

ANEXOS

RESULTADOS BÚSQUEDA CONFORMACIONAL

Datos proporcionados con el nivel de cálculo B3LYP/6-311++G(d,p)

Confórmero	5	1	66	6	4	14	3	57	102	11	8
A(MHz)	501	688	886	536	931	553	945	1157	636	523	1166
B(MHz)	429	246	209	392	192	358	189	206	325	445	208
C(MHz)	290	196	186	263	177	290	170	193	286	322	194
μ_A (D)	1.56	0.81	2.35	-0.20	-2.80	2.92	2.17	3.89	2.06	-3.50	0.45
μ_B (D)	4.19	5.29	4.38	5.06	4.51	2.82	5.02	3.41	3.53	1.16	2.31
μ_C (D)	-2.72	-1.66	-1.24	-2.20	1.00	-3.46	-1.02	-1.08	-3.19	3.05	-0.28
ΔE (cm ⁻¹)	0	531	551	459	861	807	894	936	1025	1053	1265
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	0	470	489	491	776	779	798	906	1030	1045	1183
ΔG (cm ⁻¹)	0	140	112	528	318	782	335	755	983	1068	1144

Confórmero	34	26	51	20	21	37	72	13	89	64	12
A(MHz)	795	780	1025	1037	549	529	972	664	890	1007	844
B(MHz)	233	223	207	204	366	425	190	257	244	200	202
C(MHz)	202	208	189	189	284	299	182	217	214	184	191
μ_A (D)	0.86	-2.94	-2.22	2.98	-0.69	2.66	-3.56	2.42	3.01	-2.24	2.11
μ_B (D)	5.38	4.11	4.61	4.69	4.67	1.95	4.29	2.07	-0.81	4.73	1.07
μ_C (D)	-1.34	2.04	0.69	-0.60	1.15	-2.91	0.92	-3.45	0.02	-0.29	-3.98
ΔE (cm ⁻¹)	1213	1269	1249	1334	1350	1407	1522	1538	1555	1544	1589
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	1185	1215	1219	1307	1356	1401	1451	1465	1467	1493	1517
ΔG (cm ⁻¹)	886	825	865	1007	1293	1318	1099	1004	1262	1038	1033

Confórmero	58	25	59	53	86	45	56	49	75	69	101
A(MHz)	870	880	969	1229	677	961	718	884	917	862	1267
B(MHz)	207	213	186	200	248	225	273	203	242	269	201
C(MHz)	186	189	176	187	193	206	254	175	215	263	190
μ_A (D)	-1.12	4.02	3.22	-4.18	-0.03	0.20	-1.50	1.23	4.18	1.52	-3.55
μ_B (D)	5.46	0.03	-0.54	3.52	5.65	3.14	1.92	5.02	-1.51	-1.42	2.70
μ_C (D)	-0.37	-2.84	-3.80	0.79	0.91	-0.31	3.16	-1.14	-0.58	-1.92	-1.71
ΔE (cm ⁻¹)	1570	1613	1625	1636	1572	1719	1668	1657	1803	1735	1739
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	1517	1526	1536	1542	1552	1608	1620	1628	1679	1694	1696
ΔG (cm ⁻¹)	1101	1067	1105	1354	1270	1518	1455	1299	1490	1583	1505

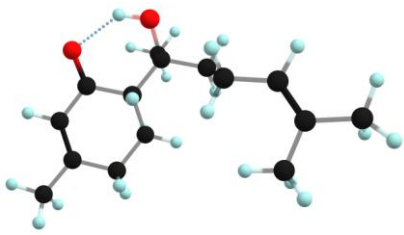
Confórmero	87	29	33	84	48	68	15	107	80	19	18
A(MHz)	788	893	1055	547	766	822	738	773	839	753	753
B(MHz)	286	244	212	442	212	266	214	241	252	213	213
C(MHz)	268	213	194	321	200	223	203	214	232	202	201
μ_A (D)	1.44	2.43	2.23	1.18	-1.66	4.40	1.12	-1.71	-1.21	2.75	-3.36
μ_B (D)	0.67	-2.33	-2.01	0.99	-0.15	-0.54	1.59	5.30	3.70	1.44	-0.49
μ_C (D)	2.36	0.56	0.21	-1.79	-1.68	-1.74	2.06	-0.87	-0.55	2.48	-1.38
ΔE (cm ⁻¹)	1749	1837	1852	1924	2044	1852	2069	1841	1835	2122	2134
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	1698	1706	1732	1757	1789	1790	1814	1819	1820	1871	1873
ΔG (cm ⁻¹)	1583	1489	1266	1924	1259	1700	1304	1706	1702	1389	1369

Confórmero	43	94	41	47	79	27	46	22	73	61	67
A(MHz)	1180	655	774	863	789	1061	576	536	1013	1153	805
B(MHz)	209	337	246	267	285	210	299	307	202	206	237
C(MHz)	195	285	228	262	267	193	242	241	190	191	218
μ_A (D)	0.78	-1.71	-1.11	0.57	0.74	1.27	-1.83	0.62	2.15	-3.00	2.52
μ_B (D)	2.54	-0.44	4.26	-2.93	-2.30	-3.24	0.49	1.71	-2.22	-1.90	-0.80
μ_C (D)	0.07	-1.52	0.18	-1.68	-2.59	0.78	-1.67	2.35	0.55	1.02	1.77
ΔE (cm ⁻¹)	2031	1942	1949	2049	2053	2132	2184	2259	2254	2349	2267
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	1900	1907	1929	1955	1959	1963	1984	2017	2081	2081	2090
ΔG (cm ⁻¹)	1713	1883	1719	1829	1862	1474	1665	1613	1520	1681	1383

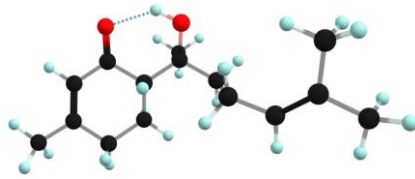
Confórmero	24	109	98	105	92	31	28	65	60	54	50
A(MHz)	675	990	668	743	524	749	779	563	548	909	655
B(MHz)	241	197	240	272	315	215	204	315	298	185	246
C(MHz)	218	193	220	238	244	201	196	256	250	179	220
μ_A (D)	-1.23	-2.66	1.07	0.29	2.27	-2.79	2.03	-0.79	0.25	-2.94	-2.83
μ_B (D)	0.52	3.70	-0.91	3.77	1.88	1.06	3.25	1.85	1.57	-0.49	0.51
μ_C (D)	-2.12	-2.07	-2.34	0.14	2.01	-2.99	2.34	2.44	2.21	-2.11	-1.41
ΔE (cm ⁻¹)	2344	2157	2321	2185	2386	2399	2411	2361	2394	2594	2483
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	2101	2103	2121	2125	2152	2153	2170	2194	2216	2225	2240
ΔG (cm ⁻¹)	1707	1652	1671	2115	1784	1635	1605	1656	1591	2204	1866

Confórmero	90	88	85	83	99	97	103	63	100	95	81
A(MHz)	560	554	561	883	875	847	679	530	1060	803	794
B(MHz)	307	324	294	236	234	241	239	309	199	256	242
C(MHz)	245	262	250	211	211	214	219	241	187	229	204
μ_A (D)	3.57	-2.35	-1.11	-2.19	1.57	3.65	2.84	0.95	0.55	-1.89	2.38
μ_B (D)	0.71	1.8	1.75	-0.8	-2.62	0.83	0.57	3.5	-3.75	-0.98	-1.12
μ_C (D)	1.61	2.05	2.43	-0.82	1.71	-0.03	2.81	3.04	0.85	-1.71	-1.77
ΔE (cm ⁻¹)	2505	2458	2495	2575	2579	2630	2638	2670	2621	2618	2721
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	2276	2284	2301	2340	2395	2404	2406	2417	2424	2447	2452
ΔG (cm ⁻¹)	1844	1815	1743	1954	1958	2087	1858	1967	1918	2297	1911

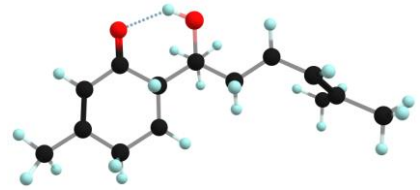
Confórmero	71	78	91	96
A(MHz)	1079	672	598	941
B(MHz)	231	242	328	200
C(MHz)	218	218	278	191
μ_A (D)	-0.07	-2.09	-0.04	2.69
μ_B (D)	3.55	1.88	-2.41	2.56
μ_C (D)	0.87	-3.12	2.53	1.37
ΔE (cm ⁻¹)	2607	2781	2725	2816
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	2474	2511	2512	2586
ΔG (cm ⁻¹)	2197	2009	2204	2002



