-0.012720	-0.000921
17	C	0.012306	0.012311	0.118028	-0.000361	0.118071	-0.000362
18	H	-0.000266	0.001973	-0.000611	0.000073	-0.006811	0.000017
19	H	0.001972	-0.000265	-0.006811	0.000017	-0.000613	0.000073
20	N	-0.000173	-0.000174	-0.000933	-0.000007	-0.000935	-0.000007
21	O	-0.000004	-0.000004	0.000218	-0.000001	0.000529	-0.000001
22	O	-0.000004	-0.000004	0.000527	-0.000001	0.000217	-0.000001
		7	8	9	10	11	12
1	N	-0.372819	-0.087640	0.007859	0.064192	-0.196162	0.133115
2	N	-0.372649	0.007839	-0.087734	0.064558	0.133205	-0.196353
3	C	0.271747	0.538329	0.019162	-0.955249	0.555152	0.654009
4	H	-0.005511	-0.002414	0.000930	0.023155	0.007644	-0.025425
5	C	0.271844	0.019194	0.538275	-0.955592	0.653211	0.555831
6	H	-0.005536	0.000933	-0.002410	0.023152	-0.025417	0.007623
7	N	8.234028	-0.073124	-0.073050	-0.088712	0.054224	0.055784
8	O	-0.073124	8.232798	-0.000885	-0.255110	-0.083000	0.274142
9	O	-0.073050	-0.000885	8.232889	-0.255477	0.274813	-0.083454
10	C	-0.088712	-0.255110	-0.255477	30.389480	-10.750941	-10.753198
11	C	0.054224	-0.083000	0.274813	-10.750941	39.358238	-2.905610
12	C	0.055784	0.274142	-0.083454	-10.753198	-2.905610	39.364383
13	C	-0.254027	-0.007406	0.019693	5.346344	-14.499162	-11.012272
14	H	-0.008612	-0.000160	-0.003257	0.107380	0.244565	0.034502
15	C	-0.253774	0.019587	-0.007366	5.346787	-11.010789	-14.503515
16	H	-0.008616	-0.003273	-0.000166	0.107387	0.034554	0.244690
17	C	0.109910	0.009895	0.009903	-10.422166	4.288211	4.288155
18	H	-0.005008	-0.000135	-0.000983	0.002589	-0.226965	-0.093844
19	H	-0.005007	-0.000982	-0.000135	0.002597	-0.093883	-0.227029
20	N	-0.001264	0.000078	0.000078	0.030972	-0.278602	-0.278390
21	O	-0.000231	-0.000002	-0.000005	0.034690	0.416206	0.045392
22	O	-0.000232	-0.000005	-0.000002	0.034637	0.045397	0.416056
		13	14	15	16	17	18
1	N	-0.052735	0.007057	0.048669	-0.019794	0.012306	-0.000266
2	N	0.048739	-0.019817	-0.052784	0.007049	0.012311	0.001973
3	C	-0.308352	-0.012726	-0.677123	0.046041	0.118028	-0.000611
4	H	0.004357	-0.000922	-0.004409	-0.000262	-0.000361	0.000073
5	C	-0.676936	0.046035	-0.308280	-0.012720	0.118071	-0.006811
6	H	-0.004394	-0.000263	0.004363	-0.000921	-0.000362	0.000017
7	N	-0.254027	-0.008612	-0.253774	-0.008616	0.109910	-0.005008
8	O	-0.007406	-0.000160	0.019587	-0.003273	0.009895	-0.000135
9	O	0.019693	-0.003257	-0.007366	-0.000166	0.009903	-0.000983
10	C	5.346344	0.107380	5.346787	0.107387	-10.422166	0.002589

V&

11	C	-14.499162	0.244565	-11.010789	0.034554	4.288211	-0.226965
12	C	-11.012272	0.034502	-14.503515	0.244690	4.288155	-0.093844
13	C	32.111290	-0.053303	0.946145	0.001671	-7.242125	0.233876
14	H	-0.053303	0.482401	0.001723	-0.004326	-0.033164	-0.004703
15	C	0.946145	0.001723	32.113595	-0.053457	-7.241920	0.200896
16	H	0.001671	-0.004326	-0.053457	0.482413	-0.033149	-0.000121
17	C	-7.242125	-0.033164	-7.241920	-0.033149	24.579915	0.220357
18	H	0.233876	-0.004703	0.200896	-0.000121	0.220357	0.447100
19	H	0.200933	-0.000122	0.233916	-0.004706	0.220376	0.001688
20	N	0.378238	-0.001063	0.378492	-0.001064	-0.708656	-0.016692
21	O	-0.039955	0.004241	-0.030318	0.000873	-0.423331	-0.019321
22	O	-0.030174	0.000874	-0.039990	0.004242	-0.423247	-0.002540
		19	20	21	22		
1	N	0.001972	-0.000173	-0.000004	-0.000004		
2	N	-0.000265	-0.000174	-0.000004	-0.000004		
3	C	-0.006811	-0.000933	0.000218	0.000527		
4	H	0.000017	-0.000007	-0.000001	-0.000001		
5	C	-0.000613	-0.000935	0.000529	0.000217		
6	H	0.000073	-0.000007	-0.000001	-0.000001		
7	N	-0.005007	-0.001264	-0.000231	-0.000232		
8	O	-0.000982	0.000078	-0.000002	-0.000005		
9	O	-0.000135	0.000078	-0.000005	-0.000002		
10	C	0.002597	0.030972	0.034690	0.034637		
11	C	-0.093883	-0.278602	0.416206	0.045397		
12	C	-0.227029	-0.278390	0.045392	0.416056		
13	C	0.200933	0.378238	-0.039955	-0.030174		
14	H	-0.000122	-0.001063	0.004241	0.000874		
15	C	0.233916	0.378492	-0.030318	-0.039990		
16	H	-0.004706	-0.001064	0.000873	0.004242		
17	C	0.220376	-0.708656	-0.423331	-0.423247		
18	H	0.001688	-0.016692	-0.019321	-0.002540		
19	H	0.447103	-0.016695	-0.002542	-0.019317		
20	N	-0.016695	6.625619	0.361532	0.361527		
21	O	-0.002542	0.361532	7.895332	-0.061764		
22	O	-0.019317	0.361527	-0.061764	7.895336		

