

रासायनिक प्रमात्रा गणनाओं की सहायता से जेनेस्टिन की आण्विक संरचना का इष्टमीकरण

राम कुमार तिवारी
असिस्टेंट प्रोफेसर, भौतिक विभाग
बी० एस० एन० वी० पी० जी० कॉलेज, चारबाग, लखनऊ-226001, उ०प्र०, भारत
rktshri@yahoo.co.in

सार

जेनेस्टिन(सी₁₅एच₁₀ओ₅) महत्वपूर्ण सोया उत्पादों में एक है जो एण्टिनियोप्लासिक सक्रियता के साथ आइसोफलेवोन तथा फाइटोएस्ट्रोजेन की श्रेणी में आता है। यह प्रोटीन- टायोसिन किनासे को बाँधता है जिससे संकेतों का प्रवाह बाधित न हो और कोशिका अन्तर उत्प्रेरित हो सके। इसमें टोपोआइसोमेरेज-2 का गुण होता है जो डी०एन०ए० विखंडन को प्रभावित करता है और जी२/एम कोशिकीय चक्र को रोकता है। जेनेस्टिन में एण्टीऑक्सीडेंट, एण्टीएंजियोजेनिक एवं इम्यूनोसप्रेसिव के गुण होने के कारण इसे **चमत्कारिक औषधि** के रूप में जाना जाता है जिसकी कैंसर जैसे असाध्य रोगों के उपचार में अत्यंत महत्वपूर्ण भूमिका है। जेनेस्टिन की आंतरिक संरचना को डेंसिटी फंक्शनल थ्योरी के डीएफटी/बी३एलवाईपी मॉडल पर 6-311++जी(डी, पी) बेसिस सेट द्वारा प्राप्त करने का प्रयास है।

बीज शब्द— जेनेस्टिन, रमन आई.आर. एण्ड यू.वी. स्पेक्ट्रा, डी.एफ.टी. गणना।

Molecular structure optimization of Genistein by quantum chemical calculations

Ram Kumar Tiwari
Assistant Professor, Department of Physics
B.S.N.V. P.G. College, Lucknow-226001, U.P., India
rktshri@yahoo.co.in

Abstract

Genistein(C₁₅H₁₀O₅), an important soy product is an isoflavone and phytoestrogen with antineoplastic activity. Genistein binds to and inhibits protein-tyrosine kinase, thereby disrupting signal transduction and inducing cell differentiation. This agent also inhibits topoisomerase-II, leading to DNA fragmentation and apoptosis, and induces G2/M cell cycle arrest. Genistein exhibits antioxidant, antiangiogenic, and immunosuppressive activities. It has been hailed as a 'wonder drug' for halting the spread of cancer (particularly breast and prostate cancer) and found to be useful in keeping skin youthful. The optimized geometry of Genistein has been determined by using density functional theory (DFT/B3LYP) method with 6-311++G(d,p) basis sets.

Keywords: Genistein, Raman, IR and UV spectra, DFT calculation

1. प्रस्तावना

जेनेस्टिन(4,5,7-ट्राईहाइड्रॉक्सीसॉप्लेवॉन 5,7-डाईहाइड्रॉक्सी-3-(4-हाइड्रॉक्सीफिनायल)-4एच-1-बेंजोपायरान-4-वन) एक प्राकृतिक उत्पाद है जो कई बिमारियों खास कर कैंसर के उपचार में प्रभावी भूमिका होने के कारण शोध का विषय रहा है। जेनेस्टिन अनेकों ज्ञात आइसोप्लेवोन्स में से एक है। आइसोप्लेवोन्स कार्बनिक यौगिकों का वह वर्ग है जो स्वाभाविक रूप से जैविक रूप से सक्रिय होते हैं। जेनेस्टिन अनेक प्रकार के पादपों से प्राप्त किया जाता है जिनमें फावा बिन्स, सोया, कुडजु, पसोरालिया इत्यादि प्रमुख हैं¹⁻²। यह अनेक औषधिय पौधों यथा फ्लेमिंगिया वेस्टिटा, मैक्रोफायला एवं कॉफी में भी पाया जाता है³⁻⁵।