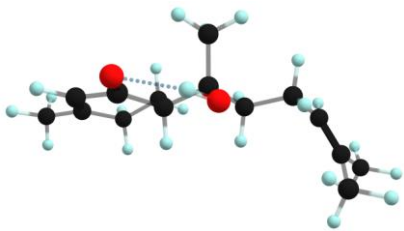
Confórmero 1



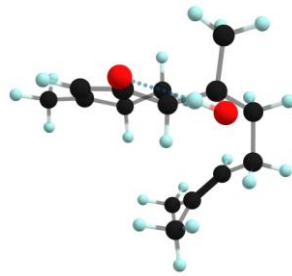
Confórmero 2



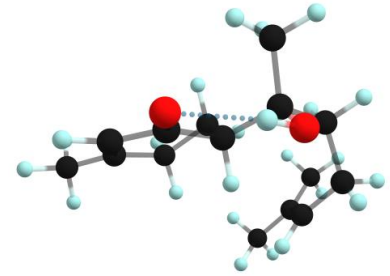
Confórmero 3



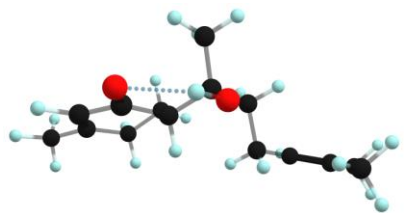
Confórmero 4



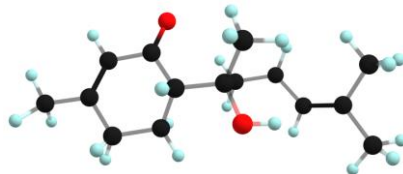
Confórmero 5



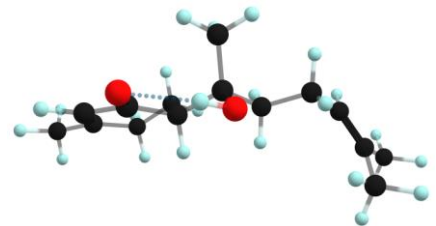
Confórmero 6



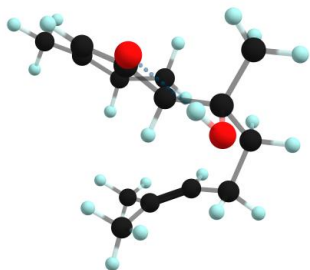
Confórmero 7



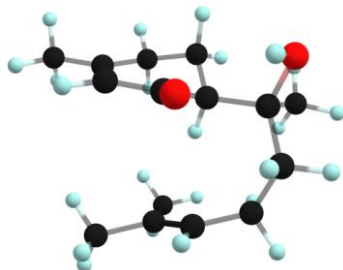
Confórmero 8



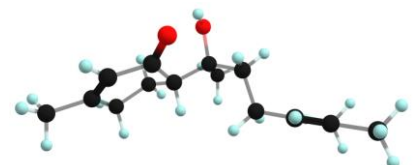
Confórmero 9



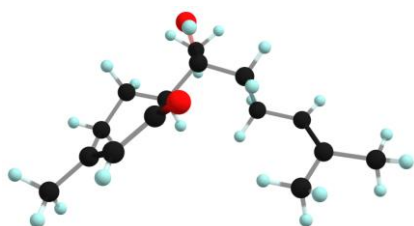
Confórmero 10



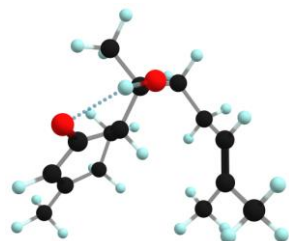
Confórmero 11



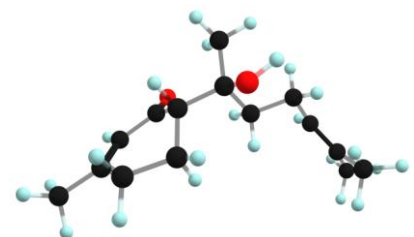
Confórmero 12



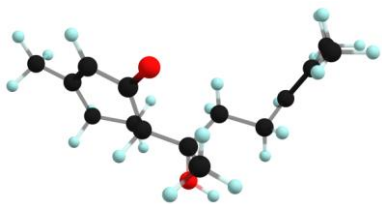
Confórmero 13



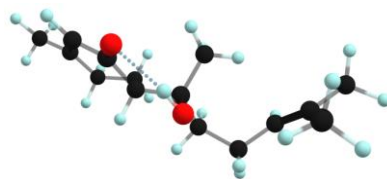
Confórmero 14



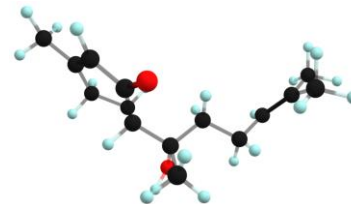
Confórmero 15



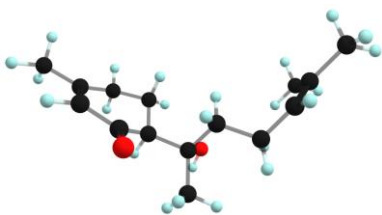
Confórmero 16



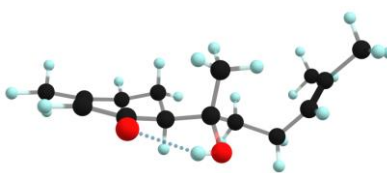
Confórmero 17



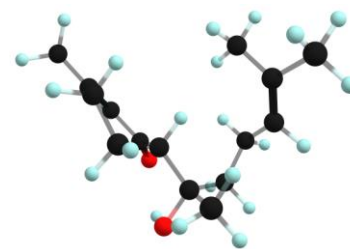
Confórmero 18



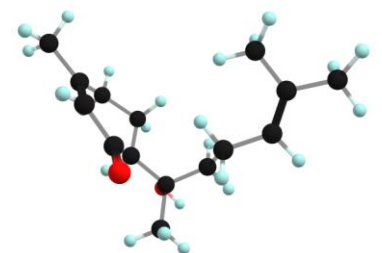
Confórmero 19



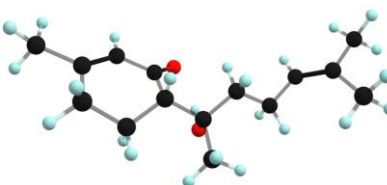
Confórmero 20



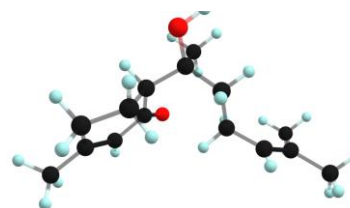
Confórmero 21



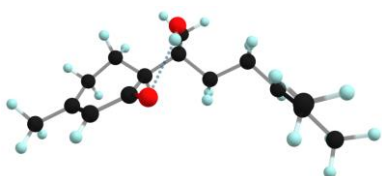
Confórmero 22



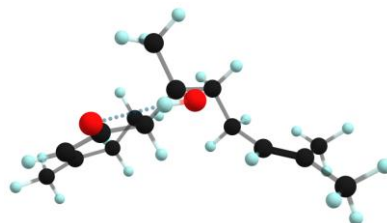
Confórmero 23



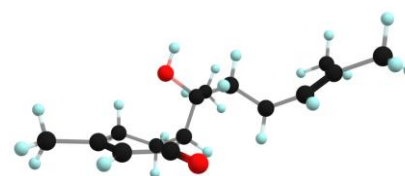
Confórmero 24



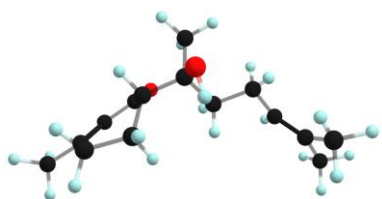
Confórmero 25



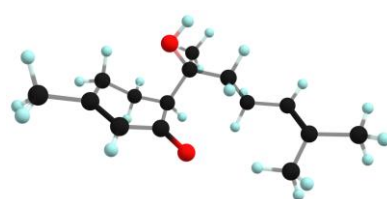
Confórmero 26



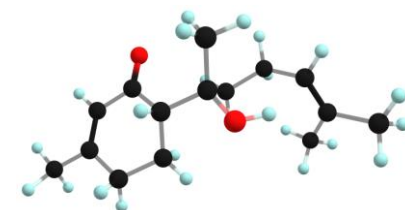
Confórmero 27



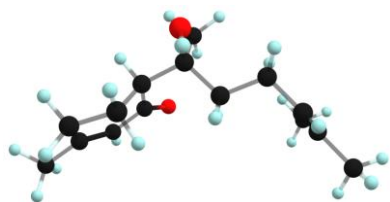
Confórmero 28



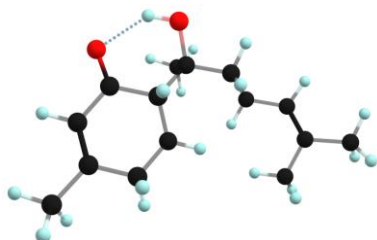
Confórmero 29



Confórmero 30



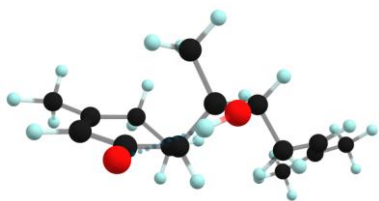
Confórmero 31



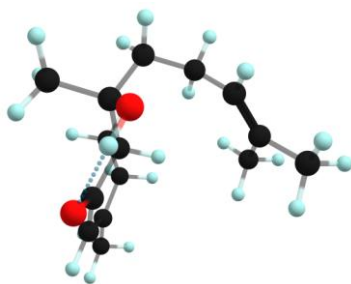
Confórmero 32



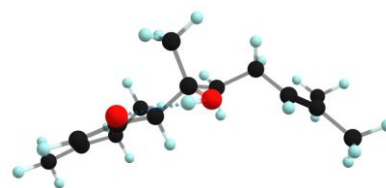
Confórmero 33



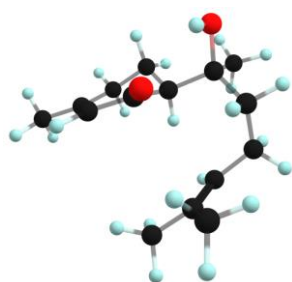
Confórmero 34



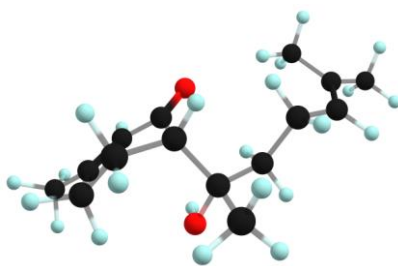
Confórmero 35



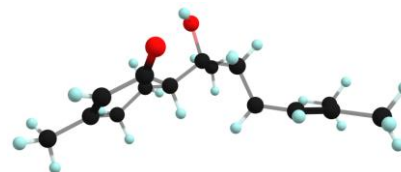
Confórmero 36



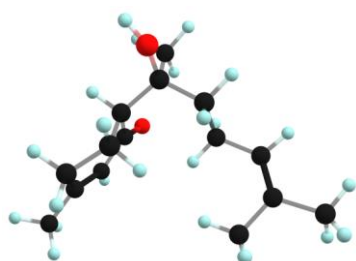
Confórmero 37



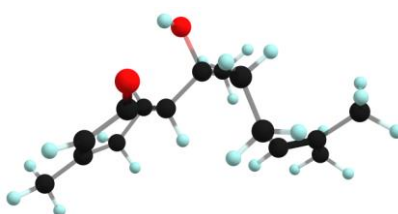
Confórmero 38



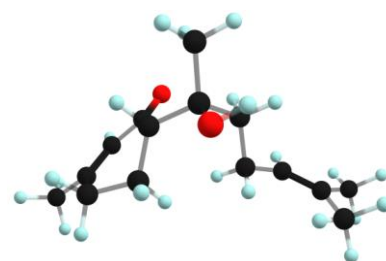
Confórmero 39



