

Univerzita Karlova v Praze



Bakalářská práce

Parciální chránění 1,6-anhydrohexopyranos: Sulfity a jiné deriváty

Tereza Řehůřková

Přírodovědecká fakulta UK

KNIHOVNA CHEMIE



3233218455

Školitel: Prof. RNDr. Tomáš Trnka, CSc.

Praha 2008

**UNIVERZITA KARLOVA v Praze**

Přírodovědecká fakulta  
Oborová knihovna chemie  
Albertov 6, 128 43 Praha 2  
IČO: 00216208, DIČ: CZ00216208  
UK 22

*pr.č. 104b/08 stud  
(bioch.)*

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracovala samostatně pod vedením školitele Prof. Tomáše Trnky a všechny použité prameny jsem řádně citovala.

V Praze dne: 5.6.2008

Podpis: 

## **Poděkování**

Děkuji Prof. RNDr. Tomáši Trnkovi CSc. za vedení bakalářské práce, ochotu a pomoc při jejím zpracovávání. RNDr. Janě Polákové a Ing. Miroslavu Lorencovi za cenné rady a pomoc v laboratoři. Dále děkuji RNDr. Jaroslavu Peckovi za počítačové modelování a výpočty, Mgr. Simoně Hybelbauerové za měření NMR spekter, RNDr. Ivě Rudovské za interpretaci NMR spekter, RNDr. Martinu Štíchovi za měření MS spekter, Mgr. Bohuně Šperlichové za měření specifické optické otáčivosti a bodů tání. V neposlední řadě bych chtěla poděkovat svým rodičům za podporu při studiu.

## Obsah

Seznam zkratk	4
1. Úvod	5
1.1. Biologický význam sacharidů	5
1.2. 1,6-anhydrohexopyranosy	8
1.3. Chránicí skupiny 1,6-anhydrohexopyranos	10
1.4. Lineární a cyklické estery kyseliny siřičité (sulfity)	13
1.5. Teoretické úvahy týkající se přípravy cyklického sulfitu levoglukosanu	15
2. Cíle práce	18
3. Experimentální část	19
3.1. Obecné metody	19
3.2. Syntéza etherů a esterů 1,6-anhydrohexopyranos	19
3.3. Syntéza lineárních a cyklických sulfitů 1,6-anhydrohexopyranos	21
4. Výsledky a diskuse	23
4.1. Chránicí reakce	23
4.2. Příprava lineárních a cyklických sulfitů	24
5. Závěr	25
6. Přehled použité literatury	26
Příloha I: Teoretické výpočty celkové energie, celkové entropie a volné energie	27

## Seznam zkratek

Bn	benzyl
BOC	di-( <i>terc</i> -butyl)-dikarbonát
CAM	molekuly mezibuněčné adheze (Cell Adhesion Molecules)
CDR	sacharid vázající doména (Carbohydrate Binding Domain)
DMAP	dimethylaminopyridin
ESI	ionizace elektrosprayem (ElectroSpray Ionisation)
IR	infračervená spektroskopie (InfraRed)
Me	methyl
MS	hmotnostní spektrometrie (Mass Spectrometry)
NMR	jaderná magnetická resonance (Nuclear Magnetic Resonance)
TBDMS	( <i>terc</i> -butyl)-dimethylsilyl
TLC	chromatografie na tenké vrstvě (Thin Layer Chromatography)
TMS	trimethylsilyl
Ts	Tosyl ( <i>p</i> -toluensulfonyl)
UV	ultrafialový (Ultra Violet)
Z	benzyloxykarbonyl

# 1. Úvod

Sacharidy jsou nejrozšířenější přírodní sloučeniny jak z hlediska absolutního množství (ročně vzniká na naší planetě kolem  $10^{11}$  tun sacharidů, především celulosy), tak co do množství různých struktur. V přírodě vznikají v buňkách fotoautotrofních organismů asimilací oxidu uhličitého a vody za využití energie slunečního světla. Heterotrofní organismy získávají sacharidy buď z autotrofních organismů, nebo si je syntetizují biochemickými pochody z aminokyselin, glycerolu a jiných výchozích látek.

V organické syntéze představují sacharidy ideální výchozí látky, protože jsou jakousi zásobárnou chirálních center, z nichž lze budovat skelet cílové sloučeniny. Vzhledem k velkému množství funkčních skupin, které sacharidy obsahují, je nutné blokovat ty z nich, které nemají být při reakci zasaženy. Odhaduje se, že je v literatuře popsáno více než 5 tisíc různých chránících skupin, přesto existuje stále dost možností dalších zlepšení.

V této práci jsme se zaměřili na studii několika nových skupin, od kterých by bylo možné očekávat dobrou stabilitu i snadné a kvantitativní odchránění. Hlavní pozornost jsme zaměřili na syntézy sulfitových esterů, jejichž chemie je v cukerné literatuře zmíněna pouze okrajově. Pokusili jsme se na základě teoretických výpočtů zjistit, zda je možná tvorba cyklických sulfitů s 1,3-diolovým uskupením a experimentálně zjištěný výsledek potvrdit či vyvrátit.

## 1.1. Biologický význam sacharidů

Sacharidy jsou jednou ze základních složek všech živých soustav, vyskytují se v každém organismu a zároveň jsou nejrozsáhlejší třídou biologicky aktivních látek. Největší množství sacharidů se nachází v rostlinách, kde jsou biosyntetizovány jako produkty fotosyntézy. Metabolické odbourávání sacharidů je pak zdrojem většiny energie potřebné pro průběh biologických pochodů.

### 1.1.1. Stavební a podpůrná funkce sacharidů

Sacharidy se nejčastěji vyskytují ve formě stavebních nebo zásobních polysacharidů, jako je celulóza, škrob nebo glykogen. Jsou rovněž součástí látek označovaných jako glykokonjugáty, mezi které patří glykolipidy, glykoproteiny,

peptidoglykany a další<sup>1</sup>. V těchto látkách jsou sacharidy kovalentně vázány glykosidickou vazbou na aminokyseliny v proteinech nebo na molekuly lipidů a mají stavební či regulační funkci.

Proteoglykany (jako podskupina glykoproteinů) se skládají z vláknité kyseliny hyaluronové, která je tvořena opakujícím se disacharidem D-glukuronátu a *N*-acetyl-D-glukosaminu. Na tuto vláknitou část se nekovalentně váží proteoglykanové podjednotky obsahující proteinové jádro a glykosaminoglykany, což jsou nevětvené polysacharidy (mezi něž patří rovněž kyselina hyaluronová) složené z opakujících se sulfátovaných disacharidů obsahujících deriváty urunových kyselin a hexosaminových zbytků. Tyto proteoglykany jsou součástí extracelulární matrix zejména v pojivových tkáních<sup>2</sup>. Abnormality v biosyntéze proteoglykanů mají pravděpodobně souvislost s řadou onemocnění, jako je artherosklerosa, některé druhy rakoviny či Alzheimerova choroba<sup>3</sup>.

Peptidoglykan murein, tvořící buněčnou stěnu bakterií, obsahuje  $\beta(1\rightarrow4)$  vázaný *N*-acetylglukosamin a *N*-acetylmuramovou kyselinu, na kterou se váže D-aminokyselina pentapeptidu, přes nějž se kovalentně váží s dalšími podjednotkami<sup>1</sup>. Gram-positivní bakterie mají v buněčné stěně obsaženy rovněž teichoové kyseliny, v nichž jsou sacharidové podjednotky vázány přes kyselinu fosforečnou a glycerol nebo ribitol.

#### 1.1.2. Funkce sacharidů v mezibuněčných interakcích

Většina dějů v imunitním systému závisí na mezibuněčných kontaktech, které jsou založeny na interakcích mezi adhezivními molekulami na povrchu obou buněk. Jedna z těchto molekul mezibuněčné adheze (CAM, Cell Adhesion Molecules) je receptorem, druhá ligandem a po jejich interakci dochází k přenosu signálu do buňky. Mezi CAM patří cadheriny, integriny, imunoglobulinové molekuly a selektiny<sup>4</sup>. Selektiny obsahují lektinové domény, které se nacházejí také na dalších povrchových i rozpustných proteinech.

Lektiny jsou strukturálně rozmanité třídy proteinů, jejichž společným rysem je schopnost specificky a reversibilně vázat sacharidové struktury, zároveň nejsou protilátkami a nemají enzymatickou aktivitu<sup>5</sup>. Lektiny i sacharidy jsou široce rozšířeny na povrchu buněk, proto hrají zásadní roli při interakcích buněk či molekul k signalizaci a zahájení obranných mechanismů. Byla objevena přítomnost lektinů v různých biologických procesech u mnoha druhů organismů, jako např. odstranění glykoproteinů



z oběhového systému<sup>6,7</sup>, adheze infekčního agens k hostitelské buňce<sup>8</sup>, povolání leukocytů do místa zánětu, interakce buněk v imunitním systému, nádorové bujení aj. Klasické lektiny obsahují dvě nebo více vazebných domén, proto mohou mimo jiné způsobovat prostřednictvím vazby sacharidů na povrchu erytrocytů jejich zesíťování a precipitaci. Tento proces je inhibován sacharidem specifickým pro daný lektin<sup>9</sup>.

Sacharidy tvoří na povrchu mikroorganismů tzv. sacharidový kód, což je soubor povrchových oligosacharidů typických pro daný mikroorganismus. Sacharidy jsou velmi variabilní, mnohem více než proteiny nebo nukleové kyseliny. Oligosacharidy se mohou lišit monosacharidovými podjednotkami, polohou jejich spojení nebo různými anomerními konfiguracemi, monomerní podjednotky jsou konformačně flexibilní, mají volnou rotaci kolem glykosidové vazby. Dále mohou tvořit rozvětvené struktury, což je v biologickém systému zcela unikátní vlastnost těchto biomolekul. Každá z možných struktur oligosacharidů může mít různou afinitu k vazebnému místu receptoru. Kódování informací pomocí sacharidů je tedy specifické, informace jsou jednoznačné a dešifrovatelné s nízkou pravděpodobností špatné interpretace. Šifrovací sekce biomolekuly je malá a snadno přístupná. Sacharidy mají také dostatečný potenciál pro rychlé strukturální změny.

Princip signalizace a přenosu informací pomocí sacharidů nebyl dosud zcela objasněn, je však zřejmé, že proteiny dokážou vázat oligosacharidy specificky a s velkou afinitou<sup>1</sup>. Lektiny specifické pro galaktosu neváží glukosu (lišící se polohou hydroxyly na C<sub>4</sub>), lektiny specifické pro mannosu neváží galaktosu (lišící se polohou hydroxyly na C<sub>1</sub> a C<sub>4</sub>), avšak některé odlišnosti v C<sub>2</sub> poloze jsou tolerovány – většina lektinů specifických pro galaktosu váže rovněž N-acetylgalaktosamin. Některé lektiny preferují α- nebo β-anomer, ostatní nevykazují anomerní specifitu<sup>9</sup>.

