



**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE QUÍMICA**

NICOLA LEONE DA ROCHA

**Cálculos teóricos de entalpia de formação através do método
composto G3(MP2)//B3-CEP: Avaliação dos efeitos de otimização
de geometria e frequências vibracionais.**

**CAMPINAS
2019**

NICOLA LEONE DA ROCHA

**Cálculos teóricos de entalpia de formação através do método
composto G3(MP2)//B3-CEP: Avaliação dos efeitos de otimização
de geometria e frequências vibracionais.**

Dissertação de Mestrado apresentada ao
Instituto de Química da Universidade Estadual
de Campinas como parte dos requisitos
exigidos para a obtenção do título de Mestre em
Química na área de Físico Química.

Orientador: Prof. Dr. Rogerio Custodio

**O arquivo digital corresponde à versão final da Dissertação defendida pelo
aluno Nicola Leone da Rocha e orientada pelo Prof. Dr. Rogerio Custodio.**

**CAMPINAS
2019**

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas
Biblioteca do Instituto de Química
Camila Barleta Fullin - CRB 8462

Rocha, Nicola Leone da, 1995-
R582c Cálculos teóricos de entalpia de formação através do método
G3(MP2)//B3-CEP : avaliação dos efeitos de otimização de geometria e
frequências vibracionais / Nicola Leone da Rocha. – Campinas, SP : [s.n.],
2019.

Orientador: Rogerio Custodio.
Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Instituto de
Química.

1. Métodos compostos. 2. Frequências vibracionais. 3. Entalpia. I.
Custodio, Rogerio, 1958-. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de
Química. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Theoretical calculations of enthalpy of formation using
G3(MP2)//B3-CEP method : geometry optimizations and vibrational frequencies effects
evaluations

Palavras-chave em inglês:

Composite methods
Vibrational frequencies
Enthalpy

Área de concentração: Físico-Química

Titulação: Mestre em Química na área de Físico-Química

Banca examinadora:

Rogerio Custodio [Orientador]

Claudio Francisco Tormena

Ataulpa Albert Carmo Braga

Data de defesa: 29-07-2019

Programa de Pós-Graduação: Química

Identificação e informações acadêmicas do(a) aluno(a)

- ORCID do autor: <https://orcid.org/0000-0002-3382-9398>

- Currículo Lattes do autor: <http://lattes.cnpq.br/1596848192544921>

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Rogerio Custodio (Orientador)

Prof. Dr. Claudio Francisco Tormena (Unicamp)

Prof. Dr. Atualpa Albert Carmo Braga (USP)

A Ata da defesa assinada pelos membros da Comissão Examinadora, consta no SIGA/Sistema de Fluxo de Dissertação/Tese e na Secretaria do Programa da Unidade.

Este exemplar corresponde à redação final da Dissertação de Mestrado defendida pelo aluno **Nicola Leone da Rocha**, aprovada pela Comissão Julgadora em 29 de Julho de 2019.

Dedicatória

Dedico este trabalho aos meus pais,
Marcio e Alessandra e a minha irmã
Luisa.

Agradecimentos

Agradeço aos meus pais, minha irmã e meus amigos pelo apoio, amizade, companheirismo e auxílio fornecido;

Ao Professor Dr. Rogério Custodio pelo que me foi ensinado, pela paciência e pela oportunidade de fazer parte de seu grupo de pesquisa;

Aos colegas de grupo, Felipe, Gabriel, Guilherme Chinini, Guilherme Morais, Mariana, Pedro Giraldi, Pedro Mariz e Régis pela companhia, conselhos e pela ajuda fornecida;

Aos colegas de outros grupos, Arnaldo, Leonardo e Manoel;

A todos os funcionários do Instituto de Química, da Unicamp e das empresas terceirizadas que direta ou indiretamente contribuíram para que este trabalho fosse realizado;

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

RESUMO

Métodos compostos são uma classe amplamente conhecida pela proposta de oferecer uma metodologia simples para estrutura eletrônica, composta majoritariamente por cálculos de custo reduzido que, através de etapas de correção, são capazes de equiparar seus resultados à cálculos de altíssimo nível. Teorias Gaussian n ou simplesmente Gn fazem parte desta classe e calculam a energia de átomos e moléculas a partir do modelo geral apresentado pela equação:

$$E_{final} = E_{ref.} + \Delta E_{Correlação} + \Delta E_{Base} + \Delta E_{Difusa} + \Delta E_{Polarização} + E_{HLC} + E_{SO}$$

Estas etapas de cálculo são realizadas através de geometrias previamente otimizadas. Erros de aproximadamente 2,0 kcal mol⁻¹ em relação aos resultados experimentais é uma das razões da popularidade destes métodos. Estes erros são obtidos para propriedades como entalpias de formação, energias de atomização, afinidades eletrônicas, energias de ionização e afinidades protônicas.

O projeto desenvolvido teve como objetivo estudar a influência das frequências vibracionais e das otimizações de geometria nos cálculos de entalpias de formação. Essas avaliações foram realizadas através da variação dos níveis de teoria, funções de base e da utilização de fatores de escalamento vibracionais seletivos nos cálculos de frequência.

Resultados mostraram que a adição de funções difusas e de polarização nas etapas de otimização de geometria e frequência podem diminuir em até 40% os erros relativos de hidrocarbonetos e hidrocarbonetos substituídos. Outras reduções puderam ser observadas com o emprego de níveis de teoria distintos, entretanto, em menor extensão. Estudos realizados em relação aos fatores de escalamento vibracionais indicaram que novas perspectivas devem ser levadas em consideração para suas determinações e que o tratamento apresentado na literatura pode não fornecer os melhores resultados. O procedimento abordado no presente trabalho mostrou que estes fatores exibem relação linear com os erros de entalpia de formação, possibilitando a aquisição de erros nulos quando um fator de escalamento ótimo é empregado.

ABSTRACT

Composite methods are well-known computational methodologies providing accurate results for electronic structure from corrections obtained at lower level calculations. Gaussian n theories or simply Gn belong to this class of methods and the energy of atoms and molecules are calculated from the general equation:

$$E_{final} = E_{ref.} + \Delta E_{Correlation} + \Delta E_{Basis} + \Delta E_{Diffuse} + \Delta E_{Polarization} + E_{HLC} + E_{SO}$$

These steps are calculated using previously optimized geometries. Mean absolute errors of approximately 2.0 kcal mol⁻¹ with respect to experimental data is one of the reasons for the popularity of these methods. These errors are obtained for properties such as enthalpies of formation, atomization energies, electron affinities, ionization energies, and proton affinities.

The objective of this study was to analyze the influence of vibrational frequencies and geometry optimization on the enthalpies of formation. These evaluations were carried out by changing the levels of theory, basis functions, and the use of selective vibrational scaling factors in the frequency calculations.

Results showed that the addition of diffuse and polarization functions in the geometry and frequency optimization steps can reduce the relative errors of substituted hydrocarbons and hydrocarbons by up to 40%. Other improvements were observed using different levels of theory, but not so significant. Our analysis on the vibrational scaling factors indicated that new perspectives can be considered and the treatment from the literature may not necessarily achieve the best results. The procedure discussed in the present work showed that these factors are linear with respect to the enthalpy of formation errors, providing the determination of null errors when an optimal scaling factor is employed.

Lista de Figuras

Figura 1. Orbitais s e p do átomo de Silício gerados por função gaussiana 26s19p.	30
Figura 2. Funções peso dos orbitais p de valência geradas a partir de uma função 26s19p para átomos do segundo e terceiro período.	31
Figura 3. Função peso do orbital 3s do átomo de silício obtido a partir de cálculo com e sem pseudopotencial (CEP).	32
Figura 4. Perfis obtidos através da matriz de densidade dos orbitais s do átomo de silício. (a) orbitais 1s, 2s e 3s, (b) orbital 3s calculado com pseudopotencial.	33
Figura 5. Erros médios absolutos (kcal mol^{-1}) de grupos de moléculas do conjunto G3/05 frente a utilização de diferentes funções de base no cálculo de otimização de geometria e frequência.....	42
Figura 6. Relação entre erros médios absolutos (kcal mol^{-1}) de grupos do conjunto G3/05 obtidos através do emprego de níveis de teoria distintos.	43
Figura 7. Fatores de escalamento empregados no cálculo de frequência para o modelo de otimização M06/CEP-311++G(3df,2pd).	45
Figura 8. Fatores de escalamento empregados no cálculo de frequência para o modelo de otimização B3LYP/CEP-31G(d)	46
Figura 9. Erros de entalpia de formação (kcal mol^{-1}) obtidos através da utilização de diferentes fatores de escalamento para o método G3(MP2)//B3-CEP	48
Figura 10. Erros de entalpia de formação (kcal mol^{-1}) obtidos através da utilização de diferentes fatores de escalamento para o método G3(MP2)//B3-CEP	49
Figura 11. Erros médios absolutos (kcal mol^{-1}) obtidos através da utilização dos erros: (a) mínimos de cada estrutura (b) mínimos de cada estrutura, exceto para moléculas com mínimos fora do intervalo de fatores estudados.	51
Figura 12. Relações entre estruturas moleculares e erros mínimos absolutos de entalpia de formação (kcal mol^{-1}).	52
Figura 13. Geometrias Moleculares: Tetraidrotiofeno ($\text{C}_4\text{H}_8\text{S}$), Diidrotiofeno ($\text{C}_4\text{H}_6\text{S}$), etano (C_2H_6) e eteno (C_2H_4), respectivamente.	53

Figura 14. Relações entre estruturas moleculares e erros mínimos absolutos de entalpia de formação
(kcal mol⁻¹).....54

Lista de Tabelas

Tabela 1. Parâmetros HLC otimizados para o método G3(MP2)//B3-CEP.....	24
Tabela 2. Modelos de otimização de geometria e cálculo de frequênci aplicados ao grupo G3/05 para cálculo de entalpia de formação através do método G3(MP2)//B3CEP.....	28
Tabela 3. Expoentes α adquiridos a nível Hartree-Fock com base 26s19p, a partir de método de Matriz de Densidade e Coordenada Geradora.....	34
Tabela 4. Adaptação de função de base aug-cc-pvTz do átomo de Silício ao pseudopotencial CEP pelo método da Coordenada Geradora e Matriz de Densidade.	35
Tabela 5. Erros absolutos entre valores teóricos de entalpia de formação (kcal mol^{-1}). Sendo $\Delta H_{\text{pvNz}} = (H_{\text{base pvNz}} - H_{\text{base pvNz adaptada}})$	36
Tabela 6. Expoentes dos orbitais s do átomo de Cloro e erros na entalpia de formação implícitos em suas remoções, em relação ao cálculo com a base completa.....	38
Tabela 7. Erros (kcal mol^{-1}) obtidos pelo método G3(MP2)//B3CEP através de diferentes modelos de otimização e frequênci.....	40

Sumário

1.	Introdução	13
2.	Objetivos.....	20
3.	Metodologia.....	21
3.1	Adaptação de bases contraídas à pseudopotenciais do tipo CEP.....	21
3.2.	Método G3(MP2)//B3-CEP.	22
3.3	Entalpia de Formação.....	24
3.4	Avaliação do efeito da etapa de otimização de geometria e frequência nos resultados de entalpia de formação.	26
3.5	Avaliação do efeito dos fatores de escalamento vibracionais nos resultados de entalpia de formação.	28
4.	Resultados e Discussão.....	30
4.1	Adaptação de bases contraídas de Dunning à pseudopotenciais do tipo CEP.	30
4.2	Influência da variação da etapa de otimização de Geometria no cálculo de entalpia de formação do grupo G3/05.....	39
4.3	Influências da variação do Fator de Escalamento em moléculas do Grupo G3/05.	46
5.	Conclusão	56
6.	Perspectivas Futuras	57
7.	Referências	58
8.	Anexos	61

1. Introdução

A química teórica e computacional possui como objetivo a utilização de modelos quânticos para determinação de energias e estruturas eletrônicas¹, posteriormente utilizadas na determinação de algumas propriedades químicas. A previsibilidade gerada pelo cálculo destas propriedades são ferramentas de interesse e de estudo da química teórica, principalmente devido ao caráter, muitas vezes, destrutivo de alguns procedimentos experimentais.

O rápido desenvolvimento computacional e a criação de softwares modernos possibilitaram não apenas a sua popularização, como, também, grandes avanços na área. Entretanto, o cálculo de energia de moléculas em nível de rigor muito elevado pode ser impraticável, mesmo para computadores de alto desempenho, devido aos custos computacionais a eles atrelados, fato este que origina a necessidade de desenvolvimento de metodologias capazes de obter propriedades confiáveis, porém, com menor esforço computacional.

Além disso, grande parte dos grupos de pesquisa almejam a elaboração de metodologias capazes de calcular propriedades de moléculas cada vez mais complexas. Entretanto, o aumento da complexidade destas estruturas eleva consideravelmente os custos computacionais envolvidos na determinação de suas propriedades. São estes aspectos que impulsionam o interesse pelo desenvolvimento de métodos capazes de calcular propriedades químicas com os menores custos computacionais possíveis, preferencialmente, sem diminuir drasticamente a qualidade dos resultados.

O emprego de métodos compostos torna-se interessante nesse sentido. Estes métodos possuem como característica principal a diminuição dos custos computacionais através da associação de diferentes etapas de cálculo baseadas em níveis de teoria e funções de base de baixo custo, que, quando somadas a uma determinada energia de referência, podem fornecer energias finais de altíssimo nível. Entre os métodos compostos mais conhecidos podem ser citados os métodos de função de base completa (CBS)^{2,3}, a teoria de Weizmann⁴⁻⁶ e as teorias Gaussian-n^{1,7-9}.

Modelos Gaussian-n são amplamente citados na literatura, comumente chamados de Métodos Gn ($n=1,2,3,4$), possuem sua popularidade centrada na exatidão de seus cálculos e em sua vasta aplicabilidade. A energia eletrônica final é gerada pela soma das correções:

$$E_{final} = E_{ref.} + \Delta E_{Correlação} + \Delta E_{Base} + \Delta E_{Difusa} + \Delta E_{Polarização} + E_{HLC} + E_{SO} \quad [1]$$

O termo $E_{ref.}$ simboliza a energia de referência ao qual são adicionadas correções complementares, tais como, correções de: correlação eletrônica ($\Delta E_{Correlação}$), função de base (ΔE_{Base}), função difusa (ΔE_{Difusa}), função de polarização ($\Delta E_{Polarização}$), *higher-level corrections* (E_{HLC}) e spin-órbita (E_{SO}).

A correção de correlação eletrônica representa a interação de repulsão dos elétrons. Esta repulsão apresenta uma singularidade quando a distância entre dois elétrons é igual a zero. O efeito é responsável pela necessidade de evitar-se cúspides na função de onda, que não são bem representados por alguns níveis de teoria. Cálculos em nível Hartree-Fock, por exemplo, não consideram o efeito individual das distâncias entre pares de elétrons, mas, sim, um campo médio gerado pelo conjunto total de elétrons presentes, enquanto cálculos em nível QCISD(T) e CCSD(T) são superiores no sentido de corrigirem, em certa extensão, esses efeitos.

As correções de função de base suprem deficiências fundamentais em nível Hartree-Fock. A primeira correção, de função de polarização, corrige a energia referente a distorções da distribuição eletrônica, pelo acréscimo de funções adicionais com simetrias diferentes das já existentes nos átomos. A segunda é a correção de função difusa, que expressa a expansão da nuvem eletrônica, incluindo primitivas de mesma simetria daquelas já existentes, efeito importante principalmente em ânions.¹⁰

Correções de spin-órbita, por sua vez são realizadas através de dados obtidos por medidas experimentais ou cálculos de altíssimo nível. Enquanto a energia E_{HLC} (*Higher-Level Correction*) é introduzida empiricamente para corrigir efeitos não considerados nas etapas anteriores.¹¹

Além disso, todas as energias calculadas são determinadas a partir de uma geometria molecular previamente otimizada.^{1,7,11,12} Tanto a energia de referência quanto as correções que a sucedem são obtidas a partir da mesma geometria.

Inicialmente, os métodos G1, G2 e G3 optavam pelo emprego de otimizações de geometria em nível MP2(full), com funções de base 6-31G(d)^{1,7,8}. Entretanto, foram realizados testes de adaptação desta etapa nos métodos G2 e G3 utilizando o funcional de densidade B3LYP com funções de base 6-31G(d) e 6-31G(d,p)^{13,14}. Esta substituição é justificada na literatura principalmente pela necessidade de representação de efeitos de correlação eletrônica. Cálculos usualmente empregados para representação destes efeitos, QCISD(T) ou até cálculos MP2, acabam exigindo maior esforço computacional. Nesse sentido, funcionais de densidade surgem como uma alternativa interessante, por incluírem estes efeitos de forma mais econômica computacionalmente.¹³

A maior vantagem na utilização dos modelos de teoria de funcional de densidade (TFD), como o B3LYP, está no ganho em velocidade e a utilização de pouco espaço de memória. Estas vantagens chamam a atenção para novas aplicações destas metodologias, possibilitando o cálculo de energia de sistemas moleculares cada vez maiores.¹⁵ Quando comparado a utilização de cálculos MP2(full), os cálculos com o funcional B3LYP causaram diminuições nos custos computacionais e também pequenas diminuições dos erros das propriedades calculadas.^{12–14,16}

Uma característica interessante encontrada nos modelos TFD é a forma de representação dos efeitos de troca e correlação presentes nas estruturas eletrônicas como átomos e moléculas, tendo em vista que o modelo de representação de distribuição eletrônica empregado pelas mesmas considera apenas uma densidade de partículas não interagentes¹⁷. Diversas tentativas de representação destes efeitos podem ser encontradas em diferentes funcionais. São conhecidos, por exemplo, os modelos de representação LDA (Local Density Approximation), GGA (Generalized Gradient Aproximation), LSD (Local Spin Density).^{15,17}

A exemplo do funcional B3LYP, são utilizadas para representação destes efeitos a correção de gradiente de Becke para representar o funcional de troca, e o gradiente de correção de Perdew-Wang para o funcional de correlação.¹⁸

Além da alteração dos níveis de teoria das etapas de otimização de geometria, foram alterados os cálculos de frequência vibracionais dos métodos Gn originais. Com exceção do método G4¹¹, os cálculos de frequência eram originalmente realizados em nível de teoria HF/6-31G(d), e as frequências vibracionais harmônicas eram multiplicadas por fator de escalamento de 0,89. Entretanto, a partir da utilização do funcional B3LYP, os cálculos de frequência passaram a ser realizados com o mesmo funcional e o fator de escalamento vibracional empregado foi alterado para 0,96.¹³

A utilização destes fatores está associada com frequências vibracionais experimentais serem tipicamente menores do que as frequências calculadas a partir de métodos ab initio, devido à determinação teórica ser realizada através de cálculos com vibrações harmônicas. Para a correção dessas diferenças representa-se os efeitos de anarmonicidade através de fatores de escalamento.¹⁹

A determinação do fator mais apropriado a ser utilizado é alvo de muita discussão na literatura¹⁹. São obtidos fatores distintos de acordo com o nível de teoria e funções de base empregadas no cálculo de frequência. Além disso, a determinação é realizada através de dados experimentais de grupos definidos de moléculas. Pople *et al.*²⁰, por exemplo, usaram um grupo de 38 moléculas e 477 frequências para estimar que o fator de escalamento apropriado para cálculos HF/3-21G(d) seria de aproximadamente 0,89. Este valor foi obtido pois Pople *et al.*²⁰ identificaram que as razões entre as frequências teóricas calculadas em nível HF/3-21G(d) e as frequências experimentais eram em média aproximadamente 1,123 vezes maiores, ou seja, aproximadamente 12,3% maiores que as frequências experimentais.²⁰

Um parâmetro semelhante foi gerado por Hout *et al.*²¹ utilizando 36 moléculas com átomos do segundo período. Ele observou que as frequências calculadas em nível HF/6-31G(d) eram 13% maiores que os valores experimentais.²¹ Hout *et al.*²¹ indicaram, também, que cálculos em nível MP2/6-31G(d) geram frequências 7% maiores que as frequências experimentais.²¹ Esses resultados resultaram na recomendação de fatores próximos a 0,8929 para cálculos HF/6-31G(d) e aproximadamente 0,921 para cálculos MP2(full)/6-31G(d).¹⁹ Scott *et al.*²² por sua vez, propuseram os fatores de escalamento vibracionais apropriados para diferentes níveis de teoria, a partir de 1066 frequências experimentais de 122 moléculas presentes nos trabalhos realizados por Shimanouchi.²² Foi determinado, a partir destas moléculas, que cálculos de frequência utilizando B3LYP/6-31G(d) deveriam utilizar fatores de

escalamento iguais a 0,96, o mesmo fator empregado pelo método G4¹¹ e métodos Gn adaptados a cálculos de frequência com funcionais B3LYP.

Os trabalhos citados acima recomendam a utilização de um fator de escalamento vibracional único para a aplicação em qualquer estrutura molecular. Entretanto, trabalhos como os realizados por Hase *et al.*^{3,24} recomendam um fator de escalamento vibracional para cada tipo de ligação química e seus modos vibracionais. Em outras palavras, o emprego de fatores de escalamento adequados pode depender também do tipo de estrutura, não apenas do nível de teoria associado ao cálculo de frequência.

Em relação ao grupo de testes utilizado pelos métodos Gn, a determinação de propriedades químicas é realizada a partir do grupo G3/05, composto por moléculas com átomos do primeiro, segundo e terceiro período, que resulta em aproximadamente 450 dados experimentais em fase gasosa com incertezas muito reduzidas (inferiores a 1 kcal mol⁻¹). São encontradas nesse conjunto energias de atomização, potenciais de ionização, afinidades protônicas, afinidades eletrônicas e entalpias de formação.⁷⁻⁹ Esse conjunto é empregado para avaliar a precisão dos procedimentos desenvolvidos.

O método G3, é a terceira geração da teoria Gaussian-n e seu erro médio absoluto é de 1,13 kcal mol⁻¹ para as moléculas do grupo G3/05 e suas propriedades¹². O método G4, por sua vez, apresenta erro médio absoluto equivalente a 0,83 kcal mol⁻¹.¹¹ Estes são os métodos mais recentes da família Gn.

Uma alternativa que pode ser somada aos métodos compostos para diminuir ainda mais custos computacionais é o uso de pseudopotenciais, como, por exemplo, os pseudopotenciais do tipo CEP (*compact effective potentials*), desenvolvidos por Stevens *et al.*^{25,26} Cálculos com pseudopotenciais diminuem as integrais envolvidas no processo de obtenção de energia acarretando, consequentemente, na diminuição dos tempos de cálculo uma vez que funções de base que representam os elétrons do caroço eletrônico dos átomos são excluídas e substituídas por um potencial analítico.

Algumas metodologias foram criadas baseadas nessa alternativa e empregadas nas teorias Gaussian-n. Dois exemplos são os métodos G3CEP e G4CEP desenvolvidos por Pereira *et al.*²⁷ e Silva *et al.*²⁸, com erros médios absolutos de 1,29 kcal mol⁻¹ e 1,09 kcal mol⁻¹ quando aplicados ao grupo de teste G3/05.

Observou-se para estes métodos uma diminuição do esforço computacional de até 60% dependendo da estrutura molecular.^{27,28}

Uma das características fundamentais relacionadas a estas adaptações está centrada no corte das funções de base. Como descrito anteriormente, pseudopotenciais realizam os cálculos de energia apenas através das funções que correspondem aos elétrons de valência. As funções comumente empregadas são funções de base de Pople, que possuem uma separação caroço-valência bem definida. Pople apresentou uma descrição clara de seus conjuntos de funções de base contraídas, o número anterior ao hífen corresponde ao número de funções que representam os elétrons do caroço eletrônico do átomo, enquanto que os números à direita do hífen, representam as funções correspondentes aos elétrons de valência¹⁰. A função 6-31G(d), por exemplo, apresenta seis funções contraídas correspondentes aos elétrons do caroço eletrônico e cinco funções que representam os elétrons de valência. Dessa forma, a adaptação para pseudopotenciais pode ser realizada apenas pela remoção das seis funções contraídas localizadas à esquerda do hífen. Essa facilidade, entretanto, não é encontrada para bases contraídas diferentes das bases de Pople, onde a separação das funções caroço-valência não é bem definida. Nesse sentido, podem ser empregados métodos como o método de Coordenada Geradora^{9,29} e o método de Matriz de Densidade, cujas aplicações são bem documentadas na literatura para o desenvolvimento de bases contraídas e análises de distribuição eletrônica.

Como mostrado anteriormente, a adaptação dos métodos G3 e G4 não apresentaram um aumento significativo dos erros relacionados as propriedades do grupo G3/05. Em contrapartida, pôde-se notar a diminuição dos custos computacionais envolvidos nos cálculos, fator relevante na aplicação destes métodos tendo em vista que o cálculo de moléculas grandes acaba sendo muitas vezes impraticável.

Resumidamente, métodos compostos, independentemente do tipo, possuem como objetivos principais a diminuição dos custos computacionais, qualidade de resultados e vasta aplicabilidade. Entretanto, ao deparar-se com um conjunto molecular formado por estruturas distintas, pode-se, facilmente, identificar diferentes características, como: comprimentos de ligação, forças de ligação, números variados de átomos etc., fatores que tornam suscetíveis a comportamentos anômalos frente a

metodologias teóricas que visam um tratamento igualitário. Os dados de referência denominados de G3/05, por exemplo, abrangem um conjunto de 248 moléculas para o cálculo de entalpia de formação e em todos os métodos Gn desenvolvidos identifica-se algumas moléculas com erros elevados em relação aos valores experimentais.

Desta forma, faz-se necessária uma avaliação das etapas de cálculo presentes nos métodos Gn para identificar características individuais relativas às moléculas presentes no grupo G3/05. A identificação das características individuais pode permitir o entendimento da origem dos erros elevados e possibilitar a construção sistemática de métodos mais rigorosos.

2. Objetivos

- (a) Realizar a adaptação de funções de base contraídas a pseudopotenciais do tipo CEP através de métodos como coordenada geradora e matriz de densidade.
- (b) Avaliar o efeito das etapas de otimização de geometria e cálculo de frequência nos resultados de entalpia de formação para as moléculas do grupo G3/05.
- (c) Descrição detalhada do comportamento destas moléculas frente a utilização de diferentes fatores de escalamento vibrationais.

3. Metodologia

3.1 Adaptação de bases contraídas à pseudopotenciais do tipo CEP.

Realizou-se a adaptação de bases contraídas de Dunning a pseudopotenciais do tipo CEP através do método da Coordenada Geradora (CG)^{9,30}, empregado no estudo de distribuições eletrônicas e no desenvolvimento de funções de base. Este método é baseado em uma transformada integral do tipo:

$$\Phi(r) = \int_0^{\infty} f(\alpha)\chi(\alpha; r)d(ln\alpha) \quad [2]$$

Em que α corresponde à coordenada geradora, $f(\alpha)$ é a função peso e $\chi(\alpha; r)$ é a função geradora.²⁹

A função peso $f(\alpha)$ não pode ser obtida analiticamente. Entretanto, são conhecidos métodos numéricos capazes de representá-la. Um desses métodos faz a associação dos coeficientes de combinação linear dos orbitais atômicos (CLOA) obtidos a partir de um conjunto de base com os expoentes das primitivas igualmente espaçados, a associação pode ser expressa pela equação:

$$f(\alpha) = c_i/\Delta ln\alpha \quad [3]$$

A equação 3 gera uma representação contínua e bem-comportada da função peso e da distribuição eletrônica dos orbitais atômicos.^{9,29}

A mesma função pode ser utilizada para representação da densidade eletrônica:

$$|\Phi(r)|^2 = \iint_{-\infty}^{\infty} f(\alpha)f(\beta)\chi^*(\alpha; r)\chi(\beta; r)d(ln\alpha)d(ln\beta) \quad [4]$$

Uma matriz densidade, $P(\alpha, \beta)$, pode ser obtida através do produto das duas funções peso $f(\alpha)$ e $f(\beta)$:

$$P(\alpha, \beta) = f_i(\alpha)f_i(\beta)^\dagger \quad [5]$$

A multiplicação dos coeficientes das funções peso $f(\alpha)$ e $f(\beta)$ gera um produto matricial. uma das funções deve ser representada por sua transposta $(f_i(\beta)^\dagger)$. Os valores obtidos pela multiplicação matricial fornecem um perfil da densidade eletrônica dos orbitais atômicos ocupados e o método é chamado de Matriz de Densidade (MD)²⁹.

Tanto os métodos CG quanto MD foram empregados para a caracterização das funções de onda de átomos do segundo, terceiro período e do átomo de bromo. Utilizou-se como função geradora uma base 26s19p com expoentes igualmente espaçados em espaço logarítmico.

Através dos métodos CG e MD determinou-se para cada átomo os expoentes que melhor representavam os elétrons de valência. Expoentes atribuídos ao caroço eletrônico foram retirados das funções contraídas de Dunning.

Estes cortes tiveram como objetivo observar o comportamento das funções de base frente a adaptação em cálculos envolvendo pseudopotenciais, observando os erros implícitos em relação ao conjunto de bases completas, além de atenuar os custos computacionais através da diminuição do número de expoentes.

O pseudopotencial CEP foi empregado em um conjunto de 24 moléculas utilizando nível de cálculo B3LYP com quatro funções de base de Dunning (aug-cc-pvNz, N= D, T, Q, 5) adaptadas. As energias foram utilizadas para o cálculo de entalpias de formação. A metodologia empregada para o cálculo desta propriedade está descrita na seção 3.3.

Os resultados gerados pelas bases adaptadas foram comparados aos resultados com as funções de base originais, para avaliar os erros implícitos ao corte das funções. As novas funções de base puderam então ser empregadas na metodologia apresentada na seção 3.4.

3.2. Método G3(MP2)//B3-CEP.

As energias obtidas no presente trabalho foram determinadas através do método G3(MP2)//B3-CEP, uma adaptação do método G3(MP2)//B3 com pseudopotenciais do tipo CEP.³¹ A sigla B3 indica que as geometrias foram otimizadas

em nível B3LYP/CEP-P31G(d), obtidas através de funções de polarização contendo 6d e 7f primitivas. As geometrias otimizadas são posteriormente empregadas nas outras etapas de cálculo. Os cálculos das frequências vibracionais são realizados no mesmo nível de teoria e função de base utilizados na etapa de otimização de geometria.

A energia final calculada pelo método G3(MP2)//B3-CEP pode ser representada pela equação 6:

$$E_{final} = E_{ref.} + \Delta E_{base} + E_{HLC} + E_{SO} \quad [6]$$

A energia de referência possui a forma $E_{ref.} = E_{QCISD(T)/CEP-P31G(d)}$, enquanto a correção de base large é expressa por, $\Delta E_{base} = E_{MP2/CEP-G3MP2Large} - E_{MP2/CEP-P31G(d)}$. Os cálculos $E_{QCISD(T)/CEP-P31G(d)}$ e $E_{MP2/CEP-P31G(d)}$ são realizados a partir de funções de polarização contendo 6d e 7f primitivas, enquanto o cálculo $E_{MP2/CEP-G3MP2Large}$ é realizado com funções de polarização contendo 5d e 7f primitivas.

As funções de base CEP – G3MP2Large e CEP – P31G(d) são adaptações das funções G3MP2Large e 6-31G(d) realizadas por Murilo *et. al.*³¹ A letra P, presente na nomenclatura da base CEP – P31G(d) indica que a base é originalmente uma base de Pople, enquanto o CEP, indica que as seis primeiras funções correspondentes ao caroço eletrônico foram removidas.

O método G3(MP2)//B3-CEP não inclui explicitamente as correções, $\Delta E_{Correlacão}$, ΔE_{Difusa} e $\Delta E_{Polarização}$. A correção E_{SO} é derivada de resultados experimentais e apresentam incertezas inferiores a 1,0 kcal mol⁻¹, para alguns elementos esta correção é obtida através de cálculos de alto nível. Em todos os casos, os valores atribuídos a esta correção podem ser encontrados na literatura.¹¹

A correção E_{HLC} , por sua vez, possuí como base quatro parâmetros, presentes na Tabela 1.