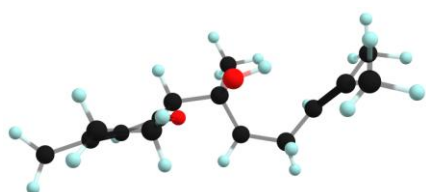
Confórmero 40



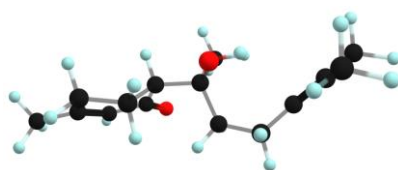
Confórmero 41



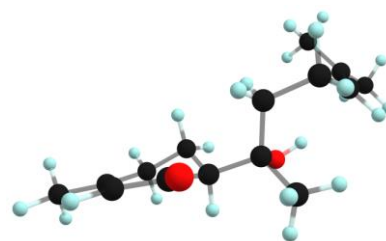
Confórmero 42



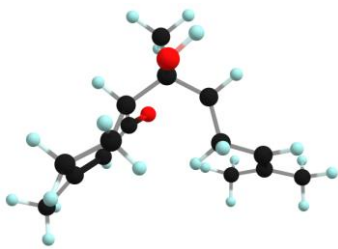
Confórmero 43



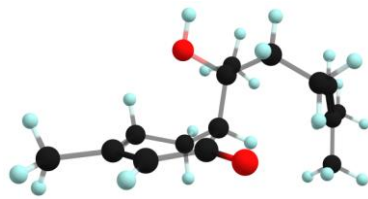
Confórmero 44



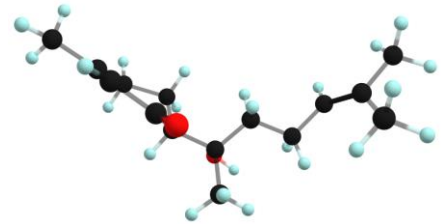
Confórmero 45



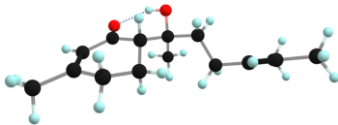
Confórmero 46



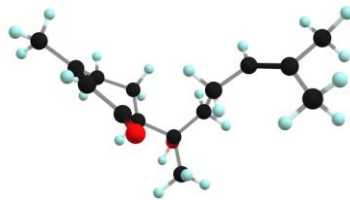
Confórmero 47



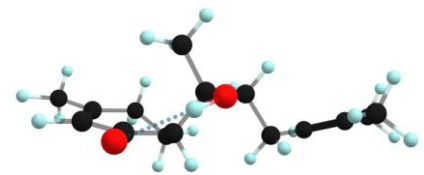
Confórmero 48



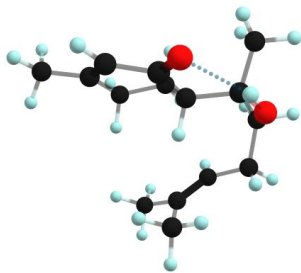
Confórmero 49



Confórmero 50



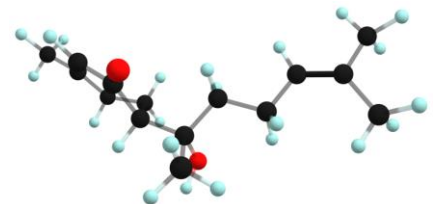
Confórmero 51



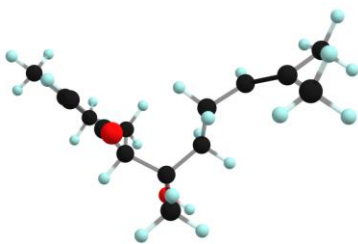
Confórmero 52



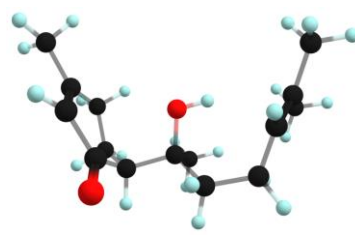
Confórmero 53



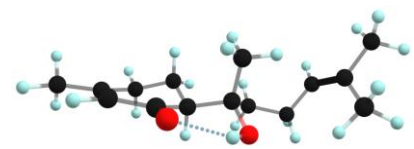
Confórmero 54



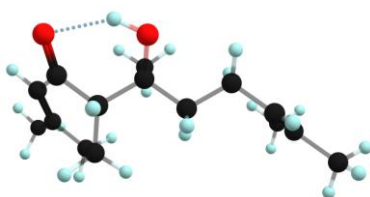
Confórmero 55



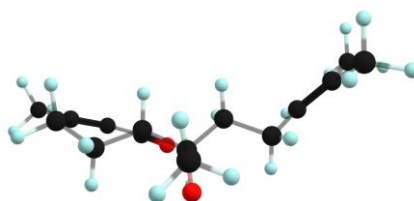
Confórmero 56



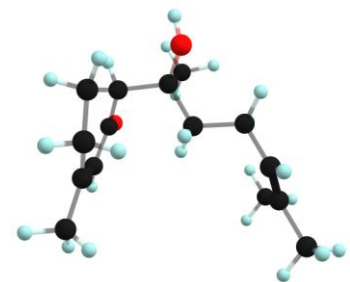
Confórmero 57



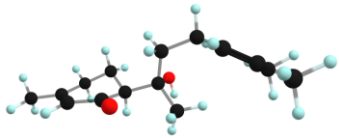
Confórmero 58



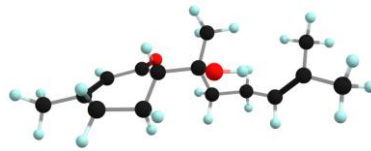
Confórmero 59



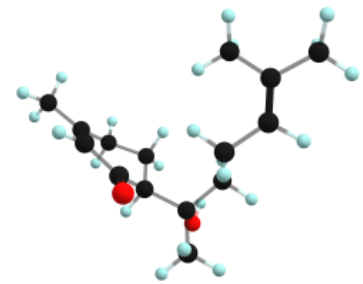
Confórmero 60



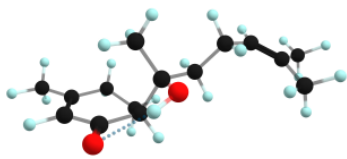
Confórmero 61



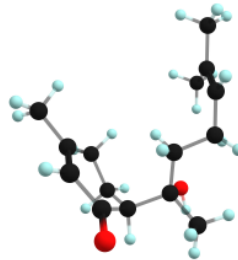
Confórmero 62



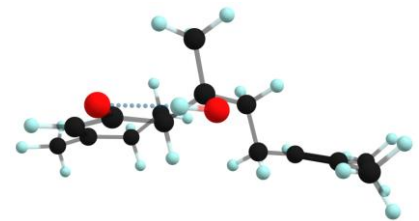
Confórmero 63



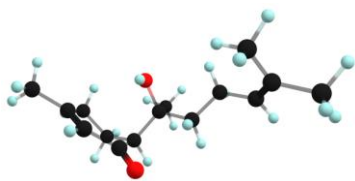
Confórmero 64



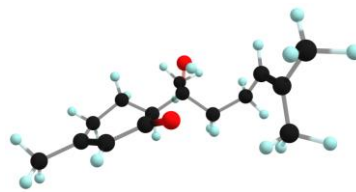
Confórmero 65



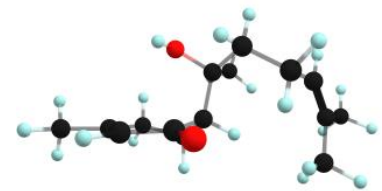
Confórmero 66



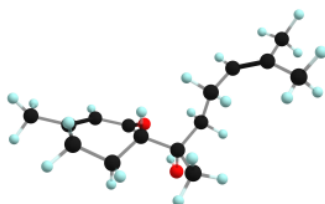
Confórmero 67



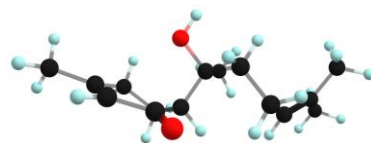
Confórmero 68



Confórmero 69



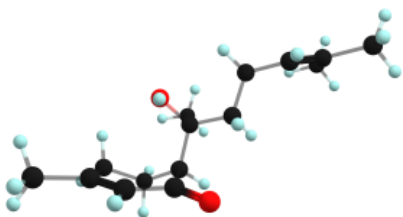
Confórmero 70



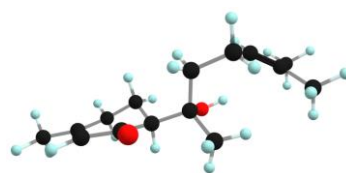
Confórmero 71



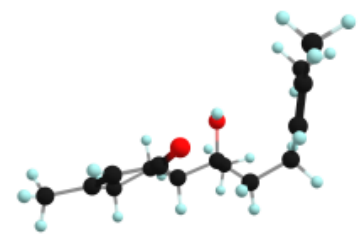
Confórmero 72



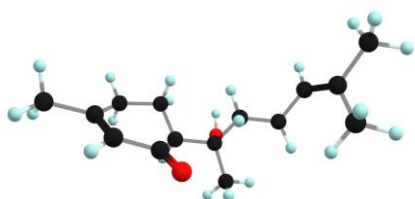
Confórmero 73



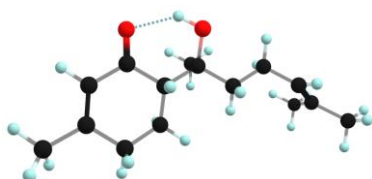
Confórmero 74



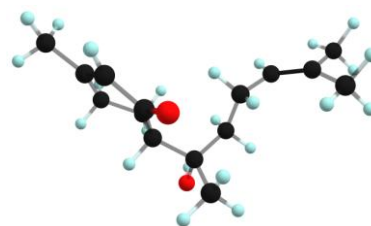
Confórmero 75



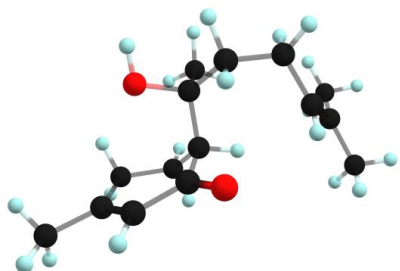
Confórmero 76



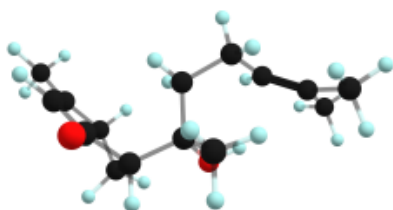
Confórmero 77



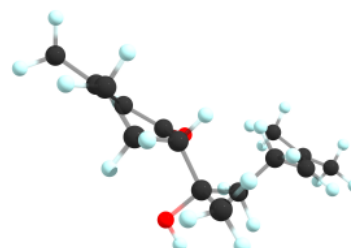
Confórmero 78



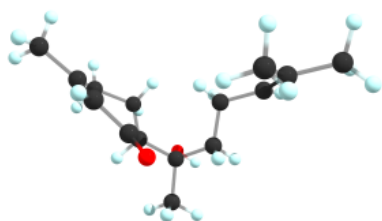
Confórmero 79