Od roku 1988 byly lektiny řazeny do dvou strukturních rodin: C-lektiny, jejichž aktivita je závislá na přítomnosti Ca<sup>2+</sup> iontů, a S-lektiny, které vyžadují přítomnost sulfuryly nebo váží β-galaktosidy<sup>10</sup>. Nyní jsou lektiny řazeny do mnoha rodin díky své strukturní rozmanitosti<sup>11</sup>. Lektiny se také dělí podle jejich struktury na jednoduché, mozaikové (vícedoménné) a makromolekulární. Jednoduché lektiny jsou složeny z malého počtu podjednotek, každá podjednotka obsahuje sacharid vázající doménu (CRD, Carbohydrate Recognition Domain). Mezi tyto lektiny patří téměř všechny rostlinné lektiny, S-lektiny a většina selektinů. Mozaikové lektiny zahrnují několik

druhů proteinových domén, z nichž pouze jedna obsahuje CRD. Do této třídy patří virové hemaglutininy, živočišné lektiny typu C, P a I. Makromolekulární lektiny se vyskytují především v bakteriích<sup>9</sup>.

### 1.1.3. Sacharidy jako potenciální terapeutika

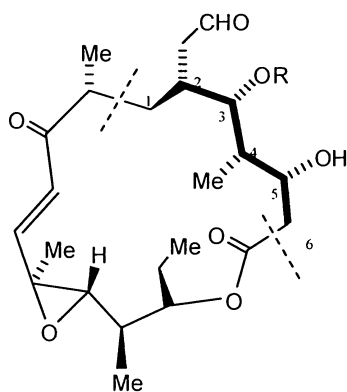
Nejdůležitější funkcí sacharidů, resp. oligosacharidů v glykokonjugátech je jejich účast na mnoha fyziologických a patologických procesech, kde slouží jako rozpoznávací markery. Takto se uplatňují především při adhezi infekčních buněk na hostitelskou buňku, zrání a směrování leukocytů, interakcí imunitního systému, tvorby a diferenciaci rakovinných buněk aj. Základním cílem pro potenciální terapeutika je zejména zamezení vstupu sacharidů do těchto dějů pomocí inhibice proteosyntézy glykokonjugátů nebo pomocí interference s glykokonjugáty v procesu rozpoznávání.<sup>12</sup>

Hledání nových léčiv a vakcín na bázi sacharidů je však poněkud náročné, jelikož polyfunkční molekuly jsou obtížně modifikovatelné, dále pro sacharidy zatím neexistuje metodika syntézy jako pro peptidy a sacharidy obecně mají nevhodné vlastnosti jako léčiva (nízká afinita k proteinům, inaktivní při orálním podávání aj.). Proto je často využíváno náhrady přirozených sacharidů látkami, které mají podobnou strukturu a funkci v procesu rozpoznávání, avšak mají lepší stabilitu, specifitu, afinitu k proteinům a syntetickou dostupnost.

I přes uvedené komplikace je sacharidový kód využíván ke hledání selektivních, cíleně působících terapeutik s minimálními vedlejšími účinky, což je pravděpodobně hlavním motivem základního i aplikovaného výzkumu sacharidů v současné době.

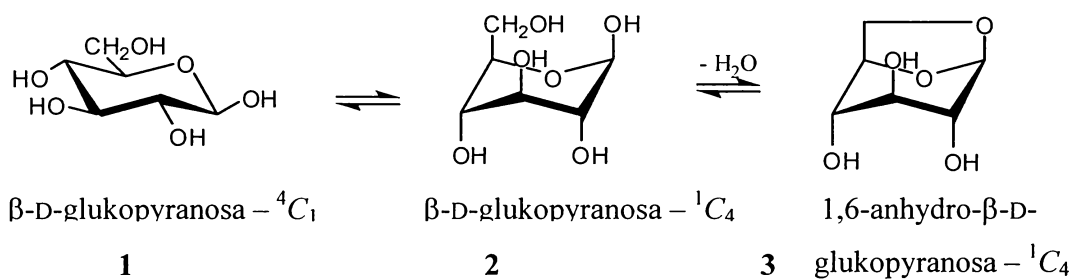
## 1.2. 1,6-anhydrohexopyranosy

1,6-anhydroderiváty hexos jsou mimořádně vhodné výchozí látky nejen pro syntézy modifikovaných sacharidů, ale i pro přípravu složitých přírodních látek, Příkladem může být syntéza antibiotika rosaramycinu<sup>13</sup> (viz *Obr. 1*).



Obr.1: Struktura rosaramycinu

Nejznámější ze všech anhydrohexopyranos je tzv. levoglukosan, 1,6-anhydro- $\beta$ -D-glukopyranosa. Struktura tohoto derivátu glukosy představuje vnitřní glykosid mezi OH skupinou na atomech C-1 a C-6. Základní struktura anhydroderivátů aldohexos je 6,8-dioxabicyklo-[3.2.1]oktan, která je na rozdíl od běžných hexos je zafixována v rigidní  ${}^1C_4$  konformaci, atypické pro běžné aldohexosy. To má za následek, že hydroxylové skupiny na uhlících C-2, C-3 a C-4 zaujímají axiální polohu (Obr.2) se všemi důsledky na reaktivitu. Tím, že jsou dvě nejcitlivější místa v molekule – poloacetalová skupina na C-1 a primární hydroxylová skupina na C-6 vázány v podobě acetalové vazby, odpadá nutnost chránění i komplikace, které vyplývají z možnosti tvorby směsí anomerů  $\alpha$  a  $\beta$ .



Obr.2: Konformační struktury glukopyranosy a syntéza levoglukosanu

Protože 1,6-anhydro vazba je vazba acetalová, dá se bez obtíží štěpit kyselou hydrolyzou a získat tak nazpět hexosu s volnými hydroxylovými skupinami na C-1 a C-6 v normální  ${}^4C_1$  konformaci.

Anhydrohexosy se dají připravit buď cyklizačními reakcemi, například z fenyglykosidů nebo halogenos, eventuálně z glykalů. Pro přípravu větších množství jsou nejvhodnější pyrolytické reakce založené na tepelné depolymeraci polysacharidů.

Takto lze připravit 1,6-anhydro- $\beta$ -D-glukopyranosu (levoglukosan), ale i anhydromannosu, anhydrogalaktosu a další. Nejběžnější anhydrocukr levoglukosan lze připravit v kilogramových množstvích vakuovou pyrolýzou škrobu nebo celulosy ve výtěžcích kolem 20 %<sup>14</sup>.

S ohledem na omezenou flexibilitu skeletu anhydrohexos se u těchto sloučenin výrazně projevuje rozdílná reaktivita axiálních a ekvatoriálních substituentů. U levoglukosanu, který má všechny hydroxylové skupiny axiální, je hydroxylová skupina v poloze C-3 stericky bráněna methylenovou skupinou v poloze C-6 a axiálně orientovaným atomem kyslíku na C-1. Toho lze výhodně využít pro parciální chránění poloh C-2 resp. C-4 (viz dále).

### 1.3. Chránící skupiny 1,6-anhydrohexopyranos

Chránící skupiny představují mimořádně významnou součást jakékoliv syntézy, ve které se využívají sloučeniny s větším počtem funkčních skupin. To platí obzvláště o sacharidech – vedle hydroxylových skupin jsou v molekule často přítomné další funkční skupiny jako např. aminoskupiny, sulfanilové, karboxylové, karbonylové aj.

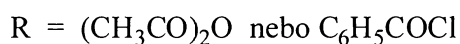
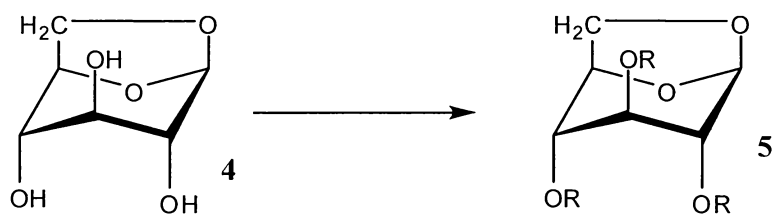
Úkolem chránících skupin není jen chránění příslušné skupiny před účinkem činidla, ale vhodnou volbou chránění je možno ovlivnit reaktivitu i stereoselektivitu průběhu dalších reakcí.

Přestože je chránění 1,6-anhydro- $\beta$ -D-glukopyranosy i dalších anhydrohexos poměrně dobře propracované, existuje stále ještě dost prostoru pro další zlepšování. Bylo by výhodné vypracovat metodiku umožňující s dobrou regioselektivitou blokovat parciálně některou z hydroxylových skupin. Lákavá je i možnost využití chránících skupin, které by bylo možné substituovat různými nukleofily.

Dále jsou uvedeny známé způsoby chránění anhydroderivátů hexos.

#### 1.3.1. Estery

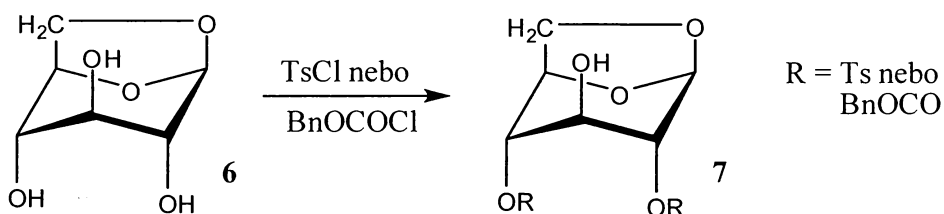
Nejběžnější typy esterů levoglukosanu jsou acetáty a benzoáty (viz *Obr.3*). Acetáty se připravují reakcí sacharidu s acetanhydridem v pyridinu, eventuálně reakcí s acetanhydridem a octanem sodným. Benzoáty se připravují působením benzoylchloridu v pyridinu.



Obr.3: Schéma syntézy acetatů nebo benzoátů levoglukosanu

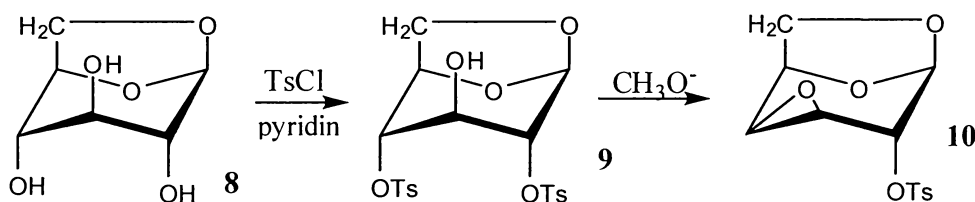
Těmito reakcemi vznikají tri-*O*-acetyl, resp. tri-*O*-benzoylderiváty, parciálně substituované deriváty levoglukosanu tímto způsobem nelze připravit. Estery sacharidů jsou omezeně stálé v alkalickém, kyselém i reduktivním prostředí. Odchránění se nejčastěji provádí transesterifikací bezvodým methanolem za katalýzy methoxidem sodným (tzv. Zemplénova deacetylace).