Tabela 1. Parâmetros HLC otimizados para o método G3(MP2)//B3-CEP.

Parâmetros (mE _H)	
A	10,325
B	5,307
C	10,767
D	2,376

Para moléculas a correção é definida por: $E_{HLC} = -A\eta\beta - B(n_\alpha - n_\beta)$ e para átomos $E_{HLC} = -Cn_\beta - D(n_\alpha - n_\beta)$, sendo n_α o número de elétrons de valência com spin alfa e n_β elétrons de valência com spin beta. As constantes são as mesmas independentemente dos átomos ou moléculas ao qual a correção é aplicada.

3.3 Entalpia de Formação.

A entalpia de formação foi calculada empregando-se a Lei de Hess. O procedimento empregado na sua obtenção pode ser expresso através de uma sequência de equações bem conhecidas na literatura.⁷

A sequência de equações apresentada por Curtiss *et. al.*⁷ inicia-se através da energia de atomização:

$$D_0 = \sum x E_{átomos} - E_{molécula} - E_{zpe} \quad [7]$$

Sendo $\sum x E_{átomos}$, o somatório das energias de cada átomo presentes na molécula, $E_{molécula}$ é a energia da molécula e E_{zpe} corresponde à energia do ponto-zero, retirada dos cálculos de frequência vibracional.

Com base na energia de atomização, pode-se calcular a entalpia de formação na temperatura de 0 K, através da equação:

$$\Delta_f H^0 (0 K, molécula) = \sum x \Delta_f H^0 (0 K, átomos) - D_0 \quad [8]$$

O primeiro termo à direita da igualdade, $\sum x \Delta_f H^0 (0 K, átomos)$, simboliza o somatório das entalpias de formação a 0 K dos elementos químicos a partir do seu estado mais

estável nessa temperatura. Os valores para esse termo são obtidos através de dados experimentais.⁷

Finalmente, a entalpia de formação a 298 K é calculada através de correções térmicas:

$$\begin{aligned}\Delta_f H^0 (298 \text{ K}, \text{moléc.}) &= [9] \\ &= \Delta_f H^0(0\text{K}, \text{moléc.}) + [H^o(298 \text{ K}) - H^o(0 \text{ K})]_{\text{molécula}} \\ &\quad - \sum x[H^o(298 \text{ K}) - H^o(0 \text{ K})]_{\text{atomos}}\end{aligned}$$

O termo $[H^o(298 \text{ K}) - H^o(0 \text{ K})]_{\text{atomos}}$ na equação 9 é a correção térmica da entalpia para os elementos, também obtido experimentalmente.⁷ O termo $[H^o(298 \text{ K}) - H^o(0 \text{ K})]_{\text{molécula}}$ é obtido a partir da energia de ponto-zero e do termo H_{corr} , denominado “correção térmica da entalpia”, também fornecido pelo cálculo de frequência:

$$[H^o(298 \text{ K}) - H^o(0 \text{ K})]_{\text{molécula}} = H_{corr} - E_{zpe} \quad [10]$$

O termo H_{corr} envolve contribuições de movimento das energias translacionais, vibracionais, rotacionais e eletrônica, além da constante de Boltzmann e da temperatura, podendo ser determinado através da equação 11:

$$H_{corr} = E_{eletr} + E_{vib} + E_{rot} + E_{trans} + k_b T \quad [11]$$

Sendo as contribuições: E_{eletr} , relativa ao estado eletrônico, E_{vib} , relativa aos modos vibracionais, E_{rot} , relativa ao movimento rotacional e E_{trans} , relativa a contribuição do movimento translacional. As equações para determinação destas contribuições são provenientes da termodinâmica estatística.³²

A contribuição da energia eletrônica E_{eletr} é obtida através da função de partição eletrônica:

$$q_e = \omega_0 + \omega_1 e^{-\Delta\varepsilon_1/k_B T} + \omega_2 e^{-\Delta\varepsilon_2/k_B T} + \dots \quad [12]$$

Em que ω_n é a degenerescência do nível de energia e $\Delta\varepsilon_n$ é a diferença de energia do nível n em relação ao estado fundamental.

Os cálculos empregados assumem que a diferença entre a energia do estado fundamental e estados excitados são muito maiores que $k_B T$. Portanto, a distribuição de energias se concentra essencialmente no estado fundamental em temperaturas convencionais, ou seja:

$$q_e = \omega_0 \quad [13]$$

Para a contribuição da energia vibracional E_{vib} , tem-se que:

$$E_{vib} = R \sum_K \Theta_{v,k} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\Theta_{v,k}/T} - 1} \right) \quad [14]$$

sendo $\Theta_{v,k}/2$ equivalente a energia de ponto zero.

Tanto a contribuição rotacional quanto a contribuição translacional são obtidas através da mesma equação³²:

$$E_{rot,trans} = \frac{3}{2} RT \quad [15]$$

3.4 Avaliação do efeito da etapa de otimização de geometria e frequência nos resultados de entalpia de formação.

Utilizou-se diferentes níveis de teoria junto com funções de base de tamanhos variados na etapa de otimização de geometria e cálculo de frequência para avaliar o erro médio absoluto das moléculas do grupo G3/05.

Foram usados 20 modelos de otimização, a geometria obtida através destes 20 modelos foi empregada nas etapas subsequentes de cálculo de energia do método

G3(MP2)//B3-CEP, mantidas idênticas ao método original. Cálculos de frequência foram realizados com os mesmos níveis de teoria e funções de base empregadas na etapa de otimização de geometria, ou seja, alterações foram realizadas nas duas etapas simultaneamente.

A diferença entre os erros do grupo G3/05 do método original e dos modelos criados torna possível a avaliação da influência desta etapa para cada molécula. Foram empregados 5 níveis de teoria, cada um denominado por letras distintas (Modelos A, B, C, D e E) testados igualmente com quatro tipos de conjuntos de base (CEP-P31G(d), CEP-P311++G(2df,p), CEP-P311++(3df,2pd) e CEP-aug-cc-pvDz).

Os conjuntos de base de Pople foram adaptadas ao pseudopotencial CEP através da remoção das primeiras 6 primitivas dos orbitais s de cada átomo do grupo G3/05.

A base aug-cc-pvDz, por sua vez, foi adaptada seguindo o método da Coordenada Geradora, a adaptação foi relatada na sessão 3.1. Esta base foi escolhida por ter apresentado o menor erro relativo à sua base original. A Tabela 2 apresenta os níveis de teoria e funções de base empregadas.

Tabela 2. Modelos de otimização de geometria e cálculo de frequência aplicados ao grupo G3/05 para cálculo de entalpia de formação através do método G3(MP2)//B3CEP.

Modelo	Nível de Cálculo	Função de Base
1A	B3LYP	CEP-31G(d)
1B	MP2	
1C	M06	
1D	B2PLYP	
1E	SOGGA11X	
2A	B3LYP	CEP-311++G(2df,p)
2B	MP2	
2C	M06	
2D	B2PLYP	
2E	SOGGA11X	
3A	B3LYP	CEP-311++G(3df,2pd)
3B	MP2	
3C	M06	
3D	B2PLYP	
3E	SOGGA11X	
4A	B3LYP	CEP-aug-cc-pVDZ
4B	MP2	
4C	M06	
4D	B2PLYP	
4E	SOGGA11X	

3.5 Avaliação do efeito dos fatores de escalamento vibracionais nos resultados de entalpia de formação.

As frequências vibracionais e a energia de ponto zero foram calculadas harmonicamente em nível B3LYP/CEP-31G(d) através de dezessete fatores de escalamento distintos, de 0,86 a 1,02. Identificou-se o fator de escalamento vibracional que fornece o menor erro absoluto para cada uma das 248 moléculas do grupo G3/05 e determinou-se o erro médio absoluto obtido destes fatores.

Todos os cálculos foram realizados com o programa Gaussian 09³³ e a energia do ponto zero e efeitos térmicos foram determinados utilizando-se a palavra-chave “Scale” com o respectivo parâmetro de escalamento.

4. Resultados e Discussão.

4.1 Adaptação de bases contraídas de Dunning à pseudopotenciais do tipo CEP.

As funções peso dos orbitais s e p de átomos do terceiro período proporcionam um perfil de suas distribuições eletrônicas no espaço dos expoentes das funções de base. A Figura 1 mostra a representação dos orbitais s e p do átomo de Silício, em função dos expoentes α igualmente espaçados logaritmicamente de uma função 26s19p.

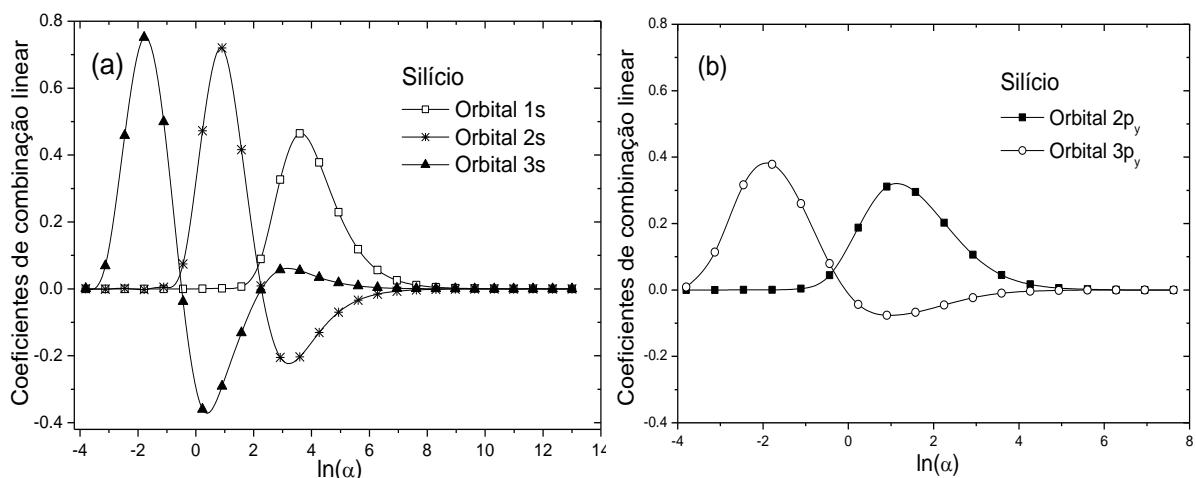


Figura 1. Orbitais s e p do átomo de Silício gerados por função gaussiana 26s19p.

É visível a maior dependência dos orbitais de valência aos valores mais negativos de $\ln(\alpha)$, enquanto os orbitais do caroço eletrônico são bem definidos por expoentes maiores. O orbital 3s do átomo de silício possuí coeficientes maiores no intervalo $-3,8 < \ln(\alpha) < 5$, enquanto para os orbitais 2s e 1s coeficientes com mais peso se encontram nos intervalos $-0,4 < \ln(\alpha) < 7$. O mesmo padrão é verificado para os orbitais do tipo p, o orbital de valência 3p_y encontra-se em intervalos de alfa menores, entre $-3,8 < \ln(\alpha) < 4$, enquanto o orbital 2p_y está localizado em regiões maiores de alfa, $-1,0 < \ln(\alpha) < 5$. Essas relações indicam que quanto mais próximo o orbital se encontra do núcleo atômico, maiores são seus coeficientes em valores maiores de alfa.

A Figura 2 apresenta apenas as funções peso de orbitais p de valência de átomos do segundo e terceiro período. Nota-se correlações de acordo com a periodicidade dos átomos tanto no perfil das curvas quanto na posição dos picos máximos.

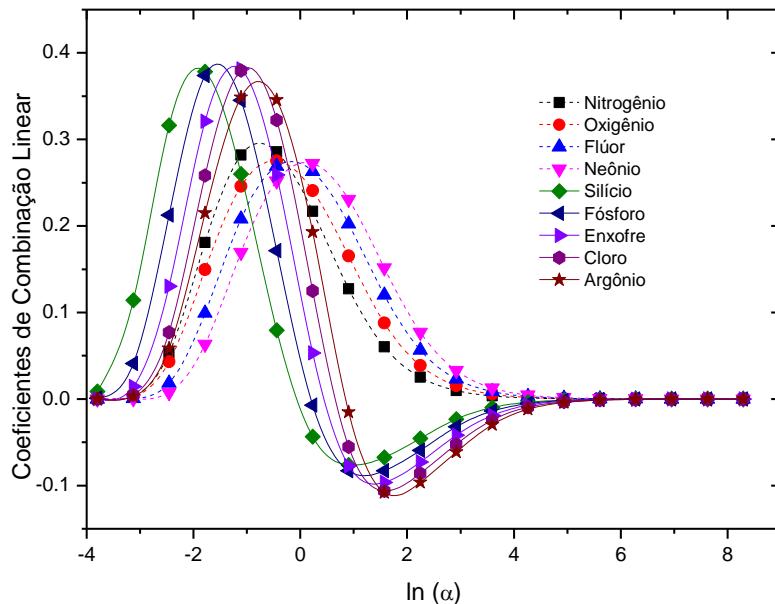


Figura 2. Funções peso dos orbitais p de valência geradas a partir de uma função 26s19p para átomos do segundo e terceiro período.

Funções peso dos orbitais p de valência de átomos do segundo período apresentam coeficientes maiores em valores maiores de $\ln(\alpha)$, quando comparadas as funções pesos dos átomos do terceiro período. Além disso, observa-se deslocamentos entre os coeficientes de combinação linear máximos para átomos de um mesmo período, átomos com raios atômicos maiores apresentam coeficientes de combinação linear máximos em regiões menores de $\ln(\alpha)$.

A adaptação das funções de bases contraídas foi realizada analisando-se os expoentes onde a função peso do orbital de valência começa a ter coeficientes próximos a zero. As funções com expoentes maiores que estes são removidos da base a ser adaptada.

Cálculos com pseudopotenciais alteram o perfil das funções peso. Para que a adaptação das funções de bases seja condizente com este efeito optou-se pela obtenção a partir de cálculos com pseudopotenciais.

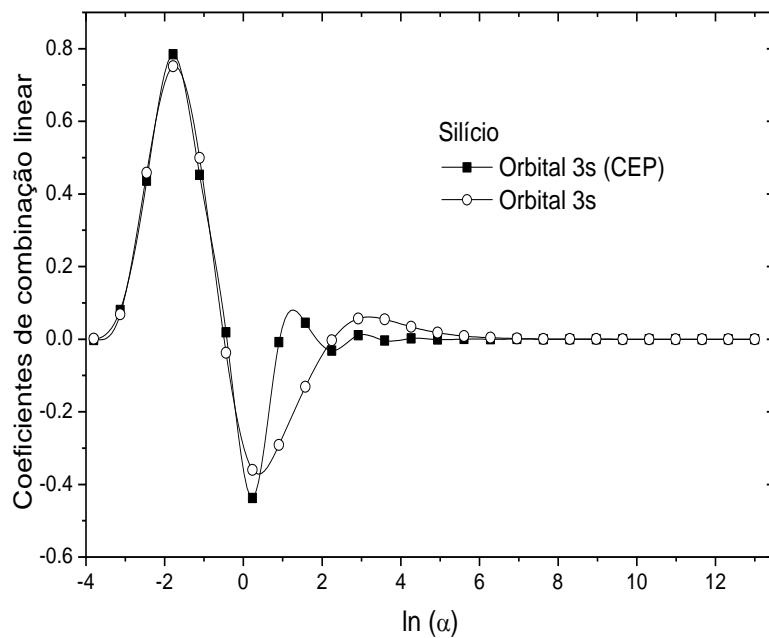


Figura 3. Função peso do orbital 3s do átomo de silício obtido a partir de cálculo com e sem pseudopotencial (CEP).

São observadas pequenas flutuações onde as funções peso obtidas por pseudopotenciais começam a tender a coeficientes nulos. Estas flutuações podem ser decorrentes da remoção dos orbitais do caroço. Além disso, a função passa a ter coeficientes constantes em expoentes menores, quando comparada ao perfil obtido para o cálculo sem pseudopotencial.

Comportamento análogo foi identificado através da utilização da Matriz Densidade. Nota-se que as curvas presentes na Figura 4 apresentam características semelhantes aos perfis das funções peso apresentadas nas Figuras 1 e 3.

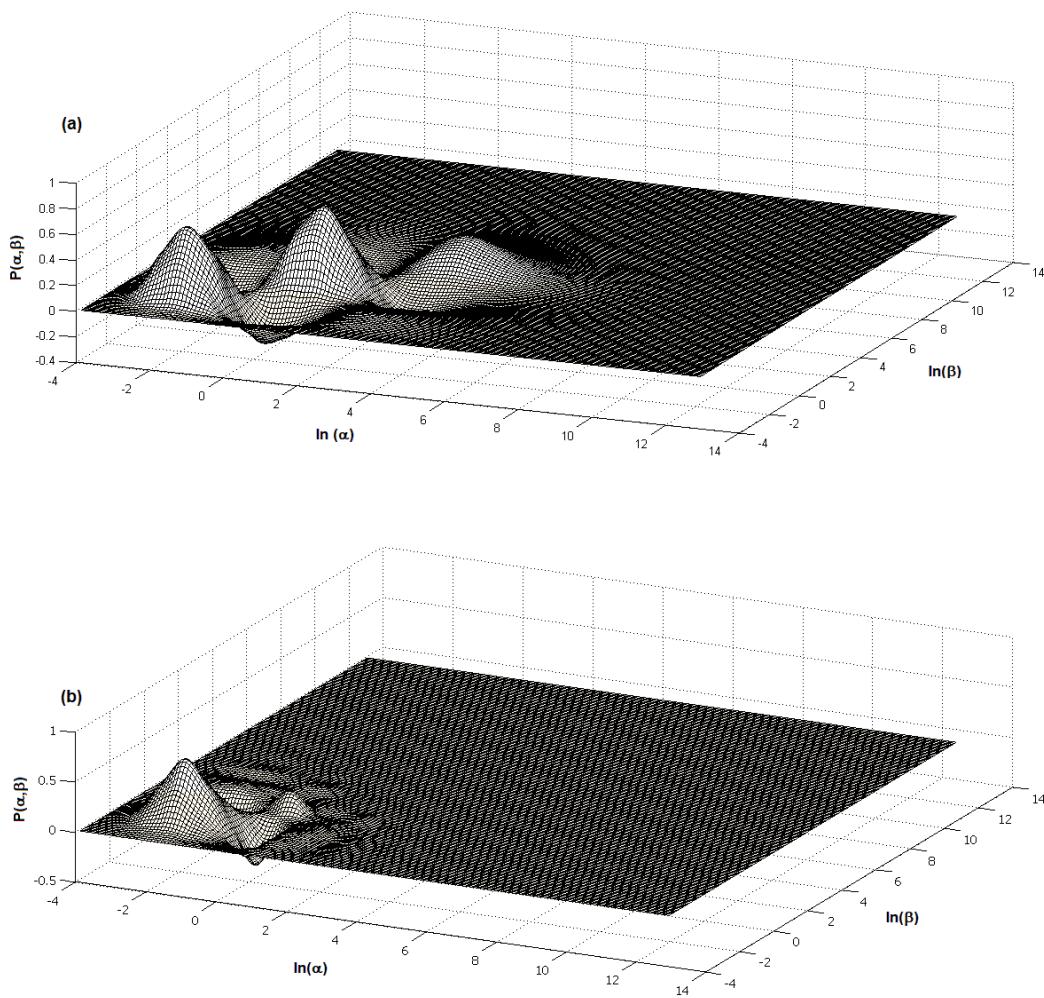


Figura 4. Perfis obtidos através da matriz de densidade dos orbitais s do átomo de silício. (a) orbitais 1s, 2s e 3s, (b) orbital 3s calculado com pseudopotencial.

Comparações entre as Figuras 1a e 4a indicam semelhanças entre os perfis apresentados. Ambas as Figuras possuem intersecções nos eixos $\ln(\alpha)$ em regiões próximas, dessa forma, pode-se identificar os expoentes para realização dos cortes através dos dois métodos.

Para determinação dos coeficientes de combinação linear utilizados na adaptação, optou-se pelo emprego do método da coordenada geradora. O gráfico da Figura 3 foi obtido para todos os átomos do segundo e terceiro período e para o átomo de bromo. Registrhou-se na Tabela 3 os expoentes próximos às regiões onde as funções peso dos orbitais de valência começam a se tornar constantes.

Tabela 3. Expoentes α adquiridos a nível Hartree-Fock com base 26s19p, a partir de método de Matriz de Densidade e Coordenada Geradora.

Orbitais s			Orbitais p		
Átomos	$\ln(\alpha)$	α	Átomos	$\ln(\alpha)$	α
Li	0,9	2,5	Li	-	-
Be	1,6	4,9	Be	-	-
B	3,6	36,2	B	2,2	9,0
C	3,6	36,2	C	2,9	18,2
N	4,3	70,8	N	2,9	18,2
O	4,3	70,8	O	2,9	18,2
F	4,9	139,8	F	3,6	36,6
Ne	4,9	139,8	Ne	3,6	36,6
Na	0,9	2,5	Na	-	-
Mg	2,5	12,2	Mg	-	-
Al	1,8	6,0	Al	2,3	10,0
Si	2,3	10,0	Si	2,9	18,2
P	4,3	70,8	P	3,6	36,6
S	3,2	24,5	S	2,9	18,2
Cl	3,3	27,1	Cl	3,7	40,4
Ar	3,8	44,7	Ar	3,7	40,4
Br	3,6	36,6	Br	2,3	10,0

Estes expoentes foram aplicados nas bases contraídas de Dunning, aug-cc-pvNz ($N=D,T,Q,5$). Funções com expoentes superiores aos presentes na Tabela 3 foram removidos do conjunto dessas bases.

A Tabela 4 mostra um exemplo da adaptação da função aug-cc-pvTz do átomo de silício. Cada orbital é representado por duas colunas, a primeira, corresponde aos expoentes α das funções gaussianas, a segunda, referente aos coeficientes de combinação linear dos orbitais atômicos gerados pelos expoentes da função.

Tabela 4. Adaptação de função de base aug-cc-pvTz do átomo de Silício ao pseudopotencial CEP pelo método da Coordenada Geradora e Matriz de Densidade.

<i>Expoentes de função de onda de orbitais s para função de base aug-cc-pvTz modelo completo,</i>						
Orbital 1s			Orbital 2s		Orbital 3s	
S 15 1,00			S 15 1,00		S 15 1,00	
2,549000E+05	6,251010E-05		2,549000E+05	-1,663700E-05	2,549000E+05	4,262570E-06
3,819000E+04	4,855530E-04		3,819000E+04	-1,293100E-04	3,819000E+04	3,310620E-05
8,690000E+03	2,545160E-03		8,690000E+03	-6,788280E-04	8,690000E+03	1,740150E-04
2,462000E+03	1,058660E-02		2,462000E+03	-2,841170E-03	2,462000E+03	7,275740E-04
8,048000E+02	3,687870E-02		8,048000E+02	-1,005510E-02	8,048000E+02	2,583330E-03
2,913000E+02	1,074790E-01		2,913000E+02	-3,057740E-02	2,913000E+02	7,863540E-03
1,136000E+02	2,479360E-01		1,136000E+02	-7,772560E-02	1,136000E+02	2,021550E-02
4,675000E+01	3,909270E-01		4,675000E+01	-1,542360E-01	4,675000E+01	4,073200E-02
1,982000E+01	3,020260E-01		1,982000E+01	-1,803680E-01	1,982000E+01	4,993580E-02
7,708000E+00	5,592360E-02		7,708000E+00	7,982180E-02	7,708000E+00	-2,493960E-02
3,340000E+00	-4,024060E-03		3,340000E+00	5,474410E-01	3,340000E+00	-1,903500E-01
1,402000E+00	2,580300E-03		1,402000E+00	4,801190E-01	1,402000E+00	-3,183500E-01
4,387000E-01	-1,038210E-03		4,387000E-01	4,748460E-02	4,387000E-01	9,480360E-02
2,070000E-01	6,079300E-04		2,070000E-01	-1,069960E-02	2,070000E-01	6,811800E-01
7,944000E-02	-1,540220E-04		7,944000E-02	2,198710E-03	7,944000E-02	3,956720E-01

<i>Expoentes de função de onda de orbitais s para função de base aug-cc-pvTz modelo adaptado,</i>						
Orbital 1s			Orbital 2s		Orbital 3s	
S 7 1,00			S 7 1,00		S 7 1,00	
1,982000E+01	3,020260E-01		1,982000E+01	-1,803680E-01	1,982000E+01	4,993580E-02
7,708000E+00	5,592360E-02		7,708000E+00	7,982180E-02	7,708000E+00	-2,493960E-02
3,340000E+00	-4,024060E-03		3,340000E+00	5,474410E-01	3,340000E+00	-1,903500E-01
1,402000E+00	2,580300E-03		1,402000E+00	4,801190E-01	1,402000E+00	-3,183500E-01
4,387000E-01	-1,038210E-03		4,387000E-01	4,748460E-02	4,387000E-01	9,480360E-02
2,070000E-01	6,079300E-04		2,070000E-01	-1,069960E-02	2,070000E-01	6,811800E-01
7,944000E-02	-1,540220E-04		7,944000E-02	2,198710E-03	7,944000E-02	3,956720E-01

Apenas sete funções da base original do silício foram mantidas, a função com expoente 19,82 foi conservada pois, segundo a Tabela 3, o valor de α para o átomo de silício é equivalente a 10, que se encontra no intervalo entre 7,708 e 19,82.

O mesmo procedimento de adaptação foi empregado para todos os outros átomos, em todas as bases aug-cc-pvNz (N= D, T, Q, 5), tanto para os expoentes s quanto para os expoentes p das funções.

Para avaliar o erro implícito à adaptação, calculou-se a entalpia de formação de 24 moléculas utilizando o funcional B3LYP, os valores de entalpia obtidos foram comparados com os resultados calculados através das funções de base completas. Os erros absolutos em kcal mol⁻¹ estão presentes na Tabela 5.

Tabela 5. Erros absolutos entre valores teóricos de entalpia de formação (kcal mol^{-1}).
Sendo $\Delta H_{\text{pvNz}} = (|H_{\text{base pvNz}} - H_{\text{base pvNz adaptada}}|)$.

Moléculas	ΔH_{pvDz}	ΔH_{pvTz}	ΔH_{pvQz}	ΔH_{pv5z}
SiF_4	0,7	1,5	2,0	1,2
PF_5	2,2	0,4	1,0	1,9
C_2F_6	0,2	2,5	2,4	2,8
Al_2Cl_6	0,5	5,2	10,1	2,8
SiCl_4	0,4	2,3	5,4	2,0
$\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_2$	1,6	1,0	4,4	4,7
$\text{N}(\text{CH}_3)_3$	1,0	0,2	2,6	2,6
SCl_2	0,1	0,4	2,2	1,4
HCN	0,6	0,3	0,8	0,9
SiH_2	0,5	1,3	1,6	0,3
S_2	0,2	0,3	1,8	0,8
Na_2	0,0	0,2	0,2	0,0
PH_3	0,2	0,7	1,3	0,6
CCl_4	0,2	0,1	3,2	2,8
C_4H_{10}	0,7	0,4	3,0	2,8
SO_2	0,5	0,0	0,2	1,8
BCl_3	0,0	1,2	2,7	2,0
$\text{CH}_3\text{-CO-CH}_2\text{-CH}_3$	1,0	0,1	3,4	3,4
NaCl	0,1	0,9	0,9	0,3
$\text{C}(\text{CH}_3)_4$	0,9	0,5	3,8	3,5
BeF_2	0,1	0,2	1,2	0,7
BF_3	0,1	0,9	0,7	1,0
LiF	0,5	0,3	0,3	0,2
LiNa	0,0	0,2	0,1	0,0
Média de Erros	0,5	0,9	2,3	1,6

As funções de base aug-cc-pvDz e aug-cc-pvTz adaptadas apresentaram os menores erros médios absolutos em relação ao cálculo de entalpias com as funções de base completas. Portanto, não houve uma diminuição significativa do desempenho destas funções causada pela adaptação ao pseudopotencial CEP.

O mesmo pode ser notado com relação a base aug-cc-pv5z. A função de base original possui o maior número de funções por orbital atômico entre as outras funções de base, sendo 20 para cada orbital s de átomos do terceiro período e 14 funções para orbitais s de átomos do segundo período. Após a adaptação, as funções do tipo s mantiveram de 7 a 10 expoentes dependendo do átomo. Foram aproximadamente 50% de expoentes s removidos para átomos do terceiro período e aproximadamente 30% para átomos do segundo período. O erro médio absoluto gerado pela adaptação gerou um erro de $1,6 \text{ kcal mol}^{-1}$.

Para as bases aug-cc-pvDz e aug-cc-pvTz, no entanto, foram aproximadamente 40% e 50% de expoentes s removidos, com erros de 0,5 kcal mol⁻¹ e 0,9 kcal mol⁻¹ em relação ao cálculo realizado com as bases originais.

A base aug-cc-pvQz, entretanto, não apresentou resultados satisfatórios inicialmente quando comparada as outras três bases. Foram removidos aproximadamente 50% das funções s de átomos do terceiro período e aproximadamente 30% das funções s de átomos do segundo período, o erro médio absoluto obtido a partir da adaptação foi de 5,9 kcal mol⁻¹. Na tentativa de diminuição dos erros, propôs-se um novo modelo de corte, baseado nos coeficientes de combinação com valores menores localizados nos expoentes remanescentes ao corte proposto inicialmente.

O primeiro teste foi a remoção completa de todas as funções do orbital 1s dos átomos do terceiro período, as funções dos outros orbitais foram mantidas seguindo a metodologia inicial de adaptação, cortando apenas funções com expoentes maiores do que os mostrados na Tabela 5. Esta metodologia gerou um erro médio absoluto inferior ao inicial de 3,6 kcal mol⁻¹.

Para as bases aug-cc-pvDz e aug-cc-pvTz, entretanto, a remoção completa das funções dos orbitais 1s de átomos do terceiro período provocou aumento nos erros médios absolutos, principalmente para a base aug-cc-pvTz, o erro médio inicial de 0,9 kcal mol⁻¹ foi elevado à 8,4 kcal mol⁻¹. A base aug-cc-pv5z, entretanto, seguiu o mesmo comportamento da base aug-cc-pvQz, diminuindo seu erro de 1,6 kcal mol⁻¹ para 1,2 kcal mol⁻¹.

Apesar da diminuição dos erros médios absolutos apresentados pela nova adaptação base aug-cc-pvQz, optou-se por uma nova alternativa de adaptação. Manteve-se um expoente a mais para cada grupo de funções dos orbitais s em cada átomo utilizado. O aumento desses expoentes para cada átomo, mais a remoção completa de funções do orbital 1s dos átomos do terceiro período diminuiu o erro médio absoluto da base para 2,3 kcal mol⁻¹.

A base aug-cc-pvQz mostra grande sensibilidade às adaptações. Utilizou-se a molécula SiCl₄ para observar o efeito da remoção dos expoentes desta base nos erros de entalpia de formação.

Conservou-se o corte tradicional para o átomo de silício. Removeu-se uma a uma as funções s do átomo de cloro, simultaneamente para o orbital 1s, 2s e 3s. Após

cada remoção, calculou-se a entalpia de formação. Os erros obtidos atrelados a cada remoção de expoente estão na Tabela 6.

A primeira linha da tabela indica o resultado obtido através do conjunto de base completo da base aug-cc-pvQz para o átomo de cloro, porém, com o conjunto adaptado do átomo de Silício. A linha dois, mostra o erro relacionado a remoção da função do expoente 8.349000E+05 da função de base do átomo de cloro dos orbitais 1s, 2s e 3s.

A coluna (a) conta com a remoção das funções dos orbitais p, tanto do átomo de cloro quanto do átomo de Si, de acordo com a metodologia de adaptação proposta pela Tabela 5, enquanto os erros da coluna (b) foram obtidos sem a remoção de nenhuma função dos orbitais p.