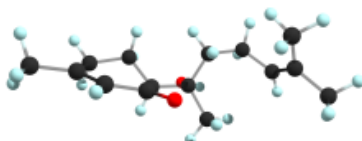
Confórmero 80



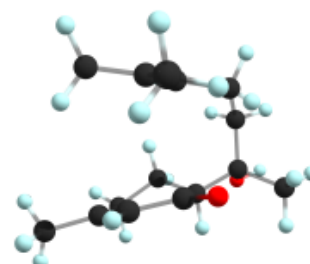
Confórmero 81



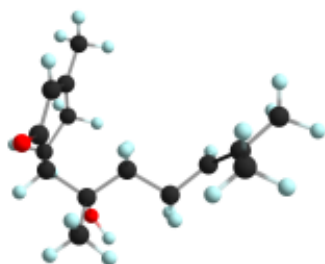
Confórmero 82



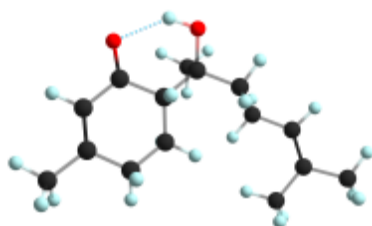
Confórmero 83



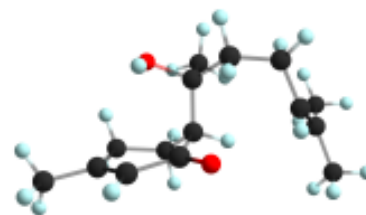
Confórmero 84



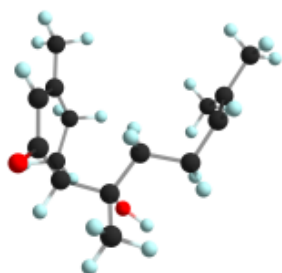
Confórmero 85



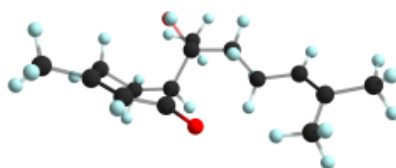
Confórmero 86



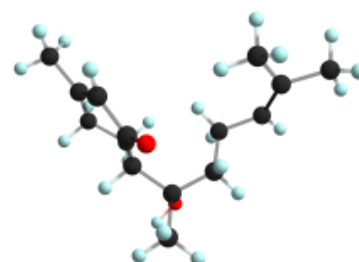
Confórmero 87



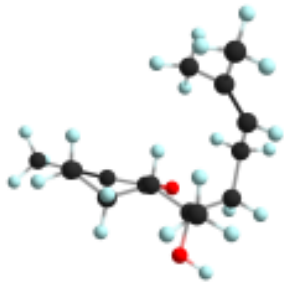
Confórmero 88



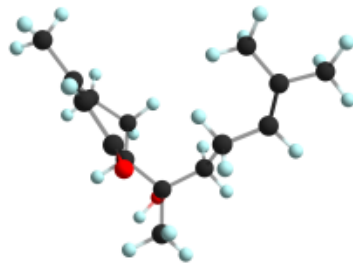
Confórmero 89



Confórmero 90



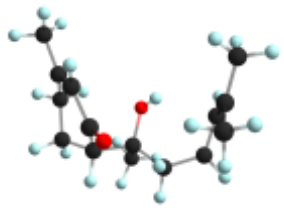
Confórmero 91



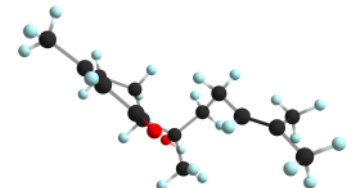
Confórmero 92



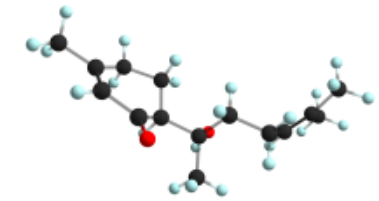
Confórmero 93



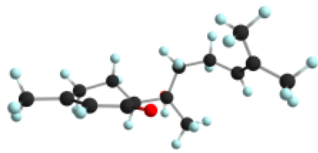
Confórmero 94



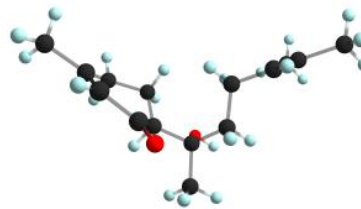
Confórmero 95



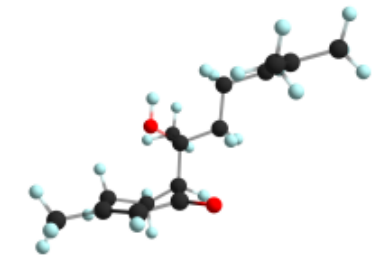
Confórmero 96



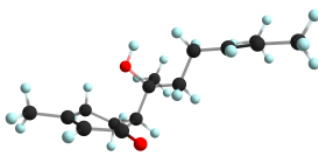
Confórmero 97



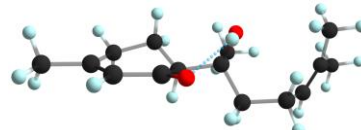
Confórmero 98



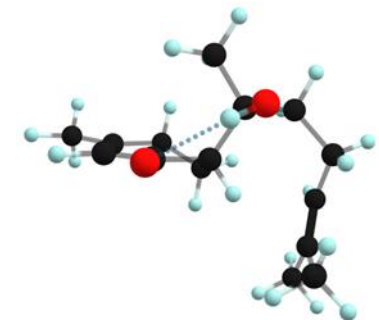
Confórmero 99



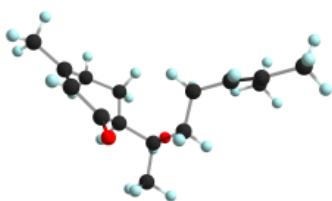
Confórmero 100



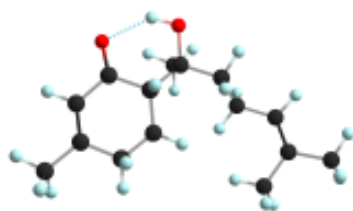
Confórmero 101



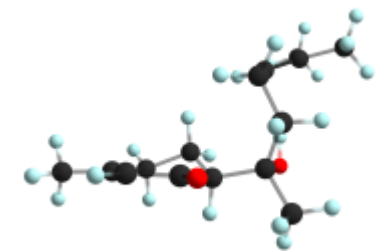
Confórmero 102



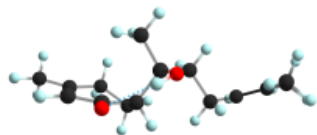
Confórmero 103



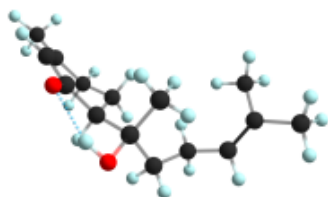
Confórmero 104



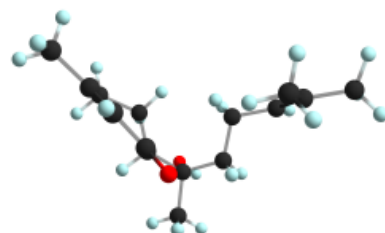
Confórmero 105



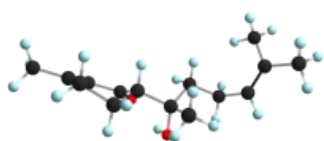
Confórmero 106



Confórmero 107



Confórmero 108



Confórmero 109

COMPARATIVA BASES DE CÁLCULO

6-31G(d)

Confórmero	1	66	4	3	5	57	26	72	6	14	59
A(MHz)	702	846	972	981	529	1179	808	982	563	576	1003
B(MHz)	231	202	182	181	368	200	213	187	328	307	182
C(MHz)	189	182	168	165	280	188	200	179	234	260	171
μ_A (D)	-1.32	2.29	2.79	2.41	2.18	3.79	3.15	3.60	0.01	-2.80	-3.29
μ_B (D)	4.77	-4.16	-4.08	-4.40	3.33	-3.02	-3.85	-3.83	4.73	-2.97	0.50
μ_C (D)	1.59	1.01	0.59	1.03	-2.63	0.83	1.44	0.60	1.90	-2.97	-3.27
ΔE (cm ⁻¹)	0	2	97	115	275	437	661	714	698	754	787
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	0	2	84	106	331	501	690	733	734	751	780
ΔG (cm ⁻¹)	41	0	49	91	504	726	722	785	817	908	767

