IBLIOTECA

STITUTO DE QUÍMICA
VERSIDADE DE SÃO PAULO

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE QUÍMICA

1286153
25758

Uso de Parâmetros Teóricos de Solutos em Relações Lineares de
Energia de Solvatação

Augusto Gouvêa Dourado
Dissertação de Mestrado

Orientador: Prof. Dr. João Pedro Simon Farah

SÃO PAULO
06/11/2001

11.2
139m

DEDALUS - Acervo - CQ

30100005053

Ficha Catalográfica

Elaborada pela Divisão de Biblioteca e
Documentação do Conjunto das Químicas da USP.

Dourado, Augusto Gouvêa

D739u Uso de parâmetros teóricos de solutos em relações
lineares de energia de solvatação / Augusto Gouvêa
Dourado. -- São Paulo, 2001.
82p.

Dissertação (mestrado) - Instituto de Química da
Universidade de São Paulo. Departamento de Química
Fundamental.

Orientador: Farah, João Pedro Simon

I. Química teórica I. T. II. Farah, João Pedro
Simon, orientador.

541.2 CDD

“Uso de Parâmetros Teóricos de Solutos em Relações Lineares de Energia de Solvatação”

AUGUSTO GOUVÊA DOURADO

***Dissertação de Mestrado submetida ao Instituto de
Química da Universidade de São Paulo como parte dos
requisitos necessários à obtenção do grau de Mestre em
Química – Área: Físico-Química***

Aprovado por:

Prof. Dr. JOÃO PEDRO SIMON FARAH
IQ - USP
(Orientador e Presidente)

Profa. Dra. ANTONIA TAVARES DO AMARAL
IQ - USP

Prof. Dr. SÉRGIO EMANUEL GALEMBECK
FFCLRP - USP

SÃO PAULO
03 DE MAIO 2002.

Dedico este trabalho à Maura, aos meus filhos, Filipe e Danilo e também aos meus pais.

Agradecimentos

Ao Prof. Dr. João Pedro Simon Farah, pela orientação e amizade; aos colegas do laboratório , Vera, Homero, Sérgio, Karina e Cristina pela amizade e por me ajudarem tantas vezes e a todos que direta ou indiretamente participaram deste trabalho.

Índice

ítem	título	pág.
I	- Introdução	1
II	- Objetivo	13
III	- Métodos	14
	III.1 - Obtenção dos parâmetros teóricos	14
	III.2 – Tratamento dos Resultados	16
IV	- Resultados e Discussão	17
	IV.1 – A relação dos parâmetros experimentais com os teóricos.	18
	IV.2 – Avaliação isolada dos parâmetros teóricos	22
	IV.3 – Relações dos $\log P$ com os parâmetros teóricos	47
V	- Conclusões	54
VI	- Referências	56
ANEXO	- Parâmetros dos Solutos	61

Índice de figuras

Figura	título	pág.
01	Valores de $\Sigma\alpha_2$ e de $\Sigma\beta_2$ calculados a partir das cargas atômicas parciais e das energias HOMO e LUMO.	19
02	Valores de R_2 e de π_2 calculados a partir do momento de dipolo elétrico e do índice de polarizabilidade.	21
03	Resíduos dos valores de $\log P_{c16}$ calculados por regressão multilinear (critérios LS e LMS) com q^+ em substituição à $\Sigma\alpha_2$.	25
04	Resíduos dos valores de $\log P_{c16}$ calculados (critério LMS) com q^+ (cargas de 26 "outliers" ajustadas).	26
05	Resíduos dos valores de $\log P_{cic}$ calculados (critérios LS e LMS) com q^+ em substituição à $\Sigma\alpha_2$.	29
06	Resíduos dos valores de $\log P_{cic}$ calculados (critério LS) com q^+ (cargas de 13 "outliers" modificadas).	30
07	Resíduos dos valores de $\log P_{oct}$ calculados (critérios LS e LMS) com $ q $ em substituição à $\Sigma\beta_2$.	33
08	Resíduos de $\log P_{oct}$ calculado com $ q $ (cargas atômicas dos 74 "outliers" modificadas).	34
09	Resíduos dos valores de $\log P_{c16}$ calculados (critérios LS e LMS) com $ q $ em substituição à $\Sigma\beta_2$.	36
10	Resíduos dos valores de $\log P_{cic}$ calculados (critérios LS e LMS) com $ q $ em substituição à $\Sigma\beta_2$.	38
11	Resíduos de $\log P_{cic}$ calculados com $ q $ em substituição à $\Sigma\beta_2$ (51 solutos excluídos).	39
12	Resíduos dos valores de $\log P_{oct}$ calculados (critérios LS e LMS) com μ em substituição à π_2 e a R_2 .	42
13	Resíduos dos valores de $\log P_{c16}$ calculados (critérios LS e LMS) com μ em substituição à π_2 e a R_2 .	44
14	Resíduos dos valores de $\log P_{cic}$ calculados (critérios LS e LMS) com μ em substituição à π_2 e R_2 .	46

continuação do Índice de figuras

Figura	título	pág.
15	Ajuste dos valores de $\log P_{\text{oct}}$ calculados (LS) com parâmetros teóricos dos solutos.	48
16	Ajuste dos valores de $\log P_{\text{c16}}$ calculados (LS) com parâmetros teóricos dos solutos.	50
17	Ajuste dos valores de $\log P_{\text{cic}}$ calculados (LS) com parâmetros teóricos dos solutos.	52

Símbolos e abreviaturas

A0	Polarizabilidade molecular
ANOVA	- Acrônimo de "Analysis of Variance"; análise de variância
d.p.	- desvio padrão
e.p.	- erro padrão
E_{HOMO}	- energia do maior orbital molecular ocupado
E_{LUMO}	- energia do primeiro orbital molecular não ocupado
F	- índice de Fischer das regressões
Fparcial	- índice de Fisher de cada variável independente na regressão
G.L.	- número de graus de liberdade
LFER	- relações lineares de energia livre
LMS	- critério de ajuste de regressão linear pela minimização dos quadrados dos resíduos em relação à mediana
$\log P$	- logaritmo dos coeficientes de partição de solutos entre fases condensadas água e solvente orgânico
$\log P_{\text{c16}}$	- logaritmo dos coeficientes de partição de solutos entre as fases condensadas água e hexadecano
$\log P_{\text{cic}}$	- logaritmo dos coeficientes de partição de solutos entre as fases condensadas água e ciclohexano
$\log P_{\text{oct}}$	- logaritmo dos coeficientes de partição de solutos entre as fases condensadas água e n-octanol
LS	- critério de ajuste de regressão linear pela minimização da soma dos quadrados dos resíduos
LSER	- Relações Lineares de Energia de Solvatação

continuação Símbolos e abreviaturas

MQ	- média quadrática das variações das variáveis em relação à média
n	- número de pontos; de solutos;...
q^+	- magnitude da carga atômica parcial do hidrogênio mais positivo
$ q^- $	- magnitude da carga atômica parcial do átomo mais negativo
r	- coeficiente de correlação de regressões lineares
R_2	- refração molar de excesso
SQ	- soma quadrática das variações das variáveis em relação à média
V_x	- volume molar característico de McGowan
$\Sigma\alpha_2$	- escala experimental de acidez de ligação de hidrogênio
$\Sigma\beta_2$	- escala experimental de basicidade de ligação de hidrogênio
μ	- momento de dipolo elétrico
π_2	- parâmetro experimental dipolaridade/polarizabilidade
π_F	- índice de polarizabilidade de Famini

Resumo

Parâmetros teóricos obtidos pela otimização de geometria da estrutura molecular em fase gasosa com o método quântico semi-empírico PM3, foram usados para correlacionar constantes de partição ($\log P_{\text{oct}}$; $\log P_{\text{c16}}$ e $\log P_{\text{cic}}$) para uma série de 700 solutos, considerando como referência as LSER obtidas com os parâmetros experimentais dos solutos: acidez ($\Sigma\alpha_2$), basicidade ($\Sigma\beta_2$), e dipolaridade/polarizabilidade (π_2) de ligação de hidrogênio; refração molar de excesso (R_2) e volume característico (V_x).

Os parâmetros avaliados foram: as energias HOMO e LUMO; o momento de dipolo elétrico e as cargas atômicas parciais do hidrogênio mais positivo e do átomo mais negativo (classe IV - modelo CM1); e o índice de polarizabilidade como proposto por Famini e col..

Estes parâmetros teóricos, juntamente com V_x , são adequadas para serem utilizados em LSER na correlação dos valores de $\log P$. Para a maioria dos solutos considerados, as quantidades eletrostáticas q^+ , $|q^-|$ e μ descrevem adequadamente os termos de acidez, basicidade e dipolaridade de ligação de hidrogênio, o que não ocorre para solutos com mais de um polo positivo ou negativo relevante, como hidroquinona, nem para solutos como 2-nitrofenol com capacidade de formar ligação de hidrogênio intramolecular.

As LSER para $\log P_{\text{oct}}$, $\log P_{\text{c16}}$ e $\log P_{\text{cic}}$ com estes parâmetros teóricos são quimicamente consistentes.

Cargas atômicas parciais, largamente usadas qualitativamente para descrever a reatividade de compostos e de grupos funcionais, podem ser usadas como descritor quantitativo de interações moleculares em estudos de solubilização, o primeiro estágio, que governa muitas reações químicas.

Summary

Semiempirical quantum theoretical parameters, obtained from PM3 geometry optimization method in gas-phase for a wide range of 700 solutes, were used to correlate experimental partition coefficients ($\log P_{\text{oct}}$; $\log P_{\text{c16}}$ and $\log P_{\text{cyc}}$), bearing as reference the LSER with experimentally derived parameters: Hydrogen bond acidity ($\Sigma\alpha_2$), basicity ($\Sigma\beta_2$), and dipolarity/polarizability (π_2); excess molar refraction and characteristic volume (V_x).

Theoretical quantities tested includes: HOMO and LUMO energies; class IV, CM1 model atomic partial charges (q^+ and $|q^-|$) and dipole moment (μ); Famini's polarizability index (π_F); and V_x .

Those quantum derived quantities can successfully be used, jointly with V_x , to correlate $\log P$ values in the LSER approach. For most of the considered solutes, electrostatic quantities q^+ , $|q^-|$ and μ describes fairly well Hydrogen bond acidity, basicity and dipolarity terms, but do not describe hydrogen bond terms for solutes with more than one relevant positive or negative centers, like hydroquinone, nor solutes like 2-nitrophenol which forms intramolecular hydrogen bond when in condensed phases.

LSER with those theoretical parameters for $\log P_{\text{oct}}$, $\log P_{\text{c16}}$ and $\log P_{\text{cic}}$ are chemically consistent.

Atomic partial charges, widely used to describe compounds and functional group reactivity in a qualitative way, can be used as a quantitative descriptor of molecular interactions in solubility, the first step which drive a lot of chemical reactions.

Uso de Parâmetros Teóricos de Solutos Neutros em Relações Lineares de Energia de Solvatação

I – Introdução

A solvatação é um processo que envolve múltiplas interações intermoleculares que afetam as estruturas eletrônicas e geométricas das moléculas do soluto e do solvente. Estas interações também definem as distribuições radial e angular das moléculas do solvente e a polarização elétrica do solvente em torno das moléculas do soluto. Influenciam, portanto, a reatividade, os equilíbrios e outras propriedades de interesse da química [REICHARDT 1990]. Devido à importância dos efeitos destas interações a solvatação e particularmente a hidratação tem sido estudada em físico-química desde a criação desta área na ciência [BEM NAIM 1987].

A solvatação de uma molécula num fluido pode ser definida como o processo de transferência desta molécula de uma posição fixa da fase de gás ideal para uma posição fixa de uma fase fluída, permanecendo constantes a temperatura, a pressão e a composição do sistema. Se a molécula é esférica é suficiente fixar o seu centro, mas se a molécula é mais complexa, como um alceno ou uma proteína, é necessário fixar seu centro de massa, observando que este centro pode ser alterado por mudanças conformacionais da molécula, sendo daí melhor representado pela média de todas as probabilidades de conformações possíveis. Para esta definição a energia livre (Gibbs) de solvatação é expressa [BEN-NAIM 1974 e 1978] como:

$$\Delta G_{\text{solv}} = W_{(M/S)} + RT \ln \frac{(q_{\text{rot,g}} q_{\text{vib,g}})}{(q_{\text{rot,s}} q_{\text{vib,s}})} - RT \ln \frac{\eta_g \Lambda_g^3}{\eta_s \Lambda_s^3} + p\Delta V \quad (\text{Eq. 1})$$

onde q representa as funções de partição microscópicas rotacionais (subscrito rot) e vibracionais (subscrito vib), η representa as densidades e Λ representa as funções de partição translacionais do soluto, sendo que os

subscritos **g** e **s** são referências às fases em que estas funções são consideradas, respectivamente a gasosa e a solução. O termo $p\Delta V$, trabalho relacionado à variação de volume da fase condensada à pressão constante, tem magnitude menor do que 10^{-3} kcal/mol e geralmente é negligenciado. Os termos relacionados às funções de partições também podem ser negligenciados quando não são esperadas alterações relevantes nas energias rotacional e vibracional. Em vários estudos, a energia livre de solvatação tem sido aproximada para o trabalho de inclusão do soluto no solvente $W_{(M/S)}$ [TOMASI e PERSICO 1994].

A partição de solutos entre fases condensadas é um fenômeno determinante para vários processos químicos e biológicos.

Para duas fases condensadas não miscíveis, em equilíbrio de temperatura e de pressão, nas quais moléculas de um soluto estão distribuídas, o potencial químico é dado por:

$$\mu_s^A = \mu_s^B \quad (\text{Eq. 2})$$

$$\mu_s = (\delta G / \delta N_s)_{P,T,N'} \quad (\text{Eq. 3})$$

onde **G** é a energia livre de Gibbs, **N_s** é o número de moléculas de soluto, **P** é a pressão, **T** é a temperatura e **N'** = **N_s**-1. O caráter extensivo da energia de Gibbs leva a:

$$\mu_A = G(T,P,N_A+1,N_B) - G(T,P,N_A,N_B) \quad (\text{Eq. 4})$$

$$\mu_A = \mu_A^* + kT \ln \rho_s \Lambda^3 \quad (\text{Eq. 5})$$

onde μ^*_A é o potencial químico para uma posição fixa do soluto, ρ_s é a densidade (N_s/V) e Λ^3 o momento de função de partição.

$$\mu^*_A + kT \ln \rho_s^A \Lambda^3 = \mu^*_B + kT \ln \rho_s^B \Lambda^3 \quad (\text{Eq. 6})$$

$$\Delta G^{*B} - \Delta G^{*A} = (\mu^{*B} - \mu^{*gi}) - (\mu^{*A} - \mu^{*gi}) \quad (\text{Eq. 7})$$

$$= \mu^{*B} - \mu^{*A} = kT \ln (\rho_s^A / \rho_s^B) \quad (\text{Eq. 8})$$

onde o superescrito **gi** indica a fase de gás ideal. O momento da função de partição é cancelado, o que vem da mecânica estatística clássica.

Esta relação provê uma forma simples, pela determinação das concentrações do soluto em cada fase, para avaliar a diferença de energia livre de Gibbs de solvatação e desta forma testar aspectos estruturais e energéticos dos diferentes ambientes de solvatação.

Apesar desta descrição razoavelmente simples da energética da solvatação, trata-se de um processo complexo, com características singulares de cada soluto em um determinado solvente, de forma a criar uma miríade de situações que dificulta generalizações, mesmo de propriedades básicas como o pKa ou reatividade em solvólises.

Deste modo, torna-se evidente a importância da idéia de relacionar propriedades das soluções com as estruturas moleculares de seus componentes, um conceito inerente à química. Uma alternativa atrativa para o estudo de solvatação vem da análise estatística destas relações entre diferenças de energia livre de solvatação e propriedades de solutos e solventes, conhecida em físico-química orgânica como relações lineares de energia livre (**LFER**)

A aplicação deste modelo leva a equações, geralmente derivadas por ajustes multilinear de dados experimentais de variações de energia e descritores, dos solutos e dos solventes. Os descritores expressam propriedades relacionadas às interações soluto-solvente e solvente-soluto. Este procedimento traz a possibilidade de estimar os valores das propriedades bem como auxilia o entendimento dos processos estudados [KARELSON 2000].

Passo importante para o desenvolvimento de LFER foi dado por Brønsted e Pedersen pela proposição da equação relacionando constantes de velocidades de reações catalisadas por ácidos e por bases, com as constantes de dissociação dos catalizadores, como:

$$\Delta G^{\#}_{HA} = -RT \ln g_{HA} + \alpha \Delta G_{HA} \quad \text{e} \quad \Delta G^{\#}_B = -RT \ln g_B + \beta \Delta G_B \quad (\text{Eq. 9})$$

onde $\Delta G^{\#}$ é a energia livre de ativação das reações catalizadas, o subscrito indicando se por ácido (HA) ou por base (B), ΔG é a diferença de energia livre relativa às constantes de dissociação e g , α e β são coeficientes do respectivo processo catalítico.

Um marco no desenvolvimento das LFER foi o trabalho de Hammett [HAMMETT 1935; 1940], pela associação das constantes de dissociação de ácido benzóico com a de seus derivados meta e para substituídos,

$$\log (K_i/K_0)_j = \sigma_i \rho_j, \quad (\text{Eq. 10})$$

onde K_0 e K_i são as constantes de ionização do ácido benzóico e do derivado com substituinte i em água, σ_i a constante do efeito eletrônico do substituinte e ρ_j a constante da reação ao efeito eletrônico do substituinte.

Para o mesmo processo p_j é constante podendo ser desconsiderado e para reações similares, a regressão das constantes de equilíbrio para uma série de substituintes com seus respectivos valores de σ_i , leva à obtenção da constante p_j do processo. Após as primeiras aplicações, foi entendido que σ_i reflete vários diferentes mecanismos de interações moleculares como o referente ao efeito indutivo gerado da polarização da ligação química pelos substituintes eletronegativos ou o efeito referente à conjugação polar direta entre o substituinte e o centro de reação (ressonância).

A partir da observação de que os estados de transição nas hidrólises, ácidas e básicas, de ésteres alifáticos substituídos são geometricamente similares, diferentes apenas quanto à carga e ao número de prótons, foi definida [TAFT 1953] uma escala de efeito indutivo de substituintes para compostos alifáticos, considerando o cancelamento do efeito estérico, como:

$$\sigma^* = 1/2.48 [\log (k_x/k_0)_B - \log (k_x/k_0)_{HA}] \quad (\text{Eq. 11})$$

onde k_0 e k_x são as constantes de velocidade de hidrólise, respectivamente para os compostos não substituídos e para os compostos com os substituintes x . Os subscritos **B** e **HA** são referências aos processos básicos e ácidos.

O tratamento quantitativo para o efeito estérico foi iniciado [TAFT 1952; 1953; PAVELICH e TAFT 1957] a partir da observação de que a constante da reação ao efeito eletrônico do substituinte ρ de Hammett para hidrólise ácida de éster é próxima a zero, indicando que o efeito de indução por substituintes nesta reação é praticamente desprezível, definindo então a constante E_s de efeito estérico dos substituintes x para hidrólises ácidas em relação ao composto não substituído:

$$E_s = \log (k_x/k_0)_{HA} \quad (\text{Eq. 12})$$

Uma das primeiras abordagens multi-paramétricas de LFER para o estudo do efeito de solventes numa dada propriedade dos solutos [KOPPEL e PALM 1972] foi proposta como:

$$A = A_0 + yY + pP + eE + bB \quad (\text{Eq.13})$$

onde **A** e **A₀** são os valores da propriedade estudada, respectivamente em fase solvatada e em fase gasosa, **Y** é a polaridade, **P** é a polarizabilidade, **E** é a eletrofilicidade e **B** é a basicidade do solvente.

Outra abordagem multi-paramétrica para avaliar os efeitos de solventes em várias propriedades, conhecida por relações lineares de energia de solvatação (**LSER**), foi proposta [ABBOUD; KAMLET e TAFT. 1977; KAMLET e TAFT 1983; KAMLET; ABRAHAM; DOHERTY e TAFT 1984], como:

$$\log (\gamma) = c_0 + c_1 \alpha + c_2 \beta + c_3 \pi^* \quad (\text{Eq.14})$$

onde γ é uma propriedade dependente do solvente, α e β são as medidas das capacidades do solvente de ceder e receber prótons para a formação de ligação de hidrogênio, π^* é o índice de dipolaridade/polarizabilidade do solvente e os coeficientes c_i são determinados por regressão multilinear.

Esta equação desenvolvida para a correlação do comportamento de cada soluto em vários solventes, foi aplicada com parâmetros dos solutos para correlacionar uma propriedade de uma série de solutos para cada sistema solvente [KAMLET; ABRAHAM; DOHERTY e TAFT. 1984; KAMLET e TAFT. 1986] como:

$$\log (\gamma) = C_0 + C_1 \alpha_2 + C_2 \beta_2 + C_3 \pi_2^* \quad (\text{Eq. 15})$$

onde os subscritos 2 indicam que os parâmetros são relativos aos solutos.

A aplicação deste enfoque aos estudos de solvatação e de partição de solutos entre dois solventes exige a proposição de um modelo para fragmentar a diferença de energia livre em parcelas aditivas, sendo que um modelo proposto [KAMLET; DOHERTY; ABOUD; ABRAHAM e TAFT. 1988; ABRAHAM e LISZI 1978], envolve as seguintes etapas:

1) A formação de uma cavidade no solvente adequada para o soluto;

Este é um processo endoérgico. Para um mesmo solvente, e diferentes tamanhos de solutos, a energia de Gibbs para a formação das cavidades pode ser considerada proporcional ao volume ou à área da superfície dos solutos.

2) A reorganização das moléculas do solvente em suas posições de equilíbrio ao redor da cavidade;

Embora a entropia e a entalpia de reorganização podem ser consideráveis, a variação da energia livre de Gibbs é efetivamente zero devido à compensação, como no processo de liquefação do gelo a 273 K e não precisa ser considerada.

3) A inclusão do soluto na cavidade e conseqüentemente das várias interações entre as moléculas do solvente e do soluto.

As interações das moléculas de soluto e de solvente são exoérgicas, energeticamente favoráveis.

A expressão geral deste modelo [KAMLET; DOHERTY e ABRAHAM 1988] é:

Propriedade = termos de (cavidade + dipolaridade/polarizabilidade + acidez e basicidade de ligação de hidrogênio) + constante. (Eq.16)

Baseado neste modelo, foi proposto [ABRAHAM.1993] escalas de parâmetros dos solutos, experimentalmente determinados, para representar cada termo do processo, levando à uma equação geral de solvatação como:

$$\log SP = a \Sigma \alpha_2^H + b \Sigma \beta_2^H + r R_2 + s \pi_2 + v Vx + f \quad (\text{Eq. 17})$$

onde **SP** é uma propriedade relacionada à energia livre de uma série de solutos num determinado sistema solvente e as variáveis independentes, acidez ($\Sigma \alpha_2^H$) e basicidade ($\Sigma \beta_2^H$) de ligação de hidrogênio; a refração molar de excesso (R_2); a dipolaridade/polarizabilidade (π_2); e o volume característico (**Vx**) são propriedades dos solutos, enquanto os coeficientes (**a**, **b**, **r**, **s** e **v**) obtidos por regressão multi-linear são característicos do sistema solvente.

Os parâmetros de acidez ($\Sigma \alpha_2^H$) e de basicidade ($\Sigma \beta_2^H$) de ligação de hidrogênio são baseados em constantes de complexação dos solutos com 4-fluor fenol em meio de tetracloreto de carbono e representam situações em que solutos são rodeados por excesso de moléculas de solventes [ABRAHAM 1993] podendo ser determinados por cromatografia gás-líquido, por medidas em fases estacionárias altamente básicas ($\Sigma \alpha_2^H$) e altamente ácidas ($\Sigma \beta_2^H$).

A interação mais geral entre soluto e solvente envolve as forças de dispersão (London). Um descritor adequado para esta interação poderia ser a refração molar, mas esta propriedade é muito relacionada a volume para ser considerada uma variável independente. Numa tentativa de complementar a representação das forças de London descritas pelo volume, foi definido o termo de refração molar de excesso R_2 [ABRAHAM e col. 1990], como a diferença da refração molar do soluto com a de um alcano de mesmo volume característico. A refração molar (**RM**) em si calculada como:

$$RM = \frac{(n_D^2 - 1)}{(n_D^2 + 1) V_x} \quad (\text{Eq. 18})$$

onde n_D é o índice de refração para a linha D do sódio à 25°C e V_x é o volume molar intrínscico.

Para representar as interações dos tipos dipolo-dipolo e dipolo-dipolo induzido, uma tentativa [ABRAHAM e col. 1990] foi usar o momento de dipolo elétrico dos solutos, assim como o seu quadrado, o que foi considerado insatisfatório, tendo então sido desenvolvido o parâmetro π_2^H , a polaridade/dipolaridade do soluto [ABRAHAM e col. 1991]. Os valores de π_2^H para compostos voláteis, podem ser determinados por cromatografia gás líquido numa fase estacionária polar não ácida [ABRAHAM 1991; 1992; 1993]. Para outros solutos, os valores de π_2^H são obtidos das equações de LSER para as partições dos solutos entre diferentes sistemas solventes.

O parâmetro V_x é calculado por método algébrico e parametrizado [ABRAHAM e MCGOWAN 1987], desenvolvido para reproduzir volumes molares intrínscicos.

Os coeficientes obtidos por regressão multi-linear contêm informações do sistema solvente considerado, quanto à basicidade (**a**) e à acidez (**b**) de ligação de hidrogênio, quanto à polaridade (**r**), quanto à dipolaridade/polarizabilidade (**s**) e quanto à coesividade e às forças de dispersão de London (**v**).

A abordagem LSER com estes parâmetros experimentais foi aplicada [ABRAHAM, CHADA, WHITING e MITCHELL 1994] para o estudo das partições de solutos neutros entre água e n-octanol ($\log P_{oct}$; 613 solutos), entre água e n-hexadecano ($\log P_{c16}$; 370 solutos) e entre água e ciclohexano ($\log P_{cic}$; 170 solutos), levando à conclusão de que a partição dos solutos entre estas fases é dominada pelo termo de volume que favorece a solubilização para o solvente orgânico e pelos termos de ligação de hidrogênio que favorecem a solubilização para o meio aquoso, em

concordância com o esperado das diferenças dos solventes. As equações resultantes mostraram bom ajuste com os valores experimentais de $\log P$.

Os resultados obtidos por Abraham e colaboradores motivou a aplicação da mesma série de parâmetros experimentais dos solutos (em vários estudos, como o da incorporação de solutos neutros em micelas aquosas, consideradas como micro pseudo-fases [QUINA; ALONSO e FARAH 1995]. As equações resultantes mostraram bom ajuste com os valores experimentais ($\log K_s$) de incorporação dos solutos neutros nas micelas aniônicas de SDS (dodecil sulfato de sódio, 66 solutos), catiônicas de CTAB e DTAB (cetil e dodecil trimetil brometo de amônio, 42 e 39 solutos) e não iônicas de BRIJ 35 (dodecil éter 23 polioxietileno, 19 solutos). Destas **LSER** foi concluído que para os quatro sistemas micelares estudados, a incorporação dos solutos é basicamente descrita pelo termo de volume, refletindo o efeito hidrofóbico que favorece a solubilização nas micelas; e pelo termo de basicidade de ligação de hidrogênio que favorece a solubilização para o meio aquoso, indicando que água é melhor doador de próton do que os sítios de solubilização das micelas.

As relações observadas [ABRAHAM, CHADA, WHITING e MITCHELL 1994] dos valores de $\log P_{oct}$, $\log P_{c16}$ e $\log P_{cic}$ com os parâmetros experimentais dos solutos, para uma grande variedade de solutos orgânicos, mostram a generalidade, a abrangência e o potencial deste modelo. O entendimento destes parâmetros empíricos e os avanços nos cálculos de orbitais moleculares proveram novo campo para fértil interação entre técnicas experimentais e computacionais gerando trabalhos para associar os parâmetros experimentais a quantidades calculadas por métodos de orbitais moleculares ou de outras técnicas de mecânica quântica [LEWIS 1992]. Vários parâmetros teóricos foram propostos [BOUCHOUX, JAUDON, DECOUSON, GAL e MARIA 1991; PEDERSEN 1965; LOEW, POULSEN, KIRKJIAN, FERREL, SUDHINDRA e REBAGLIATI 1985; CHASTRETTE, RAJZMANN, CHANON e PURCELL. 1985]. As vantagens da utilização destes descritores obtidos por cálculos computacionais em relação aos experimentais foram relatadas [FORD e LIVINGSTONE 1990] principalmente

devido a não se limitarem a um pequeno grupo de compostos e por descreverem propriedades moleculares claramente definidas, levando a interpretações mais específicas das equações de **LSER**. No entanto os esforços para correlacionar os descritores teóricos dos solutos com os determinados experimentalmente, não obtiveram muito êxito [LEWIS 1987].

Uma abordagem [FAMINI; PENSKI e WILSON 1992; CRAMER; FAMINI e LOWREY 1993] foi desenvolvida como uma extensão teórica do método de Kamlet e Taft Parâmetros de natureza física bem definida, obtidos por cálculos a partir da estrutura molecular dos solutos em fase gasosa, foram propostos para representar cada um dos termos do modelo. Os parâmetros propostos foram:

- V_{MC} - O volume molecular característico de van der Waals, calculado pelo método de Hopfinger [HOPFINGER 1980] para representar o termo estérico,
- π_F - O índice de polarizabilidade obtido pela razão do volume da polarizabilidade calculada pelo método de Kurtz [KURTZ, STEWART e DIETER 1990] pelo volume molecular; para representar o termo de polarizabilidade,
- ϵ_a - A magnitude da diferença das energias, do primeiro orbital molecular não ocupado (**LUMO**) do soluto e do maior orbital ocupado (**HOMO**) da água, dividido por 100 para representar a parte covalente do termo de acidez de ligação de hidrogênio,
- ϵ_b - A magnitude da diferença das energias, **HOMO** do soluto e **LUMO** da água; dividido por 100, para representar a parte covalente do termo de basicidade de ligação de hidrogênio,
- q^+ - A carga atômica parcial do hidrogênio mais positivo para representar a parte eletrostática do termo de acidez de ligação de hidrogênio,
- $|q^-|$ - A magnitude da carga atômica parcial do átomo mais negativo para representar a parte eletrostática do termo de basicidade de ligação de hidrogênio.