Tabela 6. Expoentes dos orbitais s do átomo de Cloro e erros na entalpia de formação implícitos em suas remoções, em relação ao cálculo com a base completa.

Expoentes Orbitais 1s, 2s e 3s	ΔH (kcalmol ⁻¹) ^(a)	ΔH (kcalmol ⁻¹) ^(b)
8,349000E+05	5,3	5,2
1,250000E+05	4,0	4,0
2,843000E+04	4,0	4,0
8,033000E+03	4,1	4,1
2,608000E+03	4,3	4,4
9,339000E+02	5,1	5,2
3,600000E+02	7,3	7,4
1,470000E+02	12,3	12,3
6,288000E+01	13,6	13,6
2,760000E+01	13,3	13,4
1,108000E+01	-	-
5,075000E+00	-	-
2,278000E+00	-	-
7,775000E-01	-	-
3,527000E-01	-	-
1,431000E-01	-	-

(a) Com expoentes p removidos.

(b) Sem expoentes p removidos.

A comparação das colunas (a) e (b) indica que a remoção dos orbitais p não influencia de forma significativa nos erros obtidos para a base aug-cc-pvQz. Esse resultado é esperado, pois poucas funções p são removidas pela adaptação. Em geral, apenas 25% das funções são retiradas para os átomos do terceiro período.

Utilizando como parâmetro a coluna (a), a primeira linha da tabela mostra que 5,3 kcal mol⁻¹ de erro estão atrelados apenas a adaptação do átomo de silício, pois nenhuma função do átomo de cloro havia sido removida. Ao remover a primeira função

do átomo de Cloro (linha 2) houve uma diminuição do erro para 4,0 kcal mol⁻¹. Esse resultado se manteve estável até a remoção da quarta função. Em seguida, houve um aumento abrupto dos erros. Este aumento próximo ao valor proposto de corte justificou a necessidade de aperfeiçoamento da adaptação da função aug-cc-pvQz.

As funções de base aug-cc-pvDz e aug-cc-pvTz mostraram os melhores resultados com relação à adaptação. A função de base aug-cc-pvDz foi escolhida para utilização nos próximos tópicos do trabalho no formato CEP-aug-cc-pvDz.

4.2 Influência da variação da etapa de otimização de Geometria no cálculo de entalpia de formação do grupo G3/05.

A variação da etapa de otimização de geometria e frequência através dos modelos citados na Tabela 2 permitiu a avaliação dos erros das moléculas do Grupo de teste G3/05 frente a alteração destas etapas. A Tabela 7 mostra um exemplo das moléculas que sofreram menor e maior alteração frente ao emprego de diferentes modelos. O conteúdo completo da Tabela 7 está presente no Anexo I, na sessão de anexos, juntamente com o conjunto completo de moléculas do grupo G3/05 e os erros obtidos através de todos os modelos testados.

Os números 1, 2, 3 e 4 se referem aos modelos com funções de base CEP-31G(d), CEP-311++G(2dp), CEP-311++G(3df,2pd) e CEP-aug-cc-pvDz, respectivamente. Enquanto as letras A, B, C, D e E representam os cálculos realizados a partir dos níveis de teoria B3LYP, MP2, M06, B2PLYP e SOGGA11X. Todos os cálculos foram realizados empregando o fator de escalamento 1,00 para que as comparações incluam apenas os efeitos relativos das etapas de otimização de geometria e frequência.

Tabela 7. Erros (kcal mol⁻¹) obtidos pelo método G3(MP2)//B3CEP através de diferentes modelos de otimização e frequência.

Moléculas	1A	1B	1C	1D	1E	2A	2B	2C	2D	2E	3A	3B	3C	3D	3E	4A	4B	4C	4D	4E	σ
NaCl	0,5	0,5	0,6	0,5	0,5	0,7	0,6	0,7	0,7	0,7	0,7	0,7	0,7	0,7	0,7	0,5	0,5	0,5	0,5	0,1	
HCl	-0,6	-0,7	-0,6	-0,6	-0,7	-0,5	-0,6	-0,5	-0,5	-0,6	-0,4	-0,6	-0,4	-0,5	-0,5	-0,5	-0,5	-0,5	-0,5	0,1	
CH	1,8	1,6	2,0	1,8	1,7	1,9	1,7	1,9	1,8	1,8	1,9	1,7	1,9	1,8	1,8	1,8	1,7	1,7	1,8	0,1	
BF ₃	-3,2	-3,3	-3,4	-3,2	-3,5	-3,3	-3,4	-3,5	-3,3	-3,5	-3,3	-3,3	-3,5	-3,3	-3,6	-3,4	-4,0	-3,2	-3,5	-3,2	0,2
CBrCl ₃	0,8	1,1	1,3	1,1	1,2	1,3	1,5	1,6	1,5	1,4	1,4	1,4	1,6	1,6	1,4	1,3	1,6	1,7	1,5	1,5	0,2
CF ₃ Cl	-0,8	-0,9	-0,9	-0,7	-1,0	-0,5	-0,5	-0,6	-0,4	-0,9	-0,4	-0,5	-0,6	-0,4	-1,1	-0,6	-0,7	-0,5	-0,6	-0,5	0,2
CF ₄	-0,7	-1,0	-0,8	-0,7	-1,0	-0,4	-0,5	-0,6	-0,4	-0,9	-0,3	-0,5	-0,8	-0,4	-1,2	-0,6	-0,9	-0,4	-0,6	-0,5	0,3
C ₄ H ₁₀ (trans-butane)	-4,0	-6,3	-3,3	-5,2	-6,1	-1,9	-3,4	-1,5	-2,7	-3,9	-1,6	-3,1	-0,9	-2,4	-3,6	-2,2	-3,3	-1,8	-2,9	-4,1	1,5
Si(CH ₃) ₄	-8,8	-11,2	-8,0	-9,9	-10,7	-6,5	-7,8	-5,8	-7,2	-8,4	-6,1	-7,6	-5,2	-6,9	-8,0	-6,9	-7,9	-6,5	-7,5	-8,5	1,6
C ₅ H ₁₂ (neopentane)	-5,1	-7,5	-4,7	-6,3	-7,6	-2,6	-4,0	-2,5	-3,4	-4,9	-2,3	-3,6	-1,8	-3,1	-4,7	-3,0	-3,8	-3,1	-3,5	-5,0	1,6
C ₅ H ₁₂ (n-pentane)	-5,0	-7,8	-4,4	-6,4	-7,6	-2,5	-4,2	-2,0	-3,4	-4,9	-2,2	-3,9	-1,3	-3,1	-4,6	-2,9	-4,1	-2,4	-3,6	-5,1	1,8
C ₆ H ₁₄ (methylpentane)	-5,9	-9,1	-4,0	-7,5	-8,9	-2,9	-4,9	-2,0	-3,9	-5,8	-2,6	-4,5	-1,3	-3,6	-5,4	-3,3	-4,7	-2,4	-4,1	-6,0	2,1
C ₇ H ₁₆	-6,5	-10,2	-5,7	-8,4	-10,1	-3,1	-5,3	-2,5	-4,3	-6,5	-2,7	-4,9	-1,6	-3,9	-6,0	-3,6	-5,2	-3,0	-4,6	-6,7	2,4
E.M.A ^(a) (248 moléculas)	2,3	3,0	2,1	2,6	3,2	1,7	2,1	1,6	1,9	2,5	1,6	2,1	1,6	1,8	2,5	2,0	2,2	1,8	2,1	2,5	

(a) E.M.A = Erro Médio Absoluto

Algumas características podem ser discutidas através da Tabela 7. Primeiramente em relação aos erros médios absolutos (E.M.A.) do conjunto total, indicados na última linha da tabela, nota-se que os cálculos com funcional M06 (colunas C) obtiveram os menores E.M.A.s em qualquer um dos conjuntos de função de base. Seguido pelos funcionais B3LYP e B2PLYP. Cálculos em nível MP2 e SOGGA11X apresentaram os E.M.A.s mais elevados dentre os cinco níveis de teoria empregados para todas as funções de base.

Além disso, observa-se que as funções CEP-311++G(2pd) e CEP-311++G(3df,2pd) fornecem os menores erros médios absolutos entre as quatro funções de base testadas.

Nota-se que entre as opções utilizadas, os menores erros foram obtidos pelo cálculo M06/CEP-311++(3df,2pd). Individualmente, os erros na Tabela 7 apresentam maior variação para as moléculas orgânicas. Moléculas como o neopentano (C_5H_{12}) e o trans-butano (C_4H_{10}) apresentaram diminuições de 65% e 78% de seus erros, respectivamente, quando comparados aos resultados gerados pelo Modelo 1A, que representa o modelo de cálculo proposto pelo método original.

A Figura 5 aponta a variação dos erros médios absolutos de entalpia de formação ($kcal\ mol^{-1}$) para os cálculos realizados através do funcional B3LYP em conjunto com as quatro funções de base testadas, para que possam ser feitas comparações entre os erros obtidos por cada uma destas funções. As moléculas do grupo G3/05 foram divididas em cinco categorias diferentes, de acordo com suas estruturas (Moléculas Inorgânicas, Hidrocarbonetos, Hidrocarbonetos Substituídos, Hidretos e Radicais) tornando possível a avaliação da influência para cada um desses grupos.

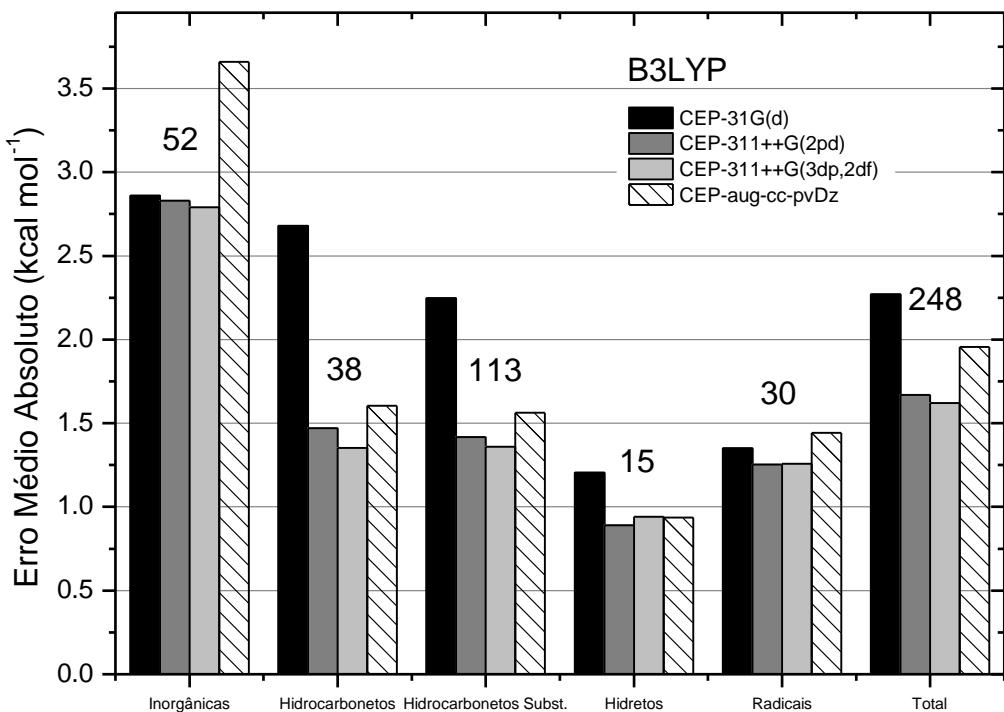


Figura 5. Erros médios absolutos (kcal mol^{-1}) de grupos de moléculas do conjunto G3/05 frente a utilização de diferentes funções de base no cálculo de otimização de geometria e frequência.

Os números presentes acima dos gráficos de barras correspondem ao número de moléculas presentes em cada um dos grupos.

Hidretos e radicais não apresentaram grande alteração nos seus erros quando diferentes funções de base foram empregadas. Moléculas inorgânicas também não demonstraram grande variação dos erros com exceção dos cálculos com a base CEP-aug-cc-pvDz. Nesse caso, nota-se um aumento significativo dos erros. Essa base, portanto, pode não ser indicada para o cálculo de otimização de geometria e frequência de moléculas deste grupo.

Em relação ao conjunto de hidrocarbonetos e hidrocarbonetos substituídos, nota-se reduções de aproximadamente 40% para os hidrocarbonetos e 30% para os hidrocarbonetos substituídos quando outras bases são empregadas no lugar da função de base CEP-31G(d). Essas reduções refletem no erro médio absoluto total. O erro médio absoluto quando CEP-31G(d) é empregada é equivalente a aproximadamente $2,3 \text{ kcal mol}^{-1}$ para o grupo de 248 moléculas. Quando as funções CEP-311++G(3df,2pd) e CEP-311++G(2pd) são utilizadas, os erros obtidos são de aproximadamente $1,5 \text{ kcal mol}^{-1}$. Esse erro é próximo ao gerado pelo método original

com a utilização dos fatores de escalamento vibracionais. Vale ressaltar que nestes exemplos o fator de escalamento vibracional não foi empregado.

A base CEP-aug-cc-pvDz, adaptada neste trabalho, gerou resultados tão bons quanto as funções CEP-311++G(2df) e CEP-311++G(3df,2pd) para os grupos dos radicais, hidretos, hidrocarbonetos e hidrocarbonetos substituídos, podendo ser indicada para utilização nestes casos. Inclusive, no caso dos hidrocarbonetos e hidrocarbonetos substituídos, os erros alcançados estão muito abaixo dos erros gerados pela base CEP-31G(d).

Realizou-se, também, comparações entre os erros gerados pelo funcional B3LYP com os erros adquiridos através dos níveis de teoria MP2, M06, B2PLYP e SOGGA11X. Essas comparações estão expressas na Figura 6. Todos os exemplos foram obtidos pela função CEP-31G(d), para que o único efeito observado fosse o do emprego dos diferentes níveis de teoria.

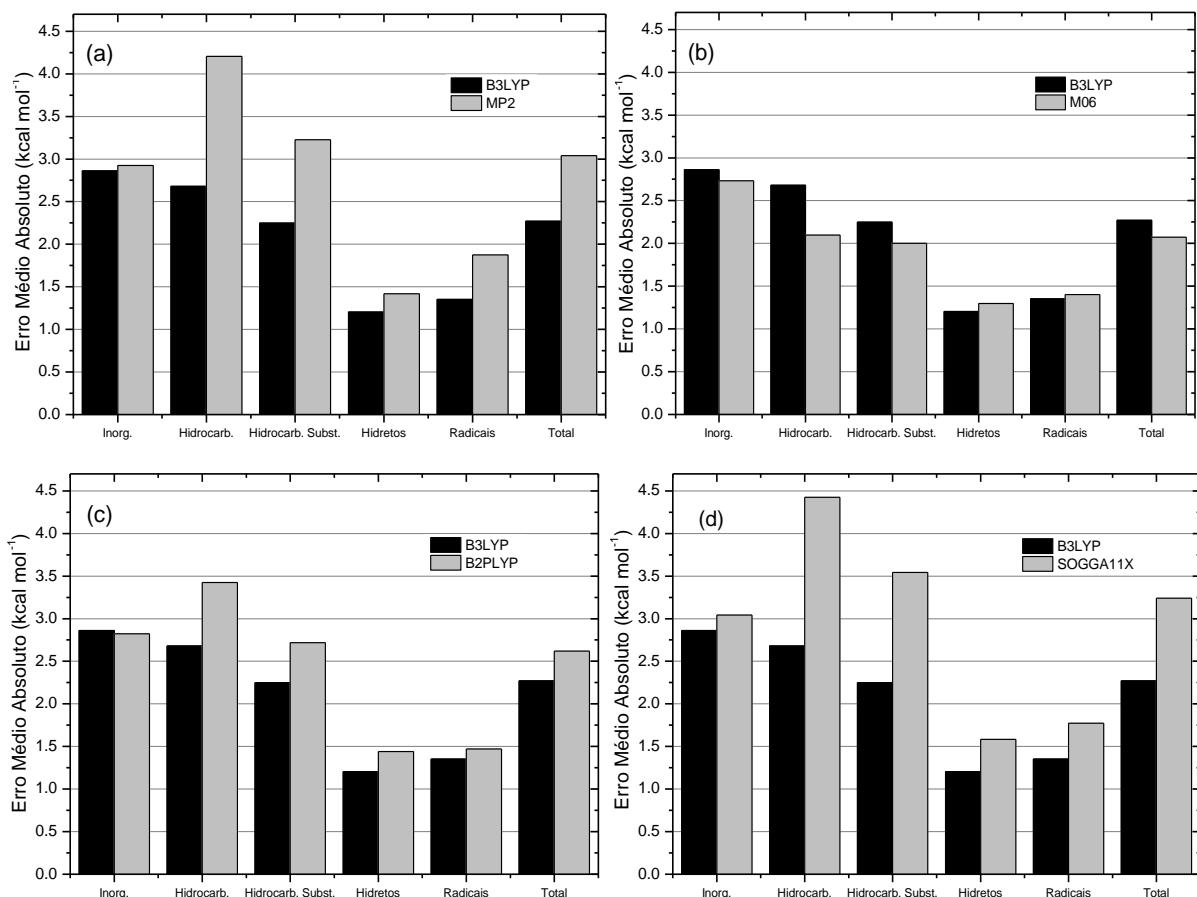


Figura 6. Relação entre erros médios absolutos (kcal mol^{-1}) de grupos do conjunto G3/05 obtidos através do emprego de níveis de teoria distintos.

Os modelos de cálculo em nível MP2, B2PLYP e SOGGA11X mostraram-se inferiores ao funcional B3LYP em todos os conjuntos de moléculas, com exceção dos cálculos de moléculas inorgânicas, onde nota-se uma diminuição pequena dos erros.

O nível MP2 é empregado na etapa de otimização de geometria dos métodos G1, G2, G3 e G3CEP. Nota-se através da Figura 6.a que este nível de teoria apresenta erros superiores ao funcional B3LYP para todos os grupos de moléculas testadas, causando um aumento significativo do erro médio absoluto do conjunto total de 248 estruturas. Esses resultados já poderiam ser esperados, pois trabalhos como os apresentados por Mebel *et al.* relatam que a utilização do nível de teoria MP2 em cálculos de frequência pode ocasionar o surgimento de erros elevados, sendo um dos argumentos utilizados para justificar a procura por novas alternativas de cálculos para essa etapa¹⁴.

O melhor resultado entre todos os modelos pode ser atribuído ao funcional M06, que gerou diminuição dos erros médios absolutos para a maioria dos grupos. Nota-se apenas pequenos aumentos dos erros para o conjunto dos hidretos e radicais. Entretanto, quando o erro médio absoluto do conjunto total é observado, verifica-se que esse aumento não foi suficiente para compensar as diminuições causadas pelos outros grupos.

Tendo em vista que este funcional, junto com a função CEP-3111++G(3df,2pd) forneceram os menores erros médios absolutos, realizou-se um estudo complementar através do fator de escalamento vibracional, para determinar qual fator poderia gerar erros mínimos de entalpia de formação para o conjunto G3/05. Uma análise geral mostra que o menor erro é obtido por um do fator de escalamento muito próximo de 1,00. os erros gerados foram expressos graficamente através da Figura 7.

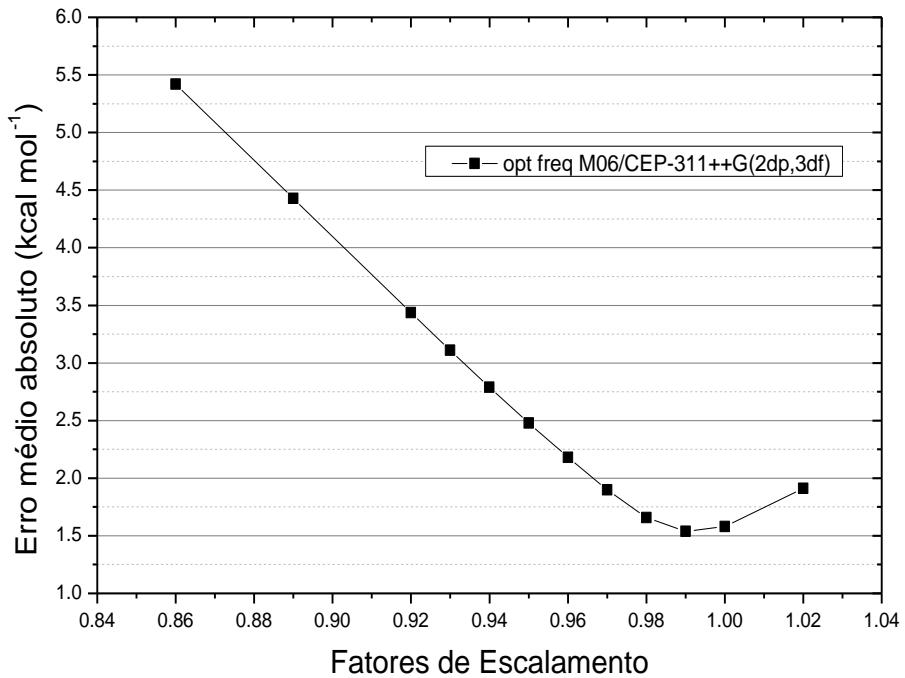


Figura 7. Fatores de escalamento empregados no cálculo de frequência para o modelo de otimização M06/CEP-311++G(3df,2pd).

O erro mínimo próximo ao fator 1,00, quando comparado ao fator 0,96, obtido através do método original, pode indicar que os fatores de escalamento não estão apenas representando os efeitos de anarmonicidade das ligações, mas também as limitações presentes nas teorias empregadas nos cálculos de frequência. Desta forma, quanto melhores são os níveis de teoria e funções de base empregados nestes cálculos, mais próximos de 1,00 são os fatores de escalamento necessários para correção das frequências vibracionais.

O Anexo I contém todos os erros obtidos através de cada modelo de cálculo de otimização de geometria e frequência empregado e está presente na sessão de anexos deste trabalho. Os erros presentes na Tabela S.1 correspondem a todos os erros apresentados graficamente nesta sessão.

4.3 Influências da variação do Fator de Escalamento em moléculas do Grupo G3/05.

A determinação do fator de escalamento apropriado para utilização em cada método composto depende do nível de teoria e da função de base empregada nos cálculos de frequência. Muitos trabalhos na literatura são realizados com a finalidade de determinar quais fatores são mais apropriados para cada nível de teoria.^{19,21}

Todos os resultados apresentados nesta sessão são baseados nos erros expressos no Anexo II contido no final deste trabalho. A Figura 8 mostra o erro médio absoluto de entalpia de formação do grupo G3/05 gerado através da utilização de dezessete fatores de escalação vibracionais (0,86 à 1,02), as entalpias foram calculadas com o método G3(MP2)//B3-CEP.

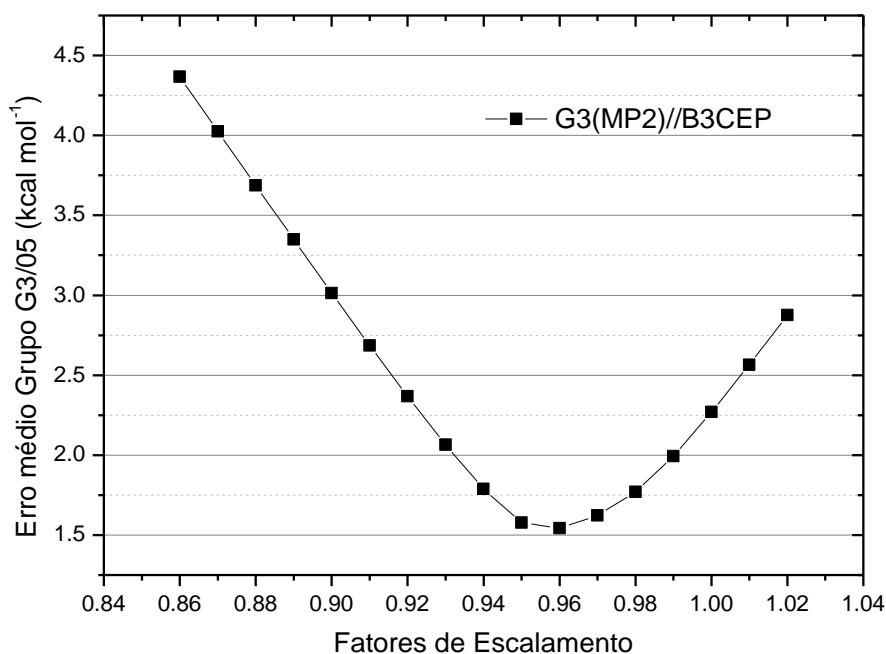


Figura 8. Fatores de escalação empregados no cálculo de frequência para o modelo de otimização B3LYP/CEP-31G(d)

Frequências vibracionais 100% harmônicas, como as obtidas através do fator 1,00, geram um erro de aproximadamente 2,25 kcal mol⁻¹ para as moléculas do grupo G3/05. Com a utilização do fator 0,96 obtém-se um erro de aproximadamente 1,5 kcal mol⁻¹, uma redução de aproximadamente 33,3% do valor encontrado com fator 1,00, sendo o menor erro entre todos os fatores testados.

. A diferença entre as frequências experimentais e harmônicas calculadas teoricamente é atribuída a anarmonicidade característica das vibrações experimentais. Tendo em vista que o fator apropriado, determinado para o método G3(MP2)//B3-CEP, é equivalente a 0,96 e este é o fator que apresenta o erro mínimo de entalpia de formação para o grupo G3/05, como demonstrado através da Figura 8, pode-se dizer que a representação dos efeitos de anarmonicidade provocam, consequentemente, a diminuição dos erros de entalpia de formação.

Entretanto, espera-se que vibrações realizadas por ligações diferentes não apresentem o mesmo caráter anarmônico. Dessa forma, o emprego de um fator de escalamento único para representação do efeito de anarmonicidade de um grupo tão variado de moléculas pode não ser a melhor alternativa.

Trabalhos realizados por Hase *et. al.*^{23,24}, por exemplo, determinam que para uma estrutura molecular podem ser atribuídos diferentes fatores de escalamento. Em seus trabalhos, os fatores de escalamento são atribuídos de acordo com os tipos de ligação e modos vibracionais presentes nas moléculas. Hase *et. al.*^{23,24} determinaram fatores de escalamento para as moléculas de acetamida e tioacetamida que variavam entre 0,70 e 1,20, dependendo dos tipos de ligação e modos vibracionais presentes nestas estruturas.

Realizou-se um estudo dos fatores de escalamento vibracionais para cada molécula do grupo G3/05, com a finalidade de observar quais podem fornecer o menor erro de entalpia de formação para cada molécula individualmente, com o objetivo de minimizar a generalização realizada pelos métodos Gaussian-n, criada pela utilização de apenas um fator de escalamento vibracional.

A Figura 9 mostra o comportamento dos erros de entalpia de formação de seis moléculas de acordo com a utilização de fatores de escalamento distintos. Os erros estão expressos pelo gráfico de barras em kcal mol⁻¹ e foram obtidos em relação aos valores de entalpia experimentais, as energias foram calculadas mantendo-se todas as etapas do método G3(MP2)//B3-CEP originais, com exceção dos fatores de escalamento vibracionais.

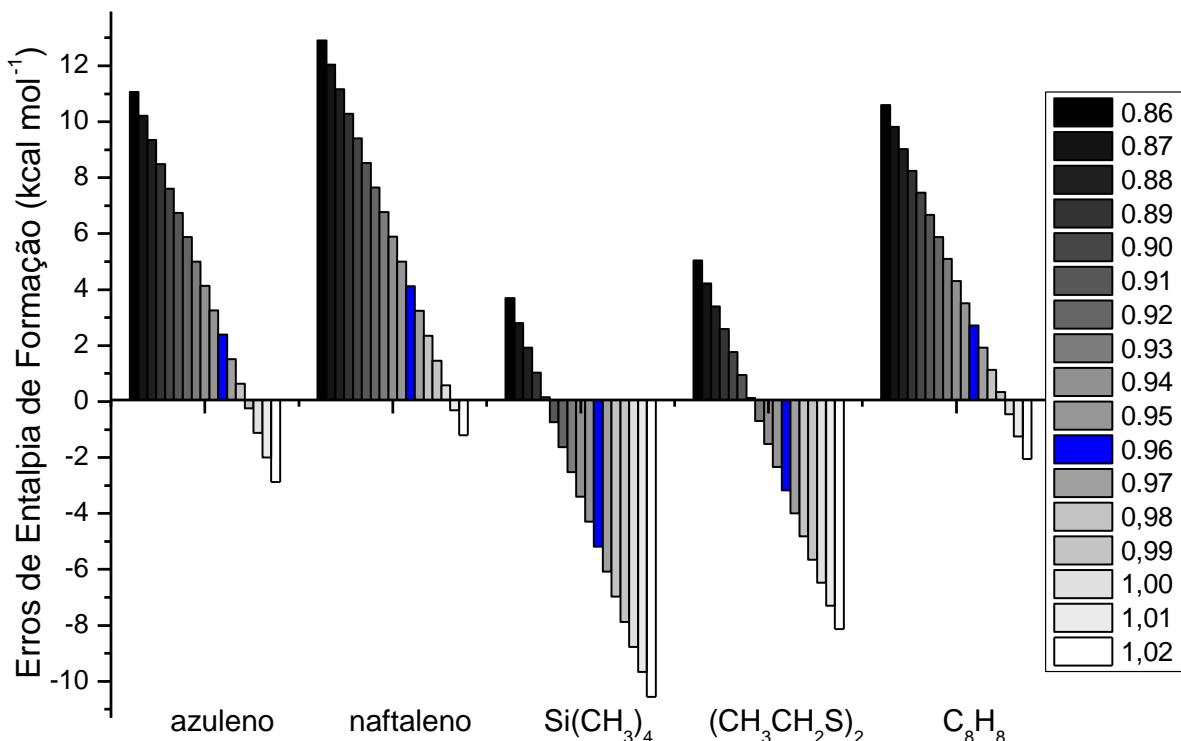


Figura 9. Erros de entalpia de formação (kcal mol^{-1}) obtidos através da utilização de diferentes fatores de escalamento para o método G3(MP2)//B3-CEP.

Algumas moléculas apresentam erros maiores que $2,0 \text{ kcal mol}^{-1}$ quando o valor do parâmetro de escalamento recomendado pelo método G3(MP2)//B3-CEP é empregado, mesmo este sendo o que apresentou o erro médio absoluto mínimo para o grupo G3/05.

Além disso, para todas estas estruturas pode-se observar que há uma região onde o erro de entalpia de formação passa por $0,0 \text{ kcal mol}^{-1}$. Esta região, por sua vez, não é igual para todas as moléculas. A molécula de tetrametilsilano ($\text{Si}(\text{CH}_3)_4$), por exemplo, apresenta erro de $5,2 \text{ kcal mol}^{-1}$ quando o fator de escalamento original é utilizado, enquanto que, com o fator $0,90$, seu erro torna-se muito próximo a $0,0 \text{ kcal mol}^{-1}$.

O mesmo é observado para o azuleno (C_{10}H_8) e (etildisulfanil)etano ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{S}_2$), que com o fator de escalamento vibracional original, apresentaram respectivamente, erros de $4,0 \text{ kcal mol}^{-1}$ e $3,0 \text{ kcal mol}^{-1}$, aproximadamente, enquanto que com o fator de escalamento $0,99$ e $0,92$, seus erros diminuíram para aproximadamente $-0,5 \text{ kcal mol}^{-1}$ e $0,0 \text{ kcal mol}^{-1}$.

A Figura 9 mostra que os erros de entalpia de formação possuem um comportamento linear em relação ao fator de escalamento vibracional e que para

qualquer estrutura é possível determinar qual o fator de escalamento que gera erro $0,0 \text{ kcal mol}^{-1}$. Entretanto, esta determinação apenas pode ser realizada para estruturas ao quais são conhecidos os valores experimentais de entalpia de formação.