जेनेस्टिन में एण्टीऑक्सीडेंट, एण्टीएंजियोजेनिक एवं इम्यूनोसप्रेसिव के गुण पाये जाते हैं। कोशिका विभाजन एवं कोशिका अस्तित्व को नियंत्रित करने वाले कारकों को प्रभावित करने वाले गुणों के कारण जेनेस्टिन को अनियंत्रित कैंसर की रोकथाम के रूप में पहचाना गया है¹¹⁻¹²। विभिन्न अध्ययनों से पता चला है कि जेनेस्टिन की सूक्ष्म मात्रा अनेक प्रकार के कैंसर जैसे प्रोस्टेट, ग्रीवा, स्तन, मस्तिष्क, पेट आदि पर अत्यंत ही प्रभावकारी है⁶⁻¹¹। यह भी पता चला है कि यह शरीर के कैंसर प्रभावित कोशिकाओं को रेडियो थेरेपी के समय संवेदनशील बना देती है। अध्ययनों का निष्कर्ष यह भी है कि कुछ एण्टी लुकैमिक दवाइयों के साथ जेनेस्टिन के उपयोग करने पर इन दवाइयों की प्रभाव क्षमता बढ़ जाती है⁶। जेनेस्टिन, एस्ट्रोजेन की भांति कार्य करने के कारण जीवों में यह स्त्रीत्व के गुणों को विकसित होने में मदद करता है एवं पुरुष उत्पादकता को प्रभावित करता है¹³।

जेनेस्टिन के रमन या आई-आर स्पेक्टा की क्वांटम रसायन गणना (केमिकल कैलकुलेशन) का अध्ययन ज्ञात नहीं है जिस कारण इसका अध्ययन आवश्यक है।

2. प्रायोगिक विवरण

जेनेस्टिन का इन्फ्रारेड स्पेक्टा बुकर टेंसर 27 एफटी आईआर पर 4सीएम⁻¹ स्पेक्टल रेजुलेशन पर 400-4000 सीएम⁻¹ रेंज में रिकार्ड किया गया। सैंपल हेतु पोटेशियम ब्रोमाइड एवं सैंपल को 100:1 भाग में मिलाकर ठोस अवस्था को प्राप्त किया जाता है। बेस लाईन करेक्शन के लिए ओपीयूएस सॉफ्टवेयर का प्रयोग होता है। एफटी रमन स्पेक्टा को बुकर आईएफएस एसएस ईक्यूयूआईएनओएक्स पर 20-3400 सीएम⁻¹ रेंज में रिकार्ड किया गया। सैंपल को अर्धवृत्ताकार गोलीय एल्यूमिनियम धातु के बर्तन में मापन हेतु रखा गया। 500 मा0 वाट लेजर शक्ति द्वारा 512 स्कैन प्राप्त किया गया।

3. अभिकलनात्मक विवरण

अणु के इलेक्ट्रॉनिक संरचना एवं आदिमार्डिज्ड आकार को डीएफटी विधि से गॉसियन 09 साफ्टवेयर¹⁴ की सहायता से कम्प्यूट किया गया। इसमें बेसिस सेट 6-311++जी(डी,पी) का प्रयोग किया गया और बेक्स प्राचल निदेशांकों को ली-यांग-पार(बी3एलवायपी)¹⁵⁻¹⁷ की फंक्शनल थ्योरी के साथ प्रयोग किया गया। बेसिस सेट6-311++जी(डी,पी) में भारी अणुओं पर डी पोलराइजेशन फंक्शन एवं हाइड्रोजन अणुओं पर डी पोलराइजेशन फंक्शन को डिफ्यूज फंक्शन के रूप में प्रयोग किया गया है¹⁸⁻¹⁹।