Os estudos LSER de Famini [FAMINI; PENSKI e WILSON 1992; FAMINI e WILSON 1993] utilizando estes parâmetros teóricos em adsorção em sólidos, partições entre solventes imiscíveis, índice de retenção em HPLC, constantes de velocidade, etc., mostraram a viabilidade do método perante tamanha variedade de propriedades, apesar da variação estrutural de solutos em cada sistema estudado ser relativamente pequena.

A incorporação de 66 solutos neutros em sistema micelar aniônico (SDS) aquoso, foi estudada utilizando o mesmo enfoque, testando a hipótese de que a solução micelar apresenta comportamento de microfases ou “pseudo-fase” [FARAH; LIMA e QUINA 1997]. Apesar do sucesso obtido, a pequena variedade de solutos ainda compromete as conclusões do ponto de vista quantitativo. Os parâmetros utilizados foram: o volume característico de McGowan (V_x); as energias **LUMO** e **HOMO**; o momento de dipolo (μ) para representar a dipolaridade; o índice de polarizabilidade de Famini (π_F); e as cargas atômicas parciais do hidrogênio mais positivo (q^+) e do átomo mais negativo ($|q^-|$). Neste trabalho foi observado que apenas as variações dos parâmetros $|q^-|$ e V_x são relevantes para descrever a solubilidade de solutos neutros em micelas aquosas de SDS. A **LSER** obtida foi comparada com a equação obtida anteriormente com os parâmetros $\Sigma\alpha_2$, $\Sigma\beta_2$, R_2 , π_2 e V_x , para o mesmo sistema de solubilização e mesmo conjunto de solutos.

Apesar do sucesso da utilização dos análogos teóricos em **LSER** é necessário notar o pequeno número de solutos estudados, apresentando pouca variação de estrutura e portanto de propriedades [ABRAHAM; CHADA 1996].

II – OBJETIVO

O objetivo deste trabalho é avaliar a utilização de parâmetros dos solutos, obtidos de suas estruturas em fase gasosa pelo método de cálculo quântico semi-empírico PM3, na abordagem **LSER**, para estudar os coeficientes de partição de uma série abrangente de solutos neutros entre fases condensadas homogêneas, visando o entendimento das interações “soluto-solvente” que determinam este equilíbrio entre as fases.

III – Métodos

Para este estudo foi escolhida a série de solutos do trabalho de Abraham e col. [ABRAHAM; CHADA; WHITING e MITCHELL 1994], com seus respectivos valores experimentais de partições entre água e solvente orgânico (n-octanol, n-hexadecano e ciclohexano) e de parâmetros experimentais ($\Sigma\alpha_2$, $\Sigma\beta_2$, R_2 , π_2 e V_x). Estes dados foram avaliados e feitas algumas correções baseadas em dados mais recentes encontrados na literatura. Da série de solutos, alguns foram excluídos devido a estarem relacionados em duplicidade, com diferentes valores de parâmetros e de coeficientes de partição, como 3,3 dimetil pentano, ácido heptanóico, ácido decanóico e sulfeto de dietila, compostos que continham fósforo (elemento não parametrizado no modelo de cálculo) e os gases nobres, resultando num conjunto de 700 solutos.

III.1 – Obtenção dos parâmetros teóricos

Para cada soluto, foi gerado um conjunto de coordenadas de cada átomo numa geometria molecular inicial ("input"), utilizando os programas MOLGEN e MOLDEN. Esta estrutura foi submetida a um processo de otimização de geometria e análise conformacional pelo método de mecânica molecular (MM2), com o objetivo de determinar os principais mínimos das hiper-superfícies de energia potencial.

Estas conformações pré-otimizadas foram submetidas à otimização de geometria pelo método **PM3** de cálculo quântico semi-empírico do programa AMSOL, versão 6.1 [HAWKINS; GIESEN; LYNCH; CHAMBERS; ROSSI; STORES; RINALDI; LIOTARD; CRAMER; e TRUHLAR 1997], utilizando o critério de convergência por energia ou por gradiente, o primeiro satisfeito. O gradiente é a derivada parcial da energia eletrônica em função de cada parâmetro ajustável e geralmente é admitido que o maior gradiente calculado deve ser menor que 0,1 kcal/u, onde *u* representa uma distância (Å) ou um ângulo (radiano). Para o critério de energia admite-se a diferença entre as duas últimas geometrias até 0,1 kcal. Foram feitos os cálculos de

freqüência para todas as moléculas estudadas, a derivada segunda da energia, para verificar a ausência de freqüências imaginárias.

Deste modo foram obtidos os parâmetros teóricos moleculares dos solutos na fase gasosa. Estes cálculos foram realizados nos computadores do LCCA/CCE-USP e nas estações de trabalho disponíveis no IQUSP.

As estruturas otimizadas foram analisadas sem alteração de geometria no programa MOPAC 93 [STEWART 1993] para obtenção da polarizabilidade molecular.

Os parâmetros extraídos destes cálculos foram: a polarizabilidade, as energias **HOMO** e **LUMO**, o momento de dipolo elétrico (μ) e as cargas atômicas parciais.

As cargas atômicas parciais e o momento de dipolo elétrico foram obtidos, tanto através da análise populacional de Mülliken como pelo modelo classe IV de cargas CM1 – “charge model 1” [STORER; GIESEN; CRAMER e TRUHLAR 1995]. Este modelo CM1 é um ajuste das cargas obtidas pela análise populacional de Mülliken, por um conjunto de parâmetros desenvolvidos para reproduzir momentos de dipolos experimentais e é caracterizado pela combinação de acuracidade com baixa demanda de recursos computacionais [CHAMBERS; HAWKINS; CRAMER e TRUHLAR, 1996]. Assim:

$$q_k^{CM} = f(q_k^0, A, B, \dots), \quad (\text{Eq. 19})$$

onde f é a funcional semi empírica; q_k^0 as cargas atômicas obtidas pela análise populacional de Mülliken; e **A**, **B**, ... os parâmetros de ajuste.

O momento de dipolo μ é calculado a partir das cargas **CM1**, como:

$$\mu = [(\sum q_k r_k)^2]^{1/2}, \quad (\text{Eq. 20})$$

onde r_k são as coordenadas cartesianas e q_k as cargas CM1 referentes à cada átomo da molécula.

Os valores do parâmetro volume característico (V_x) foram calculados por método algébrico e parametrizado [ABRAHAM e MCGOWAN 1987].

O índice de polarizabilidade de Famini (π_F) foi obtido dividindo a polarizabilidade molecular pelo volume característico de McGowan.

III-2 Tratamento dos Resultados

Foram utilizadas regressões do tipo “stepwise” por exclusão de variáveis não significantes (“backward”) e pela inclusão de variáveis significantes (“forward”) para avaliar a significância estatística de cada variável em cada relação estudada, e regressões do tipo multilinear com critério de ajuste pela minimização da soma (**LS**) dos quadrados dos resíduos e pela minimização dos quadrados dos resíduos em relação à mediana (**LMS**), como proposto por Massart e col. [Massart, Kaufman, Rousseeuw, Leroy 1986].

As regressões multilíneas com critério de ajuste pela minimização da mediana do quadrado dos resíduos (**LMS**) foram aplicadas para melhor avaliar pontos (solutos) não adequadamente representados pelo modelo considerado (“outliers”). Os ajustes destas regressões **LMS** são menos sensíveis a “outliers” do que os ajustes obtidos pelas regressões **LS** e desta forma destacam os resíduos destes “outliers”.

IV – Resultados e Discussão

O conjunto de 700 solutos, com valores experimentais de **log P_{oct}** (596), de **log P_{c16}** (362) e de **log P_{cic}** (160), apresenta uma ampla variedade de funções químicas. A distribuição de cada função química dos solutos em cada sistema estudado é apresentada na Tabela 1.

Tabela 1. Composição percentual de solutos, por função (total de solutos em n-octanol-água é 596, n-hexadecano-água é 362 e cicloexano-água é 160).

	log P_{oct}	log P_{c16}	log P_{cic}
álcoois e tiois	8.8	10	11.2
aldeidos	0.5	3.5	3
hidrocarbonetos alifáticos	8.6	15.4	3.6
amidas	3.3	1.4	3.6
aminas e nitroalcanos	5.2	5.9	5.3
compostos aromáticos e derivados	19.1	12.4	4.7
ácidos carboxílicos	4.7	1.9	3
ésteres	8	7.3	5.3
éteres	2.3	3	1.8
gases	0.8	3.2	4.1
compostos alifáticos halogenados	10.8	14.6	1.2
cetonas	3.8	4.3	3.6
naftalenos	2.8	2.2	1.2
anilinas e compostos heterocíclicos	6.5	7.8	16.6
fenóis	9.1	3.2	25.4
outros	5.7	3.8	6.5

Pode-se observar o grande número de funções químicas e um equilíbrio razoável entre as porcentagens distribuídas em cada sistema de solventes, salientando-se em negrito as excessões, para cicloexano de compostos aromáticos e alifáticos halogenados em menor quantidade e de anilinas,

heterocíclicos e fenóis em maior proporção, relativamente a octanol-água e hexadecano-água. No caso de octanol-água observa-se pequenas quantidades relativas de aldeídos e de gases. Apesar disto, mesmo no pior caso existe mais de um representante, o que confere às conclusões dos estudos que utilizam esta série uma boa consistência.

Os valores dos parâmetros teóricos, extraídos dos procedimentos descritos estão apresentados em anexo, a partir da página 61.

Os descritores teóricos utilizados com sucesso em correlações deste tipo, assim como os experimentais, foram idealizados de modo a tentar refletir propriedades envolvidas no modelo de solvatação. Diferentemente dos teóricos, os experimentais são em geral composições complexas de propriedades moleculares, específicas para cada função química e dependentes do próprio meio solvatante. É interessante então averiguar a existência de correlações que tentem descrever esta complexidade em função dos parâmetros moleculares, de composição mais simples.

Foram então estudadas as dependências *parâmetros experimentais* = $f(\text{parâmetros teóricos})$ utilizando funções lineares como uma primeira aproximação.

IV.1– A relação dos parâmetros experimentais com os teóricos.

O procedimento conhecido como “stepwise”, com F de corte de 4, tanto por adição como por exclusão de variáveis, foi utilizado para avaliar a significância dos diversos parâmetros teóricos em cada caso. Para acidez e basicidade de ligação de hidrogênio, os resultados mostram significância das cargas atômicas parciais e das energias dos orbitais e a não significância de μ , π_F e V_x . Excluindo-se estes últimos, é observado a grande diferença nos valores de F parcial das cargas atômicas parciais em relação as energias HOMO e LUMO como mostram as Equações 21 e 22.

$$\Sigma\alpha_2 = 0.55 - 0.02 E_{\text{LUMO}} + 1.94 q^+ - 0.04 E_{\text{HOMO}} - 0.17 |q^-| \quad (\text{Eq. 21})$$

erro padrão.	<0.01	0.04	<0.01	0.03
F parcial	50	2112	104	35

(n = 700; r = 0.9102; d.p. = 0.0963; F = 834)

$$\Sigma\beta_2 = 0.64 - 0.01 E_{\text{LUMO}} - 0.53 q^+ + 0.06 E_{\text{HOMO}} + 1.20 |q^-| \quad (\text{Eq. 22})$$

erro padrão.	<0.01	0.06	0.01	0.04
F parcial	3	89	123	1054

(n = 700; r = 0.8177; d.p. = 0.1277; F = 351)

As correlações podem também ser avaliadas nos gráficos da Figura 1, que mostra a baixa qualidade dos ajustes, não permitindo inferências sobre os “outliers” e nem mesmo sobre a forma funcional da dependência.

Como esperado, existe correlação entre cargas atômicas parciais e energias HOMO e LUMO com $\Sigma\alpha_2$ e $\Sigma\beta_2$, apesar da baixa qualidade do ajuste.

Figura 1 – Valores de $\Sigma\alpha_2$ e $\Sigma\beta_2$, calculados a partir das cargas atômicas parciais e das energias HOMO e LUMO

Como esperado, existe correlação entre cargas atômicas parciais e energias HOMO e LUMO com $\Sigma\alpha_2$ e $\Sigma\beta_2$, apesar da baixa qualidade do ajuste.

É de certo modo surpreendente a pequena relevância estatística das energias HOMO e LUMO do soluto, na descrição de acidez e basicidade.

Este resultado pode ser interpretado de diversas maneiras, dentre as quais parece mais provável aquela envolvendo a discrepância entre concentração de carga, área de acesso do solvente e forma dos orbitais HOMO e LUMO do soluto na solução. Deste modo a energia do LUMO do soluto não leva em conta a localização da carga positiva dos hidrogênios da periferia da molécula, onde a área de acesso do solvente é grande e a polarização entre soluto e solvente se dá. Mesmo se calculada esta energia de LUMO na fase solvatada, ainda iria refletir somente a afinidade eletrônica da molécula e não a sua capacidade de fazer ponte de hidrogênio. Acrescente-se ainda a baixa qualidade das energias LUMO obtidas sem popular os primeiros orbitais virtuais. As mesmas considerações podem ser feitas com respeito à energia de HOMO, aqui com a adicional complexidade de que o átomo envolvido diretamente na ponte de hidrogênio não é o mesmo para todas as moléculas e não está necessariamente na periferia da molécula.

Pode-se ainda observar que $\Sigma\alpha_2$ é melhor representado pelos parâmetros teóricos do que $\Sigma\beta_2$. Isto é esperado visto que a acidez do soluto é referente apenas ao átomo de hidrogênio que apresenta carga praticamente pontual, do núcleo, sempre na extremidade da molécula enquanto que a representação de basicidade tem que contemplar diferentes átomos, com diferentes estados de valência, com carga espalhada na camada eletrônica, em diferentes posições na molécula e com diferentes áreas de contato com o meio.

Para os parâmetros experimentais refração molar de excesso (R_2) e dipolaridade/polarizabilidade (π_2) os resultados mostram significância do momento de dipolo elétrico e do índice de polarizabilidade e a não significância das cargas atômicas parciais, de HOMO, de LUMO e de V_x .

relevância do índice de polarizabilidade em relação ao momento de dipolo nestas relações.

$$\begin{aligned} R_2 &= -1.69 + (0.04 \pm 0.01) \pi_F - (0.03 \pm 0.01) \mu \\ \text{F parcial} &\quad \quad \quad 2925 \quad \quad \quad 19 \\ (n = 700; r = 0.8992; \text{d.p.} = 0.2471; F = 1472) \end{aligned} \quad (\text{Eq. 23})$$

$$\begin{aligned} \pi_2 &= -0.95 + (0.02 \pm 0.01) \pi_F + (0.16 \pm 0.01) \mu \\ \text{F parcial} &\quad \quad \quad 1776 \quad \quad \quad 776 \\ (n = 700; r = 0.8861; \text{d.p.} = 0.1908; F = 1274) \end{aligned} \quad (\text{Eq. 24})$$

Fig 2 – Valores de R_2 e de π_2 calculados a partir dos valores de momento de dipolo elétrico e do índice de polarizabilidade.

Como nos casos de $\Sigma\alpha_2$ e $\Sigma\beta_2$, nestas relações pode-se notar a baixa qualidade dos ajustes não permitindo inferências sobre os “outliers” e nem mesmo sobre a forma funcional da dependência.

IV.2 – Avaliação isolada dos parâmetros teóricos.

A substituição de um parâmetro experimental do modelo **LSER** por parâmetros teóricos correspondentes, deixando a descrição dos demais termos por parâmetros experimentais, possibilita observar a sobreposição de fatores avaliados por mais de um dos parâmetros experimentais, o que lhe confere alta complexidade e uma grande dose de redundância à LSER. O exemplo do volume é o mais conhecido mas ocorre o mesmo com todos os outros, notadamente π_2 e R_2 .

As equações 25 a 27 expressam as relações dos valores de **log P_{oct}**, de **log P_{c16}** e de **log P_{c1c}** com os valores normalizados (variância igual a 1) dos parâmetros experimentais, consideradas como referência para a avaliação das relações com parâmetros teóricos.

$$\begin{array}{l} \log P_{oct} = 0,05 \Sigma\alpha_2 - 3,81 \Sigma\beta_2 + 2,62 R_2 - 2,48 \pi_2 + 7,95 V_x + 0,38 \\ \text{erro padrão.} \quad 0,03 \quad 0,03 \quad 0,07 \quad 0,05 \quad 0,05 \\ \text{F parcial} \quad 4 \quad 15653 \quad 1351 \quad 2323 \quad 48493 \\ (\text{inclinação } 0,99 \pm 0,01; \text{ intercepto } 0,01 \pm 0,01) \\ (n = 596; r = 0,9970; dp = 0,1206; F = 19423) \end{array} \quad (\text{Eq. 25})$$

$$\begin{array}{l} \log P_{c16} = - 4,15 \Sigma\alpha_2 - 5,36 \Sigma\beta_2 + 3,08 R_2 - 3,81 \pi_2 + 9,20 V_x + 0,52 \\ \text{erro padrão.} \quad 0,05 \quad 0,04 \quad 0,13 \quad 0,08 \quad 0,06 \\ \text{F parcial} \quad 8381 \quad 16465 \quad 523 \quad 2382 \quad 27787 \\ (\text{inclinação } 1,00 \pm 0,01; \text{ intercepto } 0,01 \pm 0,01) \\ (n = 362; r = 0,9980; dp = 0,1280; F = 18826) \end{array} \quad (\text{Eq. 26})$$

$$\log P_{cic} = -4,38 \Sigma\alpha_2 - 5,40 \Sigma\beta_2 + 3,84 R_2 - 4,08 \pi_2 + 9,67 V_x + 0,47$$

erro padrão.	0,05	0,07	0,22	0,11	0,12
F parcial	8185	5832	309	1394	6482

(inclinação 0.99 ± 0.01 ; intercepto $< 0.01 \pm 0.01$)
 (n = 160; r = 0.9970; dp = 0.1340; F = 4665) (Eq. 27)

IV.2.1 – Avaliação de q^+ em substituição de $\Sigma\alpha_2$.

Para este conjunto de solutos, foi observado em IV.1 que o parâmetro experimental $\Sigma\alpha_2$ é basicamente relacionado à carga atômica parcial do hidrogênio mais positivo, sendo então adequado avaliar nas relações dos valores de $\log P_{oct}$, de $\log P_{c16}$ e de $\log P_{cic}$ esta carga como descritor de acidez de ligação de hidrogênio, mantendo os demais parâmetros experimentais dos solutos para descrever os outros termos do modelo de solvatação.

IV.2.1.1 – Avaliação de q^+ em substituição de $\Sigma\alpha_2$ na relação de $\log P_{oct}$.

A equação 28 expressa as relações dos valores de $\log P_{oct}$ com os valores normalizados (variância 1) dos parâmetros q^+ , $\Sigma\beta_2$, R_2 , π_2 e V_x , obtidas por regressão multilinear com critério (LS) de ajuste.

$$\log P_{oct} = 0,05 q^+ - 3,83 \Sigma\beta_2 + 2,59 R_2 - 2,47 \pi_2 + 7,96 V_x + 0,37$$

erro padrão.	0,02	0,03	0,07	0,05	0,04
F parcial	8	14304	1353	2424	48798

(inclinação 0.99 ± 0.01 ; intercepto 0.01 ± 0.01)
 (n = 596; r = 0.9970; dp = 0.1202; F = 19545) (Eq. 28)

$$\log P_{\text{oct}} = 0,05 \Sigma\alpha_2 - 3,81 \Sigma\beta_2 + 2,62 R_2 - 2,48 \pi_2 + 7,95 V_x + 0,38$$

erro padrão.	0,03	0,03	0,07	0,05	0,05
F parcial	4	15653	1351	2323	48493

(inclinação $0,99 \pm 0,01$; intercepto $0,01 \pm 0,01$)
 (n = 596; r = 0,9970; dp = 0,1206; F = 19423) (Eq. 25)

As relações de $\log P_{\text{oct}}$ expressas na equação 28 são praticamente as mesmas observadas na equação 25 e evidenciam a irrelevância do termo de acidez de ligação de hidrogênio, independentemente de ser representado pelo parâmetro experimental $\Sigma\alpha_2$ ou pela carga atômica parcial calculada do hidrogênio mais positivo (q^+), o que é justificado pela semelhança de basicidade de ligação de hidrogênio entre as fases água e n-octanol.

IV.2.1.2 – Avaliação de q^+ em substituição de $\Sigma\alpha_2$ na relação de $\log P_{\text{c16}}$.

A equação 29 expressa as relações dos valores de $\log P_{\text{c16}}$ com os valores normalizados (variância 1) dos parâmetros q^+ , $\Sigma\beta_2$, R_2 , π_2 e V_x , obtidas por regressão multilinear com critério (LS) de ajuste.

$$\log P_{\text{c16}} = - 2,40 q^+ - 4,25 \Sigma\beta_2 + 5,88 R_2 - 5,58 \pi_2 + 9,52 V_x + 0,56$$

erro padrão.	0,07	0,10	0,31	0,17	0,12
F parcial	1321	1685	357	1019	5809

(inclinação $0,98 \pm 0,02$; intercepto $0,03 \pm 0,02$)
 (n = 362; r = 0,9900; dp = 0,2920; F = 3577) (Eq. 29)

$$\log P_{\text{c16}} = - 4,15 \Sigma\alpha_2 - 5,36 \Sigma\beta_2 + 3,08 R_2 - 3,81 \pi_2 + 9,20 V_x + 0,52$$

erro padrão.	0,05	0,04	0,13	0,08	0,06
F parcial	8381	16465	523	2382	27787

(inclinação $1,00 \pm 0,01$; intercepto $0,01 \pm 0,01$)
 (n = 362; r = 0,9980; dp = 0,1280; F = 18826) (Eq. 26)

A comparação dos valores de Fparcial e dos coeficientes entre as Equações 29 e 26, mostra que a substituição apresenta boa consistência e

A comparação dos valores de F_{parcial} e dos coeficientes entre as Equações 29 e 26, mostra que a substituição apresenta boa consistência e que a carga atômica parcial do hidrogênio mais positivo tem característica mais específica do que o parâmetro $\Sigma\alpha_2$.

A Figura 3 ilustra a dispersão dos resíduos dos valores calculados de $\log P_{c16}$ a partir dos valores de q^+ , $\Sigma\beta_2$, R_2 , π_2 e V_x por regressões multilíneas com os diferentes critérios de ajuste, pelas minimizações da soma dos quadrados dos resíduos (LS) e da soma dos quadrados dos resíduos da mediana (LMS).

Figura 3. Resíduos de $\log P_{c16}$ calculado com q^+ em substituição à $\Sigma\alpha_2$ por LS (o) e LMS (x).

O Tratamento LS resalta o soluto 2-nitrofenol como maior resíduo na regressão, embora existam outros grandes resíduos negativos. Este soluto apresenta uma ligação de hidrogênio interna quando em fase condensada, que necessariamente diminui a disponibilidade do hidrogênio mais positivo, e a redução do valor calculado desta carga atômica parcial (por exemplo

dividindo-se por 2) diminui o grande resíduo observado de 1.9 para 0,7. O mesmo raciocínio pode ser aplicado aos solutos que apresentam grandes resíduos negativos. O uso da regressão utilizando a mediana mostra que estes resíduos são realmente “pontos fora”, já que eles são bastante aumentados, provocando aumentos e diminuições artificiais como os do grupo de álcoois e ácidos e o 2-nitrofenol, respectivamente, entre outros.

Os solutos “outliers” do tratamento LMS formam dois grupos: aqueles que apresentam mais de um hidrogênio com elevada carga atômica parcial como água, e aqueles cujo cálculo de carga não leva em conta, o efeito de grupos na estrutura que estabilizam o complexo formado, como o 4-clorofenol. O aumento do valor calculado da carga do hidrogênio mais positivo (por ex: a soma das cargas dos 2 hidrogênios mais positivos) para estas substâncias, provoca uma redução de seus resíduos. Isto de fato ocorre, como pode ser visto na Figura 4.

Figura 4. Resíduos de $\log P_{c16}$ (mediana) calculado com q^+ (cargas atômicas dos 26 “outliers” modificadas).

Considerando que as correções feitas aqui têm por objetivo apenas mostrar que a carga parcial é um bom descritor e, portanto, capaz de explicar grande parte da variação de alfa nas correlações, foram excluídos (Eq. 30) os 26 solutos considerados “outliers” para refazer a correlação (Equação 29) com o objetivo de compara-la com a relação de $\log P_{c16}$ com apenas os parâmetros experimentais (Eq. 26).

$$\log P_{c16} = - 1.71 q^+ - 5.02 \Sigma \beta_2 + 3.99 R_2 - 4.10 \pi_2 + 9.46 V_x + 0.56 \quad (\text{Eq. 30})$$

erro padrão.	0.06	0,08	0,22	0.14	0,08
F parcial	960	4230	326	913	13647

(inclinação 0.99 ± 0.01 ; intercepto 0.02 ± 0.01)
 (n = 336; r = 0.9952; dp = 0.1846; F = 6893)

$$\log P_{c16} = - 4,15 \Sigma \alpha_2 - 5,36 \Sigma \beta_2 + 3,08 R_2 - 3,81 \pi_2 + 9,20 V_x + 0,52$$

erro padrão.	0.05	0,04	0,13	0.08	0,06
F parcial	8381	16465	523	2382	27787

(inclinação $1,00 \pm 0.01$; intercepto 0.01 ± 0.01)
 (n = 362; r = 0.9980; dp = 0.1280; F = 18826) (Eq. 26)

Da equação 30 em relação à equação 26 é interessante observar que embora a substituição de $\Sigma \alpha_2$ por q^+ altere a magnitude dos coeficientes dos parâmetros experimentais, nota-se a constância das relações entre aqueles de R_2 e π_2 e de V_x . Isto sugere que devem ocorrer redundâncias de efeitos representados pelos parâmetros experimentais dos solutos. Outro aspecto a observar é que a exclusão dos “outliers” reduz a magnitude do coeficiente de q^+ . Isto pode ter ocorrido devido à exclusão de solutos com cargas q^+ num conjunto já pouco representado por este tipo de soluto. De toda forma, é importante observar que os coeficientes de todos os termos tiveram seus sinais mantidos, indicando os mesmos sentidos no fenômeno.

IV.2.1.3 – Avaliação de q^+ em substituição de $\Sigma\alpha_2$ na relação de $\log P_{c1c}$.

Na Figura 5 que mostra os resíduos dos valores de $\log P_{c1c}$ calculados pelos tratamentos LS e LMS, verifica-se uma compensação entre os maiores resíduos positivos e negativos, diferente do observado para $\log P_{c16}$. Aqui o menor número de pontos em relação ao de moléculas cuja carga deve ser alterada para compor o descritor q^+ é responsável por este efeito.

Como discutido para $\log P_{c16}$, as equações 27 e 31, referentes ao tratamento **LS**, mostram a consistência da substituição de $\Sigma\alpha_2$ por q^+ e a manutenção dos sinais dos coeficientes de todos os descritores, indicando os mesmos sentidos destes na partição dos solutos entre os meios solvatados.

$$\log P_{c1c} = - 4,38 \Sigma\alpha_2 - 5,40 \Sigma\beta_2 + 3,84 R_2 - 4,08 \pi_2 + 9,67 V_x + 0,47$$

erro padrão.	0,05	0,07	0,22	0,11	0,12
F parcial	8185	5832	309	1394	6482

(inclinação 0.99 ± 0.01 ; intercepto $< 0.01 \pm 0.01$)
 (n = 160; r = 0.9970; dp = 0.1340; F = 4665) (Eq. 27)

$$\log P_{c1c} = - 3.00 q^+ - 4.04 \Sigma\beta_2 + 6.24 R_2 - 5.86 \pi_2 + 10.09 V_x + 0,66$$

erro padrão.	0,14	0,26	0,83	0,40	0,44
F parcial	461	242	57	218	522

(inclinação 0.91 ± 0.22 ; intercepto 0.21 ± 0.04)
 (n = 160; r = 0.9550; dp = 0.493; F = 316) (Eq. 31)

Fig. 5 – Resíduos de $\log P_{cic}$ calculado com q^+ em substituição à $\Sigma\alpha_2$.

Os resíduos mais destacados são os referentes a 2-nitrofenol, que tem a capacidade de formar ligação de hidrogênio intramolecular, reduzindo a capacidade de compartilhamento do hidrogênio mais positivo com o solvente, já comentada na relação de $\log P_{c16}$ e aos isômeros catecol, resorcinol e hidroquinona que apresentam duas posições equivalentes com capacidade de doar próton para a formação de ligação de hidrogênio, além do efeito de potencializar a carga do hidrogênio mais positivo, quando em processo de formação da ligação de hidrogênio.

Em menor intensidade estas inadequações também ocorrem para outros solutos, tais como 2-clorofenol e 2 metoxifenol no mesmo sentido que 2-nitrofenol e trietilamina e (1 e 2) naftol no sentido dos isômeros di-hidroxibenzeno, levando a um total de 13 moléculas cuja carga deve ser alterada para compor o descritor q^+ .

Figura 6. Resíduos de $\log P_{cic}$ (LS) calculado com q^+ (cargas atômicas dos 13 "outliers" modificadas).