Outras moléculas, por sua vez, apresentam o mínimo de erro ($0,0 \text{ kcal mol}^{-1}$) em regiões distantes do intervalo de fatores de escalamento testados, estas moléculas demonstram apenas pequenas variações dos erros de entalpias de formação. A Figura 10 mostra alguns exemplos que representam este comportamento.

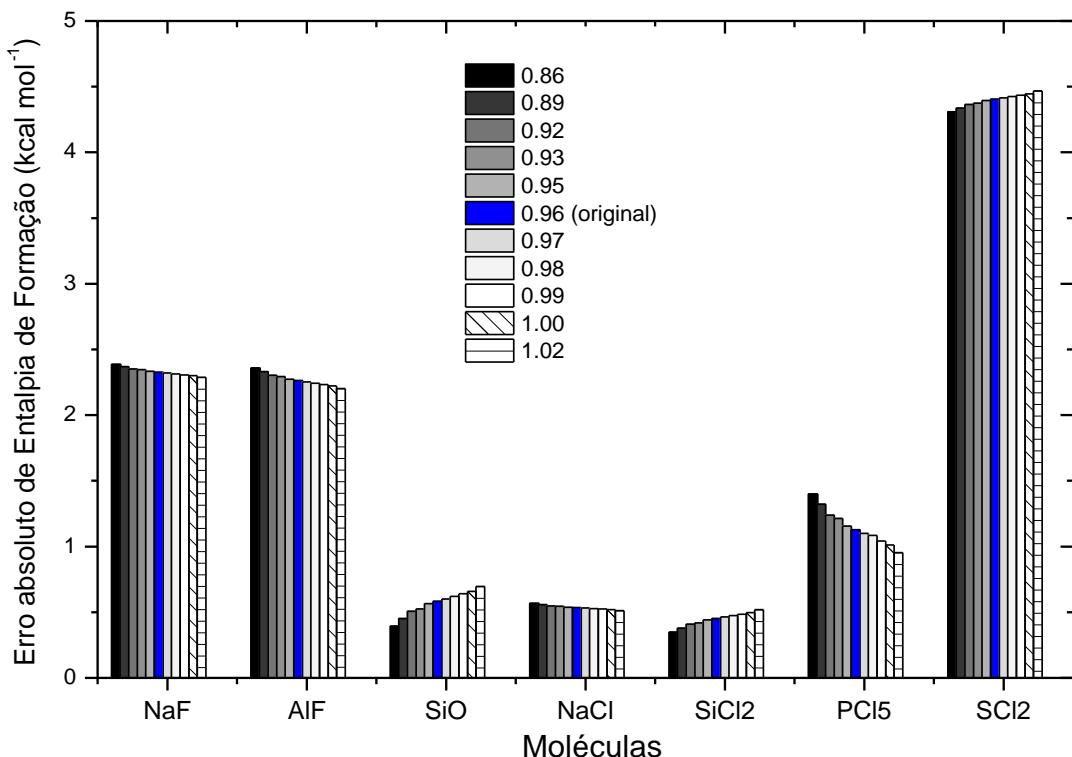


Figura 10. Erros de entalpia de formação (kcal mol^{-1}) obtidos através da utilização de diferentes fatores de escalação para o método G3(MP2)//B3-CEP.

Moléculas como as demonstradas na Figura 9 possuem estruturas grandes, com muitas ligações, átomos e ramificações, enquanto as estruturas da Figura 10 são compostas majoritariamente por moléculas com apenas um átomo central ou então moléculas diatômicas. A pequena influência do fator de escalação vibracional para as moléculas da Figura 10 pode estar relacionada ao fato de apresentarem poucas componentes vibracionais e, consequentemente, pequenas energias de vibração.

Apesar da presença de dois grupos distintos, sendo um deles relativamente pouco dependente do fator avaliado, determinou-se para as 248 estruturas os fatores

de escalamento que apresentaram os erros mínimos de entalpia de formação dentro do intervalo estudado.

O erro médio absoluto obtido para o grupo G3/05 gerado a partir da utilização dos erros mínimos foi de 0,84 kcal mol⁻¹, representando uma redução de aproximadamente 45,5% do valor original.

Entretanto, para moléculas como as demonstradas na Figura 10 pode-se esperar que o erro nulo não esteja no intervalo testado, como dito anteriormente, nesses casos, o fator de escalamento empregado foi o recomendado pelo método G3(MP2)//B3-CEP. Através da utilização do fator 0,96 para moléculas, como as da Figura 10, o erro médio absoluto passa a ser 1,05 kcal mol⁻¹.

O método G3(MP2)//B3-CEP é composto por apenas uma correção de energia principal, a correção de base large, ΔE_{Large} , mais correções empíricas empregadas em praticamente todos os métodos compostos, E_{HLC} e E_{SO} , portanto, a obtenção de um erro médio absoluto de 1,05 kcal mol⁻¹, gerado apenas através da utilização de fatores de escalamento distintos, é um resultado interessante, visto que o método G4CEP²⁸, o mais moderno dentre os métodos compostos Gaussian-n adaptados a pseudopotenciais CEP, apresenta um erro médio absoluto de 1,09 kcal mol⁻¹ para a entalpia de formação das 248 moléculas do grupo G3/05 e inclui em sua energia final etapas de correções mais complexas.

A Figura 11 mostra a variação geral dos erros médios absolutos para cinco categorias diferentes presentes no grupo G3/05, sendo estas, moléculas inorgânicas, hidrocarbonetos, hidrocarbonetos substituídos, hidretos e radicais.

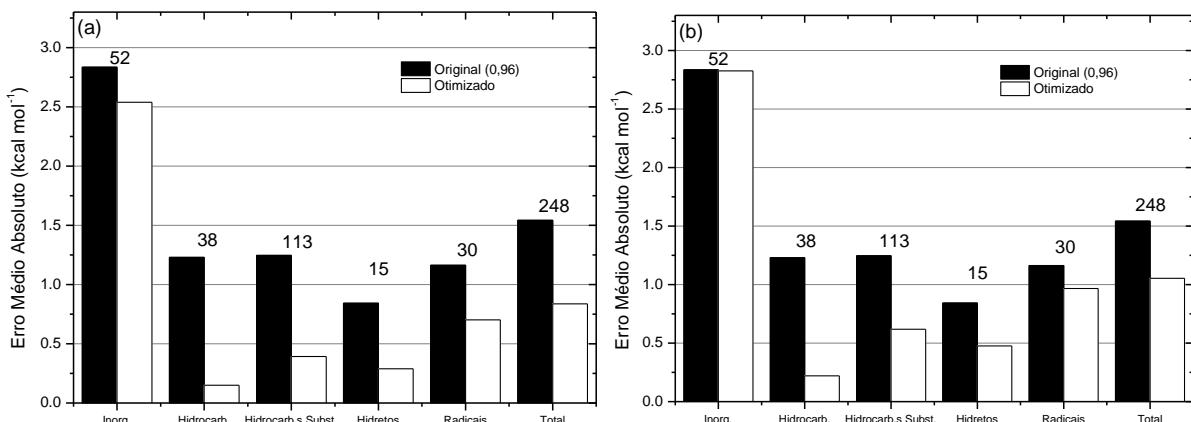


Figura 11. Erros médios absolutos (kcal mol^{-1}) obtidos através da utilização dos erros: (a) mínimos de cada estrutura (b) mínimos de cada estrutura, exceto para moléculas com mínimos fora do intervalo de fatores estudados.

As moléculas que demonstram maior dependência aos fatores de escalamento foram os hidrocarbonetos e os hidrocarbonetos substituídos, com reduções maiores que 50% dos erros, essa elevada diminuição mostra que hidrocarbonetos e hidrocarbonetos substituídos possuem grande dependência com os fatores de escalamento vibracionais.

Tanto com relação a Figura 11.a quanto com relação a Figura 11.b nota-se que o grupo das moléculas inorgânicas é o que sofre menor variação dos erros de entalpia de formação. Essa informação já era esperada, tendo em vista os exemplos mostrados anteriormente na Figura 10.

No caso da Figura 11.a a pequena variação dos erros esperada, pela pequena dependência destas moléculas ao fator de escalamento vibracional, ou seja, mesmo quando os erros mínimos localizados entre os fatores 0,86 e 1,02 são empregados, pouca diminuição é observada.

A Figura 11.b mostra uma variação praticamente nula para as moléculas inorgânicas, isso é explicado pela maior parte destas moléculas possuir mínimos distantes do intervalo de fatores testados. Problemas de natureza eletrônica ainda devem ser estudados para que seus erros elevados sejam corrigidos.

Algumas tendências estruturais foram identificadas a partir dos resultados anteriores. Moléculas com os mesmos átomos e tipos de ligação, apresentaram comportamentos semelhantes com relação ao fator de escalamento com erro mínimo.

Moléculas orgânicas simples, por exemplo, exibiram o erro absoluto mínimo de entalpia de formação nos mesmos fatores de escalamento vibracionais. A Figura 12

apresenta graficamente erros absolutos de algumas moléculas com estruturas semelhantes de acordo com os fatores de escalação vibracionais empregados.

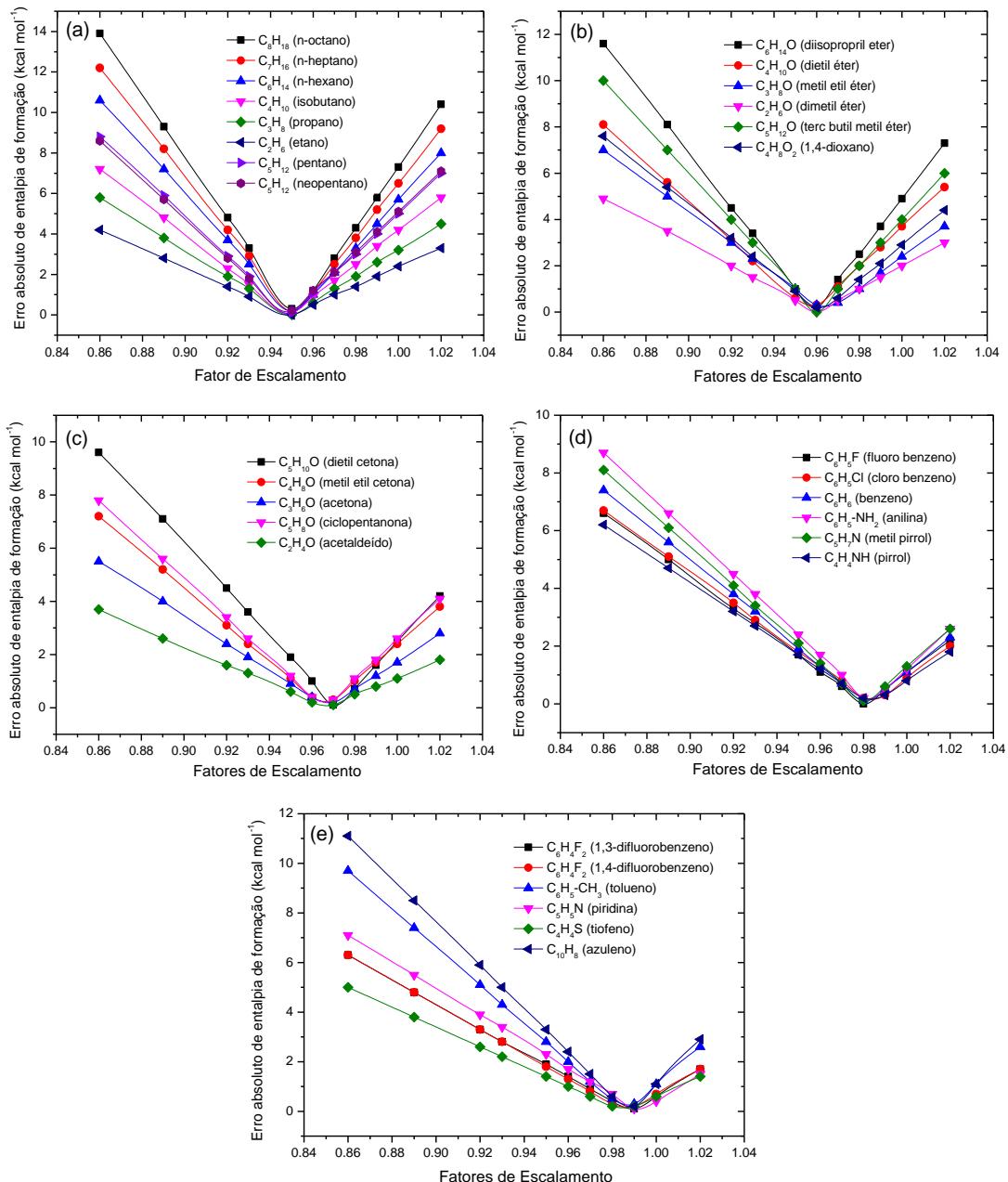


Figura 12. Relações entre estruturas moleculares e erros mínimos absolutos de entalpia de formação (kcal mol^{-1}).

Todos os hidrocarbonetos homogêneos saturados de cadeia aberta (Figura 12.a), apresentam erro mínimo de entalpia de formação no fator de escalação 0,95. Enquanto isso, hidrocarbonetos com grupo funcional éter apresentam erro mínimo no fator de escalação vibracional 0,96, como expresso na Figura 12.b.

O mesmo pode ser observado na Figuras 12.c que mostra um conjunto de moléculas com grupos funcionais cetonas e erros mínimos no fator de escalamento 0,97. As Figuras 12.d e 12.e apresentam estruturas de moléculas aromáticas, monosubstituídas e polisubstituídas, com erros mínimos de entalpia de formação nos fatores de escalamento 0,98 e 0,99, respectivamente.

Observa-se, principalmente com relação as Figuras 12.d e 12.e, que o fator de escalamento 0,96 gera erros elevados ao ser empregado, chegando a valores próximos a 3,0 kcal mol⁻¹, em alguns casos, enquanto os erros mínimos gerados por outros fatores de escalamento são de aproximadamente 0,0 kcal mol⁻¹.

Aparentemente, o fator que apresenta o menor erro de entalpia de formação, está relacionado com os tipos de átomos e com as ligações presentes nas moléculas. Correlações claras entre os fatores de escalamento vibracionais e as estruturas moleculares puderam ser definidos apenas para moléculas simples. Insaturações ou a presença de diferentes átomos em uma mesma molécula, dificultaram a realização de correlações estruturais similares às apresentadas anteriormente na Figura 12.

As moléculas tetraidrotiofeno (C_4H_8S) e diidrotiofeno (C_4H_6S), e as moléculas etano (C_2H_6) e eteno (C_2H_4) possuem como única diferença estrutural uma ligação dupla entre átomos de carbono, como pode ser observado através da Figura 13.

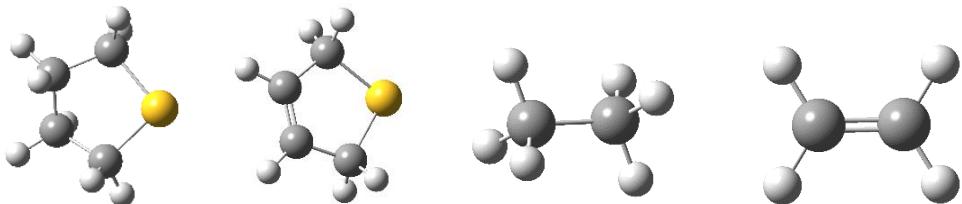


Figura 13. Geometrias Moleculares: Tetraidrotiofeno (C_4H_8S), Diidrotiofeno (C_4H_6S), etano (C_2H_6) e eteno (C_2H_4), respectivamente.

Estas insaturações modificaram as regiões de erros mínimos. O erro mínimo relativo a molécula de diidrofeno está localizado no fator 0,97, enquanto para a molécula de tetraidrotiofeno o erro mínimo é encontrado no fator 0,93.

Comportamento semelhante é observado para as moléculas de etano e eteno, que também se diferenciam apenas pela presença de uma ligação dupla. Os erros mínimos destas duas estruturas estão localizados em 0,95 e 0,99, respectivamente.

Para os dois grupos, as diferenças entre as regiões de erro mínimo são causadas devido a presença da dupla ligação, inclusive, para os dois casos, observa-se que a diferença entre os dois fatores de escalamento mínimos é a mesma, correspondente a 0,04.

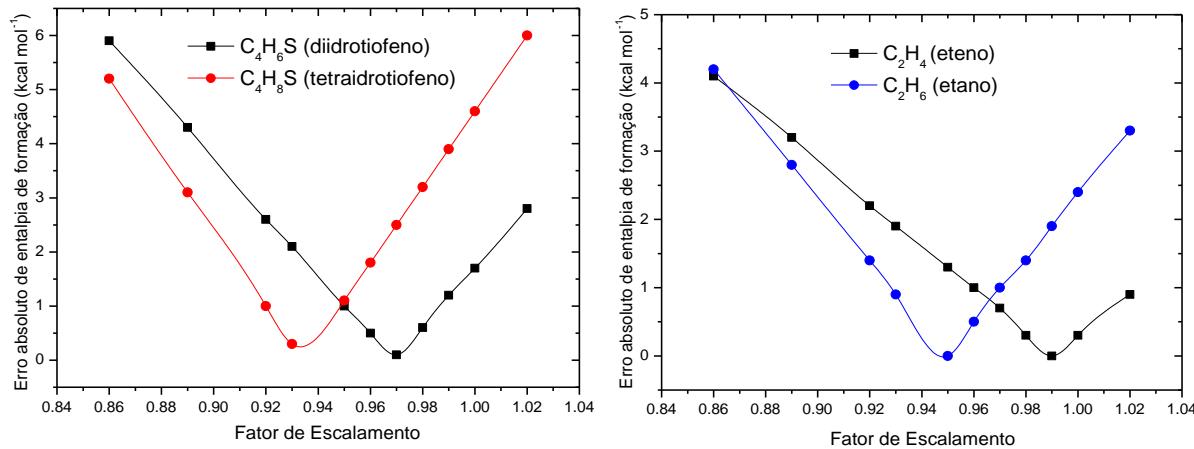


Figura 14. Relações entre estruturas moleculares e erros mínimos absolutos de entalpia de formação (kcal mol^{-1}).

O emprego de fatores de escalamento vibracionais apropriados de acordo com as estruturas moleculares mostrou-se efetivo na diminuição dos erros de entalpia de formação. Estas determinações só foram possíveis devido as entalpias experimentais serem conhecidas. Entretanto, com a discussão realizada, pôde-se indicar que o modelo proposto por métodos compostos, envolvendo apenas um fator para escalamento vibracional de moléculas distintas, não é o mais apropriado.

Tendo em vista o que foi discutido anteriormente, um procedimento simples pode ser recomendado para determinação destes fatores caso os dados experimentais apresentem erros pequenos ou aceitáveis, o procedimento para determinar o fator de escalamento ótimo é:

- 1) Calcular a entalpia de formação com dois fatores de escalamento cujo valores compreendem um intervalo predeterminado. Neste trabalho, foram considerados como os limites do intervalo os fatores 0.86 e 1.02 para o cálculo de frequência B3LYP/CEP-31G(d).
- 2) Calcular a diferença entre os valores teóricos e experimentais: $\Delta H_1 = H_1 - H_{exp}$ e $\Delta H_2 = H_2 - H_{exp}$. Se houver mudança de sinais entre os erros

obtidos, determinar os coeficientes angulares e lineares da reta entre o erro ΔH e o fator de escalamento (η), ou seja, $\Delta H = a + b\eta$.

- 3) Considerar o erro nulo entre os dados experimentais e teóricos: $\eta = -a/b$. Nesse caso, η indica o fator de escalamento ótimo.
- 4) Em casos onde não há inversão dos sinais o fator de escalamento considerado deverá ser o recomendado através dos dados experimentais presentes na literatura.¹⁹⁻²¹ Ou então, a determinação deve ser realizada através da metodologia empregada na Figura 8.
- 5) Para casos em que os dados experimentais apresentem erros significativos ou são desconhecidos, a alternativa é utilizar os parâmetros apresentados no Anexo 2 considerando-se a similaridade entre as moléculas de interesse, ou utilizar um conjunto de moléculas com propriedades bem determinadas e efetuar a análise apresentada neste trabalho para o nível de cálculo de interesse.

5. Conclusão

Os resultados apresentados mostraram que a adaptação de funções contraídas de Dunning a pseudopotenciais do tipo CEP pode ser realizada através do método de Coordenada Geradora, sem aumento significativo dos erros.

Os experimentos que envolveram a utilização de diferentes modelos de otimização de geometria e frequência para os cálculos de entalpia de formação das moléculas do grupo G3/05 indicaram que as moléculas com maior dependência em relação a estas etapas são hidrocarbonetos e hidrocarbonetos substituídos, mostrando diminuições de mais de 40% dos seus erros quando modelos melhores foram empregados. A principal causa dessas reduções está no uso de funções de bases maiores que a função empregada no modelo de otimização original (CEP-31G(d)). O nível de teoria B3LYP, utilizado em grande parte dos métodos Gn, mostrou-se um bom nível de teoria para realização destes cálculos, sendo inferior apenas ao funcional M06. Entretanto, muito superior aos níveis MP2, SOGGA11X e B2PLYP para a grande maioria das estruturas.

O uso de diferentes fatores de escalamento vibracionais indicou que a determinação dos fatores de escalamento apropriados não deve ser realizada levando em consideração apenas os níveis de teoria e funções de base empregadas no cálculo de frequência, mas também o tipo de estrutura ao qual se deseja realizar o escalamento das frequências. Pôde-se observar uma dependência linear entre os erros de entalpia de formação e os fatores de escalamento empregado nos cálculos de frequências. Essa dependência possibilita a determinação de fatores de escalamento seletivos que geram erros nulos de entalpia de formação. Além disso, foi possível identificar correlações moleculares entre os fatores de escalamento ótimos e as moléculas do grupo G3/05, indicando que este fator esta relacionado com o tipo de moléculas.

6. Perspectivas Futuras

Os resultados gerados neste trabalho abriram perspectivas para novos estudos. As adaptações das bases contraídas de Dunning estimulam o desenvolvimento de métodos compostos baseados apenas nestas bases, principalmente com a inclusão de pseudopotencial, tendo em vista o erro pequeno gerado pela adaptação.

Além disso, os estudos apresentados com relação a utilização de diferentes níveis de teoria e funções de base em cálculos de otimização de geometria e frequência mostram que a utilização de um funcional como o M06 pode apresentar diminuição significativa dos erros de entalpia de formação de moléculas orgânicas e moléculas orgânicas substituídas. Este resultado abre margem a substituição de funcionais como o B3LYP nestas etapas de cálculo.

Em relação as funções de base empregadas nos cálculos de otimização de geometria e frequência, os resultados apresentados sugerem o estudo do aumento gradativo do tamanho destas bases. Considerando-se a comparação das funções CEP-31G(d), CEP-311++(2dp) e CEP-311++(3df,2pd), foram observadas reduções significativas dos erros quando comparados os resultados gerados pelas duas últimas funções com os resultados apresentados pela função CEP-31G(d). Entretanto, comparações entre os resultados apresentados pelas bases CEP-311++(2dp) e CEP-311++(3df,2pd), mostraram reduções mais atenuadas. O aumento gradativo do número de expoentes da função CEP-31G(d) pode indicar até que ponto o aumento da base influência de maneira significativa na qualidade dos resultados. Além disso, pode-se determinar a influência do acréscimo de funções de polarização e difusas separadamente.

Os estudos relativos aos fatores de escalamento vibracionais ainda estão em andamento, pretende-se estudar de maneira mais aprofundada a natureza destes fatores com relação a propriedade de entalpia de formação, principalmente para que possam ser feitas correlações mais bem definidas entre estes parâmetros e as moléculas presentes em conjuntos mais amplos do que aquelas disponíveis no conjunto G3/05.

7. Referências

1. Pople, J. A., Head-Gordon, M., Fox, D. J., Raghavachari, K. & Curtiss, L. A. Gaussian-1 theory: A general procedure for prediction of molecular energies. *J. Chem. Phys.* **90**, 5622–5629 (1989).
2. Petersson, G. A. *et al.* A complete basis set model chemistry. I. The total energies of closed-shell atoms and hydrides of the first-row elements. *J. Chem. Phys.* **89**, 2193–2218 (1988).
3. Petersson, G. A., Tensfeldt, T. G. & Montgomery, J. A. A complete basis set model chemistry. III. The complete basis set-quadratic configuration interaction family of methods. *J. Chem. Phys.* **94**, 6091–6101 (1991).
4. Parthiban, S. & Martin, J. M. L. Assessment of W1 and W2 theories for the computational of electron affinities, ionization potentials, heats of formation, and proton affinities. *J. Chem. Phys.* **114**, 6014–6029 (2001).
5. Daniel Boese, A. *et al.* W3 theory: Robust computational thermochemistry in the kJ/mol accuracy range. *J. Chem. Phys.* **120**, 4129–4141 (2004).
6. Martin, J. M. L. & De Oliveira, G. Towards standard methods for benchmark quality ab initio thermochemistry - W1 and W2 theory. *J. Chem. Phys.* **111**, 1843–1856 (1999).
7. Curtiss, L. A., Raghavachari, K., Redfern, P. C. & Pople, J. A. Assessment of Gaussian-2 and density functional theories for the computation of enthalpies of formation. *J. Chem. Phys.* **106**, 1063–1079 (1997).
8. Curtiss, L. A., Raghavachari, K., Redfern, P. C., Rassolov, V. & Pople, J. A. Gaussian-3 (G3) theory for molecules containing first and second-row atoms. *J. Chem. Phys.* **109**, 7764–7776 (1998).
9. Mohallem, J. R. & Trsic, M. A universal Gaussian basis set for atoms Li through Ne based on a generator coordinate version of the Hartree-Fock equations. *J. Chem. Phys.* **86**, 5043–5044 (1987).
10. Morgan, N. H. & Custódio, R. Funções de Base: O Ajuste Variacional. *ChemKeys* 1–17 (2001).
11. Curtiss, L. A., Redfern, P. C. & Raghavachari, K. Gaussian-4 theory. *J. Chem. Phys.* **126**, (2007).
12. Curtiss, L. A., Redfern, P. C. & Raghavachari, K. Assessment of Gaussian-3 and density-functional theories on the G3/05 test set of experimental energies. *J. Chem. Phys.* **123**, (2005).
13. Baboul, A. G., Curtiss, L. A., Redfern, P. C. & Raghavachari, K. Gaussian-3 theory using density functional geometries and zero-point energies. *J. Chem. Phys.* **16**, 7650 (1999).

14. Mebel, A. M., Morokuma, K. & Lin, M. C. Modification of the gaussian – 2 theoretical model: The use of coupled-cluster energies , density-functional geometries , and frequencies. *J. Chem. Phys.* **103**, (1999).
15. Morgan, N. H. & Custodio, R. Teoria do Funcional de Densidade. *Quim. Nova* 44–55 (1994).
16. Curtiss, L. A. & Redfern, P. C. Assessment of Gaussian-2 and density functional theories for the computation of enthalpies of formation for the computation of enthalpies of formation. *J. Chem. Phys.* **106**, 1063 (1998).
17. Koch, W. & Holthausen, M. C. *A Chemist's Guide to Density Functional Theory*. (2001).
18. Wang, Y. & Perdew, J. P. Correlation hole of the spin-polarized electron gas, with exact small-wave-vector and high-density scaling. *Phys. Rev. B* **44**, 13 298-13 307 (1991).
19. Scott, A. P. & Radom, L. Harmonic Vibrational Frequencies: An Evaluation of Hartree - Fock, Møller - Plesset, Quadratic Configuration Interaction, Density Functional Theory, and Semiempirical Scale Factors. *J. Phys. Chem.* **100**, 16502–16513 (1996).
20. Pople, J. A. *et al.* Molecular orbital studies of vibrational frequencies. *Int. J. Quantum Chem.* **20**, 269–278 (1981).
21. Hout, R. F., Levi, B. A. & Hehre, W. J. Effect of Electron Correlation on Theoretical Vibrational Frequencies. *J. Comput. Chem.* **3**, 234–250 (1982).
22. Shimanouchi, T. *Tables of Molecular Vibrational Frequencies Consolidated Volume I*. (1972).
23. Hase, Y. Theoretical study of the force field and vibrational assignments of acetamide and deuterated analogues. *Spectrochim. Acta Part A* **51**, 2561–2573 (1995).
24. Hase, Y. Theoretical study of the force field and vibrational assignments of thioacetamide and its deuterated analogues. *Spectrochim. Acta Part A* **56**, 1035–1044 (2000).
25. Stevens, W. J., Basch, H. & Krauss, M. Compact effective potentials and efficient shared-exponent basis sets for the first- and second-row atoms. *J. Chem. Phys.* **81**, 6026 (1998).
26. Stevens, W. & Krauss, M. Relativistic compact effective potencials and efficient, shared-exponent basis sets for the third-, fourth-, and fifth-row atoms. *Can. J. Chem.* **70**, 1992 (1991).
27. Pereira, D. H., Ramos, A. F., Morgan, N. H. & Custodio, R. Implementation of pseudopotential in the G3 theory for molecules containing first-, second-, and non-transition third-row atoms. *J. Chem. Phys.* **135**, 1–14 (2011).
28. Silva, C. D. S., Pereira, D. H. & Custodio, R. G4CEP: A G4 theory modification by including pseudopotential for molecules containing first-, second- and third-row

- representative elements. *J. Chem. Phys.* **144**, (2016).
- 29. Custodio, R., Pereira, A., Sensato, F. & Trevas, J. Analysis of the Segmented Contraction of Basis Functions Using Density Matrix Theory. *J Comput Chem* **27**, 1822–1829 (2006).
 - 30. Custodio, R. & Goddard, J. D. Can the linear combination of atomic orbital coefficients (the weight function) be used to improve the wavefunction? *J. Mol. Struct.* **281**, 75–87 (1993).
 - 31. Rocha, C. M. R., Pereira, D. H., Morgon, N. H. & Custodio, R. Assessment of G3(MP2)//B3 theory including a pseudopotential for molecules containing first-, second-, and third-row representative elements. *J. Chem. Phys.* **139**, (2013).
 - 32. Ochterski, J. W. & Ph, D. Thermochemistry in Gaussian. 1–19 (2000).
 - 33. Frisch, M. J. *et al.* Gaussian 09 Revision D.01. (2009).

8. Anexos

Anexo I. Erros de entalpia de formação (kcal mol⁻¹) obtidos por diferentes modelos de otimização de geometria e frequência para moléculas do grupo G3/05).