4. संरचना का इष्टमीकरण

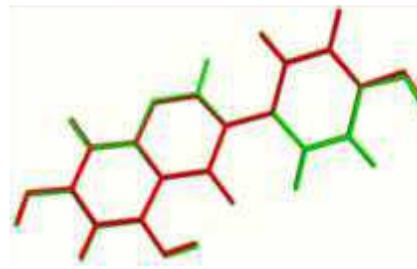
एक्स-रे विवर्तन द्वारा प्राप्त जेनेस्टिन की संरचना के मूल ऑकड़ों को लेकर बिना किसी रुकावट के संरचना के निम्नवत रूप को प्राप्त किया जाता है। निम्नवत उर्जा प्राप्त होने पर साम्य संरचना प्राप्त होती है। चित्र-1 में जेनेस्टिन के निम्नतर उर्जा स्तर की स्थायी संरचना को दर्शाया गया है। इस प्रक्रिया के द्वारा प्राप्त अणु, क्रिस्टलोग्राफिक असममित ईकाई के अणुओं के सदृश होते हैं। इस प्रकार से प्राप्त अणु की संरचना को प्रयोगों द्वारा प्राप्त अणु की संरचना से मिलान कराया गया है जिसमें लीस्ट स्क्वायर एलगॉरिदम का उपयोग किया गया है जो गैर हाइड्रोजन परमाणुओं के मध्य दूरियों को न्यूनतम करता है। एब इनीशियो डीएफटी (बी3एलवायपी) का उपयोग करके अणुओं की सापेक्षिक उर्जा को ज्ञात किया गया है। डीएफटी विधि से प्राकलित उर्जा -412.06×10^{-18} जूल एवं प्राकलित द्विध्रुव आघुर्ण 4.64×10^{-30} कु0मी0 है। प्राप्त संरचना एवं मूल संरचना के अणुओं के विभिन्न प्राचलों को तालिका-1 में दर्शाया गया है। यह पता चलता है कि दोनों संरचनाओं में बन्धों की लम्बाइयों का अधिकतम अन्तर 0.037 \AA है। बन्ध कोणों में सी(19)-सी(20)-ओ(5), सी(18)-सी(20)-ओ(5), एच(30)-सी(19)-सी(17) तथा एच(29)-सी(18)-सी(16) को छोड़ कर जिनमें यह अन्तर क्रमशः 5.27° , 5.22° , 1.46° तथा 1.38° है जो कि 0.82 डिग्री से अधिक नहीं है।

5. परिणाम/निष्कर्ष

इस कार्य में दिये गये अणु के अनेक उपलब्ध संरचना को स्कैन किया गया। आण्विक संरचना एवं जैविक क्रियाशीलता को समझने का यह उपयोगी तरीका है। प्रायोगिक एवं सिमुलेशन द्वारा प्राप्त परिणामों की तुलना से अणु की बेहतरीन संरचना को समझा जा सकता है। साम्य संरचना को 6-311++जी(डी,पी) बेसिस सेट पर डीएफटी विधि से ज्ञात किया गया है जिसके सबसे अधिक स्थायी कनफॉर्मर हैं।



चित्र-1



चित्र-2

चित्र-1 ऑप्टिमाइज्ड मॉलिक्यूलर स्ट्रक्चर ऑफ जेनेस्टिन मॉलिक्यूल

चित्र-2 कंपेरीजन ऑफ द ऐक्सपेरिमेंटल(फ्राम सिंगल क्रिस्टल एक्स-रे डिफ्रैक्शन)(ग्रीन) एण्ड ऑप्टिमाइज्ड स्ट्रक्चर ऑफ जेनेस्टिन(साफ चित्र हेतु हाइड्रोजन परमाणुओं को नहीं लिया गया है।)