Excluindo 13 solutos ("outliers"), as relações dos valores de $\log P_{cic}$ com os valores dos parâmetros q^+ , $\Sigma\beta_2$, R_2 , π_2 e V_x é expressa pela Equação 32.

$$\log P_{cic} = -3.09 q^+ - 3.50 \Sigma\beta_2 + 7.81 R_2 - 6.50 \pi_2 + 9.65 V_x + 0,56$$

erro padrão.	0,08	0,16	0,51	0,25	0,26
F parcial	1374	465	231	701	1348

(inclinação 0.97 ± 0.01 ; intercepto 0.01 ± 0.02)
 (n = 147; r = 0.9843; dp = 0.2870; F = 879) (Eq. 32)

$$\log P_{cic} = -4,38 \Sigma\alpha_2 - 5,40 \Sigma\beta_2 + 3,84 R_2 - 4,08 \pi_2 + 9,67 V_x + 0,47$$

erro padrão.	0,05	0,07	0,22	0,11	0,12
F parcial	8185	5832	309	1394	6482

(inclinação 0.99 ± 0.01 ; intercepto $<0.01 \pm 0.01$)
 (n = 160; r = 0.9970; dp = 0.1340; F = 4665) (Eq. 27)

A série de solutos considerada na relação de $\log P_{\text{cic}}$ é a de maior incidência de solutos com acidez de ligação de hidrogênio relevante e há certo balanceamento quanto aos sentidos dos desvios dos “outliers”. Desta forma a exclusão dos “outliers” não altera a magnitude do coeficiente de q^+ .

Como observado nas relações de $\log P_{\text{cic}}$, as equações 31 e 32 mostram que a utilização de q^+ em substituição a $\Sigma\alpha_2$ altera a magnitude dos coeficientes dos outros parâmetros experimentais, principalmente de $\Sigma\beta_2$ que é reduzido e de R_2 e π_2 que são aumentados.

Também é interessante observar que a utilização de q^+ em substituição a $\Sigma\alpha_2$ na LSER para $\log P_{\text{cic}}$ leva à equivalência dos F parciais de $\Sigma\beta_2$ e π_2 , inferiores em relação à q^+ . Esta observação sugere a sobreposição e interdependência das propriedades representadas por $\Sigma\alpha_2$, $\Sigma\beta_2$ e π_2 .

Todos os termos tiveram os sinais de seus coeficientes mantidos, indicando os mesmos sentidos de suas influências na partição.

IV.2.2 – Avaliação de $|q^-|$ em substituição de $\Sigma\beta_2$.

Como observado em IV.1 a carga atômica parcial do átomo mais negativo da molécula é o principal descritor de $\Sigma\beta_2$. Analogamente ao que foi feito em relação a $\Sigma\alpha_2$, a substituição de $\Sigma\beta_2$ por $|q^-|$ pode avaliar a influência da carga local no parâmetro basicidade de ligação de hidrogênio, sem a sobreposição das outras componentes.

IV.2.2.1 – Avaliação de $[q^-]$ em substituição de $\Sigma\beta_2$ na relação de $\log P_{\text{oct}}$.

A Equação 33 expressa as relações dos valores de $\log P_{\text{oct}}$ com os valores normalizados (variância 1) dos parâmetros $\Sigma\alpha_2$, $[q^-]$, R_2 , π_2 e V_x , obtidas por regressão multilinear (LS), que apresenta ajuste bastante inferior ao observado com o uso de $\Sigma\beta_2$ (Eq. 25).

$$\log P_{\text{oct}} = 0,05 \Sigma\alpha_2 - 3,81 \Sigma\beta_2 + 2,62 R_2 - 2,48 \pi_2 + 7,95 V_x + 0,38$$

erro padrão.	0,03	0,03	0,07	0,05	0,05
F parcial	4	15653	1351	2323	48493

(inclinação $0,99 \pm 0,01$; intercepto $0,01 \pm 0,01$)
($n = 596$; $r = 0,9970$; $dp = 0,1206$; $F = 19423$) (Eq. 25)

$$\log P_{\text{oct}} = 1,09 \Sigma\alpha_2 - 3,27 [q^-] + 2,01 R_2 - 3,06 \pi_2 + 7,63 V_x + 0,85$$

erro padrão.	0,11	0,13	0,29	0,19	0,13
F parcial	103	661	48	256	3473

(inclinação $0,92 \pm 0,01$; intercepto $0,18 \pm 0,03$)
($n = 596$; $r = 0,9600$; $dp = 0,4344$; $F = 1387$) (Eq. 33)

O coeficiente de $\Sigma\alpha_2$ é aumentado e passa a ser estatisticamente significativo, provavelmente devido a redundâncias de efeitos representados pelos parâmetros experimentais dos solutos. Apesar do pequeno coeficiente de correlação entre os parâmetros $\Sigma\alpha_2$ e $\Sigma\beta_2$ (0.242), é interessante notar que trata-se de parâmetros complexos, apresentando correlação (não estatística) nas componentes menos importantes. Assim a parcela de $\Sigma\beta_2$ não representada por $[q^-]$ pode estar sendo suprida por $\Sigma\alpha_2$ além de por π_2 . Existe então sobreposição entre $\Sigma\alpha_2$ e $\Sigma\beta_2$, que são constantes de equilíbrio, englobando fatores covalentes, estabilidade termodinâmica e outros fatores não representados pelas cargas atômicas parciais. Os coeficientes dos outros parâmetros apresentam pouca variação.

As dispersões dos resíduos dos valores de $\log P_{\text{oct}}$ calculados pelas regressões (LS e LMS) estão ilustradas na Figura 7.

Figura 7 – Resíduos de $\log P_{\text{oct}}$ calculado com $|q^-|$ em substituição à $\Sigma\beta_2$.

Os solutos que apresentam mais de um átomo negativo com elevada carga atômica parcial, como 1,4 dioxana, etoxietanol, dimetilftalato, os isômeros de di-hidroxi benzeno e os solutos com dois nitrogênios como quinolina e imidazol, apresentam grandes desvios negativos. Os grandes resíduos positivos são referentes a nitro compostos e a moléculas que realçam o efeito de ressonância do átomo mais negativo, por exemplo pelo efeito indutivo do halogeno em moléculas aromáticas, como 3,5-diclorofenol. Quando da formação do complexo solvente ácido_soluto básico envolvendo nitrocompostos, ocorre diminuição da disponibilidade do oxigênio mais negativo em função da carga positiva do átomo de nitrogênio, havendo então a necessidade da redução do valor calculado desta carga atômica parcial para a formação do descritor $|q^-|$.

O ajuste do valor calculado da carga parcial atômica mais negativa, a duplicação ou a redução pela metade para os solutos referentes aos maiores

resíduos negativos e positivos respectivamente, provoca uma redução de seus resíduos. Isto de fato ocorre, como pode ser visto na Figura 8.

Figura 8. Resíduos de $\log P_{\text{oct}}$ (LS) calculado com $|q^*|$ (cargas atômicas dos 74 “outliers” modificadas).

Excluindo os solutos considerados “outliers”, a relação expressa na equação 34, melhora o ajuste dos valores calculados aproximando o intercepto e a inclinação do ideal (0; 1).

$$\log P_{\text{oct}} = 0.99 \Sigma \alpha_2 - 3,34 |q^-| + 1.93 R_2 - 3.22 \pi_2 + 7.77 V_x + 0,90$$

erro padrão.	0.08	0,09	0,20	0.14	0,09
F parcial	141	1452	94	561	8257

(inclinação 0.97 ± 0.01 ; intercepto 0.08 ± 0.02)

($n = 522$; $r = 0.9838$; $dp = 0.2774$; $F = 3116$)

(Eq. 34)

IV.2.2.2 – Avaliação de $|q|$ em substituição de $\Sigma\beta_2$ na relação de $\log P_{c16}$.

A equação 35 expressa as relações dos valores de $\log P_{c16}$ com os valores normalizados (variância 1) dos parâmetros $\Sigma\alpha_2$, $|q|$, R_2 , π_2 e V_x , obtidas pelo tratamento LS, que apresenta ajuste bastante inferior ao observado com o uso de $\Sigma\beta_2$ (Eq. 26).

$$\log P_{c16} = - 4,15 \Sigma\alpha_2 - 5,36 \Sigma\beta_2 + 3,08 R_2 - 3,81 \pi_2 + 9,20 V_x + 0,52$$

erro padrão.	0,05	0,04	0,13	0,08	0,06
F parcial	8381	16465	523	2382	27787

(inclinação $1,00 \pm 0,01$; intercepto $0,01 \pm 0,01$)
 (n = 362; r = 0.9980; dp = 0.1280; F = 18826) (Eq. 26)

$$\log P_{c16} = - 2,34 \Sigma\alpha_2 - 4,99 |q| + 1,74 R_2 - 4,17 \pi_2 + 8,70 V_x + 1,31$$

erro padrão.	0,22	0,22	0,66	0,36	0,24
F parcial	109	532	7	133	1328

(inclinação $0,93 \pm 0,01$; intercepto $0,12 \pm 0,04$)
 (n = 362; r = 0.9636; dp = 0.5584; F = 926) (Eq. 35)

A comparação das Equações 35 e 26 mostra que a utilização de $|q|$ em substituição a $\Sigma\beta_2$ reduz a magnitude dos coeficientes dos parâmetros $\Sigma\alpha_2$ e R_2 , basicamente mantém o coeficiente de V_x e aumenta o coeficiente de π_2 . As alterações de magnitude dos coeficientes dos parâmetros provavelmente são decorrentes das sobreposições de efeitos que os parâmetros experimentais representam. O coeficiente do parâmetro $|q|$ tem o mesmo sentido e magnitude similar ao do coeficiente de $\Sigma\beta_2$.

Os resíduos dos tratamentos LS e LMS estão ilustrados na Figura 9.

Fig. 9– Resíduos de $\log P_{c16}$ calculado com $|q|$ em substituição à $\Sigma\beta_2$.

Assim como para $\log P_{oct}$, na relação de $\log P_{c16}$ os maiores resíduos positivos são referentes a nitro compostos e a moléculas que realçam o efeito de ressonância do átomo mais negativo, por exemplo pelo efeito indutivo do halogeno em moléculas aromáticas, como 3,5-diclorofenol e os maiores resíduos negativos são referentes a solutos com duas cargas negativas relevantes, como 1,4 dioxana e etoxietanol e a solutos com dois nitrogênios como N-metil piperidina.

A exclusão de 35 solutos com as características acima descritas melhora o ajuste dos valores calculados de $\log P_{c16}$ (Eq.36), aproximando o intercepto e a inclinação do ideal (0; 1).

$$\log P_{c16} = -2.27 \Sigma\alpha_2 - 5.34 |q| + 1.02 R_2 - 4.42 \pi_2 + 9.03 V_x + 1.50$$

erro padrão. 0.16 0.15 0.47 0.26 0.16
F parcial 199 1218 5 281 3138

(inclinação 0.97 ± 0.01 ; intercepto 0.05 ± 0.03)

($n = 327$; $r = 0.9849$; $dp = 0.3625$; $F = 2081$)

(Eq. 36)

IV.2.2.3 – Avaliação de $|q^-|$ em substituição de $\Sigma\beta_2$ na relação de $\log P_{cic}$.

A equação 37 expressa as relações dos valores de $\log P_{cic}$ com os valores normalizados (variância 1) dos parâmetros $\Sigma\alpha_2$, $|q^-|$, R_2 , π_2 e V_x , obtidas por regressão multilinear (LS) que apresenta ajuste bastante inferior ao observado com o uso de $\Sigma\beta_2$ (Eq. 27).

$$\log P_{cic} = -4,38 \Sigma\alpha_2 - 5,40 \Sigma\beta_2 + 3,84 R_2 - 4,08 \pi_2 + 9,67 V_x + 0,47$$

erro padrão.	0,05	0,07	0,22	0,11	0,12
F parcial	8185	5832	309	1394	6482

(inclinação $0,99 \pm 0,01$; intercepto $< 0,01 \pm 0,01$)
($n = 160$; $r = 0,9970$; $dp = 0,1340$; $F = 4665$) (Eq. 27)

$$\log P_{cic} = -3,19 \Sigma\alpha_2 - 3,82 |q^-| + 5,68 R_2 - 4,88 \pi_2 + 8,72 V_x + 0,31$$

erro padrão.	0,25	0,40	1,08	0,55	0,59
F parcial	163	92	28	77	218

(inclinação $0,84 \pm 0,03$; intercepto $0,04 \pm 0,05$)
($n = 160$; $r = 0,9166$; $dp = 0,6615$; $F = 162$) (Eq. 37)

Da equação 37 em relação à equação 27 é interessante observar que o parâmetro $|q^-|$ tem o mesmo sentido e magnitude um pouco menor do que o coeficiente de $\Sigma\beta_2$, a manutenção dos sinais dos coeficientes dos outros parâmetros experimentais dos solutos, a redução da magnitude dos coeficientes dos parâmetros $\Sigma\alpha_2$ e de V_x em menor escala e o aumento da magnitude do coeficiente de π_2 e R_2 . As alterações de magnitude dos coeficientes dos parâmetros podem ser decorrentes das sobreposições de efeitos que os parâmetros experimentais representam.

Na Figura 10 que ilustra os resíduos para os tratamentos LS e LMS, verifica-se que os maiores resíduos positivos são referentes a nitro compostos e a moléculas que realçam o efeito de ressonância do átomo mais negativo pelo efeito indutivo do halogeno em moléculas aromáticas e que os maiores resíduos negativos são referentes a moléculas com duas

cargas negativas relevantes, num total de 51 solutos com estas características.

Figura 10. Resíduos de $\log P_{cic}$ calculado com $|q|$ em substituição à $\Sigma\beta_2$.

Também são destacados grandes resíduos positivos referentes a solutos como água e n-alcanos e grandes resíduos negativos para solutos como trimetil amina, trietil amina e alguns derivados de piridina. Isto é justificado pelo deslocamento das curvas de ajuste em função dos “outliers” e pela redução do coeficiente do parâmetro volume.

A exclusão dos 51 solutos considerados “outliers” melhora os dados da regressão, como expressa a Equação 38, porém a dispersão de resíduos, ilustrada na Figura 11, indica a tendência destes, o que deve ser devido a redução do coeficiente do parâmetro volume.

$$\log P_{\text{cic}} = -3.25 \Sigma \alpha_2 - 4.46 [\eta] + 4.66 R_2 - 4.90 \pi_2 + 9.22 V_x + 0.73$$

erro padrão.	0.18	0,22	0.66	0.38	0,33
F parcial	344	402	49	169	761

(inclinação 0.96 ± 0.02 ; intercepto 0.03 ± 0.02)

($n = 111$; $r = 0.9779$; $dp = 0.3260$; $F = 460$)

(Eq. 38)

Figura 11. Resíduos de $\log P_{\text{cic}}$ calculado com $[\eta]$ em substituição à $\Sigma \beta_2$ (51 solutos excluídos).

IV.2.3 – Avaliação de μ em substituição de π_2 e R_2 .

A simples exclusão do parâmetro π_2 da série de parâmetros experimentais, torna o parâmetro R_2 praticamente irrelevante nas relações dos $\log P$ para os três sistemas estudados, e a inclusão do parâmetro momento de dipolo elétrico, não altera esta situação.

De forma diferente, a exclusão de R_2 ou a substituição deste pelo parâmetro teórico índice de polarizabilidade (π_F) pouco altera as relações dos $\log P$ com o parâmetro experimental π_2 , de maior relevância, o que indica a dependência de R_2 em relação a π_2 .

Para os tres sistemas estudados, μ é importante para as relações enquanto que π_F é pouco relevante em certa concordância com o observado com os parâmetros experimentais π_2 e R_2 . O fato dos parâmetros experimentais R_2 e π_2 serem mais relacionados ao índice de polarizabilidade do que ao momento de dipolo elétrico como expesso nas equações 23 e 24 não é contraditório em relação ao observado das relações de $\log P$ com π_F , visto que das equações citadas, pode-se concluir pela “compensação” de efeitos em que π_F favorece a solubilização dos solutos para as diferentes fases dos sistemas em estudo.

Por estas razões é adequado testar a substituição dos parâmetros π_2 e R_2 pelo momento de dipolo elétrico isoladamente.

IV.2.3.1–Avaliação de μ em substituição de π_2 e R_2 na relação de $\log P_{oct}$.

A comparação das Equações 39 e 25 mostra que a utilização de μ em substituição aos parâmetros experimentais π_2 e R_2 gera o aumento dos valores dos coeficientes de $\Sigma\alpha_2$ e $\Sigma\beta_2$, enquanto o coeficiente de Vx é inalterado. Isto sugere, assim como observado nos testes das cargas atômicas parciais, haver sobreposições dos efeitos que os parâmetros experimentais $\Sigma\alpha_2$, $\Sigma\beta_2$ e π_2 representam. Estas variações dos valores dos

coeficientes são pouco acentuadas, o que é devido à menor importância de μ em relação aos parâmetros $\Sigma\alpha_2$ e $\Sigma\beta_2$ para as LSER estudadas.

$$\log P_{\text{oct}} = -0.14 \Sigma\alpha_2 - 4.16 \Sigma\beta_2 - 1.02 \mu + 7.94 V_x + 0.47$$

erro padrão.	0.04	0.05	0.05	0.05
F parcial	11	7400	412	22582

(inclinação 0.98 ± 0.01 ; intercepto 0.04 ± 0.02)
 (n = 596; r = 0.9914; dp = 0.2056; F = 8418) (Eq. 39)

$$\log P_{\text{oct}} = 0.05 \Sigma\alpha_2 - 3.81 \Sigma\beta_2 + 2.62 R_2 - 2.48 \pi_2 + 7.95 V_x + 0.38$$

erro padrão.	0.03	0.03	0.07	0.05	0.05
F parcial	4	15653	1351	2323	48493

(inclinação 0.99 ± 0.01 ; intercepto 0.01 ± 0.01)
 (n = 596; r = 0.9970; dp = 0.1206; F = 19423) (Eq. 25)

A Figura 12 ilustra que os resíduos observados dos tratamentos LS e LMS são diferentes quanto a magnitudes, porém os mais destacados são referentes aos mesmos solutos, independentemente do tipo da regressão aplicada.

Os maiores resíduos negativos são referentes a solutos cujas estruturas moleculares apresentam mais de um “dipolo local” relevante como alcanos policlorados, sugerindo que o momento de dipolo elétrico resultante não é suficiente para descrevê-los em termos de dipolaridade.

Para os solutos referentes aos maiores resíduos positivos não foram encontradas justificativas, em termos de dipolaridade, para explicar seus respectivos desvios. Ajustes dos valores de μ para os solutos que apresentam mais de um “dipolo local” relevante, levam os resíduos destes em direção ao zero, mas não alteram os ajustes dos demais solutos. Estes resultados sugerem que para alguns solutos, aparentemente há falta de um descritor adicional, talvez o de polarizabilidade, não o parâmetro teórico π_F ou do experimental R_2 , irrelevantes nesta relação.

Figura 12. Resíduos de $\log P_{oct}$ calculado com μ em substituição à π_2 e R_2 .

IV.2.3.2– Avaliação de μ em substituição de π_2 e R_2 na relação de $\log P_{c16}$.

A comparação das Equações 40 e 26, mostra que a utilização de μ em substituição aos parâmetros experimentais π_2 e R_2 gera o aumento de aproximadamente 8% dos valores dos coeficientes de $\Sigma\alpha_2$ e $\Sigma\beta_2$, enquanto que para o coeficiente de V_x ocorre uma pequena redução (~3%), sugerindo haver sobreposições dos efeitos que os parâmetros experimentais $\Sigma\alpha_2$, $\Sigma\beta_2$ e π_2 representam.

$$\log P_{c16} = - 4.50 \Sigma\alpha_2 - 5.85 \Sigma\beta_2 - 1.58 \mu + 8.96 V_x + 0,57$$

erro padrão.	0.10	0,09	0.12	0,10
F parcial	1948	4456	257	5562

(inclinação 0.99 ± 0.01 ; intercepto 0.02 ± 0.01)
 (n = 362; r = 0.9901; dp = 0.2932; F = 4434) (Eq. 40)

$$\log P_{c16} = - 4,15 \Sigma\alpha_2 - 5,36 \Sigma\beta_2 + 3,08 R_2 - 3,81 \pi_2 + 9,20 V_x + 0,52$$

erro padrão.	0.05	0,04	0,13	0.08	0,06
F parcial	8381	16465	523	2382	27787

(inclinação $1,00 \pm 0.01$; intercepto 0.01 ± 0.01)
 (n = 362; r = 0.9980; dp = 0.1280; F = 18826) (Eq. 26)

Os resíduos dos tratamentos **LS** e **LMS**, ilustrados na Figura 13 são diferentes quanto a magnitudes, porém qualitativamente iguais, no sentido de que os mais destacados são referentes aos mesmos solutos, independentemente do tipo da regressão aplicada.

Figura 13. Resíduos de $\log P_{c16}$ calculado com μ em substituição à π_2 e R_2 .

Como observado nas relações de $\log P_{oct}$ os solutos com mais de um “dipolo local” relevante não são bem descritos em termos de dipolaridade pelo momento de dipolo, apresentando grandes resíduos negativos, podendo ser identificados como “outliers”. Sem justificativas em termos de dipolaridade, naftalenos apresentam grandes resíduos negativos enquanto ésteres e iodo alcanos apresentam grandes resíduos positivos, sugerindo a falta de um descritor adicional, talvez o de polarizabilidade. A utilização do parâmetro teórico π_F ou do experimental R_2 não melhora os ajustes referentes a estes solutos. Ajustes dos valores de μ para os solutos que apresentam mais de um “dipolo local” relevante, levam os resíduos destes em direção ao zero, mas não alteram os ajustes dos demais solutos.

IV.2.3.2– Avaliação de μ em substituição de π_2 e R_2 na relação de $\log P_{cic}$.

A comparação das Equações 41 e 27, mostra que a utilização de μ em substituição aos parâmetros experimentais π_2 e R_2 gera alterações pouco acentuadas, aumentos nos valores dos coeficientes de $\Sigma\alpha_2$ e $\Sigma\beta_2$ e pequena redução do coeficiente de V_x .

$$\log P_{cic} = - 4.61 \Sigma\alpha_2 - 5.79 \Sigma\beta_2 - 1.93 \mu + 9.09 V_x + 0,74$$

erro padrão.	0.09	0,13	0.12	0,19
F parcial	2605	1871	274	2158

(inclinação 0.98 ± 0.01 ; intercepto 0.01 ± 0.01)
(n = 160; r = 0.9871; dp = 0.2645; F = 1468)

(Eq. 41)

$$\log P_{cic} = - 4,38 \Sigma\alpha_2 - 5,40 \Sigma\beta_2 + 3,84 R_2 - 4.08 \pi_2 + 9,67 V_x + 0,47$$

erro padrão.	0.05	0,07	0,22	0.11	0,12
F parcial	8185	5832	309	1394	6482

(inclinação 0.99 ± 0.01 ; intercepto $< 0.01 \pm 0.01$)
(n = 160; r = 0.9970; dp = 0.1340; F = 4665)

(Eq. 27)

Assim como observado para $\log P_{oct}$ e para $\log P_{c16}$, os resíduos dos tratamentos LS e LMS, ilustrados na Figura 14 são diferentes quanto a magnitudes, porém qualitativamente iguais.

Também para $\log P_{cic}$, os solutos com mais de um “dipolo local” relevante não são bem descritos em termos de dipolaridade pelo momento de dipolo calculado. Amidas apresentam grandes resíduos negativos enquanto alcanos lineares apresentam grandes resíduos positivos, sugerindo a falta de um descritor adicional, talvez o de polarizabilidade. A utilização do parâmetro teórico π_F ou do experimental R_2 não melhora os ajustes referentes a estes solutos.

Ajustes dos valores de μ para os solutos que apresentam mais de um “dipolo local” relevante, levam os resíduos destes em direção ao zero, mas não alteram os ajustes dos demais solutos.

Figura 14. Resíduos de $\log P_{cic}$ calculado com μ em substituição à π_2 e R_2

IV.3– Relações dos log P com os parâmetros teóricos dos solutos.

Das avaliações realizadas em IV.2 é esperado das relações dos log P com os parâmetros teóricos, a ocorrência de “outliers” referentes a solutos cujas componentes eletrostáticas dos termos de acidez, basicidade e dipolaridade de ligação de hidrogênio não são adequadamente descritos pelos valores calculados de q^+ , $|q^-|$ e μ . Devido a isto as relações destes log P com a série de parâmetros teóricos foram avaliadas considerando o conjunto completo de solutos e excluindo os solutos considerados como “outliers” nos testes isolados de q^+ , $|q^-|$ e μ .

IV. 3.1 – Relações de log P_{oct} com parâmetros teóricos dos solutos

As equações 42 e 43 expressam as relações de log P_{oct} com os parâmetros teóricos dos solutos normalizados (variância 1), considerando todo o conjunto de solutos e excluindo os “outliers”.

$$\log P_{oct} = -0.30 E_{LUMO} + 0.90 q^+ - 0.83 E_{HOMO} - 4.21 |q^-| - 1.35 \pi_F - 0.79 \mu + 7.70 V_x + 1.87$$

e.p.	0.17	0.10	0.27	0.18	0.30	0.16	0.15
F parc.	3	74	10	568	20	23	2655

(inclinação 0.90 ± 0.01 ; intercepto 0.24 ± 0.04)
($n = 596$; $r = 0.9473$; $dp = 0.4984$; $F = 733$) (Eq. 42)

$$\log P_{oct} = -0.01 E_{LUMO} + 0.53 q^+ - 0.04 E_{HOMO} - 3.82 |q^-| - 1.62 \pi_F - 1.20 \mu + 7.73 V_x + 1.39$$

erro padrão	0.12	0.08	0.20	0.13	0.20	0.13	0.10
F parc.	0	46	0	874	63	86	5675

(inclinação 0.96 ± 0.01 ; intercepto 0.11 ± 0.03)
($n = 514$; $r = 0.9772$; $dp = 0.3257$; $F = 1529$) (Eq. 43)

$$\log P_{oct} = 0,05 \Sigma \alpha_2 - 3,81 \Sigma \beta_2 + 2,62 R_2 - 2,48 \pi_2 + 7.95 V_x + 0,38$$

erro padrão.	0.03	0.03	0.07	0.05	0.05
F parcial	4	15653	1351	2323	48493

(inclinação 0.99 ± 0.01 ; intercepto 0.01 ± 0.01)
($n = 596$; $r = 0.9970$; $dp = 0.1206$; $F = 19423$) (Eq. 25)

Nestas relações, os principais parâmetros que determinam a solubilização dos solutos em uma ou outra fase do sistema água_n-octanol são o volume que favorece a solubilização para a fase n-octanol e a carga atômica parcial do átomo mais negativo que favorece a solubilização para a fase água, em concordância com o observado na Equação 25. O momento de dipolo elétrico e o parâmetro índice de polarizabilidade são pouco relevantes e as energias HOMO e LUMO não são relevantes na relação

A Figura 15 ilustra os ajustes e resíduos dos valores de $\log P_{\text{oct}}$ calculados pelas Eq. 42 e 43. Considerando o conjunto completo de solutos, observa-se resíduos de até 2 unidades de logaritmo, enquanto que excluindo os "outliers" a amplitude da dispersão dos resíduos passa para ± 0.8 unidades de logaritmo.

Figura 15. Ajuste dos valores de $\log P_{\text{oct}}$ calculados (LS) com parâmetros teóricos dos solutos.

IV. 5.2 – Relações de $\log P_{c16}$ com parâmetros teóricos dos solutos

As equações 44 e 45 expressam as relações de $\log P_{c16}$ pelo tratamento **LS**, com os parâmetros teóricos dos solutos normalizados (variância 1), considerando todo o conjunto de solutos e excluindo os “outliers” e indicam que V_x , $|q^-|$ e q^+ são os parâmetros que melhor descrevem as variações de $\log P_{c16}$, em concordância com o observado na Eq. 26. Os parâmetros momento de dipolo elétrico e índice de polarizabilidade são pouco importantes, mais do que as energias HOMO e LUMO, praticamente irrelevantes na relação.

$$\log P_{c16} = -0.34 E_{LUMO} - 1.26 q^+ - 0.83 E_{HOMO} - 5.76 |q^-| - 1.53 \pi_F - 1.14 \mu + 9.45 V_x + 2.00$$

e.p.	0.27	0.19	0.42	0.31	0.58	0.31	0.32
F parc.	2	42	4	349	7	13	865

(inclinação 0.90 ± 0.02 ; intercepto 0.17 ± 0.04)
($n = 362$; $r = 0.9455$; $dp = 0.6825$; $F = 426$) (Eq. 44)

$$\log P_{c16} = 0.93 E_{LUMO} - 1.71 q^+ + 0.99 E_{HOMO} - 5.40 |q^-| - 2.88 \pi_F - 1.88 \mu + 9.33 V_x + .18$$

e.p.	0.21	0.16	0.33	0.26	0.43	0.27	0.23
F parc.	20	119	9	457	45	48	1679

(inclinação 0.95 ± 0.01 ; intercepto 0.09 ± 0.03)
($n = 302$; $r = 0.9750$; $dp = 0.4488$; $F = 808$) (Eq. 45)

$$\log P_{c16} = -4.15 \Sigma \alpha_2 - 5.36 \Sigma \beta_2 + 3.08 R_2 - 3.81 \pi_2 + 9.20 V_x + 0.52$$

erro padrão.	0.05	0.04	0.13	0.08	0.06
F parcial	8381	16465	523	2382	27787

(inclinação 1.00 ± 0.01 ; intercepto 0.01 ± 0.01)
($n = 362$; $r = 0.9980$; $dp = 0.1280$; $F = 18826$) (Eq. 26)

A Figura 16 ilustra os ajustes e resíduos dos valores de $\log P_{c16}$ calculados pelas Eq. 44 e 45. Considerando o conjunto completo de solutos, observa-se resíduos de até 3 unidades de logaritmo, e mesmo excluindo os “outliers”, ainda assim, cinco solutos (3 aminas, O_2 e H_2) apresentam

resíduos menores do que (-1) unidade de logaritmo e três solutos (formiato de isopropila, benzaldeído e monóxido de carbono) apresentam resíduos superiores a 1 unidade de logaritmo. Não foi detectado justificativas físico-químicas para a ocorrência destes resíduos e a avaliação da regressão (Eq. 44) sugere que estes resíduos são em parte decorrentes do deslocamento da curva de ajuste (inclinação = 0.95 e intercepto = 0.09).

Figura16. Ajuste dos valores de $\log P_{c16}$ calculados (LS) com parâmetros teóricos dos solutos.