Parciální acylací nebo alkylací lze získat 2,4-di-*O*-substituované deriváty, které jsou výhodnými výchozími sloučeninami pro syntézu derivátů hexos. Příkladem může být reakce levoglukosanu s tosylchloridem, kde vzniká jako hlavní produkt 1,6-anhydro-2,4-di-*O*-*p*-toluensulfonyl- $\beta$ -D-glukopyranosa. Trisubstituovaný derivát vznikne až po delší době a při použití velkého nadbytku tosylchloridu. Obdobně se dá připravit i 2,4-di-*O*-benzyloxykarbonylderivát<sup>15</sup> (viz Obr.4).



Obr.4: Syntéza parciálních esterů levoglukosanu

2,4-Ditosylderivát poskytuje reakcí s methoxidem sodným 1,6:2,3-dianhydro-2-*O*-tosyl- $\beta$ -D-galaktopyranosu jako jediný produkt, epoxid konfigurace D-manno- vůbec nevzniká (viz Obr.5).



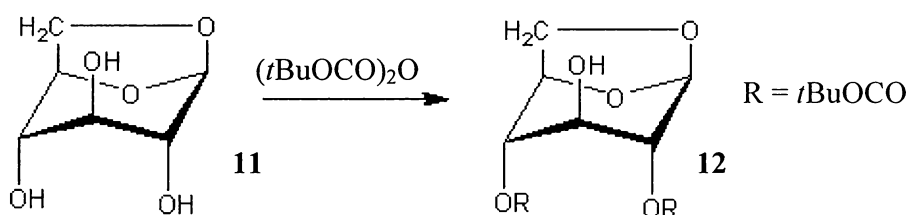
Obr.5: Vznik 1,6:2,3-dianhydro-2-*O*-tosyl- $\beta$ -D-galaktopyranosy

Chránění hydroxylové skupiny sacharidů převedením na tosyl ester má velmi omezené použití, protože odchránění je značně obtížné – provádí se buď redukcí sodíkovým amalgamem nebo fotochemicky, v obou případech jsou výtěžky velmi nízké. Hlavní přednost této skupiny spočívá ve snadnosti jejího odstoupení při nukleofilních substitucích.

Skupina benzyloxykarbonylová je používána obvykle pro chránění aminoskupiny. Nepříliš často byla použita i ke chránění hydroxylových skupin sacharidů<sup>15</sup>. Výhoda této skupiny spočívá v dobré stabilitě a možnosti kvantitativního zavedení i odstranění.

Benzyloxykarbonylestery se připravují obdobně jako tosyláty reakcí sacharidu s benzyloxykarbonylchloridem (*Z*-chloridem) v pyridinu. Na levoglukosanu dochází k parciální esterifikaci hydroxylových skupin v polohách C-2 a C-4, což umožňuje ortogonálně chránit hydroxyl na C-3. Odchránění se provádí obvykle hydrogenolyticky.

Obdobně di-(*tert*-butyl)-dikarbonát reaguje s 1,6-anhydrocukry za vzniku esteru uvedeného na *Obr.6*.



*Obr.6: Syntéza 2,4-(*tert*-butyloxykarbonyl)-1,6-anhydro- $\beta$ -D-glukopyranosy*

### 1.3.2. Ethery

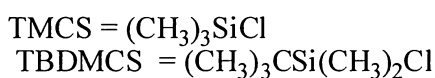
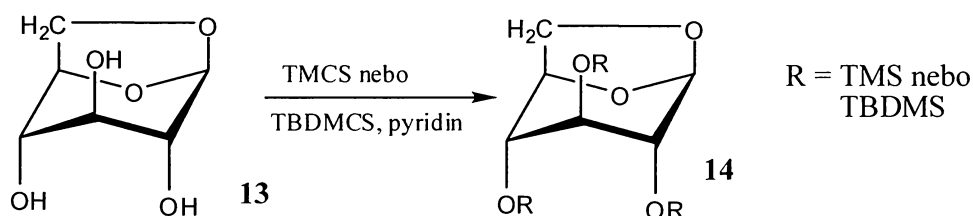
Metodika přípravy etherů 1,6-anhydrohexopyranos se nijak neliší od obecně používaných metod, podobně jako odstranění etherových chránicích skupin.

Z etherů je při syntéze nejčastěji používána skupina benzylová – zavádí se působením benzylbromidu nebo benzylchloridu v přítomnosti báze. Benzylethery anhydrocukrů jsou stálé v bazickém i v kyselém prostředí, omezenou stálost vykazují vůči oxidačním činidlům. Toho lze využít i k odstranění benzylových skupin, působením silných oxidačních činidel dojde k oxidaci za vzniku benzoátů, které se pak štěpí jako estery. Běžně se však benzylethery štěpí hydrogenolyticky, nejčastěji na

palladiovém katalyzátoru. Jiný způsob štěpení benzyletherů spočívá v působení sodíku v kapalném amoniaku.

### 1.3.3. Silylethery

V chemii sacharidů se ze skupin silylového typu pro chránění hydroxylových skupin používá skupina trimethylsilylová (viz *Obr. 13*). Původně byly tyto deriváty využívány pro plynově-chromatografické stanovení sacharidů, protože jsou dobře těkavé<sup>16</sup>. Pro syntézu nejsou trimethylsilylové chránicí skupiny vhodné, protože jsou dosti nestálé, zejména v kyselém prostředí a snadno se štěpí, například již při chromatografii na silikagelu. Stabilnější typy silylových chránicích skupin (skupina *tert*-butyldimethylsilylová nebo *tert*-butyldifenylsilylová) nebyly pro chránění sekundárních hydroxylových skupin levoglukosanu zatím používány (viz *Obr. 7*).

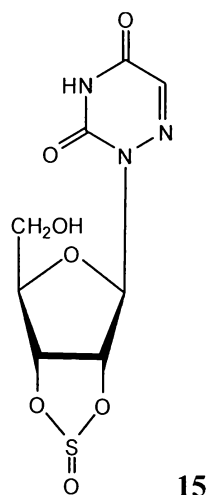


*Obr. 7: Chránění hydroxylových skupin levoglukosanu pomocí silyletherů*

### 1.4. Lineární a cyklické estery kyseliny siřičité (sulfity)

Cyklické sulfity a sulfáty byly na necukerných systémech studovány vícekrát a jsou shrnuty v přehledném článku<sup>17</sup>.

Cyklické estery kyseliny siřičité s vicinálními dioly byly popsány v nukleosidové chemii několikrát, viz např.<sup>10,13,18</sup>. Při reakci 6-azauridinu s thionylchloridem a hexamethylfosfortriamidem vznikl vedle 5'-chlor-5'-deoxyderivátů i cyklický sulfit (viz *Obr. 8*).



Obr. 8: Cyklický sulfit 6-azauridinu.

Vzhledem k přítomnosti volného elektronového páru na atomu síry vzniká nové stereogenní centrum, takže reakcí se tvoří dva nové diastereoismery. Dalo by se předpokládat, že jeden z diastereoisomerů bude vznikat přednostně, vzhledem k vlivu chirální molekuly, na které reakce probíhá.

Tuto reakci jsme chtěli aplikovat i na anhydrohexosy, konkrétně na 1,6-anhydro- $\beta$ -D-glukopyranosu. Protože v této molekule není *cis*-1,2-diolové uspořádání, ale *cis*-1,3-diolové, zajímalo nás, jestli je možné uzavření šestičlenného cyklu místo pětičlenného, který vznikal na ribosovém skeletu v uvedené publikaci<sup>18</sup>. Pokusili jsme se tuto věc zjistit výpočtem (viz dále) a určit příslušné termodynamické parametry vzniku tohoto cyklu (energie, entropie, volná energie).

Syntézu cílových sulfitů lze provádět dvěma způsoby – buď přímou reakcí thionylchloridu s diolem, nebo transesterifikační reakcí dimethylsulfitu s cukerným diolem. Transesterifikační reakci lze katalyzovat buď kyselé nebo bazicky. Reakcí s thionylchloridem, ale i reakcí s dimethylsulfitem může vznikat buď cyklický produkt **19** (viz Obr. 9), nebo parciálně substituované produkty, zde na C-2 (**17**) a C-4 (**18**). Další možností je vznik oligomerních produktů **20**.

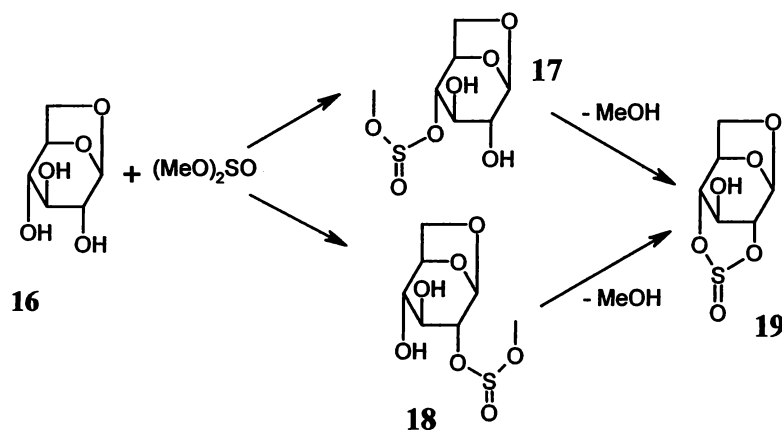
Při reakci s thionylchloridem existuje ještě další potenciální komplikace, totiž záměna vznikajícího chlorsulfitu chloridovým iontem, takže výsledkem by byl chlorderivát.