संदर्भ

1. कोवार्ड, एल0; बार्नेस, एन0 सी0; सेशेल, के0 डी0 आर0 एवं बार्नेस, एस0(1993) ज0 एग्रीक0 फूड के0, खण्ड 41, पृ0 1961।
2. कॉफमैन, पी0 बी0; ड्यूक, जे0 ए0; ब्रीलमान, एच0 एवं हॉयट, जे0 ई0(1997) ज0 आल्टरने0 कॉम्प्लीमेंट मेड0, खण्ड 3, पृ0 7।
3. राव, एच0 एस0 पी0 एवं रेड्डी, के0 एस0(1991) फिटोटेरपिया0, खण्ड 62, पृ0 458।
4. वांग, बी0 एस0; जुआंग, एल0 जे0; यांग, जे0 जे0; चेन, एल0 वाय0; ताइ, एच0 एम0 एवं हुआन, एम0 एच0(2012) "एण्टीऑक्सीडेंट एण्ड एण्टीटायरोसिनेज एक्टिविटी ऑफ फ्लेमिन्गिया मैक्रोफायला एण्ड ग्लाइसीन टोमेन्टेला रूट्स", एविडेन्स-बेस्ड कॉम्प्लीमेंटरी एण्ड आल्टरनेटिव मेडिसिन, खण्ड 1, आर्टिकल आई0 डी0-431081।
5. आल्वेस, आर0 सी0; अल्मीएडा, आई0 एम0; कसाल, एस0 एवं ओलीवेयरा, एम0 बी0(2010) ज0 एग्री0 फूड केम0, खण्ड 58, पृ0 3002।
6. ली, एच0 पी0 एवं अन्य(1991) लान्सेट0, खण्ड 337, पृ0 1197।
7. मर्ज-डेम्लो, बी0 ई0 एवं अन्य(2000) अमे0 ज0 क्लिन0 न्यूट्रि0, खण्ड 71, पृ0 1462।
8. एलेकेल, डी0 एल0; सेंटजर्मेन, ए0 एवं अन्य(2000) अमे0 ज0 क्लिन0 न्यूट्रि0, खण्ड 72, पृ0 844।
9. मान, जी0 ई0 एवं अन्य(2009) करे0 ओपि0 फार्मेकोल0, खण्ड 9, पृ0 139।
10. कॉफमैन, पी0 बी0; ड्यूक, जे0 ए0; ब्रीलमान, एच0; बॉयक, जे0 एवं हॉयट, जे0 ई0(1997) ज0 आल्टरने0 कॉम्प्लीमेंट मेड0, खण्ड 3, पृ0 7।
11. डी लेमोज, एम0 एल0(2001) एनवल फारमेकोथर0, खण्ड 35, पृ0 1118।
12. किम, एस0 एच0 एवं अन्य(2009) एनवल एन0 वाय0 एकेड0 साइं0, खण्ड 1171, पृ0 495।
13. मिशेल, जे0 एच0 एवं अन्य(2001) क्लिन0 साइं0(लंदन), खण्ड 100, अंक 6, पृ0 613।
14. मार्टिन, जे0 एम0 एल0 एवं ऐस्लेनॉय, सी0 वान(1995) गार2पेड, यूनिवर्सिटी ऑफ एण्टवर्प।
15. जुको, जी0 ए0(2005) केमक्रापट।
16. कैसिडा, एम0 ई0(1995) "रीसेन्ट डेवेलपमेंट इन डेन्सिटी फन्क्शनल थ्योरी", चोंग डी0 पी0(संपा0), वर्ल्ड साइंटिफिक, सिंगापुर, खण्ड 1, अंक 1, पृ0 155।

17. कैसिडा, एम0 ई0; कैसिडा, के0 सी0 एवं सलाहब, डी0 आर0(1998) इंटर0 ज0 क्वांटम केम0, खण्ड 70, पृ0 933।
18. स्ट्रैटमैन, आर0 ई0; शुसेरिया, जी0 ई0 एवं फ्रिश, एम0 जे0(1998) ज0 केमि0 फिजिक्स, खण्ड 109, पृ0 8218।
19. मियरटस, एस0; स्कोरॉक, ई0 एवं टोमेसी, जे0(1981) केम0 फिज0, खण्ड 55, पृ0 117।

तालिका-1ए: बन्ध दूरी (बॉन्ड लेन्थ)