IV. 3.3 – Relações de log P_{cic} com parâmetros teóricos dos solutos

As equações 46 e 47 expressam as relações de log P_{cic} pelo tratamento LS, com os parâmetros teóricos dos solutos normalizados (variância 1), considerando respectivamente todo o conjunto de solutos e excluindo os “outliers” e indicam que V_x, |q| e q⁺ são os parâmetros que melhor descrevem as variações de log P_{cic}, em concordância com o observado na Eq. 27. Com menor importância, o momento de dipolo também é relevante, enquanto que os parâmetros índice de polarizabilidade e as energias HOMO e LUMO são pouco relevantes para a relação de log P_{cic}.

$$\log P_{cic} = 0.47 E_{LUMO} - 2.15 q^+ - 2.36 E_{HOMO} - 3.20 |q| - 2.10 \pi_F - 2.71 \mu + 9.02 V_x + 1.13$$

e.p.	0.72	0.31	0.99	0.65	1.43	0.56	0.86
F parc.	0	50	6	24	2	23	111

(inclinação 0.72±0.04; intercepto 0.06±0.06)
(n = 160; r = 0.8501; dp = 0.8768; F = 57)

(Eq. 46)

$$\log P_{cic} = 2.06 E_{LUMO} - 2.65 q^+ + 0.63 E_{HOMO} - 3.58 |q| + 1.96 \pi_F - 2.30 \mu + 8.22 V_x - 1.03$$

e.p.	0.36	0.17	0.52	0.35	0.73	0.36	0.43
F parc.	33	233	1	104	7	42	363

(inclinação 0.95±0.02; intercepto 0.03±0.04)
(n = 100; r = 0.9715; dp = 0.3658; F = 221)

(Eq. 47)

$$\log P_{cic} = -4.38 \Sigma \alpha_2 - 5.40 \Sigma \beta_2 + 3.84 R_2 - 4.08 \pi_2 + 9.67 V_x + 0.47$$

erro padrão.	0.05	0.07	0.22	0.11	0.12
F parcial	8185	5832	309	1394	6482

(inclinação 0.99±0.01; intercepto <0.01±0.01)
(n = 160; r = 0.9970; dp = 0.1340; F = 4665)

(Eq. 27)

A Figura 17 ilustra os ajustes e resíduos dos valores de log P_{cic} calculados pelas Eq. 46 e 47. Considerando o conjunto completo de solutos, observa-se resíduos de até 3 unidades de logaritmo, e mesmo excluindo os “outliers” (Eq. 47), ainda se observa cinco solutos (éter dietílico, metil fenil sulfona, 4-fenilfenol, piridina e N,N dimetil anilina) com resíduos menores do

que -0.6 unidades de logaritmo. Não foi detectado justificativas físico-químicas para a ocorrência destes resíduos e a avaliação desta regressão sugere que estas ocorrências são devidas ao deslocamento da curva de ajuste (0.95; 0.03).

Figura 17. Ajuste dos valores de $\log P_{cic}$ calculados (LS) com parâmetros teóricos dos solutos.

IV. 5.4 – Sumário das relações dos $\log P$ com parâmetros teóricos.

Como previsto pelas avaliações realizadas em IV.2 as relações de $\log P$ com os parâmetros teóricos geram a ocorrência de “outliers” referentes a solutos cujas componentes eletrostáticas dos termos de acidez, basicidade e dipolaridade de ligação de hidrogênio não são adequadamente descritas pelos valores calculados de q^+ , $|q^-|$ e μ . A exclusão destes solutos torna as relações quimicamente mais consistentes e qualitativamente semelhantes às LSER observadas com parâmetros experimentais dos solutos.

Os coeficientes das regressões referentes às quantidades eletrostáticas são sensíveis às distribuições das intensidades destes parâmetros nos conjuntos de solutos testados, o que já havia sido observado anteriormente nos testes isolados de cada carga parcial. Esta sensibilidade pode ser um limitante para a aplicação de uma equação geral de LSER com parâmetros teóricos dos solutos.

Os valores calculados de $\log P$ a partir dos parâmetros teóricos, mesmo com a exclusão dos “outliers”, são menos ajustados do que os observados com a utilização de parâmetros experimentais. As fontes consideradas para estas dispersões são muitas, como a utilização apenas da intensidade da maior carga negativa, independentemente da posição em que o átomo se encontra na molécula ou do átomo a que esta se refere, o fato de outros solutos em menor intensidade apresentarem características semelhantes às dos “outliers” identificados e a falta de um termo mais efetivo para descrever a polarizabilidade. Todavia é evidente que o ajuste é pelo menos razoável, principalmente em se considerando que estes parâmetros teóricos foram obtidos de estruturas moleculares isoladas dos solutos.

O melhor ajuste das LSER com parâmetros teóricos é observado para $\log P_{oct}$ em função deste sistema, em relação aos sistemas água_alcano, ser menos sensível aos termos de ligação de hidrogênio e a mais relacionada ao parâmetro V_x , parâmetro este que não foi alterado neste estudo.

V – Conclusões

Como se depreende pelas conclusões abaixo expostas, a contribuição mais relevante deste trabalho é o emprego de um universo de 700 solutos, validando a proposta de Famini e col. de utilizar cargas atômicas parciais, comumente empregadas para o entendimento qualitativo de reatividade, como descritores quantitativos de interações moleculares de solubilização, estágio inicial da maioria das reações químicas.

- 1) Os parâmetros teóricos, obtidos pela otimização de geometria de estruturas moleculares em fase gasosa, pelo método PM3, são adequados como ou para compor descritores em estudos de solubilização pela abordagem **LSER**. Para a maioria dos solutos considerados, as quantidades eletrostáticas q^+ , $|q^-|$ e μ descrevem adequadamente os termos de acidez, basicidade e dipolaridade de ligação de hidrogênio, o que não ocorre para solutos com mais de um polo positivo ou negativo relevante, como hidroquinona, nem para solutos que apresentam interações intramoleculares como 2-nitrofenol. Nestes casos os valores calculados podem ser ajustados para a formação destes descritores;
- 2) Os termos de acidez e basicidade de ligação de hidrogênio têm caráter predominantemente eletrostático. As demais componentes são menos relevantes;

- 3) Com a ampla base de dados empregada, a utilização de uma técnica de ajuste menos sensível a “outliers”, como é o caso de regressões com critério de ajuste pela minimização da mediana (**LMS**) dos quadrados dos resíduos, pode ser decisiva na interpretação dos resultados e portanto nas conclusões obtidas.

Os resultados e conclusões obtidos deste trabalho sugerem como continuidade os seguintes estudos:

- utilização de áreas de acesso do solvente ao soluto, como uma forma de “ponderar” as intensidades das quantidades eletrostáticas;
- aplicação destes descritores em estudos de reatividade;
- cálculo de energia livre de solvatação, pelo modelo de Cramer e Truhlar (AMSOL), como uma forma de avaliar os diferentes componentes do ΔG de solvatação (cavitação, eletrostática, polarizabilidade...);
- cálculo da energia de cavitação, como uma forma de “desmembrar” os efeitos descritos pelo volume.

VI – Referências

- ABRAHAM MH *Chem. Soc. Revs.* **1993**,22,73
- ABRAHAM MH *J. Phys. Org. Chem.* **1993**,6,660
- ABRAHAM MH; CHADA HS "Lipophilicity in Drug Actin and Toxicology", Pliska V, testa B, van der Waterbeend; VCH: Weinheim 1996
- ABRAHAM MH, CHADA HS; WHITING GS; MITCHELL RC *J.Pharm.Sci.* **1994**,83,8,1085.
- ABRAHAM MH; GRELLIER PL; PRIOR DV; DUCE PP; MORRIS JJ; TAYLOR PJ *J.Chem. Soc. Perkin Trans* **1989**,2,699
- ABRAHAM MH; GRELLIER PL; PRIOR DV; DUCE PP; MORRIS JJ, TAYLOR PJ *J.Chem. Soc. Perkin Trans* **1990**,2,521
- ABRAHAM MH; LISZI J *J. Chem.Soc. Faraday Trans.1* **1978**,74,1604
- ABRAHAM MH; McGOWAN JC, *Chromatographia* **1987**,23,243.
- ABRAHAM MH *Pure Appl. Chem.***1993**,65,2503
- ABRAHAM MH; WHITING GS *J. Chromatogr.* **1992**,594,229
- ABRAHAM MH; WHITING GS; DOHERTY RM; SHUELY WJ *J. Chem. Soc. Perkin Trans.* **1990**,3,1451
- ABRAHAM MH; WHITING GS; DOHERTY RM; SHUELY WJ *J. Chromatogr.***1991**,587,213
- ABRAHAM MH; WHITING GS; FUCKS R; CHAMBERS EJ *J.Chem. Soc, Perkin Trans.***1990**,2,291.
- BARONE V; COSSI M; TOMASI J *J.Chem. Phys.* **1997**,107,8,3210.

- BEM-NAIM A *J. Phys. Chem.* **1978**,82,792
- BEM NAIM A *Solvation Thermodynamics*, Plenum Press, N Y **1987**.
- BEN-NAIM A *Water and Aqueous Solutions*; Plenum Press: N Y **1974**.
- BERTHELOT M; HELBERT M; LAURENCE C; Le QUESTEL JY J
. *Phys. Org. Chem.* **1993**,6,302
- BOUCHOUX G; JAUDON P; DECOUSON M; GAL JF; MARIA PC J.
Phys Org. Chem. **1991**, 4,285.
- CHAMBERS CC; HAWKINS GD; CRAMER CJ; TRUHLAR DG J
. *Phys. Chem.* **1996**,100,16385.
- CHASTRETTE M; RAJZMANN M; CHANON M; PURCELL KF *J. Am.
Chem. Soc.***1985**, 10,7,1.
- CRAMER CJ; FAMINI GR; LOWREY AH *Acc. Chem. Res.*
1993,26,599
- DILLET V; RINALDI D; RIVAIL JL *J. Phys. Chem.* **1994**, 98,5034.
- FAMINI GR; WILSON LY *J. Phys. Org Chem.* **1993**,6,395.
- FAMINI GR, PENSKI CA; WILSON LY *J. Phys. Org. Chem.* **1992**,5,
539.
- FARAH JPS; LIMA GAR; QUINA FH *J. Mol. Struc.(THEOCHEM)*
1997,394,267.
- FORD MG; LIVINGSTONE DG *Quant. Struc. Act. Relat.* **1990**,9,107.
- FRISCH HL *Adv. Chem. Phys.* **1963**,6,229.
- GIESEN DJ; CRAMER CJ; TRUHLAR DG *J. Phys. Chem.* **1994**,98,
4141.

- HAMMETT LP *Chem. Rev.* **1935**,17,125.
- HAMMETT LP *Physical Organic Chemistry*, McGraw-Hill, N.York, **1940**.
- HANSCH C *Acc. Chem. Res.* **1969**,B2,232.
- HAWKINS GD; CRAMER CJ; TRUHLAR DG *J. Phys. Chem.* **1996**,
100,19824.
- HAWKINS GD; GIESEN DJ; LYNCH GC; CHAMBERS CC; ROSSI I;
STORER JW; RINALDI D.; LIOTARD DA; CRAMER CJ;TRUHLAR
DG *AMSOL Version 6.1 Manual* **1997**.
- KAMLET MJ; ABRAHAM MH; DOHERTY RM; TAFT RW *J. Am.
Chem. Soc.* **1984**,106,464
- KAMLET MJ; DOHERTY RM; ABRAHAM MH; TAFT RW *Quant.
Struct. Act.* **1988**,7,71.
- KAMLET MJ; TAFT RW; ABBOUDT JLM *J. Am. Chem. Soc.* **1977**, 91,
8325.
- KAMLET MJ, TAFT RW *Acta Chem. Scand.* **1986**,B40,619
- KAMLET MJ; TAFT RW; FAMINI GR; DOHERTY RM *Acta Chem.
Scand.* **1987**,41,589.
- KAMLET MJ; TAFT RW *Prog. Org. Chem.* **1983**,48,2877
- KAMLET MJ; DOHERTY RM; ABBOUD JLM; ABRAHAM MH; TAFT
RW *Chemtech* **1988**,16,566
- KARELSON M *Molecular Descriptors in QSAR / QSPR*, Willey-
Interscience, N.York **2000**
- KARELSON M; DIERCKSON GHF "in *Computational Molecular
Science*", *Kluwer Acad. Publ., Dordiecht, The Netherlands* **1997**.

- KOPPEL IA; PALM VA "in Advances in Linear Free Energy Relationships, chapter 5, Plenum – London **1972**
- KURTZ HA; STEWART JJP; DIETER KM *J. Comput. Chem.* **1990**,11,82
- LAURENCE C; QUEIGNEC R *J. Chem. Soc. Perkin Trans.* **1992**,2,1915
- LEWIS DFV *J. Comp. Chem.* **1987**,8, 1084;
- LEWIS DFV *Prog. Drug Met.* **1990**,12,205
- Le QUESTEL JY; LAURENCE C; LACHKAR A; HELBERT M; BERTHELOT M *J.Chem. Soc. Perkin Trans.* **1992**,2,2091
- LEWIS DFV *J. Comp. Chem.* **1987**,8,1084
- LOEW GH; POULSEN M; KIRKJIAN E; FERREL J; SUDHINDRA BS; REBAGLIATI M *Envir. Health Perspect.* **1985**, 61,69.
- MASSART DL; KAUFMAN L; ROUSSEEUW PJ; LEROY A *Anal. Chimica Acta* **1986**,187,171.
- PAVELICH WA; TAFT RW *J. Am. Chem. Soc.* **1957**,79,4935
- PEDERSEN L *Environ. Health Perspect.* **1965**, 61,185.
- PLATTS JA; ABRAHAM MH; BUTINA D; HERSEY A *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **2000**,40,7
- QUINA FH; ALONSO EO; FARAH JPS *J. Phys. Chem.* **1995**,99,30, 11708.
- REICHARDT C *Solvents and Solvent effects in Organic Chemistry*, VCH, New York **1990**
- STEWART JJP *Fujitsu Limited*, Tokyo, Japan **1993**

- STORER JW; GIESEN DG; CRAMER CJ; TRUHLAR D., *J. Comput. Aided Mol. Des.* **1995**, 9,87.
- TAFT RW; GURKA D; JORIS L; VON RSCHLEYER P; RAKSHYS JW, *J. Am. Chem. Soc.* **1969**,91,4801
- TAFT RW *J. Am. Chem. Soc.* **1953**,75, 4321
- TOMASI J; PÉRSICO M *Chem. Rev.* **1994**,94,2027

Anexo - Tabela de dados dos solutos

soluto	dados extraídos da literatura							dados extraídos dos cálculos								
	$\Sigma\alpha_2$	$\Sigma\beta_2$	R_2	π_2	Vx	$\log P_{oct}$	$\log P_{c16}$	$\log P_{c1c}$	Ao	E_{HOMO}	E_{LUMO}	$lq^{1\downarrow}$	q^{2-}	q^{1+}	q^{2+}	μ
HYDROGEN	0	0	0	0	0.11	.	0.52	0.69	1.36	-16.11	4.76	0	—	0	0	0
OXYGEN	0	0	0	0	0.18	.	0.79	.	4.79	-10.73	-0.98	0	0	0	—	0
NITROGEN	0	0	0	0	0.22	.	0.82	1.04	7.7	-13.8	0.55	0	0	0	—	0
NITROUS OXYDE	0	0.1	0.07	0.35	0.28	.	0.39	.	12.95	-12.15	0.44	0.47	-0.42	0	—	0.11
CARBON MONOXIDE	0	0.04	0	0	0.22	.	0.81	.	8.08	-13.03	1	0.28	—	0	—	1.51
CARBON DIOXIDE	0	0.1	0.15	0.42	0.28	.	0.14	.	11.42	-12.73	1.04	0.34	-0.34	0	—	0
METHANE	0	0	0	0	0.25	1.09	1.14	1.33	7.58	-13.64	4.24	0.11	—	0	0.03	0
ETHANE	0	0	0	0	0.39	1.81	1.83	2.06	14.96	-11.98	3.89	0.11	-0.11	0	0.04	0
PROPANE	0	0	0	0	0.53	2.36	2.49	2.79	21.94	-11.51	3.71	0.11	-0.11	0.1	0.05	0.03
n-BUTANE	0	0	0	0	0.67	2.89	3.13	3.62	28.93	-11.35	3.56	0.11	-0.11	0.1	0.05	0
2-METHYLPROPANE	0	0	0	0	0.67	2.76	3.11	.	28.6	-11.59	3.61	0.11	-0.11	0.1	0.04	0.05
n-PENTANE	0	0	0	0	0.81	3.39	3.87	4.27	35.95	-11.3	3.45	0.11	-0.11	0.1	0.05	0.03
2-METHYLBUTANE	0	0	0	0	0.81	.	3.76	.	35.71	-11.44	3.51	0.12	-0.12	0.1	0.05	0.06
2,2-DIMETHYLPROPANE	0	0	0	0	0.81	3.11	3.66	.	35.05	-12.06	3.63	0.11	-0.11	0	0.04	0
n-HEXANE	0	0	0	0	0.95	3.9	4.49	.	42.98	-11.28	3.36	0.11	-0.11	0.1	0.05	0
2-METHYLPENTANE	0	0	0	0	0.95	.	4.34	.	42.8	-11.25	3.42	0.12	-0.11	0.1	0.06	0.08
3-METHYLPENTANE	0	0	0	0	0.95	3.6	4.42	.	42.73	-11.44	3.42	0.13	-0.12	0.1	0.05	0.07
2,2-DIMETHYLBUTANE	0	0	0	0	0.95	3.82	4.19	.	42.24	-11.48	3.51	0.13	-0.12	0.1	0.05	0.1
2,3-DIMETHYLBUTANE	0	0	0	0	0.95	3.85	4.22	.	42.61	-11.3	3.41	0.12	-0.12	0.1	0.06	0
n-HEPTANE	0	0	0	0	1.1	4.5	5.14	.	50.02	-11.27	3.3	0.11	-0.11	0.1	0.05	0.03
2-METHYLHEXANE	0	0	0	0	1.1	.	5.15	.	49.84	-11.19	3.35	0.12	-0.11	0.1	0.06	0.05
3-METHYLHEXANE	0	0	0	0	1.1	.	5.03	.	49.85	-11.24	3.34	0.12	-0.11	0.1	0.06	0.06
2,2-DIMETHYLPENTANE	0	0	0	0	1.1	.	4.91	.	49.42	-11.18	3.42	0.12	-0.12	0.1	0.06	0.11
2,3-DIMETHYLPENTANE	0	0	0	0	1.1	.	4.87	.	49.71	-11.22	3.34	0.12	-0.12	0.1	0.06	0.04
2,4-DIMETHYLPENTANE	0	0	0	0	1.1	.	4.89	.	49.66	-11.25	3.4	0.12	-0.12	0.1	0.07	0.12
3,3-DIMETHYLPENTANE	0	0	0	0	1.1	.	4.83	.	49.32	-11.48	3.4	0.13	-0.12	0.1	0.05	0.1
n-OCTANE	0	0	0	0	1.24	5.15	5.79	.	57.07	-11.28	3.25	0.11	-0.11	0.1	0.05	0
3-METHYLHEPTANE	0	0	0	0	1.24	.	5.69	.	56.9	-11.18	3.28	0.12	-0.11	0.1	0.06	0.04
2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	0	0	0	0	1.24	.	5.28	.	56.3	-11.24	3.34	0.12	-0.12	0.1	0.06	0.15

soluto	dados extraídos da literatura								dados extraídos dos cálculos							
	$\Sigma\alpha_2$	$\Sigma\beta_2$	R_2	π_2	V_x	$\log P_{oct}$	$\log P_{c16}$	$\log P_{c1c}$	Ao	E_{HOMO}	E_{LUMO}	lq^1	q^{2-}	q^{1+}	q^{2+}	μ
2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	0	0	0	0	1.24	.	5.36	.	56.7	-11.24	3.23	0.14	-0.13	0.1	0.06	0.09
n-NONANE	0	0	0	0	1.38	5.65	6.49	.	64.13	-11.28	3.21	0.11	-0.11	0.1	0.05	0.03
n-DECANE	0	0	0	0	1.52	.	7.01	.	71.2	-11.28	3.18	0.11	-0.11	0.1	0.05	0
n-UNDECANE	0	0	0	0	1.66	6.54	.	.	78.26	-11.27	3.16	0.11	-0.11	0.1	0.05	0.03
n-DODECANE	0	0	0	0	1.8	6.8	.	.	85.33	-11.27	3.14	0.11	-0.11	0.1	0.05	0
n-TRIDECANE	0	0	0	0	1.94	7.56	.	.	92.4	-11.27	3.12	0.11	-0.11	0.1	0.05	0.03
n-TETRADECANE	0	0	0	0	2.08	8	.	.	99.48	-11.27	3.11	0.11	-0.11	0.1	0.05	0
CYCLOPROPANE	0	0	0.18	0.15	0.42	1.72	1.86	.	20.85	-11.78	3.1	0.15	-0.15	0.1	0.08	0
CYCLOPENTANE	0	0	0.26	0.1	0.71	3	3.4	.	33.82	-11.08	3.51	0.1	-0.1	0.1	0.05	0.02
METHYLCYCLOPENTANE	0	0	0.23	0.1	0.85	3.37	3.99	.	40.76	-11.07	3.45	0.11	-0.1	0.1	0.05	0.04
CYCLOHEXANE	0	0	0.31	0.1	0.85	3.44	3.91	4.15	41.85	-11.29	3.48	0.1	-0.1	0.1	0.05	0
METHYLCYCLOHEXANE	0	0	0.24	0.1	0.99	3.61	4.49	.	48.62	-11.25	3.4	0.11	-0.1	0.1	0.05	0.04
cis-1,2-DIMETHYLCYCLOHEX	0	0	0.28	0.1	1.13	.	4.96	.	55.4	-11	3.43	0.13	-0.12	0.1	0.06	0.06
trans-1,4-DIMETHYLCYCLOHI	0	0	0.19	0.1	1.13	.	5.09	.	55.42	-11.19	3.35	0.11	-0.11	0.1	0.06	0
CYCLOOCTANE	0	0	0.41	0.1	1.13	4.45	.	.	55.39	-10.94	3.42	0.11	-0.11	0.1	0.06	0.07
ADAMANTENE	0	0.02	0.67	0.66	1.19	4.24	.	.	66.4	-10.85	3.57	0.09	-0.09	0.1	0.06	0
ETHENE	0	0.07	0.11	0.1	0.35	1.13	1.23	.	15	-10.64	1.23	0.15	-0.15	0.1	0.08	0
PROPENE	0	0.07	0.1	0.08	0.49	1.77	1.92	.	23.24	-10.1	1.18	0.17	-0.14	0.1	0.08	0.23
BUT-1-ENE	0	0.07	0.1	0.08	0.63	2.4	2.5	.	30.3	-10.15	1.18	0.17	-0.14	0.1	0.08	0.23
ISOBUTENE	0	0.07	0.1	0.08	0.63	2.34	.	.	30.72	-9.8	1.12	0.17	-0.11	0.1	0.08	0.34
PENT-1-ENE	0	0.07	0.09	0.08	0.77	2.8	3.28	.	37.52	-10.14	1.17	0.17	-0.14	0.1	0.08	0.22
cis-PENT-2-ENE	0	0.07	0.14	0.08	0.77	.	3.17	.	38.8	-9.71	1.13	0.15	-0.15	0.1	0.09	0.25
3-METHYLBUT-1-ENE	0	0.07	0.06	0.08	0.77	.	3.25	.	37.06	-10.26	1.17	0.16	-0.14	0.1	0.08	0.17
2-METHYLBUT-2-ENE	0	0.07	0.16	0.08	0.77	2.67	3.22	.	38.56	-9.39	1.07	0.16	-0.13	0.1	0.05	0.21
HEX-1-ENE	0	0.07	0.08	0.08	0.91	3.39	3.73	.	44.67	-10.15	1.16	0.17	-0.14	0.1	0.08	0.23
2-METHYLPENT-1-ENE	0	0.07	0.09	0.08	0.91	.	3.62	.	45	-9.83	1.12	0.17	-0.11	0.1	0.08	0.38
HEPT-1-ENE	0	0.07	0.09	0.08	1.05	3.99	4.28	.	51.79	-10.15	1.16	0.17	-0.14	0.1	0.08	0.23
OCT-1-ENE	0	0.07	0.09	0.08	1.19	4.57	4.98	.	58.88	-10.15	1.16	0.17	-0.14	0.1	0.08	0.23
NON-1-ENE	0	0.07	0.09	0.08	1.33	5.15	5.58	.	65.97	-10.15	1.16	0.17	-0.14	0.1	0.08	0.23
CYCLOHEXENE	0	0.1	0.4	0.2	0.8	2.86	3.29	.	43.66	-9.59	1.17	0.15	-0.15	0.1	0.1	0.24
1-METHYLCYCLOHEXANE	0	0.1	0.39	0.2	0.94	.	3.97	.	51.62	-9.33	1.12	0.15	-0.13	0.1	0.05	0.2
BUTA-1,3-DIENE	0	0.1	0.32	0.23	0.59	1.99	1.99	.	35.25	-9.47	0.26	0.15	-0.15	0.1	0.1	0

soluto	dados extraídos da literatura										dados extraídos dos cálculos						
	$\Sigma\alpha_2$	$\Sigma\beta_2$	R_2	π_2	Vx	$\log P_{oct}$	$\log P_{c16}$	$\log P_{c16}$	$\log P_{c16}$	Ao	E_{HOMO}	E_{LUMO}	lq^{1*}	q^{2-}	q^{1+}	q^{2+}	μ
2-METHYLBUTA-1,3-DIENE	0	0.1	0.31	0.23	0.73	.	2.6	.	.	41.67	-9.35	0.31	0.16	-0.16	0.1	0.09	0.23
2,3-DIMETHYLBUTA-1,3-DIENE	0	0.14	0.35	0.23	0.87	.	2.98	.	.	46.31	-9.65	0.83	0.16	-0.16	0.1	0.09	0.3
PENTA-1,4-DIENE	0	0.1	0.19	0.2	0.73	2.48	.	.	.	39.06	-10.05	1.03	0.17	-0.17	0.1	0.1	0.2
HEXA-1,4-DIENE	0	0.1	0.24	0.2	0.87	3.16	.	.	.	48.08	-9.71	1.01	0.17	-0.15	0.1	0.1	0.26
HEXA-1,5-DIENE	0	0.1	0.19	0.2	0.87	2.87	.	.	.	46.37	-10.1	1.05	0.16	-0.16	0.1	0.1	0.14
CYCLOOCTA-1,5-DIENE	0	0.2	0.6	0.36	1.04	3.16	.	.	.	56.7	-9.65	0.89	0.15	-0.15	0.1	0.09	0
CYCLOHEPTA-1,3,5-TRIENE	0	0.2	0.76	0.46	0.86	2.63	2.72	.	.	53.58	-8.95	0.04	0.12	-0.12	0.1	0.1	0.21
CYCLOHEXA-1,3-DIENE	0	0.14	0.52	0.3	0.76	2.47	.	.	.	45.37	-8.91	0.3	0.14	-0.14	0.1	0.1	0.39
CYCLOHEXA-1,4-DIENE	0	0.17	0.5	0.35	0.76	2.3	.	.	.	44.68	-9.19	1.08	0.15	-0.15	0.1	0.1	0
ETHYNE	0.21	0.15	0.19	0.25	0.3	0.37	.	.	.	11.77	-11.61	2.01	0.19	-0.19	0.2	0.19	0
PROPYNE	0.12	0.15	0.18	0.25	0.45	0.94	0.68	.	.	20.96	-10.89	1.92	0.19	-0.19	0.2	0.05	0.51
BUT-1-YNE	0.12	0.15	0.18	0.23	0.59	1.46	1.4	.	.	28.19	-10.77	1.91	0.19	-0.19	0.2	0.06	0.52
BUT-2-YNE	0	0.15	0.26	0.3	0.59	1.46	.	.	.	30.86	-10.35	1.83	0.18	-0.18	0.1	0.05	0
PENT-1-YNE	0.12	0.12	0.17	0.23	0.73	.	2.02	.	.	35.6	-10.76	1.89	0.19	-0.18	0.2	0.06	0.53
HEX-1-YNE	0.12	0.1	0.17	0.23	0.87	2.73	2.72	.	.	42.74	-10.76	1.88	0.19	-0.18	0.2	0.06	0.55
HEPT-1-YNE	0.12	0.1	0.16	0.23	1.01	3.32	3.44	.	.	49.89	-10.76	1.88	0.19	-0.18	0.2	0.06	0.55
OCT-1-YNE	0.12	0.1	0.16	0.23	1.15	3.92	4.04	.	.	57.04	-10.76	1.88	0.19	-0.18	0.2	0.06	0.56
NON-1-YNE	0.12	0.1	0.15	0.23	1.29	4.51	.	.	.	64.16	-10.77	1.87	0.19	-0.19	0.2	0.06	0.55
FLUOROMETHANE	0	0.1	0.07	0.35	0.27	0.51	.	.	.	7.92	-12.92	2.95	0.19	—	0	0.03	1.38
TETRAFLUOROMETHANE	0	0	-0.28	-0.2	0.32	1.18	1.49	.	.	8.02	-16.79	0.51	0.14	-0.14	—	—	0
1-FLUOROBUTANE	0	0.1	0.02	0.35	0.69	2	.	.	.	29.24	-11.65	2.74	0.19	-0.14	0.1	0.06	1.62
1-FLUOROPENTANE	0	0.1	0	0.35	0.83	2.33	.	.	.	36.26	-11.56	2.72	0.19	-0.13	0.1	0.06	1.62
CHLOROMETANE	0	0.08	0.25	0.43	0.37	0.91	0.76	.	.	14.02	-10.48	1.33	0.18	—	0.1	0.05	1.76
DICHLOROMETHANE	0.1	0.05	0.39	0.57	0.49	1.25	1.06	.	.	22.36	-10.58	0.52	0.14	-0.14	0.1	0.08	1.83
CHLOROFORM	0.15	0.02	0.43	0.49	0.62	1.97	1.69	1.74	.	32.19	-10.84	-0.12	0.1	-0.1	0.1	—	1.46
TETRACHLOROMETHANE	0	0	0.46	0.38	0.74	2.83	2.88	.	.	42.77	-10.99	-0.63	0.06	-0.06	—	—	0
CHLOROETHANE	0	0.1	0.23	0.4	0.51	1.43	1.22	.	.	22.24	-10.41	1.24	0.19	-0.13	0.1	0.06	1.97
1,1-DICHLOROETHANE	0.1	0.1	0.32	0.49	0.64	1.79	1.7	.	.	30.76	-10.58	0.53	0.15	-0.15	0.1	0.07	2.15
1,2-DICHLOROETHANE	0.1	0.11	0.42	0.64	0.64	1.48	1.26	.	.	30.37	-10.68	0.54	0.16	-0.16	0.1	0.08	0
1,1,1-TRICHLOROETHANE	0	0.09	0.37	0.41	0.76	2.49	2.59	.	.	40.12	-10.75	-0.07	0.15	-0.1	0.1	0.08	1.9
1,1,2-TRICHLOROETHANE	0.13	0.13	0.5	0.68	0.76	1.89	1.83	.	.	38.56	-10.69	0.18	0.14	-0.13	0.1	0.09	1.45
1,1,2,2-TETRACHLOROETHANE	0.16	0.12	0.6	0.76	0.88	2.39	1.99	.	.	47.17	-10.7	-0.1	0.1	-0.1	0.1	0.12	0