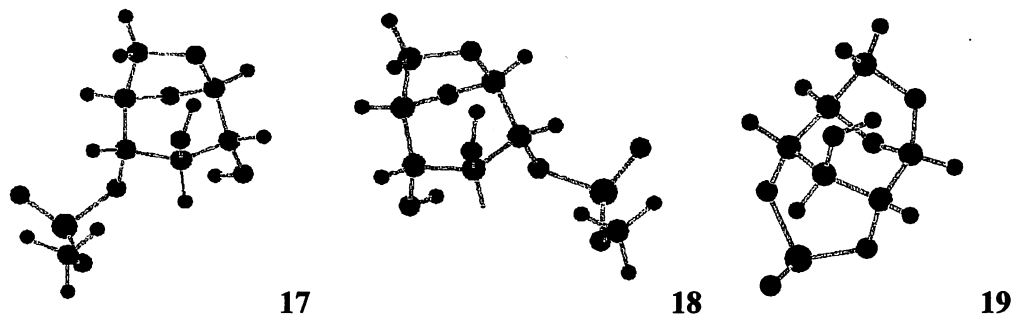
### 1.5. Teoretické úvahy týkající se přípravy cyklického sulfitu levoglukosanu

Výpočet byl proveden jednak semiempiricky metodou AM1<sup>19</sup> a jednak *ab initio* s bází 6-31G\*\*<sup>20</sup> a výpočtem korelační energie metodou MP2<sup>21</sup> (metoda MP2/6-31G\*\*, nebo také MP2/6-31G(d,p), počítá se po 5 orbitalech na vodících, 19 na síře a po 15 na uhlících a kyslících). Podrobnosti lze nalézt například v knize „*Ab Initio Molecular Orbital Theory*“<sup>22</sup>. Vibrační energie a entropie byla počítána ve všech případech pouze semiempiricky (z časových důvodů). Pro posouzení případné chyby byl výpočet proveden jak se zahrnutím vibrace nulového bodu (největší část vibračního příspěvku), tak bez ní. Významnější rozdíly (kolem 5 kJ/mol) se objevují pouze při cyklizaci a působí při semiempirickém zahrnutí tohoto příspěvku ve prospěch cyklického produktu. Jde ale o hodnotu úplného zanedbání nebo zahrnutí tohoto příspěvku. Rozdíl mezi *ab initio* a semiempirickým výpočtem lze předpokládat menší.

Byly počítány rovnováhy reakcí uvedených na *Obr.9*, na *Obr.10* jsou uvedené vypočítané prostorové struktury vznikajících látek.



*Obr.9: Schéma reakcí, pro které byly prováděny teoretické výpočty*



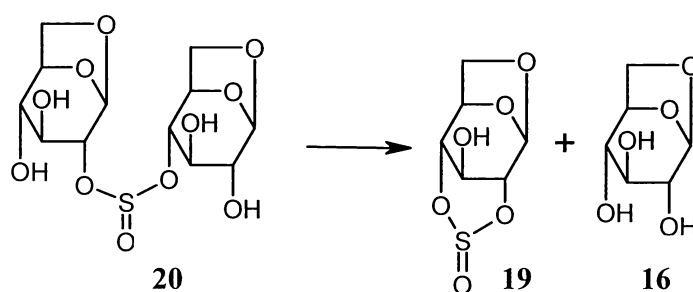
*Obr.10: Prostorové struktury látek 17, 18 a 19 podle výpočtů*

První krok (vznik látek **17** a **18**) vychází *ab initio* jako rovnovážná reakce, která by měla při odčerpávání některého z produktů (methanolu) proběhnout hladce, semiempirický výpočet však dává rovnováhu výrazně posunutou k výchozí látce **16**.

Druhý krok je značně tepelně závislý a při vyšší teplotě (100°C a více) výrazně převažuje cyklický produkt **19**.

Také byla porovnána stabilita (rovnováha) látek **17** a **18**. Látka **17** vychází o něco stabilnější než látka **18** (cca 2 kJ/mol).

Dále byl proveden, pro posouzení možné konkurenční polymerace, výpočet následující reakce (viz *Obr.11*).

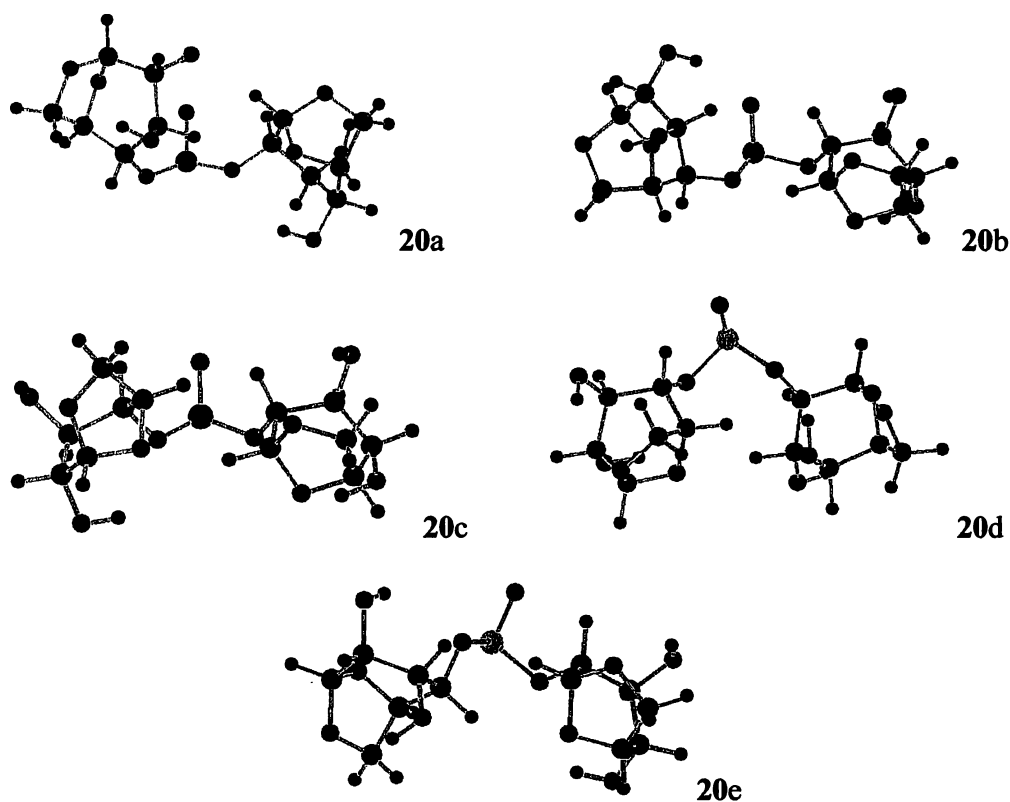


*Obr.11: Schéma reakce oligomeru levoglukosanu*

Látka **20** byla počítána pouze semiempiricky. Podle výpočtu je (hlavně při vyšších teplotách) před polymerací preferována cyklizace (látka **19** před látkou **20**) a to díky poměrně vysoké entropii reakce (energie má nižší látka **20**).

Výpočty byly provedeny bez zahrnutí (resp. korekce) rozpouštědla (tj. ve vakuu), což může zhruba odpovídat málo polárnímu prostředí. Počítány byly pouze rovnováhy, nikoliv reakční rychlosti. Za přítomnosti vhodného katalysátoru (kyselého, basického) lze ale předpokládat, že k ustavení rovnováhy dojde.

Protože se některé z látek mohou vyskytovat ve více formách, bylo spočítáno několik konformerů látky **20** (viz *Obr.12*) a pět nejstabilnějších bylo vyhodnoceno jako směs. Byla spočítána volná energie rovnovážné směsi a porovnána s volnou energií nejstabilnějšího konformeru **20c**. Rozdíl vypočítaný metodou AM1 byl 0,16 až 0,51 kJ/mol (pro teploty 20-140 °C), tedy v podstatě nevýznamný.



*Obr.12: Nejstabilnější konformery látky 20*

Jako největší problém se jeví značný rozdíl volných energií vypočtených AM1 a MP2/6-31G\*\* pro reakce při nichž vznikají látky 17 a 18. Zdá se, že metoda AM1 asi není schopna popsat s dostatečnou přesností siřičitanovou síru, vyskytující se v látkách 17 a 18. Bohužel látku 20 a její přeměnu na látky 16 a 19 (pro posouzení možné konkurenční polymerace při cyklizaci) bylo možno spočítat jen semiempiricky (AM1). Je třeba uvážit, do jaké míry se lze spolehnout na tuto metodu a výsledky, které poskytla.

## 2. Cíle práce

Smyslem této studie bylo ověřit možnosti chránění sekundárních hydroxylových skupin při sacharidových syntézách využívajících 1,6-anhydrohexopyranosy, zejména 1,6-anhydro- $\beta$ -D-glukopyranosu, jako výchozí látky. Pozornost byla zaměřena na tyto skupiny:

- Skupina benzyloxykarbonylová
- Skupina *terc*-butoxykarbonylová
- Skupina *terc*-butyldimethylsilylová
- Estery kyseliny siřičité

Ve všech případech bylo cílem zjistit, zda je možné uvedené skupiny použít k parciálnímu chránění určité polohy. Skupina benzyloxykarbonylová již byla v minulosti několikrát použita k parciálnímu chránění polohy C-2 a C-4, a zde šlo o zjištění, zda změnou reakčních podmínek není možné regioselektivně substituovat pouze jedinou polohu.

V případě skupin sulfitového typu bylo cílem zjistit, zda je možné tyto deriváty připravit reakcí thionylchloridu s diolovými systémy, eventuálně transesterifikační reakcí diolu připravit cyklické estery. Teoreticky bylo možno očekávat, že může vzniknout buď cyklický produkt, ale také by mohl vzniknout produkt, v němž by byly dvě sacharidové jednotky spojeny přes S=O skupinu (**20** Obr.11, 12).

### **3. Experimentální část**

#### **3.1. Obecné metody**

NMR spektra byla měřena na přístrojích Varian UNITY INOVA 400 ( $^1\text{H}$  při 400 MHz,  $^{13}\text{C}$  při 100 MHz) nebo na přístroji Varian VNMRS 300 ( $^1\text{H}$  při 300 MHz,  $^{13}\text{C}$  při 75 MHz) jako roztoky  $\text{CDCl}_3$  nebo  $\text{D}_2\text{O}$  (jako referenční signál byl použit TMS nebo centrální pík rozpouštědla). Interakční konstanty  $J$  jsou udány v Hz. ESI MS byla měřena na přístroji Bruker IFS 88. Specifické optické otáčivosti byly měřeny při 589 nm a  $20\text{ }^\circ\text{C}$  na přístroji Autopol IV (Rudolph Research Analytical, USA) a hodnoty  $[\alpha]_{\text{D}}$  jsou uvedeny v  $\text{deg}\cdot\text{cm}^2\cdot\text{g}^{-1}$ . IR spektra byla měřena na KBr v MeOH na přístroji Nicolet Avatar a vlnočty jsou uvedeny v  $\text{cm}^{-1}$ . Body tání byly měřeny na mikrobodotávku Boëtius a nejsou korigovány. TLC byly provedeny na deskách Merck silica gel 60 F<sub>254</sub> s UV detekcí a detekcí pomocí anisaldehydového činidla (roztok anisaldehydu, kyseliny octové a kyseliny sírové v ethanolu) nebo roztoku  $\text{KMnO}_4$ . Pro kolonové chromatografie byl použit Fluka silica gel for flash chromatography 60 (230-400 mesh).