परमाणु	वास्तविक मान	गणनात्मक मान	अंतर
एच(30)-सी(19)	1.0831	1.0862	0.0031
एच(29)-सी(18)	1.0862	1.0831	-0.0031
एच(28)-सी(17)	1.0845	1.0808	-0.0037
एच(27)-सी(18)	1.0811	1.0844	0.0033
एच(26)-सी(14)	1.0843	1.0843	0
एच(25)-सी(13)	1.0808	1.0808	0
एच(24)-सी(12)	1.0817	1.0815	-0.0002
एच(23)-ओ(5)	0.963	0.963	0
एच(22)-ओ(4)	0.9634	0.9634	0
एच(21)-ओ(2)	0.9934	0.9932	-0.0002
सी(20)-ओ(5)	1.3676	1.3675	-1ई-04
सी(20)-सी(18)	1.396	1.3956	-0.0004
सी(20)-सी(19)	1.3946	1.3948	0.0002
सी(19)-सी(17)	1.389	1.3904	0.0014
सी(18)-सी(16)	1.3902	1.3885	-0.0017
सी(17)-सी(10)	1.4035	1.4021	-0.0014
सी(16)-सी(10)	1.4016	1.4043	0.0027
सी(15)-सी(13)	1.3946	1.3945	-1ई-04
सी(15)-सी(14)	1.3986	1.3986	0
सी(15)-ओ(4)	1.3602	1.3602	0
सी(14)-सी(11)	1.3905	1.3905	0
सी(13)-सी(8)	1.3855	1.3855	0
सी(12)-सी(7)	1.3544	1.3551	0.0007
सी(12)-ओ(1)	1.3499	1.3496	-0.0003
सी(11)-सी(6)	1.4247	1.4249	0.0002
सी(11)-ओ(2)	1.3374	1.3374	0
सी(10)-सी(7)	1.4811	1.4813	0.0002
सी(9)-ओ(3)	1.2459	1.2462	0.0003
सी(9)-सी(7)	1.4702	1.4708	0.0006
सी(9)-सी(6)	1.4525	1.4526	1ई-04
सी(8)-सी(6)	1.4052	1.4051	-1ई-04
सी(8)-ओ(1)	1.3679	1.3676	-0.0003

तालिका-1बी: बन्ध कोण(बॉन्ड एन्गल्स)

परमाणु	वास्तविक मान	गणनात्मक मान	अंतर
सी(19)-सी(20)-सी(18)	119.7384	119.6881	-0.0503
सी(19)-सी(20)-ओ(5)	117.5127	122.7823	5.2696
सी(18)-सी(20)-ओ(5)	122.7467	117.5276	-5.2191
सी(30)-सी(19)-सी(20)	119.2033	120.0278	0.8245
एच(30)-सी(19)-सी(17)	121.1705	119.7132	-1.4573
सी(20)-सी(19)-सी(17)	119.6179	120.2589	0.641
एच(29)-सी(18)-सी(20)	120.0247	119.2108	-0.8139
एच(29)-सी(18)-सी(16)	119.7583	121.1426	1.3843
सी(20)-सी(18)-सी(16)	120.2168	119.6377	-0.5791
एच(28)-सी(17)-सी(19)	118.7843	119.2984	0.5141
एच(28)-सी(17)-सी(10)	119.6163	119.723	0.1067
सी(19)-सी(17)-सी(10)	121.581	120.977	-0.604
एच(27)-सी(16)-सी(18)	119.3158	118.6021	-0.7137
एच(27)-सी(16)-सी(10)	119.7472	119.7151	-0.0321
सी(18)-सी(16)-सी(10)	120.9358	121.6587	0.7229
सी(14)-सी(15)-सी(13)	121.7649	121.7516	-0.0133
सी(14)-सी(15)-ओ(4)	121.6102	121.6131	0.0029
सी(14)-सी(15)-ओ(4)	116.6249	116.6352	0.0103
एच(26)-सी(14)-सी(15)	121.3187	121.3186	-0.0001
एच(26)-सी(14)-सी(11)	118.8402	118.8262	-0.014
सी(15)-सी(14)-सी(11)	119.8411	119.8552	0.0141
एच(25)-सी(13)-सी(15)	121.1284	121.1345	0.0061
एच(25)-सी(13)-सी(8)	121.2724	121.2739	0.0015
सी(15)-सी(13)-सी(8)	117.5992	117.5915	-0.0077
एच(24)-सी(12)-सी(7)	123.5219	123.541	0.0191
एच(24)-सी(12)-ओ(1)	110.6494	110.5393	-0.1101
सी(7)-सी(12)-ओ(1)	125.828	125.9168	0.0888
सी(14)-सी(11)-सी(6)	120.0484	120.0543	0.0059
सी(14)-सी(11)-ओ(2)	119.2652	119.2273	-0.0379
सी(6)-सी(11)-ओ(2)	120.6864	120.7184	0.032
सी(17)-सी(10)-सी(16)	117.8989	117.7724	-0.1265
सी(17)-सी(10)-सी(7)	120.6859	121.4901	0.8042
सी(16)-सी(10)-सी(7)	121.4104	120.716	-0.6944
सी(7)-सी(9)-सी(6)	115.7226	115.7935	0.0709
सी(7)-सी(9)-ओ(3)	122.7899	122.8338	0.0439
सी(6)-सी(9)-ओ(3)	121.4868	121.3722	-0.1146
सी(13)-सी(8)-सी(6)	123.1186	123.1563	0.0377
सी(13)-सी(8)-ओ(1)	116.9745	116.9815	0.007
सी(6)-सी(8)-ओ(1)	119.9061	119.8614	-0.0447
सी(12)-सी(7)-सी(10)	120.2885	120.2792	-0.0093