soluto	dados extraídos da literatura										dados extraídos dos cálculos						
	$\Sigma\alpha_2$	$\Sigma\beta_2$	R_2	π_2	Vx	$\log P_{oct}$	$\log P_{c16}$	$\log P_{c16}$	$\log P_{c16}$	Ao	E_{HOMO}	E_{LUMO}	$lq^{1\cdot}$	q^{2-}	q^{1+}	q^{2+}	μ
1,1,1,2-TETRACHLOROETHA	0.1	0.08	0.54	0.63	0.88	2.66	2.7	•	•	47.38	-10.73	-0.23	0.12	-0.09	0.1	0.1	1.75
PENTACHLOROETHANE	0.17	0.06	0.65	0.66	1	3.22	3.25	•	•	55.72	-10.77	-0.37	0.09	-0.09	0.1	—	1.33
HEXACHLOROETHANE	0	0.06	0.68	0.22	1.13	4.14	•	•	•	64.74	-10.84	-0.56	0.05	-0.05	—	—	0
1-CHLOROPROPANE	0	0.1	0.22	0.4	0.65	2.04	1.96	•	•	29.3	-10.41	1.24	0.19	-0.12	0.1	0.06	1.98
2-CHLOROPROPANE	0	0.12	0.18	0.35	0.65	1.9	1.79	•	•	29.81	-10.42	1.17	0.2	-0.13	0.1	0.06	2.11
1,2-DICHLOROPROPANE	0.1	0.11	0.37	0.6	0.78	2.02	1.93	•	•	37.73	-10.65	0.53	0.18	-0.16	0.1	0.08	0.46
1,3-DICHLOROPROPANE	0	0.17	0.41	0.74	0.78	2	1.71	•	•	36.99	-9.98	1.21	0.17	-0.17	0.1	0.07	3.5
1-CHLOROBUTANE	0	0.1	0.21	0.4	0.8	2.64	2.6	•	•	36.46	-10.41	1.23	0.19	-0.12	0.1	0.07	2.02
1-CHLORO-2-METHYLPROPA	0	0.12	0.19	0.37	0.8	2.39	•	•	•	35.81	-10.37	1.26	0.19	-0.12	0.1	0.07	1.92
2-CHLOROBUTANE	0	0.12	0.19	0.35	0.8	2.52	2.54	•	•	36.56	-10.39	1.19	0.2	-0.13	0.1	0.07	2.06
2-CHLORO-2-METHYLPROPA	0	0.12	0.14	0.25	0.8	2.39	3.02	•	•	36.81	-10.41	1.12	0.2	-0.13	0.1	0.06	2.18
1,4-DICHLOROBUTANE	0	0.17	0.41	0.95	0.92	2.24	2.08	•	•	44.28	-10.53	0.97	0.18	-0.18	0.1	0.07	0
1-CHLOROPENTANE	0	0.1	0.21	0.4	0.94	3.11	3.17	•	•	43.58	-10.41	1.23	0.19	-0.12	0.1	0.07	2.02
1-CHLOROHXANE	0	0.1	0.2	0.4	1.08	3.66	3.78	•	•	50.67	-10.42	1.23	0.19	-0.12	0.1	0.07	2.05
1-CHLOROOCANE	0	0.1	0.19	0.4	1.36	4.73	•	•	•	64.84	-10.42	1.22	0.19	-0.12	0.1	0.07	2.06
CHLOROETHENE	0	0.05	0.26	0.38	0.47	1.52	•	•	•	22.96	-9.84	0.7	0.16	-0.1	0.1	0.1	1.44
1,1-DICHLOROETHENE	0	0.05	0.36	0.34	0.59	2.13	2.29	•	•	31.9	-9.74	0.33	0.14	-0.05	0.1	0.11	1.43
cis-1,2-DICHLOROETHENE	0.11	0.05	0.44	0.61	0.59	1.86	1.58	•	•	31.43	-9.49	0.29	0.06	-0.06	0.1	0.13	2
trans-1,2-DICHLOROETHENE	0.09	0.05	0.43	0.41	0.59	2.09	1.71	•	•	32.73	-9.52	0.26	0.07	-0.07	0.1	0.13	0
TRICHLOROETHENE	0.08	0.03	0.52	0.37	0.72	2.42	2.68	2.86	•	42.04	-9.38	-0.04	0.06	-0.04	0.1	—	1.07
TETRACHLOROETHENE	0	0	0.64	0.44	0.84	3.4	3.65	•	•	52.78	-9.22	-0.32	0	0	—	—	0
1-CHLOROPROP-2-ENE	0	0.05	0.33	0.56	0.61	•	1.69	•	•	31.54	-10.31	0.53	0.18	-0.17	0.1	0.08	1.96
BROMOMETHANE	0	0.1	0.4	0.43	0.43	1.19	1.03	•	•	17.06	-11.01	-0.14	0.15	-0.02	0.1	0.06	1.66
DIBROMOMETHANE	0.1	0.1	0.71	0.67	0.6	•	1.45	•	•	27.95	-10.59	-0.7	0.08	-0.08	0.1	0.09	1.55
TRIBROMOMETHANE	0.15	0.06	0.97	0.68	0.78	2.67	2.22	•	•	39.96	-10.84	-1.17	0.07	-0.02	0.1	—	1.05
BROMOETHANE	0	0.12	0.37	0.4	0.57	1.61	1.58	•	•	25.98	-10.91	-0.15	0.18	-0.14	0.1	0.07	2.01
1,2-DIBROMOETHANE	0.1	0.17	0.75	0.76	0.74	1.74	1.67	•	•	40.18	-11.22	-1.08	0.14	-0.14	0.1	0.09	0
1-BROMOPROPANE	0	0.12	0.37	0.4	0.71	2.1	2.21	•	•	32.92	-10.93	-0.15	0.17	-0.12	0.1	0.07	1.99
2-BROMOPROPANE	0	0.14	0.33	0.35	0.71	2.1	2.04	•	•	33.97	-10.86	-0.15	0.2	-0.14	0.1	0.06	2.23
1-BROMOBUTANE	0	0.12	0.36	0.4	0.85	2.75	2.82	•	•	40.17	-10.93	-0.16	0.17	-0.13	0.1	0.07	2.03
1-BROMO-2-METHYLPROPAN	0	0.12	0.34	0.37	0.85	2.53	2.94	•	•	39.36	-10.86	-0.13	0.17	-0.12	0.1	0.07	1.92
2-BROMO-2-METHYLPROPAN	0	0.12	0.31	0.25	0.85	2.53	3.24	•	•	41.18	-10.8	-0.14	0.21	-0.13	0.1	0.06	2.36

soluto	dados extraídos da literatura							dados extraídos dos cálculos								
	$\Sigma\alpha_2$	$\Sigma\beta_2$	R_2	π_2	V_x	$\log P_{oct}$	$\log P_{c16}$	$\log P_{c1c}$	Ao	E_{HOMO}	E_{LUMO}	$lq^{1'}$	q^{2-}	q^{1+}	q^{2+}	μ
1-BROMOPENTANE	0	0.12	0.36	0.4	0.99	3.37	3.54	•	47.33	-10.93	-0.16	0.17	-0.13	0.1	0.07	2.03
1-BROMOHEXANE	0	0.12	0.35	0.4	1.13	3.8	4.26	•	54.44	-10.93	-0.16	0.17	-0.13	0.1	0.07	2.05
1-BROMOHEPTANE	0	0.12	0.34	0.4	1.27	4.36	4.91	•	61.56	-10.93	-0.16	0.17	-0.13	0.1	0.07	2.05
1-BROMOOCTANE	0	0.12	0.34	0.4	1.41	4.89	5.47	•	68.7	-10.93	-0.16	0.17	-0.13	0.1	0.07	2.07
1-BROMODECANE	0	0.12	0.33	0.4	1.69	6	•	•	82.83	-10.93	-0.16	0.17	-0.13	0.1	0.07	2.07
BROMOCYCLOHEXANE	0	0.16	0.62	0.54	1.02	3.2	•	•	54.28	-10.86	-0.11	0.19	-0.12	0.1	0.07	2.31
IODOMETHANE	0	0.13	0.68	0.43	0.51	1.51	1.46	•	19.95	-9.47	-0.43	0.13	-0.04	0.1	0.06	1.61
DIODOMETHANE	0.05	0.23	1.45	0.69	0.77	2.3	•	•	38.49	-8.98	-0.89	0.09	-0.09	0.1	0.09	1.7
IODOETHANE	0	0.15	0.64	0.4	0.65	2	2.03	•	29.61	-9.44	-0.44	0.16	-0.13	0.1	0.07	1.94
1-IODOPROPANE	0	0.15	0.63	0.4	0.79	2.54	2.74	•	36.62	-9.45	-0.45	0.15	-0.12	0.1	0.07	1.93
1-IODOBUTANE	0	0.15	0.63	0.4	0.93	3.08	3.45	•	43.98	-9.45	-0.45	0.15	-0.13	0.1	0.07	1.97
1-IODOPENTANE	0	0.15	0.62	0.4	1.07	3.62	4.03	•	51.22	-9.45	-0.45	0.15	-0.13	0.1	0.07	1.98
1-IODOHEXANE	0	0.15	0.62	0.4	1.21	4.16	4.68	•	58.36	-9.45	-0.45	0.15	-0.13	0.1	0.07	2
1-IODOHEPTANE	0	0.15	0.61	0.4	1.35	4.7	•	•	65.49	-9.45	-0.46	0.15	-0.13	0.1	0.07	2
BROMODICHLOROMETHANE	0.13	0.07	0.54	0.66	0.55	1.41	•	•	36.85	-10.68	-1.02	0.1	-0.07	0.1	—	1.45
HALOTHANE	0.15	0.05	0.1	0.38	0.74	2.3	2.1	•	34.6	-11.04	-1.42	0.15	-0.15	0.1	—	1.78
TEFLURANE	0.2	0.02	-0.07	0.21	0.64	2.01	1.74	•	27.17	-11.87	-1.61	0.14	-0.14	0.1	—	1.76
DIMETHYL ETHER	0	0.41	0	0.27	0.45	0.1	•	•	18.63	-10.69	3.2	0.36	—	0	0.04	1.22
DIETHYL ETHER	0	0.45	0.04	0.25	0.73	0.89	0.85	0.66	33.58	-10.48	2.86	0.36	-0.12	0.1	0.05	1.14
DH-n-PROPYL ETHER	0	0.45	0.08	0.25	1.01	2.03	2.1	•	47.8	-10.49	2.75	0.36	-0.11	0.1	0.06	1.06
DIISOPROPYL ETHER	0	0.41	0	0.19	1.01	•	2.09	•	47.26	-10.65	2.79	0.35	-0.15	0.1	0.05	1.27
DI-n-BUTYL ETHER	0	0.45	0	0.25	1.3	3.21	3.31	•	62.07	-10.49	2.7	0.36	-0.12	0.1	0.06	1.09
METHYL n-PROPYL ETHER	0	0.45	0.06	0.25	0.73	1.21	•	•	33.21	-10.58	2.94	0.36	-0.11	0.1	0.06	1.14
ETHYL n-BUTYL ETHER	0	0.45	0.01	0.25	1.01	2.03	•	•	47.78	-10.49	2.77	0.36	-0.12	0.1	0.06	1.12
1,2-PROPYLENE OXIDE	0	0.45	0.24	0.57	0.48	0.13	•	•	24.63	-11.28	2.34	0.36	-0.11	0.1	0.07	2.47
METHOXYFLURANE	0.07	0.14	0.11	0.67	0.87	2.21	2.04	•	41.53	-10.78	0.12	0.37	-0.17	0.1	0.06	0.83
ISOFLURANE	0.1	0.1	-0.24	0.5	0.8	2.06	1.65	•	35.66	-11.23	-0.17	0.36	-0.18	0.1	0.12	2.14
ENFLURANE	0.12	0.13	-0.23	0.4	0.8	2.1	•	•	36.21	-11.32	-0.34	0.42	-0.18	0.1	0.11	2.4
FLUROXENE	0	0.27	0.18	0.3	0.74	1.77	•	•	36.74	-10.08	0.75	0.27	-0.2	0.1	0.1	2.47
TETRAHYDROFURAN	0	0.48	0.29	0.52	0.62	0.46	0.09	•	30.42	-10.26	3.29	0.36	-0.12	0.1	0.06	1.65
2-METHYL TETRAHYDROFURAN	0	0.53	0.24	0.48	0.76	•	0.4	•	37.49	-10.39	3.2	0.36	-0.14	0.1	0.06	1.58
2,5-DIMETHYL TETRAHYDROFURAN	0	0.58	0.2	0.38	0.9	1.25	0.84	•	44.68	-10.41	3.05	0.36	-0.13	0.1	0.06	1.56

soluto	dados extraídos da literatura										dados extraídos dos cálculos					
	$\Sigma\alpha_2$	$\Sigma\beta_2$	R_2	π_2	V_x	$\log P_{oct}$	$\log P_{c16}$	$\log P_{c1c}$	Ao	E_{HOMO}	E_{LUMO}	$lq^{1'}$	q^{2-}	q^{1+}	q^{2+}	μ
TETRAHYDROPYRAN	0	0.55	0.28	0.47	0.76	0.95	0.77	.	38.58	-10.57	3.21	0.35	-0.13	0.1	0.06	1.34
1,4-DIOXANE	0	0.64	0.33	0.75	0.68	-0.27	-0.81	.	35.15	-10.45	2.84	0.35	-0.35	0.1	0.06	0
FORMALDEHYDE	0	0.33	0.22	0.7	0.27	.	-1.29	.	9.92	-10.63	0.83	0.4	—	0	0.01	2.41
ACETALDEHYDE	0	0.45	0.21	0.67	0.41	.	-1.34	.	17.52	-10.71	0.82	0.41	-0.2	0.1	0.06	2.7
PROPANAL	0	0.45	0.2	0.65	0.55	.	-0.71	.	24.65	-10.62	0.84	0.41	-0.18	0.1	0.07	2.72
BUTANAL	0	0.45	0.19	0.65	0.69	.	-0.06	.	31.77	-10.63	0.83	0.41	-0.19	0.1	0.08	2.77
ISOBUTANAL	0	0.45	0.14	0.62	0.69	.	0.02	.	31.45	-10.54	0.84	0.4	-0.16	0.1	0.05	2.66
PENTANAL	0	0.45	0.16	0.65	0.83	.	0.63	.	38.8	-10.64	0.83	0.41	-0.19	0.1	0.08	2.78
HEXANAL	0	0.45	0.15	0.65	0.97	.	1.3	.	45.94	-10.63	0.83	0.41	-0.19	0.1	0.08	2.8
HEPTANAL	0	0.45	0.14	0.65	1.11	.	1.91	.	53.01	-10.63	0.83	0.41	-0.19	0.1	0.08	2.81
OCTANAL	0	0.45	0.16	0.65	1.25	.	2.68	.	60.08	-10.63	0.83	0.41	-0.19	0.1	0.08	2.82
NONANAL	0	0.45	0.15	0.65	1.39	.	3.38	.	67.16	-10.64	0.82	0.41	-0.19	0.1	0.08	2.82
trans-2-BUT-2-EN-1-AL	0	0.5	0.39	0.8	0.65	.	-0.53	.	36.52	-10.49	-0.18	0.41	-0.26	0.1	0.09	3.4
PROPANONE	0.04	0.49	0.18	0.7	0.55	-0.24	-1.09	-0.96	24.53	-10.77	0.79	0.41	-0.17	0.1	0.07	2.92
BUTANONE	0	0.51	0.17	0.7	0.69	0.29	-0.43	-0.25	31.52	-10.65	0.81	0.4	-0.17	0.1	0.07	2.88
PENTAN-2-ONE	0	0.51	0.14	0.68	0.83	0.91	0.18	0.44	38.7	-10.67	0.82	0.41	-0.17	0.1	0.07	2.78
PENTAN-3-ONE	0	0.51	0.15	0.66	0.83	0.82	0.31	.	38.67	-10.54	0.84	0.4	-0.15	0.1	0.07	2.79
3-METHYLBUTAN-2-ONE	0	0.51	0.13	0.65	0.83	0.84	0.31	.	38.29	-10.56	0.84	0.4	-0.17	0.1	0.07	2.77
HEXAN-2-ONE	0	0.51	0.14	0.68	0.97	1.38	0.85	1.12	45.77	-10.68	0.82	0.4	-0.17	0.1	0.07	2.79
HEXAN-3-ONE	0	0.51	0.14	0.66	0.97	.	.	1.27	45.91	-10.56	0.85	0.4	-0.16	0.1	0.07	2.68
4-METHYLPENTAN-2-ONE	0	0.51	0.11	0.65	0.97	1.31	0.85	.	45.19	-10.65	0.81	0.41	-0.17	0.1	0.08	2.76
3,3-DIMETHYLBUTAN-2-ONE	0	0.51	0.11	0.62	0.97	1.2	.	.	45.03	-10.5	0.86	0.4	-0.18	0.1	0.07	2.86
HEPTAN-2-ONE	0	0.51	0.12	0.68	1.11	1.98	1.53	1.78	52.81	-10.68	0.82	0.4	-0.17	0.1	0.07	2.75
HEPTAN-4-ONE	0	0.51	0.11	0.66	1.11	2.04	1.57	.	52.83	-10.58	0.83	0.4	-0.16	0.1	0.08	2.85
5-METHYL-HEXAN-2-ONE	0	0.51	0.11	0.65	1.11	1.88	.	.	52.66	-10.66	0.83	0.41	-0.17	0.1	0.07	2.83
OCTAN-2-ONE	0	0.51	0.11	0.68	1.25	2.37	2.15	.	59.83	-10.68	0.81	0.4	-0.17	0.1	0.07	2.77
NONAN-2-ONE	0	0.51	0.12	0.68	1.39	3.14	2.91	.	66.97	-10.68	0.81	0.4	-0.17	0.1	0.07	2.74
NONAN-5-ONE	0	0.51	0.1	0.66	1.39	2.88	2.76	.	66.95	-10.58	0.82	0.4	-0.16	0.1	0.07	2.76
5-METHYLOCTAN-2-ONE	0	0.51	0.09	0.63	1.39	2.92	.	.	66.97	-10.66	0.83	0.41	-0.17	0.1	0.07	2.84
DI-tert-BUTYL KETONE	0	0.51	0.04	0.56	1.39	3	.	.	65.96	-10.28	0.92	0.4	-0.13	0.1	0.06	2.85
DECAN-2-ONE	0	0.51	0.11	0.68	1.53	3.73	3.53	.	74.05	-10.68	0.81	0.4	-0.17	0.1	0.07	2.77
UNDECAN-2-ONE	0	0.51	0.1	0.68	1.67	4.09	4.15	.	81.13	-10.68	0.81	0.4	-0.17	0.1	0.07	2.74

soluto	dados extraídos da literatura										dados extraídos dos cálculos						
	$\Sigma\alpha_2$	$\Sigma\beta_2$	R_2	π_2	Vx	$\log P_{oct}$	$\log P_{c16}$	$\log P_{c16}$	$\log P_{c16}$	Ao	E_{HOMO}	E_{LUMO}	lq^{1-}	q^{2-}	q^{1+}	q^{2+}	μ
CYCLOPENTANONE	0	0.52	0.37	0.86	0.72	0.38	-0.23	.	.	37.06	-10.6	0.84	0.41	-0.16	0.1	0.08	2.95
CYCLOHEXANONE	0	0.56	0.4	0.86	0.86	0.81	0.19	.	.	44.81	-10.48	0.85	0.41	-0.15	0.1	0.08	3.05
CYCLODODECANONE	0	0.56	0.59	0.86	1.71	4.1	.	.	.	87.73	-10.54	0.84	0.4	-0.17	0.1	0.08	3.14
HEX-5-EN-2-ONE	0	0.57	0.28	0.75	0.93	1.02	.	.	.	47.35	-10.37	0.71	0.4	-0.17	0.1	0.08	2.76
g-BUTYROLACTONE	0	0.45	0.37	1.74	0.64	-0.64	.	.	.	34.03	-11.17	1.05	0.41	-0.33	0.1	0.09	4.51
METHYL FORMATE	0	0.38	0.19	0.68	0.47	-0.26	-0.76	.	.	21.24	-11.35	1.04	0.46	-0.38	0.1	0.05	1.79
ETHYL FORMATE	0	0.38	0.15	0.66	0.61	0.27	-0.04	.	.	29.71	-11.16	1.09	0.43	-0.35	0.1	0.05	4.14
n-PROPYL FORMATE	0	0.38	0.13	0.63	0.75	0.83	0.61	.	.	36.93	-11.16	1.09	0.43	-0.35	0.1	0.07	4.13
ISOPROPYL FORMATE	0	0.4	0.09	0.6	0.75	.	0.75	.	.	36.3	-10.88	1.18	0.43	-0.35	0.1	0.08	4.3
ISOBUTYL FORMATE	0	0.4	0.1	0.6	0.89	.	1.16	.	.	43.37	-11.03	1.12	0.43	-0.35	0.1	0.08	4.2
ISOPENTYL FORMATE	0	0.4	0.09	0.6	1.03	.	1.75	.	.	51.16	-11.13	1.1	0.43	-0.35	0.1	0.07	4.2
METHYL ACETATE	0	0.45	0.14	0.64	0.61	0.18	-0.39	-0.19	-0.19	28.7	-11.27	1.01	0.46	-0.36	0.1	0.07	2.05
ETHYL ACETATE	0	0.45	0.11	0.62	0.75	0.73	0.15	0.34	0.34	36.44	-11.25	1.05	0.47	-0.37	0.1	0.07	2.09
n-PROPYL ACETATE	0	0.45	0.09	0.6	0.89	1.24	0.77	1.1	1.1	43.58	-11.25	1.05	0.47	-0.36	0.1	0.07	2.11
ISOPROPYL ACETATE	0	0.47	0.06	0.57	0.89	1.02	0.61	.	.	42.89	-10.82	1.13	0.47	-0.37	0.1	0.07	1.89
n-BUTYL ACETATE	0	0.45	0.07	0.6	1.03	1.78	1.41	1.75	1.75	50.76	-11.25	1.05	0.47	-0.36	0.1	0.07	2.1
ISOBUTYL ACETATE	0	0.47	0.05	0.57	1.03	1.78	1.43	.	.	50.34	-11.22	1.06	0.47	-0.36	0.1	0.07	2.17
n-PENTYL ACETATE	0	0.45	0.07	0.6	1.17	2.3	2	2.39	2.39	57.86	-11.25	1.05	0.47	-0.36	0.1	0.07	2.13
ISOPENTYL ACETATE	0	0.47	0.05	0.57	1.17	2.17	2.12	.	.	57.71	-11.14	1.05	0.47	-0.36	0.1	0.07	2.03
n-HEXYL ACETATE	0	0.45	0.06	0.6	1.31	2.83	2.69	.	.	64.97	-11.25	1.05	0.47	-0.36	0.1	0.07	2.1
VINYL ACETATE	0	0.43	0.22	0.64	0.7	0.73	.	.	.	37.46	-10.09	0.69	0.45	-0.33	0.1	0.11	2.12
ALLYL ACETATE	0	0.49	0.2	0.72	0.85	0.97	.	.	.	45	-10.31	0.88	0.47	-0.36	0.1	0.08	2.03
METHYL PROPANOATE	0	0.45	0.13	0.6	0.75	0.82	0.28	0.57	0.57	35.82	-11.15	1.04	0.46	-0.36	0.1	0.07	2.05
ETHYL PROPANOATE	0	0.45	0.09	0.58	0.89	1.21	0.84	.	.	43.56	-11.13	1.08	0.47	-0.36	0.1	0.07	2.09
n-PROPYL PROPANOATE	0	0.45	0.07	0.56	1.03	1.71	1.55	.	.	50.73	-11.14	1.07	0.47	-0.36	0.1	0.07	2.1
ISOPROPYL PROPANOATE	0	0.47	0.04	0.53	1.03	1.57	.	.	.	50.45	-11.07	1.11	0.47	-0.36	0.1	0.07	1.97
n-PENTYL PROPANOATE	0	0.45	0.05	0.56	1.31	2.67	2.78	.	.	65.01	-11.14	1.07	0.47	-0.36	0.1	0.07	2.11
METHYL BUTANOATE	0	0.45	0.11	0.6	0.89	1.29	0.81	.	.	42.97	-11.17	1.03	0.46	-0.36	0.1	0.08	2.06
ETHYL BUTANOATE	0	0.45	0.07	0.58	1.03	1.71	1.44	.	.	50.73	-11.16	1.07	0.47	-0.36	0.1	0.08	2.1
n-PROPYL BUTANOATE	0	0.45	0.05	0.56	1.17	2.15	2.11	.	.	57.91	-11.16	1.06	0.47	-0.36	0.1	0.08	2.11
METHYL PENTANOATE	0	0.45	0.11	0.6	1.03	1.96	1.51	1.81	1.81	50.05	-11.17	1.03	0.46	-0.36	0.1	0.08	2.08
ETHYL PENTANOATE	0	0.45	0.05	0.58	1.17	2.3	1.94	.	.	57.81	-11.15	1.07	0.47	-0.36	0.1	0.08	2.11

soluto	dados extraídos da literatura								dados extraídos dos cálculos							
	$\Sigma\alpha_2$	$\Sigma\beta_2$	R_2	π_2	Vx	$\log P_{oct}$	$\log P_{c16}$	$\log P_{c1c}$	Ao	E_{HOMO}	E_{LUMO}	lq^{1-}	q^{2-}	q^{1+}	q^{2+}	μ
n-BUTYL PENTANOATE	0	0.45	0.03	0.56	1.45	3.36	.	.	72.18	-11.16	1.06	0.47	-0.36	0.1	0.08	2.1
METHYL HEXANOATE	0	0.45	0.08	0.6	1.17	2.42	2.04	2.39	57.14	-11.17	1.02	0.46	-0.36	0.1	0.08	2.09
ETHYL HEXANOATE	0	0.45	0.04	0.58	1.31	.	2.61	.	64.91	-11.15	1.06	0.47	-0.36	0.1	0.08	2.1
METHYL NONANOATE	0	0.45	0.06	0.6	1.59	3.87	.	.	78.36	-11.17	1.02	0.46	-0.36	0.1	0.08	2.09
METHYL DECANOATE	0	0.45	0.05	0.6	1.73	4.41	.	.	85.44	-11.17	1.02	0.46	-0.36	0.1	0.08	2.09
ETHYL ISOBUTANOATE	0	0.47	0.03	0.55	1.03	1.55	.	.	50.49	-11.04	1.11	0.46	-0.36	0.1	0.06	2
ISOBUTYL ISOBUTANOATE	0	0.47	0	0.5	1.17	.	2.65	.	57.34	-10.99	1.13	0.47	-0.36	0.1	0.08	2.1
METHYL ACRYLATE	0	0.42	0.25	0.66	0.7	0.8	.	.	37.47	-11.07	0.05	0.46	-0.36	0.1	0.09	2.36
ETHYL ACRYLATE	0	0.42	0.21	0.64	0.85	1.32	.	.	45.47	-11.04	-0.08	0.47	-0.36	0.1	0.09	2.52
n-BUTYL ACRYLATE	0	0.42	0.18	0.62	1.13	2.36	.	.	59.4	-11.06	0.08	0.47	-0.36	0.1	0.09	2.4
ISOBUTYL ACRYLATE	0	0.42	0.16	0.59	1.13	2.22	.	.	59.01	-11.05	0.07	0.47	-0.36	0.1	0.09	2.47
METHYL METHACRYLATE	0	0.45	0.25	0.62	0.85	1.38	.	.	44.85	-10.56	0.41	0.46	-0.35	0.1	0.09	2.02
ETHYL METHACRYLATE	0	0.45	0.2	0.6	0.99	1.94	.	.	52.57	-10.54	0.43	0.46	-0.36	0.1	0.09	2.07
ISOPROPYL METHACRYLATE	0	0.45	0.14	0.57	1.13	2.25	.	.	59.48	-10.52	0.49	0.46	-0.35	0.1	0.09	1.95
n-BUTYL METHACRYLATE	0	0.45	0.17	0.6	1.27	2.88	.	.	66.91	-10.55	0.43	0.46	-0.35	0.1	0.09	2.08
ISOBUTYL METHACRYLATE	0	0.45	0.14	0.57	1.27	2.66	.	.	66.48	-10.54	0.4	0.46	-0.35	0.1	0.09	2.14
ACETONITRILE	0.07	0.32	0.24	0.9	0.4	-0.34	-1.11	-1.46	18.63	-12.33	1.4	0.34	—	0.1	0.07	3.89
PROPIONITRILE	0.02	0.36	0.16	0.9	0.55	0.16	-0.74	.	25.8	-12.01	1.42	0.34	-0.11	0.1	0.07	3.96
1-CYANOPROPANE	0	0.36	0.19	0.9	0.69	0.53	-0.12	.	33.1	-11.89	1.41	0.34	-0.11	0.1	0.07	4.02
2-CYANOPROPANE	0	0.36	0.14	0.87	0.69	0.46	.	.	32.69	-12.07	1.46	0.34	-0.12	0.1	0.05	4
1-CYANOBUTANE	0	0.36	0.18	0.9	0.83	1.12	0.53	.	40.22	-11.8	1.4	0.34	-0.11	0.1	0.07	4.07
1-CYANO-2-METHYLPROPAN	0	0.36	0.16	0.87	0.83	1.1	.	.	39.81	-11.99	1.42	0.34	-0.12	0.1	0.08	4.01
2-CYANOBUTANE	0	0.36	0.16	0.87	0.83	1.1	.	.	39.74	-12	1.47	0.34	-0.12	0.1	0.06	4.01
2-CYANO-2-METHYLPROPAN	0	0.36	0.14	0.84	0.83	1.08	.	.	39.36	-12.34	1.5	0.34	-0.12	0.1	0.05	4.03
1-CYANOPENTANE	0	0.36	0.17	0.9	0.97	1.66	.	.	47.33	-11.7	1.4	0.34	-0.11	0.1	0.07	4.08
METHYLAMINE	0.16	0.58	0.25	0.35	0.35	-0.57	-2.04	.	13.55	-9.4	3.11	0.66	-0.03	0.3	0.29	1.21
ETHYLAMINE	0.16	0.61	0.24	0.35	0.49	-0.13	-1.62	-1.8	20.68	-9.5	3.12	0.67	-0.14	0.3	0.29	1.14
n-PROPYLAMINE	0.16	0.61	0.23	0.35	0.63	0.48	-1.08	-0.98	27.71	-9.38	2.99	0.67	-0.11	0.3	0.29	1.11
ISOPROPYLAMINE	0.16	0.61	0.18	0.32	0.63	0.26	.	.	27.54	-9.38	2.98	0.67	-0.12	0.3	0.3	1.1
n-BUTYLAMINE	0.16	0.61	0.22	0.35	0.77	0.97	-0.49	-0.29	34.78	-9.49	3.05	0.67	-0.13	0.3	0.29	1.14
ISOBUTYLAMINE	0.16	0.63	0.2	0.32	0.77	0.73	.	.	34.44	-9.46	3.11	0.67	-0.11	0.3	0.29	1.17
sec-BUTYLAMINE	0.16	0.63	0.17	0.32	0.77	0.74	.	.	34.53	-9.45	3.08	0.68	-0.13	0.3	0.3	1.08