#### **3.2. Syntéza etherů a esterů 1,6-anhydrohexopyranos**

##### **3.2.1. 2,4-(benzyloxykarbonyl)-1,6-anhydro- $\beta$ -D-glukopyranosa (7)**

Bylo naváženo 6,5 g 1,6-anhydro-D-glukopyranosy, rozpuštěno v 70 ml pyridinu. Za intenzivního míchání a chlazení na  $-15\text{ }^\circ\text{C}$  ledovou lázní se solí bylo přidáno 20 g *Z*-chloridu (benzyloxykarbonylchloridem) injekční stříkačkou. Za stálého míchání a chlazení probíhala reakce 2 hodiny. Průběh reakce byl sledován pomocí TLC v soustavě ethylacetát-hexan v různých poměrech (1:1, 2:3, 7:3) s detekcí anisaldehydovým činidlem.

Poté byla reakční směs přelita do 150 ml vody, vytřepána do dichlormethanu a se sušidlem dána do lednice. Po odsátí sušidla na fritě a odpaření rozpouštědla na vakuové odparce byla reakční směs opět nechána v lednici. Vzniklé krystaly byly odsáty na fritě, za tepla rozpuštěny v ethanolu a dány do lednice. Po překrystalizování byly krystaly opět odděleny odsátím a nechány usušit.

Bylo připraveno 4,5 g látky **7**  $[\alpha]_{\text{D}} - 38,1$  (*c* 0,1  $\text{CHCl}_3$ ), b.t.  $122 - 124\text{ }^\circ\text{C}$ . Literatura<sup>15</sup> udává  $[\alpha]_{\text{D}} - 36,8$ ; b.t.  $122 - 123\text{ }^\circ\text{C}$ .

### 3.2.2. Reakce levoglukosanu s di-(*terc*-butyl)-dikarbonátem

Byl navážen 1 g 1,6-anhydro-D-glukopyranosy, rozpuštěn v 15 ml pyridinu a za chlazení v ledové lázni se solí bylo přidáno 3,4 g BOC-anhydridu (di-*terc*-butyl-dikarbonát). Reakce probíhala 3 hodiny, teplota postupně dosáhla laboratorní teploty. Sledování pomocí TLC bylo prováděno v soustavě ethylacetát-hexan v různých poměrech.

Po nalití do ledové vody se vytvořila sraženina, která byla rozpuštěna v dichlormethanu a po přidání sušidla dána do lednice. Po odsátí sušidla a odpaření vznikly krystalky o hmotnosti 0,4 g. Ty byly separovány chromatografií na koloně 25 g silikagelu v soustavě ethylacetát-hexan 1:5. Ve frakcích jímáných do 250 ml baněk byla izolována první látka v první frakci *F1* o hmotnost 39 mg a v třetí frakci *F3* další látka o hmotnosti 52 mg. Tyto frakce byly charakterizovány v <sup>1</sup>H-NMR a bylo zjištěno, že látka z frakce *F1* je trisubstituovaná 2,3,4-(*terc*-butyloxycarbonyl)-1,6-anhydro-β-D-glukopyranosa, frakce *F3* obsahovala směs více látek.

Tato reakce byla zopakována s mírným nedostatkem BOC-anhydridu (molární poměr 1:1,9) a za stálého chlazení. Reakce probíhala 4 hodiny, po nalití na vodu byla reakční směs vytřepána do dichlormethanu a se sušidlem dána do lednice. Po odsátí sušidla a odpaření na vakuové odparce byla opět provedena chromatografie odparku o hmotnosti 1,9 g na koloně 100 g silikagelu v soustavě ethylacetát-hexan 1:5. Ve frakcích jímáných do 100 ml baněk byly izolovány frakce *F6-11* (15 mg) a *F17-22* (41 mg), které byly charakterizovány pomocí NMR.

Bylo připraveno 15 mg tri-(O-Boc)-1,6-anhydroglukopyranosy ve frakci *F6-11*.

<sup>1</sup>H-NMR: 1.49 s, 18 H; 1.50 s, 9 H (3 x (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>C-); 3.79 dd, 1 H (J<sub>1</sub> = 8.1 Hz, J<sub>2</sub> = 5.7 Hz); 4.11 bd, 1 H (J = 7.5 Hz); 4.49 bs, 1 H; 4.52 bs, 1 H; 4.69 dm, 1 H (J = 4.8 Hz); 4.78 m, 1 H; 5.52 bs, 1 H.

<sup>13</sup>C-NMR: 27.97 (9 C), 65,66, 71.77, 72.47, 73.04, 74.04, 83.48, 83.61, 83.67, 99.58, 152.54, 152.83.

Ve frakci *F17-22* bylo přítomno 41 mg krystalické látky **12**.

<sup>1</sup>H-NMR: 1.49 – 1.51, 18 H (2 x (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>C-); 3.13 bs, 1 H (OH); 3.58 bs, 1 H; 3.80 dd, 1 H (J<sub>1</sub> = 7.5 Hz, J<sub>2</sub> = 6.0 Hz); 4.12 d, 1 H (J = 8.1 Hz); 4.53 bs, 1 H; 4.63 – 4.68, 2 H; 5.45 bs, 1 H.

### 3.2.3. 2,4-di-(*O*-*tert*-butyldimethylsilyl)-1,6-anhydro- $\beta$ -D-glukopyranosa (14)

Byl navážen 1 g levoglukosanu, rozpuštěn v 15 ml pyridinu a za stálého chlazení ledovou lázní se solí bylo postupně přidáváno 2,05 g *tert*-butyldimethylsilylchloridu. Sledování průběhu reakce bylo prováděno pomocí TLC v soustavě ethylacetát-hexan 1:1. Reakční směs byla ponechána 20 hodin v lednici, poté byla nalita na vodu a vytřepána do dichlormethanu a se sušidlem dána opět do lednice. Po odsátí sušidla a odpaření na vakuové odparce byla provedena chromatografie odparku o hmotnosti 2,2 g na 50 g silikagelu v hexanu, později v soustavě 9:1. Byly izolovány dvě frakce *F15* (0,28 g) a *F16-22* (0,64 g), které byly charakterizovány pomocí NMR.

Ve frakci *F16-22* bylo připraveno 0,64 g krystalické látky **14**  $[\alpha]_D -22,2$  (*c* 0,1 CHCl<sub>3</sub>) b.t. 57,9 °C. (Frakce *F15* byla směs více produktů podle NMR.)

<sup>1</sup>H-NMR: 0,09 s, 3 H; 0,10 s, 3 H; 0,103 s, 3 H; 0,11 s, 3 H (4 x CH<sub>3</sub>-Si); 0,91 s, 9 H, 0,92 s, 9 H (2 x (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>C-); 2,09 bd, 1 H (J = 4,5 Hz, OH); 3,40 – 3,54 m, 3 H; 3,65 dd, 1 H (J<sub>1</sub> = 7,2 Hz, J<sub>2</sub> = 5,1 Hz); 3,83 dd, 1 H (J<sub>1</sub> = 7,8 Hz, J<sub>2</sub> = 0,9 Hz); 4,36 dd, 1 H (J<sub>1</sub> = 5,1 Hz, J<sub>2</sub> = 0,9 Hz); 5,56 s, 1 H.

<sup>13</sup>C-NMR: -4,80, -4,69, -4,66, -4,57, 18,11, 18,14, 25,81 (6 C), 66,68, 74,49, 74,72, 75,81, 78,31, 103,79.

## 3.3. Syntéza lineárních a cyklických sulfitů 1,6-anhydrohexopyranos

### 3.3.1. Reakce levoglukosanu v pyridinu

Byla provedena reakce levoglukosanu s thionylchloridem (v množství 0,6 a 1,2 ekvivalentu levoglukosanu) v pyridinu. Za laboratorní teploty ani při zahřívání na 42 °C k reakci nedošlo.

### 3.3.2. Reakce levoglukosanu v dioxanu

Reakce 0,5 g levoglukosanu s 1,2 a 0,6 ekvivalentem thionylchloridu (tj. 0,44 a 0,22 g) v dioxanu s odpovídajícím přídatkem 1,2 a 0,6 ekvivalentu dimethylaminopyridinu (0,45 a 0,23 g) probíhala za laboratorní teploty po dobu 2,5 hod, poté byla ponechána 20 hod v lednici. Poté bylo přidáno 5 ml vody pro odstranění nezreagovaného thionylchloridu a rozpouštědla byla odpařena na vakuové odparce. Po přidání dichlormethanu došlo k vytvoření dvou nemísitelných fází, které byly odděleny,

odpařeny a pomocí TLC bylo zjištěno, že dichlormethanová fáze neobsahovala žádnou látku.

Tato reakce byla studována rovněž s 3,0 ekvivalentem thionylchloridu, kdy však vznikla směs mnoha produktů.

### 3.3.3. Reakce levoglukosanu v dimethylsulfitu

0,1 g levoglukosanu reagovalo s thionylchloridem v dimethylsulfitu za laboratorní teploty po dobu 24 hod. Vzniklá směs produktů byla chromatografována na sloupci 25 g silikagelu v soustavě chloroform – methanol 20:1. Byly izolovány frakce *F2*, *F6-8*, *F11* a *F15-18*, z kterých bylo naměřeno infračervené spektrum.

Pomocí IR spektra bylo zjištěno, že frakce *F2* a *F6-8* vykazují vibrační pás S=O skupiny ( $1045\text{ cm}^{-1}$ ).

Při opakování této reakce z většího množství reagovalo 0,5 g levoglukosanu s 0,35 ml thionylchloridu v dimethylsulfitu. Reakce probíhala 4 hod za laboratorní teploty. Vznikla směs méně produktů, která byla opět dělena chromatografií na 50 g silikagelu v soustavě chloroform – methanol 20:1. Byla separována čistá frakce *F3*, na níž bylo změřeno IR spektrum a MS. To opět potvrdilo přítomnost S=O pásu, avšak MS spektrum se neshodovalo s žádnou možnou strukturou.

### 3.3.4. Reakce 2,4-di-*O*-benzyl-1,6-anhydro- $\beta$ -D-glukopyranosy v dioxanu

0,2 g 2,4-di-*O*-benzyllevoglukosanu reagovalo s 0,05 ml thionylchloridu v dioxanu s přísávkem 0,17 g dimethylaminopyridinu za laboratorní teploty po dobu 3 hod. Po odpaření rozpouštědla na vakuové odparce byla vzniklá směs produktů separována na chromatografickém sloupci 20 g silikagelu v soustavě toluen – aceton 9:1. Byla izolována čistá frakce *F6*, která byla charakterizována pomocí MS.