Final structure in terms of initial Z-matrix:

N
N,1,R2
C,1,R3,2,A3
H,1,R4,2,A4,3,D4,0
C,2,R5,1,A5,3,D5,0
H,2,R6,1,A6,5,D6,0
N,3,R7,1,A7,2,D7,0
O,3,R8,1,A8,7,D8,0
O,5,R9,2,A9,1,D9,0
C,7,R10,3,A10,1,D10,0
C,10,R11,7,A11,3,D11,0
C,10,R12,7,A12,11,D12,0
C,11,R13,10,A13,7,D13,0
H,11,R14,10,A14,13,D14,0
C,12,R15,10,A15,7,D15,0
H,12,R16,10,A16,15,D16,0
C,13,R17,11,A17,10,D17,0
H,13,R18,11,A18,17,D18,0
H,15,R19,12,A19,10,D19,0
N,17,R20,13,A20,11,D20,0
O,20,R21,17,A21,13,D21,0
O,20,R22,17,A22,21,D22,0
Variables:
R2=1.4052
R3=1.3817
R4=0.999
R5=1.3817
R6=0.999

R7=1.3867
R8=1.1864
R9=1.1864
R10=1.4243
R11=1.3874
R12=1.3874
R13=1.3829
R14=1.0715
R15=1.3829
R16=1.0715
R17=1.3822
R18=1.0713
R19=1.0713
R20=1.4613
R21=1.194
R22=1.194
A3=107.8049
A4=113.5104
A5=107.8058
A6=113.5084
A7=106.01
A8=126.2222
A9=126.2217
A10=124.8428
A11=119.5265
A12=119.5263
A13=119.6158
A14=120.3782
A15=119.6157
A16=120.3782
A17=118.8633
A18=120.879
A19=120.879
A20=118.9545
A21=117.5837
A22=117.5837
D4=-126.7702#
D5=-15.0065
D6=-126.7704#
D7=11.8627
D8=-179.2409#
D9=-167.4199
D10=175.4044
D11=-134.7178
D12=179.9983#
D13=-179.7204
D14=178.9094#
D15=-179.7221
D16=178.9090#
D17=-0.5483
D18=-179.6150#
D19=179.7517
D20=-179.7238
D21=0.36
D22=179.9930#

From 6-31G** opt

N-N= 1.064509158677D+03 E-N=-4.059544053367D+03 KE= 8.220667206142D+02
1|1|UNPC-UNK|FOpt|RHF|6-31++G(d,p)|C8H6N4O4|PCUSER|30-Aug-2003|0|# RH
F / 6-31++G** GEOM=CHECKPOINT GUESS=READ OPT||opt & freq of NITROPHENY
LURAZOLE||0,1|N,-3.8392787965,-0.6268997998,0.3171927867|N,-3.83930761
02,0.627001192,-0.3170164536|C,-2.5350546971,-1.081554471,0.3543099152
|H,-4.4760749238,-1.2797198055,-0.090543998|C,-2.5350226761,1.08145241
69,-0.3547027705|H,-4.4758272728,1.279906738,0.0910187335|N,-1.7427652
881,-0.0000430434,-0.0001324948|O,-2.1837018434,-2.1821758427,0.623963

```

5912|o,-2.1836530194,2.1821480425,-0.6240300526|c,-0.3184194584,-0.000
0346957,-0.0000530649|c,0.3653151305,1.0743536787,0.5505924543|c,0.365
3836848,-1.0744088436,-0.5506401617|c,1.7481855928,1.0789618666,0.5464
348949|H,-0.1719418064,1.9050103238,0.9623137205|c,1.7482540674,-1.078
9878302,-0.5463616788|H,-0.1718203146,-1.9050725668,-0.9624151519|c,2.
4173660782,-0.0000080236,0.0000689709|H,2.2965439631,1.8998729227,0.96
25621836|H,2.2966648975,-1.8998874785,-0.9624421756|N,3.8786376593,0.0
000068739,0.0001319664|o,4.431484935,0.9411258844,0.4841901205|o,4.431
5458494,-0.9409994942,-0.4840755718||Version=x86-win32-G98RevA.6|HF=-8
23.6206742|RMSD=7.064e-009|RMSF=2.090e-005|Dipole=-2.6623814,-0.000083
,-0.0000724|PG=C01 [X(C8H6N4O4)]||@

```

-- FROM THE BACK OF A SUGAR PACKET

Job cpu time: 0 days 16 hours 46 minutes 16.0 seconds.

File lengths (MBytes): RWF= 56 Int= 0 D2E= 0 Chk= 12 Scr= 1

Normal termination of Gaussian 98.