Confórmero	25	20	12	34	8	53	13	51	86	49	64
A(MHz)	939	1139	830	818	1144	1260	663	1007	703	876	1040
B(MHz)	195	192	197	218	204	191	235	198	230	197	189
C(MHz)	178	179	187	192	189	179	203	181	184	172	173
μ_A (D)	-3.77	3.27	-2.08	-1.40	0.24	4.05	-2.08	2.28	-0.51	1.35	2.37
μ_B (D)	0.06	-3.87	-1.22	4.80	-2.24	-3.20	-2.52	-4.20	5.20	-4.66	-4.20
μ_C (D)	-2.46	0.91	-3.62	1.25	0.24	0.40	-3.08	0.25	0.75	1.04	-0.11
ΔE (cm ⁻¹)	827	763	1021	1032	1104	1094	1062	1048	1121	1135	1162
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	822	857	1025	1046	1055	1061	1066	1066	1154	1165	1186
ΔG (cm ⁻¹)	787	1062	1023	1095	1289	1100	1047	1078	1236	1205	1189

Confórmero	58	11	102	89	21	45	37	56
A(MHz)	919	518	645	883	640	948	520	723
B(MHz)	194	353	301	238	274	217	347	260
C(MHz)	177	269	269	209	234	200	268	245
μ_A (D)	-1.67	0.46	-2.14	2.89	-0.82	0.03	1.19	-1.24
μ_B (D)	4.82	4.08	-3.17	0.58	4.43	-2.97	3.46	1.36
μ_C (D)	-0.18	-1.84	-2.79	-0.08	0.50	-0.25	-2.37	3.08
ΔE (cm ⁻¹)	1181	1230	1465	1601	1541	1729	1611	1774
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	1199	1263	1462	1566	1569	1628	1678	1774
ΔG (cm ⁻¹)	1211	1408	1354	1665	1584	1808	1830	1960

6-31G(d,p)

Confórmero	1	66	4	3	5	57	26	6	72	14	59
A(MHz)	702	846	975	983	531	1181	804	564	987	576	1007
B(MHz)	231	202	182	181	368	200	214	327	186	307	182
C(MHz)	189	182	168	165	280	188	200	233	179	259	171
μ_A (D)	-1.31	2.27	2.79	2.39	2.22	3.81	3.12	0.04	3.59	-2.78	-3.31
μ_B (D)	4.79	-4.15	-4.07	-4.41	3.30	-2.99	-3.86	4.75	-3.84	-3.01	0.54
μ_C (D)	1.59	1.00	0.57	1.03	-2.64	0.83	1.47	1.89	0.56	-2.96	-3.25
ΔE (cm ⁻¹)	0	3	106	119	253	421	648	683	721	750	777
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	0	2	90	108	312	493	674	720	730	742	775
ΔG (cm ⁻¹)	48	0	56	100	496	743	725	827	783	887	772

Confórmero	25	20	8	12	34	53	51	13	86	49	64
A(MHz)	944	1141	1143	829	821	1263	1010	664	704	876	1044
B(MHz)	194	192	204	197	217	191	198	236	230	197	189
C(MHz)	178	179	189	187	192	179	181	204	184	172	173
μ_A (D)	-3.79	-3.25	0.25	-2.09	-1.41	4.04	2.28	-2.10	-0.49	1.31	2.37
μ_B (D)	0.10	-3.88	-2.26	-1.19	4.80	-3.20	-4.18	-2.51	5.22	-4.66	-4.19
μ_C (D)	-2.41	-0.91	0.22	-3.62	1.26	0.39	0.25	-3.09	0.74	1.03	-0.10
ΔE (cm ⁻¹)	819	776	1075	1029	1045	1090	1062	1070	1132	1148	1187
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	819	866	1032	1033	1050	1051	1072	1074	1162	1173	1199
ΔG (cm ⁻¹)	797	1069	1272	1027	1095	1083	1076	1052	1245	1213	1191

Confórmero	58	11	102	89	21	45	37	56	58
A(MHz)	922	518	644	880	641	946	521	723	922
B(MHz)	194	353	302	239	274	217	348	260	194
C(MHz)	177	270	269	209	234	201	269	245	177
μ_A (D)	1.67	0.48	-2.12	-2.93	-0.83	0.01	1.23	-1.22	1.67
μ_B (D)	-4.83	-4.06	-3.18	0.56	4.43	-3.01	3.43	1.40	-4.83
μ_C (D)	-0.17	1.89	-2.78	0.10	0.54	-0.24	-2.39	3.09	-0.17
ΔE (cm ⁻¹)	1202	1218	1452	1578	1527	1691	1605	1767	1202
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	1212	1253	1439	1551	1555	1602	1676	1768	1212
ΔG (cm ⁻¹)	1219	1401	1342	1662	1581	1794	1832	1962	1219

6-311G(d)

Confórmero	66	1	4	3	5	57	26	72	59	25	6
A(MHz)	848	700	963	975	517	1184	806	969	991	943	560
B(MHz)	203	232	184	182	377	199	213	188	183	195	331
C(MHz)	183	189	169	166	278	187	199	180	172	179	235
μ_A (D)	2.31	-1.29	2.80	2.36	1.89	3.77	3.13	3.57	-3.24	-3.77	0.01
μ_B (D)	-4.15	4.78	-4.09	-4.43	3.57	-3.11	-3.89	-3.85	0.46	0.09	4.72
μ_C (D)	1.06	1.61	0.69	1.06	-2.61	0.82	1.53	0.83	-3.35	-2.50	1.97
ΔE (cm ⁻¹)	0	24	100	129	356	523	709	744	773	808	782
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	0	24	85	122	378	557	736	761	784	813	822
ΔG (cm ⁻¹)	0	123	80	172	471	748	818	885	871	828	960

Confórmero	14	20	8	12	13	51	34	53	86	64	49
A(MHz)	574	1138	1158	832	667	1015	819	1276	703	1039	879
B(MHz)	304	192	204	198	237	199	218	189	231	190	198
C(MHz)	256	179	189	188	204	182	193	177	184	175	172
μ_A (D)	-2.77	-3.25	0.29	-2.08	-2.09	2.34	-1.41	4.05	-0.46	2.42	1.33
μ_B (D)	-3.05	-3.96	-2.19	-1.22	-2.45	-4.23	4.84	-3.31	5.21	-4.25	-4.66
μ_C (D)	-2.98	-0.90	0.21	-3.63	-3.11	0.31	1.26	0.35	0.76	-0.10	1.07
ΔE (cm ⁻¹)	846	830	994	974	1020	1070	1073	1163	1163	1200	1175
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	828	919	968	991	1035	1083	1085	1118	1200	1217	1217
ΔG (cm ⁻¹)	961	1163	1279	1043	1084	1092	1196	1107	1333	1254	1336

Confórmero	58	11	89	45	102	21	37	56	58
A(MHz)	917	516	886	954	650	632	521	726	917
B(MHz)	195	354	239	218	301	278	352	260	195
C(MHz)	178	270	209	201	270	237	270	245	178
μ_A (D)	1.66	0.47	-2.79	0.01	-2.28	-0.80	1.29	-1.23	1.66
μ_B (D)	-4.88	-4.02	0.61	-2.97	-3.08	4.41	3.34	1.29	-4.88
μ_C (D)	-0.19	1.92	0.10	-0.24	-2.89	0.59	-2.44	3.11	-0.19
ΔE (cm ⁻¹)	1235	1277	1513	1584	1562	1561	1620	1795	1235
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	1246	1318	1482	1511	1576	1604	1705	1794	1246
ΔG (cm ⁻¹)	1306	1512	1634	1783	1694	1703	1929	2016	1306

6-311G(d,p)

Confórmero	66	1	4	3	5	57	26	72	59	25	6
A(MHz)	848	700	967	978	521	1185	809	976	996	941	563
B(MHz)	203	232	183	182	373	199	213	187	183	195	328
C(MHz)	182	189	169	166	278	187	199	180	172	179	234
μ_A (D)	2.25	-1.24	2.75	2.31	1.95	3.76	3.07	3.51	-3.26	-3.79	0.07
μ_B (D)	-4.18	4.82	-4.13	-4.48	3.52	-3.14	-3.94	-3.92	0.53	0.12	4.74
μ_C (D)	1.06	1.64	0.65	1.06	-2.65	0.81	1.54	0.77	-3.35	-2.48	2.00
ΔE (cm ⁻¹)	0	27	100	134	351	520	690	739	780	806	768
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	0	28	86	126	378	559	713	748	779	805	807
ΔG (cm ⁻¹)	0	119	82	166	468	749	780	847	833	811	933

Confórmero	14	20	8	12	13	51	34	53	64	86	49
A(MHz)	576	1142	1150	828	665	1017	822	1274	1045	705	879
B(MHz)	304	192	204	198	238	199	218	189	190	230	198
C(MHz)	256	179	189	188	204	182	193	177	174	184	172
μ_A (D)	-2.75	-3.20	0.35	-2.07	-2.12	2.28	-1.38	4.04	2.37	-0.41	1.25
μ_B (D)	-3.07	-4.02	-2.25	-1.18	-2.44	-4.24	4.86	-3.33	-4.27	5.25	-4.69
μ_C (D)	-3.02	-0.90	0.19	-3.68	-3.16	0.33	1.31	0.34	-0.09	0.76	1.06
ΔE (cm ⁻¹)	845	854	1020	1005	1048	1062	1069	1161	1192	1190	1200
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	826	938	976	1011	1057	1077	1078	1112	1209	1219	1233
ΔG (cm ⁻¹)	965	1165	1249	1032	1086	1082	1162	1095	1231	1329	1315

Confórmero	58	11	89	45	102	21	37	56
A(MHz)	921	514	883	951	652	638	521	721
B(MHz)	195	356	239	218	300	275	351	261
C(MHz)	178	271	209	201	269	235	269	246
μ_A (D)	1.60	0.49	-2.87	-0.09	-2.25	-0.80	1.30	-1.13
μ_B (D)	-4.91	-4.00	0.62	-3.01	-3.06	4.45	3.32	1.24
μ_C (D)	-0.17	2.06	0.06	-0.21	-2.92	0.66	-2.50	3.13
ΔE (cm ⁻¹)	1228	1308	1478	1582	1537	1578	1657	1793
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	1241	1339	1457	1510	1545	1605	1729	1784
ΔG (cm ⁻¹)	1281	1500	1604	1749	1618	1656	1904	1975

6-31+G(d)