MS spektrum vykazovalo maximum v hodnotě  $m/z = 365.1$ , což odpovídá poměru  $m/z$  výchozí látky.



## 4. Výsledky a diskuse

### 4.1. Chránicí reakce

#### 4.1.1. Reakce se Z-chloridem

Tyto pokusy v podstatě pouze potvrdily to co bylo známo, tj. zcela jednoznačně lze připravit popsany 2,4-disubstituovaný derivát levoglukosanu, který se získá v minimálně 80% výtěžku. Pokusy o přípravu regiospecificky monosubstituovaného derivátu použitím 1 ekvivalentu chloridu při nízké teplotě skončily nezdarem, od samého počátku vzniká směs monosubstituovaných derivátů i disubstituovaného. Ukazuje se tedy, že rozdíly v reaktivitě jednotlivých poloh jsou natolik malé, že není možné volbou reakčních podmínek připravit selektivně jeden monosubstituovaný produkt.

#### 4.1.2. Reakce s BOC-anhydridem

Skupina BOC je známá z peptidové chemie, kde reakcí BOC-anhydridu s volnou aminoskupinou vzniká karbamát. Tento způsob chránění se ukázal jako perspektivní i pro chránění sekundárních hydroxylových skupin anhydrohexos. Podobně jako při reakci se Z-chloridem i v tomto případě vzniká krystalický produkt **12**. Monosubstituované deriváty se nepodařilo přímo připravit. I zde se projevuje srovnatelná reaktivita sekundárních hydroxylů v poloze C-2 a C-4, takže i při nízké teplotě za použití jednoho ekvivalentu činidla vznikají směsi monosubstituovaných a disubstituovaného produktu.

Oproti di-*O*-benzyloxykarbonylderivátu se di-*O-terc*-butoxykarbonylderivát vyznačuje výrazně vyšší stabilitou v bazickém prostředí, což může být při některých reakcích výhodné.

#### 4.1.3. Reakce s *terc*-butyldimethylsilylchloridem

Reakce s dvěma ekvivalenty činidla vede ke vzniku 2,4-disubstituovaného levoglukosanu. Příprava je velmi jednoduchá a výtěžky jsou téměř kvantitativní. Poněkud nezaslouženě byla tomuto způsobu chránění věnována v literatuře jen minimální pozornost. Vynikající stabilita v bazickém a dobrá v kyselém prostředí toto chránění předurčuje k častějšímu použití v cukerných syntézách. Odchránění se

kvantitativně provede působením fluoridových iontů – například pomocí tetrabutylammoniumfluoridu.

#### 4.2. Příprava lineárních a cyklických sulfitů

Byly zkoušeny tyto metody:

- Reakce anhydrocukru s thionylchloridem v pyridinu
- Transesterifikace dimethylsulfitu anhydrocukrem

V obou případech byla použita různá rozpouštědla (pyridin, dioxan, bez rozpouštědla) a různé katalyzátory (TEA, DMAP). Ve všech případech vznikaly směsi látek, které byly děleny na sloupci silikagelu a analyzovány. Jako vodičko byla použita IR spektroskopie, protože charakteristická vibrace S=O by přítomnost očekávaného produktu signalizovala.

V některých případech byl ve spektru pás S=O zjištěn, ale podle MS se nejednalo o očekávaný produkt.

Celkově lze konstatovat, že se nepodařilo vypracovat syntézu cyklických ani acyklických sulfitů. Tato syntéza a hledání vhodných reakčních podmínek bude předmětem dalšího zkoumání.

## 5. Závěr

Byly připraveny tyto deriváty 1,6-anhydropyranos reakcemi s chránícími skupinami:

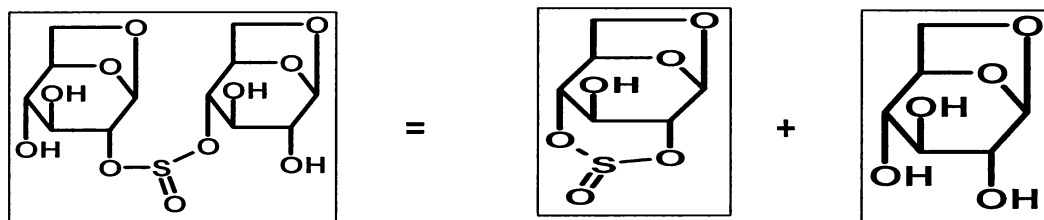
- 2,4-di-(benzyloxykarbonyl)-1,6-anhydro- $\beta$ -D-glukopyranosa
- 2,4-di-(*tert*-butyloxykarbonyl)-1,6-anhydro- $\beta$ -D-glukopyranosa
- 2,4-di-(*tert*-butyldimethylsilyl)-1,6-anhydro- $\beta$ -D-glukopyranosa

Lineární a cyklické estery kyseliny siřičité i přes příznivé teoretické hodnoty výpočtů nebyly připraveny. Jejich syntéza bude nadále rozvíjena, a to především nalezením vhodných reakčních podmínek.

## 6. Přehled použité literatury

1. Lehman J.: Carbohydrates Structure and Biology, Thieme Verlag, **1998** Berlín.
2. Voet D., Voetová J.G.: Biochemie, Victoria Publishisng, **1995** Praha.
3. Snow A.D., Wight T.N.: Neurobiol. Aging, **1989**, 10, 481.
4. Hořejší V., Bartůňková J.: Základy imunologie, Triton, 2001 Praha.
5. Barondes S. H.: Trends Biochem. Sci. **1988**,13, 480.
6. Ashwell G., Morell A. G.: Adv. Enzymol. Relat. Areas Mol. Biol., **1974**, 41, 99.
7. Ashwell G., Harford J.: Annu. Rev. Biochem., **1982**, 51, 531.
8. Sharon N.: FEBS Lett., **1987**, 217, 145.
9. Ambrosi M., Cameron N. R., Davis B.G.: Org. Biomol. Chem., **2005**, 3, 1593.
10. Drickamer K.: J. Biol. Chem. **1988**, 263, 9557.
11. D. C. Kilpatrick: Biochim. Biophys. Acta, **2002**, 2-3, 187.
12. Moravcová J.: přednáška Role sacharidů v živých organismech; dne 5.5.2008 z <http://www.otevrena-veda.cz/ov/users/Image/default/C2Seminare/MultiObSem/004.pdf>
13. Kulkarni S. S., Lee J-C., Hung S-C.: Curr. Org. Chem., **2004**, 8, 475.
14. Černý M., Trnka T., Redlich H.: Carbohyd.Res., **1988**, 174, 349.
15. Černý M., Gut V., Pacák J.: Collect. Czech. Chem. Commun., **1961**, 26, 2542.
16. Sweeley C. C., Bentley R., Makita M., Wells W. W.: J. Am. Chem. Soc., **1963**, 85, 2497.
17. Marchand A. P., Liu, Z., Gadgil V.R., Burritt A., Bot S.G.: Tetrah. Lett., **1995**, 36, 5487
18. Drašar P., Beránek J.: Collect. Czech. Chem., <sup>Commun.</sup> **1989**, 54, 1358.
19. Dewar M. J. S., Zoebisch E. G., Healy E. F., Stewart J. J. P.: J. Am. Chem. Soc., **1985**, 107, 3902.
20. Ditchfield R., Hehre W. J., Pople J. A.: J. Chem. Phys., **1971**, 54, 724.
21. Moller R, Plesset M. S.: Phys Rev, **1934**, 46, 618.
22. Hehre W. J., Radom L., Schleyer P. v. R., Pople J.: *Ab Initio* Molecular Orbital Theory, Wiley, **1986** New York

**Příloha I: Teoretické výpočty celkové energie, celkové entropie a volné energie uvedených reakcí**



translační energie (tepelná) 20°C	3,66	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
translační energie (tepelná) 60°C	4,15	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
translační energie (tepelná) 100°C	4,65	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
translační energie (tepelná) 140°C	5,15	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
rotační energie (tepelná) 20°C	3,66	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
rotační energie (tepelná) 60°C	4,15	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
rotační energie (tepelná) 100°C	4,65	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
rotační energie (tepelná) 140°C	5,15	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
translační entropie 20°C	138,23	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
translační entropie 60°C	139,83	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
translační entropie 100°C	141,24	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
translační entropie 140°C	142,51	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$

**AM1 (semiempiricky) vibrace**

Vibrační energie nulového bodu	-2,71	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
tepelná vibrační energie 20°C	-12,68	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
tepelná vibrační energie 60°C	-14,60	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
tepelná vibrační energie 100°C	-16,53	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
tepelná vibrační energie 140°C	-18,45	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
vibrační entropie 20°C	47,71	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
vibrační entropie 60°C	52,70	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
vibrační entropie 100°C	57,24	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
vibrační entropie 140°C	61,40	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$

**AM1 (semiempiricky) ostatní**

HF energie valenčních elektronů	1115027,65	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
core-core repulsní energie	-1114980,59	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
celková energie bez vib, rot, tr (AM1)	47,06	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
rotační entropie 20°C	105,27	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
rotační entropie 60°C	106,86	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
rotační entropie 100°C	108,28	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
rotační entropie 140°C	109,55	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$

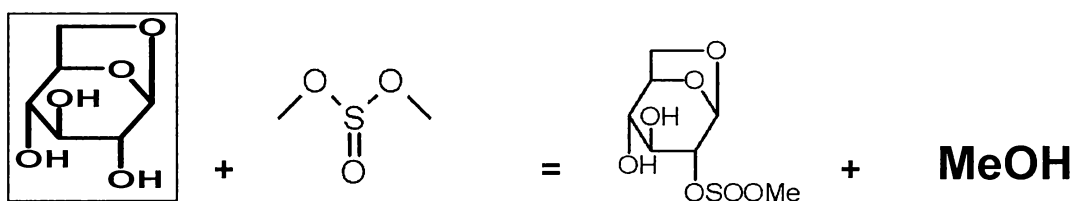
**AM1 SEMIEMPIRICKY**

celková energie bez vib. nul. bodu 20°C	41,70	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu 60°C	40,76	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$

celková energie bez vib. nul. bodu 100°C	39,83	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu 140°C	38,91	$\text{kJ.mol}^{-1}$
<b>celková energie (včetně nul. vib.) 20°C</b>	<b>38,99</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>celková energie (včetně nul. vib.) 60°C</b>	<b>38,05</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>celková energie (včetně nul. vib.) 100°C</b>	<b>37,12</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>celková energie (včetně nul. vib.) 140°C</b>	<b>36,20</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
celková entropie 20°C	291,21	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie 60°C	299,39	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie 100°C	306,76	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie 140°C	313,46	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
volná energie bez nul. vib. 20°C	-43,67	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib. 60°C	-58,98	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib. 100°C	-74,64	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib. 140°C	-90,60	$\text{kJ.mol}^{-1}$
<b>volná energie (včetně nul. vib.) 20°C</b>	<b>-46,38</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>volná energie (včetně nul. vib.) 60°C</b>	<b>-61,69</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>volná energie (včetně nul. vib.) 100°C</b>	<b>-77,35</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>volná energie (včetně nul. vib.) 140°C</b>	<b>-93,31</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>