soluto	dados extraídos da literatura										dados extraídos dos cálculos					
	$\Sigma\alpha_2$	$\Sigma\beta_2$	R_2	π_2	Vx	$\log P_{oct}$	$\log P_{c16}$	$\log P_{c1c}$	Ao	E_{HOMO}	E_{LUMO}	lq^{1*}	q^{2-}	q^{1+}	q^{2+}	μ
t-BUTYLAMINE	0.16	0.71	0.12	0.29	0.77	0.4	.	.	34.05	-9.47	3.01	0.67	-0.14	0.3	0.3	1.01
n-PENTYLAMINE	0.16	0.61	0.21	0.35	0.91	1.49	0.14	.	41.84	-9.5	3.02	0.67	-0.13	0.3	0.29	1.16
n-HEXYLAMINE	0.16	0.61	0.2	0.35	1.05	2.06	0.76	.	48.88	-9.5	3	0.67	-0.13	0.3	0.29	1.14
n-HEPTYLAMINE	0.16	0.61	0.2	0.35	1.2	2.57	1.39	.	55.93	-9.5	2.99	0.67	-0.13	0.3	0.29	1.17
n-OCTYLAMINE	0.16	0.61	0.19	0.35	1.34	3.09	1.84	.	62.99	-9.5	2.98	0.67	-0.13	0.3	0.29	1.14
n-NONYLAMINE	0.16	0.61	0.19	0.35	1.48	3.6	.	.	70.06	-9.5	2.97	0.67	-0.13	0.3	0.29	1.17
ALLYLAMINE	0.16	0.58	0.35	0.49	0.59	0.03	.	.	29.06	-9.53	0.9	0.67	-0.18	0.3	0.29	1.08
CYCLOHEXYLAMINE	0.16	0.58	0.33	0.56	0.95	1.49	0.2	.	47.58	-9.45	3	0.67	-0.12	0.3	0.3	1.03
DIMETHYLAMINE	0.08	0.66	0.19	0.3	0.49	-0.38	-1.55	.	21.1	-9.22	2.91	0.51	-0.02	0.3	0.05	0.98
DIETHYLAMINE	0.08	0.69	0.15	0.3	0.77	0.58	-0.6	-0.34	35.64	-9.14	2.76	0.52	-0.11	0.3	0.05	0.89
Di-n-PROPYLAMINE	0.08	0.69	0.12	0.3	1.05	1.53	0.69	.	49.79	-9.16	2.69	0.52	-0.11	0.3	0.06	0.86
DIISOPROPYLAMINE	0.08	0.73	0.05	0.24	1.05	1.16	0.53	.	49.39	-9.17	2.69	0.52	-0.14	0.3	0.08	0.74
Di-n-BUTYLAMINE	0.08	0.69	0.11	0.3	1.34	2.83	1.97	.	63.98	-9.17	2.65	0.52	-0.11	0.3	0.06	0.84
TRIMETHYLAMINE	0	0.67	0.14	0.2	0.63	0.22	-0.73	-0.44	28.47	-9.07	2.73	0.35	0	0.1	0.05	0.56
TRIETHYLAMINE	0	0.79	0.1	0.15	1.05	1.45	0.72	1.1	50.4	-9.01	2.56	0.36	-0.12	0.1	0.06	0.43
NITROMETHANE	0.06	0.31	0.31	0.95	0.42	-0.35	-1.06	-0.93	19.99	-12.17	-0.02	0.52	-0.52	0.1	0.1	3.7
NITROETHANE	0.02	0.33	0.27	0.95	0.57	0.18	-0.31	.	27.18	-12.08	0.03	0.52	-0.52	0.1	0.1	3.83
1-NITROPROPANE	0	0.31	0.24	0.95	0.71	0.87	0.44	0.53	34.28	-12.09	0.03	0.52	-0.52	0.1	0.11	3.96
2-NITROPROPANE	0	0.33	0.22	0.92	0.71	0.55	0.25	.	34.2	-11.92	0.09	0.52	-0.51	0.1	0.07	3.96
1-NITROBUTANE	0	0.29	0.23	0.95	0.85	1.47	1.15	.	41.31	-12.05	0.03	0.52	-0.52	0.1	0.11	4.03
2-METHYL-2-NITROPROPANE	0	0.35	0.2	0.92	0.85	1.17	.	.	40.93	-11.81	0.16	0.51	-0.51	0.1	0.07	4.04
1-NITROPENTANE	0	0.29	0.21	0.95	0.99	2.01	1.87	.	48.38	-11.88	0.03	0.52	-0.52	0.1	0.11	4.06
FORMAMIDE	0.62	0.6	0.47	1.3	0.37	-1.51	-5.1	.	17.79	-10.15	1	0.67	-0.45	0.3	0.32	3.56
ACETAMIDE	0.54	0.68	0.46	1.3	0.51	-1.26	-4.68	-4.88	24.7	-10.09	0.95	0.65	-0.45	0.3	0.31	3.68
PROPIONAMIDE	0.55	0.68	0.44	1.3	0.65	.	.	-4.07	31.68	-10.07	0.98	0.65	-0.45	0.3	0.32	3.69
BUTANAMIDE	0.56	0.68	0.42	1.3	0.79	-0.21	-3.44	.	38.81	-10.07	0.97	0.65	-0.45	0.3	0.32	3.71
ISOBUTANAMIDE	0.57	0.66	0.4	1.27	0.79	.	-3.43	.	38.47	-10.02	1.01	0.64	-0.45	0.3	0.32	3.7
N-METHYLFORMAMIDE	0.4	0.55	0.41	1.3	0.51	-0.97	.	.	25.77	-9.79	1.02	0.53	-0.45	0.4	0.09	3.11
N-METHYLACETAMIDE	0.4	0.72	0.4	1.3	0.65	-1.05	.	.	32.36	-9.76	0.99	0.5	-0.44	0.3	0.07	3.72
N-BUTYLACETAMIDE	0.4	0.74	0.36	1.3	1.07	.	.	-1.9	54.15	-9.7	1.03	0.51	-0.45	0.3	0.08	3.69
N,N-DIMETHYLFORMAMIDE	0	0.74	0.37	1.31	0.65	-1.01	-2.35	-2.71	33.01	-9.56	1.04	0.44	-0.38	0.1	0.07	3.12
N,N-DIMETHYLACETAMIDE	0	0.78	0.36	1.33	0.79	-0.77	.	.	39.97	-9.51	0.97	0.44	-0.36	0.1	0.07	3.2

soluto	dados extraídos da literatura										dados extraídos dos cálculos					
	$\Sigma\alpha_2$	$\Sigma\beta_2$	R_2	π_2	Vx	$\log P_{oct}$	$\log P_{c16}$	$\log P_{ele}$	Ao	E _{HOMO}	E _{LUMO}	$\log I^1$	q^{2-}	q^{1+}	q^{2+}	μ
N,N-DIETHYLACETAMIDE	0	0.78	0.3	1.3	1.07	0.34	.	.	54.54	-9.47	1.08	0.45	-0.36	0.1	0.07	3.31
N,N-DIMETHYLPROPANAMIDE	0	0.78	0.34	1.3	0.93	-0.11	.	.	46.92	-9.47	1.01	0.44	-0.35	0.1	0.07	3.32
FORMIC ACID	0.75	0.38	0.3	0.6	0.32	-0.54	.	.	13.23	-11.56	0.97	0.53	-0.48	0.1	0.39	1.62
ACETIC ACID	0.61	0.44	0.27	0.65	0.47	-0.17	-3.16	-3.05	20.51	-11.44	0.93	0.52	-0.48	0.4	0.07	1.96
PROPANOIC ACID	0.6	0.45	0.23	0.65	0.61	0.33	-2.45	-2.4	27.54	-11.34	0.95	0.52	-0.48	0.4	0.08	1.97
BUTANOIC ACID	0.6	0.45	0.21	0.62	0.75	0.79	-1.83	-1.76	34.65	-11.36	0.95	0.52	-0.48	0.4	0.08	2
PENTANOIC ACID	0.6	0.45	0.21	0.6	0.89	1.39	-1.14	-1.1	41.97	-11.35	0.94	0.52	-0.48	0.4	0.08	2.01
3-METHYLBUTANOIC ACID	0.6	0.49	0.18	0.57	0.89	1.16	-1.33	.	41.33	-11.32	0.96	0.52	-0.48	0.4	0.08	2.06
HEXANOIC ACID	0.6	0.45	0.17	0.6	1.03	1.92	-0.64	.	48.78	-11.35	0.94	0.52	-0.48	0.4	0.08	2.03
2-METHYLPENTANOIC ACID	0.6	0.49	0.18	0.57	1.03	1.8	.	.	48.88	-11.22	0.98	0.52	-0.48	0.4	0.09	2.23
HEPTANOIC ACID	0.6	0.45	0.15	0.6	1.17	.	-0.06	.	55.85	-11.35	0.94	0.52	-0.48	0.4	0.08	2.04
2-ETHYLBUTANOIC ACID	0.6	0.5	0.18	0.57	1.03	1.68	.	.	48.31	-11.18	1.02	0.52	-0.49	0.4	0.09	2.13
OCTANOIC ACID	0.6	0.45	0.15	0.6	1.31	3.05	.	.	62.92	-11.35	0.94	0.52	-0.48	0.4	0.08	2.03
2-ETHYLHEXANOIC ACID	0.6	0.5	0.18	0.57	1.31	2.64	.	.	62.96	-11.13	0.99	0.52	-0.48	0.4	0.09	2.26
2-PROPYLPENTANOIC ACID	0.6	0.5	0.18	0.57	1.31	2.75	.	.	62.31	-11.19	1	0.51	-0.49	0.4	0.09	2.08
TETRADECANOIC ACID	0.6	0.45	0.06	0.6	2.16	6.1	.	.	105.4	-11.32	0.94	0.52	-0.48	0.4	0.08	2.04
CHLOROACETIC ACID	0.74	0.36	0.37	1.08	0.59	0.22	.	.	27.9	-10.8	0.2	0.51	-0.46	0.4	0.09	1.49
DICHLOROACETIC ACID	0.9	0.27	0.48	1.2	0.71	0.92	.	.	36.86	-10.89	-0.11	0.49	-0.44	0.1	0.4	0.06
TRICHLOROACETIC ACID	0.95	0.28	0.59	1.33	0.83	1.33	.	.	46.21	-10.94	-0.46	0.49	-0.42	0.4	—	1.28
WATER	0.82	0.35	0	0.45	0.17	.	-4.38	.	3.38	-12.32	4.06	0.71	—	0.4	0.36	1.92
METHANOL	0.43	0.47	0.28	0.44	0.31	-0.74	-2.77	-2.49	10.94	-11.14	3.51	0.53	—	0.4	0.04	1.59
ETHANOL	0.37	0.48	0.25	0.42	0.45	-0.3	-2.19	-1.89	18.11	-11.13	3.36	0.53	-0.15	0.4	0.05	1.61
PROPAN-1-OL	0.37	0.48	0.24	0.42	0.59	0.25	-1.53	-1.49	25.22	-10.88	3.23	0.53	-0.12	0.4	0.06	1.52
PROPAN-2-OL	0.33	0.56	0.21	0.36	0.59	0.05	-1.72	.	25.03	-11.04	3.28	0.53	-0.16	0.4	0.05	1.58
BUTAN-1-OL	0.37	0.48	0.22	0.42	0.73	0.88	-0.86	-0.87	32.27	-10.89	3.16	0.53	-0.12	0.4	0.06	1.53
2-METHYLPROPAN-1-OL	0.37	0.48	0.22	0.39	0.73	0.76	-0.89	-0.85	31.82	-11.01	3.19	0.53	-0.11	0.4	0.06	1.59
BUTAN-2-OL	0.33	0.56	0.22	0.36	0.73	0.61	-1.05	-0.96	32.03	-10.92	3.19	0.53	-0.15	0.4	0.06	1.71
2-METHYLPROPAN-2-OL	0.31	0.6	0.18	0.3	0.73	0.35	-1.32	-1.15	31.57	-11.28	3.25	0.52	-0.15	0.4	0.05	1.55
1-PENTANOL	0.37	0.48	0.22	0.42	0.87	1.56	-0.24	-0.26	39.31	-10.89	3.11	0.53	-0.12	0.4	0.06	1.5
2-PENTANOL	0.33	0.56	0.2	0.36	0.87	1.19	-0.38	-0.39	39.1	-10.94	3.11	0.53	-0.15	0.4	0.07	1.74
3-PENTANOL	0.33	0.56	0.22	0.36	0.87	1.21	-0.33	.	39.15	-10.92	3.13	0.53	-0.15	0.4	0.06	1.65
2-METHYLBUTAN-1-OL	0.37	0.48	0.22	0.39	0.87	1.16	-0.23	.	39.08	-10.88	3.2	0.53	-0.12	0.4	0.08	1.44

soluto	dados extraídos da literatura							dados extraídos dos cálculos								
	$\Sigma\alpha_2$	$\Sigma\beta_2$	R_2	π_2	Vx	$\log P_{oct}$	$\log P_{c16}$	$\log P_{c1c}$	Ao	E _{HOMO}	E _{LUMO}	lq^{1*}	q ²⁻	q ¹⁺	q ²⁺	μ
3-METHYLBUTAN-1-OL	0.37	0.48	0.19	0.39	0.87	1.16	-0.23	•	39.13	-10.78	3.15	0.53	-0.12	0.4	0.07	1.57
2-METHYLBUTAN-2-OL	0.31	0.6	0.19	0.3	0.87	0.89	-0.62	•	38.75	-11.21	3.21	0.52	-0.16	0.4	0.06	1.48
3-METHYLBUTAN-2-OL	0.33	0.56	0.19	0.33	0.87	1.28	•	•	38.77	-10.83	3.12	0.53	-0.13	0.4	0.07	1.67
2,2-DIMETHYLPROPAN-1-OL	0.37	0.53	0.22	0.36	0.87	1.36	•	•	38.51	-10.91	3.2	0.53	-0.11	0.4	0.05	1.43
HEXAN-1-OL	0.37	0.48	0.21	0.42	1.01	2.03	0.38	0.45	46.37	-10.89	3.08	0.53	-0.12	0.4	0.06	1.52
HEXAN-2-OL	0.33	0.56	0.19	0.36	1.01	1.76	•	0.23	46.13	-10.94	3.05	0.53	-0.15	0.4	0.07	1.76
HEXAN-3-OL	0.33	0.56	0.2	0.36	1.01	1.65	0.36	•	46.23	-10.92	3.09	0.53	-0.15	0.4	0.06	1.64
2-METHYLPENTAN-2-OL	0.31	0.6	0.17	0.3	1.01	1.53	0.2	•	45.84	-11.16	3.1	0.53	-0.16	0.4	0.07	1.73
4-METHYLPENTAN-2-OL	0.33	0.56	0.17	0.33	1.01	•	0.44	•	46.06	-10.9	3.19	0.53	-0.15	0.4	0.08	1.51
2-METHYLPENTAN-3-OL	0.33	0.56	0.21	0.33	1.01	•	0.39	•	46.09	-10.88	3.1	0.53	-0.16	0.4	0.07	1.65
2,3-DIMETHYLBUTAN-2-OL	0.31	0.6	0.21	0.27	1.01	1.48	•	•	45.7	-11.13	3.15	0.52	-0.16	0.4	0.06	1.44
HEPTAN-1-OL	0.37	0.48	0.21	0.42	1.15	2.72	1.03	1.12	53.42	-10.89	3.06	0.53	-0.12	0.4	0.06	1.49
HEPTAN-2-OL	0.33	0.56	0.19	0.36	1.15	2.31	•	0.9	53.21	-10.94	3.01	0.53	-0.15	0.4	0.07	1.77
HEPTAN-3-OL	0.33	0.56	0.18	0.36	1.15	2.24	•	•	53.3	-10.92	3.07	0.53	-0.15	0.4	0.07	1.64
HEPTAN-4-OL	0.33	0.56	0.18	0.36	1.15	2.44	•	•	53.31	-10.94	3.03	0.53	-0.15	0.4	0.07	1.67
OCTAN-1-OL	0.37	0.48	0.2	0.42	1.3	3.07	1.62	•	60.48	-10.89	3.05	0.53	-0.12	0.4	0.06	1.52
OCTAN-2-OL	0.33	0.56	0.16	0.36	1.3	2.9	•	•	60.32	-11.04	3.12	0.53	-0.15	0.4	0.07	1.51
OCTAN-4-OL	0.33	0.56	0.16	0.36	1.3	2.68	•	•	60.41	-10.94	3.01	0.53	-0.15	0.4	0.07	1.67
NONAN-1-OL	0.37	0.48	0.19	0.42	1.44	3.67	2.27	•	67.55	-10.89	3.03	0.53	-0.12	0.4	0.06	1.49
DECAN-1-OL	0.37	0.48	0.19	0.42	1.58	•	2.96	•	74.62	-10.89	3.02	0.53	-0.12	0.4	0.06	1.52
UNDECAN-1-OL	0.37	0.48	0.18	0.42	1.72	4.72	•	•	81.69	-10.9	3.02	0.53	-0.12	0.4	0.06	1.49
DODECAN-1-OL	0.37	0.48	0.18	0.42	1.86	5.13	•	•	88.76	-10.9	3.01	0.53	-0.12	0.4	0.06	1.52
TRIDECAN-1-OL	0.37	0.48	0.17	0.42	2	5.82	•	•	95.84	-10.9	3.01	0.53	-0.12	0.4	0.06	1.49
TETRADECAN-1-OL	0.37	0.48	0.16	0.42	2.14	6.36	•	•	102.9	-10.9	3	0.53	-0.12	0.4	0.06	1.51
CYCLOPENTANOL	0.32	0.56	0.43	0.54	0.76	0.71	-0.79	•	37.21	-10.95	3.26	0.53	-0.14	0.4	0.07	1.49
CYCLOHEXANOL	0.32	0.57	0.46	0.54	0.9	1.23	-0.25	•	45.08	-10.9	3.15	0.53	-0.14	0.4	0.06	1.57
CYCLOHEPTANOL	0.32	0.58	0.51	0.54	1.05	1.83	0.39	•	51.56	-11.07	3.19	0.53	-0.14	0.4	0.06	1.72
CYCLOOCTANOL	0.32	0.58	0.58	0.54	1.19	2.39	•	•	58.7	-10.83	3.16	0.53	-0.14	0.4	0.08	1.61
ADAMANTAN-1-OL	0.32	0.56	0.85	1.2	1.25	2.14	•	•	69.54	-10.69	3.16	0.52	-0.13	0.4	0.06	1.58
PROP-2-EN-1-OL	0.38	0.48	0.34	0.46	0.55	0.17	-1.74	•	28.39	-9.22	1.23	0.46	-0.22	0.4	0.12	1.74
2,2,2-TRIFLUOROETHANOL	0.57	0.25	0.02	0.6	0.5	0.41	-1.93	-2.04	19.09	-12.24	0.92	0.49	-0.17	0.4	0.09	2.22
HEXAFLUOROPROPAN-2-OL	0.77	0.1	-0.24	0.55	0.7	1.66	-1.37	-1.46	27.04	-12.94	-0.1	0.47	-0.16	0.1	0.39	3.19

soluto	dados extraídos da literatura							dados extraídos dos cálculos								
	$\Sigma\alpha_2$	$\Sigma\beta_2$	R_2	π_2	Vx	$\log P_{oct}$	$\log P_{c16}$	$\log P_{c16}$	Ao	E_{HOMO}	E_{LUMO}	lq^{1*}	q^{2-}	q^{1+}	q^{2+}	μ
2-CHLOROETHANOL	0.47	0.57	0.42	0.59	0.57	-0.06	.	.	25.26	-10.58	1.04	0.52	-0.17	0.4	0.08	1.69
2-METHOXYETHANOL	0.3	0.84	0.27	0.5	0.65	-0.77	.	.	29.35	-10.63	2.7	0.53	-0.36	0.4	0.04	0.37
2-ETHOXYETHANOL	0.3	0.83	0.24	0.5	0.79	-0.1	-2.03	.	36.83	-10.55	2.6	0.53	-0.36	0.4	0.05	0.4
METHYLTHIOL	0	0.24	0.4	0.35	0.41	0.65	.	0.93	18.13	-9.21	0.38	0.18	-0.11	0.1	0.07	1.23
ETHYLTHIOL	0	0.24	0.39	0.35	0.55	1.18	1.33	.	26.13	-9.19	0.34	0.19	-0.1	0.1	0.07	1.39
n-PROPYLTHIOL	0	0.24	0.39	0.35	0.7	1.81	1.91	1.52	33.2	-9.19	0.34	0.19	-0.11	0.1	0.07	1.38
n-BUTYLTHIOL	0	0.24	0.38	0.35	0.84	2.28	2.38	.	40.38	-9.19	0.33	0.19	-0.11	0.1	0.07	1.41
Dn-PROPYL SULFIDE	0	0.32	0.36	0.38	1.12	2.96	3.18	.	57.38	-8.86	0.35	0.21	-0.11	0.1	0.07	1.19
DIISOPROPYL SULFIDE	0	0.37	0.33	0.32	1.12	.	2.71	.	57.74	-8.93	0.33	0.23	-0.11	0.1	0.08	1.41
METHYL ETHYL SULFIDE	0	0.28	0.39	0.38	0.7	1.54	.	1.73	34.88	-8.87	0.41	0.2	-0.12	0.1	0.07	1.31
DIMETHYL SULFIDE	0	0.28	0.7	0.44	0.72	1.77	.	.	45.97	-9.4	-1.98	0.14	-0.14	0.1	0.09	1.66
DIETHYL SULFIDE	0	0.28	0.67	0.48	1	2.8	3.01	.	43.06	-8.86	0.36	0.22	-0.1	0.1	0.07	1.28
DIMETHYL SULFOXIDE	0	0.88	0.52	1.74	0.61	.	-3.97	.	35.54	-9.35	0.26	0.56	-0.24	0.1	0.09	4.53
DIMETHYL SULFONE	0	0.76	0.59	1.7	0.67	-1.41	.	.	36.04	-11.2	0.04	0.58	-0.58	0.1	0.11	4.32
CARBON DISULFIDE	0	0.07	0.88	0.21	0.49	1.94	.	.	36.47	-9.83	-1.62	0.02	-0.02	—	—	0
SULFUR HEXAFLUORIDE	0	0	-0.6	-0.2	0.46	1.68	2.11	.	16.43	-16.39	-1.93	0.29	-0.29	—	—	0
BENZENE	0	0.14	0.61	0.52	0.72	2.13	2.15	2.35	45.59	-9.75	0.4	0.1	-0.1	0.1	0.1	0
TOLUENE	0	0.14	0.6	0.52	0.86	2.73	2.68	2.99	54.06	-9.45	0.38	0.11	-0.1	0.1	0.1	0.26
ETHYLBENZENE	0	0.15	0.61	0.51	1	3.15	3.2	.	61.31	-9.3	0.39	0.1	-0.1	0.1	0.1	0.45
o-XYLENE	0	0.16	0.66	0.56	1	3.12	3.28	.	62.28	-9.3	0.39	0.1	-0.1	0.1	0.1	0.45
m-XYLENE	0	0.16	0.62	0.52	1	3.2	3.23	.	62.54	-9.31	0.39	0.11	-0.11	0.1	0.11	0.25
p-XYLENE	0	0.16	0.61	0.52	1	3.15	3.25	.	62.91	-9.18	0.36	0.1	-0.1	0.1	0.1	0.03
n-PROPYLBENZENE	0	0.15	0.6	0.5	1.14	3.72	3.84	.	68.83	-9.45	0.38	0.11	-0.11	0.1	0.1	0.29
ISOPROPYLBENZENE	0	0.16	0.6	0.49	1.14	3.66	3.86	.	67.99	-9.52	0.39	0.12	-0.11	0.1	0.11	0.25
1,2,3-TRIMETHYLBENZENE	0	0.19	0.73	0.61	1.14	3.66	3.68	.	70.63	-9.25	0.44	0.11	-0.11	0.1	0.1	0.55
1,2,4-TRIMETHYLBENZENE	0	0.19	0.68	0.56	1.14	3.56	3.81	.	71.09	-9.09	0.38	0.11	-0.1	0.1	0.1	0.26
1,3,5-TRIMETHYLBENZENE	0	0.19	0.65	0.52	1.14	3.59	3.68	.	71.01	-9.27	0.43	0.11	-0.11	0.1	0.11	0.02
2-ETHYLTOLUENE	0	0.18	0.68	0.55	1.14	3.53	3.59	.	69.37	-9.33	0.39	0.12	-0.11	0.1	0.1	0.48
4-ETHYLTOLUENE	0	0.18	0.63	0.51	1.14	3.63	3.59	.	70.23	-9.19	0.37	0.12	-0.11	0.1	0.1	0.08
n-BUTYLBENZENE	0	0.15	0.6	0.51	1.28	4.38	4.44	.	76	-9.45	0.38	0.11	-0.11	0.1	0.1	0.31
ISOBUTYLBENZENE	0	0.15	0.58	0.47	1.28	.	4.62	.	75.84	-9.48	0.37	0.12	-0.11	0.1	0.11	0.23
tert-BUTYLBENZENE	0	0.16	0.62	0.49	1.28	4.11	.	.	74.87	-9.5	0.4	0.12	-0.12	0.1	0.11	0.3