Gaussian 98: x86-win32-G98RevA.6 19-Oct-1998
03-Sep-2003

%CHK= NITROPHENYLURAZOLE-3

Default route: MaxDisk=2000MB

RHF / 6-31++G** Geom=checkpoint guess=read pop=nbo

Interatomic angles:

N2-N1-C3=107.8049	N2-N1-H4=113.5104	C3-N1-H4=113.4308
N2-H4-C3= 68.0525	N1-N2-C5=107.8058	C3-N1-C5= 73.1982
C3-N2-C5= 73.1988	H4-N1-C5=138.0033	H4-N2-C5=127.6036
H4-C3-C5= 91.4251	N1-N2-H6=113.5084	C3-N1-H6=127.6033
C3-N2-H6=138.0018	H4-N1-H6=111.7009	H4-N2-H6=111.6993
C3-H4-H6= 83.4195	N1-H6-C5= 68.0533	C5-N2-H6=113.4313
C3-C5-H6= 91.4237	H4-H6-C5= 83.4203	N2-N1-N7= 71.4738
N1-C3-N7=106.01	N2-N7-C3= 73.5051	H4-N1-N7=136.9794
H4-N2-N7= 90.8665	H4-C3-N7=125.0697	N1-N7-C5= 73.5065
N2-C5-N7=106.0107	C3-N7-C5=110.3147	H6-N1-N7= 90.8642
H6-N2-N7=136.9675	H6-C5-N7=125.0621	N2-N1-O8=131.7516
N1-C3-O8=126.2222	N2-C3-O8=160.5893	H4-N1-O8= 94.108
N2-H4-O8= 94.6739	H4-C3-O8=104.2356	C5-N1-O8= 97.8366
C5-C3-O8=162.2403	H6-N1-O8=151.8621	H6-H4-O8=109.3379
N7-N1-O8= 61.7528	N2-N7-O8= 97.21	N7-C3-O8=127.7638
H4-O8-N7= 76.3022	C5-N7-O8=134.1168	N1-N2-O9=131.7491
C3-N2-O9= 97.8365	H4-N2-O9=151.8656	N1-C5-O9=160.5791
N2-C5-O9=126.2217	C3-C5-O9=162.237	N1-H6-O9= 94.6765
H6-N2-O9= 94.1013	H4-H6-O9=109.3432	H6-C5-O9=104.2283
N1-N7-O9= 97.2095	N7-N2-O9= 61.7523	C3-N7-O9=134.1164
N7-C5-O9=127.7629	H6-O9-N7= 76.3018	O8-N7-O9=158.0126
N1-C3-C10=133.8737	N2-C3-C10= 98.2518	H4-C3-C10=150.9527
N1-C5-C10= 98.2502	N2-C5-C10=133.8761	C3-C5-C10= 62.8218
H6-C5-C10=150.9363	N1-N7-C10=161.4715	N2-N7-C10=161.4748
C3-N7-C10=124.8428	C5-N7-C10=124.8425	N1-O8-C10= 85.7661
O8-C3-C10= 99.8769	H4-O8-C10=104.2957	C5-C10-O8= 77.7487
O8-N7-C10=100.9938	N2-O9-C10= 85.7673	C3-C10-O9= 77.7484
O9-C5-C10= 99.8765	H6-O9-C10=104.2935	O9-N7-C10=100.9937
O8-C10-O9=101.1709	N1-N7-C11=156.2963	N2-N7-C11=136.875
C3-N7-C11=141.5141	C5-N7-C11=102.0529	O8-N7-C11=121.4469
O9-N7-C11= 79.0021	C3-C10-C11=135.8944	C5-C10-C11= 99.1359
N7-C10-C11=119.5265	O8-C10-C11=143.493	O9-C10-C11= 79.7457
N1-N7-C12=136.883	N2-N7-C12=156.314	C3-N7-C12=102.0527
C5-N7-C12=141.5125	O8-N7-C12= 79.0046	O9-N7-C12=121.449
C3-C10-C12= 99.1355	C5-C10-C12=135.8931	N7-C10-C12=119.5263