#### AB INITIO (kromě vibrace)

celková energie bez vib. nul. bodu 20°C	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu 60°C	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu 100°C	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu 140°C	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.) 20°C	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.) 60°C	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.) 100°C	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.) 140°C	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková entropie 20°C	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie 60°C	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie 100°C	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie 140°C	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
volná energie bez nul. vib. 20°C	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib. 60°C	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib. 100°C	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib. 140°C	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie (včetně nul. vib.) 20°C	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie (včetně nul. vib.) 60°C	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie (včetně nul. vib.) 100°C	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie (včetně nul. vib.) 140°C	$\text{kJ.mol}^{-1}$



translační energie (tepelná) 20°C	0,00	kJ.mol <sup>-1</sup>
translační energie (tepelná) 60°C	0,00	kJ.mol <sup>-1</sup>
translační energie (tepelná) 100°C	0,00	kJ.mol <sup>-1</sup>
translační energie (tepelná) 140°C	0,00	kJ.mol <sup>-1</sup>
rotační energie (tepelná) 20°C	0,00	kJ.mol <sup>-1</sup>
rotační energie (tepelná) 60°C	0,00	kJ.mol <sup>-1</sup>
rotační energie (tepelná) 100°C	0,00	kJ.mol <sup>-1</sup>
rotační energie (tepelná) 140°C	0,00	kJ.mol <sup>-1</sup>
translační entropie 20°C	-10,49	J.mol <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
translační entropie 60°C	-10,49	J.mol <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
translační entropie 100°C	-10,50	J.mol <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
translační entropie 140°C	-10,50	J.mol <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
<b>ab initio</b>		
elektronová HF energie	-783782,39	kJ.mol <sup>-1</sup>
repulsní energie jader	783782,41	kJ.mol <sup>-1</sup>
korelační energie (MP2)	-11,99	kJ.mol <sup>-1</sup>
celková energie bez vib, rot, tr (ab initio)	-11,97	kJ.mol <sup>-1</sup>
rotační entropie 20°C	-22,73	J.mol <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
rotační entropie 60°C	-22,75	J.mol <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
rotační entropie 100°C	-22,73	J.mol <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
rotační entropie 140°C	-22,73	J.mol <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
<b>AM1 (semiempiricky) vibrace</b>		
Vibrační energie nulového bodu	-1,03	kJ.mol <sup>-1</sup>
tepelná vibrační energie 20°C	0,94	kJ.mol <sup>-1</sup>
tepelná vibrační energie 60°C	0,97	kJ.mol <sup>-1</sup>
tepelná vibrační energie 100°C	0,98	kJ.mol <sup>-1</sup>
tepelná vibrační energie 140°C	0,99	kJ.mol <sup>-1</sup>
vibrační entropie 20°C	-8,76	J.mol <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
vibrační entropie 60°C	-9,45	J.mol <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
vibrační entropie 100°C	-10,04	J.mol <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
vibrační entropie 140°C	-10,53	J.mol <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
<b>AM1 (semiempiricky) ostatní</b>		
HF energie valenčních elektronů	-326189,40	kJ.mol <sup>-1</sup>
core-core repulsní energie	326199,73	kJ.mol <sup>-1</sup>
celková energie bez vib, rot, tr (AM1)	10,33	kJ.mol <sup>-1</sup>
rotační entropie 20°C	-22,55	J.mol <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
rotační entropie 60°C	-22,55	J.mol <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
rotační entropie 100°C	-22,55	J.mol <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
rotační entropie 140°C	-22,55	J.mol <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>

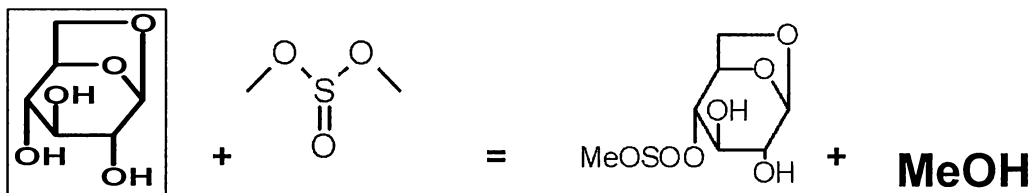
**AM1 SEMIEMPIRICKY**

celková energie bez vib. nul. bodu	20°C	11,27	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu	60°C	11,30	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu	100°C	11,31	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu	140°C	11,32	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	20°C	10,23	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	60°C	10,26	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	100°C	10,27	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	140°C	10,28	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková entropie	20°C	-41,80	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie	60°C	-42,49	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie	100°C	-43,09	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie	140°C	-43,58	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	20°C	23,52	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	60°C	25,46	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	100°C	27,39	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	140°C	29,33	$\text{kJ.mol}^{-1}$
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>20°C</b>	<b>22,48</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>60°C</b>	<b>24,42</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>100°C</b>	<b>26,35</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>140°C</b>	<b>28,29</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>

**AB INITIO (kromě vibrace)**

celková energie bez vib. nul. bodu	20°C	-11,03	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu	60°C	-11,00	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu	100°C	-10,99	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu	140°C	-10,98	$\text{kJ.mol}^{-1}$
<b>celková energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>20°C</b>	<b>-12,06</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>celková energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>60°C</b>	<b>-12,03</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>celková energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>100°C</b>	<b>-12,02</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>celková energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>140°C</b>	<b>-12,01</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
celková entropie	20°C	-41,98	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie	60°C	-42,69	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie	100°C	-43,27	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie	140°C	-43,76	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	20°C	1,28	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	60°C	3,22	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	100°C	5,16	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	140°C	7,10	$\text{kJ.mol}^{-1}$
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>20°C</b>	<b>0,25</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>60°C</b>	<b>2,19</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>100°C</b>	<b>4,13</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>140°C</b>	<b>6,07</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>





translační energie (tepelná) 20°C	0,00	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
translační energie (tepelná) 60°C	0,00	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
translační energie (tepelná) 100°C	0,00	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
translační energie (tepelná) 140°C	0,00	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
rotační energie (tepelná) 20°C	0,00	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
rotační energie (tepelná) 60°C	0,00	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
rotační energie (tepelná) 100°C	0,00	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
rotační energie (tepelná) 140°C	0,00	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
translační entropie 20°C	-10,49	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
translační entropie 60°C	-10,49	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
translační entropie 100°C	-10,50	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
translační entropie 140°C	-10,50	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$

#### ab initio

elektronová HF energie	-778618,59	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
repulsní energie jader	778615,48	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
korelační energie (MP2)	-10,35	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
celková energie bez vib, rot, tr (ab initio)	-13,46	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
rotační entropie 20°C	-22,48	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
rotační entropie 60°C	-22,50	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
rotační entropie 100°C	-22,48	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
rotační entropie 140°C	-22,48	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$

#### AM1 (semiempiricky) vibrace

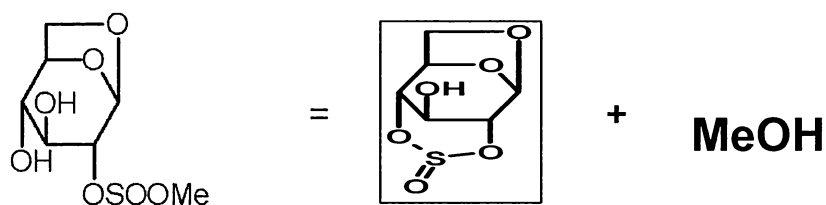
Vibrační energie nulového bodu	-0,82	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
tepelná vibrační energie 20°C	0,79	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
tepelná vibrační energie 60°C	0,81	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
tepelná vibrační energie 100°C	0,81	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
tepelná vibrační energie 140°C	0,81	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
vibrační entropie 20°C	-7,11	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
vibrační entropie 60°C	-7,71	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
vibrační entropie 100°C	-8,22	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
vibrační entropie 140°C	-8,63	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$

#### AM1 (semiempiricky) ostatní

HF energie valenčních elektronů	-328207,80	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
core-core repulsní energie	328216,68	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
celková energie bez vib, rot, tr (AM1)	8,88	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
rotační entropie 20°C	-22,42	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
rotační entropie 60°C	-22,42	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
rotační entropie 100°C	-22,42	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
rotační entropie 140°C	-22,42	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$

**AM1 SEMIEMPIRICKY**

celková energie bez vib. nul. bodu	20°C	9,67	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu	60°C	9,69	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu	100°C	9,69	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu	140°C	9,69	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	20°C	8,84	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	60°C	8,86	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	100°C	8,86	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	140°C	8,86	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková entropie	20°C	-40,02	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie	60°C	-40,62	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie	100°C	-41,14	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie	140°C	-41,55	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	20°C	21,40	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	60°C	23,22	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	100°C	25,04	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	140°C	26,86	$\text{kJ.mol}^{-1}$
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>20°C</b>	<b>20,57</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>60°C</b>	<b>22,39</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>100°C</b>	<b>24,21</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>140°C</b>	<b>26,03</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>