soluto	dados extraídos da literatura							dados extraídos dos cálculos								
	$\Sigma\alpha_2$	$\Sigma\beta_2$	R_2	π_2	Vx	$\log P_{oct}$	$\log P_{c16}$	$\log P_{c1c}$	Ao	E_{HOMO}	E_{LUMO}	$ q^1 ^1$	q^{2-}	q^{1+}	q^{2+}	μ
4-ISOPROPYL TOLUENE	0	0.19	0.61	0.49	1.28	4.1	.	.	76.95	-9.24	0.36	0.12	-0.11	0.1	0.1	0.05
1,2,3,4-TETRAMETHYLBENZENE	0	0.19	0.79	0.66	1.28	3.98	.	.	79.23	-9.02	0.43	0.1	-0.1	0.1	0.1	0.52
1,2,3,5-TETRAMETHYLBENZENE	0	0.19	0.75	0.61	1.28	4.04	.	.	79.39	-9.03	0.42	0.11	-0.11	0.1	0.11	0.3
1,2,4,5-TETRAMETHYLBENZENE	0	0.19	0.74	0.6	1.28	4	.	.	79.58	-8.96	0.38	0.1	-0.1	0.1	0.11	0
n-PENTYLBENZENE	0	0.15	0.59	0.51	1.42	4.9	5.06	.	83.18	-9.45	0.38	0.11	-0.11	0.1	0.11	0.3
PENTAMETHYLBENZENE	0	0.2	0.85	0.66	1.42	4.56	.	.	87.69	-8.92	0.43	0.11	-0.08	0.1	0.05	0.34
n-HEXYLBENZENE	0	0.15	0.59	0.5	1.56	5.52	5.69	.	90.36	-9.46	0.38	0.11	-0.11	0.1	0.11	0.31
n-OCTYLBENZENE	0	0.15	0.58	0.48	1.84	6.34	.	.	104.5	-9.46	0.37	0.11	-0.11	0.1	0.11	0.32
n-DECYLBENZENE	0	0.15	0.58	0.47	2.13	7.4	.	.	118.8	-9.46	0.37	0.11	-0.11	0.1	0.11	0.32
CYCLOPROPYLBENZENE	0	0.15	0.81	0.65	1.03	3.27	.	.	68.7	-9.42	0.33	0.16	-0.14	0.1	0.11	0.22
PHENYLETHYNE	0.12	0.24	0.68	0.58	0.91	2.53	.	.	66.18	-9.4	-0.08	0.17	-0.14	0.2	0.11	0.34
STYRENE	0	0.16	0.85	0.65	0.96	2.95	2.95	.	66.32	-9.13	-0.12	0.16	-0.1	0.1	0.1	0.02
α-METHYLSTYRENE	0	0.19	0.85	0.64	1.1	3.35	3.38	.	71.5	-9.38	0.2	0.16	-0.1	0.1	0.11	0.24
ALLYLBENZENE	0	0.22	0.72	0.6	1.1	3.23	.	.	68.63	-9.64	0.27	0.19	-0.18	0.2	0.11	0.45
DIPHENYLMETHANE	0	0.28	1.22	1.04	1.47	4.14	.	.	101.6	-9.52	0.25	0.11	-0.11	0.1	0.11	0.17
1,2-DIPHENYLETHANE	0	0.28	1.2	1.03	1.61	4.79	.	.	110.8	-9.46	0.27	0.11	-0.11	0.1	0.11	0.08
BIPHENYL	0	0.22	1.36	0.99	1.32	4.06	4.08	.	102	-8.92	-0.36	0.1	-0.1	0.1	0.11	0
4-METHYLBIPHENYL	0	0.23	1.38	0.98	1.47	4.63	.	.	112.4	-8.78	-0.35	0.1	-0.1	0.1	0.11	0.32
NAPHTHALENE	0	0.2	1.34	0.92	1.09	3.3	3.41	.	83.83	-8.84	-0.41	0.1	-0.1	0.1	0.1	0
1-METHYLNAPHTHALENE	0	0.2	1.34	0.9	1.23	3.87	4.05	.	92.49	-8.69	-0.4	0.11	-0.1	0.1	0.11	0.31
2-METHYLNAPHTHALENE	0	0.2	1.3	0.88	1.23	3.86	.	.	92.32	-8.71	-0.4	0.11	-0.1	0.1	0.11	0.28
1,2-DIMETHYLNAPHTHALENE	0	0.2	1.43	0.92	1.37	4.31	.	.	101.4	-8.62	-0.37	0.1	-0.1	0.1	0.11	0.5
1,3-DIMETHYLNAPHTHALENE	0	0.2	1.39	0.92	1.37	4.42	4.51	.	101.9	-8.63	-0.37	0.11	-0.1	0.1	0.11	0.36
1,4-DIMETHYLNAPHTHALENE	0	0.2	1.4	0.91	1.37	4.42	4.27	.	101.2	-8.59	-0.41	0.1	-0.1	0.1	0.11	0.02
1,5-DIMETHYLNAPHTHALENE	0	0.2	1.37	0.87	1.37	4.38	.	.	101	-8.61	-0.4	0.11	-0.11	0.1	0.11	0
1,7-DIMETHYLNAPHTHALENE	0	0.2	1.37	0.89	1.37	4.44	.	.	102	-8.62	-0.37	0.11	-0.1	0.1	0.11	0.48
1,8-DIMETHYLNAPHTHALENE	0	0.2	1.4	0.91	1.37	4.26	.	.	101.1	-8.53	-0.38	0.12	-0.12	0.1	0.11	0.61
2,3-DIMETHYLNAPHTHALENE	0	0.2	1.43	0.95	1.37	4.4	4.25	.	102.6	-8.69	-0.35	0.1	-0.1	0.1	0.11	0.57
2,6-DIMETHYLNAPHTHALENE	0	0.2	1.33	0.91	1.37	4.31	4.3	.	101	-8.59	-0.4	0.11	-0.11	0.1	0.11	0.04
1-ETHYLNAPHTHALENE	0	0.2	1.37	0.88	1.37	4.39	4.38	.	99.55	-8.73	-0.4	0.12	-0.11	0.1	0.11	0.31
2-ETHYLNAPHTHALENE	0	0.2	1.33	0.9	1.37	4.38	.	.	100.9	-8.75	-0.35	0.11	-0.11	0.1	0.1	0.39
2,3,6-TRIMETHYLNAPHTHALENE	0	0.21	1.43	0.86	1.51	5.1	.	.	112.5	-8.62	-0.32	0.1	-0.09	0.1	0.11	0.3

soluto	dados extraídos da literatura							dados extraídos dos cálculos								
	$\Sigma\alpha_2$	$\Sigma\beta_2$	R_2	π_2	Vx	$\log P_{oct}$	$\log P_{c16}$	$\log P_{c16}$	Ao	E_{HOMO}	E_{LUMO}	lq^{1-}	q^{2-}	q^{1+}	q^{2+}	μ
INDENE	0	0.2	1	0.77	0.99	2.92	.	.	71.41	-8.97	-0.08	0.15	-0.11	0.1	0.11	0.51
INDANE	0	0.17	0.83	0.62	1.03	3.18	3.52	.	67.86	-9.22	0.41	0.1	-0.1	0.1	0.11	0.47
ACENAPHTHENE	0	0.2	1.6	1.05	1.26	3.92	4.16	.	98.42	-8.59	-0.35	0.09	-0.09	0.1	0.11	0.59
FLUORENE	0	0.2	1.59	1.06	1.36	4.18	4.4	.	108.8	-8.84	-0.34	0.11	-0.11	0.1	0.11	0.36
1-METHYLFLUORENE	0	0.2	1.59	1.06	1.5	4.97	.	.	117.1	-8.81	-0.31	0.11	-0.1	0.1	0.11	0.61
AZULENE	0.15	0.16	1.34	1.17	1.09	3.2	.	.	94.85	-8.16	-1.02	0.17	-0.17	0.1	0.12	1.37
ANTHRACENE	0	0.26	2.29	1.34	1.45	4.45	.	.	131.4	-8.25	-0.97	0.1	-0.1	0.1	0.11	0
9-METHYLANTHRACENE	0	0.26	2.29	1.3	1.6	5.07	.	.	140.4	-8.13	-0.97	0.1	-0.1	0.1	0.11	0.36
9,10-DIMETHYLANTHRACENE	0	0.26	2.29	1.3	1.74	5.69	.	.	149.3	-8.02	-0.96	0.1	-0.1	0.1	0.11	0.05
PHENANTHRENE	0	0.26	2.06	1.29	1.45	4.46	4.74	.	123.6	-8.74	-0.54	0.1	-0.1	0.1	0.11	0.04
1-METHYLPHENANTHRENE	0	0.26	2.06	1.25	1.6	5.08	.	.	132.9	-8.64	-0.52	0.11	-0.11	0.1	0.11	0.3
2-METHYLPHENANTHRENE	0	0.26	2.06	1.25	1.6	5.24	.	.	133.8	-8.72	-0.5	0.1	-0.1	0.1	0.11	0.32
3-METHYLPHENANTHRENE	0	0.26	2.06	1.25	1.6	5.1	.	.	133.5	-8.64	-0.52	0.1	-0.1	0.1	0.11	0.34
FLUORANTHRENE	0	0.2	2.38	1.55	1.6	5.16	.	.	143.4	-8.73	-1.04	0.11	-0.11	0.1	0.11	0.2
BENZO[a]FLUORENE	0	0.2	2.62	1.59	1.73	5.68	.	.	151.8	-8.51	-0.66	0.11	-0.1	0.1	0.11	0.37
BENZO[b]FLUORENE	0	0.2	2.62	1.57	1.73	5.77	.	.	154	-8.58	-0.61	0.11	-0.1	0.1	0.11	0.35
PYRENE	0	0.29	2.81	1.71	1.59	4.88	.	.	145.2	-8.25	-1.01	0.1	-0.1	0.1	0.11	0.01
BENZ[a]ANTHRACENE	0	0.33	2.99	1.7	1.82	5.79	.	.	173.1	-8.33	-0.93	0.1	-0.1	0.1	0.11	0.04
NAPHTHACENE	0	0.33	2.85	1.7	1.82	5.76	.	.	187.1	-7.87	-1.35	0.1	-0.1	0.1	0.11	0
CHRYSENE	0	0.33	3.03	1.73	1.82	5.73	.	.	168.1	-8.5	-0.78	0.1	-0.1	0.1	0.11	0
PERYLENE	0	0.4	3.26	1.76	1.95	5.82	.	.	191.4	-7.99	-1.28	0.1	-0.1	0.1	0.11	0
3-METHYLCHOLANTHRENE	0	0.58	3.26	1.57	2.14	6.42	.	.	188.8	-8.16	-0.9	0.1	-0.1	0.1	0.11	0.61
DIBENZ[c]ANTHRACENE	0	0.44	4	1.93	2.19	7.19	.	.	210.8	-8.4	-0.91	0.1	-0.1	0.1	0.11	0.01
BENZO[a]PYRENE	0	0.44	3.63	1.98	1.95	5.97	.	.	198.3	-8.04	-1.22	0.1	-0.1	0.1	0.11	0.05
BENZO[ghi]PERYLENE	0	0.46	4.07	1.9	2.08	6.63	.	.	207.3	-8.14	-1.17	0.1	-0.1	0.1	0.11	0.04
p-TERPHENYL	0	0.3	2.04	1.48	1.93	6.03	.	.	167.7	-8.59	-0.69	0.1	-0.1	0.1	0.11	0
FLUOROBENZENE	0	0.1	0.48	0.57	0.73	2.27	.	.	46.95	-9.81	0.03	0.13	-0.13	0.1	0.12	1.62
BENZOTRIFLUORIDE	0	0.1	0.23	0.48	0.91	3.01	2.71	.	54.2	-10.34	-0.49	0.18	-0.17	0.1	0.12	3.15
CHLOROBENZENE	0	0.07	0.72	0.65	0.84	2.89	2.84	3.13	55.14	-9.39	0.06	0.1	-0.1	0.1	0.12	1.58
1,2-DICHLOROBENZENE	0	0.04	0.87	0.78	0.96	3.43	3.52	.	64.48	-9.29	-0.17	0.09	-0.09	0.1	0.12	2.46
1,3-DICHLOROBENZENE	0	0.02	0.85	0.73	0.96	3.53	3.69	.	65.45	-9.42	-0.19	0.1	-0.1	0.1	0.12	1.52
1,4-DICHLOROBENZENE	0	0.02	0.83	0.75	0.96	3.44	3.7	.	65.97	-9.23	-0.24	0.09	-0.09	0.1	0.12	0

soluto	dados extraídos da literatura							dados extraídos dos cálculos								
	$\Sigma\alpha_2$	$\Sigma\beta_2$	R_2	π_2	V_x	$\log P_{oct}$	$\log P_{c16}$	$\log P_{c1c}$	Ao	E_{HOMO}	E_{LUMO}	lq^{1+}	q^{2-}	q^{1+}	q^{2+}	μ
1,2,3-TRICHLOROBENZENE	0	0	1.03	0.86	1.08	4.05	4.13	.	74.5	-9.38	-0.33	0.09	-0.09	0.1	0.12	2.64
1,2,4-TRICHLOROBENZENE	0	0	0.98	0.81	1.08	4.02	4.43	.	76.05	-9.24	-0.43	0.09	-0.09	0.1	0.12	1.31
1,3,5-TRICHLOROBENZENE	0	0	0.98	0.73	1.08	4.19	4.48	.	76.5	-9.59	-0.38	0.1	-0.1	0.1	0.13	0
1,2,3,4-TETRACHLOROBENZ	0	0	1.18	0.92	1.21	4.64	.	.	85.66	-9.28	-0.56	0.08	-0.07	0.1	0.12	2.12
1,2,3,5-TETRACHLOROBENZ	0	0	1.16	0.85	1.21	4.65	4.73	.	86.71	-9.3	-0.59	0.09	-0.09	0.1	0.13	1.11
1,2,4,5-TETRACHLOROBENZ	0	0	1.16	0.86	1.21	4.6	4.95	.	87.23	-9.19	-0.64	0.07	-0.07	0.1	0.13	0
PENTACHLOROBENZENE	0	0	1.33	0.96	1.33	5.18	.	.	97.47	-9.25	-0.74	0.08	-0.03	0.1	—	1.09
HEXACHLOROBENZENE	0	0	1.49	0.99	1.45	5.37	.	.	108.7	-9.31	-0.83	0.01	-0.01	—	—	0
2-CHLOROTOLUENE	0	0.07	0.76	0.65	0.98	3.42	3.33	.	63.2	-9.29	0.09	0.1	-0.1	0.1	0.11	1.42
3-CHLOROTOLUENE	0	0.07	0.74	0.67	0.98	3.28	.	.	63.76	-9.32	0.09	0.11	-0.1	0.1	0.12	1.76
4-CHLOROTOLUENE	0	0.07	0.71	0.67	0.98	3.33	.	.	64.19	-9.19	0.05	0.09	-0.09	0.1	0.12	1.88
BENZYL CHLORIDE	0	0.33	0.82	0.82	0.98	2.3	.	.	63.09	-9.76	-0.06	0.18	-0.12	0.1	0.11	2.02
BROMOBENZENE	0	0.09	0.88	0.73	0.89	2.99	2.97	.	57.57	-9.81	-0.05	0.1	-0.09	0.1	0.12	1.42
1,2-DIBROMOBENZENE	0	0.04	1.19	0.96	1.07	3.64	.	.	67.66	-9.86	-0.45	0.09	-0.09	0.1	0.12	1.87
1,3-DIBROMOBENZENE	0	0.04	1.17	0.88	1.07	3.75	.	.	70.47	-9.94	-0.43	0.09	-0.08	0.1	0.12	1.29
1,4-DIBROMOBENZENE	0	0.04	1.15	0.86	1.07	3.79	.	.	71.02	-9.87	-0.32	0.08	-0.08	0.1	0.13	0
2-BROMOTOLUENE	0	0.09	0.92	0.72	1.03	3.5	.	.	65.56	-9.64	-0.02	0.1	-0.1	0.1	0.11	1.21
3-BROMOTOLUENE	0	0.09	0.9	0.75	1.03	3.5	.	.	66.42	-9.65	-0.02	0.1	-0.09	0.1	0.12	1.62
4-BROMOTOLUENE	0	0.09	0.88	0.74	1.03	3.5	3.57	.	66.6	-9.55	-0.01	0.1	-0.1	0.1	0.12	1.74
BENZYL BROMIDE	0	0.2	1.01	0.98	1.03	2.92	.	.	69.08	-9.72	-0.64	0.17	-0.12	0.1	0.11	2.14
IODOBENZENE	0	0.12	1.19	0.82	0.98	3.25	3.22	.	63.24	-9.04	-0.43	0.1	-0.1	0.1	0.12	1.54
METHYL PHENYL ETHER	0	0.29	0.71	0.75	0.92	2.11	2.09	2.19	59.58	-9.14	0.34	0.29	-0.18	0.1	0.12	1.08
ETHYL PHENYL ETHER	0	0.32	0.68	0.7	1.06	2.51	2.61	2.77	67.89	-9.08	0.36	0.29	-0.19	0.1	0.12	1.09
n-PROPYL PHENYL ETHER	0	0.32	0.68	0.7	1.2	3.18	.	.	75.29	-9.08	0.37	0.29	-0.19	0.1	0.12	1.02
2-METHYLANISOLE	0	0.3	0.73	0.75	1.06	2.74	.	.	66.96	-9.41	0.23	0.3	-0.11	0.1	0.11	1.38
3-METHYLANISOLE	0	0.3	0.71	0.78	1.06	2.66	.	.	67.99	-9.05	0.34	0.29	-0.19	0.1	0.12	1.33
4-METHYLANISOLE	0	0.3	0.7	0.77	1.06	2.66	.	.	68.79	-8.9	0.39	0.29	-0.18	0.1	0.12	1.03
2,6-DIMETHYLANISOLE	0	0.34	0.67	0.78	1.2	3.02	.	.	75.03	-9.36	0.28	0.3	-0.1	0.1	0.11	1.25
4-CHLOROANISOLE	0	0.24	0.84	0.86	1.04	2.78	.	.	70.13	-8.96	0.11	0.28	-0.17	0.1	0.12	1.93
DIPHENYL ETHER	0	0.2	1.22	1.08	1.38	4.21	.	.	104.7	-9.08	0.07	0.23	-0.15	0.1	0.12	1.17
1,3-DIMETHOXYBENZENE	0	0.45	0.82	1.01	1.12	2.21	.	.	74.14	-9.04	0.39	0.29	-0.29	0.1	0.12	1.79
1,4-DIMETHOXYBENZENE	0	0.5	0.81	1	1.12	2.03	.	.	74.61	-8.68	0.28	0.28	-0.28	0.1	0.12	1.95

soluto	dados extraídos da literatura							dados extraídos dos cálculos								
	$\Sigma\alpha_2$	$\Sigma\beta_2$	R_2	π_2	Vx	$\log P_{oct}$	$\log P_{c16}$	$\log P_{c1c}$	Ao	E_{HOMO}	E_{LUMO}	$lq^{1'}$	q^{2-}	q^{1+}	q^{2+}	μ
BENZALDEHYDE	0	0.39	0.82	1	0.87	1.48	1.06	1.13	58.34	-10.05	-0.48	0.41	-0.2	0.1	0.11	2.83
2-METHYLBENZALDEHYDE	0	0.4	0.87	0.96	1.01	2.09	.	1.86	66.86	-9.75	-0.45	0.41	-0.2	0.1	0.11	2.96
3-METHYLBENZALDEHYDE	0	0.42	0.84	0.97	1.01	.	.	1.8	66.83	-9.74	-0.44	0.41	-0.19	0.1	0.11	2.77
4-METHYLBENZALDEHYDE	0	0.42	0.86	1	1.01	.	.	1.68	67.67	-9.76	-0.47	0.41	-0.21	0.1	0.11	3.12
4-CHLOROBENZALDEHYDE	0	0.36	0.93	1.08	1	2.09	.	1.82	69.47	-9.66	-0.73	0.41	-0.2	0.1	0.12	1.98
ACETOPHENONE	0	0.48	0.82	1.01	1.01	1.58	1.14	1.27	65.17	-10.01	-0.36	0.41	-0.17	0.1	0.11	2.99
3-METHYLACETOPHENONE	0	0.49	0.81	1	1.16	.	1.72	.	72.93	-9.69	-0.08	0.4	-0.17	0.1	0.11	3.15
4-METHYLACETOPHENONE	0	0.51	0.84	1	1.16	2.1	1.63	.	73.54	-9.71	-0.35	0.41	-0.17	0.1	0.11	3.23
4-FLUOROACETOPHENONE	0	0.47	0.69	1.02	1.03	1.72	1.2	.	66.07	-10.04	-0.45	0.4	-0.17	0.1	0.13	2.45
3-CHLOROACETOPHENONE	0	0.4	0.92	1.07	1.14	2.51	2.01	.	74.36	-9.6	-0.34	0.39	-0.17	0.1	0.12	2.39
4-CHLOROACETOPHENONE	0	0.44	0.96	1.09	1.14	2.32	1.85	.	76.24	-9.62	-0.61	0.41	-0.17	0.1	0.12	2.37
ETHYL PHENYL KETONE	0	0.51	0.8	0.95	1.16	2.19	.	2.02	72.67	-10	-0.32	0.4	-0.16	0.1	0.11	2.89
BENZOPHENONE	0	0.5	1.45	1.5	1.48	3.18	.	3.29	105.6	-9.89	-0.28	0.39	-0.14	0.1	0.11	3.01
METHYL BENZOATE	0	0.46	0.73	0.85	1.07	2.12	1.56	2.08	69.98	-10.07	-0.35	0.46	-0.36	0.1	0.12	2.29
ETHYL BENZOATE	0	0.46	0.69	0.85	1.21	2.64	.	.	77.86	-10.06	-0.33	0.47	-0.36	0.1	0.12	2.28
n-PROPYL BENZOATE	0	0.46	0.68	0.8	1.35	3.17	.	.	85.16	-10.06	-0.33	0.47	-0.36	0.1	0.12	2.3
ISOPROPYL BENZOATE	0	0.48	0.66	0.76	1.35	3.18	.	.	84.85	-10.04	-0.29	0.47	-0.36	0.1	0.12	2.14
n-BUTYL BENZOATE	0	0.46	0.67	0.8	1.5	3.7	.	.	92.43	-10.06	-0.33	0.47	-0.36	0.1	0.12	2.28
PHENYL BENZOATE	0	0.47	1.33	1.42	1.54	3.59	.	.	114.5	-9.33	-0.45	0.45	-0.29	0.2	0.12	2.26
METHYL 2-METHYL BENZOATE	0	0.43	0.77	0.87	1.21	2.75	.	.	78.65	-9.74	-0.32	0.46	-0.35	0.1	0.11	2.09
PHENYL ACETATE	0	0.54	0.66	1.13	1.07	1.49	.	.	71.82	-9.69	-0.1	0.42	-0.28	0.1	0.12	4.46
2-METHYL PHENYL ACETATE	0	0.57	0.68	1.04	1.21	1.86	.	.	78.88	-9.21	0.2	0.45	-0.3	0.2	0.11	2.17
3-METHYL PHENYL ACETATE	0	0.57	0.66	1.13	1.21	1.95	.	.	78.82	-9.5	0.17	0.45	-0.32	0.1	0.12	1.73
4-METHYL PHENYL ACETATE	0	0.47	0.66	1.01	1.21	2.1	.	.	79.35	-9.38	0.13	0.45	-0.32	0.1	0.11	1.68
2-ETHYL PHENYL ACETATE	0	0.58	0.68	1.04	1.35	2.75	.	.	86.31	-9.18	0.21	0.45	-0.3	0.2	0.11	2.26
4-ETHYL PHENYL ACETATE	0	0.58	0.66	1	1.35	2.61	.	.	86.31	-9.45	0.13	0.45	-0.32	0.1	0.11	1.67
BENZYL ACETATE	0	0.65	0.8	1.06	1.21	1.83	.	.	78.06	-9.83	0.08	0.42	-0.33	0.1	0.11	4.39
METHYL PHENYL ACETATE	0	0.58	0.7	1.13	1.21	1.93	.	.	75.25	-9.74	0.08	0.46	-0.36	0.1	0.11	2.01
ETHYL PHENYL ACETATE	0	0.57	0.66	1.01	1.36	.	.	2.4	83.01	-9.73	0.09	0.47	-0.36	0.1	0.11	2.04
DIMETHYL PHTHALATE	0	0.88	0.78	1.41	1.43	1.56	.	.	91.57	-10.52	-0.66	0.45	-0.41	0.1	0.12	4.79
DIETHYL PHTHALATE	0	0.88	0.73	1.4	1.71	2.47	.	.	108.5	-10.32	-0.51	0.46	-0.46	0.1	0.12	2.67
BENZONITRILE	0	0.33	0.74	1.11	0.87	1.56	.	1.11	61.83	-10.1	-0.58	0.33	-0.1	0.1	0.12	4.36

soluto	dados extraídos da literatura										dados extraídos dos cálculos					
	$\Sigma\alpha_2$	$\Sigma\beta_2$	R_2	π_2	Vx	$\log P_{oct}$	$\log P_{c16}$	$\log P_{c16}$	Ao	E_{HOMO}	E_{LUMO}	lq^{1-}	q^{2-}	q^{1+}	q^{2+}	μ
2-METHYLBENZONITRILE	0	0.31	0.78	1.06	1.01	2.21	.	.	70.07	-9.89	-0.54	0.34	-0.11	0.1	0.11	4.21
3-FLUORONITROBENZENE	0	0.35	0.64	1.09	0.91	1.47	.	.	61.36	-10.64	-1.42	0.53	-0.53	0.2	0.14	4.35
PHENYLACETONITRILE	0	0.45	0.75	1.15	1.01	1.56	.	1.31	65.67	-9.99	-0.09	0.34	-0.1	0.1	0.11	4.07
ANILINE	0.26	0.41	0.96	0.96	0.82	.	.	0.05	55.86	-8.61	0.42	0.57	-0.15	0.3	0.3	1.46
o-TOLUIDINE	0.23	0.45	0.97	0.92	0.96	.	0.36	0.61	63.92	-8.54	0.41	0.57	-0.14	0.3	0.3	1.51
m-TOLUIDINE	0.23	0.45	0.95	0.95	0.96	.	.	0.58	64.28	-8.57	0.41	0.57	-0.15	0.3	0.3	1.36
p-TOLUIDINE	0.23	0.45	0.92	0.95	0.96	.	.	0.56	65.08	-8.47	0.4	0.57	-0.14	0.3	0.3	1.3
2,6-DIMETHYLANILINE	0.2	0.46	0.97	0.89	1.1	.	.	1.35	72.01	-8.48	0.43	0.58	-0.13	0.3	0.3	1.55
2-CHLOROANILINE	0.25	0.31	1.03	0.92	0.94	.	1.07	1.17	64.95	-8.67	0.13	0.56	-0.14	0.3	0.3	1.81
3-CHLOROANILINE	0.3	0.3	1.05	1.1	0.94	.	0.64	0.89	65.95	-8.76	0.12	0.57	-0.15	0.3	0.3	2.53
4-CHLOROANILINE	0.3	0.31	1.06	1.13	0.94	.	0.56	0.69	66.62	-8.58	0.1	0.57	-0.13	0.3	0.3	2.85
2-METHOXYANILINE	0.23	0.5	0.99	1	1.02	.	0.33	0.52	68.73	-8.58	0.28	0.57	-0.3	0.3	0.3	0.65
3-METHOXYANILINE	0.25	0.55	1.03	1.22	1.02	.	-0.33	-0.13	69.93	-8.56	0.39	0.57	-0.29	0.3	0.3	2.16
4-METHOXYANILINE	0.23	0.65	1.05	1.1	1.02	.	-0.54	-0.38	70.84	-8.32	0.36	0.57	-0.29	0.3	0.3	1.73
2-NITROANILINE	0.3	0.36	1.18	1.37	0.99	1.85	0.22	0.36	72.48	-9.16	-1	0.58	-0.57	0.4	0.32	4.65
3-NITROANILINE	0.4	0.35	1.2	1.71	0.99	1.37	.	-0.42	71.1	-9.29	-1.06	0.56	-0.54	0.3	0.3	5.78
4-NITROANILINE	0.42	0.38	1.22	1.91	0.99	1.39	.	-1	73.95	-9.42	-1.01	0.55	-0.54	0.3	0.31	6.82
N-METHYLANILINE	0.17	0.43	0.95	0.9	0.96	.	.	1.18	64.21	-8.53	0.43	0.42	-0.15	0.3	0.12	1.12
N,N-DIMETHYLANILINE	0	0.41	0.96	0.84	1.1	.	2.17	2.47	72.33	-8.44	0.45	0.27	-0.15	0.1	0.12	0.79
1-NAPHTHYLAMINE	0.2	0.57	1.67	1.26	1.19	2.25	.	1.26	94.53	-8.26	-0.38	0.57	-0.16	0.3	0.3	1.49
2-NAPHTHYLAMINE	0.22	0.55	1.67	1.28	1.19	2.28	.	1.21	96.36	-8.37	-0.36	0.57	-0.15	0.3	0.3	1.52
BENZYLAMINE	0.1	0.72	0.83	0.88	0.96	1.09	.	-0.12	59.69	-9.46	0.14	0.67	-0.13	0.3	0.3	1.2
N,N-DIMETHYLBENZYLAMINE	0	0.69	0.67	0.8	1.24	1.98	.	.	75.66	-9.09	0.35	0.35	-0.1	0.1	0.1	0.49
AZOBEZENE	0	0.44	1.68	1.2	1.48	3.82	.	.	126.2	-9.24	-0.81	0.13	-0.13	0.1	0.12	0
NITROBENZENE	0	0.28	0.87	1.11	0.89	1.85	1.54	1.69	59.92	-10.6	-1.13	0.53	-0.53	0.1	0.13	5.08
2-NITROTOLUENE	0	0.27	0.87	1.11	1.03	2.3	2.25	.	68.58	-10.28	-0.86	0.53	-0.53	0.1	0.12	4.67
3-NITROTOLUENE	0	0.25	0.87	1.1	1.03	2.42	.	.	68.57	-10.28	-1.09	0.53	-0.53	0.1	0.13	5.28
4-NITROTOLUENE	0	0.28	0.87	1.11	1.03	2.37	.	.	69.37	-10.47	-1.11	0.54	-0.54	0.1	0.13	5.57
1-CHLORO-4-NITROBENZENE	0	0.25	0.98	1.17	1.01	2.4	.	.	71.81	-10.22	-1.36	0.53	-0.53	0.1	0.14	3.73
BENZAMIDE	0.49	0.67	0.99	1.5	0.97	0.64	.	-1.92	65.25	-10.04	-0.41	0.64	-0.45	0.3	0.32	3.65
3-METHYLBENZAMIDE	0.49	0.63	0.99	1.5	1.11	1.18	.	.	73.83	-9.73	-0.37	0.5	-0.44	0.3	0.12	3.7
N-METHYLBENZAMIDE	0.35	0.73	0.95	1.44	1.11	0.86	.	.	72.65	-9.7	-0.12	0.5	-0.44	0.4	0.11	3.33