08-C10-C12= 79.7489
 C11-C10-C12=120.9472
 N7-C10-C13=149.6631
 N7-C11-C13=150.2902
 C12-C10-C13= 90.8103
 N2-C5-H14=150.6799
 N1-N7-H14=135.5368
 C5-N7-H14= 82.5806
 C5-O9-H14= 89.5233
 C3-C10-H14=112.547
 08-C10-H14=127.5434
 N7-C11-H14= 89.7055
 C12-N7-H14= 83.4447
 C5-H14-C13=123.3055
 C10-H14-C13= 68.2082
 C3-C10-C15=127.2048
 08-C10-C15=105.175
 C11-C10-C15= 90.8103
 C11-C12-C15= 90.0896
 C12-C15-C13= 89.9092
 H14-C13-C15=115.7194
 H4-C3-H16=132.7054
 N2-N7-H16=135.552
 N1-O8-H16=114.113
 N7-O8-H16= 65.3837
 C5-C10-H16=112.5461
 09-C10-H16=127.5472
 C3-H16-C12= 90.8184
 C10-C12-H16=120.3782
 C13-C12-H16=179.372
 C3-H16-C15=123.3065
 C10-H16-C15= 68.2082
 C13-C15-H16=115.7194
 N7-C10-C17=179.9993
 N7-C11-C17=119.7319
 C10-C12-C17= 89.0569
 C11-C13-C17=118.8633
 H14-C11-C17=150.5558
 C11-C17-C15= 91.5147
 H16-C10-C17= 86.0724
 N7-C11-H18=175.7253
 C10-C13-H18=151.1256
 C5-H14-H18=146.6236
 C10-H14-H18= 93.8222
 C15-C11-H18= 85.7539
 C11-H18-C17= 67.7122
 H14-H18-C17= 93.3507
 C10-C12-H19=145.0577
 C10-C15-H19=151.1255
 C13-C15-H19=149.2114
 08-H16-H19=141.3459
 H16-C15-H19= 95.0691
 C12-H19-C17= 67.7123
 H16-H19-C17= 93.3507
 C11-C13-N20=150.3247
 C10-C15-N20=120.0795
 C15-C13-N20= 60.4165
 C11-C17-N20=149.5305
 C15-C17-N20=118.9545
 H14-H18-N20=126.7109
 C12-H19-N20=101.0724
 H16-H19-N20=126.711
 C10-C13-O21=146.4383
 H14-C13-O21=157.5049
 C11-C17-O21=121.8118
 C15-C17-O21=146.6724
 09-C10-C12=143.4972
 C3-C10-C13=158.5752
 08-C10-C13=146.5342
 C10-C11-C13=119.6158
 C12-C11-C13= 90.0897
 C3-C5-H14= 97.567
 N2-N7-H14=114.2182
 08-N7-H14=133.9059
 H6-O9-H14=119.2218
 C5-C10-H14= 74.8373
 09-H14-C10= 76.4315
 09-H14-C11=103.784
 C12-C10-H14=146.5444
 N7-H14-C13=100.634
 C13-C11-H14=119.9977
 C5-C10-C15=158.573
 09-C10-C15=146.5361
 N7-C12-C15=150.2902
 C13-C10-C15= 60.674
 H14-C10-C15=116.4093
 N1-C3-H16=150.71
 C5-C3-H16= 97.5668
 C3-N7-H16= 82.5799
 C3-O8-H16= 89.515
 09-N7-H16=133.9104
 N7-C10-H16= 93.9275
 C11-N7-H16= 83.4447
 N7-C12-H16= 89.7054
 C11-C12-H16=149.9002
 H14-N7-H16=107.293
 N7-H16-C15=100.634
 C11-C15-H16= 85.9403
 C3-C10-C17=152.8223
 08-C10-C17=129.4149
 C10-C11-C17= 89.0569
 C11-C17-C12= 60.939
 C12-C17-C13= 91.5147
 H14-C13-C17=144.6738
 C12-C15-C17=118.8634
 H16-C12-C17=150.5558
 C10-C11-H18=145.0578
 C11-C13-H18=120.879
 N7-H14-H18=126.248
 H14-C11-H18= 94.5574
 C15-C13-H18=149.2114
 C12-C17-H18=117.2239
 C15-C17-H18=147.8002
 C11-C12-H19=115.5319
 C11-C15-H19=178.9854
 C3-H16-H19=146.6249
 C10-H16-H19= 93.8221
 C10-C17-H19= 86.7547
 C13-C17-H19=147.8002
 H18-C17-H19=173.5094
 C12-C13-N20= 90.1954
 C11-C15-N20= 90.1954
 H16-C15-N20=176.1355
 C12-C17-N20=149.5305
 C11-H18-N20=101.0724
 C15-N20-H18= 82.978
 C13-N20-H19= 82.978
 H19-C17-N20= 93.2453
 C11-C13-O21=176.6626
 C15-C13-O21= 86.7756
 C12-C17-O21=177.249
 C11-H18-O21=127.8141
 N7-C12-C11= 60.2015
 C5-C10-C13=127.2047
 09-C10-C13=105.1726
 N7-C12-C13= 89.9805
 N1-C5-H14=124.4692
 H6-C5-H14=132.6726
 C3-N7-H14=143.7525
 N2-O9-H14=114.109
 N7-O9-H14= 65.3865
 N7-C10-H14= 93.9278
 C5-H14-C11= 90.8177
 C10-C11-H14=120.3782
 C12-C11-H14=149.9002
 09-H14-C13=128.6752
 C12-C13-H14= 85.9403
 N7-C10-C15=149.6629
 N7-C11-C15= 89.9804
 C10-C12-C15=119.6157
 C11-C13-C15= 89.9091
 H14-C11-C15=179.3716
 N2-C3-H16=124.4832
 N1-N7-H16=114.2287
 C5-N7-H16=143.7505
 H4-O8-H16=119.2345
 C3-C10-H16= 74.8367
 08-H16-C10= 76.4284
 C11-C10-H16=146.5444
 08-H16-C12=103.7802
 C13-C10-H16=116.4093
 H14-C10-H16=172.1447
 08-H16-C15=128.6713
 C15-C12-H16=119.9977
 C5-C10-C17=152.8213
 09-C10-C17=129.4142
 N7-C12-C17=119.732
 C10-C13-C17= 88.6175
 H14-C10-C17= 86.0723
 C10-C15-C17= 88.6175
 C13-C17-C15=122.091
 H16-C15-C17=144.6739
 C12-C11-H18=115.532
 C12-C13-H18=178.9854
 09-H14-H18=141.3489
 H14-C13-H18= 95.0692
 C10-C17-H18= 86.7547
 C17-C13-H18=120.257
 N7-C12-H19=175.7255
 C13-C12-H19= 85.7538
 C12-C15-H19=120.879
 N7-H16-H19=126.248
 H16-C12-H19= 94.5574
 C11-C17-H19=117.2238
 C17-C15-H19=120.2569
 C10-C13-N20=120.0794
 H14-C13-N20=176.1354
 C12-C15-N20=150.3248
 C10-C17-N20=179.9999
 C13-C17-N20=118.9545
 H18-C13-N20= 88.795
 H18-C17-N20= 93.2453
 H19-C15-N20= 88.795
 H18-N20-H19=106.7889
 C12-C13-O21=116.5548
 C10-C17-O21=152.2813
 C13-C17-O21= 91.2362
 C13-H18-O21= 94.1366