Moléculas	$\Delta H_{(exp)}$	1A	1B	1C	1D	1E	2A	2B	2C	2D	2E	3A	3B	3C	3D	3E	4A	4B	4C	4D	4E
SiF ₄	-386	-2,6	-3,4	-2,1	-2,7	-2,1	-1,7	-1,6	-1,5	-1,6	-1,5	-1,6	-1,6	-1,5	-1,6	-1,6	-5,4	-6,0	-3,4	-5,3	-3,4
PF ₅	-381,1	-6,0	-6,6	-5,3	-6,0	-5,3	-4,8	-4,6	-4,6	-4,6	-4,6	-4,5	-4,5	-4,6	-4,5	-4,7	-9,7	-9,9	-7,5	-9,4	-6,9
C ₂ F ₆	-321,3	-0,1	-0,8	-0,5	-0,4	-0,9	0,4	0,2	0,1	0,4	-0,5	0,5	0,1	-0,2	0,3	-0,9	-0,1	-0,5	0,2	-0,2	0,0
Al ₂ Cl ₆	-309,7	3,3	2,9	2,6	3,8	3,6	3,8	3,8	4,4	4,0	4,0	3,7	3,9	3,8	4,0	4,0	-0,3	1,2	1,3	0,6	1,6
SF ₆	-291,7	-9,3	-9,6	-8,1	-9,0	-7,9	-7,8	-7,2	-7,1	-7,3	-7,3	-7,4	-7,2	-7,4	-7,2	-7,8	-14,2	-13,6	-10,7	-13,3	-9,4
AlF ₃	-289	0,6	0,2	0,9	0,6	0,9	1,3	1,3	1,2	1,3	1,2	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	0,3	0,1	0,4	0,4	1,0
BF ₃	-271,4	-3,2	-3,3	-3,4	-3,2	-3,5	-3,3	-3,4	-3,5	-3,3	-3,5	-3,3	-3,3	-3,5	-3,3	-3,6	-3,4	-4,0	-3,2	-3,5	-3,2
PF ₃	-229,1	-6,1	-6,4	-5,9	-6,1	-5,9	-5,8	-5,7	-5,5	-5,7	-5,6	-5,7	-5,6	-5,5	-5,6	-5,6	-9,9	-10,0	-8,9	-9,7	-8,1
C ₆ F ₆	-228,4	2,3	1,8	1,8	2,2	1,3	2,9	2,7	2,4	2,9	0,7	3,0	2,7	2,3	2,9	0,6	2,6	2,1	2,7	2,5	1,9
CF ₄	-223	-0,7	-1,0	-0,8	-0,7	-1,0	-0,4	-0,5	-0,6	-0,4	-0,9	-0,3	-0,5	-0,8	-0,4	-1,2	-0,6	-0,9	-0,4	-0,6	-0,5
C ₆ F ₅ Cl	-194,1	0,9	0,3	0,3	0,8	-0,4	1,6	1,5	1,1	1,6	-0,5	1,6	1,4	1,1	1,5	-0,7	1,0	0,5	1,2	0,9	0,4
BeF ₂	-190,3	-5,1	-5,1	-5,1	-5,1	-5,3	-4,9	-4,9	-4,8	-4,9	-5,1	-5,0	-5,0	-4,5	-5,0	-5,2	-5,6	-6,3	-5,0	-5,8	-5,2
CF ₃ Cl	-169,5	-0,8	-0,9	-0,9	-0,7	-1,0	-0,5	-0,5	-0,6	-0,4	-0,9	-0,4	-0,5	-0,6	-0,4	-1,1	-0,6	-0,7	-0,5	-0,6	-0,5
CHF ₃	-166,6	-1,0	-1,4	-1,1	-1,2	-1,6	-0,5	-0,9	-0,6	-0,7	-1,2	-0,5	-0,9	-0,6	-0,7	-1,4	-0,7	-1,1	-0,5	-0,9	-0,9
SiCl ₄	-158	-1,6	-1,8	-1,6	-1,6	-1,6	-1,6	-1,4	-1,6	-1,4	-1,4	-1,7	-1,4	-1,5	-1,4	-1,4	-4,1	-3,1	-3,5	-3,5	-2,7
C ₂ F ₄	-157,4	3,8	3,5	3,6	3,8	3,4	4,2	4,0	3,9	4,1	3,1	4,2	4,0	3,7	4,1	2,9	4,0	3,6	4,0	3,9	3,7
CF ₃ Br	-155	1,1	1,4	1,1	1,3	1,2	1,8	1,8	1,6	1,9	1,4	1,8	1,8	1,6	1,8	1,2	1,6	1,5	1,8	1,7	1,8

Moléculas	$\Delta H_{(exp)}$	1A	1B	1C	1D	1E	2A	2B	2C	2D	2E	3A	3B	3C	3D	3E	4A	4B	4C	4D	4E
COF ₂	-149,1	-3,8	-4,0	-4,1	-3,8	-4,4	-3,5	-3,6	-3,9	-3,5	-4,4	-3,6	-3,6	-4,0	-3,6	-4,6	-3,6	-3,9	-3,7	-3,6	-4,0
AlCl ₃	-139,7	1,0	1,2	1,0	1,1	1,2	1,3	1,2	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	-0,7	-0,2	-0,2	-0,4	0,1
C ₄ H ₆ O ₃	-136,8	-0,3	-1,6	-0,1	-0,9	-2,6	1,5	0,8	1,4	1,2	-1,0	1,4	0,9	1,6	1,2	-1,2	1,4	0,6	1,5	1,1	-0,7
POCl ₃	-133,8	-3,5	-3,1	-3,3	-3,1	-3,3	-3,3	-2,8	-3,0	-2,9	-2,9	-3,3	-2,8	-2,9	-2,9	-3,1	-5,9	-5,2	-4,9	-5,4	-3,7
CF ₃ CN	-118,4	2,0	1,3	1,8	1,9	1,3	2,2	2,5	2,2	2,5	1,2	2,2	2,6	2,0	2,5	0,9	2,1	1,6	2,3	2,2	1,8
C ₅ H ₁₀ O ₂ (etil acetat,)	-115,1	-2,6	-5,4	-2,7	-4,3	-6,1	-1,0	-2,2	-0,7	-1,6	-3,7	-0,9	-2,0	-0,2	-1,5	-3,7	-1,3	-2,3	-0,9	-1,8	-3,6
CF ₃	-111,3	0,1	-0,2	0,0	0,0	-0,2	0,3	0,2	0,1	0,3	-0,2	0,3	0,1	0,0	0,2	-0,4	0,1	-0,1	0,3	0,1	0,2
CH ₂ F ₂	-107,7	-0,8	-1,4	-1,1	-1,1	-1,6	-0,3	-0,8	-0,3	-0,5	-1,0	-0,2	-0,7	-0,2	-0,4	-1,0	-0,4	-0,9	-0,2	-0,6	-0,8
CH ₃ COF	-105,7	-1,3	-2,1	-1,3	-1,7	-2,4	-0,5	-0,9	-0,5	-0,7	-1,6	-0,5	-0,8	-0,4	-0,7	-1,7	-0,6	-1,2	-0,4	-0,9	-1,4
CH ₃ COOH	-103,4	-1,6	-2,4	-0,9	-2,0	-3,1	-0,5	-1,0	-0,6	-0,8	-2,1	-0,6	-1,0	-0,5	-0,9	-2,3	-0,7	-1,2	0,0	-0,9	-2,1
CHF ₂ Br	-101,6	-0,4	-0,1	-0,2	-0,2	-0,3	0,6	0,5	0,6	0,6	0,1	0,6	0,5	0,6	0,6	0,0	0,5	0,3	0,7	0,5	0,4
CH ₃ COOCH ₃	-98,4	-1,2	-3,1	-0,9	-2,4	-3,9	-0,4	-1,2	-0,1	-0,8	-2,3	-0,3	-1,1	0,1	-0,7	-2,4	-0,5	-1,3	-0,2	-0,8	-2,1
BCl ₃	-96,3	-4,4	-4,8	-4,4	-4,4	-4,6	-4,3	-4,3	-4,3	-4,2	-4,3	-4,3	-4,3	-4,2	-4,2	-4,3	-4,5	-4,4	-4,4	-4,4	-4,3
SO ₃	-94,6	-4,4	-4,7	-4,7	-4,4	-5,1	-4,2	-4,4	-4,5	-4,2	-5,0	-4,3	-4,3	-4,9	-4,2	-5,8	-6,8	-9,2	-6,0	-7,8	-4,9
CO ₂	-94,1	2,4	2,1	2,2	2,3	1,9	2,5	2,6	2,3	2,6	1,7	2,4	2,6	2,1	2,6	1,4	2,6	2,4	2,4	2,6	2,0
MgCl ₂	-93,8	4,7	5,0	4,9	4,9	4,9	5,1	5,1	5,1	5,2	5,1	5,0	5,1	5,1	5,1	5,1	5,1	5,1	5,2	5,1	5,0
CH ₃ -CH(OCH ₃) ₂	-93,1	-2,7	-4,8	-2,4	-3,8	-5,9	-0,6	-1,9	-0,2	-1,3	-3,2	-0,5	-1,8	0,2	-1,1	-3,3	-0,8	-1,8	-0,4	-1,3	-3,2
HCOOH	-90,5	-0,1	-0,4	-0,3	-0,3	-1,3	0,5	0,4	0,3	0,4	-0,6	0,4	0,3	0,3	0,3	-0,9	0,4	0,3	0,4	0,4	-0,6
(CH ₃) ₂ SO ₂	-89,7	-6,5	-8,0	-6,2	-7,2	-7,9	-4,9	-5,5	-4,4	-5,2	-6,0	-4,7	-5,5	-4,3	-5,0	-6,4	-7,6	-8,6	-6,1	-8,1	-6,8
PCl ₅	-86,1	1,0	2,1	1,7	1,9	2,1	1,3	2,2	2,0	2,1	2,2	1,4	2,2	2,1	2,1	2,3	-1,2	1,0	0,2	0,0	1,4
HCOOCH ₃	-85	0,3	-0,4	0,5	0,0	-1,3	1,3	0,8	1,5	1,1	-0,3	1,3	0,8	1,7	1,1	-0,4	1,3	0,7	1,5	1,1	-0,1
SO ₂ Cl ₂	-84,8	-7,3	-6,6	-6,8	-6,7	-6,7	-6,6	-6,2	-6,3	-6,3	-6,5	-6,4	-6,3	-6,4	-6,2	-7,1	-10,4	-10,1	-8,6	-10,2	-7,1

Moléculas	$\Delta H_{(exp)}$	1A	1B	1C	1D	1E	2A	2B	2C	2D	2E	3A	3B	3C	3D	3E	4A	4B	4C	4D	4E
LiF	-80,1	2,4	2,3	2,4	2,4	2,4	2,7	2,7	2,5	2,7	2,6	2,7	2,7	2,5	2,7	2,6	2,7	2,6	2,6	2,7	2,7
(CH ₃) ₂ CHOCH(CH ₃) ₂	-76,3	-4,9	-8,0	-4,3	-6,4	-8,3	-2,0	-3,8	-1,5	-3,0	-5,1	-1,7	-3,5	-0,8	-2,7	-4,9	-2,4	-3,7	-2,2	-3,2	-5,2
C ₄ H ₈ O ₂ (1,4-dioxano)	-75,5	-2,9	-4,6	-2,6	-3,8	-5,9	-1,1	-2,3	-0,8	-1,7	-3,8	-1,0	-2,2	-0,4	-1,6	-3,8	-1,3	-2,2	-0,9	-1,8	-3,6
(CH ₃) ₃ COH	-74,7	-3,6	-5,8	-3,3	-4,7	-6,2	-1,6	-3,0	-1,4	-2,4	-3,9	-1,5	-2,8	-1,1	-2,3	-3,9	-2,0	-2,9	-1,8	-2,5	-4,1
C ₆ H ₄ F ₂	-73,9	-0,6	-1,2	-0,5	-0,9	-2,1	0,4	0,0	0,6	0,1	-1,6	0,4	0,2	0,7	0,2	-1,6	0,1	-0,5	0,5	-0,1	-1,0
C ₆ H ₄ F ₂	-73,3	-0,7	-1,2	-0,6	-1,0	-2,1	0,3	0,0	0,6	0,1	-1,7	0,3	0,2	0,7	0,2	-1,6	0,1	-0,5	0,5	-0,1	-1,0
SO ₂	-71	-2,4	-2,1	-2,6	-2,2	-3,3	-2,1	-2,2	-2,3	-2,1	-2,8	-2,3	-2,1	-2,6	-2,1	-3,3	-3,5	-5,9	-3,1	-4,4	-2,5
NaF	-69,4	2,3	2,3	2,2	2,3	2,2	2,7	2,7	2,7	2,7	2,7	2,7	2,7	2,7	2,7	2,7	2,7	2,7	2,7	2,7	2,7
PCl ₃	-69	-4,1	-3,6	-3,7	-3,6	-3,5	-3,9	-3,3	-3,5	-3,5	-3,3	-3,9	-3,4	-3,4	-3,4	-3,4	-5,7	-4,4	-4,7	-5,0	-4,0
(CH ₃) ₃ COCH ₃	-67,8	-4,0	-6,0	-2,9	-5,3	-7,0	-1,5	-2,5	-0,5	-2,4	-4,2	-1,3	-2,8	0,0	-2,1	-4,1	-1,2	-2,3	-0,8	-1,8	-3,6
(CH ₃) ₂ CHOH	-65,2	-3,0	-4,6	-2,8	-3,8	-5,1	-1,3	-2,4	-1,2	-1,9	-3,2	-1,3	-2,3	-0,9	-1,9	-3,2	-1,7	-2,4	-1,5	-2,1	-3,4
HF	-65,1	0,0	-0,1	-0,2	0,0	-0,2	0,0	-0,1	-0,2	-0,1	-0,2	0,0	-0,1	-0,2	-0,1	-0,3	-0,1	-0,1	-0,3	-0,1	-0,3
AlF	-63,5	2,2	2,2	2,2	2,2	2,2	2,3	2,3	2,3	2,3	2,3	2,3	2,3	2,3	2,3	2,3	2,0	2,0	2,2	2,1	2,2
CH ₃ CH ₂ COCH ₂ CH ₃	-61,6	-2,5	-4,8	-2,6	-3,6	-5,0	-0,8	-1,6	-0,5	-1,6	-3,4	-0,6	-1,4	0,1	-1,4	-3,2	-1,2	-2,3	-0,8	-1,8	-3,4
CH ₃ CH ₂ OCH ₂ CH ₃	-60,3	-3,7	-5,9	-3,5	-4,8	-6,3	-1,5	-2,9	-1,3	-2,3	-3,9	-1,3	-2,7	-0,7	-2,1	-3,7	-1,8	-2,9	-1,7	-2,4	-3,9
CH ₃ COCl	-58	-1,6	-2,2	-1,4	-1,8	-2,4	-0,7	-1,0	-0,6	-0,8	-1,7	-0,7	-0,9	-0,4	-0,8	-1,7	-0,9	-1,1	-0,7	-1,0	-1,5
H ₂ O	-57,8	-0,5	-0,7	-0,7	-0,6	-1,1	-0,2	-0,3	-0,4	-0,2	-0,7	-0,4	-0,5	-0,5	-0,4	-1,0	-0,3	-0,3	-0,4	-0,3	-0,8
CH ₃ COCH ₂ CH ₃	-57,1	-2,4	-4,2	-1,9	-3,3	-4,5	-0,6	-1,7	-0,4	-1,2	-2,7	-0,5	-1,5	0,1	-1,0	-2,5	-0,8	-2,4	-0,4	-1,9	-2,6
CH ₃ CONH ₂	-57	-2,5	-3,4	-2,4	-2,9	-4,0	-1,2	-1,7	-0,5	-1,5	-2,8	-1,3	-1,8	-1,1	-1,6	-2,9	-1,6	-2,1	-1,5	-1,8	-2,9
CH ₃ CH ₂ OH	-56,2	-2,3	-3,5	-2,3	-2,9	-4,0	-1,1	-1,9	-1,0	-1,5	-2,6	-1,0	-1,9	-0,9	-1,5	-2,6	-1,4	-2,0	-1,4	-1,7	-2,8
Si(CH ₃) ₄	-55,7	-8,8	-11,2	-8,0	-9,9	-10,7	-6,5	-7,8	-5,8	-7,2	-8,4	-6,1	-7,6	-5,2	-6,9	-8,0	-6,9	-7,9	-6,5	-7,5	-8,5
C ₅ H ₁₀ O	-53,4	-4,4	-6,6	-3,8	-5,5	-7,4	-2,2	-3,7	-1,8	-3,0	-5,0	-2,0	-3,5	-1,3	-2,8	-4,8	-2,5	-3,5	-2,0	-3,1	-5,0
Cl ₂ CO	-52,4	-0,1	0,1	-0,1	0,1	-0,2	0,2	0,3	0,2	0,3	-0,2	0,2	0,3	0,2	0,3	-0,4	0,1	0,3	0,2	0,3	-0,1

Moléculas	$\Delta H_{(exp)}$	1A	1B	1C	1D	1E	2A	2B	2C	2D	2E	3A	3B	3C	3D	3E	4A	4B	4C	4D	4E
CH ₃ COCH ₃	-51,9	-1,7	-3,6	-2,1	-2,3	-3,2	-0,3	-1,1	-0,8	-0,7	-1,9	-0,8	-1,5	-0,5	-1,2	-1,8	-0,4	-1,7	-0,8	-0,7	-1,7
C ₂ H ₅ OCH ₃	-51,7	-2,4	-4,1	-2,1	-3,2	-4,6	-0,6	-1,8	-0,3	-1,2	-2,6	-0,5	-1,6	0,1	-1,1	-2,5	-0,8	-1,7	-0,5	-1,3	-2,5
(CH ₃) ₂ CHCHO	-51,6	-3,8	-5,5	-2,9	-4,6	-5,9	-2,0	-3,0	-1,8	-2,5	-4,1	-1,9	-2,8	-1,3	-2,4	-3,9	-2,2	-3,0	-2,0	-2,6	-4,0
HCOCOH	-50,7	0,8	0,5	0,7	0,7	-0,3	1,7	1,7	1,5	1,7	0,3	1,6	1,7	1,6	0,2	1,7	1,5	1,6	1,7	0,6	
C ₈ H ₁₈	-49,9	-7,3	-11,5	-6,1	-9,4	-11,4	-3,4	-5,9	-2,7	-4,8	-7,3	-3,0	-5,5	-1,8	-4,4	-6,8	-4,1	-5,9	-5,1	-7,6	
H ₃ COH	-48	-1,2	-2,0	-1,4	-1,6	-2,4	-0,4	-1,0	-0,4	-0,7	-1,5	-0,4	-1,0	-0,3	-0,8	-1,6	-0,6	-1,1	-0,6	-0,8	-1,6
C ₅ H ₈ O	-45,9	-2,6	-4,4	-2,1	-3,5	-5,0	-0,8	-1,8	-0,5	-1,4	-3,3	-0,7	-1,6	-0,1	-1,2	-3,1	-0,9	-1,6	-0,6	-1,3	-3,1
C ₇ H ₁₆	-44,9	-6,5	-10,2	-5,7	-8,4	-10,1	-3,1	-5,3	-2,5	-4,3	-6,5	-2,7	-4,9	-1,6	-3,9	-6,0	-3,6	-5,2	-3,0	-4,6	-6,7
CH ₃ OCH ₃	-44	-2,0	-3,2	-2,0	-2,6	-3,8	-0,7	-1,6	-0,5	-1,2	-2,2	-0,6	-1,5	-0,2	-1,0	-2,2	-0,7	-1,5	-0,6	-1,1	-2,1
C ₄ H ₈ O (tetraidrofurano)	-44	-3,8	-5,6	-3,6	-4,8	-6,4	-2,2	-3,3	-1,9	-2,8	-4,5	-2,0	-3,2	-1,5	-2,6	-4,4	-2,4	-3,2	-2,1	-2,8	-4,4
NaCl	-43,8	0,5	0,5	0,6	0,5	0,5	0,7	0,6	0,7	0,7	0,7	0,7	0,7	0,7	0,7	0,7	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5
(CH ₃) ₃ CCl	-43,5	-3,7	-6,0	-3,0	-4,7	-5,8	-2,0	-3,0	-1,5	-2,5	-3,6	-1,7	-2,8	-1,0	-2,2	-3,4	-2,5	-3,0	-2,1	-2,8	-3,7
C ₆ H ₁₄ (metil pentano)	-41,1	-5,9	-9,1	-4,0	-7,5	-8,9	-2,9	-4,9	-2,0	-3,9	-5,8	-2,6	-4,5	-1,3	-3,6	-5,4	-3,3	-4,7	-2,4	-4,1	-6,0
SiCl ₂	-40,3	-0,5	-0,5	-0,4	-0,4	-0,4	-0,4	-0,3	-0,4	-0,3	-0,3	-0,5	-0,3	-0,4	-0,3	-0,3	-1,9	-1,3	-1,7	-1,6	-1,2
C ₅ H ₁₂ (neopentano)	-40,2	-5,1	-7,5	-4,7	-6,3	-7,6	-2,6	-4,0	-2,5	-3,4	-4,9	-2,3	-3,6	-1,8	-3,1	-4,7	-3,0	-3,8	-3,1	-3,5	-5,0
C ₆ H ₁₄	-39,9	-5,7	-8,9	-4,0	-7,3	-8,7	-2,6	-4,6	-2,0	-3,7	-5,6	-2,3	-4,3	-1,3	-3,4	-5,2	-3,1	-4,6	-2,5	-3,9	-5,8
CH ₃ CHO	-39,7	-1,1	-1,9	-1,0	-1,5	-2,2	-0,1	-0,6	-0,1	-0,4	-1,4	-0,1	-0,5	0,1	-0,3	-1,3	-0,2	-0,7	-0,1	-0,4	-1,2
C ₄ H ₉ NO ₂	-39,1	-3,0	-5,3	-2,5	-3,9	-6,4	-0,9	-2,1	-0,6	-1,3	-4,3	-0,8	-2,0	-0,3	-1,2	-4,5	-1,2	-2,3	-0,8	-1,5	-4,2
ClF ₃	-38	-6,7	-6,7	-6,8	-6,7	-7,1	-6,6	-6,5	-6,7	-6,5	-7,1	-6,5	-6,5	-7,0	-6,4	-7,5	-7,7	-7,5	-6,7	-7,6	-6,6
CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ Cl	-37	-4,8	-7,0	-4,1	-5,8	-6,9	-3,0	-4,1	-2,4	-3,6	-4,8	-2,7	-4,0	-1,8	-3,3	-4,5	-3,3	-4,1	-2,7	-3,8	-4,8
(CH ₃) ₂ SO	-36,2	-4,7	-6,1	-4,5	-5,4	-6,3	-3,2	-3,9	-2,7	-3,5	-4,3	-3,0	-3,9	-2,6	-3,4	-4,5	-4,2	-5,0	-3,1	-4,6	-4,5
C ₆ H ₁₃ Br	-35,4	-5,1	-7,7	-3,6	-6,4	-7,6	-2,0	-3,6	-1,0	-2,9	-4,6	-1,7	-3,4	-0,4	-2,6	-4,3	-2,5	-3,7	-0,9	-3,2	-4,8

Moléculas	$\Delta H_{(exp)}$	1A	1B	1C	1D	1E	2A	2B	2C	2D	2E	3A	3B	3C	3D	3E	4A	4B	4C	4D	4E
C ₅ H ₁₂ (n-pentano)	-35,1	-5,0	-7,8	-4,4	-6,4	-7,6	-2,5	-4,2	-2,0	-3,4	-4,9	-2,2	-3,9	-1,3	-3,1	-4,6	-2,9	-4,1	-2,4	-3,6	-5,1
CH ₂ =CHF	-33,2	0,5	0,0	0,6	0,3	-0,3	1,0	0,7	1,2	0,8	0,1	1,1	0,8	1,4	0,9	0,1	0,9	0,5	1,1	0,7	0,3
OCS	-33	3,7	3,3	3,6	3,7	3,3	3,7	3,7	3,6	3,8	3,2	3,7	3,7	3,6	3,8	3,0	3,8	3,6	3,7	3,8	3,4
H ₂ O ₂	-32,5	-2,0	-2,1	-2,8	-2,1	-3,7	-1,6	-1,7	-2,2	-1,6	-3,1	-1,9	-1,9	-2,5	-1,9	-3,7	-1,7	-1,7	-2,4	-1,7	-3,5
C ₄ H ₁₀ (isobutano)	-32,1	-4,2	-6,4	-3,5	-5,3	-6,2	-2,1	-3,5	-1,7	-2,8	-4,0	-1,8	-3,2	-1,2	-2,6	-3,8	-2,4	-3,4	-2,1	-3,0	-4,2
NF ₃	-31,6	-2,3	-2,5	-2,6	-2,3	-3,4	-2,1	-2,3	-2,6	-2,1	-3,7	-2,2	-2,5	-2,9	-2,2	-4,3	-2,2	-2,2	-2,4	-2,2	-3,4
CH ₃ CH ₂ CH ₂ Cl	-31,5	-3,4	-5,2	-2,9	-4,2	-5,0	-2,0	-2,9	-1,4	-2,4	-3,3	-1,7	-2,8	-1,0	-2,3	-3,1	-2,3	-2,9	-1,7	-2,6	-3,4
C ₄ H ₁₀ (trans-butano)	-30	-4,0	-6,3	-3,3	-5,2	-6,1	-1,9	-3,4	-1,5	-2,7	-3,9	-1,6	-3,1	-0,9	-2,4	-3,6	-2,2	-3,3	-1,8	-2,9	-4,1
C ₆ H ₁₂	-29,5	-5,5	-8,4	-4,7	-6,9	-8,5	-3,0	-4,7	-2,5	-3,9	-5,9	-2,7	-4,4	-1,9	-3,6	-5,5	-3,5	-4,5	-3,0	-4,2	-6,1
C ₆ H ₄ O ₂	-29,4	-1,1	-1,7	-0,9	-1,4	-3,0	0,1	0,1	0,2	0,1	-2,4	0,0	0,3	0,4	0,1	-2,4	0,1	-0,2	0,4	0,1	-1,7
(CH ₃) ₃ CNH ₂	-28,9	-4,2	-6,6	-3,6	-5,4	-6,8	-1,9	-3,3	-1,5	-2,7	-4,3	-1,8	-3,2	-1,2	-2,6	-4,3	-2,2	-3,2	-1,8	-2,8	-4,4
C ₆ H ₅ F	-27,7	-1,1	-1,7	-0,8	-1,4	-2,6	-0,1	-0,4	0,2	-0,4	-2,1	-0,2	-0,2	0,4	-0,3	-2,1	-0,3	-0,8	0,2	-0,5	-1,5
COBr ₂	-27,1	3,2	4,0	3,8	3,6	3,9	4,1	4,6	4,3	4,4	3,9	4,1	4,6	4,3	4,4	3,8	4,2	4,5	4,4	4,4	4,2
C ₂ H ₅ Cl	-26,8	-2,8	-4,1	-2,4	-3,4	-3,9	-1,9	-2,5	-1,4	-2,2	-2,8	-1,7	-2,5	-1,1	-2,0	-2,6	-2,1	-2,5	-1,6	-2,3	-2,8
CO	-26,4	1,5	1,6	1,6	1,6	1,2	1,5	1,8	1,5	1,7	1,1	1,4	1,7	1,5	1,6	1,0	1,6	1,6	1,7	1,7	1,4
(CH ₃) ₃ CSH	-26,2	-3,8	-6,3	-3,4	-5,0	-6,1	-1,6	-2,9	-1,2	-2,2	-3,5	-1,4	-2,8	-0,8	-2,1	-3,3	-2,0	-2,8	-1,6	-2,5	-3,6
H ₂ CO	-26	0,7	0,5	0,6	0,6	0,0	1,2	1,0	1,0	1,1	0,4	1,2	1,1	1,2	1,1	0,4	1,2	0,9	1,1	1,1	0,5
C ₃ H ₈ (propene)	-25	-3,2	-5,0	-2,8	-4,1	-4,8	-1,5	-2,7	-1,3	-2,2	-3,1	-1,3	-2,5	-0,8	-1,9	-2,8	-1,8	-2,7	-1,6	-2,3	-3,2
CHCl ₃	-24,7	-2,5	-2,8	-2,2	-2,5	-2,8	-2,2	-2,2	-1,8	-2,1	-2,4	-2,1	-2,3	-1,8	-2,1	-2,4	-2,1	-2,1	-1,7	-2,1	-2,2
SiO	-24,6	-0,7	0,1	1,1	-0,3	-1,3	0,6	0,7	0,4	0,7	0,3	0,5	0,7	0,4	0,7	0,2	0,6	-0,1	0,6	0,4	0,7
CH ₃ CH=CHCHO	-24	-0,5	-1,5	-0,3	-1,0	-2,2	0,9	0,2	1,0	0,5	-1,0	0,9	0,4	1,3	0,6	-0,9	0,7	0,0	0,9	0,4	-0,8
C ₃ H ₇ Br	-23,8	-3,2	-4,2	-2,3	-3,7	-4,1	-1,4	-2,1	-0,8	-1,8	-2,5	-1,2	-1,9	-0,4	-1,5	-2,4	-1,7	-2,1	-1,0	-1,9	-2,6
C ₆ H ₅ OH	-23	-1,8	-2,3	-1,6	-2,1	-3,8	-0,5	-0,7	-0,2	-0,7	-2,9	-0,7	-0,7	-0,2	-0,9	-3,1	-0,9	-1,2	-0,6	-1,1	-2,7

Moléculas	$\Delta H_{(exp)}$	1A	1B	1C	1D	1E	2A	2B	2C	2D	2E	3A	3B	3C	3D	3E	4A	4B	4C	4D	4E
CCl ₄	-22,9	-1,6	-1,6	-1,4	-1,4	-1,5	-1,4	-1,4	-1,2	-1,2	-1,5	-1,3	-1,4	-1,2	-1,2	-1,4	-1,4	-1,3	-1,2	-1,3	-1,3
CH ₂ Cl ₂	-22,8	-2,4	-2,9	-2,1	-2,6	-2,9	-1,9	-2,2	-1,6	-2,0	-2,3	-1,8	-2,2	-1,5	-1,9	-2,3	-1,9	-2,1	-1,6	-2,0	-2,1
HCl	-22,1	-0,6	-0,7	-0,6	-0,6	-0,7	-0,5	-0,6	-0,5	-0,5	-0,6	-0,4	-0,6	-0,4	-0,5	-0,5	-0,5	-0,5	-0,5	-0,5	-0,5
C ₂ H ₆	-20,1	-2,4	-3,7	-2,0	-3,0	-3,5	-1,1	-2,0	-0,9	-1,6	-2,2	-0,9	-1,9	-0,5	-1,4	-2,0	-1,3	-2,1	-1,1	-1,8	-2,3
CH ₃ Cl	-19,5	-1,7	-2,4	-1,4	-2,0	-2,3	-1,1	-1,5	-0,8	-1,3	-1,6	-1,0	-1,5	-0,6	-1,2	-1,6	-1,1	-1,4	-0,8	-1,2	-1,5
C ₅ H ₁₀ (ciclopentano)	-18,3	-4,9	-7,2	-4,3	-6,1	-7,5	-3,0	-3,7	-2,5	-3,7	-5,4	-2,7	-4,0	-1,9	-3,4	-5,0	-2,6	-3,5	-3,0	-3,1	-4,8
CH ₃ CH ₂ SSCH ₂ CH ₃	-17,9	-6,5	-9,3	-5,7	-7,7	-8,7	-4,4	-5,4	-3,5	-4,9	-6,2	-4,0	-5,4	-2,9	-4,6	-6,0	-5,1	-5,9	-4,2	-5,4	-6,3
CH ₄	-17,9	-1,4	-2,3	-1,3	-1,8	-2,1	-0,6	-1,2	-0,5	-0,9	-1,2	-0,5	-1,1	-0,3	-0,8	-1,1	-0,7	-1,2	-0,6	-0,9	-1,2
CH ₃ NO ₂	-17,8	-1,0	-1,4	-0,5	-1,3	-3,0	-0,1	-0,7	0,3	-0,2	-2,4	-0,2	-0,7	0,3	-0,3	-2,7	0,3	-1,0	0,2	0,2	-2,2
HOCl	-17,8	-2,1	-2,2	-2,2	-2,1	-2,5	-1,9	-1,9	-2,2	-1,9	-2,5	-2,0	-2,1	-2,3	-2,0	-2,8	-2,1	-2,1	-2,0	-2,1	-2,3
C ₃ H ₆ Br ₂	-17,1	-1,2	-1,3	0,4	-1,2	-1,3	0,7	0,6	1,7	0,7	0,1	0,9	0,8	2,1	0,9	0,2	0,5	0,6	1,5	0,6	0,1
CH ₃ ONO	-15,9	-1,3	-2,2	-1,2	-1,6	-3,6	-0,5	-0,7	-0,7	-0,5	-3,0	-0,7	-0,8	-0,8	-0,6	-3,5	-0,6	-0,8	-0,7	-0,6	-2,9
C ₅ H ₁₀ S	-15,2	-4,9	-7,5	-4,1	-6,1	-7,5	-2,8	-4,1	-2,1	-3,5	-5,1	-2,5	-3,9	-1,5	-3,2	-4,9	-3,3	-4,0	-2,5	-3,7	-5,2
C ₂ H ₅ Br	-14,8	-1,5	-2,2	-0,6	-1,8	-2,0	-0,2	-0,7	0,4	-0,4	-1,0	0,0	-0,6	0,7	-0,3	-0,8	-0,4	-0,8	0,2	-0,6	-1,0
ClF	-13,2	-3,3	-3,3	-3,2	-3,3	-3,3	-3,2	-3,2	-3,3	-3,2	-3,4	-3,2	-3,2	-3,4	-3,2	-3,5	-3,5	-3,5	-3,2	-3,5	-3,3
C ₅ H ₈ Br ₂	-13,1	-1,2	-1,4	0,8	-1,2	-1,8	1,1	1,2	2,7	1,3	0,0	1,4	1,4	3,1	1,6	0,2	1,0	1,3	2,1	1,2	0,1
C ₂ H ₄ O	-12,6	-1,8	-2,5	-2,3	-2,2	-3,6	-0,9	-1,6	-1,2	-1,3	-2,6	-0,9	-1,5	-1,0	-1,2	-2,6	-1,0	-1,6	-1,2	-1,2	-2,2
CH ₂ CO	-11,4	1,3	0,9	1,4	1,2	0,8	1,8	1,8	1,9	1,8	0,9	1,8	1,9	2,1	1,9	0,9	1,8	1,5	1,8	1,7	1,2
CH ₃ CH ₂ NH ₂	-11,3	-2,4	-3,9	-2,1	-3,1	-4,1	-0,9	-1,8	-0,6	-1,4	-2,5	-0,8	-1,8	-0,4	-1,4	-2,5	-1,0	-1,8	-0,9	-1,5	-2,6
C ₅ H ₁₀ NH (piperidina)	-11,3	-5,2	-7,8	-4,4	-6,5	-8,3	-2,9	-4,4	-2,2	-3,7	-5,9	-2,8	-4,3	-1,9	-3,6	-5,8	-3,3	-4,2	-2,6	-3,9	-6,0
C ₂ H ₅ SH (etanolíol)	-11,1	-3,2	-4,5	-2,8	-3,8	-4,4	-1,8	-2,6	-0,8	-2,2	-3,0	-1,7	-2,7	-0,5	-2,2	-2,9	-2,1	-2,7	-1,7	-2,4	-3,1
NH ₃	-11	-1,2	-1,7	-1,2	-1,4	-1,9	-0,6	-0,9	-0,5	-0,7	-1,2	-0,6	-0,9	-0,5	-0,8	-1,3	-0,5	-0,7	-0,5	-0,6	-1,1
CBrCl ₃	-10	0,8	1,1	1,3	1,1	1,2	1,3	1,5	1,6	1,5	1,4	1,4	1,4	1,6	1,6	1,4	1,3	1,6	1,7	1,5	1,5