soluto	dados extraídos da literatura										dados extraídos dos cálculos					
	$\Sigma\alpha_2$	$\Sigma\beta_2$	R_2	π_2	Vx	$\log P_{oct}$	$\log P_{c16}$	$\log P_{c16}$	Ao	E_{HOMO}	lq^1l	q^{2-}	q^{1+}	q^{2+}	μ	
N,N-DIMETHYLBENZAMIDE	0	0.98	0.95	1.4	1.26	0.62	.	.	80.56	-9.48	0.43	-0.35	0.1	0.11	3.37	
N,N-DIETHYLBENZAMIDE	0	1.1	0.95	1.4	1.54	1.25	.	.	94.97	-9.43	0.44	-0.36	0.1	0.11	3.46	
FORMANILIDE	0.5	0.5	0.97	1.4	0.97	1.15	.	.	71.54	-8.98	0.44	-0.44	0.4	0.11	2.93	
4-METHYLFORMANILIDE	0.5	0.52	0.97	1.4	1.11	1.61	.	.	81.23	-8.83	0.44	-0.44	0.4	0.11	3.23	
ACETANILIDE	0.5	0.67	0.87	1.4	1.11	1.16	.	-1.31	75.35	-9.03	0.43	-0.43	0.3	0.13	3.43	
2-METHYLACETANILIDE	0.5	0.7	0.87	1.4	1.25	1.51	.	.	81.89	-9.23	0.44	-0.43	0.3	0.11	3.36	
3-METHYLACETANILIDE	0.5	0.66	0.87	1.4	1.25	1.68	.	.	85.5	-9.1	0.45	-0.43	0.4	0.12	3.39	
4-METHYLACETANILIDE	0.5	0.67	0.87	1.4	1.25	1.7	.	.	86.57	-8.99	0.45	-0.43	0.4	0.12	3.49	
BENZOIC ACID	0.59	0.4	0.73	0.9	0.93	1.87	.	-0.85	61.35	-10.13	0.52	-0.49	0.4	0.12	2.37	
2-METHYLBENZOIC ACID	0.6	0.34	0.73	0.9	1.07	2.46	.	.	68.69	-9.81	0.51	-0.48	0.4	0.11	2.1	
3-METHYLBENZOIC ACID	0.59	0.38	0.73	0.9	1.07	2.37	.	.	70.02	-9.82	0.52	-0.49	0.4	0.12	2.66	
4-METHYLBENZOIC ACID	0.6	0.38	0.73	0.9	1.07	2.27	.	.	70.76	-9.87	0.52	-0.49	0.4	0.12	2.72	
3-CHLOROBENZOIC ACID	0.65	0.3	0.84	0.95	1.05	2.68	.	.	71.31	-9.67	0.52	-0.48	0.4	0.14	2.8	
4-CHLOROBENZOIC ACID	0.63	0.27	0.84	0.97	1.05	2.65	.	.	72.62	-9.74	0.52	-0.49	0.4	0.13	1.36	
3-NITROBENZOIC ACID	0.7	0.56	0.99	1.41	1.11	1.83	.	.	75.28	-10.94	0.53	-0.53	0.4	0.15	5.44	
4-NITROBENZOIC ACID	0.68	0.51	0.99	1.43	1.11	1.89	.	.	75.99	-11.12	0.53	-0.52	0.4	0.14	2.23	
PHENOL	0.6	0.3	0.81	0.89	0.78	1.46	-1.08	-0.8	50.75	-9.17	0.29	-0.19	0.4	0.12	1.25	
o-CRESOL	0.52	0.3	0.84	0.86	0.92	1.98	-0.09	-0.04	59.19	-9.04	0.31	-0.19	0.4	0.11	0.97	
m-CRESOL	0.57	0.34	0.82	0.88	0.92	1.98	.	-0.34	59.2	-9.08	0.3	-0.2	0.4	0.12	1.52	
p-CRESOL	0.57	0.31	0.82	0.87	0.92	1.97	-0.19	-0.35	59.64	-8.95	0.33	-0.19	0.4	0.12	1.33	
2,3-DIMETHYLPHENOL	0.53	0.36	0.85	0.81	1.06	.	.	0.51	67.38	-8.99	0.29	-0.2	0.4	0.11	0.78	
2,4-DIMETHYLPHENOL	0.53	0.39	0.84	0.8	1.06	2.3	.	0.59	68.05	-8.85	0.35	-0.19	0.4	0.11	1.03	
2,5-DIMETHYLPHENOL	0.54	0.37	0.84	0.79	1.06	2.33	.	0.57	67.99	-8.91	0.3	-0.19	0.4	0.11	1.24	
2,6-DIMETHYLPHENOL	0.39	0.39	0.86	0.79	1.06	2.36	.	1	67.45	-8.96	0.3	-0.16	0.4	0.11	1.2	
3,4-DIMETHYLPHENOL	0.56	0.39	0.83	0.86	1.06	2.23	.	0.25	67.78	-8.89	0.31	-0.2	0.4	0.12	1.21	
3,5-DIMETHYLPHENOL	0.57	0.36	0.82	0.84	1.06	2.35	.	0.38	67.62	-9.04	0.3	-0.2	0.4	0.12	1.35	
2-ETHYLPHENOL	0.52	0.37	0.83	0.84	1.06	2.47	.	0.36	66.63	-9.01	0.33	-0.19	0.4	0.11	0.87	
3-ETHYLPHENOL	0.55	0.37	0.81	0.91	1.06	2.4	.	.	66.54	-9.1	0.29	-0.2	0.4	0.12	1.12	
4-ETHYLPHENOL	0.55	0.36	0.8	0.9	1.06	2.58	.	0.37	66.95	-8.95	0.34	-0.19	0.4	0.12	1.41	
2,3,5-TRIMETHYLPHENOL	0.52	0.42	0.86	0.84	1.2	.	.	0.97	76.14	-8.89	0.45	-0.2	0.4	0.11	1.05	
2,4,5-TRIMETHYLPHENOL	0.52	0.44	0.85	0.79	1.2	.	.	0.94	76.48	-8.75	0.45	-0.19	0.4	0.11	1.33	
2,4,6-TRIMETHYLPHENOL	0.37	0.44	0.86	0.79	1.2	2.97	.	.	76.28	-8.77	0.45	-0.16	0.4	0.11	1.22	

soluto	dados extraídos da literatura							dados extraídos dos cálculos								
	$\Sigma\alpha_2$	$\Sigma\beta_2$	R_2	π_2	Vx	$\log P_{oct}$	$\log P_{c16}$	$\log P_{c1c}$	Ao	E_{HOMO}	E_{LUMO}	lq^{1+}	q^{2-}	q^{1+}	q^{2+}	μ
2,3,6-TRIMETHYLPHENOL	0.37	0.47	0.87	0.81	1.2	2.67	.	.	76.02	-8.91	0.29	0.45	-0.17	0.4	0.11	0.95
3,4,5-TRIMETHYLPHENOL	0.55	0.44	0.83	0.88	1.2	.	.	0.63	76.01	-8.83	0.34	0.45	-0.2	0.4	0.12	1.49
2-PROPYLPHENOL	0.52	0.37	0.82	0.86	1.2	2.93	.	1.18	73.98	-9.01	0.33	0.45	-0.19	0.4	0.11	0.87
3-PROPYLPHENOL	0.55	0.37	0.79	0.9	1.2	.	.	0.83	74.06	-9.11	0.29	0.45	-0.2	0.4	0.12	1.14
4-PROPYLPHENOL	0.55	0.37	0.79	0.88	1.2	.	.	1.03	74.51	-8.96	0.33	0.45	-0.19	0.4	0.12	1.42
2-ISOPROPYLPHENOL	0.52	0.38	0.84	0.88	1.2	2.88	.	.	73.06	-9.08	0.3	0.45	-0.2	0.4	0.11	1.01
4-ISOPROPYLPHENOL	0.55	0.38	0.79	0.89	1.2	2.9	.	0.77	73.66	-9	0.34	0.45	-0.19	0.4	0.12	1.37
4-BUTYLPHENOL	0.55	0.37	0.8	0.88	1.34	3.56	.	1.48	81.7	-8.96	0.33	0.45	-0.19	0.4	0.12	1.42
2-sec-BUTYLPHENOL	0.52	0.41	0.82	0.91	1.34	3.27	.	.	80.16	-9.06	0.31	0.45	-0.2	0.4	0.11	0.98
2-tert-BUTYLPHENOL	0.52	0.4	0.82	0.92	1.34	3.31	.	.	80.07	-9.04	0.32	0.45	-0.2	0.4	0.11	0.95
4-tert-BUTYLPHENOL	0.56	0.41	0.81	0.89	1.34	3.31	.	.	80.62	-8.99	0.36	0.45	-0.19	0.4	0.12	1.35
2-ISOPROPYL-5-METHYLPHENOL	0.52	0.44	0.82	0.79	1.34	3.3	.	.	81.95	-8.96	0.29	0.45	-0.2	0.4	0.11	1.32
4-tert-PENTYLPHENOL	0.56	0.41	0.81	0.89	1.48	3.83	.	.	88.78	-8.9	0.34	0.45	-0.19	0.4	0.12	1.47
2-PHENYLPHENOL	0.56	0.49	1.55	1.4	1.38	3.09	.	.	107.7	-8.7	-0.3	0.45	-0.2	0.4	0.14	1.49
3-PHENYLPHENOL	0.59	0.45	1.56	1.41	1.38	3.23	.	.	107.4	-8.91	-0.4	0.45	-0.19	0.4	0.13	1.17
4-PHENYLPHENOL	0.59	0.45	1.56	1.41	1.38	3.2	.	0.98	109.5	-8.64	-0.34	0.45	-0.19	0.4	0.12	1.2
2-FLUOROPHENOL	0.61	0.26	0.66	0.69	0.79	1.71	.	-0.3	52.33	-9.36	-0.05	0.43	-0.17	0.4	0.12	2.81
3-FLUOROPHENOL	0.68	0.17	0.67	0.98	0.79	1.93	.	-0.7	52.08	-9.47	-0.06	0.45	-0.21	0.4	0.14	2.64
4-FLUOROPHENOL	0.63	0.23	0.67	0.97	0.79	1.77	.	-1	52.49	-9.27	-0.06	0.45	-0.17	0.4	0.13	1.78
2-CHLOROPHENOL	0.32	0.31	0.85	0.88	0.9	2.15	.	0.87	60.29	-9.04	0.03	0.44	-0.18	0.4	0.12	2.66
3-CHLOROPHENOL	0.69	0.15	0.91	1.06	0.9	2.5	.	-0.12	60.7	-9.28	-0.02	0.45	-0.2	0.4	0.14	2.59
4-CHLOROPHENOL	0.67	0.2	0.92	1.08	0.9	2.4	-0.75	-0.35	60.76	-9.01	0.05	0.45	-0.18	0.4	0.13	1.76
3,4-DICHLOROPHENOL	0.74	0	1.02	1.2	1.02	3.33	.	.	70.47	-9.05	-0.22	0.44	-0.18	0.4	0.14	3.03
3,5-DICHLOROPHENOL	0.77	0	1.02	1.17	1.02	3.62	.	.	71.24	-9.42	-0.27	0.44	-0.2	0.4	0.14	1.7
4-CHLORO-2-METHYLPHENOL	0.63	0.22	0.89	0.91	1.04	2.78	.	.	69.4	-8.92	0.08	0.44	-0.18	0.4	0.12	1.73
4-CHLORO-3-METHYLPHENOL	0.65	0.22	0.92	1.02	1.04	.	0.31	.	68.76	-8.94	0.09	0.45	-0.19	0.4	0.13	1.85
2-BROMOPHENOL	0.35	0.31	1.04	0.9	0.95	2.35	.	1.16	62.29	-9.31	0.02	0.43	-0.19	0.4	0.12	2.31
3-BROMOPHENOL	0.7	0.16	1.06	1.15	0.95	2.63	.	-0.06	63.32	-9.42	-0.07	0.44	-0.19	0.4	0.14	2.45
4-BROMOPHENOL	0.67	0.2	1.08	1.17	0.95	2.59	-0.1	-0.09	63.14	-9.31	-0.03	0.45	-0.19	0.4	0.13	1.63
2-iodophenol	0.4	0.35	1.36	1	1.03	2.65	.	1.26	67.81	-8.74	-0.29	0.43	-0.19	0.4	0.12	2.49
3-iodophenol	0.7	0.18	1.37	1.2	1.03	2.93	.	.	69.14	-9.04	-0.45	0.44	-0.19	0.4	0.14	2.55
4-iodophenol	0.68	0.2	1.38	1.22	1.03	2.91	.	0.57	68.86	-8.84	-0.41	0.45	-0.19	0.4	0.13	1.71

soluto	dados extraídos da literatura							dados extraídos dos cálculos								
	$\Sigma\alpha_2$	$\Sigma\beta_2$	R_2	π_2	Vx	$\log P_{oct}$	$\log P_{c16}$	$\log P_{c1c}$	Ao	E _{HOMO}	E _{LUMO}	$lq^{1'}$	q ²⁻	q ¹⁺	q ²⁺	μ
2-METHOXYPHENOL	0.22	0.52	0.84	0.91	0.98	1.32	.	0.47	63.91	-9.15	0.16	0.44	-0.29	0.4	0.12	2.15
3-METHOXYPHENOL	0.59	0.39	0.88	1.17	0.98	1.58	-1.08	.	64.81	-8.94	0.29	0.45	-0.28	0.4	0.13	1.78
4-METHOXYPHENOL	0.57	0.48	0.9	1.17	0.98	1.34	.	.	65.21	-8.76	0.22	0.45	-0.29	0.4	0.12	2.21
2-CIANOPHENOL	0.74	0.33	0.92	1.33	0.93	.	.	-1.7	67.24	-9.61	-0.57	0.43	-0.34	0.4	0.12	5.59
3-CIANOPHENOL	0.77	0.28	0.93	1.55	0.93	1.7	-1.9	.	67.28	-9.64	-0.63	0.44	-0.33	0.4	0.13	3.16
4-CIANOPHENOL	0.79	0.29	0.94	1.63	0.93	1.6	-2.04	-2.14	68.45	-9.56	-0.54	0.44	-0.34	0.4	0.13	4.39
2-NITROPHENOL	0.05	0.37	1.02	1.05	0.95	1.85	1.52	1.45	65.92	-9.9	-1.22	0.59	-0.51	0.4	0.13	4.15
3-NITROPHENOL	0.79	0.23	1.05	1.57	0.95	2	-1.37	-1.51	65.61	-9.96	-1.18	0.53	-0.53	0.4	0.15	5.96
4-NITROPHENOL	0.82	0.26	1.07	1.72	0.95	1.91	-1.93	-2.05	66.42	-10.17	-1.08	0.54	-0.54	0.4	0.13	5.24
CATECHOL	0.85	0.52	0.97	1.07	0.83	0.88	.	-2.66	55.56	-8.92	0.24	0.46	-0.44	0.4	0.38	2.13
RESORCINOL	1.1	0.58	0.98	1	0.83	0.8	.	-3.79	55.82	-9	0.22	0.45	-0.45	0.4	0.37	1.75
HYDROQUINONE	1.16	0.6	1	1	0.83	0.59	.	-4.04	56.33	-8.76	0.17	0.45	-0.45	0.4	0.37	2.37
METHYL PARABEN	0.69	0.45	0.9	1.37	1.13	1.96	.	.	76.77	-9.53	-0.36	0.47	-0.44	0.4	0.13	1.67
n-BUTYL PARABEN	0.69	0.45	0.86	1.35	1.56	3.57	.	.	99.42	-9.52	-0.4	0.48	-0.44	0.4	0.13	1.44
1-NAPHTOL	0.61	0.37	1.52	1.05	1.14	2.84	.	0.58	89.35	-8.55	-0.35	0.45	-0.22	0.4	0.12	0.97
2-NAPHTOL	0.61	0.4	1.52	1.08	1.14	2.7	.	0.29	89.79	-8.72	-0.45	0.45	-0.2	0.4	0.12	1
BENZYL ALCOHOL	0.33	0.56	0.8	0.87	0.92	1.1	-0.43	-0.62	57.53	-9.64	0.32	0.52	-0.11	0.4	0.11	1.62
3-METHYLBENZYL ALCOHOL	0.33	0.59	0.82	0.9	1.06	1.6	.	.	66.1	-9.39	0.34	0.52	-0.1	0.4	0.11	1.5
4-METHYLBENZYL ALCOHOL	0.33	0.6	0.81	0.88	1.06	1.58	.	.	66.44	-9.35	0.3	0.52	-0.11	0.4	0.11	1.44
1-PHENYLETHANOL	0.3	0.66	0.78	0.83	1.06	1.42	.	.	64.46	-9.58	0.36	0.52	-0.15	0.4	0.11	1.65
2-PHENYLETHANOL	0.3	0.64	0.81	0.91	1.06	1.36	-0.36	0.01	64.69	-9.6	0.29	0.53	-0.1	0.4	0.11	1.52
3-PHENYLPROPANOL	0.3	0.67	0.82	0.9	1.2	1.88	0.18	.	72.37	-9.48	0.36	0.53	-0.13	0.4	0.11	1.61
THIOPHENOL	0.09	0.16	1	0.8	0.88	2.52	2.25	.	60.38	-8.78	-0.01	0.11	-0.1	0.1	0.11	1
DIPHENYL SULFIDE	0	0.3	1.63	1.2	1.49	4.45	.	.	117.4	-8.67	-0.23	0.11	-0.11	0.1	0.12	1.35
PHENYLMETHYL SULFIDE	0	0.26	1.07	0.92	1.03	2.47	2.66	.	69.92	-8.56	0.09	0.11	-0.11	0.1	0.11	1.03
METHYL PHENYL SULFOXIDE	0	0.91	1.1	1.8	1.08	.	-1.49	-1.29	77.38	-9.16	-0.33	0.55	-0.23	0.1	0.11	4.31
METHYL PHENYL SULFONE	0	0.76	1.08	1.85	1.14	0.5	-0.92	-0.59	76.61	-10.31	-0.56	0.57	-0.57	0.1	0.11	4.65
DIPHENYL SULFONE	0	0.7	1.57	2.15	1.61	2.4	.	.	116.7	-10.2	-0.55	0.56	-0.56	0.1	0.12	5.14
BENZENE SULFONAMIDE	0.55	0.8	1.13	1.55	1.1	0.35	.	-2.28	75.81	-10.39	-0.74	0.86	-0.55	0.4	0.36	5.49
N-METHYLBENZENESULFONAMIDE	0.3	0.82	1.1	1.5	1.24	0.92	.	.	84.26	-10.03	-0.68	0.71	-0.55	0.4	0.13	5.1
N,N-DIMETHYLBENZENESULFONAMIDE	0	0.86	1.1	1.5	1.38	1.35	.	.	91.97	-9.75	-0.66	0.55	-0.55	0.1	0.11	4.8
3-METHYLBENZENESULFONAMIDE	0.55	0.85	1.1	1.55	1.24	0.9	.	.	84.18	-9.98	-0.63	0.86	-0.58	0.4	0.37	4.34

soluto	dados extraídos da literatura							dados extraídos dos cálculos								
	$\Sigma\alpha_2$	$\Sigma\beta_2$	R_2	π_2	V_x	$\log P_{oct}$	$\log P_{c16}$	$\log P_{c16}$	Ao	E_{HOMO}	E_{LUMO}	lq^{1*}	q^{2-}	q^{1+}	q^{2+}	μ
4-METHYLBENZENESULFONATE	0.55	0.87	1.1	1.55	1.24	0.8	.	.	84.83	-10.22	-0.66	0.86	-0.58	0.4	0.37	4.52
3-ISOPROPYLBENZENESULFONATE	0.55	0.92	1.09	1.55	1.52	1.7	.	.	98.11	-10.07	-0.62	0.86	-0.58	0.4	0.37	4.37
4-ISOPROPYLBENZENESULFONATE	0.55	0.91	1.09	1.55	1.52	1.75	.	.	98.92	-10.23	-0.65	0.86	-0.58	0.4	0.37	4.56
FURANE	0	0.13	0.37	0.53	0.54	1.34	.	.	32.08	-9.38	0.61	0.18	-0.18	0.2	0.15	0.54
2-METHYLFURANE	0	0.14	0.37	0.5	0.68	1.85	.	.	40.98	-9.1	0.6	0.18	-0.17	0.2	0.13	0.55
BENZOFURANE	0	0.15	0.89	0.83	0.91	2.67	.	.	67.46	-9.07	-0.15	0.19	-0.17	0.1	0.14	0.86
DBENZOFURANE	0	0.17	1.41	1.02	1.27	4.12	.	.	106.9	-9.02	-0.48	0.18	-0.13	0.1	0.12	1.2
PARALDEHYDE	0	0.68	0.14	0.68	1.02	.	0.24	.	54.08	-10.88	2.45	0.39	-0.39	0.1	0.06	2.26
PYRIDINE	0	0.52	0.63	0.84	0.68	.	-0.42	-0.31	43.61	-10.1	-0.01	0.36	-0.15	0.1	0.12	1.65
2-METHYLPYRIDINE	0	0.58	0.6	0.75	0.82	.	0.03	0.23	52.36	-9.8	0	0.35	-0.16	0.1	0.12	1.43
3-MNETHYLPYRIDINE	0	0.54	0.63	0.81	0.82	.	0.13	0.27	52.18	-9.81	-0.01	0.35	-0.14	0.1	0.12	1.81
4-METHYLPYRIDINE	0	0.54	0.63	0.82	0.82	.	0.13	0.21	51.97	-10.06	0	0.36	-0.15	0.1	0.12	2
2,3-DIMETHYLPYRIDINE	0	0.62	0.66	0.77	0.96	.	0.51	.	60.56	-9.6	0.03	0.35	-0.15	0.1	0.12	1.61
2,4-DIMETHYLPYRIDINE	0	0.63	0.63	0.76	0.96	.	0.44	0.67	60.75	-9.75	0.04	0.36	-0.16	0.1	0.12	1.76
2,5-DIMETHYLPYRIDINE	0	0.62	0.63	0.74	0.96	.	0.53	.	61.33	-9.53	-0.01	0.35	-0.15	0.1	0.12	1.53
2,6-DIMETHYLPYRIDINE	0	0.63	0.61	0.7	0.96	.	0.39	0.64	61.06	-9.59	0.04	0.35	-0.16	0.1	0.12	1.15
3,4-DIMETHYLPYRIDINE	0	0.62	0.68	0.85	0.96	.	0.49	.	60.24	-9.75	0.02	0.36	-0.15	0.1	0.12	2.16
3,5-DIMETHYLPYRIDINE	0	0.6	0.66	0.79	0.96	.	0.67	0.76	60.71	-9.62	0.02	0.35	-0.11	0.1	0.12	1.91
2-ETHYLPYRIDINE	0	0.59	0.61	0.71	0.96	.	0.67	.	59.32	-9.86	0	0.35	-0.16	0.1	0.12	1.41
3-ETHYLPYRIDINE	0	0.57	0.64	0.79	0.96	.	0.72	.	59.1	-9.88	-0.01	0.35	-0.15	0.1	0.12	1.8
4-ETHYLPYRIDINE	0	0.57	0.63	0.8	0.96	.	0.74	.	58.86	-10.05	0.02	0.36	-0.16	0.1	0.12	2.07
4-n-PROPYLPYRIDINE	0	0.55	0.63	0.77	1.1	.	1.3	.	66.24	-10.05	0.01	0.36	-0.15	0.1	0.12	2
2-FLUOROPYRIDINE	0	0.36	0.49	0.89	0.69	0.84	.	.	44.89	-10.21	-0.37	0.37	-0.17	0.1	0.12	2.96
3-FLUOROPYRIDINE	0	0.43	0.5	0.74	0.69	0.77	.	.	45.13	-10.19	-0.38	0.33	-0.12	0.1	0.13	1.62
2,6-DIFLUOROPYRIDINE	0	0.24	0.38	0.94	0.71	1.17	.	.	46.21	-10.37	-0.71	0.38	-0.18	0.1	0.14	3.65
2-CHLOROPYRIDINE	0	0.37	0.74	1.03	0.8	1.22	0.65	0.91	54.26	-9.65	-0.3	0.34	-0.15	0.1	0.12	2.74
3-CHLOROPYRIDINE	0	0.4	0.73	0.83	0.8	1.33	0.84	.	53.34	-9.67	-0.32	0.34	-0.14	0.1	0.12	1.57
4-CHLOROPYRIDINE	0	0.4	0.74	0.85	0.8	1.28	.	.	53.3	-9.92	-0.31	0.35	-0.15	0.1	0.13	0.23
3-BROMOPYRIDINE	0	0.38	0.91	0.9	0.85	1.6	.	.	55.48	-10.12	-0.34	0.35	-0.14	0.1	0.13	1.5
4-BROMOPYRIDINE	0	0.38	0.9	0.93	0.85	1.54	.	.	55.62	-10.37	-0.38	0.35	-0.13	0.1	0.13	0.41
2-METHOXYPYRIDINE	0	0.47	0.64	0.76	0.88	1.36	.	.	58.08	-9.48	-0.03	0.37	-0.25	0.1	0.12	2.6
4-METHOXYPYRIDINE	0	0.53	0.68	0.93	0.88	1	.	.	57.55	-9.75	-0.01	0.39	-0.28	0.1	0.13	2.07

soluto	dados extraídos da literatura							dados extraídos dos cálculos								
	$\Sigma\alpha_2$	$\Sigma\beta_2$	R_2	π_2	Vx	$\log P_{oct}$	$\log P_{c16}$	$\log P_{c1c}$	Ao	E_{HOMO}	$lq^{1'1}$	q^{2-}	q^{1+}	q^{2+}	μ	
2-CIANOPYRIDINE	0	0.51	0.73	1.44	0.83	0.4	.	.	59.78	-10.44	-0.91	0.32	-0.31	0.1	0.13	5.24
3-CIANOPYRIDINE	0	0.62	0.75	1.26	0.83	0.23	.	.	59.86	-10.44	-0.94	0.35	-0.32	0.1	0.13	3.71
4-CIANOPYRIDINE	0	0.59	0.75	1.21	0.83	0.46	.	.	59.42	-10.63	-0.95	0.34	-0.31	0.1	0.13	2.45
N-METHYLPYRIDINE	0	0.69	0.32	0.39	0.95	1.3	0.48	.	48.78	-9.01	2.66	0.35	-0.1	0.1	0.06	0.48
N-ETHYLPYRIDINE	0	0.63	0.3	0.32	1.09	1.88	.	.	56.12	-8.99	2.59	0.35	-0.12	0.1	0.06	0.41
PIRROLE	0.41	0.29	0.61	0.73	0.58	0.75	.	.	35.76	-8.93	1.11	0.2	-0.2	0.3	0.14	2.12
N-METHYLPYRROLE	0	0.31	0.56	0.79	0.72	1.21	.	.	44.44	-8.87	1.08	0.18	-0.18	0.1	0.14	1.79
ACRIDINE	0	0.58	2.36	1.33	1.41	3.4	.	.	129.3	-8.61	-1.2	0.33	-0.1	0.1	0.12	1.46
INDOLE	0.44	0.22	1.2	1.12	0.95	.	.	0.79	73.04	-8.47	0.1	0.24	-0.15	0.3	0.14	1.68
PIRAZOLE	0.54	0.45	0.62	1	0.54	.	.	-2.91	33.82	-9.68	0.54	0.41	-0.21	0.4	0.15	2.27
IMIDAZOLE	0.42	0.78	0.71	0.85	0.54	.	.	-3.7	33.88	-9.47	0.7	0.38	-0.22	0.3	0.17	3.72
N-METHYLIMIDAZOLE	0	0.83	0.59	0.95	0.68	.	.	-2.16	42.33	-9.36	0.69	0.38	-0.2	0.2	0.16	3.48
PIRAZINE	0	0.62	0.63	0.95	0.63	-0.23	.	.	41.9	-10.16	-0.44	0.31	-0.31	0.1	0.13	0
2-METHYLPYRAZINE	0	0.64	0.63	0.9	0.78	0.23	-0.79	.	50.78	-10.11	-0.41	0.31	-0.3	0.1	0.13	0.45
2,5-DIMETHYLPYRAZINE	0	0.69	0.63	0.9	0.92	0.63	.	.	60.03	-9.86	-0.39	0.31	-0.31	0.1	0.13	0.04
QUINOXALINE	0	0.59	1.3	1.2	1	1.32	.	.	79.97	-9.58	-0.9	0.29	-0.29	0.1	0.13	0.17
PRIMIDINE	0	0.65	0.61	1	0.63	-0.4	.	.	41.54	-10.29	-0.41	0.39	-0.39	0.1	0.13	1.75
QUINAZOLINE	0	0.65	0.93	1.15	1	1.01	.	.	78.97	-9.59	-0.93	0.39	-0.36	0.1	0.13	2.34
PYRIDAZINE	0	0.81	0.67	0.85	0.63	-0.72	.	.	41.77	-9.94	-0.5	0.17	-0.17	0.1	0.13	3.1
CINNOLINE	0	0.78	1.28	1	1	0.93	.	.	79.2	-9.61	-0.96	0.14	-0.11	0.1	0.12	2.95
THIOPHENE	0	0.15	0.69	0.56	0.64	1.81	1.78	.	42.23	-9.54	-0.19	0.17	-0.17	0.2	0.15	0.69
2-METHYL THIOPHENE	0	0.16	0.69	0.56	0.78	2.33	2.3	.	51	-9.49	-0.19	0.18	-0.14	0.2	0.13	0.73
BENZO[b]THIOPHENE	0	0.2	1.32	0.88	1.01	3.12	.	.	78.78	-8.8	-0.47	0.15	-0.1	0.2	0.13	1.07
DIBENZOTHIOPHENE	0	0.18	1.96	1.31	1.38	4.38	.	.	117.2	-8.6	-0.63	0.1	-0.1	0.1	0.12	1.28
THIAZOLE	0	0.45	0.8	0.8	0.6	0.44	.	.	41.09	-10.01	-0.61	0.33	-0.21	0.2	0.16	0.97
BENZOTHAZOLE	0	0.4	1.33	1.1	0.97	2.02	.	.	77.56	-9.24	-0.73	0.3	-0.13	0.2	0.12	1.01
OXAZOLE	0	0.42	0.42	0.7	0.5	0.12	.	.	30.16	-10.03	0.22	0.4	-0.19	0.2	0.16	1.33
BENZOXAZOLE	0	0.38	0.9	1	0.86	1.59	.	.	65.23	-9.56	-0.39	0.38	-0.2	0.2	0.12	1.13
ISOXAZOLE	0	0.38	0.4	0.7	0.5	0.08	.	.	30.67	-10.33	-0.14	0.27	-0.25	0.2	0.15	2.83
1,2-BENZISOXAZOLE	0	0.33	0.88	1	0.86	1.63	.	.	65.39	-9.74	-0.69	0.24	-0.18	0.2	0.13	3.38
2,1-BENZISOXAZOLE	0	0.36	0.97	1.1	0.86	1.52	.	.	69.26	-9.01	-1.07	0.28	-0.19	0.2	0.12	3.26