H14-H18-O21=153.4533	H18-C17-O21= 65.5271	H19-C17-O21=120.9635
C13-N20-O21= 88.0006	C15-N20-O21=147.1663	C17-N20-O21=117.5837
H18-O21-N20= 89.067	H19-N20-O21=170.9732	C10-C15-O22=146.4383
C11-C15-O22=116.5548	C12-C15-O22=176.6621	C13-C15-O22= 86.7756
H16-C15-O22=157.5048	C10-C17-O22=152.2812	C11-C17-O22=177.2489
C12-C17-O22=121.8118	C13-C17-O22=146.6723	C15-C17-O22= 91.2362
H18-C17-O22=120.9634	C12-H19-O22=127.8141	C15-H19-O22= 94.1366
H16-H19-O22=153.4533	H19-C17-O22= 65.5271	C13-N20-O22=147.1662
C15-N20-O22= 88.0006	C17-N20-O22=117.5837	H18-N20-O22=170.9729
H19-O22-N20= 89.067	C13-O21-O22= 93.2234	C15-O22-O21= 93.2234
C17-O22-O21= 62.2813	H18-O21-O22=116.6502	H19-O22-O21=116.6502
O21-N20-O22=124.8327		

stoichiometry C8H6N4O4

Total atomic charges:

1	N	-0.324050	
2	N	-0.323951	
3	C	0.799566	
4	H	0.367594	
5	C	0.799530	
6	H	0.367590	
7	N	-0.469365	
8	O	-0.588659	
9	O	-0.588677	
10	C	-1.141475	
11	C	0.005111	
12	C	0.005408	
13	C	0.889555	
14	H	0.213656	
15	C	0.889553	
16	H	0.213654	
17	C	-1.458955	
18	H	0.269432	
19	H	0.269432	
20	N	0.168118	
21	O	-0.181535	
22	O	-0.181532	

Sum of Mulliken charges= 0.00000

بحث و نتیجه گیری

برای انجام این مطالعه، ترکیبات زیر انتخاب شدند:

(I) ۴،۲،۱-تری آزولیدین-۵،۳-دی اون (یورازول)

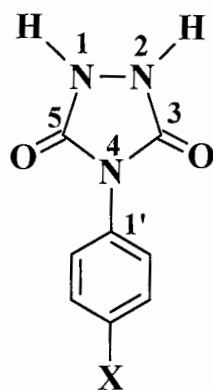
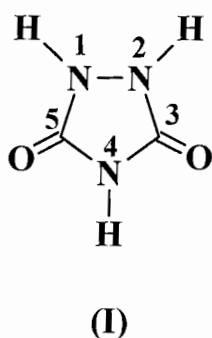
(II) ۴-فنیل-۴،۲،۱-تری آزولیدین-۵،۳-دی اون (۴-فنیل یورازول)

(III) ۴'-آمینو-۴-فنیل-۴،۲،۱-تری آزولیدین-۵،۳-دی اون (۴-آمینوفنیل یورازول)

(IV) ۴'-هیدروکسی-۴-فنیل-۴،۲،۱-تری آزولیدین-۵،۳-دی اون (۴-هیدروکسی فنیل یورازول)

(V) ۴'-نیترو-۴-فنیل-۴،۲،۱-تری آزولیدین-۵،۳-دی اون (۴-نیتروفنیل یورازول)

(VI) ۴'-سیانو-۴-فنیل-۴،۲،۱-تری آزولیدین-۵،۳-دی اون (۴-سیانوفنیل یورازول)



(II) X= H

(III) X= NH₂

(IV) X= OH

(V) X= NO₂

(VI) X= CN

در مرحله اول، ساختار هر کدام از این ترکیبات به وسیله یک Z-ماتریکس برای نرم افزار Gaussian 98 تعریف شده و سپس به کمک این نرم افزار و استفاده از مجموعه پایه 6-31G توسط روش کوانتم مکانیکی *ab initio* RHF بدون هیچ محدودیت تقارنی بهینه شدند. سپس Z-ماتریکس نهایی این فرایند به عنوان Z-ماتریکس ورودی مجموعه پایه 6-31G** به کار رفته، ساختار مولکولها با استفاده از این مجموعه پایه نیز بهینه شدند و در نهایت Z-ماتریکس نهایی این فرایند به عنوان Z-ماتریکس ورودی مجموعه پایه 6-31++G** به کار رفت تا ساختارها به وسیله این مجموعه پایه نیز بهینه شوند. هدف از این کار بررسی اثر مجموعه پایه‌های مختلف روی خواص ساختاری مولکولها بود. نتایج این بررسی در جدول‌های ۱ تا ۶ آورده شده است.

جدول (۱): تعدادی از مشخصه‌های ساختاری بهینه شده در سطح تئوری RHF برای ترکیبات I

Variable	6-31G	6-31G**	6-31++G**
N-N	141.2	141.0	141.0
C-N(1)	137.6	138.7	138.7
H-N	99.2	99.8	99.9
C(3)-N(4)	138.1	137.3	137.3
C=O	121.4	118.6	118.7
H-N(4)	99.1	99.4	99.5
C-N-N	108.6	107.7	107.7
H-N-N	118.1	113.3	113.4
N-C-N	104.7	105.2	105.3
O=C-N(1)	127.4	126.8	126.8
H-N(7)-C	123.6	123.9	124.0
C(3)-N-C(5)	112.8	112.2	112.0
H-N-N-C	-143.1	-126.4	-126.5
C-N-N-C	-8.5	-14.8	-14.3
N-C-N-N	6.6	11.7	11.3
H-N-N-H	65.1	92.4	92.6
O=C-N-N	-172.3	-167.8	-168.1
O=C-N-H	-30.5	-41.5	-41.7
O=C-N-H	-3.7	-5.1	-5.0

تمامی طول پیوندها بر حسب پیکومتر و تمامی زاویه‌ها بر حسب درجه می‌باشد.