Moléculas	$\Delta H_{(exp)}$	1A	1B	1C	1D	1E	2A	2B	2C	2D	2E	3A	3B	3C	3D	3E	4A	4B	4C	4D	4E
CH ₃ SCH ₃	-8,9	-2,8	-4,1	-2,2	-3,4	-3,9	-1,5	-2,3	-1,0	-1,9	-2,5	-1,3	-2,2	-0,6	-1,8	-2,5	-1,5	-2,2	-1,0	-1,8	-2,4
C ₄ H ₄ O	-8,3	-0,9	-1,4	-0,9	-1,1	-2,7	-0,1	-0,4	0,1	-0,3	-2,1	-0,1	-0,4	0,3	-0,3	-2,1	-0,2	-0,6	0,0	-0,3	-1,6
C ₄ H ₈ S	-8,2	-4,6	-6,5	-3,8	-5,5	-6,6	-2,9	-3,9	-2,2	-3,4	-4,8	-2,7	-3,8	-1,8	-3,2	-4,6	-3,3	-3,8	-2,6	-3,6	-4,8
CH ₃ SiH ₃	-7	-3,3	-4,3	-3,1	-3,7	-3,9	-2,4	-3,2	-2,5	-2,8	-3,0	-2,3	-3,2	-2,3	-2,8	-2,9	-2,3	-3,0	-2,2	-2,6	-2,9
(CH ₃) ₃ N	-5,7	-3,1	-5,0	-2,3	-4,0	-5,3	-1,1	-2,3	-0,6	-1,7	-3,2	-1,0	-2,2	-0,3	-1,6	-3,1	-1,3	-2,1	-0,8	-1,7	-3,2
CH ₃ SH	-5,5	-2,1	-3,0	-1,9	-2,5	-2,8	-1,2	-1,8	-0,9	-1,5	-1,9	-1,1	-1,8	-0,8	-1,5	-1,9	-1,3	-1,8	-1,0	-1,5	-1,8
CH ₃ NH ₂	-5,5	-2,3	-3,4	-2,2	-2,9	-3,6	-1,3	-2,0	-1,1	-1,7	-2,5	-1,3	-2,0	-1,0	-1,7	-2,5	-1,4	-2,0	-1,2	-1,7	-2,5
ClFO ₃	-5,1	-12,6	-13,0	-12,5	-12,7	-12,6	-12,1	-12,1	-12,0	-12,1	-12,5	-11,8	-12,2	-12,5	-11,8	-14,3	-18,3	-18,5	-15,3	-19,0	-13,3
H ₂ S	-4,9	-0,9	-1,1	-1,0	-1,0	-1,1	-0,4	-0,6	-0,4	-0,5	-0,6	-0,4	-0,8	-0,4	-0,6	-0,7	-0,4	-0,6	-0,5	-0,5	-0,7
(CH ₃) ₂ NH	-4,4	-3,2	-4,7	-2,8	-3,9	-5,0	-1,7	-2,7	-1,4	-2,2	-3,4	-1,6	-2,7	-1,1	-2,2	-3,4	-1,9	-2,7	-1,6	-2,3	-3,4
SCl ₂	-4,2	-4,4	-3,8	-3,9	-4,0	-3,8	-3,9	-3,8	-3,8	-3,8	-3,9	-3,9	-3,9	-3,9	-3,8	-4,0	-5,0	-4,4	-4,2	-4,7	-3,9
H ₂ COH	-4,1	-0,7	-1,4	-0,5	-1,0	-1,6	0,1	-0,5	0,2	-0,2	-0,8	0,0	-0,5	0,2	-0,2	-0,9	0,0	-0,6	0,0	-0,2	-0,8
C ₄ H ₈ (isobutano)	-4	-2,4	-3,9	-1,8	-3,2	-4,0	-0,9	-1,9	-0,5	-1,5	-2,7	-0,7	-1,7	0,0	-1,3	-2,4	-1,0	-1,9	-0,7	-1,5	-2,5
S ₂ Cl ₂	-4	-3,3	-2,3	-2,5	-2,6	-2,4	-2,5	-2,3	-2,2	-2,2	-2,5	-2,5	-2,4	-2,3	-2,2	-2,5	-4,0	-3,0	-2,7	-3,5	-2,4
CH ₃ CH ₂ O	-3,7	-1,6	-3,0	-3,1	-2,2	-8,0	-0,4	-1,5	-1,9	-1,0	-6,8	-0,3	-1,4	-1,6	-0,8	-6,8	-0,6	-1,6	-2,1	-1,1	-6,8
C ₄ H ₆ O	-3,3	-0,9	-1,4	-0,5	-1,2	-2,5	0,0	-0,3	0,5	-0,3	-2,0	0,0	-0,2	0,7	-0,2	-1,9	-0,1	-0,5	0,2	-0,3	-1,6
C ₂ Cl ₄	-3	0,7	0,8	0,9	0,8	0,6	1,0	1,1	1,2	1,1	0,6	1,1	0,9	1,2	1,2	0,5	0,8	1,1	1,1	1,0	0,8
CH ₃ CO (2A')	-2,4	-0,4	-1,2	-0,2	-0,7	-1,3	0,3	-0,1	0,4	0,1	-0,7	0,3	-0,1	0,5	0,2	-0,7	0,4	-0,1	0,5	0,2	-0,5
C ₄ H ₈ NH	-0,8	-4,1	-6,1	-3,6	-5,1	-6,8	-2,3	-3,4	-1,9	-2,9	-4,8	-2,2	-3,3	-1,5	-2,8	-4,7	-2,5	-3,2	-2,3	-3,0	-4,8
F ₂	0	-2,6	-2,5	-3,0	-2,6	-3,5	-2,7	-2,6	-3,2	-2,6	-3,9	-2,8	-2,7	-3,5	-2,7	-4,3	-2,6	-2,4	-3,1	-2,5	-3,8
H ₂	0	0,9	0,8	1,0	0,9	0,9	1,0	0,8	1,1	0,9	0,9	1,0	0,8	1,2	0,9	0,9	1,0	0,9	0,9	0,9	0,9
Cl ₂	0	-3,1	-2,7	-2,7	-2,8	-2,6	-2,6	-2,7	-2,8	-2,6	-2,8	-2,6	-2,8	-2,9	-2,6	-2,9	-3,4	-3,1	-2,7	-3,2	-2,7

Moléculas	$\Delta H_{(exp)}$	1A	1B	1C	1D	1E	2A	2B	2C	2D	2E	3A	3B	3C	3D	3E	4A	4B	4C	4D	4E
O ₂	0	-0,4	-1,2	-0,4	-0,5	-0,6	-0,2	-0,2	-0,4	-0,1	-1,1	-0,3	-0,1	-0,5	-0,1	-1,4	-0,3	-0,4	-0,4	-0,2	-1,2
N ₂	0	0,5	-1,0	0,3	0,2	0,6	0,5	1,1	0,7	0,9	-0,1	0,5	1,0	0,7	0,9	-0,1	0,8	-0,1	0,7	0,7	0,6
SO	1,2	-0,7	-0,6	-0,8	-0,6	-1,1	-0,7	-0,7	-0,8	-0,7	-0,9	-0,7	-0,7	-0,8	-0,7	-1,0	-1,4	-2,0	-1,2	-1,7	-0,9
PH ₃	1,3	-1,4	-1,9	-1,5	-1,6	-1,7	-0,2	-0,8	-0,3	-0,4	-0,5	-0,2	-0,8	-0,3	-0,5	-0,5	-0,4	-0,8	-0,6	-0,6	-0,7
N ₂ O ₄	2,2	0,5	-0,4	-0,3	0,5	-3,1	1,1	1,1	0,2	1,6	-2,8	0,7	1,1	-0,2	1,4	-3,6	1,0	0,2	0,1	1,2	-2,5
CINO ₂	2,9	-0,1	-0,2	-0,2	0,0	-0,8	0,4	0,4	-0,1	0,6	-1,4	0,2	0,4	-0,2	0,5	-1,8	0,2	-0,2	-0,1	0,3	-0,9
CH ₃ O	4,1	-0,4	-2,5	-2,4	-1,6	-2,5	0,4	-1,6	-1,7	0,0	-1,8	0,4	-1,6	-1,4	0,1	-1,7	0,3	-1,6	-1,7	-0,7	-1,7
CH ₃ -CH=CH ₂	4,8	-1,4	-2,4	-0,9	-1,9	-2,5	-0,4	-1,1	-0,1	-0,8	-1,8	-0,3	-0,9	0,3	-0,6	-1,5	-0,5	-1,1	-0,1	-0,8	-1,5
(CH ₃) ₂ CHCN	5,6	-2,8	-4,7	-2,3	-3,6	-4,6	-1,4	-2,0	-0,8	-1,7	-3,3	-1,3	-1,8	-0,5	-1,5	-3,2	-1,5	-2,4	-1,0	-1,8	-3,1
F ₂ O	5,9	-3,0	-3,0	-3,6	-2,9	-4,2	-2,9	-2,9	-3,8	-2,8	-4,7	-3,1	-3,0	-4,2	-3,0	-5,3	-3,0	-2,8	-3,9	-2,8	-4,9
C ₄ H ₈ (ciclobutano)	6,8	-3,3	-5,3	-3,0	-4,2	-5,5	-1,7	-2,8	-1,3	-2,3	-3,8	-1,5	-2,6	-0,9	-2,1	-3,5	-1,9	-2,6	-1,7	-2,3	-3,7
NO ₂	7,9	0,2	-0,8	0,1	0,2	-0,8	0,4	-2,8	0,0	0,5	-1,3	0,2	-2,2	-0,2	0,4	-1,6	0,4	-0,6	0,2	0,4	-0,9
SiH ₄	8,2	-1,1	-1,6	-1,2	-1,3	-1,3	-0,6	-1,2	-1,0	-0,9	-0,8	-0,6	-1,3	-0,9	-0,9	-0,7	-0,5	-0,9	-0,6	-0,7	-0,7
CH ₂ =CHCl	8,9	2,8	2,3	3,2	2,6	2,2	3,1	3,0	3,5	3,0	2,4	3,3	3,0	3,7	3,1	2,5	3,1	2,8	3,5	3,0	2,6
OH	9,4	1,2	1,0	1,1	1,1	1,0	1,2	1,1	1,2	1,2	1,1	1,2	1,0	1,1	1,1	0,9	1,2	1,1	1,1	1,2	1,0
HCO	10	1,2	1,0	1,2	1,2	0,7	1,4	1,4	1,3	1,5	0,8	1,4	1,4	1,5	0,7	1,5	1,4	1,5	1,6	1,0	
C ₆ H ₅ -CH ₃ (tolueno)	12	-1,1	-2,7	-0,5	-1,7	-3,1	-0,3	-1,0	0,9	-0,8	-2,2	0,4	-0,8	1,3	-0,6	-1,9	0,2	-0,5	0,8	-0,2	-1,6
(CH ₃) ₃ C	12,3	-4,3	-6,5	-2,5	-5,3	-6,1	-2,4	-3,9	-2,1	-3,1	-4,2	-2,1	-3,7	-1,6	-2,9	-3,9	-2,5	-3,8	-2,3	-3,1	-4,1
C ₆ H ₅ Cl	12,4	-0,9	-1,3	-0,4	-1,1	-2,3	0,0	-0,1	0,5	-0,2	-1,9	0,0	-0,1	0,9	-0,1	-1,7	-0,3	-0,5	0,3	-0,4	-1,5
CINO	12,4	-0,7	-1,0	-0,7	-0,8	-1,1	-0,7	-0,5	-1,0	-0,5	-2,0	-0,8	-0,5	-1,1	-0,6	-2,2	-0,7	-1,1	-0,7	-0,7	-1,3
C ₂ H ₄	12,5	-0,3	-0,9	0,0	-0,6	-1,0	0,1	-0,2	0,5	-0,1	-0,8	0,2	-0,1	0,8	0,0	-0,5	0,1	-0,3	0,3	-0,1	-0,5
C ₃ H ₆ (ciclopropano)	12,7	-3,0	-4,5	-2,7	-3,7	-4,6	-2,0	-2,9	-1,7	-2,5	-3,5	-1,8	-2,8	-1,3	-2,4	-3,3	-2,1	-2,7	-1,8	-2,4	-3,3
P ₄	14,1	-0,4	-0,8	-0,7	-0,4	-0,9	-0,3	-0,3	-0,7	-0,3	-0,6	-0,3	-0,3	-0,8	-0,2	-0,6	-1,6	-1,7	-0,7	-1,6	-0,6

Moléculas	$\Delta H_{(exp)}$	1A	1B	1C	1D	1E	2A	2B	2C	2D	2E	3A	3B	3C	3D	3E	4A	4B	4C	4D	4E
CH ₃ C=OCCH	15,6	-3,1	-4,5	-2,7	-3,6	-4,1	-1,4	-1,4	-1,3	-1,5	-3,1	-1,3	-1,3	-1,0	-1,3	-2,9	-1,2	-1,9	-1,1	-1,3	-2,4
C ₅ H ₈ (isopreno)	18	-1,4	-2,5	-0,7	-2,0	-3,0	-0,2	-0,9	0,4	-0,7	-2,2	0,0	-0,6	0,9	-0,4	-1,9	-0,4	-1,1	0,1	-0,8	-1,9
CH ₃ CN	18	0,3	-0,6	0,4	-0,1	-0,5	0,9	0,9	1,2	1,0	-0,1	1,0	1,0	1,4	1,0	-0,1	1,1	0,4	1,2	0,9	0,3
C ₂ H ₃ Br	18,9	2,1	1,8	2,5	1,9	1,7	2,5	2,4	2,9	2,4	1,8	2,6	2,5	3,2	2,6	2,0	2,5	2,3	2,9	2,4	2,0
Si ₂ H ₆	19,1	-2,3	-3,3	-1,8	-2,8	-2,7	-1,7	-2,6	-1,4	-2,1	-2,0	-1,7	-2,7	-1,3	-2,2	-2,0	-1,6	-2,1	-1,7	-1,8	-1,9
N ₂ O	19,6	0,9	-1,5	0,4	0,4	0,5	1,2	1,0	0,9	1,5	-0,4	1,1	1,0	0,9	1,5	-0,5	1,4	-0,3	1,1	1,3	0,6
C ₂ H ₄ S	19,6	-0,8	-2,0	-0,7	-1,3	-2,0	-0,2	-0,8	0,0	-0,5	-1,3	-0,1	-0,8	0,1	-0,4	-1,3	-0,4	-0,7	-0,1	-0,6	-1,1
C ₆ H ₆	19,7	-1,1	-1,7	-0,7	-1,5	-2,7	-0,3	-0,6	0,2	-0,6	-2,3	-0,2	-0,2	0,6	-0,4	-2,1	-0,2	-0,5	0,2	-0,4	-1,6
N ₂ O ₃	19,8	-0,1	-0,9	-0,7	-0,1	-3,6	0,5	0,8	-0,1	1,0	-2,9	0,2	0,7	-0,4	0,8	-3,6	0,6	0,1	0,0	0,9	-2,6
C ₅ H ₆ S (metiltiofeno)	20	-1,1	-2,2	-0,7	-1,6	-2,8	-0,1	-0,7	0,4	-0,4	-2,0	0,1	-0,7	0,7	-0,3	-1,9	-0,5	-1,0	-0,1	-0,7	-1,8
C ₄ H ₆ S	20,8	-1,7	-3,0	-1,1	-2,3	-3,2	-0,6	-1,3	-0,1	-1,0	-2,4	-0,4	-1,2	0,3	-0,9	-2,2	-0,8	-1,4	-0,1	-1,1	-2,1
C ₆ H ₅ NH ₂	20,8	-1,2	-1,9	-0,8	-1,6	-3,2	0,1	-0,4	0,5	-0,2	-2,4	0,0	-0,2	0,7	-0,3	-2,4	-1,3	-0,3	-0,9	-0,2	-2,1
(CH ₃) ₂ CH	21,5	-2,6	-4,4	-2,2	-3,4	-3,9	-1,1	-2,4	-0,9	-1,7	-2,5	-0,9	-2,2	-0,5	-1,5	-2,2	-1,3	-2,3	-0,4	-1,7	-2,4
NO	21,6	-1,1	-2,7	-1,0	-1,7	-0,4	-0,1	-2,1	-0,2	-0,3	-0,6	-0,1	-2,1	-0,2	-0,3	-0,6	-0,5	-2,6	-0,4	-1,1	-0,3
H ₂ NNH ₂	22,8	-2,4	-3,1	-2,6	-2,8	-4,0	-1,5	-1,9	-1,5	-1,7	-2,9	-1,7	-2,1	-1,8	-1,9	-3,3	-1,4	-1,8	-1,6	-1,6	-2,9
ClO	24,2	-3,5	-3,3	-3,4	-3,4	-3,4	-3,4	-3,4	-3,6	-3,4	-3,5	-3,4	-3,7	-3,8	-3,4	-3,7	-3,9	-3,7	-3,5	-3,8	-3,5
C ₅ H ₇ N	24,6	-1,3	-2,3	-0,1	-1,8	-3,4	-0,2	-0,9	0,4	-0,6	-2,7	-0,1	-0,8	1,4	-0,6	-2,6	0,2	-1,2	0,7	-0,7	-1,7
C ₆ H ₈ (ciclohexa-1,4-dieno)	25	-2,8	-4,4	-2,3	-3,6	-4,9	-1,6	-2,4	-1,2	-2,1	-4,0	-1,4	-2,1	-0,6	-1,9	-3,7	-1,6	-2,4	-1,2	-2,0	-3,5
C ₆ H ₅ Br	25,2	1,3	1,1	2,0	1,2	0,2	2,5	2,4	3,1	2,3	0,7	2,6	2,7	3,4	2,5	0,9	2,3	2,1	2,9	2,2	1,2
C ₆ H ₈ (ciclohexa-1,3-dieno)	25,4	-2,2	-3,6	-1,6	-2,9	-4,3	-1,0	-1,7	-0,5	-1,5	-3,4	-0,8	-1,5	0,0	-1,3	-3,1	-1,0	-1,7	-0,6	-1,3	-2,9
C ₄ H ₅ N	25,9	-0,8	-1,3	-0,5	-1,1	-2,5	-0,1	-0,5	0,3	-0,4	-2,2	-0,2	-0,5	0,4	-0,5	-2,2	-0,4	-0,9	-0,2	-0,6	-2,0
CH ₂ CHCHCH ₂	26,3	-0,6	-1,3	-0,1	-1,0	-1,8	0,1	-0,3	0,7	-0,2	-1,5	0,3	-0,1	1,1	0,0	-1,2	0,0	-0,5	0,4	-0,2	-1,1
C ₄ H ₄ S	27,5	-0,6	-1,1	-0,4	-0,8	-1,8	-0,1	-0,3	0,3	-0,2	-1,5	0,1	-0,3	0,5	-0,1	-1,4	-0,3	-0,6	0,0	-0,4	-1,2

Moléculas	$\Delta H_{(exp)}$	1A	1B	1C	1D	1E	2A	2B	2C	2D	2E	3A	3B	3C	3D	3E	4A	4B	4C	4D	4E
CS ₂	28	3,5	3,3	3,5	3,5	3,2	3,4	3,2	3,4	3,4	3,0	3,4	3,2	3,4	3,4	3,0	3,3	3,1	3,2	3,2	3,2
C ₂ H ₅	28,9	-1,5	-2,8	-0,6	-2,0	-2,3	-0,5	-1,5	0,3	-1,0	-1,4	0,2	-1,3	0,6	-0,8	-1,2	-0,7	-1,4	0,1	-1,0	-1,4
CH ₃ S	29,8	-0,5	-1,2	-0,6	-0,8	-0,9	0,1	-0,4	0,0	-0,1	-0,3	0,3	-0,3	0,1	0,0	-0,2	0,2	-0,3	-0,1	0,0	-0,2
C ₂ H ₄ NH	30,2	-2,8	-3,7	-2,8	-3,3	-4,6	-1,6	-2,3	-1,6	-2,0	-3,5	-1,7	-2,3	-1,5	-2,0	-3,5	-1,7	-2,2	-1,7	-2,0	-3,3
S ₂	30,7	-1,3	-1,0	-1,0	-1,1	-0,8	-0,8	-0,7	-0,8	-0,7	-0,8	-0,7	-0,7	-0,8	-0,7	-0,9	-1,2	-1,3	-1,0	-1,2	-0,8
HCN	31,5	0,9	0,6	1,0	0,9	0,5	1,4	1,9	1,6	1,7	0,7	1,3	1,9	1,6	1,7	0,7	1,7	1,4	1,6	1,7	1,3
ClCN	32,9	1,7	1,5	1,6	1,7	1,4	1,7	2,0	1,8	1,9	1,1	1,6	2,0	1,8	1,9	1,0	1,7	1,5	1,7	1,8	1,4
PH ₂	33,1	1,0	0,8	1,1	1,0	0,9	1,5	1,2	1,5	1,4	1,4	1,5	1,1	1,5	1,4	1,3	1,4	1,2	1,4	1,3	1,3
LiH	33,3	0,6	0,6	0,6	2,5	0,6	0,5	0,5	0,5	0,6	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,6	0,5	0,5	0,5	0,5
C ₅ H ₅ N	33,6	-0,4	-1,0	0,0	-0,8	-2,2	0,5	0,3	1,0	0,3	-1,6	0,5	0,4	1,2	0,3	-1,5	0,3	-0,2	0,7	0,1	-1,2
Na ₂	34	3,6	3,6	3,7	3,6	3,6	4,0	4,0	4,0	4,0	4,0	4,0	4,0	4,0	4,0	4,0	4,0	4,0	4,0	4,0	4,0
O ₃	34,1	-1,7	-3,7	-2,4	-1,6	-4,0	-1,9	-2,9	-3,1	-1,3	-5,3	-2,4	-2,8	-3,5	-1,4	-6,4	-2,1	-3,1	-3,0	-1,3	-5,6
HS	34,2	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3	0,6	0,4	0,5	0,5	0,4	0,5	0,3	0,5	0,5	0,4	0,5	0,4	0,5	0,5	0,4
P ₂	34,3	-0,1	-0,4	-0,1	-0,2	0,1	0,2	0,2	0,2	0,2	0,0	0,2	0,2	0,2	0,2	-0,1	0,1	-0,6	0,0	-0,1	0,1
C ₄ H ₆ (2-butino)	34,8	-2,1	-3,8	-1,4	-2,9	-3,0	-0,2	-0,8	0,8	-0,5	-1,1	0,0	-0,6	1,2	-0,3	-1,4	0,1	-1,1	0,8	-0,4	-1,1
CH ₃	35	0,2	-0,3	1,2	0,0	-0,1	0,6	0,1	0,9	0,4	0,3	0,7	0,2	1,1	0,5	0,4	0,4	0,1	0,7	0,3	0,2
C ₁₀ H ₈ (naftaleno)	35,9	0,6	0,2	1,2	0,2	-1,8	2,0	1,9	2,7	1,7	-1,2	2,0	2,0	3,1	1,7	-0,9	1,6	1,1	1,6	1,4	-0,6
C ₄ H ₆ (ciclobuteno)	37,4	-3,3	-4,6	-3,1	-4,0	-5,2	-2,2	-2,9	-2,0	-2,6	-4,1	-2,1	-2,7	-1,6	-2,5	-3,8	-2,3	-2,9	-2,2	-2,6	-3,9
CH ₃ -CH=C=CH ₂	38,8	-0,2	-1,5	0,1	-0,9	-1,4	0,7	0,1	1,2	0,3	-0,9	0,9	0,4	1,6	0,6	-0,5	0,8	0,1	1,2	0,5	-0,3
CH ₂ CHCN	43,2	-0,6	-1,2	-0,3	-0,8	-1,4	-0,2	0,0	0,3	-0,1	-1,4	-0,2	0,2	0,5	0,0	-1,3	-0,2	-0,6	0,2	-0,1	-1,0
LiNa	43,4	4,1	4,1	4,1	4,1	4,1	4,1	4,1	4,1	4,1	4,1	4,1	4,1	4,1	4,1	4,1	4,1	4,1	4,1	4,1	4,1
CH ₃ CCH	44,2	-0,8	-2,0	-1,0	-1,3	-1,5	0,5	0,3	0,7	0,4	-0,6	0,6	0,5	1,0	0,5	-0,4	0,7	0,0	0,7	0,5	-0,1
C ₅ H ₈ (espiropentano)	44,3	-3,3	-5,3	-2,9	-4,3	-5,7	-1,9	-3,1	-1,5	-2,6	-4,3	-1,7	-3,0	-1,2	-2,4	-4,0	-2,1	-2,8	-1,9	-2,5	-4,0

Moléculas	$\Delta H_{(exp)}$	1A	1B	1C	1D	1E	2A	2B	2C	2D	2E	3A	3B	3C	3D	3E	4A	4B	4C	4D	4E
NH ₂	45,1	0,8	0,4	0,7	0,6	0,4	1,2	0,8	1,1	1,0	0,8	1,0	0,7	1,0	0,9	0,6	1,1	0,9	1,0	1,0	0,8
CH ₂ =C=CH ₂ (aleno)	45,5	1,0	0,3	1,3	0,6	0,4	1,4	1,2	1,9	1,2	0,4	1,6	1,4	2,3	1,4	0,6	1,6	1,1	1,9	1,4	0,9
C ₄ H ₄ N ₂ (1,4- dipiridina)	46,8	-2,4	-3,0	-2,0	-2,7	-4,2	-1,7	-1,9	-1,3	-1,9	-3,9	-1,9	-1,8	-1,2	-1,9	-4,0	-1,8	-2,1	-1,5	-1,9	-3,5
C ₄ H ₄ N ₂ (pirimidina)	46,9	1,8	1,4	2,2	1,5	0,0	2,7	2,5	3,2	2,5	0,5	2,6	2,6	3,3	2,5	0,5	2,7	2,3	3,0	2,5	1,0
SiH ₃	47,9	0,3	0,0	0,4	0,2	0,1	0,8	0,3	0,5	0,6	0,6	0,8	0,2	0,5	0,5	0,6	0,8	0,5	0,7	0,7	0,6
C ₄ H ₆	47,9	0,3	-1,0	0,6	-0,4	-1,2	1,3	0,5	1,6	0,8	-0,5	1,5	0,7	2,0	1,0	-0,2	1,2	0,5	1,4	0,8	-0,2
NCCH ₂ CH ₂ CN	50,1	0,7	-0,8	0,9	0,2	-0,8	1,6	1,9	2,2	1,8	-0,3	1,5	2,0	2,4	1,8	-0,3	1,6	0,8	2,0	1,6	0,1
Li ₂	51,6	3,5	3,6	3,4	3,6	3,6	4,2	4,2	4,2	4,2	4,2	4,2	4,2	4,2	4,2	4,2	4,1	4,1	4,2	4,1	4,1
C ₄ H ₆	51,9	-4,7	-6,1	-4,7	-5,4	-7,0	-3,2	-4,1	-3,2	-3,7	-5,3	-3,1	-4,0	-2,9	-3,6	-5,1	-3,3	-3,9	-3,3	-3,6	-4,9
C ₂ H ₂	54,2	-0,1	-0,6	-0,5	-0,3	-0,5	0,4	0,9	0,7	0,6	-0,2	0,5	0,9	0,7	0,6	-0,1	0,7	0,6	0,6	0,7	0,3
SiH ₂ (¹ A)	65,2	1,0	0,9	1,1	1,0	0,9	1,4	1,0	1,1	1,2	1,3	1,4	1,0	1,2	1,2	1,2	1,3	1,2	1,3	1,2	1,2
C ₃ H ₄	66,2	-2,7	-3,4	-2,7	-3,0	-3,9	-2,0	-2,3	-1,9	-2,2	-3,3	-1,8	-2,2	-1,6	-2,0	-3,1	-1,9	-2,3	-1,9	-2,0	-2,9
CS	66,9	1,6	1,5	1,6	1,6	1,4	1,6	1,5	1,6	1,6	1,3	1,5	1,5	1,5	1,5	1,2	1,6	1,5	1,5	1,6	1,5
C ₁₀ H ₈ (azuleno)	69,1	-1,1	-2,0	-0,6	-1,6	-3,5	0,3	-0,5	0,9	-0,1	-2,9	0,2	-0,5	1,2	-0,1	-2,6	-0,2	-1,5	0,3	-0,6	-2,4
C ₈ H ₈	70,7	-0,5	-1,6	0,2	-1,0	-2,6	0,1	0,1	0,9	0,0	-2,6	0,3	0,3	1,4	0,1	-2,3	0,5	0,0	1,3	0,3	-1,6
C ₂ H ₃	71,6	0,6	-0,4	0,7	0,2	0,1	1,4	-0,7	1,5	1,1	0,8	1,5	-0,5	1,8	1,2	1,0	1,3	0,0	1,3	1,0	0,8
NCCN	73,3	2,1	1,5	2,0	2,2	1,6	2,3	3,3	2,7	3,0	1,2	2,1	3,3	2,5	2,8	1,0	1,8	1,7	2,1	2,2	1,2
C ₆ H ₅	81,2	-3,7	-6,4	-3,5	-4,1	-4,6	-2,0	-7,9	-1,8	-2,3	-3,4	-2,1	-7,4	-1,6	-2,3	-3,4	-2,7	-5,4	-2,7	-3,1	-3,5
BeH	81,7	-5,5	-5,6	-5,5	-4,8	-5,6	-5,4	-5,5	-5,6	-5,5	-5,4	-5,4	-5,6	-5,6	-5,5	-5,4	-5,4	-5,5	-5,6	-5,6	-5,4
NH	85,2	1,8	1,5	2,2	1,7	1,6	1,8	1,6	1,9	1,8	1,7	1,8	1,5	2,5	1,7	1,6	1,8	1,7	2,3	1,7	1,7
SiH ₂ (³ B)	86,2	1,9	1,7	2,0	1,9	1,8	2,2	1,8	2,0	2,0	2,1	2,2	1,7	2,0	2,0	2,1	2,2	2,0	2,1	2,1	2,1
CH ₂ (³ B)	93,7	1,6	1,1	1,6	1,5	1,4	2,1	1,7	2,0	2,0	1,9	2,2	1,7	2,2	2,0	2,0	2,0	1,6	1,8	1,8	1,8
CH ₂ (¹ A)	102,8	0,4	0,0	0,5	0,2	0,1	0,8	0,5	0,8	0,6	0,6	0,8	0,5	1,0	0,7	0,6	0,7	0,5	0,6	0,5	0,5

Moléculas	$\Delta H_{(exp)}$	1A	1B	1C	1D	1E	2A	2B	2C	2D	2E	3A	3B	3C	3D	3E	4A	4B	4C	4D	4E
CN	104,9	0,1	-1,8	0,0	-0,1	0,1	0,2	-3,9	0,0	0,3	-0,2	0,2	-4,0	0,0	0,3	-0,3	0,3	-2,2	-0,1	0,1	0,1
CCH	135,1	-0,3	-0,5	-0,9	0,1	0,0	2,6	-2,5	-7,1	1,1	0,5	-3,6	-2,4	-5,5	0,6	0,6	-6,3	-0,6	-7,0	2,3	0,8
Si ₂	139,9	1,3	1,5	1,4	2,3	1,5	2,4	2,4	2,3	2,4	1,5	2,4	2,4	2,4	1,5	2,3	2,4	1,4	2,3	1,5	
CH	142,5	1,8	1,6	2,0	1,8	1,7	1,9	1,7	1,9	1,8	1,8	1,9	1,7	1,9	1,8	1,8	1,7	1,7	1,8	1,7	
Erro Médio Absoluto (kcal mol ⁻¹)		2,27	3,04	2,10	2,62	3,24	1,67	2,10	1,64	1,86	2,51	1,62	2,05	1,58	1,81	2,52	1,96	2,24	1,78	2,06	2,47

Anexo II. Erros de entalpia de formação (kcal mol⁻¹) obtidos por fatores de escalamento vibracionais distintos para moléculas do grupo G3/05).