तालिका-1सी: डाईहीड्रल कोण

परमाणु	वास्तविक मान	गणनात्मक मान	अंतर
सी(18)-सी(20)-ओ(5)-एच(23)	0.7833	-178.7211	-179.5044
सी(19)-सी(20)-ओ(5)-एच(23)	-178.682	0.7696	179.4519
ओ(5)-सी(20)-सी(19)-सी(17)	-179.853	-179.8508	0.0022
ओ(5)-सी(20)-सी(19)-एच(30)	-0.0252	0.0307	0.0559
सी(18)-सी(20)-सी(19)-सी(17)	-0.3987	-0.3707	0.028
सी(18)-सी(20)-सी(19)-एच(30)	179.429	179.5108	0.0818
ओ(5)-सी(20)-सी(18)-सी(16)	179.7734	179.7592	-0.0142
ओ(5)-सी(20)-सी(18)-एच(29)	0.8107	0.8281	0.0174
सी(19)-सी(20)-सी(18)-सी(16)	0.2909	0.2521	-0.0388
सी(19)-सी(20)-सी(18)-एच(29)	-178.672	-178.679	-0.0072
सी(20)-सी(19)-सी(17)-सी(10)	0.5289	-0.1875	-0.7164
सी(20)-सी(19)-सी(17)-एच(28)	-177.907	179.3633	357.2698
एच(30)-सी(19)-सी(17)-सी(10)	179.4707	179.9306	0.4599
एच(30)-सी(19)-सी(17)-एच(28)	1.0352	-0.5185	-1.5537
सी(20)-सी(18)-सी(16)-सी(10)	-0.3103	0.4279	0.7382
सी(20)-सी(18)-सी(16)-एच(27)	179.2936	-177.7826	-357.0762
एच(29)-सी(18)-सी(16)-सी(10)	179.8615	179.3378	-0.5237
एच(29)-सी(18)-सी(16)-एच(27)	-0.5346	1.1274	1.662
सी(19)-सी(17)-सी(10)-सी(7)	178.0063	-177.4899	-355.4962
सी(19)-सी(17)-सी(10)-सी(16)	-1.2068	0.8355	2.0423
एच(28)-सी(17)-सी(10)-सी(7)	-3.5711	2.9611	6.5322
एच(28)-सी(17)-सी(10)-सी(16)	177.2159	-178.7134	-355.9293
सी(18)-सी(16)-सी(10)-सी(7)	-178.116	177.3783	355.494
सी(18)-सी(16)-सी(10)-सी(17)	1.0913	-0.9607	-2.052
एच(27)-सी(16)-सी(10)-सी(7)	2.2821	-4.4308	-6.7129
एच(27)-सी(16)-सी(10)-सी(17)	-178.511	177.2302	355.7411
ओ(4)-सी(15)-सी(13)-सी(8)	-179.959	-179.9781	-0.0194
ओ(4)-सी(15)-सी(13)-एच(25)	0.1101	0.1028	-0.0073
सी(14)-सी(15)-सी(13)-सी(8)	0.1059	0.0762	-0.0297
सी(14)-सी(15)-सी(13)-एच(25)	-179.825	-179.8428	-0.0175
ओ(4)-सी(15)-सी(14)-सी(11)	-179.964	-179.9625	0.0012
ओ(4)-सी(15)-सी(14)-एच(26)	0.0315	0.0349	0.0034
सी(13)-सी(15)-सी(14)-सी(11)	-0.0315	-0.0196	0.0119
सी(13)-सी(15)-सी(14)-एच(26)	179.9637	179.9778	0.0141
सी(13)-सी(15)-ओ(4)-एच(22)	-179.876	-179.9125	-0.0365
सी(14)-सी(15)-ओ(4)-एच(22)	0.0596	0.0332	-0.0264
सी(15)-सी(14)-सी(11)-ओ(2)	-179.931	-179.9283	0.0022
सी(15)-सी(14)-सी(11)-सी(6)	-0.0348	-0.0132	0.0216