جدول (۲): تعدادی از مشخصه‌های ساختاری بهینه شده که در سطح تئوری RHF برای ترکیب II

Variable	6-31G	6-31G**	6-31++G**
N-N	140.7	140.6	140.7
C-N(1)	137.4	138.5	138.5
H-N	99.3	99.9	99.9
C(3)-N(4)	139.0	138.3	138.2
C=O	121.4	118.6	118.7
C(1')-N	142.3	142.8	142.9
C-N-N	108.5	107.6	107.6
H-N-N	118.0	113.3	113.3
N-C-N	105.6	106.0	106.1
O=C-N(1)	126.5	125.9	126.0
C(1')-N-C	124.5	124.7	124.7
C(3)-N-C(5)	111.0	110.6	110.6
H-N-N-C	-141.7	-125.8	-125.8
C-N-N-C	-9.2	-15.3	-14.9
N-C-N-N	7.2	12.1	11.8
H-N-N-H	67.5	93.0	93.6
O=C-N-N	-172.5	-167.7	-167.3
O=C-N-H	-31.6	-41.7	-42.0
C-C-N-C	131.7	131.8	125.3
O=C-N-C(1')	-3.5	-4.8	-4.9

تمامی طول پیوندها بر حسب پیکومتر و تمامی زاویه‌ها بر حسب درجه می‌باشد.

جدول (۳): تعدادی از مشخصه‌های ساختاری بهینه شده که در سطح تئوری RHF برای ترکیب III

Variable	6-31G	6-31G**	6-31++G**
N-N	140.9	140.8	140.8
C-N(1)	137.7	138.7	138.7
H-N	99.3	99.8	99.9
C(3)-N(4)	138.7	138.0	138.1
C=O	121.4	118.6	118.7
C(1')-N	142.8	142.8	142.9
C-N-N	108.4	107.5	107.6
H-N-N	117.7	113.2	113.1
N-C-N	105.6	106.0	106.1
O=C-N(1)	126.5	125.9	125.9
C(1')-N-C	124.4	124.6	124.7
C(3)-N-C(5)	111.2	110.7	110.7
H-N-N-C	-140.9	-125.5	-125.5
C-N-N-C	-9.5	-15.5	-15.0
N-C-N-N	7.4	12.3	11.9
H-N-N-H	68.7	93.6	94.0
O=C-N-N	-172.1	-167.8	-167.7
O=C-N-H	-32.4	-42.2	-42.2
C-C-N-C	115.3	120.0	103.0
O=C-N-C(1')	-3.4	-4.7	-5.0

تمامی طول پیوندها بر حسب پیکومتر و تمامی زاویه‌ها بر حسب درجه می‌باشد.

جدول (۴): تعدادی از مشخصه‌های ساختاری بهینه شده که در سطح تئوری RHF برای ترکیب IV

Variable	6-31G	6-31G**	6-31++G**
N-N	140.7	140.6	140.7
C-N(1)	137.4	138.5	138.6
H-N	99.3	99.8	99.9
C(3)-N(4)	138.9	138.2	138.1
C=O	121.4	118.6	118.7
C(1')-N	142.8	142.8	142.9
C-N-N	108.5	107.6	107.6
H-N-N	118.0	113.3	113.2
N-C-N	105.6	106.0	106.1
O=C-N(1)	126.6	126.0	126.0
C(1')-N-C	124.5	124.7	124.7
C(3)-N-C(5)	111.1	110.6	110.6
H-N-N-C	-141.8	-140.9	-140.4
C-N-N-C	-8.7	-15.0	-14.7
N-C-N-N	6.8	11.8	11.6
H-N-N-H	67.5	93.2	93.8
O=C-N-N	-171.2	-166.9	-167.3
O=C-N-H	-30.8	-41.0	-41.6
C-C-N-C	-127.0	125.6	-114.4
O=C-N-C(1')	-4.8	-6.0	-5.8

تمامی طول پیوندها بر حسب پیکومتر و تمامی زاویه‌ها بر حسب درجه می‌باشد.

جدول (۵): تعدادی از مشخصه‌های ساختاری بهینه شده که در سطح تئوری RHF برای ترکیب V

Variable	6-31G	6-31G**	6-31++G**
N-N	140.4	140.5	140.5
C-N(1)	136.8	138.1	138.2
H-N	99.2	99.9	99.9
C(3)-N(4)	139.6	138.7	138.7
C=O	121.4	118.5	118.6
C(1')-N	142.3	142.3	142.4
C-N-N	108.9	107.6	107.8
H-N-N	118.6	113.7	113.5
N-C-N	105.5	105.9	106.0
O=C-N(1)	126.7	126.2	126.2
C(1')-N-C	124.7	124.8	124.8
C(3)-N-C(5)	110.7	110.3	110.3
H-N-N-C	-144.4	-126.8	-141.5
C-N-N-C	-8.5	-15.3	-15.0
N-C-N-N	6.8	12.1	11.8
H-N-N-H	62.8	91.2	91.9
O=C-N-N	-172.1	-167.2	-167.4
O=C-N-H	-28.9	-40.3	-40.9
C-C-N-C	-141.7	137.4	134.7
O=C-N-C(1')	-3.9	-5.4	-5.3

تمامی طول پیوندها بر حسب پیکومتر و تمامی زاویه‌ها بر حسب درجه می‌باشد.