Moléculas	$\Delta H_{(exp)}$	0,86	0,87	0,88	0,89	0,90	0,91	0,92	0,93	0,94	0,95	0,96	0,97	0,98	0,99	1,00	1,01	1,02	Ftr, Min,	Err, Min,
SiF ₄	-386	-1,8	-1,8	-1,9	-1,9	-2,0	-2,1	-2,1	-2,2	-2,3	-2,3	-2,4	-2,4	-2,5	-2,6	-2,6	-2,7	-2,8	0,86	-1,8
PF ₅	-381,1	-4,9	-4,9	-5,0	-5,1	-5,2	-5,3	-5,3	-5,4	-5,5	-5,6	-5,7	-5,8	-5,8	-5,9	-6,0	-6,1	-6,2	0,86	-4,9
C ₂ F ₆	-321,3	2,1	1,9	1,8	1,6	1,5	1,3	1,2	1,0	0,8	0,7	0,5	0,4	0,2	0,1	-0,1	-0,3	-0,4	0,99	0,1
Al ₂ Cl ₆	-309,7	3,8	3,8	3,8	3,7	3,7	3,7	3,6	3,6	3,5	3,5	3,5	3,4	3,4	3,3	3,3	3,2	3,2	1,02	3,2
SF ₆	-291,7	-7,9	-8,0	-8,1	-8,2	-8,3	-8,4	-8,5	-8,6	-8,7	-8,8	-8,9	-9,0	-9,1	-9,2	-9,3	-9,4	-9,5	0,86	-7,9
AlF ₃	-289	1,2	1,1	1,1	1,1	1,0	1,0	0,9	0,9	0,9	0,8	0,8	0,7	0,7	0,7	0,6	0,6	0,5	1,02	0,5
BF ₃	-271,4	-2,3	-2,3	-2,4	-2,5	-2,5	-2,6	-2,6	-2,7	-2,8	-2,8	-2,9	-3,0	-3,1	-3,1	-3,2	-3,3	-3,3	0,86	-2,3
PF ₃	-229,1	-5,6	-5,6	-5,6	-5,7	-5,7	-5,8	-5,8	-5,8	-5,9	-5,9	-6,0	-6,0	-6,1	-6,1	-6,1	-6,2	-6,2	0,86	-5,6
C ₆ F ₆	-228,4	6,2	5,9	5,7	5,4	5,1	4,8	4,5	4,3	4,0	3,7	3,4	3,2	2,9	2,6	2,3	2,0	1,7	1,02	1,7
CF ₄	-223	0,6	0,6	0,5	0,4	0,3	0,2	0,1	0,0	-0,1	-0,2	-0,3	-0,4	-0,5	-0,6	-0,7	-0,7	-0,8	0,93	0,0
C ₆ F ₅ Cl	-194,1	4,7	4,4	4,2	3,9	3,6	3,4	3,1	2,8	2,6	2,3	2,0	1,7	1,5	1,2	0,9	0,6	0,4	1,02	0,4
BeF ₂	-190,3	-4,5	-4,6	-4,6	-4,7	-4,7	-4,7	-4,7	-4,8	-4,8	-4,8	-4,9	-4,9	-5,0	-5,0	-5,0	-5,1	-5,1	0,86	-4,5
CF ₃ Cl	-169,5	0,3	0,2	0,1	0,1	0,0	-0,1	-0,2	-0,3	-0,3	-0,4	-0,5	-0,6	-0,6	-0,7	-0,8	-0,9	-1,0	0,9	0,0
CHF ₃	-166,6	1,1	1,0	0,8	0,7	0,5	0,4	0,2	0,1	-0,1	-0,2	-0,4	-0,5	-0,7	-0,8	-1,0	-1,1	-1,3	0,94	-0,1
SiCl ₄	-158	-1,2	-1,2	-1,3	-1,3	-1,3	-1,4	-1,4	-1,4	-1,4	-1,5	-1,5	-1,5	-1,6	-1,6	-1,6	-1,6	-1,7	0,86	-1,2
C ₂ F ₄	-157,4	5,4	5,3	5,2	5,1	5,0	4,9	4,8	4,6	4,5	4,4	4,3	4,2	4,1	3,9	3,8	3,7	3,6	1,02	3,6
CF ₃ Br	-155	2,1	2,0	1,9	1,9	1,8	1,7	1,7	1,6	1,5	1,4	1,4	1,3	1,2	1,1	1,1	1,0	0,9	1,02	0,9
COF ₂	-149,1	-2,7	-2,7	-2,8	-2,9	-3,0	-3,1	-3,1	-3,2	-3,3	-3,4	-3,5	-3,5	-3,6	-3,7	-3,8	-3,9	-4,0	0,86	-2,7
AlCl ₃	-139,7	1,2	1,2	1,2	1,2	1,2	1,1	1,1	1,1	1,1	1,1	1,1	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	0,9	1,02	0,9
C ₄ H ₆ O ₃	-136,8	8,1	7,5	6,9	6,3	5,7	5,1	4,5	3,9	3,3	2,7	2,1	1,5	0,9	0,3	-0,3	-0,9	-1,5	1,00	-0,3
POCl ₃	-133,8	-2,9	-3,0	-3,0	-3,1	-3,1	-3,1	-3,2	-3,2	-3,3	-3,3	-3,4	-3,4	-3,4	-3,5	-3,5	-3,6	-3,6	0,86	-2,9
CF ₃ CN	-118,4	3,7	3,6	3,5	3,4	3,3	3,1	3,0	2,9	2,7	2,6	2,5	2,4	2,2	2,1	2,0	1,9	1,7	1,02	1,7
C ₅ H ₁₀ O ₂ (etil acetat,)	-115,1	9,9	9,0	8,1	7,2	6,3	5,4	4,5	3,6	2,8	1,9	1,0	0,1	-0,8	-1,7	-2,6	-3,5	-4,4	0,97	0,1
CF ₃	-111,3	1,0	1,0	0,9	0,8	0,8	0,7	0,6	0,6	0,5	0,4	0,4	0,3	0,2	0,2	0,1	0,0	0,0	1,02	0,0

Moléculas	$\Delta H_{(exp)}$	0,86	0,87	0,88	0,89	0,90	0,91	0,92	0,93	0,94	0,95	0,96	0,97	0,98	0,99	1,00	1,01	1,02	Ftr, Min,	Err, Min,
CH ₂ F ₂	-107,7	2,0	1,8	1,6	1,4	1,2	1,0	0,8	0,6	0,4	0,2	0,0	-0,2	-0,4	-0,6	-0,8	-1,0	-1,2	0,96	0,0
CH ₃ COF	-105,7	2,8	2,6	2,3	2,0	1,7	1,4	1,1	0,8	0,5	0,2	-0,1	-0,4	-0,7	-1,0	-1,3	-1,6	-1,9	0,96	-0,1
CH ₃ COOH	-103,4	3,7	3,3	3,0	2,6	2,2	1,8	1,5	1,1	0,7	0,3	-0,1	-0,4	-0,8	-1,2	-1,6	-2,0	-2,4	0,96	-0,1
CHF ₂ Br	-101,6	1,4	1,3	1,2	1,0	0,9	0,8	0,6	0,5	0,4	0,2	0,1	0,0	-0,2	-0,3	-0,4	-0,6	-0,7	0,97	0,0
CH ₃ COOCH ₃	-98,4	6,5	6,0	5,4	4,9	4,3	3,8	3,2	2,7	2,1	1,6	1,0	0,5	-0,1	-0,7	-1,2	-1,8	-2,3	0,98	-0,1
BCl ₃	-96,3	-3,9	-3,9	-3,9	-4,0	-4,0	-4,0	-4,1	-4,1	-4,1	-4,2	-4,2	-4,3	-4,3	-4,3	-4,4	-4,4	-4,5	0,86	-3,9
SO ₃	-94,6	-3,4	-3,5	-3,6	-3,6	-3,7	-3,8	-3,8	-3,9	-4,0	-4,0	-4,1	-4,2	-4,3	-4,3	-4,4	-4,5	-4,5	0,86	-3,4
CO ₂	-94,1	3,4	3,3	3,2	3,1	3,1	3,0	2,9	2,9	2,8	2,7	2,6	2,6	2,5	2,4	2,4	2,3	2,2	1,02	2,2
MgCl ₂	-93,8	4,9	4,9	4,9	4,9	4,8	4,8	4,8	4,8	4,8	4,8	4,8	4,8	4,8	4,8	4,7	4,7	4,7	1,02	4,7
CH ₃ -CH(OCH ₃) ₂	-93,1	9,4	8,5	7,7	6,8	5,9	5,1	4,2	3,3	2,5	1,6	0,7	-0,1	-1,0	-1,9	-2,7	-3,6	-4,5	0,97	-0,1
HCOOH	-90,5	2,8	2,6	2,4	2,2	2,0	1,8	1,5	1,3	1,1	0,9	0,7	0,5	0,3	0,1	-0,1	-0,3	-0,6	0,99	0,1
(CH ₃) ₂ SO ₂	-89,7	0,7	0,2	-0,3	-0,8	-1,3	-1,9	-2,4	-2,9	-3,4	-3,9	-4,4	-5,0	-5,5	-6,0	-6,5	-7,0	-7,6	0,87	0,2
PCl ₅	-86,1	1,4	1,4	1,3	1,3	1,3	1,3	1,2	1,2	1,2	1,2	1,1	1,1	1,1	1,0	1,0	1,0	1,0	1,02	1,0
HCOOCH ₃	-85	5,7	5,3	4,9	4,5	4,1	3,8	3,4	3,0	2,6	2,2	1,9	1,5	1,1	0,7	0,3	-0,1	-0,5	1,01	-0,1
SO ₂ Cl ₂	-84,8	-6,5	-6,6	-6,6	-6,7	-6,7	-6,8	-6,9	-6,9	-7,0	-7,0	-7,1	-7,1	-7,2	-7,3	-7,3	-7,4	-7,4	0,86	-6,5
LiF	-80,1	2,6	2,6	2,6	2,5	2,5	2,5	2,5	2,5	2,5	2,5	2,4	2,4	2,4	2,4	2,4	2,4	2,4	1,02	2,4
(CH ₃) ₂ CHOCH(CH ₃) ₂	-76,3	11,6	10,4	9,2	8,1	6,9	5,7	4,5	3,4	2,2	1,0	-0,2	-1,4	-2,5	-3,7	-4,9	-6,1	-7,3	0,96	-0,2
C ₄ H ₈ O ₂ (1,4-dioxano)	-75,5	7,6	6,9	6,1	5,4	4,6	3,9	3,2	2,4	1,7	0,9	0,2	-0,6	-1,4	-2,1	-2,9	-3,6	-4,4	0,96	0,2
(CH ₃) ₃ COH	-74,7	7,9	7,1	6,3	5,5	4,6	3,8	3,0	2,2	1,3	0,5	-0,3	-1,1	-2,0	-2,8	-3,6	-4,5	-5,3	0,96	-0,3
C ₆ H ₄ F ₂	-73,9	6,3	5,8	5,3	4,8	4,3	3,8	3,3	2,8	2,4	1,9	1,4	0,9	0,4	-0,1	-0,6	-1,2	-1,7	0,99	-0,1
C ₆ H ₄ F ₂	-73,3	6,3	5,8	5,3	4,8	4,3	3,8	3,3	2,8	2,3	1,8	1,3	0,8	0,3	-0,2	-0,7	-1,2	-1,7	0,99	-0,2
SO ₂	-71	-1,8	-1,8	-1,9	-1,9	-2,0	-2,0	-2,0	-2,1	-2,1	-2,2	-2,2	-2,2	-2,3	-2,3	-2,4	-2,4	-2,5	0,86	-1,8
NaF	-69,4	2,4	2,4	2,4	2,4	2,4	2,4	2,4	2,3	2,3	2,3	2,3	2,3	2,3	2,3	2,3	2,3	2,3	1,02	2,3
PCl ₃	-69	-3,9	-3,9	-3,9	-3,9	-3,9	-4,0	-4,0	-4,0	-4,0	-4,0	-4,0	-4,1	-4,1	-4,1	-4,1	-4,1	-4,1	0,86	-3,9
(CH ₃) ₃ COCH ₃	-67,8	10,0	9,0	8,0	7,0	6,0	5,0	4,0	3,0	2,0	1,0	0,0	-1,0	-2,0	-3,0	-4,0	-5,0	-6,0	0,96	0,0
(CH ₃) ₂ CHOH	-65,2	6,3	5,6	5,0	4,3	3,7	3,0	2,3	1,7	1,0	0,4	-0,3	-1,0	-1,6	-2,3	-3,0	-3,6	-4,3	0,96	-0,3
HF	-65,1	0,8	0,7	0,7	0,6	0,6	0,5	0,5	0,4	0,3	0,3	0,2	0,2	0,1	0,1	0,0	-0,1	-0,1	1,00	0,0

Moléculas	$\Delta H_{(exp)}$	0,86	0,87	0,88	0,89	0,90	0,91	0,92	0,93	0,94	0,95	0,96	0,97	0,98	0,99	1,00	1,01	1,02	Ftr, Min,	Err, Min,
AlF	-63,5	2,4	2,3	2,3	2,3	2,3	2,3	2,3	2,3	2,3	2,3	2,3	2,3	2,2	2,2	2,2	2,2	1,02	2,2	
CH ₃ CH ₂ COCH ₂ CH ₃	-61,6	9,6	8,8	7,9	7,1	6,2	5,3	4,5	3,6	2,7	1,9	1,0	0,1	-0,7	-1,6	-2,5	-3,3	-4,2	0,97	0,1
CH ₃ CH ₂ OCH ₂ CH ₃	-60,3	8,1	7,3	6,4	5,6	4,8	3,9	3,1	2,2	1,4	0,6	-0,3	-1,1	-2,0	-2,8	-3,7	-4,5	-5,4	0,96	-0,3
CH ₃ COCl	-58	2,4	2,1	1,9	1,6	1,3	1,0	0,7	0,4	0,1	-0,1	-0,4	-0,7	-1,0	-1,3	-1,6	-1,9	-2,2	0,94	0,1
H ₂ O	-57,8	1,4	1,3	1,2	1,0	0,9	0,8	0,6	0,5	0,3	0,2	0,1	-0,1	-0,2	-0,3	-0,5	-0,6	-0,7	0,97	-0,1
CH ₃ COCH ₂ CH ₃	-57,1	7,2	6,6	5,9	5,2	4,5	3,8	3,1	2,4	1,7	1,1	0,4	-0,3	-1,0	-1,7	-2,4	-3,1	-3,8	0,97	-0,3
CH ₃ CONH ₂	-57	3,8	3,4	2,9	2,5	2,0	1,6	1,1	0,7	0,2	-0,2	-0,7	-1,1	-1,6	-2,0	-2,5	-2,9	-3,4	0,95	-0,2
CH ₃ CH ₂ OH	-56,2	4,6	4,1	3,6	3,1	2,6	2,1	1,6	1,2	0,7	0,2	-0,3	-0,8	-1,3	-1,8	-2,3	-2,8	-3,3	0,95	0,2
Si(CH ₃) ₄	-55,7	3,7	2,8	1,9	1,0	0,1	-0,7	-1,6	-2,5	-3,4	-4,3	-5,2	-6,1	-7,0	-7,9	-8,8	-9,7	-10,6	0,9	0,1
C ₅ H ₁₀ O	-53,4	8,2	7,3	6,4	5,5	4,6	3,7	2,8	1,9	1,0	0,1	-0,8	-1,7	-2,6	-3,5	-4,4	-5,3	-6,2	0,95	0,1
Cl ₂ CO	-52,4	0,7	0,6	0,5	0,5	0,4	0,4	0,3	0,3	0,2	0,2	0,1	0,1	0,0	-0,1	-0,1	-0,2	-0,2	0,98	0,0
CH ₃ COCH ₃	-51,9	5,5	5,0	4,5	4,0	3,4	2,9	2,4	1,9	1,4	0,9	0,4	-0,2	-0,7	-1,2	-1,7	-2,2	-2,8	0,97	-0,2
C ₂ H ₅ OCH ₃	-51,7	7,0	6,3	5,7	5,0	4,3	3,7	3,0	2,3	1,7	1,0	0,3	-0,4	-1,0	-1,7	-2,4	-3,0	-3,7	0,96	0,3
(CH ₃) ₂ CHCHO	-51,6	5,8	5,2	4,5	3,8	3,1	2,4	1,7	1,0	0,3	-0,4	-1,0	-1,7	-2,4	-3,1	-3,8	-4,5	-5,2	0,94	0,3
HCOCOH	-50,7	4,0	3,8	3,6	3,3	3,1	2,9	2,7	2,4	2,2	2,0	1,8	1,5	1,3	1,1	0,8	0,6	0,4	1,02	0,4
C ₈ H ₁₈	-49,9	13,9	12,3	10,8	9,3	7,8	6,3	4,8	3,3	1,8	0,3	-1,2	-2,8	-4,3	-5,8	-7,3	-8,8	-10,4	0,95	0,3
H ₃ COH	-48	3,2	2,9	2,6	2,3	2,0	1,6	1,3	1,0	0,7	0,4	0,0	-0,3	-0,6	-0,9	-1,2	-1,6	-1,9	0,96	0,0
C ₅ H ₈ O	-45,9	7,8	7,1	6,3	5,6	4,9	4,1	3,4	2,6	1,9	1,2	0,4	-0,3	-1,1	-1,8	-2,6	-3,3	-4,1	0,97	-0,3
C ₇ H ₁₆	-44,9	12,2	10,9	9,6	8,2	6,9	5,5	4,2	2,9	1,5	0,2	-1,1	-2,5	-3,8	-5,2	-6,5	-7,9	-9,2	0,95	0,2
CH ₃ OCH ₃	-44	6,2	5,5	4,8	4,1	3,4	2,7	1,9	1,2	0,5	-0,2	-0,9	-1,7	-2,4	-3,1	-3,8	-4,6	-5,3	0,95	-0,2
C ₄ H ₈ O (tetraidrofurano)	-44	4,9	4,5	4,0	3,5	3,0	2,5	2,0	1,5	1,0	0,5	0,0	-0,5	-1,0	-1,5	-2,0	-2,5	-3,0	0,96	0,0
NaCl	-43,8	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	1,02	0,5
(CH ₃) ₃ CCl	-43,5	6,8	6,0	5,3	4,5	3,8	3,1	2,3	1,6	0,8	0,1	-0,7	-1,4	-2,2	-2,9	-3,7	-4,4	-5,2	0,95	0,1
C ₆ H ₁₄ (metil pentano)	-41,1	10,3	9,2	8,0	6,8	5,7	4,5	3,4	2,2	1,1	-0,1	-1,3	-2,4	-3,6	-4,8	-5,9	-7,1	-8,3	0,95	-0,1
SiCl ₂	-40,3	-0,3	-0,4	-0,4	-0,4	-0,4	-0,4	-0,4	-0,4	-0,4	-0,4	-0,5	-0,5	-0,5	-0,5	-0,5	-0,5	-0,5	0,86	-0,3
C ₅ H ₁₂ (neopentano)	-40,2	8,6	7,6	6,7	5,7	4,7	3,7	2,8	1,8	0,8	-0,2	-1,2	-2,1	-3,1	-4,1	-5,1	-6,1	-7,1	0,95	-0,2
C ₆ H ₁₄	-39,9	10,6	9,5	8,3	7,2	6,0	4,8	3,7	2,5	1,4	0,2	-1,0	-2,1	-3,3	-4,5	-5,7	-6,8	-8,0	0,95	0,2

Moléculas	$\Delta H_{(exp)}$	0,86	0,87	0,88	0,89	0,90	0,91	0,92	0,93	0,94	0,95	0,96	0,97	0,98	0,99	1,00	1,01	1,02	Ftr, Min,	Err, Min,
CH ₃ CHO	-39,7	3,7	3,3	3,0	2,6	2,3	2,0	1,6	1,3	0,9	0,6	0,2	-0,1	-0,5	-0,8	-1,1	-1,5	-1,8	0,97	-0,1
C ₄ H ₉ NO ₂	-39,1	8,6	7,8	6,9	6,1	5,3	4,5	3,6	2,8	2,0	1,2	0,3	-0,5	-1,3	-2,2	-3,0	-3,8	-4,7	0,96	0,3
ClF ₃	-38	-6,3	-6,3	-6,4	-6,4	-6,4	-6,5	-6,5	-6,5	-6,6	-6,6	-6,6	-6,6	-6,7	-6,7	-6,7	-6,8	-6,8	0,86	-6,3
CH ₃ CH ₂ CH ₂ Cl	-37	5,9	5,1	4,4	3,6	2,8	2,1	1,3	0,6	-0,2	-1,0	-1,7	-2,5	-3,2	-4,0	-4,8	-5,5	-6,3	0,94	-0,2
(CH ₃) ₂ SO	-36,2	2,0	1,6	1,1	0,6	0,1	-0,4	-0,8	-1,3	-1,8	-2,3	-2,8	-3,3	-3,8	-4,2	-4,7	-5,2	-5,7	0,9	0,1
C ₆ H ₁₃ Br	-35,4	10,3	9,2	8,1	7,0	5,9	4,8	3,7	2,6	1,5	0,4	-0,7	-1,8	-2,9	-4,0	-5,1	-6,2	-7,3	0,95	0,4
C ₅ H ₁₂ (n-pentano)	-35,1	8,8	7,8	6,9	5,9	4,9	3,9	2,9	1,9	0,9	-0,1	-1,1	-2,1	-3,0	-4,0	-5,0	-6,0	-7,0	0,95	-0,1
CH ₂ =CHF	-33,2	4,2	4,0	3,7	3,4	3,2	2,9	2,6	2,4	2,1	1,8	1,5	1,3	1,0	0,7	0,5	0,2	-0,1	1,02	-0,1
OCS	-33	4,4	4,4	4,3	4,3	4,2	4,2	4,1	4,1	4,0	4,0	3,9	3,9	3,8	3,7	3,7	3,6	3,6	1,02	3,6
H ₂ O ₂	-32,5	0,3	0,1	0,0	-0,2	-0,4	-0,5	-0,7	-0,9	-1,0	-1,2	-1,4	-1,5	-1,7	-1,9	-2,0	-2,2	-2,4	0,88	0,0
C ₄ H ₁₀ (isobutano)	-32,1	7,2	6,4	5,6	4,8	3,9	3,1	2,3	1,5	0,7	-0,1	-0,9	-1,7	-2,5	-3,4	-4,2	-5,0	-5,8	0,95	-0,1
NF ₃	-31,6	-1,6	-1,6	-1,7	-1,7	-1,8	-1,8	-1,9	-1,9	-2,0	-2,0	-2,1	-2,1	-2,2	-2,3	-2,3	-2,4	-2,4	0,86	-1,6
CH ₃ CH ₂ CH ₂ Cl	-31,5	4,8	4,2	3,7	3,1	2,5	1,9	1,3	0,7	0,2	-0,4	-1,0	-1,6	-2,2	-2,8	-3,4	-3,9	-4,5	0,94	0,2
C ₄ H ₁₀ (trans-butano)	-30	7,4	6,6	5,7	4,9	4,1	3,3	2,5	1,7	0,9	0,0	-0,8	-1,6	-2,4	-3,2	-4,0	-4,9	-5,7	0,95	0,0
C ₆ H ₁₂	-29,5	9,1	8,1	7,0	6,0	5,0	3,9	2,9	1,8	0,8	-0,3	-1,3	-2,4	-3,4	-4,5	-5,5	-6,6	-7,6	0,95	-0,3
C ₆ H ₄ O ₂	-29,4	6,1	5,6	5,1	4,6	4,0	3,5	3,0	2,5	2,0	1,5	1,0	0,5	0,0	-0,5	-1,1	-1,6	-2,1	0,98	0,0
(CH ₃) ₃ CNH ₂	-28,9	8,5	7,6	6,7	5,8	4,9	4,0	3,1	2,2	1,3	0,4	-0,5	-1,4	-2,3	-3,2	-4,2	-5,1	-6,0	0,95	0,4
C ₆ H ₅ F	-27,7	6,6	6,1	5,5	5,0	4,4	3,9	3,3	2,8	2,2	1,7	1,1	0,6	0,0	-0,5	-1,1	-1,7	-2,2	0,98	0,0
COBr ₂	-27,1	3,8	3,8	3,7	3,7	3,6	3,6	3,5	3,5	3,4	3,4	3,3	3,3	3,3	3,2	3,2	3,1	3,1	1,02	3,1
C ₂ H ₅ Cl	-26,8	2,9	2,5	2,1	1,7	1,3	0,9	0,5	0,0	-0,4	-0,8	-1,2	-1,6	-2,0	-2,4	-2,8	-3,2	-3,7	0,93	0,0
CO	-26,4	2,0	1,9	1,9	1,9	1,8	1,8	1,8	1,7	1,7	1,7	1,6	1,6	1,6	1,5	1,5	1,5	1,5	1,02	1,5
(CH ₃) ₃ CSH	-26,2	7,4	6,6	5,8	5,0	4,2	3,4	2,6	1,8	1,0	0,2	-0,6	-1,4	-2,2	-3,0	-3,8	-4,6	-5,4	0,95	0,2
H ₂ CO	-26	3,1	2,9	2,7	2,6	2,4	2,2	2,0	1,9	1,7	1,5	1,4	1,2	1,0	0,9	0,7	0,5	0,4	1,02	0,4
C ₃ H ₈ (propene)	-25	5,8	5,1	4,5	3,8	3,2	2,6	1,9	1,3	0,6	0,0	-0,6	-1,3	-1,9	-2,6	-3,2	-3,9	-4,5	0,95	0,0
CHCl ₃	-24,7	-1,0	-1,1	-1,2	-1,3	-1,4	-1,5	-1,6	-1,8	-1,9	-2,0	-2,1	-2,2	-2,3	-2,4	-2,5	-2,7	-2,8	0,86	-1,0
SiO	-24,6	-0,4	-0,4	-0,4	-0,5	-0,5	-0,5	-0,5	-0,5	-0,5	-0,6	-0,6	-0,6	-0,6	-0,6	-0,7	-0,7	-0,7	0,86	-0,4
CH ₃ CH=CHCHO	-24	7,1	6,6	6,1	5,5	5,0	4,4	3,9	3,3	2,8	2,2	1,7	1,1	0,6	0,0	-0,5	-1,1	-1,6	0,99	0,0