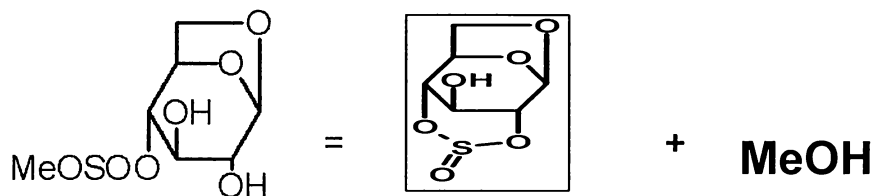
translační energie (tepelná) 20°C	3,66	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
translační energie (tepelná) 60°C	4,15	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
translační energie (tepelná) 100°C	4,65	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
translační energie (tepelná) 140°C	5,15	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
rotační energie (tepelná) 20°C	3,66	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
rotační energie (tepelná) 60°C	4,15	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
rotační energie (tepelná) 100°C	4,65	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
rotační energie (tepelná) 140°C	5,15	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
translační entropie 20°C	123,40	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
translační entropie 60°C	125,01	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
translační entropie 100°C	126,42	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
translační entropie 140°C	127,69	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
<b>ab initio</b>		
elektronová HF energie	540720,69	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
repulsní energie jader	-540650,07	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
korelační energie (MP2)	6,31	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
celková energie bez vib, rot, tr (ab initio)	76,93	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
rotační entropie 20°C	72,72	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
rotační entropie 60°C	74,31	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
rotační entropie 100°C	75,72	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
rotační entropie 140°C	76,99	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
<b>AM1 (semiempiricky) vibrace</b>		
Vibrační energie nulového bodu	-4,92	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
tepelná vibrační energie 20°C	-10,74	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
tepelná vibrační energie 60°C	-12,63	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
tepelná vibrační energie 100°C	-14,53	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
tepelná vibrační energie 140°C	-16,44	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
vibrační entropie 20°C	20,00	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
vibrační entropie 60°C	23,51	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
vibrační entropie 100°C	26,85	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
vibrační entropie 140°C	30,02	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
<b>AM1 (semiempiricky) ostatní</b>		
HF energie valenčních elektronů	288899,06	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
core-core repulsní energie	-288833,92	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
celková energie bez vib, rot, tr (AM1)	65,14	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
rotační entropie 20°C	73,03	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
rotační entropie 60°C	74,63	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
rotační entropie 100°C	76,04	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
rotační entropie 140°C	77,31	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$

**AM1 SEMIEMPIRICKY**

celková energie bez vib. nul. bodu	20°C	61,72	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu	60°C	60,81	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu	100°C	59,91	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu	140°C	59,00	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	20°C	56,79	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	60°C	55,88	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	100°C	54,98	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	140°C	54,07	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková entropie	20°C	216,43	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie	60°C	223,15	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie	100°C	229,31	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie	140°C	235,02	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	20°C	-1,73	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	60°C	-13,53	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	100°C	-25,66	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	140°C	-38,10	$\text{kJ.mol}^{-1}$
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>20°C</b>	<b>-6,66</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>60°C</b>	<b>-18,46</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>100°C</b>	<b>-30,59</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>140°C</b>	<b>-43,03</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>

**AB INITIO (kromě vibrace)**

celková energie bez vib. nul. bodu	20°C	73,51	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu	60°C	72,60	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu	100°C	71,70	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu	140°C	70,79	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	20°C	68,59	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	60°C	67,68	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	100°C	66,78	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	140°C	65,87	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková entropie	20°C	216,12	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie	60°C	222,83	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie	100°C	228,99	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie	140°C	234,70	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	20°C	10,15	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	60°C	-1,64	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	100°C	-13,75	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	140°C	-26,18	$\text{kJ.mol}^{-1}$
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>20°C</b>	<b>5,23</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>60°C</b>	<b>-6,56</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>100°C</b>	<b>-18,67</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>140°C</b>	<b>-31,10</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>



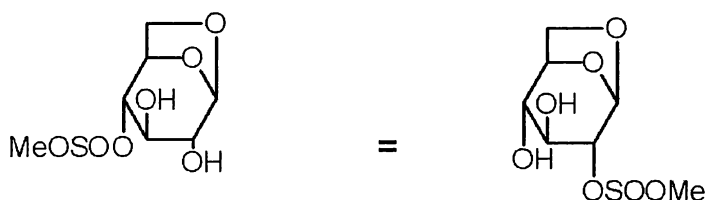
translační energie (tepelná) 20°C	3,66	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
translační energie (tepelná) 60°C	4,15	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
translační energie (tepelná) 100°C	4,65	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
translační energie (tepelná) 140°C	5,15	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
rotační energie (tepelná) 20°C	3,66	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
rotační energie (tepelná) 60°C	4,15	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
rotační energie (tepelná) 100°C	4,65	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
rotační energie (tepelná) 140°C	5,15	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
translační entropie 20°C	123,40	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
translační entropie 60°C	125,01	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
translační entropie 100°C	126,42	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
translační entropie 140°C	127,69	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
<b>ab initio</b>		
elektronová HF energie	535556,89	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
repulsní energie jader	-535483,14	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
korelační energie (MP2)	4,67	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
celková energie bez vib, rot, tr (ab initio)	78,42	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
rotační entropie 20°C	72,47	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
rotační entropie 60°C	74,06	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
rotační entropie 100°C	75,47	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
rotační entropie 140°C	76,74	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
<b>AM1 (semiempiricky) vibrace</b>		
Vibrační energie nulového bodu	-5,13	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
tepelná vibrační energie 20°C	-10,59	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
tepelná vibrační energie 60°C	-12,47	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
tepelná vibrační energie 100°C	-14,36	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
tepelná vibrační energie 140°C	-16,26	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
vibrační entropie 20°C	18,35	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
vibrační entropie 60°C	21,77	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
vibrační entropie 100°C	25,03	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
vibrační entropie 140°C	28,12	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
<b>AM1 (semiempiricky) ostatní</b>		
HF energie valenčních elektronů	290917,46	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
core-core repulsní energie	-290850,87	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
celková energie bez vib, rot, tr (AM1)	66,59	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
rotační entropie 20°C	72,90	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
rotační entropie 60°C	74,50	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
rotační entropie 100°C	75,91	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
rotační entropie 140°C	77,18	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$

**AM1 SEMIEMPIRICKY**

celková energie bez vib. nul. bodu	20°C	63,32	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu	60°C	62,42	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu	100°C	61,53	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu	140°C	60,63	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	20°C	58,18	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	60°C	57,28	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	100°C	56,39	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	140°C	55,49	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková entropie	20°C	214,65	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie	60°C	221,28	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie	100°C	227,36	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie	140°C	232,99	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	20°C	0,40	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	60°C	-11,30	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	100°C	-23,31	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	140°C	-35,63	$\text{kJ.mol}^{-1}$
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>20°C</b>	<b>-4,74</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>60°C</b>	<b>-16,44</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>100°C</b>	<b>-28,45</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>140°C</b>	<b>-40,77</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>

**AB INITIO (kromě vibrace)**

celková energie bez vib. nul. bodu	20°C	75,15	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu	60°C	74,25	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu	100°C	73,36	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu	140°C	72,46	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	20°C	70,02	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	60°C	69,12	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	100°C	68,23	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	140°C	67,33	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková entropie	20°C	214,22	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie	60°C	220,84	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie	100°C	226,92	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie	140°C	232,55	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	20°C	12,35	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	60°C	0,68	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	100°C	-11,32	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	140°C	-23,62	$\text{kJ.mol}^{-1}$
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>20°C</b>	<b>7,22</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>60°C</b>	<b>-4,45</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>100°C</b>	<b>-16,45</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>140°C</b>	<b>-28,75</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>



translační energie (tepelná) 20°C	0,00	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
translační energie (tepelná) 60°C	0,00	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
translační energie (tepelná) 100°C	0,00	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
translační energie (tepelná) 140°C	0,00	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
rotační energie (tepelná) 20°C	0,00	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
rotační energie (tepelná) 60°C	0,00	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
rotační energie (tepelná) 100°C	0,00	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
rotační energie (tepelná) 140°C	0,00	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
translační entropie 20°C	0,00	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
translační entropie 60°C	0,00	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
translační entropie 100°C	0,00	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
translační entropie 140°C	0,00	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
<b>ab initio</b>		
elektronová HF energie	-5163,80	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
repulsní energie jader	5166,93	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
korelační energie (MP2)	-1,64	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
celková energie bez vib, rot, tr (ab initio)	1,49	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
rotační entropie 20°C	-0,25	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
rotační entropie 60°C	-0,25	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
rotační entropie 100°C	-0,25	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
rotační entropie 140°C	-0,25	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
<b>AM1 (semiempiricky) vibrace</b>		
Vibrační energie nulového bodu	-0,21	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
tepelná vibrační energie 20°C	0,15	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
tepelná vibrační energie 60°C	0,16	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
tepelná vibrační energie 100°C	0,17	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
tepelná vibrační energie 140°C	0,18	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
vibrační entropie 20°C	-1,65	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
vibrační entropie 60°C	-1,74	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
vibrační entropie 100°C	-1,82	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
vibrační entropie 140°C	-1,90	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
<b>AM1 (semiempiricky) ostatní</b>		
HF energie valenčních elektronů	2018,40	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
core-core repulsní energie	-2016,95	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
celková energie bez vib, rot, tr (AM1)	1,45	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
rotační entropie 20°C	-0,13	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
rotační entropie 60°C	-0,13	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
rotační entropie 100°C	-0,13	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
rotační entropie 140°C	-0,13	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$

**AM1 SEMIEMPIRICKY**

celková energie bez vib. nul. bodu	20°C	1,60	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu	60°C	1,61	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu	100°C	1,62	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu	140°C	1,63	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	20°C	1,39	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	60°C	1,40	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	100°C	1,41	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	140°C	1,42	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková entropie	20°C	-1,78	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie	60°C	-1,87	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie	100°C	-1,95	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie	140°C	-2,03	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	20°C	2,12	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	60°C	2,23	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	100°C	2,35	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	140°C	2,47	$\text{kJ.mol}^{-1}$
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>20°C</b>	<b>1,91</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>60°C</b>	<b>2,02</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>100°C</b>	<b>2,14</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>140°C</b>	<b>2,26</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>

**AB INITIO (kromě vibrace)**

celková energie bez vib. nul. bodu	20°C	1,64	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu	60°C	1,65	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu	100°C	1,66	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie bez vib. nul. bodu	140°C	1,67	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	20°C	1,43	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	60°C	1,44	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	100°C	1,45	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková energie (včetně nul. vib.)	140°C	1,46	$\text{kJ.mol}^{-1}$
celková entropie	20°C	-1,90	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie	60°C	-1,99	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie	100°C	-2,07	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
celková entropie	140°C	-2,15	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	20°C	2,20	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	60°C	2,31	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	100°C	2,43	$\text{kJ.mol}^{-1}$
volná energie bez nul. vib.	140°C	2,56	$\text{kJ.mol}^{-1}$
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>20°C</b>	<b>1,99</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>60°C</b>	<b>2,10</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>100°C</b>	<b>2,22</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>
<b>volná energie (včetně nul. vib.)</b>	<b>140°C</b>	<b>2,35</b>	<b><math>\text{kJ.mol}^{-1}</math></b>



Svoluji k zapůjčení této práce pro studijní účely a prosím, aby byla řádně vedena evidence vypůjčovatelů.

<b>Jméno a příjmení, adresa</b>	<b>Číslo OP</b>	<b>Datum vypůjčení</b>	<b>Poznámka</b>