جدول (۶): تعدادی از مشخصه‌های ساختاری بهینه شده که در سطح تئوری RHF برای ترکیب VI

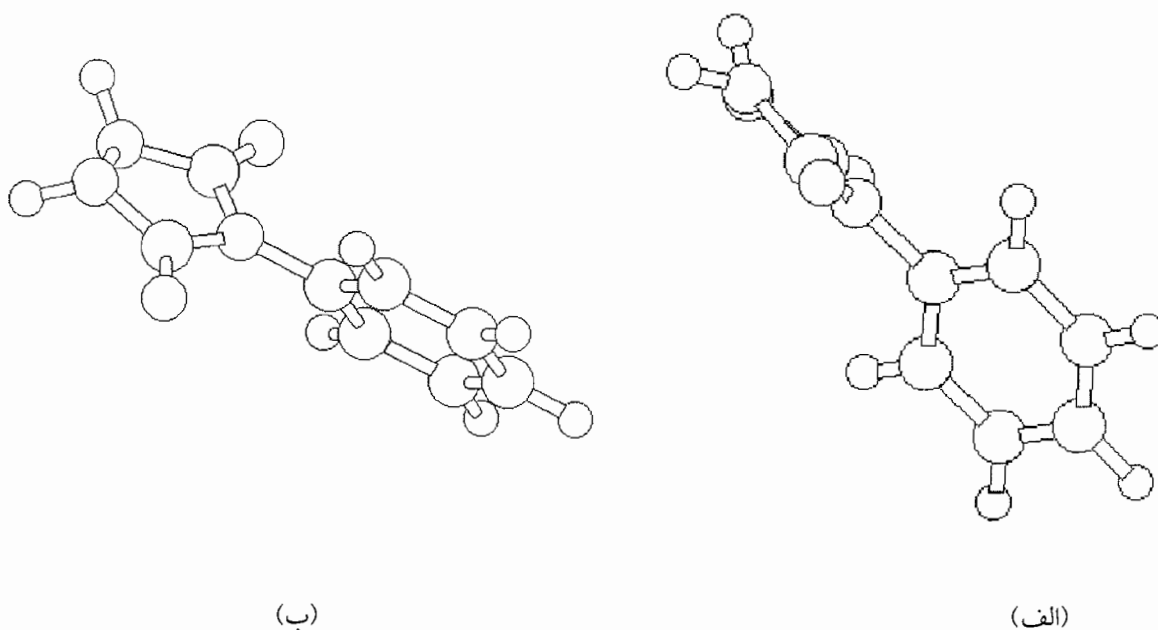
Variable	6-31G	6-31G**	6-31++G**
N-N	140.5	140.5	140.5
C-N(1)	137.0	138.1	138.2
H-N	99.3	99.9	99.9
C(3)-N(4)	139.4	138.6	138.6
C=O	121.4	118.5	118.7
C(1')-N	142.5	142.5	142.6
C-N-N	108.8	107.8	107.8
H-N-N	118.5	113.6	113.5
N-C-N	105.5	105.9	106.0
O=C-N(1)	126.7	126.2	126.2
C(1')-N-C	124.6	124.8	124.8
C(3)-N-C(5)	110.8	110.4	110.4
H-N-N-C	-143.6	-126.6	-126.4
C-N-N-C	-8.6	-15.3	-14.9
N-C-N-N	6.7	12.0	11.8
H-N-N-H	64.2	91.5	92.3
O=C-N-N	-171.9	-167.2	-167.4
O=C-N-H	-29.4	-40.4	-41.0
C-C-N-C	-138.4	-136	133.1
O=C-N-C(1')	-4.1	-5.5	-5.4

تمامی طول پیوندها بر حسب پیکومتر و تمامی زاویه‌ها بر حسب درجه می‌باشد.

در نتایج حاصل از مجموعه پایه $6-31G^{**}$ با استفاده از توابع موج پلاریزه روی همه اتم‌ها، پارامترهای ساختاری همه مولکول‌ها نسبت به مجموعه پایه $6-31G$ تغییر زیادی کرده است که این موضوع قابل انتظار است، زیرا اربیتال‌های اتمی تحت تأثیر برهم‌کنش‌های بین اتمی هنگام تشکیل مولکول پلاریزه می‌شوند و این پلاریزاسیون می‌تواند توسط توابع پایه‌ای که دارای اربیتال‌های با I بزرگتر هستند یعنی همان توابع موج پلاریزه بیان شود.

نتایج حاصل از مجموعه پایه $6-31++G^{**}$ با استفاده از توابع موج نفوذی روی مجموعه پایه قبلی تأثیر چندانی روی پارامترهای ساختاری مشاهده نمی‌شود. این موضوع نشانگر آن است که نیروهای دور برد ناشی از رزونانس وجود ندارد و مبادله اطلاعات بین اتم‌های با فاصله زیاد صورت نمی‌گیرد. در نتیجه انتگرال‌های دور برد صفر شده‌اند. این موضوع همان هدف پروژه است که در ادامه روی آن بیشتر صحبت خواهد شد.