Moléculas	$\Delta H_{(exp)}$	0,86	0,87	0,88	0,89	0,90	0,91	0,92	0,93	0,94	0,95	0,96	0,97	0,98	0,99	1,00	1,01	1,02	Ftr, Min,	Err, Min,
C ₃ H ₇ Br	-23,8	4,8	4,2	3,7	3,1	2,5	1,9	1,4	0,8	0,2	-0,4	-0,9	-1,5	-2,1	-2,7	-3,2	-3,8	-4,4	0,94	0,2
C ₆ H ₅ OH	-23	7,0	6,4	5,8	5,1	4,5	3,9	3,3	2,6	2,0	1,4	0,7	0,1	-0,5	-1,2	-1,8	-2,4	-3,1	0,97	0,1
CCl ₄	-22,9	-1,0	-1,0	-1,1	-1,1	-1,2	-1,2	-1,2	-1,3	-1,3	-1,4	-1,4	-1,4	-1,5	-1,5	-1,6	-1,6	-1,6	0,86	-1,0
CH ₂ Cl ₂	-22,8	0,1	-0,1	-0,2	-0,4	-0,6	-0,8	-0,9	-1,1	-1,3	-1,5	-1,7	-1,8	-2,0	-2,2	-2,4	-2,5	-2,7	0,87	-0,1
HCl	-22,1	0,0	-0,1	-0,1	-0,1	-0,2	-0,2	-0,3	-0,3	-0,4	-0,4	-0,4	-0,5	-0,5	-0,6	-0,6	-0,7	-0,7	0,86	0,0
C ₂ H ₆	-20,1	4,2	3,7	3,2	2,8	2,3	1,8	1,4	0,9	0,4	0,0	-0,5	-1,0	-1,4	-1,9	-2,4	-2,8	-3,3	0,95	0,0
CH ₃ Cl	-19,5	1,6	1,4	1,2	0,9	0,7	0,5	0,2	0,0	-0,2	-0,5	-0,7	-0,9	-1,2	-1,4	-1,7	-1,9	-2,1	0,93	0,0
C ₅ H ₁₀ (ciclopentano)	-18,3	7,2	6,4	5,5	4,6	3,8	2,9	2,0	1,2	0,3	-0,6	-1,4	-2,3	-3,2	-4,0	-4,9	-5,8	-6,7	0,94	0,3
CH ₃ CH ₂ SSCH ₂ CH ₃	-17,9	5,0	4,2	3,4	2,6	1,8	0,9	0,1	-0,7	-1,5	-2,3	-3,2	-4,0	-4,8	-5,6	-6,5	-7,3	-8,1	0,92	0,1
CH ₄	-17,9	2,5	2,3	2,0	1,7	1,4	1,1	0,8	0,6	0,3	0,0	-0,3	-0,6	-0,9	-1,2	-1,4	-1,7	-2,0	0,95	0,0
CH ₃ NO ₂	-17,8	-1,0	-1,1	-1,2	-1,2	-1,3	-1,4	-1,5	-1,6	-1,6	-1,7	-1,8	-1,9	-2,0	-2,1	-2,1	-2,2	-2,3	0,86	-1,0
HOCl	-17,8	3,3	3,0	2,7	2,4	2,1	1,8	1,5	1,2	0,9	0,6	0,2	-0,1	-0,4	-0,7	-1,0	-1,3	-1,6	0,97	-0,1
C ₃ H ₆ Br ₂	-17,1	6,0	5,5	5,0	4,5	4,0	3,5	2,9	2,4	1,9	1,4	0,9	0,4	-0,1	-0,7	-1,2	-1,7	-2,2	0,98	-0,1
CH ₃ ONO	-15,9	2,8	2,5	2,2	1,9	1,7	1,4	1,1	0,8	0,5	0,2	-0,1	-0,4	-0,7	-1,0	-1,3	-1,6	-1,9	0,96	-0,1
C ₅ H ₁₀ S	-15,2	7,3	6,4	5,6	4,7	3,8	3,0	2,1	1,2	0,3	-0,5	-1,4	-2,3	-3,2	-4,0	-4,9	-5,8	-6,7	0,94	0,3
C ₂ H ₅ Br	-14,8	4,2	3,8	3,4	3,0	2,6	2,2	1,8	1,4	1,0	0,6	0,1	-0,3	-0,7	-1,1	-1,5	-1,9	-2,3	0,96	0,1
ClF	-13,2	-3,2	-3,2	-3,2	-3,2	-3,2	-3,2	-3,2	-3,2	-3,2	-3,2	-3,3	-3,3	-3,3	-3,3	-3,3	-3,3	-3,3	0,86	-3,2
C ₅ H ₈ Br ₂	-13,1	9,1	8,3	7,6	6,9	6,2	5,4	4,7	4,0	3,2	2,5	1,8	1,0	0,3	-0,5	-1,2	-1,9	-2,7	0,98	0,3
C ₂ H ₄ O	-12,6	3,2	2,8	2,5	2,1	1,8	1,4	1,1	0,7	0,4	0,0	-0,4	-0,7	-1,1	-1,4	-1,8	-2,1	-2,5	0,95	0,0
CH ₂ CO	-11,4	4,0	3,8	3,6	3,4	3,2	3,1	2,9	2,7	2,5	2,3	2,1	1,9	1,7	1,5	1,3	1,1	0,9	1,02	0,9
CH ₃ CH ₂ NH ₂	-11,3	8,4	7,4	6,5	5,5	4,5	3,6	2,6	1,6	0,6	-0,3	-1,3	-2,3	-3,3	-4,2	-5,2	-6,2	-7,2	0,95	-0,3
C ₅ H ₁₀ NH (piperidina)	-11,3	5,7	5,1	4,5	3,9	3,4	2,8	2,2	1,7	1,1	0,5	-0,1	-0,6	-1,2	-1,8	-2,4	-2,9	-3,5	0,96	-0,1
C ₂ H ₅ SH (etanolíol)	-11,1	3,3	2,8	2,3	1,9	1,4	1,0	0,5	0,1	-0,4	-0,9	-1,3	-1,8	-2,3	-2,7	-3,2	-3,6	-4,1	0,93	0,1
NH ₃	-11	1,9	1,7	1,5	1,2	1,0	0,8	0,6	0,4	0,2	-0,1	-0,3	-0,5	-0,7	-0,9	-1,2	-1,4	-1,6	0,95	-0,1
CBrCl ₃	-10	1,3	1,3	1,3	1,2	1,2	1,2	1,1	1,1	1,1	1,0	1,0	1,0	0,9	0,9	0,8	0,8	0,8	1,02	0,8
CH ₃ SCH ₃	-8,9	3,8	3,3	2,8	2,4	1,9	1,4	1,0	0,5	0,1	-0,4	-0,9	-1,3	-1,8	-2,3	-2,8	-3,2	-3,7	0,94	0,1
C ₄ H ₄ O	-8,3	5,0	4,6	4,2	3,8	3,3	2,9	2,5	2,1	1,7	1,2	0,8	0,4	0,0	-0,5	-0,9	-1,3	-1,7	0,98	0,0

Moléculas	$\Delta H_{(exp)}$	0,86	0,87	0,88	0,89	0,90	0,91	0,92	0,93	0,94	0,95	0,96	0,97	0,98	0,99	1,00	1,01	1,02	Ftr, Min,	Err, Min,
C ₄ H ₈ S	-8,2	5,2	4,5	3,8	3,1	2,4	1,7	1,0	0,3	-0,4	-1,1	-1,8	-2,5	-3,2	-3,9	-4,6	-5,3	-6,0	0,93	0,3
CH ₃ SiH ₃	-7	1,9	1,5	1,1	0,8	0,4	0,0	-0,3	-0,7	-1,1	-1,4	-1,8	-2,2	-2,5	-2,9	-3,3	-3,6	-4,0	0,91	0,0
(CH ₃) ₃ N	-5,7	7,3	6,6	5,8	5,1	4,4	3,6	2,9	2,1	1,4	0,6	-0,1	-0,8	-1,6	-2,3	-3,1	-3,8	-4,6	0,96	-0,1
CH ₃ SH	-5,5	1,9	1,6	1,3	1,0	0,7	0,4	0,2	-0,1	-0,4	-0,7	-1,0	-1,3	-1,6	-1,8	-2,1	-2,4	-2,7	0,93	-0,1
CH ₃ NH ₂	-5,5	3,3	2,9	2,5	2,1	1,7	1,3	0,9	0,5	0,1	-0,3	-0,7	-1,1	-1,5	-1,9	-2,3	-2,7	-3,1	0,94	0,1
ClFO ₃	-5,1	-11,5	-11,6	-11,6	-11,7	-11,8	-11,9	-12,0	-12,1	-12,1	-12,2	-12,3	-12,4	-12,5	-12,6	-12,6	-12,7	-12,8	0,86	-11,5
H ₂ S	-4,9	0,4	0,3	0,2	0,1	0,0	-0,1	-0,2	-0,3	-0,4	-0,4	-0,5	-0,6	-0,7	-0,8	-0,9	-1,0	-1,1	0,9	0,0
(CH ₃) ₂ NH	-4,4	4,9	4,3	3,7	3,1	2,6	2,0	1,4	0,9	0,3	-0,3	-0,9	-1,4	-2,0	-2,6	-3,2	-3,7	-4,3	0,94	0,3
SCl ₂	-4,2	-4,3	-4,3	-4,3	-4,3	-4,3	-4,4	-4,4	-4,4	-4,4	-4,4	-4,4	-4,4	-4,4	-4,4	-4,4	-4,5	-4,5	0,86	-4,3
H ₂ COH	-4,1	2,6	2,3	2,1	1,9	1,6	1,4	1,2	1,0	0,7	0,5	0,3	0,0	-0,2	-0,4	-0,7	-0,9	-1,1	0,97	0,0
C ₄ H ₈ (isobutano)	-4	-3,1	-3,1	-3,1	-3,1	-3,1	-3,1	-3,2	-3,2	-3,2	-3,2	-3,2	-3,2	-3,2	-3,3	-3,3	-3,3	-3,3	0,86	-3,1
S ₂ Cl ₂	-4	6,9	6,2	5,5	4,9	4,2	3,6	2,9	2,3	1,6	0,9	0,3	-0,4	-1,1	-1,7	-2,4	-3,0	-3,7	0,96	0,3
CH ₃ CH ₂ O	-3,7	3,9	3,5	3,1	2,7	2,3	2,0	1,6	1,2	0,8	0,4	0,0	-0,4	-0,8	-1,2	-1,6	-2,0	-2,4	0,96	0,0
C ₄ H ₆ O	-3,3	6,6	6,1	5,6	5,0	4,5	4,0	3,4	2,9	2,4	1,8	1,3	0,8	0,2	-0,3	-0,9	-1,4	-1,9	0,98	0,2
C ₂ Cl ₄	-3	1,8	1,7	1,6	1,5	1,5	1,4	1,3	1,2	1,2	1,1	1,0	0,9	0,9	0,8	0,7	0,6	0,6	1,02	0,6
CH ₃ CO (² A')	-2,4	3,3	3,1	2,8	2,5	2,3	2,0	1,7	1,5	1,2	0,9	0,7	0,4	0,1	-0,1	-0,4	-0,7	-1,0	0,98	0,1
C ₄ H ₈ NH	-0,8	7,1	6,3	5,5	4,7	4,0	3,2	2,4	1,6	0,8	0,0	-0,8	-1,6	-2,4	-3,2	-4,1	-4,9	-5,7	0,95	0,0
F ₂	0	-2,4	-2,5	-2,5	-2,5	-2,5	-2,5	-2,5	-2,5	-2,6	-2,6	-2,6	-2,6	-2,6	-2,6	-2,6	-2,7	-2,7	0,86	-2,4
H ₂	0	0,0	0,0	-0,1	-0,1	-0,1	-0,1	-0,2	-0,2	-0,2	-0,2	-0,3	-0,3	-0,3	-0,3	-0,4	-0,4	-0,4	0,86	0,0
Cl ₂	0	1,8	1,8	1,7	1,6	1,6	1,5	1,4	1,4	1,3	1,3	1,2	1,1	1,1	1,0	0,9	0,9	0,8	1,02	0,8
O ₂	0	-3,0	-3,0	-3,0	-3,0	-3,0	-3,0	-3,0	-3,0	-3,1	-3,1	-3,1	-3,1	-3,1	-3,1	-3,1	-3,1	-3,1	0,86	-3,0
N ₂	0	1,0	0,9	0,9	0,9	0,8	0,8	0,8	0,7	0,7	0,7	0,6	0,6	0,6	0,5	0,5	0,4	0,4	1,02	0,4
SO	1,2	-0,5	-0,5	-0,5	-0,5	-0,5	-0,5	-0,6	-0,6	-0,6	-0,6	-0,6	-0,6	-0,7	-0,7	-0,7	-0,7	-0,7	0,86	-0,5
PH ₃	1,3	0,7	0,6	0,4	0,3	0,1	0,0	-0,2	-0,3	-0,5	-0,7	-0,8	-1,0	-1,1	-1,3	-1,4	-1,6	-1,8	0,91	0,0
N ₂ O ₄	2,2	2,4	2,3	2,2	2,0	1,9	1,8	1,6	1,5	1,3	1,2	1,1	0,9	0,8	0,7	0,5	0,4	0,2	1,02	0,2
ClNO ₂	2,9	0,9	0,8	0,7	0,7	0,6	0,5	0,5	0,4	0,3	0,2	0,2	0,1	0,0	0,0	-0,1	-0,2	-0,2	0,99	0,0
CH ₃ O	4,1	2,7	2,5	2,3	2,0	1,8	1,6	1,4	1,2	0,9	0,7	0,5	0,3	0,1	-0,2	-0,4	-0,6	-0,8	0,98	0,1

Moléculas	$\Delta H_{(exp)}$	0,86	0,87	0,88	0,89	0,90	0,91	0,92	0,93	0,94	0,95	0,96	0,97	0,98	0,99	1,00	1,01	1,02	Ftr, Min,	Err, Min,
CH ₃ -CH=CH ₂	4,8	5,5	5,0	4,5	4,0	3,5	3,1	2,6	2,1	1,6	1,1	0,6	0,1	-0,4	-0,9	-1,4	-1,9	-2,3	0,97	0,1
(CH ₃) ₂ CHCN	5,6	6,0	5,3	4,7	4,1	3,5	2,8	2,2	1,6	1,0	0,3	-0,3	-0,9	-1,6	-2,2	-2,8	-3,5	-4,1	0,96	-0,3
F ₂ O	5,9	-2,5	-2,6	-2,6	-2,6	-2,7	-2,7	-2,7	-2,7	-2,8	-2,8	-2,8	-2,9	-2,9	-2,9	-3,0	-3,0	-3,0	0,86	-2,5
C ₄ H ₈ (ciclobutano)	6,8	6,3	5,6	4,9	4,2	3,6	2,9	2,2	1,5	0,8	0,2	-0,5	-1,2	-1,9	-2,6	-3,3	-4,0	-4,6	0,95	0,2
NO ₂	7,9	1,0	0,9	0,9	0,8	0,8	0,7	0,7	0,6	0,6	0,5	0,4	0,4	0,3	0,3	0,2	0,2	0,1	1,02	0,1
SiH ₄	8,2	1,5	1,3	1,2	1,0	0,8	0,6	0,4	0,2	0,0	-0,2	-0,3	-0,5	-0,7	-0,9	-1,1	-1,3	-1,5	0,94	0,0
CH ₂ =CHCl	8,9	6,4	6,1	5,9	5,6	5,4	5,1	4,9	4,6	4,3	4,1	3,8	3,6	3,3	3,1	2,8	2,5	2,3	1,02	2,3
OH	9,4	1,9	1,9	1,8	1,8	1,7	1,7	1,6	1,6	1,5	1,5	1,4	1,4	1,3	1,2	1,2	1,1	1,1	1,02	1,1
HCO	10	2,4	2,3	2,2	2,1	2,1	2,0	1,9	1,8	1,7	1,6	1,6	1,5	1,4	1,3	1,2	1,1	1,1	1,02	1,1
C ₆ H ₅ -CH ₃ (tolueno)	12	9,7	9,0	8,2	7,4	6,7	5,9	5,1	4,3	3,6	2,8	2,0	1,2	0,5	-0,3	-1,1	-1,9	-2,6	0,99	-0,3
(CH ₃) ₃ C	12,3	5,7	5,0	4,3	3,6	2,8	2,1	1,4	0,7	0,0	-0,7	-1,5	-2,2	-2,9	-3,6	-4,3	-5,1	-5,8	0,94	0,0
C ₆ H ₅ Cl	12,4	-0,2	-0,3	-0,3	-0,3	-0,4	-0,4	-0,4	-0,5	-0,5	-0,6	-0,6	-0,6	-0,7	-0,7	-0,7	-0,7	-0,8	0,86	-0,2
ClNO	12,4	6,7	6,2	5,6	5,1	4,6	4,0	3,5	2,9	2,4	1,8	1,3	0,8	0,2	-0,3	-0,9	-1,4	-2,0	0,98	0,2
C ₂ H ₄	12,5	4,1	3,8	3,5	3,2	2,9	2,5	2,2	1,9	1,6	1,3	1,0	0,7	0,3	0,0	-0,3	-0,6	-0,9	0,99	0,0
C ₃ H ₆ (ciclopropano)	12,7	4,0	3,5	3,0	2,5	2,0	1,5	1,0	0,5	0,0	-0,5	-1,0	-1,5	-2,0	-2,5	-3,0	-3,5	-4,0	0,94	0,0
P ₄	14,1	-0,1	-0,1	-0,1	-0,2	-0,2	-0,2	-0,2	-0,3	-0,3	-0,3	-0,3	-0,4	-0,4	-0,4	-0,4	-0,5	-0,5	0,86	-0,1
CH ₃ C=OCH	15,6	2,5	2,1	1,7	1,3	0,9	0,5	0,1	-0,3	-0,7	-1,1	-1,5	-1,9	-2,3	-2,7	-3,1	-3,5	-3,9	0,92	0,1
C ₅ H ₈ (isopreno)	18	8,2	7,6	6,9	6,2	5,5	4,8	4,1	3,4	2,8	2,1	1,4	0,7	0,0	-0,7	-1,4	-2,1	-2,8	0,98	0,0
CH ₃ CN	18	4,2	3,9	3,7	3,4	3,1	2,8	2,5	2,3	2,0	1,7	1,4	1,1	0,8	0,5	0,3	0,0	-0,3	1,01	0,0
C ₂ H ₃ Br	18,9	5,6	5,3	5,1	4,8	4,6	4,3	4,1	3,8	3,6	3,3	3,1	2,8	2,6	2,3	2,1	1,8	1,5	1,02	1,5
Si ₂ H ₆	19,1	1,7	1,4	1,1	0,8	0,5	0,3	0,0	-0,3	-0,6	-0,9	-1,2	-1,5	-1,8	-2,0	-2,3	-2,6	-2,9	0,92	0,0
N ₂ O	19,6	3,9	3,5	3,2	2,9	2,5	2,2	1,9	1,5	1,2	0,9	0,5	0,2	-0,1	-0,5	-0,8	-1,1	-1,5	0,98	-0,1
C ₂ H ₄ S	19,6	1,8	1,8	1,7	1,6	1,6	1,5	1,4	1,3	1,3	1,2	1,1	1,1	1,0	0,9	0,9	0,8	0,7	1,02	0,7
C ₆ H ₆	19,7	7,4	6,8	6,2	5,6	5,0	4,4	3,8	3,2	2,5	1,9	1,3	0,7	0,1	-0,5	-1,1	-1,7	-2,3	0,98	0,1
N ₂ O ₃	19,8	1,3	1,2	1,1	1,0	0,9	0,8	0,7	0,6	0,5	0,4	0,3	0,2	0,1	0,0	-0,1	-0,2	-0,3	0,99	0,0
C ₅ H ₆ S (metiltiofeno)	20	6,8	6,3	5,7	5,1	4,6	4,0	3,4	2,9	2,3	1,7	1,2	0,6	0,0	-0,5	-1,1	-1,7	-2,3	0,98	0,0
C ₄ H ₆ S	20,8	5,9	5,3	4,8	4,3	3,7	3,2	2,6	2,1	1,6	1,0	0,5	-0,1	-0,6	-1,2	-1,7	-2,2	-2,8	0,97	-0,1

Moléculas	$\Delta H_{(exp)}$	0,86	0,87	0,88	0,89	0,90	0,91	0,92	0,93	0,94	0,95	0,96	0,97	0,98	0,99	1,00	1,01	1,02	Ftr, Min,	Err, Min,
C ₆ H ₅ NH ₂	20,8	8,7	8,0	7,3	6,6	5,9	5,2	4,5	3,8	3,1	2,4	1,7	1,0	0,2	-0,5	-1,2	-1,9	-2,6	0,98	0,2
(CH ₃) ₂ CH	21,5	5,0	4,4	3,9	3,4	2,8	2,3	1,7	1,2	0,6	0,1	-0,4	-1,0	-1,5	-2,1	-2,6	-3,2	-3,7	0,95	0,1
NO	21,6	-0,7	-0,8	-0,8	-0,8	-0,9	-0,9	-0,9	-1,0	-1,0	-1,0	-1,0	-1,0	-1,1	-1,1	-1,1	-1,2	-1,2	0,86	-0,7
H ₂ NNH ₂	22,8	2,3	2,0	1,6	1,3	1,0	0,6	0,3	0,0	-0,4	-0,7	-1,0	-1,4	-1,7	-2,0	-2,4	-2,7	-3,1	0,93	0,0
ClO	24,2	-3,4	-3,4	-3,4	-3,4	-3,4	-3,4	-3,5	-3,5	-3,5	-3,5	-3,5	-3,5	-3,5	-3,5	-3,5	-3,5	-3,5	0,86	-3,4
C ₅ H ₇ N	24,6	8,1	7,4	6,7	6,1	5,4	4,7	4,1	3,4	2,7	2,1	1,4	0,7	0,1	-0,6	-1,3	-2,0	-2,6	0,98	0,1
C ₆ H ₈ (ciclohexa-1,4-dieno)	25	7,6	6,9	6,1	5,4	4,7	3,9	3,2	2,4	1,7	1,0	0,2	-0,5	-1,3	-2,0	-2,8	-3,5	-4,3	0,96	0,2
C ₆ H ₅ Br	25,2	8,9	8,3	7,8	7,3	6,7	6,2	5,7	5,1	4,6	4,0	3,5	3,0	2,4	1,9	1,3	0,8	0,2	1,02	0,2
C ₆ H ₈ (ciclohexa-1,3-dieno)	25,4	8,2	7,5	6,7	6,0	5,2	4,5	3,8	3,0	2,3	1,5	0,8	0,1	-0,7	-1,4	-2,2	-2,9	-3,7	0,97	0,1
C ₄ H ₅ N	25,9	6,2	5,7	5,2	4,7	4,2	3,7	3,2	2,7	2,2	1,7	1,2	0,7	0,2	-0,3	-0,8	-1,3	-1,8	0,98	0,2
CH ₂ CHCHCH ₂	26,3	6,6	6,1	5,6	5,1	4,6	4,1	3,6	3,0	2,5	2,0	1,5	1,0	0,4	-0,1	-0,6	-1,1	-1,6	0,99	-0,1
C ₄ H ₄ S	27,5	5,0	4,6	4,2	3,8	3,4	3,0	2,6	2,2	1,8	1,4	1,0	0,6	0,2	-0,2	-0,6	-1,0	-1,4	0,99	-0,2
CS ₂	28	4,0	4,0	3,9	3,9	3,9	3,8	3,8	3,8	3,7	3,7	3,7	3,6	3,6	3,5	3,5	3,5	3,4	1,02	3,4
C ₂ H ₅	28,9	3,7	3,3	2,9	2,6	2,2	1,8	1,5	1,1	0,7	0,4	0,0	-0,4	-0,7	-1,1	-1,5	-1,8	-2,2	0,96	0,0
CH ₃ S	29,8	2,6	2,4	2,2	2,0	1,7	1,5	1,3	1,1	0,9	0,6	0,4	0,2	0,0	-0,2	-0,5	-0,7	-0,9	0,98	0,0
C ₂ H ₄ NH	30,2	3,3	2,9	2,5	2,0	1,6	1,2	0,7	0,3	-0,1	-0,6	-1,0	-1,4	-1,9	-2,3	-2,8	-3,2	-3,6	0,94	-0,1
S ₂	30,7	-1,2	-1,2	-1,2	-1,2	-1,2	-1,2	-1,2	-1,2	-1,2	-1,2	-1,2	-1,3	-1,3	-1,3	-1,3	-1,3	-1,3	0,86	-1,2
HCN	31,5	2,4	2,3	2,2	2,1	2,0	1,9	1,8	1,7	1,5	1,4	1,3	1,2	1,1	1,0	0,9	0,8	0,7	1,02	0,7
ClCN	32,9	2,4	2,3	2,3	2,2	2,2	2,1	2,1	2,0	2,0	1,9	1,9	1,8	1,8	1,7	1,7	1,6	1,6	1,02	1,6
PH ₂	33,1	2,2	2,1	2,1	2,0	1,9	1,8	1,7	1,6	1,5	1,5	1,4	1,3	1,2	1,1	1,0	1,0	0,9	1,02	0,9
LiH	33,3	0,9	0,9	0,8	0,8	0,8	0,8	0,8	0,7	0,7	0,7	0,7	0,7	0,7	0,6	0,6	0,6	0,6	1,02	0,6
C ₅ H ₅ N	33,6	7,1	6,6	6,0	5,5	5,0	4,4	3,9	3,4	2,8	2,3	1,7	1,2	0,7	0,1	-0,4	-1,0	-1,5	0,99	0,1
Na ₂	34	3,6	3,6	3,6	3,6	3,6	3,6	3,6	3,6	3,6	3,6	3,6	3,6	3,6	3,6	3,6	3,6	3,6	1,02	3,6
O ₃	34,1	-1,1	-1,1	-1,1	-1,2	-1,2	-1,3	-1,3	-1,4	-1,4	-1,4	-1,5	-1,5	-1,6	-1,6	-1,7	-1,7	-1,8	0,86	-1,1
HS	34,2	0,9	0,8	0,8	0,8	0,7	0,7	0,6	0,6	0,6	0,5	0,5	0,5	0,4	0,4	0,3	0,3	0,3	1,02	0,3
P ₂	34,3	0,1	0,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	-0,1	-0,1	-0,1	-0,1	0,93	0,0
C ₄ H ₆ (2-butino)	34,8	5,2	4,7	4,2	3,6	3,1	2,6	2,1	1,6	1,1	0,5	0,0	-0,5	-1,0	-1,6	-2,1	-2,6	-3,1	0,96	0,0

Moléculas	$\Delta H_{(exp)}$	0,86	0,87	0,88	0,89	0,90	0,91	0,92	0,93	0,94	0,95	0,96	0,97	0,98	0,99	1,00	1,01	1,02	Ftr, Min,	Err, Min,
CH ₃	35	2,8	2,6	2,4	2,2	2,1	1,9	1,7	1,5	1,3	1,1	1,0	0,8	0,6	0,4	0,2	0,0	-0,2	1,01	0,0
C ₁₀ H ₈ (naftaleno)	35,9	12,9	12,0	11,2	10,3	9,4	8,5	7,7	6,8	5,9	5,0	4,1	3,2	2,4	1,5	0,6	-0,3	-1,2	1,01	-0,3
C ₄ H ₆ (ciclobuteno)	37,4	4,1	3,6	3,1	2,5	2,0	1,5	0,9	0,4	-0,1	-0,6	-1,2	-1,7	-2,2	-2,8	-3,3	-3,8	-4,4	0,94	-0,1
CH ₃ -CH=C=CH ₂	38,8	6,9	6,4	5,9	5,4	4,9	4,4	3,8	3,3	2,8	2,3	1,8	1,3	0,8	0,3	-0,2	-0,7	-1,3	1,00	-0,2
CH ₂ CHCN	43,2	3,8	3,4	3,1	2,8	2,5	2,2	1,9	1,6	1,3	1,0	0,7	0,4	0,1	-0,3	-0,6	-0,9	-1,2	0,98	0,1
LiNa	43,4	4,1	4,1	4,1	4,1	4,1	4,1	4,1	4,1	4,1	4,1	4,1	4,1	4,1	4,1	4,1	4,1	4,1	1,02	4,1
CH ₃ CCH	44,2	4,0	3,6	3,3	2,9	2,6	2,3	1,9	1,6	1,2	0,9	0,5	0,2	-0,1	-0,5	-0,8	-1,2	-1,5	0,98	-0,1
C ₅ H ₈ (espiropentano)	44,3	6,4	5,8	5,1	4,4	3,7	3,0	2,3	1,6	0,9	0,2	-0,5	-1,2	-1,9	-2,6	-3,3	-4,0	-4,7	0,95	0,2
NH ₂	45,1	2,5	2,4	2,3	2,1	2,0	1,9	1,8	1,7	1,5	1,4	1,3	1,2	1,0	0,9	0,8	0,7	0,6	1,02	0,6
CH ₂ =C=CH ₂ (aleno)	45,5	5,7	5,3	5,0	4,7	4,3	4,0	3,7	3,3	3,0	2,7	2,3	2,0	1,7	1,3	1,0	0,7	0,3	1,02	0,3
C ₄ H ₄ N ₂ (1,4-dipiridina)	46,8	4,1	3,6	3,1	2,7	2,2	1,8	1,3	0,8	0,4	-0,1	-0,6	-1,0	-1,5	-2,0	-2,4	-2,9	-3,4	0,95	-0,1
C ₄ H ₄ N ₂ (pirimidina)	46,9	8,4	7,9	7,4	7,0	6,5	6,0	5,6	5,1	4,6	4,2	3,7	3,2	2,8	2,3	1,8	1,3	0,9	1,02	0,9
SiH ₃	47,9	7,5	7,0	6,5	6,0	5,5	5,0	4,4	3,9	3,4	2,9	2,4	1,8	1,3	0,8	0,3	-0,2	-0,8	1,01	-0,2
C ₄ H ₆	47,9	2,1	1,9	1,8	1,7	1,6	1,4	1,3	1,2	1,1	0,9	0,8	0,7	0,5	0,4	0,3	0,2	0,0	1,02	0,0
NCCH ₂ CH ₂ CN	50,1	7,0	6,5	6,1	5,7	5,2	4,8	4,3	3,9	3,4	3,0	2,5	2,1	1,6	1,2	0,7	0,3	-0,2	1,02	-0,2
Li ₂	51,6	3,6	3,6	3,6	3,6	3,6	3,6	3,6	3,6	3,6	3,6	3,5	3,5	3,5	3,5	3,5	3,5	3,5	1,02	3,5
C ₄ H ₆	51,9	2,7	2,2	1,6	1,1	0,6	0,1	-0,5	-1,0	-1,5	-2,1	-2,6	-3,1	-3,7	-4,2	-4,7	-5,3	-5,8	0,91	0,1
C ₂ H ₂	54,2	2,2	2,0	1,9	1,7	1,5	1,4	1,2	1,1	0,9	0,7	0,6	0,4	0,2	0,1	-0,1	-0,2	-0,4	0,99	0,1
SiH ₂ (^t A)	65,2	2,0	1,9	1,9	1,8	1,7	1,7	1,6	1,5	1,5	1,4	1,3	1,2	1,1	1,0	1,0	0,9	1,02	0,9	
C ₃ H ₄	66,2	2,1	1,8	1,5	1,1	0,8	0,4	0,1	-0,3	-0,6	-1,0	-1,3	-1,6	-2,0	-2,3	-2,7	-3,0	-3,4	0,92	0,1
CS	66,9	1,9	1,8	1,8	1,8	1,8	1,8	1,8	1,7	1,7	1,7	1,7	1,7	1,6	1,6	1,6	1,6	1,6	1,02	1,6
C ₁₀ H ₈ (azuleno)	69,1	11,1	10,2	9,3	8,5	7,6	6,7	5,9	5,0	4,1	3,3	2,4	1,5	0,6	-0,2	-1,1	-2,0	-2,9	0,99	-0,2
C ₈ H ₈	70,7	10,6	9,8	9,0	8,2	7,5	6,7	5,9	5,1	4,3	3,5	2,7	1,9	1,1	0,3	-0,5	-1,3	-2,1	0,99	0,3
C ₂ H ₃	71,6	3,8	3,5	3,3	3,1	2,9	2,6	2,4	2,2	2,0	1,7	1,5	1,3	1,1	0,8	0,6	0,4	0,1	1,02	0,1
NCCN	73,3	3,5	3,4	3,3	3,2	3,1	3,0	2,9	2,8	2,7	2,6	2,5	2,4	2,3	2,2	2,1	2,0	1,9	1,02	1,9
C ₆ H ₅	81,2	3,6	3,1	2,6	2,1	1,5	1,0	0,5	0,0	-0,6	-1,1	-1,6	-2,1	-2,7	-3,2	-3,7	-4,3	-4,8	0,93	0,0
BeH	81,7	-5,1	-5,2	-5,2	-5,2	-5,3	-5,3	-5,3	-5,3	-5,4	-5,4	-5,4	-5,4	-5,5	-5,5	-5,5	-5,6	-5,6	0,86	-5,1

Moléculas	$\Delta H_{(exp)}$	0,86	0,87	0,88	0,89	0,90	0,91	0,92	0,93	0,94	0,95	0,96	0,97	0,98	0,99	1,00	1,01	1,02	Ftr, Min,	Err, Min,
NH	85,2	2,4	2,4	2,3	2,3	2,2	2,2	2,1	2,1	2,0	2,0	1,9	1,9	1,8	1,8	1,8	1,7	1,7	1,02	1,7
SiH ₂ (³ B)	86,2	2,9	2,9	2,8	2,7	2,6	2,6	2,5	2,4	2,4	2,3	2,2	2,1	2,1	2,0	1,9	1,8	1,8	1,02	1,8
CH ₂ (³ B)	93,7	3,1	3,0	2,9	2,8	2,7	2,6	2,5	2,4	2,3	2,2	2,0	1,9	1,8	1,7	1,6	1,5	1,4	1,02	1,4
CH ₂ (¹ A)	102,8	1,9	1,8	1,7	1,6	1,5	1,4	1,3	1,2	1,1	1,0	0,9	0,7	0,6	0,5	0,4	0,3	0,2	1,02	0,2
CN	104,9	0,5	0,5	0,5	0,5	0,4	0,4	0,4	0,3	0,3	0,3	0,2	0,2	0,2	0,1	0,1	0,1	0,0	1,02	0,0
CCH	135,1	1,0	0,9	0,8	0,7	0,6	0,5	0,4	0,3	0,2	0,1	0,0	0,0	-0,1	-0,2	-0,3	-0,4	-0,5	0,97	0,0
Si ₂	139,9	1,4	1,4	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	1,3	1,02	1,3
CH	142,5	2,4	2,4	2,3	2,3	2,2	2,2	2,2	2,1	2,1	2,0	2,0	2,0	1,9	1,9	1,8	1,8	1,7	1,02	1,7
Erro Médio Absoluto (kcal mol ⁻¹)		4,37	4,03	3,69	3,35	3,01	2,69	2,37	2,07	1,79	1,58	1,54	1,62	1,77	1,99	2,27	2,57	2,88		0,84