एच(26)-सी(14)-सी(11)-ओ(2)	0.0742	0.0742	0
एच(26)-सी(14)-सी(11)-सी(6)	179.9699	179.9893	0.0194
सी(15)-सी(13)-सी(8)-ओ(1)	-179.782	-179.7916	-0.0093
सी(15)-सी(13)-सी(8)-सी(6)	-0.1189	-0.1045	0.0144
एच(25)-सी(13)-सी(8)-ओ(1)	0.1487	0.1273	-0.0214
एच(25)-सी(13)-सी(8)-सी(6)	179.8121	179.8144	0.0023
ओ(1)-सी(12)-सी(7)-सी(9)	-2.443	-1.8998	0.5432
ओ(1)-सी(12)-सी(7)-सी(10)	177.1983	176.882	-0.3163
एच(24)-सी(12)-सी(7)-सी(9)	177.2296	177.4273	0.1977
एच(24)-सी(12)-सी(7)-सी(10)	-3.129	-3.7909	-0.6619
सी(7)-सी(12)-ओ(1)-सी(8)	0.7258	0.4933	-0.2325
एच(24)-सी(12)-ओ(1)-सी(8)	-178.983	-178.9078	0.0748
ओ(2)-सी(11)-सी(6)-सी(8)	179.9177	179.9018	-0.0159
ओ(2)-सी(11)-सी(6)-सी(9)	0.4112	0.4006	-0.0106
सी(14)-सी(11)-सी(6)-सी(8)	0.0234	-0.012	-0.0354
सी(14)-सी(11)-सी(6)-सी(9)	-179.483	-179.5131	-0.03
सी(6)-सी(11)-ओ(2)-एच(21)	0.0042	-0.0704	-0.0746
सी(14)-सी(11)-ओ(2)-एच(21)	179.8992	179.8441	-0.0551
सी(16)-सी(10)-सी(7)-सी(9)	-42.7194	141.8716	184.591
सी(16)-सी(10)-सी(7)-सी(12)	137.6542	-36.8554	-174.5096
सी(17)-सी(10)-सी(7)-सी(9)	138.0955	-39.8518	-177.9473
सी(17)-सी(10)-सी(7)-सी(12)	-41.5308	141.4212	182.952
ओ(3)-सी(9)-सी(7)-सी(10)	2.4478	2.8321	0.3843
ओ(3)-सी(9)-सी(7)-सी(12)	-177.917	-178.4091	-0.4921
सी(6)-सी(9)-सी(7)-सी(10)	-177.254	-176.9038	0.3501
सी(6)-सी(9)-सी(7)-सी(12)	2.3813	1.855	-0.5263
ओ(3)-सी(9)-सी(6)-सी(8)	179.4059	179.6316	0.2257
ओ(3)-सी(9)-सी(6)-सी(11)	-1.1048	-0.8849	0.2199
सी(7)-सी(9)-सी(6)-सी(11)	-0.8882	-0.6282	0.26
सी(7)-सी(9)-सी(6)-सी(11)	178.6011	178.8553	0.2542
ओ(1)-सी(8)-सी(6)-सी(9)	-0.783	-0.7463	0.0367
ओ(1)-सी(8)-सी(6)-सी(11)	179.7097	179.7517	0.042
सी(13)-सी(8)-सी(6)-सी(9)	179.5631	179.5752	0.0121
सी(13)-सी(8)-सी(6)-सी(11)	0.0558	0.0733	0.0175
सी(6)-सी(8)-ओ(1)-सी(12)	0.9631	0.8885	-0.0746
सी(13)-सी(8)-ओ(1)-सी(12)	-179.362	-179.4135	-0.0514