مقایسه مشخصه‌های ساختاری بهینه شده برای این ترکیبات با مجموعه پایه $6-31++G^{**}$ نشان می‌دهد که دو گروه کربونیل یورازولی با توجه به زاویه دو وجهی $C-N-N-C$ حدود ۱۵ درجه نسبت به هم واپیچیدگی دارند که این بر مسطح نبودن حلقه یورازول دلالت دارد. مسطح نبودن حلقه یورازولی همچنین از زاویه دو وجهی $N-C-C-N$ که خارج بودن حدود ۱۲ درجه‌ای نیتروژن ۴ از صفحه زاویه $N-N-C$ را نشان می‌دهد مشخص می‌شود. مقادیر زاویه دو وجهی $H-N-N-H$ که $91/9$ تا $94/0$ درجه می‌باشد، نشان می‌دهد که دو پیوند $N-H$ بر هم منطبق نیستند. زاویه دو وجهی $O=C-N-H$ خارج بودن این هیدروژن‌ها از صفحه $O=C-N$ به میزان $41/0$ تا $42/2$ درجه و در نتیجه هم صفحه نبودن این هیدروژن‌ها با حلقه یورازولی را نشان می‌دهد؛ با توجه به زاویه دو وجهی $H-N-N-H$ نتیجه می‌شود که این هیدروژن‌ها در دو سمت مختلف صفحه حلقه یورازولی جهت‌گیری کرده‌اند (شکل ۱-الف). زاویه دو وجهی $O=C-N-C(1')$ با مقادیر حدود ۵ درجه نشان دهنده استفاده نیتروژن ۴ از هیبریداسیون نزدیک به sp^2 می‌باشد. زاویه دو وجهی $C-N-C$ نشان دهنده واپیچیدگی حلقه یورازولی و حلقه فیل نسبت به هم دیگر می‌باشد؛ میزان این واپیچیدگی در اثر تغییر گروه استخلافی موجود در موقعیت پارای حلقه فیل تغییر می‌کند؛ به طوری که برای ترکیبات III و IV که دارای گروه‌های الکترون دهنده هستند میزان واپیچیدگی دو حلقه نسبت به هم بیشتر، و برای ترکیبات V و VI که دارای گروه‌های الکترون کشنده هستند میزان این واپیچیدگی کمتر می‌باشد. (شکل ۱-ب).



شکل (۱): ساختار فنیل یورازول بهینه شده

مقادیر بارهای اتمی مولیکن در جدول (۷) آورده شده است. این جدول نشان می‌دهد که تغییر گروه استخلافی روی حلقه فنیل تغییر محسوسی روی میزان بار مولیکن اتم‌های نیتروژن ۱ و ۲ نمی‌گذارد؛ از آنجا که خاصیت نوکلئوفیلی یورازول‌ها به تمرکز بار روی این دو اتم دارد، در نتیجه میزان واکنش پذیری نوکلئوفیلی یورازول‌ها تحت تاثیر خاصیت الکترون دهنده‌گی و الکترون کشندگی گروه‌های استخلافی موجود در موقعیت پارای حلقه فنیل موجود روی اتم نیتروژن ۴ نخواهد بود. پارامترهای ساختاری حاصل از مجموعه پایه $G^{**++}31-6$ با استفاده از توابع موج نفوذی نیز عدم ارتباط الکترونی بین دو قطعه یورازولی و فنیلی را نشان می‌داد که این موضوع ناشی از هیبریداسیون sp^2 برای نیتروژن ۴ می‌باشد. این نتیجه با نتایج تجربی مطابقت کامل دارد [۱۲].

جدول (۷): بارهای اتمی مولیکن برای اتمهای حلقه یورازولی

	I	II	III	IV	V	VI
N (1)	-0.39	-0.34	-0.33	-0.32	-0.32	-0.32
C	0.81	0.75	0.79	0.81	0.80	0.79
H	0.36	0.36	0.36	0.36	0.37	0.37
N (4)	-0.71	-0.40	-0.27	-0.41	-0.47	-0.46
O (8)	-0.63	-0.58	-0.56	-0.59	-0.59	-0.59

1. Cookson, R. C., Gupte, S. S., Stevens, I. D. R., Watts, C. T., *Organic Synthesis*, Collect. Vol. 6, 936, 1988.
 2. Giesecke, H., Merten, R., Rottmaier, L., *Ger. Offen. DE 3,027,612. C. A.*, 96, 182879f, 1982.
 3. Kato, S., *Japan*, Vol. 56, pp. 3121. *C. A.*, 51, 12983c.
 4. Kato, S., *Japan*, Vol. 56, pp. 3428. *C. A.*, 51, 10587i.
 5. Rottmaier, L., Merten, R., *Ger Offen.* 3,106,944. *C. A.*, 97, 198209u, 1982.
 6. Oikawa, M., Ebina, C., Inui, N., Nagasaki, H., Yago, S., *JP.04,249,552 Jpn. C. A.*, 118, 61373a, 1993.
 7. Bausch, M. J., David B., Dobrowolski, P., Prasad, V., *J. Org. Chem.*, Vol. 55, pp. 5806-5808, 1990.
 8. Atkins, P. W., Friedman, R. S., *Molecular Quantum Mechanics*, Oxford University Press, Oxford, New York, Tokyo, 1997.
 9. Seidel, U., Hellman, J., Schollmeyer, D., Hilger, C., Stadler, R., *Supramolecular Science*, Vol. 2, pp 45-50, 1995.
 10. Hilger, C., Drager, M., Stadler, R., *Macromol. ecules.*, Vol. 25, pp. 2498, 1992.
 11. Jensen, J. O., *Spectrochimica Acta part A* Vol. 59, pp. 637-650, 2003.
- ۱۲ نصر اصفهانی، ح، ساخت مونومرها و پلیمرهای رنگی حاوی گروه آزو بر پایه ۴-فنیل یورازول، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی اصفهان، رساله دکتری، ۱۳۸۰.