Confórmero	66	1	4	3	5	57	26	59	72	6	25
A(MHz)	839	698	959	971	505	1159	805	985	976	563	927
B(MHz)	203	231	183	181	376	194	212	182	186	323	194
C(MHz)	182	188	168	165	271	183	198	171	179	231	178
μ_A (D)	2.20	-1.14	2.74	2.29	1.38	3.60	3.09	-3.26	3.60	0.21	-3.86
μ_B (D)	-4.59	5.23	-4.55	-4.89	4.23	-3.74	-4.30	0.65	-4.31	5.10	0.19
μ_C (D)	1.25	1.84	0.80	1.22	-2.85	0.74	1.76	-3.75	0.86	2.25	-2.89
ΔE (cm ⁻¹)	0	12	106	120	494	684	825	874	837	866	931
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	0	13	91	111	505	679	839	860	860	891	913
ΔG (cm ⁻¹)	0	51	43	84	640	688	814	830	929	905	841

Confórmero	14	12	20	13	34	51	49	86	64	58	8
A(MHz)	579	822	1092	663	815	1000	868	699	1030	912	1151
B(MHz)	300	197	192	235	217	198	197	230	189	194	202
C(MHz)	254	188	179	203	192	181	172	184	174	177	188
μ_A (D)	-2.92	-2.04	3.10	-2.13	-1.27	2.24	1.16	-0.26	2.33	-1.51	0.35
μ_B (D)	-3.23	-1.31	-4.60	-2.62	5.32	-4.72	-5.14	5.70	-4.75	5.40	-2.39
μ_C (D)	-3.38	-4.09	0.87	-3.54	1.46	0.38	1.22	0.90	-0.07	-0.18	0.29
ΔE (cm ⁻¹)	940	980	949	1018	999	1002	1071	1081	1122	1137	1228
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	925	979	1004	1018	1019	1025	1109	1121	1147	1161	1170
ΔG (cm ⁻¹)	1029	962	1043	992	1079	1038	1156	1199	1144	1161	1388

Confórmero	53	11	89	102	21	45	37	56
A(MHz)	1260	512	901	636	609	955	518	719
B(MHz)	190	352	232	300	286	215	345	259
C(MHz)	178	268	204	266	241	199	266	244
μ_A (D)	4.22	0.30	2.76	-2.09	-0.59	-0.11	1.13	-1.29
μ_B (D)	-3.68	4.37	0.93	-3.62	4.81	-3.17	3.71	1.42
μ_C (D)	0.45	-2.26	0.14	-3.17	0.91	-0.25	-2.75	3.37
ΔE (cm ⁻¹)	1267	1340	1657	1596	1628	1743	1676	1838
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	1224	1356	1587	1602	1649	1654	1740	1833
ΔG (cm ⁻¹)	1213	1462	1579	1724	1692	1839	1884	1957

6-31++G(d)

Confórmero	66	1	4	3	5	57	26	59	72	6	25
A(MHz)	836	697	961	973	504	1159	804	987	976	562	927
B(MHz)	203	231	183	181	377	193	212	182	186	324	194
C(MHz)	182	188	168	165	271	183	197	171	178	231	178
μ_A (D)	2.189	-1.131	2.751	2.299	1.344	3.593	3.076	-3.266	3.592	0.223	-3.857
μ_B (D)	-4.595	5.219	-4.538	-4.877	4.238	-3.736	-4.292	0.651	-4.297	5.095	0.188
μ_C (D)	1.255	1.847	0.801	1.224	-2.839	0.740	1.757	-3.742	0.865	2.240	-2.882
ΔE (cm ⁻¹)	0	17	117	133	497	696	830	869	849	870	916
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	0	17	101	123	504	690	844	859	873	894	906
ΔG (cm ⁻¹)	0	46	43	83	618	686	803	810	931	897	830

Confórmero	14	12	13	20	34	51	49	86	64	58	8
A(MHz)	579	820	663	1090	815	999	867	699	1032	913	1151
B(MHz)	300	197	235	192	217	198	197	230	189	194	202
C(MHz)	254	188	203	179	192	181	172	184	173	177	188
μ_A (D)	-2.911	-2.038	-2.117	-3.088	-1.267	2.232	1.158	-0.247	2.330	1.519	0.362
μ_B (D)	-3.227	-1.339	-2.629	-4.603	5.302	-4.719	-5.137	5.694	-4.736	-5.381	-2.388
μ_C (D)	-3.368	-4.085	-3.531	-0.856	1.463	0.367	1.221	0.888	-0.050	-0.172	0.292
ΔE (cm ⁻¹)	948	963	1009	968	1006	1010	1079	1085	1136	1155	1240
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	931	969	1014	1020	1027	1032	1116	1125	1160	1178	1181
ΔG (cm ⁻¹)	1016	946	978	1034	1075	1031	1149	1188	1141	1167	1379

Confórmero	53	11	89	102	21	45	37	56
A(MHz)	1260	513	900	635	612	955	518	721
B(MHz)	189	352	232	300	284	215	345	258
C(MHz)	177	268	204	266	239	199	266	243
μ_A (D)	4.206	0.300	-2.782	-2.079	-0.601	-0.122	1.133	-1.286
μ_B (D)	-3.679	-4.370	0.917	-3.612	4.807	-3.173	3.707	1.435
μ_C (D)	0.449	2.236	-0.156	-3.166	0.894	-0.257	-2.736	3.360
ΔE (cm ⁻¹)	1279	1341	1659	1605	1622	1751	1676	1858
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	1236	1360	1586	1612	1645	1661	1743	1850
ΔG (cm ⁻¹)	1211	1452	1553	1722	1673	1824	1870	1948

6-311+G(d)

Confórmero	66	1	4	3	5	57	59	26	6	72	25
A(MHz)	843	697	959	968	506	1170	982	808	561	975	931
B(MHz)	204	233	184	183	381	195	183	213	330	187	195
C(MHz)	183	189	169	166	274	184	172	197	234	179	179
μ_A (D)	2.20	-1.11	2.74	2.26	1.44	3.60	-3.21	3.06	0.23	3.55	-3.82
μ_B (D)	-4.47	5.12	-4.44	-4.81	4.07	-3.61	0.58	-4.21	5.00	-4.22	0.18
μ_C (D)	1.26	1.82	0.84	1.22	-2.81	0.79	-3.71	1.75	2.21	0.94	-2.81
ΔE (cm ⁻¹)	0	24	124	143	442	656	832	828	836	859	882
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	0	22	109	134	466	660	835	841	867	875	882
ΔG (cm ⁻¹)	0	68	64	120	647	709	841	828	948	949	828

Confórmero	14	12	13	20	51	34	8	49	86	64	58
A(MHz)	576	826	667	1091	1006	815	1156	873	700	1032	908
B(MHz)	304	198	236	194	200	219	203	198	231	190	196
C(MHz)	256	188	204	180	182	193	189	172	185	175	178
μ_A (D)	-2.87	-2.02	-2.11	-3.04	2.24	-1.25	0.31	1.17	-0.26	2.34	1.48
μ_B (D)	-3.17	-1.25	-2.52	-4.52	-4.65	5.25	-2.33	-5.02	5.59	-4.68	-5.34
μ_C (D)	-3.32	-3.99	-3.45	-0.85	0.41	1.43	0.28	1.23	0.91	-0.06	-0.20
ΔE (cm ⁻¹)	929	939	978	960	998	1006	1092	1103	1106	1134	1154
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	909	947	982	1012	1016	1021	1049	1142	1145	1148	1166
ΔG (cm ⁻¹)	1015	943	954	1063	1039	1091	1297	1212	1231	1147	1161

Confórmero	53	11	89	45	21	102	37	56
A(MHz)	1266	513	896	957	611	641	518	722
B(MHz)	190	356	235	217	288	301	352	260
C(MHz)	178	270	206	200	242	268	270	244
μ_A (D)	4.15	0.32	-2.74	-0.05	-0.60	-2.15	1.19	-1.36
μ_B (D)	-3.61	-4.28	0.85	-3.12	4.70	-3.49	3.56	1.43
μ_C (D)	0.47	2.18	-0.06	-0.28	0.86	-3.15	-2.72	3.32
ΔE (cm ⁻¹)	1256	1256	1533	1602	1536	1558	1601	1735
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	1213	1289	1481	1535	1569	1570	1677	1740
ΔG (cm ⁻¹)	1212	1444	1516	1761	1643	1720	1859	1883

6-31+G(d,p)

Confórmero	66	1	4	3	5	57	26	72	59	6	25
A(MHz)	840	698	962	973	506	1156	805	981	989	564	931
B(MHz)	203	231	183	181	376	193	212	186	182	322	194
C(MHz)	182	188	168	165	271	183	197	178	171	231	178
μ_A (D)	2.18	-1.12	2.74	2.28	1.35	3.56	3.07	3.58	-3.28	0.24	-3.88
μ_B (D)	-4.60	5.25	-4.56	-4.91	4.26	-3.78	-4.32	-4.33	0.69	5.11	0.22
μ_C (D)	1.24	1.85	0.78	1.22	-2.84	0.71	1.77	0.83	-3.74	2.26	-2.85
ΔE (cm ⁻¹)	0	13	108	120	473	674	811	841	871	849	929
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	0	13	96	114	483	670	826	858	865	873	920
ΔG (cm ⁻¹)	0	61	62	100	625	692	819	931	847	887	863

Confórmero	20	8	12	34	53	51	13	86	49	64	58
A(MHz)	1141	1143	829	821	1263	1010	664	704	876	1044	922
B(MHz)	192	204	197	217	191	198	236	230	197	189	194
C(MHz)	179	189	187	192	179	181	204	184	172	173	177
μ_A (D)	-3.25	0.25	-2.09	-1.41	4.04	2.28	-2.10	-0.49	1.31	2.37	1.67
μ_B (D)	-3.88	-2.26	-1.19	4.80	-3.20	-4.18	-2.51	5.22	-4.66	-4.19	-4.83
μ_C (D)	-0.91	0.22	-3.62	1.26	0.39	0.25	-3.09	0.74	1.03	-0.10	-0.17
ΔE (cm ⁻¹)	776	1075	1029	1045	1090	1062	1070	1132	1148	1187	1202
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	866	1032	1033	1050	1051	1072	1074	1162	1173	1199	1212
ΔG (cm ⁻¹)	1069	1272	1027	1095	1083	1076	1052	1245	1213	1191	1219

Confórmero	11	102	89	21	45	37	56
A(MHz)	518	644	880	641	946	521	723
B(MHz)	353	302	239	274	217	348	260
C(MHz)	270	269	209	234	201	269	245
μ_A (D)	0.48	-2.12	-2.93	-0.83	0.01	1.23	-1.22
μ_B (D)	-4.06	-3.18	0.56	4.43	-3.01	3.43	1.40
μ_C (D)	1.89	-2.78	0.10	0.54	-0.24	-2.39	3.09
ΔE (cm ⁻¹)	1218	1452	1578	1527	1691	1605	1767
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	1253	1439	1551	1555	1602	1676	1768
ΔG (cm ⁻¹)	1401	1342	1662	1581	1794	1832	1962

6-31++G(d,p)

Confórmero	66	1	4	3	5	57	26	72	59	6	25
A(MHz)	838	697	964	975	505	1157	805	982	991	564	932
B(MHz)	203	231	183	181	376	193	212	186	182	322	194
C(MHz)	182	188	168	165	271	183	197	178	171	231	178
μ_A (D)	2.18	-1.12	2.74	2.29	1.33	3.55	3.06	3.58	-3.28	0.24	-3.87
μ_B (D)	-4.60	5.23	-4.54	-4.89	4.26	-3.78	-4.32	-4.32	0.70	5.11	0.22
μ_C (D)	1.25	1.86	0.78	1.23	-2.83	0.71	1.76	0.82	-3.73	2.25	-2.85
ΔE (cm ⁻¹)	0	17	117	131	473	683	815	851	875	850	922
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	0	17	103	124	481	678	829	867	871	875	918
ΔG (cm ⁻¹)	0	51	57	99	603	687	806	928	832	874	856

Confórmero	14	12	34	51	20	13	49	86	64	8	58
A(MHz)	580	818	817	1002	1083	663	868	700	1036	1150	916
B(MHz)	299	197	217	198	193	235	197	230	189	202	194
C(MHz)	253	188	192	182	179	203	172	184	173	188	177
μ_A (D)	-2.89	-2.04	-1.27	2.22	3.04	-2.14	1.13	-0.23	2.32	0.38	-1.51
μ_B (D)	-3.27	-1.33	5.31	-4.72	-4.66	-2.61	-5.15	5.71	-4.73	-2.41	5.4
μ_C (D)	-3.37	-4.1	1.48	0.38	0.82	-3.54	1.22	0.88	-0.05	0.28	-0.17
ΔE (cm ⁻¹)	947	975	1001	1004	977	1020	1083	1088	1136	1221	1152
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	928	983	1017	1025	1029	1029	1117	1124	1155	1167	1173
ΔG (cm ⁻¹)	1004	963	1058	1025	1023	994	1149	1185	1131	1368	1164

Confórmero	53	11	102	89	21	45	37	56
A(MHz)	1263	512	637	896	617	953	518	720
B(MHz)	189	353	300	233	282	215	345	258
C(MHz)	177	268	265	205	238	199	266	243
μ_A (D)	4.20	0.32	-2.08	2.82	-0.62	-0.15	1.15	-1.26
μ_B (D)	-3.70	4.35	-3.61	0.89	4.82	-3.20	3.69	1.43
μ_C (D)	0.44	-2.30	-3.17	0.13	0.91	-0.24	-2.76	3.36
ΔE (cm ⁻¹)	1274	1334	1572	1649	1610	1731	1679	1856
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	1227	1356	1573	1588	1636	1651	1751	1851
ΔG (cm ⁻¹)	1191	1449	1679	1573	1665	1811	1876	1953

6-311+G(d,p)

Confórmero	66	1	4	3	5	57	26	59	6	72	25
A(MHz)	843	697	963	972	507	1161	816	985	563	983	932
B(MHz)	204	233	184	182	379	194	212	183	327	186	195
C(MHz)	182	189	169	166	273	184	197	172	233	179	179
μ_A (D)	2.15	-1.07	2.70	2.22	1.38	3.51	3.03	-3.22	0.26	3.51	-3.84
μ_B (D)	-4.52	5.18	-4.49	-4.86	4.14	-3.72	-4.27	0.64	5.03	-4.29	0.21
μ_C (D)	1.25	1.85	0.81	1.22	-2.83	0.72	1.73	-3.73	2.25	0.87	-2.81
ΔE (cm ⁻¹)	0	25	116	136	440	663	822	834	828	855	880
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	0	22	102	128	461	662	830	831	859	864	877
ΔG (cm ⁻¹)	0	67	70	114	635	699	807	827	915	929	830

Confórmero	14	12	13	34	51	20	8	64	49	86	58
A(MHz)	581	822	665	817	1008	1082	1153	1038	874	702	913
B(MHz)	302	198	237	218	199	194	203	190	198	231	195
C(MHz)	255	189	204	193	182	180	189	174	172	184	178
μ_A (D)	-2.88	-2.02	-2.13	-1.23	2.20	2.96	0.37	2.30	1.12	-0.22	-1.45
μ_B (D)	-3.19	-1.27	-2.53	5.28	-4.67	-4.64	-2.36	-4.70	-5.07	5.65	5.38
μ_C (D)	-3.35	-4.05	-3.50	1.46	0.41	0.80	0.28	-0.07	1.22	0.90	-0.20
ΔE (cm ⁻¹)	936	947	984	996	987	979	1122	1121	1106	1113	1142
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	916	949	987	1005	1006	1025	1069	1135	1137	1143	1154
ΔG (cm ⁻¹)	1019	934	954	1055	1024	1030	1295	1127	1185	1216	1137

Confórmero	53	11	89	102	45	21	37	56
A(MHz)	1266	511	894	642	955	614	518	720
B(MHz)	190	357	235	300	216	286	351	260
C(MHz)	178	271	207	267	200	241	269	245
μ_A (D)	4.16	0.34	2.79	-2.11	-0.14	-0.6	1.19	-1.28
μ_B (D)	-3.65	4.28	0.85	-3.51	-3.15	4.75	3.56	1.41
μ_C (D)	0.43	-2.3	0.11	-3.18	-0.26	0.92	-2.78	3.32
ΔE (cm ⁻¹)	1254	1284	1533	1534	1625	1548	1631	1767
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	1206	1310	1485	1542	1552	1578	1701	1762
ΔG (cm ⁻¹)	1183	1435	1523	1673	1740	1641	1847	1884

6-311++G(d,p) GD3

Confórmero	5	1	66	6	4	3	14	57	11	8	102
A(MHz)	497	687	893	534	924	946	555	1160	511	1170	632
B(MHz)	428	245	208	391	191	187	354	205	442	207	323
C(MHz)	287	195	185	261	176	169	288	193	317	193	284
μ_A (D)	1.33	-0.78	2.35	0.26	2.72	2.13	-2.90	3.88	-3.28	0.47	-2.01
μ_B (D)	4.25	5.24	-4.30	5.01	-4.48	-4.94	-2.78	-3.35	1.48	-2.29	-3.55
μ_C (D)	-2.66	1.63	1.25	2.15	1.02	1.05	-3.42	1.09	2.99	0.25	-3.17
ΔE (cm ⁻¹)	0	480	515	495	849	876	804	952	1116	1159	1125
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	0	402	435	508	726	749	761	899	1045	1083	1092
ΔG (cm ⁻¹)	27	46	0	531	164	245	745	734	907	1016	1023

Confórmero	26	34	51	89	20	21	13	72	37	25	59
A(MHz)	774	792	1026	880	1032	549	668	962	529	867	978
B(MHz)	223	232	207	245	204	361	258	190	419	216	185
C(MHz)	208	201	189	214	189	282	216	181	297	191	175
μ_A (D)	2.89	-0.83	2.23	3.09	2.92	-0.76	-2.47	3.48	2.62	-3.99	-3.19
μ_B (D)	-4.04	5.34	-4.56	0.72	-4.66	4.51	-1.88	-4.24	1.89	-0.09	0.61
μ_C (D)	2.09	1.36	0.77	-0.06	0.58	1.24	-3.37	1.05	-2.85	-2.81	-3.70
ΔE (cm ⁻¹)	1246	1256	1300	1402	1379	1365	1515	1513	1449	1568	1576
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	1177	1190	1238	1314	1321	1326	1387	1403	1417	1437	1449
ΔG (cm ⁻¹)	772	844	871	1096	989	1227	847	1045	1334	952	988

Confórmero	12	64	45	53	86	58	56	49
A(MHz)	844	998	960	1226	673	866	721	874
B(MHz)	200	199	223	199	248	206	270	202
C(MHz)	190	184	205	187	193	185	252	175
μ_A (D)	-2.09	2.16	-0.2	4.14	0.01	-1.07	-1.56	1.15
μ_B (D)	-0.94	-4.72	-3.14	-3.47	5.6	5.42	2.04	-4.99
μ_C (D)	-3.92	-0.24	-0.29	0.79	0.89	-0.32	3.11	1.13
ΔE (cm ⁻¹)	1567	1619	1618	1652	1563	1639	1669	1663
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	1456	1507	1520	1530	1534	1539	1596	1617
ΔG (cm ⁻¹)	931	879	1422	1302	1267	1084	1376	1277

B3LYP/Def2TZVP GD3BJ

Confórmero	5	1	66	6	4	3	14	57	102	11	34
A(MHz)	504	692	884	539	940	952	558	1159	640	519	801
B(MHz)	428	247	209	391	192	189	357	206	325	446	233
C(MHz)	291	197	186	262	177	170	290	193	287	321	202
μ_A (D)	1.54	-0.85	2.31	0.19	2.77	2.18	-2.83	3.79	-2.03	3.33	-0.91
μ_B (D)	4.03	5.09	-4.24	4.89	-4.33	-4.80	-2.74	-3.30	-3.36	1.25	5.14
μ_C (D)	-2.58	1.55	1.13	2.06	0.87	0.93	-3.30	0.96	-3.04	-2.88	1.26
ΔE (cm ⁻¹)	0	447	481	464	757	787	749	865	1010	1058	1126
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	0	384	416	489	671	694	731	829	1021	1045	1104
ΔG (cm ⁻¹)	0	62	13	513	187	248	756	647	972	1044	820

Confórmero	51	26	8	20	21	72	13	25	59	64	37
A(MHz)	1030	796	1171	1057	554	973	666	891	979	1019	530
B(MHz)	207	223	209	203	363	191	256	212	187	199	424
C(MHz)	189	209	194	189	283	183	216	189	177	184	299
μ_A (D)	2.20	2.93	0.44	-3.00	-0.73	3.49	-2.38	-3.95	-3.21	2.24	2.57
μ_B (D)	-4.40	-3.94	-2.30	-4.45	4.45	-4.14	-2.03	0.00	0.55	-4.49	1.90
μ_C (D)	0.58	1.86	0.24	-0.61	1.09	0.84	-3.28	-2.67	-3.59	-0.29	-2.76
ΔE (cm ⁻¹)	1166	1187	1261	1258	1348	1433	1468	1487	1489	1448	1422
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	1141	1143	1176	1241	1360	1361	1399	1400	1409	1409	1414
ΔG (cm ⁻¹)	796	806	1150	990	1305	970	916	865	1025	983	1331

Confórmero	53	58	12	89	86	49	45	56
A(MHz)	1235	880	849	895	682	888	964	722
B(MHz)	201	207	202	244	248	203	225	273
C(MHz)	188	186	192	214	193	176	207	255
μ_A (D)	4.12	1.18	-2.13	-2.97	-0.12	1.26	-0.18	-1.42
μ_B (D)	-3.35	-5.19	-1.00	0.79	5.42	-4.81	-3.10	1.85
μ_C (D)	0.68	-0.36	-3.79	0.04	0.82	1.04	-0.26	3.03
ΔE (cm ⁻¹)	1496	1474	1501	1538	1491	1574	1745	1687
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	1417	1431	1443	1448	1474	1554	1621	1639
ΔG (cm ⁻¹)	1253	1039	1021	1241	1212	1264	1524	1475

M06-2X/6-311++G(d,p)

Confórmero	5	6	66	1	14	4	3	11	57	8	102
A(MHz)	491	540	913	705	558	926	909	553	1151	1203	630
B(MHz)	453	399	214	248	363	200	200	450	208	209	332
C(MHz)	290	263	191	199	294	186	178	330	196	195	288
μ_A (D)	0.58	0.65	2.33	-0.67	-2.77	2.78	1.84	-3.42	3.56	0.42	-1.73
μ_B (D)	4.31	4.80	-3.99	5.03	-2.55	-4.10	-4.91	0.32	-3.30	-2.12	-3.59
μ_C (D)	-2.43	1.93	1.29	1.49	-3.30	1.24	0.78	3.00	1.12	0.15	-3.01
ΔE (cm ⁻¹)	0	416	500	572	829	896	1002	867	1042	1161	1297
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	0	432	439	477	797	799	866	874	975	1066	1236
ΔG (cm ⁻¹)	51	415	81	0	734	302	240	1019	661	928	997

Confórmero	21	20	51	26	37	34	89	25	13	53	72
A(MHz)	547	1083	1033	743	539	798	912	891	652	1228	946
B(MHz)	376	205	214	234	436	239	246	226	276	203	193
C(MHz)	291	191	195	217	299	205	216	197	229	190	184
μ_A (D)	-0.77	2.90	2.11	2.54	2.59	-0.61	2.82	-3.96	-2.23	3.82	3.18
μ_B (D)	4.34	-4.32	-4.36	-3.63	1.60	5.22	0.86	0.15	-1.95	-3.34	-4.01
μ_C (D)	1.24	0.80	0.86	2.41	-2.73	1.16	-0.08	-2.55	-3.31	0.81	1.38
ΔE (cm ⁻¹)	1275	1379	1356	1386	1312	1419	1459	1518	1514	1615	1604
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	1240	1320	1324	1336	1336	1342	1389	1456	1473	1505	1505
ΔG (cm ⁻¹)	1075	916	979	779	1386	862	1105	1013	1096	1274	899

Confórmero	12	45	59	64	86	49	58	56
A(MHz)	916	985	939	981	659	893	818	752
B(MHz)	203	226	192	211	258	208	227	268
C(MHz)	193	207	183	195	198	179	197	250
μ_A (D)	-2.12	-0.13	-2.91	2.01	0.29	1.15	-0.58	-1.76
μ_B (D)	-0.54	-2.99	0.3	-4.5	5.37	-4.69	5.3	2.41
μ_C (D)	-3.65	-0.24	-3.76	-0.33	0.77	0.97	-0.33	2.95
ΔE (cm ⁻¹)	1588	1624	1629	1705	1685	1750	1800	1772
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	1508	1512	1520	1660	1660	1712	1713	1730
ΔG (cm ⁻¹)	961	1291	772	1196	1258	1280	1151	1483

PM6/6-311++G(d,p)

Confórmero	5	66	1	4	3	8	86	49	6	20	14
A(MHz)	519	1004	680	992	1054	1090	736	843	588	1070	598
B(MHz)	399	212	240	201	180	210	221	205	330	204	287
C(MHz)	283	194	197	192	165	194	184	179	237	193	246
μ_A (D)	1.47	2.78	-0.53	3.22	1.69	0.42	0.77	-0.18	0.98	2.75	-1.97
μ_B (D)	4.90	-4.29	5.83	-4.71	-5.61	-3.01	6.60	-6.10	5.98	-4.70	-4.58
μ_C (D)	-3.34	1.48	2.79	0.72	1.78	-0.17	0.95	1.43	2.80	1.05	-3.94
ΔE (cm ⁻¹)	0	25	188	130	277	328	255	270	332	325	335
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	0	35	86	132	174	188	213	219	307	309	341
ΔG (cm ⁻¹)	482	412	0	473	76	307	400	335	574	591	684

Confórmero	57	89	13	11	72	25	102	45	12	51	37
A(MHz)	1142	849	677	506	1308	883	637	919	792	1136	547
B(MHz)	212	259	280	382	187	239	323	228	207	213	402
C(MHz)	199	223	229	283	173	203	282	210	195	196	297
μ_A (D)	3.59	3.21	-3.08	0.67	3.24	-4.56	-2.10	-0.49	-1.47	2.69	2.70
μ_B (D)	-3.82	0.52	-1.74	4.42	-5.00	0.28	-4.15	-3.98	-1.52	-4.65	2.46
μ_C (D)	1.84	-0.23	-3.83	-3.88	0.90	-2.45	-3.65	0.11	-4.98	1.22	-3.60
ΔE (cm ⁻¹)	330	564	496	575	505	578	642	659	673	650	601
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	390	426	444	525	537	540	568	576	588	607	635
ΔG (cm ⁻¹)	990	658	929	684	927	895	1039	915	544	1004	1307

Confórmero	34	21	59	64	58	56
A(MHz)	805	696	1137	1112	951	786
B(MHz)	223	257	181	209	195	254
C(MHz)	200	228	168	194	179	239
μ_A (D)	-0.74	-0.45	-2.93	2.92	-0.88	-1.47
μ_B (D)	6.03	5.78	1.69	-4.73	6.33	3.25
μ_C (D)	2.18	1.39	-3.83	-0.66	0.22	3.33
ΔE (cm ⁻¹)	793	784	822	767	915	1076
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	653	695	701	721	764	1002
ΔG (cm ⁻¹)	661	763	599	1102	730	1158

HF/6-311++G(d,p)

Confórmero	66	1	4	3	5	59	25	12	57	13	72
A(MHz)	841	699	943	962	501	987	917	838	1185	686	947
B(MHz)	206	236	186	185	389	185	199	200	194	238	190
C(MHz)	184	191	171	168	272	174	181	189	183	204	182
μ_A (D)	1.78	-0.68	2.27	1.79	0.67	-2.98	-3.61	-1.92	3.18	-2.16	3.08
μ_B (D)	-4.45	5.06	-4.49	-4.84	4.17	0.72	0.24	-0.87	-3.83	-2.03	-4.20
μ_C (D)	1.41	1.88	1.02	1.27	-2.84	-3.73	-2.89	-4.05	0.66	-3.54	1.53
ΔE (cm ⁻¹)	0	35	153	187	603	787	817	865	910	896	980
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	0	39	126	163	619	784	809	874	891	899	987
ΔG (cm ⁻¹)	0	79	44	96	788	697	686	798	798	785	1002

Confórmero	14	26	6	8	20	51	34	53	49	11	86
A(MHz)	578	798	560	1192	1125	1004	816	1282	877	509	698
B(MHz)	305	216	334	201	194	201	222	190	200	362	235
C(MHz)	256	201	236	187	180	184	195	178	174	273	187
μ_A (D)	-2.57	2.64	0.62	0.34	-2.74	1.83	-0.87	3.81	0.78	0.43	0.13
μ_B (D)	-3.07	-4.12	4.83	-2.43	-4.58	-4.75	5.27	-3.79	-4.96	-3.83	5.49
μ_C (D)	-3.48	2.13	2.29	0.08	-0.87	0.62	1.59	0.30	1.23	2.70	0.89
ΔE (cm ⁻¹)	1004	993	996	1203	1163	1269	1290	1410	1325	1352	1338
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	991	1017	1030	1154	1222	1291	1316	1356	1366	1379	1380
ΔG (cm ⁻¹)	1082	944	1092	1356	1292	1288	1352	1310	1410	1400	1433

Confórmero	64	58	89	21	45	37	102	56	64
A(MHz)	1018	894	906	586	985	526	644	749	1018
B(MHz)	193	200	234	308	212	353	301	253	193
C(MHz)	177	181	207	254	198	269	267	239	177
μ A(D)	1.85	0.97	-2.69	-0.49	-0.03	1.28	-1.86	-1.40	1.85
μ B(D)	-4.82	-5.43	1.07	4.45	-3.19	3.07	-3.54	1.56	-4.82
μ C(D)	0.04	-0.15	-0.05	1.44	-0.01	-2.98	-3.30	3.62	0.04
ΔE (cm ⁻¹)	1430	1463	1526	1570	1723	1708	2037	2080	1430
ΔE_{ZPE} (cm ⁻¹)	1439	1477	1502	1621	1649	1782	2057	2081	1439
ΔG (cm ⁻¹)	1381	1435	1550	1723	1818	1865	2189	2126	1381